

Пријављено:	28. IV. 1982		
Ср. Ј. А.	Број	Филог	Вредност
03	10 / 20		

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

UNIVERZITET U NOVOM SADU

Vehbo J. Bahtijarević

ENERGETSKI PROCEP NA T = 0K
KOD ANIZOTROPNOG FEROMAGNETIKA

diplomski rad

NOVI SAD

1982.

Na ovom mestu želim da izrazim veliku zahvalnost dr Darku Kaporu, mentoru ovog rada, na pomoći prilikom izrade rada. Takođe se zahvaljujem dr Mariju Škrinjaru na pomoći u izboru teme i vodjenju rada.

Vehbo J. Bahtijarević

*Tek teorija odlučuje o tome
šta se može posmatrati.*

Albert Ajnštajn

SADRŽAJ

1.	Uvod	1
2.1.	Jaki magnetizam	3
2.2.	Jaki magnetni materijali	7
3.1.	Hajzenbergov feromagnetik	9
3.2.	Anizotropni feromagnetik	13
4.	Energetski procep	17
5.	Zaključak	28
	Literatura	29

1. UVOD

U poslednje vreme teorijski radovi iz teorije magnetizma se više okreću ka modelima koji teže da što realnije opišu situaciju. Uzimanje u obzir svih svojstava realnih magnetika je veoma teško, te se zbog toga formulišu takvi modeli kod kojih se odredjenim dodatnim članovima Hamiltonijana opisuje neka od osobina realnih magnetika.

Jedna od važnih osobina realnog magnetika je njihova anizotropija. Heisenberov feromagnetik je sam po sebi izotropan (u odsustvu spoljašnjeg polja) i stoga se formulišu različite varijante anizotropnog Hajzenbergovog modela.

S teorijskog stanovišta ovakvi modeli su interesantni stoga što kod njih ne važi Goldstonova teorema tj. energija elementarnih eksitacija ne mora obavezno da teži nuli kada talasni vektor eksitacije teži nuli.

S druge strane, tehnologija je toliko napredovala da danas postoji velike mogućnosti sintetizovanja jedinjenja koja po svojim strukturnim magnetnim osobinama odgovaraju različitim modelima magnetika. Na takvim jedinjenjima se može eksperimentalno proveriti i rezultati proračuna, što znači da se mogu verifikovati kako odredjeni modeli tako i računski metodi.

U ovom radu ćemo se baviti jednom varijantom anizotropnog Hajzenbergovog modela.

U drugoj glavi izlažemo osnovne eksperimentalne podatke o jakim magneticima.

U trećoj glavi diskutujemo osnovne postavke idealnog Hajzenbergovog feromagnetika i rezultate koje daje na niskim

temperaturama. Zatim uvodimo jedan anizotropni model i diskutujemo osnovne rezultate koje on daje na niskim temperaturama.

U četvrtoj glavi razmatramo dosadašnja niskotemperaturska istraživanja na ovom modelu i polazeći od rezultata dobijenih metodom Grinovih funkcija izvodimo svojstva simetrije dobijenih rešenja, a potom perturbacionim razvojem računamo vrednosti energetskog gepa na $T = 0\text{K}$.

2.1. JAKI MAGNETIZAM

Pojava magnetizma je dobila svoje ime još u ranim ispitivanjima feromagnetnog ponašanja u komadu gvozdene rude - magnetita (kristal $\text{Fe}^{3+}|\text{Fe}^{2+}\text{Fe}^{3+}|\text{O}_4$).

Prvo učenje o magnetizmu započinje Vihelm Weber. On razvija čitavu teoriju o magnetizmu u kojoj iznosi ideju da magnet pretstavlja skup uredjenih elementarnih magneta i da su magnetne pojave rezultat narušavanja uredjenosti tog skupa. Medjutim, u svojoj teoriji ne daje objašnjenje prirode elementarnih magneta, što čini nedostatak njegove teorije. I savremena teorija tumačenja magnetizma polazi od toga da je magnet sistem uredjenih elementarnih magneta. Usled odredjene unutrašnje uredjenosti kristala, jaki magneti ispoljavaju veliki makroskopski magnetni moment čija je vrednost $N\mu_B$, gde je N broj uzoraka koji nose jedinični magnetni moment μ_B (μ_B - Bohrov magneton). Inače, klasično tumačenje jakog magnetizma dao je Vajs u svojoj fenomenološkoj teoriji. Pri temperaturi koja je niža od neke kritične, feromagnetne supstance ispoljavaju osobinu spontanog namagnetisanja u odsustvu spoljašnjeg polja ($\vec{H} = 0$). Da bi objasnio ovaj fenomen Vajs je pretpostavio da se svaki feromagnetik sastoji od velikog broja domena (Vajsova oblast) spontano namagnetisanih. Ovi domeni su haotično orijentisani u materijalu, ali već pod uticajem slabog spoljašnjeg polja delimično se usmeravaju duž polja.

Magnetno stanje materijala karakteriše se pomoću magnetizacije \vec{M} (negde se magnetizacija naziva i magnetnom polarizacijom \vec{P}). Pod magnetnom polarizacijom materijala pod-

razumeva se rezultujući magnetni moment po jedinici zapremine ($\vec{P} = \frac{d\vec{m}}{dV}$).

Navešćemo neke osnovne relacije koje povezuju magnetno polje \vec{H} i magnetizaciju \vec{M} :

$$\vec{B} = \mu \vec{H} ; \quad \vec{M} = \chi \vec{H} ; \quad \vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$$

Ako napišemo $\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \chi \mu_0 \vec{H} = \mu \mu_0 \vec{H}$, vidimo da je $\mu = 1 + \chi$ i naziva se magnetna permeabilnost sredine, dok se χ naziva magnetna susceptibilnost. Magnetna susceptibilnost se definiše kao $\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M}{H} = \frac{\partial M}{\partial H}$. Magnetna susceptibilnost je neimenovan broj i karakteristična veličina za dati materijal. Za dijamagnete materijale χ je negativna veličina ($\sim -10^{-6}$) i ne zavisi od jačine magnetnog polja. Za paramagnete materijale χ je pozitivna veličina ($\sim 10^{-6}$). Veličina χ se u opštem slučaju javlja kao tensor. U homogenim izotropnim supstancama, gde su vektori \vec{M} i \vec{H} paralelni, magnetna susceptibilnost je skalar.

S gledišta kvantne mehanike feromagnetizam čvrstih tela se javlja kao posledica nepotpunjenosti unutrašnjih ljudskih atoma, koji čine njihove kristalne rešetke [1]. Ipak, savremena teorija nije u mogućnosti da formuliše neophodne i dovoljne uslove pojave jakog magnetizma na osnovu elektronske konfiguracije atoma koji grade kristalnu rešetku.

Da bi objasnili magnetna svojstva čistih metala, neophodno je upotrebiti model energetskih zona [2].

Drugi aspekt posmatranja magnetnih svojstava metala stimulisan je nedavnim radom Kondoa po s-d-rasejanju, povezano sa razredjenim legurama, koje se sastoje naprimjer iz Fe, pomešanih sa nenamagnetisanim supstancama (Ir, Cu, Rh, ...).

Vezu izmedju energetskih zona i magnetnih svojstava čistih metala dao je Stoner. Na osnovu modela Stonera zaključuje se da zone sa polarizovanim spinom $E(\vec{k})$ cepaju na

na energije $\Delta E(\vec{k})$ kao posledica interakcije izmene. Cepanje zone $\Delta E(\vec{k})$ zavisi od talasnog vektora (\vec{k}) i indeksa zone. Za d-zonu ta veličina se smatra konstantnom, dok je za sp-zonu ravna nuli.

Zonski model, koji opisuje dijamagnetizam i paramagnetizam metala, pokazao se vrlo složenim, ako se ne koristi približno efektivna masa, koja pretpostavlja, da spektar elektrona ima jednostavan oblik $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ pri svakom spinu (\uparrow ili \downarrow) u nultom magnetnom polju.

Heisenberg je prepostavio da je pojava makroskoposkog magnetnog momenta posledica uredjenosti spinova elektrona nepotpunjenih ljsaka atoma, ova uredjenost je posledica interakcije izmedju elektrona. Pošto su jaki magnetici poznati kod materijala u čvrstom stanju, očigledno je da mora postojati neka veza izmedju magnetizacije i kristalne rešetke. Magnetne osobine kristala zavise od pravca u kom se mere, što znači da magnetni materijali imaju magnetno kristalografsku anizotropiju. U kristalima postoje tzv. oselake magnetizacije duž kojih se orijentišu magnetni momenti elektrona u odsustvu spoljašnjeg polja. Relativna orijentacija spinova je posledica interakcije izmene. Ova interakcija je posledica zavisnosti energije sistema od prostorne simetrije talasne funkcije sistema i proporcionalna je veličini njegovog ukupnog spina. Naime, uredjenost spinova se narušava pri nekoj temperaturi, o čemu će biti govora kasnije. Pri paralelnoj orijentaciji spinova atoma dolazi do njihovog odbijanja, dok se pri antiparalelnoj orijentaciji privlače. Ako sa m označimo magnetni moment atoma, sa N broj atoma kristalne rešetke, onda se magnetizacija zasićenja definiše kao

$$M_o = m \cdot N$$

Ukoliko se uzorak nalazi u spoljašnjem magnetnom polju jačine \vec{H} ,

njegova magnetizacija će da raste sa porastom polja.

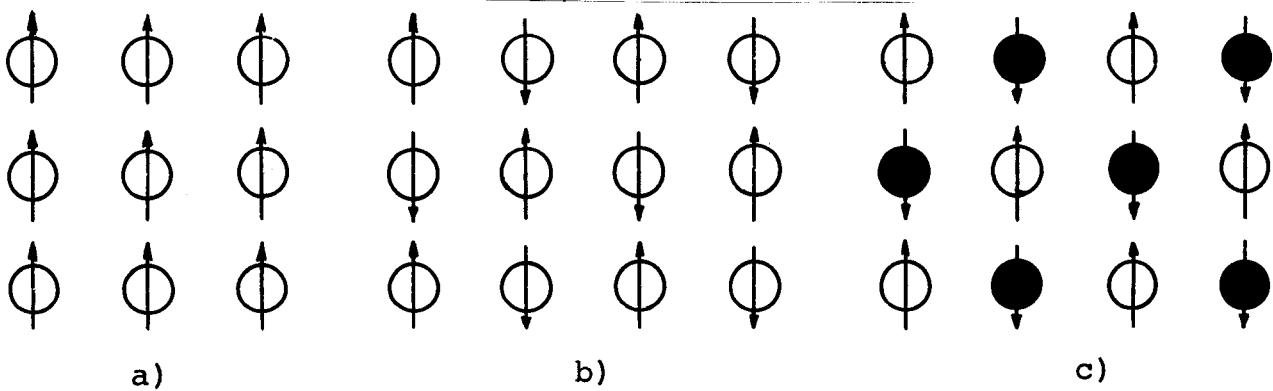
Iz prethodnog izlaganja može se primetiti da nije moguće sa klasične tačke gledišta opisati jake magnetike kao sistem magnetnih momenata razmeštenih u čvorovima rešetke sa čisto dipolnim interakcijama. Stoga u kvaziklasičnoj šemi prećutno stoji da dipoli interaguju energijom jednakom energiji interakcije izmene.

U daljem tekstu sve će se odnositi na dielektrike.

2.2. JAKI MAGNETNI MATERIJALI

Pri niskim temperaturama jake magnetne supstance je moguće podeliti u tri različite podklase: feromagnetični, anti-feromagnetični i ferimagnetični.

Osnova za tu podelu je spontana namagnetisanost tj. spontana orijentacija magnetnih momenata atoma po kristalografskim osama. Jednostavni slučaj je ilustrovan na slici 1. gde svaka strelica označava magnetni moment i ukazuje na njegovu orijentaciju.



Slika 1.

FEROMAGNETICI

Feromagnetska tela imaju jako izražena magnetna svojstva zahvaljujući nepotpunjenosti unutrašnjih elektronskih ljuški. Pri temperaturama manjim od neke kritične, svi spinovi u kristalu su orijentisani paralelno (Sl.1a), pri čemu se javlja veliki spontani magnetni moment. Ukoliko je spoljašnje polje $\vec{H} \neq 0$ spinovi a takodje i rezultujući moment orijentuju se u pravcu polja. Kada se feromagnetska tela zagreju na neku višu temperaturu gube feromagnetska svojstva i prelaze u paramagnetska tela. Ta temperatura, na kojoj telo gubi feromagnetske osobine zove se Kirijeva temperatura θ_c . Kirijeva temperatura se tumači razaranjem domenske strukture na višim temperaturama. Povećanjem temperature magnetizacija se smanjuje i pri Kirijevoj temperaturi $\theta = \theta_c$ i u odsustvu spoljašnjeg polja, isčezava.

U okolini Kirijeve temperature ($\theta < \theta_c$) magnetizacija se ponaša po sledećem zakonu:

$$M = \text{const} \left(1 - \frac{\theta}{\theta_c}\right)^\beta$$

gde je β - tzv. kritični eksponent. Tipični predstavnici feromagnetika su Fe, Ni i Co.

FERIMAGNETICI

Kristali ferimagnetika se sastoje iz dve ili više magnetnih podrešetaka čiji se magnetni momenti u potpunosti ne kompenzuju (Sl.1c). Pri povećanju spoljašnjeg magnetnog polja H od neke kritične vrednosti ($\vec{H} > \vec{H}_{kr}$), magnetni moment je linearna funkcija polja \vec{H} sve do neke druge kritične vrednosti polja kada nastupa magnetizacija zasićenja.

ANTIFEROMAGNETICI

Kristali antiferomagnetika se mogu prikazati kao skup dve ili nekoliko feromagnetičnih podrešetaka postavljenih jedna na drugu (Sl.1b). Za antiferomagnetike je karakteristično da im je rezultujući magnetni moment jednak nuli pri temperaturama nižim od Nelove temperature θ_N . Ako antiferomagnetik unesemo u spoljašnje polje $\vec{H} > \vec{H}_{kr}$ dolazi do magnetizacije zasićenja (ako je $\theta < \theta_N$). Ukoliko je $\theta > \theta_N$ antiferomagnetik se ponaša kao paramagnetik. Pri temperaturama $\theta = \theta_N$ imamo fazni prelaz druge vrste.

Kao primer za antiferomagnetike mogu da posluže uglavnom neke kiseline i soli prelaznih metala: FeO , CoO , NiSO_4 , CoF_2 itd.

3.1. HEISENBERGOV FEROMAGNETIK

Za ispitivanje svojstava i veličina koje karakterišu feromagnetik neophodno je poznavati opšti oblik Hamiltonijana. Naime, uvodi se Heisenbergov model kao najprostiji oblik koji opisuje feromagnetne osobine kristala. Hamiltonian ovog modela eksplicitno uračunava samo interakcije odgovorne za orientaciju spinova, zanemarujući spin-spinsku i spin-orbitalnu interakciju u poredjenju sa interakcijom izmene. Ukoliko se kristal feromagnetička nalazi u spoljašnjem magnetnom polju \vec{H} usmerenom u pravcu z-ose, Hamiltonian ima sledeći oblik:

$$\hat{H} = -g\mu_B H \sum_n \vec{S}_n^z - \frac{1}{2} \sum_{n,m} I_{nm}^r \vec{S}_n^r \vec{S}_m^r \quad \text{za } \hbar = 1. \quad 3.1$$

gde je g -Landeov faktor, μ_B -Borov magneton, I_{nm}^r -integral izmeđe koji se odnosi na interakciju spinova u čvorovima \vec{n} i \vec{m} kristalne rešetke.

U specijalnom slučaju, kada je $I_{nm}^x = I_{nm}^y = I_{nm}^z$ imamo izotropan feromagnetik, a kada su I_{nm}^r medjusobno različiti onda imamo anizotropni feromagnetik ($r = x, y, z$). \vec{S}_n^r i \vec{S}_m^r su operatori spina. Osa z se obično uzima za osu kvantizacije.

Za anizotropni feromagnetik parametri I_{nm}^r nisu isti za sva komponente. Tako naprimjer, ako je $I_{nm}^x = I_{nm}^y \neq 0$ a $I_{nm}^z = 0$, imamo tzv. XY-model, a slučaj $I_{nm}^x = I_{nm}^y = 0$ i $I_{nm}^z \neq 0$ odgovara Izingovom modelu.

Osnovno stanje feromagnetička definiše se kao:

$$\sum_{\vec{r}} S_n^z |0\rangle = NS |0\rangle \quad 3.2$$

gde je N-broj atoma u kristalu a S-maksimalan efektivni spin svakog atoma rešetke. Drugim rečima, u osnovnom stanju svi spinovi su orijentisani u pravcu z-ose.

Već u prvom koraku teorijskog ispitivanja Heisenbergovog feromagnetika nailazimo na poteškoće vezane za problem spinskih operatora. Naime, spinski operatori,

$$S_n^{\pm} = S_n^x \pm i S_n^y \quad i \quad S_n^z ; [S_i^i, S_j^j] = i \epsilon_{ijk} S^k \quad 3.3$$

zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[S_n^+, S_m^-] = 2S_n^z \delta_{n,m} ; \quad [S_n^+, S_n^+] = + S_n^+ \delta_{n,m} \\ \{S_n^+, S_m^-\} = 2S(S+1) - 2(S_n^+)^2; \quad (S_n^+)^{2S+1} = 0 \quad 3.4$$

Iz gore navedenih relacija vidi se da komutacione relacije za spinske operatore nemaju ni bozonsku ni fermionsku kinematiku. Osim toga, često je neophodno pri kvantno-mehaničkom rešavanju problema čvrstih tela izračunati fizičke veličine u impulsnom prostoru što zahteva upotrebu Fourier - transformacija.

Medjutim Fourier - transformacije za spinske operatore ne održavaju komutacione relacije (3.4). Ovo su dva osnovna problema koji otežavaju teorijsko ispitivanje Heisenbergovog feromagnetika. Prvi pokušaj pri rešavanju ovog problema učinili su Holstein i Primakoff, zamenjujući spinske operatore Bose operatorima:

$$S_n^+ = B_n^+ \sqrt{2S} ; \quad S_n^- = B_n^+ \sqrt{2S} ; \quad S_n^z = S - B_n^+ B_n^- \quad 3.5$$

gde su B_n^+ i B_n^- operatori kreacije odnosno anihilacije bozona.

Na ovaj način se dobija za Heisenbergov feromagnetik ekvivalentan bozonski sistem čiji zakon disperzije za magnone ima sledeći oblik:

$$E_{\vec{k}} = g\mu_B H + S(J_0 - J_{\vec{k}}) \quad 3.6$$

gde je $J_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} J_{\vec{o}\vec{n}} e^{i\vec{k}\vec{n}}$ 3.7

U specijalnom slučaju kada je $H = 0$ imamo da je

$$\lim_{k \rightarrow 0} E(\vec{k}) \equiv 0 \quad 3.7a$$

Ukoliko se za slučaj niskih temperatura ($\theta \rightarrow 0K$) i za slučaj kada je spoljašnje magnetno polje $H = 0$, razvije zakon disperzije (3.6) isključivo po kvadratnim članovima, tada se za relativnu magnetizaciju

$$\sigma = \frac{\langle S_{\vec{n}}^z \rangle}{S} \quad 3.8$$

dobija poznati Blochov zakon "tri polovine":

$$\sigma = 1 - \frac{1}{S} \left[\frac{k\theta}{4\pi SJ_0} \right]^{3/2} \xi^{3/2} \quad 3.9$$

gde je $\xi(p) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-p}$ Riemanova ceta - funkcija.

Dobijeni Blochov zakon je kasnije pretrpeo mnoge korekcije. Dyson je pokazao da Blochov zakon magnetizacije ima korekcije dva tipa, i to: članove proporcionalne $\theta^{5/2}$ i $\theta^{7/2}$ koji potiču od viših stepeni talasnog vektora po kom je razvijen zakon disperzije (3.6) i člana proporcionalnog θ^4 koji potiče od anharmonijskih magnonskih efekata.

Koristeći se boljom aproksimacijom spinskih operatora bozonskim, Dyson je dobio sledeći izraz za magnetizaciju pri niskim temperaturama:

$$G = G_{BL} + G_{ANH} \quad 3.10$$

gde su: $G_{BL} = 1 - \frac{1}{S} [\xi_{3/2} \tau^{3/2} + \frac{3}{4}\pi \xi_{3/2} \tau^{5/2} \frac{33}{32} \xi_{7/2} \tau^{7/2} + \dots]$

$$G_{ANH} = - \frac{1}{S} \frac{6\pi \xi_{3/2} \xi_{5/2} \tau^4}{2\pi SJ_0}, \quad \tau = \frac{k\theta}{2\pi SJ_0} \quad 3.11$$

U svim ovim analizama zanemaren je uticaj magnetne anizotropije. Ipak, kod izvesnih feromagnetnih materijala magnetno-kristalografska anizotropija ima znatan uticaj na njihove magnetne osobine.

Kao što je rečeno, pri temperaturama bliskim Curievoj temperaturi u kojoj feromagnetik ima fazni prelaz druge vrste, u slučaju kada je $H = 0$ i $S = 1/2$, magnetizacija poprima sledeći oblik: (u aproksimaciji Tjablikova)

$$G = [3\tau_c^0 (1 - \frac{\tau}{\tau_c^0})]^{1/2} \quad 3.12$$

$$\text{gde je } \tau_c^0 = \frac{1}{C_0}; \quad C_0 = \frac{V}{N(2n)^3} \int \frac{d^3 \vec{k}}{E_{\vec{k}}} \quad \text{a} \quad E_{\vec{k}} = \frac{e_{\vec{k}}}{J_0}$$

V - zapremina kristala, K - Boltzmanova konstanta.

Iz relacije (3.12) je očigledno da se temperatura

$$\theta_c^0 = \frac{J_0}{4KC_0} \quad 3.13$$

podudara sa Curievom pri kojoj magnetizacija isčezava. Iz ove relacije moguće je teorijski proceniti Curieu temperaturu.

3.2. ANIZOTROPNI FEROMAGNETIK

Poznato je da u prirodi postoje feromagnetni materijali kod kojih magnetno-kristalografska anizotropija ima veliki uticaj na njihove magnetne osobine. Magnetnu anizotropiju i magnetostrikciju, moguće je objasniti spin-orbitalnom interakcijom medju spinskim momentima količine kretanja i orbitalnog momenta elektrona. Anizotropija nastaje zahvaljujući tome, što je orbitalni moment količine kretanja povezan sa strukturom rešetke. Na višim temperaturama magnetno regulisanje smera atomskih momenata menja se vrlo brzo, tako da ih sledi atomske deformacije i u toj oblasti se ne može ispitivati anizotropija. Ako je moment količine kretanja sistema u osnovnom stanju ravan nuli, anizotropija i magnetostrikcija se pojavljuju samo kao slabi efekti druge vrste. Pored toga može da nastane kolektivno spontano pomeranje, koje ukida orbitalnu degeneraciju osnovnog stanja. Ovo se zove pomeranje Jana-Telera. Ovo pomeranje snižava simetriju kristala od kubne do tetragonalne ili romboedarske i vodi ka anizotropiji prve vrste od dipol-dipolske interakcije. Mi ćemo razmatrati jedan specijalan slučaj [3].

Posmatrajmo jednu kristalnu strukturu koju grade magnetni joni sa neparnim brojem elektrona koji formiraju kubnu feromagnetnu rešetku. U koliko se radi o magnetnim jonima u osnovnom stanju, onda je interakcija izmene ovih jona anizotropna. Medutim, ova interakcija brzo opada sa rastojanjem izmedju jona pa je dovoljno zadržati se samo na interakcijama izmene medju najbližim susedima.

Hamiltonian, koji daje interakciju (\vec{n} i \vec{m}) para magnetnih jona u pravcu z-ose izražen spinskim operatorima za slučaj spina $1/2$ i magnetnog momenta jona u osnovnom stanju $\vec{M} = \mu_B \vec{S}$, ima sledeći oblik:

$$\mathcal{H}_{\vec{n}\vec{m}} = J_{||} S_n^z S_m^z + J_{\perp} (S_n^x S_m^x + S_n^y S_m^y) \quad 3.14$$

Odgovarajući oblici $\mathcal{H}_{\vec{n}\vec{m}}$ za x i y - pravce dobijaju se na analogan način cikličnom permutacijom x, y i z .

Ako uvedemo smenu:

$$J = -J_{\perp} \quad \text{i} \quad J' = J_{||} - J_{\perp} \quad 3.15$$

tada ukupni Hamiltonijan dobija oblik:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \vec{S}_n \cdot \vec{S}_m + J' \sum_{\vec{n}} \sum_{r=1}^3 S_n^r S_{n+\epsilon_r}^r - g\mu_B H \sum_{\vec{n}} S_n^z \quad 3.16$$

Iz relacije (3.16) se vidi da Hamiltonijan opisuje izotropan Hajzenbergov feromagnetik za slučaj $J' = 0$. Feromagnetna konfiguracija postoji pod uslovom da je $J_{\perp} < 0$ i $J_{||} < 0$, i ose lake magnetizacije su x, y odnosno z -osa. Zato smo spoljašnje polje usmerili u pravcu z -ose. To ćemo pokazati [3].

Koristeći linearnu Holstein-Primakoffovu aproksimaciju spinskih operatora Bose-operatorima kreacije i anihilacije magnona (3.5) i preuzeći Fourier-transformacijama u impulsni prostor, dobija se sledeći kvadratni Hamiltonijan dat preko Bose-operatora:

$$\mathcal{H} = E_0 + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}}^* B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{\vec{k}}^{\dagger} \quad 3.17$$

gde je $\omega_{\vec{k}}$ i $\gamma_{\vec{k}}$ funkcije talasnog vektora \vec{k} , a

$$E_0 = (2J_{\perp} + J_{||})NS^2 - g\mu_B H NS \quad 3.18$$

klasična vrednost energije osnovnog stanja u kojem su svi spinovi usmereni u pravcu spoljašnjeg magnetnog polja.

Hamiltonijan (3.17) se dijagonalizuje "UV" transformacijom pri čemu se dohaja:

$$\mathcal{H} = E'_0 + \sum_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}}^+ \beta_{\vec{k}}^{\dagger} \beta_{\vec{k}} \quad 3.19$$

gde je

$$E'_o = E_o + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (\lambda_{\vec{k}}^+ - \omega_{\vec{k}}^+) \quad 3.20$$

$$\lambda_{\vec{k}}^+ = \lambda_{\vec{k}}^- = \pm |\omega_{\vec{k}}^2 - (\gamma_{\vec{k}}^+ + \gamma_{\vec{k}}^-)|^{1/2} \quad 3.21$$

$\beta_{\vec{k}}, \beta_{\vec{k}}^+$ su operatori koji zadovoljavaju obične komutacione relacije za Bose-operatore i $\lambda_{\vec{k}}^+$ - energija spinskih talasa. Energija E'_o je energija osnovnog stanja anizotropnog feromagnetika i ona uključuje u sebi klasičnu energiju osnovnog stanja E_o kao i kvantno-mehaničku nultu energiju.

Za analizu magnetne stabilnosti anizotropnog feromagnetika, potrebno je ispitati uslove koje treba da zadovolje $J_{||}$ i J_{\perp} kada $H \rightarrow 0$.

Pre svega, energija spinskih talasa $\lambda_{\vec{k}}^+$ mora biti realna veličina. Zbog toga, koristeći izraz (3.21) imamo da je za svako \vec{k}

$$|\omega_{\vec{k}}^+| > |\gamma_{\vec{k}}^+ + \gamma_{\vec{k}}^-| \quad 3.22$$

Magnetna stabilnost feromagnetcnog stanja se može obezbediti ako se totalna energija sistema ne smanjuje usled eksitacije spinskih talasa. Tako za svako \vec{k} imamo da je $\lambda_{\vec{k}}^+ > 0$. Pošto su $\omega_{\vec{k}}^+$ i $\lambda_{\vec{k}}^+$ istog znaka sledi da je

$$\omega_{\vec{k}}^+ > 0 \quad 3.23$$

Dobijene nejednakosti (3.22) i (3.23) pretstavljaju kriterijum za magnetnu stabilnost. Iz gornjih izraza se dobija da je $J_{\perp} < 0$ i $J_{||} < 0$. Ukoliko ovo nije zadovoljeno javiće se antiferomagnetna konfiguracija.

Na kraju analizirajući vrednosti energije osnovnog stanja anizotropnog feromagnetika (3.20) na temperaturama $T = 0K$ kada $H \rightarrow 0$, može se videti da su uslovi magnetne sta-



bilnosti ($J_{\perp} < 0$ i $J_{||} < 0$) zadovoljeni su za sva tri osnovna pravca elementarne ćelije i da najniža vrednost E_0' odgovara uvek pravcu $|0,0,1|$. Ovo znači da su ose lake magnetizacije upravo ose rotacije četvrtog reda elementarne ćelije: x,y,z.

4. ENERGETSKI PROCEP

Spektar elementarnih eksitacija u anizotropnom feromagnetiku, može se izračunati rešavanjem sistema jednačina za Grinove funkcije definisane preko Bose operatora [5]

$$\langle\langle B(\vec{k}, t) | B^+(\vec{k}, t') \rangle\rangle \quad i \quad \langle\langle B^+(-\vec{k}, t) | B_-(\vec{k}, t') \rangle\rangle$$

koristeći Hamiltonian iz paragrafa (3.2). Pregled osobina Grinovih funkcija dat je u [4].

U energetskoj reprezentaciji jednačine kretanja za date funkcije su oblika:

$$\begin{aligned} E \langle\langle B_{\vec{k}} | B_{\vec{k}}^+ \rangle\rangle_E &= \frac{1}{2\pi} + \langle\langle [B_{\vec{k}}, \chi] | B_{\vec{k}}^+ \rangle\rangle \\ E \langle\langle B_{\vec{k}}^+ | B_{\vec{k}}^+ \rangle\rangle_E &= \langle\langle [B_{\vec{k}}^+, \chi] | B_{\vec{k}}^+ \rangle\rangle \end{aligned} \quad 4.1$$

gde su B i B^+ Bose operatori.

Izračunavanjem komutatora koji figurišu u (4.1) dobija se sistem jednačina, koji se može približno rešiti dekuplovanjem dvočestičnih Grinovih funkcija. Nakon dekuplovanja i sredjivanja dobijamo sistem jednačina [6]:

$$\left. \begin{aligned} [E - X(\vec{k})] G_{\vec{k}}(E) + Y(\vec{k}) D_{\vec{k}}^+(E) &= \frac{i}{2\pi} \\ -[Y^*(\vec{k}) - y(\vec{k})] G_{\vec{k}}(E) + [E - X(\vec{k})] D_{\vec{k}}^+(E) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad 4.2$$

Ovaj sistem jednačina se može rešiti pomoću determinante Δ :

$$\Delta = \begin{vmatrix} E - X(\vec{k}) & Y(\vec{k}) \\ -[Y^*(\vec{k}) - y(\vec{k})] & E + X(\vec{k}) \end{vmatrix}$$

$$\Delta = E^2 - X^2(\vec{k}) + Y(\vec{k}) [Y^*(\vec{k}) - y(\vec{k})] \quad 4.3$$

gde su $X(\vec{k})$, $Y(\vec{k})$ i $y(\vec{k})$ parametri koji se nalaze samousaglašenom procedurom.

Energija elementarnih eksitacija odredjena je polom Grinove funkcije tj. uslovom $\Delta = 0$, što za energiju elementarnih eksitacija daje:

$$E(\vec{k}) = \{X^2(\vec{k}) - Y(\vec{k}) [Y^*(\vec{k}) - y(\vec{k})]\}^{1/2} \quad 4.4$$

Izraz (4.4) možemo napisati u nešto povoljnijem obliku

$$E(\vec{k}) = \{X^2(\vec{k}) + Y(\vec{k}) R(\vec{k})\}^{1/2} \quad 4.5$$

koji ćemo nadalje koristiti, gde je

$$R(\vec{k}) = y(\vec{k}) - Y^*(\vec{k})$$

Pošto nas interesuje energetski procep $E(0)$ za $T = 0K$, na osnovu (4.5) imamo:

$$E(0) = \{X^2(0) + Y(0)R(0)\}^{1/2} \quad 4.6$$

Parametri $X(\vec{k})$, $Y(\vec{k})$ i $R(\vec{k})$ su dati sledećim izrazima za $T = 0K$ |6|:

$$\begin{aligned} X(\vec{k}) &= a(\vec{k}) - \delta b(\vec{k}) + \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_q \left[\frac{X(\vec{q})}{E(\vec{q})} - 1 \right] [M(\vec{k}, \vec{q}) - \delta M'(\vec{k}, \vec{q})] + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_q \frac{Y(\vec{q})}{E(\vec{q})} [W(\vec{k}) + 2W(\vec{q})] \quad \text{gde je } \delta = \frac{J'}{J} \end{aligned} \quad 4.7$$

$$Y(\vec{k}) = \frac{\delta}{2} \left\{ 2 \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\cos q_x a}{E(\vec{q})} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\cos q_x a \cos q_y a}{E(\vec{q})} \right] - 1 \right\}^{-1} \cdot (\cos k_x a - \cos k_y a) \quad 4.8$$

$$R(\vec{k}) = \frac{\delta}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left[\frac{X(\vec{q})}{E(\vec{q})} - 1 \right] \right\} \left\{ 2 \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\cos^2 q_x a}{E(\vec{q})} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\cos q_x a \cos q_y a}{E(\vec{q})} \right] - 1 \right\}^{-1} (\cos k_x a - \cos k_y a) \quad 4.9$$

gde su:

$$a(\vec{k}) = \frac{1}{2} [Y(0) - Y(\vec{k})] ; \quad Y(\vec{k}) = 2(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad 4.10$$

$$b(\vec{k}) = \frac{1}{2} [2 - a(\vec{k})] ; \quad a(\vec{k}) = \cos k_x a + \cos k_y a \quad 4.11$$

$$M(\vec{k}, \vec{q}) = Y(\vec{k}) + Y(\vec{q}) - Y(0) - Y(\vec{k}-\vec{q}) \quad 4.12$$

$$M'(\vec{k}, \vec{q}) = a(\vec{k}) + a(\vec{q}) - 2 \cos(k_z a) \quad 4.13$$

$$W(\vec{k}) = -\frac{\delta}{2} (\cos k_x a - \cos k_y a) \quad 4.14$$

Izrazi za $Y(\vec{k})$ i $R(\vec{k})$ dobijeni su korišćenjem osobina simetrije koje slede pod sledećim pretpostavkama:

- a) $E(\vec{k})$, $X(\vec{k})$, $Y(\vec{k})$ i $R(\vec{k})$ su parne funkcije od \vec{k} (jer sistem ima centar inverzije).
- b) $E(k_x, k_y, k_z)$ zavisi od k_x i k_y na isti način, ovo sledi iz same simetrije Hamiltonijana.

Kako se dolazi do ovih rezultata pokazaćemo na primjeru analize jednačine (4.7). Ako zamenimo eksplicitno (4.10 - 4.14) u (4.7), vidimo da se funkcionalna zavisnost od \vec{k} javlja u obliku linearne kombinacije $\cos k_i a$ i $\sin k_i a$ ($i = x, y, z$).

Zavisnost od $\sin k_i a$ dolazi naprimer od izraza

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left[\frac{X(\vec{q})}{E(\vec{q})} - 1 \right] M(\vec{k}, \vec{q}) &\rightarrow \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left[\frac{X(\vec{q})}{E(\vec{q})} - 1 \right] \gamma(\vec{k} - \vec{q}) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left[\frac{X(\vec{q})}{E(\vec{q})} - 1 \right] 2 \sum_i \cos(k_i - q_i) a = \\ &= 2 \sum_i \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left[\frac{X(\vec{q})}{E(\vec{q})} - 1 \right] (\cos k_i a \cos q_i a - \sin k_i a \sin q_i a) \quad 4.14a \end{aligned}$$

Razmotrimo član $2 \sum_i \sin k_i a \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left[\frac{X(\vec{q})}{E(\vec{q})} - 1 \right] \sin q_i a$

S obzirom na parnost $X(\vec{q})$ i $E(\vec{q})$, suma je jednaka nuli, tako da preostaje samo zavisnost od kosinusa kao i slobodan član

$$X(\vec{k}) = X^0 + X^x \cos k_x a + X^y \cos k_y a + X^z \cos k_z a \quad 4.14b$$

Sada se koeficijenti X^i ($i=0,x,y,z$) odredjuju samousaglašenom procedurom tj. zamenom u jednačinu (4.7). Iz ove jednačine se može videti da je $X^x = X^y$, prema tome imamo

$$X(\vec{k}) = X^0 + X^x (\cos k_x a + \cos k_y a) + X^z \cos k_z a \quad 4.14c$$

Na kraju ove analize na osnovu simetrije, treba uočiti sledeći član u (4.7):

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{Y(\vec{q})}{E(\vec{q})} W(\vec{k}) = W(\vec{k}) \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{Y(\vec{q})}{E(\vec{q})}$$

Zbog antisimetričnosti $Y(\vec{q})$, sledi da je ova suma jednaka nuli.

Nas će uglavnom zanimati vrednost $Y(0)$, $R(0)$ i $X(0)$, da bi na osnovu (4.6) mogli odrediti energetski procepi. Treba odmah primetiti da za $\vec{k} = 0$ iz (4.8) i (4.9) sledi:

$$Y(0) = R(0) = 0$$

4.15

tako da je na osnovu (4.6)

$$E(0) = |X(0)| = |X^0 + 2X^x + X^z| \quad 4.16$$

Radićemo u feromagnetnoj oblasti u kojoj je parametar anizotropije $\delta = J'/J < 1$ i pretpostavljajući da je $\delta \ll 1$, možemo izračunati energetski procep (energetski gep), razvijajući izraze (4.5 - 4.9) do δ^4

$$X(\vec{k}) = X_0(\vec{k}) + X_1(\vec{k}) + \delta^2 X_2(\vec{k}) + \delta^3 X_3(\vec{k}) + \delta^4 X_4(\vec{k}) \quad 4.17$$

$$Y(\vec{k}) = \delta Y_1(\vec{k}) + \delta^2 Y_2(\vec{k}) + \delta^3 Y_3(\vec{k}) + \delta^4 Y_4(\vec{k}) \quad 4.18$$

$$R(\vec{k}) = \delta R_1(\vec{k}) + \delta^2 R_2(\vec{k}) + \delta^3 R_3(\vec{k}) + \delta^4 R_4(\vec{k}) \quad 4.19$$

$$E(\vec{k}) = E_0(\vec{k}) + \delta E_1(\vec{k}) + \delta^2 E_2(\vec{k}) + \delta^3 E_3(\vec{k}) + \delta^4 E_4(\vec{k}) \quad 4.20$$

Kombinujući jednačine (4.17 - 4.20) i (4.5) dobijamo

$$E_1(\vec{k}) = X_0(\vec{k})$$

$$E_2(\vec{k}) = X_1(\vec{k})$$

$$E_2(\vec{k}) = X_2(\vec{k}) + \frac{Y_1(\vec{k}) R_1(\vec{k})}{2X_0(\vec{k})}$$

$$E_3(\vec{k}) = X_3(\vec{k}) + \frac{Y_1(\vec{k}) R_2(\vec{k})}{2X_0(\vec{k})} + \frac{Y_2(\vec{k}) R_1(\vec{k})}{2X_0(\vec{k})} - \frac{X_1(\vec{k}) Y_1(\vec{k}) R_1(\vec{k})}{2X_0^2(\vec{k})}$$

$$E_4(\vec{k}) = X_4(\vec{k}) + \frac{Y_1(\vec{k}) R_3(\vec{k})}{2X_0(\vec{k})} + \frac{Y_2(\vec{k}) R_2(\vec{k})}{2X_0(\vec{k})} + \frac{Y_3(\vec{k}) R_1(\vec{k})}{2X_0(\vec{k})} +$$

$$+ \frac{X_1^2(\vec{k}) Y_1(\vec{k}) R_1(\vec{k})}{2X_0^3(\vec{k})} - \frac{X_2(\vec{k}) Y_1(\vec{k}) R_1(\vec{k})}{2X_0^2(\vec{k})} - \frac{Y_1^2(\vec{k}) R_1^2(\vec{k})}{8X_0^3(\vec{k})} -$$

$$- X_1(\vec{k}) \left[\frac{Y_1(\vec{k}) R_2(\vec{k}) + Y_2(\vec{k}) R_1(\vec{k})}{2X_0^2(\vec{k})} \right]$$

4.21

Koeficijente $x_i(\vec{k})$, $y_i(\vec{k})$ i $r_i(\vec{k})$ možemo izračunati na sledeći način:

razvijmo kao geometrijsku progresiju vrednost

$\left[\frac{x(\vec{q})}{E(\vec{q})} - 1 \right]$ i $\left[\frac{y(\vec{q})}{E(\vec{q})} \right]$ koja figuriše u (4.7). Pošto je na osno-

vu (4.12 - 4.14) $W(\vec{k}) \sim \delta$ i $M(0, \vec{q}) = 0$, dovoljno je gornje izraze razviti do člana proporcionalnog δ^2 .

Grupisanjem članova uz δ i sredjivanjem, dobijamo:

$$\left. \begin{aligned} x_0(\vec{k}) &= a(\vec{k}) = \frac{1}{2}[\gamma(0) - \gamma(\vec{k})] \\ x_1(\vec{k}) &= -b(\vec{k}) = \frac{1}{2}[\cos k_x a + \cos k_y a] - 1 \\ x_2(\vec{k}) &= \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} A(\vec{q}) M(\vec{k}, \vec{q}) + 2 \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} D(\vec{q}) \tilde{W}(\vec{q}) \\ x_3(\vec{k}) &= \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} B(\vec{q}) M(\vec{k}, \vec{q}) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} A(\vec{q}) M'(\vec{k}, \vec{q}) + \\ &\quad + 2 \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} F(\vec{q}) \tilde{W}(\vec{q}) \end{aligned} \right\} 4.22$$

gde smo uveli oznaku $W(\vec{q}) = \delta \tilde{W}(\vec{q})$.

Vrednosti A, B, D i F su eksplicitno date preko koeficijenata x_i , y_i i r_i na sledeći način

$$\left. \begin{aligned} A &= - \frac{Y_1(\vec{k}) R_1(\vec{k})}{2X_0(\vec{k})} \\ B &= \frac{X_1(\vec{k}) Y_1(\vec{k}) R_1(\vec{k})}{X_0^3(\vec{k})} \\ D &= \frac{Y_1(\vec{k})}{X_0(\vec{k})} \\ F &= \frac{Y_2(\vec{k})}{X_0(\vec{k})} - \frac{X_1(\vec{k}) Y_1(\vec{k})}{X_0^2(\vec{k})} \end{aligned} \right\} 4.23$$

Na sličan način nalazimo koeficijente Y_i . Ako sada razvijemo (4.8) do δ^3 (uzimajući u obzir da je $Y(\vec{k}) \sim \delta$) i koristeći relacije (4.21), posle sredjivanja dobijamo:

$$Y_1(\vec{k}) = \frac{1}{2} \frac{\cos k_x - \cos k_y}{2[I_o^{xx} - I_o^{xy}] - 1} \quad 4.24$$

$$Y_2(\vec{k}) = \frac{\cos k_x - \cos k_y}{[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1]^2} \frac{1}{N} \sum_q \frac{\cos q_x (\cos q_x - \cos q_y)}{X_o(\vec{q})} X_1(\vec{q}) \quad 4.25$$

$$Y_3(\vec{k}) = \frac{\cos k_x - \cos k_y}{[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1]^2} \left\{ \frac{2}{2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1} \left[\frac{1}{N} \sum_q \frac{\cos q_x (\cos q_x - \cos q_y)}{X_o^2(\vec{q})} X_1(\vec{q}) \right]^2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{N} \sum_q \frac{\cos q_x (\cos q_x - \cos q_y)}{X_o(\vec{q})} \left[\left(\frac{X_1(\vec{q})}{X_o(\vec{q})} \right)^2 - \frac{E_1(\vec{q})}{X_o(\vec{q})} \right] \right\} \quad 4.26$$

gde su I_o^{xx} i I_o^{xy} integrali tipa

$$I_o^{xx} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\cos^2 q_x a}{X_o(\vec{q})} \quad \text{i} \quad I_o^{xy} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\cos q_x \cos q_y a}{X_o(\vec{q})} \quad 4.27$$

Koeficijente R_i dobijamo iz relacije (4.9), stim što izraz $[\frac{X(\vec{q})}{E(\vec{q})} - 1]$ razvijamo kao geometrijsku progresiju do δ^3

(jer je $R \sim \delta$) i posle sredjivanja dobijamo

$$R_1(\vec{k}) = Y_1(\vec{k}) \quad 4.28$$

$$R_2(\vec{k}) = Y_2(\vec{k}) \quad 4.29$$

Na osnovu jednačina (4.7), (4.16), (4.28) i (4.29) imamo da je za $k = 0$ energetski procep jednog anizotropnog feromagnetičara na $\theta = 0^\circ$ dat izrazom:

$$\begin{aligned}
 E(0) &= |X(0)| = \left| -\frac{\delta}{2} \frac{1}{N} \sum_q \left[\frac{X(q)}{E(q)} - 1 \right] M'(0, q) + \frac{2}{N} \sum_q \frac{Y(q)}{E(q)} W(q) \right| = \\
 &= \left| \frac{\delta^4}{4} \frac{1}{N} \sum_q \frac{Y_1(q)}{q X_0^2(q)} M'(0, q) - \frac{\delta^4}{2} \frac{1}{N} \sum_q \left(\frac{X_1(q) Y_1^2(q)}{X_0^3(q)} - \frac{Y_1(q) Y_2(q)}{X_0^2(q)} \right) M'(0, q) - \right. \\
 &\quad - \delta^3 \frac{1}{N} \sum_q \left(\frac{Y_1(q)}{X_0(q)} (\cos k_x a - \cos k_y a) - \delta^3 \frac{1}{N} \sum_q \left(\frac{Y_2(q)}{X_0(q)} - \frac{X_1(q) Y_1(q)}{X_0^2(q)} \right) (\cos k_x a - \cos k_y a) - \right. \\
 &\quad - \delta^4 \frac{1}{N} \sum_q \left(\frac{Y_3(q)}{X_0(q)} + \frac{X_1^2(q) Y_1(q)}{X_0^3(q)} - \frac{X_1(q) Y_2(q)}{X_0^2(q)} - \frac{Y_1(q) X_2(q)}{X_0^2(q)} + \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{Y_1(q) R_1(q)}{2 X_0^3(q)} \right) (\cos k_x a - \cos k_y a) \right| \tag{4.30}
 \end{aligned}$$

Iz jednačine (4.30) vidimo da je za izračunavanje energetskog procepa potrebno znati X_0 , X_1 , X_2 , Y_1 , Y_2 , R_1 , R_2 i Y_3 .

Korišćenjem relacija (4.22 – 4.26) zatim (4.28) i (4.29) dobijamo:

$$\left. \begin{aligned}
 X_1(\vec{k}) &= -1 + \frac{1}{2} (\cos k_x a + \cos k_y a) \\
 X_0(\vec{k}) &= 3 - (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \\
 X_2(\vec{k}) &= X_2^0 + X_2^x (\cos k_x a + \cos k_y a) + X_2^z \cos k_z a \\
 X_2^0 &= \frac{1}{4} \frac{I_0^{xx} - I_0^{xy}}{2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1} \left[\frac{1}{2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1} - 2 \right] \\
 X_2^x &= \frac{1}{4} \frac{1}{[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]^2} [I_1^{xx} - I_1^{xy} - \frac{1}{2}(I_1^{xxx} - I_1^{xxy})] \\
 X_2^z &= \frac{1}{4} \frac{1}{[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]^2} [I_1^{xx} - I_1^{xy} - I_1^{xxx} + I_1^{xyz}] \\
 Y_1(\vec{k}) &= R_1(\vec{k}) = Y_1^y (\cos k_x a - \cos k_y a)
 \end{aligned} \right\} \tag{4.31}$$

$$\left. \begin{aligned}
 Y_1^y &= R_1^x = \frac{1}{2[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]} \\
 Y_2(\vec{k}) &= R_2(\vec{k}) = Y_2^y (\cos k_x a - \cos k_y a) \\
 Y_2^y &= R_2^x = \frac{\frac{1}{2}(I_1^{xxx} - I_1^{xxy}) - I_1^{xx} + I_1^{xy}}{[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]^2} \\
 Y_3(\vec{k}) &= Y_3^y (\cos k_x a - \cos k_y a) \\
 Y_3^y &= \frac{1}{[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]^2} \{ (Y_1^y)^2 (I_2^{xxx} - I_2^{xxy}) - \frac{1}{2} Y_1^y (I_2^{xxxx} + I_2^{xxyy} - 2I_2^{xxx}y) + \\
 &+ X_2^0 (I_1^{xx} - I_1^{xy}) - 2X_2^x I_1^{xxy} - X_2^z I_1^{xyz} + I_2^{xy} - I_1^{xx} - 2I_2^{xxy} + \frac{1}{2} (I_2^{xxx}y + I_2^{xxy}) + \\
 &+ X_2^x (I_1^{xxx} + I_1^{xxy}) + X_2^z I_1^{xxz} + I_1^{xxx} + I_1^{xy} - \frac{1}{4} (I_1^{xxxx} + 2I_1^{xxx}y + I_1^{xxy}) + \\
 &+ \frac{2}{[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]} [\frac{1}{2}(I_1^{xxx} - I_1^{xxy}) - (I_1^{xx} - I_1^{xy})]^2 \}
 \end{aligned} \right\} \quad 4.31$$

Sa I_n smo obeležili integrale tipa:

$$I_n^{abc} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\cos q_a a \cos q_b b \dots \cos q_c c}{(3 - \sum_i \cos q_i i)^{n+1}} \quad 4.32$$

Kombinujući relacije (4.30) i (4.31) konačno dobijamo izraz za energetski procep nekog anizotropnog feromagnetika na $T = 0K$ dat preko integrala tipa (4.32):

$$\begin{aligned}
 E(0) &= |X(0)| = |\delta^2 [2Y_1^y (I_0^{xx} - I_0^{xy})] + \delta^3 [2Y_1^y (I_1^{xy} - I_1^{xx}) + \frac{1}{2} (I_1^{xxx} - I_1^{xxy})] + \\
 &+ \frac{1}{2} (Y_1^y)^2 (I_1^{xxx} - I_1^{xxy}) + 2Y_2^y (I_0^{xx} - I_0^{xy})] + \delta^4 \{ (Y_1^y)^3 (I_2^{xxxx} - I_2^{xxyy}) + \\
 &+ Y_1^y [2X_2^0 (I_1^{xx} - I_1^{xy}) + X_2^x (2I_1^{xxx} - 2I_1^{xxy}) + X_2^z (2I_1^{xxz} - 2I_1^{xyz})] +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + Y_1^y [2(I_2^{xx} - I_2^{xy}) + \frac{7}{2}I_2^{xxy} - \frac{3}{2}I_2^{xxx} - I_2^{xxxx} - I_2^{xxyy}] + \\
 & + Y_2^y [2I_1^{xy} - 2I_1^{xx} + I_1^{xxx} - I_1^{xyy}] + 2Y_3^y (I_o^{xx} - I_o^{xy}) + Y_1^y (I_1^{xxx} - I_1^{xyz}) + \\
 & + (Y_1^y)^2 [I_2^{xxy} - I_2^{xxx} + I_2^{xxxx} - I_2^{xxyy} + I_2^{xxxxz} - I_2^{xxyz} + 2I_2^{xyz} - 2I_2^{xxz}] \} \quad 4.33
 \end{aligned}$$

Ako u izrazu (4.33) uvrstimo vrednosti za x_2^o , x_2^x , x_2^z , y_1^y , y_2^y i y_3^y iz (4.31), tada dobijamo da je:

$$\begin{aligned}
 E(0) = & |\delta^2 \left[\frac{1}{2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1} (I_o^{xx} - I_o^{xy}) \right] + \delta^3 \left\{ \frac{1}{2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1} [I_1^{xy} - I_1^{xx} + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2}(I_1^{xxx} - I_1^{xxy})] + \frac{1}{8[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) + 1]^2} (I_1^{xxx} - I_1^{xyz}) + \right. \\
 & \left. + \frac{(I_1^{xxx} - I_1^{xxy}) - I_1^{xx} + I_1^{xy}}{[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1]^2} (I_o^{xx} - I_o^{xy}) \right\} + \delta^4 \left\{ \left\{ \frac{1}{8[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1]^3} (I_o^{xxxx} - I_o^{xxyy}) + \right. \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1]^3} \left\{ \frac{I_1^{xx} - I_1^{xy}}{2} - 2[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1] (I_1^{xx} - I_1^{xy}) + \right. \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2}[I_1^{xx} - I_1^{xy} - \frac{1}{2}(I_1^{xxx} - I_1^{xxy})] (I_1^{xxx} - I_1^{xxy}) + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2}(I_1^{xx} - I_1^{xy} - I_1^{xxy} + I_1^{xyz}) (I_1^{xxy} - I_1^{xyz}) + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1]} [2(I_2^{xx} - I_2^{xy}) + \frac{7}{2}I_2^{xxy} - \frac{3}{2}I_2^{xxx} - I_2^{xxxx} - I_2^{xxyy}] + \right. \\
 & \left. + \frac{I_1^{xxx} - I_1^{xxy} - I_1^{xx} + I_1^{xy}}{2[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1]} [2I_1^{xy} - 2I_1^{xx} + I_1^{xxx} - I_1^{xyy}] + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{4[2(I_o^{xx} - I_o^{xy}) - 1]^2} (I_2^{xxy} - I_2^{xxx} + I_2^{xxxx} - I_2^{xxyy} + I_2^{xxxxz} - I_2^{xxyz} + 2I_2^{xyz} - 2I_2^{xxz}) + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{I_0^{xx} - I_0^{xy}}{[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]^2} \left\{ \frac{I_2^{xxx} - I_2^{xxy}}{4[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]^2} - \frac{I_2^{xxxx} + I_2^{xxy} - 2I_2^{xxx}}{4[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]} \right. + \\
 & + \frac{I_1^{xx} - I_1^{xy}}{4[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]} \left[\frac{1}{2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1} - 2 \right] - \frac{I_1^{xxy}}{2[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]^2} [I_1^{xx} - I_1^{xy} - \\
 & - \frac{1}{2}(I_1^{xxx} - I_1^{xxy})] - \frac{I_1^{xyz}(I_1^{xx} - I_1^{xy} - I_1^{xxz} + I_1^{xyz})}{4[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]^2} + I_2^{xy} - I_1^{xx} - 2I_2^{xxy} + \\
 & + \frac{1}{2}(I_2^{xxx} + I_2^{xxy}) + \frac{I_1^{xxx} + I_1^{xxy}}{4[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]^2} [I_1^{xx} - I_1^{xy} - \frac{1}{2}(I_1^{xxx} - I_1^{xxy})] + \\
 & + \frac{I_1^{xxz}(I_1^{xx} - I_1^{xy} - I_1^{xxz} + I_1^{xyz})}{4|2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1|^2} + I_1^{xxx} + I_1^{xxy} - \frac{1}{4}(I_1^{xxxx} + 2I_1^{xxx} + I_1^{xxy}) + \\
 & + \frac{2}{[2(I_0^{xx} - I_0^{xy}) - 1]} [\frac{1}{2}(I_1^{xxx} - I_1^{xxy}) - I_1^{xx} + I_1^{xy}]^2 \} \} \} | \quad 4.34
 \end{aligned}$$

Integrali tipa (4.32) su singularni u centru Brilue-nove zone, tako da ih sada nećemo izračunavati, već samo navodimo opšti izraz preko ovih integrala. Napomenimo da smo većinu drugih proračuna izostavili, jer bi time nepotrebno opteretili tekst.

5. ZAKLJUČAK

Cilj ovog rada je bio da se prouči energetski procep za jedan model anizotropnog Hajzenbergovog feromagnetika na $T = 0K$. Poznato je da za ovakve modele ne važi Goldstonova teorema [8], i stoga je postojala mogućnost da se ovaj procep izračuna eksplicitno. Polazeći od sistema jednačina za bozonske Grinove funkcije, uspeli smo da izvedemo razvoj po malom parametru anizotropije $\delta \ll 1$ do δ^4 .

Pokazali smo da je procep različit od nule, i proporcionalan δ^2 u najnižoj aproksimaciji [6,8].

Nažalost, nismo bili u mogućnosti da numerički izračunamo koeficijente razvoja. Ipak, dobijeni razvoj omogućuje da se uz odredjene metode u oblasti numeričke integracije dobiju i procene ove veličine.

LITERATURA

- | 1 | С.В. Тябликов, Методы квантовой теории магнетизма.
"Наука" Москва (1965).
- | 2 | А. Анибалу, Квантовая теория кристаллических твердых тел.
"МИР", Москва (1981),
- | 3 | E. Beloritzky, R. Casalegno and P. Fries, *Phys.Stat.Sol.*,
(b) 77, 495 (1976).
- | 4 | B. Tošić, *Statistička fizika*. PMF Novi Sad (1978).
- | 5 | Zorica P. Stepanić, *Diplomski rad* (1980).
- | 6 | M.J. Škrinjar, D.V. Kapor and J.P. Šetrajčić, *Phys.Stat.Sol.*,
(b) 103, 559 (1981).
- | 7 | L.J. DeJong, *J.appl.Phys.*, 49, 1305 (1978).
- | 8 | E. Beloritzky, R. Casalegno and J.J. Niez, *Phys.Stat.Sol.*,
(b) 102, 365 (1980).

