



UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI
FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU



Elementarne eksitacije i magnetne osobine kvazi – dvodimenzionalnih antiferomagnetskih materijala

-diplomska rad -

Mentor: dr Milan Pantić

Kandidat: Slobodan Radošević

Novi Sad, 2006

SADRŽAJ

Uvod.....	3
1. Hajzenbergov model i antiferomagnetizam	
1.1. Poreklo integrala izmene.....	5
1.2. Hamiltonian kvazi – dvodimenzionalnih antiferomagnetika.....	9
1.3. Spektar elementarnih ekscitacija.....	12
2. Numerička analiza magnetnih svojstava kvazi – dvodimenzionalnih Antiferomagnetika.....	22
2.1. Nelova temperature i magnetizacija za Rb_2MnCl_4	25
2.2. Nelova temperature i magnetizacija za MAMC - D.....	27
2.3. Nelova temperature i magnetizacija za Rb_2MnF_4	25
Zaključak.....	31
Dodatak 1.....	32
Dodatak 1.....	36
Literatura.....	41

UVOD

Za objašnjavanje magnetnih pojava, kroz istoriju su korišćeni različiti modeli, koji su se oslanjali na vodeće naučne teorije u datom trenutku. Zaokruživanjem klasične elektrodinamike i statističke fizike stekli su se uslovi za dobijanje prve ozbiljnije slike o prirodi magnetizma. To su bile Lanževinova teorija paramagnetizma i dijamagnetizma. Teorija paramagnetizma je obuhvatala supstance čiji atomi (odnosno, molekuli, zavisno od konkretnе strukture; u kratkom prikazu klasičnih teorija biće, radi pojednostavljenja korišćen termin atom) poseduju permanentni magnetni dipolni momenat, nastao usled asimetrije raspodele njihovih nadelektrisanja. Takva supstanca se posmatra kao sistem magnetnih dipola. Dok nema polja, svi pravci u prostoru su podjednako verovatni, pa je magnetizacija, kao ukupni magnetni moment po jedinici zapremine jednaka nuli. Uključivanjem polja, dolazi do formiranja ravnotežnog stanja u kome su verovatniji oni pravci magnetnih dipola koji grade manje uglove sa spoljašnjim poljem, te se javlja i konačna magnetizacija u uzorku. Primenom Gibbsove formule za kanonički ansambl, dolazi se do poznatog obrazca u kome je magnetizacija povezana sa magnetnim dipolom molekula preko Lanževinove funkcije. Ova teorija je uspela da objasni postojanje Kirijevog zakona.

Sa druge strane teorija dijamagnetizma razmatra supstance koje nemaju permanentni magnetni dipolni momenat. Razmatranja o dijamagnetcima se zasnivaju na indukovanim magnetnim momentima usled Larmorove precesije. Ovako shvaćen, dijamagnetizam je opšta osobina svih atoma i javlja se i kod paramagnetika, ali je prikriven jačim paramagnetskim efektom.

Na Lanževinovu teoriju paramagnetizma tesno se oslanja Vajsova teorija feromagnetizma. Za razliku od dijamagnetika i paramagnetika, feromagnetne materijale karakteriše postojanje konačne magnetizacije u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja. Da bi objasnio ovakvo ponašanje supstance, Vajs je uveo pojam domena spontane magnetizacije. To su male oblasti unutar samog materijala koje se prakrično ponašaju kao mikroskopska tela sa određenom vrednošću ukupnog magnetnog momenta (postojanje domena je kasnije i eksperimentalno potvrđeno). Slično kao kod paramagnetika, uključivanje spoljašnjeg polja dovodi do orientacije domena duž njegovog pravca. Međutim, posle isključivanja polja, uređenost je delimično sačuvana, pa se javlja zaostala magnetizacija. Usled toga, ukupno polje koje deluje na atome feromagnetika jednako je zbiru spoljašnjeg i izvesnog »molekulskog« polja, koje potiče od susednih atoma (Ovo »molekulsko« polje je uvek mnogo jače od spoljašnjeg, kao što će pokazati i kasnije analize). Vajs je pretpostavio da je ono polje proporcionalno magnetizaciji. Spoljašnje i »molekulsko« polje zajedno sačinjavaju tz. efektivno polje. Na ovo efektivno polje se primenjuje ista procedura kao pri tretiranju paramagnetika, ali sada je dobijena funkcionalna zavisnost složenija. Vajsova teorija feromagnetizma je uspela da objasni postojanje kritične temperature ispod koje je moguće postojanje spontane magnetizacije bez prisustva spoljašnjeg polja (Kirijeva temperatura). Jedan od njenih važnijih rezultata je formulisanje Kiri – Vajsovog zakona.

Ovi klasični modeli magnetnih osobina materije omogućavaju fenomenološko opisivanje pojava, ali ne i njihovo pravilno tumačenje. Takođe, oni sadrže određene činjenice koje

nisu u stanju da objasne. Tako se pri razmatranju dijamagnetizma uzimalo da srednje rastojanje elektrona od jezgra atoma ima konstantnu vrednost, što odgovara postojanju stacionarnih orbita, koje klasična fizika ne može da objasni. Slično tome, bez objašnjenja je ostao mehanizam nastanka domena spontane magnetizacije kod feromagnetika.

Iz neuspeha klasične fizike nastala je kvantna teorija. Jedan od osnovnih rezultata kvantne mehanike je postojanje sopstvenog momenta čestica – spina (u stvari otkriće spina je prethodilo strogom zasnivanju kvantne mehanike, ali je njegovo tumačenje dobijeno tek posle formulisanja Dirakove relativističke teorije elektrona). Posledica postojanja spina je postojanje sopstvenog magnetnog momenta. Nova teorija se na svoj način pozabavila i sa magnetnim pojavama.

Često se kao osnova za kvantno tumačenje magnetnih osobina materije uzima tzv. Hajzenbergov model koji se zasniva na pretpostavci postojanja lokalizovanih spinskih magnetnih momenata u čvorovima kristalne rešetke. Oni potiču od nesparenih spinova elektrona u atomima, odnosno jonima. Interakcije između ovih spinova su preko sila izmene, koje su posledica principa nerazlikovanja čestica iste vrste formulisanog tek pojavom kvantne mehanike. Važno je uvideti da ni pojam spina, kao ni interakcija izmene ne postoje u klasičnoj fizici. Ovo je jedan potpuno novi prilaz problemu.

Hajzenbergov model omogućava istovremeno tumačenje feromagnetizma i antiferomagnetizma. Ovaj rad upravo predstavlja primenu Hajzenbergovog modela na jednu klasu antiferomagnethih jedinjenja. Reč je, dakle, o jedinjenjima hlorida i mangana. Atomi mangana imaju spin $S = 5/2$ i grade magnetnu kristalnu rešetku, dok se hloridi postavljaju duž z-ose. S obzirom da je njihov radijus veliki, oni ekraniraju interakciju između atoma mangana, koji pripadaju različitim slojevima. Zbog toga se ovi sistemi ponašaju kao dvodimenzionalni antiferomagneti. U radu će najpre biti formirani modelni hamiltonian sistema. Zatim će, na bazi metoda dvovremenskih Grinovih funkcija biti određen spektar elementarnih ekscitacija i na osnovu toga nadene magnetizacije sistema i izračunate odgovarajuće Nelove temperature za jedinjenja Rb_2MnCl_4 , Rb_2MnF_4 i $(\text{CH}_3\text{Nh}_3)_2\text{MnCl}_4$ (tj. MAMC – D).

1. HAJZEHBERGOV MODEL I ANTIFEROMAGNETIZAM

1.1 POREKLO INTERAKCIJE IZMENE

Od ovog odeljka ne treba očekivati iscrpan prikaz svih osobina antiferomagnetika ili eksperimentalnih thenika za njihovo proučavanje. Osnovni cilj ovog odeljka je definisanje Nelove temperature, kao i dobijanje hamiltonijana na koji će biti primenjen metod Grinovih funkcija u nastavku.

U uvodu je spomenuto da se Hajzenbergov model zasniva na postojanju interakcije izmena, koja ima čisto kvantni karakter. Da bi pokazali njen smisao, posmatrajmo sistem koji se sastoji od dve čestice. Hamiltonian sistema ima sledeći oblik:

$$\hat{H} = \hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2) + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (1.1.-1)$$

pri čemu su \hat{H}_1 i \hat{H}_2 hamiltonijani slobodnih čestica, a V je interakcija koja zavisi od rastojanja između čestica. Smatraćemo da su nam poznata rešenja svojstvenih problema nepertubovanih hamiltonijana:

$$\hat{H}_i \varphi_{k,i} = E_{k,i} \varphi_{k,i}, \quad i = 1, 2. \quad (1.1.-2)$$

Indeks k se odnosi na određeno stanje. U prvoj aproksimaciji, rešenje svojstvenog problema za hamiltonijan (1.1.-1) je

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2).$$

Ali, elektroni su identične čestice. Jedan od bitnih rezultata kvantne mehanike govori da se identične čestice međusobno ne mogu razlikovati. Zbog toga, rešenje problema može biti i

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_1(\vec{r}_2) \varphi_2(\vec{r}_1).$$

Opšte rešenje je linearna kombinacija prethodna dva. Talasna funkcija mora biti normirana na jedinicu, pa je opšte rešenje:

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \pm \varphi_1(\vec{r}_2) \varphi_2(\vec{r}_1)]. \quad (1.1.-3)$$

Ukoliko su čestice Bozoni, talasna funkcija je parna (ili simetrična u odnosu na permutovanje čestica), a ukoliko su Fermioni, talasna funkcija je neparna, odnosno antisimetrična.

U nerelativističkom limesu, energija čestica, kao i njihiva interakcija, ne zavise od spina. To dozvoljava da se razdvoje prostorna i spinske promenjive. Ograničimo

razmatranje na elektrone. Pošti su elektroni fermioni, ukupna talasna funkcija mora biti antisimetrična, pa razlikujemo dva slučaja:

$$|\psi_A\rangle = |\varphi_A\rangle |\chi_S\rangle$$

ili

$$|\psi_A\rangle = |\varphi_S\rangle |\chi_A\rangle$$

Sa A je označena antisimetrična funkcija, a sa S simetrična, dok $|\chi\rangle$ predstavlja spinsku funkciju.

Operator interakcije ne deluje na spinske promenjive, pa je popravka na energiju sistema u prvoj aproksimaciji teorije perturbacija:

$$\Delta E = \langle \varphi_S | V | \varphi_S \rangle, \quad \langle \chi_A | \chi_A \rangle = 1,$$

tj.

$$\Delta E = \langle \varphi_A | V | \varphi_A \rangle, \quad \langle \chi_S | \chi_S \rangle = 1.$$

Prethodna dva izraza za popravku vrednosti energije možemo objediniti u jedan uvođenjem sledeće funkcije definisane jednačinom (1.1.-3). Tada je:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \varphi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \\ &\int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 |\varphi_1(\vec{r}_1)|^2 |\varphi_2(\vec{r}_2)|^2 V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \pm \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \varphi_1^*(\vec{r}_1) \varphi_2^*(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_1(\vec{r}_2) \varphi_2(\vec{r}_1) \end{aligned}$$

Prvi integral predstavlja čistu klasičnu Kulonovsku interakciju između dva elektrona (u to se možemo lako uveriti ako iskoristimo činjenicu da je proizvod elementarnog nanelektrisanja i kvadrata modula talasne funkcije upravo prostorna gustina nanelektrisanja), dok drugi integral, koji nas ovde i najviše zanima, ostaje bez klasične interpretacije. To je tzv. integral izmene, u kome su talasne funkcije elektrona »izmešane«. Obično se označava sa J .

Dirak je prvi uveo operator izmene, takav da su veličine $\pm J$ njegove svojstvene vrednosti. Taj operator ima sledeći oblik:

$$\hat{V}_{ex} = -\frac{1}{2} J \left(1 + 4 \hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2 \right).$$

Ako se sistem sastoji od dva elektrona, moguće vrednosti ukupnog spina sistema su 0 i 1. Da bi iskoristili tu činjenicu, napisaćemo:

$$\hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2 = \frac{1}{2} \left(\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2 \right).$$

Prethodna jednakost se dobija kvadriranjem izraza $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2$. Za slučaj $S = 0$ lako nalazimo (imajući u vidu da je $S_1^2 = S_2^2 = 1/2(1/2+1) = 3/4$)

$$\hat{V}_{ex} = -\frac{1}{2}J\left(1 - 4\frac{3}{4}\right) = J, \quad S = 0.$$

Slično, za $S = 1$ dobija se ($S_1^2 = S_2^2 = 1/2(1/2+1) = 3/4$, $S^2 = 1(1+1) = 2$):

$$\hat{V}_{ex} = -\frac{1}{2}J\left(1 + 4\frac{1}{4}\right) = -J, \quad S = 1.$$

Prethodni rezultati nam govore sledeće: Ukoliko je J pozitivna veličina, spinovi sistema će se orijentisati paralelno, jer je ukupna energija sistema manja (skalarni proizvod $\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2$ je tada veći od nule). Supstance kod kojih su spinovi orijentisani paralelno su feromagnetični. Ali, ako je vrednost integrala izmene manja od nule, spinovi će težiti da se orijentisu antiparalelno. Tada govorimo o antiferomagneticima.

Hamiltonian Hajzenbergovog modela, a koji sledi iz prethodnih razmatranja je :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}} \sum_{\vec{m}} J'(\vec{n} - \vec{m}) \hat{\vec{S}}_{\vec{n}} \cdot \hat{\vec{S}}_{\vec{m}} \quad (1.1.-4)$$

Sumiranje se vrši po svi čvorovima rešetke. Spinski operatori koji deluju na pojedinim čvorovima potiču od nesparenih sopstvenih momenata elektrona koji ulaze u sastav atoma, odnosno jona ili molekula, na posmatranom čvoru. Veličina $J'(\vec{n} - \vec{m})$ predstavlja integral izmene, koji po pretpostavci zavisi samo od rastojanja između čvorova.

Pošto se na ovom mestu razmatraju antiferomagnetični definisaćemo vrednost integrala izmene kao

$$J(\vec{n} - \vec{m}) \equiv -J'(\vec{n} - \vec{m}) \equiv J_{\vec{n} - \vec{m}},$$

da bi baratali sa pozitivnom veličinom.

Relacijom (4) je definisan izotropni Hajzenbergov model, jer se prepostavlja da veličina integrala izmene ne zavisi od pravca u prostoru. Opštiji je tzv. izotropni Hajzenbergov model, okarakterisan Hamiltonijanom:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}} \sum_{\vec{m}} \left\{ J_{\vec{n} - \vec{m}}^x \hat{S}_{\vec{n}}^x \hat{S}_{\vec{m}}^x + J_{\vec{n} - \vec{m}}^y \hat{S}_{\vec{n}}^y \hat{S}_{\vec{m}}^y + J_{\vec{n} - \vec{m}}^z \hat{S}_{\vec{n}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^z \right\},$$

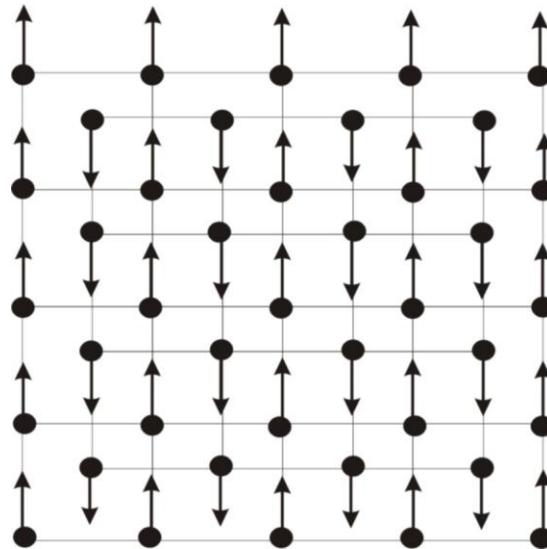
kod kojeg je uračunata zavisnost integrala izmene od pravca u prostoru. Najopštiji je ovaj slučaj, kad su sve tri vrednosti različite.

Do sada smo smatrali da nema spoljašnjeg uticaja na sistem. Ukoliko se sistem nalazi u spoljašnjem magnetnom polju \vec{H} , potrebno je proširiti osnovni Hamiltonijan. Interakciju sa spoljašnjim poljem opisuje dobro poznati Zemanov član:

$$\hat{H}_{Zem} = -g \mu_B \vec{H} \sum_{\vec{n}} \hat{\vec{S}}_{\vec{n}},$$

gde je g Landeov factor, a μ_B Borov magneton.

Iz gore iznesenog, jasno je da antiferomagnetik predstavlja uređen sistem. Antiferomagnetik se sastoji od dve magnetne podrešetke (magnetnu rešetku šačinjava periodična raspodela spinova u prostoru.; magnetna elementarna ćelija se ne mora poklapati sa kristalografskom). Jednostavan šematski prikaz dvodimenzionalnog antiferomagneta je dat na slici 1.1.-1.

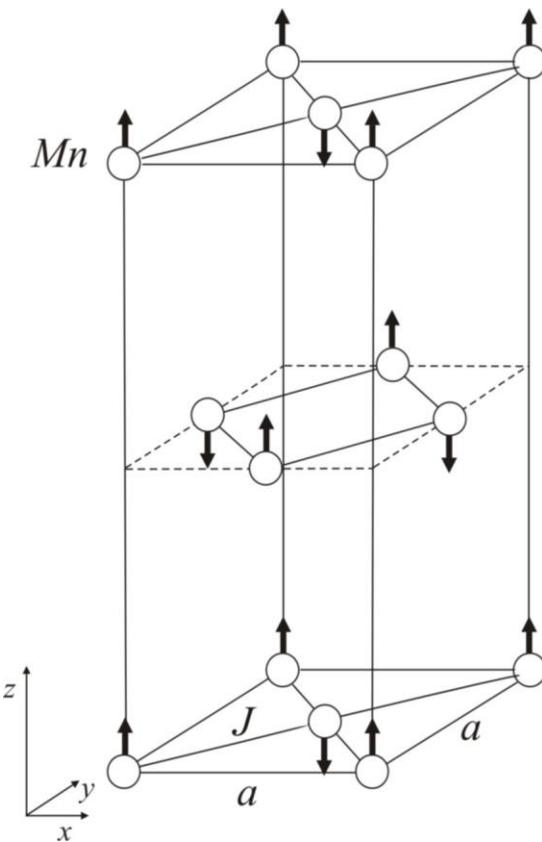


Slika 1.1.-1 Šematski prikaz dvodimenzionalnog antiferomagneta

Očigledno, uređenost je najveća na apsolutnoj nuli. Tada su svi spinovi jedne podrešetke orijentisani u jednom pravcu. Obično se kao referentni pravac bira z – osa, tako da je magnetizacija podrešetke data kao srednja vrednost z – projekcije operatora spina. Pošto su spinovi ove dve podrešetke suprotno orijentisani, a istog su intenziteta, ukupna magnetizacija je jednak nuli. Kako se temperature povećava, topotni kvanti (fononi) interaguju sa rešetkom. Jedan fonon smanji projekciju spina na čvoru za jedan. Međutim, usled sila izmene, poremećaj se prenosi na susedne čvorove. Tako nastaje spinski talas. Kvant energije spinskog talasa (tj. energija elementarnog pobuđenja) se naziva magnon. Sa povećanjem temperature, magnetizacija podrešetke se smanjuje. Konačno, na Nelovoj temperaturi, uređenost nestaje i antiferomagnetik prelazi u paramagnetu fazu.

1.2. HAMILTONIJAN KVAZI DVODIMENZIONALNIH ANTIFEROMAGNETIKA

U nastavku ćemo se posebno osvrnuti na jedu klasu antiferomagnetičnih materijala, tzv. kvazi dvodimenzionalnih antiferomagnetika. Reč je o jedinjenjima kod kojih je dominantna interakcija između najbližih suseda, unutar jedne ravni. Interakcija sa spinovima susedne ravni je mnogo slabija (oko 10^{-4} puta). Unutar jedne ravni, dvodimenzionalne elementarne čelije su kvadratne (vidi se sa slike 1.2.-1 ; detaljniji crtež je dat u Dodatku 1). Tipičan predstavnik ove klase jedinjenja je Rb_2MnCl_4 , čija je magnetna elementarna čelija prikazana na slici 1.2.-1. Ovo jedinjenje, kao i druga dva razmatrana u radu, ima ukupni spin $S = 5/2$.



Slika 1.2.-1: Magnetna elementarna čelija Rb_2MnCl_4

Za detaljniju analizu, potrebno je da odredimo konačan oblik Hamiltonijana koji ćemo koristiti za konkretnе proračune.

Kao što je napomenuto, dominantna je interakcija između najbližih suseda, unutar jedne ravni. Za najbliže susede, vrednost interakcije izmene je konstantna. Označićemo je sa J . Kao što se vidi sa slike 1.2.-1 najbliži susedi uvek potiču iz suprotne podrešetke. Ove dve podrešetke označićemo sa a i b . Umesto sumiranja po svim parovima čvorova, zbog

aproksimacije najbližih suseda, može se sumirati samo po čvorovima (odnosno spinovima) jedna podrešetke. Na svaki takav čvor se “kače” njegovi najbliži susedi. Vektor koji spaja čvor na mestu $\vec{\rho}$ sa njegovim najbližim susedima se obično označi sa $\vec{\lambda}$. Držaćemo se tog uobičajenog načina označavanja. Na osnovu ovih objašnjenja, sledi da se hamiltonian može uzeti u sledećem obliku:

$$\hat{H} = J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \hat{S}_{\vec{\rho}}(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^*(b) \quad (1.2.-1)$$

Umesto operatora \hat{S}^x i \hat{S}^y , pogodno je hamiltonijan izraziti pomoću operatora \hat{S}^+ i \hat{S}^- , definisanih relacijama:

$$\hat{S}^\pm = \hat{S}^x \pm i \hat{S}^y. \quad (1.2.-2)$$

Ovi operatori imaju neposredno fizičko tumačenje (iz kvantne mehaničke teorije momenta impulsa, poznato je da delovanje \hat{S}^+ i \hat{S}^- na stanje sa vrednošću projekcije spina S^z povećava, odnosno smanjuje tu vrednost za jedan.. Zato kažemo da \hat{S}^- kreira pobuđenje sistema, dok ga \hat{S}^+ anihilira). Izražen pomoću ovih operatora hamiltonijan (1.2.-1) postaje:

$$\hat{H} = J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \left\{ \frac{1}{2} \left[\hat{S}_{\vec{\rho}}^+(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^-(b) + \hat{S}_{\vec{\rho}}^-(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^+(b) \right] + \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^z(b) \right\}.$$

Radi lakšeg računanja, izvršićemo rotaciju b podrešetke oko x – ose. Na taj način dobijamo jedinstvenu osu kvantizacije duž z ose. Matrica ove transformacije je

$$\begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}.$$

Za $\alpha = 180^\circ$, komponente vektora u novom sistemu su:

$$\begin{bmatrix} \hat{S}^z'(b) \\ \hat{S}^y'(b) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{S}^z(b) \\ \hat{S}^y(b) \end{bmatrix},$$

odakle lako nalazimo (pomoću definicionih relacija (6), uvezši u obzir da se x komponenta nije promenila)

$$\begin{aligned}\hat{S}^{+}'(b) &= \hat{S}^{-}(b) \\ \hat{S}^{-}'(b) &= \hat{S}^{+}(b) \\ \hat{S}^{z}'(b) &= -\hat{S}^{z}(b)\end{aligned}$$

Znak prim u buduće nećemo pisati. Ako je uključeno spoljašnje polje, u hamiltonijan treba dodati Zemanov član. Međutim, to nije sve. U okviru izotropnog dvodimenzionalnog Hajzenbergovog modela nije moguće postojanje dugodometnog uređenja, (Mermin – Vagnerova teorema) pa samim time ni magnetizacije. U hamiltonijan je neophodno uključiti anizotropiju, koja omogućava postojanje magnetizacije. Razmatrana je tzv. spinska anizotropija u z – pravcu. Anizotropija je označena sa η . Konačan oblik hamiltonijana glasi:

$$\begin{aligned}\hat{H} = J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \left\{ \frac{1}{2} \left[\hat{S}_{\vec{\rho}}^+(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^+(b) + \hat{S}_{\vec{\rho}}^-(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^-(b) - \eta \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^z(b) \right] - \right. \right. \\ \left. \left. - g \mu_B H \sum_{\vec{\rho}} \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(a) - \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(b) \right] \right\}\end{aligned}$$

Ovaj hamiltonijan će biti korišćen za određivanje spektra elementarnih ekscitacija, Nelove temperature i magnetizacije posmatranih jedinjenja.

1.3. SPEKTAR ELEMENTARNIH EKSCITACIJA

Za analizu sistema koristimo ranije dobijen hamiltonijan:

$$\hat{H} = J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \left\{ \frac{1}{2} \left[\hat{S}_{\vec{\rho}}^+(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^-(b) + \hat{S}_{\vec{\rho}}^-(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^-(b) \right] - \eta \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^z(b) \right\} - g \mu_B H \sum_{\vec{\rho}} \left[\hat{S}_{\vec{\rho}}^z(a) - \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(b) \right]. \quad (1.3.-1)$$

Da bismo odredili spektar elementarnih ekscitacija u sistemu, koristićemo dve Grinove funkcije:

$$G_{\vec{n}\vec{m}} = \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^+(a) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle \quad \text{i} \quad \Gamma_{\vec{n}\vec{m}} = \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^-(b) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle, \quad (1.3.-2)$$

kao i dve Grinove funkcije za odgovarajuće adjungovane operatore, tj.

$$G_{\vec{n}\vec{m}}^1 = \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^-(a) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle \quad \text{i} \quad \Gamma_{\vec{n}\vec{m}}^1 = \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^+(b) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle. \quad (1.3.-3)$$

Indeksi \vec{n} i \vec{m} se ovde odnose na određenu ravan. Jednačine koje zadovoljavaju gore navedene Grinove funkcije u energetskoj reprezentaciji glase (postupak kojim se dolazi do ovde korišćenih jednačina, kao i način formiranja Grinovih funkcija detaljnije je razmatran u Dodatku 2):

$$EG_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{i}{2\pi} \left\langle \left[\hat{S}_{\vec{n}}^+(a), \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \right] + \langle\langle [\hat{S}_{\vec{n}}^+(a), \hat{H}] | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle \right\rangle \quad (1.3.-4)$$

$$E\Gamma_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{i}{2\pi} \left\langle \left[\hat{S}_{\vec{n}}^-(b), \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \right] + \langle\langle [\hat{S}_{\vec{n}}^-(b), \hat{H}] | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle \right\rangle.$$

Za izračunavanje odgovarajućih komutatora koristimo poznata pravila iz kvantno – mehaničkog tretmana momenta impulsa:

$$\left[\hat{S}_{\vec{n}}^\pm(a), \hat{S}_{\vec{n}}^\mp(b) \right] = \mp \hat{S}_{\vec{n}}^\pm(a) \delta_{a,b} \delta_{\vec{n},\vec{m}}$$

i

$$\left[\hat{S}_{\vec{n}}^+(a), \hat{S}_{\vec{n}}^-(b) \right] = 2 \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) \delta_{a,b} \delta_{\vec{n},\vec{m}},$$

Jer operatori $\hat{S}(a)$ i $\hat{S}(b)$ deluju na različitim podrešetkama. Primenom ovih pravila na sistem jednačina (1.3.-4) dobijamo:

$$\begin{aligned} \left[\hat{s}_{\vec{n}}^+(a), \hat{H} \right] &= \frac{1}{2} J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \left[\hat{s}_{\vec{n}}^+(a), \hat{S}_{\vec{\rho}}^+(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^+(b) \right] + \left[\hat{s}_{\vec{n}}^+(a), \hat{S}_{\vec{\rho}}^-(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^-(b) \right] \\ &\quad - \eta J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \left[\hat{s}_{\vec{n}}^+(a), \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^z(b) \right] - g \mu_B H \sum_{\vec{\rho}} \left[\hat{s}_{\vec{n}}^+(a), \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(a) + \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(b) \right] = \\ &= \frac{1}{2} J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} 2 \delta_{\vec{n}, \vec{\rho}} \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^-(b) - \eta J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} (-\delta_{\vec{n}, \vec{\rho}} \hat{S}_{\vec{n}}^+(a)) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^z(b) \\ &\quad - g \mu_B H \sum_{\vec{\rho}} (-\delta_{\vec{n}, \vec{\rho}} \hat{S}_{\vec{n}}^+(a)) \end{aligned}$$

odnosno, posle ukidanja suma Kronekerovim simbolima, konačno dobijamo:

$$\left[\hat{s}_{\vec{n}}^+(a), \hat{H} \right] = J \sum_{\vec{\lambda}} \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^-(b) + \eta J \sum_{\vec{\lambda}} \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^z(b) \hat{S}_{\vec{n}}^+(a) + g \mu_B H \hat{S}_{\vec{n}}^+(a) . \quad (1.3.-5)$$

Zamenjujući u jednačinu za $G_{\vec{n}\vec{m}}$, dobijamo:

$$\begin{aligned} EG_{\vec{n}\vec{m}} &= \frac{i}{2\pi} 2 \langle \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) \rangle \delta_{\vec{n}\vec{m}} + J \sum_{\vec{\lambda}} \langle \langle \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^-(b) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle \rangle + \\ &\quad + \eta J \sum_{\vec{\lambda}} \langle \langle \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^z(b) \hat{S}_{\vec{n}}^+(a) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle \rangle + g \mu_B H \langle \langle \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle \rangle . \end{aligned} \quad (1.3.-6)$$

Ostalo je još da se nađe vrednost komutatora $[\hat{S}_{\vec{n}}^-(b), \hat{H}]$. Zbog lakšeg računanja, hamiltonijan prepisujemo u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \left\{ \frac{1}{2} \left[\hat{s}_{\vec{\rho}}^+(b) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^+(a) + \hat{S}_{\vec{\rho}}^-(b) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^-(a) \right] - \eta \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(b) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^z(a) \right\} - \\ &\quad - g \mu_B H \sum_{\vec{\rho}} \left[\hat{S}_{\vec{\rho}}^z(a) - \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(b) \right] \end{aligned} \quad (1.3.-7)$$

Izmena u odnosu na Hamiltonijan iz (1) se sastoji u sledećem. Naime, u (1.3.-1) smo sumirali po svim čvorovima podrešetke a , spajivajući čvorove iz podrešetke b kao najблиže susede sa odgovarajućim čvorovima iz prve podrešetke. U jednačini (1.3.-7) smo samo obrnuli brojanje čvorova. Kao »osnovne« posmatramo čvorove podrešetke b , preko kojih se vrši sumiranje. Čvorove podrešetke a »kačimo« kao najблиže susede na čvorove podrešetke b . Time je račun pojednostavljen i dobijamo:

$$\begin{aligned}
& \left[\hat{\mathbf{f}}_{\vec{n}}^-(b), \hat{H} \right] = \frac{1}{2} J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \left[\hat{\mathbf{f}}_{\vec{n}}^-(b), \hat{S}_{\vec{\rho}}^+(b) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^+(a) + \hat{\mathbf{f}}_{\vec{n}}^-(b), \hat{S}_{\vec{\rho}}^-(b) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^-(a) \right] \\
& - \eta J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \left[\hat{\mathbf{f}}_{\vec{n}}^-(b), \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(b) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^z(a) \right] - g \mu_B H \sum_{\vec{\rho}} \left[\hat{\mathbf{f}}_{\vec{n}}^-(b), \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(a) + \hat{S}_{\vec{\rho}}^z(b) \right] = \\
& = -\frac{1}{2} J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} 2 \delta_{\vec{n}, \vec{\rho}} \hat{S}_{\vec{n}}^z(b) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^+(a) - \eta J \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\lambda}} \delta_{\vec{n}, \vec{\rho}} \hat{S}_{\vec{n}}^-(b) \hat{S}_{\vec{\rho}+\vec{\lambda}}^-(a) \\
& \quad - g \mu_B H \sum_{\vec{\rho}} (-\delta_{\vec{n}, \vec{\rho}} \hat{S}_{\vec{n}}^+(a)) ,
\end{aligned}$$

ili konačno:

$$\left[\hat{\mathbf{f}}_{\vec{n}}^-(a), \hat{H} \right] = -J \sum_{\vec{\lambda}} \hat{S}_{\vec{n}}^z(b) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^+(a) - \eta J \sum_{\vec{\lambda}} \hat{S}_{\vec{n}}^-(b) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^-(a) + g \mu_B H \hat{S}_{\vec{n}}^-(b). \quad (1.3.-8)$$

Na sličan način nalazimo jednačinu za drugu Grinovu funkciju $\Gamma_{\vec{n}\vec{m}}$:

$$\begin{aligned}
E \Gamma_{\vec{n}\vec{m}} = & -J \sum_{\vec{\lambda}} \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^z(b) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^+(a) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle - \eta J \sum_{\vec{\lambda}} \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^z(a) \hat{S}_{\vec{n}}^-(b) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle \\
& + g \mu_B H \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle.
\end{aligned} \quad (1.3.-9)$$

Cilj ovog postupka je da se odredi zavisnost elementarnih pobuđenja od talasnog vektora. Za tu svrhu je potrebno, kako je pokazano u Dodatku 2, izvršiti prostorni Furije transform. Međutim, pre toga moramo dekuplovati više Grinove funkcije koje se pojavljuju u (1.3.-8) i (1.3.-9).

Grinove funkcije višeg reda dekuplujemo Tjablikovom aproksimacijom:

$$\langle\langle \hat{S}_{\vec{r}}^z \hat{S}_{\vec{n}}^{\pm} | \hat{S}_{\vec{m}}^- \rangle\rangle \rightarrow \langle\langle \hat{S}_{\vec{r}}^z | \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^{\pm} | \hat{S}_{\vec{m}}^- \rangle\rangle \rangle. \quad (1.3.-10)$$

Ovaj rezultat primenjujemo na Grinove funkcije iz (1.3.-6). Tako dobijamo:

$$\begin{aligned}
\langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^-(b) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle & \cong \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) | \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^-(b) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle \rangle = \\
& = \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) | \Gamma_{\vec{n}+\vec{\lambda}, \vec{m}} \rangle\rangle ,
\end{aligned}$$

odnosno

$$\begin{aligned}
\langle\langle \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^z(b) \hat{S}_{\vec{n}}^+(a) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle & \cong \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^z(b) | \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^+(a) | \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \rangle\rangle \rangle = \\
& = \langle\langle \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^z(b) | G_{\vec{n}, \vec{m}} \rangle\rangle .
\end{aligned}$$

Naša sledeća prepostavka je da zbog translatorne invarijantnosti kristala, srednja vrednost operatora z – komponente spina ne zavisi od položaja čvora. Znači, imamo da je:

$$\langle \hat{S}_{\vec{n}}^z(a) \rangle = \langle \hat{S}^z(a) \rangle,$$

kao i :

$$\sum_{\vec{\lambda}} \langle \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^z(a) \rangle = z \langle \hat{S}^z(a) \rangle.$$

Sve ovo vodi na sledeću jednačinu za $G_{\vec{n}\vec{m}}$:

$$\begin{aligned} EG_{\vec{n}\vec{m}} &= \frac{i}{2\pi} 2 \langle \hat{S}^z(a) \rangle \delta_{\vec{n}\vec{m}} + J \langle \hat{S}^z(a) \rangle \sum_{\vec{\lambda}} \Gamma_{\vec{n}+\vec{\lambda},\vec{m}} + \eta J z \langle \hat{S}^z(b) \rangle G_{\vec{n}\vec{m}} + \\ &\quad + g \mu_B H G_{\vec{n}\vec{m}}. \end{aligned} \quad (1.3.-11)$$

Sličnim postupkom dolazimo do uprošćene jednačine za $\Gamma_{\vec{n}\vec{m}}$:

$$\begin{aligned} E \Gamma_{\vec{n}\vec{m}} &= -J \langle \hat{S}^z(b) \rangle \sum_{\vec{\lambda}} G_{\vec{n}+\vec{\lambda},\vec{m}} - \eta J z \langle \hat{S}^z(a) \rangle \Gamma_{\vec{n}\vec{m}} + \\ &\quad + g \mu_B H \Gamma_{\vec{n}\vec{m}}. \end{aligned} \quad (1.3.-12)$$

Sada možemo primeniti prostorni Furije transform (detaljnije obrađen u Dodatku 1):

$$G_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N_2} \sum_{\vec{k}_\parallel} G_{\vec{k}_\parallel} e^{i\vec{k}_\parallel(\vec{n}-\vec{m})}.$$

Ovde je \vec{k}_\parallel dvodimenzionalni talasni vector, a N_2 broj čvorova u jednoj podrešetci (podrazumeva se jedan sloj trodimenzionalne rešetke, u duhu kvazi dvodimenzionalne aproksimacije). U nastavku će, zbog jednostavnosti biti korištene oznake \vec{k} i N , bez bojazni da će doći do zabune. Pogledajmo posebno članove u kojima se vrši sumiranje po najbližim susedima. Recimo:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{\lambda}} \Gamma_{\vec{n}+\vec{\lambda},\vec{m}} &= \sum_{\vec{\lambda}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \Gamma_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}+\vec{\lambda}-\vec{m})} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \Gamma_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} \sum_{\vec{\lambda}} e^{i\vec{k}\vec{\lambda}} = \\ &= z \gamma_{\vec{k}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \Gamma_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}, \end{aligned}$$

gde smo uveli tzv. geometrijski factor :

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\lambda}} e^{i\vec{k}\vec{\lambda}}.$$

Nakon Furije transforma sistem jednačina (1.3.-11) i (1.3.-12) dobija sledeći oblik:

$$(E - \varepsilon_1) G_{\vec{k}} - J z \gamma_{\vec{k}} \langle \hat{S}^z(a) \rangle \Gamma_{\vec{k}} = \frac{i}{2\pi} 2 \langle \hat{S}^z(a) \rangle, \quad (1.3.-13)$$

$$J z \gamma_{\vec{k}} \langle \hat{S}^z(b) \rangle G_{\vec{k}} + (E - \varepsilon_2) \Gamma_{\vec{k}} = 0,$$

gde su uvedene sledeće oznake:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \eta J z \langle \hat{S}^z(b) \rangle + g \mu_B H \\ \varepsilon_2 &= \eta J z \langle \hat{S}^z(a) \rangle - g \mu_B H \end{aligned} \quad (1.3.-14)$$

Sistem jednačina (1.3.-13) je nehomogen. Njegovo rešenje se može naći pomoću Kramerovog pravila :

$$G_{\vec{k}} = \frac{\Delta_G}{\Delta}, \quad \Gamma_{\vec{k}} = \frac{\Delta_\Gamma}{\Delta},$$

Ovde je Δ determinanta sistema, data sa:

$$\Delta = \begin{vmatrix} E - \varepsilon_1 & -\langle \hat{S}^z(a) \rangle J(\vec{k}) \\ \langle \hat{S}^z(b) \rangle J(\vec{k}) & E + \varepsilon_2 \end{vmatrix},$$

dok su:

$$\Delta_G = \begin{vmatrix} \frac{i}{2\pi} 2 \langle \hat{S}^z(a) \rangle & -\langle \hat{S}^z(a) \rangle J(\vec{k}) \\ 0 & E + \varepsilon_2 \end{vmatrix}$$

i

$$\Delta_\Gamma = \begin{vmatrix} E - \varepsilon_1 & \frac{i}{2\pi} 2 \langle \hat{S}^z(a) \rangle \\ -\langle \hat{S}^z(a) \rangle J(\vec{k}) & 0 \end{vmatrix}$$

gde je

$$J(\vec{k}) = J z \gamma_{\vec{k}}$$

Kako je pokazano u Dodatku 2, energija elementarnih eksitacija sistema je određena singularitetima Grinove funkcije. Odmah vidimo da je za to potrebno da determinanta sistema bude jednaka nuli.

Razvijanjem determinante sistema, dolazimo do jedne kvadratne jednačine:

$$E^2 - E(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) - \varepsilon_1 \varepsilon_2 + J^2(\vec{k}) \langle \hat{S}^z(a) \rangle \langle \hat{S}^z(b) \rangle ,$$

čija su rešenja

$$E_{1/2}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 \pm \sqrt{\varepsilon_1^2 - \varepsilon_2^2 + 4 \varepsilon_1 \varepsilon_2 - 4 J^2(\vec{k}) \langle \hat{S}^z(a) \rangle \langle \hat{S}^z(b) \rangle} \right),$$

ili, pošto je

$$\varepsilon_1^2 - \varepsilon_2^2 + 4 \varepsilon_1 \varepsilon_2 = \varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2,$$

možemo napisati:

$$E_{1/2}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 \pm \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 - 4 J^2(\vec{k}) \langle \hat{S}^z(a) \rangle \langle \hat{S}^z(b) \rangle} \right). \quad (1.3.-15a)$$

Sličnim postupkom za adjungovane Grinove funkcije dobijamo:

$$E_{3/4}(\vec{k}) = -\frac{1}{2} \left(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 \pm \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 - 4 J^2(\vec{k}) \langle \hat{S}^z(a) \rangle \langle \hat{S}^z(b) \rangle} \right) \quad (1.3.-15b)$$

Iz poslednja dva izraza za energije vidi se da na temperaturi različitoj od nule u prisustvu spoljašnjeg magnetnog polja postoje četiri različite energije, dok u odsustvu polja postoje dve, dvostruko degenerisane energije (na apsolutnoj nuli, u prisustvu polja imamo dve različite energije, a u odsustvu polja jednu degenerisanu.). U ovom radu mi ćemo definisati dve pozitivne energije. U jednačini (1.3.15a) zadržaćemo granu sa pozitivnim znakom ($E_1(\vec{k})$), a u jednačini (1.3.15b) zadržaćemo granu sa negativnim znakom ispred korena ($E_2(\vec{k})$). U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja, usled translatorne invarijantnosti, srednje magnetizacije kod obe pod rešetke su jednakе:

$$\langle \hat{S}^z(a) \rangle = \langle \hat{S}^z(b) \rangle \equiv \langle \hat{S}^z \rangle .$$

Takođe, u tom slučaju je, na osnovu (1.3.-15)

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon = J \eta z \langle \hat{S}^z \rangle ,$$

te je determinanta sistema $\Delta = E^2 - E^2(\vec{k})$, dok je energija elementarnih eksitacija data jednačinom

$$E(\vec{k}) = \sqrt{\varepsilon^2 - J^2(\vec{k}) \langle S^z \rangle^2} = \sqrt{J^2 \eta^2 z^2 \langle S^z \rangle^2 - J^2 z^2 \gamma_{\vec{k}}^2 \langle S^z \rangle^2},$$

odnosno, konačno:

$$E(\vec{k}) = J z \langle S^z \rangle \sqrt{\eta^2 - \gamma_{\vec{k}}^2}. \quad (1.3.-16)$$

Ovim je završen jedan deo zadatka. Dobijen je spektar elementarnih eksitacija sistema u odsustvu spaljašnjeg magnetnog polja. Ova jednačina će kasnije biti korišćena za određivanje Nelove temperature, kao i kod nalaženja magnetizacije u podrešetkama.

Sada je potrebno odrediti Grinovu funkciju. Za tu svrhu, napisaćemo determinantu sistema u sledećem obliku :

$$\Delta = (E - E_1)(E - E_2) = (E - E_1)(E + E_1),$$

zato što je $E_1 = -E_2$, $E_1 \equiv E(\vec{k})$. Lako se može dobiti da je:

$$\Delta_G = \frac{i}{2\pi} 2 \langle \hat{S}^z \rangle (E + \varepsilon_2),$$

što znači da je Furijeova komponenta Grinove funkcije data sa:

$$G_{\vec{k}} = \frac{i}{2\pi} \frac{2 \langle \hat{S}^z \rangle (E + \varepsilon_2)}{(E - E_1(\vec{k}))(E + E_1(\vec{k}))}.$$

U Dodatku 2 je pokazano kako se preko Grinove funkcije može izraziti srednja vrednost proizvoda operatora. Da bi iskoristili tu relaciju, potrebno je malo transformisati $G_{\vec{k}}$. U tom smislu faktorizovaćemo izraz

$$\frac{E + \varepsilon_2}{(E - E_1)(E + E_1)} = \frac{A}{(E - E_1)} + \frac{B}{(E + E_1)}.$$

Ukoliko saberemo gornja dva razlomka, добићемо:

$$\frac{E + \varepsilon_2}{(E - E_1)(E + E_1)} = \frac{E(A + B) + E_1(A - B)}{(E - E_1)(E + E_1)},$$

odakle dobijamo sistem za određivanje A i B :

$$\begin{aligned} A + B &= 1 \\ E_1(A - B) &= \varepsilon_2 . \end{aligned}$$

Iz njega lako dobijamo:

$$A = \frac{E_1 + \varepsilon_1}{2E_1}, \quad B = \frac{E_1 - \varepsilon_1}{2E_1} .$$

Sada smo sveli Furije komponentu Grinove funkcije na željeni oblik:

$$G_{\vec{k}} = \frac{i}{2\pi} \frac{\langle \hat{S}^z \rangle}{E_1} \left\{ \frac{E_1 + \varepsilon_1}{E - E_1} + \frac{E_1 - \varepsilon_1}{E + E_1} \right\} .$$

Odavde možemo naći odgovarajuću korelacionu funkciju (videti Dodatak 2):

$$\langle \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \hat{S}_{\vec{n}}^+(a) \rangle_{\vec{k}} = 2 \langle \hat{S}^z \rangle \frac{1}{2E_1} \left\{ \frac{E_1 + \varepsilon_1}{e^{E_1/\theta} - 1} + \frac{E_1 - \varepsilon_1}{e^{-E_1/\theta} - 1} \right\} ,$$

ili, kako je

$$\frac{E_1 - \varepsilon_1}{e^{-E_1/\theta} - 1} = -(E_1 - \varepsilon_1) - \frac{E_1 - \varepsilon_1}{e^{E_1/\theta} - 1} ,$$

dobija se konačno

$$\langle \hat{S}_{\vec{m}}^-(a) \hat{S}_{\vec{n}}^+(a) \rangle_{\vec{k}} = 2 \langle \hat{S}^z \rangle \left\{ \frac{1}{E_1} \frac{\varepsilon_1}{e^{E_1/\theta} - 1} - \frac{E_1 - \varepsilon_1}{2E_1} \right\} .$$

Vraćanjem Furije transforma, za $\vec{n} = \vec{m}$, nalazimo traženu srednju vrednost proizvoda operatora:

$$\langle \hat{S}^-(a) \hat{S}^+(a) \rangle = 2 \langle \hat{S}^z \rangle P_S(T) , \quad (1.3.-17)$$

gde smo definisali:

$$P_S(T) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{\varepsilon_1}{E_1} \frac{1}{e^{E_1/\theta} - 1} - \frac{E_1 - \varepsilon_1}{2E_1} \right\} . \quad (1.3.-18)$$

Rezultat (1.3.-17) omogućava da se primenom Kalenovog metoda, za slučaj proizvoljnog spina S, izračuna magnetizacija podrešetki:

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \frac{(S + P_S(T))(1 + P_S(T))^{2S+1} + (1 + S + P_S(T))(P_S(T))^{2S+1}}{(1 + P_S(T))^{2S+1} - (P_S(T))^{2S+1}} . \quad (1.3.-19)$$

Međutim, nama je vrednost srednje magnetizacije "sakrivena" u funkciji $P_S(T)$ preko E_1 i ε_1 . Zato prvo nalazimo magnetizaciju na apsolutnoj nuli. Za $T = 0\text{K}$, imajući u vidu da je za posmatrana jedinjenja $S = 5/2$, funkcija iz (1.3.-18) se svodi na

$$P_{5/2}(0) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{\varepsilon_1}{2E_1} - \frac{1}{2} \right\}.$$

Da bi odredili $P_S(0)$ potrebno je sa sume preći na integral, po pravilu koje je objašnjeno u Dodatku 1.

$$\begin{aligned} P_{5/2}(0) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{\varepsilon_1}{2E_1} - \frac{1}{2} \right\} = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi dx \int_0^\pi dy \left\{ \frac{\varepsilon_1}{2E_1} - \frac{1}{2} \right\} = \\ &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi dx \int_0^\pi dy \left\{ \frac{4\eta J \langle \hat{S}^z \rangle}{8\eta J \langle \hat{S}^z \rangle \sqrt{\eta^2 - \gamma_{\vec{k}}^2}} - \frac{1}{2} \right\} \end{aligned}$$

U gornji integral smo zamenili ranije nađeno E_1 i ε_1 . U Dodatku 1 je izračunata i geometrijska konstanta. Imajući u vidu da je $x = a k_x$ i $y = a k_y$, gornji integral postaje:

$$P_{5/2}(0) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi dx \int_0^\pi dy \left\{ \frac{\eta/2}{\sqrt{\eta^2 - \left(\cos \frac{x}{2} \cos \frac{y}{2}\right)^2}} - \frac{1}{2} \right\} . \quad (1.3.-20)$$

U jednačini (1.3.-20) figuriše još jedna nepoznata veličina, vrednost anizotropije η , pa se date jednačine moraju rešavati numerički. Oslanjajući se na prethodne rezultate, uzimamo za početak iznos $\eta = 1+0.005$. Sa ovom vrednošću konstante anizotropije, brojna vrednost integrala je

$$P_{5/2}(0) = 0.166834.$$

Kombinujući ovo sa jednačinom (1.3.-19) dobijamo vrednost magnetizacije

$$\langle \hat{S}^z \rangle_0 = 2.33.$$

Ova vrednost će se koristiti u nastavku.

Sa druge strane, kada se temperature približava Nelovoj, magnetizacija teži nuli. Tada energija elementarnih ekscitacija postaje veoma mala, pa se eksponencijalna funkcija u jednačini (18) može razviti u red.

$$P_S(T_N) \cong \frac{1}{N} \sum_k \left\{ \frac{\varepsilon_1}{E_1} \frac{1}{1 + E_1/\theta_N - 1} + \frac{\varepsilon_1}{2E_1} - 1/2 \right\} \cong \frac{\theta_N}{N} \sum_k \frac{\varepsilon_1}{E_1^2}.$$

Zamenom E_1 i ε_1 u gornju aproksimaciju se dolazi do:

$$P_S(T_N) = \frac{\theta_N}{zJ\langle \hat{S}^z \rangle} C. \quad (1.3.-21)$$

Sa C je označen još jedan geometrijski koeficijent:

$$C = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\eta}{\eta^2 - \gamma_k^2}. \quad (1.3.-22)$$

Iz (1.3.-21) vidimo da je $P_S(T_N) \propto 1/\langle \hat{S}^z \rangle$, što znači da P_S veoma raste kako se material približava Nelovoj temperaturi. To možemo iskoristiti da razvijemo (19) po $(P_S)^{-1}$:

$$\langle \hat{S}^z \rangle \cong \frac{S(S+1)}{3} \frac{1}{P_S(T_N)}. \quad (1.3.-23)$$

U slučaju izotropnih 2 – D antiferomagnetika, koeficijent C divergira. Iz (1.3.-21) i (1.3.-22) vidimo da u tom slučaju ne može postojati magnetizacija. Ovaj rezultat je u skladu sa Mermin – Vagnerovom teoremom.

Na kraju ovog dela, napisaćemo izraz za Nelovu temperaturu, koji sledi iz jednačina (1.3.-21) i (1.3.-23):

$$T_N = \frac{S(S+1)}{3k_B} \frac{zJ}{C}. \quad (1.3.-24)$$

Ovaj rezultat će kasnije biti korišćen pri numeričkoj analizi Nelove temperature za posmatrana jedinjenja.

2. NUMERIČKA ANALIZA MAGNETNIH SVOJSTAVA KVAZIDVODIMENZIONALNIH ANTIFEROMAGNETIKA

Najpre ćemo odrediti Nelovu temperaturu za navedenu klasu jedinjenja za koju postoje eksperimentalni podaci. Nelovu temperaturu računamo po formuli (24) iz prethodnog odeljka. U toj formuli gigurišu dve nepoznate veličine: veličina anizotropije η (koja ulazi u izraz za T_N preko C) i interakcija izmene J . Njih možemo odrediti pomoću disperzione relacije, koristeći eksperimentalne podatke o zavisnosti energije elementarnih pobuđenja od talasnog broja. Neke formule dobijene u prethodnom odeljku, a koje će biti korišćene dalje, na jednom mestu:

$$T_N = \frac{S(S+1)}{3k_B} \frac{zJ}{C}, \quad (2.0.-1)$$

$$C = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\eta}{\eta^2 - \gamma_{\vec{k}}^2}, \quad (2.0.-2)$$

$$E(\vec{k}) = J z \langle S^z \rangle \sqrt{\eta^2 - \gamma_{\vec{k}}^2}. \quad (2.0.-3)$$

Kakos u sva merenja ekscitacija vršena na veoma niskim temperaturama, opravdano je korišćenje aproksimacije:

$$\langle \hat{S}^z \rangle \cong \langle \hat{S}^z \rangle_0 = 2.33. \quad (2.0.-4)$$

Koeficijent C zavisi od konkretnе vrednosti anizotropije. Da bi se on mogao odrediti, potrebno je preći na integral, po već korišćenom pravilu:

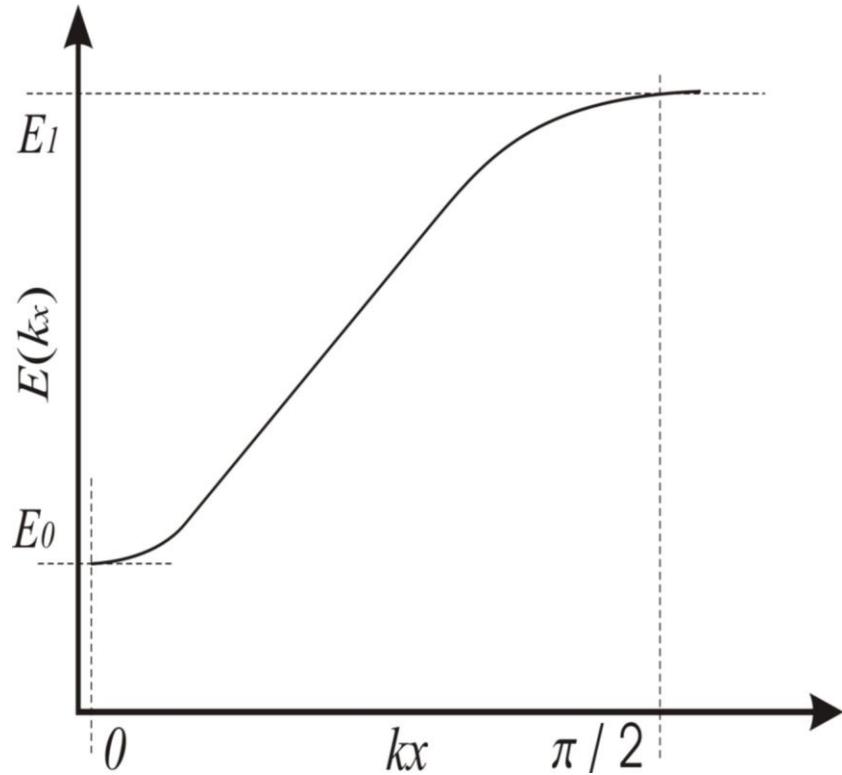
$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\eta}{\eta^2 - \gamma_{\vec{k}}^2} = \\ &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi dx \int_0^\pi dy \frac{\eta}{\eta^2 - (\cos \frac{x}{2} \cos \frac{y}{2})^2}. \end{aligned} \quad (2.0.-5)$$

U eksperimentima je, različitim tehnikama, merena zavisnost energije elementarnih ekscitacija od vrednosti k_x . Na primer, za RbMnCl₄ I MAMC (tj. (CH₃NH₃)₂MnCl₄), korišćena je tehnika neelastičnog rasejavanja neutrona za $[k_x, 0, 0]$ pravac. To znači da je pravac prostiranja elementarni ekscitacija (magnona) unutar jednog posmatranog sloja, odnosno ravni u k prostoru. Jedna takva zavisnost je skicirana niže. Da bismo odredili nepoznate veličine, integral izmene i anizotropiju, koji ulaze u izraz za T_N , izabraćemo dve tačke sa eksperimentalno dobijenog grafika. Mi ćemo posebno koristiti eksperimentalne vrednosti energije za talasni vektor $k_x = 0$, i $k_x = \pi/2$. Označićemo ove

energije sa E_0 i E_1 , respektivno. Kako se talasni vektor magnona duž k_x pravca menja od 0 do π/a , a $k_y = 0$, zbog toga se vrednost za $\gamma_{\vec{k}}$ pojednostavljuje:

$$\gamma_{\vec{k}} \rightarrow \cos \frac{ak_x}{2}$$

Koristeći pomenute dve tačke, kao i disperzionu relaciju (2.0-3), moguće je odrediti vrednost integrala izmene i veličinu anizotropije.



Slika 3.0.-1: određivanje E_0 I E_1

Ako raspošemo (3.0.-3) za pomenute dve vrednosti talasnog vektora, dobijamo sledeći sistem od dve jednačine:

$$E_0 = z J \langle \hat{S}^z \rangle_0 \sqrt{(1+x)^2 - 1} \quad (2.0.-6)$$

i

$$E_1 = z J \langle \hat{S}^z \rangle_0 \sqrt{(1+x)^2} . \quad (2.0.-77)$$

Ovde smo uveli sledeću oznaku:

$$x = 1 - \eta .$$

Veličina x predstavlja odstupanje od izotropije.
Ako podelimo (3.0.-6) sa (3.0.7) dobićemo

$$\frac{E_0}{E_1} = \frac{\sqrt{(1+x)^2 - 1}}{(1+x)}.$$

Odavde je lako naći x :

$$x = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{E_0}{E_1}\right)^2}} - 1, \quad (2.0.-8)$$

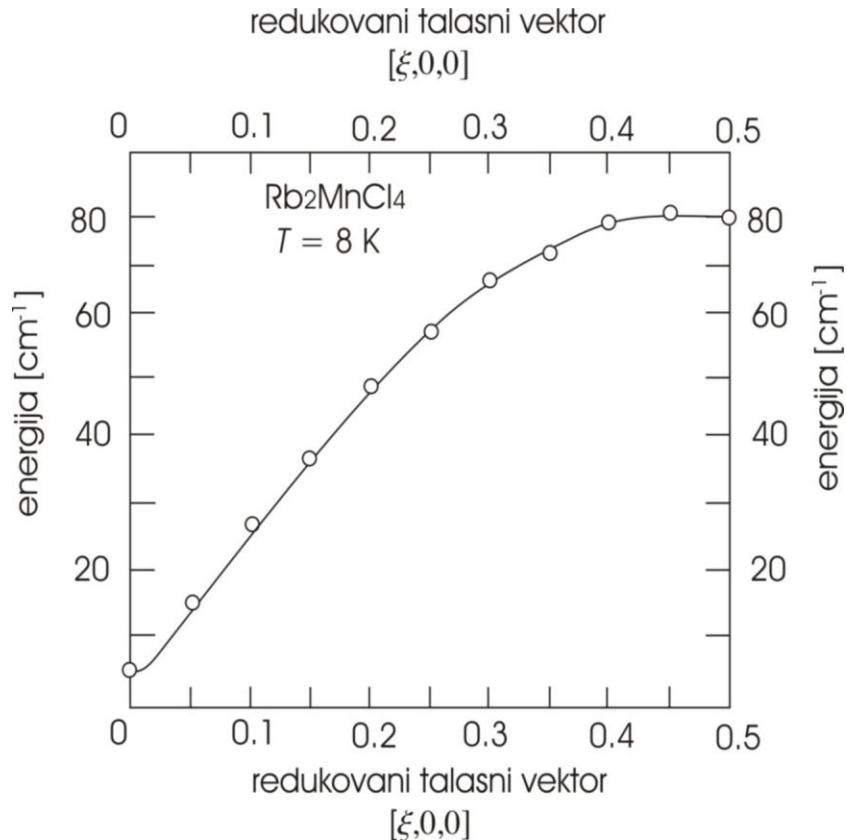
kao i J :

$$J = \frac{E_1}{4 \langle \hat{S}^z \rangle_0} \frac{1}{1+x}. \quad (2.0.-9)$$

Koristeći jednačine (2.0.-8) i (2.0.-9), možemo na osnovu eksperimentalnih podataka za zavisnost energije elementarnih pobuđenja od talasnog vektora, odrediti samousaglašeno, u okviru ovde izložene teorije, odrediti integral izmene i spinsku anizotropiju. Sa tako izračunatim vrednostima navedenih parametara možemo izračunati i Nelove temperature za navedena jedinjenja, i rezultate uporediti sa eksperimentalnim vrednostima za Nelovu temperaturu za posmatrana jedinjenja.

2.1.NELOVA TEMPERATURA I MAGNETIZACIJA ZA Rb₂MnCl₄

Na bazi opisane procedure, odredili smo Nelovu temperaturu za Rb₂MnCl₄. Rezultati merenja (preuzeti iz [6]), prikazani su na grafiku:



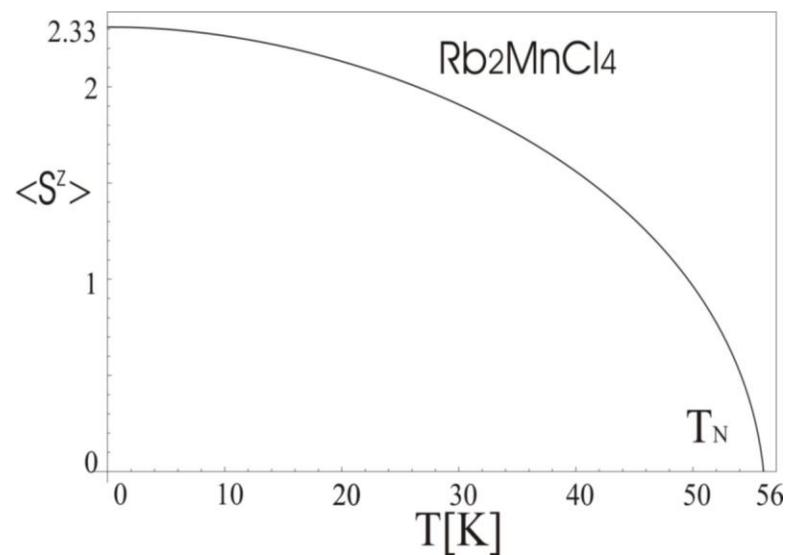
Slika 2.1.-1: Energija elementarnih ekscitacija u funkciji talasnog vektora za Rb₂MnCl₄ pri $T = 8\text{ K}$; $\xi = \frac{ak_x}{2\pi}$

Izborom E_0 i E_1 u jednačine (2.0.-8) i (2.0.9) sa gornjeg grafika, konačno dobijamo J i x , kao iodgovarajuće T_N za dato jedinjenje. Rezultati numeričkih kalkulacija dati su u sledećoj tabeli

Tabela 2.1.-1: Izračunate vrednosti parametara i eksperimentalne vrednosti za Rb₂MnCl₄

E_0 [cm ⁻¹]	E_1 [cm ⁻¹]	x	J [K]	C	T_N^{th} [K]	T_N^{exp} [K]
5.22	80.0	0.00214	12.29	2.61674	54.93	56

Iz tabele se vidi dobro slaganje teorijske i eksperimentalne vrednosti za Nelovu temperaturu. Na bazi teorijski dobijenih vrednosti za x i J , moguće je pomoću jednačine (1.3.-19) odrediti temperatursku zavisnost magnetizacije.

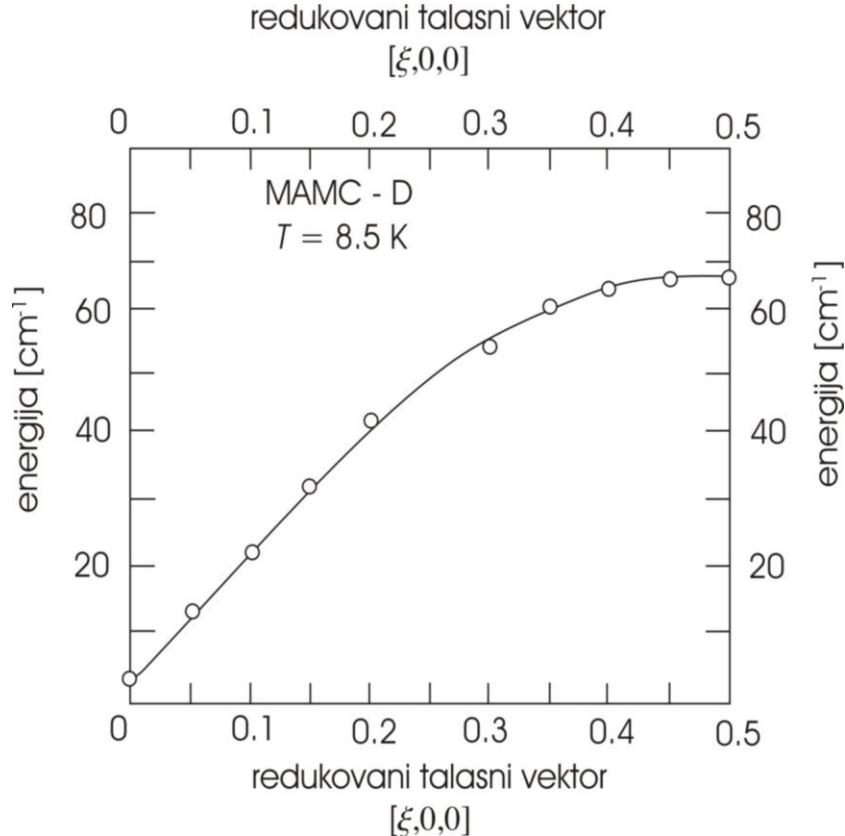


Slika 2.1-2 :Temperaturska zavisnost magnetizacije

Kao što je očekivano, magnetizacija opada sa temperaturom, od maksimalne na $T = 0\text{K}$, do isčezavajuće na Nelovojoj temperaturi.

2.2.NELOVA TRMPEATURA I MAGNETIZACIJA ZA MAMC – D

Analogno prethodnom slučaju, koristimo eksperimentalne rezultate sa donjeg grafika (koji su ponovo preuzeti iz [6]), za određivanje T_N , x i J :



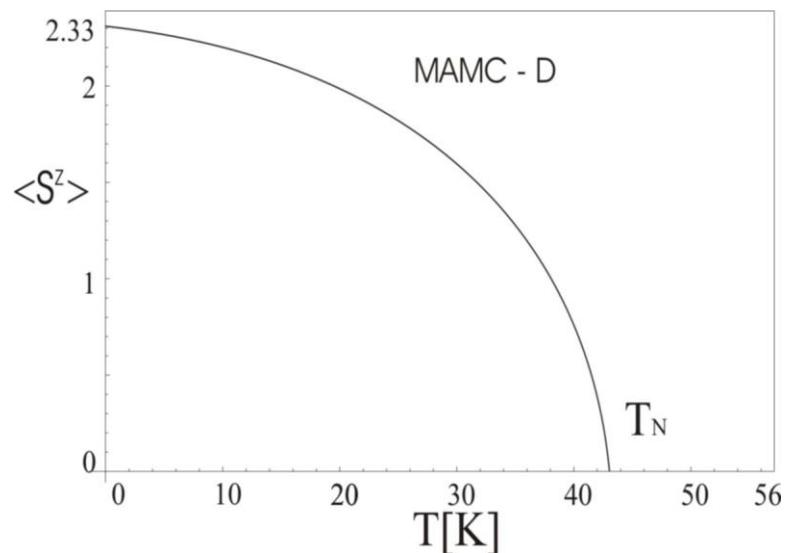
Slika 2.2.-1: Energija elementarnih ekscitacija u funkciji talasnog vektora za MAMC – D pri $T = 8.5\text{ K}$; $\xi = \frac{ak_x}{2\pi}$

Tu je i tabela koja prikazuje rezultate proračuna i poredi ih sa eksperimentalno određenom vrednošću:

Tabela 2.2.-1: Izračunate vrednosti parametara i eksperimentalne vrednosti za MAMC - D

$E_0 [\text{ cm}^{-1}]$	$E_1 [\text{ cm}^{-1}]$	x	$J [\text{K}]$	C	$T_N^{\text{th}} [\text{K}]$	$T_N^{\text{exp}} [\text{K}]$
3.48	67.0	0.001352	10.3	2.763	43.6	45.3

Pored očigledno dobrog slaganja izračunate Nelove temperature, dobijena je lepa zavisnost magnetizacije od temperature.

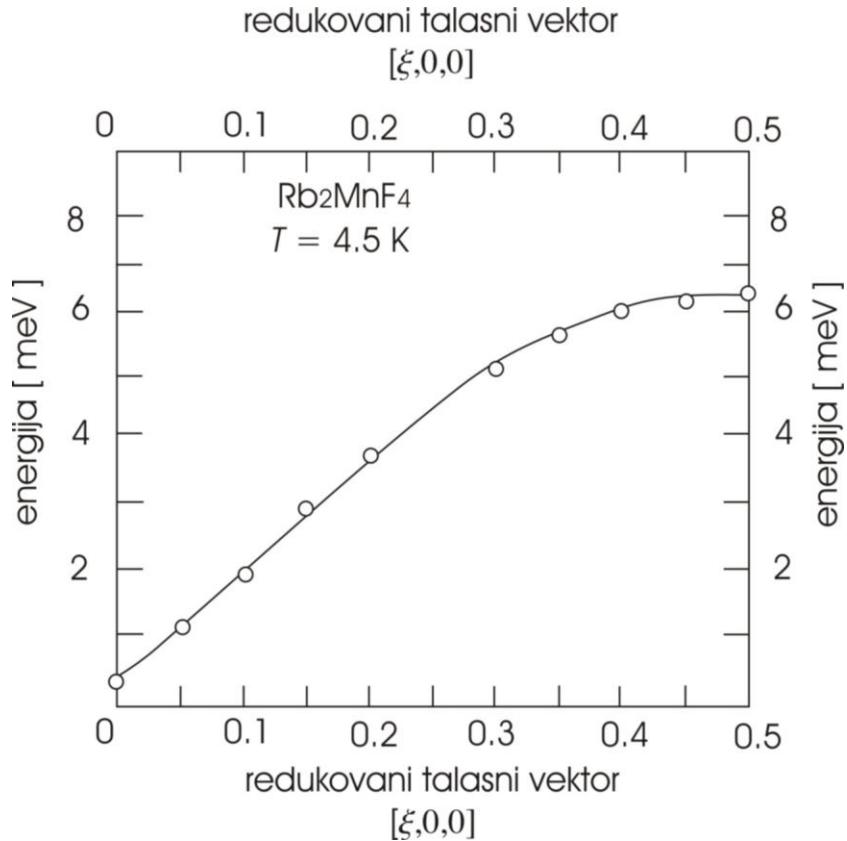


Slika 2.2-2 :Temperaturska zavisnost magnetizacije

S obzirom da magnetizacija ulazi u izraz za energiju (videti (1.3.-19)), za očekivati je da i energija elementarnih ekscitacija ima slično temperatursko ponašanje.

2.3.NELOVA TEMPERATURA I MAGNETIZACIJA ZA Rb₂MnF₄

Po treći put ponavljamo istu proceduru. U ovom slučaju, rezultati merenja su preuzeti iz reference [7]. Na slici 2.2.-1 je prikazan spektar elementarnih ekscitacija za Rb₂MnF₄. On će nam poslužiti prilikom numeričkih proračuna.



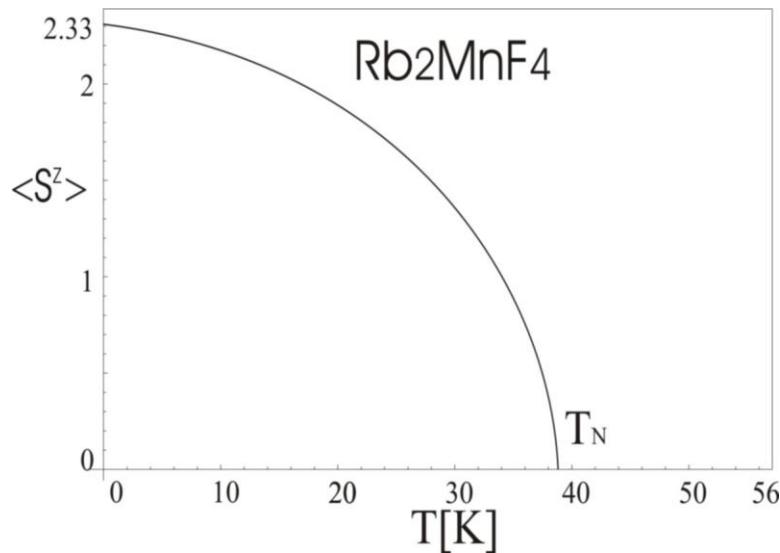
Slika 2.2.-1: Energija elementarnih ekscitacija u funkciji talasnog vektora za Rb₂MnF₄ pri $T = 4.5 \text{ K}$; $\xi = \frac{ak_x}{2\pi}$

Konačno, rezultati numeričkih kalkulacija su dati u sledećoj tabeli .

Tabela 3: Izračunate vrednosti parametara I eksperimentalne vrednosti za Rb₂MnF₄

E ₀ [meV]	E ₁ [meV]	x	J [K]	C	T _N th [K]	T _N ^{exp} [K]
0.63	6.3	0.005037	7.80	2.34	38.86	38.4

Slaganje teorijske vrednosti sa eksperimentalnom je u ovom slučaju još bolje nego u prethodna dva. Slično važi i za temperatursku zavisnost magnetizacije, kao što se vidi na priloženom grafiku:



Slika 2.3-2 :Temperaturska zavisnost magnetizacije

Kako se naše izračunate kritične temperature za navedena jedinjenja dobro slažu sa odgovarajućim eksperimentalnim vrednostima to jasno ukazuje na činjenicu da je naš teorijski pristup opravdan, što istovremeno predstavlja i potvrdu ispravnosti navedenog modela koji je korišćen za opis magnetnih svojstava navedenih jedinjenja.

ZAKLJUČAK

Jedinjenja, Rb_2MnF_4 , Rb_2MnCl_4 i MAMC – D, koja smo razmatrali u ovom radu poslednjih decenija eu veoma aktivno eksperimentalno izučavana. Takođe, pravljeni su i odgovarajući teorijski modeli za ova jedinjenja. Ova teorijska istraživanja su uglavnom bila bazirana na standardnom Hajzenbergovom modelu. U nekim od njih anizotropija je uzimana u obzir preko člana u hamiltonijanu koji je predstavlja dipol-dipol interakciju. Ovaj član je dovodio do veoma komplikovanih i dugačkih matematičkih računa. Međutim i pored toga, teorijski dobijene vrednosti za Nelove temperature se nisu dobro slagale sa eksperimentalno dobijenim vrednostima. Osim toga, ovi teorijski prilazi su uglavnom bazirani na bozonskom prilazu i na kvadratnoj aproksimaciji (spin – talasna aproksimacija). S obzirom da je ova aproksimacija opravdana na niskim temperaturama, jasno je da su i odgovarajuće računate temperature prelaza pokazale loše slaganje sa eksperimentalno dobijenim vrednostima.

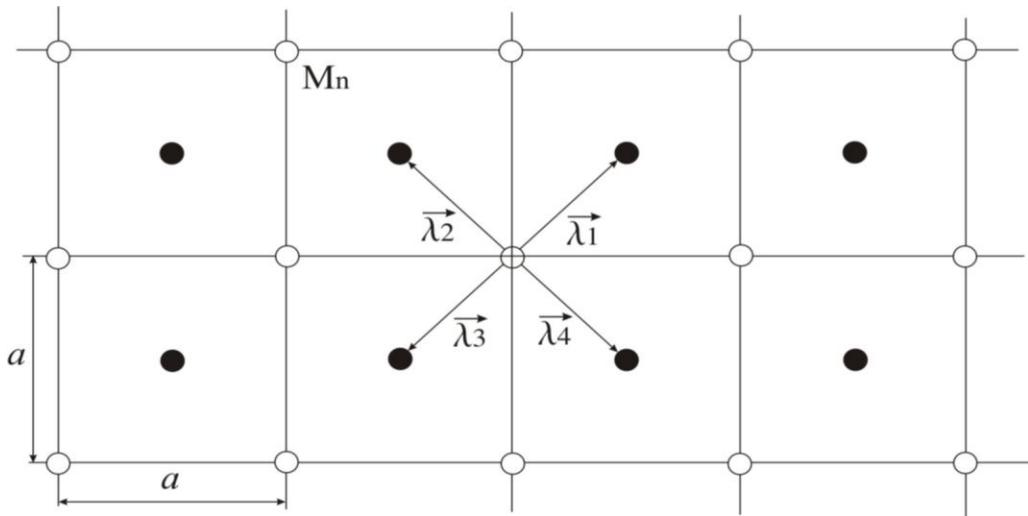
U radu je razmatran kvazi – dvodimenzionalni antiferomagnetik sa proizvoljnim spinom S , u okviru spinskog formalizma. Metodom spinskih Grinovih funkcija je određen spektar elementarnih ekscitacija u sistemu. Zatim je nađena kritična temperatura i vrednost magnetizacija za podrešetke.

Rezultati teorijske analize su primjenjeni na konkretna jedinjenja Rb_2MnF_4 , Rb_2MnCl_4 i MAMC – D. Sva jedinjenja imaju spin $S = 5/2$. Na bazi eksperimentalnih podataka, u okviru ovog prilaza su najpre određeni parametri modela (spinska anizotropija η i integral izmene J). Na osnovu tako izračunatih vrednost za parametre, odredene su Nelove temperature za data jedinjenja, kao i magnetizacija podrešetki. Treba istaći da je u okviru sprovedenog teorijskog prilaza dobijeno veoma dobro smo slaganje između izračunatih i eksperimentalno izmerenih vrednosti za Nelovu temperaturu. Ovo jasno ukazuje da je Hajzenbergov model sa spinskom anizotropijom veoma dobar za opis ovih sistema. Takođe, opravdana je činjenica tretirati ove sisteme kao skoro dvodimenzionalne, iako su oni naravno trodimenzionalne strukture. Međutim, njihova magnetna svojstva se mogu tretirati kao da su skoro dvodimenzionalni.

DODATAK 1

U tekstu je korišćeno pravilo po kome se sa sume u \vec{k} -prostoru prelazi na integral. Ovde će ukratko biti pokazano kako se do njega došlo. Takođe, biće izračunata geometrijski faktor $\gamma_{\vec{k}_n}$. Na kraju, biće malo reči o prostornom Furije transformu, korišćenom u tekstu.

Ranije je napomenuto da ova grupa jedinjenja ima slojevitu strukturu, pri čemu se svaki sloj sastoji od dve kvadratne podrešetke, sa međusobno suprotno orijentisanim spinovima (“gore” i “dole”), kao što je prikazano na sledećoj ilustraciji



*Ilustracija D1.1 Dvodimenzionalna rešetka
Osenčeni i neosenčeni kružiči simbolišu dve podrešetke*

Kako date strukture posmatramo kao dvodimenzionalne, postoje dva bazisna vektora:

$$\vec{a}_1 = a \vec{e}_1, \quad \vec{a}_2 = a \vec{e}_2.$$

Bazisni vektori recipročne rešetke \vec{b}_1 i \vec{b}_2 su određeni uslovom:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2$$

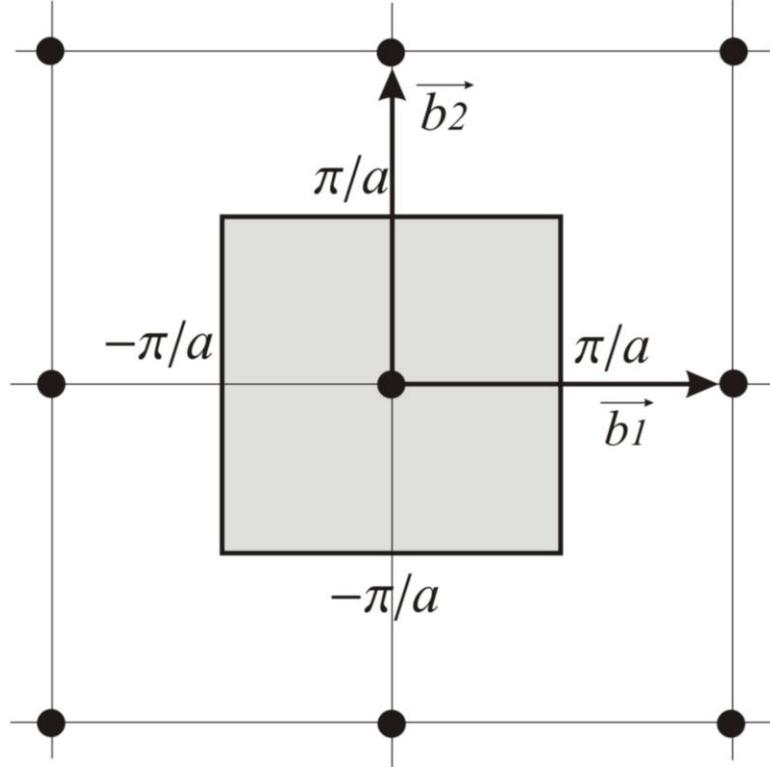
Zbog toga vektore recipročne rešetke tražimo u vidu linearne kombinacije:

$$\vec{b}_1 = \nu_1 \vec{e}_1 + \nu_2 \vec{e}_2, \quad \vec{b}_2 = \mu_1 \vec{e}_1 + \mu_2 \vec{e}_2$$

Rešenje gornjeg sistema, koje se relativno lako nalazi je

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_1, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_2$$

I Briluenova zona je u stvari Vigner – Zajcova primitivna čelija u recipročnoj rešetki. Kao što se vidi na ilustraciji D2.2, to je kvadrat ivice $2\pi/a$ (osenčena oblast).



Ilustracija D2.2 I Briluenova zona

Osnovno pravilo po kome se sa sume u dvodimenzionalnom \vec{k} - prostoru prelazi na integral glasi:

$$\sum_{\vec{k}_{||}} f(\vec{k}_{||}) = \frac{V}{(2\pi)^2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_{x_{||}} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_{y_{||}} f(k_{x_{||}}, k_{y_{||}}),$$

gde je V »zapremina« podrešetke u direktnom prostoru ($V = v_o N_2 = a^2 N_2$, N_2 je broj čvorova u podrešetki.). Uvođenjem novih promenljivih $a k_x = x$ i $a k_y = y$, dolazimo do sledećeg rezultata (funkcija f je simetrična u I Briluenovoj zoni.)

$$\frac{1}{N_2} \sum_{\vec{k}_{||}} f(\vec{k}_{||}) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi dx \int_0^\pi dy f(x, y).$$

Što se tiče geometrijskog faktora, on je definisan felacijom:

$$\frac{1}{z} \sum_{\vec{\lambda}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{\lambda}},$$

gde suma ide po najbližim susedima, a z je upravo broj najbližih suseda ($z = 4$). Sa il.D2.1 možemo pročitati vektore koji povezuju centralni ion sa njegovim najbližim susedima. To su sledeći vektori:

$$\begin{aligned}\vec{\lambda}_1 &= \frac{a}{2}(\vec{e}_1 + \vec{e}_2), \quad \vec{\lambda}_2 = \frac{a}{2}(-\vec{e}_1 + \vec{e}_2), \\ \vec{\lambda}_3 &= -\frac{a}{2}(\vec{e}_1 + \vec{e}_2), \quad \vec{\lambda}_4 = \frac{a}{2}(\vec{e}_1 - \vec{e}_2).\end{aligned}$$

Odavde lako nalazimo odgovarajuće skalarne proizvode:

$$\begin{aligned}\vec{\lambda}_1 \vec{k}_{\parallel} &= \frac{a}{2}(k_x + k_y), \quad \vec{\lambda}_2 \vec{k}_{\parallel} = \frac{a}{2}(-k_x + k_y), \\ \vec{\lambda}_3 \vec{k}_{\parallel} &= -\frac{a}{2}(k_x + k_y), \quad \vec{\lambda}_4 \vec{k}_{\parallel} = \frac{a}{2}(k_x - k_y),\end{aligned}$$

Koje potom zamenujemo u izraz za $\gamma_{\vec{k}_{\parallel}}$:

$$\begin{aligned}\gamma_{\vec{k}_{\parallel}} &= \frac{1}{4} \left(\exp \left\{ i \frac{a}{2} (k_x + k_y) \right\} + \exp \left\{ i \frac{a}{2} (-k_x + k_y) \right\} + \exp \left\{ -i \frac{a}{2} (k_x + k_y) \right\} + \exp \left\{ i \frac{a}{2} (k_x - k_y) \right\} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(\cos \frac{a}{2} (k_x + k_y) + \cos \frac{a}{2} (k_x - k_y) \right),\end{aligned}$$

odnosno:

$$\gamma_{\vec{k}_{\parallel}} = \cos \frac{a k_x}{2} \cos \frac{a k_y}{2}.$$

Položaji čvorova u kristalnoj rešetci su određeni vektorom \vec{n} , koji uzima diskretne vrednosti:

$$\vec{n} = n_x a \vec{i} + n_y b \vec{j} + n_z c \vec{k}, \quad n_{\alpha} - celi brojevi, \quad \alpha = x, y, z.$$

Takođe, komponente talasnog vektora imaju diskretan spektar:

$$k_{\alpha} = \frac{2\pi}{N_{\alpha} a_{\alpha}} \nu_{\alpha},$$

što je posledica periodičnih graničnih uslova ([2], [3]). Ovim se postiže dosta pogodnosti prilikom računanja. Recimo, lako se pokazuje:

$$\sum_{\vec{n}} e^{i\vec{n}(\vec{k}-\vec{q})} = N \delta_{\vec{k}, \vec{q}} , \quad \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} = N \delta_{\vec{n}, \vec{m}} . \quad (\text{D1.1})$$

Ovde N označava ukupan broj čvorova u rešetki. Ukoliko neka veličina zavisi samo od rastojanja između čvorova, moguće je uvesti njen Furije transform:

$$I(\vec{n} - \vec{m}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} I(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{n} - \vec{m})} . \quad (\text{D1.2})$$

Ukoliko obe strane jednačine (D1.2) pomnožim sa $e^{-i\vec{q}(\vec{n} - \vec{m})}$ i prosumiramo po $\vec{n} - \vec{m}$, iskoristivši (D1.1), dobijamo relaciju:

$$I(\vec{k}) = \sum_{\vec{n} - \vec{m}} I(\vec{n} - \vec{m}) e^{-i\vec{k}(\vec{n} - \vec{m})} ,$$

koja je korišćena u tekstu

DODATAK 2

U aproksimaciji linearog odziva (videti [1]), srednja vrednost veličine A se izražava preko zbiru srednje vrednosti uzete po ravnotežnom ansamblu i popravke, koja zavisi od perturbacije. Ta popravka se računa preko Grinove funkcije. Sama Grinova funkcija je definisana kao:

$$G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \Theta(t - t') \left\langle \hat{A}_I(\vec{r}, t) \hat{B}_I(\vec{r}', t') \right\rangle_0 \equiv \langle\langle \hat{A}_I(\vec{r}, t) | \hat{B}_I(\vec{r}', t') \rangle\rangle \quad (\text{D2.1})$$

Operator \hat{B} se odnosi na vremenski zavisnu perturbaciju, a operator \hat{A} predstavlja fizičku veličinu A . Oba operatora su u slici interakcije, a srednja vrednost njihovog komutatora je uzeta po ravnotežnom ansamblu. Veličina $\Theta(t - t')$ je tzv Hevisajdova step funkcija. Ukoliko je sredina prostorno homogena, a operatori \hat{A} i \hat{B} u Šredingerovoj slici ne zavise eksplisitno od vremena, kao argumenti Grinove funkcije pojavljuju se samo $t - t'$ i $\vec{r} - \vec{r}'$. U tom slučaju, Grinovu funkciju možemo zapisati kao:

$$G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \Theta(t - t') \left[J_{AB}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') - J_{BA}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \right], \quad (\text{D2.2})$$

pri čemu smo uveli tzv. korelace funkcije:

$$J_{AB}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \left\langle \hat{A}_I(\vec{r}, t) \hat{B}_I(\vec{r}', t') \right\rangle_0 \quad (\text{D2.3})$$

$$J_{BA}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \left\langle \hat{B}_I(\vec{r}', t') \hat{A}_I(\vec{r}, t) \right\rangle_0.$$

Korelace funkcije račuamo u kanoničkom ansamblu pomoću odgovarajućeg statističkog operatora

$$\hat{\rho}_o = Q^{-1} \exp \frac{i}{\hbar} \hat{H}_o / \theta .$$

Ovde je \hat{H}_o neperturbovani hamiltonijan, a $\theta = k_B T$. Svojstvena stanja i svojstvene vrednosti ovog hamiltonijana označićemo sa $| n \rangle$ i E_n . Znamo sledeću vezu:

$$\hat{B}_I(\vec{r}', t') = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_o t'} \hat{B}(\vec{r}') e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_o t'}.$$

Analogna relacija važi za operator \hat{A}_I (veličina bez indeksa, tj $\hat{B}(\vec{r}')$ je Šredingerov operator). Imajući sve ovo u vidu, izraz za koreacionu funkciju postaje:

$$J_{BA}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \text{Sp } \hat{B}_I(\vec{r}', t') \hat{A}_I(\vec{r}, t) \hat{\rho}_o$$

$$= Q^{-1} \sum_n \langle n | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_o t'} \hat{B}(\vec{r}') e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_o t'} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_o t} A(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_o t} e^{-\hat{H}_o / \theta} | n \rangle.$$

Sad ćemo iskoristiti umetanje jediničnog operatora i svojstveni problem nepertubovanog hamiltonijana. Na taj način dolazimo do sledećeg rezultata:

$$J_{BA}(t-t') = Q^{-1} \sum_n \sum_m \langle n | \hat{B} | m \rangle \langle m | \hat{A} | n \rangle e^{-i\Omega_{nm}(t-t')} e^{-E_n / \theta} \quad (\text{D2.4})$$

pri čemu je

$$\Omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$$

frekvenca prelaska između stanja $|n\rangle$ i $|m\rangle$. Radi preglednijeg pisanja dalje neće biti naglašavana zavisnost korelacionih i Grinovih funkcija od prostornih koordinata. Za nastavak analize, potrebno je da izvršimo Furije transform :

$$J_{BA}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} J_{BA}(\tau) \quad (\text{D2.5})$$

pišući kraće $t-t' \equiv \tau$. Zamena (D1.5) u (D1.4) daje

$$J_{BA}(\omega) = Q^{-1} \sum_n \sum_m \langle n | \hat{B} | m \rangle \langle m | \hat{A} | n \rangle e^{-E_n / \theta} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\omega - \Omega_{nl})\tau},$$

tj.

$$J_{BA}(\omega) = Q^{-1} \sum_n \sum_m \langle n | \hat{B} | m \rangle \langle m | \hat{A} | n \rangle e^{-E_n / \theta} \delta(\omega - \Omega_{nl}). \quad (\text{D2.6})$$

Pre nego što utvrdimo smisao upravo dobijene relacije, naćemo vezu između J_{AB} i J_{BA} . Trag proizvoda operatora je invarijantan u odnosu na njihovu cikličnu permutaciju pa možemo pisati

$$J_{AB} = \text{Sp} \hat{A}_I \hat{B}_I \hat{\rho}_o \not\propto \text{Sp} \hat{B}_I \hat{\rho}_o \hat{A}_I \not\propto Q^{-1} \sum_n \langle n | \hat{B}_I e^{-\hat{H}_o / \theta} \hat{A}_I | n \rangle,$$

odnosno, ako opet iskoristimo umetanje jediničnog operatora

$$J_{AB}(\tau) = Q^{-1} \sum_n \sum_m \langle n | \hat{B} | m \rangle \langle m | \hat{A} | n \rangle e^{-i\Omega_{nm}\tau} e^{-E_m / \theta} \quad (\text{D2.7})$$

U jednačini (D2.7) figuriše E_m , a u jednačini (D2.4) to je E_n . Zato pišemo

$$\frac{-E_m}{\theta} = \frac{-E_m}{\theta} + \frac{E_n}{\theta} - \frac{En}{\theta} = \frac{-E_n}{\theta} + \frac{\Omega_{nm}\hbar}{\theta}$$

Znači da je

$$J_{AB}(\tau) = Q^{-1} \sum_n \sum_m \langle n | \hat{B} | m \rangle \langle m | \hat{A} | n \rangle e^{-i\Omega_{nm}\tau} e^{-E_n/\theta} e^{\Omega_{nm}\hbar/\theta}.$$

Zbog prisustva δ -funkcije nalazimo sledeću vezu između J_{AB} i J_{BA} :

$$J_{AB}(\omega) = J_{BA}(\omega) e^{\hbar\omega/\theta}. \quad (\text{D2.8})$$

Još jedna važna posledica prisustva δ -funkcije u izrazu (D2.6) i analognom za J_{AB} je ta što Furije transform korelacionih funkcija, pa samim tim i Grinova funkcija u energijskoj reprezentaciji, postaju beskonačne kada je $\omega = \Omega_{nm}$. Kako su $\nabla \Omega_{nm}$ energije koje odgovaraju prelazu sistema iz stanja $|m\rangle$ u stanje $|n\rangle$, možemo zaključiti da singulariteti Grinovih funkcija u kompleksnoj ravni daju energije elementarnih ekscitacija sistema. Preko Grinove funkcije moguće je izraziti srednju vrednost proizvoda operatora. Definišimo prvo Furije transform za samu Grinovu funkciju:

$$G_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau G_{AB}(\tau) e^{i\omega\tau} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau (J_{AB}(\tau) - J_{BA}(\tau)) \Theta(\tau) e^{i\omega\tau}. \quad (\text{D2.9})$$

Dalje imamo

$$J_{AB/BA}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega e^{-i\Omega\tau} J_{AB/BA}(\Omega),$$

pa (D1.9) postaje

$$G_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega (e^{\hbar\omega/\theta} - 1) J_{BA}(\Omega) \int_0^{\infty} d\tau e^{-i(\Omega-\omega)\tau}. \quad (\text{D2.10})$$

U jednačini (D2.10) je iskorišćena veza (D2.8) između korelacionih funkcija, a donja granica integrala po τ je promenjena zbog step-funkcije. U tom integralu se javlja problem gornje granice. Taj problem se može prevazići tako što se u eksponent doda jedan sabirak - η , takav da $\eta \rightarrow 0$. Znači:

$$\int_0^\infty d\tau e^{-i(\Omega-\omega)\tau} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^\infty d\tau e^{-i(\Omega-\omega)\tau} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{i}{\omega - \Omega + i\eta}.$$

Zamenom dobijamo:

$$G_{AB}(\omega + i\eta) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\Omega \frac{J_{BA}(\Omega) (e^{\hbar\omega/\theta} - 1)}{\omega - \Omega + i\eta}.$$

Gornja relacija omogućava da se iskoristi jedan simbolički identitet potnat iz kompleksne analize:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{x - a \pm i\eta} = P \frac{1}{x - a} \mp i\pi \delta(x - a) \quad (\text{D2.11})$$

pri čemu se P odnosi na glavnu vrednost. Tako dobijamo:

$$J_{BA}(\omega) = \frac{G_{AB}(\omega + i\eta) - G_{AB}(\omega - i\eta)}{e^{\hbar\omega/\theta} - 1}, \quad \eta \rightarrow 0, \quad (\text{D2.12})$$

Odnosno, za $t = t'$:

$$\langle \hat{B} \hat{A} \rangle_o = \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{G_{AB}(\omega + i\eta) - G_{AB}(\omega - i\eta)}{e^{\hbar\omega/\theta} - 1}, \quad \eta \rightarrow 0. \quad (\text{D2.13})$$

Što se tiče jednačine kretanja koju zadovoljava Grinova funkcija, nju možemo dobiti polazeći od definicione relacije (D2.1). Posle diferenciranja po t , iskoristićemo Hajzenbergove jednačine kretanja da bi dobili:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{AB}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = i\hbar \delta(t - t') \left\langle \hat{A}_I(\vec{r}, t), \hat{B}_I(\vec{r}', t') \right\rangle + R(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$$

gde R označava Grinovu funkciju višeg reda:

$$R(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \Theta(t - t') \left\langle \hat{A}_I(\vec{r}, t), \hat{H}_o(t) \right\rangle \left\langle \hat{B}_I(\vec{r}', t') \right\rangle \equiv \langle\langle [\hat{A}_I, \hat{H}_o]_t | \hat{B}_I(t') \rangle\rangle.$$

Komutator uz δ -funkciju je različit od nule samo ako je $t = t'$, što znači da ta dva operatora deluju u istom vremenskom trenutku. Zbog toga se taj komutator može izračunati. Njegovu srednju vrednost označićemo sa $C(\vec{r} - \vec{r}')$. Ponovo prelazimo na Furije transforme :

$$R(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \int d^3 \vec{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega R(\vec{k}, \omega) e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}') - i\omega(t - t')}.$$

Postupak za druge funkcije je analogan ovom. Takođe, treba iskoristiti integralnu reprezentaciju za δ -funkciju, koja je već jednom korišćena, pri analizi korelacionih funkcija u jednačini (D2.6). Na taj način dolazimo do relacije koju zadovoljavaju Furije komponente Grinovih funkcija:

$$\hbar\omega G_{AB}(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} C(\vec{k}) + R(\vec{k}, \omega). \quad (\text{D2.14})$$

U relaciji (D2.14) figuriše Grinova funkcija za red viša od polazne, tj. tražena funkcija je uvek izražena preko složenije. Na taj način dobijamo lanac jednačina koji se na nekom mestu mora prekinuti, izražavajući najsloženiju Grinovu funkciju preko prve niže, recimo $R(\vec{k}, \omega) = \hbar\Omega(\vec{k}) G_{AB}(\vec{k}, \omega)$, što daje:

$$G_{AB}(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{C(\vec{k})}{\omega - \Omega(\vec{k})}. \quad (\text{D2.15})$$

Pomoću jednakosti (D2.15), (D2.11) i (D2.13) dobijamo:

$$\langle \hat{B} \hat{A} \rangle_{\vec{k}} = \frac{C(\vec{k})}{e^{\hbar\Omega(\vec{k})/\theta} - 1}, \quad (\text{D2.16})$$

što je relacija korišćena u tekstu.

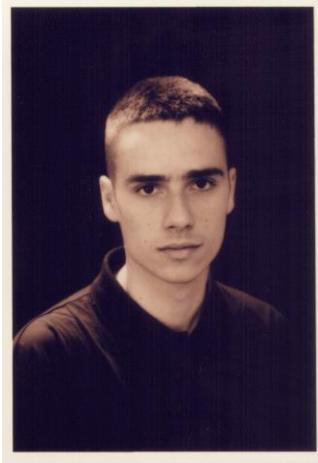
NAPOMENA:

Svi numerički proračuni su vršeni u programskom paketu *Mathematica* 4.1

LITERATURA

1. B. S. Tošić: Statistička fizika, Institut za fiziku, Novi Sad, 1978.
2. M. Škrinjar, D. Kapor: Zbirka zadataka po odabranim poglavljima iz statističke fizike, Institut za fiziku, Novi Sad, 1982.
3. J. M. Ziman: Principles of the theory of solids, Cambridge University Press, 1972.
4. L. D. Landau i E. M. Lifšic: Kvantna mehanika (nerelativistička teorija), Građevinska knjiga, Beograd, 1966.
5. D. Kapor, M. Pantić, M. Manojlović and M. Pavkov: J. Res. Phys. (2006) prihvaćeno
6. B. Schroder, V. Wagneg, N. Lehner, K.M. Kesharwani and R. Gieck: phys. stat. sol. (b) **97**, 501 (1980).
7. R. A. Cowley, G. Shirane, R. J. Birgenau and H. J. Guggenheim: Phys. Rev. B **15**, 4292, 1977.
8. C. Kittel: Uvod u fiziku čvrstog stanja, Savremena Administracija, Beograd, 1970.
9. Đ. Mušicki: Uvod u teorijsku fiziku III/2 (posebni deo elektrodinamike), Univerzitet u Beogradu, 1985.
10. H. B. Callen, Phys. Rev. **130**, 890 (1963).
11. C. Pinch and F. Schwabl, Phys. Rev. B **49**, 413 (1994)

KRATKA BIOGRAFIJA



Radošević Slobodan je rođen 21. 11. 1981. u Novom Sadu, Srbija. Osnovnu školu "Ivo Andrić", završio je u Budisavi, a prirodno matematički smer gimnazije "J. J. Zmaj" u Novom Sadu. Godine 2000 je upisao Prirodno – matematički fakultet, smer diplomirani fizičar.

Novi Sad, 18. 9. 2006.

Slobodan Radošević

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj:

RBR

Identifikacioni broj:

IBR

Tip dokumentacije:

Monografska dokumentacija

TD

Tip zapisa:

Tekstualni štampani materijal

TZ

Vrsta rada:

Diplomski rad

VR

Autor:

Radošević Slobodan, br. dos. 458/200

AU

Mentor:

Dr. Milan Pantić

MN

Naslov rada:

Elementarne eksitacije i magnetne osobine kvazi – dvodimenzionalnih antiferomagnetskih materijala

NR

srpski (latinica)

JP

Jezik izvoda:

srpski/engleski

JI

Zemlja publikovanja:

Srbija

ZP

Uže geografsko područje:

Vojvodina

UGP

Godina:

2006

GO

Izdavač:

Autorski reprint

IZ

Mesto i adresa:

Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

MA

Fizički opis rada:

FO

Naučna oblast:

Fizika

NO

Naučna disciplina:

Teorijska fizika kondenzovanog stanja

ND

Predmetna odrednica/ ključne reči:

Grinove funkcije, Nelova temperature, Hajzenbergov model

PO

UDK

Čuva se:

Biblioteka departmana za fiziku, PMF-a u Novom Sadu

ČU

Važna napomena:

nema

VN

Izvod:

IZ

Datum prihvatanja teme od NN veća:

DP

Datum odbrane:

DO

Članovi komisije:

KO

Predsednik:

Dr. Mario Škrinjar

član:

Dr. Milan Pantić

član:

Dr. Srđan Rakić

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCE AND MATHEMATICS

KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document type:

DT

Type of record:

TR

Content code:

CC

Author:

AU

Mentor/comentor:

MN

Title:

TI

Language of text:

LT

Language of abstract:

LA

Country of publication:

CP

Locality of publication:

LP

Publication year:

PY

Publisher:

PU

Publication place:

PP

Physical description:

PD

Scientific field:

SF

Scientific discipline:

SD

Subject/ Key words:

SKW

UC

Holding data:

HD

Note:

N

Abstract:

AB

Accepted by the Scientific Board:

ASB

Defended on:

DE

Thesis defend board:

DB

President:

Dr. Mario Škrinjar

Member:

Dr. Milan Pantić

Member:

Dr. Srđan Rakić