



UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI
FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU



Termodinamička svojstva složenih antiferomagnetnih sistema opisanih Hajzenbergovim modelom

-doktorska disertacija-

Mentor: dr Milica Pavkov-Hrvojević

Kandidat: Slobodan Radošević

Novi Sad, 2012

Sadržaj

Uvod	7
I Spinski hamiltonijan i metod linearizacije jednačina kretanja	11
1 Halogenidi mangana i Hajzenbergov antiferomagnet	13
1.1 Hajzenbergov antiferomagnet	13
1.1.1 Hamiltonijan	14
1.1.2 Simetrije hamiltonijana i osnovnog stanja	15
1.1.3 Unitarna transformacija hamiltonijana	16
1.2 Kristalografska i magnetna struktura Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$	18
1.3 Modelni hamiltonijan	21
2 Metod jednačina kretanja	23
2.1 Hajzenbergov feromagnet	23
2.1.1 Jednačine kretanja	24
2.1.2 Tjablikovska linearizacija	24
2.1.3 Termodinamičke karakteristike feromagneta	26
2.1.4 Kalenovska linearizacija	29
2.2 Hajzenbergov antiferomagnet	31
2.2.1 Jednačine kretanja: RPA na $T = 0\text{K}$	31
2.2.2 Jednačine kretanja: RPA na konačnim temperaturama	37
2.2.3 Jednačine kretanja: Kalenova linearizacija	40
3 Integrali Votsonovog tipa i Hajzenbergov model	43
3.1 Analitička rešenja	43
3.1.1 Integrali $I_D(\eta)$	43
3.1.2 Integrali $\tilde{I}_D(\eta)$ i $\tilde{J}_D(\eta)$	46
3.1.3 Integrali $J_D(\eta)$	47
3.1.4 Integrali $L_D(\eta)$	49
3.2 Uopštavanje rešenja	50
3.2.1 Asimptotsko ponašanje	50
3.2.2 Rešenja za kontinualnu dimenziju	51
3.2.3 $I(D, \eta)$ kao diferencijabilna funkcija parametra D	52
3.3 Hajzenbergov model u RPA slici	54
3.3.1 Osnovno stanje HAFM	54

3.3.2	Kritična temperatura	56
3.4	Kritična temperatura u Kalenovom prilazu	58
3.4.1	Izotropni model	58
3.4.2	Anizotropni model	59
4	Termodinamičke osobine Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$	65
4.1	Dvodimenzioni antiferomagnetni model	65
4.1.1	RPA i LSW za Rb_2MnCl_4	65
4.1.2	Kalenova linearizacija za Rb_2MnCl_4	69
4.1.3	LSW, RPA i Kalenova linearizacija za $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$	72
4.2	Uticaoj prostorne anizotropije	75
4.2.1	Jednačine kretanja: RPA linearizacija	75
4.2.2	Jednačine kretanja: Kalenova linearizacija	80
II	Metod teorije polja	85
5	Efektivna teorija polja i Hajzenbergov feromagnet	87
5.1	Statistički i fizički opis jako korelisanog sistema	88
5.1.1	Efektivni stepeni slobode	88
5.1.2	Efektivni lagranžijan	89
5.2	Efektivni magnonski hamiltonijan na rešetki	91
5.2.1	Efektivni lagranžijan za feromagnet	91
5.2.2	Regularizacija	92
5.3	Popravka prvog reda za Grinovu funkciju	94
5.3.1	Propagator i spontana magnetizacija	94
5.3.2	Računanje Grinove funkcije	94
5.3.3	Renormalizacija magnonskih masa	97
5.3.4	RPA Tjablikova	98
5.4	Slobodna energija i simetrija efektivnog lagranžijana	100
5.4.1	Spontana magnetizacija	100
5.4.2	Spin-rotaciona simetrija efektivnog lagranžijana	101
5.4.3	RPA Tjablikova i Hajzenbergov antiferomagnet	104
6	Magnonski operatori i 1D HAFM	107
6.1	Opis spinskih sistema u granici kontinuuma	107
6.2	Transformacija Hajzenbergovog hamiltonijana	108
6.2.1	Definicija transformacije	108
6.2.2	Novi dinamički stepeni slobode	110
6.2.3	Hamiltonijan bozonskog polja $M(\mathbf{n})$ na rešetki	111
6.3	Magnonske energije	115
6.3.1	Linearizacija hamiltonijana	115
6.3.2	Jednačine kretanja	116
6.3.3	Dijagonalni hamiltonijan i magnetizacija podrešetke	118
7	Zaključak	121

A	Teorija polja na rešetki	125
A.1	D – dimenziona prosta kubna rešetka	125
A.2	D – dimenziona zapreminski centrirana kubna rešetka	128
A.2.1	Laplasijan i Furiije transformi	128
A.2.2	Integracija po I Brilluonovoj zoni	129
A.3	3D – magnetna rešetka za manganove halogenide	130

Uvod

Direktna primena kvantne mehanike na sisteme velikog broja ($\sim 10^{23}$) nerelativističkih čestica podrazumeva rešavanje izuzetno komplikovane Šredingerove jednačine. Fizičke veličine od interesa bi se u datom slučaju mogle izraziti pomoću dobijene talasne funkcije. Međutim, ovaj prilaz je skopčan sa određenim tehničkim i principijelnim poteškoćama. Naime, pomenutu Šredingerovu jednačinu je nemoguće rešavati približno čak ni primenom savremenih računara, a kako stvari stoje, to neće biti izvodljivo ni u dogledno vreme (podrazumeva se da nalaženje analitičkog rešenja nije moguće). Sa druge strane, eksperimentalno određivanje potrebnih početnih uslova za mikroskopske konstituente jednog makroskopskog sistema je isključeno zbog Hajzenbergovih relacija neodređenosti. Pri razmatranju jako korelisanih sistema koji se, po definiciji, ne mogu predstaviti jednostavnim zbirom slabo interagujućih delova, situacija je još komplikovanija. Zbog toga se problemu velikog broja jako interagujućih čestica mora pristupiti na drugi način.

Jedna od mogućnosti prevazilaženja ovih problema je uvođenjem novih, pogodno odabranih efektivnih stepeni slobode. Ovaj postupak se lepo ilustruje na primeru antiferomagneta¹. Antiferomagnet se sastoji od kristalne rešetke u čijim čvorovima su smešteni joni određenih hemijskih elemenata i od elektrona koji u opštem slučaju mogu da prelaze sa čvora na čvor. Pošto je masa jona bar 2000 puta veća od mase elektrona, u prvoj aproksimaciji se dinamika kristalne rešetke može odvojiti od dinamike pokretnih elektrona (tzv. adijabatska aproksimacija). Na taj način se dolazi do hamiltonijana u kojem figurišu jedino elektronski operatori. Najjednostavniji takav hamiltonijan, kod kojeg se u svakom čvoru rešetke mogu naći maksimalno dva elektrona suprotno orijentisanih spinova je Habardov. U njemu postoje tri nezavisna parametra: amplituda verovatnoće prelaska elektrona sa čvora \mathbf{n} na čvor \mathbf{m} koja se obično označava sa t_{nm} , intenzitet kulonovskog odbijanja elektrona na istom čvoru U i popunjenost čvorova elektronima (koncentracija). Kada je $U \ll |t_{nm}|$, elektroni se ponašaju kao sistem skoro slobodnih čestica i može se koristiti standardna teorija perturbacija sa malim parametrom $U/|t_{nm}|$. Ako je Kulonova interakcija dominantna, nemoguće je primeniti perturbativni razvoj jer ne postoji osnovno stanje koje sačinjavaju neinteragujući elektroni. Jaka kulonovska interakcija tada fiksira elektrone u čvorovima rešetke, jer je energetski mnogo povoljnije da se na čvorovima nalaze izolovani elektroni. Pokazuje se da je kod polupopunjenog kristala dinamiku jako korelisaniog Habardovog modela ($U \gg |t_{nm}|$) moguće svesti na efektivnu antiferomagnetnu interakciju

¹Slični argumenti su na snazi i u slučaju feromagneta

lokalizovanih spinova $S = 1/2$ sa integralom izmene $J = 4|t_{nm}|^2/U$. Elementarne ekscitacije sistema lokalizovanih spinova su magnoni. Korist od uvođenja magnona kao efektivnih stepeni slobode se najbolje ogleda u sledećem: koliko god interakcije između elektrona u antiferomagnetnom kristalu bile komplikovane i jake, magnoni se u dobrom delu uređene faze ponašaju kao slobodne čestice. Uticaj male popravke usled magnon–magnon interakcije na termodinamičke osobine antiferomagnetnog i feromagnetnog kristala je osnovna tema ovog teksta.

Iako predstavljaju efektivne hamiltonijane u jako korelisanom režimu elektronskog sistema, Hajzenbergov feromagnet (HFM) i antiferomagnet (HAFM), spadaju u najvažnije modele savremene fizike kondenzovane materije. Postoji nekoliko dobrih razloga za to. Pre svega, visokotemperaturni superprovodnici u nedopiranoj fazi su antiferomagnetni izolatori pa postoji mišljenje (koje nije u potpunosti prihvaćeno) da su interakcije magnona i elektrona (ili magnona i šupljina) odgovorne za povezivanje nosioca naelektrisanja poput Kuperovog mehanizma klasičnih superprovodnika. Takođe, u granici kontinuuma, HAFM se preslikava na Lorenc–invarijantni $O(3)$ nelinearni sigma model (NLSM) čime se omogućava direktna primena metoda relativističke kvantne teorije polja (KTP) na problem statističke fizike. Konačno, osnovno stanje HAFM je veoma komplikovano i model je interesantan sam po sebi. Bez obzira što se razlikuju samo po predznaku integrala izmene, HAFM i HFM se ponašaju veoma različito na kvantnom nivou. Na primer, parametar uređenja feromagneta je konstanta kretanja, dok kod antiferomagneta to nije slučaj. Dalje, ispostavlja se da u granici kontinuuma efektivni lagranžijan feromagneta sadrži topološki Ves-Zumino-Viten (Wess-Zumino-Witten, WZW) član koji je odgovoran za klasičnu ($\propto \mathbf{k}^2$) disperziju feromagnetnih magnona. S obzirom da rešenje postoji samo za jednodimenzioni HAFM/HFM model sa lokalizovanim spinovima $S = 1/2$, razvijeni su brojni aproksimativni postupci za približni tretman HFM i HAFM. Radi potpunijeg razumevanja magnon-magnon interakcija, njihovog uticaja na termodinamičke karakteristike HAFM kao i raznih aproksimativnih postupaka koji se često koriste, korisno je povući paralele između HAFM i HFM. Na kraju krajeva, u realnim sistemima kakvi su i manganovi halogenidi, uvek se javlja određeni stepen frustracije. Drugim rečima, pored dominantnih antiferomagnetnih interakcija javljaju se i feromagnetno kuplovani spinovi. Sprega feromagnetnih i antiferomagnetnih interakcija je od velikog značaja u novootkrivenim visokotemperaturnim superprovodnicima na bazi gvožđa i arsena, tako da je u principu teško potpuno razdvojiti analizu fero i antiferomagneta.

Standardni postupak za analizu Hajzenbergovog modela na niskim temperaturama je linearna teorija spinskih talasa (LSW). Osnovna ideja na kojoj se bazira LSW je korišćenje egzaktnih bozonskih reprezentacija spinskih operatora. Zadržavanjem samo kvadratnih članova po bozonskim operatorima², dolazi se do dijagonalnog hamiltonijana. Pomoću dijagonalnog bozonskog hamiltonijana se relativno lako mogu dobiti osnovne karakteristike sistema u linearnoj aproksimaciji. Kao što je već napomenuto, ovaj prilaz daje dobre rezultate na niskim temperaturama. U stvari, sve do $T/T_C \approx 0.4$, rezultati teorije neinteragujućih magnona se slažu sa eksperimentalnim merenjima.

Drugi postupak, koji za razliku od LSW daje dobre rezultate na celom temperaturnom intervalu uređene faze je metod spinskih Grinovih funkcija (SGF) u kombinaciji sa Tjablikovljevim dekuplovanjem (RPA). Korišćenjem aproksimacije Tjablikova se zatvara sistem jednačina kretanja za Grinove funkcije pa je primenom spektralne teoreme moguće odrediti osnovne korelacione funkcije pomoću kojih su izražene termodinamičke karakteristike Hajzenbergovog

²I upotrebom Bogoljubovljeve transformacije u slučaju antiferomagneta.

magneta.

Iako daje dobro slaganje sa eksperimentom, RPA GF metod ima nekoliko nedostataka. Prvi se odnosi na jasan fizički uvid u aproksimaciju Tjablikova. Naime, RPA dekuplovanje omogućava da se zatvore sistemi jednačina kretanja, ali prava priroda ove aproksimacije ostaje maskirana matematičkim formalizmom teorije Grinovih funkcija i primenom spektralne teoreme. S tim u vezi je i interpretacija pozitivnih i negativnih korena disperzione relacije, prisutnih u slučaju antiferomagneta, koji su ponekad u literaturi tumačeni na pogrešan način.

Drugo, u RPA teoriji se pojavljuju srednje vrednosti fizičkih veličina (korelacione funkcije). Poznavanje samo korelacionih funkcija se svakako smatra manje detaljnim opisom sistema od onog u kojem su eksplicitno rešeni operatori (fizičkih) veličina. Na operatorskom formalizmu se zasniva LSW, ali je zbog grube aproksimacije taj postupak primenljiv samo na niskim temperaturama.

Konačno, kad se jednom izvrši dekuplovanje Grinovih funkcija, nemoguće je uračunati dodatnu popravku usled magnon–magnon interakcije jer se RPA metod zasniva na primeni operatora u Hajzenbergovoj slici.

Gore navedene poteškoće u tumačenju aproksimacije Tjablikova su motivisale nešto drugačiji pristup problemu.

Radi efikasnije analize, sadržaj disertacije je podeljen u dve celine. Prva je uglavnom posvećena analizi Hajzenbergovog antiferomagneta na D – dimenzionoj zapreminski centriranoj rešetki metodom linearizacije jednačina kretanja za spinske operatore. U tekstu je pokazano da ovaj metod daje iste rezultate kao i standardni metod dvovremenskih temperaturnih Grinovih funkcija. Pogodnim izborom linearizacije jednačina, dobijaju se rezultati poznatih šema dekuplovanja Grinovih funkcija, konkretno RPA Tjablikova i odgovarajuća Kalenova generalizacija. Metod linearizacije jednačina kretanja pomaže da se jasnije uvidi smisao često korišćenih dekuplovanja tipa RPA Tjablikova. Gde god je bilo moguće, povlačana je paralela sa Hajzenbergovim feromagnetom. Kao što je već napomenuto, istovremeno razmatranje feromagneta i antiferomagneta pomaže da se potpunije sagleda kompleksna problematika jako korelisanih sistema lokalizovanih spinova. Linearizovane jednačine su pažljivo rešavane i pokazano je da je u RPA slici HFM zapravo opisan Šredingerovim poljem na rešetki, pri čemu je masa elementarnih ekscitacija renormalizovana. Slično, ispostavlja se da RPA (pa i kalenovski) opis antiferomagneta ima dosta sličnosti sa kompleksnim skalarnim poljem na rešetki. Ovi rezultati su protumačeni sa drugčijeg stanovišta u Glavi 5, odnosno 6. Prilikom analize HFM i HAFM na D –dimenzionoj zapreminski centriranoj rešetki se pojavljuje jedna klasa integrala Votsonovog tipa. Ti integrali su rešeni analitički, svodjenjem na generalisanu hipergeometrijsku funkciju. Ova egzaktna rešenja olakšavaju i poboljšavaju analizu. Konkretno, strogo je pokazano da za pomenute feromagnetne i antiferomagnetne modele sa malom ali konačnom ili sa velikom spinskom anizotropijom RPA uvek predviđa nižu kritičnu temperaturu od Kalenove aproksimacije ako je $D \geq 2$. Istovremeno, za jednodimenzione sisteme RPA daje višu kritičnu temperaturu. Takođe, korišćenjem egzaktnih rešenja integrala Votsonovog tipa, pokazuje se da RPA tjablikova daje rezultate u saglasnosti sa Kolmen-Mermin-Vagnerovom teoremom. Pomenuti integrali dopuštaju i uopštavanje nekih od dobijenih rezultata na necelobrojne vrednosti parametra D . Konačno, u prvom delu disertacije je pažnja posvećena i primeni metoda linearizacije jednačina kretanja na magnetne osobine kvazidvdimenzionih antiferomagnetnih jedinjenja mangana, Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$. Detaljna analiza, koja je uključila i postojanje interplanarnih interakcija (prošireni, 3D model), pokazala je kako najbolje slaganje sa eksperimentalnim vrednostima u širokom temperaturnom inter-

valu uređene faze daje linearizacija jednačina kretanja koja je ekvivalentna originalnom RPA postupku Tjablikova. Posebno treba istaći odlično slaganje predviđenih kritičnih temperatura u okviru samousaglašenog RPA prilaza sa odgovarajućim eksperimentalnim vrednostima. U okviru ovog dela je izneto više argumenata koji favorizuju 2D model sa spinskom anizotropijom kao optimalno prilagođen magnetnim osobinama pomenutih jedinjenja.

Drugi deo disertacije predstavlja primenu nekih metoda teorije polja na Hajzenbergov model. Konkretno, u Glavi 5 je metod efektivnih lagranžijana, u okviru regularizacije rešetkom primenjen na D – dimenzioni Hajzenbergov feromagnet. Detaljno su diskutovane prednosti koje nosi metod efektivnih lagranžijana u odnosu na standardne linearizacije jednačina kretanja za spinske operatore (odnosno, metod Grinovih funkcija Tjablikova). Nakon opšte analize, za koju se pokazalo da daje rezultate u saglasnosti sa Dajsonovom teorijom, konstruisana je efektivna teorija polja koja je na niskim temperaturama ekvivalentna RPA linearizaciji. Kao bitan zaključak ove analize se izdvaja nalaženje uzroka za odstupanja na niskim temperaturama koje unosi RPA linaerizacija. Pokazano je da je efektivna teorija za RPA tjablikova zasnovana na lagranžijanu koji eksplicitno narušava unutrašnju $O(3)$ simetriju Hajzenbergovog modela zanemarivanjem magnon–magnon interakcija koje generiše WZW član u lagranžijanu. Ovaj rezultat se može uzeti i kao indirektna potvrda za primenu RPA linearizacije na HAFM čiji efektivni lagranžijan ne sadrži WZW član. Konačno, u poslednjoj Glavi je razmatran 1D HAFM sa malom spinskom anizotropijom. Predložena je transformacija Hajzenbergovog hamiltonijana koja direktno povezuje 1D HAFM sa nelinearnim sigma modelom (NLSM) na rešetki koji sadrži topološki θ – član. Ovaj rezultat eliminiše potrebu za transformacijom Bogoljubova u linearnoj aproksimaciji i potvrđuje zaključke o analogiji HAFM i kompleksnog Klajn-Gordonovog polja iznete u Glavi 2.

Zbog jednostavnijeg pisanja jednačina u tekstu je korišćen sistem jedinica u kome je $\hbar = k_B = 1$. Zbog toga je integral izmene J , jedini parametar hamiltonijana sa dimenzijama energije koji je određivan pomoću eksperimentalnih podataka, uvek izražen u jedinicama Bolcmanove konstante.

Deo I

Spinski hamiltonijan i metod linearizacije jednačina kretanja

Glava 1

Halogenidi mangana i Hajzenbergov antiferomagnet

Određena jedinjenja mangana, o kojima će biti više reči u daljem tekstu, predstavljaju izuzetno dobru realizaciju kvazi-dvdimenzionog Hajzenbergovog antiferomagneta. Tipičan predstavnik halogenida mangana je Rb_2MnCl_4 . U grupi jedinjenja sa sličnim magnetnim karakteristikama se nalaze i Rb_2MnF_4 , Cs_2MnCl_4 i K_2MnF_4 . Oni zajedno spadaju u širu klasu jedinjenja A_2MX_4 , gde je A alkalni metal, M metal grupe gvožđa i X halogeni element. Sva jedinjenja kristališu u istoj strukturi i njihove magnetne osobine se veoma dobro mogu opisati Hajzenbergovim hamiltonijanom, u slučaju mangana sa spinom $S = 5/2$. Nešto komplikovaniju strukturu, ali sa sličnim magnetnim osobinama ima jedinjenje $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$ (\equiv MAMC). Modelni hamiltonijan, koji se zasniva na eksperimentalnim činjenicama iznetim u daljem tekstu, predstavlja osnovu za teorijsko ispitivanje magnetnog sistema. Hamiltonijan sadrži kako spinsku, tako i prostornu anizotropiju. Spinska anizotropija je definisana parametrom $\eta = 1 + g$, dok se prostorna ogleda u postojanju različitih integrala superizmene duž različitih kristalografskih pravaca. Pri tome je interakcija između spinova unutar x - y ravni dominantna, dok je integral superizmene koji povezuje spinove iz susednih ravni za nekoliko redova veličine manji. Spinska anizotropija ima vrednost vrlo blisku jedinici ($\eta \simeq 1 + 5 \cdot 10^{-3}$). Pogodno je da se integral superizmene među najbližim susedima u ravni J i spinska anizotropija η određuju pomoću eksperimentalnih podataka za magnonsku disperziju, dok se međuravanski integral superizmene J_{\perp} tretira kao parametar koji definiše dimenzionost magnetne rešetke. Najpre će biti reči o apstraktnom Hajzenbergovom hamiltonijanu, da bi nakon toga detaljnije razmotrili njegovu eksperimentalnu realizaciju kod halogenida mangana.

1.1 Hajzenbergov antiferomagnet

U ovom odeljku ukratko razmatramo Hajzenbergov antiferomagnet, stavljajući akcenat na simetrije hamiltonijana. Takav prilaz omogućava da se izvrši unitarna transformacija hamiltonijana koja pojednostavljuje kasnije račune. Takođe, unutrašnja $O(3)$ simetrija Hajzenbergovog modela (kako antiferomagnetnog tako i feromagnetnog), predstavlja osnovu za konstruisanje efektivne teorije, kao što je izloženo u drugom delu disertacije. S obzirom da se najvažniji rezultati za 2D HAFM direktno generalizuju na antiferomagnet definisan na D dimenzionoj zapreminski centriranoj rešetki, pogodno je odmah definisati opšti D – dimenzioni model. U

poglavljima koja slede dobijeno je više rezultata koji važe i u slučaju drugih geometrija. Ukoliko ne bude drugačije naglašeno, sve vreme će se podrazumevati D – dimenziona zapreminski centrirana rešetka.

1.1.1 Hamiltonijan

Hajzenbergov antiferomagnet sa spinskom anizotropijom $g > 0$ na D dimenzionoj zapreminski centriranoj kubnoj rešetki je definisan hamiltonijanom [1,2]

$$H = J \sum_{\mathbf{n} \in a, \boldsymbol{\lambda}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}}(a) \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\lambda}}(b) + Jg \sum_{\mathbf{n} \in a, \boldsymbol{\lambda}} S_{\mathbf{n}}^z(a) S_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\lambda}}^z(b), \quad (1.1)$$

zajedno sa komutacionim relacijama

$$\left[S_{\mathbf{n}}^{\alpha(i)}, S_{\mathbf{m}}^{\beta(j)} \right] = i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{\mathbf{n}}^{\gamma(i)} \Delta(\mathbf{n} - \mathbf{m}) \delta_{i,j}, \quad i, j = a, b. \quad (1.2)$$

Pri tome je interakcija izmene J ograničena na najbliže susede a $\mathbf{S}_{\mathbf{n}}$ je vektorski operator lokalizovanog spina S . Umesto S^x i S^y , često je pogodnije raditi sa $S^{\pm} = S^x \pm iS^y$ operatorima, za koje važi

$$\left[S_{\mathbf{n}}^+, S_{\mathbf{m}}^- \right] = 2S_{\mathbf{n}}^z \Delta(\mathbf{n} - \mathbf{m}), \quad \left[S_{\mathbf{n}}^{\pm}, S_{\mathbf{m}}^z \right] = \mp S_{\mathbf{n}}^{\pm} \Delta(\mathbf{n} - \mathbf{m}) \quad (1.3)$$

Dva Kronekerova simbola u (1.2) možda izgledaju suvišna, ali je operatore koji pripadaju različitim podrešetkama potrebno pažljivo razlikovati. Potreba za dva Kronekerova simbola će postati evidentna prilikom definisanja transformacije za 1D HAFM u Glavi 6. Orijentacije $S_{\mathbf{n}}^{\alpha}$ koordinatnih osa u principu ne zavise od pravaca koje zauzimaju ose kristalne rešetke. Indeksi a i b se odnose na dve podrešetke u kojima spinovi dominantno pokazuju "gore" i "dole". Vektor $\mathbf{n} = [n^1, n^2, \dots, n^D]^T$, $n^i \in \mathbb{Z}$, prebrojava čvorove podrešetke a , dok $\boldsymbol{\lambda}$ spaja uočeni čvor sa najbližim susedima [3]

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\lambda}_1 &= \frac{a}{2}[\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \dots + \mathbf{e}_D], \quad \boldsymbol{\lambda}_2 = \frac{a}{2}[\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \dots - \mathbf{e}_D] \\ \boldsymbol{\lambda}_3 &= \frac{a}{2}[\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \dots - \mathbf{e}_{D-1} + \mathbf{e}_D], \dots, \quad \boldsymbol{\lambda}_{2^D} = \frac{a}{2}[-\mathbf{e}_1 - \dots - \mathbf{e}_D], \end{aligned} \quad (1.4)$$

gde je a parametar rešetke¹. Najbliži susedi uočenog čvora ograničavaju elementarnu ćeliju (hiperkocka) kojoj pripada i dati čvor. Lako je videti da je broj najbližih suseda posmatranog čvora 2^D kao i da su vektori koji spajaju taj čvor sa najbližim susedima baš oni iz (1.4). Pošto se svaki čvor podrešetke a nalazi u centru D dimenzione kocke u čijim su temenima čvorovi podrešetke b , svi čvorovi b se nalaze na rastojanju $a\sqrt{D}/2$ od posmatranog čvora a . Odnosno, relativne koordinate čvorova podrešetke b koji okružuju jedan čvor podrešetke a predstavljaju kombinacije pomaka $\pm a/2$ u svakom od D pravaca. Ukupan broj pomaka te vrste je 2^D i njima su pridruženi vektori iz (1.4). Pri tome se vektori $\boldsymbol{\lambda}_i$ uvek javljaju u parovima $\pm \boldsymbol{\lambda}$ (npr. vektori $\boldsymbol{\lambda}_1$ i $\boldsymbol{\lambda}_{2^D}$ iz (1.4)).

Osnovna veličina kroz koju se uračunava simetrija elementarne ćelije je tzv. geometrijski faktor, definisan u (A.25). On figuriše u određenim integralima Votsonovog tipa koji se pojavljuju u različitim teorijskim prilazima Hajzenbergovim magnetima, pa je pogodno imati njegovu eksplicitnu formu.

¹Iz konteksta je uvek jasno kada se indeks a odnosi na parametar rešetke a kada označava jednu od magnetnih podrešetki antiferomagneta, pa ne bi trebalo da dođe do zabune.

Tvrdimo da je za D dimenzionu zapreminski centriranu rešetku [3]

$$\gamma_D(\mathbf{k}) = \frac{1}{Z_1} \sum_{\boldsymbol{\lambda}} \exp[i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}] = \prod_{i=1}^D \cos \frac{ak_i}{2}, \quad \text{pri čemu je } Z_1 = Z_1(D) = 2^D. \quad (1.5)$$

Formulu (1.5) ćemo dokazati matematičkom indukcijom. Za $D = 1$ imamo

$$\gamma_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left(\exp \left[i \frac{ak_1}{2} \right] + \exp \left[-i \frac{ak_1}{2} \right] \right) = \cos \frac{ak_1}{2}. \quad (1.6)$$

Za $D = N$ je $\mathbf{k} = [k_1, k_2, \dots, k_N]^T$, dok su vektori $\boldsymbol{\lambda}_i$, $i = 1, 2, \dots, 2^N$ navedeni u (1.4). Dalje, pretpostavićemo da je jednakost (1.6) ispravna za $D = N$. U $N + 1$ dimenzionom prostoru je $\mathbf{k} = [k_1, k_2, \dots, k_N, k_{N+1}]^T \equiv \tilde{\mathbf{k}}$. Vektora, koji spajaju uočeni čvor sa najbližim susedima na $N + 1$ dimenzionoj rešetki (označićemo ih sa $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$), ima 2^{N+1} . Njih možemo dobiti od 2^N vektora $\boldsymbol{\lambda}_i$ iz (1.4), tako što svakom vektoru $\boldsymbol{\lambda}_i$ dodamo pomeraaj od $\pm a/2$ u pravcu koordinatne ose $N + 1$. Na taj način dobijamo skup od 2^{N+1} vektora koji spajaju centar $N + 1$ dimenzione hiperkocke sa njenih 2^{N+1} temena, $\{\tilde{\boldsymbol{\lambda}}_i\} = \{\boldsymbol{\lambda}_i \pm (a/2)\mathbf{e}_{N+1}\}$: Sada lako nalazimo zbir iz definicije geometrijskog faktora za $D = N + 1$

$$\begin{aligned} \sum_{\tilde{\boldsymbol{\lambda}}} \exp[i\tilde{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \tilde{\mathbf{k}}] &= \sum_{\boldsymbol{\lambda}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}} \left(e^{i\frac{a}{2}k_{N+1}} + e^{-i\frac{a}{2}k_{N+1}} \right) \\ &= 2 \cos \frac{ak_{N+1}}{2} 2^N \prod_{i=1}^N \cos \frac{ak_i}{2} \end{aligned} \quad (1.7)$$

pri čemu je u poslednjem koraku iskorišćena jednačina (1.5) za $D = N$. Time je dokaz završen.

1.1.2 Simetrije hamiltonijana i osnovnog stanja

Izotropni hamiltonijan ($g = 0$) poseduje kontinualnu globalnu $O(3)$ simetriju u odnosu na rotacije spinskih operatora u unutrašnjem prostoru. Prema teoremi Emi Neter [4–6] moraju postojati tri integrala kretanja koji su generatori rotacija u prostoru spinskih operatora. Lako je videti da je konstanta kretanja ukupni spin

$$\mathbf{S} = \sum_{n \in a} \mathbf{S}_n(a) + \sum_{m \in b} \mathbf{S}_m(b), \quad [\mathbf{S}, H] = \sum_i e_i [S_i, H] = 0, \quad (1.8)$$

odnosno da su generatori rotacija komponente operatora \mathbf{S}

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} S_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3. \quad (1.9)$$

Dakle, operator $\exp[-i\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{S}]$ rotira lokalizovane spinove u unutrašnjem prostoru za uglove θ_x, θ_y i θ_z oko odgovarajućih osa u pozitivnom smeru. Detaljnije napisan operator rotacije glasi

$$U(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{n \in a} \exp \left[-i\theta_i S_n^i(a) \right] \otimes \prod_{n \in b} \exp \left[-i\theta_i S_n^i(b) \right] \quad (1.10)$$

pri čemu je iskorišćena činjenica da spinski operatori sa različitih čvorova međusobno komutiraju. Klasično (Nelovo) osnovno stanje antiferomagneta je

$$|\text{Nel}\rangle = \prod_{n \in a} |S, S^z = S\rangle_n \otimes \prod_{n \in b} |S, S^z = -S\rangle_n. \quad (1.11)$$

i očigledno je invarijantno jedino u odnosu na rotacije oko z ose. Nelovo stanje nije osnovno stanje kvantnog antiferomagneta ali se uzima kao polazno u različitim približnim metodama. Ako se posmatra samo osnovno stanje antiferomagneta, potpuna rotaciona simetrija hamiltonijana je sakrivena i izotropni HAFM predstavlja prototip sistema sa spontano narušenom simetrijom. Imajući u vidu da su spontano narušena dva generatora rotacije (S_x i S_y), kao i da se u granici kontinuuma HAFM preslikava na relativističku teoriju nelinearnog σ modela, u spektru bi trebalo da se pojave dve Goldstonove čestice. Iako dolazi do spontanog narušavanja simetrije po istom principu, $O(3) \rightarrow O(2)$, u spektru feromagneta se javlja samo jedan magnon. Kod anizotropnog modela ($g \neq 0$) ne dolazi do spontanog narušavanja simetrije jer z -osa definiše preferirani pravac u hamiltonijanu.

Parametar uređenosti kvantnog antiferomagneta je Nelov vektor [5]

$$\mathbf{N} = \sum_{n \in a} \mathbf{S}_n(a) - \sum_{m \in b} \mathbf{S}_m(b). \quad (1.12)$$

Pravo osnovno stanje HAFM, u oznaci $|\Omega\rangle$, odlikuje se kvantnim fluktuacijama za razliku od klasičnog stanja $|\text{Nel}\rangle$. Ipak, Nelov vektor definiše preferirani pravac u spinskom prostoru ($\langle \Omega | \mathbf{N} | \Omega \rangle \neq 0$) i osnovno stanje kvantnog antiferomagneta je invarijantno u odnosu na rotacije oko tog pravca. Kako je ranije primećeno, kod anizotropnog modela nema spontanog narušavanja simetrije, pa se u magnonskom spektru pojavljuje gep (magnoni postaju masivni) [9]. Pri tome ovaj jednostavan zaključak o postojanju gepa u magnonskom spektru izveden u duhu linearne teorije spinskih talasa ne važi za jednodimenzioni HAFM [1, 7, 8].

Nelov vektor nije konstanta kretanja, što prouzrokuje velike posledice po osnovno stanje HAFM, već zadovoljava komutacione relacije

$$[\mathbf{N}, H] = -2i \sum_{n \in a, \lambda} \mathbf{S}_n^{(a)} \times \mathbf{S}_{n+\lambda}^{(b)}, \quad [S_i, N_j] = i \varepsilon_{ijk} N_k. \quad (1.13)$$

Radi poređenja sa eksperimentalnim rezultatima, pogodno je uzeti da vektor \mathbf{N} leži duž z pravca. Tada se za parametar uređenosti antiferomagnetne faze može uzeti srednja vredost z komponente ukupnog spina podrešetke obračunata po čvoru. U slučaju feromagneta, parametar uređenosti je ukupni spin (1.8), pa se u osnovnom stanju HFM ne javljaju kvantne fluktuacije. Jedan drugačiji pogled na pojavu kvantnih fluktuacija u osnovnom stanju HAFM je iznet na kraju Glave 6.

1.1.3 Unitarna transformacija hamiltonijana

Koristeći $\exp[-i\phi S^\beta] S^\alpha \exp[i\phi S^\beta] = S^\alpha \cos \phi - \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S^\gamma \sin \phi$, za $\alpha \neq \beta$ (čvor rešetke i indeks podrešetke ne pišemo radi preglednosti), moguće je eksplicitno naći rotirane spinske operatore. Izbor $\boldsymbol{\theta} = (\theta, 0, 0)^T$, koji odgovara rotaciji oko x ose, će biti naročito koristan u nastavku. Za njega dobijamo

$$\begin{bmatrix} \tilde{S}_n^x \\ \tilde{S}_n^y \\ \tilde{S}_n^z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U(\boldsymbol{\theta}) S_n^x U^\dagger(\boldsymbol{\theta}) \\ U(\boldsymbol{\theta}) S_n^y U^\dagger(\boldsymbol{\theta}) \\ U(\boldsymbol{\theta}) S_n^z U^\dagger(\boldsymbol{\theta}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_n^x \\ S_n^y \\ S_n^z \end{bmatrix}. \quad (1.14)$$

Slične jednačine važe i za rotacije oko preostale dve ose. To potvrđuje da se u odnosu na rotacije u unutrašnjem prostoru $\mathbf{S}_n = (S_n^x, S_n^y, S_n^z)^T$ transformiše kao vektor, što se intuitivno i očekuje.

Da bismo odredili svojstvena stanja novih operatora, možemo postupiti na sledeći način. Svojstvena stanja od $S_{\mathbf{n}}^z$ su definisana jednačinom

$$S_{\mathbf{n}}^z |S, m\rangle_{\mathbf{n}} = m |S, m\rangle_{\mathbf{n}}, \quad (1.15)$$

što nakon množenja sa $\exp[-i\theta S_{\mathbf{n}}^x]$ i umetanja jediničnog operatora postaje

$$\tilde{S}_{\mathbf{n}}^z \left[e^{-i\theta S_{\mathbf{n}}^x} |S, m\rangle_{\mathbf{n}} \right] = m \left[e^{-i\theta S_{\mathbf{n}}^x} |S, m\rangle_{\mathbf{n}} \right]. \quad (1.16)$$

Gornja jednačina predstavlja svojstveni problem rotiranog operatora $\tilde{S}_{\mathbf{n}}^z$ dobijenog od $S_{\mathbf{n}}^z$ rotacijom oko x ose za ugao θ . Ovo znači da su $\exp[-i\theta S_{\mathbf{n}}^x] |S, m\rangle_{\mathbf{n}}$ svojstvena stanja u rotiranom sistemu.

Definišimo sada unitarni operator

$$U_b = \prod_{\mathbf{n} \in b} \exp \left[-i\pi S_{\mathbf{n}}^x(b) \right] \quad (1.17)$$

koji rotira spinske operatore b podrešetke za ugao $\theta = \pi$ oko S_x ose. Ova transformacija uvodi jedinstvenu osu kvantizacije i pojednostavljuje kasnije proračune. Na osnovu (1.14) nalazimo rotirane operatore

$$\tilde{S}_{\mathbf{n}}^x(b) = S_{\mathbf{n}}^x(b), \quad \tilde{S}_{\mathbf{n}}^y(b) = -S_{\mathbf{n}}^y(b), \quad \tilde{S}_{\mathbf{n}}^z(b) = -S_{\mathbf{n}}^z(b). \quad (1.18)$$

Umesto S^x i S^y , hamiltonijan ćemo napisati pomoću S^{\pm} operatora. Iz (1.18) dobijamo rotirane S^{\pm} operatore

$$\tilde{S}_{\mathbf{n}}^{\pm}(b) = \tilde{S}_{\mathbf{n}}^x(b) \pm i\tilde{S}_{\mathbf{n}}^y(b) = S_{\mathbf{n}}^{\mp}(b). \quad (1.19)$$

tako da hamiltonijan (1.1) postaje

$$H \rightarrow \tilde{H} = U_b H U_b^{\dagger} = J \sum_{\mathbf{n} \in a, \lambda} \left[\frac{1}{2} \left(S_{\mathbf{n}}^{+(a)} S_{\mathbf{n}+\lambda}^{+(b)} + S_{\mathbf{n}}^{-(a)} S_{\mathbf{n}+\lambda}^{-(b)} \right) - \eta S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}+\lambda}^{z(b)} \right],$$

$$\eta = 1 + g. \quad (1.20)$$

Što se tiče rotacije svojstvenih stanja, za $\theta = \pi$ i $m = -S$, iz (1.16) nalazimo

$$-S_{\mathbf{n}}^{z(b)} \left[e^{-i\pi S_{\mathbf{n}}^{x(b)}} |S, -S\rangle_{\mathbf{n}} \right] = -S \left[e^{-i\pi S_{\mathbf{n}}^{x(b)}} |S, -S\rangle_{\mathbf{n}} \right]. \quad (1.21)$$

S obzirom da stanju $\exp[-i\pi S_{\mathbf{n}}^{x(b)}] |S, -S\rangle_{\mathbf{n}}$ odgovara svojstvena vrednost S , mora važiti

$$\exp[-i\pi S_{\mathbf{n}}^{x(b)}] |S, -S\rangle_{\mathbf{n}} = |S, S\rangle_{\mathbf{n}}, \quad \mathbf{n} \in b. \quad (1.22)$$

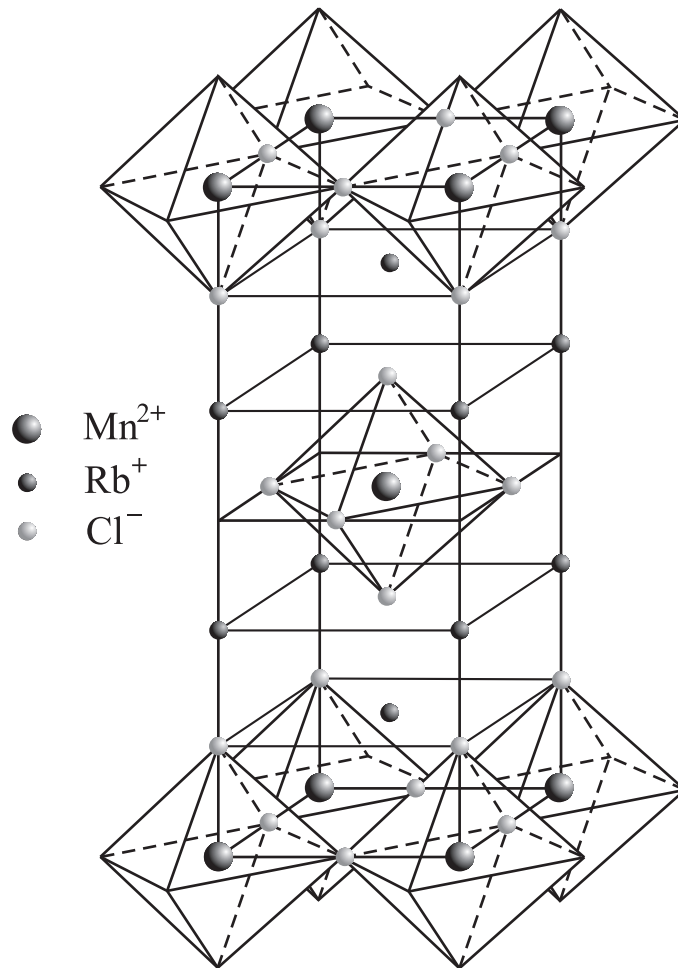
do na fazni faktor. Odnosno, Nelovo stanje se transformiše kao

$$|\text{Nel}\rangle \longrightarrow U_b |\text{Nel}\rangle = \prod_{\mathbf{n} \in a} |S, S^z = S\rangle_{\mathbf{n}} \otimes \prod_{\mathbf{n} \in b} |S, S^z = S\rangle_{\mathbf{n}}. \quad (1.23)$$

Operator $U_b(\pi)$ prevodi hamiltonijan i Nelovo stanje u tzv. lokalni koordinatni sistem. Iz (1.23) se vidi da u lokalnom sistemu Nelovo stanje izgleda kao feromagnetno. Međutim, zbog člana $S_{\mathbf{n}}^-(a) S_{\mathbf{n}+\lambda}^-(b)$, (1.23) nije svojstveno stanje hamiltonijana (1.20). Ukoliko ne bude drugačije naznačeno, hamiltonijan Hajzenbergovog antiferomagneta će biti napisan u lokalnom koordinatnom sistemu.

1.2 Kristalografska i magnetna struktura Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$

U eksperimentima sa rasejanjem neutrona [10, 11] utvrđeno je da Rb_2MnCl_4 kristališe u strukturi tipa K_2NiF_4 . Reč je o tetragonalnoj strukturi, sa dva molekula po jediničnoj ćeliji (videti Sl. 1.1). Parametri rešetke su $\tilde{a} = \tilde{b} = 5.05 \cdot 10^{-10}\text{m}$, $\tilde{c} = 16.18 \cdot 10^{-10}\text{m}$. Svaki Mn^{2+} jon se nalazi u centru oktaedra i okružena je sa po 6 Cl^- jona, koji su smešteni u oktaedarska temena. Oktaedri su raspoređeni u trodimenzione rešetke, tako da Mn^{2+} joni sačinjavaju kvadratne mreže unutar $x - y$ ravni. Duž z pravca koji spaja temena susednih oktaedara, nalaze se dva Rb^+ i dva Cl^- jona.



Sl. 1.1: Kristalografska elementarna ćelija Rb_2MnCl_4

Elektronske konfiguracije Rb^+ i Cl^- jona odgovaraju popunjenim ljuskama kriptona i argona, respektivno. Zbog toga oni ne doprinose magnetizmu posmatranog kristala. Nosioći magnetizma jedinjenja Rb_2MnCl_4 su joni Mn^{2+} .

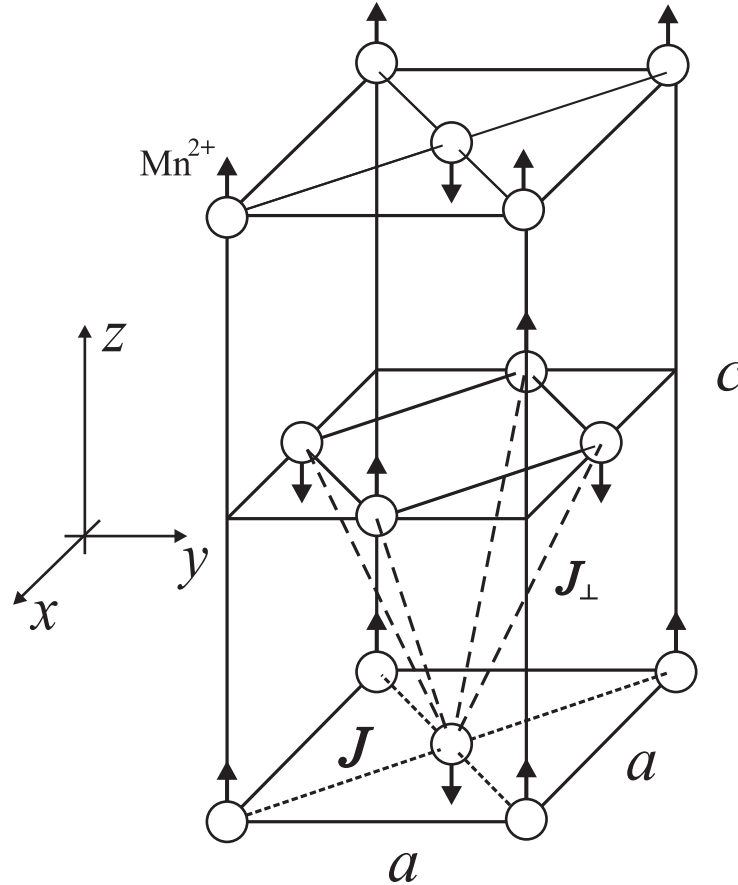
Mangan pripada prelaznim elementima grupe gvožđa. Njegova elektronska konfiguracija je

$$[\text{Ar}](3d)^5(4s)^2.$$

Jon Mn^{2+} sa polupopunjenom $3d$ ljuskom nastaje otpuštanjem dva $4s$ elektrona. Ukupni orbitalni moment polupopunjene ljuske je jednak nuli ($\hat{\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^5 \hat{\mathbf{l}}_i = 0$). Shodno Hundovom

pravilu, osnovno stanje jona Mn^{2+} je ${}^6\text{D}$. To znači da je na svakom čvoru kristalne rešetke, koji zauzima manganov jon, lokalizovan spin $S = 5/2$.

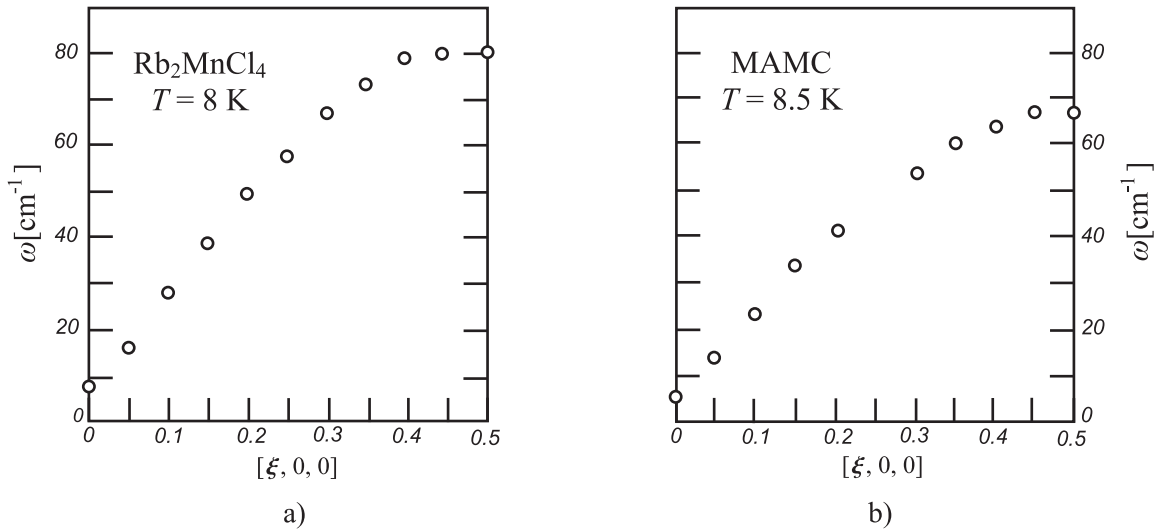
Eksperimenti pokazuju da postoji jako antiferomagnetno kuplovanje između spinova unutar $x - y$ ravni, tako da spinovi dominantno leže duž c -kristalografske ose (tj. duž z - ose). Vrednost integrala izmene koji karakteriše ovu interakciju će biti označena sa J (videti Sl. 1.2).



Sl. 1.2: Magnetna elementarna ćelija Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$ (\equiv MAMC). Tačkasta linija označava integral superizmene unutar $x - y$ ravni J , dok isprekidana linija označava J_{\perp} . a i c su parametri elementarne ćelije koji definišu Brilluenovu zonu ($a = \sqrt{2}\tilde{a}$, $c = \tilde{c}$)

Uzastopne ravni duž z -pravca su smaknute za $ae_y/2$. Zbog toga svaki spin ima po četiri fero- i antiferomagnetno orijentisana suseda u dve bliske ravni. Pod pretpostavkom da interakcija izmene zavisi samo od rastojanja između čvorova rešetke, biće uzeto da je intenzitet fero i antiferomagnetnog kuplovanja između najbližih suseda iz uzastopnih ravni isti (videti Sl. 1.2). U nastavku će ova konstanta interakcije biti označavana sa J_{\perp} . Izmenska interakcija spinova iz susednih ravni se odvija kroz dva nemagnetna RbCl sloja, zbog čega je za nekoliko redova veličine slabija od unutarplanarnog kuplovanja J ($J_{\perp}/J \equiv \lambda_{\perp} \simeq 10^{-3}, 10^{-4}$) [12] i praktično se može zanemariti.

Spektar elementarnih ekscitacija je određen pomoću neelastičnog rasejanja neutrona pri $T = 8\text{K}$ [10]. U eksperimentima je pokazano odsustvo z -komponente talasnog vektora u disperziji za dve konkretne vrednosti \mathbf{k} ($\mathbf{k}_1 = [0.2\pi/a, 0, 0.5\pi/a]^T$, $\mathbf{k}_2 = [0.3\pi/a, 0, 0.5\pi/a]^T$), dok izmerena vrednost za Nelovu temperaturu iznosi $T_N^{\text{exp}} = 56\text{K}$. Eksperimentalno je konstatovano i postojanje procepa u magnonskom spektru. Njegova vrednost je $\omega(0) = 5.22\text{cm}^{-1}$.



Sl. 1.3: Eksperimentalni podaci [10] o magnonskoj disperziji za a) Rb_2MnCl_4 i b) za $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$ (\equiv MAMC). Karakteristični gep u centru Brillouneve zone se može objasniti postojanjem spinske anizotropije. Spektar je sniman na temperaturama $T = 8 \text{ K}$ za Rb_2MnCl_4 i $T = 8.5 \text{ K}$ za MAMC.

U drugoj seriji eksperimenata [11], registrovano je postojanje anizotropije Izingovog tipa, koja je protumačena kao uzrok postojanja spontane magnetizacije na konačnim temperaturama. Numerička vrednost koeficijenta anizotropije kod manganovih halogenida ($\eta - 1 \sim 1/200$) je eksperimentalno potvrđena [13]. Eksperimentalni podaci [10] za magnonsku disperziju kod jedinjenja Rb_2MnCl_4 su prikazani na Sl. 1.3.. Uočava se karakteristični gep u centru Brillouneve zone. Kasnije ćemo pokazati da se gep može objasniti snižavanjem simetrije Hajzenbergovog hamiltonijana.

Struktura jedinjenja MAMC je donekle složenija. Zamena jona Rb^+ organskim lancima $(\text{CH}_3\text{NH}_3)^+$ povećava rastojanje između susednih $x - y$ ravni u kojima se nalaze manganovi joni. Parametri kristalografske ćelije su $\tilde{a} = \tilde{b} = 7.235 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, $\tilde{c} = 19.399 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ [14–16]. Na taj način se dodatno ističe 2D karakter magnetizma u MAMC. Iz eksperimenata je poznato da MAMC kristališe u strukturi K_2NiF_4 tek na visokim temperaturama ($T > 394 \text{ K}$) [10]. Usled promena u orijentaciji organskih molekula, MAMC prolazi kroz nekoliko strukturnih prelaza dok se hladi ka Nelovoj temperaturi, koja iznosi $T_N^{\text{exp}} = 45.3 \text{ K}$ [10]. Ipak, ispostavlja se da je magnetna struktura MAMC gotovo identična sa Rb_2MnCl_4 . Slično kao i kod Rb_2MnCl_4 , merenja pokazuju odsustvo z -komponente impulsa u disperziji, dok je gep u centru Brillouneve zone $\omega(0) = 3.48 \text{ cm}^{-1}$ [10]. Magnonski spektar za MAMC, dobijen rasejanjem neutrona [10], prikazan je takođe na Sl. 1.3.. Primetna je velika sličnost sa spektrom Rb_2MnCl_4 .

Treba pomenuti da postoji srodna klasa jedinjenja tipa perovskita AMX_3 (KNiF_3 , KMnCl_3 , itd). Osnovnu strukturnu jedinicu ovih kristala takođe sačinjavaju MX_6 oktaedri raspoređeni u kubne rešetke. Ipak, magnetne osobine AMX_3 i A_2MX_4 jedinjenja se bitno razlikuju. Jedinjenja tipa perovskita se odlikuju magnonskom disperzijom koja zavisi od sve tri komponente impulsa, kao i antiferomagnetnim uređenjem u 3 dimenzije. Jednom rečju, za njihov opis je potrebno koristiti 3DHAFM. Razlog tome je odsustvo nemagnetnih AX slojeva koji, kod A_2MX_4 jedinjenja, razdvajaju aniferomagnetne ravni M^{2+} jona [17].

1.3 Modelni hamiltonijan

Hamiltonijan treba formulisati tako da se u prvi plan istakne dvodimenzioni karakter spin-spin interakcija [3, 9]. Pri tome, radi opštije analize, za trenutak ćemo razmotriti eventualni uticaj interplanarne superizemske interakcije. Kasniji proračuni zasnovani na metodu jednačina kretanja, potvrdiće da se Rb_2MnCl_4 i MAMC uspešno opisuju dvodimenzionim Ha-jzenbergovim antiferomagnetom sa spinskom anizotropijom. Uticaj prostorne anizotropije je diskutovan u dodatku B.

Osnovu hamiltonijana čini zbir međusobno neinteragujućih antiferomagnetnih ravni sa spinskom anizotropijom (1.20):

$$\begin{aligned}
H_{2D} &= J \sum_{(\boldsymbol{\rho}, m)} \sum_{\delta_{\parallel}} \frac{1}{2} \left[S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^+(a) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\parallel}}^+(b) + S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^-(a) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\parallel}}^-(b) \right] \\
&- J\eta \sum_{(\boldsymbol{\rho}, m)} \sum_{\delta_{\parallel}} S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^z(a) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\parallel}}^z(b).
\end{aligned} \tag{1.24}$$

U gornjem izrazu je korišćena notacija po kojoj su koordinate spina u 3D kristalnoj rešetki određen je pomoću vektora $\boldsymbol{\rho}$ u $x - y$ ravni i položaja pripadajuće ravni, definisanog sa mL :

$$\mathbf{m} = m_x a \mathbf{e}_x + m_y a \mathbf{e}_y + mL \mathbf{e}_z \equiv (\boldsymbol{\rho}, m), \tag{1.25}$$

a m_x, m_y i m su celi brojevi. Vektor $(\boldsymbol{\rho}, m)$ prebrojava čvorove jedne podrešetke, a δ_{\parallel} spaja uočeni čvor sa najbližim susedima unutar $x - y$ ravni.

Drugi sabirak opisuju antiferomagnetnu interakciju spinova koji pripadaju susednim $x y$ ravnima:

$$\begin{aligned}
H_2 &= J_{\perp} \sum_{(\boldsymbol{\rho}, m)} \sum_{\delta_{\perp}^{ab}} \frac{1}{2} \left[S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^+(a) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\perp}^{ab}}^+(b) + S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^-(a) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\perp}^{ab}}^-(b) \right] \\
&- J_{\perp} \sum_{(\boldsymbol{\rho}, m)} \sum_{\delta_{\perp}^{ab}} S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^z(a) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\perp}^{ab}}^z(b).
\end{aligned} \tag{1.26}$$

U hamiltonijanu (1.26) vektor δ_{\perp}^{ab} spaja antiferomagnetno povezane spinove iz susednih ravni. Pretpostavljeno je da ovaj tip interakcije ne poseduje spinsku anizotropiju.

Feromagnetna interakcija između spinova iz susednih ravni je predstavljena trećim sabirkom:

$$\begin{aligned}
H_3 &= -\frac{J_{\perp}}{2} \sum_{\alpha} \sum_{(\boldsymbol{\rho}, m)} \sum_{\delta_{\perp}^{\alpha\alpha}} \frac{1}{2} \left[S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^+(\alpha) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\perp}^{\alpha\alpha}}^-(\alpha) + S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^-(\alpha) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\perp}^{\alpha\alpha}}^+(\alpha) \right] \\
&- \frac{J_{\perp}}{2} \sum_{\alpha} \sum_{(\boldsymbol{\rho}, m)} \sum_{\delta_{\perp}^{\alpha\alpha}} S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^z(\alpha) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\perp}^{\alpha\alpha}}^z(\alpha), \quad \alpha = a, b,
\end{aligned} \tag{1.27}$$

pri čemu $\delta_{\perp}^{\alpha\alpha}$ spaja najbliže susede iz uzastopnih ravni koji su povezani feromagnetno. Eventualno postojanje spinske anizotropije u ovom sabirku nije uzeto u obzir. Koristeći činjenicu da je $\delta_{\perp}^{\alpha\alpha} \neq 0$, hamiltonijan \hat{H}_3 se može uprostiti:

$$\begin{aligned}
H_3 &= -\frac{J_{\perp}}{2} \sum_{\alpha} \sum_{(\boldsymbol{\rho}, m)} \sum_{\delta_{\perp}^{\alpha\alpha}} \left[S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^+(\alpha) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\perp}^{\alpha\alpha}}^-(\alpha) + S_{(\boldsymbol{\rho}, m)}^z(\alpha) S_{(\boldsymbol{\rho}, m) + \delta_{\perp}^{\alpha\alpha}}^z(\alpha) \right] \\
\alpha &= a, b,
\end{aligned} \tag{1.28}$$

Konačno, interakciju antiferomagneta i spoljašnjeg magnetnog polja opisuje uobičajeni Ze-
manov član:

$$H_4 = -g_L \mu_B \mathcal{H} \sum_{(\rho, m)} [S_{(\rho, m)}^z(a) - S_{(\rho, m)}^z(b)], \quad (1.29)$$

gde je $g_L \simeq 2$ Landeov g -faktor elektrona, μ_B Borov magneton, a \mathcal{H} spoljašnje magnetno polje usmereno duž z ose.

Modelni hamiltonijan, koji je korišćen pri teorijskoj analizi Rb_2MnCl_4 i MAMC je

$$H = H_{2D} + H_2 + H_3 + H_4. \quad (1.30)$$

i sadrži spinsku i prostornu anizotropiju. Hamiltonijan (1.30) opisuje trodimenzionu magnetnu strukturu (članovi (1.26) i (1.27)).

Dobar teorijski model za Rb_2MnCl_4 i MAMC pre svega mora da objasni tri eksperimentalne činjenice. To su postojanje dugodometnog (antiferomagnetnog) uređenja u $x - y$ ravnima, odsustvo k_z komponente u magnonskoj disperziji i postojanje gepa u centru Brillouenove zone [3]. Prisustvo prostorne anizotropije uz $\eta = 1$ dopušta postojanje dugodometnog uređenja i Goldstonovih bozona², jer takav hamiltonijan, kada *nije* zapisan u lokalnom koordinatnom sistemu,

$$\begin{aligned} H = & J \sum_{n \in a} \sum_{\delta_{\parallel}} \mathbf{S}_n(a) \cdot \mathbf{S}_{n+\delta_{\parallel}}(b) + J_{\perp} \sum_{n \in a} \sum_{\delta_{\perp}^{ab}} \mathbf{S}_n(a) \cdot \mathbf{S}_{n+\delta_{\perp}^{ab}}(b) \\ & - \frac{J_{\perp}}{2} \sum_{\alpha} \sum_{n \in \alpha} \sum_{\delta_{\perp}^{\alpha\alpha}} \mathbf{S}_n(\alpha) \cdot \mathbf{S}_{n+\delta_{\perp}^{\alpha\alpha}}(\alpha), \quad \mathbf{n} \equiv (\rho, m), \end{aligned} \quad (1.31)$$

poprima manifestno $O(3)$ -invarijantan oblik. Međutim, bezmaseni bozoni se ne pojavljuju u eksperimentalno dobijenom spektru. Sa druge strane, postojanje spinske anizotropije otvara gep u magnonskom spektru i omogućava postojanje dugodometnog uređenja u dvodimenzionoj strukturi [3, 9]. Dakle, anizotropni 2D HAFM bi u principu mogao da objasni sve tri gore navedene eksperimentalne karakteristike posmatranih jedinjenja i njemu će biti posvećena veća pažnja. Naglašavamo da principijelni razlog za odbacivanje H_3 i H_4 nije mali intenzitet interplanarne interakcije izmene ($\lambda_{\perp} < 10^{-3}$), već oblik magnonske disperzije. Više detalja o (zaista slabom) uticaju prostorne anizotropije se može naći u Glavi 4.

²Reč je o čistoj 3D strukturi.

Glava 2

Metod jednačina kretanja

Poznato je da metod spinskih Grinovih funkcija u kombinaciji sa dekuplovanjem Tjablikova (RPA) daje veoma dobar opis magnetnih sistema. Između ostalog RPA metod daje rezultate u saglasnosti sa teoremom Mermin-Vagnera, dok se teorijski određena kritična temperatura veoma dobro slaže kako sa eksperimentalnim merenjima tako i sa Monte-Karlo simulacijama. Takođe, jednačine za korelacione funkcije se često mogu rešavati standardnim numeričkim postupcima. Ipak, određeni nedostaci su prisutni u metodu Tjablikova. Grubo, mogu se klasifikovati u dve kategorije, iako nisu u potpunosti nezavisni jedni od drugih. U prvu grupu spada manjkavost jasnog uvida u fizički smisao aproksimacije Tjablikova zbog znatnog korišćenja matematičkog formalizma dvovremenskih Grinovih funkcija. Drugu grupu sačinjavaju dobro poznate posledice Tjablikovljevog dekuplovanja: kritični eksponent β uvek ima vrednost iz fenomenološke Landauove teorije ($\beta = 1/2$), dok se u niskotemperaturnom razvoju parametra uređenosti javljaju doprinosi sa pogrešnim stepenim temperature. Greška je čak izrazitija kod feromagnetna. Na primer, kod 3D HFM se javlja član $\propto T^3$ za koji se na osnovu teorijskih radova Dajsona zna da mora biti odsutan. Prvi tip nedostataka se relativno jednostavno zaobilazi u pristupu koji se zasniva direktno na jednačinama za spinske operatore i njihovom linearizacijom, kao što je prikazano u ovoj Glavi. Radi jasnoće, potpunosti izlaganja i ukazivanja na složenost HAFM, najpre je diskutovan feromagnet. Druga klasa nedostataka je svakako ozbiljnija jer predstavlja principijelna ograničenja RPA metoda. Njima je posvećen drugi deo disertacije. Neki tehnički detalji i konvencije se mogu naći u prilogu A.

2.1 Hajzenbergov feromagnet

Generalno, HFM se smatra jednostavnijim sistemom u poređenju sa HAFM. Čak i u kvantnoj verziji, feromagnet poseduje trivijalno osnovno stanje i egzaktne jednočestične ekscitacije. Kako bi od početka naglasili analogiju sa efektivnom teorijom za HFM, koja je korišćena u drugom delu disertacije, transformisaćemo Hajzenbergov feromagnetni hamiltonijan tako da u njemu figuriše diskretni laplasijan.

2.1.1 Jednačine kretanja

Koristeći definiciju diskretnog laplasijana iz (A.23), hamiltonijan izotropnog Hajzenbergovog feromagneta (na proizvoljnoj D - dimenzionoj rešetki)

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}} \mathbf{S}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{x}+\boldsymbol{\lambda}}, \quad (2.1)$$

možemo prepisati kao

$$H = -\frac{1}{2} \frac{JZ_1|\boldsymbol{\lambda}|^2}{2D} \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{S}_{\mathbf{x}} \cdot \nabla^2 \mathbf{S}_{\mathbf{x}} - \frac{JS(S+1)Z_1N}{2}. \quad (2.2)$$

U gornjem hamiltonijanu Z_1 je broj najbližih suseda, a $|\boldsymbol{\lambda}|$ je rastojanje između najbližih suseda na rešetki. Pošto ćemo uglavnom raditi na konačnim temperaturama, pogodno je od samog početka preći na formalizam imaginarnog vremena [18,19]. Tako ćemo u nastavku po-drazumevati imaginarno vreme u jednačinama ($t = -i\tau$), ukoliko ne bude drugačije naglašeno.

Koristeći $-\partial_{\tau} S_j(\mathbf{n}, \tau) = [S_j(\mathbf{n}, \tau), H]$, $j = 1, 2, 3$ [20], nalazimo jednačinu kretanja za lokalizovane spinove Hajzenbergovog feromagneta (vremenski argument ne pišemo radi preglednosti)

$$-\partial_{\tau} \mathbf{S}(\mathbf{x}) = -\frac{i}{2} \frac{JZ_1|\boldsymbol{\lambda}|^2}{2D} \left[\left(\nabla^2 \mathbf{S}(\mathbf{x}) \right) \times \mathbf{S}(\mathbf{x}) - \mathbf{S}(\mathbf{x}) \times \nabla^2 \mathbf{S}(\mathbf{x}) \right]. \quad (2.3)$$

Ovo je jednačina Landau-Lifšica za operator $\mathbf{S}(\mathbf{x}, \tau)$ u imaginarnom vremenu, regularizovana na prostornoj rešetki. U opštem slučaju, jednačina (2.3) se ne može rešiti. Ipak, lako se nalazi rešenje linearizovane jednačine. Jedna od stvari koja dosatno komplikuje analizu Hajzenbergovog feromagneta je dvostruka priroda jednačine (2.3). Ona istovremeno predstavlja zakon održanja ukupnog spina¹ i jednačinu kretanja [6].

2.1.2 Tjablikovska linearizacija

Pod pretpostavkom dugodometnog uređenja, operator $S^z(\mathbf{x}, \tau)$ možemo zameniti srednjom vrednošću $S^z(\mathbf{x}, \tau) \approx \langle S^z \rangle$. Zbog Mermin-Vagnerove teoreme, očekujemo da aproksimacije ovog tipa budu korektne samo za $D \geq 3$ ako je $T > 0$. Međutim, ispravni rezultati se dobijaju i za $D < 3$, jer se ispostavlja da dobijena Kirijeva temperatura strogo ide u nulu za niskodimenzione ($D = 1, 2$) izotropne sisteme. Treba voditi računa da se aproksimiranjem operatora S^z sa srednjom vrednošću koja ne zavisi od čvora rešetke u krajnjem rezultatu gube sve informacije o eventualnim kratkodometnim fluktuacijama parametra uređenosti. Često se baš zanemarivanje kratkodometnih fluktuacija navodi [21] kao razlog za odstupanje Tjablikovljevog rešenja od strogih rezultata Dajsona [22,23] na niskim temperaturama. U drugom delu disertacije će biti pokazano da to nije slučaj, odnosno da je osnovni razlog za nepodesnost RPA metode na niskim temperaturama zanemarivanje određenog tipa magnon-magnon interakcija koje potiču od Ves-Zumino-Vitenovog (WZW) člana u efektivnom lagranžijanu za feromagnet. Ubrzo nakon originalnih radova Tjablikova, pojavile su se publikacije u kojima autori reprodukuju njegove rezultate za izotropni feromagnet bez korišćenja metoda GF [24,25]. Osnovnu aproksimaciju u pomenutim radovima predstavlja zamena operatora $S^z(\mathbf{k} - \mathbf{q})$ sa $\Delta(\mathbf{k} - \mathbf{q})S^z(\mathbf{k} = 0)$,

¹Ovo se može jednostavno pokazati sumiranjem po svim čvorovima rešetke, uz korišćenje definicije diskretnog laplasijana (A.23).

gde je $S^z(\mathbf{k})$ Furije – transform operatora $S_{\mathbf{x}}^z$. Aproksimiranje operatora srednjom vrednošću u direktnom prostoru, po ugledu na originalni postupak Tjablikova, ima tu prednost da direktno ukazuje na pretpostavku o dugodometnom feromagnetnom uređenju.

Linearizovana jednačina (2.3) za operator $S^+(\mathbf{x}) = S^x(\mathbf{x}) + iS^y(\mathbf{x})$ poprima oblik Šredingerove jednačine sa imaginarnim vremenom na prostornoj rešetki

$$-\partial_\tau S^+(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2m_{\text{RPA}}}\nabla^2 S^+(\mathbf{x}), \quad (2.4)$$

gde smo definisali

$$m_{\text{RPA}} = \frac{2D}{2J\langle S^z \rangle Z_1 |\boldsymbol{\lambda}|^2}. \quad (2.5)$$

Slična jednačina se dobija i za $S^-(\mathbf{x}) = S^x(\mathbf{x}) - iS^y(\mathbf{x})$. Istovremeno, komutacione relacije (1.3) za S^\pm operatore postaju

$$\left[\frac{S^+(\mathbf{x})}{\sqrt{2\langle S^z \rangle}}, \frac{S^-(\mathbf{y})}{\sqrt{2\langle S^z \rangle}} \right] = \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (2.6)$$

Poredeći (2.6) sa standardnim komutacionim relacijama za Šredingerovo polje, $[\psi(\mathbf{x}), \psi^\dagger(\mathbf{y})] = v_0^{-1}\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, pri čemu je v_0 zapremina primitivne ćelije (videti prilog A), vidimo da je u ovoj aproksimaciji HFM opisan bozonskim Šredingerovim poljem na rešetki

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{S^+(\mathbf{x}, \tau)}{\sqrt{2\langle S^z \rangle v_0}}, \quad \psi^\dagger(\mathbf{x}, \tau) = \frac{S^-(\mathbf{x}, \tau)}{\sqrt{2\langle S^z \rangle v_0}}. \quad (2.7)$$

Da bismo kompletirali sliku Šredingerovog polja, eksplicitno ćemo naći operatore $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ i $\psi^\dagger(\mathbf{x}, \tau)$ i konstruisati dijagonalni hamiltonijan.

Jednačina (2.4) poseduje rešenja u vidu ravnih talasa [18, 26]

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \int_{\mathbf{k} \text{ IBZ}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega(\mathbf{k})\tau}, \quad (2.8)$$

pri čemu je (videti (A.24) i (A.25))

$$\omega(\mathbf{k}) = \omega_{\text{RPA}}(\mathbf{k}) = \frac{\hat{\mathbf{k}}^2}{2m_{\text{RPA}}} = JZ_1\langle S^z \rangle [1 - \gamma_D(\mathbf{k})], \quad (2.9)$$

dok integracija $\int_{\mathbf{k} \text{ IBZ}}$ ide po I Brilluonovoj zoni (videti prilog A). Disperzija (2.9) se poklapa sa poznatim rezultatom Tjablikova [27] (videti takođe novija izlaganja metoda Grinovih funkcija [2, 28]). Konačno, koristeći

$$\sum_{\mathbf{x}, \alpha} \psi \nabla^2 \psi^\dagger = \sum_{\mathbf{x}, \alpha} \psi^\dagger \nabla^2 \psi - \frac{2DN}{|\boldsymbol{\lambda}|^2 v_0}, \quad (2.10)$$

dobijamo dijagonalni hamiltonijan

$$H_{\text{RPA}} = \frac{v_0}{2m_{\text{RPA}}} \sum_{\mathbf{x}, \alpha} \nabla_\alpha \psi^\dagger \nabla_\alpha \psi - E_{\text{RPA}}^0 = V \int_{\mathbf{k} \text{ IBZ}} \omega_{\text{RPA}}(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}} - E_{\text{RPA}}^0, \quad (2.11)$$

gde je

$$Vn_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}}, \quad E_{\text{RPA}}^0 = \frac{Z_1 J N [S^2 + S - \langle S^z \rangle]}{2}. \quad (2.12)$$

$V = v_0 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p})$ je zapremina kristala, a v_0 je zapremina primitivne ćelije. U skladu sa standardnom teorijom Šredingerovog polja [18,19], vidimo da operator $\psi^{\dagger}(\mathbf{x})$ kreira magnon mase m_{RPA} na čvoru \mathbf{x} . Naravno, feromagnetni magnoni su bezmaseni sa stanovišta Goldstonove teoreme, ali je zgodno parametar m_{RPA} poistovetiti sa masom magnona zbog nerelativističkog karaktera disperzije (2.9). Slično, $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ kreira jednočestično RPA magnonsko stanje $|\mathbf{k}\rangle = a_{\mathbf{k}}^{\dagger}|0\rangle$, gde je $|0\rangle$ vakuum. Operatori $a_{\mathbf{k}}$ i $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ su standardni bozonski operatori, $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}] = (2\pi)^D \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q})$, a jednočestična stanja su normirana prema [29] $\langle \mathbf{p} | \mathbf{q} \rangle = (2\pi)^D \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q})$. Višemagnonska stanja se nalaze direktnom primenom standardnih procedura za višestetična stanja bozonskih polja [18,19,30].

Lako je videti da aproksimacija $S^z(\mathbf{x}) \approx S$ dovodi do standardne linearne teorije spinskih talasa (LSW) (u [1,2] je dato izlaganje LSW zasnovano na bozonskim reprezentacijama spinskih operatora), odnosno do modela neinteragujućih magnona. Odgovarajući dijagonalni hamiltonijan, operatori polja i masa magnona su

$$H_0 = \frac{v_0}{2m} \sum_{\mathbf{x}, \alpha} \nabla_{\alpha} \psi^{\dagger} \nabla_{\alpha} \psi - E_0 = V \int_{\mathbf{k} \text{ IBZ}} \omega(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}} - E_0, \quad (2.13)$$

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{S^+(\mathbf{x}, \tau)}{\sqrt{2Sv_0}} = \int_{\mathbf{k} \text{ IBZ}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega(\mathbf{k})\tau}, \quad (2.14)$$

$$m = \frac{2D}{2JSZ_1|\boldsymbol{\lambda}|^2}, \quad E_0 = \frac{JS^2 Z_1 N}{2}, \quad \omega(\mathbf{k}) = \frac{\widehat{\mathbf{k}}^2}{2m}. \quad (2.15)$$

S obzirom da je RPA rešenje za feromagnet u ovoj aproksimaciji dobijeno u formi ravnih talasa (slično kao i za LSW aproksimaciju), te da je hamiltonijan bilinearan po magnonskim operatorima, može se steći pogrešan utisak da magnon–magnon interakcije nisu uračunate. U sledećem odeljku je pokazano na koji način je aproksimacijom $S^z(\mathbf{x}) \approx \langle S^z \rangle$ približno uračunata kinematička interakcija. Više detalja o dinamičkoj interakciji magnona koja se prilikom pomenute linearizacije zadržava, a koja renormalizuje njihovu masu, biće u drugom delu disertacije.

2.1.3 Termodinamičke karakteristike feromagneta

Pošto je dobijen dijagonalni hamiltonijan, u principu je moguće odrediti termodinamičke karakteristike feromagneta u ovoj aproksimaciji. Od najvećeg interesa je korelaciona funkcija $\langle S^- S^+ \rangle$, koja ulazi u definicije različitih termodinamičkih veličina. Koristeći rešenja (2.8), direktno dobijamo

$$\langle S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}}^+ \rangle = 2\langle S^z \rangle v_0 \langle \psi^{\dagger}(\mathbf{n}) \psi(\mathbf{n}) \rangle = 2\langle S^z \rangle v_0 \int_{\mathbf{k} \text{ IBZ}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = 2\langle S^z \rangle \left(\frac{a}{2}\right)^D \int_{\mathbf{k}(a/2)} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.16)$$

pri čemu je integral $\int_{\mathbf{k}(a/2)}$ definisan u (A.37). U (2.16) je sa $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ označena Boze–raspodela za magnone sa energijama (2.9) i iskorišćen je standardni rezultat $\langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} \rangle = \langle n_{\mathbf{k}} \rangle (2\pi)^D \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q})$. U teoriji Šredingerovog polja [18,19], korelaciona funkcija $\langle \psi^{\dagger}(\mathbf{n}) \psi(\mathbf{n}) \rangle$ daje srednji broj

kvanata polja (magnona) obračunat po jedinici zapremine, tako da je $v_0 \langle \psi^\dagger(\mathbf{n}) \psi(\mathbf{n}) \rangle$ srednji broj magnona po čvoru rešetke. Pošto se termodinamičke veličine izražavaju pomoću $\langle S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}}^+ \rangle$, vidimo da srednji broj magnona po čvoru u RPA jednačine ulazi pomnožen sa $\langle S^z \rangle$. Na taj način se efektivno uračunava kinematička interakcija magnona, što za posledicu ima jednačinu za Kirijevu temperaturu čija se rešenja veoma dobro slažu sa eksperimentalnim vrednostima i Monte–Karlo simulacijama [28]. Ono što je takođe značajno, je da se za D –dimenzionu zapreminski centriranu rešetku nalaze egzaktna rešenja, u vidu uopštene hipergeometrijske funkcije [31].

Spontana magnetizacija

Za $S = 1/2$ HFM, koristeći $S_{\mathbf{n}}^z = 1/2 - S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}}^+$, direktno dobijamo Tjablikovljev rezultat za spontanu magnetizaciju [27]

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \left[1 + 2 \left(\frac{a}{2} \right)^D \int_{\mathbf{k}(a/2)} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle \right]^{-1}. \quad (2.17)$$

Ako je $S > 1/2$, gore navedena jednačina koja povezuje operatore $S_{\mathbf{n}}^z$ i $S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}}^+$ ne važi. Ipak, tada se može koristiti Kalenova formula [32] koja povezuje srednje vrednosti ovih operadora

$$\langle S^z \rangle = \frac{[S - P_S(T)][1 + P_S(T)]^{2S+1} + [S + 1 + P_S(T)][P_S(T)]^{2S+1}}{[1 + P_S(T)]^{2S+1} - [P_S(T)]^{2S+1}}. \quad (2.18)$$

Prema oznakama uvedenim ranije u tekstu je

$$P_S(T) = v_0 \langle \psi^\dagger(\mathbf{n}) \psi(\mathbf{n}) \rangle. \quad (2.19)$$

Kombinovanjem

$$\begin{aligned} P_S(T \approx T_C) &= \left(\frac{a}{2} \right)^D \int_{\mathbf{k}(a/2)} \frac{T_C}{\omega(\mathbf{k})} = \frac{1}{\langle S^z \rangle \Big|_{T \approx T_C}} \frac{T_C}{J Z_1} L_D, \\ L_D &= \left(\frac{a}{2} \right)^D \int_{\mathbf{k}(a/2)} \frac{1}{1 - \gamma_D(\mathbf{k})}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

sa RPA izrazom za Kirijevu temperaturu [2, 27]

$$T_C = \frac{S(S+1)}{3} \frac{J Z_1}{L_D}, \quad (2.21)$$

vidimo da se uslov za prelaz iz feromagnetne u paramagnetnu fazu može zapisati i kao

$$\langle S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}}^+ \rangle \Big|_{T_C} = \frac{2}{3} S(S+1). \quad (2.22)$$

Na nivou RPA aproksimacije (2.6), jednačina (2.22) je ekvivalentna sa $\langle [S_{\mathbf{n}}^x]^2 + [S_{\mathbf{n}}^y]^2 - 2\langle S^z \rangle \rangle \Big|_{T_C} = \langle [S_{\mathbf{n}}^x]^2 + [S_{\mathbf{n}}^y]^2 \rangle \Big|_{T_C} = (2/3) \mathbf{S}^2$ ili

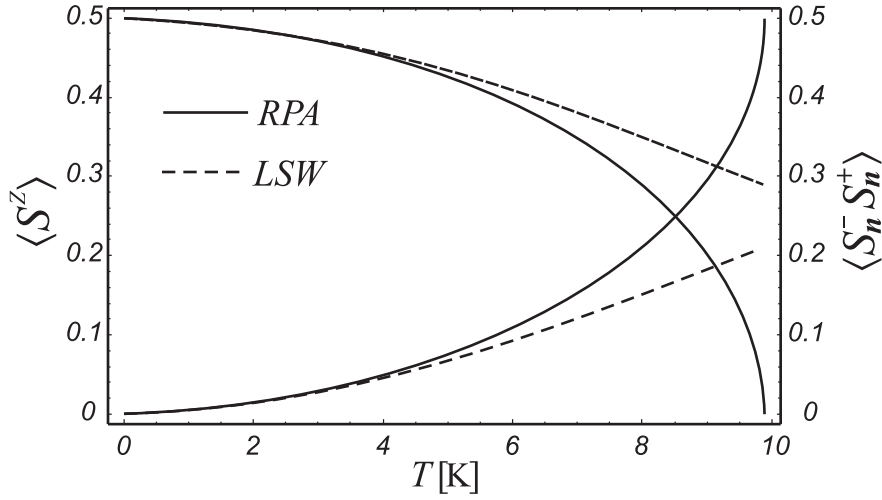
$$\langle [S_{\mathbf{n}}^x]^2 \rangle \Big|_{T_C} = \langle [S_{\mathbf{n}}^y]^2 \rangle \Big|_{T_C} = \langle [S_{\mathbf{n}}^z]^2 \rangle \Big|_{T_C} = \frac{\mathbf{S}^2}{3}, \quad (2.23)$$

što je samo definicija prelaza između fero i para faze klasičnog $O(3)$ vektorskog modela. Energija potrebna za pobuđivanje RPA magnona se snižava sa temperaturom, za razliku od magnona dobijenih u LSW prilazu. Zbog toga se uslov izotropne (simetrične) orijentacije spinova (2.22), tj. (2.23) postiže na znatno nižim temperaturama, u saglasnosti sa eksperimentima i Monte–Karlo simulacijama [28]. Zabeležićemo još da se u slučaju postojanja spinske anizotropije, opisane dodatnim članom $(Jg/2) \sum_{\mathbf{x}, \lambda} S_{\mathbf{x}}^z S_{\mathbf{x}+\lambda}^z$ u hamiltonijanu, izraz za Kirijevu temperaturu svodi na [3, 31]

$$T_C(\eta) = \frac{S(S+1)}{3} \frac{J Z_1}{L_D(\eta)}, \quad (2.24)$$

$$L_D(\eta) = \left(\frac{a}{2}\right)^D \int_{\mathbf{k}(a/2)} \frac{1}{\eta - \gamma_D(\mathbf{k})}, \quad \eta = 1 + g > 1.$$

Integrali $L_D(\eta)$ poseduju egzaktna rešenja u slučaju D dimenzione zapreminski centrirane rešetke [31].



Sl. 2.1: Spontana magnetizacija i korelaciona funkcija $\langle S_n^- S_n^+ \rangle$ za $D = 3$, $S = 1/2$ and $J = 10$ HFM. Prikazani su RPA i LSW rezultati.

Kao ilustracija poređenja RPA i LSW rezultata, na Sl. 2.1 je prikazana spontana magnetizacija za trodimenzioni $S = 1/2$ HFM sa integralom izmene $J = 10$ K.

Sa druge strane, teorija zasnovana na magnonima sa energijama (2.9) pokazuje slabosti na niskim temperaturama. U niskotemperaturnom razvoju feromagnetnog parametra uređenosti za 3D HFM se pojavljuje "problematicni" član $\propto T^3$, pa se RPA razilazi sa strogim prilazom Dajsona [22, 23]. Odstupanje od Dajsonovih rezultata se često pripisuje zanemarivanju kratkodometnih fluktuacija [21] zbog aproksimativnog karaktera dekuplovanja [27]. Ovakvo rezonovanje bi vodilo do zaključka da je RPA podjednako nepodesan za niskotemperaturni opis antiferomagneta, s obzirom da se u GF formalizmu jednačine dekupluju na isti način. Međutim, u drugom delu disertacije ćemo pokazati da je ovako grubo odstupanje u principu karakteristično samo za feromagnet.

Unutrašnja energija

Što se tiče unutrašnje energije feromagneta, za $S = 1/2$ HFM, moguće je dobiti bolju procenu od jednostavog usrednjavanja hamiltonijana (2.11). Bez pozivanja na spektralnu teo-

remu [28], dobićemo rezultat Tjablikova korišćenjem magnonskih polja (2.8) i hamiltonijana (2.1). Pomoću jednačine kretanja za $S^+(\mathbf{x}, \tau)$ i dva operatorska identiteta za $S = 1/2$ spinove, ($S^z = 1/2 - S^-S^+$ i $S^-S^z = S^-/2$), nalazimo

$$-\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{n}, \boldsymbol{\lambda}} S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\lambda}}^z = \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^- (-\partial_{\tau} S_{\mathbf{n}}^+) + \frac{J}{4} \sum_{\mathbf{n}, \boldsymbol{\lambda}} S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\lambda}}^+ + \frac{Jz}{4} \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}}^+ - \frac{JzN}{4}. \quad (2.25)$$

Unutrašnja energija $S = 1/2$ HFM se sada može zapisati kao

$$U = -\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{n}, \boldsymbol{\lambda}} \langle S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\lambda}}^+ + S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\lambda}}^z \rangle = V \langle S^z \rangle \int_{\mathbf{p} \in \text{IBZ}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle [\omega_{\text{RPA}}(\mathbf{p}) + \omega(\mathbf{p})] - \frac{JzN}{4}, \quad (2.26)$$

što je poznati rezultat Tjablikova [2, 27].

Slični proračuni se mogu sprovesti i za ostale termodinamičke veličine feromagneta, tako da je ovde izloženi prilaz u principu ekvivalentan sa standardnim GF metodom Tjablikova. Prednost pristupa koji se zasniva na operatorima polja u odnosu na standardni GF tretman feromagneta je jasnija slika magnona kao bozonskih ekscitacija Šredingerovog tipa. Bez obzira na to, GF metod je vrlo operativan i ostaje nezamenljiv u radu sa složenijim strukturama.

2.1.4 Kalenovska linearizacija

Ranije je rečeno da je aproksimacija $S^z(\mathbf{x}) \approx \langle S^z \rangle$ previše gruba da bi sačuvala informacije o kratkodometnim fluktuacijama feromagnetnog parametra uređenosti. Ukratko ćemo prodiskutovati Kalenov [32] pokušaj da se fluktuacije uračunaju GF metodom.

Pre svega, očigledno je da ne postoji jedinstven način za linearizaciju jednačina za spinske operatore Hajzenbergovog feromagneta. Međutim, jasno je da je od presudnog značaja aproksimativni tretman komutatora $[S_{\mathbf{x}}^+, S_{\mathbf{y}}^-] = 2S_{\mathbf{x}}^z \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, jer svaka zamena operatora $S_{\mathbf{x}}^z$ sa C -brojem uvodi magnone kao bozonske ekscitacije pomoću kreacionih i anihilacionih operatora u direktnom prostoru (videti diskusije u [22, 25]).

Kalenova modifikacija Tjablikovljevoj postupka se sastoji u aproksimativnom uključivanju kratkodometnih fluktuacija. Pri tome, Kalen kreće od RPA rezultata, bez direktne veze sa LSW. Da bismo videli na koji način se fluktuacije mogu uračunati u formalizmu Šredingerovog polja na rešetki, poći ćemo od jednačine kretanja za $S^+(\mathbf{x}, \tau)$:

$$-\partial_{\tau} S_{\mathbf{x}}^+ = -\frac{J}{2} \frac{Z_1 |\boldsymbol{\lambda}|^2}{2D} [S_{\mathbf{x}}^z \nabla^2 S_{\mathbf{x}}^+ + (\nabla^2 S_{\mathbf{x}}^+) S_{\mathbf{x}}^z] + \frac{J}{2} \frac{Z_1 |\boldsymbol{\lambda}|^2}{2D} [S_{\mathbf{x}}^+ \nabla^2 S_{\mathbf{x}}^z + (\nabla^2 S_{\mathbf{x}}^z) S_{\mathbf{x}}^+]. \quad (2.27)$$

Ako bi sada zamenili operator $S^z(\mathbf{x})$ sa veličinom koja ne zavisi od čvora rešetke ($\nabla^2 S_{\mathbf{x}}^z = 0$), dobili bismo RPA rezultat. Da bi poboljšali aproksimaciju, stavićemo $[S^+(\mathbf{x}), S^-(\mathbf{y})] \approx 2\langle S^z \rangle \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ i $S^z = \sqrt{S(S+1) - [S^x]^2 - [S^y]^2} \approx S - S^-S^+/(2S) + [S - \langle S^z \rangle]/(2S)$. Tako nalazimo

$$\nabla^2 S^z(\mathbf{x}) \approx -\frac{1}{2S} \nabla^2 [S^-(\mathbf{x}) S^+(\mathbf{x})]. \quad (2.28)$$

Jednačina (2.27) se tako svodi na

$$-\partial_{\tau} S_{\mathbf{x}}^+ = -J \frac{Z_1 |\boldsymbol{\lambda}|^2}{2D} \langle S_{\mathbf{x}}^z \rangle \nabla^2 S_{\mathbf{x}}^+ - \frac{J}{4S} \frac{Z_1 |\boldsymbol{\lambda}|^2}{2D} [S_{\mathbf{x}}^+ \nabla^2 (S_{\mathbf{x}}^- S_{\mathbf{x}}^+) + \nabla^2 (S_{\mathbf{x}}^- S_{\mathbf{x}}^+) S_{\mathbf{x}}^+]. \quad (2.29)$$

Da bismo dobili jednačinu Šredingerovog tipa, potrebna su dalja uprošćavanja. Imajući u vidu da je najprostija korelaciona funkcija koja uračunava kratkodometne fluktuacije u broju magnona po čvoru $1/(2D) \sum_{\{\lambda\}} \langle S_{\mathbf{x}}^- S_{\mathbf{x}+\lambda}^+ \rangle$ (opisuje preskakanje magnona sa čvora na čvor), pretpostavićemo da je

$$\frac{1}{4S} [S_{\mathbf{x}}^+ \nabla^2 (S_{\mathbf{x}}^- S_{\mathbf{x}}^+) + \nabla^2 (S_{\mathbf{x}}^- S_{\mathbf{x}}^+) S_{\mathbf{x}}^+] \approx \frac{\alpha(T)}{2D} \sum_{\{\lambda\}} \langle S_{\mathbf{x}}^- S_{\mathbf{x}+\lambda}^+ \rangle \nabla^2 S_{\mathbf{x}}^+. \quad (2.30)$$

$\alpha(T)$ je za sada neodređeni parametar. Zamenom (2.30) u (2.29), dobijamo jednačinu istog oblika kao (2.4), ali sa renormalizovanim magnonskim masama

$$m_{\text{CA}}^{-1} = m_{\text{RPA}}^{-1} \left[1 + \frac{\alpha(T)}{2D} \sum_{\{\lambda\}} \langle S_{\mathbf{x}}^- S_{\mathbf{x}+\lambda}^+ \rangle \right]. \quad (2.31)$$

Forma rešenja u obliku Šredingerovog polja je ista kao i nakon RPA linearizacije. Konkretno, magnonske energije su $\omega_{\text{CA}}(\mathbf{k}) = \hat{\mathbf{k}}^2 / (2m_{\text{CA}})$ i Kalenov rezultat

$$m_{\text{CA}}^{-1} = m_{\text{RPA}}^{-1} \left[1 + 2\alpha(T) \left(\frac{a}{2} \right)^D \int_{\mathbf{q}(a/2)} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle_{\text{CA}} \gamma(\mathbf{q}) \right]. \quad (2.32)$$

se dobija ako uzmemo $\alpha(T) = \langle S^z \rangle / (2S^2)$. Ova vrednost koeficijenta α se poklapa sa Kalenovim parametrom dekuplovanja. Takođe, $\langle n_{\mathbf{q}} \rangle_{\text{CA}} = [\exp\{\beta\omega_{\text{CA}}(\mathbf{q})\} - 1]^{-1}$.

Kirijeva temperatura koju predviđa Kalenova aproksimacija je određena jednačinom [3, 32]

$$T_{\text{C}}(\eta) = \frac{S(S+1)}{3} \frac{\tilde{J}_{\text{C}} Z_1}{L_D(\tilde{\eta}_{\text{C}})}, \quad (2.33)$$

gde su $\tilde{J}_{\text{C}} = \tilde{J}(T_{\text{C}})$, $\tilde{\eta}_{\text{C}} = \tilde{\eta}(T_{\text{C}})$. Renormalizovani (temperaturski zavisni) integral izmene i spinska anizotropija $\tilde{J}(T)$ i $\tilde{\eta}(T)$ su definisani kao [3]

$$\tilde{J}(T) = J \left(1 - \frac{\eta f(T)}{2S^2} \right), \quad \tilde{\eta}(T) = \frac{\eta - \frac{f(T)}{2S^2}}{1 - \eta \frac{f(T)}{2S^2}} \quad (2.34)$$

dok je $f(T_{\text{C}})$ rešenje samousaglašene jednačine

$$f(T_{\text{C}}) = -\frac{2S(S+1)\tilde{\eta}_{\text{C}}}{3} \left[1 - \frac{1}{\tilde{\eta}_{\text{C}} L_D(\tilde{\eta}_{\text{C}})} \right]. \quad (2.35)$$

Više reči o sistemu jednačina (2.33)–(2.35), kao i o poređenju RPA i Kalenovih rezultata će biti kasnije. Za sada ćemo primetiti da Kalenova aproksimacija, poput RPA, daje ispravan oblik korelacione funkcije $\langle S_{\mathbf{n}}^+ S_{\mathbf{n}}^- \rangle = (2/3)S(S+1)$ na kritičnoj temperaturi. Neki drugi prilazi, poput aproksimacije srednjeg polja za Švingerove bozone, narušavaju ovaj rezultat zbog prevelikog broja stepeni slobode koji se pojavljuju [1]. Problem sa prevelikim brojem stepeni slobode se ne pojavljuje ako se O(3) HFM opisuje Šredingerovim poljem (kako u RPA, tako i u Kalenovoj linearizaciji), jer su dva realna polja pridružena jednom magnonu, u skladu sa nerelativističkom verzijom Goldstonove teoreme [6, 33]. Takođe, ovo izvođenje Kalenovog

rezultata kao osnovni cilj ima ukazivanje na određeni stepen proizvoljnosti prilikom izbora koeficijenta $\alpha(T)$. Generalno, ovakve linearizacije, ili aproksimativna dekuplovanja u teoriji GF se smatraju za najslabije tačke prilaza jer ne postoje *a priori* razlozi za takva uprošćavanja [2]. U originalnom radu [32], Kalen opravdava predloženu šemu dekuplovanja pomoću određenih operatorskih identiteta koji važe za $S = 1/2$ spinove. Ipak, relativno poboljšanje u odnosu na RPA se postiže samo za $S > 1/2$, kada je čuveni T^3 član Tjablikova odsutan. Takođe, Kalenovo dekuplovanje uvodi dodatne pogrešne stepene temperature $T^{3S+3/2}$, $T^{3S+5/2}$, i znatno precenjuje kritičnu temperaturu [3]. Takođe, ispostavlja se da RPA daje znatno bolje slaganje sa Monte–Karlo simulacijama [28].

2.2 Hajzenbergov antiferomagnet

Prilikom uopštavanja metoda jednačina kretanja iz prethodnog odeljka na Hajzenbergov antiferomagnet, odmah primećujemo bitnu razliku. Kako susedne čvorove u antiferomagnetnoj rešetki zauzimaju dva različita tipa spinskih operatora, hamiltonijan HAFM se ne može direktno zapisati u obliku analognom (2.2), jer sam po sebi operator $\mathbf{S}^{(a)}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}^{(b)}(\mathbf{x})$ nema smisla na prosto antiferomagnetnoj rešetki definisanoj u (1.1). Transformacija koja to omogućava za 1D HAFM je prikazana u drugom delu disertacije. To je povezano sa dobro poznatom činjenicom da je kontinualni opis HAFM mnogo komplikovaniji nego što je slučaj sa HFM [1, 7, 8, 19, 34]. Druga zanimljiva činjenica vezana za antiferomagnet jeste postojanje netrivialne dinamike na $T = 0\text{K}$. Zbog toga je jednačine kretanja za spinske operatore u antiferomagnetu pogodno prvo razmatrati u realnom vremenu.

2.2.1 Jednačine kretanja: RPA na $T = 0\text{K}$

Jednačine kretanja za S^\pm operatore, koji definišu hamiltonijan (1.1), odnosno (1.20) glase

$$\begin{aligned} i\dot{S}_{\mathbf{x}}^{+(a)} &= \left[S_{\mathbf{x}}^{+(a)}, H \right] = J S_{\mathbf{x}}^{z(a)} \sum_{\lambda} S_{\mathbf{x}+\lambda}^{-(b)} + J\eta S_{\mathbf{x}}^{+(a)} \sum_{\lambda} S_{\mathbf{x}+\lambda}^{z(b)}, \\ i\dot{S}_{\mathbf{y}}^{-(b)} &= \left[S_{\mathbf{y}}^{-(b)}, H \right] = -J S_{\mathbf{y}}^{z(b)} \sum_{\lambda} S_{\mathbf{y}+\lambda}^{+(a)} - J\eta S_{\mathbf{y}}^{-(b)} \sum_{\lambda} S_{\mathbf{y}+\lambda}^{z(a)}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Dobijeni sistem jednačina se ne može rešiti analitički u opštem slučaju. Međutim, ako se uvede aproksimacija Tjablikova u stilu linearizacije korišćene kod HFM, gornji sistem postaje

$$\begin{aligned} i\dot{S}_{\mathbf{x}}^{+(a)} &= J \langle S^z \rangle \sum_{\lambda} S_{\mathbf{x}+\lambda}^{-(b)} + J\eta Z_1 \langle S^z \rangle S_{\mathbf{x}}^{+(a)}, \\ i\dot{S}_{\mathbf{y}}^{-(b)} &= -J \langle S^z \rangle \sum_{\lambda} S_{\mathbf{y}+\lambda}^{+(a)} - J\eta Z_1 \langle S^z \rangle S_{\mathbf{y}}^{-(b)}, \end{aligned} \quad (2.37)$$

pri čemu smo uzeli da je u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja, u lokalnom koordinatnom sistemu, $\langle S^z(a) \rangle = \langle S^z(b) \rangle \equiv \langle S^z \rangle$. Istovremeno, RPA komutacione relacije za S^\pm operatore glase

$$\left[\frac{S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t)}{\sqrt{2\langle S^z \rangle}}, \frac{S_{\mathbf{y}}^{-(a)}(t)}{\sqrt{2\langle S^z \rangle}} \right] = \left[\frac{S_{\mathbf{x}}^{+(b)}(t)}{\sqrt{2\langle S^z \rangle}}, \frac{S_{\mathbf{y}}^{-(b)}(t)}{\sqrt{2\langle S^z \rangle}} \right] = \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (2.38)$$

dok su ostali komutatori jednaki nuli. Komutacione relacije (2.38) opisuju sistem kod kojeg se pojavljuju dve vrste bozonskih ekscitacija². Ovu činjenicu moramo uzeti u obzir prilikom pisanja Furije razvoja za $S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t)$ niže u tekstu.

Disperziona relacija i Furijeov razvoj

Dobijeni sistem od dve jednačine (2.37), u kojima figurišu samo operatori $S_{\mathbf{n}}^{+(a)}$ i $S_{\mathbf{n}}^{-(b)}$, može se rešiti prelaskom u impulsni prostor:

$$S_{\mathbf{x}}^{\pm(a)}(t) = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}^{\pm(a)}(t) e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad \alpha = a, b, \quad (2.39)$$

gde je $N_a = N/2$ broj čvorova podrešetke. Pošto je

$$\sum_{\lambda} S_{\mathbf{x}+\lambda}^{\pm(a)} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}^{\pm(a)} e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \sum_{\lambda} e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\lambda} = \frac{Z_1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_D(\mathbf{k}) e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} S_{\mathbf{k}}^{\pm(a)} \quad (2.40)$$

dok je $\gamma_D(\mathbf{k})$ definisano u (A.25), sistem (2.37) se svodi na

$$\begin{aligned} i\dot{S}_{\mathbf{k}}^{+(a)} &= J\langle S^z \rangle Z_1 \gamma_D(\mathbf{k}) S_{\mathbf{k}}^{-(b)} + JZ_1 \eta \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{+(a)}, \\ i\dot{S}_{\mathbf{k}}^{-(b)} &= -J\langle S^z \rangle Z_1 \gamma_D(\mathbf{k}) S_{\mathbf{k}}^{+(a)} - JZ_1 \eta \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{-(b)}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Ili,

$$\dot{S}_{\mathbf{k}}^{+(a)} = -iJ(\mathbf{k})\langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{-(b)} - i\epsilon S_{\mathbf{k}}^{+(a)}, \quad (2.42)$$

$$\dot{S}_{\mathbf{k}}^{-(b)} = iJ(\mathbf{k})\langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{+(a)} + i\epsilon S_{\mathbf{k}}^{-(b)}, \quad (2.43)$$

pri čemu su uvedene standardne oznake [9]

$$J(\mathbf{k}) = JZ_1 \gamma_D(\mathbf{k}), \quad \epsilon = JZ_1 \eta \langle S^z \rangle, \quad \eta = 1 + g. \quad (2.44)$$

Diferenciranjem (2.42) po vremenu nalazimo jednačinu

$$\begin{aligned} \ddot{S}_{\mathbf{k}}^{+(a)} &= -J(\mathbf{k})\langle S^z \rangle i\dot{S}_{\mathbf{k}}^{-(b)} - \epsilon i\dot{S}_{\mathbf{k}}^{+(a)} \\ &= -J(\mathbf{k})\langle S^z \rangle \left[-J(\mathbf{k})\langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{+(a)} - \epsilon S_{\mathbf{k}}^{-(b)} \right] - \epsilon \left[J(\mathbf{k})\langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{-(b)} + \epsilon S_{\mathbf{k}}^{+(a)} \right] \\ &= \{ [J(\mathbf{k})\langle S^z \rangle]^2 - \epsilon^2 \} S_{\mathbf{k}}^{+(a)}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Jednačina (2.45) predstavlja dobro poznatu jednačinu harmonijskog oscilatora. U Glavi 6 je pokazano da je (bar što se tiče jednodimenzionog HAFM) jednačina (2.45) Furije transform specijalnog oblika Klajn-Gordonove jednačine na rešetki. Rešenje ove jednačine možemo tražiti u obliku $S_{\mathbf{k}}^{+(a)}(t) \propto \exp[-i\omega t]$, odakle nalazimo disperzionu relaciju

$$\omega^2 = \epsilon^2 - [J(\mathbf{k})\langle S^z \rangle]^2 \equiv \omega_{\mathbf{k}}^2 = [J\langle S^z \rangle Z_1]^2 [\eta^2 - \gamma_D^2(\mathbf{k})]. \quad (2.46)$$

odnosno

$$\omega_{\mathbf{k}} = \pm J\langle S^z \rangle Z_1 \sqrt{\eta^2 - \gamma_D^2(\mathbf{k})}. \quad (2.47)$$

²Istovremeno, jednakosti (2.38), zajedno sa $[S_{\mathbf{x}}^{+(a)}, S_{\mathbf{x}}^{+(b)}] = [S_{\mathbf{x}}^{-(a)}, S_{\mathbf{x}}^{-(b)}] \dots = 0$, podsećaju na komutacione relacije za kompleksno skalarno polje [4]: $[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})] = [\phi^\dagger(\mathbf{x}), \pi^\dagger(\mathbf{y})] = i\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})$, $[\phi(\mathbf{x}), \phi^\dagger(\mathbf{y})] = [\pi(\mathbf{x}), \pi^\dagger(\mathbf{y})]$. Više detalja o analogiji HAFM i kompleksnog skalarnog polja je dato u drugom delu disertacije.

Sada možemo pisati

$$S_{\mathbf{k}}^{+(a)}(t) = A(\mathbf{k}) e^{-i\omega(\mathbf{k})t} + B(\mathbf{k}) e^{i\omega(\mathbf{k})t} \quad (2.48)$$

ili, konačno

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t) &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(A(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega(\mathbf{k})t} + B(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + i\omega(\mathbf{k})t} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(A(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega(\mathbf{k})t} + B(-\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + i\omega(\mathbf{k})t} \right). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Koeficijente $A(\mathbf{k})$ i $B(\mathbf{k})$, koji moraju biti proporcionalni bozonskim operatorima, odredićemo tako da budu zadovoljene komutacione relacije (2.38). Takođe, mora biti $A(\mathbf{k}) \neq [B(\mathbf{k})]^\dagger$, jer $S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t)$ nije ermitski operator.

Za razliku od feromagneta, disperziona relacija (2.46) ima i rešenje sa negativnim predznakom. Sličan problem se pojavljuje i prilikom rešavanja relativističke Šredingerove jednačine [4]. Problem interpretacije rešenja kvantnih jednačina koja naizgled sadrže i negativne energije je razrešen uvođenjem kvantne teorije polja. Prema standardnoj interpretaciji KTP, rešenja sa pozitivnim predznakom predstavljaju energije elementarnih ekscitacija (u ovom slučaju to su RPA magnoni), dok se negativna rešenja jednostavno označavaju kao negativne mode polja. U Furije razvoju kvantnog skalarnog polja pozitivne mode množe anihilacione a negativne kreacione operatore kvanata polja [4].

Da bismo naglasili vezu između rešenja (2.39) i odgovarajućeg razvoja kompleksnog skalarnog polja, prepisaćemo (2.49) kao

$$S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t) = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega(\mathbf{k})t} + v_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + i\omega(\mathbf{k})t} \right), \quad (2.50)$$

gde smo uveli nove oznake

$$A(\mathbf{k}) = u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}, \quad B(-\mathbf{k}) = v_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger. \quad (2.51)$$

Jednačina (2.50) definiše opšti oblik razvoja kompleksnog skalarnog polja u Furijeov red [4]. Operatori $a_{\mathbf{k}}$ i $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ su bozonski operatori

$$\left[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q}}^\dagger \right] = \left[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{q}}^\dagger \right] = \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad \left[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q}} \right] = \left[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{q}}^\dagger \right] = \left[a_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{q}}^\dagger \right] = \dots = \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{q}}^\dagger \right] = 0, \quad (2.52)$$

dok ćemo funkcije $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ utvrditi kasnije. Za sada ćemo samo pretpostaviti da su to realne parne funkcije talasnog vektora \mathbf{k} .

Neophodnost zadržavanja negativnih moda u Furije razvoju (2.49) se može razumeti i na sledeći način. Naime, prostorno–vremenski Furije razvoj za operator $S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t)$, ali takav da bude zadovoljena disperziona relacija (2.46), je

$$S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t) = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S^{+(a)}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega t} \delta(\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2) \quad (2.53)$$

Ako sada iskoristimo poznatu osobinu δ –funkcije

$$\delta(\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2) = \frac{\delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}})}{2\omega_{\mathbf{k}}} + \frac{\delta(\omega + \omega_{\mathbf{k}})}{2\omega_{\mathbf{k}}}, \quad (2.54)$$

rešenje (2.53) možemo prepisati kao

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t) &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S^{+(a)}(\mathbf{k}, \omega) \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega t} \frac{\delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}})}{2\omega_{\mathbf{k}}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega t} \frac{\delta(\omega + \omega_{\mathbf{k}})}{\omega_{\mathbf{k}}} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{S^{+(a)}(\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}})}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega(\mathbf{k})t} + \frac{S^{+(a)}(-\mathbf{k}, -\omega_{\mathbf{k}})}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+i\omega(\mathbf{k})t} \right), \end{aligned} \quad (2.55)$$

pri čemu smo u drugom sabirku izvršili smenu $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$. Nakon identifikacije

$$\frac{S^{+(a)}(\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}})}{2\omega_{\mathbf{k}}} = A(\mathbf{k}), \quad \frac{S^{+(a)}(-\mathbf{k}, -\omega_{\mathbf{k}})}{2\omega_{\mathbf{k}}} = B(-\mathbf{k}) \quad (2.56)$$

gornje rešenje se svodi na (2.49). Dakle, jedino ako se u Furije razvoju zadrže i negativne mode, biće obuhvaćene obe grane disperzione relacije (2.46). Pri tome su magnonske energije strogo pozitivne. Potrebno je ispravno protumačiti smisao negativnog korena disperzione relacije jer se on pojavljuje i u metodu temperaturnih Grinovih funkcija u kojem analogija između HAFM i kompleksnog skalarnog polja nije tako lako uočljiva. Za dalju diskusiju o pogrešnoj interpretaciji negativnog korena disperzione relacije videti npr. [35] i tamo navedene reference.

Pozivajući se na pretpostavljene osobine funkcija $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$, pomoću (2.50) nalazimo i $S_{\mathbf{x}}^{-(a)}(t)$ kao

$$S_{\mathbf{x}}^{-(a)}(t) = [S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t)]^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+i\omega(\mathbf{k})t} + v_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega(\mathbf{k})t} \right). \quad (2.57)$$

Iz (2.50) i (2.57) vidimo da operator $S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t)$ kreira magnon tipa b na čvoru $\mathbf{x} \in a$, istovremeno uništavajući magnon tipa a na istom čvoru, dok $S_{\mathbf{x}}^{-(a)}(t)$ čini suprotno [4, 30]. Drugim rečima, antiferomagnetni magnoni tipa a nisu lokalizovani samo na čvorovima a podrešetke a isto važi i za magnone tipa b [37]. Ovaj rezultat se možda ne očekuje na prvi pogled, ali je veoma značajan i biće od pomoći u drugom delu disertacije kada budu uvođeni novi efektivni stepeni slobode za opis HAFM.

Pomoću bozonskih operatora a i b i funkcija $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$, moguće je konstruisati još dva linearno nezavisna rešenja. Ona daju operatore $S_{\mathbf{y}}^{+(b)}(t)$ i $S_{\mathbf{y}}^{-(b)}(t)$:

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{y}}^{+(b)}(t) &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}+i\omega(\mathbf{k})t} + u_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}-i\omega(\mathbf{k})t} \right), \\ S_{\mathbf{y}}^{-(b)}(t) &= [S_{\mathbf{x}}^{+(b)}(t)]^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}-i\omega(\mathbf{k})t} + u_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}+i\omega(\mathbf{k})t} \right). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Interpretacija operatora $S^{\pm(b)}$ je slična kao u slučaju $S^{\pm(a)}$ operatora. Jedina razlika je da operatori $S^{\pm(b)}$ deluju na čvorovima b podrešetke.

Strogo govoreći, da bi $S^{\pm(a)}$ i $S^{\pm(b)}$ bili pravi RPA magnonski operatori, potrebno je da zadovoljavaju bozonske komutacione relacije (2.38) i da dijagonalizuju hamiltonijan u RPA aproksimaciji. Ova dva zahteva se mogu ispuniti pogodnim izborom koeficijenata $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$, što je pokazano niže u tekstu.

Komutacione relacije i dijagonalni hamiltonijan

Zamenom rešenja (2.50) i (2.57) u komutator (2.38) nalazimo

$$\begin{aligned} \left[S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(t), S_{\mathbf{y}}^{-(a)}(t) \right] &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left\{ u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}} \left[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}} + v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{q}} \left[b_{\mathbf{q}}^{\dagger}, b_{\mathbf{k}} \right] e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}} \right\} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} = 2\langle S^z \rangle \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \end{aligned} \quad (2.59)$$

pri čemu smo koristili skraćenu oznaku za skalarni proizvod $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t$ i bozonske komutacione relacije (2.52). Iz (2.59) dobijamo prvi uslov koji treba da zadovolje funkcije $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$

$$u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 2\langle S^z \rangle. \quad (2.60)$$

Ista relacija se nalazi iz drugog komutatorskog para $[S_{\mathbf{x}}^{+(b)}, S_{\mathbf{y}}^{-(b)}]$, dok su ostali komutatori automatski jednaki nuli.

Da bismo lakše našli dijagonalnu RPA verziju hamiltonijana (1.1), odnosno (1.20), podelićemo ga na tri dela.

$$\begin{aligned} H^1 &= \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda} S_{\mathbf{n}}^{+(a)} S_{\mathbf{n}+\lambda}^{+(b)} = \frac{J}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} S_{\mathbf{k}}^{+(a)} S_{\mathbf{n}+\mathbf{q}}^{+(b)} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} + i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{n}+\lambda)} \\ &= \frac{JZ_1}{2} \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}^{+(a)} S_{-\mathbf{k}}^{+(b)} \gamma_D(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (2.61)$$

pri čemu smo prešli u impulsni prostor prema (2.39). Uvrštavanjem rešenja (2.50) i (2.58) u (2.61) nalazimo

$$H_{\text{RPA}}^1 = \frac{Jz_D}{2} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_D(\mathbf{k}) \left\{ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} + b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} \right) + u_{\mathbf{k}}^2 e^{-i2\omega(\mathbf{k})t} a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2 e^{i2\omega(\mathbf{k})t} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right\}. \quad (2.62)$$

Na isti način dobijamo i

$$\begin{aligned} H_{\text{RPA}}^2 &= \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda} S_{\mathbf{n}}^{-(a)} S_{\mathbf{n}+\lambda}^{-(b)} \\ &= \frac{Jz_D}{2} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_D(\mathbf{k}) \left\{ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) + u_{\mathbf{k}}^2 e^{i2\omega(\mathbf{k})t} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}^2 e^{-i2\omega(\mathbf{k})t} a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} \right\}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Ostao je još da se nađe Furiije transform za

$$H^3 = -J \eta \sum_{\mathbf{n}, \lambda} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}+\lambda}^{z(b)}. \quad (2.64)$$

Međutim, u H^3 figurišu operatori $S_{\mathbf{n}}^{z(a/b)}$ koji još uvek nisu izraženi pomoću bozonskih operatera a i b . Taj problem možemo rešiti tako što ćemo H_{RPA}^3 napisati pomoću S^{\pm} operatera i to tako da budu zadovoljene jednačine kretanja (2.36). Drugim rečima, u RPA linearizaciji, H_{RPA}^3 je operator za koji važi

$$\begin{aligned} \left[S_{\mathbf{x}}^{+(a)}, H_{\text{RPA}}^3 \right] &= JZ_1 \langle S^z \rangle S_{\mathbf{x}}^{+(a)} = \epsilon S_{\mathbf{x}}^{+(a)} \\ \left[S_{\mathbf{x}}^{-(b)}, H_{\text{RPA}}^3 \right] &= -\epsilon S_{\mathbf{x}}^{-(b)}. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Pošto je u RPA $[S_{\mathbf{x}}^{+(a)}, S_{\mathbf{y}}^{-(a)}] = [S_{\mathbf{x}}^{+(b)}, S_{\mathbf{y}}^{-(b)}] = 2\langle S^z \rangle \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, jednačina (2.65) će važiti ako stavimo

$$H_{\text{RPA}}^3 = \frac{\epsilon}{2\langle S^z \rangle} \sum_{\mathbf{n} \in a} S_{\mathbf{n}}^{+(a)} S_{\mathbf{n}}^{-(a)} + \frac{\epsilon}{2\langle S^z \rangle} \sum_{\mathbf{n} \in b} S_{\mathbf{n}}^{+(b)} S_{\mathbf{n}}^{-(b)}. \quad (2.66)$$

Kod ovakvog izbora za H_{RPA}^3 se dobija dijagonalni bozonski hamiltonijan definisan do na konstantu i on se koristi prilikom termodinamičkih usrednjavanja. Prava RPA unutrašnja energija HAFM se tada mora računati slično kao i u slučaju feromagneta. Prelaskom u impulsni prostor nalazimo

$$\begin{aligned} H_{\text{RPA}}^3 &= \frac{\epsilon}{2\langle S^z \rangle} \sum_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}) \\ &+ \frac{\epsilon}{2\langle S^z \rangle} \sum_{\mathbf{k}} 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(e^{i2\omega(\mathbf{k})t} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + e^{-i2\omega(\mathbf{k})t} a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} \right). \end{aligned} \quad (2.67)$$

Dakle, ukupni bozonski RPA hamiltonijan za Hajzenbergov antiferomagnet je

$$\begin{aligned} H_{\text{RPA}} &= \sum_{\mathbf{k}} \left\{ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} J(\mathbf{k}) + \frac{\epsilon}{2\langle S^z \rangle} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) \right\} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \left\{ J(\mathbf{k}) \frac{u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2}{2} + \frac{u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \epsilon}{\langle S^z \rangle} \right\} \left(e^{i2\omega(\mathbf{k})t} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + e^{-i2\omega(\mathbf{k})t} a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} \right), \end{aligned} \quad (2.68)$$

pri čemu je konstantni član ispušten iz razloga koji su već navedeni. Da bi H_{RPA} bio dijagonalni bozonski hamiltonijan, potrebno je da koeficijenti $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ budu takvi da je ispunjen uslov

$$J(\mathbf{k}) \frac{u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2}{2} + \frac{u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \epsilon}{\langle S^z \rangle} = 0. \quad (2.69)$$

Relacije (2.60) i (2.69) u potpunosti određuju funkcije $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$. Rešenja tog sistema su

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{2\langle S^z \rangle} \sqrt{\frac{\epsilon}{2\omega(\mathbf{k})} + \frac{1}{2}}, \quad v_{\mathbf{k}} = -\sqrt{2\langle S^z \rangle} \sqrt{\frac{\epsilon}{2\omega(\mathbf{k})} - \frac{1}{2}}. \quad (2.70)$$

Konačno, dijagonalni bozonski hamiltonijan u RPA linearizaciji je

$$H_{\text{RPA}} = \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \right] \quad (2.71)$$

pri čemu je $\omega(\mathbf{k})$ dato u (2.46). Ovaj hamiltonijan ima istu strukturu kao hamiltonijan kompleksnog skalarnog (Klaajn-Gordonovog) polja [4, 30]. Analiza HAFM sa stanovišta "relativističke" teorije je predmet drugog dela disertacije. Tamo je pokazano da se pogodnom transformacijom hamiltonijana u direktnom prostoru, odnosno uvođenjem pravih magnonskih stepeni slobode na direktnoj rešetki, moguće dobiti uobičajene koeficijente $u_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} = [2\omega_{\mathbf{k}}]^{-1/2}$ karakteristične za kompleksno skalarno polje [4].

Magnetizacija podrešetke

Pošto smo odredili dijagonalni RPA hamiltonijan, moguće je računati termodinamičke veličine. U nastavku je pažnja posvećena spontanoj magnetizaciji.

Osnovno stanje hamiltonijana (2.71), u oznaci $|0\rangle$, definisano je uslovima

$$a_{\mathbf{k}}|0\rangle = b_{\mathbf{k}}|0\rangle = \langle 0|a_{\mathbf{k}}^\dagger = \langle 0|b_{\mathbf{k}}^\dagger = 0. \quad (2.72)$$

Koristeći (2.72) i rešenja (2.50), (2.57) i (2.58), lako nalazimo korelacionu funkciju

$$\langle S_{\mathbf{x}}^{-(a)} S_{\mathbf{x}}^{+(a)} \rangle = \langle 0|S_{\mathbf{x}}^{-(a)} S_{\mathbf{x}}^{+(a)}|0\rangle \quad (2.73)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle 0| \left[u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + v_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right] \left[u_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} + v_{\mathbf{q}} b_{-\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \right] |0\rangle$$

$$= \frac{1}{N} \langle 0|b_{-\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger|0\rangle v_{\mathbf{k}}^2 e^{i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{q})} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} 2\langle S^z \rangle \left[\frac{\epsilon}{2\omega_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2} \right] \quad (2.74)$$

Za razliku od feromagneta, korelaciona funkcija $\langle S^- S^+ \rangle$ ne iščezava na $T = 0\text{K}$ ³. Zbog toga je $\langle 0|S^z|0\rangle < S$. Konkretno, za $S = 1/2$ dobijamo

$$\langle 0|S^z|0\rangle \equiv \langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_{\mathbf{x}}^{-(a)} S_{\mathbf{x}}^{+(a)} \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} 2\langle S^z \rangle \left[\frac{\epsilon}{2\omega_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2} \right] \quad (2.75)$$

odakle sledi poznati rezultat Tjablikova

$$\langle S^z \rangle_0 = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon}{\omega_{\mathbf{k}}} \right]^{-1} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2 - \gamma_D^2(\mathbf{k})}} \right]^{-1}. \quad (2.76)$$

Pojava smanjivanja z - projekcije spina u osnovnom stanju se obično označava kao kvantne fluktuacije. Za $S > 1/2$ HAFM, umesto operatorske jednačine $S^z = 1/2 - S^- S^+$, može se koristiti Kalenova jednačina (2.18) koja povezuje srednje vrednosti operatora S^z i $S^- S^+$. Kako se opšti oblik korelacione funkcije (2.73) pri tome ne menja, za D - dimenzioni HAFM na zapreminski centriranoj rešetki imamo [3, 31]

$$P_S(0) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\epsilon}{2\omega_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2} \right] = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\eta}{2\sqrt{\eta^2 - \gamma_D^2(\mathbf{k})}} - \frac{1}{2} \right] = \frac{1}{2} [I_D(\eta) - 1],$$

$$I_D(\eta) = a^D \int_{\mathbf{k}(a)} \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2 - \gamma_D^2(\mathbf{k})}} \quad (2.77)$$

pa se dobijaju isti rezultati kao i standardnim RPA GF postupkom [2].

2.2.2 Jednačine kretanja: RPA na konačnim temperaturama

Na konačnim temperaturama primenjujemo Macubarinu tehniku i rešavamo jednačine kretanja u imaginarnom vremenu [18–20]

$$-\partial_\tau \mathcal{O} = [\mathcal{O}, H], \quad \mathcal{O} = S_{\mathbf{x}}^{+(a)}, S_{\mathbf{x}}^{-(b)}. \quad (2.78)$$

³Videti diskusiju na kraju Glave 6.

Tako jednačine (2.36) prelaze u

$$\begin{aligned} -\dot{S}_{\mathbf{x}}^{+(a)} &= J S_{\mathbf{x}}^{z(a)} \sum_{\lambda} S_{\mathbf{x}+\lambda}^{-(b)} + J\eta S_{\mathbf{x}}^{+(a)} \sum_{\lambda} S_{\mathbf{x}+\lambda}^{z(b)}, \\ -\dot{S}_{\mathbf{y}}^{-(b)} &= -J S_{\mathbf{y}}^{z(b)} \sum_{\lambda} S_{\mathbf{y}+\lambda}^{+(a)} - J\eta S_{\mathbf{y}}^{-(b)} \sum_{\lambda} S_{\mathbf{y}+\lambda}^{z(a)}. \end{aligned}$$

pri čemu tačka označava diferenciranje po τ . Linearizacijom ovih jednačina prema RPA šemi $S_{\mathbf{n}}^{z(a/b)} \rightarrow \langle S^z \rangle$ i prelaskom u impulsni prostor, umesto (2.42) i (2.43), dobijamo sistem

$$\begin{aligned} -\dot{S}_{\mathbf{k}}^{+(a)} &= J(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{-(b)} + \epsilon S_{\mathbf{k}}^{+(a)}, \\ -\dot{S}_{\mathbf{k}}^{-(b)} &= -J(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{+(a)} - \epsilon S_{\mathbf{k}}^{-(b)}, \end{aligned} \quad (2.79)$$

odakle se eliminacijom $S_{\mathbf{k}}^{-(b)}$ nalazi

$$\ddot{S}_{\mathbf{k}}^{+(a)}(\tau) = \{ \epsilon^2 - [J(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle]^2 \} S_{\mathbf{k}}^{+(a)}. \quad (2.80)$$

Rešenje ove jednačine tražimo u obliku $S_{\mathbf{k}}^{+(a)}(\tau) \propto \exp[-\omega\tau]$, tako da dobijamo istu disperzionu relaciju kao i u (2.46)

$$\omega^2 = \epsilon^2 - [J(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle]^2 \equiv \omega_{\mathbf{k}}^2 = [J \langle S^z \rangle Z_1]^2 [\eta^2 - \gamma_D^2(\mathbf{k})]. \quad (2.81)$$

Konačno, ponavljajući isti postupak kao i u osnovnom stanju, nalazimo RPA spinske operatore na konačnim temperaturama

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega(\mathbf{k})\tau} + v_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + \omega(\mathbf{k})\tau} \right), \\ S_{\mathbf{x}}^{-(a)}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + \omega(\mathbf{k})\tau} + v_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega(\mathbf{k})\tau} \right), \\ S_{\mathbf{y}}^{+(b)}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y} + \omega(\mathbf{k})\tau} + u_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y} - \omega(\mathbf{k})\tau} \right), \\ S_{\mathbf{y}}^{-(b)}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} \left(v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y} - \omega(\mathbf{k})\tau} + u_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y} + \omega(\mathbf{k})\tau} \right), \end{aligned} \quad (2.82)$$

pri čemu su $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ definisani u (2.70).

Pošto smo našli eksplicitni oblik spinskih operatora u aproksimaciji haotičnih faza, korelaciju funkciju $\langle S_{\mathbf{m}}^{-} S_{\mathbf{m}}^{+} \rangle$ dobijamo usrednjavanjem po $\exp[-\beta H_{\text{RPA}}]$

$$\begin{aligned} \langle S_{\mathbf{x}}^{-(a)}(\tau) S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(\tau) \rangle &= \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle e^{i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \tau[\omega(\mathbf{k}) - \omega(\mathbf{q})]} \\ &+ \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{q}} \langle b_{-\mathbf{q}} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle e^{-i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{q}) + \tau[\omega(\mathbf{k}) - \omega(\mathbf{q})]} \\ &= \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \langle n_{\mathbf{k}} \rangle e^{i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \tau[\omega(\mathbf{k}) - \omega(\mathbf{q})]} \\ &+ \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) [\langle n_{\mathbf{k}} \rangle + 1] v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{q}} \langle b_{-\mathbf{q}} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle e^{-i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{q}) + \tau[\omega(\mathbf{k}) - \omega(\mathbf{q})]} \\ &= \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} [u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2] \langle n_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2. \end{aligned} \quad (2.83)$$

Slično kao što smo imali kod feromagneta, $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ predstavlja Boze–raspodelu za magnone sa energijama (2.81). Dakle,

$$\begin{aligned} \langle S_{\mathbf{x}}^{-(a)}(\tau) S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(\tau) \rangle &= \frac{2\langle S^z \rangle}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon}{\omega(\mathbf{k})} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{2\langle S^z \rangle}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\epsilon}{2\omega(\mathbf{k})} + \frac{1}{2} \right] \\ &= \frac{2\langle S^z \rangle}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\epsilon}{2\omega(\mathbf{k})} \coth \frac{\omega(\mathbf{k})}{2T} - \frac{1}{2} \right], \end{aligned} \quad (2.84)$$

pri čemu smo iskoristili (2.70) i poznatu vezu $1 + 2[e^x - 1]^{-1} = \coth[x/2]$. Korelaciona funkcija (2.84) se potpuno poklapa sa RPA GF rezultatom [2, 9, 28]. Magnetizacija podrešetke na konačnoj temperaturi a $S = 1/2$ HAFM se nalazi kao $\langle S^z \rangle = 1/2 - \langle S^{-(a)} S^{+(a)} \rangle$, odakle je

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon}{\omega(\mathbf{k})} \coth \frac{\omega(\mathbf{k})}{2T} \right]^{-1/2} \quad (2.85)$$

što je takođe poznati RPA rezultat [28]. Za određivanje magnetizacije podrešetke $S > 1/2$, korelacionu funkciju (2.84) je potrebno koristiti zajedno sa Kalenovom formulom (2.18) uz

$$P_S(T) = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\epsilon}{2\omega(\mathbf{k})} \coth \frac{\omega(\mathbf{k})}{2T} - \frac{1}{2} \right]. \quad (2.86)$$

Pošto smo našli dijagonalni hamiltonijan, računanje bilo koje druge fizičke veličine na konačnim temperaturama ne bi trebalo da predstavlja neki problem jer se srednje vrednosti proizvoljnog proizvoda anihilacionih i kreacionih operatora mogu uprostiti primenom temperaturske Vikove teoreme [18, 19].

Niskotemperaturski razvoj antiferomagnetnog parametra uređenosti u RPA takođe pokazuje odstupanja od standardnih rezultata [38]. Ipak, neslaganje je znatno manje izraženo nego kod feromagneta, jer se ne pojavljuju novi, pogrešni stepeni temperature (bar za prvih nekoliko članova razvoja), već RPA rešenje modifikuje neke od postojećih (korektnih) članova. Ovo možda deluje neočekivano, uzimajući u obzir složenost antiferomagnetnog osnovnog stanja sa jedne i trivijalnost feromagnetnog osnovnog stanja sa druge strane. U drugom delu disertacije je pokazano da razlog za ovakvo odstupanje leži u WZW članu u efektivnom dejstvu za feromagnet.

Kritična (Nelova) temperatura D – Hajzenbergovog antiferomagneta na zapreminski centriranoj kubnoj rešetki je u RPA linearizaciji data sa [3, 31]

$$\begin{aligned} T_N(\eta) &= \frac{S(S+1)}{3} \frac{JZ_1}{J_D(\eta)}, \\ J_D(\eta) &= \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\eta}{\eta^2 - \gamma_D^2(\mathbf{q})} = a^D \int_{q(a)} \frac{\eta}{\eta^2 - \gamma_D^2(\mathbf{q})}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Korišćenjem egzaktnih rešenja [31] za integrale $L_D(\eta)$, $I_D(\eta)$ i $J_D(\eta)$ u nastavku će biti pokazano da RPA rešenje zadovoljava Mermin-Vagnerovu teoremu.

2.2.3 Jednačine kretanja: Kalenova linearizacija

Kao i u slučaju feromagneta, moguće je uvesti Kalenovu modifikaciju [39] postupka Tjablikova. Osnovna ideja je da se komutacione relacije za S^\pm operatore zadrže u aproksimativnom obliku (2.38), dok se računanje kratkodometnih fluktuacija vrši efektivno kroz linearizaciju jednačine kretanja (2.36). Pri tome, novo rešenje mora imati opštu strukturu tipa (2.82), dajući istu interpretaciju rešenjima za S^\pm operatore. Šta više, očekujemo da disperzija, kao i kod feromagneta, za RPA i kalenovsko rešenje ima istu geometrijsku strukturu uz dodatnu renormalizaciju nekih koeficijenata (koji ne zavise od talasnog vektora).

Pogledajmo sada na koji način možemo proširiti RPA postupak tako da se računaju kratkodometne fluktuacije. Pošto bozonski operator $S_{\mathbf{x}}^{+(a)}$ kreira magnon tipa b i uništava magnon tipa a na čvoru \mathbf{x} , dok operator $S_{\mathbf{x}+\boldsymbol{\lambda}}^{+(b)}$ kreira magnon tipa a i uništava magnon tipa b na susednom čvoru⁴ $\mathbf{x} + \boldsymbol{\lambda}$, u linearizovanoj jednačini kretanja bi trebala da figuriše korelaciona funkcija $\langle S_{\mathbf{x}}^{+(a)} S_{\mathbf{x}+\boldsymbol{\lambda}}^{+(b)} \rangle$, odnosno $\langle S_{\mathbf{x}}^{-(a)} S_{\mathbf{x}+\boldsymbol{\lambda}}^{-(b)} \rangle$, koja meri (opisuje) preskakanje magnona sa čvora na čvor. Prema Kalenu [39], linearizacija u jednačinama kretanja se vrši zamenom

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{x}}^{z(a)} S_{\mathbf{x}+\boldsymbol{\lambda}}^{- (b)} &\longrightarrow \langle S^z \rangle S_{\mathbf{x}+\boldsymbol{\lambda}}^{- (b)} - \alpha(T) \langle S_{\mathbf{x}}^{+(a)} S_{\mathbf{x}+\boldsymbol{\lambda}}^{+(b)} \rangle S_{\mathbf{x}}^{+(a)}, \\ S_{\mathbf{y}}^{z(b)} S_{\mathbf{y}+\boldsymbol{\lambda}}^{+(a)} &\longrightarrow \langle S^z \rangle S_{\mathbf{y}+\boldsymbol{\lambda}}^{+(a)} - \alpha(T) \langle S_{\mathbf{x}}^{+(a)} S_{\mathbf{x}+\boldsymbol{\lambda}}^{+(b)} \rangle S_{\mathbf{y}}^{- (b)}, \end{aligned} \quad (2.88)$$

pri čemu je parametar dekuplovanja isti kao kod feromagneta

$$\alpha(T) = \frac{\langle S^z \rangle}{2S^2}. \quad (2.89)$$

Nakon prelaska u impulsni prostor prema (2.39), jednačine kretanja za spinske operatore postaju

$$\begin{aligned} -\dot{S}_{\mathbf{k}}^{+(a)} &= \tilde{J} Z_1 \gamma_D(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{- (b)} + \tilde{J} \tilde{\eta} Z_1 \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{+(a)}, \\ -\dot{S}_{\mathbf{k}}^{- (b)} &= -\tilde{J} Z_1 \gamma_D(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{+(a)} - \tilde{J} \tilde{\eta} Z_1 \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{- (b)}, \end{aligned} \quad (2.90)$$

gde su

$$\begin{aligned} \tilde{J} &= \tilde{J}(T) = J \left[1 - \frac{\eta \alpha(T) f(T)}{\langle S^z \rangle} \right] = J \left[1 - \frac{\eta f(T)}{2S^2} \right], \\ \tilde{\eta} &= \tilde{\eta}(T) = \frac{\eta - \alpha(T) f(T) / \langle S^z \rangle}{1 - \eta \alpha(T) f(T) / \langle S^z \rangle} = \frac{\eta - f(T) / (2S^2)}{1 - \eta f(T) / (2S^2)}, \\ f(T) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle S^{+(a)} S^{+(b)} \rangle_{\mathbf{q}} \gamma_D(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (2.91)$$

Osim renormalizacije integrala izmene i spinske anizotropije, Kalenovo dekuplovanje ne unosi nikakve dodatne izmene u RPA rešenje. Konkretno, vidimo da je za izotropni antiferomagnet $\eta = \tilde{\eta} = 1$, kao što i mora biti, jer izotropni modeli dozvoljavaju postojanje Goldstonovih bozona. Dakle, spinski operatori u Kalenovoj bozonskoj aproksimaciji su dati sa (2.82), pri čemu je sada [3]

$$\tilde{\omega}(\mathbf{k}) = \tilde{J} \langle S^z \rangle Z_1 \sqrt{\tilde{\eta}^2 - \gamma_D^2(\mathbf{k})}. \quad (2.92)$$

⁴U lokalnom koordinatnom sistemu.

Koristeći rešenja (2.82), nalazimo i dodatnu korelacionu funkciju

$$f(T) = -\frac{\langle S^z \rangle^2 Z_1 \tilde{J}(T)}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_D^2(\mathbf{k})}{\tilde{\omega}(\mathbf{k})} \coth \frac{\tilde{\omega}(\mathbf{k})}{2T}. \quad (2.93)$$

Dakle, magnetizacija podrešetke u Kalenovoj aproksimaciji je određena sistemom jednačina (2.93), (2.92), (2.91), Kalenovom formulom (2.18) i funkcijom $P_S(T)$, koja u ovom slučaju glasi

$$\tilde{P}_S(T) = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\tilde{\epsilon}}{2 \tilde{\omega}(\mathbf{k})} \coth \frac{\tilde{\omega}(\mathbf{k})}{2T} - \frac{1}{2} \right], \quad \tilde{\epsilon} = \tilde{J} \langle S^z \rangle Z_1 \tilde{\eta}. \quad (2.94)$$

Konačno, Nelova temperatura u Kalenovoj aproksimaciji je određena sa [3]

$$T_N(\eta) = \frac{S(S+1)}{3} \frac{\tilde{J}_N Z_1}{J_D(\tilde{\eta}_N)}, \quad (2.95)$$

gde su $\tilde{J}_N = \tilde{J}(T_N)$, $\tilde{\eta}_N = \tilde{\eta}(T_N)$, dok je $f(T_N)$ rešenje samousaglašene jednačine

$$f(T_N) = -\frac{2S(S+1)\tilde{\eta}_N}{3} \left[1 - \frac{1}{\tilde{\eta}_N J_D(\tilde{\eta}_N)} \right]. \quad (2.96)$$

Integral $J_D(\eta)$ je definisan u (2.87). Slično, magnetizacija podrešetke na $T = 0$ K je u Kalenovoj aproksimaciji određena Kalenovom formulom i

$$\tilde{P}_S(0) = \frac{1}{2} \left[I_D(\tilde{\eta}_0) - 1 \right] \quad (2.97)$$

Integral $I_D(\eta)$ je definisan u (2.77), $\tilde{\eta}_0 = \tilde{\eta}(T = 0)$, dok se $f(0)$ nalazi rešavanjem samousaglašene jednačine

$$f(0) = -\frac{\langle S^z \rangle_0}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_D^2(\mathbf{k})}{\sqrt{\tilde{\eta}^2(0) - \gamma_D^2(\mathbf{k})}} \equiv -\langle S^z \rangle_0 \tilde{J}_D(\tilde{\eta}(0)). \quad (2.98)$$

U nastavku ćemo iskoristiti analitička rešenja [31] integrala $L_D(\eta)$, $I_D(\eta)$ i $J_D(\eta)$ kako bismo uspostavili egzaktne veze između kritičnih temperatura koje predviđaju aproksimacije Tjablikova i Kalena. Takođe, pokazaćemo da su oba rešenja u skladu sa Mermin-Vagnerovom teoremom.

Glava 3

Integrali Votsonovog tipa i Hajzenbergov model

U prethodnoj Glavi su dobijene jednačine koje određuju temperaturno ponašanje parametra urednosti Hajzenbergovog feromagneta i antiferomagneta na D – dimenzionoj zapreminski centriranoj rešetki u okviru RPA i Kalenovog prilaza. Ispostavlja se da su Kirijeva temperatura za feromagnet, kao i Nelova temperatura i magnetizacija podrešetke u osnovnom stanju u slučaju antiferomagneta, izraženi pomoću D – dimenzionih integrala $L_D(\eta)$, $J_D(\eta)$, $\tilde{J}_D(\eta)$ i $I_D(\eta)$. Ovi integrali spadaju u klasu tzv. Votsonovih integrala i za njih postoje egzaktna rešenja koja se svode na uopštene hipergeometrijske funkcije [31]. Pomenuti integrali čak dopuštaju i uopštavanje na necelobrojne vrednosti parametra D . U nastavku će analitička rešenja pomenutih integrala biti iskorišćena da se pokaže kako i Tjablikovljevo i Kalenovo rešenje zadovoljavaju Mermin-Vagnerovu-Kolmenovu teoremu. Takođe, biće analitički pokazano da za $D \geq 2$ i fiksirane parametre J i η u spinskom hamiltonijanu, u slučaju male ($g \ll 1$) i jako izražene ($g \gg 1$) spinske anizotropije, RPA rešenje uvek predviđa nižu kritičnu temperaturu. Situacija je obrnuta za $D = 1$. Eksplicitni oblici raznih integrala koji su izračunati u ovoj glavi se dobijaju primenom pravila iz (A.37) za feromagnetnu i (A.38) za antiferomagnetnu rešetku. Originalne reference koje se tiču egzaktnih rešenja sličnih integrala, kao i njihiva primena na magnonske i fononske sisteme, dat su u [31].

3.1 Analitička rešenja

3.1.1 Integrali $I_D(\eta)$

D – dimenzioni integral Votsonovog tipa $I_D(\eta)$, uveden u (2.77), glasi [31]

$$I_D(\eta) = \frac{1}{\pi^D} \prod_{i=1}^D \int_0^\pi dx_i \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2 - \prod_{j=1}^D \cos^2[x_j/2]}}. \quad (3.1)$$

Ovaj oblik $I_D(\eta)$ je pogodan za dalja računanja. Rešenje integrala $I_D(\eta)$ za opšte celobrojno D se može naći rešavanjem prvo najjednostavnijeg integrala (za $D = 1$) i svodenjem složenijih integrala na $I_1(\eta)$.

D = 1

Za $D = 1$, integral $I_D(\eta)$ jednostavno predstavlja površinu ispod krive $[1 - 1/\eta^2 \cos^2 x]^{-1/2}$ za $0 \leq x \leq \pi/2$. Dakle, on je istovetan sa uobičajenom definicijom potpunog eliptičnog integrala prve vrste [31]

$$I_1(\eta) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} dx \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{1}{\eta^2} \cos^2 x}} = \frac{2}{\pi} \mathcal{K} \left(\frac{1}{\eta} \right). \quad (3.2)$$

Za nastavak je pogodno izraziti $I_1(\eta)$ pomoću hipergeometrijske funkcije [31, 41]

$$I_1(\eta) = {}_2F_1 \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; \frac{1}{\eta^2} \right) = \frac{\pi}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(1/2)_m (1/2)_m}{(1)_m} \frac{1}{m!} \frac{1}{\eta^{2m}}, \quad (3.3)$$

gde je uvedena standardna oznaka za Pochamerov simbol

$$(a)_m = \frac{\Gamma(a+m)}{\Gamma(a)}. \quad (3.4)$$

Integral $I_1(\eta)$ nije definisan za $\eta = 1$.

D = 2

Dvodimenzioni integral se može zapisati u sledećem obliku [31]

$$I_2(\eta) = \frac{4}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{\sqrt{1 - a_x^2 \cos^2 y}}, \quad a_x = \frac{\cos x}{\eta}. \quad (3.5)$$

Koristeći (3.3), kao i činjenicu da je $a_x \leq 1$ za $\eta \geq 1$, dobijamo

$$\begin{aligned} I_2(\eta) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} dx {}_2F_1 \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; a_x^2 \right) \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(1/2)_m (1/2)_m}{(1)_m} \frac{1}{m!} \frac{1}{\eta^{2m}} \int_0^{\pi/2} dx \cos^{2m} x. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Dalje, pošto je [42]

$$\int_0^{\pi/2} dz \cos^{2m} z = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(m+1/2)}{\Gamma(m+1)}, \quad (3.7)$$

i

$$\frac{\Gamma(m+1/2)}{\Gamma(m+1)} = \frac{(1/2)_m}{(1)_m} \sqrt{\pi}, \quad (3.8)$$

dobijamo [31]

$$I_2(\eta) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(1/2)_m (1/2)_m (1/2)_m}{(1)_m (1)_m} \frac{1}{m!} \frac{1}{\eta^{2m}}. \quad (3.9)$$

Za $\eta \geq 1$ gornji red apsolutno konvergira i definiše uopštenu hipergeometrijsku funkciju ${}_3F_2$ [43]. Dakle, nalazi se [31]

$$I_2(\eta) = {}_3F_2 \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 1; \frac{1}{\eta^2} \right). \quad (3.10)$$

$D = 3$

Integral $I_3(\eta)$ se može izračunati na sličan način. Pre svega, $I_3(\eta)$ se može zapisati kao [31]

$$\begin{aligned} I_3(\eta) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} dz \frac{4}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{\sqrt{1 - b_{xz}^2 \cos^2 y}}, \\ b_{xz} &= \frac{\cos x \cos z}{\eta} \equiv \frac{\cos x}{\eta_z}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Zamenom (3.10) i (3.9) u (3.11) nalazimo

$$\begin{aligned} I_3(\eta) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} dz {}_3F_2 \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 1; \frac{1}{\eta_z^2} \right) \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(1/2)_m (1/2)_m (1/2)_m}{(1)_m (1)_m} \frac{1}{m! \eta^{2m}} \int_0^{\pi/2} dz \cos^{2m} z. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Odnosno,

$$I_3(\eta) = {}_4F_3 \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 1, 1; \frac{1}{\eta^2} \right), \quad (3.13)$$

pri čemu smo iskoristili (3.7) i (3.8).

Opšte rešenje

Na osnovu (3.3), (3.10) i (3.13), može se videti da je rešenje integrala $I_D(\eta)$ za proizvoljno celobrojno D dato sa [31]

$$\begin{aligned} I_D(\eta) &= \frac{1}{\pi^D} \prod_{i=1}^D \int_0^{\pi} dx_i \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2 - \prod_{j=1}^D \cos^2[x_j/2]}} \\ &= {}_{D+1}F_D \left(\underbrace{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_{D+1 \text{ put}}; \underbrace{1, 1, \dots, 1}_{D \text{ puta}}; \frac{1}{\eta^2} \right), \quad \begin{array}{l} \text{za } D > 1 \text{ i } \eta \geq 1, \\ \text{ili } D = 1 \text{ i } \eta > 1 \end{array} \end{aligned} \quad (3.14)$$

što se može dokazati indukcijom. Važno je primetiti da red koji definiše uopštenu hipergeometrijsku funkciju

$${}_pF_q \left(\underbrace{a_1, a_2, \dots, a_p}_{p \text{ puta}}; \underbrace{b_1, b_2, \dots, b_q}_{q \text{ puta}}; \frac{1}{\eta^2} \right) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a_1)_m \cdots (a_p)_m}{(b_1)_m \cdots (b_q)_m} \frac{1}{m! \eta^{2m}}, \quad (3.15)$$

pri $p = q + 1$, konvergira apsolutno samo za $\eta > 1$. Ako je $\sum_j b_j > \sum_i a_i$, red konvergira i za $\eta = 1$. Pri tome mora važiti $b_j \neq 0$ i $b_j \notin \mathbb{Z}_-$ [31, 43].

3.1.2 Integrali $\tilde{I}_D(\eta)$ i $\tilde{J}_D(\eta)$

Postupokom koji je detaljno prikazan na primeru integrala $I_D(\eta)$, moguće je izračunati još dva integrala $\tilde{I}_D(\eta)$ i $\tilde{J}_D(\eta)$ koji se pojavljuju prilikom računanja magnetizacije podrešetke u osnovnom stanju u Kalenovom prilazu.

Prvi od njih, $\tilde{I}_D(\eta)$, ima rešenje [31]

$$\begin{aligned} \tilde{I}_D(\eta) &= \frac{1}{\pi^D} \prod_{i=1}^D \int_0^\pi dx_i \sqrt{\eta^2 - \prod_{j=1}^D (\cos[x_j/2])^2} \\ &= \eta_{D+1} F_D \left(-\frac{1}{2}, \underbrace{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_{D \text{ puta}}, \underbrace{1, 1, \dots, 1}_{D \text{ puta}}; \frac{1}{\eta^2} \right). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Do rešenja (3.16) se može doći korišćenjem potpunog eliptičkog integrala druge vrste i njegove reprezentacije pomoću hipergeometrijske funkcije [41]

$$\mathcal{E}(t) = \frac{\pi}{2} F \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; t^2 \right). \quad (3.17)$$

S obzirom da je $I_a(\eta) = \partial \tilde{I}_a(\eta) / \partial \eta$, ispravnost rešenja (3.16) se može pokazati integracijom.

Drugi integral je

$$\begin{aligned} \tilde{J}_D(\eta) &= \frac{1}{\pi^D} \prod_{i=1}^D \int_0^\pi dx_i \frac{\prod_{j=1}^D (\cos[x_j/2])^2}{\sqrt{\eta^2 - \prod_{j=1}^D (\cos[x_j/2])^2}} \\ &= \eta_{D+1} F_D \left(\underbrace{\frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_{D+1 \text{ put}}, \underbrace{1, \dots, 1}_{D \text{ puta}}; \frac{1}{\eta^2} \right) - \eta_{D+1} F_D \left(-\frac{1}{2}, \underbrace{\frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_{D \text{ puta}}, \underbrace{1, \dots, 1}_{D \text{ puta}}; \frac{1}{\eta^2} \right) \\ &= \frac{1}{\eta} \left(\frac{1}{2} \right)^D {}_{D+1}F_D \left(\frac{1}{2}, \underbrace{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{3}{2}}_{D \text{ puta}}, \underbrace{2, 2, \dots, 2}_{D \text{ puta}}; \frac{1}{\eta^2} \right). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Prilikom dobijanja rešenja (3.18) je iskorišćena veza $(-1/2)_m - (1/2)_m = 2m(-1/2)_m$, kao i $(a)_{m+1} = (a+1)_m \Gamma(a+1) / \Gamma(a)$ uz $\Gamma(3/2) / \Gamma(1/2) = 1/2$.

3.1.3 Integrali $J_D(\eta)$

Drugi integral Votsonovog tipa se pojavljuje u jednačinama za Nelovu temperaturu, definisan u (2.87), glasi [31]

$$J_D(\eta) = \frac{1}{\pi^D} \prod_{i=1}^D \int_0^\pi dx_i \frac{\eta}{\eta^2 - \prod_{j=1}^D (\cos^2[x_j/2])}. \quad (3.19)$$

Kao i u slučaju $I_D(\eta)$, opšte rešenje za $J_D(\eta)$, gde D uzima celobrojne vrednosti, može se dobiti svodenjem složenijih integrala na $J_1(\eta)$ [31].

$D = 1$

Kada je $D = 1$, integral $J_D(\eta)$ je jednostavno

$$J_1(\eta) = \frac{2}{\pi \eta} \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{1 - \frac{1}{\eta^2} \cos^2 y}. \quad (3.20)$$

Da bismo našli rešenje za $J_1(\eta)$, pogodno je prvo rešiti neodređeni integral

$$\tilde{J}(y, a) = \int \frac{dy}{1 - a^2 \cos^2 y} = \frac{2}{1 - a^2} \int dt \frac{1 + t^2}{\prod_{\alpha=1}^4 (t - t_\alpha)}. \quad (3.21)$$

Pretpostavićemo da je $a < 1$, dok je poslednji integral dobijen smenom $y = \tan[t/2]$, pri čemu su t_α koreni jednačine

$$t^4(1 - a^2) + t^2 2(1 + a^2) + (1 - a^2) = 0. \quad (3.22)$$

Rešenja ove jednačine se lako nalaze

$$t_1 = i\sqrt{\frac{1+a_x}{1-a_x}} \equiv i\sqrt{d}, \quad t_2 = -t_1, \quad t_3 = -\frac{1}{t_1}, \quad t_4 = \frac{1}{t_1}. \quad (3.23)$$

Sva četiri korena su različita pa je moguće iskoristiti razvoj

$$\frac{1 + t^2}{\prod_{\alpha=1}^4 (t - t_\alpha)} = \sum_{\alpha=1}^4 \frac{A_\alpha}{t - t_\alpha}, \quad (3.24)$$

gde su koeficijenti A_α definisani kao

$$A_\alpha = \frac{1 + t_\alpha^2}{\prod_{\beta \neq \alpha} (t_\alpha - t_\beta)}. \quad (3.25)$$

Zamena (3.23) u (3.24) i (3.25) vodi na elementarnu integraciju:

$$\begin{aligned} \int \frac{dy}{1 - a_x^2 \cos^2 y} &= \frac{2A_1}{1 - a^2} \ln \frac{(t - t_1)(t + 1/t_1)}{(t + t_1)(t - 1/t_1)} \\ &= -\frac{2A_1}{1 - a^2} \ln \frac{(t^2 - 1) + i t(\sqrt{d} + \sqrt{1/d})}{(t^2 - 1) - i t(\sqrt{d} + \sqrt{1/d})}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

gde je

$$A_1 = \frac{1}{2} \frac{t_1}{t_1^2 - 1}. \quad (3.27)$$

Pošto je

$$\ln \frac{a + i b}{a - i b} = 2 i \arctan \frac{b}{a}, \quad (3.28)$$

vraćanjem smene i korišćenjem standardnih trigonometrijskih transformacija, dolazi se do [31, 42]

$$\tilde{J}(y, a) = \int \frac{dy}{1 - a^2 \cos^2 y} = \frac{1}{\sqrt{1 - a^2}} \arctan \frac{\tan y}{\sqrt{1 - a^2}}. \quad (3.29)$$

Kako smo pretpostavili da je $a = 1/\eta \leq 1$, računanjem graničnih vrednosti za $y \rightarrow 0$ i $y \rightarrow \pi/2$, nalazimo i $J_1(\eta)$ [31]

$$J_1(\eta) = \frac{1}{\eta \sqrt{1 - (1/\eta)^2}} = \frac{1}{\eta} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, 1; 1; \frac{1}{\eta^2}\right). \quad (3.30)$$

Vidi se da integral $J_1(1)$ divergira.

D = 2

Ako $J_2(\eta)$ prepisemo u obliku

$$J_2(\eta) = \frac{4}{\pi^2 \eta} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{1 - a_x^2 \cos^2 y}, \quad (3.31)$$

pri čemu je a_x definisano u (3.5), koristeći (3.30) nalazimo

$$J_2(\eta) = \frac{2}{\pi \eta} \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{\sqrt{1 - (1/\eta)^2 \cos^2 x}}. \quad (3.32)$$

Prema (3.2) i (3.3), integral $J_2(\eta)$ se može izraziti pomoću hipergeometrijske funkcije [31]

$$J_2(\eta) = \frac{1}{\eta} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; \frac{1}{\eta^2}\right). \quad (3.33)$$

D = 3

Potpuno istim postupkom se nalazi $J_3(\eta)$ [31]

$$\begin{aligned} J_3(\eta) &= \frac{2}{\pi \eta} \int_0^{\pi/2} dz \frac{4}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{1 - b_{xz}^2 \cos^2 y} \\ &= \frac{1}{\eta} {}_3F_2\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 1; \frac{1}{\eta^2}\right), \end{aligned} \quad (3.34)$$

gde je oznaka b_{xz} uvedena u (3.11).

Opšte rešenje

Iz (3.30), (3.33) i (3.34) se vidi da je rešenje za $J_D(\eta)$ moguće napisati u formi uopštene hipergeometrijske funkcije [31]

$$\begin{aligned} J_D(\eta) &= \frac{1}{\pi^D} \prod_{i=1}^D \int_0^\pi dx_i \frac{\eta}{\eta^2 - \prod_{j=1}^D (\cos[x_j/2])^2} \\ &= \frac{1}{\eta} {}_D F_{D-1} \left(\underbrace{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_{D \text{ puta}}; \underbrace{1, 1, \dots, 1}_{D-1 \text{ put}}; \frac{1}{\eta^2} \right), \end{aligned} \quad (3.35)$$

što se lako dokazuje indukcijom. Za $J_D(\eta)$ važe kriterijumi konvergencije već navedeni uz jednačinu (3.15).

Poređenjem opštih rešenja za $I_D(\eta)$ i $J_D(\eta)$ datih u (3.14) i (3.35), vidimo da između njih postoji jednostavna veza [31]

$$I_D(\eta) = \eta J_{D+1}(\eta), \quad \text{ili} \quad J_D(\eta) = \frac{1}{\eta} I_{D-1}(\eta), \quad (3.36)$$

koja će biti od koristi prilikom generalizacije dobijenih rešenja na realne pozitivne vrednosti parametra D .

3.1.4 Integrali $L_D(\eta)$

D – dimenzioni integral Votsonovog tipa, koji se pojavljuje u RPA i Kalenovom izrazu za Kirijeju temperaturu [jednačine(2.24) i(2.33)], može se zapisati kao

$$L_D(\eta) = \frac{1}{\pi^D} \prod_{i=1}^D \int_0^\pi dx_i \frac{1}{\eta - \prod_{j=1}^D \cos x_j}, \quad \eta \geq 1 \quad (3.37)$$

Da bismo našli rešenje, iskoristićemo $[1 - x]^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$ za $|x| < 1$. Integral $L_D(\eta)$ se pomoću ovog razvoja može zapisati kao

$$L_D(\eta) = \frac{1}{\eta} \frac{1}{\pi^D} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\eta}\right)^n \left[\int_0^\pi dx \cos^n x \right]^D. \quad (3.38)$$

Koristeći ponovo $m! = (1)_m$, (3.7) i (3.8), odnosno

$$\int_0^{\pi/2} dz \cos^{2m} z = \pi \frac{(1/2)_m}{(1)_m}, \quad \int_0^{\pi/2} dz \cos^{2m+1} z = 0, \quad (3.39)$$

vidimo da se integral $L_D(\eta)$ svodi na uopštenu hipergeometrijsku funkciju [31]

$$\begin{aligned} L_D(\eta) &= \frac{1}{\pi^D} \prod_{i=1}^D \int_0^\pi dx_i \frac{1}{\eta - \prod_{j=1}^D \cos x_j} = \frac{1}{\eta} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[(1/2)_m]^D}{[(1)_m]^{D-1}} \frac{1}{m!} \frac{1}{\eta^{2m}} \\ &= \frac{1}{\eta} {}_D F_{D-1} \left(\underbrace{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_{D \text{ puta}}; \underbrace{1, 1, \dots, 1}_{D-1 \text{ put}}; \frac{1}{\eta^2} \right). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Poređenjem (3.40) sa (3.35) vidimo da je

$$L_D(\eta) = J_D(\eta). \quad (3.41)$$

Metod pomoću kojeg je izračunat integral $L_D(\eta)$ se lako uopštava na računanje integrala

$$\mathcal{J}_D^f(\eta) = \frac{1}{\pi^D} \prod_{i=1}^D \int_0^\pi dx_i \eta \left[\eta^2 - \prod_{j=1}^D \cos^2 \frac{x_j}{2} \right]^f, \quad f \in \mathbb{R}. \quad (3.42)$$

Pošto je $[1 - x^2]^f = {}_2 F_1(-f, \beta; \beta; x^2)$, za proizvoljno β , gornji integral se svodi na

$$\mathcal{J}_D^f(\eta) = \left(\frac{1}{\eta} \right)^{2f+1} \frac{1}{\pi^D} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-f)_n}{n!} \left(\frac{1}{\eta} \right)^{2n} \left[2 \int_0^{\pi/2} dx \cos^{2n} x \right]^D. \quad (3.43)$$

Konačno, integrali (3.39) daju

$$\mathcal{J}_D^f(\eta) = \left(\frac{1}{\eta} \right)^{2f+1} {}_D F_{D-1} \left(-f, \underbrace{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_{D \text{ puta}}; \underbrace{1, 1, \dots, 1}_{D \text{ puta}}; \frac{1}{\eta^2} \right). \quad (3.44)$$

Očigledno je $I_D(\eta) = \mathcal{J}_D^{-1/2}(\eta)$ i $J_D(\eta) = \mathcal{J}_D^{-1}(\eta)$.

3.2 Uopštavanje rešenja

3.2.1 Asimptotsko ponašanje

Da bismo ispitali asimptotsko ponašanje integrala $I_D(\eta)$ za $\eta \gg 1$, prepisaćemo rešenje (3.14) kao [31]

$$\begin{aligned} I_D(\eta) &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[(1/2)_m]^{D+1}}{[(1)_m]^D} \frac{1}{m! \eta^{2m}} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \right)^{D+1} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\Gamma(m + 1/2)]^{D+1}}{[\Gamma(m + 1)]^D} \frac{1}{m! \eta^{2m}}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Kada je $D \gg 1$ najznačajniji doprinos integralu dolazi od najnižih članova u razvoju. Odnosno,

$$I_D(\eta) = 1 + \frac{1}{\eta^2} \left(\frac{1}{2}\right)^{D+1} + \frac{1}{\eta^4} \left(\frac{3}{8}\right)^{D+1} + \frac{1}{\eta^6} \left(\frac{5}{16}\right)^{D+1} + \frac{1}{\eta^8} \left(\frac{35}{128}\right)^{D+1} + \frac{1}{\eta^{10}} \left(\frac{63}{256}\right)^{D+1} + \frac{1}{\eta^{12}} \left(\frac{231}{1024}\right)^{D+1} + \dots \quad (3.46)$$

Drugim rečima,

$$\lim_{D \rightarrow \infty} I_D(\eta) = 1, \quad \text{za svako } \eta \geq 1. \quad (3.47)$$

Takođe

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} I_D(\eta) = 1, \quad \text{za svako } D \geq 1. \quad (3.48)$$

Niže je pokazano da red (3.45) definiše diferencijabilnu funkciju parametra D , tako da je zamena granične vrednosti $D \rightarrow \infty$ i sumiranja po m korektna. To važi i za drugu graničnu vrednost jer je $I_D(\eta)$ stepeni red po $1/\eta$.

3.2.2 Rešenja za kontinualnu dimenziju

Red iz (3.45) je dobro definisan čak i za necelobrojne vrednosti D . Da bismo to pokazali, definisaćemo funkciju $I(D, \eta)$ kao stepeni red po $1/\eta^2$ [31]

$$I(D, \eta) = \sum_{m=0}^{\infty} \beta(D, m) \left(\frac{1}{\eta^2}\right)^m, \quad \beta(D, m) = \frac{[\Gamma(m+1/2)/\sqrt{\pi}]^{D+1}}{m! [\Gamma(m+1)]^D} = \left[\frac{(1/2)_m}{(1)_m} \right]^{D+1}. \quad (3.49)$$

Notacija $I(D, \eta)$ ukazuje da sada D može uzeti i necelobrojne vrednosti. Konvergenciju reda (3.49) dokazujemo u dve etape.

$\eta = 1$

Neka je prvo $\eta = 1$. Konvergentnost funkcije $I(D, 1)$ se može ispitati Rabeovim testom [41], koji tvrdi da red $\sum_{n=1}^{\infty} a_n$ konvergira ako je

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[n \left(\frac{a_n}{a_{n+1}} - 1 \right) \right] > 1. \quad (3.50)$$

Pošto je $\beta(D, n+1) = (n+1/2)^{D+1} (n+1)^{-D-1} \beta(D, n)$, uslov konvergencije reda $I(D, 1)$ se svodi na

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[n \frac{[n+1]^{D+1} - [n+1/2]^{D+1}}{[n+1/2]^{D+1}} \right] > 1. \quad (3.51)$$

Zadržavajući samo najviše članove u binomnom razvoju, dobijamo

$$[n+1]^{D+1} \approx n^{D+1} + (D+1)n^D, \quad [n+1/2]^{D+1} \approx n^{D+1} + \frac{D+1}{2}n^D, \quad (3.52)$$

tako da (3.51) postaje [31]

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^{D+1}[(D+1) - (D+1)/2]}{n^{D+1}[1 + (D+1)/(2n)]} = \frac{D+1}{2} > 1. \quad (3.53)$$

Dakle, red

$$I(D, 1) = \sum_{m=0}^{\infty} \beta(D, m) \quad (3.54)$$

konvergira za svako pozitivno realno $D > 1$.

$\eta > 1$

Posmatrajmo prvo slučaj $D = 1$ i $\eta > 1$. Tada se red (3.49) svodi na hipergeometrijsku funkciju $I(1, \eta) = {}_2F_1(1/2, 1/2; 1; 1/\eta^2)$ koja konvergira ako je $\eta > 1$. Pošto je za svako $D > 1$

$$\beta(D, m) \leq \frac{(1/2)_m (1/2)_m}{(1)_m m!} = \beta(1, m), \quad (3.55)$$

na osnovu Vajerštrasovog kriterijuma [41] zaključujemo da red (3.49) konvergira i za $D \geq 1$ i $\eta > 1$ [31].

3.2.3 $I(D, \eta)$ kao diferencijabilna funkcija parametra D

U prethodnom odeljku pokazano je da red (3.49) definiše funkciju kontinualne promenljive D , za određeni opseg parametara D i η . Da bismo pokazali da je ova funkcija glatka, odnosno da se red (3.49) može diferencirati član po član, potrebno je da pokažemo uniformnu konvergenciju reda

$$\begin{aligned} I'(D, \eta) &= \sum_{m=0}^{\infty} \partial_D \beta(D, m) \left(\frac{1}{\eta^2} \right)^m \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \beta(D, m) \ln \left[\frac{\Gamma(m+1/2)}{\Gamma(m+1)\sqrt{\pi}} \right] \left(\frac{1}{\eta^2} \right)^m \equiv \sum_{m=0}^{\infty} u(D, m) \left(\frac{1}{\eta^2} \right)^m. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Posmatraćemo prvo slučaj $\eta = 1$. Kada je $\eta > 1$, dokaz se izvodi veoma slično.

Prema Vajerštrasovom kriterijumu uniformne konvergencije, ako postoji niz sa opštim članom M_m , tako da je $|u(D, m)| \leq M_m$, pri čemu red $\sum_{m=1}^{\infty} M_m$ konvergira, red (3.56) zaista konvergira uniformno. Jednostavno ćemo uzeti

$$M_m = \beta(D, m) \left| \ln \left[\frac{\Gamma(m+1/2)}{\Gamma(m+1)\sqrt{\pi}} \right] \right|. \quad (3.57)$$

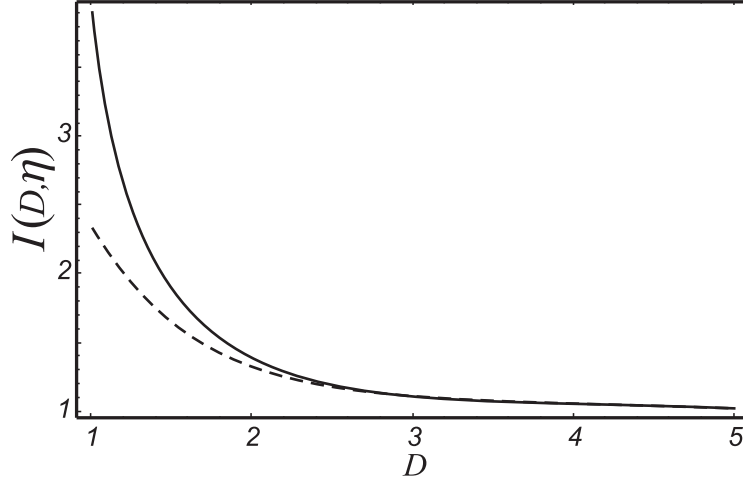
Red koji definiše M_m konvergira, jer je prema Rabeovom testu

$$\begin{aligned} &\lim_{m \rightarrow \infty} \left[m \left(\frac{M_m}{M_{m+1}} - 1 \right) \right] \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \left[m \left(\frac{\beta(D, m) \left| \ln \frac{\Gamma(m+1/2)}{\Gamma(m+1)\sqrt{\pi}} \right|}{\beta(D, m+1) \left[\left| \ln \frac{\Gamma(m+1/2)}{\Gamma(m+1)\sqrt{\pi}} \right| + \left| \ln \frac{m+1/2}{m+1} \right| \right]} - 1 \right) \right] \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \left[m \left(\frac{\beta(D, m)}{\beta(D, m+1)} - 1 \right) \right] = \frac{D+1}{2} > 1. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Sledi da je red po M_m konvergentan za $D > 1$, pa je i $I'(D, 1)$ uniformno konvergentan za $D > 1$. Kada je $\eta > 1$, važi $u(D, m)/\eta^2 < u(D, m)$ i red sigurno konvergira za $D > 1$. Pošto je

$$\begin{aligned} \lim_{m \rightarrow \infty} \left[m \left(\frac{M_m \eta^{-2m}}{M_{m+1} \eta^{-2m-2}} - 1 \right) \right] &= \lim_{m \rightarrow \infty} \left[\eta^2 m \left(\frac{M_m}{M_{m+1}} - 1 \right) + m(\eta^2 - 1) \right] \\ &= \eta^2 \frac{D+1}{2} + m(\eta^2 - 1) \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (3.59)$$

vidi se da red (3.56) konvergira i za $D = 1$ kad je $\eta > 1$.



Slika 3.1: Integral Votsonovog tipa $I(D, \eta)$ kao funkcija kontinualnog parametra D izračunat prema (3.60). Punoj liniji odgovara $\eta = 1$, dok je za isprekidanu $\eta = 1.005$

Na Sl. 3.1 je prikazan integral $I(D, \eta)$ kao funkcija kontinualne promenjive D za $\eta = 1$ i $\eta = 1.005$. Ove vrednosti parametra η su interesantne jer $\eta = 1$ odgovara izotropnom HAFM dok se vrednosti $\eta \sim 1.005$ pojavljuju kod realnih jedinjenja [9, 31]. Prilikom računanja $I(D, \eta)$ je korišćena aproksimativna formula

$$I(D, \eta) = \sum_{m=0}^M \beta(D, m) \left(\frac{1}{\eta^2} \right)^m, \quad (3.60)$$

za $M = 10^4$ [31]. Kada je $\eta = 1$, suma iz (3.60) sporo konvergira i u blizini tačke divergencije ($\eta = D = 1$) poslednji zadržani sabirak doprinosi sa 3.02×10^{-5} . Kako D raste, konvergencija se ubrzava i greška aproksimacije (3.60) se smanjuje. Konvergencija sume je mnogo brža za $\eta = 1.005$ kada je greška aproksimacije $< 1.42 \times 10^{-48}$.

Što se tiče integrala $J_D(\eta)$, i rešenje (3.35) se može uopštiti tako da obuhvati kontinualne vrednosti parametra D . Na taj način dobijamo funkciju $J(D, \eta)$, koja se može definisati pomoću (3.36):

$$J(D, \eta) = \frac{1}{\eta} I(D-1, \eta). \quad (3.61)$$

Za celobrojne vrednosti parametra D , funkcije $I(D, \eta)$ i $J(D, \eta)$ se svode na generalisane hipergeometrijske funkcije (3.14) i (3.35). Primena funkcija $I(D, \eta)$ i $J(D, \eta)$ na HAFM je data niže u radu.

3.3 Hajzenbergov model u RPA slici

U ovom odeljku ćemo primeniti analitička rešenja na Hajzenbergov model. Najpre su diskutovani osnovno stanje i kritična temperatura u okviru RPA prilaza, dok na kraju dajemo poređenje sa rezultatima kalenovske linearizacije.

3.3.1 Osnovno stanje HAFM

$D = 1$ i Kolmenova teorema

Jednačina (2.18) zajedno sa (2.77) određuje RPA magnetizaciju podrešetke HAFM u osnovnom stanju. Ovde ih prepisujemo sa malo izmenjenim oznakama koje treba da naglase uticaj broja prostornih dimenzija antiferomagnetne rešetke

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle_0^D(\eta) &= \frac{[S - P_D(\eta)][1 + P_D(\eta)]^{2S+1} + [S + 1 + P_D(\eta)][P_D(\eta)]^{2S+1}}{[1 + P_D(\eta)]^{2S+1} - [P_D(\eta)]^{2S+1}}, \\ P_D(\eta) &= \frac{1}{2} [I_D(\eta) - 1]. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Integral $I_D(\eta)$ je detaljno rešen u odeljku 3.1, tako da se sada mogu izvući zaključci o uticaju dimenzije sistema D i spinske anizotropije η na osnovno stanje HAFM na zapreminski centriranoj rešetki.

Iz opštih uslova konvergencije hipergeometrijskog reda (3.15) jasno je da integral $I_1(1)$ divergira. U tom slučaju se lako pokazuje da važi $\langle S^z \rangle_0^1 \propto [P_1(1)]^{-1} \rightarrow 0$. Dakle, ako je jednodimenzioni model izotropan, bez obzira na vrednost spina S , osnovno stanje mu je neuređeno (parametar uređenosti je jednak nuli). Drugim rečima, kod izotropnog jednodimenzionog antiferomagneta nema spontanog narušavanja simetrije i Goldstonovi bozoni se ne pojavljuju u spektru. Na ovaj način se pokazuje da RPA rešenje zadovoljava Kolmenovu teoremu [44], koja važi za Lorenc-invarijantne teorije u 1+1 dimenzija. U drugom delu disertacije će biti više reči o vezi 1D HAFM i Lorenc-invarijantne efektivne teorije (tzv. nelinearni σ model). Situacija je drugačija kod anizotropnog modela. Za $\eta > 1$, integral $I_1(\eta)$ je konačan i dugodometno uređenje postoji na $T = 0$ K.

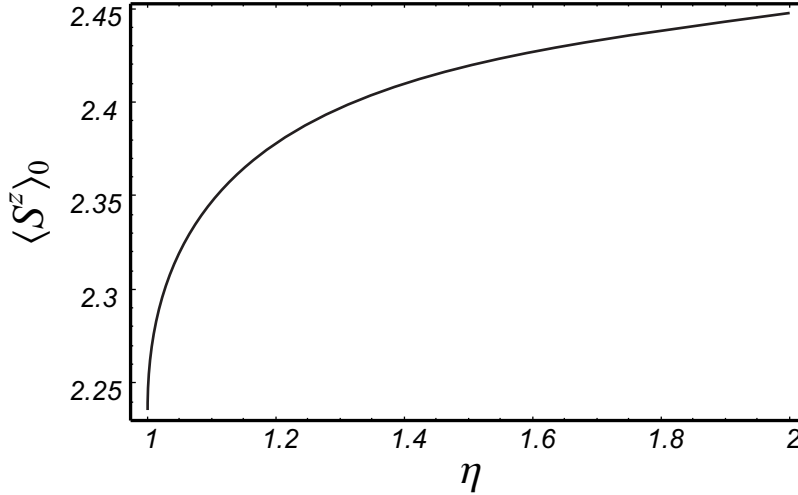
$D > 1$

Integral $I_D(1)$ konvergira za $D > 1$, što znači da se HAFM odlikuje dugodometnim uređenjem na $T = 0$ K kada je $D > 1$. Ovim je pokazano da RPA rešenje daje rezultate u saglasnosti sa dokazanim postojanjem dugodometnog uređenja u osnovnom stanju izotropnog HAFM na kvadratnoj rešetki [47]. Dugodometno uređenje sigurno postoji za $D \geq 3$, pa je 2D HAFM posebno interesantan. Pošto je $I_2(1) = \pi[\Gamma(3/4)]^{-4} \approx 1.39$, iz (3.62) lako dobijamo LSW rezultat

$$\langle S^z \rangle_0^{D=2} \approx S - \frac{1}{2} [I_2(1) - 1] \approx S - 0.196. \quad (3.63)$$

Ranije je naglašeno da $|Nel\rangle$ nije pravo osnovno stanje kvantnog HAFM. U RPA pristupu, kao i u linearnoj teoriji spinskih talasa, to se ogleda u redukciji magnetizacije podrešetke kao posledice kvantnih fluktuacija. Sa povećanjem spinske anizotropije raste masa magnona (videti drugi deo disertacije) i oni se sve teže pobuđuju. Konačno, za $\eta \rightarrow \infty$ imamo $I_D(\eta) \rightarrow 1$ [videti

(3.48)]. Dakle, kvantne fluktuacije su potpuno potisnute u slučaju ekstremno velike spinske anizotropije. To se i očekuje, jer tada hamiltonijan (1.1) prelazi u hamiltonijan uopštenog ($S \neq 1/2$) Izingovog modela, čije je osnovno stanje $|\text{Nel}\rangle$.



Slika 3.2: Magnetizacija osnovnog stanja 2D HAFM kao funkcija spinske anizotropije prema (3.62). $S = 5/2$.

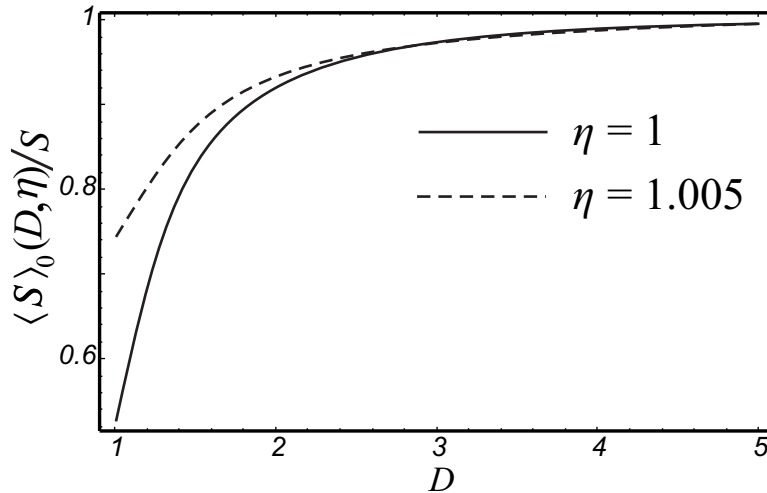
Na Sl.3.2 je prikazana zavisnost magnetizacije podrešetke od spinske anizotropije za $S = 5/2$ dvodimenzioni HAFM [9]. Prema (3.62), Magnetizacija osnovnog stanja izotropnog modela je $\langle S^z \rangle_0^{D=1}(1) = 2.32338$, dok je LSW rezultat (3.63), $\langle S^z \rangle_0^{D=1}(1) = 2.3034$.

Kontinualna dimenzija

Analiza iz odeljka 3.2 govori da je rešenje integrala $I_D(\eta)$ moguće uopštiti tako da parametar D uzme kontinualne vrednosti. Na taj način se dolazi do zanimljivog rezultata. Pomoću funkcije $I(D, \eta)$ može se izračunati magnetizacija podrešetke osnovnog stanja HAFM i kada je dimenzija D necelobrojna [31]. Tretiranje dimenzije kao kontinualnog parametra je dobro poznato u kvantnoj teoriji polja [30, 45], a koristi se i u tehnikama renormalizacije grupe [46]. Za razliku od [30, 45, 46] gde se (uglavnom) razmatraju sferno-simetrični integrali, u $I_D(\eta)$ i $J_D(\eta)$ ulazi geometrijski faktor $\gamma_D(\mathbf{k})$. Zbog toga rešenja iz ovog teksta sadrže punu simetriju zapreminski centrirane rešetke u D dimenzija.

Ako u (3.62) umesto $I_D(\eta)$ stavimo $I(D, \eta)$ dobijamo RPA magnetizaciju podrešetke u osnovnom stanju za necelobrojno D [31], što je prikazano na Sl. 3.3. Izbor $\eta = 1.005$ je motivisan vrednostima spinske anizotropije koje karakterišu manganove halogenide (videti Glavu 4)

Iz (3.47) i (3.62) sledi da $\langle S^z \rangle_0^D \rightarrow S$ kada D raste, što znači da se tada i kvantne fluktuacije smanjuju. Konačno, u limesu $D \rightarrow \infty$, kvantne fluktuacije iščezavaju. Prema opštim kriterijumima konvergencije za funkciju $I(D, \eta)$ [videti (3.54) i (3.55)], sledi da uređeno osnovno stanje postoji tek kada je $\eta = 1$ i $D > 1$, odnosno kada je $D = 1$ i $\eta > 1$, u skladu sa Kolmenovom teoremom.



Slika 3.3: Relativna magnetizacija osnovnog stanja HAFM $\langle S^z \rangle_0^D / S$, sa dimenzijom D kao kontinualnim parametrom. Punoj liniji odgovara $\eta = 1$, dok je za isprekidanu $\eta = 1.005$. Za obe krive je $S = 5/2$ (prema [31])

Treba napomenuti da ovakvo uopštavanje na necelobrojno D nije jednoznačno i da su mogući i drugačiji postupci [31], kako za ekstrapolaciju integrala $I_D(\eta)$ na $I(D, \eta)$, tako i za definisanje $\langle S^z \rangle_0^D$ za necelobrojno D .

3.3.2 Kritična temperatura

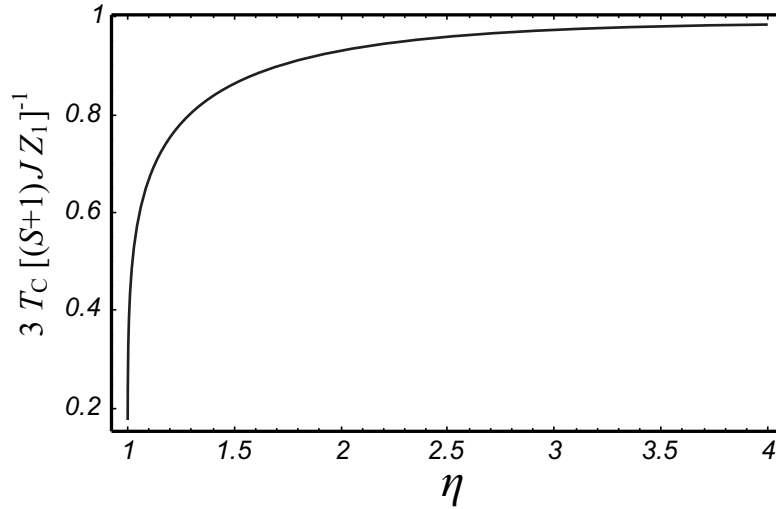
Ranije u odeljku 3.3 [jednačina (3.41)] smo pokazali da je $L_D(\eta) = J_D(\eta)$. Prema tome [videti (2.24) i (2.87)], tjablikovska linearizacija predviđa isto ponašanje Kirijeve i Nelove temperature u zavisnosti od D i η (videti i [2,39]). Zbog toga ćemo u nastavku jednostavno govoriti o kritičnoj temperaturi Hajzenbergovog modela, podrazumevajući da dobijeni rezultati važe kako za HFM tako i za HAFM. Kalenova linearizacija takođe predviđa isti oblik rešenja za Nelovu i Kirijevu temperaturu. Naravno, kritične temperature koje predviđaju RPA i kalenovska linearizacija se međusobno razlikuju i nešto kasnije će biti reči o njihovom odnosu.

Mermin-Vagnerova teorema

Kako je već naglašeno u odeljku 2.1.2, spontano narušavanje simetrije u 1D i 2D izotropnom Hajzenbergovom modelu na konačnim temperaturama nije moguće. Da bismo pokazali kako metod Tjablikova daje rešenje u saglasnosti sa Mermin-Vagnerovom teoremom, poći ćemo od RPA izraza za kritičnu temperaturu (2.87)

$$T_C(D, \eta) = \frac{S(S+1)}{3} \frac{JZ_1}{J_D(\eta)}. \quad (3.64)$$

Pošto integrali $J_1(1)$ i $J_2(1)$ divergiraju (videti (3.30) i kriterijum konvergencije uz (3.15)), iz (3.64) se dobija $T_C(1, 1) \rightarrow 0$, kao i $T_C(2, 1) \rightarrow 0$. To znači da dugodometno uređenje ne postoji u izotropnim 1D i 2D HAFM na zapreminski centriranoj rešetki na konačnim temperaturama, u skladu sa Mermin-Vagnerovom teoremom. Sa stanovišta Mermin-Vagnerove i Kolmenove teoreme, izotropni 2D HAFM je veoma zanimljiv. Videli smo da taj model poseduje dugodometno uređenje na $T = 0$ K. Međutim, termalne fluktuacije uništavaju dugodometno uređenje na konačnim temperaturama [1].



Slika 3.4: Redukovana kritična temperatura $3T_C[S(S+1)JZ_1]^{-1}$ za 2D HAFM kao funkcija spinske anizotropije ($S = 5/2$).

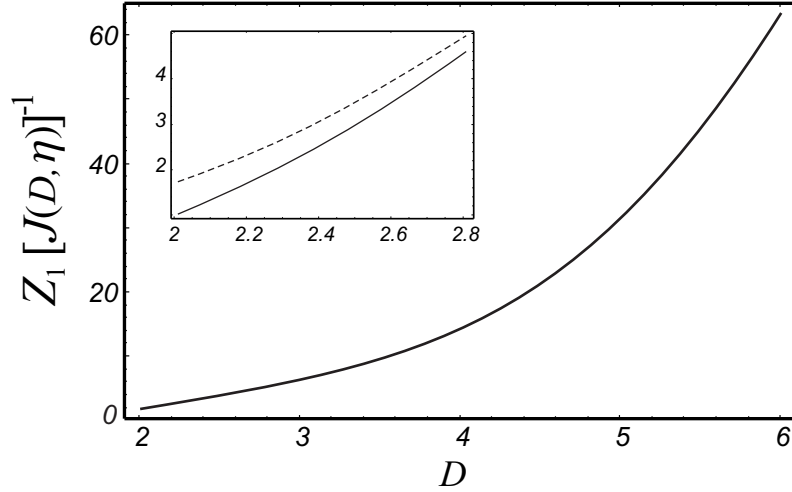
Za jako velike vrednosti spinske anizotropije, RPA kritična temperatura raste linearno sa spinskom anizotropijom. Da bismo to pokazali, krenućemo od veze (3.36) i (3.46). Iz ove dve jednačine se za $\eta \gg 1$ dobija $J_D(\eta) \approx 1/\eta$, tako da je za jako anizotropni model $T_C(D, \eta) \approx JZ_1 S(S+1)\eta/3$. Ispostavlja se da ovo rešenje opisuje uopšteni Izingov model za spin S sa integralom izmene $J\eta$ u teoriji srednjeg polja [49]. Dakle, graničnu vrednost $\eta \rightarrow \infty$ treba shvatiti uslovno, u smislu aproksimacije Hajzenbergovog modela Izingovim. Svakako, Izingov model sa konačnim integralom izmene ima konačnu kritičnu temperaturu.

Na Sl. 3.4 je prikazan uticaj spinske anizotropije na kritičnu temperaturu kod 2D Hajzenbergovog modela za $S = 5/2$. Tačnije, na ordinatnoj osi je redukovana kritična temperatura $3T_C[S(S+1)JZ_1]^{-1}$. Kada se uzme u obzir samousaglašenost RPA jednačina, nalazi se da je $T_C(\eta \gg 1) \approx (S+1)\omega(\pi/a, 0)/3$, gde je $\omega(\pi/a, 0)$ energija magnona sa talasnim vektorom $\mathbf{k} = [\pi/a, 0]^T$ [49]. Dakle, RPA rešenje predviđa konačnu vrednost kritične temperature i u slučajevima velikih anizotropija.

Kontinualna dimenzija

RPA kritična temperatura (3.64) se takođe može uopštiti na necelobrojno D . Samo je potrebno umesto integrala $J_D(\eta)$ [odnosno $L_D(\eta)$] koristiti funkciju $J(D, \eta)$ uvedenu u (3.61).

U ovom slučaju je pogodno promeniti definiciju redukovane kritične temperature i uzeti $3T_N(D)[JS(S+1)]^{-1} = Z_1(D)/J(D, \eta)$. Na Sl. 3.5 je prikazana zavisnost redukovane kritične temperature od prostorne dimenzije sistema. Svi zaključci u vezi Mermin-Vagnerove teoreme ostaju na snazi i za kontinualno D . Pri $D \rightarrow \infty$ važi $J(D, \eta) \rightarrow 1$, pa vidimo da za $D \gg 1$ Nelova temperatura raste kao 2^D .



Slika 3.5: Redukovana kritična temperatura $3T_N[S(S+1)]^{-1}$ za HAFM kao funkcija prostorne dimenzije rešetke. Punoj liniji odgovara $\eta = 1$, dok je za isprekidanu $\eta = 1.005$. Umetak prikazuje region u okolini $D = 2$. $S = 5/2$ (prema [31])

3.4 Kritična temperatura u Kalenovom prilazu

Postoje dva osnovna načina na koji se mogu porediti kritične temperature u okviru različitih prilaza. Prvi je posmatranje apstraktnog Hajzenbergovog modela, lišenog eksperimentalne realizacije, sa fiksnim vrednostima J i η . Jednačine (2.24) sa jedne i (2.33), (2.34) i (2.35) sa druge strane, zajedno sa analitičkim rešenjima Votsonovih integrala, u potpunosti određuju kritičnu temperaturu u RPA i Kalenovom prilazu. Drugi način je vezivanje za eksperimentalne podatke o magnonskoj disperziji, što nužno vodi do različitih vrednosti parametara J i η u RPA i kalenovskoj linearizaciji. O drugom tipu poređenja će biti reči u narednoj Glavi kada budu diskutovani halogenidi mangana. Analiza iz ovog poglavlja je ograničena na apstraktni Hajzenbergov model.

3.4.1 Izotropni model

Radi preglednosti, prepisaćemo na ovom mestu jednačine koje određuju kritičnu temperaturu u Kalenovoj linearizaciji:

$$T_C^{\text{CA}}(D, \eta) = \frac{S(S+1)}{3} \frac{\tilde{J}_C Z_1}{J_D(\tilde{\eta}_C)}, \quad (3.65)$$

$$\tilde{J}(T) = J \left(1 - \frac{\eta f(T)}{2S^2} \right), \quad \tilde{\eta}(T) = \frac{\eta - f(T)/(2S^2)}{1 - \eta f(T)/(2S^2)} \quad (3.66)$$

$$f(T_C) = -\frac{2S(S+1)\tilde{\eta}_C}{3} \left[1 - \frac{1}{\tilde{\eta}_C J_D(\tilde{\eta}_C)} \right], \quad (3.67)$$

pri čemu je $\tilde{J}_C = \tilde{J}(T_C)$, $\tilde{\eta}_C = \tilde{\eta}(T_C)$. Kao što je ranije primećeno, u slučaju izotropnog modela je $\tilde{\eta}(T) = 1$. Jednačina (3.67) tada direktno daje $f(T_C)$, pa je kritična temperatura D – dimenzionog izotropnog Hajzenbergovog modela u Kalenovoj linearizaciji data sa [3] (videti

takođe i [40])

$$T_C^{\text{CA}}(D, 1) = \left[1 + \frac{S+1}{3S} \left(1 - \frac{1}{J_D(1)} \right) \right] T_C^{\text{RPA}}(D, 1), \quad (3.68)$$

$$T_C^{\text{RPA}}(D, 1) = \frac{S(S+1)}{3} \frac{JZ_1}{J_D(1)}. \quad (3.69)$$

Imajući u vidu da je za konačno D uvek $J_D(1) > 1$, vidimo da je za izotropni model

$$\frac{T_C^{\text{CA}}(D, 1)}{T_C^{\text{RPA}}(D, 1)} = \left[1 + \frac{S+1}{3S} \left(1 - \frac{1}{J_D(1)} \right) \right] \geq 1. \quad (3.70)$$

Razlika između RPA i Kalenove vrednosti za kritičnu temperaturu nije velika jer je $J_D(1) \approx 1$ za $D \geq 3$. Konkretno, $1 - 1/J_3(1) \approx 0.28223$, $1 - 1/J_4(1) \approx 0.106054$, $1 - 1/J_5(1) \approx 0.044731$. Jednakost se dobija za $D \rightarrow \infty$, jer je $\lim_{D \rightarrow \infty} J_D(1) = 1$ [videti (3.47) i (3.36)]. Takođe, iz (3.68) je očigledno da i Kalenovo rešenje zadovoljava Mermin-Vagnerovu teoremu.

3.4.2 Anizotropni model

Anizotropni model je komplikovaniji za analizu, jer se jednačina (3.67), osim kod jednodimenzionog modela može rešavati samo numerički. Ipak, u slučaju male $g \ll 1$ i velike anizotropije Izingovog tipa ($g \gg 1$), moguće je dobiti analitičke rezultate [3].

Aproksimativni izraz za kritičnu temperaturu

Pošto je razlika između kritičnih temperatura koje predviđaju RPA i Kalenova linearizacija za izotropni model ($D \geq 3$) mala, za očekivati je da tako ostane i prilikom postojanja konačne, ali male, spinske anizotropije ($g \ll 1$). Zbog toga ćemo potražiti rešenja za $T_C^{\text{CA}}(D, 1 + g)$ linearna po g . Uvodeći oznaku $f_C \equiv f(T_C)/(2S^2)$, iz (3.66) nalazimo $\tilde{\eta}_C \approx \eta + 2gf_C$. Samousaglašena jednačina (3.67) se sada može aproksimirati sa

$$\begin{aligned} f_C &\approx -[\eta + 2gf_C]B_D(\eta), \\ B_D(\eta) &= \frac{S+1}{3S} \left[1 - \frac{1}{\eta J_D(\eta)} \right]. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Primetićemo da je

$$0 \leq B_D(\eta) \leq 1, \quad (3.72)$$

jer $(S+1)/(3S)$ uzima vrednosti na intervalu $[1/3, 1]$, dok je

$$0 \leq 1 - \frac{1}{\eta J_D(\eta)} = 1 - \left[{}_{D+1}F_D \left(\underbrace{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_{D \text{ puta}}, \underbrace{1, 1, \dots, 1}_{D-1 \text{ put}}, \frac{1}{\eta^2} \right) \right]^{-1} \leq 1. \quad (3.73)$$

Iz (3.71) je $f_N \approx -\eta B_D(\eta)[1 + 2gB_D(\eta)]^{-1}$

$$\tilde{\eta}_C \approx \eta[1 - 2gB_D(\eta)], \quad \tilde{J}_C \approx J \left[1 + B_D(\eta) \left\{ 1 + 2g(1 - B_D(\eta)) \right\} \right]. \quad (3.74)$$

Zamenom linearizovanih rešenja (3.74) u Kalenovu jednačinu za određivanje kritične temperature, dobijamo

$$T_C^{\text{CA}}(D, 1+g) \approx \frac{S(S+1)JZ_1}{3} \frac{1+B_D(\eta)[1+2g\{1-B_D(\eta)\}]}{J_D(\eta-2g\eta B_D(\eta))} \quad (3.75)$$

Sada ćemo naći aproksimativni izraz za hipergeometrijsku funkciju u imeniocu (3.75), tako da direktno povežemo Kalenovu i RPA kritičnu temperaturu. Stavljajući $[\eta-2g\eta B_D(\eta)]^{-2} \approx [1+4gB_D(\eta)]/\eta^2$, možemo pisati

$${}_D F_{D-1} \left(\underbrace{\frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_{D \text{ puta}}; \underbrace{1, \dots, 1}_{D-1 \text{ put}}; \frac{1}{[\eta-2g\eta B_D(\eta)]^2} \right) \approx \sum_{n=0}^{\infty} (1)_n \left[\frac{(1/2)_n}{(1)_n} \right]^D \frac{[1+4gB_D(\eta)]^n}{n! \eta^{2n}}. \quad (3.76)$$

Zadržavajući samo linearne članove po g i koristeći poznatu veze $(a)_{m+1} = (a+1)_m \Gamma(a+1)/\Gamma(a)$, kao i $\Gamma(3/2)/\Gamma(1/2) = 1/2$, konačno dobijamo

$$J_D(\eta-2g\eta B_D(\eta)) \approx \frac{J_D(\eta)}{1-2gB_D(\eta)} \left[1 + \frac{4gB_D(\eta)C_D(\eta)}{\eta J_D(\eta)} \right], \quad (3.77)$$

gde je [3]

$$C_D(\eta) = \frac{1}{\eta^{2D}} {}_D F_{D-1} \left(\underbrace{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{3}{2}}_{D \text{ puta}}; \underbrace{2, 2, \dots, 2}_{D-1 \text{ put}}; \frac{1}{\eta^2} \right). \quad (3.78)$$

Zamenjujući (3.77) u (3.75) i zadržavanjem linearnih članova po g , dobijamo formulu za aproksimativno računanje kritične temperature u Kalenovoj linearizaciji

$$T_C^{\text{CA}}(D, \eta) \approx \left[1 + \left\{ 1 - \frac{4gC_D(\eta)[1+B_D(\eta)]}{\eta J_D(\eta)} - 2gB_D(\eta) \right\} B_D(\eta) \right] T_C^{\text{RPA}}(D, \eta). \quad (3.79)$$

Imajući u vidu da je $0 \leq B_D(\eta) \leq 1$, vidimo da se efekat Kalenove linearizacije ogleda u smanjenju spinske anizotropije i povećanju integrala izemene. Konačni učinak te aproksimacije je povećanje kritične temperature za $D \geq 2$ i njeno smanjenje za $D = 1$, u odnosu na RPA rezultat. Sada ćemo to detaljnije pokazati tako što ćemo potvrditi da je izraz u vitičastoj zagradi u (3.79) veći od 1 ako je $D \geq 2$, odnosno da je manji od 1 ako je $D = 1$.

Računanje graničnih vrednosti za $D \geq 2$

Da bismo dokazali kako je $T_C^{\text{CA}}(D, \eta) > T_C^{\text{RPA}}(D, \eta)$ za $D \geq 2$, treba da pokažemo kako je $\{1 - [4gC_D(1+B_D)]/[\eta J_D] - 2gB_D(\eta)\} > 0$ u graničnom slučaju $g \rightarrow 0$. Pri tome je dovoljno da se skoncentrišemo na član $4gC_D(\eta)/[\eta J_D(\eta)]$, jer je $\lim_{g \rightarrow 0} [gB_D(1+g)] = 0$, dok je $B_D(1+g) \leq 1/3$. Računanje graničnih vrednosti se pojednostavljuje ako primetimo da je [3]

$$C_D(\eta) = -\frac{\eta}{2} \partial_{\eta} [\eta J_D(\eta)]. \quad (3.80)$$

Posmatrajmo prvo dvodimenzioni model ($D = 2$). Tada je $J_2(\eta) = 2/(\eta \pi)\mathcal{K}(1/\eta)$, gde je \mathcal{K} potpuni eliptički integral prve vrste. Pošto je

$$\partial_\eta [\eta J_2(\eta)] = -\frac{1}{\eta^2} \frac{2}{\pi} \mathcal{K}'\left(\frac{1}{\eta}\right) \quad (3.81)$$

i [50]

$$\partial_x \mathcal{K}(x) = \frac{\mathcal{E}(x) - (1-x^2)\mathcal{K}(x)}{x(1-x^2)} \quad (3.82)$$

nalazimo

$$C_2(\eta) = \frac{\eta^2}{\pi} \frac{\mathcal{E}(1/\eta)}{\eta^2 - 1} - \frac{1}{\pi} \mathcal{K}(1/\eta) \quad (3.83)$$

U gornjim jednačinama $\mathcal{E}(1/\eta)$ označava potpuni eliptički integral druge vrste [41]. Sada je lako pokazati da je

$$\lim_{\eta \rightarrow 1} \frac{4gC_2(\eta)[1 + B_2(\eta)]}{\eta J_2(\eta)} = \lim_{\eta \rightarrow 1} \frac{\mathcal{E}(1/\eta)}{\mathcal{K}(1/\eta)} \left[1 + \frac{S+1}{3S}\right] = 0, \quad (3.84)$$

jer je $\mathcal{E}(1) = 1$ i $\lim_{x \rightarrow 1} \mathcal{K}(x) = \infty$. Na ovaj načina smo pokazali da za slučaj veoma male anizotropije, kod 2D modela, važi $\{1 - [4gC_D(1 + B_D)]/[\eta J_D] - 2gB_D(\eta)\} > 0$.

Za trodimenzioni slučaj je [50]

$$J_3(\eta) = \frac{1}{\eta} \frac{4}{\pi^2} \mathcal{K}^2 \left(\sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{1}{\eta^2}}\right)} \right). \quad (3.85)$$

Integral $J_3(1)$ konvergira ($J_3(1) = \pi[\Gamma(3/4)]^{-4} \approx 1.4$) pa treba samo da se pokaže kako je $\lim_{\eta \rightarrow 0} (\eta - 1)C_3(\eta) = 0$. Koristeći (3.85) i (3.80)

$$C_3(\eta) = -\frac{\eta}{2} \frac{4}{\pi^2} [\partial_x \mathcal{K}^2(x)] \partial_\eta x, \quad x = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{1}{\eta^2}}\right)}. \quad (3.86)$$

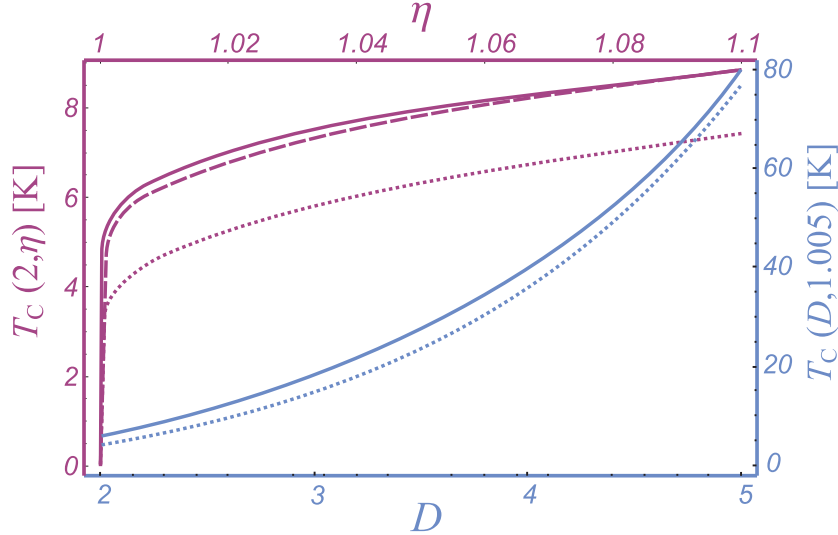
Na osnovu jednakosti (3.82) i $\lim_{\eta \rightarrow 1} \mathcal{K}(x) = \mathcal{K}(\sqrt{1/2}) \approx 2.4$, $\lim_{\eta \rightarrow 1} \mathcal{E}(x) = \mathcal{E}(\sqrt{1/2}) \approx 1.15$, pokazuje se da je u limesu $\eta \rightarrow 1$ veličina $[\partial_x \mathcal{K}^2(x)]$ konačna. Dakle, ostaje [3]

$$\lim_{\eta \rightarrow 1} (\eta - 1)C_3(\eta) \sim \lim_{\eta \rightarrow 1} (\eta - 1) \partial_\eta x = \lim_{\eta \rightarrow 1} (\eta - 1) \frac{1}{\sqrt{(\eta - 1)(\eta + 1)}} = 0. \quad (3.87)$$

Pošto je $C_D(\eta) \leq C_3(\eta)$ za $D > 3$, pokazali smo da je $\lim_{\eta \rightarrow 1} 4(\eta - 1)C_D(\eta)/J_D(\eta) = 0^1$.

Aproksimativni izraz (3.79) se vrlo dobro slaže sa numeričkim rezultatima dobijenim na osnovu sistema (3.65) – (3.67). Na primer, za dvodimenzioni model sa paramterima $J = 10$ K, $\eta = 1.005$ i $S = 3/2$, sistem (3.65) – (3.67) daje $T_C^{\text{CA}} = 26.0955$ K, dok jednačina (3.79) daje $T_C^{\text{CA}} = 26.3295$ K, tako da je relativno odstupanje numeričkog i analitičkog rezultata $\delta \approx 0.89\%$ (zabeležićemo da je $T_C^{\text{RPA}} = 21.3369$ K). Tačnost aproksimativne formule (3.79) se povećava sa porastom parametara S i D , dok se svodi na (3.68) pri $g = 0$ [3].

¹Primećujemo da na osnovu kriterijuma konvergencije za hipergeometrijske funkcije, iznetih ispod jednačine (3.15), sledi da $C_D(1)$ konvergira za $D > 4$



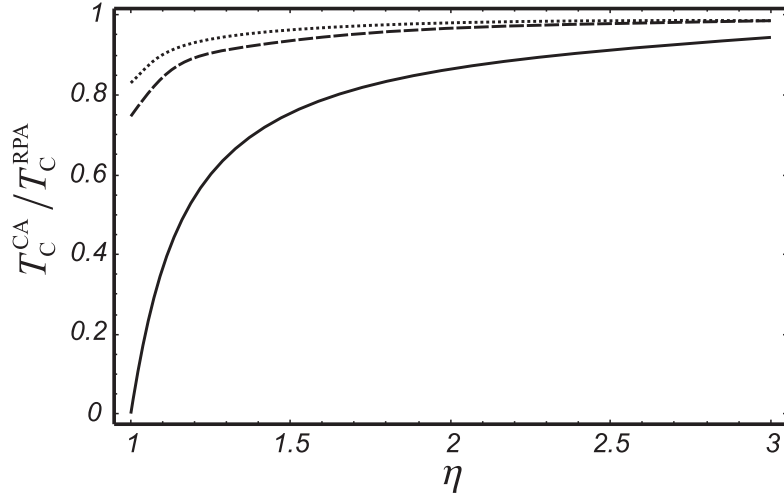
Slika 3.6: Kritična temperatura 2D Hajzenbergovog modela u funkciji spinske anizotropije $\eta = 1 + g$ (gornje tri krive, leva i gornja osa): RPA rezultat [tačkasta kriva], Kalenov rezultat dobijen numeričkim rešavanjem jednačina (3.65) – (3.67) [isprekidana kriva] i Kalenov rezultat dobijen pomoću analitičkog rešenja (3.79) [glatka kriva]. Na grafiku je prikazana i Kritična temperatura anizotropnog [$\eta = 1 + 0.005$] Hajzenbergovog modela u funkciji kontinualnog parametra D [donje dve krive, donja i desna osa]: RPA rezultat [tačkasta kriva] i Kalenov rezultat dobijen pomoću (3.79) [glatka kriva]. $S = 5/2$ i $J = 10$ K za sve krive (prema [3])

Konačno, primećujemo da (3.79) važi i u slučaju velike anizotropije Izingovog tipa $g \gg 1$. Tada je mali parametar razvoja $B_D(\eta)$, jer je $\lim_{\eta \rightarrow \infty} B_D(\eta) = 0$, dok je

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} \frac{(\eta - 1)C_D(\eta)}{\eta J_D(\eta)} = \frac{2^{2-D}}{\eta} = 0. \quad (3.88)$$

Takođe, u slučaju velike anizotropije važi i $\lim_{\eta \rightarrow \infty} [\eta B_D(\eta)] = 0$, što se lako dokazuje korišćenjem asimptotske forme za $I_D(\eta)$ i veze (3.36).

Numerička računanja podržavaju zaključke dobijene na osnovu analitičkog izraza (3.79). Na Sl. 3.6 je prikazana kritična temperatura 2D Hajzenbergovog modela u funkciji spinske anizotropije (gornje tri krive) izračunata u RPA (2.87) i u Kalenovoj linearizaciji. Pri tome su za računanje kritične temperature u Kalenovoj aproksimaciji korišćena numerička rešenja sistema (3.65) – (3.67) [gornja isprekidana kriva], kao i analitičko rešenje (3.79) [gornja glatka kriva]. Jasno se uočava da oblast primenjivosti aproksimativne formule (3.79) nije ograničena samo na $g \ll 1$ i $g \gg 1$. Aproksimativni izraz za kritičnu temperaturu u Kalenovoj linearizaciji (3.79) poseduje još jednu zanimljivu osobinu [3]. Lako je pokazati da red koji definiše uopštenu hipergeometrijsku funkciju iz (3.78) konvergira za svako $D > 1$ ako je $\eta > 1$. Tako se Kalenov rezultat za kritičnu temperaturu može uopštiti na kontinualne vrednosti parametra D , po uzoru na RPA iz odeljka 3.3. Na Sl. 3.6. je prikazana kritična temperatura anizotropnog Hajzenbergovog modela ($\eta = 1 + 0.005$), dobijena u RPA i Kalenovoj linearizaciji, sa kontinualnim parametrom D . Ponovo dobijamo da je $T_C^{\text{CA}}(D, \eta) > T_C^{\text{RPA}}(D, \eta)$ za $D > 2$. Konačno, jasno je da povećanje S smanjuje razliku između RPA i Kalenove vrednosti za kritičnu temperaturu u svim slučajevima [3].



Slika 3.7: Odnos T_C^{CA}/T_C^{RPA} za jednodimenzioni Hajzenbergov model. Puna, isprekidana i tačkasta linija odgovaraju modelima sa $S = 1/2$, $S = 1$ i $S = 3/2$, respektivno (prema [3]).

Računanje graničnih vrednosti za $D = 1$

Za jednodimenzioni model je $J_1(\eta) = [\eta^2 - 1]^{-1/2}$, $C_1(\eta) = \eta/2[\eta^2 - 1]^{-3/2}$, pa nalazimo

$$\lim_{\eta \rightarrow 1} 4 \frac{(\eta - 1)C_1(\eta)}{\eta J_1(\eta)} = 1, \quad \lim_{\eta \rightarrow 1} B_1(\eta) = \frac{S + 1}{3S} \equiv \frac{1}{\delta}. \quad (3.89)$$

Odnosno

$$\lim_{\eta \rightarrow 1} \frac{T_C^{CA}(1, \eta)}{T_C^{RPA}(1, \eta)} = 1 - \left(\frac{1}{\delta}\right)^2 < 1, \quad (3.90)$$

jer je $1 \leq \delta^2 \leq 9$. Dakle, analitički izraz (3.79) predviđa nižu kritičnu temperaturu u Kalenovoj linearizaciji za jednodimenzioni Hajzenbergov model sa malom (ali konačnom) anizotropijom.

Da bismo pokazali kako je gornji rezultat u skladu sa jednačinama za određivanje kritične temperature (3.65) – (3.67), iskoristićemo činjenicu da se samousaglašena jednačina (3.67) za jednodimenzioni model svodi na kubnu jednačinu

$$\delta^2 \eta f_C^3 - \delta(\delta - 2)f_C^2 - \eta(2\delta - 1)f_C - 1 = 0, \quad \delta = \frac{3S}{S + 1}, \quad (3.91)$$

koja uvek poseduje barem jedno realno rešenje. Takođe, za jednodimenzioni model je

$$\frac{T_C^{CA}}{T_C^{RPA}} = \frac{\tilde{J}_C}{J_1(\tilde{\eta}_C)} \frac{J_1(\eta)}{J} = \sqrt{1 - f_C^2}. \quad (3.92)$$

Da bi energija magnona u Kalenovoj linearizaciji bila realna veličina, mora važiti $f_C \in \mathbb{R}$. Pošto je T_C^{RPA} realan broj, iz (3.92) sledi da je $T_C^{CA} \in \mathbb{R}$ samo ako je $|f_C| \leq 1$. Za takvo f_C , jednačina (3.92) predviđa nižu kritičnu temperaturu u Kalenovoj linearizaciji [3]. Na Sl. 3.7 je prikazan odnos T_C^{CA}/T_C^{RPA} za jednodimenzione modele sa različitim vrednostima η i S . Vidimo da se razlika između kalenovske i tjablikovske linearizacije smanjuje sa povećanjem S . Podrazumeva se da je $T_C^{RPA}(1, 1) = T_C^{CA}(1, 1) = 0K$.

Imajući u vidu prethodno dobijene analitičke i numeričke rezultate, možemo pretpostaviti da je za Hajzenbergov model na D – dimenzionoj rešetki, pored nejednakosti $T_C^{RPA}(D, 1) <$

$T_C^{\text{CA}}(D, 1)$ koja važi za konačno realno $D > 2$, takođe važi i $T_C^{\text{RPA}}(D, \eta) < T_C^{\text{CA}}(D, \eta)$ za svako realno $D \geq 2$ i $\eta > 1$. Temperature se poklapaju kada $D \rightarrow \infty$ i/ili $\eta \rightarrow \infty$, dok je $T_C^{\text{RPA}}(1, \eta) > T_C^{\text{CA}}(1, \eta)$ [3].

Glava 4

Termodinamičke osobine Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$

U prethodnoj Glavi je dobijeno više rezultata za D – dimenzioni Hajzenbergov model na zapreminski centriranoj rešetki. Između ostalog pokazano je kako, u odnosu na RPA Tjablikova, Kalenova linearizacija jednačina kretanja predviđa višu kritičnu temperaturu apstraktnog Hajzenbergovog feromagneta i antiferomagneta za $D \geq 2$. U ovoj Glavi će pažnja biti posvećena primeni RPA i kalenovskog postupka na opis realnih jedinjenja Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$, koja predstavljaju izuzetnu eksperimentalnu realizaciju dvodimenzionog Hajzenbergovog antiferomagneta. Ispostaviće se, da slično kao i kod apstraktnog Hajzenbergovog modela, RPA predviđa nižu kritičnu temperaturu. Ono što je takođe bitno, jeste da se kritična temperatura dobijena u okviru samousaglašenog modela koji se bazira na eksperimentalnim podacima o magnonskoj disperziji na relativno niskim temperaturama ($T \approx 8$ K), vrlo dobro slaže sa eksperimentom [3, 9]. Konačno, rezultati iz ove Glave će potvrditi pretpostavku iznetu na kraju odeljka 1.3, u vezi slabog uticaj interplanarne izmenske interakcije¹.

4.1 Dvodimenzioni antiferomagnetni model

U odeljku 3.4. je ukazano da u principu postoje dva načina za upoređivanje rezultata koje predviđaju RPA i kalenovska linearizacija i izvršeno je poređenje za apstraktni model. U ovom odeljku razmatramo konkretnu eksperimentalnu realizaciju 2D Hajzenbergovog antiferomagneta u vidu jedinjenja Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$. Kao osnovu za određivanje parametara hamiltonijana uzimamo eksperimentalne podatke za magnonsku disperziju. Na taj način opservabilne mikroskopske karakteristike sistema (jednomagnonske energije) povezujemo sa makroskopskim parametrima antiferomagneta (magnetizacija podrešetke i Nelova temperatura), čime se dolazi do pravog samousaglašenog sistema [3].

4.1.1 RPA i LSW za Rb_2MnCl_4

Pošto je model na kvadratnoj rešetki specijalni slučaj D – dimenzionog modela na zapreminski centriranoj rešetki, sve jednačine dobijene u Glavi 2 ostaju na snazi. Promena u notaciji će se ticati geometrijskog faktora. Usvojicemo oznaku [9, 49] $\gamma_2(\mathbf{k}) \equiv \gamma_{||}(\mathbf{k}_{||})$ da bismo

¹Naravno, u okviru eksperimentalnih vrednosti za $\lambda_{\perp} = J_{\perp}/J$.

istakli 2D karakter sistema, dok ćemo neke karakteristične veličine označiti dodatnim indeksom 2D.

Parametri hamiltonijana

Osnovni eksperimentalni podaci vezani za Rb_2MnCl_4 su navedeni u odeljku 1.2. Između ostalog, na Sl. 1.3. je prikazana magnonska disperzija duž k_x -pravca izmerena na $T = 8$ K. Uzimajući dve eksperimentalne vrednosti za disperziju u tačkama $(0, 0, 0)$ i $(\pi/a, 0, 0)$, dobijamo sistem za određivanje parametara J i η

$$\omega_{2\text{D}}^{\text{RPA}}(0, 0) = J\langle S^z \rangle \Big|_8 Z_1 \sqrt{\eta^2 - 1} \quad (4.1)$$

$$\omega_{2\text{D}}^{\text{RPA}}(\pi/a, 0) = J\langle S^z \rangle \Big|_8 Z_1 \eta \quad (4.2)$$

$$\langle S^z \rangle \Big|_8 = \frac{[S - P_S^{2\text{D}}(8)][1 + P_S^{2\text{D}}(8)]^{2S+1} + [S + 1 + P_S^{2\text{D}}(8)][P_S^{2\text{D}}(8)]^{2S+1}}{[1 + P_S^{2\text{D}}(8)]^{2S+1} - [P_S^{2\text{D}}(8)]^{2S+1}}$$

$$P_S^{2\text{D}}(8) = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \frac{\epsilon_{\text{RPA}}^{2\text{D}} \Big|_8}{2 \omega_{2\text{D}}^{\text{RPA}}(\mathbf{k}_{\parallel}) \Big|_8} \coth \frac{\omega_{2\text{D}}^{\text{RPA}}(\mathbf{k}_{\parallel}) \Big|_8}{2 \cdot 8} - \frac{1}{2}, \quad (4.3)$$

$$\omega_{2\text{D}}^{\text{RPA}}(\mathbf{k}_{\parallel}) \Big|_8 = J\langle S^z \rangle \Big|_8 Z_1 \sqrt{\eta^2 - \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel})}, \quad \epsilon_{\text{RPA}}^{2\text{D}} \Big|_8 = J\langle S^z \rangle \Big|_8 Z_1 \eta. \quad (4.4)$$

Rešenja ovog sistema, zajedno sa izračunatom Nelovom temperaturom i magnetizacijom podrešetke u osnovnom stanju su prikazani u Tabeli 4.1.

Tabela 4.1:

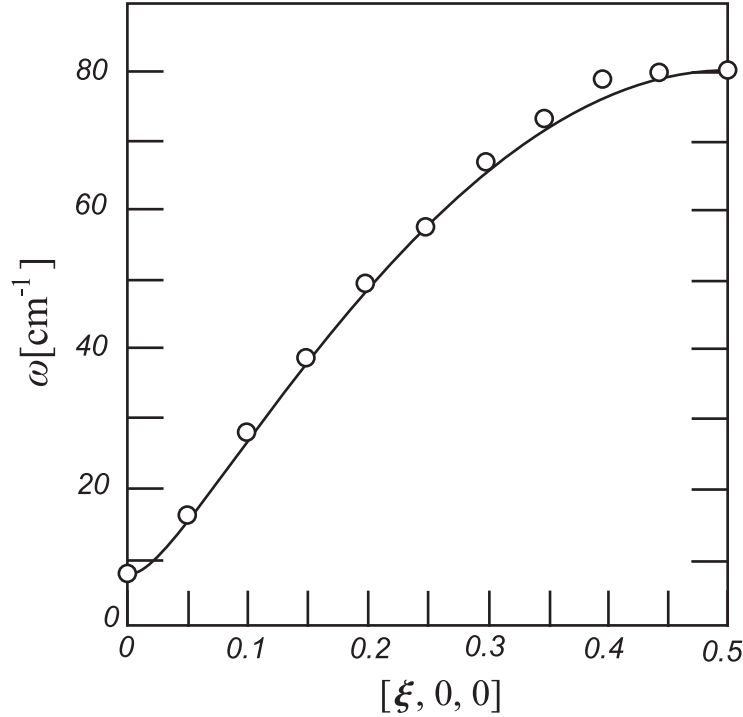
RPA i LSW karakteristike 2D modela za Rb_2MnCl_4

	J	η	$T_N[\text{K}]$	$\langle S \rangle_0$
RPA	12.4785	1.0021356	55.635	2.32338
LSW	11.4857	1.0021356	128	2.32331

Radi poređenja, u tabeli su dati i rezultati standardne teorije neinteragujućih magnona (LSW). Jednačine za LSW opis antiferomagneta se dobijaju jednostavnom zamenom $S_x^z \rightarrow S$ u jednačinama kretanja za spinske operatore. S obzirom da se bozonizacija uvodi na formalno isti način kao u RPA, bozonski S^{\pm} operatori u LSW aproksimaciji su identični ranije navedenim za RPA² u odeljcima 2.2.1–2.2.3, uz zamenu $\langle S^z \rangle \rightarrow S$. Pošto su RPA jednačine samousaglašene, one efektivno uračunavaju magnon–magnon interakciju, što dovodi do prihvatljivih (ili čak veoma dobrih) rezultata na višim temperaturama. O problematici magnon–magnon interakcije će biti više reči u drugom delu disertacije. Ne treba naglašavati da se rezultati LSW ne uzimaju kao pouzdani na visokim temperaturama, kada magnon–magnon interakcije počinju da igraju bitnu ulogu. Tako LSW obično dvostruko precenjuje kritičnu temperaturu³, ali daje razumno dobre rezultate sve do nekih $T_C/T \approx 0.5$.

²Bar što se tiče Hajzenbergovog modela sa spinskom anizotropijom

³Videti npr. diskusiju posvećenu metodu samousaglašanih spinskih talasa u [51], konkretno vrednosti za kritične temperature raznih jedinjenja navedene u Tabeli I na str. 1095



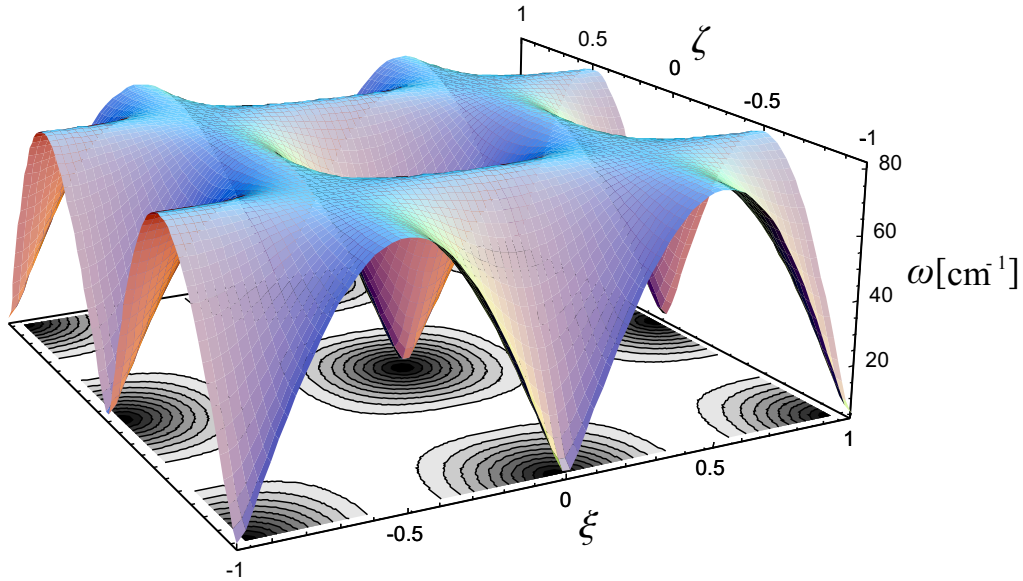
Sl. 4.1: Magnonska disperzija Rb_2MnCl_4 na $T = 8$ K izračunata RPA postupkom [jednačina (4.4)], za 2D model (puna linija). RPA parametri hamiltonijana su navedeni u Tabeli 4.1. Ista kriva predstavlja i LSW disperziju sa parametrima iz Tabele 4.1 i Kalenovu disperziju sa parametrima iz Tabele 4.2. Kružići su eksperimentalni podaci preuzeti iz [10]. Na x osi je prikazan redukovani talasni vektor $\xi = \frac{ak_x}{2\pi}$

Iz tabele se vidi da insistiranje na istim vrednostima magnonske disperzije na $T = 8$ K nužno vodi do različitih parametra Hamiltonijana. Zbog velike formalne sličnosti RPA i LSW linearizacija, jednačine za određivanje parametra spinske anizotropije su iste u ova dva prilaza. Zbog toga se i izračunate vrednosti poklapaju (više detalja se može naći u [49]). Ovo je naravno slučajnost. U opštem slučaju se svi parametri razlikuju, što će biti demonstrirano u odeljcima posvećenim Kalenovoj linearizaciji. Drugim rečima, u samousaglašenom prilazu se pod pojmom modela koji opisuje dati sistem (sa eksperimentalnom realizacijom) mora obuhvatiti i linearizacija jednačina kretanja, odnosno neka druga pogodna aproksimacija. U poslednjoj koloni tabele su vrednosti za magnetizaciju podrešetke u osnovnom stanju i one oslikavaju kvantne fluktuacije, odnosno činjenicu da Nelovo stanje nije osnovno stanje HAFM.

Magnonska disperzija

Prva provera samousaglašenog prilaza je disperziona kriva. Koristeći paramete iz Tabele 4.1, nalazimo jednomagnonske energije koje gotovo u potpunosti reprodukuju eksperimentalne podatke u celoj Brilluenovoj zoni. Geometrija magnonskih energija je ista u RPA i LSW prilazima i obe krive se u potpunosti poklapaju (videti Sl. 4. 1.)

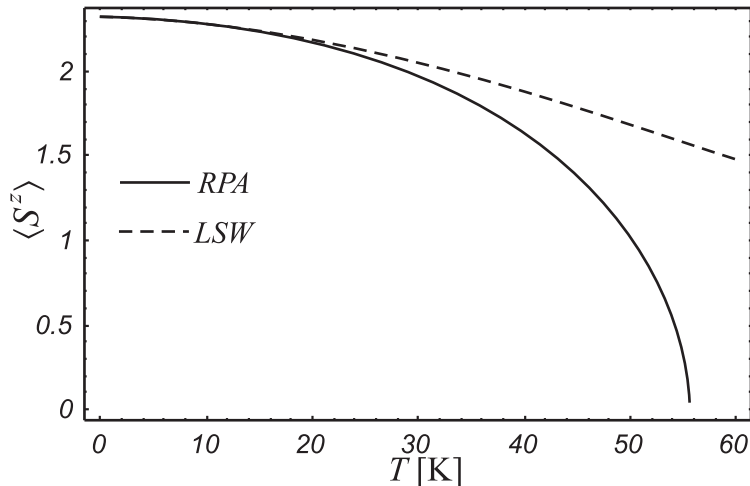
Na Sl. 4.2 je dat prikaz površine $\omega_{2D}^{\text{RPA}}(k_x, k_y)$. Slično kao i na Sl. 4.1, RPA i LSW rezultati se poklapaju. Naravno, ovo važi samo na temperaturi $T = 8$ K, jer je RPA disperzija temperaturno zavisna, a LSW nije. Disperziona površ sa Sl. 4.2 lepo ilustruje periodičnost u recipročnom prostoru.



Sl. 4.2: 3D prikaz magnonskih energija za Rb_2MnCl_4 u LSW, RPA i Kalenovom prilazu na $T = 8$ K. Na x i y osi su prikazane komponente redukovanih talasnih vektora, $\xi = ak_x/(2\pi)$ i $\zeta = ak_y/(2\pi)$, respektivno (prema [9])

Magnetizacija podrešetke

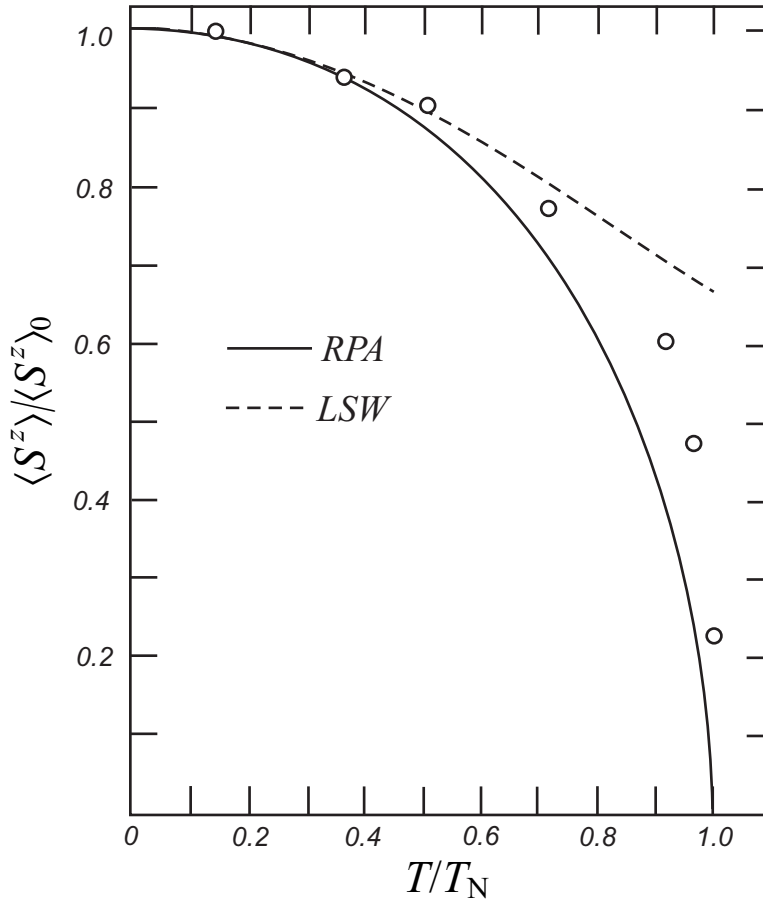
Činjenica da i LSW i RPA linearizacija za 2D HAFM gotovo do detalja reprodukuju eksperimentalne podatke o magnonskoj disperziji govori da je geometrija, odnosno simetrija antiferomagnetne rešetke na pravilan način inkorporirana u pomenute aproksimacije [tzv. geometrijski deo magnonskih energija je isti u oba slučaja, $\omega \propto \sqrt{\eta^2 - \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel})}$]. Međutim, renormalizacija magnonskih energija u RPA, koja efektivno uključuje jedan tip magnon–magnon interakcija, dovodi do toga da se RPA magnoni pobuđuju sve lakše sa porastom temperature.



Sl. 4.3: Temperaturno ponašanje spontane magnetizacije dobijene metodom GF u okviru RPA pristupa za 2D model (puna linija) u poredjenju sa SW rezultatom (isprekidana linija) za Rb_2MnCl_4

Tako je relativno odstupanje RPA vrednosti za Nelovu temperaturu (navedene u Tabeli 4.1) u odnosu na eksperimentalnu vrednost od 56 K svega 0.62 %. Na Sl. 4.3 je prikazana temperaturna zavisnost magnetizacije podrešetke za 2D HAFM sa parametrima iz Tabele 4.1.

Dalje, na Sl. 4.4 je predstavljena relativna magnetizacija podrešetke $\langle S^z \rangle / \langle S \rangle_0$, zajedno sa eksperimentalnim rezultatima iz [10].



Sl. 4.4: Poredjenje relativne magnetizacije dobijene GF metodom u okviru RPA pristupa za 2D model (puna linija) i relativne magnetizacije dobijene linearnom teorijom spinskih talasa za 2D model (isprekidana linija) sa eksperimentalnim podacima (kružići) preuzetim iz [10]. Parametri hamiltonijana su navedeni u Tabeli 4.1.

Vidi se da je relativno slaganje RPA krive i eksperimentalnih podataka zadovoljavajuće na celom temperaturskom intervalu. Mala odstupanja na niskim temperaturama se pripisuju zanemarivanju određenog tipa magnon–magnon interakcija. Više detalja u vezi odgovarajućeg problema kod Hajzenbergovog feromagneta se može naći u drugom delu disertacije. Sa druge strane, poznato je da kritični eksponent β u prilazu Tjablikova uvek ima vrednost iz Landauove fenomenološke teorije faznih prelaza, $\beta = 1/2$ [9, 27], dok je eksperimentalna vrednost za Rb_2MnCl_4 je $0.15 \leq \beta \leq 0.18$ [10].

4.1.2 Kalenova linearizacija za Rb_2MnCl_4

Slično kao i za RPA iz prethodnog odeljka, jednačine kalenovske linearizacije za HAFM na kvadratnoj rešetki predstavljaju specijalni slučaj jednačina dobijenih u odeljku 2.2.3. za $D = 2$.

Ranije je rečeno da je efekat Kalenovog proširenja RPA linearizacije⁴ temperaturska renor-

⁴Barem za model sa spinskom anizotropijom.

malizacija integrala izmene i spinske anizotropije. Veza je data u (3.66)–(3.67), odnosno u (2.91). Kako je geometrija kalenovske disperzije ista kao i kod RPA i LSW, sistem za određivanje parameta $\tilde{J}(T = 8K)$, $\tilde{\eta}(T = 8K)$ i $\langle S^z \rangle|_{T=8K}$ je isti kao već navedeni sistem u slučaju RPA [jednačine (4.1)–(4.4)], pa su mu i rešenja ista [$\tilde{J}(T = 8K) = J^{\text{RPA}}$, $\tilde{\eta}(T = 8K) = \eta^{\text{RPA}}$ i $\langle S^z \rangle^{\text{CA}}|_{T=8K} = \langle S^z \rangle^{\text{RPA}}|_{T=8K}$]. Drugim rečima, veza između RPA i Kalenovih parametara hamiltonijana u samousaglašenom prilazu je

$$J^{\text{CA}} = \frac{J^{\text{RPA}}}{1 - f_8/(2S^2)}, \quad \eta^{\text{CA}} = \frac{\eta^{\text{RPA}} + f_8/(2S^2)}{1 + \eta^{\text{RPA}} f_8/(2S^2)}, \quad (4.5)$$

$$f_8 = f(T = 8K), \quad (4.6)$$

gde je, u novim oznakama

$$f(T) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \langle S^{+(a)} S^{+(b)} \rangle_{\mathbf{q}_{\parallel}} \gamma_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel}) = -\frac{\langle S^z \rangle^2 Z_1 \tilde{J}(T)}{N_a} \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \frac{\gamma_{\parallel}^2(\mathbf{q}_{\parallel})}{\tilde{\omega}(\mathbf{q}_{\parallel})} \coth \frac{\tilde{\omega}(\mathbf{q}_{\parallel})}{2T}, \quad (4.7)$$

dok je $\tilde{\omega}(\mathbf{q}_{\parallel}) = \tilde{J}(T) \langle S^z \rangle Z_1 \sqrt{\tilde{\eta}^2(T) - \gamma_{\parallel}^2(\mathbf{q}_{\parallel})}$. Koristeći RPA rešenja za $T = 8K$, pomoću (4.7) nalazimo f_8 , a samim tim i kalenovske parametre, J^{CA} i η^{CA} . Jednačina za određivanje magnetizacije podrešetke u osnovnom stanju je navedena ranije (2.98). Integral Votsonovog tipa koji se pojavljuje u (2.98) ima analitičko rešenje (3.18). Sistem za određivanje Nelove temperature sa parametrima J^{CA} i η^{CA} je takođe detaljno razmatran u prethodnoj glavi [jednačine (3.65)–(3.67)]. Konačno, primenićemo i jednačinu za aproksimativno računanje Nelove temperature⁵. (3.79), čiju ćemo vrednost ovde označiti sa T_N^{app} . Rezultati ovih proračuna su sumirani u Tabeli 4.2

Tabela 4.2:
Karakteristike 2D modela za Rb_2MnCl_4 u Kalenovoj linearizaciji

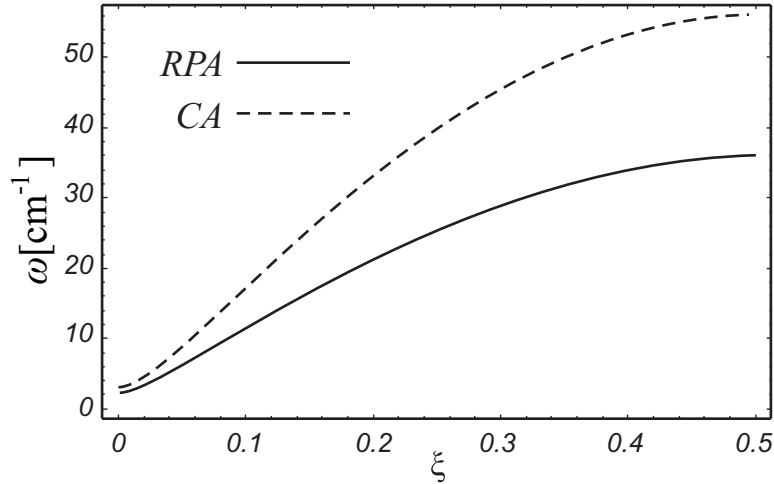
$f_8/(2S^2)$	J^{CA}	η^{CA}	$f_0/(2S^2)$	$\langle S \rangle_0$	$f_N/(2S^2)$	$T_N^{\text{CA}}[\text{K}]$	$T_N^{\text{app}}[\text{K}]$
−0.10218	11.3216	1.00262	−0.09498	2.32352	−0.290365	62.1445	61.8008

Pre svega, poređenjem rezultata iz Tabele 4.1 i Tabele 4.2, uočavamo dobro slaganje LSW, RPA i Kalenovog prilaza na $T = 0$ K. Takođe, vidimo da pravi samousaglašeni prilaz neizbežno daje različite parametre J i η u RPA i Kalenovoj linearizaciji, o čemu je već bilo reči. Dalje, primećujemo da rešenje na bazi Kalenove linearizacije znatno precenjuje Nelovu temperaturu (relativno odstupanje u odnosu na eksperimentalnu vrednost iz [10] je $\approx 10\%$). Konačno, vidimo da aproksimativna formula za računanje kritične temperature u Kalenovom prilazu (3.79) daje vrednost koja je veoma bliska kritičnoj temperaturi određenoj numeričkim rešavanjem jednačina (3.65)–(3.67) [relativno odstupanje ove dve vrednosti je $\delta = 0.59\%$].

Pošto su parametri hamiltonijana u sva tri postupka određeni tako da reprodukuju eksperimentalnu disperziju na $T = 8$ K, a sve tri disperzije odlikuje ista geometrija u \mathbf{k} -prostoru, i kalenovska disperzija se poklapa sa LSW i RPA magnonskim energijama na Sl. 4.1 i 4.2. Naravno, usled različite renormalizacije energija u RPA i Kalenovom prilazu, magnonske energije

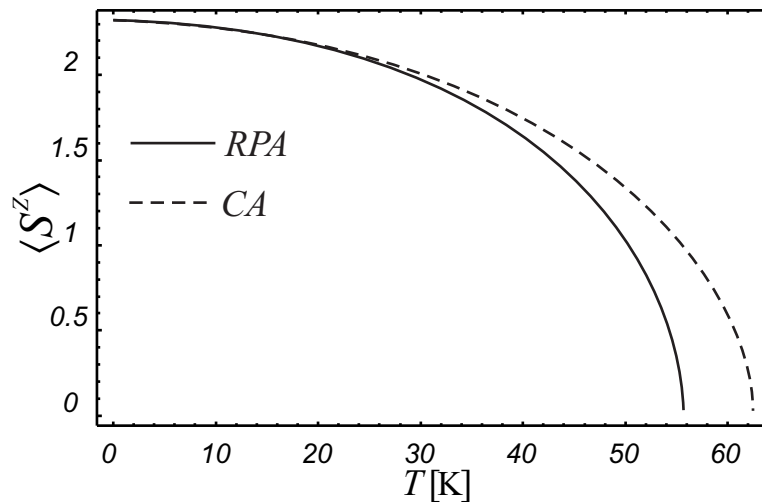
⁵Naravno, sa parametrima J^{CA} i η^{CA} .

se razlikuju na višim temperaturama. Na Sl. 4.5 je prikazana disperzija za RPA i kalen-ovske magnone na $T = 50$ K. Jasno se vidi da se RPA magnoni lakše pobuđuju na visokim temperaturama što dovodi do niže kritične temperature.



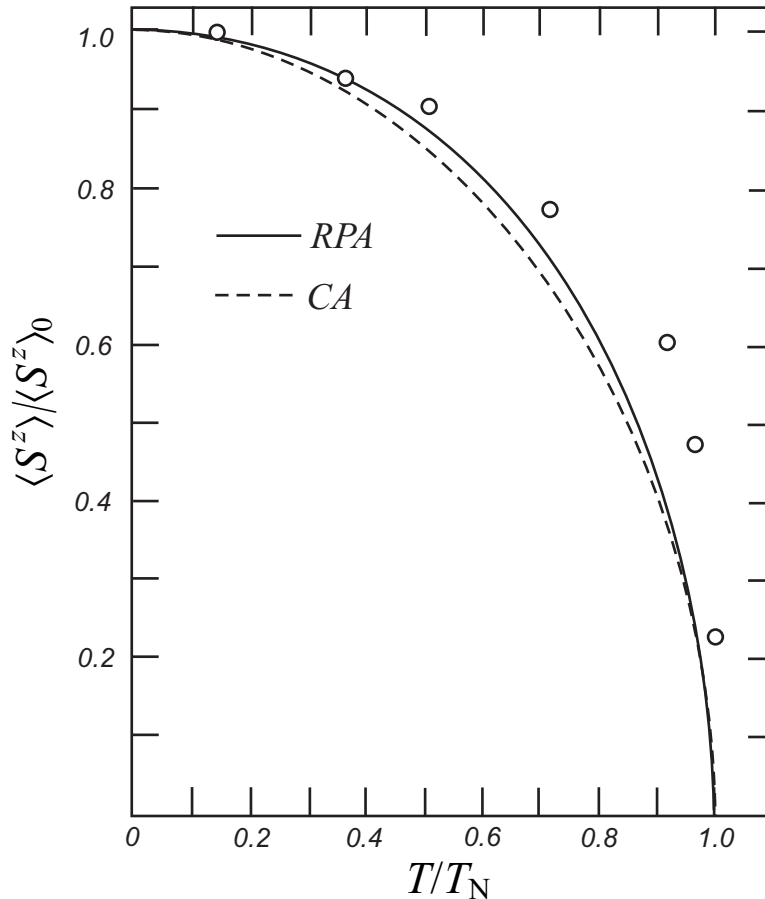
Sl. 4.5: Magnonske energije u RPA i Kalenovom (CA) prilazu na $T = 50$ K Na apscisi je redukovani talasni vektor $\xi = ak_x/(2\pi)$ (prema [9])

Uticaj renormalizacije magnonskih energija se oslikava u vrednostima spontane magnetizacije (i kritične temperature). Tako je na Sl. 4.6 prikazana temperaturna zavisnost magnetizacije podrešetke na celom temperaturnom intervalu uređene faze. Dato je poređenje RPA i Kalenove krive.



Sl. 4.6: Temperaturna zavisnost magnetizacije podrešetke u RPA i Kalenovom (CA) pristupu [9]

Konačno, poređenje relativnih magnetizacija dobijenih u RPA i Kalenovoj linearizaciji sa eksperimentalnim podacima iz [10] je prikazano na Sl.4.7.



Sl. 4.7: Poredjenje relativnih magnetizacija izračunatih RPA i Kalenovim (CA) postupkom

Imajući u vidu vrednosti koje za Nelovu temperaturu predviđaju RPA i Kalenova linearizacija, kao i poredjenje relativnih magnetizacija, u odnosu na eksperimentalne podatke iz [10], možemo zaključiti da 2D HAFM u okviru prilaza Tjablikova bolje opisuje osnovne magnetne karakteristike Rb_2MnCl_4 .

4.1.3 LSW, RPA i Kalenova linearizacija za $(CH_3NH_3)_2MnCl_4$

Analiza iz prethodnog odeljka se može gotovo bez ikakvih izmena primeniti i na antiferomagnetno jedinjenje $(CH_3NH_3)_2MnCl_4$ (\equiv MAMC). Kako je računaska procedura identična kao i za Rb_2MnCl_4 , samo ćemo ukratko sumirati najvažnije rezultate.

Tabela 4.3:

RPA i LSW karakteristike 2D modela za $(CH_3NH_3)_2MnCl_4$

	J	η	T_N [K]	$\langle S \rangle_0$
RPA	10.5866	1.00135	44.6991	2.31946
LSW	9.62678	1.00135	101	2.31938

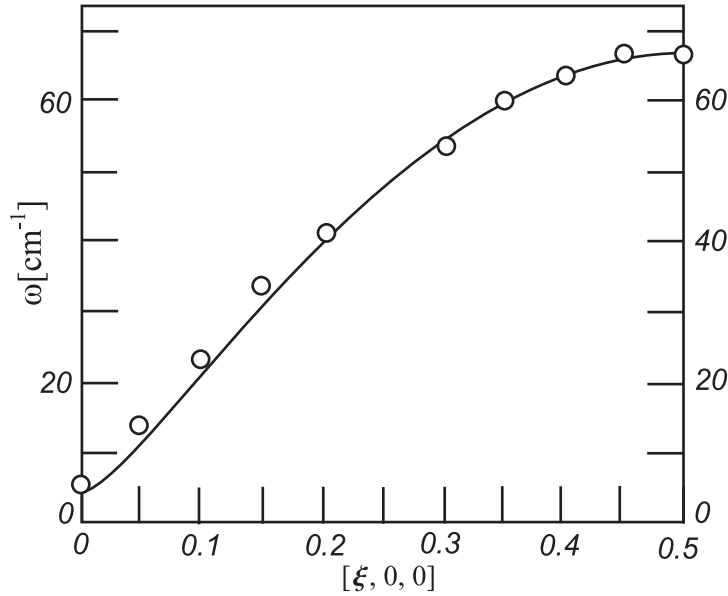
Pre svega, koristeći eksperimentalne podatke o magnonskoj disperziji, predstavljene na Sl. 1.3, nalazimo parametre modelnog hamiltonijana u okviru RPA, LSW i Kalenovog prilaza. Rezultati za RPA i LSW su dati u Tabeli 4.3, a za Kalenovu linearizaciju u Tabeli 4.4.

Tabela 4.4:
Karakteristike 2D modela za $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$ u Kalenovoj linearizaciji

$f_{8.5}/(2S^2)$	J^{CA}	η^{CA}	$f_0/(2S^2)$	$\langle S \rangle_0$	$f_N/(2S^2)$	$T_N^{\text{CA}}[\text{K}]$	$T_N^{\text{app}}[\text{K}]$
-0.110884	9.52989	1.00169	-0.09626	2.31969	-0.30583	50.1879	50.5772

Kao i u slučaju Rb_2MnCl_4 , vidimo da RPA predviđa kritičnu temperaturu koja je znatno bliža eksperimentalnoj vrednosti ($T_N^{\text{exp}} = 45.3 \text{ K}$) nego Nelova temperatura izračunata u Kalenovom prilazu. Takođe, vidimo da i aproksimativna formula za računanje kritične temperature u Kalenovoj linearizaciji (3.79) daje vrednosti bliske numeričkom rezultatu.

Magnonske energije na $T = 8.5 \text{ K}$, izračunate pomoću parametrara iz Tabele 4.3, odnosno 4.4, prikazane su na Sl. 4. 8.

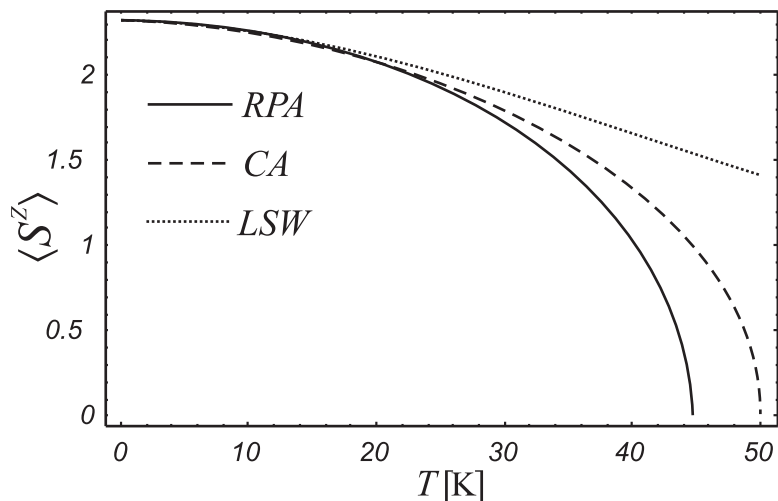


Sl. 4.8: Magnonska disperzija $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$ na $T = 8.5 \text{ K}$ izračunata RPA postupkom [jednačina (4.4)], za 2D model (puna linija). RPA parametri hamiltonijana su navedeni u Tabeli 4.3.

Ista kriva predstavlja i LSW disperziju sa parametrima iz Tabele 4.3 i Kalenovu disperziju sa parametrima iz Tabele 4.4. Kružići su eksperimentalni podaci preuzeti iz [10]. Na apscisi je prikazan redukovani talasni vektor $\xi = \frac{ak_x}{2\pi}$

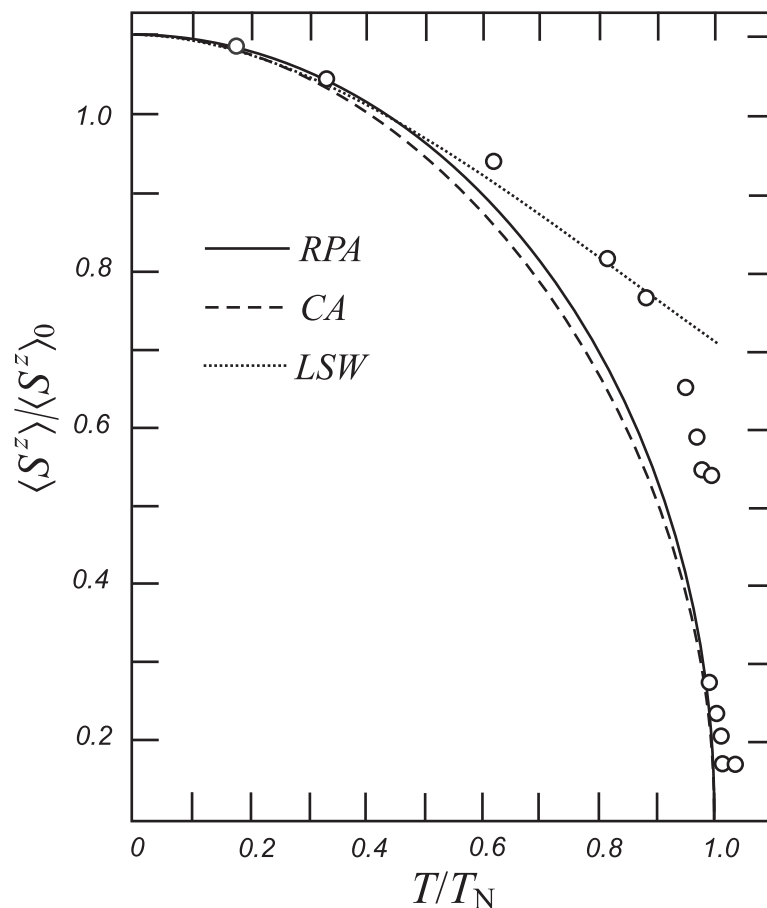
S obzirom da je geometrija magnonskih energija ista za sve tri aproksimacije, ponovo se sve tri krive preklapaju duž cele Brillueneve zone. To je moguće jedino ako se koristi različit set parametara u sva tri slučaja.

Razlike se naravno pojavljuju na višim (i nižim) temperaturama. Smanjenje magnetizacije podrešetke sa temperaturom dobijeno u okviru RPA, LSW i Kalenove linearizacije je predstavljeno na Sl. 4.9.



Sl. 4.9: Temperaturna zavisnost magnetizacije podrešetke u RPA i Kalenovom (CA) pristupu [9]

Slično, na Sl. 4.10 je prikazano poređenje relativnih vrednosti spontane magnetizacije, dobijenih u tri razmatrane aproksimacije, sa eksperimentalnim podacima iz [10].



Sl. 4.10: Poređenje relativnih magnetizacija izračunatih LSW, RPA i Kalenovim (CA) postupkom

Uzimajući u obzir upravo dobijene rezultate za RPA, LSW i Kalenovu linearizaciju sa jedne i eksperimentalne podatke sa druge strane, vidimo da 2D HAFM relativno dobro opisuje osnovne magnetne osobine $(CH_3NH_3)_2MnCl_4$. Pri tome model koji se zasniva na RPA linearizaciji, daje

rezultate koji na najbolji način povezuju niskotemperaturske i visokotemperaturske osobine $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$. Pored dobro poznatih ograničenja RPA modela, o kojima je već bilo reči, sa Sl. 4.10 uočavamo da RPA linearizacija preneglašava uticaj magnon–magnon interakcija na srednjim temperaturama $0.4T_N \leq T \leq 0.8T_N$.

4.2 Uticaj prostorne anizotropije

U prethodnom odeljku je pokazano da se osnovne magnetne karakteristike jedinjenja mangana Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$ relativno uspešno mogu opisati pomoću anizotropnog 2D HAFM, pogotovo u RPA linearizaciji. Tri najvažnije eksperimentalne karakteristike pomenutih jedinjenja (gep u magnonskom spektru, odsustvo k_z komponente u disperziji i dugodometno uređenje na konačnim temperaturama) se jednostavno reprodukuju uključivanjem spinske anizotropije. U odeljku 1.3 je ukazano da uključivanje dodatne prostorne anizotropiji, čime se efektivno prelazi na 3D frustrirani model, u principu ne bi trebalo bitnije da utiče na osobine pomenutih jedinjenja. Za to su navedena dva razloga. Prvi je dominacija interplanarene u odnosu na intraplanarnu izmensku interakciju ($\lambda_\perp = J_\perp/J < 10^{-3}$) koja je eksperimentalno registrovana. Kao drugi razlog je navedeno da hamiltonijan koji poseduje samo prostornu anizotropiju nužno generiše Goldstonove bozone, koji nisu opaženi u spektru. Preostala mogućnost je kombinovanje prostorne i spinske anizotropije, tako da se bezmasene ekscitacije eliminišu iz spektra i da se uračuna interplanarna interakcija lokalizovanih spinova. U ovom odeljku ćemo pokazati da ovakvo usložnjavanje hamiltonijana ne doprinosi poboljšanju rezultata dobijenih sa jednostavnijim 2D modelom. Skoncentrisaćemo se na RPA i Kalenovu linearizaciju. Teorija neinteragujućih magnona je detaljnije diskutovana u [49].

4.2.1 Jednačine kretanja: RPA linearizacija

Modelni hamiltonijan koji eksplicitno uračunava spinsku i prostornu anizotropiju je dat u (1.30). Ograničićemo se na slučaj odsustva spoljašnjeg magnetnog polja jer to odgovara eksperimentalnoj situaciji u odnosu na koju vršimo poređenje. Jednačine kretanja za S^\pm operatore u ovom slučaju glase

$$\begin{aligned}
-\partial_\tau S_{\mathbf{x}}^{+(a)} &= J \sum_{\delta_\parallel} S_{\mathbf{x}}^{z(a)} S_{\mathbf{x}+\delta_\parallel}^{-(b)} + J\eta \sum_{\delta_\parallel} S_{\mathbf{x}+\delta_\parallel}^{z(b)} S_{\mathbf{x}}^{+(a)} \\
&+ J_\perp \sum_{\delta_\perp^{ab}} S_{\mathbf{x}}^{z(a)} S_{\mathbf{x}+\delta_\perp^{ab}}^{-(b)} + J_\perp \sum_{\delta_\perp^{ab}} S_{\mathbf{x}+\delta_\perp^{ab}}^{z(b)} S_{\mathbf{x}}^{+(a)} \\
&- J_\perp \sum_{\delta_\perp^{aa}} S_{\mathbf{x}}^{z(a)} S_{\mathbf{x}+\delta_\perp^{aa}}^{+(a)} + J_\perp \sum_{\delta_\perp^{aa}} S_{\mathbf{x}+\delta_\perp^{aa}}^{z(a)} S_{\mathbf{x}}^{+(a)}, \tag{4.8}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\partial_\tau S_{\mathbf{y}}^{-(b)} &= -J \sum_{\delta_\parallel} S_{\mathbf{y}}^{z(b)} S_{\mathbf{y}+\delta_\parallel}^{+(a)} - J\eta \sum_{\delta_\parallel} S_{\mathbf{y}+\delta_\parallel}^{z(a)} S_{\mathbf{y}}^{-(b)} \\
&- J_\perp \sum_{\delta_\perp^{ab}} S_{\mathbf{y}}^{z(b)} S_{\mathbf{y}+\delta_\perp^{ab}}^{+(a)} - J_\perp \sum_{\delta_\perp^{ab}} S_{\mathbf{y}+\delta_\perp^{ab}}^{z(a)} S_{\mathbf{y}}^{-(b)} \\
&+ J_\perp \sum_{\delta_\perp^{bb}} S_{\mathbf{y}}^{z(b)} S_{\mathbf{y}+\delta_\perp^{bb}}^{-(b)} - J_\perp \sum_{\delta_\perp^{bb}} S_{\mathbf{y}+\delta_\perp^{bb}}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{y}}^{-(b)}, \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Zamenjujući u jednačinama kretanja operatore S^z sa $\langle S^z \rangle$ u duhu Tjablikovljevog dekuplovanja i prelaskom u impulsni prostor, dobijamo sistem koji ima istu strukturu kao (2.42)–(2.43). Jedina razlika je što umesto veličina ϵ i $J(\mathbf{k})$, definisanih u (2.44), u novom sistemu figurišu

$$\epsilon_{3D}^{RPA}(\mathbf{k}) = JZ_1 \langle S^z \rangle \{ \eta + \lambda_{\perp} [2 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k})] \}, \quad (4.10)$$

$$J_{3D}(\mathbf{k}) = JZ_1 [\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) + \lambda_{\perp} \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k})], \quad (4.11)$$

pri čemu su⁶

$$\gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) = \frac{1}{Z_1} \sum_{\delta_{\perp}^{ab}} e^{i\delta_{\perp}^{ab} \cdot \mathbf{k}} = \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ck_z}{2}, \quad (4.12)$$

$$\gamma_{\perp}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) = \frac{1}{Z_1} \sum_{\delta_{\perp}^{\alpha\alpha}} e^{i\delta_{\perp}^{\alpha\alpha} \cdot \mathbf{k}} = \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ck_z}{2}.$$

Odnosno, jednačina za $S^+(\mathbf{x}, \tau)$ sada glasi

$$\partial_{\tau}^2 S_{\mathbf{k}}^{+(a)}(\tau) = \left\{ [\epsilon_{3D}^{RPA}(\mathbf{k})]^2 - [J_{3D}(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle]^2 \right\} S_{\mathbf{k}}^{+(a)}. \quad (4.13)$$

Rešenja za bozonske S^{\pm} operatore ostaju istog oblika kao u (2.82), uz zamenu $\omega(\mathbf{k}_{\parallel})$ sa

$$\omega_{3D}^{RPA}(\mathbf{k}) = \sqrt{[\epsilon_{3D}^{RPA}(\mathbf{k})]^2 - [J_{3D}(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle]^2}, \quad (4.14)$$

dok su $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ sada dati sa

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{2\langle S^z \rangle} \sqrt{\frac{\epsilon_{3D}^{RPA}(\mathbf{k})}{2\omega_{3D}^{RPA}(\mathbf{k})} + \frac{1}{2}}, \quad v_{\mathbf{k}} = -\sqrt{2\langle S^z \rangle} \sqrt{\frac{\epsilon_{3D}^{RPA}(\mathbf{k})}{2\omega_{3D}^{RPA}(\mathbf{k})} - \frac{1}{2}}. \quad (4.15)$$

Sada lako dobijamo osnovnu korelacionu funkciju u RPA

$$\langle S_{\mathbf{x}}^{-(a)}(\tau) S_{\mathbf{x}}^{+(a)}(\tau) \rangle = \frac{2\langle S^z \rangle}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\epsilon_{3D}^{RPA}(\mathbf{k})}{2\omega_{3D}^{RPA}(\mathbf{k})} \coth \frac{\omega_{3D}^{RPA}(\mathbf{k})}{2T} - \frac{1}{2} \right], \quad (4.16)$$

koja, zajedno sa Kalenovom formulom (2.18) u potpunosti određuje temperaturno ponašanje magnetizacije podrešetke u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja. Konkretno, magnetizacija na $T = 0$ K je određena sa limitom

$$\begin{aligned} P_S(0) &\approx \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{RPA}(\mathbf{k})}{2\omega_{RPA}(\mathbf{k})} - \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\eta + \lambda_{\perp} [2 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k})]}{2 \sqrt{[\eta + \lambda_{\perp} (2 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}))]^2 - [\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) + \lambda_{\perp} \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k})]^2}} - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Slično, Nelova temperatura za ovaj 3D model je data sa

$$T_N = \frac{S(S+1)}{3} \frac{JZ_1}{C^d(\lambda_{\perp}, \eta)}, \quad (4.18)$$

⁶Sa Sl. 1.2 se vidi da je broj najbližih suseda za sva tri tipa interakcije isti i iznosi $Z_1 = 4$.

gde je sa $C^d(\eta, \lambda_\perp)$ označena geometrijska konstanta

$$C^d(\eta, \lambda_\perp) = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\eta + \lambda_\perp(2 - \gamma_\perp^{aa}(\mathbf{k}))}{[\eta + \lambda_\perp(2 - \gamma_\perp^{aa}(\mathbf{k}))]^2 - [\gamma_\parallel(\mathbf{k}_\parallel) + \lambda_\perp \gamma_\perp^{ab}(\mathbf{k})]^2}. \quad (4.19)$$

U nastavku ćemo primeniti upravo dobijene jednačine na jedinjenja mangana. Da bismo u potpunosti zatvorili sistem jednačina za određivanje parametara hamiltonijana⁷, veličinu λ_\perp ćemo tretirati kao unapred zadat parametar.

Rb₂MnCl₄

Rezultati numeričkog rešavanja samousaglašenog sistema za određivanje parametara hamiltonijana, zajedno sa odgovarajućim vrednostima za magnetizaciju podrešetke u osnovnom stanju i Nelovu temperaturu 3D modela, prikazani su u Tabeli 4.5. Radi poredjenja, u istoj tabeli su date i vrednosti odgovarajućih veličina koje karakterišu 2D model ($\lambda_\perp = 0$).

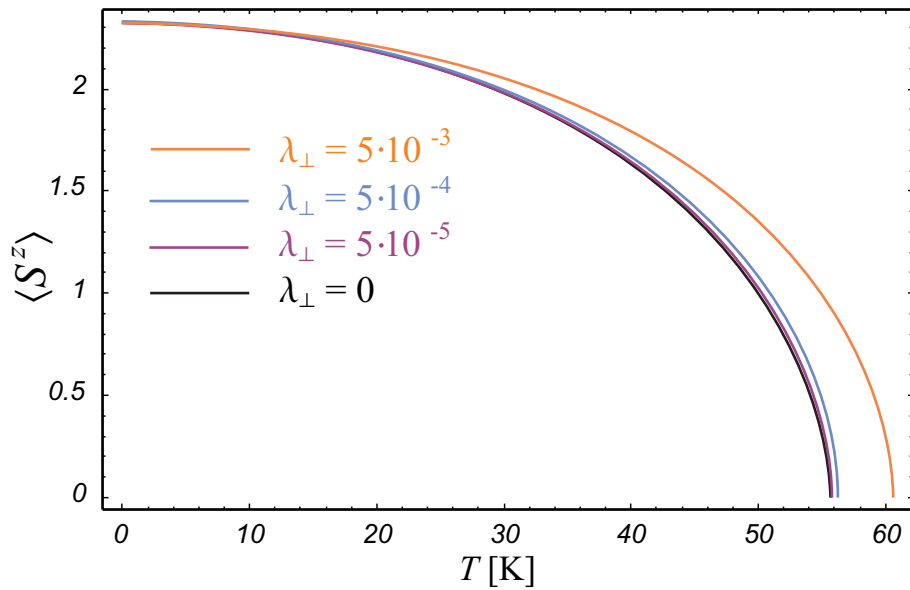
Tabela 4.5:

Izračunate vrednosti parametara modela za različite vrednosti λ_\perp u RPA prilazu

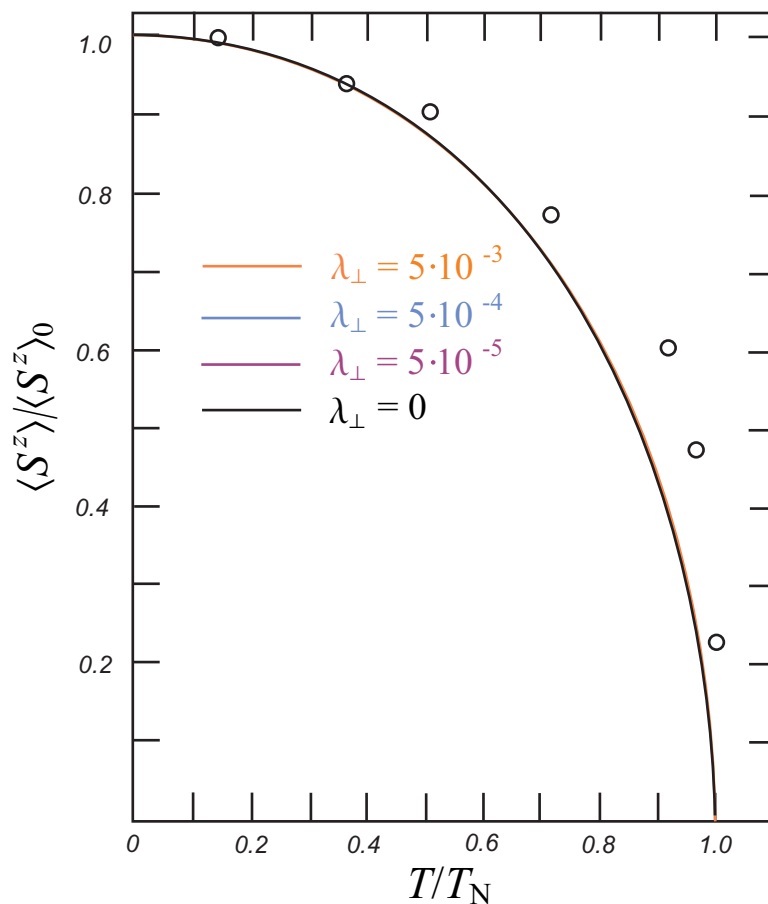
λ_\perp	0	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-1}$
J	12.4785	12.4698	12.4088	12.1541	11.2883	7.6808
η	1.0021356	1.0021357	1.0021367	1.0021463	1.0022424	1.0032034
$\langle \hat{S}^z \rangle_0$	2.32338	2.32354	2.32488	2.33395	2.36681	2.4192
$T_N[\text{K}]$	55.635	55.7128	56.3796	60.6734	74.2798	104.498

Lako je videti da uključivanje interplanarne izmenske interakcije ne utiče na geometriju magnonskih energija duž k_x pravca (za $k_y = k_z = 0$). Drugim rečima, primenom parametara iz Tabele 4.5 nalazimo magnonsku disperziju koja se poklapa sa već prikazanim na Sl. 4.1 i 4.2. Takođe, uočavamo da interplanarna interakcija slabo utiče na magnetne osobine Rb₂MnCl₄ sve dok λ_\perp ne prelazi nekih $\sim 10^{-4}$. To je u skladu sa eksperimentalnim rezultatim o snazi izmenske interakcije koja se odvija kroz nemagnetne slojeve halogenih elemenata [12]. Na Sl. 4.11 i 4.12 je prikazano temperaturno ponašanje magnetizacije podrešetke u funkciji interplanarne izmenske interakcije.

⁷Sistem je naravno iste strukture kao i (4.1)–(4.4), uz odgovarajuće modifikacije koje se mogu sumirati u sledeće tri zamene $\omega^{2D}(\mathbf{k}_\parallel) \rightarrow \omega^{3D}(\mathbf{k})$, $\epsilon \rightarrow \epsilon_{3D}^{\text{RPA}}(\mathbf{k})$, $J(\mathbf{k}_\parallel) \rightarrow J(\mathbf{k})_{3D}^{\text{RPA}}$.



Sl. 4.11: Temperaturna zavisnost magnetizacije podrešetke u RPA pristupu za 3D model jedinjenja Rb_2MnCl_4 . Prikazane su krive za nekoliko vrednosti parametra λ_{\perp}



Sl. 4.12: Temperaturna zavisnost relativne magnetizacije podrešetke u RPA pristupu za 3D model jedinjenja Rb_2MnCl_4 . Prikazane su krive za nekoliko vrednosti parametra λ_{\perp} . Sve krive se gotovo preklapaju (u granicama primenjene rezolucije).

Rezultati sa Sl. 4.12 dodatno ukazuju da uračunavanje interplanarne izmenske interakcije ne doprinosi poboljšanju modela. Slabost 2D modela, koja se tiče precenjivanja magnon–magnon interakcija na srednjem temperaturskom intervalu je prisutna i kod 3D modela.

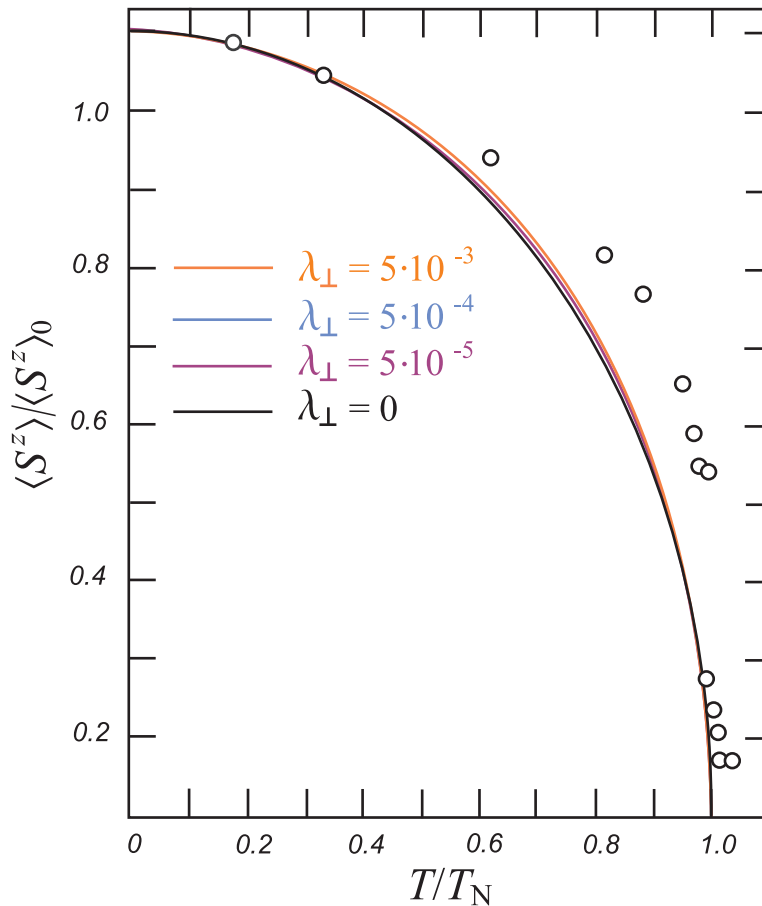
$(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$

Rezultati 3D modela koji uračunava interplanarnu interakciju za $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$ su sumirani u Tabeli 4.6.

Tabela 4.6:

Izračunate vrednosti parametara modela za različite vrednosti λ_\perp u RPA prilazu

λ_\perp	0	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-1}$
J	10.5866	10.573	10.4875	10.2142	9.4636	6.44067
η	1.00135	1.0013517	1.0013523	1.0013584	1.00142	1.0020
$\langle \hat{S}^z \rangle_0$	2.31946	2.31967	2.32132	2.3315	2.36564	2.4187
$T_N[\text{K}]$	44.6991	44.7794	45.4689	49.5498	61.4034	86.9177



Sl. 4.13: Temperaturska zavisnost relativne magnetizacije podrešetke u RPA pristupu za 3D model jedinjenja $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$. Prikazane su krive za nekoliko vrednosti parametra λ_\perp . Krive se gotovo preklapaju (u granicama primenjene rezolucije).

Kao i kod Rb_2MnCl_4 , prostorna anizotropija ne utiče na magnonsku disperziju duž k_x pravca (Videti Sl. 4. 8). Takođe, magnetizacija osnovnog stanja pokazuje uticaj interplanarne interakcije tek za $\lambda_{\perp} \geq 10^{-4}$, što izlazi iz okvira eksperimentalnih merenja. Uticaj koeficijenta λ_{\perp} se najbolje vidi na vrednostima za Nelovu temperaturu koje sve više odstupaju od eksperimentalnog rezultata sa porastom J_{\perp} . Na Sl. 4.13 je dato poređenje eksperimentalnih i teorijskih vrednosti za relativnu magnetizaciju podrešetke.

4.2.2 Jednačine kretanja: Kalenova linearizacija

U primeni Kalenove linearizacije na modelni 3D hamiltonijan za posmatrana dva jedi-njenja, krećemo od sistema (4.8)–(4.9) uz korišćenje linearizacije za antiferomagnetno kuplo-vane spinove navedene u (2.88). Parametar $\alpha(T)$ je definisan u (2.89). Hamiltonijan (1.30) opisuje frustriranu strukturu jer postoje i feromagnetna i antiferomagnetna kuplovanja spinova. Zbog toga moramo uvesti dodatno pravilo pomoću kojeg linearizujemo one delove jednačina kretanja koji sadrže feromagnetnu interakciju. Prema Kalenu [32], ono glasi

$$S_{\mathbf{x}}^{z(a)} S_{\mathbf{x}+\delta_{\perp}^{aa}}^{+(a)} \longrightarrow \langle S^z \rangle S_{\mathbf{x}+\delta_{\perp}^{aa}}^{+(a)} - \alpha(T) \langle S_{\mathbf{x}}^{-(a)} S_{\mathbf{x}+\delta_{\perp}^{aa}}^{+(a)} \rangle S_{\mathbf{x}}^{+(a)}. \quad (4.20)$$

Nakon linearizacije i prelaska u impulsni prostor, dobijamo sledeći sistem jednačina (videti i [49])

$$\begin{aligned} -\partial_{\tau} S_{\mathbf{k}}^{+(a)} &= \tilde{J}_{CA}(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{-(b)} + \epsilon_{CA}(\mathbf{k}) S_{\mathbf{k}}^{+(a)}, \\ -\partial S_{\mathbf{k}}^{-(b)} &= -\tilde{J}_{CA}(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle S_{\mathbf{k}}^{+(a)} - \epsilon_{CA}(\mathbf{k}) S_{\mathbf{k}}^{-(b)}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

U (4.21) su uvedene nove veličine

$$\epsilon_{CA}(\mathbf{k}) = \tilde{\epsilon}_{\parallel} + \tilde{\epsilon}_{\perp}^{ab} + \tilde{\epsilon}_{\perp}^{aa} - \langle S^z \rangle \tilde{J}_{\perp}^{bb}(\mathbf{k}), \quad (4.22)$$

$$J_{CA}(\mathbf{k}) = \tilde{J}_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) + \tilde{J}_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}), \quad (4.23)$$

gde su

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{\parallel} &= \epsilon_{\parallel} \left[1 - \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle \eta} \Phi_{\parallel}^{--} \right] = J\eta z \langle S^z \rangle \left[1 - \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle \eta} \Phi_{\parallel}^{--} \right], \\ \tilde{\epsilon}_{\perp}^{ab} &= \epsilon_{\perp}^{ab} \left[1 - \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\perp}^{--} \right] = J_{\perp} z \langle S^z \rangle \left[1 - \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\perp}^{--} \right], \\ \tilde{\epsilon}_{\perp}^{aa} &= \epsilon_{\perp}^{aa} \left[1 + \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\perp}^{-+} \right] = J_{\perp} z \langle S^z \rangle \left[1 + \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\perp}^{-+} \right], \\ \tilde{J}_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) &= J_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) \left[1 - \frac{\alpha(T) \eta}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\parallel}^{--} \right] = J z \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) \left[1 - \frac{\alpha(T) \eta}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\parallel}^{--} \right], \\ \tilde{J}_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) &= J_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) \left[1 - \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\perp}^{--} \right] = J_{\perp} z \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) \left[1 - \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\perp}^{--} \right], \\ \tilde{J}_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}) &= J_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}) \left[1 + \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\perp}^{-+} \right] = J_{\perp} z \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}) \left[1 + \frac{\alpha(T)}{\langle S^z \rangle} \Phi_{\perp}^{-+} \right]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Takođe, uveli smo i definicije

$$\Phi_{\parallel}^{-} = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \langle S^{\pm}(a) S^{\pm}(b) \rangle_{\mathbf{k}} \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) \quad (4.25)$$

$$\Phi_{\perp}^{-} = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \langle S^{\pm}(a) S^{\pm}(b) \rangle_{\mathbf{k}} \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) \quad (4.26)$$

$$\Phi_{\perp}^{+} = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \langle S^{\mp}(a) S^{\pm}(a) \rangle_{\mathbf{k}} \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \langle S^{\mp}(a) S^{\pm}(a) \rangle_{\mathbf{k}} \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}). \quad (4.27)$$

Radi preglednijeg pisanja, temperaturska zavisnost veličina Φ_{\parallel}^{-} , Φ_{\perp}^{-} i Φ_{\perp}^{+} je izostavljena. Pri dobijanju sistema (4.21) je korišćena jednakost

$$\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = \gamma(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \gamma(\mathbf{k}), \quad \text{za } \gamma(\mathbf{k}) = \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}), \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}), \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}), \quad (4.28)$$

koja važi kada je $F(\mathbf{k})$ parna funkcija po komponentama talasnog vektora.

Rešenja sistema (4.21) nalazimo sada već standardnom metodom. Tako dobijamo magnonske energije

$$\begin{aligned} \omega_{3D}^{CA}(\mathbf{k}) &= \sqrt{[\epsilon_{CA}(\mathbf{k})]^2 - [\langle \hat{S}^z \rangle \tilde{J}_{CA}(\mathbf{k})]^2} \\ &= J \langle \hat{S}^z \rangle_z \left\{ \left(\left[\eta - \frac{\Phi_{\parallel}^{-}}{2S^2} \right] + \lambda_{\perp} \left[1 - \frac{\Phi_{\perp}^{-}}{2S^2} \right] + \lambda_{\perp} \left[1 + \frac{\Phi_{\perp}^{+}}{2S^2} \right] (1 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k})) \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - \left(\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) \left[1 - \frac{\eta \Phi_{\parallel}^{-}}{2S^2} \right] + \lambda_{\perp} \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) \left[1 - \frac{\Phi_{\perp}^{-}}{2S^2} \right] \right)^2 \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

i potrebne korelacione funkcije

$$\begin{aligned} \langle S^{-(a)}(\tau) \hat{S}^{+(a)}(\tau) \rangle_{\mathbf{k}} &\equiv \Phi^{-+}(\mathbf{k}) = 2 \langle S^z \rangle \left[\frac{\epsilon_{CA}(\mathbf{k})}{2 \omega_{3D}^{CA}(\mathbf{k})} \coth \frac{\omega_{3D}^{CA}(\mathbf{k})}{2T} - \frac{1}{2} \right], \\ \langle \hat{S}^{-(a)}(\tau) \hat{S}^{-(b)}(\tau) \rangle_{\mathbf{k}} &\equiv \Phi^{--}(\mathbf{k}) = - \frac{\langle S^z \rangle^2 \tilde{J}_{CA}(\mathbf{k})}{\omega_{3D}^{CA}(\mathbf{k})} \coth \frac{\omega_{3D}^{CA}(\mathbf{k})}{2T}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Od interesa će nam biti pre svega uticaj prostorne anizotropije na magnetizaciju osnovnog stanja i Nelovu temperaturu. Na apsolutnoj nuli korelacione funkcije postaju

$$\Phi_{\parallel}^{--}(0) = - \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle \hat{S}^z \rangle_0^2 \tilde{J}_{CA}(\mathbf{k}) \Big|_0}{\omega_{CA}(\mathbf{k}) \Big|_0} \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}), \quad (4.31)$$

$$\Phi_{\perp}^{--}(0) = - \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle \hat{S}^z \rangle_0^2 \tilde{J}_{CA}(\mathbf{k}) \Big|_0}{\omega_{CA}(\mathbf{k}) \Big|_0} \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}), \quad (4.32)$$

$$\Phi_{\perp}^{-+}(0) = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{S}^z \rangle_0 \left[\frac{\epsilon_{CA}(\mathbf{k}) \Big|_0}{\omega_{CA}(\mathbf{k}) \Big|_0} - 1 \right] \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}), \quad (4.33)$$

dok u blizini Nelove temperature važi

$$\Phi_{\parallel}^{--}(T_N) = -\frac{2T_N}{Jz} \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) B(\mathbf{k})}{A^2(\mathbf{k}) - B^2(\mathbf{k})}, \quad (4.34)$$

$$\Phi_{\perp}^{--}(T_N) = -\frac{2T_N}{Jz} \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) B(\mathbf{k})}{A^2(\mathbf{k}) - B^2(\mathbf{k})}, \quad (4.35)$$

$$\Phi_{\perp}^{-+}(T_N) = \frac{2T_N}{Jz} \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}) A(\mathbf{k})}{A^2(\mathbf{k}) - B^2(\mathbf{k})}. \quad (4.36)$$

U gornje tri jednakosti figurišu

$$\begin{aligned} A(\mathbf{k}) &= \left[\eta - \frac{\Phi_{\parallel}^{--}(T_N)}{2S^2} \right] + \lambda_{\perp} \left[1 - \frac{\Phi_{\perp}^{--}(T_N)}{2S^2} \right] + \lambda_{\perp} [1 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k})] \left[1 + \frac{\Phi_{\perp}^{-+}(T_N)}{2S^2} \right], \\ B(\mathbf{k}) &= \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) \left[1 - \frac{\Phi_{\parallel}^{--}(T_N)}{2S^2} \right] \eta + \lambda_{\perp} \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) \left[1 - \frac{\Phi_{\perp}^{--}(T_N)}{2S^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Konačno, Nelova temperatura 3D modela se računa kao

$$T_N = \frac{S(S+1)}{3} \frac{Jz}{C \left[\lambda_{\perp}, \Phi_{\parallel}^{--}(T_N), \Phi_{\perp}^{--}(T_N), \Phi_{\perp}^{-+}(T_N) \right]}, \quad (4.38)$$

gde je

$$C \left[\lambda_{\perp}, \Phi_{\parallel}^{--}(T_N), \Phi_{\perp}^{--}(T_N), \Phi_{\perp}^{-+}(T_N) \right] = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \frac{A(\mathbf{k})}{A^2(\mathbf{k}) - B^2(\mathbf{k})}. \quad (4.39)$$

U sledećem odeljku ćemo videti kakav je uticaj prostorne anizotropije na magnetne karakteristike Rb_2MnCl_4 i $(CH_3NH_3)_2MnCl_4$ u Kalenovoj aproksimaciji.

Rb_2MnCl_4

Numeričkim rešavanjem jednačina (4.31), (4.32) i (4.33), zajedno sa (4.29) i Kalenovom formulom (2.18), za nekoliko različitih vrednosti λ_{\perp} , dobijaju se vrednosti magnetizacije u osnovnom stanju Rb_2MnCl_4 . Rezultati su prikazani u Tabeli 4.7. Vrednosti za Nelovu temperaturu, izračunate pomoću jednačina (4.34)-(4.39) su takodje prikazane u Tabeli 4.7.

Upoređivanjem vrednosti za magnetizaciju podrešetke u osnovnom stanju iz Tabele 4.7 sa odgovarajućim vrednostima iz Tabele 4.6, uočavamo relativno dobro slaganje RPA i Kalenovog metoda. Sa druge strane, vidimo da Kalenova linearizacija vodi na znatno više kritične temperature, u skladu sa analizom iz Glave 3.

Tabela 4.6:

Izračunate vrednosti parametara modela za različite vrednosti λ_{\perp} u CA prilazu za Rb_2MnCl_4

λ_{\perp}	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-1}$
J	11.31757	11.30740	11.23020	10.68300	7.38454
η	1.002620	1.002640	1.002800	1.004630	1.02333
$\Phi_{\parallel}^{--}(0)$	-1.18675	-1.181110	-1.142650	-0.993575	-0.702575
$\Phi_{\perp}^{--}(0)$	-0.881516	-0.879513	-0.864624	-0.798211	-0.659999
$\Phi_{\perp}^{+-}(0)$	0.478437	0.476243	0.460153	0.390974	0.257052
$\langle S^z \rangle_0$	2.323670	2.325020	2.334200	2.368280	2.423880
$\Phi_{\parallel}^{--}(T_N)$	-3.712980	-3.666620	-3.433393	-2.84774	-2.05298
$\Phi_{\perp}^{--}(T_N)$	-2.524920	-2.527760	-2.50381	-2.31116	-1.956190
$\Phi_{\perp}^{+-}(T_N)$	2.524920	2.527730	2.503420	2.306570	1.920810
$T_N[\text{K}]$	62.5395	63.7386	69.8099	86.6559	123.0190

Kao i u svim prethodnim slučajevima, prostorna anizotropija ne utiče na magnonsku disperziju duž k_x pravca.

$(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$

Odgovarajuće vrednosti za $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$ su prikazane u Tabeli 4.8. Numerički podaci iz poslednje dve tabele pokazuju isti trend: povećanjem jačine interplanarne interakcije lokalizovanih spinova rastu magnetizacija osnovnog stanja i Nelova temperatura. Pri tome se, bar što se tiče Nelove temperature, predviđanja teorije sve više razilaze sa eksperimentom.

Tabela 4.7:

Izračunate vrednosti parametara modela za različite vrednosti λ_{\perp} u CA prilazu za $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$

λ_{\perp}	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-1}$
J	9.52663	9.56157	9.43559	8.96255	6.19408
η	1.001690	1.00167	1.001858	1.00362	1.021250
$\Phi_{\parallel}^{--}(0)$	-1.20241	-1.19621	-1.15268	-0.998265	-0.704952
$\Phi_{\perp}^{--}(0)$	-0.891541	-0.889533	-0.872129	-0.802227	-0.6623
$\Phi_{\perp}^{+-}(0)$	0.488725	0.486484	0.467682	0.394792	0.258963
$\langle S^z \rangle_0$	2.31989	2.32139	2.33181	2.36722	2.4234
$\Phi_{\parallel}^{--}(T_N)$	-3.81457	-3.75756	-3.48719	-2.87245	-2.06551
$\Phi_{\perp}^{--}(T_N)$	-2.58443	-2.59185	-2.55501	-2.33682	-1.96879
$\Phi_{\perp}^{+-}(T_N)$	2.58442	2.59182	2.55464	2.33226	1.93351
$T_N[\text{K}]$	50.3591	51.8463	57.4661	72.1318	102.804

Nakon detaljne numeričke analize 3D modela, možemo zaključiti da 2D HAFM sasvim dobro opisuje magnetizam jedinjenja Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$. Bez obzira što se pogodnim izborom $\lambda_{\perp} \neq 0$ može postići da izračunata Nelova temperatura bude koji delić stepena bliža

eksperimentalnoj vrednosti, 2D model (naročito u RPA slici) ima nekoliko prednosti. Pre svega, 2D HAFM u RPA slici je pravi samousaglašeni model. To znači da se *svi* njegovi parametri mogu fiksirati koristeći eksperimentalne podatke o magnonskoj disperziji na niskim temperaturama. Drugo, u teorijskom opisu 2D modela (kao i uostalom kod svih D – dimenzionih modela razmatranih u Glaviama 2 i 3) se pojavljuju određeni integrali koji poseduju *analitička rešenja*. Prema tome, 2D model je istinski zatvoren i jednostavniji, pri čemu analitička rešenja povećavaju stepen pouzdanosti predviđanja. O svrsishodnosti uključivanja medjuravanske interakcije u hamiltonijan može se suditi tek posle razmatranja dodatnih eksperimentalnih rezultata. Recimo, nakon poredjenja teorijskih predviđanja sa eksperimentalnim vrednostima magnonske disperzije duž još nekih pravaca visoke simetrije unutar Brillouinove zone. Takvi eksperimentalni rezultati, prema našim saznanjima, za sada ne postoje. Na kraju treba istaći da primena samousaglašenog metoda daje vrlo dobre rezultate i u slučaju roditeljskih jedinjenja visokotemperaturnih superprovodnika, kupratnih antiferomagnetna [52–54].

Deo II

Metod teorije polja

Glava 5

Efektivna teorija polja i Hajzenbergov feromagnet

U prvom delu disertacije su razmatrani Hajzenbergov feromagnet i antiferomagnet koristeći metod linearizacije jednačina kretanja za spinske operatore. Pokazano je da takav prilaz u suštini daje iste rezultate kao dobro poznati metod dvovremenskih temperaturskih Grinovich funkcija Tjablikova (kako u originalnoj RPA šemi, tako i u Kalenovoj aproksimaciji). Takođe, naglašeno je da prilaz korišćen u ovom tekstu ima prednost da se jasnije ističe priroda RPA rešenja. Ispostavlja se da je u RPA (ili Kalenovoj) slici, Hajzenbergov model opisan bozonskim magnonskim poljem, pri čemu je masa magnona renormalizovana usled interakcije (videti npr. rešenja za operatore magnonskog polja u LSW i RPA linearizaciji, navedene u odeljku 2.1.2). Konkretno, feromagnet je opisan Šredingerovim poljem, dok se iz odeljka 2.2 vidi da RPA rešenje za antiferomagnet podseća na kompleksno skalarno polje na rešetki. Zanimljivo je da se analogije između kompleksnih polja i RPA rešenja za Hajzenbergov model mogu podići na viši nivo. Odnosno, moguće je konstruisati efektivnu teoriju polja na rešetki u kojoj se kao dinamički stepeni pojavljuju pravi magnonski operatori. Koristeći metode teorije polja, uz zadržavanje pune simetrije originalne rešetke (tj. zadržavanjem korektnog oblika magnonske disperzije u celoj Brilluonovoj zoni), moguće je pružiti odgovore na dva dobro poznata pitanja koja se pojavljuju u konvencionalnim pristupima Hajzenbergovom modelu. Prvo se odnosi na poznati "sporni" doprinos $\propto T^3$ u niskotemperaturskom razvoju feromagnetnog parametra uređenosti za 3D model koji se javlja u RPA šemi. Niže u tekstu je pokazano da se ovaj doprinos javlja usled zanemarivanja magnon–magnon interakcija koje generiše Ves-Zumino-Vitenov (WZW) član u efektivnom lagranžijanu za feromagnet. Drugi problem je vezan za razlikovanje jednodimenzionih antiferomagnetnih modela u zavisnosti od toga da li je u čvorovima lokalizovan celobrojni ili polucelobrojni spin (tzv. Haldejnova hipoteza [7, 8, 55]). Naime, dobro je poznato da se u granici kontinuuma HAFM preslikava na nelinearni sigma model (NLSM), pri čemu se kod jednodimenzionih modela pojavljuje tzv. θ – član koji pravi razliku između modela sa celobrojnim i polucelobrojnim spinovima [1, 55, 56]. Problem u vezi ovog, danas već standardnog rezultata, je što do sada nije konstruisan model na rešetki koji bi davao rezultat $\theta \neq 0$ [56–59]. Ispostavlja se da je takav model moguće dobiti pogodnom transformacijom antiferomagnetnog spinskog lanca. Dodatna korist od ove transformacije je pojavljivanje pravih magnonskih operatora polja čime se eliminiše potreba za rotacijom Bogoljubova prilikom dijagonalizacije antiferomagnetnog hamiltonijana u linearnoj aproksimaciji. Tako se u potpunosti naglašava analogija sa relativističkim teorijama polja na koju je ukazano prilikom linearizacije

jednačina kretanja za antiferomagnet u odeljku 2.2.

Rukovodeći se idejom koja je izneta u uvodu, da je radi potpunijeg razumevanja problema poželjno razmatrati *i feromagnet i antiferomagnet*, kao i od činjenice da je ponekad lakše formulisati teorijski prilaz za feromagnet, krenućemo od efektivne teorije polja na rešetki koja nudi objašnjenje za T^3 – član Tjablikova. Najpre ćemo izračunati popravku prvog reda na propagator za Šredingerovo polje na rešetki, na osnovu čega ćemo dobiti prvu popravku na LSW rezultat sa spontanu magnetizaciju. Takođe, pokazaćemo da je spontana magnetizacija izračunata na ovaj način ekvivalentna uobičajenoj definiciji magnetizacije pomoću slobodne energije. Konačno, nakon računanja slobodne energije i u granici kontinuuma, pokazaćemo da je pravi uzrok za T^3 – član Tjablikova zanemarivanje magnon–magnon interakcija koje su posledica WZW člana, odnosno da RPA Tjablikova eksplicitno narušava $O(3)$ invarijantnost Hajzenbergovog feromagneta. Istovremeno, rezultati ove analize će poslužiti kao dodatno opravdanje za primenu tjablikovske linearizacije na Hajzenbergov antiferomagnet.

Nakon toga, pažnja će biti posvećena jednodimenzionom antiferomagnetu i dobijanju θ – člana na rešetki. Definisana je transformacija koja povezuje 1D HAFM sa malom ali konačnom spinskom anizotropijom ($G \ll 1$) sa hamiltonijanom masivnog $O(3)$ NLS modela sa θ – članom. Pokazano je da linearizovano rešenje ovakvog NLS modela na rešetki reprodukuje standardni LSW rezultat bez primene transformacije Bogoljubova. Na osnovu rezultata iz Glave 6 se može bolje razumeti sličnost između kompleksnog skalarnog polja na rešetki i Hajzenbergovog antiferomagneta, uočena prilikom RPA linearizacije u Glavi 2.

5.1 Statistički i fizički opis jako korelisanih sistema

5.1.1 Efektivni stepeni slobode

Teorijski prilazi kojima se u literaturi tretiraju jako korelisani sistem lokalizovanih spinova se grubo mogu podeliti u dve velike kategorije. Prva bi se mogla označiti kao statistički pristup problemu¹. U ovu kategoriju pre svega spada metod jednačina kretanja, na čijoj se primeni zasniva analiza Hajzenbergovog modela iz prethodne tri Glave. Tu se takođe nalaze srodni metodi Grinovih funkcija [2, 21, 27, 28] i egzaktnih reprezentacija lokalizovanih spinova pomoću bozonskih [1, 2, 60], fermionskih [34], kombinovanih bozonsko–fermionskih operatora [51, 61] ili dijagramska tehnika za spinske operatore [62–64]. Takođe, u ovu kategoriju treba svrstati i poznata egzaktna rešenja nekih modela, recimo Onzagerovo rešenje 2D Izingovog ili Beteovo rešenje jednodimenzionog Hajzenbergovog modela [65]. Zajedničko za sve prilaze iz ove kategorije je da se dinamika sistema kao celine pokušava rekonstruisati korišćenjem kinematike njegovih konstituenata. Drugim rečima, u statističkom opisu sistema lokalizovanih spinova se ni u jednom koraku ne pojavljuju stepeni slobode kojih nema u originalnom Hajzenbergovom hamiltonijanu². Iako su u određenom smislu različiti metodi koji pripadaju statističkom prilazu standardni i u nekim slučajevima daju odlične³ (ili čak egzaktne) rezultate, ovaj prilaz ima određene manjkavosti. Osnovni nedostatak se tiče upravo algebre, odnosno kinematike

¹U smislu direktne primene metoda statističke fizike.

²Originalni stepeni slobode uključuje bozonske ili fermionske operatore pomoću kojih su izraženi lokalizovani spinovi.

³Pod odlične rezultate sigurno možemo podvući predviđanja za kritičnu temperaturu u samousaglašenom prilazu iz Glave 4.

spinskih operatora. Standardne teorije nelinearnih spinskih talasa se zasnivaju za bozonskim/fermionskim reprezentacijama spinskih operatora. Međutim, komutacione relacije za spinske operatore, pa samim tim i dinamika celog sistema, ostaju potpuno nepromenjeni jedino ako se u *potpunosti* zadrži egzaktna reprezentacija spinskih operatora [51]. Zbog toga su teorije interagujućih spinskih talasa veoma osetljive na bilo kakve aproksimacije⁴. Tu spadaju različite aproksimacije srednjeg polja (MFA) u Hajzenbergovom hamiltonijanu [62, 63, 66, 67], korišćenje aproksimativnih bozonskih/fermionskih izraza za spinske operatore [2, 51] ili linearizacija jednačina kretanja za S^\pm operatore⁵ gde se aproksimacija vrši direktno u komutatoru $[S^+, S^-]$ (videti [24, 25, 27, 68] i Glavu 2). Svi navedeni tipovi aproksimacija u suštini *menjaju* spinsku strukturu trojke operatora (S^\pm, S^z), na način koji se često ne može najbolje sagledati samo u okviru korišćenog pristupa.

Naspram statističkog pristupa stoji metod efektivnih lagranžijana, odnosno efektivna teorija polja, čija je osnovna ideja uvođenje *fizičkih* stepeni slobodne od samog početka. Ovaj prilaz vuče korene iz kvantne hromodinamike, gde je poznat i pod nazivom kiralna teorija perturbacija [69–74]. U suštini, efektivna teorija polja je detaljno razvijena teorija perturbacija za Goldstonove bozone i samim tim je primenljiva na sisteme kod kojih dolazi do spontanog narušavanja simetrije, pod uslovom da su Goldstonovi bozoni jedine bezmasene čestice u spektru [72]. Takođe, metod efektivnih lagranžijana dopušta i tretiranje sistema kod kojih postoji eksplicitno narušavanje simetrije okarakterisano nekim malim parametrom [75]. U slučaju Hajzenbergovog modela, to može biti mala ali konačna spinska anizotropija ili slabo spoljašnje magnetno polje. Metod efektivnih lagranžijana je osmišljen tako da se maksimalno iskoristi simetrija datog modela. Zbog toga je ovaj prilaz u određenoj meri opšti i omogućava predviđanja za veliki broj modela koji se odlikuju istom simetrijom, tačnije istim obrascem narušavanja simetrije. Detalji koji inače razlikuju pojedine mikroskopske modele u metodu efektivnih lagranžijana se pojavljuju kroz numeričke vrednosti konstanti kuplovanja koje se ne mogu fiksirati samo na osnovu simetrijskih razmatranja. Njih je moguće odrediti fitovanjem na eksperimentalne podatke, poređenjem sa mikroskopskim proračunima ili sa numeričkim simulacijama.

Naravno, ovakva podela verovatno nije iscrpna niti pretenduje da bude univerzalna, samim tim što se i u statističkom prilazu koristi pojam magnona kao elementarne ekscitacije. Takođe, sigurno postoji veliki broj prelaznih formi, ili čak metoda koji se ne mogu svrstati ni u jednu od dve pomenute kategorije (npr. numeričke simulacije, koje su možda bliže statističkom metodu). Ipak, podela na statistički i fizički prilaz lepo ilustruje razliku između metoda koji je primenjen u prvom delu disertacije i metoda efektivnih lagranžijana, o kojem će biti reči u nastavku.

5.1.2 Efektivni lagranžijan

Obrazac spontanog narušavanja simetrije, karakterističan za određenu klasu mikroskopskih modela omogućava da se uvede efektivni opis sistema pomoću Goldstonovih bozona. Neka je hamiltonijan datog modela invarijantan u odnosu na globalne transformacije koje generišu elementi grupe G , dok je osnovno stanje $|0\rangle$ invarijantno u odnosu na užu klasu transformacija definisanu grupom $H \subset G$. Ograničavamo se na slučaj kada G predstavlja transformaciju u unutrašnjem prostoru. Recimo, kod Hajzenbergovog modela to će biti globalna $O(3)$ simetrija

⁴Razume se da je nekakva forma aproksimacije neophodna.

⁵Odnosno metod Grinovih funkcija

hamiltonijana i $O(2)$ simetrija osnovnog stanja. Prema Goldstonovoj teoremi [6, 33, 73], prilikom spontanog narušavanja simetrije po obrazcu $G \longrightarrow H$, u spektru se pojavljuju bezmasene čestice (Goldstonovi bozoni), tako da je broj *realnih* Goldstonovih polja $\pi^a(x)$ dat sa $N_{GB} = \dim(G) - \dim(H)$. S obzirom da energija Goldstonovih bozona nestaje u limesu $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$, na Goldstonove ekscitacije se može gledati kao na simetrijske transformacije, ali sa parametrom transformacije koji zavisi od prostorno–vremenskih koordinata [73, 76]. Recimo, u slučaju Hajzenbergovog modela, mala odstupanja od osnovnog stanja, odnosno stanja koja sadrže pobuđene magnone (Goldstonove bozone u slučaju Hajzenbergovih magneta), mogu se shvatiti kao delovanje operatora rotacije (1.10) sa prostorno–vremenski zavisnim koeficijentima $\theta_i(\mathbf{x}, t)$, na vakuumsko stanje $|0\rangle$. Zapravo, elementarne ekscitacije nastaju delovanjem transformacija koje ne očuvavaju osnovno stanje. Pošto elementi $h \in H$, po definiciji, ne menjaju osnovno stanje ($h|0\rangle = |0\rangle$), Goldstonove bozone kreiraju transformacije koje pripadaju prostoru koseta G/H [73, 76]. U slučaju feromagneta, to su transformacije tipa $\exp[iS_1\pi^1(x) + iS_2\pi^2(x)]$, pri čemu su S_1 i S_2 generatori koji ne anihiliraju vakuum $S_j|0\rangle \neq 0$, $j = 1, 2$ [79]. Parametri $\pi^1(x)$ i $\pi^2(x)$ se mogu, do na faktor, poistovetiti sa Goldstonovim bozonima. Drugim rečima, Goldstonova polja svakoj tački prostor–vremena pridružuju element iz prostora G/H [72].

Efektivni lagranžijan, kao centralni objekat u efektivnom prilazu, predstavlja najopštiji mogući lagnanžijan koji je u skladu sa unutrašnjim i odgovarajućim prostorno–vremenskim simetrijama originalnog hamiltonijana, napisan pomoću Goldstonovih polja π^a , $a = 1, 2 \dots N_{GB}$. Stepene slobode koji figurišu u mikroskopskom hamiltonijanu se ne pojavljuju u efektivnom lagranžijanu. Ukoliko bi bili uzeti u obzir svi mogući članovi, efektivna teorija bi matematički bila ekvivalentna polaznoj [69, 72]. Naravno, takva teorija zapravo ne bi predstavljala nikakvo značajno uprošćenje. Pojednostavljenje računa u efektivnoj teoriji dolazi od opažanja da se pri niskim energijama (odnosno temperaturama) Goldstonovi bozoni ponašaju kao slobodne čestice, sa disperzijom $\omega \propto \mathbf{p}^2$ u slučaju nerelativističkih i $\omega \propto |\mathbf{p}|$ za relativističke sisteme⁶ koja oslikava izotropiju u direktnom prostoru. Tako se u efektivnoj teoriji sve veličine računaju pomoću razvoja po stepenima impulsa, tj. temperature. Posmatrano u direktnom prostoru, stepenima impulsa odgovaraju izvodi, pa se efektivni lagranžijan sastoji od niza sabiraka, koji su invarijantni u odnosu na globalne transformacije G , pri čemu se broj prostorno–vremenskih izvoda kod uzastopnih sabiraka povećava. Prvi sabirak sakuplja sve članove reda \mathbf{p}^2 . Ukoliko je originalni hamiltonijan invarijantan u odnosu na operaciju parnosti, kao što je slučaj sa Hajzenbergovim modelom, mogući su samo sabirci sa parnim stepenima impulsa. Dakle, sledeći sabirak je reda \mathbf{p}^4 itd. Za nerelativističke sisteme se vremenski izvod računa kao \mathbf{p}^2 , odnosno kao dva prostorna izvoda. Slično, za nerelativističke sisteme se svaki stepen temperature računa kao \mathbf{p}^2 , a za relativističke kao $|\mathbf{p}|$. Nakon što je konstruisan efektivni lagranžijan, direktna primena Fejnmanovih pravila omogućava da se izračunaju korelacione funkcije, particiona funkcija (odnosno slobodna energija) i druge veličine od interesa.

Naravno, ni metod efektivne teorije polja nije bez ograničenja. Za predviđanja sa višim stepenom tačnosti, odnosno za računanje veličina proporcionalno višim stepenima impulsa (ili temperature), potrebno je uračunavati doprinose sve većeg broja članova iz efektivnog lagranžijana. Iako je za dati stepen tačnosti uvek potrebno izračunati konačan broj dijagrama, taj broj veoma brzo raste sa porastom stepena impulsa. Budući da je maksimalno prilagođen

⁶Pod relativističkim i nerelativističkim podrazumevamo sisteme kod kojih ekscitacije imaju gore navedenu zavisnost od impulsa. U ovakvoj klasifikaciji je feromagnet u granici kontinuuma tipičan nerelativistički a antiferomagnet relativistički sistem.

opisu sistema pri niskim temperaturama, direktno ekstrapoliranje rezultata teorije perturbacija za Goldstonove bozone na proizvoljno visoke temperature može da se stavi pod znak pitanja⁷. Ovom nedostatku se može (donekle) doskočiti regularizacijom pomoću prostorene rešetke i sumiranjem svih mogućih dijagrama određene klase, kao što je pokazano niže u disertaciji. Ipak, takav postupak donekle narušava potpunu sistematičnost prilaza efektivne teorije polja.

5.2 Efektivni magnonski hamiltonijan na rešetki

5.2.1 Efektivni lagranžijan za feromagnet

Ubrzo nakon originalne formulacije, metod efektivnih lagranžijana je prilagođen problemima kondenzovanog stanje [29, 79]. Konkretno, efektivna teorija je primenjena na Hajzenbergov feromagnet sa popriličnim uspehom [80–82].

Kod Hajzenbergovog feromagneta dolazi do narušavanja simetrije po obrascu $O(3) \rightarrow O(2)$, zbog čega se pojavljuju dva Goldstonova polja $\pi^1(x)$ i $\pi^2(x)$. Međutim, Goldstonovi bozoni u ovom slučaju poseduju nerelativističku disperziju $\omega \propto \mathbf{p}^2$, tako da je potrebno kompleksno polje $\psi \propto \pi^1 + i\pi^2$ da se opiše feromagnetni magnon. Geometrijski gledano, prostor $O(3)/O(2)$ se može identifikovati sa sferom S^2 , tako je umesto magnonskih polja $\pi^1(x)$ i $\pi^2(x)$ efektivni lagranžijan pogodno napisati pomoću jediničnog vektora $\mathbf{U}(x) := [\boldsymbol{\pi}(x), U^3(x)]^T$. Detaljno izvođenje vodećeg člana efektivnog lagranžijana za feromagnet se može naći u [19, 29, 83–85]. U pogodno izabranoj parametrizaciji polja $U^i(x)$, u realnom vremenu, on glasi

$$\mathcal{L}_{\text{eff}} = \Sigma \frac{\partial_t U^1 U^2 - \partial_t U^2 U^1}{1 + U^3} - \frac{F^2}{2} \partial_\alpha U^i \partial_\alpha U^i, \quad (5.1)$$

pri čemu je $\Sigma = NS/V$ magnetizacija osnovnog stanja obračunata po jedinici zapremine [80] dok je F konstanta (N je broj čvorova a V je zapremina rešetke). Kao što je već rečeno, neodređene konstante koje se pojavljuju u lagranžijanu se mogu fiksirati fitovanjem na eksperimentalne podatke (slično postupku iz Glave 4) ili poređenjem sa mikroskopskim proračunima, odnosno sa numeričkim simulacijama. Važno je primetiti da je prvi član iz lagranžijana zapravo invarijantan do na totalni izvod u odnosu na globalne $O(3)$ transformacije [29, 83, 84], tako da je samo dejstvo zaista nepromenjeno. Taj sabirak se obično označava kao Ves–Zumino–Vitenov (WZW) član i odgovoran je za Berijevu fazu [19], odnosno za nerelativističku disperziju feromagnetnih magnona. Takođe, niže je pokazano da je "problematični" doprinos Tjablikova posledica zanemarivanja magnon–magnon interakcija koje generiše WZW član. Viši doprinosi u efektivnom lagranžijanu sadrže sabirke poput $l_1(\partial_\alpha U^i \partial_\alpha U^i)^2$, $l_1(\partial_\alpha U^i \partial_\beta U^i)^2$, $l_3 U^i \partial_\alpha \partial_\alpha U^i$, ili $l_4 \partial_\alpha^2 U^i \partial_\alpha^2 U^i$, sa neodređenim konstantama l_1, \dots, l_4 [81, 82]. Ove $\mathcal{O}(\mathbf{p}^4)$ članove nećemo direktno uključiti u efektivni opis. Umesto toga, viši članovi po impulsu, odnosno po prostornim izvodima, pojaviće se prirodno u rešetkom regularizovanoj teoriji. Međutim, stavljanje hamiltonijana na rešetku ograničava moguće izbore ovih viših članova. Iako izgleda da lagranžijan (5.1) opisuje slobodno polje, uslov $|\mathbf{U}(x)| = 1$ generiše izuzetno netrivialnu interakciju između magnona.

⁷Na sličan problem je ukazivao Dajson još 1956. godine [22].

5.2.2 Regularizacija

Proračuni u efektivnoj teoriji polja se obično vrše u funkcionalnom formalizmu. Međutim, naš osnovni cilj je da ispitamo kako magnon–magnon interakcija utiče na renormalizaciju mase, uz puno očuvanje disperzione relacije, odnosno diskretne simetrije originalne prostorne rešetke. Tako ćemo moći da izvršimo poređenje sa prilazom Tjablikova i drugim teorijama nelinearnih spinskih talasa. Zbog toga ćemo formulirati teoriju u Hamiltonovom (kanonskom) formalizmu, zamenjujući na pogodan način prostorni kontinuum rešetkom i ostavljajući samo (imaginarnu) vremensku koordinatu kontinualnom [20, 86, 87]. Neki detalji o regularizaciji rešetkom Lorenc–invarijantne teorije (kiralne teorije perturbacija) se mogu naći u [88, 89].

Lagranžijan koji opisuje dinamiku neinteragujućih magnona se dobija jednostavno iz uslova $U^3 = 1$, što odgovara osnovnom stanju feromagneta. Tako nalazimo

$$\mathcal{L}_{\text{free}} = i\psi^\dagger(x)\partial_t\psi(x) - \frac{F^2}{\Sigma}\nabla\psi^\dagger(x)\cdot\nabla\psi(x), \quad \psi = \sqrt{\frac{\Sigma}{2}}[U^1 + iU^2] \quad (5.2)$$

što prepoznavamo kao lagranžijan slobodnog Šredingerovog polja ψ [19] za čestice sa disperzijom $\mathbf{k}^2/(2m)$, gde je $m = \Sigma/(2F^2)$. Odgovarajući slobodni (klasični) hamiltonijan je

$$\mathcal{H}_0 = \frac{F^2}{\Sigma}\partial_\mu\psi^\dagger\partial_\mu\psi. \quad (5.3)$$

EksPLICITNI oblik magnon–magnon interakcije dobijamo rešavanjem uslova $|\mathbf{U}| = 1$. U najnižoj aproksimaciji možemo pisati [81, 82] $U^3 \approx 1 - (1/2)\boldsymbol{\pi}^2$, čime dobijamo

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = \frac{\Sigma}{8}\boldsymbol{\pi}^2[\partial_t U^1 U^2 - \partial_t U^2 U^1] - \frac{F^2}{2}(\boldsymbol{\pi}\cdot\partial_\alpha\boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\pi}\cdot\partial_\alpha\boldsymbol{\pi}). \quad (5.4)$$

Članovi sa vremenskim izvodima se mogu eliminisati [81, 82] pomoću jednačine kretanja [uporediti sa (2.3)]

$$\partial_t U^a + \frac{F^2}{\Sigma}\varepsilon_{aij}(\Delta U^i)U^j = 0, \quad (5.5)$$

gde je $\Delta = \partial_\alpha\partial_\alpha$. Na ovaj način dolazimo do gustine hamiltonijana koja opisuje magnon–magnon interakciju

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{F^2}{8}\boldsymbol{\pi}^2[\boldsymbol{\pi}\cdot\Delta\boldsymbol{\pi} - \Delta\boldsymbol{\pi}^2], \quad (5.6)$$

pri čemu smo odbacili totalni izvod. Konačno, stavljanjem slobodnog hamiltonijana (5.3) i interakcionog dela (5.6) na rešetku, dobijamo hamiltonijan koji opisuje efektivnu interakciju feromagnetnih magnona na rešetki

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= H_0 + H_{\text{int}}, \\ H_0 &= -\frac{F^2}{\Sigma}v_0\sum_{\mathbf{x}}\psi^\dagger(\mathbf{x})\nabla^2\psi(\mathbf{x}), \\ H_{\text{int}} &= -\frac{F^2}{8}v_0\sum_{\mathbf{x}}\boldsymbol{\pi}^2(\mathbf{x})[\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x})\cdot\nabla^2\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}) - \nabla^2\boldsymbol{\pi}^2(\mathbf{x})] \\ &\equiv H_{\text{int}}^{(1)} + H_{\text{int}}^{(2)}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

U gornjim jednačinama ∇^2 označava diskretni laplasijan (A.23), dok je kompleksno Šredingerovo polje na rešetki (za teoriju na rešetki je $\Sigma = S/v_0$, gde je v_0 zapremina elementarne ćelije)

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{S}{2v_0}}[\pi^1(\mathbf{x}) + i\pi^2(\mathbf{x})], \quad [\psi(\mathbf{x}), \psi^\dagger(\mathbf{y})] = \frac{1}{v_0}\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (5.8)$$

H_0 je u suštini LSW hamiltonijan (2.13), tako da su nerenormalizovane magnonske energije, slobodni operatori polja i dijagonalni hamiltonijan u impulsnom prostoru dati sa

$$H_0 = V \int_{\mathbf{k} \text{ IBZ}} \omega(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}, \quad (5.9)$$

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \int_{\mathbf{k} \text{ IBZ}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega(\mathbf{k})\tau}, \quad (5.10)$$

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{\widehat{\mathbf{k}}^2}{2m}, \quad m = \frac{F^2}{2\Sigma}, \quad \widehat{\mathbf{k}}^2 = \frac{2D}{|\boldsymbol{\lambda}|^2}[1 - \gamma_D(\mathbf{k})], \quad (5.11)$$

gde je $|\boldsymbol{\lambda}|$ rastojanje između najbližih suseda na rešetki, a D broj prostornih dimenzija rešetke (videti Prilog A). Za razliku od hamiltonijana koji opisuje magnonsku dinamiku u granici kontinuuma, diskretna simetrija rešetke koja modifikuje magnonsku disperziju od $\mathbf{k}^2/(2m)$ do $\widehat{\mathbf{k}}^2/(2m)$, u potpunosti je sačuvana u (5.7). Drugim rečima, svi članovi iz efektivnog lagranžijana koji su višeg reda po impulsima magnona (odnosno, višeg reda po prostornim izvodima) i koji opisuju modifikaciju disperzione relacije usled diskretne strukture rešetke, skupljeni su u H_0 . Ova činjenica na izvestan način uprošćava dalje proračune. Sa druge strane, magnon-magnon interakcije koje su u skladu sa unutrašnjim simetrijama Hajzenbergovog hamiltonijana (do datog stepena tačnosti) i diskretnim simetrijama originalne rešetke, nalaze se u H_{int} . Na ovaj član se može gledati i kao na korekciju reda $1/S$. Važno je dalje da primetimo kako H_{int} uključuje interakcije koje generiše WZW član $H_{\text{int}}^{(1)}$. Konstantu F^2 možemo izabrati da bude $\Sigma/(2m)$, gde je m masa LSW magnona iz (2.15). Tako bi energija efektivnih magnona takođe bila merena u jedinicama integrala izmene J . Naravno, ovakav izbor nije bitan jer se vrednost konstante F^2 u principu može odrediti na osnovu eksperimentalnih podataka o magnonskoj disperziji, slično postupku iz Glave 4. Hamiltonijan (5.7) podseća na Dajsonov hamiltonijan, do kojeg je on došao razmatrajući neortogonalna višemagnonska stanja [22]. Kasnije je isti hamiltonijan dobijen korišćenjem bozonskih reprezentacija spinskih operatora [38, 90]. Međutim, hamiltonijan (5.7) je dobijen polazeći od efektivnog lagranžijana, bez ikakve direktne veze sa lokalizovnim spinovima. Ovde prikazano izvođenje jasno pokazuje da $H_{\text{int}}^{(2)}$ potiče od uobičajenog gradijentnog člana hamiltonijana koji opisuje dinamiku jediničnog vektorskog polja dok $H_{\text{int}}^{(1)}$ opisuje magnon-magnon interakcije usled postojanja WZW člana u efektivnom lagranžijanu. Zbog toga je $H_{\text{int}}^{(1)}$ ključan za očuvanje spinskih karakteristika bozonskog polja $\mathbf{U}(x)$ [19].

Na osnovu dosadašnjeg izlaganja prednost efektivnog u odnosu na statistički prilaz postaje očigledna. U efektivnoj teoriji polja se od samog početka radi sa *bozonskim* magnonskim operatorima $\pi^a(x)$, tj. $\psi(x)$, tako da je dinamika sistema razdvojena od spinskih komutacionih relacija. Sva uprošćavanja se tiču direktno operatora magnon-magnon interakcije čime efekat aproksimacija postaje transparentniji.

5.3 Popravka prvog reda za Grinovu funkciju

5.3.1 Propagator i spontana magnetizacija

Da bismo ispitali na koji način magnon–magnon interakcija iz (5.7) utiče na masu magnona, pa i na druge makroskopske karakteristike feromagneta, izračunaćemo popravku na termalni magnonski propagator [18, 19, 81]

$$D(\mathbf{x} - \mathbf{y}, \tau_x - \tau_y) = \langle T \{ \psi(\mathbf{x}, \tau_x) \psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y) \} \rangle_0 = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbf{q}} \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y}) - i\omega_n(\tau_x - \tau_y)}}{\omega(\mathbf{q}) - i\omega_n}. \quad (5.12)$$

Ovde su $\omega_n = 2\pi n/\beta$ bozonske Macubarine frekvencije, $\langle \dots \rangle_0$ označava usrednjavanje po slobodnom hamiltonijanu H_0 iz (5.7) dok su $\omega(\mathbf{q})$ nerenormalizovane magnonske energije (5.11)

Propagator možemo iskoristiti da izračunamo spontanu magnetizaciju u funkciji temperature. Na niskim temperaturama možemo staviti $\Sigma(T) = S \langle U^3 \rangle \approx S - (S/2) \langle \boldsymbol{\pi}^2 \rangle$, odnosno

$$\Sigma(T) = S - v_0 \int_{\mathbf{q} \text{ IBZ}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle_0 = S - v_0 D(0), \quad (5.13)$$

gde je $D(0)$ propagator izračunat u koordinatnom početku, $\langle n_{\mathbf{q}} \rangle_0$ je Boze raspodela slobodnih magnona, dok smo takođe iskoristili formalno pravilo sumiranja [18] $\beta^{-1} \sum_n [\omega_{\mathbf{p}} - i\omega_n]^{-1} = \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0$. Kada u razmatranje uključimo interakciju, propagator iz (5.13) ćemo jednostavno zameniti Grinovom funkcijom interagujućeg sistema i na taj način dobiti popravku na LSW rezultat. Kasnije će biti pokazano da je ovakav način računanja spontane magnetizacije ekvivalentan standardnoj definiciji izvoda slobodne energije po spoljašnjem polju [81, 82].

5.3.2 Računanje Grinove funkcije

Grinova funkcija interagujućeg Šredingerovog polja je definisana kao

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{y}, \tau_x - \tau_y) = \frac{\langle T \{ \psi(\mathbf{x}, \tau_x) \psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y) U(\beta) \} \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}, \quad (5.14)$$

gde je $U(\beta) = T \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau H_{\text{int}}(\tau) \right\}$. Razvijanjem eksponenta u red po stepenima H_{int} dolazimo do Fejnmanovih pravila za interagujuće magnonsko polje.



Sl. 5.1.: Dijagrami relevantni za računanje popravke prvog reda na propagator (5.12). Brojevi kojima su označeni verteksi se odnose na $H_{\text{int}}^{(1)}$ i $H_{\text{int}}^{(2)}$ iz (5.7) dok pune linije označavaju propagatore (5.12)

Dijagrami potrebni za popravku prvog reda su prikazani na Sl. 5.1. Korekcija koja potiče od prvog verteksa je

$$\begin{aligned} \delta G^{(1)}(x - y) &= - \frac{F^2 a^{2D}}{S^2} \int_{z(\beta)} D(x - z) D(z - y) [\nabla_z^2 G(z)] \Big|_0 \\ &- \frac{F^2 a^{2D}}{S^2} \int_{z(\beta)} D(x - z) \nabla_z^2 D(z - y) G(0), \end{aligned} \quad (5.15)$$

pri čemu smo uveli skraćeno označavanje $\int_0^\beta d\tau_z a^D \sum_{\mathbf{z}} := \int_{z(\beta)}$, kao i $D+1$ dimenzione vektore $z = [z, \tau_z]^T$. Slično, popravka usled drugog verteksa je

$$\begin{aligned} \delta G^{(2)}(x-y) &= \frac{F^2 a^{2D}}{2S^2} \int_{z(\beta)} \nabla_z^2 [D(x-z)D(z-y)] D(0) \\ &+ \frac{F^2 a^{2D}}{S^2} \int_{z(\beta)} D(x-z) \nabla_z^2 [D(z-y)D(w-z)] \Big|_{w=z} \end{aligned} \quad (5.16)$$

jer je $\nabla^2 D(0) = 0$. Kao i obično [18], ove popravke se najlakše računaju u impulsnom prostoru. Ograničavajući se u nastavku radi jednostavnosti na D -dimenzionu prostu kubnu rešetku⁸, nalazimo

$$\begin{aligned} G(p) &= D(p) + \delta G^{(1)}(p) + \delta G^{(2)}(p) \\ &= D(p) + \frac{F^2}{S^2} D^2(p) a^{2D} \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle_0 \left[\hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{\mathbf{q}}^2 - \widehat{(\mathbf{p}-\mathbf{q})}^2 \right], \end{aligned} \quad (5.17)$$

gde je $p = [\mathbf{p}, \omega_n]^T$. Iz (5.17) nalazimo spontanu magnetizaciju, $\langle S^z \rangle = S - a^D G(0)$, u prvoj popravci (one-loop),

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= S - a^D \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 + \delta \langle S^z \rangle, \\ \delta \langle S^z \rangle &= -\frac{1}{S} \frac{F^2}{\Sigma T} a^D \int_{\mathbf{p}} \frac{I(\mathbf{p})}{4 \sinh^2 [\omega_{\mathbf{p}}/(2T)]}, \end{aligned} \quad (5.18)$$

gde je $\omega_{\mathbf{p}} = (F^2/\Sigma) \hat{\mathbf{p}}^2$ i

$$\begin{aligned} I(\mathbf{p}) &= a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle_0 \left[\hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{\mathbf{q}}^2 - \widehat{(\mathbf{p}-\mathbf{q})}^2 \right] \\ &= \hat{\mathbf{p}}^2 \frac{a^2}{2D} a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle_0 \hat{\mathbf{q}}^2. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Zapisivanje spontane magnetizacije feromagneta kao u (5.18) ima jednu očiglednu prednost. Član $S - a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle_0$ opisuje smanjivanje magnetizacije usled slobodnih magnona. Njegov niskotemperaturski razvoj za 3D HFM sadrži poznate stepene temperature $T^{3/2}$ (Blohov zakon), $T^{5/2}$, $T^{7/2}$ itd. Sa druge strane, korekcije koje su posledica magnon-magnon interakcija su objedinjene u integralu proporcionalnom sa $F^2/(\Sigma ST)$. U opštem slučaju D -dimenzionog HFM na prostoj kubnoj rešetki, niskotemperaturski razvoj spontane magnetizacije, izračunate u popravci prvog reda, sastoji se iz dva dela

$$\langle S^z \rangle = S - \delta \sigma_{\text{free}}(T) - \delta \sigma_{\text{int}}(T), \quad (5.20)$$

gde je

$$\delta \sigma_{\text{free}}(T) = \alpha_0 T^{D/2} + \alpha_1 T^{(D+2)/2} + \alpha_2 T^{(D+4)/2} + \alpha_3 T^{(D+6)/2} + \mathcal{O}(T^{(D+8)/2}) \quad (5.21)$$

⁸Videti jednačine (A.27)–(A.29) za definiciju geometrijskog faktora i svojstvenih vrednosti diskretnog laplasi-jana za D -dimenzionu prostu kubnu rešetku.

pri čemu su koeficijenti α_i koji potiču od slobodnih magnona dati sa

$$\begin{aligned}
\alpha_0 &= \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \right)^D \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(D/2)} \zeta \left(\frac{D}{2} \right) \left[\frac{\Sigma a^2}{F^2} \right]^{D/2}, \\
\alpha_1 &= \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \right)^D \frac{D}{16} \zeta \left(\frac{D+2}{2} \right) \left[\frac{\Sigma a^2}{F^2} \right]^{(D+2)/2}, \\
\alpha_2 &= \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \right)^D \frac{D[D+8]}{512} \zeta \left(\frac{D+4}{2} \right) \left[\frac{\Sigma a^2}{F^2} \right]^{(D+4)/2}, \\
\alpha_3 &= \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \right)^D \frac{D}{3072} \zeta \left(\frac{D+6}{2} \right) \left[\frac{\Sigma a^2}{F^2} \right]^{(D+6)/2} \left[25 + 3D + \frac{D^2}{8} \right].
\end{aligned} \tag{5.22}$$

Niskotemperaturski razvoj popravke prvog reda na LSW rezultat je

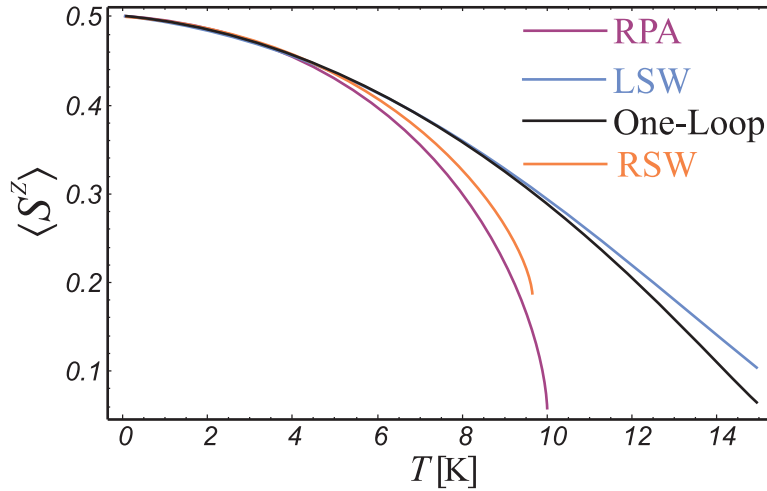
$$\delta\sigma_{\text{int}}(T) = \beta_1 T^{D+1} + \beta_2 T^{D+2} + \mathcal{O}(T^{D+3}), \tag{5.23}$$

sa koeficijentima

$$\begin{aligned}
\beta_1 &= \frac{1}{S} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{2D} \frac{D\pi^D}{8} \zeta \left(\frac{D}{2} \right) \zeta \left(\frac{D+2}{2} \right) \left[\frac{\Sigma a^2}{F^2} \right]^{D+1}, \\
\beta_2 &= \frac{1}{S} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{2D} \frac{D[D+2]\pi^D}{128} \left[\frac{\Sigma a^2}{F^2} \right]^{D+2} \\
&\times \left\{ \left[\zeta \left(\frac{D+2}{2} \right) \right]^2 + \zeta \left(\frac{D}{2} \right) \zeta \left(\frac{D+4}{2} \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{5.24}$$

U gornjim jednačinama $\zeta(x)$ označava Rimanovu zeta funkciju dok se $D \geq 3$ podrazumeva. Za 3D HFM, nalazimo da je najniža popravka $\propto T^4$, u saglasnosti sa Dajsonovim rezultatom [23, 38, 62, 63]. Vidimo da je korektan rezultat dobijen prilično jednostavno, računanjem samo jednog tipa dijagrama. Takođe, regularizacija rešetkom omogućava da se rezultat prve popravke poredi sa drugim metodama, poput RPA Tjablikova i LSW prilaza, ne ograničavajući se pri tom samo na jako niske temperature.

Poređenje popravke prvog reda (5.18) sa RPA rezultatom (2.17), LSW aproksimacijom (5.13) i teorijom renormalizovanih spinskih talasa [videti niže, jednačina (5.27)] za $S = 1/2$ i $J = 10$ K feromagnet na prostoju kubnoj rešetki je prikazana na Sl 5.2. Stavili smo $F^2 = JS\Sigma a^2$ u (5.18) i (5.27) da bismo računali sa jedinstvenom skalom energije. RPA rezultat za kritičnu temperaturu je $T_C \approx 10.065$ K.



Sl.5.2.: Spontana magnetizacija trodimenzionog HFM sa parametrima $S = 1/2$ and $J = 10\text{K}$, na prostoj kubnoj rešetki, izračunata u LSW aproksimaciji [jednačina (5.13)], RPA aproksimaciji Tjablikova (2.17), popravci prvog reda [one-loop, (5.18)] i samousaglašenoj (renormalizovanoj) teoriji spinskih talasa (RSW) [jednačina 5.27].

5.3.3 Renormalizacija magnonskih masa

Sumiranjem svih stepena dijagrama koji su prikazani na Sl.5.1, nalazimo Grinovu funkciju

$$G^{-1}(\mathbf{p}, \omega_n) = D^{-1}(\mathbf{p}, \omega_n) - \frac{F^2}{S^2} a^{2D} \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle \left[\widehat{\mathbf{p}}^2 + \widehat{\mathbf{q}}^2 - \widehat{(\mathbf{p} - \mathbf{q})}^2 \right]. \quad (5.25)$$

Prema (5.25), magnon–magnon interakcija renormalizuje magnonsku masu

$$m^{-1} \rightarrow m_{\text{R}}^{-1} = m^{-1} \left[1 - \frac{1}{S} \frac{a^2}{2D} a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle \widehat{\mathbf{q}}^2 \right], \quad (5.26)$$

gde je $\langle n_{\mathbf{q}} \rangle$ Boze raspodela za magnone sa energijom $\widehat{\mathbf{q}}^2/(2m_{\text{R}})$, dok je $2m = \Sigma/F^2$. Renormalizovane (obučene) magnonske energije se obično zapisuju pomoću integrala izmene kao jedinice energije. Tada je

$$\omega_{\text{R}}(\mathbf{k}) = J2D \left[S - a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle [1 - \gamma(\mathbf{q})] \right] [1 - \gamma(\mathbf{k})]. \quad (5.27)$$

Disperziju iz (5.27) prepoznamo kao korektan oblik renormalizovanih magnonskih energija [2, 61–63] Računanje spontane magnetizacije pomoću renormalizovanih magnona se svodi na samousaglašenu jednačinu, slično kao u RPA. Ovaj isti rezultat se dobija kada se na HAFM, izraženi pomoću bozona Dajson-Maleeva i uprošćen aproksimacijom haotičnih faza, primeni varijacija slobodne energije [91].

Dakle, koristeći rešetkom regularizovanu efektivnu teoriju polja za feromagnet, dobili smo neke od standardnih rezultata nelinearnih teorija spinskih talasa. Time smo pokazali ispravnost primenjenog postupka. Sada ćemo posvetiti pažnju T^3 članu Tjablikova.

5.3.4 RPA Tjablikova

Posmatrajmo sada sistem magnona na rešetki, i to takav da je slobodni deo hamiltonijana (5.9). Neka je njihova interakcija opisana članom $H_{\text{int}}^{(2)}$ iz (5.7) pri čemu ćemo dopustiti proizvoljnu konstantu kuplovanja g umesto $-F^2/8$. Ovaj interakcioni hamiltonijan se jednostavnim transformacijom prevodi u uobičajeni oblik dvočestične interakcije za Šredingerovo polje [18, 19]

$$\tilde{H}_{\text{int}} = \frac{a^{2D}}{2} \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi^\dagger(\mathbf{y}) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x}), \quad (5.28)$$

gde je efektivni potencijal

$$V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{8g}{a^{2+D}\Sigma^2} \sum_{\boldsymbol{\lambda}} \left[\Delta(\mathbf{y} = \mathbf{x} + \boldsymbol{\lambda}) - \Delta(\mathbf{y} = \mathbf{x}) \right]. \quad (5.29)$$

Popravka prvog reda na magnonski propagator se sada može izračunati kao

$$\delta\tilde{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \text{---} \overset{\circ}{\text{---}} + \text{---} \overset{\text{---}}{\text{---}} \text{---}. \quad (5.30)$$

Isprekidana linija predstavlja (minus) Furije–transform efektivnog dvočestičnog potencijala, $V(\mathbf{k}) = -16gD/(a^2\Sigma^2)[1 - \gamma(\mathbf{k})]$. Da bismo našli renormalizovane magnonske energije za ovaj tip interakcije, sumiraćemo sve moguće stepene dijagrama iz (5.30). Pošto je $V(\mathbf{k} = 0) = 0$, prvi član iz (5.30) ne doprinosi Grinovoj funkciji, tako da ostaje

$$\tilde{G}^{-1}(\mathbf{p}, \omega_n) = D^{-1}(\mathbf{p}, \omega_n) - \frac{1}{S} \frac{8g}{\Sigma} a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle (\widehat{\mathbf{p} - \mathbf{q}})^2. \quad (5.31)$$

Odnosno, uzimajući J za jedinicu energije, nalazimo renormalizovanu magnonsku disperziju

$$\tilde{\omega}(\mathbf{p}) = J2DS[1 - \gamma(\mathbf{p})] - \frac{1}{S} \frac{2D}{a^2} \frac{8g}{\Sigma} a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle [1 - \gamma(\mathbf{p} - \mathbf{q})]. \quad (5.32)$$

Dalje ćemo pretpostaviti da je srednji broj pobuđenih magnona isti na svim čvorovima rešetke. Ovo uprošćavanje igra ulogu Tjablikovljeve zamene operatora $S^z(\mathbf{x})$ sa srednjom vrednošću $\langle S^z \rangle$. Tada je

$$a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle \gamma(\mathbf{q}) = a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle \quad (5.33)$$

jednostavno srednji broj magnona na čvoru rešetke, $\langle n_{\mathbf{x}} \rangle$. Renormalizovane magnonske energije se sada mogu zapisati kao

$$\tilde{\omega}(\mathbf{p}) = J2D[1 - \gamma(\mathbf{p})] \left[S - \frac{8g}{Ja^2S\Sigma} \langle n_{\mathbf{x}} \rangle \right], \quad (5.34)$$

i svodiće se na RPA disperziju (2.9) na niskim temperaturama ako je $g = JSa^2\Sigma/8 = F^2/8$. Drugim rečima, efektivni hamiltonijan koji vodi do RPA Tjablikova, napisan pomoću magnonskih polja na rešetki je

$$H_{\text{eff}}^{\text{RPA}} = H_0 + \frac{F^2}{8} \sum_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\pi}^2(\mathbf{x}) \nabla^2 \boldsymbol{\pi}^2(\mathbf{x}) \quad (5.35)$$

pri čemu je H_0 definisan u (5.7). Obrtanjem sleda argumenata koji su doveli do $H_{\text{eff}}^{\text{RPA}}$ i korektnog efektivnog hamiltonijana za feromagnetne magnone (5.7), vidimo da se rezultati RPA Tjablikova dobijaju ako se krene od efektivnog lagranžijana

$$\mathcal{L}_{\text{eff}}^{\text{RPA}} = \frac{\Sigma}{2} (\partial_t U^1 U^2 - \partial_t U^2 U^1) - \frac{F^2}{2} \partial_\alpha U^i \partial_\alpha U^i - \frac{F^2}{4} \boldsymbol{\pi}^2(\mathbf{x}) \Delta \boldsymbol{\pi}^2(\mathbf{x}). \quad (5.36)$$

Prvi i treći sabirak u (5.36) eksplicitno narušavaju originalnu $O(3)$ invarijantnost Hajzenbergovog feromagneta.

Nakon pojavljivanja Tjablikovljevih radova, više autora (uključujući i samog Tjablikova) je ponudilo različita objašnjenja za suvišni T^3 — član u niskotemperaturnom razvoju magnetizacije. Tako je u Tjablikovljevoj monografiji [27] on pripisan "aproksimativnom karakteru" deкупlovanja jednačina kretanja i "zanemarivanju fluktuacija parametra uređenosti". U kontekstu dijagramske tehnike za spinske operatore [62, 63], autori primećuju da se član uz T^3 pojavljuje jer se u "metodu deкупlovanja jednačina kretanja članovi višeg reda u odnosu na r_0^{-3} ne računavaju na korektan način" (ovde je r_0^{-3} recipročna vrednost zapremine u kojoj se odvija interakcija i predstavlja formalni parametar razvoja u dijagramskoj tehnici za spinske operatore). Slično, autori u [25] zaključuju da se sporni T^3 doprinos javlja jer se "srednja vrednost u jednačinama kretanja uzima previše rano". Konačno, u [21] se tvrdi da je RPA aproksimacija u kojoj su "zanemareni doprinosi statičkih fluktuacija spinova". Međutim, u [21] je takođe primećeno da će se T^3 — član pojaviti u svakom prilazu koji nekorektno tretira spektralnu gustin koja ulazi u korelaciju funkciju $\langle S^- S^+ \rangle_{\mathbf{k}}$. Svi argumenti koji su ovde citirani se baziraju ili direktno na lokalizovanim spinovima [21, 27] koji definišu Hajzenbergov hamiltonijan, ili na njihovim bozonskim/fermijskim reprezentacijama [25, 62, 63]. Izvođenje rezultata Tjablikova pomoću efektivne teorije polja, prikazano u ovom odeljku, pruža jednostavan odgovor oslanjajući se na unutrašnju simetriju Hajzenbergovog modela. Iz jednačina (5.28)-(5.36) se vidi da RPA nekorektno opisuje $O(3)$ HFM na niskim temperaturama jer se zasniva na efektivnom lagranžijanu (5.36) koji ne očuvava unutrašnju rotacionu invarijantnost originalnog Hajzenbergovog hamiltonijana. Eksplicitno, vidimo da su u RPA slici ispuštene magnon–magnon interakcije koje potiču iz WZW člana, reprezentovane sa $H_{\text{int}}^{(1)}$. Možemo takođe reći da usled ovavog pojednostavljivanja magnon–magnon interakcija u efektivnom lagranžijanu, klasično vektorsko polje $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ nekorektno opisuje lokalizovane spinove feromagneta.

Ovde želimo da naglasimo da se ključna greška u RPA čini izostavljanjem magnon–magnon interakcija koje generiše WZW član. Zanemarivanje kratkodometnih fluktuacija parametra uređenosti, odnosno zanemarivanje fluktuacija srednjeg broja magnona po čvoru rešetke⁹ samo modifikuje T^3 član. Da bismo to pokazali, primetićemo da je popravka prvog reda na spontanu magnetizaciju koja odgovara jednačini (5.30) data sa

$$\delta \langle S^z \rangle = -\frac{1}{S} \frac{8g}{T\Sigma} a^D \int_{\mathbf{p}} \frac{J(\mathbf{p})}{4 \sinh^2[\omega_{\mathbf{p}}/(2T)]}, \quad (5.37)$$

$$J(\mathbf{p}) = a^D \int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle_0 (\widehat{\mathbf{p} - \mathbf{q}})^2. \quad (5.38)$$

Niskotemperaturni razvoj $\delta \langle S^z \rangle$ iz (5.37) počinje sa

$$-\frac{1}{S} \frac{8gD\pi^D}{2\Sigma} \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{2D} \left[\frac{\Sigma}{F^2}\right]^{D+1} \left\{ \left[\zeta\left(\frac{D}{2}\right)\right]^2 + \zeta\left(\frac{D}{2} + 1\right) \zeta\left(\frac{D}{2} - 1\right) \right\} T^D \quad (5.39)$$

⁹zamena $\int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle_0 \gamma(\mathbf{q})$ sa $\int_{\mathbf{q}} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle_0 = \langle n_{\mathbf{x}} \rangle$.

i za $D = 3$ će dati sporni T^3 član. Ako se uključi i dodatna pretpostavka o zanemarivanju kratkodometnih fluktuacija, u (5.39) nestaje doprinos $\propto \zeta(D/2 + 1)\zeta(D/2 - 1)$. Tačna vrednost Tjablikovljevog T^3 člana [27, 92],

$$-\frac{3}{2S} \left(\frac{1}{4\pi JS} \right)^3 \left[\zeta \left(\frac{3}{2} \right) \right]^2 T^3 \quad (5.40)$$

dobija se ako izaberemo $F^2 = JS\Sigma a^2$ i $g = F^2/8$.

5.4 Slobodna energija i simetrija efektivnog lagranžijana

5.4.1 Spontana magnetizacija

U ovom odeljku ćemo opravdati prethodno korišćenu definiciju spontane magnetizacije tako što ćemo pokazati da se isti rezultati dobijaju ako se pođe od slobodne energije sistema interagujućih magnona.

Da bismo mogli da iskoristimo standardnu definiciju spontane magnetizacije, uključićemo spoljašnje magnetno polje $\mathbf{H} = H\mathbf{e}_z$. Tako se otvara gep u magnonskom spektru

$$\omega(\mathbf{p}) \longrightarrow \omega(\mathbf{p}, H) = \omega(\mathbf{p}) + \mu H. \quad (5.41)$$

Popravka prvog reda na slobodnu energiju sistema magnona se može izračunati kao [93]

$$\delta F = -T \left(\text{diagram 1} \right) - T \left(\text{diagram 2} \right), \quad (5.42)$$

pri čemu koristimo istu notaciju kao na Sl.5.2. Doprinos slobodnoj energiji obrčunatoj po čvoru rešetke, koji potiče od ova dva dijagrama je

$$\delta f_N = \delta F/N = -\frac{1}{S} \frac{F^2}{\Sigma} \frac{a^2}{4D} \left[a^D \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \hat{\mathbf{p}}^2 \right]^2, \quad (5.43)$$

tako da se popravka na LSW spontanu magnetizaciju može izračunati kao

$$\delta \langle S^z \rangle(T) = -\frac{\partial(\delta f_N)}{\partial(\mu H)} \Big|_{H=0}. \quad (5.44)$$

Diferenciranjem (5.43) i korišćenjem (5.19), dolazimo do istog rezultata kao u (5.18). Primitićemo takođe da niskotemperaturski razvoj jednačine (5.43) počinje sa

$$\delta f_N = -\frac{1}{S} \frac{D\pi^D}{16a^D} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{2D} \left(\frac{\Sigma a^2}{F^2} \right)^{D+1} T^{D+2} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\mu H n/T}}{n^{(D+2)/2}} \right]^2 + \mathcal{O}(T^{D+3}), \quad (5.45)$$

što za $D = 3$ daje poznati Dajsonov član [23].

Pravi smisao efektivnih magnonskih polja se najbolje vidi kada se pomoću njih računa slobodna energija. Pošto je slobodna energija funkcija temperature i spoljašnjeg magnetnog polja,

očigledno je da magnonski operatori predstavljaju pogodno uvedene pomoćne stepene slobode za računanje traga statističkog operatora. Odnosno, prelazak sa originalnih stepeni slobode (lokalizovanih spinova) na magnonske operatore se može shvatiti kao smena promenljivih u računanju statističke sume. Ovo postaje naročito jasno ako se particiona funkcija računa u funkcionalnom formalizmu [70].

5.4.2 Spin–rotaciona simetrija efektivnog lagranžijana

Zaključci o prirodi RPA aproksimacije, izvedeni u odeljku 5.3.4, mogu se dodatno pojasniti (utvrditi) računanjem slobodne energije trodimenzionog Hajzenbergovog feromagneta na prosto kubnoj rešetki u granici kontinuuma. To će takođe omogućiti direktno poređenje sa postojećim proračunima izvršenim u funkcionalnom formalizmu [81, 82].

Za opis feromagneta u granici kontinuuma najpre moramo da nađemo gustinu hamiltonijana. Prema [1, 95], polazimo od hamiltonijana na rešetki (5.7) za $D = 3$ i razvojem u red dobijamo gustinu hamiltonijana do $|\mathbf{p}|^6$, organizovanu po stepenima impulsa

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 &= \frac{F^2}{2} \partial_\alpha \boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha \boldsymbol{\pi} - \Sigma \mu H (1 - \boldsymbol{\pi}^2/2) \\ \mathcal{H}^{(2)} &= \frac{F^2}{8} [\boldsymbol{\pi}^2 \boldsymbol{\pi} \cdot \Delta \boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\pi}^2 \Delta \boldsymbol{\pi}^2], \\ \mathcal{H}^{(4)} &= -l_1 \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi} + \frac{l_1}{4} [\partial_\alpha^2 (\boldsymbol{\pi}^2 \boldsymbol{\pi}) \cdot \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi} - \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi}^2 \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi}^2] \\ \mathcal{H}^{(6)} &= c_1 \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi} + \frac{c_1}{4} [-\partial_\alpha^3 (\boldsymbol{\pi}^2 \boldsymbol{\pi}) \cdot \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi} + \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi}^2 \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi}^2].\end{aligned}\tag{5.46}$$

pri čemu smo uključili slabo spoljašnje magnetno polje $\mathbf{H} = H e_z$. \mathcal{H}_0 opisuje slobodne magnone sa rotaciono–invarijantnom disperzijom

$$E(\mathbf{k}) = \frac{F^2}{\Sigma} \mathbf{k}^2 + \mu H,\tag{5.47}$$

dok prvi sabirci u $\mathcal{H}^{(4)}$ i $\mathcal{H}^{(6)}$ samo modifikuju disperziju usled anizotropija rešetke. Ostali doprinosi opisuju pravu magnon–magnon interakciju. Formalne vrednosti konstanti kuplovanja u (5.46) su $l_1 = F^2 a^2/24$, $c_1 = F^2 a^4/720$. Lako je videti da se hamiltonijan (5.46) može dobiti polazeći od lagranžijana

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}^{(2)} + \mathcal{L}^{(4)} + \mathcal{L}^{(6)}\tag{5.48}$$

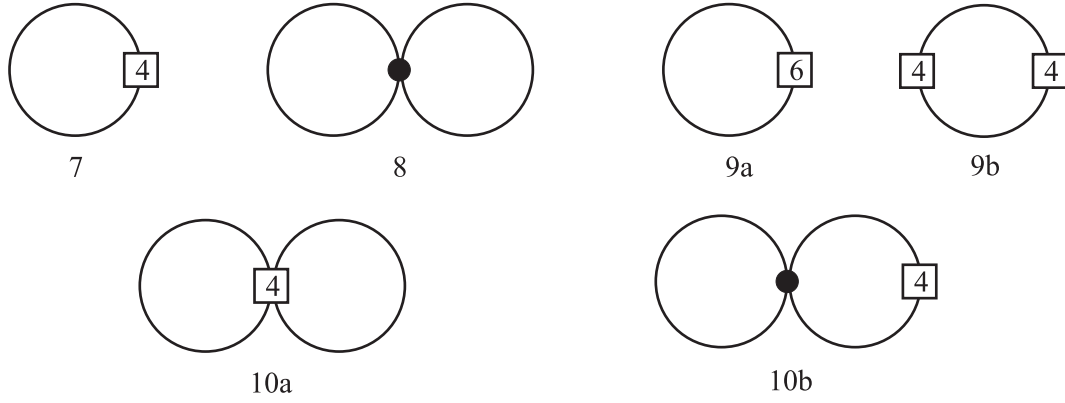
gde je $\mathcal{L}^{(2)}$ definisano u (5.1)

$$\mathcal{L}^{(2)} = \Sigma \frac{\partial_t U^1 U^2 - \partial_t U^2 U^1}{1 + U^3} - \frac{F^2}{2} \partial_\alpha \mathbf{U} \cdot \partial_\alpha \mathbf{U} + \Sigma \mu H U^3,\tag{5.49}$$

dok su

$$\mathcal{L}^{(4)} = l_1 \partial_\alpha^2 \mathbf{U} \cdot \partial_\alpha^2 \mathbf{U}, \quad \mathcal{L}^{(6)} = c_1 \mathbf{U} \cdot \partial_\alpha^3 \partial_\alpha^3 \mathbf{U}.\tag{5.50}$$

Vidimo da se, za razliku od unutrašnje (spin–rotacione) simetrije, prostorno–rotaciona simetrija gubi već kod članova reda $|\mathbf{p}|^4$.



Sl. 5.3.: Dijagrami potrebni za računanje popravke na slobodnu energiju neinteragujućih magnona opisanih hamiltonijanom \mathcal{H}_0 iz (5.46). Brojevi pridruženi verteksima se odnose na $\mathcal{H}^{(4)}$ i $\mathcal{H}^{(6)}$ iz (5.46), dok je verteks koji potiče od $\mathcal{H}^{(2)}$ označen tačkom. Uz svaki dijagram takođe stoji broj koji specificira odgovarajući stepen impulsa. Ovaj isti skup dijagrama se pojavljuje prilikom računanja popravke na slobodnu energiju za sistem opisan efektivnim RPA hamiltonijanom (5.56)

Sada ćemo izračunati popravku na gustinu slobodne energije ($\delta f_V = \delta F/V$) neinteragujućih magnona opisanih sa \mathcal{H}_0 , zaključno sa članovima $|\mathbf{p}|^{10}$, odnosno T^5 . U [81, 82] je detaljno obrazložena struktura dijagrama koji se pojavljuju u opisu 3D HFM. Pošto petlje nose dodatni faktor $|\mathbf{p}|^3$, relevantni dijagrami su prikazani na Sl. 5.3 (videti i [81, 82]). Svaki verteks je označen brojem koji ga povezuje sa odgovarajućim članom u (5.46). Izuzetak je $\mathcal{H}^{(2)}$ koji je označen tačkom. Takođe, uz svaki dijagram se nalazi i broj jednak odgovarajućem stepenu impulsa. Propagatori (pune linije) su sada dati sa (5.12), uz zamenu $\omega(\mathbf{k})$ sa $E(\mathbf{k})$, dok se granice integracije u \mathbf{k} prostoru sada protežu do $\pm\infty$. Takođe, oznaka $\int_{\beta(x)}$ sada predstavlja skraćeni zapis za $\int_0^\beta d\tau_x \int d^3x$.


Prvo ćemo izračunati doprinos koji potiče od neinteragujućih magnona. Njega daju dijagrami 7, 9a i 9b:

$$\begin{aligned} \delta f_V^{(7)} &= -\frac{2l_1}{\Sigma} \partial_\alpha^2 \partial_\alpha^2 D(x) \Big|_0 & (5.51) \\ &= -\frac{9}{2} \frac{l_1}{\Sigma} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \right)^3 \left[\frac{\Sigma}{F^2} \right]^{7/2} T^{7/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\mu H n/T}}{n^{7/2}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta f_V^{(9a)} &= -\frac{2c_1}{\Sigma} \partial_\alpha^3 \partial_\alpha^3 D(x) \Big|_0 & (5.52) \\ &= \frac{45}{4} \frac{c_1}{\Sigma} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \right)^3 \left[\frac{\Sigma}{F^2} \right]^{9/2} T^{9/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\mu H n/T}}{n^{9/2}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta f_V^{(9b)} &= -\frac{2l_1^2}{\Sigma^2} \int_{z(\beta)} \partial_\alpha^4 D(z) \partial_\alpha^4 D(-z) & (5.53) \\ &= -\frac{369}{8} \frac{l_1^2}{\Sigma^2} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \right)^3 \left[\frac{\Sigma}{F^2} \right]^{11/2} T^{9/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\mu H n/T}}{n^{9/2}}. \end{aligned}$$

Ako stavimo $l_1 = F^2 a^2 / 24$ i $c_1 = F^2 a^4 / 720$, popravka na sponatanu magnetizaciju, izračunatu korišćenjem (5.51)-(5.53), će se (do na faktor a^3) poklopiti sa koeficijentima $\alpha_1 T^{5/2}$ i $\alpha_2 T^{7/2}$ u niskotemperaturskom razvoju iz (5.21).

Dijagram  je jedini kandidat za T^4 doprinos slobodnoj energiji (odnosno, za T^3 doprinos magnetizaciji). Međutim, za Hamiltonijan (5.46), odnosno za lagranžijan (5.48) njegova vrednost iščezava zbog prostorno-rotacione simetrije¹⁰ vodećeg člana u lagranžijanu [jednačina (5.49)], odnosno $\mathcal{H}^{(2)}$ iz (5.46)

$$\begin{aligned}\delta f_V^{(8)} &= \frac{F^2}{2\Sigma^2} \{2D(0)\partial_\alpha\partial_\alpha D(x) - \partial_\alpha\partial_\alpha [D(x)D(-x)]\} \Big|_0 \\ &= \frac{F^2}{\Sigma^2} \partial_\alpha D(x)\partial_\alpha D(x) \Big|_0 = 0.\end{aligned}\quad (5.54)$$

Na iščezavanje ovog dijagrama je već ukazano u [81, 82]. Preostala dva dijagrama, 10a i 10b, sačinjavaju Dajsonov član. Za dijagram 10a nalazimo

$$\begin{aligned}\delta f_V^{(10a)} &= \frac{4l_2}{\Sigma^2} \left\{ 2D(0)\partial_\alpha^2\partial_\alpha^2 D(x) - \partial_\alpha^2\partial_\alpha^2 [D(x)D(-x)] \right\} \Big|_0 \\ &= - \frac{18\pi^3 l_2}{\Sigma^2} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^6 \left[\frac{\Sigma}{F^2} \right]^5 T^5 \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n\mu H/T}}{n^{5/2}} \right]^2,\end{aligned}\quad (5.55)$$

dok dijagram 10b takođe iščezava. Dakle, ako efektivni magnonski hamiltonijan zapišemo kao u (5.46), Dajsonov član (5.45) daje samo dijagram 10a. Za razliku od [81, 82], gde je računata slobodna energija 3D HFM pod pretpostavkom prostorne izotropije sve do članova reda $|\mathbf{p}|^6$, ovde su uračunati efekti koje prouzrokuje rešetka. Glavni zaključci, naravno, ostaju nepromenjeni.

Sada ćemo izračunati gustinu slobodne energije pomoću efektivne teorije polja za koju je u odeljku 5.3.4 pokazano da je ekvivalentna sa RPA na niskim temperaturama. Gustina hamiltonijana do $|\mathbf{p}|^6$ je u ovom slučaju data sa

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{RPA}}^{(2)} &= \frac{F^2}{8} \boldsymbol{\pi}^2 \Delta \boldsymbol{\pi}^2, \\ \mathcal{H}_{\text{RPA}}^{(4)} &= -l_1 \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi} + \frac{l_1}{4} \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi}^2 \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi}^2, \\ \mathcal{H}_{\text{RPA}}^{(6)} &= c_1 \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi} + \frac{c_1}{4} \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi}^2 \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi}^2.\end{aligned}\quad (5.56)$$

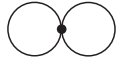
pri čemu su \mathcal{H}_0 i koeficijenti l_1 i c_1 isti kao u (5.46). Gustina lagranžijana se sada sastoji iz tri sabirka, $\mathcal{L}_{\text{RPA}} = \mathcal{L}_{\text{RPA}}^{(2)} + \mathcal{L}_{\text{RPA}}^{(4)} + \mathcal{L}_{\text{RPA}}^{(6)}$, od kojih svaki eksplicitno narušava unutrašnju $O(3)$ simetriju Hajzenbergovog modela

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{\text{RPA}}^{(2)} &= \frac{\Sigma}{2} (\partial_t U^1 U^2 - \partial_t U^2 U^1) - \frac{F^2}{2} \partial_\alpha \mathbf{U} \cdot \partial_\alpha \mathbf{U} + \Sigma \mu H U^3 - \frac{F^2}{4} \boldsymbol{\pi}^2 \Delta \boldsymbol{\pi}^2, \\ \mathcal{L}_{\text{RPA}}^{(4)} &= l_1 \partial_\alpha^2 \mathbf{U} \cdot \partial_\alpha^2 \mathbf{U} - \frac{l_1}{2} \boldsymbol{\pi}^2 \partial_\alpha^2 \partial_\alpha^2 \boldsymbol{\pi}^2 \\ \mathcal{L}_{\text{RPA}}^{(6)} &= l_1 \partial_\alpha^3 \mathbf{U} \cdot \partial_\alpha^3 \mathbf{U} - \frac{l_1}{2} \boldsymbol{\pi}^2 \partial_\alpha^3 \partial_\alpha^3 \boldsymbol{\pi}^2.\end{aligned}\quad (5.57)$$

Dijagrami potrebni za računanje slobodne energije su prikazani na Sl.5.3. Lako je videti da doprinosi koji opisuju modifikaciju slobodne energije usled anizotropija rešetke (dijagrami 7,

¹⁰Prostorno – rotaciona simetrija se ogleda u činjenici da je $\partial_\alpha D(x)|_0 = 0$, što se lako dobija na osnovu definicije propagatora (5.12) i izmena koje se tiču teorije u granici kontinuuma navedenih ispod Sl.5.3.

9a i 9b) ostaju isti kao i u slučaju hamiltonijana (5.46). Glavna promena se tiče dijagrama



. Njegov doprinos slobodnoj energiji u ovom slučaju iznosi

$$\delta f_V^{(8)\text{RPA}} = \frac{F^2}{\Sigma^2} D(0) \partial_\alpha \partial_\alpha D(x) \Big|_0 = -\frac{3}{2\Sigma} \left[\frac{\Sigma}{4\pi F^2} \right]^3 T^4 \sum_{n,m=1}^{\infty} \frac{e^{-(n+m)\mu H/T}}{n^{3/2} m^{5/2}} \quad (5.58)$$

i on je odgovoran za pogrešan T^3 član Tjablikova [videti (5.38) i (5.39)]. Na ovaj način smo stigli do istog zaključka kao i korišćenjem rešetkom regularizovane teorije: osnovni razlog za loše rezultate koje RPA predviđa na niskim temperaturama je eksplicitno narušavanje unutrašnje $O(3)$ simetrije Hajzenbergovog hamiltonijana, do čega dolazi zbog zanemarivanja magnon–magnon interakcija iz WZW člana. Drugim rečima, efektivno dejstvo za RPA Tjablikova više nije $O(3)$ invarijantno. U [81, 82] je pokazano da slobodna energija trodimenzionog $O(3)$ HFM ne sadrži doprinos uz T^4 ukoliko je vodeći član u efektivnom lagranžijanu rotaciono invarijantan u direktnom prostoru. Međutim, upravo smo pokazali da taj zaključak važi *samo* ako je istovremeno očuvana i rotaciona simetrija u unutrašnjem prostoru. U korektno postavljenoj teoriji perturbacija, prilikom definisanja operatora magnon–magnon interakcije, neophodno je zadržati sve članove koji na datom nivou obezbeđuju spin–rotacionu invarijantnost.

5.4.3 RPA Tjablikova i Hajzenbergov antiferomagnet

U prethodna dva odeljka je demonstrirana primenljivost metoda efektivnih lagranžijana, u kombinaciji sa regularizacijom rešetkom, na Hajzenbergov feromagnet. Sada ćemo dati neke argumente koji pokazuju da prethodni rezultati zapravo govore o favorizovanju primene RPA na Hajzenbergov antiferomagnet.

Hajzenbergov antiferomagnet i feromagnet se obično definišu pomoću mikroskopskih hamiltonijana koji se na prvi pogled razlikuju samo po predznaku integrala izmene. Tako je i učinjeno u Glavama 1 i 2 ovog teksta. Međutim, ova dva sistema se ponašaju znatno drugačije na mikroskopskom nivou. Razlika između feromagneta i antiferomagneta se mnogo bolje uočava ako se efektivni lagranžijan (5.1) uporedi sa odgovarajućim efektivnim lagranžijanom za antiferomagnet [29, 73, 77, 79, 80]

$$\mathcal{L}_{\text{eff}}^{(2)} = \frac{F^2}{2} \left[\partial_\alpha \mathbf{U} \cdot \partial_\alpha \mathbf{U} - \frac{1}{c^2} \partial_t \mathbf{U} \cdot \partial_t \mathbf{U} \right]. \quad (5.59)$$

Ovde je F konstanta kuplovanja, c je brzina prostiranja spinskih talasa, dok je od dva realna magnonska polja $\pi^1(x)$ i $\pi^2(x)$ sačinjen jedinični vektor $\mathbf{U}(x) = [\boldsymbol{\pi}(x), U^3(x)]^T$. Odmah primećujemo da je odgovarajuća jednačina kretanja drugog reda po vremenu, pa antiferomagnetni magnoni poseduju relativističku disperziju $\omega \propto |\mathbf{k}|$, o čemu će više biti reči u narednoj Glavi.

U odeljcima 5.3.4, 5.4.1 i 5.4.2 je pokazano da RPA Tjablikova zanemaruje magnon–magnon interakcije koje prouzrokuje WZW član u efektivnom lagranžijanu usled čega dolazi do odstupanja od strogih rezultata na niskim temperaturama. Iako se u jednačinama kretanja za dvovremenske Grinove funkcije formalno vrši ista aproksimacija $S_{\mathbf{n}}^z \approx \langle S^z \rangle$, ona više utiče na opis feromagneta. Naime, efektivni lagranžijan za antiferomagnet ne sadrži WZW član, pa je RPA aproksimacija manje gruba u ovom slučaju. To se lepo vidi iz niskotemperaturnog razvoja magnetizacije podrešetke. Poznato je da RPA Tjablikova daje članove sa parnim stepenima temperature, T^2, T^4, T^6, \dots [39]. Isti stepeni temperature se dobijaju u nelinearnoj

teoriji spinskih talasa [38], kao i u metodu efektivnih lagranžijana [78, 82]. Razlika je u tome što se magnon–magnon interakcija u RPA aproksimaciji počinje ispoljavati već od članova uz T^4 , dok je poznato da korektan rezultat predviđa uticaj interakcije tek od T^6 [38, 78, 82]. Međutim, RPA Tjablikova u slučaju antiferomagneta samo modifikuje već postojeći T^4 član, prisutan zbog anizotropije rešetke. Tako se može reći da je RPA samo *manje precizan* od strogih rezultata, u smislu da ne prouzrokuje pojavu novih, pogrešnih, stepeni temperature. O neophodnosti uključivanja WZW člana u efektivni opis feromagneta, kao i o njegovom slabom uticaju na HAFM, diskutovano je u [96]. Rezultati ovog poglavlja idu korak dalje od [96], budući da je pokazano kako termodinamičke veličine feromagneta zavise od magnon-magnon interakcija proisteklih u WZW članu.

Glava 6

Magnonski operatori i 1D Hajzenbergov antiferomagnet

Analiza u granici kontinuuma se danas svrstava u nezaobilazne alate za opis Hajzenbergovog antiferomagneta (HAFM). Jedan od razloga za ovo je nesumnjivo i Haldejevo otkriće [7,8] da se jednodimenzioni HAFM ponaša različito u zavisnosti od toga da li je u čvorovima rešetke lokalizovan celobrojni ili polucelobrojni spin. Pažljivim prelaskom na dugotalasnu aproksimaciju u direktnom prostoru se od HAFM dobija Lorenc-invarijantni $O(3)$ nelinearni σ model (NLSM) na osnovu kojeg se mogu izvesti zaključci u vezi elementarnih ekscitacija i prirode osnovnog stanja HAFM. U ovoj glavi je predložena transformacija Hajzenbergovog hamiltonijana koja znatno uprošćava prelazak na kontinuum u direktnom prostoru uz istovremeno očuvanje ukupnog broja stepeni slobode. Prikazani postupak ima tu prednost da se jednostavno dobijaju diskretni hamiltonijan i dejstvo koji zadržavaju punu simetriju originalne rešetke. Takođe, u slučaju anizotropnog modela (sa malom, ali konačnom anizotropijom) se u potpunosti reprodukuje magnonski spektar, a ne samo njegov rotaciono invarijantni deo koji odgovara dugotalasnim magnonima. Nakon kratkog uvoda u problem kontinualne teorije HAFM, definisana je transformacija jednodimenzionog Hajzenbergovog hamiltonijana koja uvodi prave magnonske operatore u direktnom prostoru, čime se eliminiše potreba za Bogoljubovljevom transformacijom prilikom određivanja spektra elementarnih ekscitacija i dijagonalizacije hamiltonijana. Ispostavlja se da dobijeni hamiltonijan predstavlja rešetkom regularizovani hamiltonijan NLS modela koji sadrži topološki θ član. Hamiltonijan je dijagonalizovan u linearnoj aproksimaciji i određene su magnonske energije, čime je uspostavljena veza sa metodom linearizacije jednačina kretanja izloženog u Glavi 2. Neki detalji u vezi teorije polja na rešetki, potrebni za dobijanje jednačina kretanja dati su u Prilogu A.

6.1 Opis spinskih sistema u granici kontinuuma

Iako kontinualna teorija feromagneta potiče još iz 1945 godine (Landauova makroskopska ili fenomenološka teorija), na potpuni dugotalasni opis antiferomagneta se moralo čekati sve do 80-tih godina XX veka. Razlog za ovoliko kašnjenje leži u netrivialnoj konfiguraciji spinova na antiferomagnetnoj rešetki. Naime, najjednostavniji antiferomagnet se sastoji od lokalizovanih spinova poređanih u dve međusobno isprepletane podrešetke i to tako da svi susedi uočenog čvora pripadaju drugoj podrešetki. Prelazak na aproksimaciju kontinuuma,

teorije koja je inicijalno definisana na prostornoj rešetki, obično podrazumeva aproksimiranje veličine $\mathcal{O}_{\mathbf{n}+a\mathbf{e}_\alpha} - \mathcal{O}_{\mathbf{n}}$ sa $a\partial_\alpha\mathcal{O}(\mathbf{x})$, gde je \mathbf{n} čvor rešetke, $a\mathbf{e}_\alpha$ je vektor koji spaja uočeni čvor sa najbližim susedom u pravcu \mathbf{e}_α na rastojanju a od njega, $\mathcal{O}_{\mathbf{n}}$ je operator neke veličine definisane na čvoru \mathbf{n} a \mathbf{x} je nova kontinualna promenljiva dobijena od diskretnog vektora položaja čvorova rešetke pri $a \rightarrow 0$. U slučaju Hajzenbergovog feromagneta (HFM), opisani postupak vodi do teorije polja čija je gustina hamiltonijana $\mathcal{H} \propto \partial_\alpha\mathbf{S}(\mathbf{x}) \cdot \partial_\alpha\mathbf{S}(\mathbf{x})$, pri čemu operatori $S_\alpha(\mathbf{x})$ sačinjavaju lokalnu spinsku algebru $[S_\alpha(\mathbf{x}), S_\beta(\mathbf{y})] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma(\mathbf{x})\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, zajedno sa uslovom normiranja $\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} = S(S + 1)$. Naravno, ove relacije predstavljaju osnovu Landauove teorije feromagnetizma. Kod HAFM se situacija komplikuje jer operatori $\mathbf{S}_{\mathbf{n}}$ i $\mathbf{S}_{\mathbf{n}+a\mathbf{e}_\alpha}$ pripadaju različitim podrešetkama pa translacija za jedan čvor rešetke odgovara rotaciji u unutrašnjem prostoru i tek preskok na sledeći susedni čvor vodi na operator u odnosu na koji ima smisla definisati prostornu varijaciju tipa $\partial_\alpha\mathbf{S}(\mathbf{x}) \cdot \partial_\alpha\mathbf{S}(\mathbf{x})$. Zbog toga se ne može jednostavno uvesti gradijentni član u hamiltonijan kada $a \rightarrow 0$. Usko povezana sa ovim je i činjenica da spinski operatori u najnižoj (Blohovej) aproksimaciji ne dijagonalizuju hamiltonijan HAFM. Pravi magnonski operatori, koji kreiraju jednomagnonska stanja u antiferomagnetu, uvode se Bogoljubovljevom transformacijom, pa se može reći da su antiferomagnetni magnoni "kolektivnija" pobuđenja od feromagnetnih. Haldejn je, sledeći Mikešku, rešio problem dugotalasne aproksimacije HAFM uvođenjem dva kontinualna polja koja opisuju uniformni i fluktuirajući deo parametra uređenosti, čime je u dugotalasnoj aproksimaciji preslikao HAFM na Lorencinvarijantni $O(3)$ nelinearni sigma model (NLSM). Poredeći ponašanje solitonskih i magnonskih rešenja u poluklasičnoj aproksimaciji ($S \gg 1$) u odnosu na operaciju inverzije vremena i koristeći od ranije poznate rezultate iz teorije NLSM, zaključio je da se u slučaju izotropnog 1D HAFM sa celobrojnim spinovima u spektru elementarnih ekscitacija javlja gep (tzv. Haldejnov gep). Sa druge strane, takav gep se ne pojavljuje u slučaju izotropnog HAFM sa polucelobrojnim spinovima. Nešto kasnije je pokazano [55, 56] da razliku između HAFM sa celobrojnim i polucelobrojnim spinovima pravi tzv. topološki (ili θ -član). Ovaj doprinos hamiltonijanu, odnosno odgovarajućem dejstvu, modifikuje impuls kanonski pridružen magnonskom polju ali, ne utiče na jednačine kretanja tako da se ne pojavljuje u perturbacionim prilazima koji se zasnivaju na teoriji spinskih talasa (SW) ili njenim mnogobrojnim modifikacijama (poput aproksimacije haotičnih faza). Treba reći da je Haldejnov gep čisto kvantni efekat koji nema klasični analogon (veličina gega je $E_0 \propto \exp[-\pi S]$, odakle se vidi da iščezava u klasičnoj aproksimaciji $S \rightarrow \infty$) i da se javlja kod sistema opisanih izotropnim hamiltonijanom. Kako stvari trenutno stoje, postojanje Haldejnove gega je karakteristično samo za jednodimenzioni HAFM.

6.2 Transformacija Hajzenbergovog hamiltonijana

6.2.1 Definicija transformacije

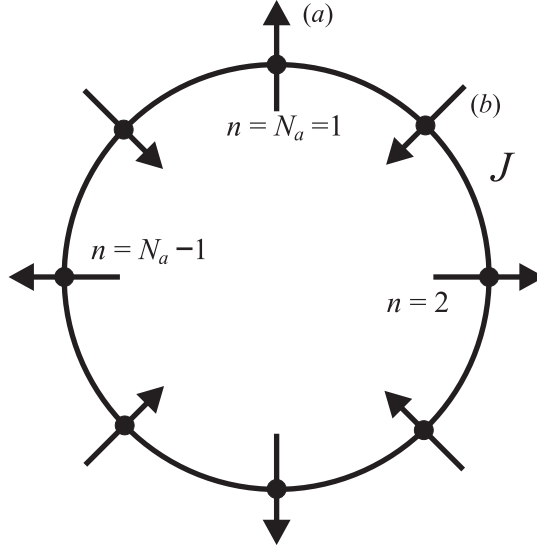
Posmatraćemo jednodimenzioni Hajzenbergov antiferomagnet sa spinskom XXZ anizotropijom koji se sastoji od dve podrešetke (a i b) na čijim čvorovima se nalaze odgovarajući spinski operatori. Za definiciju sistema uzimamo hamiltonijan

$$H = J \sum_{\mathbf{n}, \lambda} \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^{(a)} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}+\lambda}^{(b)} + GJ \sum_{\mathbf{n}, \lambda} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}+\lambda}^{z(b)}, \quad \lambda = \pm a\mathbf{e}_x \quad (6.1)$$

zajedno sa komutacionim relacijama

$$\left[S_{\mathbf{n}}^{\alpha(i)}, S_{\mathbf{m}}^{\beta(j)} \right] = i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{\mathbf{n}}^{\gamma(i)} \Delta(\mathbf{n} - \mathbf{m}) \delta_{i,j}, \quad i, j = a, b; \quad \alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3. \quad (6.2)$$

Vektor \mathbf{n} prebrojava čvorove podrešetke a kojih ima N_a , dok $\boldsymbol{\lambda}$ spaja uočeni čvor sa najbližim susedima ($\boldsymbol{\lambda} = \pm a \mathbf{e}_x$ gde je a rastojanje između susednih čvorova). Ograničićemo se na slučaj lake ose magnetizacije ($G > 0$) i male anizotropije ($G \ll 1$). Komutacione relacije (6.2) definišemo sa dva Kronekerova simbola da bi razlikovali dva seta međusobno komutirajućih spinskih operatora. Uvešćemo i periodične granične uslove ($S_{N_a}^{(a)} \equiv S_1^{(a)}$), tako da je 1D HAFM topološki ekvivalentan kružnici (videti Sl. 6.1).



Sl. 6.1: Šematski prikaz 1D HAFM sa periodičnim graničnim uslovima. Puna linija (kržnica) označava integral izmene J među susednim čvorovima

Da bi teorija Hajzenbergovog antiferomagneta bila izražena na jeziku obične teorije polja, odnosno da bi se operacije translacije za jedno mesto u levo ili desno jasno razdvojile od rotacija u unutrašnjem prostoru, potrebno je da na svakom čvoru rešetke budu definisani isti dinamički stepeni slobode. Hamiltonijan (6.1), kod kojeg se naizmenično smenjuju $S^{(a)}$ i $S^{(b)}$ operatori, očigledno ne zadovoljava taj uslov. Ovaj problem se može rešiti transformacijom koja operatore podrešetke b translira za jedno mesto u desno

$$S_{\mathbf{m}}^{(b)} \longrightarrow S_{\mathbf{m}+a\mathbf{e}_x}^{(b)}. \quad (6.3)$$

Tako nalazimo

$$\begin{aligned} H/J &= \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{(a)} \cdot S_{\mathbf{n}-a\mathbf{e}_x}^{(b)} + \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{(a)} \cdot S_{\mathbf{n}+a\mathbf{e}_x}^{(b)} + G \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}-a\mathbf{e}_x}^{z(b)} + G \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}+a\mathbf{e}_x}^{z(b)} \\ &\rightarrow \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{(a)} \cdot S_{\mathbf{n}}^{(b)} + \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{(a)} \cdot S_{\mathbf{n}+2a\mathbf{e}_x}^{(b)} + G \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}}^{z(b)} + G \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}+2a\mathbf{e}_x}^{z(b)}, \quad (6.4) \end{aligned}$$

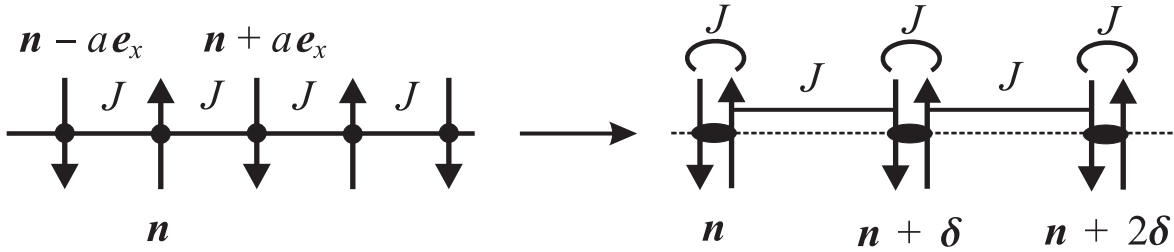
odnosno

$$\begin{aligned} H &= J \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{(a)} \cdot S_{\mathbf{n}}^{(b)} + GJ \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}}^{z(b)} \\ &+ J \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{(a)} \cdot S_{\mathbf{n}+\delta}^{(b)} + GJ \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}+\delta}^{z(b)} \quad (6.5) \end{aligned}$$

gde je

$$\boldsymbol{\delta} = 2a\mathbf{e}_x. \quad (6.6)$$

Treba obratiti pažnju da u trećem i četvrtom sabirku iz poslednje jednakosti u (6.5) nema sume po $\boldsymbol{\delta}$. Prelazak od originalnog hamiltonijana (6.1) ka novom (6.5) je ilustrovan na Sl.6.2



Sl. 6.2: Transformacija 1D HAFM u direktnom prostoru transliranjem operatora sa b podrešetke za jedno mesto u desno. Simbol \frown označava interakciju između operatora $\mathbf{S}^{(a)}$ i $\mathbf{S}^{(b)}$ koji se nalaze na istom čvoru dok puna linija označava interakciju između operatora $\mathbf{S}_n^{(a)}$ sa čvora \mathbf{n} i operatora $\mathbf{S}_{n+\delta}^{(b)}$ sa njemu susednog čvora sa desne strane. Parametar nove rešetke je $b = 2a = |\boldsymbol{\delta}|$.

Kod transformisanog sistema, opisanog hamiltonijanom (6.5), na svakom čvoru rešetke se nalaze po dva spinska operatora. U njemu postoje dve vrste interakcija: prva je između $\mathbf{S}^{(a)}$ i $\mathbf{S}^{(b)}$ operatora koji se nalaze na istom čvoru, a druga je između $\mathbf{S}^{(a)}$ operatora sa čvora \mathbf{n} i operatora $\mathbf{S}^{(b)}$ sa čvora $\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}$. Parametar nove rešetke je očigledno $b = 2a = |\boldsymbol{\delta}|$. Jedna od prednosti ovog prilaza, kao što će biti demonstrirano, je što se aproksimacije mogu vršiti postupno.

6.2.2 Novi dinamički stepeni slobode

Sledeći [55, 56], uvodimo nove operatore

$$\mathbf{M}(\mathbf{n}) = \frac{1}{2\sqrt{S(S+1)}} \left[\mathbf{S}_n^{(a)} - \mathbf{S}_n^{(b)} \right], \quad \mathbf{L}(\mathbf{n}) = \frac{1}{b} \left[\mathbf{S}_n^{(a)} + \mathbf{S}_n^{(b)} \right], \quad b = 2a \quad (6.7)$$

odnosno

$$\mathbf{S}_n^{(a)} = \sqrt{S(S+1)}\mathbf{M}(\mathbf{n}) + a\mathbf{L}(\mathbf{n}), \quad \mathbf{S}_n^{(b)} = -\sqrt{S(S+1)}\mathbf{M}(\mathbf{n}) + a\mathbf{L}(\mathbf{n}). \quad (6.8)$$

Iz gornje dve definicije vidimo da je u blizini Nelovog stanja ($\mathbf{S}^{(a)} = -\mathbf{S}^{(b)}$) za očekivati $\mathbf{L}(\mathbf{n}) \approx 0$, $\sqrt{S(S+1)}\mathbf{M}(\mathbf{n}) \approx \mathbf{S}^{(a)} = -\mathbf{S}^{(b)}$. Dublji smisao operatora $\mathbf{M}(\mathbf{n})$ i $\mathbf{L}(\mathbf{n})$ možemo sagledati iz komutacionih relacija. Koristeći (6.2), lako se pokazuje da važi

$$\left[L_\alpha(\mathbf{n}), L_\beta(\mathbf{m}) \right] = i \frac{\Delta(\mathbf{n} - \mathbf{m})}{b} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} L_\gamma(\mathbf{n}), \quad (6.9)$$

$$\left[M_\alpha(\mathbf{n}), L_\beta(\mathbf{m}) \right] = i \frac{\Delta(\mathbf{n} - \mathbf{m})}{b} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} M_\gamma(\mathbf{n}), \quad (6.10)$$

$$\left[M_\alpha(\mathbf{n}), M_\beta(\mathbf{m}) \right] = i \frac{\Delta(\mathbf{n} - \mathbf{m})}{b} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} L_\gamma(\mathbf{n}) \frac{b^2}{4S(S+1)}. \quad (6.11)$$

U poluklasičnoj aproksimaciji ($S \gg 1$) jednačina (6.11) postaje

$$\left[M_\alpha(\mathbf{n}), M_\beta(\mathbf{m}) \right] = 0, \quad (6.12)$$

pa $\mathbf{M}(\mathbf{n})$ možemo shvatiti kao vektorsko bozonsko polje definisano na 1D rešetki parametra $b = 2a$. Na osnovu definicije $\mathbf{L}(\mathbf{n})$ sledi da operator

$$\mathbf{L} = b \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}(\mathbf{n}), \quad \left[L_\alpha, L_\beta \right] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} L_\gamma \quad (6.13)$$

predstavlja ukupni spin rešetke. Kako je

$$\left[M_\alpha(\mathbf{n}), L_\beta \right] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} M_\gamma(\mathbf{n}), \quad (6.14)$$

vidimo da je \mathbf{L} generator rotacija u unutrašnjem prostoru operatora $\mathbf{M}(\mathbf{n})$. Dodatna ograničenja na $\mathbf{M}(\mathbf{n})$ i $\mathbf{L}(\mathbf{n})$ nalazimo koristeći definicione relacije. Tako je

$$\mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{n}) = \frac{1}{2b\sqrt{S(S+1)}} \left([\mathbf{S}_n^{(a)}]^2 - [\mathbf{S}_n^{(b)}]^2 - \mathbf{S}_n^{(a)} \cdot \mathbf{S}_n^{(b)} + \mathbf{S}_n^{(b)} \cdot \mathbf{S}_n^{(a)} \right) = 0, \quad (6.15)$$

pri čemu smo iskoristili činjenicu da operatori $\mathbf{S}_n^{(a)}$ i $\mathbf{S}_n^{(b)}$ međusobno komutiraju. Slično, iz

$$\mathbf{L}^2(\mathbf{n}) = \frac{1}{b^2} \left(2S(S+1) + 2\mathbf{S}_n^{(a)} \cdot \mathbf{S}_n^{(b)} \right), \quad (6.16)$$

nalazimo

$$\mathbf{S}_n^{(a)} \cdot \mathbf{S}_n^{(b)} = \frac{b^2}{2} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}) - S(S+1). \quad (6.17)$$

Koristeći (6.17), za normu vektorskog polja $\mathbf{M}(\mathbf{n})$ nalazimo

$$\mathbf{M}^2(\mathbf{n}) = \frac{1}{4S(S+1)} \left(2S(S+1) - 2\mathbf{S}_n^{(a)} \cdot \mathbf{S}_n^{(b)} \right) = 1 - \frac{a^2}{S(S+1)} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}). \quad (6.18)$$

Da bismo zadržali sve doprinose kvadratnih članova $\mathbf{L}^2(\mathbf{n})$ i $\mathbf{M}^2(\mathbf{n})$ prilikom dobijanja efektivnog bozonskog hamiltonijana, korišćemo normu vektora $\mathbf{M}(\mathbf{n})$ definisanu jednačinom (6.18). Mada će iz konteksta biti jasno da radimo sa operatorima polja u Hajzenbergovoj slici [npr. $\mathbf{M}(\mathbf{n}, t)$], vremenski argument neće biti pisan radi preglednosti.

6.2.3 Hamiltonijan bozonskog polja $\mathbf{M}(\mathbf{n})$ na rešetki

Konačno, preostalo je da se hamiltonijan (6.5) napiše pomoću novih operatora $\mathbf{M}(\mathbf{n})$ i $\mathbf{L}(\mathbf{n})$ definisanih na svakom čvoru 1D rešetke. Pri tome ćemo, za razliku od teorije spinskih talasa ili apoksimacije haotičnih faza pretpostaviti samo postojanje kratkodometnog uređenja. Naravno, sve izvršene aproksimacije treba da budu opravdane kasnijim izračunavanjima.

Prvi i drugi sabirak iz (6.5), koji opisuju interakciju spinskih operatora sa istog čvora, možemo transformisati pomoću (6.17):

$$\begin{aligned} & J \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{S}_n^{(a)} \cdot \mathbf{S}_n^{(b)} + GJ \sum_{\mathbf{n}} S_n^{z(a)} S_n^{z(b)} = \frac{b^2}{2} \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}) - JN_a S(S+1) \\ & + JG \sum_{\mathbf{n}} \left[aL^z(\mathbf{n}) + \sqrt{S(S+1)} M^z(\mathbf{n}) \right] \left[aL^z(\mathbf{n}) - \sqrt{S(S+1)} M^z(\mathbf{n}) \right]. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Pošto je u poluklasičnoj aproksimaciji

$$\begin{aligned}
& [aL^z(\mathbf{n}) + \sqrt{S(S+1)}M^z(\mathbf{n})][aL^z(\mathbf{n}) - \sqrt{S(S+1)}M^z(\mathbf{n})] \\
&= a^2[L^z(\mathbf{n})]^2 - S(S+1)[M^z(\mathbf{n})]^2 - aS[L^z(\mathbf{n}), M^z(\mathbf{n})] \\
&\approx S(S+1)\mathbf{M}_\perp^2(\mathbf{n}) - S(S+1),
\end{aligned} \tag{6.20}$$

gde je

$$\mathbf{M}_\perp^2(\mathbf{n}) = [M^x(\mathbf{n})]^2 + [M^y(\mathbf{n})]^2, \tag{6.21}$$

dobijamo

$$\begin{aligned}
& J \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{S}_n^{(a)} \cdot \mathbf{S}_n^{(b)} + GJ \sum_{\mathbf{n}} S_n^{z(a)} S_n^{z(b)} \\
&= J \frac{b^2}{2} \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}) + GJS(S+1) \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{M}_\perp^2(\mathbf{n}) - JN_a S(S+1)\eta,
\end{aligned} \tag{6.22}$$

$$\eta = 1 + G. \tag{6.23}$$

U (6.20) je zanemaren doprinos $\propto G[L^z(\mathbf{n})]^2$. Za to postoje tri razloga. S obzirom da smo pretpostavili kratkodometno uređenje, $L^z(\mathbf{n}) \approx 0$. Dalje, taj član je još za faktor $1/S(S+1)$ manji od preostala dva. Konačno, pomnožen je sa $G \ll 1$.

Treći i četvrti sabirak u hamiltonijanu, koji opisuju interakcije spinova sa susednih čvorova, mogu se napisati u pogodnom obliku upotrebom operatora konačnih razlika (videti Prilog A). Uvođenjem operatora $\mathbf{L}(\mathbf{n})$ i $\mathbf{M}(\mathbf{n})$ u treći sabirak, nalazimo

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_n^{(a)} \cdot \mathbf{S}_{n+\delta}^{(b)} &= a^2 \mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{n} + \delta) - a\sqrt{S(S+1)}[\mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{n} + \delta) - \mathbf{M}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{n} + \delta)] \\
&\quad - S(S+1)\mathbf{M}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{n} + \delta).
\end{aligned} \tag{6.24}$$

Stavljanjem

$$\begin{aligned}
-\mathbf{M}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{n} + \delta) &= \frac{1}{2}[\mathbf{M}(\mathbf{n} + \delta) - \mathbf{M}(\mathbf{n})]^2 - \frac{1}{2}[\mathbf{M}^2(\mathbf{n} + \delta) - \mathbf{M}^2(\mathbf{n})] \\
&= \frac{b^2}{2}[\nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n})]^2 - S(S+1) + a^2 \frac{\mathbf{L}^2(\mathbf{n}) + \mathbf{L}^2(\mathbf{n} + \delta)}{2S(S+1)},
\end{aligned} \tag{6.25}$$

gde smo uveli operator konačnih razlika (A.6) na rešetki parametra $|\delta| = b = 2a$ i iskoristili (6.18). Dakle

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{n}} \mathbf{S}_n^{(a)} \cdot \mathbf{S}_{n+\delta}^{(b)} &= a^2 \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{n} + \delta) \\
&\quad - a\sqrt{S(S+1)} \sum_{\mathbf{n}} [\mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{n} + \delta) - \mathbf{M}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{n} + \delta)] \\
&\quad + 2a^2 S(S+1) \sum_{\mathbf{n}} [\nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n})]^2 + a^2 \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}) - N_a S(S+1),
\end{aligned} \tag{6.26}$$

gde smo iskoristili $\sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}) = \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}^2(\mathbf{n} + \delta)$, što očigledno važi na beskonačnoj ili na rešetki sa periodičnim graničnim uslovima [26]. Prvi sabirak iz (6.26) možemo zapisati i kao

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{n} + \delta) &= \sum_{\mathbf{n}, \beta} L_\beta(\mathbf{n}) [b\nabla_x L_\beta(\mathbf{n}) + L_\beta(\mathbf{n})] \\
&= \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}) + b \sum_{\mathbf{n}} L_\beta(\mathbf{n}) \nabla_x L_\beta(\mathbf{n}) \approx \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}),
\end{aligned} \tag{6.27}$$

pri čemu smo zanemarili prostorne varijacije operatora $\mathbf{L}(\mathbf{n})$, što odgovara pretpostavci o postojanju kratkodometnog uređenja [vektor \mathbf{L} definiše tzv. uniformnu komponentu, što se vidi iz (6.8)]. Drugi sabirak iz (6.26) takođe možemo izraziti pomoću diskretnog operatora izvoda

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{n}} \left[\mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}) - \mathbf{M}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}) \right] &= b \sum_{\mathbf{n}} \left[\mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n}) - \mathbf{M}(\mathbf{n}) \cdot \nabla_x \mathbf{L}(\mathbf{n}) \right] \\ &= b \sum_{\mathbf{n}} \left[\mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n}) + [\nabla_x^* \mathbf{M}(\mathbf{n})] \cdot \mathbf{L}(\mathbf{n}) \pm [\nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n})] \cdot \mathbf{L}(\mathbf{n}) \right] \\ &= 2b \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n}) + b \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot [\nabla_x^* - \nabla_x] \mathbf{M}(\mathbf{n}), \end{aligned} \quad (6.28)$$

gde smo iskoristili i parcijalnu integraciju na rešetki (A.10). Međutim

$$\mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot [\nabla_x^* - \nabla_x] \mathbf{M}(\mathbf{n}) = -[\mathbf{M}(\mathbf{n} - \boldsymbol{\delta}) + \mathbf{M}(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta})] \cdot \mathbf{L}(\mathbf{n}) \approx 0, \quad (6.29)$$

jer pod pretpostavkom postojanja kratkodometnog uređenja u sistemu možemo uzeti da je $[\mathbf{M}(\mathbf{n} - \boldsymbol{\delta}) + \mathbf{M}(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta})]/2 \approx \mathbf{M}(\mathbf{n})$. Takođe, ovaj član iščezava u granici kontinuuma, dok na rešetki može postati bitan tek kada se uzimaju u obzir popravke višeg reda. U svakom slučaju, za određivanje magnonskih energija u najnižoj aproksimaciji, on ne igra važnu ulogu. Sada (6.26) možemo zapisati kao

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^{(a)} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}}^{(b)} &\approx 2a^2 \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}) - 4a^2 \sqrt{S(S+1)} \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n}) \\ &+ 2a^2 S(S+1) \sum_{\mathbf{n}} [\nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n})]^2 - N_a S(S+1). \end{aligned} \quad (6.30)$$

Ostao je još četvrti sabirak iz (6.5). Zadržavajući samo najveći doprinos uz $S(S+1)$ dobijamo

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}}^{z(b)} &= a \sum_{\mathbf{n}} L_z(\mathbf{n}) L_z(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}) - S(S+1) \sum_{\mathbf{n}} M_z(\mathbf{n}) M_z(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}) \\ &- a \sqrt{S(S+1)} \sum_{\mathbf{n}} \left[L_z(\mathbf{n}) M_z(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}) - M_z(\mathbf{n}) L_z(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}) \right] \\ &\approx -S(S+1) \sum_{\mathbf{n}} M_z(\mathbf{n}) M_z(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}). \end{aligned} \quad (6.31)$$

Postojanje lake ose magnetizacije i kratkodometnog uređenja podrazumeva da je $M_z(\mathbf{n}) \approx M_z(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta})$. Da bismo izdvojili najznačajnije dinamičke doprinose iz (6.31), iskoristićemo

$$\begin{aligned} - \sum_{\mathbf{n}} M_z(\mathbf{n}) M_z(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}) &= \frac{1}{2} \left[M_z(\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}) - M_z(\mathbf{n}) \right]^2 - [M_z(\mathbf{n})]^2 \\ &\approx \mathbf{M}_{\perp}^2(\mathbf{n}) - 1, \end{aligned} \quad (6.32)$$

gde smo zanemarili doprinos $\propto GL^2(\mathbf{n})$ u hamiltonijanu. Dakle,

$$\sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^{z(a)} S_{\mathbf{n}}^{z(b)} = \mathbf{M}_{\perp}^2(\mathbf{n}) - N_a. \quad (6.33)$$

Konačno, zamenom (6.22), (6.30) i (6.33) u (6.5) nalazimo

$$\begin{aligned}
H &= 4Ja^2 \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}^2(\mathbf{n}) + 2GJS^2 \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{M}_{\perp}^2(\mathbf{n}) + 2Ja^2 S^2 \sum_{\mathbf{n}} [\nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n})]^2 \\
&\quad - 4a^2 JS \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{L}(\mathbf{n}) \cdot \nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n}) \\
&= 4Ja^2 \sum_{\mathbf{n}} \left[\mathbf{L}(\mathbf{n}) - \frac{S}{2} \nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n}) \right]^2 + Ja^2 S^2 \sum_{\mathbf{n}} [\nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n})]^2 + [\eta^2 - 1] JS^2 \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{M}_{\perp}^2(\mathbf{n})
\end{aligned} \tag{6.34}$$

pri čemu smo izostavili konstantni član $2J\eta N_a S(S+1)$. Takođe, iskoristili smo činjenicu da za $G \ll 1$ važi [8] $2G \approx \eta^2 - 1$, gde je $\eta = 1 + G$. Definisanjem novih konstanti (tj. novih parametara hamiltonijana) relacijama

$$\sqrt{S(S+1)} = \frac{\tilde{\theta}}{2\pi}, \quad g = \frac{2}{\sqrt{S(S+1)}}, \quad c = 2Ja\sqrt{S(S+1)}, \quad m_0^2 = \frac{\eta^2 - 1}{4J^2 a^4 S(S+1)}, \tag{6.35}$$

hamiltonijan 1D HAFM sa XXZ spinskom anizotropijom dobija konačni oblik

$$H = \frac{cg}{2} b \sum_{\mathbf{n}} \left\{ \left[\mathbf{L}(\mathbf{n}) - \frac{\tilde{\theta}}{4\pi} \nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n}) \right]^2 + \frac{1}{g^2} [\nabla_x \mathbf{M}(\mathbf{n})]^2 + \frac{m_0^2 c^2}{g^2} \mathbf{M}_{\perp}^2(\mathbf{n}) \right\}. \tag{6.36}$$

Pretpostavimo li sada da je intenzitet bozonskog polja $\mathbf{M}(\mathbf{n})$ konstantan

$$\mathbf{M}^2(\mathbf{n}) = 1, \tag{6.37}$$

(6.36) postaje hamiltonijan rešetkom regularizovanog $O(3)$ Lorenc invarijantnog NLS modela koji sadrži tzv. topološki θ -član¹ [55,56]. U parametrima c i m_0 prepoznajemo brzinu spinskih talasa i masu magnona kod 1D XXZ HAFM, dok je g konstanta kuplovanja NLS modela [8]. Modeli na rešetki, sa po nekoliko spinova na svakom čvoru, razmatrani su u [56–59]. Ipak, ovi modeli nisu bili direktno povezani sa hamiltonijanom 1D HAFM (6.1), pa su autori pomenutih radova uspeli dobiti samo NLS model sa $\tilde{\theta} = 0$. Očigledno, primenom transformacije (6.3) u opštem slučaju nalazimo $\tilde{\theta} \neq 0$.

U uvodnom delu ove glave je naglašeno da prelazak na aproksimaciju kontinuuma za HAFM nije jednostavan zbog postojanja više podrešetki (najmanje dve). Prethodno izvođenje rešava taj problem. Sve dinamičke veličine u (6.36) su definisane na jedinstvenoj rešetki parametra $b = |\boldsymbol{\delta}| = 2a$. Dugotalasna aproksimacija se sada lako dobija puštanjem $b \rightarrow 0$, uz zamene

$$b \sum_{\mathbf{n}} f(\mathbf{n}) \rightarrow \int_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}), \quad \nabla_x f(\mathbf{n}) \rightarrow \partial_x f(\mathbf{x}), \quad \frac{\Delta(\mathbf{n} - \mathbf{m})}{b} \rightarrow \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \tag{6.38}$$

Dakle, kontinualni opis 1D HAFM je određen hamiltonijanom

$$H = \frac{cg}{2} \int_{\mathbf{x}} \left\{ \left[\mathbf{L}(\mathbf{x}) - \frac{\theta}{4\pi} \partial_x \mathbf{M}(\mathbf{x}) \right]^2 + \frac{1}{g^2} [\partial_x \mathbf{M}(\mathbf{x})]^2 + \frac{m_0^2 c^2}{g^2} \mathbf{M}_{\perp}^2(\mathbf{x}) \right\}, \tag{6.39}$$

¹Tačnije, član koji u dugotalasno aproksimaciji direktno daje topološki član.

gde sada polja $\mathbf{L}(\mathbf{x})$ i $\mathbf{M}(\mathbf{x})$ zadovoljavaju komutacione relacije

$$\left[L_\alpha(\mathbf{x}), L_\beta(\mathbf{y}) \right] = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \epsilon_{\alpha\beta\gamma} L_\gamma(\mathbf{x}), \quad (6.40)$$

$$\left[M_\alpha(\mathbf{x}), L_\beta(\mathbf{y}) \right] = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \epsilon_{\alpha\beta\gamma} M_\gamma(\mathbf{x}), \quad (6.41)$$

$$\left[M_\alpha(\mathbf{x}), M_\beta(\mathbf{y}) \right] = 0, \quad (6.42)$$

i dodatna dva uslova

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{M}^2(\mathbf{x}) = 1 \quad (6.43)$$

pri čemu je u granici velikog spina $\tilde{\theta} \rightarrow \theta = 2\pi S \in \mathbb{N}$, uz slične zamene u ostalim konstantama. Jednačine (6.39)-(6.43) definišu kontinualnu teoriju 1D HAFM u Hamiltonovom prilazu NLS modelu i obično se izvode drugim putem [55, 56].

6.3 Magnonske energije

6.3.1 Linearizacija hamiltonijana

Ispostavlja se [1, 19, 34, 55, 56, 65] da u granici kontinuuma, parametar $\theta = 2\pi S$ uzima efektivno samo dve vrednosti $\theta = \pi$ i $\theta = 0$, kao i da član koji množi θ ne utiče na jednačine kretanja. Zbog toga ćemo se, prilikom određivanja energije elementarnih ekscitacija, ograničiti na najjednostavniji slučaj $\theta = 0$. To će voditi do LSW rezultata. Pravilno tretiranje 1D HAFM sa θ -članom zahteva drugačiji pristup [1, 19, 34, 55, 56, 65].

Za rešavanje problema u Hamiltonovom formalizmu je neophodno definisati kanonske impulse pridružene polju $\mathbf{M}(\mathbf{n})$. Operatori polja $\mathbf{M}(\mathbf{x})$ i njima pridruženi kanonski impulsi $\mathbf{\Pi}(\mathbf{x})$ zadovoljavaju komutacione relacije $[M_\alpha(\mathbf{x}), \Pi_\beta(\mathbf{y})] = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\delta_{\alpha,\beta}$ [69], koje na rešetki parametra b postaju (A.22)

$$\left[M_\alpha(\mathbf{n}), \Pi_\beta(\mathbf{m}) \right] = i \frac{\Delta(\mathbf{m} - \mathbf{n})}{b} \delta_{\alpha,\beta}. \quad (6.44)$$

Sada je očigledno da se generator rotacija može zapisati kao [56]

$$\mathbf{L}(\mathbf{n}) = \mathbf{M}(\mathbf{n}) \times \mathbf{\Pi}(\mathbf{n}) \quad (6.45)$$

jer (6.44) i (6.45) daju komutacione relacije (6.9) i (6.10). Da bismo odredili energije elementarnih ekscitacija, pretpostavićemo dugodometno uređenje

$$\mathbf{M}(\mathbf{n}) = [0, 0, 1]^T, \quad (6.46)$$

tako da operatori $M_1(\mathbf{n})$ i $M_2(\mathbf{n})$ koje ćemo zadržati u hamiltonijanu opisuju mala pobuđenja u odnosu na uniformno stanje (6.46), koje se obično označava kao Nelovo stanje. Linearna aproksimacija je validna samo u blizini Nelovog stanja, što odgovara niskim temperaturama. Naravno, sam postupak linearizacije ne može da garantuje da stanje (6.46) zaista postoji.

Generator rotacija je u blizini Nelovog stanja određen sa

$$\mathbf{L}(\mathbf{n}) = \mathbf{e}_3 \times \mathbf{\Pi}(\mathbf{n}) = -\Pi_2(\mathbf{n}) \mathbf{e}_1 + \Pi_1(\mathbf{n}) \mathbf{e}_2, \quad (6.47)$$

tako da je

$$\mathbf{L}^2(\mathbf{n}) = \Pi_1^2(\mathbf{n}) + \Pi_2^2(\mathbf{n}). \quad (6.48)$$

Zamena (6.48) u (6.36), zajedno sa $\nabla_x M_3(\mathbf{n}) = 0$, vodi do linearnog hamiltonijana

$$H = \frac{cg}{2} b \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\alpha=1}^2 \left\{ \Pi_{\alpha}^2(\mathbf{n}) + \frac{1}{g^2} [\nabla_x M_{\alpha}(\mathbf{n})]^2 + \frac{m^2 c^2}{g^2} M_{\alpha}^2(\mathbf{n}) \right\}. \quad (6.49)$$

Reskaliranjem operatora koje očuvava kanonske komutacione relacije

$$M_{\alpha}(\mathbf{n}) = \sqrt{cg} m_{\alpha}(\mathbf{n}), \quad \Pi_{\alpha}(\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{cg}} \pi_{\alpha}(\mathbf{n}) \quad (6.50)$$

i uvođenjem kompleksnih polja

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{n}) &= \frac{m_1(\mathbf{n}) + im_2(\mathbf{n})}{\sqrt{2}}, & \phi^{\dagger}(\mathbf{n}) &= \frac{m_1(\mathbf{n}) - im_2(\mathbf{n})}{\sqrt{2}} \\ \pi(\mathbf{n}) &= \frac{\pi_1(\mathbf{n}) - i\pi_2(\mathbf{n})}{\sqrt{2}}, & \pi^{\dagger}(\mathbf{n}) &= \frac{\pi_1(\mathbf{n}) + i\pi_2(\mathbf{n})}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (6.51)$$

za koje važi

$$\left[\phi(\mathbf{n}, t), \pi(\mathbf{m}, t) \right] = \left[\phi^{\dagger}(\mathbf{n}, t), \pi^{\dagger}(\mathbf{m}, t) \right] = i \frac{\Delta(\mathbf{n} - \mathbf{m})}{b} \quad (6.52)$$

dok su ostali komutatori jednaki nuli, linearizovani hamiltonijan (6.49) postaje

$$H = b \sum_{\mathbf{n}} \left\{ \pi^{\dagger}(\mathbf{n}) \pi(\mathbf{n}) + c^2 [\nabla_x \phi^{\dagger}(\mathbf{n})] [\nabla_x \phi(\mathbf{n})] + m^2 c^4 \phi^{\dagger}(\mathbf{n}) \phi(\mathbf{n}) \right\}, \quad (6.53)$$

i njega ćemo koristiti da odredimo magnonske energije. U (6.53) prepoznamo hamiltonijan kompleksnog skalarnog polja [4].

6.3.2 Jednačine kretanja

Jednačina kretanja za operator $\phi(\mathbf{n})$ (u realnom vremenu) je

$$i\partial_t \phi(\mathbf{n}) = \left[\phi(\mathbf{n}), H \right] = i\pi^{\dagger}(\mathbf{n}). \quad (6.54)$$

Korišćenjem formule za parcijalnu integraciju (A.10) i definiciju Laplasijana na rešetki (A.8), (A.9), nalazimo

$$i\partial_t \pi^{\dagger}(\mathbf{n}) = ic^2 \nabla_x^2 \phi(\mathbf{n}) - im_0^2 c^4 \phi(\mathbf{n}) \quad (6.55)$$

Pomoću (6.54) i (6.55), nalazimo da polje $\phi(\mathbf{n}, t)$ zadovoljava diskretnu verziju Klajn-Gordonove (KG) jednačine

$$\left[\nabla_x^2 - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - m^2 c^2 \right] \phi(\mathbf{n}, t) = 0. \quad (6.56)$$

Kao i u slučaju kontinualne Klajn-Gordonove jednačine, rešenja ćemo tražiti u vidu ravnih talasa $\phi(\mathbf{n}, t) \propto \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n} - i\omega_{\mathbf{k}} t]$. Ovu jednačinu treba uporediti sa (2.45), koja je dobijena u RPA linearizaciji D – dimenzionog Hajzenbergovog antiferomagneta.

Imajući u vidu definiciju diskretnog laplasijana (A.9), lako nalazimo disperzionu relaciju

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 = \frac{2c^2}{b^2}(1 - \cos[k_x b]) + m^2 c^4. \quad (6.57)$$

Ako pomoću (6.35) i relacije $b = 2a$ vratimo parametre originalnog antiferomagnetnog hamiltonijana, koristeći $1 - \cos[2x] = 2 \sin^2 x = 2[1 - \cos^2 x]$, dobijamo dva rešenja disperzione relacije ($\sqrt{S(S+1)} \approx S$)

$$\omega_{\mathbf{k}} = \pm 2JS \sqrt{\eta^2 - \cos^2[k_x b/2]}. \quad (6.58)$$

U skladu sa konvencijom iz prvog dela disertacije, u magnonskoj disperziji figuriše parametar magnetne elementarne ćelije. Ovde ga označavamo sa b , da bi izbegli zabunu. Primetićemo da se u dugotalasnoj aproksimaciji disperziona relacija (6.58) svodi na poznati izraz za energiju masivne relativističke čestice

$$\omega_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 k_x^2}, \quad (6.59)$$

gde su m_0 i c masa i brzina prostiranja magnona (6.35).

U skladu sa standardnom interpretacijom kvantne teorije polja [69], pozitivni koren iz (6.58) tumačimo kao energiju magnona sa impulsom k_x . Naravno, (6.58) je rezultat koji se dobija i u teoriji spinskih talasa u Blohovoju aproksimaciji reprezentacije Holštajn-Primakova [1, 2], odnosno u RPA linearizaciji jednačina kretanja [disperzija (6.58) je, uz zamenu $S \rightarrow \langle S^z \rangle$, specijalni slučaj disperzije (2.47), pri čmu je sada parametar magnetne ćelije označen sa b]. Pošto disperziona relacija sadrži i negativne mode, opšte rešenje jednačine kretanja je oblika [69]

$$\phi(\mathbf{n}, t) = \int_{\mathbf{k}(b)} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} - i\omega_{\mathbf{k}} t} + b_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} + i\omega_{\mathbf{k}} t} \right), \quad \int_{\mathbf{k}(b)} = \int_{-\pi/b}^{\pi/b} \frac{dk_x}{2\pi} \quad (6.60)$$

gde su $a_{\mathbf{k}}$ i $b_{\mathbf{k}}$ amplitude polja. Na osnovu definicija (6.51) nalazimo i ostala tri operatora

$$\begin{aligned} \phi^\dagger(\mathbf{n}, t) &= [\phi(\mathbf{n}, t)]^\dagger = \int_{\mathbf{k}(b)} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} + i\omega_{\mathbf{k}} t} + b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} - i\omega_{\mathbf{k}} t} \right), \\ \pi(\mathbf{n}, t) &= \dot{\phi}^\dagger(\mathbf{n}, t) = i \int_{\mathbf{k}(b)} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} + i\omega_{\mathbf{k}} t} - b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} - i\omega_{\mathbf{k}} t} \right), \\ \pi^\dagger(\mathbf{n}, t) &= \dot{\phi}(\mathbf{n}, t) = i \int_{\mathbf{k}(b)} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \left(-a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} - i\omega_{\mathbf{k}} t} + b_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} + i\omega_{\mathbf{k}} t} \right). \end{aligned} \quad (6.61)$$

Da bi važile kanonske komutacione relacije (6.52), amplitude polja treba da zadovoljavaju skup relacija

$$\left[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q}}^\dagger \right] = \left[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{q}}^\dagger \right] = 2\pi \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad (6.62)$$

uz iščezavanje ostalih komutatora. Odavde vidimo da su a i b bozonski operatori (Naravno, to se odmah vidi i iz hamiltonijana (6.53) koji je istog oblika kao hamiltonijan kompleksnog skalarnog polja).

6.3.3 Dijagonalni hamiltonijan i magnetizacija podrešetke

Zamenom (6.61) u (6.53) dolazimo do dijagonalnog hamiltonijana [69]

$$H = \int_{\mathbf{k}(b)} \omega(\mathbf{k}) \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + 2\pi\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}) \right] = V(b) \int_{\mathbf{k}(b)} \omega(\mathbf{k}) \left[N_{\mathbf{k}}(a) + N_{\mathbf{k}}(b) + 1 \right], \quad (6.63)$$

gde je $V(b) = 2\pi\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}) = N_a b$ zapremina antiferomagneta, dok su operatori gustine broja čestica [30]

$$N_{\mathbf{k}}(a) = \frac{a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}}{V}, \quad N_{\mathbf{k}}(b) = \frac{b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}}{V}. \quad (6.64)$$

Dijagonalni hamiltonijan (6.63) je poznati rezultat linearne teorije spinskih talasa² [1, 2]. Ipak, između standardne linearne teorije spinskih talasa (LSW) i ovde izloženog prilaza postoje određene konceptualne razlike. U teoriji spinskih talasa se dijagonalni hamiltonijan dobija tek nakon Bogoljubovljeve transformacije. To znači da originalni bozonski operatori Blohove aproksimacije, definisani tako da povećavaju ili smanjuju z -projekciju spinskog operatora na datom čvoru nisu pravi magnonski operatori u smislu da ne kreiraju magnon na uočenom čvoru. O tome je već bilo reči u Glavi 4. Za razliku od njih, operatori ϕ i ϕ^\dagger jesu pravi magnonski operatori jer dijagonalizuju hamiltonijan neinteragujućeg sistema [4]. Konkretno, operator $\phi(\mathbf{n})$ anihilira magnon tipa a i kreira magnon tipa b na čvoru \mathbf{n} dok $\phi^\dagger(\mathbf{n})$ čini suprotno. Naravno, operatori ϕ i ϕ^\dagger žive na rešetki parametra $b = 2a$, definisane transformacijom (6.3). Takođe, vidimo da translacija (6.3) eliminiše potrebu za transformacijom Bogoljubova, jer su ϕ i ϕ^\dagger pravi magnonski operatori. Zbog toga su koeficijenti u Furije – razvoju jednostavno $u_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} = [2\omega_{\mathbf{k}}]^{-1/2}$. Pristup koji se zasniva na pravim magnonskim operatorima omogućava da se na HAFM direktno primeni teorija perturbacija razvijena u relativističkoj kvantnoj teoriji polja [4, 76]. To bi svakako trebao da bude jedan od pravaca budućeg istraživanja.

Kada je definisan dijagonalni hamiltonijan, lako se mogu izračunati fizičke veličine od interesa. Ilustrovaćemo to primerom magnetizacije podrešetke u osnovnom stanju. Dobro je poznato [4, 30] da je osnovno stanje hamiltonijana (6.63) vakuum $|0\rangle$, definisan uslovom $a_{\mathbf{k}}|0\rangle = b_{\mathbf{k}}|0\rangle = 0$. Tako, koristeći (6.37), za srednju vrednost magnetizacije podrešetke u osnovnom stanju dobijamo

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle_0 &= \sqrt{S(S+1)} \langle 0 | M^z(\mathbf{n}) | 0 \rangle = \sqrt{S(S+1)} \langle 0 | \sqrt{1 - [M_x^2(\mathbf{n}) + M_y^2(\mathbf{n})]} | 0 \rangle \quad (6.65) \\ &\approx \sqrt{S(S+1)} [1 - 2cg \langle 0 | \phi^\dagger(\mathbf{n}) \phi(\mathbf{n}) | 0 \rangle] \\ &\approx S + \frac{1}{2} - b \int_{\mathbf{k}(b)} \frac{1}{2 \sqrt{\eta^2 - \cos^2[k_x b/2]}} \end{aligned}$$

što je naravno LSW rezultat za $G \ll 1$. Analiza se lako uopštava na konačne temperature.

Upravo izloženi prilaz omogućava da se pojava kvantnih fluktuacija u osnovnom stanju HAFM sagleda u drugačijem svetlu, kao i da se povuče zanimljiva paralela sa feromagnetom. Naime, iz (6.65) je očigledno da se kvantne fluktuacije javljaju zbog toga što operator $\phi(\mathbf{n})$ ne anihilira vakuum. Sa druge strane, to je posledica činjenice da je jednačina kretanja za $\phi(\mathbf{n})$ drugog reda po vremenu usled čega $\phi(\mathbf{n})$ sadrži kako pozitivne tako i negativne mode (odnosno i kreacione i anihilacione operatore). Jednačina drugog reda po vremenu je posledica

²Konstantni član koji figuriše u LSW hamiltonijanu, $2J\eta N_a S(S+1)$, ispustili smo još u (6.34)

hamiltonijana (6.53), koji je aproksimacija hamiltonijana NLS modela. U (5.59) je naveden i lagranžijan NLS modela (bez θ – člana), odakle se vidi da je on invarijantan u odnosu na operaciju inverzije vremena ($t \rightarrow -t$) jer sadrži doprinos $\propto [\partial_t \mathbf{M}]^2$. Operacija inverzije vremena nije potpuna simetrija HAFM, jer okreće spinske operatore na svakom čvoru ($\mathbf{S}_n \rightarrow -\mathbf{S}_n$). Ipak, operacija inverzije vremena u kombinaciji sa translacijom cele rešetke za jedno mesto u desno³ (ili levo) ostavlja HAFM nepromenjenim [73], tako da je efektivni lagranžijan (odnosno hamiltonijan) zaista invarijantan u odnosu na operaciju inverzije vremena. Ovo je moguće zbog toga što se izborom dominantnog pravca spinova u prostoru i položaja rešetke spontano narušavaju unutrašnja $SO(3)$ simetrija i translaciona invarijantnost Hajzenbergovog antiferomagnetnog hamiltonijana, a efektivni hamiltonijan treba da opisuje mala odstupanja od ravnotežne konfiguracije [73]. U slučaju feromagneta, ne postoji neka dodatna spontano narušena simetrija hamiltonijana koja bi u kombinaciji sa inverzijom vremena ostavila sistem invarijantnim. Zbog toga su feromagnetni magnoni opisani Šredingerovim poljem u čijem lagranžijanu postoji sabirak $\propto \psi^\dagger \partial_t \psi$. Jednačina za ψ je prvog reda po vremenu pa $\psi(\mathbf{n})$ sadrži samo anihilacioni operator, odnosno $\psi(\mathbf{n})|0\rangle = 0$. Zbog toga u osnovnom stanju feromagneta ne postoje kvantne fluktuacije.

³Ovo naravno važi za jednostavni antiferomagnet sa dve podrešetke.

Glava 7

Zaključak

Analiza jako korelisanih sistema spada među važnije probleme savremene fizike, kako sa praktične tako i sa fundamentalne tačke gledišta. Različiti novosintetisani magnetni materijali nalaze široku primenu, dok su matematički modeli kojima se opisuju jako korelisani sistemi zanimljivi sami po sebi. U nedostatku egzaktnih rešenja, pribegava se različitim aproksimacijama koje mogu, ali i ne moraju biti dodatno teorijski utemeljene.

Jedan od standardnih pristupa za teorijsku analizu uređenih magnetnih sistema je metod dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija (TGF), u kombinaciji sa dekuplovanjem Tjablikova (RPA) ili Kalenovom aproksimacijom (CA). Metod TGF daje relativno dobre rezultate na celom temperaturskom intervalu uređene faze, uključujući pri tome i predviđanje konačne vrednosti kritične temperature na kojoj iščezava parametar uređenosti. Takođe, rezultati RPA i CA TGF prilaza su u skladu sa Kolmen-Mermin-Vagnerovom (KMV) teoremom.

U primeni TGF na Hajzembergov antiferomagnet (HAFM) i feromagnet (HFM) se pojavljuje jedna klasa integrala Votsonovog tipa. U slučaju D – dimenzione zapreminski centrirane rešetke, za pomenute Votsonove integrale se mogu naći analitička rešenja, izražena pomoću generalisanih hipergeometrijskih funkcija. Pored toga što znatno utiču na povećanje preciznosti u predviđanju kritične temperature ili magnetizacije podrešetke u osnovnom stanju, ova analitička rešenja omogućavaju da se iznesu određena stroga tvrđenja. Tako je pokazano da za D – dimenzioni HAFM i HFM na zapreminski centriranoj rešetki, u slučaju postojanja male ili velike spinske anizotropije i sa fiksiranim parametrima J (integral izmene) i η (koeficijent spinske anizotropije) u hamiltonijanu, RPA TGF predviđa nižu kritičnu temperaturu ako je $D \geq 2$. Takođe, pokazuje se da kod jednodimenzionih modela, RPA TGF predviđa višu kritičnu temperaturu. Na osnovu opštih kriterijuma za konvergenciju generalisane hipergeometrijske funkcije se lako pokazuje da i RPA i CA TGF metod daju rezultate u saglasnosti sa KMV teoremom.

Poređenje RPA i CA TGF metoda, koje se bazira na istim parametrima u hamiltonijanu mora biti lišno eksperimentalne realizacije. Sa druge strane, eksperimentalni podaci o magnonskoj disperziji na niskim temperaturama omogućavaju da se parametri hamiltonijana fiksiraju nezavisno u RPA i CA slici. Na taj način se jednomagnonske energije direktno povezuju sa makroskopskim karakteristikama magneta, što se obično označava kao samousaglašeni prilaz. Upravo je samousaglašeni pristup korišćen prilikom opisa osnovnih termodinamičkih osobina kvazi 2D antiferomagnetnih jedinjenja Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$. Pokazano je da 2D HAFM sa spinskom anizotropijom, naročito u kombinaciji sa RPA TGF metodom daje vrlo dobre rezultate za oba jedinjenja. To se naročito lepo vidi u izračunatim vrednostima za

kritičnu temperaturu koje se u oba slučaja razlikuju od eksperimentalnih vrednosti za $\sim 0.6\%$.

Iako u okviru smousaglašenog prilaza metod TGF daje vrlo dobre rezultate, on ipak ima određenih nedostataka. Oni se uglavnom tiču same aproksimacije kojom se uprošćavaju složenije TGF prilikom zatvaranja sistema jednačina. Pre svega, formalizam TGF je u velikoj meri matematiziran, pa se presecanjem sistema jednačina kretanja gubi jasan fizički smisao aproksimacije. Dalje, metod TGF ima neka poznata ograničenja. Recimo, kritični eksponent β uvek uzima vrednost iz fenomenološke teorije Landau-Ginzburga, dok se u niskotemperaturskom razvoju parametra uređenosti javljaju stepeni temperature koji nekorektno opisuju magnon-magnon interakciju. Zbog toga je u disertaciji korišćen prilaz koji se zasniva na linearizaciji jednačina kretanja za spinske operatore. U tekstu je pokazano da ovaj prilaz daje iste rezultate¹ kao i standardni TGF metod, sa tom prednosti da se jasnije uviđa smisao aproksimacije. Ispostavlja se da je O(3) HFM u RPA i CA slici ekvivalentan teoriji Šredingerovog polja na rešetki, pri čemu masa magnona biva renormalizovana usled interakcije. Metod linearizacije jednačina kretanja, slično kao ni metod TGF ne daje nikakve informacije o zadržanom ili odbačenom tipu magnon-magnon interakcija. Slično, pokazano je da RPA i CA rešenja za HAFM podsećaju na teoriju kompleksnog Klajn–Gordonovog polja na rešetki.

Jedan od načina da se dobije više informacija o tipu magnon-magnon interakcija koje se pojavljuju u TGF metodu je korišćenje efektivnih lagranžijana u kombinaciji sa regularizacijom rešetkom. U ovom prilazu se od samog početka uvode magnonski stepeni slobode, bez direktne veze sa originalnim lokalizovanim spinovima Hajzenbergovog modela. Ispravnost ovog postupka je demonstrirana reprodukcijom nekih klasičnih Dajsonovih rezultata. Analizom popravke na magnoski propagator i perturbativnim računanjem slobodne energije, pokazano je da razlog za odstupanje RPA TGF metoda od strogih rezultata na niskim temperaturama dolazi zbog eksplicitnog narušavanja unutrašnje O(3) simetrije Hajzenbergovog feromagneta. Konkretno, ispostavlja se da RPA TGF zanemaruje magnon-magnon interakcije koje generiše Ves-Zumino-Vitenov (WZW) član u efektivnom lagranžijanu. S obzirom da se u efektivnom lagranžijanu za antiferomagnet, koji je zapravo lagranžijan nelinearnog sigma modela (NLSM), ne pojavljuje WZW član, ovaj rezultat predstavlja indirektnu potvrdu za primenu RPA TGF na Hajzenbergov antiferomagnet. Ovu hipotezu potvrđuju dobro poznati temperaturski razvoji antiferomagnetnog parametra uređenosti. Za razliku od feromagneta, RPA TGF u slučaju antiferomagneta ne dovodi do pojave potpuno pogrešnih stepena temperature (bar za prvih nekoliko članova).

Konačno, analogija između HAFM i kompleksnog skalarnog polja, uočena prilikom RPA linearizacija jednačina kretanja u Glavi 2, detaljnije je analizirana u Glavi 6. Pokazano je da se u slučaju 1D HAFM sa malom spinskom anizotropijom, pod pretpostavkom kratkodometnog uređenja, može uvesti transformacija hamiltonijana koja direktno povezuje Hajzenbergov i hamiltonijan NLS modela regularizovan prostornom rešetkom. Na ovaj način se maksimalno naglašava analogija između HAFM i relativističke teorije polja, uočena još prilikom RPA linearizacije jednačina kretanja u Glavi 2. Predložena transformacija hamiltonijana uvodi prave magnonske stepene slobode budući da eliminiše potrebu za transformacijom Bogoljubova prilikom dijagonalizacije linearnog hamiltonijana. Takođe, pomenuta transformacija omogućava da se direktno na rešetki dobije topološki θ – član².

U određenom smislu, rezultate disertacije pre treba shvatiti kao isečak iz istraživanja koje

¹Bar što se tiče Hajzenbergovog feromagneta, kao i antiferomagneta sa dve podrešetke.

²Tačnije, član koji u dugotalasnoj aproksimaciji direktno daje topološki θ – član.

je u toku, a manje kao iznošenje zaokružene teorijske celine. Što se tiče rezultata prezentovanih u prvom delu, za očekivati je da rešenja na bazi generalisane hipergeometrijske funkcije nađu još primena u teoriji Hajzenbergovih magneta. Teorija perturbacija za Goldstonove bozone u kombinaciji sa regularizacijom rešetkom se u Glavi 5 pokazala kao vrlo efikasna i transparentna, u smislu da omogućava jasno izdvajanje uticaja pojedinih članova u efektivnom lagranžijanu. Pažnju svakako treba posvetiti uopštavanju tog prilaza na Hajzenbergov antiferomagnet, čime bi se dobio teorijski okvir za detaljnije ispitivanje uticaja magnon-magnon interakcija na termodinamičke osobine antiferomagneta.

Prilog A

Teorija polja na rešetki

A.1 D – dimenziona prosta kubna rešetka

U ovom Prilogu su navedene neke od relacija koje se koriste u kvantnoj teoriji polja na rešetki (LFT) u kanonskom formalizmu. Pretpostavićemo za početak hiperkubnu D –dimenzionu rešetku, što izlaganje čini donekle opštim i jasnijim. Više detalja se može naći u [20, 26].

Pretpostavimo kubnu rešetku sa parametrom a . Vektor položaja koji prebrojava čvorove rešetke je [26]

$$\mathbf{x} = \sum_i a n_i \mathbf{e}_i, \quad i = 1, 2, \dots, D \quad (\text{A.1})$$

gde su n_i celi brojevi. Vektor \mathbf{x} i ima ulogu vektora položaja u običnoj (kontinualnoj) teoriji. Koristimo istu oznaku za vektor položaja na rešetki kao i za kontinualni radijus vektor prema [26]. Do zabune ne može doći jer je u prilogu isključivo korišćena KTP na rešetki. Umesto integrala po celom prostoru, u teoriji na rešetki se pojavljuju sume po svim čvorovima [26]

$$\int_{\mathbf{x}} \longrightarrow a^D \sum_{\mathbf{x}}. \quad (\text{A.2})$$

Dalje, zbog diskretizacije prostora impulsi su ograničeni na prvu Brillouinovu zonu [26]

$$\text{BZ} = \left\{ \mathbf{k} : -\frac{\pi}{a} \leq k_\alpha \leq \frac{\pi}{a} \right\}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, D. \quad (\text{A.3})$$

Kako se u LFT pojavljuje konačna gornja granica, ovakva teorija je automatski regularizovana [26].

Nametanjem periodičnih graničnih uslova [97], impulsi postaju diskretni

$$k_\alpha = \frac{2\pi n_\alpha}{aN_i}, \quad n_\alpha = -\frac{N_\alpha}{2} + 1, \dots, 0, 1, \dots, \frac{N_\alpha}{2}, \quad (\text{A.4})$$

pri čemu je $V = a^D N_1 N_2 \dots N_D \equiv L^D$ zapremina "kristala". Umesto integrala po \mathbf{k} prostoru, pojavice se sume po vektorima iz Brillouinove zone. U graničnom slučaju kada $V \rightarrow \infty$, te sume se mogu zameniti integralima [26, 97]

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \longrightarrow \prod_{\alpha=1}^D \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk_i}{2\pi} \equiv \int_{\mathbf{k}(a)}. \quad (\text{A.5})$$

gde $\int_{\mathbf{k}(a)}$ označava da je reč o integraciji po Brilluenovoj zoni koja je hiperkocka ivice $2\pi/a$. Kada nema opasnosti od zabune, koristimo jednostavno simbol $\int_{\mathbf{k}}$.

Operatori polja, koji obično kao argumet imaju kontinualni radijus vektor, sada su parametrizovani diskretnim vektorima \mathbf{x} iz (A.2). Drugim rečima, operatori polja $\phi(\mathbf{x})$ "žive" u čvorovima rešetke. Zbog toga parcijalni izvodi operatora polja koji ulaze u hamiltonijan moraju biti zamenjeni konačnim razlikama. Definišemo leve i desne konačne razlike (ili izvode na rešetki) kao [26]

$$\begin{aligned}\nabla_{\alpha}\phi(\mathbf{x}) &= \frac{\phi(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha}) - \phi(\mathbf{x})}{a}, \\ \nabla_{\alpha}^{\star}\phi(\mathbf{x}) &= \frac{\phi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x} - a\mathbf{e}_{\alpha})}{a},\end{aligned}\tag{A.6}$$

gde je \mathbf{e}_{α} vektor koji spaja uočeni čvor sa najbližim susedom u α -tom pravcu. Parcijalni izvodi na rešetki su povezani uslovima [26]

$$\left[\nabla_{\alpha}\right]^{\dagger} = -\nabla_{\alpha}^{\star}, \quad \left[\nabla_{\alpha}^{\star}\right]^{\dagger} = -\nabla_{\alpha}.\tag{A.7}$$

Dakle, operatori ∇_{α} i ∇_{α}^{\star} su anti-konjugovani jedan drugom. Medjutim, operator

$$\nabla^2 = \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha} \nabla_{\alpha}^{\star} = \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha}^{\star} \nabla_{\alpha}\tag{A.8}$$

jeste ermitski i predstavlja Laplasov operator na rešetki. Njegov eksplicitni oblik dobijamo zamenom (A.6) u (A.8)

$$\begin{aligned}\nabla^2\phi(\mathbf{x}) &= \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha}^{\star} \nabla_{\alpha}\phi(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha}^{\star} \frac{\phi(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha}) - \phi(\mathbf{x})}{a} \\ &= \sum_{\alpha} \frac{\phi(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha}) + \phi(\mathbf{x} - a\mathbf{e}_{\alpha}) - 2\phi(\mathbf{x})}{a^2}.\end{aligned}\tag{A.9}$$

U nastavku će nam trebati i formula koja predstavlja analogon parcijalne integracije. Ona glasi [26]

$$\sum_{\mathbf{x}} [\nabla_{\alpha} f(\mathbf{x})] g(\mathbf{x}) = - \sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \nabla_{\alpha}^{\star} g(\mathbf{x}),\tag{A.10}$$

odnosno

$$\sum_{\mathbf{x}} \left[f(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha}) g(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}) g(\mathbf{x}) \right] = \sum_{\mathbf{x}} \left[f(\mathbf{x}) g(\mathbf{x} - a\mathbf{e}_{\alpha}) - f(\mathbf{x}) g(\mathbf{x}) \right].\tag{A.11}$$

Jednakost (A.11) se lako pokazuje smenom indeksa $\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha} = \mathbf{y}$. Ovom zamenom nalazimo uslov

$$\sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) g(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x} - a\mathbf{e}_{\alpha}) g(\mathbf{x} - a\mathbf{e}_{\alpha})\tag{A.12}$$

koji mora biti ispunjen da bi važila jednakost (A.10). To znači da formula za parcijalnu integraciju (A.10) važi na beskonačnoj rešetki ili na rešetki sa periodičnim graničnim uslovima. Drugim rečima

$$\sum_{\mathbf{x}} \nabla_{\alpha} f(\mathbf{x}) = \frac{1}{a} \left[\sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha}) - \sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \right] = 0.\tag{A.13}$$

Takodje, važi i

$$\sum_{\mathbf{x}} [\nabla_{\alpha}^{\star} f(\mathbf{x})] g(\mathbf{x}) = - \sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \nabla_{\alpha} g(\mathbf{x}). \quad (\text{A.14})$$

Iz (A.10) i (A.14) se vidi ispravnost uslova antikonjugovanosti (A.7). Pored izvoda na rešetki koji su definisani u (A.6), može se uvesti i sledeći antihermitski operator [26] koji se proteže preko rastojanja $2a$

$$\frac{1}{2} [\nabla + \nabla^{\star}]_{\alpha} \phi(\mathbf{x}) = \frac{\phi(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha}) - \phi(\mathbf{x} - a\mathbf{e}_{\alpha})}{2a}. \quad (\text{A.15})$$

Koristeći (A.10) i (A.14), lako se pokazuje da za ovaj operator važi

$$\sum_{\mathbf{x}} [(\nabla_{\alpha} + \nabla_{\alpha}^{\star}) f(\mathbf{x})] g(\mathbf{x}) = - \sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) [(\nabla_{\alpha} + \nabla_{\alpha}^{\star}) g(\mathbf{x})]. \quad (\text{A.16})$$

Za operator izvoda na rešetki očigledno važi

$$\nabla_{\alpha} [f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})] = \nabla_{\alpha} f(\mathbf{x}) + \nabla_{\alpha} g(\mathbf{x}). \quad (\text{A.17})$$

U praksi se pojavljuje i diskretni izvod proizvoda funkcija, $\nabla_{\alpha} [f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})]$. Koristeći definiciju operatora konačne razlike (A.6), imamo

$$\begin{aligned} a\nabla_{\alpha} [f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})] &= f(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha})g(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha}) - f(\mathbf{x})g(\mathbf{x}) \pm f(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha})g(\mathbf{x}) \\ &= f(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\alpha})a\nabla_{\alpha} g(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})a\nabla_{\alpha} f(\mathbf{x}) \\ &= [a\nabla_{\alpha} f(\mathbf{x}) + f(\mathbf{x})]a\nabla_{\alpha} g(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})a\nabla_{\alpha} f(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Iz poslednje jednakosti sledi

$$\nabla_{\alpha} [f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})] = g(\mathbf{x})\nabla_{\alpha} f(\mathbf{x}) + f(\mathbf{x})\nabla_{\alpha} g(\mathbf{x}) + a[\nabla_{\alpha} f(\mathbf{x})][\nabla_{\alpha} g(\mathbf{x})], \quad (\text{A.19})$$

pri čemu nema sumiranja po α u poslednjem sabirku.

Sada možemo uvesti i Furije transforme na rešetki [26]

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{p}) &= a^D \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}), \\ \phi(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{p}(a)} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \phi(\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

pri čemu se, kao što je naglašeno u (A.5) podrazumeva integracija po prvoj Brillouenovoj zoni u \mathbf{p} prostoru. Delta funkcija u impulsnom i Kronekerov simbol u direktnom prostoru postaju [26]

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}) &= \frac{a^D}{(2\pi)^D} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}, \\ \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= a^D \int_{\mathbf{p}(a)} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Konačno, kanonske komutacione relacije za operatore polja na rešetki glase [20]

$$\left[\phi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{y}, t) \right]_{-} = \frac{i}{a^D} \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (\text{A.22})$$

dok su ostali komutatori jednaki nuli. Pri $a \rightarrow 0$ upravo navedene jednačine prelaze u obične jednačine KTP [4].

A.2 D – dimenziona zapreminski centrirana kubna rešetka

A.2.1 Laplasijan i Furije transformi

Realne magnetne strukture se ne mogu uvek podvesti pod prostu D – dimenzionu rešetku. Kod proste D – dimenzione rešetke je broj pravaca koji spajaju uočeni čvor sa njegovim najbližim susedima jednak broju dimenzija. Za druge rešetke, recimo D – dimenzionu zapreminski centriranu, to nije slučaj jer je broj najbližih suseda 2^D . Zbog toga nije očigledno na koji bi se način operatori diskretnog izvoda uveli na proizvoljnoj rešetki. Međutim, za potpunu formulaciju bozonskih polja na rešetki je dovoljan diskretni laplasijan. On se jednostavno uopštava sa proste kubne na proizvoljnu rešetku. Ako uvedemo skup vektora koji spajaju čvor sa najbližim susedima $\{\boldsymbol{\lambda}\} = a\{\pm\mathbf{e}_1, \pm\mathbf{e}_2, \dots, \pm\mathbf{e}_D\}$ i broj najbližih suseda $Z_1 = 2D$, laplasijan (A.9) možemo zapisati kao [98]

$$\nabla^2\phi(\mathbf{x}) = \frac{2D}{Z_1|\boldsymbol{\lambda}|^2} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}\}} [\phi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\lambda}) - \phi(\mathbf{x})]. \quad (\text{A.23})$$

Ovaj oblik se može uzeti kao definicija Laplasijana za proizvoljnu rešetku definisanu skupom vektora $\{\boldsymbol{\lambda}\}$. Lako se pokazuje da je (A.23) korektno normalizovan Laplasijan, tj. da u limesu $a \rightarrow 0$ dobijamo $\partial_\mu\partial_\mu\phi(\mathbf{x})$. Takođe, po uzoru na svojstveni problem operatora $\partial_\mu\partial_\mu$, za diskretni laplasijan nalazimo

$$\nabla^2 \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}] = -\frac{2D}{|\boldsymbol{\lambda}|^2} [1 - \gamma_D(\mathbf{k})] \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}] \equiv -\widehat{\mathbf{k}}^2 \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}] \quad (\text{A.24})$$

gde je

$$\gamma_D(\mathbf{k}) = Z_1^{-1} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}\}} \exp[i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}]. \quad (\text{A.25})$$

U slučaju zapreminski centrirane rešetke je (1.7)

$$\gamma_D(\mathbf{k}) = \prod_{i=1}^D \cos \frac{ak_i}{2}, \quad Z_1 = Z_1(D) = 2^D. \quad (\text{A.26})$$

Sično, lako se pokazuje da je geometrijski faktor za D –dimenzionu prostu kubnu rešetku

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{D} \sum_{\alpha=1}^D \cos[ak_\alpha]. \quad (\text{A.27})$$

Da bismo izbegli eventualnu zabunu, geometrijski faktor za prostu kubnu rešetku pišemo bez indeksa D . Takođe, direktnom zamenom u (A.9) nalazimo svojstvene vrednosti diskretnog laplasijana za prostu kubnu rešetku

$$\nabla^2 \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}] = -\widehat{\mathbf{k}}^2 \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}] \quad (\text{A.28})$$

gde je

$$\widehat{\mathbf{k}}^2 = \sum_{\alpha=1}^D \widehat{k}_\alpha^2, \quad \widehat{k}_\alpha = \frac{2}{a} \sin \frac{ak_\alpha}{2}. \quad (\text{A.29})$$

Jednačine (A.27)–(A.29) su uglavnom korišćene u Glavi 5.

Za proizvoljnu rešetku, jednačine (A.20), (A.21) i (A.22) prelaze u

$$\phi(\mathbf{p}) = v_0 \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}), \quad \phi(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{p} \text{ IBZ}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \phi(\mathbf{p}), \quad (\text{A.30})$$

$$\delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = \frac{1}{v_0^*} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}, \quad \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = v_0 \int_{\mathbf{p} \text{ IBZ}} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}. \quad (\text{A.31})$$

$$\left[\phi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{y}, t) \right]_- = \frac{i}{v_0} \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (\text{A.32})$$

gde je v_0 zapremina primitivne ćelije u direktnom, a $v_0^* = (2\pi)^D/v_0$ u inverznom prostoru. Takođe, $\int_{\mathbf{p} \text{ IBZ}}$ označava integraciju po odgovarajućoj I Brilluenovoj zoni sa standardnom merom $d^d \mathbf{k}/(2\pi)^D$.

A.2.2 Integracija po I Brilluenovoj zoni

Na mnogim mestima u tekstu se pojavljuju integrali po I Brilluenovoj zoni (IBZ). Radi lakšeg računanja, umesto originalne IBZ, pogodno je za oblast integracije uzeti hiperkocku. To olakšava numeričku integraciju i omogućava korišćenje određenih egzaktnih rešenja za integrale Votsonovog tipa. Dimenzije hiperkocke se razlikuju kod fero i antiferomagnetna, pa ćemo na ovom mestu pažljivo diskutovati pomenuta dva slučaja.

Feromagnetna rešetka

Standardno pravilo za prelazak sa sume na integral u Furijeovom prostoru je [99]

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = v_0 \int_{\text{IBZ}} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} F(\mathbf{k}), \quad (\text{A.33})$$

pri čemu suma $\sum_{\mathbf{k}}$, odnosno, integral \int_{IBZ} uračunava sve talasne vektore iz IBZ. Da bismo oblast integracije sveli na hiperkocku, prisetićemo se da IBZ sadrži sve impulse koji karakterišu jednočestična stanja $|\mathbf{k}\rangle = a_{\mathbf{k}}|0\rangle$. Pošto je disperzija za feromagnetne magnone $\omega(\mathbf{k}) \propto 1 - \gamma_D(\mathbf{k})$, gde je $\gamma_D(\mathbf{k})$ dato u (A.26), vidimo da je maksimum magnonskih energija za $k_\alpha = 2\pi/a$. Drugim rečima, za $|k_\alpha| > 2\pi/a$ komponente impulsa u α – pravcu počinju da se ponavljaju, jer maksimalna vrednost magnonske energije označava ivicu zone. To znači da je umesto integracije po IBZ moguće preći na integral po hiperkocki $-2\pi/a \leq k_\alpha \leq 2\pi/a$, jer se izvan nje *sve* komponente talasnog vektora počinju ponavljati. Treba samo da pokažemo da je zapremina hiperkocke ($V_H = (4\pi/a)^D$) veća od zapremine IBZ, $v^* = (2\pi)^D/v_0$, odnosno da sa ponavljanjem, sadrži sve neekvivalentne talasne vektore. Primitivnu ćeliju možemo konstruisati pomoću ukupno D vektora koje možemo izabrati da budu

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\lambda}_1 &= \frac{a}{2}[-\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \cdots + \mathbf{e}_D], \quad \boldsymbol{\lambda}_2 = \frac{a}{2}[\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \cdots + \mathbf{e}_D] \\ \boldsymbol{\lambda}_3 &= \frac{a}{2}[\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3 \cdots + \mathbf{e}_{D-1} + \mathbf{e}_D], \quad \cdots, \quad \boldsymbol{\lambda}_D = \frac{a}{2}[\mathbf{e}_1 + \cdots + \mathbf{e}_{D-1} - \mathbf{e}_D]. \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Odgovarajuća zapremina primitivne ćelije je (biramo pozitivan predznak)

$$v_0 = \epsilon_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_D} [\boldsymbol{\lambda}_1]_{\alpha_1} [\boldsymbol{\lambda}_2]_{\alpha_2} \cdots [\boldsymbol{\lambda}_D]_{\alpha_D} = 2^{D-1} \left(\frac{a}{2}\right)^D (D-2), \quad (\text{A.35})$$

gde su $\epsilon_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_D}$ komponente totalno antisimetričnog tenzora u D – dimenzija. Dobijena relacija očigledno važi za $D > 2$. Za $D = 2$ se lako nalazi $v_0 = a^2/2$. Ovim smo dokazali da je

$$\frac{V_H}{v^*} = \frac{(D-2)2^D}{2} > 1. \quad (\text{A.36})$$

Dakle, za prelazak sa sume na integral, u slučaju fermagnetne rešetke možemo pisati

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2}\right)^D \frac{a^D}{(2\pi)^D} \prod_{\alpha=1}^D \int_{-2\pi/a}^{2\pi/a} dk_{\alpha} F(\mathbf{k}) \equiv \left(\frac{a}{2}\right)^D \int_{\mathbf{k}(a/2)} F(\mathbf{k}). \quad (\text{A.37})$$

Dodatni faktor 2^{-D} kompenzuje višestruka ponavljanja talasnih vektora unutar hiperkocke, tako da važi $\sum_{\mathbf{k}} 1 = N$.

Antiferomagnetna rešetka

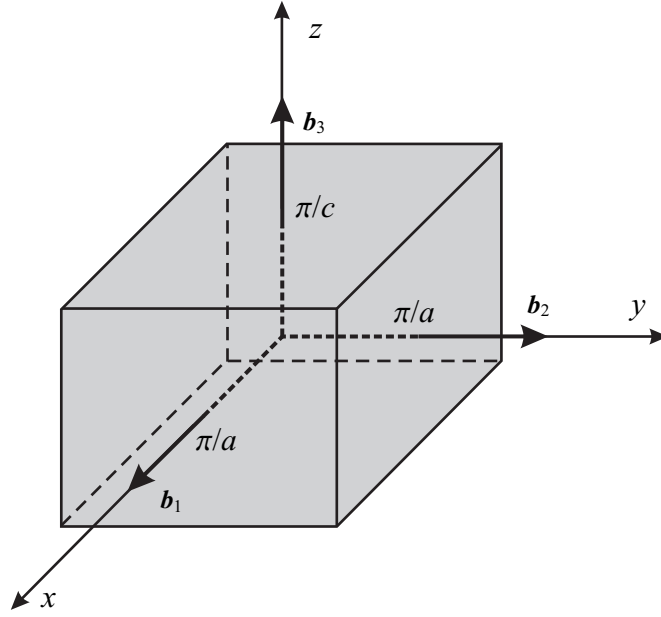
Maksimum magnonske disperzije $\omega(\mathbf{k}) \propto \sqrt{1 - \gamma_D^2(\mathbf{k})}$, pa samim tim i krajnja tačka IBZ za antiferomagnetnu rešetku je za $|k_{\alpha}| = \pi/a$. Dakle, zapremina hiperkocke koja u \mathbf{k} – prostoru predstavlja pogodnu oblast integracije je $(2\pi/a)^D$. Ova hiperkocka se poklapa sa Brillouinovom zonom za antiferomagnet. Naime, kao osnovni motiv na direktnoj antiferomagnetnoj rešetki treba uzeti magnetnu elementarnu ćeliju koja predstavlja hiperkocku ivice a . U njenom je centru čvor sa podrešetke a , dok su u temenima čvorovi koji pripadaju podrešetki b . Zapremina ove ćelije je a^D , tako da je zapremina IBZ baš $v^* = (2\pi/a)^D$. Drugim rečima, hiperkocka se poklapa sa Brillouinovom zonom pa se integrali po IBZ za antiferomagnetnu rešetku računaju kao

$$\frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \frac{a^D}{(2\pi)^D} \prod_{\alpha=1}^D \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_{\alpha} F(\mathbf{k}) \equiv a^D \int_{\mathbf{k}(a)} F(\mathbf{k}), \quad (\text{A.38})$$

pri čemu je $N_a = N/2$ broj čvorova podrešetke.

A.3 3D – magnetna rešetka za manganove halogenide

Konačno, od interesa je da definišemo I Brillouinovu zonu za 3D rešetku koja uključuje interplanarnu interakciju lokalizovanih spinova za Rb_2MnCl_4 i $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$. Kristalografska lementarna ćelija je prikazana na Sl. 1.1, a magnetna, koja je relevantna za definisanje Brillouinove zone kod antiferomagneta, je prikazana na Sl. 1.2.



Sl. A.1: I Brilluonova zona za tetragonalnu rešetku.

Ako su \mathbf{a}_α vektori translacije direktne (magnete) ćelije, primitivni vektori translacije recipročne rešetke su određeni jednačinama $\mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{b}_\beta = 2\pi\delta_{\alpha\beta}$. Osnovni vektori magnetne elementarne ćelije direktne rešetke su (videti Sl. 1.2):

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_x, \quad \mathbf{a}_2 = a\mathbf{e}_y, \quad \mathbf{a}_3 = c\mathbf{e}_z. \quad (\text{A.39})$$

pa su primitivni vektori translacije recipročne rešetke

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\mathbf{e}_x, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\mathbf{e}_y, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{c}\mathbf{e}_z. \quad (\text{A.40})$$

Dakle, Brilluonova zona u ovom slučaju je kvadar ivica $2\pi/a$, $2\pi/a$ i $2\pi/c$ (videti Sl. A.1)

Shodno tome, integracija u impulsnom prostoru se vrši prema pravilu

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = a^2 c \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/c}^{\pi/c} \frac{dk_x dk_y dk_z}{(2\pi)^3} F(ak_x, ak_y, ck_z). \quad (\text{A.41})$$

Ovaj obrazac je korišćen u odeljku 4.2.

Literatura

- [1] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag (1994)
- [2] W. Nolting, A. Ramakanth, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer-Verlag, (2009)
- [3] S. Radošević, M. Rutonjski, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, D. Kapor, M. Škrinjar, *Solid State Commun.* **151**1753 (2011)
- [4] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields I*, Cambridge University Press (2008)
- [5] C.P. Burgess, *Phys. Rep.* **330** 193 (2000)
- [6] G. S. Guralnik, C. R. Hagen, and T. W. B. Kibble, in *Advances in Particle Physics*, edited by R. L. Cool and R. E. Marshak, Vol. 2, p. 567, Wiley, New York (1968)
- [7] F. D. M. Haldane, *Phys. Lett.* **93A** 464 (1983)
- [8] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50** 1153 (1983)
- [9] S. Radošević, M. Pavkov-Hrvojević, M. Pantić, M. Rutonjski, D. Kapor and M. Škrinjar, *Eur. Phys. J. B* **68** 511 (2009)
- [10] B. Schröder, V. Wagner, N. Lehner, K. M. Kesharwani, R. Geick, *Phys. Stat. Sol (b)* **97** 501 (1980)
- [11] A. Epstein, E. Gurewitz, J. Makovsky, H. Shaked, *Phys. Rev. B* **2** 3703 (1970)
- [12] T. Huberman, D. A. Tennant, R. A. Cowley, R. Coldea, C. D. Frost, *J. Stat. Mech.* P05017 (2008)
- [13] T. Huberman, R. Coldea, R. A. Cowley, D. A. Tennant, R. L. Leheny, R. J. Christianson, C. D. Frost, *Phys. Rev. B* **72** 014413 (2005)
- [14] W. D. van Amstel, L. J. de Jongh, *Solid State Commun.* **11** 1423 (1972)
- [15] G. Heger, E. Heinrich, B. Kanellakopulos, *Solid State Commun.* **12** 1157 (1973)
- [16] I. Mikhali, *Acta Cryst.* **B11** 1317 (1977)
- [17] M. E. Lines, *Phys. Rev.* **164** 736 (1967)
- [18] A. L. Fetter, J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, New York (1971)

- [19] X. G. Wen, *Quantum Field Theory of Many Body Systems*, Oxford University Press (2004)
- [20] J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **51** 659 (1979)
- [21] N. N. Plakida, Theor. Math. Phys. **168** (2011)
- [22] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102** 1217 (1956)
- [23] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102** 1230 (1956)
- [24] F. Englert, Phys. Rev. Lett. **5** 102 (1960)
- [25] R. Stinchcombe, G. Horwitz, F. Englert, R. Brout, Phys. Rev. **130** 155 (1963)
- [26] S. Capitani, Phys. Rep. **382** 113 (2003)
- [27] S.V. Tyablikov, *The Methods in the Quantum Theory of Magnetism*, Plenum Press, New York (1967)
- [28] P. Fröbrich and P. J. Kuntz, Phys. Rep. **432** 223 (2006)
- [29] H. Leutwyler, Phys. Rev. D **49** 3033 (1994)
- [30] L. H. Ryder, *Quantum Field Theory*, Cambridge University Press (1996)
- [31] S. Radošević, M. Pantić, D. Kapor, M. Pavkov-Hrvojević and M. Škrinjar, J. Phys. A: Math. Theor. **43** 155206 (2010)
- [32] H. B. Callen, Phys. Rev. **130** 890 (1963)
- [33] H.B. Nielsen, S. Chadha, Nucl. Phys. B **105** 445 (1976)
- [34] A. M. Tsvelik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press (2003)
- [35] D. Kapor, M. Pantić, M. Škrinjar, M. Pavkov, S. Radošević, M. Rutonjski, Phys. Stat. Sol. (b) **244** 3750 (2007)
- [36] M. Pantić, M. Škrinjar, D. Kapor, Physica A **387** 5786 (2008)
- [37] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*, World Scientific, Singapore (2003)
- [38] T. Oguchi, Phys. Rev. **117** 117 (1960)
- [39] F. B. Anderson, H. B. Callen, Phys. Rev. **136** A 1068 (1964)
- [40] K. H. Lee, S. H. Liu, Phys. Rev. **159** 390 (1967)
- [41] G. B. Arfken, H. J. Weber *Mathematical Methods for Physicist, Fifth edition*, New York: Harcourt Academic Press (2001)

- [42] Gradshteyn I S and Ryzhik I M 1965 *Tables of Integrals, Series and Products* (New York: Academic Press)
- [43] Bailey W N 1964 *Generalized Hypergeometric Series* (New York: Stechert-Hafner Service Agency)
- [44] S. Coleman, Commun. math. Phys. **31** 259 (1973)
- [45] K. G. Wilson, Phys. Rev. D **7** 2911 (1972)
- [46] K. G. Wilson, J. B. Kogut, Phys. Rep. **12C** 75 (1974)
- [47] E. J. Neves, J. F. Perez, Phys. Lett. A **114** 331 (1986)
- [48] N. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17** 1133 (1966)
- [49] S. Radošević, *Magnetne osobine antiferomagnetnih halogenida mangana – Master rad*, Departman za fiziku, Univerzitet u Novom Sadu (2009)
- [50] 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)
- [51] V. Yu. Irkhin, A. A. Katanin, M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B. **60** 1082 (1999)
- [52] M. Rutonjski, S. Radošević, M. Škrinjar, M. Pavkov-Hrvojević, D. Kapor, M. Pantić, Phys. Rev. B **76** 172506 (2007)
- [53] M. Manojlović, M. Pavkov, M. Škrinjar, M. Pantić, D. Kapor, S. Stojanović, Phys. Rev. B. **68** 014435 (2003)
- [54] M. Rutonjski, S. Radošević, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, D. Kapor, M. Škrinjar, Solid State Commun. **151** 518 (2011)
- [55] I. Affleck, J. Phys.: Condens. Matter. **1** 3047 (1989)
- [56] I. Affleck, Nucl. Phys. B **257** 397 (1985)
- [57] L. Faddeev, L. Takhtajan, LOMI preprint E-4-83 (1983)
- [58] J. Sólyom, J. Timonen, Phys. Rev. B **34** 487 (1986)
- [59] J. Sólyom, J. Timonen, Phys. Rev. B **38** 6832 (1988)
- [60] P. Garbaczewski, Phys. Rep. **36** 35 (1978)
- [61] V. G. Baryakhtar, V. N. Krivoruchko, and D. A. Yablonsky, *Greens Functions in the Theory of Magnetism* [na ruskom], Naukova Dumka, Kiev (1984).
- [62] V. G. Vaks, A. I. Larkin, S. A. Pikin, Zh. Éksp. Theor. Fiz. **53** 281 (1967) [Sov. Phys. JETP **26** 188 (1968)]
- [63] V. G. Vaks, A. I. Larkin, S. A. Pikin, Zh. Éksp. Theor. Fiz. **53** 1089 (1967) [Sov. Phys. JETP **26** 647 (1968)]

- [64] Y.A. Izyumov, F.A. Kasan-Ogli, Y.N. Skryabin, *Field Methods in the Theory of Ferromagnetism* [na ruskom], Nauka, Moscow (1974)
- [65] N. Nagaosa, *Quantum Field Theory in Strongly Correlated Electronic Systems*, Springer (1999)
- [66] D. P. Arovas, A. Auerbach, Phys. Rev. B. **38** 316 (1988)
- [67] S. Sarker, C. Jayaparakash, H. R. Krishnamurthy, M. Ma, Phys. Rev. B. **40** 5028 (1989)
- [68] A.L. Kuzemsky, Rivista Nuovo Cimento **25** 1 (2002)
- [69] S. Weinberg, Physica A, **96** 327 (1979)
- [70] J. Gasser, H. Leutwyler, Ann. Phys. **158**, 142 (1984)
- [71] P. Gerber, H. Leutwyler, Nucl. Phys. B **321**, 387 (1989)
- [72] H. Leutwyler, Ann. Phys. **235** 165 (1994)
- [73] C.P. Burgess, Phys. Rep. **330** 193 (2000)
- [74] S. Scherer, M. Schindler, *A Primer for Chiral Perturbation Theory*, Lecture Notes in Physics 830, Springer, Berlin-Heidelberg (2012)
- [75] J. Gasser, H. Leutwyler, Nucl. Phys. B **250** 465 (1985)
- [76] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields II*, Cambridge University Press (2005)
- [77] S. Chakravarty, B. I. Halperin, D. R. Nelson, Phys. Rev. B **39** 2344 (1989)
- [78] C. P. Hofmann, Phys. Rev. B **60**, 406 (1999)
- [79] J. M. Roman, J. Soto, Int. J. Mod. Phys B **13** 755 (1999)
- [80] C. P. Hofmann, Phys. Rev. B **60** 388 (1999)
- [81] C. P. Hofmann, Phys. Rev. B **65** 094430 (2002)
- [82] C. P. Hofmann, Phys. Rev. B **84** 064414 (2011)
- [83] B. Schlittgen, U.-J. Wiese, Phys. Rev. D **63** 085007 (2001)
- [84] A. Jevicki, N. Papanikolaou, Ann. Phys. **120** 107 (1979)
- [85] J. Klauder, Phys. Rev. D **19** 2349 (1979)
- [86] C. J. Hamer, J. B. Kogut, L. Susskind, Phys. Rev. D **19** 3091 (1978)
- [87] R. Shankar, N. Read, Nucl. Phys. B **336** 457 (1990)
- [88] I. A. Shushpanov, A. V. Smilga, Phys. Rev. D **59** 054013 (1999)
- [89] R. Lewis, P. Ouimet, Phys. Rev. D **64** 034005 (2001)

- [90] S. V. Maleev, Zh. Éksp. Theor. Fiz. **33** 1010 (1957) [Sov. Phys. JETP **64**, 654 (1958)]
- [91] M. Bloch, Phys. Rev. Lett. **9** 286 (1962)
- [92] R. A. Tahir-Kheli, D. ter Haar, Phys. Rev. **127** 88 (1962)
- [93] J. I. Kapusta, C. Gale, *Finite-Temperature Field Theory - Principles and Applications*, Cambridge University Press (2006)
- [94] J. Gasser, H. Leutwyler, Nucl. Phys. B **307** 763 (1988)
- [95] T. Dombre, N. Read, Phys. Rev. B **38** 7181 (1988)
- [96] X. G. Wen, A. Zee, Phys. Rev. Lett. **61** 1025 (1988)
- [97] M. Pavkov-Hrvojević, M. Škrinjar, D. Kapor, P. Krstonošić, *Zbirka zadataka po odabranim poglavljima statističke fizike*, Univerzitet u Novom Sadu, (2007)
- [98] V. Kobelev, A. B. Kolomeisky, M. E. Fisher, J. Chem. Phys. **116**, 7589 (2002)
- [99] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, John Wiley & Sons, inc., New York (1963) (na ruskom)

**UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO MATEMATIČKI FAKULTET**

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj: RBR	
Identifikacioni broj: IBR	
Tip dokumentacije: TD	Monografska dokumentacija
Tip zapisa: TZ	Tekstualni štampani materijal
Vrsta rada (dipl., mag., dokt.): VR	Doktorska disertacija
Ime i prezime autora: AU	Slobodan Radošević
Mentor (titula, ime, prezime, zvanje): MN	dr Milica Pavkov-hrvojević, vanredni profesor
Naslov rada: NR	Termodinamička svojstva složenih antiferomagnetnih sistema opisanih Hajzenbergovim modelom
Jezik publikacije: JP	Srpski (latinica)
Jezik izvoda: JI	srp. / eng.
Zemlja publikovanja: ZP	Srbija
Uže geografsko područje: UGP	Vojvodina
Godina: GO	2012
Izdavač: IZ	autorski reprint
Mesto i adresa: MA	Budisava, Vojvođanska 74

Fizički opis rada: FO	7 poglavlja /137 stranica /30 slika / 99 referenci /1 prilog
Naučna oblast: NO	Fizika
Naučna disciplina: ND	Teorijska fizika kondenzovane materije
Predmetna odrednica, ključne reči: PO	Hajzenbergov model, D -dimenzioni sistemi, metod jednačina kretanja, integrali Votsonovog tipa, generalisana hipergeometrijska funkcija, magnonski operatori, magnon-magnon interakcija, spontano narušavanje simetrije, efektivni lagranžijan, Goldstonovi bozoni, nelinearni sigma model
UDK	
Čuva se: ČU	
Važna napomena: VN	Ova doktorska disertacija je realizovana u okviru naučno-istraživačkog projekta „Uticaj elementarnih ekscitacija i konformacija na fizička svojstva novih materijala baziranih na jako korelisanim niskodimenzionalnim sistemima” Ministarstva Republike Srbije za nauku i tehnološki razvoj (broj OI 171009).
Izvod: IZ	U disertaciji se ispituje uticaj magnon-magnon interakcije na termodinamičke osobine Hajzenbergovog modela. Linearizacijama jednačina kretanja za lokalizovane spinove su dobijena rešenja ekvivalentna standardnim aproksimacijama u teoriji dvovremenskih temperaturskih Grinovih gunkcija (RPA Tjablikova i Kalenova aproksimacija) na fizički transparentnij način. Pokazano je kako dobijena rešenja, naročito u RPA prilazu, dobro opisuju osnovne termodinamičke veličine kvazidvodimenzionih antiferomagnetnih jedinjenja mangana Rb_2MnCl_4 i $(CH_3NH_3)_2MnCl_4$. Takođe, korišćenjem analitičkih rešenja za integrale Votsonovog tipa, pokazano je da u slučaju male i velike spinske anizotropije RPA rešenje predviđa nižu kritičnu temperaturu nego Kalenova aproksimacija za Hajzenbergov model na D dimenzionoj zepreminski centriranoj rešetki, ako je $D \geq 2$.

	<p>Slično, ispostavlja se da RPA predviđa višu kritičnu temperaturu kod jednodimenzionih sistema. Primenom metoda efektivnih lagranžijana, u kombinaciji sa regularizacijom rešetkom, na D dimenzioni O(3) Hajzenbergov feromagnet je pokazano da nepodesnost RPA na niskim temperaturama dolazi udled eksplicitnog narušavanja unutrašnje simetrije zenemarivanjem magnon-magnon interakcija koje generiše WZW član. Pošto je ovaj član karakterističan za feromagnet, ovim je implicitno opravdana primena RPA na Hajzenbergov antiferomagnet. Konačno, uvedena je transformacijaa 1D Hajzenbergovog antiferomagneta u slučaju male spinske anizotropije koja uvodi prave magnonske stepene na direktnoj rešetki. Na ovaj način se eliminiše potreba za transformacijom Bogoljubova prilikom dijagonalizacije hamiltonijana u linearnoj aproksimaciji. Takođe, ova transformacija direktno povezuje 1D HAFM sa hamiltonijanom rešetkom regularizovanog NσS modela. Ovako dobijeni NσS model sadrži doprinos koji u granici kontinuuma postaje topološki θ član.</p>
<p>Datum prihvatanja teme od strane NN veća: DP</p>	<p>10. 11. 2011.</p>
<p>Datum odbrane: DO</p>	
<p>Članovi komisije: (ime i prezime / titula / zvanje / naziv organizacije / status) KO</p>	<p>predsednik: dr Darko kapor, redovni profesor PMF u Novom Sadu</p> <p>član: dr Milica Pavkov-Hrvojević, vanredni profesor PMF u Novom Sadu, mentor</p> <p>član: dr Milan Pantić, redovni profesor PMF u Novom Sadu</p> <p>član: dr Miljko Satarić, redovni profesor FTN u Novom Sadu</p>

University of Novi Sad
Faculty of Sciences
Key word documentation

Accession number: ANO	
Identification number: INO	
Document type: DT	Monograph documentation
Type of record: TR	Textual printed material
Contents code: CC	
Author: AU	Slobodan Radošević
Mentor: MN	Dr Milica Pavkov-hrvojević, associate professor
Title: TI	Thermodynamic properties of complex antiferromagnetic systems described by Heisenberg model
Language of text: LT	Serbian (latin)
Language of abstract: LA	eng. / srp.
Country of publication: CP	Serbia
Locality of publication: LP	Vojvodina
Publication year: PY	2012
Publisher: PU	Author's reprint
Publication place: PP	Budisava, Vojvođanska 74

Physical description: PD	7 chapters / 137 pages /30 figures/ 99 literature quotes /1 appendix
Scientific field SF	Physics
Scientific discipline SD	Theoretical condensed matter physics
Subject, Key words SKW	Heisenberg model, D -dimensional systems, method of equations of motion, Watson-like integrals, generalyzed hypergeometric function, magnon field operators, magnon-magnon interactions, spontaneous symmetry breaking, effective Lagrangian, Goldstone bosons, nonlinear sigma model
UC	
Holding data: HD	
Note: N	This work was supported by the Serbian Ministry of Science and Technological Development within the project "Influence of elementary excitations and conformations on the physical properties of the new materials based on the strongly correlated low-dimensional systems" (OI 171009)
Abstract: AB	The influence of magnon-magnon interactions on thermodynamic properties of Heisenberg model is investigated in the thesis. The first part relays on the linearization of the equations of motion for localized spins. Using suitable linearization, results of standard methods of double time temperature Green's function (in particular, Tyablikov RPA and Callen's approximation) are obtained. The present method provides more physical insight since equations of motions are solved in terms of magnon field operators. It is shown that RPA-like solution adequately describes basic thermodynamic properties of quasi 2D

	<p>antiferromagnetic compounds Rb_2MnCl_4 and $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$.</p> <p>Using analytical solutions of Watson-like integrals, an exact statement is made concerning RPA and Callen's approximation: in case of small or large spin anisotropy, RPA predicts lower critical temperature for D-dimensional Heisenberg model on body centered lattice if $D \geq 2$. Also, RPA predicts higher critical temperature for one dimensional systems. Further, an explanation for spurious T^3 contribution to the low temperature expansion of spontaneous magnetization (an consequence of RPA linearization) in terms of internal symmetry of Heisenberg model is provided, using method of effective Lagrangians and lattice regularization. It is shown that RPA linearization explicitly violates internal $O(3)$ symmetry of Heisenberg model by discarding magnon-magnon interactions generated by WZW term in the effective Lagrangian for ferromagnet. This finding indirectly favors application of RPA to the Heisenberg antiferromagnet, since corresponding effective Lagrangian does not contain WZW term. Finally, an transformation that relates 1D Heisenberg antiferromagnet and lattice-regularized Hamiltonian of $O(3)$ NLSM is introduced. In case of small spin anisotropy, this transformation introduces true magnon field operators on a lattice, since diagonal boson (magnon) Hamiltonian is obtained without Bogoliubov transformation. Also, transformation directly produces topological θ term on a lattice.</p>
Accepted on Scientific Board on: AS	10. 11. 2011.
Defended: DE	
Thesis Defend Board: DB	<p>president: Dr Darko Kapor, full professor, Faculty of Sciences, Novi Sad</p> <p>member: Dr Milica Pavkov-Hrvojević, associate professor, Faculty of Sciences, Novi Sad, mentor</p>

	<p>member: Dr Milan Pantić, full professor, Faculty of Sciences, Novi Sad</p> <p>member: Dr Miljko Satarić, full professor, Faculty of Technical Sciences, Novi Sad</p>
--	---

Biografija



Slobodan Radošević je rođen u Novom Sadu, 21.11. 1981. godine. Gimnaziju "J. J. Zmaj" je završio 2000. godine kada se i upisao na Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu, smer diplomirani fizičar. Na osnovnim studijama je diplomirao 2006. godine nakon čega se upisao na master studije fizike, smer Teorijska fizika kondenzovane materije. Akademski naziv diplomirani fizičar-master je stekao 2009. godine.

Koautor je 12 naučnih radova, od kojih je 5 objavljeno u vodećim međunarodnim časopisima. Zaposlen je na Prirodno-Matematičkom fakultetu u Novom Sadu sa zvanjem istraživača saradnika.