



UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI  
FAKULTET  
DEPARTMAN ZA FIZIKU



# Primena samousaglašene aproksimacije u analizi slojevitih antiferomagnetika

- diplomski rad -

Mentor: dr Milan Pantić

Kandidat: Petar Mali

Novi Sad, 2011



# Sadržaj

Uvod	5
<b>1 Hajzenbergov model magnetizma</b>	<b>7</b>
1.1 Interakcija izmene . . . . .	7
1.2 Hajzenbergov hamiltonijan . . . . .	9
1.3 Hamiltonijan Hajzenbergovog antiferomagneta . . . . .	10
<b>2 Slojeviti antiferomagnetni sistemi</b>	<b>13</b>
2.1 Modelni hamiltonijan slojevitog antiferomagneta . . . . .	13
2.2 Sistem jednačina za spinske Grinove funkcije . . . . .	14
2.3 Računanje magnetizacije u Tjablikovskoj aproksimaciji . . . . .	19
2.4 Nelova temperatura u RPA za opšti spin . . . . .	22
<b>3 Analiza antiferomagneta u bozonskoj slici</b>	<b>25</b>
3.1 Spinski talasi u Blohovoju aproksimaciji . . . . .	27
3.2 Reprerentacije Holštajn-Primakova i Dajson-Maljejeva . . . . .	28
3.2.1 Reprerentacija Holštajn - Primakova (HP) ( $S \geq \frac{1}{2}$ ) . . . . .	28
3.2.2 Reprerentacija Dajson - Maljejeva (DM) ( $S \geq \frac{1}{2}$ ) . . . . .	29
3.3 Samousaglašena aproksimacija spinskih talasa . . . . .	29
3.4 Izraz za magnetizaciju . . . . .	32
3.5 Magnetizacija i Nelova temperatura u Blohovoju aproksimaciji . . . . .	34
3.6 Magnetizacija i Nelova temperatura u samousaglašenoju aproksimaciji . . . . .	34
<b>4 Numerička analiza slojevitog antiferomagneta</b>	<b>37</b>
<b>5 Zaključak</b>	<b>41</b>
<b>A Tjablikovske dvovremenske temperaturne Grinove funkcije</b>	<b>43</b>
A.1 Jednačine kretanja za Grinove funkcije . . . . .	44
A.2 Spektralna teorija . . . . .	46
<b>B Tjablikovsko i Kalenovo deкупlovanje</b>	<b>49</b>
<b>C Neke relacije između spinskih operatora</b>	<b>51</b>
<b>D Računanje potrebnih korelacionih funkcija</b>	<b>53</b>



# Uvod

Poslednjih godina znatno su intenzivirana istraživanja slojevitih magnetnih sistema, magnetnih superrešetki, tankih filmova i slično kako sa eksperimentalne, tako i sa teorijske tačke gledišta. Novije eksperimentalne tehnike, posebno SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) i neutronske rasejanje, omogućavaju precizna merenja spektra elementarnih ekscitacija, zatim lokalnih veličina kao, na primer, magnetizacije i drugih dinamičkih svojstava, što dodatno stimuliše i eksperimentalna i teorijska istraživanja. Osim toga, postoji i sve veći interes za praktičnu primenu ovih materijala naročito u novim sofisticiranim tehnologijama, magnetnim diskovima i memorijskim jedinicama i slično. Tako su višeslojni magnetni sistemi sa nemagnetnim međuslojem postali osnova za proizvodnju različitih novih uređaja, posebno ultramalih memorijskih senzora.

Takođe, u keramičkim oksidima bakra, lantana i barijuma ( $\text{La}_2\text{CuO}_4$  dopiran barijumom) otkrivena je visokotemperaturna superprovodnost 1986. godine. Ušli smo u 21. vek, a još uvek ne postoji adekvatna teorija koja objašnjava pojavu visokotemperaturne superprovodnosti, analogna BCS teoriji na nižim temperaturama. Ovi sistemi imaju slojevitou strukturu i mogu se tretirati kao kvazi-dvodimenzionalni antiferomagnetni (Q2DHAFM) sa spinom  $S = 1/2$  u okviru Hajzenbergovog modela.

Isto tako, manganovi halogenidi ( $\text{Rb}_2\text{MnF}_4$ ,  $\text{Cs}_2\text{MnCl}_4$ ,  $\text{K}_2\text{MnF}_4$  i  $\text{Rb}_2\text{MnCl}_4$ ) predstavljaju čitavu grupu jedinjenja kod koje postoji slojevita antiferomagnetna (AFM) uređenost. Eksperimentalno je pokazano da se spinovi u ovim jedinjenjima, koji su lokalizovani u čvorovima kristalne rešetke, uređuju antiferomagnetno u slojeve, između kojih takodje postoji interakcija, s tim što je međuravanska interakcija spinova manja od interakcije spinova unutar slojeva. Kod magnetnih halogenida u čvorovima rešetke lokalizovan je spin  $S = 5/2$ .

U ovom radu teorijski je analiziran slojeviti AFM u čijim čvorovima je lokalizovan neki opšti spin  $S$  u Blohovej, Tjablikovskoj i bozonskoj samousaglašenoj aproksimaciji. Numerička analiza je vršena za specijalan slučaj  $S = \frac{1}{2}$ .

U prvom delu rada date su osnove lokalizovanog magnetizma i formulisani modelni Hajzenbergov hamiltonijan. Dat je sistem jednačina za Grinove funkcije. Za dekuplovanje viših Grinovih funkcija korišćeno je tjablikovska ili aproksimacija haotičnih faza (Random Phase Approximation - RPA). Nađena je zavisnost magnetizacije od temperature i parametara sistema i izračunata je odgovarajuća temperatura faznog prelaza (Nelova temperatura).

U drugom delu diplomskog rada modelni hamiltonijan je bozonizovan, tj. spinski operatori su zamenjeni izrazima koji u sebi sadrže bozonske (Boze) operatore. Pritom je iskorišćena neermitska reprezentacija Dajson - Maljejeva. U daljem toku rada obrađena je Blohova aproksimacija spinskih talasa (SW) (spin wave) i samousaglašena aproksimacija spinskih talasa (SCSW) (self consistent spin wave) u cilju dobijanja izraza koji opisuju zavisnost magnetizacije od temperature. I za ovaj slučaj izračunata je Nelova temperatura.

Numeričkim putem ispitana je zavisnost magnetizacije od temperature za sve tri pomenute aproksimacije, kao i zavisnost Nelove temperature od parametra koji opisuje slojevitost strukturu.

U radu su vektori označeni boldovanjem. Pošto nigde nije zastupljen 1D slučaj na pojedinim mestima vektori u indeksima nisu boldovani, ali se ipak podrazumevaju.

Numerika je sprovedena u programskom paketu Mathematica 7.0.

# Glava 1

## Hajzenbergov model magnetizma

Magnetno uređenje u čvrstim telima posledica je elektrostatičke interakcije među elektronima. Ova interakcija ne "oseća" kako su spinovi orijentisani, ali u kombinaciji sa Paulijevim principom isključenja može da izazove pojavu dugodomentog uređenja [1, 2].

Sa pojavom antiferomagnetizma usko je povezana izolatorska faza kristala, jer bi prema zonskoj teoriji trebalo da budu provodnici [3]. Joni koji formiraju kristal imaju nepopunjene  $3d$  ili  $4f$  ljuske, pa će i formirana valentna zona biti polupopunjena. Takvi kristali trebalo bi da budu dobri provodnici. Ipak Kulonova interakcija stvara gap (procep) u provodnoj zoni i drži elektrone lokalizovane na čvorovima rešetke. U ovakvim sistemima spin elektrona dolazi do izražaja. Ovaj sistem je jako korelisan i za njega je dobra aproksimacija Hajzenbergov model.

### 1.1 Interakcija izmene

Koncept dijamagnetizma i paramagnetizma može se razumeti bez uvođenja eksplicitne interakcije između magnetnih momenata. Potpuno je drugačije u slučaju feromagnetizma, ferimagnetizma i antiferomagnetizma.

"Potpis" ove familije je postojanje spontane uređenosti magnetnih momenata za temperature niže od neke kritične vrednosti. Ove strukture, prema tome, nazivamo magnetno uređenim. U slučaju fero i ferimagnetizma kritična temperatura naziva se Kirijevom, a u slučaju antiferomagnetizma Nelovom. Iznad kritične temperature magnetna uređenost nestaje i materijal se ponaša kao normalan paramagnet. Ovaj magnetni fenomen ne može biti objašnjen bez uvođenja interakcija. Ovde se govori o tzv. kolektivnom fenomenu. Za ovaj kolektivni fenomen odgovorna je izmena. Jednostavno govoreći izmena može biti objašnjena na sledeći način. Paulijev princip [4] drži elektrone sa paralelnim spinom razdvojenim i tako redukuje njihovo Kulonovo odbijanje. Ova interakcija predstavlja simultan uticaj Kulonovog dejstva i Paulijevog principa. Izmjena je stoga strogo kvantni fenomen.

Zbog lakšeg uvođenja koncepta izmene posmatra se dvoelektronski sistem. Za dve elektrona moguće je praviti različite kombinacije, ali je bitno da se dobije kao krajnji rezultat antisimetrična funkcija.

$$\psi = \varphi\chi \tag{1.1}$$

$\psi$  je ukupna talasna funkcija,  $\varphi$  njen koordinatni, a  $\chi$  spinski deo. Talasna funkcija  $\varphi$ , koja

zavisi samo od koordinata, može biti ili simetrična ili antisimetrična.

$$\varphi_{s/a}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_1)] \quad (1.2)$$

Ova funkcija se množi sa spinskom funkcijom. Prilikom sabiranja dva spina  $\frac{1}{2}$  može se dobiti ukupna vrednost 0 ili 1. Spinska funkcija koja odgovara stanju  $S = 0$  je antisimetrična i singlet je  $\chi^0(1, 2) = |00\rangle$ . Stanju  $S = 1$  odgovaraju tri spinske funkcije  $|10\rangle, |1-1\rangle, |11\rangle$ , odnosno triplet.

Osnovnom stanju atoma helijuma, tzv.  $1s$  stanju, odgovaraju dva elektrona sa kvantnim brojevima  $n = 1, l = 0, m_l = 0$ . Ovi elektroni se zbog Paulijevog principa moraju razlikovati po spinu.

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \varphi_{100}(\mathbf{r}_1)\varphi_{100}(\mathbf{r}_2)\chi^0(1, 2) \quad (1.3)$$

Razmatranje atoma helijuma može se vršiti pomoću hamiltonijana

$$\hat{H} = \hat{H}(1) + \hat{H}(2) + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (1.4)$$

U ovom zapisu operatori  $\hat{H}(1)$  i  $\hat{H}(2)$  su hamiltonijani elektrona u atomu vodonikovog tipa. Ne zavise od spinova. Ovi hamiltonijani opisuju svaki od elektrona kao poseban sistem. Interakcija je sadržana u članu  $V$ . Iz izraza (1.4) može se dobiti doprinos interakcije u prvooj popravci.

Nakon što se spinski deo talasne funkcije normira dobija se sledeći izraz za doprinos interakcije.

$$\Delta E = \langle \varphi_{s/a} | V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) | \varphi_{s/a} \rangle \quad (1.5)$$

Multiplikativni operator koji predstavlja interakciju je usendvičen između dve koordinatne talasne funkcije. U ovoj apstraktnoj notaciji pojavljuje se srednja vrednost Kulonove energije, ali i interakcija izmene. Da bi se došlo do eksplicitnog izraza za integral izmene u ovom slučaju izraz (1.5) se mora raspisati.

$$\Delta E = \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \varphi_{s/a}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_{s/a}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (1.6)$$

gde je  $\varphi_{s/a}$  definisano relacijom (1.2). Rapisivanjem i sređivanjem izraza (1.6) dobija se

$$\Delta E = K \pm J \quad (1.7)$$

gde  $K$  predstavlja srednju vrednost Kulonove energije

$$K = \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 |\varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2)|^2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (1.8)$$

a  $J$  interakciju (integral) izmene

$$J = \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \varphi_{k_1}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{k_2}^*(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_2) \varphi_{k_2}(\mathbf{r}_1) \quad (1.9)$$



Ako se posmatra formalno s leva na desno izgleda kao da su elektroni nakon interakcije zamenili mesta i stoga se izraz (1.9) i naziva interakcija (integral) izmene. Izmena je zapravo kvantnomehanički efekat koji je posledica simetrizacije.

U izrazu (1.7) znak  $+$  odgovara singletnom, a  $-$  tripletnom stanju. Ako je  $J > 0$  favorizovano je simetrično stanje kojem odgovara  $S = 1$ , a ako je  $J < 0$  favorizovano je antisimetrično stanje kojem odgovara  $S = 0$ .

Integral izmene može se predstaviti kao svojstvena vrednost operatora koji zavise samo od spinova. Ako se posmatra sistem od dva spina njihova interakcija može biti zapisana u formi

$$\hat{V} = -\frac{1}{2}J(1 + 4\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2) \quad (1.10)$$

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 \quad (1.11)$$

Nakon kvadriranja izraza (1.11) dobija se

$$\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2) = \frac{1}{2}[S(S+1) - \frac{3}{2}] \quad (1.12)$$

za  $S = 0$  dobija se  $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = -\frac{3}{4}$

za  $S = 1$  dobija se  $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = \frac{1}{4}$

Svojstvene vrednosti operatora  $\hat{V}$  su za  $S = 0$  i  $S = 1$  respektivno  $J$  i  $-J$ .

Ovo je polazna tačka za krucijalni model u kvantnoj teoriji magnetizma.

## 1.2 Hajzenbergov hamiltonijan

U ovom radu proučavani su magnetni dielektrici. Kod magnetnih dielektrika su nosioci magnetnih osobina spinovi jona lokalizovani u čvorovima kristalne rešetke. To su obično joni sa nepopunjenim  $3d$  ili  $4f$  ljuskama.

U slučaju jako korelisanih sistema Hajzenbergov model je odgovarajući. Pojednostavljenje kod ovog modela je što ukupnu interakciju među spinovima u rešeci možemo tretirati kao sumu interakcija po parovima. Hamiltonijan ovog modela je

$$\hat{H} = -\sum_{i,j} J_{i,j} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (1.13)$$

gde  $J_{i,j}$  predstavlja integral izmene. Hajzenbergov hamiltonijan bi trebalo da bude shvaćen kao efektivni operator. Spin - spin interakcija predstavljena je skalarnim produktom operatora  $\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ . Hajzenberg je predložio ovaj model 1928. godine, pa se zbog toga model opisan ovim hamiltonijanom i zove po njemu.  $\hat{\mathbf{S}}_i$  predstavlja operator spina na čvoru  $\mathbf{i}$ .

Integral izmene  $J_{i,j}$  u homogenoj rešeci zavisi samo od rastojanja između čvorova [5]

$$J_{i,j} = J|\mathbf{i} - \mathbf{j}| \quad (1.14)$$

Pri povećanju temperature kod sistema uređenih spinova dolazi do pojave talasa zaljuljanih spinova, odnosno spinskih talasa. Toplotni kvant smanji vrednost  $z$  - projekcije spina jednog čvora za 1, a ovaj se poremećaj zbog izmenske interakcije prenosi i na ostale čvorove. Sa porastom temperature, raste i intenzivnost spinskih talasa do one kritične vrednosti temperature

na kojoj više ne postoji uređenost i koja ustvari označava paramagnetnu fazu. S obzirom da operator  $\hat{S}^+$  povećava  $z$  - projekciju za jedinicu, a operator  $\hat{S}^-$  smanjuje, može se uzeti da ovi operatori respektivno anihiliraju i kreiraju pobuđenja. Da bi se ovo uključilo u račun neophodno je da se hamiltonijan (1.13) izrazi preko ovih operatora. Za svaki od čvorova rešetke važe relacije

$$\hat{S}^x = \frac{\hat{S}^+ + \hat{S}^-}{2} \quad (1.15)$$

$$\hat{S}^y = \frac{\hat{S}^+ - \hat{S}^-}{2i} \quad (1.16)$$

Kada se veze između spinskih operatora uvrste u (1.13) dobija se hamiltonijan

$$\hat{H} = - \sum_{i,j} J_{i,j} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z) \quad (1.17)$$

Operator (1.17) je modelni hamiltonijan za feromagnet bez spoljnog magnetskog polja. Iz ovog hamiltonijana moguće je odrediti izraz magnetizaciju  $\langle \hat{S}^z \rangle$  metodom Tjablikovskih dvovremenskih Grinovih funkcija. U slučaju kada postoji interakcija samo između  $z$  - komponenti spinova govori se o tzv. Izingovom modelu, a ukoliko samo ne postoji interakcija između  $z$  komponenti spinova o  $XY$  modelu [6].

### 1.3 Hamiltonijan Hajzenbergovog antiferomagneta

Nel je 1932. predložio ideju antiferomagnetizma da bi objasnio temperaturno nezavisnu paramagnetnu susceptibilnost kod metala Cr i Mn, koja je bila prevelika da bi se mogla objasniti Paulijevom teorijom. Predložio je ideju dve podrešetke koje se međusobno kompenzuju negativnom interakcijom izmene.

Klasično osnovno stanje antiferomagneta naziva se Nelovo stanje: svaki spin up je okružen najbližim susedima koji su down, i obratno. Da bi im dali ime, pridružimo spinovima down  $A$  podrešetku, a spinovima up  $B$  podrešetku. Neka spinovi sa  $A$  podrešetke pokazuju u  $-z$ , a sa  $B$  podrešetke u  $+z$  pravcu. Da bismo kasnije mogli da izvršimo bozonizaciju hamiltonijana moramo da rotiramo jednu od podrešetki za  $180^\circ$  oko  $x$  ose. Primeni se kanonska transformacija na  $B$  (ali ne na  $A$ ) spinove:

$$\hat{S}_j^\pm \rightarrow +\hat{S}_j^\mp \quad (1.18)$$

$$\hat{S}_j^z \rightarrow -\hat{S}_j^z \quad (1.19)$$

Pretpostavimo da je spin određen vektorom položaja  $i$  u  $A$  i da je spin određen vektorom položaja  $j$  njegov najbliži sused u  $B$  da bismo napisali hamiltonijan u formi:

$$\hat{H} = \sum_{i \subseteq A} \sum_{j \subseteq B} \left[ \left( \frac{1}{2} \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ + h.c. \right) - \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \right] \quad (1.20)$$

Pri definisanju hamiltonijana (1.20) u obzir je uzeta samo interakcija između najbližih suseda. U samom hamiltonijanu upotrebljena je, u cilju skrećenog pisanja, oznaka koja predstavlja zapravo adjungovani (ermitski konjugovani) član, članu koji prethodi ovoj oznaci.<sup>1</sup>

Pogodno je ponekad uzeti za konstantu izmene jediničnu energiju, da integral izmene ne bi morao biti napisan eksplicitno. Kako je poslednji rezultat simetrican u dve podrešetke, to dozvoljava da pustimo da indeks sumiranja  $i$  ide po svim čvorovima rešetke, a  $j$  po svim najbližim susedima  $i$ , u oznaci  $j(i)$ . U ovom slučaju dobijeni izraz treba podeliti sa 2 da ne bi svaki čvor bio uzet dva puta u obzir.

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(i)} [(\frac{1}{2} \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ + h.c.) - \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z] \quad (1.21)$$

Ako se ubaci i interakcija izmene dobija se

$$\hat{H} = \sum_{i \subseteq A} \sum_{j \subseteq B} J_{i,j} [(\frac{1}{2} \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ + h.c.) - \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z] \quad (1.22)$$

ili drugačije zapisano

$$\hat{H} = \sum_{i,j} J_{i,j} [(\frac{1}{2} \hat{S}_i^{+(a)} \hat{S}_j^{+(b)} + h.c.) - \hat{S}_i^{z(a)} \hat{S}_j^{z(b)}] \quad (1.23)$$

Ovo predstavlja hamiltonijan Hajzenbergovog antiferomagneta [7] koji će nadalje biti detaljno analiziran na konkretnom sistemu. Nadalje će podrešetke biti označene kao u hamiltonijanu (1.23).

---

1

$\frac{1}{2} \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ + h.c. \equiv \frac{1}{2} \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ + \frac{1}{2} \hat{S}_i^- \hat{S}_j^-$



# Glava 2

## Slojeviti antiferomagnetni sistemi

Brojne tehnike rasta kristala su razvijene u cilju dobijanja slojevitih struktura. Jedna od ovih metoda je epitaksija molekulskim snopom (Molecular beam epitaxy -MBE) koja uključuje hemijsku reakciju jednog ili više molekulskih snopova ili atomskih snopova sa površi zagrejane monokristalne podloge. MBE predstavlja proces naparavanja u uslovima veoma visokog vakuuma oko  $10^{-8}Pa$ .

Tehnike rasta mogu biti korišćene za pripremanje uzoraka koji se sastoje od alternirajućih slojeva u kojima se smenjuju sloj debljine  $d_1$  konstituenta 1 i sloj debljine  $d_2$  konstituenta 2. Maksimalna debljina slojeva  $d_1$  i  $d_2$  je oko  $100nm$ . Ovakve strukture se nazivaju periodičnim slojevitim strukturama ili superrešetkama [8]. Mnoge fizičke karakteristike su modifikovane kod ovih struktura zbog postojanja dugog prostornog perioda  $D = d_1 + d_2$ . Superrešetke imaju primenu između ostalog u poluprovodničkim laserima.

Tanki magnetni filmovi [8] su strukture koje su translatorno invarijantne u  $x, y$  ravnima, dok im je debljina u pravcu  $z$ -ose veoma mala, od nekoliko  $nm$  do nekoliko  $\mu m$ . Zbog toga u  $z$ -pravcu dolazi do narušenja translatorne simetrije. Glavna primena tankih filmova su u proizvodnji elektronskih poluprovodnika.

Slojeviti fero i antiferomagnetni sistemi, kao i magnetni sistemi sa složenim magnetnim rešetkama su od velikog značaja danas. Ovi materijali su od velikog značaja zbog svoje primene u mikroelektronici (memorijski sistemi), ali i zbog toga što ovakvu strukturu imaju neki visokotemperaturni superprovodnici. Teorijski napredak u ovoj oblasti je jako bitan jer linearan napredak u nauci dovodi do eksponencijalnog u tehnici i postoji nada da će proučavanje ovakvih sistema dovesti do još veće ugodnosti u svakodnevici čoveka. U ovom radu proučavan je slojeviti antiferomagnet.

### 2.1 Modelni hamiltonijan slojevitog antiferomagneta

Modelni hamiltonijan sadrži prostornu anizotropiju, koja se ispoljava u različitom integralu izmene u ravni i normalno na ravan. Ovaj hamiltonijan, u lokalnom sistemu koordinata, glasi:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & J \sum_m \sum_{\rho, \delta_{||}} \left[ \frac{1}{2} \left( \hat{S}_{m, \rho}^{-(a)} \hat{S}_{m, \rho + \delta_{||}}^{-(b)} + h.c. \right) - \hat{S}_{m, \rho}^{z(a)} \hat{S}_{m, \rho + \delta_{||}}^{z(b)} \right] + \\ & + J' \sum_{m, \rho} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \left( \hat{S}_{m, \rho}^{-(a)} \hat{S}_{m+1, \rho}^{-(b)} + \hat{S}_{m, \rho}^{-(a)} \hat{S}_{m-1, \rho}^{-(b)} \right) + h.c. \right] - \hat{S}_{m, \rho}^{z(a)} \left( \hat{S}_{m+1, \rho}^{z(b)} + \hat{S}_{m-1, \rho}^{z(b)} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$(2.1)$$

Položaj svakog spina obeležava se sa:

$$\hat{S}_{\mathbf{n}}^{(i)} = \hat{S}_{m,\boldsymbol{\rho}}^{(i)}, \quad i = a, b \quad (2.2)$$

gde  $i$  predstavlja oznaku za odgovarajuću podrešetku,  $m$  određuje odgovarajuću ravan, a  $\boldsymbol{\rho}$  je dvodimenzioni vektor koji određuje položaj unutar date ravni i definisan je relacijom

$$\boldsymbol{\rho} = n_x \mathbf{e}_x + n_y \mathbf{e}_y \quad (2.3)$$

dok  $\boldsymbol{\delta}_{\parallel}$  označava najbliže susede u ravni. Specijalno u slučaju  $J' = J$  antiferomagnet bi bio izotropan.

U ovom radu proučava se kubna struktura, sa antiferomagnetno uređenim spinovima, koja je slojevita jer integrali izmene nisu isti u svim pravcima. Posmatra se tzv. balk struktura, što znači da se zanemaruju površinski efekti. Prvi član hamiltonijana opisuje interakciju između prvih suseda u ravni, a drugi između prvih suseda u susednim ravnima. Za integral izmene između prvih suseda u svakoj pojedinačnoj ravni iskorišćena je oznaka  $J$ , a za integral izmene između prvih suseda u susednim ravnima  $J'$ . Kako ovaj hamiltonijan sadrži spinske operatore naziva se spinskim hamiltonijanom.

Pošto se radi u aproksimaciji najbližih suseda  $J, J'$  predstavljaju integrale izmene između spinova koji pripadaju različitim podrešetkama, pa je  $J, J' < 0$ .

## 2.2 Sistem jednačina za spinske Grinove funkcije

Tjablikovske dvovremenske temperaturske spinske Grinove funkcije koriste se, između ostalog, za računanje energije ekscitacija. Ove veličine u sebi sadrže potpun opis dinamičkog ponašanja uređenih magnetnih sistema. Dinamika je u Hajzenbergovoj slici predstavljena jednačinama kretanja. Da bi se definisale jednačine kretanja za Grinove funkcije, prvo moraju biti definisane jednačine kretanja za spinske operatore koji figurišu u definiciji odgovarajućih funkcija.

Napišimo jednačine kretanja za spinske operatore koji figurišu u hamiltonijanu (2.1). Jednačine kretanja za spinske operatore su od značaja jer figurišu u jednačinama kretanja za Grinove funkcije.

Hajzenbergove jednačine kretanja za neki operator  $\hat{A}$  su jednačine oblika  $i\hbar \frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{A}, \hat{H}]$ . Specijalno u sledećim koracima umesto operatora  $\hat{A}$  u izrazima će figurisati spinski operatori  $\hat{S}^+, \hat{S}^-$ , a hamiltonijan će biti hamiltonijan koji opisuje tretirani problem (2.1).

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{S}_{m,\boldsymbol{\rho}}^{+(a)}}{dt} &= [\hat{S}_{m,\boldsymbol{\rho}}^{+(a)}, J \sum_{m'} \sum_{\boldsymbol{\rho}', \boldsymbol{\delta}_{\parallel}} \left( \frac{1}{2} (\hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{-(a)} \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'+\boldsymbol{\delta}_{\parallel}}^{-(b)} + h.c.) - \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{z(a)} \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'+\boldsymbol{\delta}_{\parallel}}^{z(b)} \right) \\ &+ J' \sum_{m',\boldsymbol{\rho}'} \left\{ \frac{1}{2} ((\hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{-(a)} \hat{S}_{m'+1,\boldsymbol{\rho}'}^{-(b)} + \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{-(a)} \hat{S}_{m'-1,\boldsymbol{\rho}'}^{-(b)}) + h.c.) - \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{z(a)} \hat{S}_{m'+1,\boldsymbol{\rho}'}^{z(b)} - \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{z(a)} \hat{S}_{m'-1,\boldsymbol{\rho}'}^{z(b)} \right\}] \\ i\hbar \frac{d\hat{S}_{m,\boldsymbol{\rho}}^{-(b)}}{dt} &= [\hat{S}_{m,\boldsymbol{\rho}}^{-(b)}, \sum_{m'} J \sum_{\boldsymbol{\rho}', \boldsymbol{\delta}_{\parallel}} \left( \frac{1}{2} (\hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{-(b)} \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'+\boldsymbol{\delta}_{\parallel}}^{-(a)} + h.c.) - \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{z(b)} \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'+\boldsymbol{\delta}_{\parallel}}^{z(a)} \right) \\ &+ J' \sum_{m',\boldsymbol{\rho}'} \left\{ \frac{1}{2} ((\hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{-(b)} \hat{S}_{m'+1,\boldsymbol{\rho}'}^{-(a)} + \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{-(b)} \hat{S}_{m'-1,\boldsymbol{\rho}'}^{-(a)}) + h.c.) - \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{z(b)} \hat{S}_{m'+1,\boldsymbol{\rho}'}^{z(a)} - \hat{S}_{m',\boldsymbol{\rho}'}^{z(b)} \hat{S}_{m'-1,\boldsymbol{\rho}'}^{z(a)} \right\}] \end{aligned}$$

Nalaženjem ovih komutatora dobija se

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}}{dt} &= \sum_{\delta_{||}} J(\hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{-(b)} + \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{z(b)}) + \\
&+ J' \{ \hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} (\hat{S}_{m+1,\rho}^{-(b)} + \hat{S}_{m-1,\rho}^{-(b)}) + \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} (\hat{S}_{m+1,\rho}^{z(b)} + \hat{S}_{m-1,\rho}^{z(b)}) \} \\
i\hbar \frac{d\hat{S}_{m,\rho}^{-(b)}}{dt} &= - \sum_{\delta_{||}} J(\hat{S}_{m,\rho}^{z(b)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{+(a)} + \hat{S}_{m,\rho}^{-(b)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{z(a)}) - \\
&- J' \{ \hat{S}_{m,\rho}^{z(b)} (\hat{S}_{m+1,\rho}^{+(a)} + \hat{S}_{m-1,\rho}^{+(a)}) + \hat{S}_{m,\rho}^{-(b)} (\hat{S}_{m+1,\rho}^{z(a)} + \hat{S}_{m-1,\rho}^{z(a)}) \}
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Jednačine kretanja za spinske operatore su potrebne da bi se definisao sistem jednačina za Grinove funkcije. Za dalju analizu definisaćemo sledeće retardovane Grinove funkcije:

$$G_{aB}^+(t) = \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}(t) | \hat{B}_{m',\rho'}(0) \rangle \rangle = \theta(t) \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}(t), \hat{B}_{m',\rho'}(0)] \rangle \tag{2.5}$$

$$G_{bB}^-(t) = \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{-(b)}(t) | \hat{B}_{m',\rho'}(0) \rangle \rangle = \theta(t) \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{-(b)}(t), \hat{B}_{m',\rho'}(0)] \rangle \tag{2.6}$$

Ovde je  $\hat{B}$  pogodno odabran operator, jedan od  $\hat{S}^\pm$  operatora. Grinove funkcije (2.5) i (2.6) definisane su u direktnom prostoru.

Napišimo jednačinu kretanja za Grinovu funkciju  $G_{aB}^+(t)$

$$i\hbar \frac{dG_{aB}^+}{dt} = i\hbar \delta(t) \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] \rangle + \theta(t) \langle [i\hbar \frac{d\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}}{dt}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] \rangle \tag{2.7}$$

U drugom članu sa desne strane iskoristi se (2.4). Sledeći korak je raspisivanje komutatora.

$$\begin{aligned}
&[i\hbar \frac{d\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}}{dt}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] = \\
&= \sum_{\delta_{||}} J([\hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{-(b)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] + [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{z(b)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)]) + \\
&+ J'([\hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m+1,\rho}^{-(b)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] + [\hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m-1,\rho}^{-(b)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] + \\
&+ [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m+1,\rho}^{z(b)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] + [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m-1,\rho}^{z(b)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)])
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Koristeći ovo dobija se jednačina

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dG_{aB}^+}{dt} &= i\hbar \delta(t) \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] \rangle + \\
&+ \sum_{\delta_{||}} J(\langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle + \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{z(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle) + \\
&+ J'(\langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m+1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle + \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m-1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle + \\
&+ \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m+1,\rho}^{z(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle + \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m-1,\rho}^{z(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle)
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Jednačina (2.9) je diferencijalna jednačina za određivanje Grinove funkcije. Pošto je mnogo pogodnije raditi sa algebarskim jednačinama na ovom mestu je zgodno Furije transformacijom preći u prostor frekvencija (energija). Uvodeći vremenske Furije transformacije

$$G_{aB}^+(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{aB}^+(\omega) \quad (2.10)$$

$$\frac{d}{dt} G_{aB}^+(t) = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega e^{-i\omega t} G_{aB}^+(\omega) \quad (2.11)$$

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \quad (2.12)$$

i koristeći postupak opisan u dodatku o Grinovim funkcijama dobija se jednačina

$$\hbar\omega G_{aB}^+(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}, \hat{B}_{m',\rho'}] \rangle + \langle \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}, \hat{H}] | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} \quad (2.13)$$

Ova jednačina je specijalan slučaj jednačine (A.24), koja poprima ovaj oblik u problemu koji se rešava. Za Grinovu funkciju  $G_{bB}^-(t)$  je postupak potpuno analogan. Potpuno analognim postupkom dobija se ista forma jednačine.

$$\hbar\omega G_{bB}^-(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{-(b)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] \rangle + \langle \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{-(b)}, \hat{H}] | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} \quad (2.14)$$

Nakon raspisivanja (2.13) dobija se

$$\begin{aligned} \hbar\omega G_{aB}^+(\omega) &= \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}, \hat{B}_{m',\rho'}] \rangle + \sum_{\delta_{||}} J \left( \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \right. \\ &+ \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{z(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} \left. \right) + J' \left( \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m+1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \right. \\ &+ \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{z(a)} \hat{S}_{m-1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m+1,\rho}^{z(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \\ &+ \left. \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} \hat{S}_{m-1,\rho}^{z(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} \right) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Pre prelaska u dualni prostor trebalo bi dekuplovati više spinske Grinove funkcije. Za dekuplovanje viših Grinovih funkcija biće primenjena metoda Tjablikova. Ona se zasniva na zameni  $z$ - projekcije operatora spina u višoj Grinovoj funkciji odgovarajućom termodinamičkom srednjom vrednošću. Na taj način problem je uprošten. Nakon dekuplovanja dobija se jednačina

$$\begin{aligned} \hbar\omega G_{aB}^+(\omega) &= \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}, \hat{B}_{m',\rho'}] \rangle + \sum_{\delta_{||}} J \left( \langle \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \langle \langle \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \right. \\ &+ \langle \langle \hat{S}^{z(b)} \rangle \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + J' \left( \langle \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \langle \langle \hat{S}_{m+1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \right. \\ &+ \langle \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \langle \langle \hat{S}_{m-1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \langle \langle \hat{S}^{z(b)} \rangle \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \\ &+ \left. \langle \langle \hat{S}^{z(b)} \rangle \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} \right) \end{aligned} \quad (2.16)$$



gde je  $\sum_{\delta_{||}} 1 = 4$  i označava broj prvih suseda u ravni. U cilju uproštavanja ovog izraza saberu se članovi uz odgovarajuće Grinove funkcije, čime se dobija koncizniji izraz

$$\begin{aligned} \hbar\omega \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}, \hat{B}_{m',\rho'}] \rangle + (4J + 2J') \langle \hat{S}^{z(b)} \rangle \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \\ &+ J \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \sum_{\delta_{||}} \langle \langle \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + J' \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \langle \langle \hat{S}_{m+1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \\ &+ \langle \langle \hat{S}_{m-1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Uvede se oznaka  $\epsilon_b = (4J + 2J') \langle \hat{S}^{z(b)} \rangle$ . Prethodna relacija u tom slučaju može biti zapisana u sledećem obliku.

$$\begin{aligned} \hbar\omega \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{+(a)}, \hat{B}_{m',\rho'}] \rangle + \epsilon_b \langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + \\ &+ J \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \sum_{\delta_{||}} \langle \langle \hat{S}_{m,\rho+\delta_{||}}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} + J' \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \langle \langle \hat{S}_{m+1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} \\ &+ \langle \langle \hat{S}_{m-1,\rho}^{-(b)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Kod periodičnih struktura (kristala) jednačine kretanja se uproste prelaskom u impulsni prostor. Pošto vezu između impulsa i talasnog vektora predstavlja Plankova konstanta ovaj prostor se još naziva i  $\mathbf{k}$  - prostor. Pri ovom prelazu se koriste diskretne Furije - transformacije jer je kristal diskretna struktura. Transformacije su slične onima za Boze operatore.

$$\langle \langle \hat{S}_{m,\rho}^{+(a)} | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_{||}, k_z} \langle \langle \hat{S}^{+(a)} | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} e^{i\mathbf{k}_{||} \cdot (\rho - \rho')} e^{ik_z(m - m')} \quad (2.19)$$

Nakon ubacivanja (2.19) u (2.18) i primene inverzne Furije - transformacije dobija se jednačina

$$\begin{aligned} \hbar\omega \langle \langle \hat{S}^{+(a)} | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}^{+(a)}, \hat{B}] \rangle_{\mathbf{k},\omega} + \\ &+ \epsilon_b \langle \langle \hat{S}^{+(a)} | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} + (J \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \sum_{\delta_{||}} e^{i(\mathbf{k}_{||} \cdot \delta_{||})} + 2J' \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \cos k_z a) \langle \langle \hat{S}^{-(b)} | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Zbog konciznijeg zapisa uvode se oznake

$$\gamma(\mathbf{k}_{||}) = \frac{1}{z_2} \sum_{\delta_{||}} e^{i(\mathbf{k}_{||} \cdot \delta_{||})} = \frac{1}{4} \sum_{\delta_{||}} e^{i(\mathbf{k}_{||} \cdot \delta_{||})} \quad (2.21)$$

$$J_a(\mathbf{k}) = (z_2 J \gamma(\mathbf{k}_{||}) + 2J' \cos k_z a) \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle = (4J \gamma(\mathbf{k}_{||}) + 2J' \cos k_z a) \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \quad (2.22)$$

Koristeći ove oznake jednačina (2.20) dobija formu

$$(\hbar\omega - \epsilon_b) \langle \langle \hat{S}^{+(a)} | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} - J_a(\mathbf{k}) \langle \langle \hat{S}^{-(b)} | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}^{+(a)}, \hat{B}] \rangle \quad (2.23)$$

Ako se sprovede potpuno analogan polazeći od jednačine

$$\hbar\omega G_{bB}^-(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{-(b)}, \hat{B}_{m',\rho'}(0)] \rangle + \langle \langle [\hat{S}_{m,\rho}^{-(b)}, \hat{H}] | \hat{B}_{m',\rho'} \rangle \rangle_{\omega} \quad (2.24)$$

dobija se

$$J_b(\mathbf{k}) \langle \langle \hat{S}^+(a) | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} + (E + \epsilon_a) \langle \langle \hat{S}^-(b) | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}^-(b), \hat{B}] \rangle \quad (2.25)$$

gde su uvedene oznake

$$\epsilon_a = (4J + 2J') \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \quad (2.26)$$

$$\tilde{J}_b(k) = (z_2 J \gamma(\mathbf{k}_{\parallel}) + 2J' \cos k_z a) \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle = (4J \gamma(\mathbf{k}_{\parallel}) + 2J' \cos k_z a) \langle \hat{S}^{z(b)} \rangle \quad (2.27)$$

Dobijen je sistem jednačina za Grinove funkcije

$$(E - \epsilon_b) \langle \langle \hat{S}^+(a) | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} - J_a(\mathbf{k}) \langle \langle \hat{S}^-(b) | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}^+(a), \hat{B}] \rangle \quad (2.28)$$

$$J_b(\mathbf{k}) \langle \langle \hat{S}^+(a) | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} + (E + \epsilon_a) \langle \langle \hat{S}^-(b) | \hat{B} \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}^-(b), \hat{B}] \rangle \quad (2.29)$$

Uvedene su oznake

$$\epsilon_a = (z_2 J + 2J') \langle \hat{S}^{z(a)} \rangle \quad (2.30)$$

$$\epsilon_b = (z_2 J + 2J') \langle \hat{S}^{z(b)} \rangle \quad (2.31)$$

$$z_2 = 4 \quad (2.32)$$

$$J_i(\mathbf{k}) = (z_2 J \gamma(\mathbf{k}_{\parallel}) + 2J' \cos k_z a) \langle \hat{S}^{z(i)} \rangle, \quad i = a, b \quad (2.33)$$

$$\gamma(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{1}{2} (\cos k_x a + \cos k_y a) = \frac{1}{z_2} \sum_{\delta_{\parallel}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \delta_{\parallel}} \quad (2.34)$$

Sistem će biti rešavan primenom Kramerovog pravila. Determinanta sistema  $\Delta(E) = 0$ , definiše energiju magnona u sistemu.

$$\begin{vmatrix} E - \epsilon_b & -J_a(\mathbf{k}) \\ J_b(\mathbf{k}) & E + \epsilon_a \end{vmatrix} = 0 \quad (2.35)$$

Raspisivanjem determinante i rešavanjem kvadratne jednačine dobija se

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{\epsilon_b - \epsilon_a \pm \sqrt{(\epsilon_a + \epsilon_b)^2 - 4J_a(\mathbf{k})J_b(\mathbf{k})}}{2} \quad (2.36)$$

S obzirom da nema spoljašnjeg polja očigledno je

$$\langle \hat{S}^{z(a)} \rangle = \langle \hat{S}^{z(b)} \rangle = \langle \hat{S}^z \rangle \quad (2.37)$$

, kao i

$$J_a(\mathbf{k}) = J_b(\mathbf{k}) = J(\mathbf{k}) \quad (2.38)$$

$$\epsilon_a = \epsilon_b = \epsilon = (z_2 J + 2J') \langle \hat{S}^z \rangle \quad (2.39)$$

$$E(\mathbf{k}) = \langle \hat{S}^z \rangle \sqrt{J^2(0) - J^2(\mathbf{k})} \quad (2.40)$$

gde je

$$J(\mathbf{k}) = z_2 J \gamma(\mathbf{k}_{\parallel}) + 2J' \cos k_z a \quad (2.41)$$

$$J(0) = z_2 J + 2J' \quad (2.42)$$

Specijalno za slučaj izotropnog antiferomagneta  $J' = J$  imamo

$$E(\mathbf{k}) = \langle \hat{S}^z \rangle 6J \sqrt{1 - \gamma^2(\mathbf{k})} \quad (2.43)$$

, gde je

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a}{3} \quad (2.44)$$

Da bi se došlo do izraza za magnetizaciju neophodno je rešiti sistem jednačina za Grinove funkcije (2.28) i (2.29). Pre rešavanja datog sistema neophodno je precizirati spinski operator  $\hat{B}$ .

## 2.3 Računanje magnetizacije u Tjablikovskoj aproksimaciji

U sistemu jednačina dobijenom u prošlom poglavlju stavimo  $\hat{B} = \hat{S}^-(a)$ . Sistem jednačina (2.28) i (2.29) prelazi u

$$(E - \epsilon) \langle \langle \hat{S}^+(a) | \hat{S}^-(a) \rangle \rangle_{\mathbf{k}, \omega} - J(\mathbf{k}) \langle \langle \hat{S}^-(b) | \hat{S}^-(a) \rangle \rangle_{\mathbf{k}, \omega} = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}^+(a), \hat{S}^-(a)] \rangle \quad (2.45)$$

$$J(\mathbf{k}) \langle \langle \hat{S}^+(a) | \hat{S}^-(a) \rangle \rangle_{\mathbf{k}, \omega} + (E + \epsilon) \langle \langle \hat{S}^-(b) | \hat{S}^-(a) \rangle \rangle_{\mathbf{k}, \omega} = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{S}^-(b), \hat{S}^-(a)] \rangle \quad (2.46)$$

Nepoznate u ovom sistemu su odgovarajuće Grinove funkcije  $\langle \langle \hat{S}^+(a) | \hat{S}^-(a) \rangle \rangle_{\mathbf{k}, \omega}$  i  $\langle \langle \hat{S}^-(b) | \hat{S}^-(a) \rangle \rangle_{\mathbf{k}, \omega}$ . One se mogu izračunati primenom Kramerovog pravila. Za izračunavanje magnetizacije potrebno je znati Grinovu funkciju  $\langle \langle \hat{S}^+(a) | \hat{S}^-(a) \rangle \rangle_{\mathbf{k}, \omega}$ .

$$\langle \langle \hat{S}^+(a) | \hat{S}^-(a) \rangle \rangle_{\mathbf{k}, \omega} = \frac{\Delta \langle \langle \hat{S}^+(a) | \hat{S}^-(a) \rangle \rangle_{\mathbf{k}, \omega}}{\Delta} \quad (2.47)$$

$$\Delta_{\langle\langle\hat{S}^+(a)|\hat{S}^-(a)\rangle\rangle_{\mathbf{k},\omega}} = \left| \begin{array}{cc} \frac{i\hbar}{2\pi}\langle[\hat{S}^+(a), \hat{S}^-(a)]\rangle & -J(\mathbf{k}) \\ \frac{i\hbar}{2\pi}\langle[\hat{S}^-(b), \hat{S}^-(a)]\rangle & E + \epsilon \end{array} \right| = \frac{i\hbar}{2\pi} \left| \begin{array}{cc} 2\langle\hat{S}^z\rangle & -J(\mathbf{k}) \\ 0 & E + \epsilon \end{array} \right| \quad (2.48)$$

$$\Delta = (E - E_{\mathbf{k}})(E + E_{\mathbf{k}}) \quad (2.49)$$

1

$$\begin{aligned} \langle\langle\hat{S}^+(a)|\hat{S}^-(a)\rangle\rangle_{\mathbf{k},\omega} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\left| \begin{array}{cc} 2\langle\hat{S}^z\rangle & -J(\mathbf{k}) \\ 0 & E + \epsilon \end{array} \right|}{(E - E_{\mathbf{k}})(E + E_{\mathbf{k}})} = \\ &= \frac{i\hbar}{2\pi} 2\langle\hat{S}^z\rangle \frac{E + \epsilon}{(E - E_{\mathbf{k}})(E + E_{\mathbf{k}})} = \\ &= \frac{i\hbar}{2\pi} \left( \frac{A}{E - E_{\mathbf{k}}} + \frac{B}{E + E_{\mathbf{k}}} \right) \end{aligned} \quad (2.50)$$

Rešavajući sistem jednačina

$$A + B = 2\langle\hat{S}^z\rangle \quad (2.51)$$

$$A - B = \frac{2\langle\hat{S}^z\rangle\epsilon}{E_{\mathbf{k}}} \quad (2.52)$$

dobija se

$$A = \langle\hat{S}^z\rangle \frac{E_{\mathbf{k}} + \epsilon}{E_{\mathbf{k}}} \quad (2.53)$$

$$B = \langle\hat{S}^z\rangle \frac{E_{\mathbf{k}} - \epsilon}{E_{\mathbf{k}}} \quad (2.54)$$

$$\langle\langle\hat{S}^+(a)|\hat{S}^-(a)\rangle\rangle_{\mathbf{k},\omega} = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\langle\hat{S}^z\rangle}{E_{\mathbf{k}}} \left( \frac{E_{\mathbf{k}} + \epsilon}{E - E_{\mathbf{k}}} + \frac{E_{\mathbf{k}} - \epsilon}{E_{\mathbf{k}} + E} \right) \quad (2.55)$$

Magnetizacija za spin  $S = \frac{1}{2}$  je data izrazom

$$\langle\hat{S}^z\rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle\hat{S}^- \hat{S}^+\rangle_{\mathbf{k}} \quad (2.56)$$

Iz ovog izraza vidi se da vrednost magnetizacije na ma kojoj temperaturi mora biti manja od 0,5.

Spektralna teorema daje

$$\langle\hat{S}^z\rangle = \frac{1}{2} - \frac{\langle\hat{S}^z\rangle}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \left( \frac{E_{\mathbf{k}} + \epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + \frac{E_{\mathbf{k}} - \epsilon}{e^{-\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} \right) \quad (2.57)$$

---

<sup>1</sup> $E_{\mathbf{k}} \equiv E(\mathbf{k})$

Odavde se elementarnom matematikom<sup>2</sup> dobija

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{\langle \hat{S}^z \rangle}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \left( \frac{\epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + \epsilon - E_{\mathbf{k}} + \frac{\epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} \right) \quad (2.58)$$

U nastavku je, iz pedagoških razloga, dat svaki korak do dobijanja krajnjeg izraza za magnetizaciju.

$$\langle \hat{S}^z \rangle \left( 1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \left( \frac{\epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + \epsilon - E_{\mathbf{k}} + \frac{\epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} \right) \right) = \frac{1}{2} \quad (2.59)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}^z \rangle &= \frac{1}{2} \frac{1}{1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \left( \frac{2\epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + \epsilon - E_{\mathbf{k}} \right)} = \frac{1}{2} \frac{1}{1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\epsilon}{E_{\mathbf{k}}} - 1 + \frac{2\epsilon}{E_{\mathbf{k}}} \frac{1}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} \right)} = \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon}{E_{\mathbf{k}}} \left( 1 + \frac{2}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} \right)} = \frac{1}{2} \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon}{E_{\mathbf{k}}} \frac{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} + 1}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1}} \end{aligned} \quad (2.60)$$

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon}{E_{\mathbf{k}}} \coth \frac{E_{\mathbf{k}}}{2\theta}} \quad (2.61)$$

Korišćenjem relacija (2.39) i (2.40) izraz za magnetizaciju (2.61) može se zapisati u samousaglašenoj formi

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1-\tilde{\gamma}^2(\mathbf{k})}} \coth \frac{2J(2+\frac{J'}{J})\sqrt{1-\tilde{\gamma}^2(\mathbf{k})}\langle \hat{S}^z \rangle}{2\theta}} \quad (2.62)$$

gde je  $\tilde{\gamma}(\mathbf{k})$  dato relacijom

$$\tilde{\gamma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2+\lambda} (\cos k_x a + \cos k_y a + \lambda \cos k_z a) \quad (2.63)$$

u kojoj parametar  $\lambda = \frac{J'}{J}$  predstavlja odnos integrala izmene u  $z$ -pravcu i integrala izmene u ravni. Magnetizacija ne može biti izračunata analitički. Ovaj izraz će kasnije biti analiziran numerički. Jednačina (2.62) je samousaglašena, jer je rezultat leve strane izražen preko funkcije od  $\langle \hat{S}^z \rangle$  na desnoj strani. Sa povećanjem temperature magnetizacija definisana relacijom (2.62) će opadati.

---

<sup>2</sup>Ovde se koristi identitet  
 $\frac{1}{e^{-x}-1} = -1 - \frac{1}{e^x-1}$

## 2.4 Nelova temperatura u RPA za opšti spin

Nelova temperatura je temperatura faznog prelaza iz antiferomagnetne u paramagnetnu fazu [5, 6, 7]. To je temperatura na kojoj magnetizacija postaje jednaka nuli. Analogon ove temperature za feromagnetne materijale je Kirijeva temperatura. Oznaka koju koristimo za Nelovu temperaturu je  $T_N$ , ili ako želimo da izrazimo ovu temperaturu u energetskim jedinicama koristimo relaciju:

$$\theta_N = k_B T_N \quad (2.64)$$

Nelova temperatura se određuje kao ona temperatura na kojoj  $\langle \hat{S}^z \rangle \rightarrow 0$ , odnosno:

$$\langle \hat{S}^z \rangle \rightarrow 0, T \rightarrow T_N \quad (2.65)$$

Na istom čvoru ( $\mathbf{n} \equiv \mathbf{m}$ ) nalazimo

$$\langle \hat{S}^-(a) \hat{S}^+(a) \rangle = 2 \langle \hat{S}^z \rangle \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \left( \frac{E_{\mathbf{k}} + \epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + \frac{E_{\mathbf{k}} - \epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} \right) = 2 \langle \hat{S}^z \rangle P_S(T) \quad (2.66)$$

odakle je očividno

$$P_S(T) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \left( \frac{E_{\mathbf{k}} + \epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + \frac{E_{\mathbf{k}} - \epsilon}{e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} \right) \quad (2.67)$$

Do izraza za magnetizaciju dolazi se polazeći od Kalenove diferencijalne jednačine

$$\frac{d^2 \Omega(\alpha)}{d\alpha^2} + \frac{(1 + P_S) + P_S e^{-\alpha \hbar}}{(1 + P_S) - P_S e^{-\alpha \hbar}} \hbar \frac{d\Omega(\alpha)}{d\alpha} - \hbar^2 S(S+1) \Omega(\alpha) = 0 \quad (2.68)$$

za granične uslove

$$\Omega(0) = 1 \quad (2.69)$$

$$\prod_{m_S=-S}^S \left( \frac{d}{d\alpha} - \hbar m_S \right) \Omega(\alpha) \Big|_{\alpha=0} = 0 \quad (2.70)$$

Rešavanjem jednačine dobija se funkcija  $\Omega(\alpha)$

$$\Omega(\alpha) = \frac{e^{-\hbar} P_S^{2S+1} - e^{\hbar \alpha (S+1)} (1 + P_S)^{2S+1}}{[P_S^{2S+1} - (1 + P_S)^{2S+1}][(1 + P_S)e^{\hbar \alpha} - P_S]} \quad (2.71)$$

Izvod  $\Omega$  po  $\alpha$  uzet u tački  $\alpha = 0$  daje izraz za magnetizaciju

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \hbar \frac{(S - P_S)(1 + P_S)^{2S+1} + (1 + S + P_S)P_S^{2S+1}}{(1 + P_S)^{2S+1} - P_S^{2S+1}} \quad (2.72)$$

Za više detalja pogledati [6]. Nadalje će ovaj izraz biti dat u jedinicama  $\hbar$ .

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \frac{(S - P_S)(1 + P_S)^{2S+1} + (1 + S + P_S)P_S^{2S+1}}{(1 + P_S)^{2S+1} - P_S^{2S+1}} \quad (2.73)$$

Kalenov izraz za  $\langle \hat{S}^z \rangle$  u RPA, Izraz (2.73) važi za ma koji spin.

Za  $S = \frac{1}{2}$  Kalenov izraz dobija oblik:

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{1 + 2P_S} \quad (2.74)$$

U okolini kritične (Nelove) temperature magnetizacija se aproksimativno može opisati izrazom:

$$\langle \hat{S}^z \rangle \approx \frac{\frac{1}{3}S(S+1)(2S+1)P_S^{2S+1}}{(2S+1)P_S^{2S}} = \frac{1}{3}S(S+1)\frac{1}{P_S} \quad (2.75)$$

Relacija (2.75) je opšteg tipa. Nije specijalan slučaj za  $S = \frac{1}{2}$  poput (2.74). Iz relacije (2.75) dobija se

$$P_S = \frac{1}{3}S(S+1)\frac{1}{\langle \hat{S}^z \rangle} \quad (2.76)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \langle \hat{S}^z \rangle \sqrt{J^2(0) - J^2(\mathbf{k})} \quad (2.77)$$

za  $\theta \approx \theta_N$ ,  $\langle \hat{S}^z \rangle \approx 0$ , tako da imamo

$$P_S(\theta \approx \theta_N) \approx \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\epsilon}{E_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}}}{\theta_N}} + \frac{\epsilon}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.78)$$

3

$$P_S(\theta \approx \theta_N) = \frac{\theta_N}{\langle \hat{S}^z \rangle} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{z_2 J + 2J'}{J^2(0) - J^2(\mathbf{k})} \quad (2.79)$$

$$P_S = \frac{1}{3}S(S+1)\frac{1}{\langle \hat{S}^z \rangle} = \frac{\theta_N}{\langle \hat{S}^z \rangle} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{z_2 J + 2J'}{J^2(0) - J^2(\mathbf{k})} \quad (2.80)$$

Izjednačavanjem desnih strana relacija (2.76) i (2.80) dobija se izraz za kritičnu temperaturu magnetnog uređivanja

$$\theta_N = k_B T_N = \frac{1}{3} \frac{S(S+1)}{C_N} \quad (2.81)$$

gde je

$$C_N = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{J(0)}{J^2(0) - J^2(\mathbf{k})} \quad (2.82)$$

U RPA metodu dobija se izraz za Nelovu temperaturu, te ona može biti računata nezavisno od magnetizacije. Ona ipak ne može biti izračunata analitički već isključivo numerički. Problem RPA metoda je što se javlja nekontrolisana greška usled presecanja lanaca jednačina. Ovaj metod se ipak široko koristi jer je priroda konzistentna i eksperimentalni rezultati se poklapaju sa teorijskim. Ipak zbog pomenute nekontrolisane greške u teoriju se uvode razni metodi čija je ideja da se spinski hamiltonijan bozonizuje uz korišćenje određenih aproksimacija.

---

<sup>3</sup>  $\frac{\epsilon}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2} \approx 0$





# Glava 3

## Analiza antiferomagneta u bozonskoj slici

U kvantnoj teoriji magnetizma postoji niz spinskih hamiltonijana, koji u manjoj ili većoj meri, dobro opisuju različite materijale. Hamiltonijani su, kako im i samo ime kaže, izražavaju preko operatora spina čije su osobine date u Prilogu C.

U tretiranju spinskih hamiltonijana moguće je koristiti kako bozonske tako i fermionske reprezentacije spinskih operatora. Spinski operatori koji figurišu u odgovarajućim spinskim hamiltonijanima nemaju ni Fermi ni Boze-komutacione relacije, već zadovoljavaju relacije koje su grubo rečeno smeša jednih i drugih. Furijeova transformacija prostor - talasni vektor nije kanonska za spinske operatore. Spinski operatori u direktnog prostoru imaju drugačiju kinematiku nego njihovi Furije - likovi koji deluju u recipročnom prostoru.

U ovom radu su korišćene bozonske reprezentacije spinskih operatora, jer se spinovi na niskim temperaturama ponašaju kao bozoni. Prednost rada sa bozonskim operatorima je u tome što Furijeova transformacija prostor - talasni vektor održava komutacione relacije bozonskih operatora, za razliku od komutatora spinskih operatora za koje Furijeova transformacija nije kanonska transformacija. Furijeova transformacija predstavlja alatku za prelazak u recipročni prostor koji daje potpunu informaciju o simetriji nekog kristala.

Za strožu matematičku formulaciju problema mora se koristiti teorija konačnodimenzionih vektorskih prostora [9]. U cilju uvođenja formalizma treba posmatrati skup od  $N$  spinskih operatora  $\{\hat{\mathbf{S}}_i\}$  pridruženim odgovarajućim čvorovima rešetke  $\mathbf{i}$ . Bazisni vektori svakog od spinskih operatora  $|S, m\rangle_i$  definisani su svojstvenim problemima:

$$\hat{\mathbf{S}}_i^2 |S, m\rangle_i = S(S + 1)\hbar^2 |S, m\rangle_i \quad (3.1)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_i^z |S, m\rangle_i = m\hbar |S, m\rangle_i \quad (3.2)$$

Za svaki pojedinačni spin ovi vektori čine bazis koji generiše jedan  $2S + 1$  - dimenzion Hilbertov prostor. Kako se proučava sistem uređenih spinova Hilbertov prostor za ceo sistem je generisan preko direktnog (tenzorskog) proizvoda Hilbertovih prostora [4] pojedinačnih spinova:

$$\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_{S_1} \otimes \mathcal{H}_{S_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{S_N} \quad (3.3)$$

Dimenzija Hilbertovog prostora sistema je

$$\dim \mathcal{H}_S = (2S_1 + 1)(2S_2 + 1)\dots(2S_N + 1) \quad (3.4)$$

Ako se u svakom čvoru nalazi spin  $\frac{1}{2}$ , kao što je to slučaj u ovom radu dimenzija Hilbertovog prostora sistema je

$$\dim \mathcal{H}_S = 2^N \quad (3.5)$$

Treba uporediti ovo sa skupom od  $N$  Boze - operatora  $\{\hat{B}_i\}$ . Bozonski operatori zadovoljavaju komutacione relacije

$$[\hat{B}_i, \hat{B}_j^+] = \delta_{i,j} \quad (3.6)$$

$$[\hat{B}_i, \hat{B}_j] = [\hat{B}_i^+, \hat{B}_j^+] = 0 \quad (3.7)$$

Hilbertov prostor sistema je

$$\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_{B_1} \otimes \mathcal{H}_{B_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{B_N} \quad (3.8)$$

čiji bazis u svakom od potprostora generišu vektori  $|n\rangle_i$  koji su svojstveni vektori operatora broja čestica  $\hat{n}_i = \hat{B}_i^+ \hat{B}_i$ .

Osnovni problem bozonizacije je da se nađu funkcije Boze operatora koje kada deluju u prostoru stanja  $\mathcal{H}_B$  imaju iste komutacione relacije i srednje vrednosti kao i operatori  $\hat{S}^\pm$  i  $\hat{S}^z$  koji figurišu u spinskom hamiltonijanu.

Najniža bozonska reprezentacija spinskih operatora je Blohova reprezentacija [10, 6] ili aproksimacija neinteragujućih spinskih talasa. Osnovno stanje je  $|SS\rangle$ .

$$\frac{1}{\hbar} \hat{S}_i^- = \sqrt{2S} \hat{B}_i^+ \quad (3.9)$$

$$\frac{1}{\hbar} \hat{S}_i^+ = \sqrt{2S} \hat{B}_i \quad (3.10)$$

Operatori  $\hat{B}_k^+$  i  $\hat{B}_k$  respektivno kreiraju i anihiliraju spinske talase odnosno magnone. Ovi operatori su Furijeove transformacije operatora  $\hat{B}_i^+$  i  $\hat{B}_i$ . U ovoj aproksimaciji zanemaruju se proizvodi od dva ili više Boze - operatora, ali tek nakon što se izvrši prelaz na normalne proizvode operatora. Ovo je analogno zanemarivanju interakcije između spinskih talasa.

Korišćenjem relacije (C.10) dobija se

$$\frac{1}{\hbar} \hat{S}_i^z = S - \hat{B}_i^+ \hat{B}_i \quad (3.11)$$

Ova relacija zajedno sa (3.9) i (3.10) definiše Blohovu aproksimaciju. U sledećem koraku potrebno je primeniti Blohovu aproksimaciju na problem koji je proučavan u ovom radu.

### 3.1 Spinski talasi u Blohovej aproksimaciji

Hamiltonijan (2.1) je napisan u pogodnoj formi za bozonizaciju. U njemu je  $B$  podrešetka zarotirana. Pod bozonizacijom se smatra prelazak sa bozonskih na spinske operatore. Jedna od prednosti rada sa bozonskim operatorima je ta što je za njihove komutatore Furije transformacija kanonska transformacija.<sup>1</sup>

Najniža ovakva aproksimacija je Blohova ili spin wave (SW) aproksimacija [10, 6].  
čvor  $i$  (podrešetka  $A$ ):

$$\hat{S}_i^+ = \sqrt{2S}\hat{a}_i, \quad \hat{S}_i^z = S - \hat{a}_i^+\hat{a}_i, \quad \hat{S}_i^- = \sqrt{2S}\hat{a}_i^+ \quad (3.12)$$

čvor  $j$  (podrešetka  $B$ ):

$$\hat{S}_j^+ = \sqrt{2S}\hat{b}_j, \quad \hat{S}_j^- = \sqrt{2S}\hat{b}_j^+, \quad \hat{S}_j^z = S - \hat{b}_j^+\hat{b}_j \quad (3.13)$$

Nakon primene Blohove aproksimacije hamiltonijan (2.1) dobija oblik

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \sum_m J \sum_{\rho, \delta_{\parallel}} (S\hat{a}_{m,\rho}^+ \hat{b}_{m,\rho+\delta_{\parallel}}^+ + S\hat{a}_{m,\rho}^+ \hat{b}_{m,\rho+\delta_{\parallel}}^+ + S\hat{a}_{m,\rho}^+ \hat{a}_{m,\rho} + S\hat{b}_{m,\rho+\delta_{\parallel}}^+ \hat{b}_{m,\rho+\delta_{\parallel}}) + \\ &+ SJ' \sum_{m,\rho} (\hat{a}_{m,\rho}^+ \hat{b}_{m+1,\rho}^+ + \hat{a}_{m,\rho} \hat{b}_{m+1,\rho} + \hat{a}_{m,\rho}^+ \hat{b}_{m-1,\rho}^+ + \hat{a}_{m,\rho} \hat{b}_{m-1,\rho} + \\ &+ \hat{b}_{m+1,\rho}^+ \hat{b}_{m+1,\rho} + \hat{b}_{m-1,\rho}^+ \hat{b}_{m-1,\rho} + 2\hat{a}_{m,\rho}^+ \hat{a}_{m,\rho}) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Sada se vrši prelazak u  $\mathbf{k}$ -prostor. Prilikom prelaženja hamiltonijana (3.14) u  $\mathbf{k}$ -prostor iskoriste se Furije transformacije Boze -operatora

$$\hat{B}_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} \quad (3.15)$$

i

$$\hat{B}_{\mathbf{n}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} \quad (3.16)$$

kao i definicija Kronekera i osobina istog da ukida sumu

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{n}-\mathbf{m})} = N\delta_{\mathbf{n},\mathbf{m}} \quad (3.17)$$

dobija se

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}^{SW} &= \hat{\mathcal{H}}_0 + \sum_{\mathbf{k}} \{ \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} (4SJ + 2SJ') + \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} (4SJ + 2SJ') + \\ &+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} (4SJ\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) + 2SJ' \cos k_z a) + \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ (4SJ\gamma(\mathbf{k}) + 2SJ' \cos k_z a) \} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Za ovu aproksimaciju biće diskutovana zavisnost magnetizacije od temperature i računata Nelova temperatura.

<sup>1</sup>Furije transformacija ostavlja komutatore bozonskih operatora nepromenjenim.

## 3.2 Reprezentacije Holštajn-Primakova i Dajson-Maljejeva

Da bi se tretirala i interakcija između magnona koriste se neke druge bozonske reprezentacije.

### 3.2.1 Reprezentacija Holštajn - Primakova (HP) ( $S \geq \frac{1}{2}$ )

Holštajn i Primakov si predložili sledeću bozonsku reprezentaciju spinskih operatora [6, 5, 9]

$$\frac{1}{\hbar} \hat{S}_i^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{\hat{a}_i^+ \hat{a}_i}{2S}} \hat{a}_i \quad (3.19)$$

$$\frac{1}{\hbar} \hat{S}_i^- = \sqrt{2S} \hat{a}_i^+ \sqrt{1 - \frac{\hat{a}_i^+ \hat{a}_i}{2S}} \quad (3.20)$$

Primenom relacije (C.10) dobija se

$$\frac{1}{\hbar} \hat{S}_i^z = S - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad (3.21)$$

Radi pojednostavljenog pisanja uzima se  $\hbar = 1$ .

Operatori  $\hat{S}^+$  i  $\hat{S}^-$  su jedan drugom adjungovani. U izrazima za ove operatore figuriše koren  $\sqrt{1 - \frac{\hat{a}_i^+ \hat{a}_i}{2S}}$ . Da bi se zapis skratio može se uvesti oznaka  $\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ .

$$\Phi(\hat{n}_i) = \sqrt{1 - \frac{\hat{n}_i}{2S}} \quad (3.22)$$

Ako svojstvena vrednost  $n_i$  operatora  $\hat{n}_i$ , broj spinskih devijacija, postane veći od  $2S$  dobijaju se nefizička stanja. U računu se mogu razmatrati samo fizička stanja

$$n_i = 0, 1, \dots, 2S$$

Razvijanjem u red izraza (3.22) dobija se beskonačno mnogo članova

$$\Phi(\hat{n}_i) = 1 - \frac{\hat{n}_i}{4S} - \frac{\hat{n}_i^2}{32S^2} - \frac{\hat{n}_i^3}{128S^3} - \dots \quad (3.23)$$

Zadržavanjem na prvom članu dobija se Blohova reprezentacija.

Reprezentacija Holštajn - Primakova (HP)[6, 5, 9] je najpoznatija ermitska bozonska reprezentacija spinskih operatora. Problem sa ovom reprezentacijom je što su spinski operatori  $\hat{S}^+$  i  $\hat{S}^-$  izraženi preko korena nekog izraza koji u sebi sadrži proizvod Boze - operatora. Ovaj koren nas u nekim računima može dovesti do problema. Takođe problem s korenom je što prilikom razvoja u red istog dobijamo beskonačno mnogo članova.

### 3.2.2 Reprezentacija Dajson - Maljejeva (DM) ( $S \geq \frac{1}{2}$ )

Najpoznatija neermitska bozonska reprezentacija nosi ime po fizičarima Dajsonu i Maljejevu [6, 5].

$$\frac{1}{\hbar} \hat{S}_i^+ = \sqrt{2S} \hat{a}_i \quad (3.24)$$

$$\frac{1}{\hbar} \hat{S}_i^- = \sqrt{2S} \hat{a}_i^+ \left(1 - \frac{\hat{n}_i}{2S}\right) \quad (3.25)$$

$$\frac{1}{\hbar} \hat{S}_i^z = S - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad (3.26)$$

U ovoj reprezentaciji nema problema sa nefizičkim stanjima i operatorskim redom kao kod reprezentacije Holštajn - Primakova. Oguči je pokazao da HP i DM dovode do istih rezultata (do članova reda  $\frac{1}{S}$ ) i da su povezane neunitarnom transformaciju.

## 3.3 Samousaglašena aproksimacija spinskih talasa

Samousaglašena aproksimacija spinskih talasa daje sistem jednačina čijim se samosaglasnim rešavanjem, na sličan način kao i u slučaju RPA, dolazi do zavisnosti magnetizacije od temperature kao i određivanja Nelove temperature.

U ovom radu će biti korišćena reprezentaciju Dajson- Maljejeva (DM) [6, 5] koja je neermitska ( $(\hat{S}^+)^{\dagger} \neq \hat{S}^-$ ), ali za razliku od HP reprezentacije ovde su operatori  $\hat{S}^+$  i  $\hat{S}^-$  izraženi u vidu konačne sume nekog izraza koji u sebi sadrži Boze - operatore.

čvor  $i$  (podrešetka  $A$ ):

$$\hat{S}_i^+ = \sqrt{2S} \hat{a}_i, \quad \hat{S}_i^z = S - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad \hat{S}_i^- = \sqrt{2S} \left( \hat{a}_i^+ - \frac{1}{2S} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \right) \quad (3.27)$$

čvor  $j$  (podrešetka  $B$ ):

$$\hat{S}_j^+ = \sqrt{2S} \left( \hat{b}_j - \frac{1}{2S} \hat{b}_j^+ \hat{b}_j \hat{b}_j \right) \quad \hat{S}_j^- = \sqrt{2S} \hat{b}_j^+, \quad \hat{S}_j^z = S - \hat{b}_j^+ \hat{b}_j \quad (3.28)$$

Podrešetke  $A$  i  $B$  posmatraju se nezavisno.<sup>2</sup>

<sup>3</sup> Nakon primene DM reprezentacije na hamiltonijan (2.1) dobija se neermitski hamiltonijan koji se može zapisati u formi.

$$\hat{H}_{DM} = \hat{H}_0 + \hat{H}_2 + \hat{H}_4 \quad (3.29)$$

---

<sup>2</sup>Na ovom mestu treba istaći i drugi oblik DM reprezentacije:

čvor  $i$  (podrešetka  $A$ ):

$$\hat{S}_i^+ = \sqrt{2S} \left( \hat{a}_i - \frac{1}{2S} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_i \right)$$

$$\hat{S}_i^- = \sqrt{2S} \hat{a}_i^+, \quad \hat{S}_i^z = S - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$$

čvor  $j$  (podrešetka  $B$ ):

$$\hat{S}_j^+ = \sqrt{2S} \hat{b}_j, \quad \hat{S}_j^z = S - \hat{b}_j^+ \hat{b}_j$$

$$\hat{S}_j^- = \sqrt{2S} \left( \hat{b}_j^+ - \frac{1}{2S} \hat{b}_j^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_j \right)$$

<sup>3</sup>Spinski operatori su dati u jedinicama  $\hbar$ .

gde su odgovarajući sumati respektivno:

$$\hat{H}_0 = -S^2 \sum_m \sum_{\rho, \delta_{||}} J - 2S^2 \sum_{m, \rho} J' \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_2 = & SJ \sum_m \sum_{\rho, \delta_{||}} (\hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ + \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}} + \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}} + \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho}) + \\ & + SJ' \sum_{m, \rho} (\hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{b}_{m+1, \rho}^+ + \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m+1, \rho} + \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{b}_{m-1, \rho}^+ + \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m-1, \rho} + \\ & + \hat{b}_{m+1, \rho}^+ \hat{b}_{m+1, \rho} + \hat{b}_{m-1, \rho}^+ \hat{b}_{m-1, \rho} + 2\hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho}) \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_4 = & - \sum_m J \sum_{\rho, \delta_{||}} \left\{ \frac{1}{2} (\hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ + \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}} \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}) + \right. \\ & + \left. \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}} \right\} - \\ & - J' \sum_{m, \rho} \left\{ \frac{1}{2} (\hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m+1, \rho}^+ + \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m+1, \rho}^+ \hat{b}_{m+1, \rho} \hat{b}_{m+1, \rho} + \right. \\ & + \left. \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho} \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m-1, \rho}^+ + \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m-1, \rho}^+ \hat{b}_{m-1, \rho} \hat{b}_{m-1, \rho}) + \right. \\ & + \left. \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m+1, \rho}^+ \hat{b}_{m+1, \rho} + \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m-1, \rho}^+ \hat{b}_{m-1, \rho} \right\} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Reprezentacija Dajson - Maljejeva je primenljiva za  $S \geq \frac{1}{2}$ . Nakon prelaska u  $\mathbf{k}$  - prostor dobija se

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_2 = & 4SJ \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \gamma_{||}(\mathbf{k}) + 4SJ \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \gamma_{||}(\mathbf{k}) + \\ & + 4SJ \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} + 4SJ \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} + \\ & + 2SJ' \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \cos k_z a + 2SJ' \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \cos k_z a + \\ & + 2SJ' \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} + 2SJ' \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Pre nego što se izvrši Furije transformacija hamiltonijana (3.32) radi pojednostavljenja izvrši se dekuplovanje na sledeći način:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ & = \frac{1}{2} \langle \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho}^+ \rangle \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ + \frac{1}{2} \langle \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ \rangle \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho}^+ + \\ & + \langle \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho} \rangle \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ + \langle \hat{a}_{m, \rho} \hat{b}_{m, \rho + \delta_{||}}^+ \rangle \hat{a}_{m, \rho}^+ \hat{a}_{m, \rho} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Ostali članovi u hamiltonijanu (3.32) dekopluju se potpuno analogno.

Nakon što je primenjeno dekoplovanje u hamiltonijanu (3.32) odbačeni su neermitski članovi i izvršena Furije transformacija. Dobijen je sledeći rezultat:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_4 = & -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ \rangle \gamma_{\parallel}(\mathbf{q}) - \\
& - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle \gamma_{\parallel}(-\mathbf{q}) - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \gamma_{\parallel}(-\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} \rangle - \\
& - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} \rangle - \\
& - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ \rangle \gamma_{\parallel}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle \gamma_{\parallel}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \\
& - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \cos(k_z a) \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ \rangle \cos(q_z a) - \\
& - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle \cos q_z a - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \cos k_z a \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} \rangle - \\
& - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} \rangle - \\
& - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ \rangle \cos(k_z - q_z) a - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle \cos(k_z - q_z) a
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Hamiltonijan (3.29) u self consistent spin wave (SCSW) aproksimaciji ima formu

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}^{SCSW} = & \hat{\mathcal{H}}_0 + \sum_{\mathbf{k}} \{ \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} (4SJ + 2SJ' - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} \rangle - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ \rangle \gamma_{\parallel}(\mathbf{q}) - \\
& - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ \rangle \cos q_z a - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} \rangle) + \\
& + \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} (4SJ + 2SJ' - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle \gamma_{\parallel}(\mathbf{q}) - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle - \\
& - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle \cos q_z a - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle) + \\
& + \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} (4SJ \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) + 2SJ' \cos k_z a - \frac{1}{N} 4J \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} \rangle - \\
& - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ \rangle \gamma_{\parallel}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \frac{1}{N} 2J' \cos k_z a \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} \rangle - \\
& - \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ \rangle \cos(k_z - q_z) a) + \\
& + \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ (4SJ \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) + 2SJ' \cos k_z a - \frac{1}{N} 4J \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle - \\
& - \frac{1}{N} 4J \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle \gamma_{\parallel}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \frac{1}{N} 2J' \cos k_z a \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle -
\end{aligned}$$

$$- \frac{1}{N} 2J' \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle \cos(k_z - q_z)a \} \quad (3.36)$$

Pošto je prelazak na Boze-operatore vršen u dve podrešetke ovaj hamiltonijan nije još dijagonalan.<sup>4</sup> Za njegovu dijagonalizaciju može se primeniti transformacija Bogoljubova ili metod Grinovih funkcija koji je korišćen u ovom radu. Za Hajzenbergov hamiltonijan (2.1) problem nalaženja očekivanih vrednosti se svodi na izračunavanje izraza

$$\sum_n \langle n | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} | n \rangle \quad (3.37)$$

Hamiltonijan (2.1) se mapira tako što se spinski operatori zamene bozonskim primenom reprezentacije Dajson - Maljejeva, da bi se izbegao problem u radu sa eksponencijalnom funkcijom hamiltonijana. Problem se pojednostavljuje tako što se proizvod četiri Boze - operatora svede na sumu proizvoda od po dva Boze - operatora, tako što se po dva operatora u svakom sumatu zamene srednjim vrednostima odgovarajućih operatora. Do rešenja problema dolazi se vršenjem iteracija uz pretpostavku da je problem samousaglašen.<sup>5</sup>

### 3.4 Izraz za magnetizaciju

Da bi se došlo do izraza za magnetizaciju koristi se metod Grinovih funkcija.

Hamiltonijani (3.18) i (3.36) mogu se napisati u formi:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \sum_{\mathbf{k}} \{ \Gamma_0 (\hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}}) + \Gamma_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+) \} \quad (3.38)$$

gde je u slučaju SW aproksimacije

$$\Gamma_0 = SJ(0) \quad (3.39)$$

$$\Gamma(\mathbf{k}) = SJ(\mathbf{k}) \quad (3.40)$$

a u slučaju SCSW aproksimacije

$$\Gamma_0 = SJ(0) - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (J(0) \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle + J(\mathbf{q}) \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle) \quad (3.41)$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = SJ(\mathbf{k}) - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (J(\mathbf{k}) \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle + J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}} \rangle) \quad (3.42)$$

$$J(\mathbf{k}) = 2J(\cos k_x a + \cos k_y a + \frac{J'}{J} \cos k_z a) \quad (3.43)$$

$$J(0) = 2J(2 + \frac{J'}{J}) \quad (3.44)$$

<sup>4</sup>Kod feromagneta nakon Furije transformacije dobili bismo dijagonalan hamiltonijan.

<sup>5</sup>U radu [12] korišćen je hamiltonijan koji nije čisto bozonski već sadrži i fermionske operatore u svojoj definiciji. Umesto DM reprezentacije u pomenutom radu je korišćena reprezentacija Barjaktar - Krivoručko - Jablonski (BJK).



U izrazima (3.43) i (3.44)  $a$  je parametar elementarne ćelije. Primenom jednačina kretanja

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_{\mathbf{k}}}{dt} = \Gamma_0 \hat{a}_{\mathbf{k}} + \Gamma_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \quad (3.45)$$

$$i\hbar \frac{d\hat{b}_{-\mathbf{k}}^+}{dt} = -\Gamma_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} - \Gamma_0 \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \quad (3.46)$$

dobija se sistem jednačina za Grinove funkcije u  $\omega$  reprezentaciji:

$$(\omega - \Gamma_0) \langle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} | \hat{B} \rangle \rangle_{\omega} - \Gamma_{\mathbf{k}} \langle \langle \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ | \hat{B} \rangle \rangle_{\omega} = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{B}] \rangle \quad (3.47)$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}} \langle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} | \hat{B} \rangle \rangle_{\omega} + (\omega + \Gamma_0) \langle \langle \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ | \hat{B} \rangle \rangle_{\omega} = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{b}_{-\mathbf{k}}^+, \hat{B}] \rangle \quad (3.48)$$

Determinanta sistema:

$$\Delta(\omega) = \begin{vmatrix} \omega - \Gamma_0 & -\Gamma_{\mathbf{k}} \\ \Gamma_{\mathbf{k}} & \omega + \Gamma_0 \end{vmatrix} \quad (3.49)$$

Determinanta sistema definiše energiju magnona u sistemu.

$$\Delta(\omega) = \omega^2 - \Gamma_0^2 + \Gamma_{\mathbf{k}}^2 = 0 \quad (3.50)$$

Odatle imamo

$$\omega(\mathbf{k}) = \sqrt{\Gamma_0^2 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2} \quad (3.51)$$

Poslednji izraz predstavlja disperzionu relaciju koja će figurisati u izrazima za magnetizaciju. Relacija (3.50) ima jednostavniju formu u slučaju spin wave aproksimacije jer je u toj aproksimaciji jednostavniji izraz za  $\Gamma_{\mathbf{k}}$ , pa samim tim i za  $\Gamma_0$ .

Za odgovarajuće korelacione funkcije dobijeni su izrazi

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\Gamma_0}{2\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\theta} - \frac{1}{2} \quad (3.52)$$

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \rangle = -\frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\theta} \quad (3.53)$$

Magnetizacija se dobija iz izraza

$$\sigma = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \quad (3.54)$$

Kada se u izrazu za magnetizaciju zameni (3.52) dobija se

$$\sigma = S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Gamma_0}{\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\theta} \quad (3.55)$$

Za  $\sigma = 0$  dobija se  $\theta_N$ .

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Gamma_0}{\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\theta_N} \quad (3.56)$$

Relacija (3.56) važi i u SW i u SCSW aproksimaciji. U SW i SCSW aproksimaciji ne može se dobiti eksplicitan izraz za Nelovu temperaturu, kao što je dobijeno u RPA aproksimaciji.

### 3.5 Magnetizacija i Nelova temperatura u Blohovej aproksimaciji

U slučaju SW aproksimacije veza između  $\Gamma(\mathbf{k})$  i  $J(\mathbf{k})$  data je relacijom (3.40). Disperziona relacija u SW aproksimaciji dobija formu

$$\omega(\mathbf{k}) = \sqrt{\Gamma_0^2 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2} = 2SJ\sqrt{(2 + \lambda)^2 - (\cos k_x a + \cos k_y a + \lambda \cos k_z a)^2} \quad (3.57)$$

Kada se relacija (3.57) zameni u izraz za magnetizaciju (3.55) dobija se

$$\sigma = S + \frac{1}{2} - (2 + \lambda) \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\coth \frac{\omega(\mathbf{k})}{2\theta}}{\frac{\omega(\mathbf{k})}{2SJ}} \quad (3.58)$$

i Nelova temperatura se određuje iz

$$0 = S + \frac{1}{2} - (2 + \lambda) \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\coth \frac{\omega(\mathbf{k})}{2\theta_N}}{\frac{\omega(\mathbf{k})}{2SJ}} \quad (3.59)$$

Pre numeričkog ispitivanja potrebno je preći sa sume na integral po pravilu

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \frac{v}{(2\pi)^3} \int F(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} \quad (3.60)$$

gde je  $v = a^3$  zapremina elementarne ćelije, a integracija se vrši po prvoj Brillouinovoj zoni. Prelaz sa sume na integral dat je u [11].

### 3.6 Magnetizacija i Nelova temperatura u samousaglašenoj aproksimaciji

Da bi se došlo do odgovarajućih izraza za magnetizaciju i Nelovu temperaturu potrebno je odrediti vezu između  $J(\mathbf{k})$  i  $J(0)$  koji su definisani relacijama (3.43) i (3.44). Veza između ovih izraza u slučaju anizotropnog AFM, koji se proučava u ovom radu, je data sa

$$\tilde{\gamma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2 + \lambda} (\cos k_x a + \cos k_y a + \lambda \cos k_z a) \quad (3.61)$$

Kod izotropnog AFM ova veza je data sa

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{3} (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (3.62)$$

Za geometrijski faktor definisan izrazom(3.62) važi relacija

$$\sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = J(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} \gamma(\mathbf{q}) \quad (3.63)$$

Za uvedeni geometrijski faktor  $\tilde{\gamma}(\mathbf{k})$  ne važi relacija (3.63). Ovako definisan geometrijski faktor ne može se izvlačiti ispred sume kao u slučaju izotropnog feromagneta.

$$\sum_{\mathbf{k}} \tilde{\gamma}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) F(\mathbf{k}) \neq \tilde{\gamma}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \tilde{\gamma}(\mathbf{k}) \quad (3.64)$$

Ipak u graničnom slučaju mora da važi  $\tilde{\gamma} \rightarrow \gamma$ , kad  $\lambda \rightarrow 1$  U SCSW aproksimaciji važe sledeće relacije

$$\omega(\mathbf{k}) = \Gamma(0)\sqrt{1 - \tilde{\gamma}^2(\mathbf{k})} \quad (3.65)$$

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \Gamma(0)\tilde{\gamma}(\mathbf{k}) = \Gamma(0)\frac{1}{2 + \lambda}(\cos k_x a + \cos k_y a + \lambda \cos k_z a) \quad (3.66)$$

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathbf{k}) &= 2J(\cos k_x a + \cos k_y a + \lambda \cos k_z a)\left(S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_0}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta}\right) + \\ &+ 2J(\cos k_x a + \cos k_y a)\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \cos q_x a \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta} + \\ &+ 2J\lambda \cos k_z a \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \cos q_z a \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta} \\ &= 2J(\cos k_x a + \cos k_y a)\left(S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_0}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta} + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \cos q_x a \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta}\right) + \\ &+ 2J\lambda \cos k_z a \left(S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_0}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta} + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \cos q_z a \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta}\right) \end{aligned} \quad (3.67)$$

Kada se iskoristi linearna nezavisnost dobija se sistem od dve jednačine:

$$\begin{aligned} &\Gamma_0 \frac{1}{2 + \lambda} (\cos k_x a + \cos k_y a) = \\ &= 2J(\cos k_x a + \cos k_y a)\left(S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_0}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta} + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \cos q_x a \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta}\right) \end{aligned} \quad (3.68)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_0 \frac{1}{2 + \lambda} \lambda \cos k_z a &= 2J\lambda \cos k_z a \left(S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_0}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta} + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \cos q_z a \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta}\right) \end{aligned} \quad (3.69)$$

Iz prve jednačine nakon eliminisanja geometrijskog faktora dobija se

$$\Gamma_0 = 2J(2 + \lambda)\left(S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_0}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta} + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \cos q_x a \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta}\right) \quad (3.70)$$

Ova jednačina uz jednačinu (3.55) daje sistem iz kojeg se određuje magnetizacija i Nelova temperatura. I u ovoj aproksimaciji mora se izvršiti prelaz sa sume na integral (3.60).

$$\Gamma_0 = 2J(2 + \lambda)\left(S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_0}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta} + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Gamma_0 \tilde{\gamma}(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}}} \cos q_x a \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\theta}\right) \quad (3.71)$$

Jednačina (3.71) je sada napisana u samousaglašenoj formi. Sa desne strane jednakosti pojavljuje se geometrijski faktor, ali pod znakom sume pa ne predstavlja problem prilikom iteracija. Samousaglašenu jednačinu (3.71) je teško napisati u kompaktnijem obliku, pa je u ovoj formi tretirana numerički.

# Glava 4

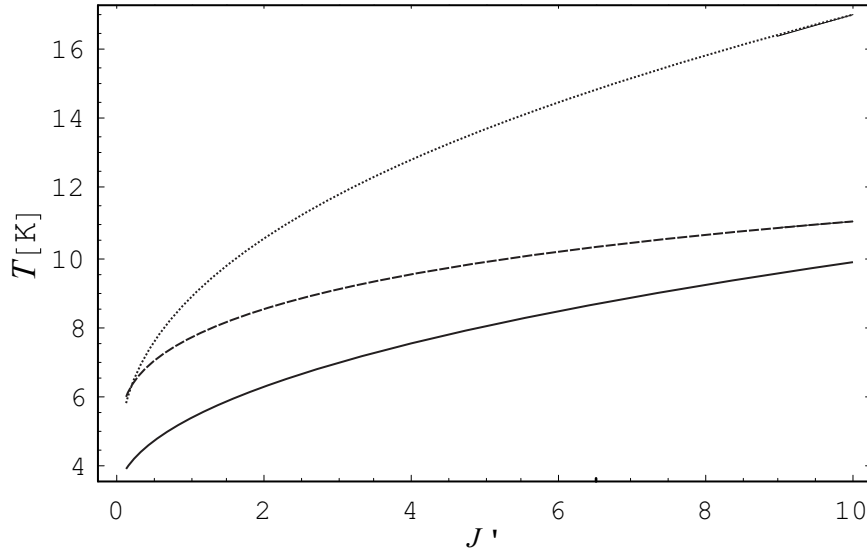
## Numerička analiza slojevitog antiferomagneta

Da bi se došlo do brojnih vrednosti neophodno je koristiti numeričke postupke. Nakon prelaza sa sume na integral (3.60) u sve tri aproksimacije RPA, SW, SCSW potrebno je izvršiti integracije i sprovesti odgovarajuće iteracije u cilju dobijanja vrednosti parametara koji opisuju antiferomagnet - magnetizacija, Nelova temperatura... Numerika je rađena u programskom paketu Mathematica 7.0. [13]

U radu je uzeto da je integral izmene u ravni dat u jedinicama  $J = 10$ . Testirana je zavisnost Nelove temperature u zavisnosti od promene integrala izmene između slojeva  $J'$ , odnosno parametra  $\lambda = \frac{J'}{J}$  u sve tri aproksimacije. Rezultati numeričke analize prikazani su grafički.

TABELA 1:  
Zavisnost Nelove temperature od integrala izmene  $J'$  za  $J = 10$

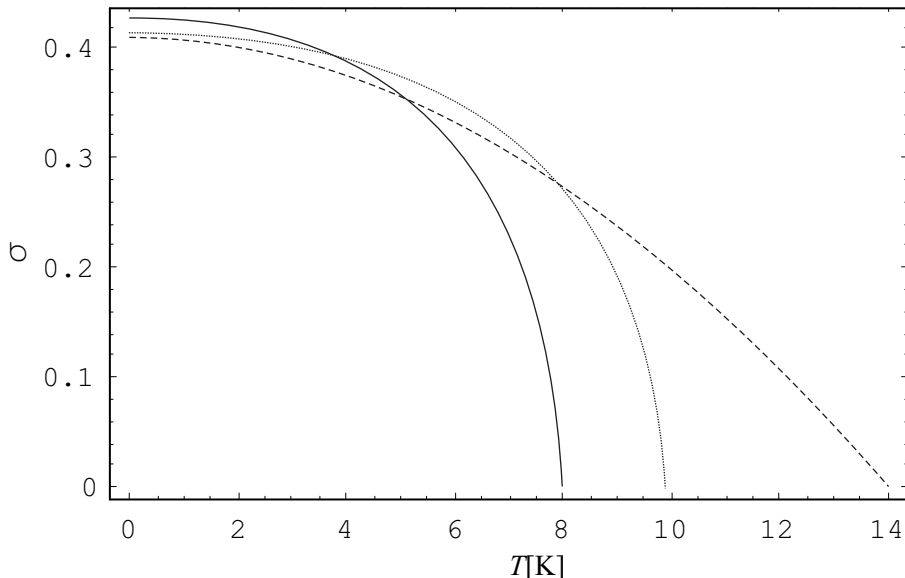
$J'$	10	9	5	2,5	1	0,1
$\lambda$	1	0,9	0,5	0,25	0,1	0,01
$T_N^{SW}$	16,99	16,4	13,65	11,2	9	5,8
$T_N^{SCSW}$	11,01	10,84	9,9	8,9	8	6
$T_N^{RPA}$	9,89	9,55	8	6,7	5,53	3,9



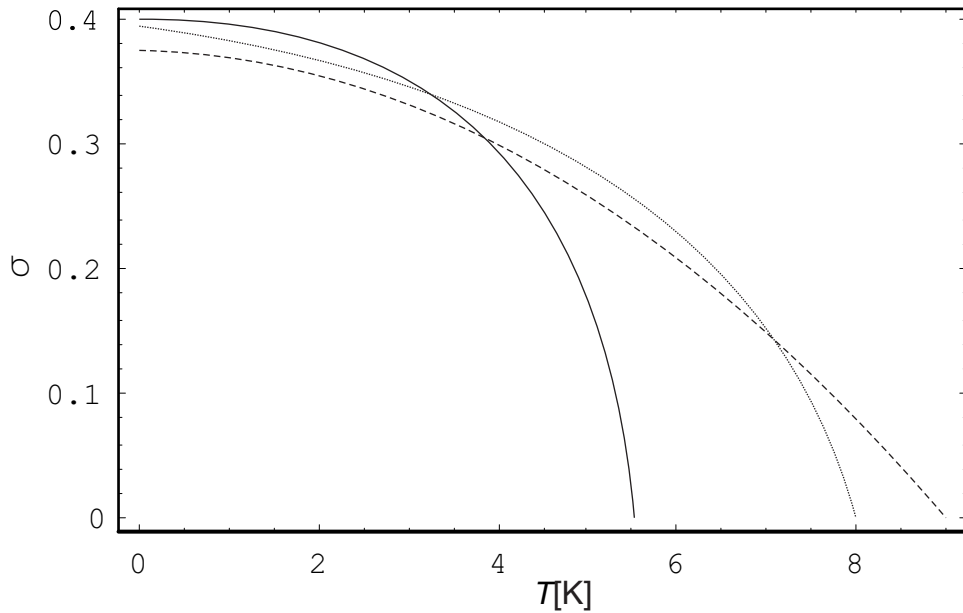
Sl. 1: Zavisnost Nelove temperature od integrala izmene između slojeva  $J'$ . Za SW aproksimaciju ova kriva je predstavljena tačkicama, za SCSW isprekidanom linijom, a za RPA punom linijom.

Na Sl.1 dat je grafik zavisnosti Nelove temperature od izmenskog integrala u  $z$ -pravcu  $J'$ . Sa grafika se vidi da za veoma male vrednosti izmenskog integrala u  $z$ -pravcu, reda veličine  $10^{-1}$ , Nelova temperatura dobijena SCSW aproksimacijom je viša od Nelove temperature dobijene SW aproksimacijom  $T_N^{SCSW} > T_N^{SW}$ . Sa porastom  $J'$   $T_N^{SW}$  postaje veće od  $T_N^{SCSW}$ , da bi ova razlika najizrazitija postala kod izotropnog AFM. Krucijalne su baš te male vrednosti međuravanskog integrala izmene, jer se za te vrednosti dobija da je Nelova temperatura dobijena u samosaglasnoj aproksimaciji viša od odgovarajuće Nelove temperature dobijene Blohovom aproksimacijom.

Za  $J' = 5$ , odnosno  $\lambda = 0,5$ , data je grafička zavisnost magnetizacije od temperature za sve tri aproksimacije



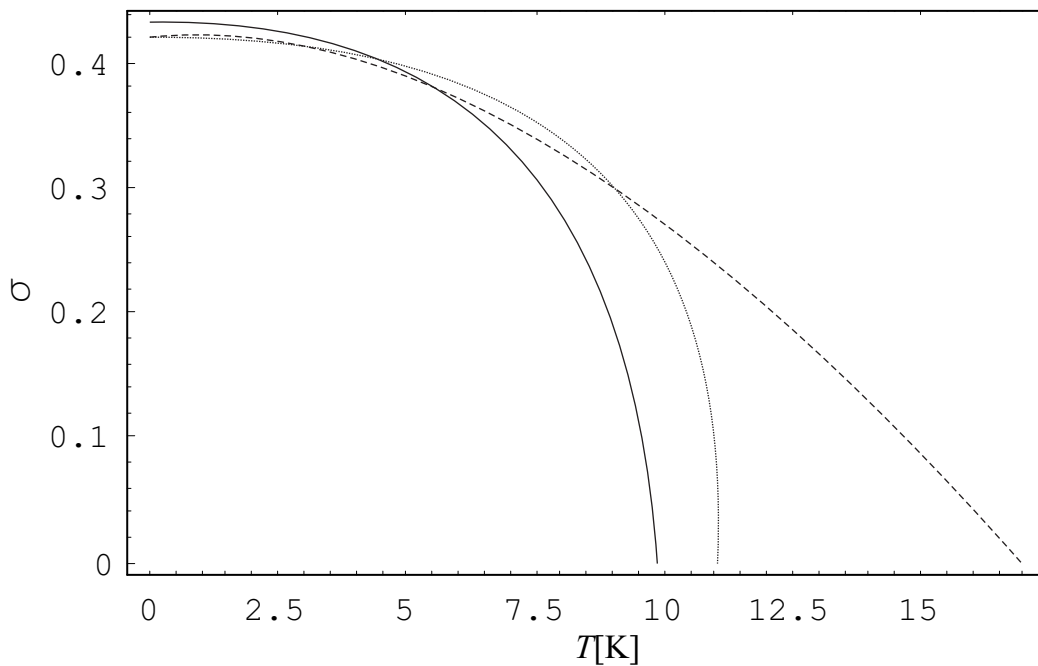
Sl. 2: Temperaturska zavisnost magnetizacije kod anizotropnog antiferomagneta za izmenski integral u  $z$  pravcu  $J' = 5$ . Punom linijom prikazana je kriva dobijena RPA metodom. Kriva dobijena SCSW metodom prikazana je tačkicama, a kriva dobijena SW metodom crticama.



Sl. 3: Temperaturna zavisnost magnetizacije kod anizotropnog antiferomagneta za izmenski integral u  $z$  pravcu  $J' = 1$ . Punom linijom prikazana je kriva dobijena RPA metodom. Kriva dobijena SCSW metodom prikazana je tačkicama, a kriva dobijena SW metodom crticama.

Na Sl.3 se vidi da za  $\lambda = 0, 1$   $T_N^{SCSW}$  postaje znatno bliže  $T_N^{SW}$ .

U slučaju kada je integral izmene unutar slojeva jednak integralu izmene između slojeva govori se o izotropnom antiferomagnetu. U slučaju izotropnog antiferomagneta



Sl. 4: Temperaturna zavisnost magnetizacije za slučaj izotropnog antiferomagneta. Punom linijom predstavljena je zavisnost dobijena RPA metodom, tačkicama SCSW metodom, a crticama SW metodom.

Izotropni antiferomagnet je specijalan slučaj slojevitog antiferomagneta kada  $\lambda \rightarrow 1$ , odnosno  $J = J'$ .

Ako se pogleda rad [12] eksperimentalne vrednosti koje su dobijene za Nelovu temperaturu za razna jedinjenja najbolje se poklapaju sa Nelovom temperaturom koja je dobijena RPA metodom. Razlika između  $T_N^{exp}$  i  $T_N^{RPA}$  je svega nekoliko procenata. Nelove temperature računata u SW i SCSW aproksimaciji značajnije odstupaju. Ipak za sva jedinjenja je uočljiv poredak

$$T_N^{SW} > T_N^{SCSW} > T_N^{RPA} \quad (4.1)$$

U radu [12] korišćena je reprezentacija Barjaktar - Krivoručko - Jablonski (BJK), koja nije ni bozonska ni fermionska, već neka mešavina. Pored bozonskih u njoj figurišu i pseudofermionski operatori, pomoću kojih je u ovom radu uvedena interakcija između spinskih talasa. Ni SW aproksimacija nije potpuno rađena klasično, već je u obzir uzimana i dužina veze.

U ovom radu takođe je pokazano da SW i SCSW aproksimacije daju lošiji rezultat u odnosu na RPA. Takođe je pokazano da za male vrednosti odnosa između izmenskog integrala u  $z$  pravcu i ravanskog izmenskog integrala  $\lambda \ll 1$ , Nelova temperatura dobijena u SCSW aproksimaciji postaje viša od Nelove temperature u SW prilazu, što se ne poklapa sa ekperimentima.



# Glava 5

## Zaključak

U ovom diplomskom radu izučavani su slojeviti antiferomagnetni sistemi u spinskom i bozonskom prilazu. Konkretno, teorijski su ispitani kvazidvodimenzionalni magnetni sistemi u spinskom formalizmu u tjablikovskoj (RPA) aproksimaciji. Takodje su ovi sistemi analizirani i u bozonskoj slici u različitim reprezentacijama i aproksimacijama.

Nadjeni su spektri spinskih talasa (magnona) i dobijeni su analitički izrazi za parametar uredjenosti i kritičnu Nelovu temperaturu u funkciji parametara sistema. Rezultati obične spin-talasne teorije u Blohovej i samosaglasnoj aproksimaciji daju lošije rezultate u odnosu na spinski formalizam u RPA.

Numerička analiza Blohove aproksimacije pokazuje da na apsolutnoj nuli magnetizacija odstupa od vrednosti  $\frac{1}{2}$ , što govori o postojanju kvantnih fluktuacija. Detaljno je numeričkim putem ispitana temperaturska zavisnost magnetizacije u ovim sistemima u funkciji temperature za različito medjuravansko izmensko kuplovanje. Takodje je ispitana Nelova temperatura u zavisnosti od izmenskog integrala duz  $z$ -pravca. Pokazano je da postoji kritična vrednost medjuravanskog integrala izmene ispod koje Nelova temperatura u samosaglasnoj spin-talasnjoj aproksimaciji postaje viša od odgovarajuće vrednosti u običnoj Blohovej aproksimaciji spinskih talasa. Ovo ukazuje na ograničene domete bozonizacije tipa Dajson-Maljejeva. Ovo je verovatno povezano i sa činjenicom što je navedena reprezentacija neermitska koja se dalje kroz odgovarajuću samosaglasnu proceduru reflektuje i daje ovaj nefizički i neprihvatljiv rezultat.

Sve ovo nam ukazuje na činjenicu da je neophodno, prilikom korišćenja ove bozonske reprezentacije ali i date aproksimacije, koristiti (razvijati) druge nove prilaze u kojima bi se u analizi slojevitih magnetnih sistema ovaj problem otklonio ili na neki način prevazišao. Ovo svakako zaslužuje odredjenu pažnju ozbiljan tretman, što će biti sigurno jedna od preokupacija u budućem radu na ovom veoma važnom teorijskom problemu i zadatku.



# Prilog A

## Tjablikovske dvovremenske temperaturske Grinove funkcije

Grinove funkcije u statističkoj fizici predstavljaju generalizaciju koncepta korelacionih funkcija. Metod Grinovih funkcija je veoma koristan jer nam pomaže u izračunavanju srednjih vrednosti makroskopskih karakteristika sistema, kao i nekih mikroskopskih karakteristika - energije elementarnih ekscitacija, njihovog srednjeg vremena života...

Metod dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija se koristi kada je zavisnost sistema u odnosu na spoljne perturbacije linearna. Ovaj metod je proučavan u radovima Bogoljubova, Tjablikova, Zubarjeva, Bonč-Brujevića.

U statističkoj fizici se mogu razmatrati različite vrste dvovremenskih Grinovih funkcija, npr.: kauzalne Grinove funkcije  $G^{(c)}(x, x'; t, t')$ , definisane preko srednje vrednosti  $\hat{T}$  produkta operatora, ili retardovane i avansovane Grinove funkcije  $G^{(r)}(x, x'; t, t')$  i  $G^{(a)}(x, x'; t, t')$ .

$$G^{(c)}(x, x'; t, t') = \langle \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle^{(c)} = \langle \hat{T}_\eta \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \quad (\text{A.1})$$

$$G^{(r)}(x, x'; t, t') = \langle \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle^{(r)} = \theta(t - t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_\eta \rangle \quad (\text{A.2})$$

$$G^{(a)}(x, x'; t, t') = \langle \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle^{(a)} = -\theta(t' - t) \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_\eta \rangle \quad (\text{A.3})$$

$\langle \dots \rangle$  predstavlja usrednjavanje po kanonskom ansablu.

$$\langle \dots \rangle = Tr(\hat{\rho} \dots) \quad (\text{A.4})$$

gde je  $\hat{\rho} = e^{\beta(F - \hat{H})}$   $F$  - slobodna energija sistema  $\hat{H}$  - Hamiltonijan sistema

$$[\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_\eta = \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') - \eta \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \quad (\text{A.5})$$

$$\hat{T}_\eta \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') = \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') + \eta \theta(t - t') \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \quad (\text{A.6})$$

$\eta$  uzima vrednosti  $\pm 1$ . Za  $\eta = 1$  u gornjim relacijama figurisu komutatori, a za  $\eta = -1$  antikomutatori. Znak  $\eta$  bira se u zavisnosti od toga šta nam više odgovara pri rešavanju određenog problema. Obično se uzima  $\eta = 1$  ako su  $\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}$  bozonski operatori, a  $\eta = -1$  ako su fermionski operatori, ali i drugačiji odabir je moguć.

$$\theta(t - t') = \begin{cases} 1 & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Vidimo da kada su vremena jednaka,  $t = t'$  Grinove funkcije nisu definisane zbog diskontinuiteta Hevisajdove step - funkcije u  $t = t'$ . Operatori  $\hat{\mathcal{A}}(x, t)$  i  $\hat{\mathcal{B}}(x', t')$  dati su u Heisenbergovoj slici

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{A}}(x, t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ \hat{\mathcal{B}}(x', t') &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}\hat{B}(x')e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}\end{aligned}$$

Grinove funkcije ovako je definisao Tjablikov pa se još nazivaju **tjablikovskim**. Zubarjev, u svom radu iz 1960., definiše dvovremenske Grinove funkcije u istoj formi, ali množene sa  $-i$ . Ovaj faktor se pojavljuje i u teoriji Macubarinih Grinovih funkcija, pa uvođenje faktora  $-i$  omogućava da se dva prilaza lakše porede. Ovde će biti korišćena tjablikovska definicija, jer nemamo potrebu za gore pomenutim poređenjem.

Razlika između Grinovih funkcija koje se koriste u statističkoj fizici i u teoriji polja je u načinu računanja srednjih vrednosti. Umesto usrednjavanja po vakuumu (najnižem kvantnom stanju sistema), usrednjavanje se vrši po kanonskom ansamblu, pa Grinove funkcije u statističkoj fizici pored zavisnosti od vremena, zavise i od temperature. Zbog toga ih nazivamo i **temperaturskim**.

Grinove funkcije  $G^{(i)}(x, x'; t, t')$   $i = r, a, c$  zavise od četiri promenljive  $x, x', t, t'$  samo u opštem slučaju kada sredine nisu prostorno homogene i kada operatori  $\hat{A}, \hat{B}$  imaju eksplicitnu vremensku zavisnost. U slučaju sredina bez defekata i vremenske nezavisnosti <sup>1</sup> operatora  $\hat{A}, \hat{B}$ :

$$G^{(i)}(x, x'; t, t') \rightarrow G^{(i)}(x - x', t - t') \quad i = r, a, c$$

Tada Grinova funkcija zavisi samo od dve združene promenljive  $x - x'$  i  $t - t'$ .

## A.1 Jednačine kretanja za Grinove funkcije

U ovom priligu postupak se sprovodi za retardovane Grinove funkcije, koje se i koriste u radu. Za avansovane i kauzalne Grinove funkcije postupak je potpuno analogan.

$$G^{(r)}(x, x'; t, t') = \langle\langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle\rangle^{(r)} = \theta(t - t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{A.8})$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} G^{(r)}(x, x'; t, t') = i\hbar \delta(t - t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle + \theta(t - t') \langle [i\hbar \frac{d\hat{\mathcal{A}}(x, t)}{dt}, \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{A.9})$$

S obzirom da ispred prvog člana na desnoj strani u (A.9) stoji  $\delta$  funkcija, reč je o operatorima koji deluju u istom trenutku vremena, tako da se srednja vrednost može izračunati i ona ne zavisi od vremena, tj.

$$i\hbar \frac{d}{dt} G^{(r)}(x, x'; t, t') = i\hbar \delta(t - t') C(x - x') + \theta(t - t') \langle [[\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}], \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{A.10})$$

drugi član na desnoj strani takođe predstavlja Grinovu funkciju koja se obično naziva viša Grinova funkcija

$$i\hbar \frac{d}{dt} G^{(r)}(x, x'; t, t') = i\hbar \delta(t - t') C(x - x') + \Gamma^{(r)}(x, x'; t, t') \quad (\text{A.11})$$

---

<sup>1</sup>  $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} = 0$

Napiše se jednačinu kretanja za višu Grinovu funkciju:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Gamma^{(r)}(x, x'; t, t') = i\hbar \delta(t-t') \langle [[\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}], \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle + \theta(t-t') \langle [[i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}], \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{A.12})$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Gamma^{(r)}(x, x'; t, t') = i\hbar \delta(t-t') \langle [[\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}], \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle + \theta(t-t') \langle [[[\hat{\mathcal{A}}, \hat{H}], \hat{H}], \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{A.13})$$

gde drugi član na desnoj strani predstavlja još višu Grinovu funkciju

$$\Gamma_1^{(r)}(x, x'; t, t') = \theta(t-t') \langle [[[\hat{\mathcal{A}}, \hat{H}], \hat{H}], \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{A.14})$$

Na ovaj način dobijamo lanac jednačina koji određuje početnu Grinovu funkciju. Ovaj lanac se može preseći samo u slučaju kada hamiltonijan predstavlja kvadratnu formu koja se može dijagonalizovati. U svim ostalim slučajevima, a takvih je dosta više, hamiltonijan sadrži, pored kvadratne, i operatorske forme višeg reda. Tada lanac jednačina ostaje beskonačan i polazna Grinova funkcija može da se odredi samo približno i to tako da se na određenom mestu iz fizički opravdanih razloga lanac preseče. Pravila za presecanje lanca ne postoje, iako se najčešće koristi ideja malog parametra, ako ovaj postoji.

Radi daljeg izlaganja formalizma Grinovih funkcija pretpostavi se da se lanac jednačina za Grinovu funkciju  $\langle \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle^{(r)}$  može preseći već na prvoj jednačini.

$$i\hbar \frac{d}{dt} G^{(r)}(x-x', t-t') = i\hbar \delta(t-t') C(x-x') + \Gamma^{(r)}(x-x', t-t') \quad (\text{A.15})$$

$$G^{(r)}(x-x', t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G^{(r)}(x-x', \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{A.16})$$

$$\Gamma^{(r)}(x-x', t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma^{(r)}(x-x', \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{A.17})$$

i iskoristi se integralna reprezentacija  $\delta$  - funkcije

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \quad (\text{A.18})$$

Jednačina kretanja postaje

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} G^{(r)}(x-x', \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega &= \\ &= \frac{i\hbar}{2\pi} C(x-x') \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} + \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma^{(r)}(x-x', \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned} \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \omega G^{(r)}(x-x', \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega &= \\ &= \frac{i\hbar}{2\pi} C(x-x') \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} + \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma^{(r)}(x-x', \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Sada se izvrši procedura za inverznu Furije transformaciju. Množi se jednačinu sa  $e^{i\Omega(t-t')}$  i integrali po  $t-t'$  od  $-\infty$  do  $\infty$ . Dobija se

$$2\pi\hbar\Omega G^{(r)}(x-x', \Omega) = i\hbar C(x-x') + 2\pi\Gamma^{(r)}(x-x', \Omega) \quad (\text{A.21})$$

Predjemo sa  $\Omega$  na  $\omega$ , u oznaci  $\Omega \rightarrow \omega$

$$\hbar\omega G^{(r)}(x-x', \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} C(x-x') + \Gamma^{(r)}(x-x', \omega) \quad (\text{A.22})$$

Druga moguća notacija za Grinove funkcije u energetsnoj reprezentaciji, koja se češće koristi je

$$\hbar\omega \langle\langle \hat{\mathcal{A}}(x) | \hat{\mathcal{B}}(x') \rangle\rangle_{\omega}^{(r)} = \frac{i\hbar}{2\pi} C(x-x') + \langle\langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}] | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle\rangle_{\omega}^{(r)} \quad (\text{A.23})$$

U ovoj drugoj notaciji se lepo vidi struktura Grinove funkcije, ali je mana što se može izgubiti iz vida da je Grinova funkcija samo funkcija razlike od  $x-x'$  što i jeste mana ovog zapisa.

Ista forma jednačine dobiće se i za avansove i kauzalne funkcije, ako se primeni isti postupak. Znajući ovo, a sa ciljem da se notacija ne opterećuje više nego što je to potrebno, treba ukoloniti oznaku (r) iz izvedene jednačine.

$$\hbar\omega \langle\langle \hat{\mathcal{A}}(x) | \hat{\mathcal{B}}(x') \rangle\rangle_{\omega} = \frac{i\hbar}{2\pi} C(x-x') + \langle\langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}] | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle\rangle_{\omega} \quad (\text{A.24})$$

Nadalje u ovom prilogu će biti razmatrane samo retardovane Grinove funkcije, koje se i koriste u ovom radu.

## A.2 Spektralna teorija

Sledeća analiza Grinovih funkcija odnosiće se na slučaj prostorno i vremenski homogenih sredina. kakve su i razmatrane u ovom prilogu. U tom slučaju retardovane Grinove funkcija se mogu predstaviti u obliku

$$G(x-x', t-t') = \theta(t-t') [J_{AB}(x-x', t-t') - J_{BA}(x-x', t-t')] \quad (\text{A.25})$$

gde su

$$J_{AB}(x-x', t-t') = \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \quad (\text{A.26})$$

i

$$J_{BA}(x-x', t-t') = \langle \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle \quad (\text{A.27})$$

korelacione funkcije sistema. Usrednjavanje se vrši pomoću statističkog operatora

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Q} e^{-\beta \hat{H}} = \frac{1}{Q} e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}} \quad (\text{A.28})$$

$$J_{BA}(x-x', t-t') = \langle \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle = Tr(\hat{\rho} \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t)) = \sum_k \langle k | \hat{\rho} \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) | k \rangle \quad (\text{A.29})$$

Trag je invarijantan u odnosu na ciklične permutacije operatora. Vektori  $|k\rangle$  su svojstveni vektori hamiltonijana  $\hat{H}$  koji figuriše u definiciji statističkog operatora (A.28). U relaciji (A.29)

iskoristi se definicija statističkog operatora i ubaci se jedinica  $\hat{1} = \sum_l |l\rangle\langle l|$ . Vektori  $|l\rangle$  su takođe svojstveni vektori operatora  $\hat{H}$ . Nakon što se iskoriste relacije

$$\hat{A}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{A}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \quad (\text{A.30})$$

$$\hat{B}(x', t') = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'} \hat{B}(x') e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'} \quad (\text{A.31})$$

dobija se

$$J_{\mathcal{BA}}(x - x', t - t') = \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x') | l \rangle \langle l | \hat{A}(x) | k \rangle e^{-\frac{E_k}{\theta} - i\Omega_{k,l}(t-t')} \quad (\text{A.32})$$

Nakon primene potpuno analognog postupka na korelacionu funkciju  $J_{\mathcal{AB}}$  dolazi se do izraza

$$J_{\mathcal{AB}}(x - x', t - t') = \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x') | l \rangle \langle l | \hat{A}(x) | k \rangle e^{-\frac{E_k}{\theta} + \hbar\frac{1}{\theta}\Omega_{k,l} - i\Omega_{k,l}(t-t')} \quad (\text{A.33})$$

gde je

$$\Omega_{k,l} = \frac{E_k - E_l}{\hbar} \quad (\text{A.34})$$

i predstavlja promenu frekvencije pri prelazu iz kvantnog stanja  $l$  u kvantno stanje  $k$ .

Nakon primene Furijeovih transformacija

$$J_{\mathcal{AB}}(x - x', t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{\mathcal{AB}}(x - x', \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{A.35})$$

i

$$J_{\mathcal{BA}}(x - x', t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} J_{\mathcal{BA}}(x - x', \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{A.36})$$

izraz (A.32) postaje

$$J_{\mathcal{BA}}(x - x', \omega) = \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x') | l \rangle \langle l | \hat{A}(x) | k \rangle e^{-\frac{E_k}{\theta}} \delta(\omega - \Omega_{k,l}) \quad (\text{A.37})$$

dok se (A.33) može napisati u obliku

$$J_{\mathcal{AB}}(x - x', \omega) = e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} J_{\mathcal{BA}}(x - x', \omega) \quad (\text{A.38})$$

Da bi se ustanovila veza između Furijeovih komponenta Grinove funkcije i odgovarajućih komponenta za korelacione funkcije, potrebno je da se u (A.25) izvrše transformacije (A.35) i (A.36), iskoristi veza (A.38), i Grinova funkcija transformiše po obrascu

$$G(x - x', t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} G(x - x', \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{A.39})$$

Takođe se mora preći na Furijeove komponente Hevisajdove funkcije  $\theta(t - t')$ , koja takođe figuriše u (A.25). Iskoristi se integralna reprezentacija  $\delta$  funkcije

$$\delta(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\Omega(t-t')} d\Omega \quad (\text{A.40})$$

iz koje se lako vidi da se Hevisajdova funkcija može predstaviti u obliku

$$\theta(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int d(t - t') \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\Omega(t-t')} d\Omega \quad (\text{A.41})$$

Na ovom mestu se pod znakom integrala napiše identitet

$$\theta(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int d(t - t') \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} e^{\epsilon\Omega} e^{-i\Omega(t-t')} d\Omega \quad (\text{A.42})$$

pretpostavi se da limes i nesvojstveni integral mogu da zamene mesta i dobija se

$$\theta(t - t') = \frac{i}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\Omega(t-t')}}{\Omega \mp i\epsilon} d\Omega \quad (\text{A.43})$$

Nakon što se pored već naznačenih transformacija u relaciji (A.25) zameni izraz (A.43) i iskoristi čuvena formula Sochockog <sup>2</sup> [14]

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega' - \omega \mp i\epsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega' - \omega} + i\pi\delta(\omega' - \omega) \quad (\text{A.44})$$

dobija se sledeća veza

$$(e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1) J_{\mathcal{BA}}(x - x', \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [G(x - x', \omega + i\epsilon) - G(x - x', \omega - i\epsilon)] \quad (\text{A.45})$$

Lako se zaključuje da se pomoću Grinovih funkcija mogu naći srednje vrednosti

$$\langle \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(x - x', \omega + i\epsilon) - G(x - x', \omega - i\epsilon)}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{A.46})$$

$$\langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(x - x', \omega + i\epsilon) - G(x - x', \omega - i\epsilon)}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}}} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (\text{A.47})$$

Ukoliko operatori  $\hat{\mathcal{A}}(x, t)$  i  $\hat{\mathcal{B}}(x', t')$  deluju u istom trenutku vremena, onda je

$$\langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle = \langle \hat{\mathcal{A}}(x) \hat{\mathcal{B}}(x') \rangle \quad (\text{A.48})$$

$$\langle \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle = \langle \hat{\mathcal{B}}(x') \hat{\mathcal{A}}(x) \rangle \quad (\text{A.49})$$

i odgovarajuće srednje vrednosti se računaju na osnovu formula

$$\langle \hat{\mathcal{B}}(x') \hat{\mathcal{A}}(x) \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(x - x', \omega + i\epsilon) - G(x - x', \omega - i\epsilon)}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} d\omega \quad (\text{A.50})$$

$$\langle \hat{\mathcal{A}}(x) \hat{\mathcal{B}}(x') \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(x - x', \omega + i\epsilon) - G(x - x', \omega - i\epsilon)}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}}} d\omega \quad (\text{A.51})$$

U ovom radu od značaja će biti Tjablikovske dvovremenske spinske Grinove funkcije. U tom slučaju umesto operatora  $\hat{\mathcal{A}}$  i  $\hat{\mathcal{B}}$  u definiciji dvovremenske Grinove funkcije će figurisati spinski operatori. Problem viših Grinovih funkcija će biti rešen Tjablikovskim dekuplovanjem.

<sup>2</sup>simbol  $\mathcal{P}$  označava glavnu vrednost integrala



# Prilog B

## Tjablikovsko i Kalenovo dekuplovanje

Tjablikovska aproksimacija je slična aproksimaciji molekularnog polja. U njoj se zamenjuje operator  $\hat{S}_i^z$  termodinamičkom očekivanom vrednošću  $\langle \hat{S}_i^z \rangle$ . Kao c-broj ovo može biti izvučeno iz Grinove funkcije. U literaturi ovo je poznato kao Tjablikovska aproksimacija ili (RPA) dekuplovanje. Ova drugi naziv se koristi zato što je ekvivalentna aproksimaciji slučajnih faza u drugim oblastima fizike. Ona se sastoji u zanemarivanju korelacija između transverzalnih komponenti spina s jednog čvora i  $z$  - komponenti spina sa susednog čvora

$$\langle \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_j^\pm | \hat{B}_l \rangle \rangle_\omega \approx \langle \hat{S}_i^z \rangle \langle \langle \hat{S}_j^\pm | \hat{B}_l \rangle \rangle_\omega \quad i \neq j \quad (\text{B.1})$$

$\hat{B}$  je neki pogodno odabran operator, zavisno od toga šta je potrebno da izračunati. Najčešće je to jedan od  $\hat{S}^\pm$  operatora.

Ova procedura dekuplovanja je slaba tačka teorije pošto nema direktnih potvrda da je ovo dekuplovanje korektno. Jedina potvrda su rezultati dobijeni ovim metodom. Ova metoda se pokazala uspešnom kako u fizici čvrstog stanja, tako i u drugim oblastima fizike gde jednačine mogu biti izvedene drugim metodama. Koristi se da bi se faktorisale više Grinove funkcije[14].

Kalenovo dekuplovanje je zamišljeno kao poboljšanje tjablikovskog postupka. U Kalenovoj aproksimaciji se korelacije između  $\hat{S}^\pm$  i  $\hat{S}^z$  sa različitih čvorova, u lokalnom koordinatnom sistemu, za spinove sa antiferomagnetnom interakcijom uračunavaju na sledeći način

$$\langle \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_j^\pm | \hat{B}_l \rangle \rangle_\omega \approx \langle \hat{S}_i^z \rangle \langle \langle \hat{S}_j^\pm | \hat{B}_l \rangle \rangle_\omega - \alpha \langle \hat{S}_i^\pm \hat{S}_j^\pm \rangle \langle \langle \hat{S}_i^\mp | \hat{B}_l \rangle \rangle_\omega \quad i \neq j \quad (\text{B.2})$$

dok je za feromagnetno kuplovane spinove Kalenova aproksimacija data sa

$$\langle \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_j^+ | \hat{B}_l \rangle \rangle_\omega \approx \langle \hat{S}_i^z \rangle \langle \langle \hat{S}_j^+ | \hat{B}_l \rangle \rangle_\omega - \alpha \langle \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+ \rangle \langle \langle \hat{S}_i^- | \hat{B}_l \rangle \rangle_\omega \quad i \neq j \quad (\text{B.3})$$

gde je

$$\alpha = \frac{1}{2S} \frac{\langle \hat{S}^z \rangle}{S} \quad (\text{B.4})$$

parametar dekuplovanja koji je uveo Kalen. Na visokim temperaturama (blizu kritične)  $\alpha \rightarrow 0$  i Kalenovo dekuplovanje se svodi na RPA.

Za spin  $S = \frac{1}{2}$ , koji je proučavan u ovom radu parametar  $\alpha$ , definisan relacijom (B.4), opisan je jednostavnijim izrazom

$$\alpha = \frac{\langle \hat{S}^z \rangle}{S} \quad (\text{B.5})$$

I Tjablikovska i Kalenova aproksimacija predstavljaju načine presecanja beskonačnog lanca jednačina.



# Prilog C

## Neke relacije izmedju spinskih operatora

Mnogi problemi u Hajzenbergovom modelu nastaju zbog složenih spinskih komutacionih relacija. U ovom prilogu date su spinske relacije koje su korišćene u radu.

$$[\hat{S}_i^\alpha, \hat{S}_j^\beta] = i\hbar\delta_{i,j}\epsilon^{\alpha,\beta,\gamma}\hat{S}_i^\gamma \quad (\text{C.1})$$

$$\begin{aligned} [\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^-] &= \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- - \hat{S}_j^- \hat{S}_i^+ = \\ &= (\hat{S}_i^x + i\hat{S}_i^y)(\hat{S}_j^x - i\hat{S}_j^y) - (\hat{S}_j^x - i\hat{S}_j^y)(\hat{S}_i^x + i\hat{S}_i^y) = \\ &= -i[\hat{S}_i^x, \hat{S}_j^y] - i[\hat{S}_j^x, \hat{S}_i^y] = \\ &= 2\hbar\hat{S}_i^z\delta_{i,j} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Dakle,

$$[\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^-] = 2\hbar\hat{S}_i^z\delta_{i,j} \quad (\text{C.3})$$

Za  $\hbar = 1$

$$[\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^-] = 2\hat{S}_i^z\delta_{i,j} \quad (\text{C.4})$$

Analognim postupkom dobija se

$$[\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^+] = 0 \quad (\text{C.5})$$

$$[\hat{S}_i^-, \hat{S}_j^-] = 0 \quad (\text{C.6})$$

Takođe veoma je važna i komutaciona relacija

$$\begin{aligned}
[\hat{S}_i^\pm, \hat{S}_j^z] &= \hat{S}_i^\pm \hat{S}_j^z - \hat{S}_j^z \hat{S}_i^\pm = \\
&= (\hat{S}_i^x \pm i\hat{S}_i^y) \hat{S}_j^z - \hat{S}_j^z (\hat{S}_i^x \pm i\hat{S}_i^y) = \\
&= [\hat{S}_i^x, \hat{S}_j^z] \pm i[\hat{S}_i^y, \hat{S}_j^z] = \\
&= \mp \hbar \delta_{i,j} (\hat{S}_i^x \pm \hat{S}_i^y) = \mp \hbar \hat{S}_i^\pm \delta_{i,j}
\end{aligned} \tag{C.7}$$

Dakle,

$$[\hat{S}_i^\pm, \hat{S}_j^z] = \mp \hbar \hat{S}_i^\pm \delta_{i,j} \tag{C.8}$$

za  $\hbar = 1$

$$[\hat{S}_i^\pm, \hat{S}_j^z] = \mp \hat{S}_i^\pm \delta_{i,j} \tag{C.9}$$

Spinski operatori zadovoljavaju još i relacije

$$\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_i = (\hat{S}_i^x)^2 + (\hat{S}_i^y)^2 + (\hat{S}_i^z)^2 = S(S+1) \tag{C.10}$$

$$\prod_{m_S=-S}^S (\hat{S}_i^z - \hbar m_S) = 0 \tag{C.11}$$

$$(\hat{S}_i^+)^{2S+1} = (\hat{S}_i^-)^{2S+1} = 0 \tag{C.12}$$

U specijalnom slučaju spina  $S = \frac{1}{2}$ , kada je operator  $(\hat{S}_i^z)^2$   $c$ -broj, tj.  $(\hat{S}_i^z)^2 = \frac{1}{4}$  važe relacije

$$[\hat{S}_i^+, \hat{S}_i^-]_+ = 1 \tag{C.13}$$

$$(\hat{S}_i^+)^2 = (\hat{S}_i^-)^2 = 0 \tag{C.14}$$

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2} - \hat{S}_i^- \hat{S}_i^+ \tag{C.15}$$

Pogledati u literaturi [15].

## Prilog D

# Računanje potrebnih korelacionih funkcija

U dodatku je dat postupak za računanje korelacionih funkcija.

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = ? \quad \Rightarrow \hat{B} = \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \quad (\text{D.1})$$

$$\begin{aligned} \langle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} | \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \rangle \rangle_{\omega} &= \frac{1}{\begin{vmatrix} \omega - \Gamma_0 & -\Gamma_{\mathbf{k}} \\ \Gamma_{\mathbf{k}} & \omega + \Gamma_0 \end{vmatrix}} \begin{vmatrix} \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+] \rangle & -\Gamma_{\mathbf{k}} \\ \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{b}_{-\mathbf{k}}^+, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+] \rangle & \omega + \Gamma_0 \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{\begin{vmatrix} \omega - \Gamma_0 & -\Gamma_{\mathbf{k}} \\ \Gamma_{\mathbf{k}} & \omega + \Gamma_0 \end{vmatrix}} \frac{i}{2\pi} \begin{vmatrix} 1 & -\Gamma_{\mathbf{k}} \\ 0 & \omega + \Gamma_0 \end{vmatrix} = \\ &= \frac{i}{2\pi} \frac{\omega + \Gamma_0}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2} = \\ &= \frac{i}{2\pi} \left( \frac{\alpha}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} + \frac{\beta}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Za  $\alpha$  i  $\beta$  se primenom elementarne matematike dobija

$$\alpha = \frac{\omega_{\mathbf{k}} + \Gamma_0}{2\omega_{\mathbf{k}}}, \quad \beta = \frac{\omega_{\mathbf{k}} - \Gamma_0}{2\omega_{\mathbf{k}}} \quad (\text{D.3})$$

$$\langle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} | \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \rangle \rangle_{\omega} = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left( \frac{\omega_{\mathbf{k}} + \Gamma_0}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} + \frac{\omega_{\mathbf{k}} - \Gamma_0}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} \right) \quad (\text{D.4})$$

Spektralna teorema daje

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle &= \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left( \frac{\omega_{\mathbf{k}} + \Gamma_0}{e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + \frac{\omega_{\mathbf{k}} - \Gamma_0}{e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} \right) = \\ &= \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left( \frac{\omega_{\mathbf{k}} + \Gamma_0}{e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + \frac{\omega_{\mathbf{k}} - \Gamma_0}{e^{-\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} - \omega_{\mathbf{k}} + \Gamma_0 \right) = \\ &= \frac{\Gamma_0}{2\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\theta} - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\Gamma_0}{2\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\theta} - \frac{1}{2} \quad (\text{D.6})$$

Lako je pokazati da je

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\Gamma_0}{2\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\theta} - \frac{1}{2} \quad (\text{D.7})$$

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \rangle = ? \quad \Rightarrow \hat{B} = \hat{b}_{-\mathbf{k}} \quad (\text{D.8})$$

$$\begin{aligned} \langle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} | \hat{b}_{-\mathbf{k}} \rangle \rangle_{\omega} &= \frac{1}{\begin{vmatrix} \omega - \Gamma_0 & -\Gamma_{\mathbf{k}} \\ \Gamma_{\mathbf{k}} & \omega + \Gamma_0 \end{vmatrix}} \begin{vmatrix} \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{-\mathbf{k}}] \rangle & -\Gamma_{\mathbf{k}} \\ \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{b}_{-\mathbf{k}}^+, \hat{b}_{-\mathbf{k}}] \rangle & \omega + \Gamma_0 \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{\begin{vmatrix} \omega - \Gamma_0 & -\Gamma_{\mathbf{k}} \\ \Gamma_{\mathbf{k}} & \omega + \Gamma_0 \end{vmatrix}} \frac{i}{2\pi} \begin{vmatrix} 0 & -\Gamma_{\mathbf{k}} \\ -1 & \omega + \Gamma_0 \end{vmatrix} = \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

$$\langle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} | \hat{b}_{-\mathbf{k}} \rangle \rangle_{\omega} = -\frac{i}{2\pi} \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2} = \frac{i}{2\pi} \left( \frac{\alpha_1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} + \frac{\beta_1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} \right) \quad (\text{D.10})$$

$$\langle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} | \hat{b}_{-\mathbf{k}} \rangle \rangle_{\omega} = -\frac{i}{2\pi} \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left( \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}}} \right) \quad (\text{D.11})$$

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \rangle = -\frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left( \frac{1}{e^{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + \frac{1}{e^{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\theta}} - 1} + 1 \right) = -\frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\theta} \quad (\text{D.12})$$

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ \rangle = -\frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\theta} \quad (\text{D.13})$$

# Prilog E

## Dokaz relacije (3.63)

Za izotropni AFM važi relacija:

$$\sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = J(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} \gamma(\mathbf{q}) \quad (\text{E.1})$$

gde je

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{3}(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (\text{E.2})$$

Dokaz

$$J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = 2J [\cos(k_x - q_x)a + \cos(k_y - q_y)a + \cos(k_z - q_z)a] \quad (\text{E.3})$$

Primenimo adicijonu fomulu

$$\cos(\alpha \pm \beta) = \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta \quad (\text{E.4})$$

i odbace se sinusni članovi pošto će oni ići u nulu prilikom prelaska sa sume na integral. Dobija se:

$$\sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = 2J \cos k_x a \sum_{\mathbf{q}} \cos q_x a + 2J \cos k_y a \sum_{\mathbf{q}} \cos q_y a + 2J \cos k_z a \sum_{\mathbf{q}} \cos q_z a \quad (\text{E.5})$$

Sume koje se pojavljuju na desnoj strani poslednje jednakosti potpuno su ekvivalentne odakle imamo

$$\sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = J(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} \cos q_x a = J(\mathbf{k}) \frac{1}{3} \sum_{\mathbf{q}} (\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a) \quad (\text{E.6})$$

čime je jednakost dokazana.





# Literatura

- [1] H. Tasaki, Prog. Theor. Phys. **99** 489 (1998) (cond-mat/9712219)
- [2] H. Tasaki, Eur. Phys. J. B **64** 365 (2008)
- [3] M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70** 1059 (1998)
- [4] F. Herbut, *Kvantna mehanika za istraživače*, Univerzitet u Beogradu, Beograd (1999)
- [5] Jenő Solyóm, *Fundamentals of the physics of solids, Volume I Structure and Dynamics*, Springer-Verlag, Berlin (2007)
- [6] W. Nolting, A. Ramakanth, *Quantum theory of magnetism*, Springer - Verlag, Berlin (2009)
- [7] D. C. Mattis, *Theory of Magnetism I*, Springer-Verlag, Berlin (1988)
- [8] M. G. Cottam, D. R. Tilley *Introduction to surface and superlattice excitations*, Cambridge University Press, Cambridge (1989)
- [9] Grupa autora, *Jubilej Zvonka Marića*, Institut za fiziku, Beograd (1992)
- [10] B. S. Tošić, *Statistička fizika*, PMF u Novom Sadu, Novi Sad (1978)
- [11] D. Kapor, M. Škrinjar, *Zbirka zadataka po odabranim poglavljima Statističke fizike*, Univerzitet u Novom Sadu, Novi Sad (1982)
- [12] V. Yu. Irkin, A. A. Katanin, M. I. Katsenelson, Phys. Rev. B **60**, 1082 (1999)
- [13] J. M. Borwein, P. B. Borwein, *Pi and the AGM - A Study in Analytic Number Theory and Computational Complexity*, John Wiley & Sons, New York (1987)
- [14] P. Fröbrich and P. J. Kuntz, Phys. Rep. **432** 223-304 (2006)
- [15] S. V. Tyablikov *The Methods in the Quantum Theory of Magnetism*, Plenum Press, New York (1967)