Univerzitet u Novom Sadu
Prirodno-matematički fakultet
institut za fiziku

predmet: kvantna fizika
mentor: Dr. Bratislav S. Tošić

tema:

BOZONSKA POLJA U ANALIZI FEROMAGNETNOG KRITIČNOG DOMENA

Novi Sad
februar 1977.

kandidat:
Dumanović Velimir

-UVOD-

Cilj ovog diplomskog rada je da se analizira oblast kritične temperature Hajsenbergovog feromagnetika uz korišćenje egzaktne bozonske reprezentacije za spinske operatore. Ovakva analiza ne predstavlja samo matematički pokušaj da se bozonska reprezentacija primeni i na visokim temperaturama već se ona vrši zato što u bozonskoj slici postaju primetni izvesni novi fizički efekti koji u reprezentaciji operatora spina ne mogu da se pojave. Radi se o tome da kinematička interakcija spinskih talasa u oblasti velikih impulsa i visokih temperatura može da dovede do stvaranja dopunskih elementarnih ekscitacija koje sa svoje strane mogu bitno da utiču na karakteristike faznog prelaza. Ovu ideju izneo je Dajson još 1956. godine i naš cilj je da proverimo u kojoj meri je ovo Dajsonovo predvidjanje tačno.

glava I

PREGLED METODA ANALIZE KIRIJEVE TEMPERATURE U FEROMAGNETICIMA

paragraf 1. DVOVREMENSKE TEMPERATURSKE FUNKCIJE GRINA

Grinova funkcija za dva operatora $\hat{A}(\vec{r},t)$ i $\hat{B}(\vec{r}',t')$ data je ovakvim izrazom

$$\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = \Theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle \quad \ldots(1.1)$$

Simbol $\langle\langle\cdots\rangle\rangle$ označava uredjivanje operatora po vremenu i znaku srednje vrednosti po Gibsovom statističkom ansamblu, odnosno:

$$\langle F\rangle = \frac{S_p \hat{F} e^{-\beta\hat{H}}}{S_p\, e^{-\beta\hat{H}}} \quad ; \quad \beta - \frac{1}{KT} \quad ; \quad K \text{ - Bolcmanova konstanta}$$

Ovde su: $\hat{H}$ Hamiltonijan sistema, a $\Theta(t-t')$ Hevisajdova funkcija data izrazom

$$\Theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{za } t>t' \\ 0 & \text{za } t<t' \end{cases} \quad \ldots(1.2)$$

Kad prodiferenciramo izraz (1.1) po oba vremena, prvo po t, a onda i po t' i kad uzmemo u obzir da je izvod Hevisajdove funkcije po vremenu δ funkcija dobijamo

$$\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = \delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle + \Theta(t-t')\times$$
$$\times\langle[\frac{d}{dt}\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$$

$$\frac{d}{dt'}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = -\delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle + \Theta(t-t')\times$$
$$\times\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\frac{d}{dt'}\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$$

Hajsenbergove jednačine kretanja za kvantnomehaničke operatore $\hat{A}(\vec{r},t)$ i $\hat{B}(\vec{r}',t')$ su:

$$i\frac{d\hat{A}(\vec{r},t)}{dt} = [\hat{A},\hat{H}]_t \qquad ; \qquad i\frac{d\hat{B}(\vec{r}',t')}{dt'} = [\hat{B},\hat{H}]_{t'}$$

Uzimajući ovo u obzir poslednje dve jednačine se svode na:

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle\hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = i\delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle + \\ +\theta(t-t')\langle[[\hat{A},\hat{H}]_t,\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle \qquad \cdots(11.3)$$

$$i\frac{d}{dt'}\langle\langle\hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = -i\delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle + \\ +\theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),[\hat{B},\hat{H}]_{t'}]\rangle \qquad \cdots(11.4)$$

Izrazi na desnoj strani ovih jednačina i to: $\theta(t-t')\langle[[\hat{A},\hat{H}]_t,\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$ i $\theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),[\hat{B},\hat{H}]_{t'}]\rangle$ predstavljaju prema (11.1) neke nove Grinove funkcije. Uzimajući to u obzir ponovo pišemo jednačinu (11.3) i jednačinu (11.4) u sledećem obliku:

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle\hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = i\delta(t-t')\,R(\vec{r}-\vec{r}') + \\ +\langle\langle[\hat{A},\hat{H}]_{\vec{r},t}|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle \qquad \cdots(11.5)$$

$$i\frac{d}{dt'}\langle\langle\hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = -i\delta(t-t')\,R(\vec{r}-\vec{r}') + \\ +\langle\langle\hat{A}(\vec{r},t)|[\hat{B},\hat{H}]_{\vec{r}',t'}\rangle\rangle \qquad \cdots(11.6)$$

Uveli smo oznaku $R(\vec{r}-\vec{r}') \equiv \langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle \cdots (11.7)$

Sada ćemo izvršiti Furijeove transformacije svih članova jednačina (11.5) i (11.6) i tako imamo:

$$\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}\,',t')\rangle\rangle = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\vec{p}\, dE \,\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}}\, e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}\,')-iE(t-t')}$$

$$\langle\langle [\hat{A},\hat{H}]_{\vec{r},t}|\hat{B}(\vec{r}\,',t')\rangle\rangle = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\vec{p}\, dE \,\langle\langle [\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}}\, e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}\,')-iE(t-t')}$$

$$\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|[\hat{B},\hat{H}]_{\vec{r}\,',t'}\rangle\rangle = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\vec{p}\, dE \,\langle\langle \hat{A}|[\hat{B},\hat{H}]\rangle\rangle_{E,\vec{p}}\, e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}\,')-iE(t-t')}$$

$$R(\vec{r}-\vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{p}\, R(\vec{p})\, e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\, e^{iE(t-t')}$$

Sada ćemo sve ovo da stavimo u jednačine (11.5) i (11.6) tako da ćemo dobiti jedan ovakav sistem:

$$E\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}} = \frac{i}{2\pi} R(\vec{p}) + \langle\langle [\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}} \quad \ldots\ldots (11.8)$$

$$E\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}} = \frac{i}{2\pi} R(\vec{p}) - \langle\langle \hat{A}|[\hat{B},\hat{H}]\rangle\rangle_{E,\vec{p}} \quad \ldots\ldots (11.9)$$

Ovo se zove osnovni sistem jednačina za funkcije Grina. U njima $\vec{p}$ je impuls, a E engergija.

U praksi koristi se ili samo jednačina (11.8) ili samo jednačina (11.9) ili pak neka njihova pogodna kombinacija.

Rešavanje se sastoji u sledećem: Grinova funkcija na desnoj strani jednačine izrazi se pogodnom smenom preko Grinove funkcije na levoj strani jednačine, na taj način u jednačini ostaje samo jedna funkcija Grina po kojoj je jednačina lako rešiva.

Posmatrajmo malo funkciju Grina na levoj strani jednačina (11.8) i (11.9). Radi se o funkciji $\langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle\rangle_{E,\vec{p}}$. Kad se ona predstavi u E ravni, njen realni deo predstavlja energiju elementarnih ekscitacija sistema koji se posmatra, a imaginarni deo pola predstavlja recipročno vreme života elementarnih ekscitacija.

Na ovom mestu ćemo još dati definiciju spektralne intenzivnosti funkcije Grina $\langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle\rangle_{E,\vec{p}}$, ona je predstavljena izrazom:

$$J(\vec{p}, E) = \frac{R(\vec{p})}{e^{\beta E} - 1} \delta(E - E_{\vec{k}}) \qquad \ldots\ldots (11.10)$$

Ovde je $E_{\vec{k}}$ realni deo pola funkcije Grina Ovu spektralnu intenzivnost smo uveli da bismo mogli naći srednju vrednost proizvoda dva operatora po Gibsovom ansamblu, na sledeći način

$$\langle \hat{A} \hat{B} \rangle = \frac{S_p \hat{A} \hat{B} e^{-\beta \hat{H}}}{S_p e^{-\beta \hat{H}}} = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\vec{p}, E)\, dE = \frac{R(\vec{p})}{e^{\beta E_{\vec{k}}} - 1} \qquad \ldots\ldots (11.11)$$

Na taj način problem koji se rešava metodom funkcija Grina može se rešiti u zatvorenoj formi: pored poznavanja energije elementarnih ekscitacija i vremena života, formulom (1.11) dajemo informaciju o statistici elementarnih ekscitacija.

paragraf 2. DEKUPLOVANJE TJABLIKOVA

Iako metod dvovremenskih temperaturnih funkcija Grina nije potpuno egzaktan u oblasti niskih temperatura, a takodje ne daje potpuno dobar izraz za temperaturu prelaza, ipak je ovim metodom dobijena do danas najbolja formula za zavisnost magnetizacije od temperature i ujedno to je jedini metod koji uz pobrojane nedostatke pokriva ceo interval temperature od 0 do T_c.

Metod ćemo sada da pokažemo na primeru feromagnetika sa spinom $S = 1/2$.

Hamiltonijan feromagnetika u granicama Hajsenbergovog modela ima oblik kao dole

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}} \vec{S}_{\vec{m}} \quad \ldots\ldots (12.1)$$

ovde su: $\vec{S}$ operatori spina, a $I_{\vec{n}\vec{m}}$ integrali izmene koji su parne funkcije razlika vektora rešetke $\vec{n} - \vec{m}$.

Kako je spin jednak $S = 1/2$, to ćemo sa spinskih preći na Paulijeve operatore po sledećem principu:

$$S^+ = P \ ; \quad S^- = P^+ \ ; \quad \frac{1}{2} - S_z = P^+P \quad \ldots\ldots (12.2)$$

Ovi novi operatori moraju zadovoljavati

ovakve relacije komutativnosti :

$$[P_{\vec{n}}, P^{+}_{\vec{m}}] = (1 - 2P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{m}})\delta_{\vec{n}\vec{m}}$$
$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P^{+}_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = 0 \qquad \dots\dots (12.3)$$
$$P^{2}_{\vec{n}} = P^{+2}_{\vec{n}} = 0$$
$$P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{m}} = \delta_{\vec{n}\vec{m}}$$

Sada ćemo naš Hamiltonijan napisati preko ovih novih Pauli operatora,

$$H = \frac{1}{2}J_0\sum_{\vec{n}}P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{n}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}I_{\vec{n}\vec{m}}P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{m}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}I_{\vec{n}\vec{m}}P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{n}}P^{+}_{\vec{m}}P_{\vec{m}} \qquad \dots\dots (12.4)$$

gde je : $J_0 = \sum_{\vec{n}} I_{\vec{n}0}$

Sistem čiji je Hamiltonijan oblika (12.4) analiziraćemo pomoću funkcije Grina oblika kao dole

$$G(\vec{f}-\vec{g}) = \langle\langle P_{\vec{f}} | P^{+}_{\vec{g}} \rangle\rangle \qquad \dots\dots (12.5)$$

Osnovna jednačina za ovu Grinovu funkciju glasi

$$E\langle\langle P_{\vec{f}} | P^{+}_{\vec{g}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\langle [P_{\vec{f}}, P^{+}_{\vec{g}}] \rangle + \langle\langle [P_{\vec{f}}, H] | P_{\vec{g}} \rangle\rangle \qquad \dots\dots (12.6)$$

znajući da je

$$\langle [P_{\vec{f}}, P^{+}_{\vec{g}}] \rangle = (1 - 2\langle P^{+}_{\vec{f}}P_{\vec{g}} \rangle)\delta_{\vec{f}\vec{g}}$$

i još

* treba da stoji preskokom

$$[P_{\vec f}, H] = \frac{1}{2} J_0 P_{\vec f} - \frac{1}{2}\sum_{\vec m} I_{\vec f\vec m} P_{\vec m} + \sum_{\vec m} I_{\vec f\vec m} P^+_{\vec f} P_{\vec f} P_{\vec m} - \sum_{\vec m} I_{\vec f\vec m} P^+_{\vec m} P_{\vec m} P_{\vec f}$$

tako da jednačina (12.6) kad se uzme u obzir da zbog identičnosti čvorova srednja vrednost $\langle P^+_{\vec f} P_{\vec f}\rangle$ ne zavisi od indeksa čvora, postaje:

$$E \langle\langle P_{\vec f} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \sigma \delta_{\vec f\vec g} + \frac{1}{2} J_0 \langle\langle P_{\vec f} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle - \frac{1}{2}\sum_{\vec m} I_{\vec f\vec m} \langle\langle P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle + \sum_{\vec m} I_{\vec f\vec m} \langle\langle P^+_{\vec f} P_{\vec f} P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle - \sum_{\vec m} I_{\vec f\vec m} \langle\langle P^+_{\vec m} P_{\vec m} P_{\vec f} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle \quad \ldots (12.7)$$

gde je:

$\sigma = 1 - 2\langle P^+ P \rangle$ relativna magnetizacija po čvoru rešetke.

Na ovom mestu je Tjablikov izvršio dekuplovanje viših funkcija Grina.

$$\langle\langle P^+_{\vec f} P_{\vec f} P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle \approx \langle P^+_{\vec f} P_{\vec f} \rangle \langle\langle P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle = \frac{1-\sigma}{2} \langle\langle P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle \quad \ldots (12.8)$$

$$\langle\langle P^+_{\vec m} P_{\vec m} P_{\vec f} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle \approx \langle P^+_{\vec m} P_{\vec m} \rangle \langle\langle P_{\vec f} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle = \frac{1-\sigma}{2} \langle\langle P_{\vec f} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle \quad \ldots (12.9)$$

Fizički smisao ovog dekuplovanja sastoji se u sledećem: rasejanje spinskih talasa na potencijalu $I_{\vec n\vec m}$ zamenjuje se presekom* spinskog talasa sa čvora na čvor u takozvanom „umekšanom" potencijalu koji iznosi: $1/2\,(1-\sigma)\, I_{\vec n\vec m}$

Zamenom ovoga prethodnog u (12.7) dobijamo ovakav izraz:

$*$ - treba da stoji $J_0 = 6I$

$$[E - \tfrac{1}{2}\sigma J_0]\langle\langle P_{\vec f} | P^+_{\vec g}\rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\sigma\delta_{\vec f \vec g} - \frac{\sigma}{2}\sum_{\vec m} I_{\vec f \vec m}\langle\langle P_{\vec m} | P^+_{\vec g}\rangle\rangle \quad \dots (I2.10)$$

Grinovu funkciju na desnoj strani (I2.10) ćemo transformisati Furijeovom transformacijom kao dole,

$$\langle\langle P_{\vec f} | P^+_{\vec g}\rangle\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\vec k}\langle\langle P_{\vec k} | P^+_{\vec k}\rangle\rangle\, e^{ik(\vec f - \vec g)}$$

gde je N broj čvorova kristalne rešetke, a $\vec k$ talasni vektor. Uzimajući u obzir pomenutu transformaciju jednačina (I2.10) postaje

$$\langle\langle P_{\vec k} | P^+_{\vec k}\rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\frac{\sigma}{E - \frac{\sigma}{2}(J_0 - J_{\vec k})} \quad \dots (I2.11)$$

gde je $J_{\vec k} = \frac{1}{N}\sum_{\vec f} I_{\vec f \vec o}\, e^{i\vec k \vec f}$

Ako se u daljem računu ograničimo na prostu kubnu strukturu u aproksimaciji najbližih suseda, tada imamo:

$$J_0 = 6I^*;\quad J_k = 2I(\cos k_x \cdot a + \cos k_y \cdot a + \cos k_z \cdot a) \quad \dots (I2.12)$$

I je integral izmene za najbliže susede, dok je a konstanta kristalne rešetke.

Realni deo pola Grinove funkcije (I2.11) daje nam energiju spinskih talasa

$$E_{\vec k} = \frac{\sigma}{2}(J_0 - J_{\vec k}) \quad \dots (I2.13)$$

Spektralna intenzivnost funkcije Grina (12.11) je:

$$J(E,\vec{k}) = \frac{\sigma}{e^{\beta E}-1}\,\delta(E-E_{\vec{k}}) \qquad \text{.....(12.14)}$$

Izraz za srednji broj Pauliona je

$$\langle P_{\vec{k}}^{+}/P_{\vec{k}}\rangle = \frac{\sigma}{e^{\frac{\beta\sigma(J_0-J_{\vec{k}})}{2}}-1} \qquad \text{.....(12.15)}$$

dok na datom čvoru kristalne rešetke imamo ovakav izraz

$$\langle P_{\vec{k}}^{+}/P_{\vec{k}}\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\langle P_{\vec{k}}^{+}/P_{\vec{k}}\rangle = \frac{\sigma}{N}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{e^{\frac{\beta\sigma(J_0-J_{\vec{k}})}{2}}-1} \qquad \text{....(12.16)}$$

Sada pomoću formule (12.16) i pomoću izraza za magnetizaciju imamo sledeće:

$$\sigma = 1-2\langle P_{\vec{k}}^{+}P_{\vec{k}}\rangle = 1-\frac{2\sigma}{N}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{e^{\frac{\beta\sigma(J_0-J_{\vec{k}})}{2}}-1} \qquad \text{....(12.17)}$$

ili

$$\sigma = \frac{1}{\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\operatorname{cotgh}\frac{\beta\sigma(J_0-J_{\vec{k}})}{4}} \qquad \text{....(12.18)}$$

U okolini tačke prelaza je $\sigma\approx 0$. Tada ćemo eksponent razviti u ovakav red

$$\frac{1}{e^{x}-1} \approx \left[1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\cdots-1\right]^{-1} = \frac{1}{x+\frac{x^2}{2}+\frac{x^3}{6}} =$$

$$=\frac{1}{x}\left(1-\frac{x}{2}-\frac{x^2}{6}+\frac{x^2}{4}\right) = \frac{1}{x}-\frac{1}{2}+\frac{x}{12}$$

U našem je slučaju $x=\frac{\beta\sigma}{2}(J_0-J_{\vec{k}})$

Kad svu ovu proceduru primenimo na izraz (12.17) dobijamo sledeći izraz za magnetizaciju

$$\sigma = 1 - 2\sigma \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}}{}' \frac{2\theta}{\sigma(J_0 - J_{\vec{k}})} + 2\sigma \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2} - 2\sigma \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}}{}' \frac{\sigma(J_0 - J_{\vec{k}})}{12\theta}$$

Kako je $\sum_{\vec{k}} J_{\vec{k}} = 0$ možemo pisati:

$$\sigma^2 = \frac{12\theta}{J_0}\left(1 - \frac{4\theta\gamma}{J_0}\right) \qquad \text{gde je: } \gamma = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}}{}' \frac{1}{1 - \frac{J_{\vec{k}}}{J_0}}$$

Ako uvedamo oznaku: $\theta_c = \frac{J_0}{4\gamma}$ imamo:

$$\sigma = \sqrt{\frac{12\theta}{J_0}} \sqrt{1 - \frac{\theta}{\theta_c}} \qquad \ldots\ldots (12.19)$$

Stavljajući $\sqrt{\frac{12\theta}{J_0}} \approx \sqrt{2}$ dobijamo:

$$\sigma = \sqrt{2\left(1 - \frac{\theta}{\theta_c}\right)} \qquad \ldots\ldots (12.20)$$

Izraz (12.20) predstavlja ponašanje magnetizacije u okolini temperature prelaza $T_c = \frac{\theta_c}{K_B}$. γ je strukturni faktor i on za prostu kubnu strukturu iznosi $\gamma = 1.512$. Pomoću izraza za magnetizaciju (12.20) možemo dobiti još i

$$\theta_c = \frac{J_0}{4\gamma} = \frac{\sigma I}{4 \cdot 1.512} \approx I \quad ; \quad T_c \approx \frac{I}{K_B} \qquad \ldots (12.21)$$

temperatura prelaza za prostu kubnu

strukturu je u energetskim jedinicama jednaka integralu izmene u aproksimaciji najbližih suseda.

U domenu niskih temperatura dobijeju se neke popravke koje su proporcionalne trećem stepenu apsolutne temperature i one su ustvari rezultat rasejanja spinskih talasa. Ova popravka ustvari predstavlja grešku prouzrokovanu nedovoljno tačnim dekuplovanjem (12.8) i (12.9). Tačnije dekuplovanje postiže se primenom Vikove teoreme. Tu kao rezultat dobijamo popravku srazmernu četvrtom stepenu apsolutne temperature koja smanjuje magnetizaciju.

paragraf 3.

METOD MOLEKULSKOG POLJA

U prethodnom paragrafu dobili smo veličinu Kirijeve temperature analizirajući kompletan spinski Hamiltonijan (12.4). Ovde ćemo izvršiti analizu Kirijeve temperature sa uprošćenim Hamiltonijanom, a to je Hamiltonijan Izingovog modela. On se dobija iz Hajsenbergovog Hamiltonijana (12.4) ako se zanemari član odgovoran za prenos spinskih talasa sa čvora na čvor, a to je drugi član na desnoj strani jednačine (12.4).

Znači analiziraćemo sistem sa Hamiltonijanom

$$H_I = \frac{1}{2} J_0 \sum_{\vec{n}}{}' P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} P^+_{\vec{m}} P_{\vec{m}} \quad \ldots\ldots (13.1)$$

Jednačina za Grinovu funkciju $\langle\langle P_{\vec{f}} | P^+_{\vec{g}} \rangle\rangle$ glasi:

$$E \langle\langle P_{\vec{f}} | P^+_{\vec{g}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \delta_{\vec{f}\vec{g}} (1 - 2 \langle P^+_{\vec{f}} P_{\vec{f}} \rangle) + \langle\langle [P_{\vec{f}}, H_I] | P^+_{\vec{g}} \rangle\rangle$$

i kad se nadje komutator $[P_{\vec{f}}, H_I]$ i izvrši dekuplovanje

$$\sum_{\vec{m}} I_{\vec{f}\vec{m}} \langle\langle P^+_{\vec{m}} P_{\vec{m}} P_{\vec{f}} | P^+_{\vec{g}} \rangle\rangle \approx \sum_{\vec{m}} I_{\vec{f}\vec{m}} \langle P^+_{\vec{m}} P_{\vec{m}} \rangle \langle\langle P_{\vec{f}} | P^+_{\vec{g}} \rangle\rangle =$$

$$= \frac{1-\sigma}{2} J_0 \langle\langle P_{\vec{f}} | P_{\vec{g}}^{+} \rangle\rangle$$

dobijamo:

$$\left(E - \frac{\sigma J_0}{2}\right) \langle\langle P_{\vec{f}} | P_{\vec{g}}^{+} \rangle\rangle = \frac{i\sigma}{2\pi} \delta_{\vec{f}\vec{g}} \qquad \ldots (13.2)$$

Posle Furije - transformacije

$$P_{\vec{f}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} P_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{f}} \; ; \quad \delta_{\vec{f}\vec{g}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{f}-\vec{g})}$$

dobijamo konačno:

$$\langle\langle P_{\vec{k}} | P_{\vec{k}}^{+} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{\sigma}{E - \frac{\sigma J_0}{2}} \qquad \ldots (13.3)$$

Na isti način kao i u prethodnom paragrafu, sledi:

$$\langle P_{\vec{k}}^{+} P_{\vec{k}} \rangle = \frac{\sigma}{e^{\frac{\sigma J_0}{2\theta}} - 1}$$

$$\langle P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle P_{\vec{k}}^{+} P_{\vec{k}} \rangle = \frac{\sigma}{e^{\frac{\sigma J_0}{2\theta}} - 1} \qquad \ldots (13.4)$$

Pošto je:

$$\sigma = 1 - 2 \langle P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} \rangle = 1 - \frac{2\sigma}{e^{\frac{\sigma J_0}{2\theta}} - 1}$$

$$\sigma \operatorname{cotgh} \frac{\sigma J_0}{4\theta} = 1$$

$$\sigma = \operatorname{tgh} \frac{\sigma J_0}{4\theta} \qquad \ldots (13.5)$$

Pošto je u okolini kritične temperature σ blisko nuli za funkciju tgh možemo iskoristiti razvoj:

$$\underset{\varepsilon \approx 0}{\mathrm{tgh}\,\varepsilon} \approx \varepsilon - \frac{1}{3}\varepsilon^3 \qquad \ldots\ldots (13.6)$$

Ako ovo primenimo u formuli (13.5) dobijamo

$$\sigma = \sigma \frac{J_0}{4\theta} - \frac{1}{3}\sigma^3 \left(\frac{J_0}{4\theta}\right)^3 \text{ odnosno } -1 + \frac{J_0}{4\theta} = \sigma^2 \frac{1}{3}\left(\frac{J_0}{4\theta}\right)^3$$

i imamo:

$$\sigma^2 = 3\left(\frac{4\theta}{J_0}\right)^2\left(1 - \frac{4\theta}{J_0}\right)$$

uvedimo oznaku

$$\frac{J_0}{4} = \theta_{M.F.}$$

pa je

$$\sigma = \sqrt{3}\sqrt{1 - \frac{\theta}{\theta_{M.F.}}} \qquad \ldots\ldots (13.7)$$

Ova formula je dobijena tako što je $\left(\frac{4\theta}{J_0}\right)^2$ zamenjeno približno jedinicom.

Kao što vidimo sa Izingovim Hamiltonijanom za Kirijevu temperaturu dobijamo vrednost

$$\theta_{M.F.} = \frac{J_0}{4} = \frac{3}{2}I \qquad \ldots\ldots (13.8)$$

Ovo znači da nam metod molekularnog polja daje temperaturu prelaza koja je za 50% veća nego temperatura koju daje metod Tjablikova. Smatra se da je rezultat metoda Tjablikova tačniji od rezultata koji daje Izingov model, odnosno metod molekularnog polja.

paragraf 4. RAZVOJ SLOBODNE ENERGIJE PO PARAMETRU UREDJENOSTI

U prethodnom paragrafu dobili smo energiju elementarnih ekscitacija

$$E = \frac{\sigma J_0}{2} \qquad \ldots\ldots (14.1)$$

i srednji broj elementarnih ekscitacija

$$\langle P_{\vec n}^{+} P_{\vec n} \rangle = \frac{1}{2}(1-\sigma) \qquad \ldots\ldots (14.2)$$

Na osnovu ovoga možemo pisati da je unutrašnja energija po jednom čvoru rešetke

$$U = \frac{\hat{U}}{N} = \frac{\sigma J_0}{2} \cdot \frac{1}{2}(1-\sigma) = \frac{\sigma J_0}{4} - \frac{\sigma^2 J_0}{4} \qquad \ldots (14.3)$$

Potražićemo sada entropiju S sistema. Na osnovu definicije entropije kao prirodnog logaritma statističke verovatnoće nju nije teško naći s obzirom da spinovi mogu da imaju samo dva stanja: spin gore sa statističkom težinom $1-\langle P_{\vec n}^{+} P_{\vec n} \rangle$ i spin dole sa statističkom težinom $\langle P_{\vec n}^{+} P_{\vec n} \rangle$.
Tada možemo pisati za statističku verovatnoću

$$\Pi = \frac{(N_\uparrow + N_\downarrow)!}{N_\uparrow!\, N_\downarrow!} = \frac{[N(1-\langle P_{\vec n}^{+} P_{\vec n} \rangle) + N\langle P_{\vec n}^{+} P_{\vec n} \rangle]!}{[N(1-\langle P_{\vec n}^{+} P_{\vec n} \rangle)]!\,[N\langle P_{\vec n}^{+} P_{\vec n} \rangle]!} =$$

$$= \frac{N!}{[N\frac{1+\sigma}{2}]![N\frac{1-\sigma}{2}]!} \approx \frac{N^N}{[N\frac{1+\sigma}{2}]^{N\cdot\frac{1+\sigma}{2}}[N\frac{1-\sigma}{2}]^{N\cdot\frac{1-\sigma}{2}}}$$

Ako logaritmujemo imamo

$$S = k_B \ln \Pi = k_B \left\{ N\ln N - N\frac{1+\sigma}{2}\ln N - N\frac{1+\sigma}{2}\ln\frac{1+\sigma}{2} - \right.$$

$$\left. - N\frac{1-\sigma}{2}\ln N - N\frac{1-\sigma}{2}\ln\frac{1-\sigma}{2} \right\} = -k_B N \left\{ \frac{1+\sigma}{2}\ln\frac{1+\sigma}{2} + \right.$$

$$\left. + \frac{1-\sigma}{2}\ln\frac{1-\sigma}{2} \right\}$$

Sada možemo naći vrednost funkcije TS na jedan čvor rešetke

$$\frac{TS}{N} = \theta \left\{ \frac{1+\sigma}{2}\ln\frac{2}{1+\sigma} + \frac{1-\sigma}{2}\ln\frac{2}{1-\sigma} \right\} \qquad \ldots (14.4)$$

U okolini kritične temperature je $\sigma \approx 0$ pa možemo približno uzeti

$$\frac{TS}{N} = \theta \left\{ \frac{1+\sigma}{2}\ln 2 + \frac{1-\sigma}{2}\ln 2 + \frac{1+\sigma}{2}\ln\frac{1}{1+\sigma} + \frac{1-\sigma}{2}\ln\frac{1}{1-\sigma} \right\} \approx$$

$$\approx \theta \left\{ \ln 2 + \frac{1+\sigma}{2}\ln(1-\sigma) + \frac{1-\sigma}{2}\ln(1+\sigma) \right\} \approx$$

$$\approx \theta\ln 2 + \frac{\theta}{2}\left\{ (1+\sigma)(-\sigma) + (1-\sigma)\sigma \right\}$$

to jest

$$\frac{TS}{N} \approx \theta\ln 2 - \theta\sigma^2 \qquad \ldots (14.5)$$

Sada možemo formirati izraz za slobodn energiju po jednom čvoru rešetke:

$$F = \frac{\tilde{U}-TS}{N} = -\theta \ln 2 + \frac{6 J_0}{4} + \sigma^2\left(\theta - \frac{J_0}{4}\right) \quad \ldots\ldots (14.6)$$

Prema teoriji Ginsburga i Landaua fazni prelaz u sistemu događa se na oni temperaturi za koju je koeficijent uz kvadrat parametra uređenosti σ ravan nuli. Iz (14.6) vidi se da je to temperatu $\theta = \frac{J_0}{4}$ pa nam prema tome ovaj postupak daje isti rezultat kao i teorija molekularnog polja.

glava II

BOZONSKA GRINOVA FUNKCIJA U DOMENU VISOKIH KONCENTRACIJA SPINSKIH TALASA

paragraf 1. JEDNAČINA ZA GRINOVU FUNKCIJU

U prethodnoj glavi upoznali smo se sa različitim metodama analize domena kritične temperature u feromagneticima. Karakteristično je da su pri svim ovim analizama korišćeni Pauli operatori

Ovde ćemo analizu izvršiti koristeći egzaktnu bozonsku reprezentaciju za Pauli operatore

$$P_{\vec{n}} = \hat{f}^{1/2} B_{\vec{n}} \;; \quad P_{\vec{n}}^{+} = B_{\vec{n}}^{+} \hat{f}^{1/2} ; \quad P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B_{\vec{n}}^{+\nu+1} B_{\vec{n}}^{\nu+1}$$

$$\hat{f}_{\vec{n}} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B_{\vec{n}}^{+\nu} B_{\vec{n}}^{\nu} \qquad \dots (II\,1.1)$$

Hajsenbergov feromagnetik sa spinom $S = 1/2$ nalazi se u spoljašnjem magnetnom polju $\mathcal{H}$ i njegov Hamiltonijan dat je izrazom

$$H = (g\mathcal{H} + 1/2\, J_0) \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{m}\vec{n}} I_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{m}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{m}\vec{n}}' I_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^{+} P_{\vec{m}} \qquad \dots (II\,1.2)$$

Naš cilj je da nadjemo paulijonsku funkciju Grina

$$\Gamma_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \langle\langle P_{\vec{a}}(t) \,|\, P_{\vec{b}}^{+}(0) \rangle\rangle \qquad \dots (II\,1.3)$$

ali izraženu preko bozonskih funkcija

Grina.

$$G_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \langle\langle B_{\vec{a}}(t) | B^{+}_{\vec{b}}(0) \rangle\rangle \qquad \ldots\ldots (III.1.4)$$

Pošto se koeficijent razvoja u funkciji $\hat{f}_{\vec{n}}$ (formula (III.1.1)) nemože eksplicitno naći mi ćemo umesto funkcije $\Gamma_{\vec{a}\vec{b}}$ posmatrati pomoćnu funkciju $\Lambda_{\vec{a}\vec{b}}$ koja je data formulom

$$\Lambda_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \langle\langle \sqrt{1+B^{+}_{\vec{a}}(t)B_{\vec{a}}(t)}\, P_{\vec{a}}(t) | P^{+}_{\vec{b}}(0) \sqrt{1+B^{+}_{\vec{b}}(0)B_{\vec{b}}(0)} \rangle\rangle \quad (III.1.5)$$

Očigledno je da važi sledeće

$$\sqrt{1+B^{+}B}\,\sqrt{\hat{f}} = (1+B^{+}B)\hat{f} = 1 - \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B^{+\nu+1} B^{\nu+1} \quad \ldots (III.1.6)$$

pa ako ovo zamenimo u formulu (III.1.5) i izvršimo dekuplovanje uz korišćenje Vikove teoreme dobijamo:

$$\Lambda_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \Omega_1(\eta)\, G_{\vec{a}\vec{b}}(t) + \Omega_2(\eta)\, D_{\vec{a}\vec{b}}(t)\, G^{2}_{\vec{a}\vec{b}}(t) + \mathcal{O}(D^2G^3) \qquad (III.1.7)$$

gde je:

$$\Omega_1(\eta) = \frac{4\eta^4+8\eta^3+8\eta^2+4\eta+1}{(2\eta+1)^4} \qquad \Omega_2(\eta) = \frac{1}{(2\eta+1)^6}$$

$$D_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \langle\langle B^{+}_{\vec{a}}(t) | B_{\vec{b}}(0) \rangle\rangle \qquad \ldots (III.1.8)$$

Približna jednačina za Grinovu funkciju $\lambda_{\vec{a}\vec{b}}$ (približno u smislu korišćenja dekuplovanja Tjablikova kao u §2 glave I) ima oblik:

$$i\frac{d}{dt}\lambda_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \mathcal{K}\delta_{\vec{a}\vec{b}}\delta(t) - \left(\mu\mathcal{H} - \frac{\sigma J_0}{2}\right)\lambda_{\vec{a}\vec{b}}(t) -$$

$$- \frac{\sigma}{2}\sum_{\vec{m}} I_{\vec{a}\vec{m}}\lambda_{\vec{m}\vec{b}}(t) \qquad \ldots (II\,1.9)$$

gde je

$$\mathcal{K} = \left\langle\left[\sqrt{1+B_{\vec{a}}^{+}(0)B_{\vec{a}}(0)}\;P_{\vec{a}}(0),\; P_{\vec{a}}^{+}(0)\sqrt{1+B_{\vec{a}}^{+}(0)B_{\vec{a}}(0)}\right]\right\rangle$$

Osnovni problem je povezati pomoćnu funkciju $\lambda_{\vec{a}\vec{b}}$ sa fizičkom funkcijom $\Gamma_{\vec{a}\vec{b}}(t)$ te da bismo to postigli iskoristićemo sledeće dekuplovanje

$$\langle\langle\sqrt{1+B^{+}B}\;P/P^{+}\sqrt{1+B^{+}B}\rangle\rangle \approx (1+2\langle B^{+}B\rangle)\langle\langle P/P^{+}\rangle\rangle \qquad \ldots (II\,1.10)$$

znači prelaz od $\Gamma_{\vec{a}\vec{b}}$ na $\lambda_{\vec{a}\vec{b}}$ izvršićemo tako što ćemo u jednačini (II 1.9) umesto korelatora $\mathcal{K}$ staviti ne vrednost koja je navedena u (II 1.9) već:

$$\mathcal{K} = (1+2\langle B^{+}B\rangle)\,\sigma \qquad \ldots (II\,1.11)$$

tada jednačina (II 1.9) postaje

$$i\frac{d}{dt}\Lambda_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \frac{i\sigma}{2\pi}(1+2\langle B^+B\rangle) + (\mu\mathcal{H} + \frac{\sigma J_0}{2})\Lambda_{\vec{a}\vec{b}}(t) + + \frac{\sigma}{2}\sum_{\vec{m}} I_{\vec{a}\vec{m}}\Lambda_{\vec{m}\vec{b}}(t) \quad \ldots\ldots (II\ 1.12)$$

Prelazeći na Furijeove komponente

$$\Lambda_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, e^{-iEt}\mathcal{N}^{-1}\sum_{\vec{k}}\Lambda_{\vec{k}}(E)\, e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})} \quad \ldots (II\ 1.13)$$

i koristeći relaciju $D_{\vec{k}}(-E) = G_{\vec{k}}(E)$
dobijamo

$$\Lambda_{\vec{k}}(E) = \Omega_1(\eta)G_{\vec{k}}(E) + \frac{\Omega_2(\eta)}{\mathcal{N}^2}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 dE_2\, G_{\vec{q}_1}(E_1) \times \times G_{\vec{q}_2}(E_2)\, G_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}(E-E_1+E_2) \quad \ldots (II\ 1.14)$$

i konačno za bozonsku funkciju Grina imamo

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{i}{2\pi}\,\frac{(1+2\langle B^+B\rangle)\sigma\,\varphi(\eta)}{E-E_{\vec{k}}} + \frac{\Omega_2(\eta)\varphi(\eta)}{\mathcal{N}^2}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 dE_2 \times \times G_{\vec{q}_2}(E_2)\, G_{\vec{q}_1}(E_1)\, G_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}(E-E_1+E_2) \quad \ldots (II\ 1.15)$$

gde su $\mathcal{N}$ broj atoma u kristalu i

$$\varphi(\eta) = \Omega^{-1}(\eta)\ ; \quad E_{\vec{k}} = \mu\mathcal{H} + \frac{\sigma J_0}{2}\gamma_{\vec{k}}\ ; \quad \gamma_{\vec{k}} = 1 - \frac{J_{\vec{k}}}{J_0} \quad \ldots (II\ 1.16)$$

Izvršićemo analizu sistema u nultoj aproksimaciji, a to znači da ćemo uzeti

$\varphi(\eta)=1$, $\langle B^+B\rangle=\eta$ i u formuli (III 1.16) zanemarićemo drugi član na desnoj strani. Tada je

$$\sigma = 1-2\langle P^+P\rangle = \sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^\nu}{\nu!}\langle B^{+\nu}B^\nu\rangle = \frac{1}{1+2\eta} \quad \ldots\ldots (III\,1.17)$$

gde je $\eta = \frac{1}{e^{E_k/\theta}-1}$ po poznatom proceduru dobijamo

$$\frac{\sigma^{(0)}}{N}\sum_{\vec{k}} cth\,\frac{E_{\vec{k}}}{2\theta} = 1 \quad \ldots\ldots (III\,1.18)$$

što nam kao što već znamo iz § 2. glave I daje poznati rezultat Tjablikova.

Sada ćemo potražiti rezultat u nešto tačnijoj aproksimaciji. Ako izvršimo iteraciju izraza (III 1.15) uzimajući da je u nultoj aproksimaciji $G_{\vec{k}}(E) = \frac{i\sigma(1+2\langle B^+B\rangle)\varphi(\eta)}{2\pi(E-E_{\vec{k}})}$ dobijamo

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{i\sigma(1+2\langle B^+B\rangle)\varphi(\eta)}{2\pi(E-E_{\vec{k}})}\Big[1+\frac{\sigma^2(1+2\langle B^+B\rangle)^2\varphi^3(\eta)Q_2(\eta)}{2N^2}\times$$

$$\times\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\frac{E-E_{\vec{k}}}{E-E_{\vec{q}_1}+E_{\vec{q}_2}-E_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}}\Big]^{-1} \quad \ldots\ldots (III\,1.19)$$

Ako izraz u srednjoj zagradi jed. (III 1.19) izjednačimo sa nulom nalazimo dopunski pol bozonske Grinove funkcije

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \mu\mathcal{H} + \frac{\hbar^2K^2}{2m}\left(1+\Psi_\theta\,\frac{Q^4}{K^4}\right) \quad \ldots\ldots (III\,1.20)$$

gde je: $m = \frac{\hbar^2}{\sigma I a^2}$ efektivna masa magnona i Q granični vektor prve Briluenove zone.

Uzimajući

$$\sigma = \frac{1}{1+2\langle B^+B\rangle} \; ; \; \langle B^+B\rangle = 2\int_{-\infty}^{+\infty} dE \, Re\, G_{\vec{k}}(E)\left(e^{\frac{E}{\theta}}-1\right)^{-1} \quad \ldots (II\ 1.21)$$

dobijamo konačni skup formula za bozonsku Grinovu funkciju sistema:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{i}{2\pi}\,\frac{\varphi(\eta)\,\xi(\eta)}{E_{\vec{k}}-\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}}\left[\frac{1}{E-E_{\vec{k}}}-\frac{1}{E-\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}}\right]$$

$$\xi(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\tilde{\Psi}_\theta\,\frac{Q^4}{K^2} \; ; \quad \tilde{\Psi}_\theta = \frac{16}{3}\,\frac{(4\eta^4+8\eta^3+8\eta^2+4\eta+1)^3}{(2\eta+1)^6}$$

$$\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}} = \mu\mathcal{H} + \frac{\hbar^2K^2}{2m}\left(1+\tilde{\Psi}_\theta\,\frac{Q^4}{K^4}\right) \quad \ldots (II\ 1.22)$$

$$\langle B^+_{\vec{k}}B_{\vec{k}}\rangle = \varphi(\eta)\left[\frac{1}{e^{E_{\vec{k}}/\theta}-1}-\frac{1}{e^{\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}/\theta}-1}\right]$$

Takođe dobijamo i konačni izraz za magnetizaciju σ.

$$\sigma = \left[1+\frac{2\varphi(\eta)}{N}\sum_{\vec{k}}\left(\frac{1}{e^{E_{\vec{k}}/\theta}-1}-\frac{1}{e^{\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}/\theta}-1}\right)\right]^{-1} \ldots (II\ 1.23)$$

paragraf 2. KIRI - VAJSOV ZAKON I RAZVOJ SLOBODNE ENERGIJE

Koristeći formule (II 1.22) i (II 1.23) mi ćemo prvo izvršiti analizu sistema u paramagnetnoj fazi i to ispitujući njegovu magnetnu susceptibilnost koja se definiše kao

$$\chi = \lim_{\mathcal{H}\to 0} \frac{\partial \sigma}{\partial \mathcal{H}} \quad \cdots\cdots (II\,2.1)$$

S obzirom da je popravka od dopunskog nivoa $\tilde{\mathcal{E}}_{\vec{k}}$ u izrazu za σ proporcionalna $e^{-\frac{const^2}{\sigma^6}}$ dovoljno je analizirati χ samo za nivo $E_{\vec{k}}$. Tada je

$$\sigma^{-1} = 1 + \frac{2\varphi(\eta)}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{E_{\vec{k}}/\theta} - 1} \quad \cdots\cdots (II\,2.2)$$

i odavde

$$\chi^{(0)} = 2\mu \lim_{\sigma\to 0} \lim_{\mathcal{H}\to 0} \left[1 + \frac{2\varphi(\eta)}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{E_{\vec{k}}/\theta} - 1}\right]^{-2} \times$$
$$\times \left[\frac{\varphi(\eta)}{\mathcal{N}\theta} \sum_{\vec{k}} \frac{\frac{\partial E_{\vec{k}}}{\partial \sigma} e^{E_{\vec{k}}/\theta}}{(e^{E_{\vec{k}}/\theta} - 1)^2} - \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial \mathcal{H}} \cdot \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{E_{\vec{k}}/\theta} - 1}\right] \quad \cdots\cdots (II\,2.3)$$

Ako se u (II 2.3) zanemare članovi koji teže ka nuli proporcionalno σ^2 onda nalazimo

$$\chi^{(0)} = \frac{\mu^2 Z}{8C^2} \frac{1}{\theta - \theta_c} \quad \cdots\cdots (II\,2.4)$$

gde je

$$Z = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\gamma_{\vec{k}}^2} \;;\; C = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\gamma_{\vec{k}}} \;;\; \theta_c = \frac{\Theta_{M.F.}}{4C} \;;\; \Theta_{M.F.} = \frac{J_0}{4} \quad \ldots (II\,2.5)$$

Kao što vidimo χ ima singularitet u tačci θ_c koja je ravna šestom delu one temperature koju za Kiri-Vajsov zakon daje metod molekulskog polja. To jest bozonska analiza feromagnetika daje za temperaturu preloza $\theta_c = \frac{1}{4} I$

Dalju analizu vršićemo razvijajući slobodnu energiju sistema po stepenima parametra σ. Koristeći formule iz §4. glave I i razvijajući formulu (II 1.23) sa tačnošću do $\sigma^{7/2}$ zaključno, mi nalazimo sledeći razvoj za redukovanu slobodnu energiju: $W = \theta \ln 2 - \theta_{M.F}\sigma - (\frac{\theta}{2} - \theta_{M.F})a_0^2 - \frac{\theta}{12} a_0^4$

$$W = A_2(\theta)\sigma^2 + A_3(\theta)\sigma^3 + A_{7/2}(\theta)\sigma^{7/2} + A_4(\theta)\sigma^4 \quad (II\,2.6)$$

gde su:

$$A_2(\theta) = a_0 a_2 \left[\left(\frac{a_0^2}{3}+1\right)\theta - 2\theta_{M.F.}\right] ; \quad A_3 = a_0 a_3 \left[\left(\frac{a_0^2}{3}+1\right)\theta - 2\theta_{M.F.}\right]$$

$$A_{7/2} = a_0 a_{7/2} \left[\left(\frac{a_0^2}{6}+1\right)\theta - 2\theta_{M.F.}\right] ; \quad A_4 = \frac{a_2^2}{2}\left[(1+a_0^2)\theta - 2\theta_{M.F.}\right]$$

i

$$t = \frac{2\theta_{M.F}}{\theta} \quad (II\,2.7)$$

$$a_0 = \frac{8C}{3t} - \frac{1}{3} ; \quad a_2 = -\frac{\beta t}{3} ; \quad a_3 = \frac{2t^2}{3C^2} ; \quad a_{7/2} = -\frac{8\tilde{B}t^{5/2}}{3}$$

$$\beta = \frac{4}{C} - \frac{2}{3} ; \quad \tilde{B} = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)^{5/3}(2\pi)^{-1/6} C^{-3}$$

Interesantno je zapaziti da u razvoju (II 2.6) koeficijenti uz različite stepene σ postaju ravni nuli po sledećoj šemi

$A_2 = A_3 = 0$ za $\Theta_3 = 1.01162\ \Theta_{M.F.}$

$A_{7/2} = 0$ za $\Theta_{7/2} = 1.17745\ \Theta_{M.F.}$ $\quad\cdots$ (II 2.8)

$A_4 = 0$ za $\Theta_4 = 0.78208\ \Theta_{M.F.}$

Sve ove temperature na osnovu teorije Ginsburga i Landaua mogu da budu specifične za ponašanje feromagneta. Analizu ovih temperatura izvršićemo u sledećem paragrafu, a ovde ćemo detaljnije ponašanje σ parametra. Iz formule (II 1.23) dobija se ovakav izraz za σ

$$\sigma = a_0(t) + a_2(t)\sigma^2 + a_3(t)\sigma^3 + a_{7/2}(t)\sigma^{7/2} + O(\sigma^4) \qquad \cdots (II\,2.9)$$

Ako ovu jednačinu diferenciramo po Θ i izjednačimo sa nulom dobijamo da na temperaturi

$\Theta_{cc} = 0.88595\ \Theta_{M.F}$ $\quad\cdots$ (II 2.10)

parametar σ poprima svoju maksimalnu vrednost koja iznosi $\sigma = 0.59$

Ako stavimo $\frac{\partial \sigma}{\partial \Theta} = \infty$ tj. potražimo singularitet specifične toplote pri stalnoj

zapremini dobijamo da na temperaturi
$\theta_\infty = 0.27131\ \theta_{M.F.}$ . . . (II2.11)
specifična toplota na stalnoj zapremini postaje beskonačna. S obzirom da susceptibilnost χ ima singularitet na temperaturi $\theta_o = 0.16486\ \theta_{M.F.}$ što sledi iz formule (II2.5) mi dolazimo do zaključka da se u feromagnetiku ne vrši čist fazni prelaz druge vrste već prelaz prve vrste ali blizak po karakteristikama faznom prelazu druge vrste. Kao što se zna kod čistog faznog prelaza druge vrste, C_v i χ imaju singularitet na istoj temperaturi i ovde se kao što vidimo ove temperature razlikuju za oko 100°K za jake feromagnetike i oko 10°K za slabe.

Ovakvo ponašanje parametra uređenosti pri kome posle $\theta_c = 0.16486\ \theta_{M.F.}$ on ne postaje ravan nuli već doseže maksimum na temperaturi $\theta_{cc} = 0.88595\ \theta_{M.F.}$, pokazuje da se na θ_c, odnosno u njenoj blizini (na bliskoj temperaturi $\theta_\infty = 0.27131\ \theta_{MF}$) ne vrši fazni prelaz iz feromagnetne u paramagnetnu fazu već fazni prelaz iz feromagnetne u antiferomagnetnu fazu.

Ovakva pojava tipična je za feromagnetike koji pripadaju grupi lantanida. Temperaturski razmak izmedju Θ_{∞} i Θ_{oc} u poredjenju sa eksperimentima pokazuje da se u ovakvu teoriju najbolje uklapaju elementi Erbijum i Tulijum.

paragraf 3. PARAMAGNETNA APROKSIMACIJA ZA SLOBODNU ENERGIJU

Kao što je ranije rečeno ovde ćemo izvršiti analizu šeme temperatura (II2.8). Da bismo ovo mogli da učinimo koristićemo razvoj (II2.6) i grubu aproksimaciju da za $\theta > \theta_c = 0.16486\,\theta_{MF}$ σ postaje ravno nuli i da sistem ne prelazi u antiferomagnetnu fazu kao što smo u prethodnom paragrafu videli, već u paramagnetnu fazu. U tom smislu sve rezultate ovog paragrafa nazivamo paramagnetnom aproksimacijom.

Ako uzmemo $\sigma_{\mathcal{H}=0} \approx 0$ za $\theta > \theta_c$ onda na osnovu formule (II2.4) možemo uzeti

$$\sigma = \sigma_{\mathcal{H}=0} + \frac{\mathcal{H}}{\mu}\chi \approx \frac{\omega}{\theta-\theta_c} \quad ; \quad \omega = \frac{\mu \mathcal{H} Z}{32 C^2} \qquad \cdots (II3.1)$$

u ovoj aproksimaciji formula (II2.6) prelazi u

$$W = C_2(\theta)\frac{\theta-\theta_3}{\theta-\theta_c}\omega^2 + C_3(\theta)\frac{\theta-\theta_3}{(\theta-\theta_c)^2}\omega^3 + C_{7/2}(\theta)\frac{\theta-\theta_{7/2}}{(\theta-\theta_c)^{5/2}}\omega^{7/2} +$$
$$+ C_4(t)\frac{\theta-\theta_4}{(\theta-\theta_c)^4}\omega^4 \qquad \cdots\cdots (II3.2)$$

gde su konstante C_i date sa:

$$C_2(\theta) = -\theta_{M.F}^{-1}(3.61970\,\tau + 2.46826 + 5.25166\,\tau^{-1})$$
$$C_3(\theta) = \theta_{M.F}^{-1}(3.19569 + 2.17911\,\tau^{-1} + 4.63648\,\tau^{-2}) \quad (II\,3.3)$$
$$C_{7/2}(\theta) = -\theta_{M.F}^{-1}(4.31148\,\tau^{-1/2} + 3.65492\,\tau^{-3/2} + 10.74879\,\tau^{-5/2})$$
$$C_4(\theta) = 3.52969 + 1.59664\,\tau^{-1} + 2.20853\,\tau^{-2}$$

gde je $\tau = \frac{\theta}{\theta_{M.F}}$ ....(II 3.4)

Pošto je spoljašnje magnetno polje $\mathcal{H}$ proizvoljno, proizvoljan je i parametar ω koji figuriše u razvoju (II3.2). Da bismo teoriju učinili nezavisnom od proizvoljnog parametra ω, ovaj ćemo odrediti iz uslova

$$\frac{\partial W}{\partial \omega} = 0 \quad \text{.....(II3.5)}$$

Za temperature koje su bliske θ_c uslov (II3.5) se približno svodi na

$$7C_{7/2}(\theta - \theta_{7/2}) + 8C_4\,\frac{\theta-\theta_4}{(\theta-\theta_c)^{3/2}}\,\omega^{1/2} = 0$$
$$\omega = X^2(\theta-\theta_c)^3 \quad ; \quad X = -\frac{7C_{7/2}}{8C_4}\,\frac{\theta-\theta_{7/2}}{\theta-\theta_4} \quad \text{...(II 3.6)}$$

Ako dobijenu vrednost ω zamenimo u (II3.2) dobijamo

$$W = X^4(\theta-\theta_3)(\theta-\theta_c)^5[C_2 + C_3X(\theta-\theta_c)^2] + X^8(\theta-\theta_c)^2 \times$$

$$\times\left[(\Theta-\Theta_{7/2})\,C_{7/2}+(\Theta-\Theta_c)(\Theta-\Theta_4)\,C_4\right] \qquad \ldots (II\,3.7)$$

Odavde se lako vidi da funkcija W ima singularitet za $\Theta=\Theta_4$ i da dobija maksimalnu vrednost koja je jednaka nuli na temperaturi $\Theta=\Theta_{7/2}$. U okolini temperature $\Theta=\Theta_3$ funkcija W ima prevoj. Ovo znači da za $\Theta=\Theta_4$ imamo čist fazni prelaz prve vrste jer na ovoj temperaturi imamo singularitet slobodne energije. Maksimum slobodne energije za $\Theta=\Theta_{7/2}$ označava nestabilnost faze u koju je sistem prešao posle temperature $\Theta=\Theta_4$.

Na osnovu ovih rezultata (koji su kao što je već naglašeno aproksimativni) možemo dati ovakvu sliku ponašanja feromagnetika: za $\Theta<\Theta_c$ imamo feromagnetnu fazu to jest feromagnetni kristal. Na temperaturi $\Theta=\Theta_c$ feromagnetni kristal prelazi u paramagnetni kristal. Na temperaturi $\Theta=\Theta_4$ dogadja se fazni prelaz prve vrste koji se sastoji u tome što paramagnetni kristal postaje paramagnetna tečnost. Na temperaturi $\Theta=\Theta_{7/2}$ zbog prisustva dopunskog nivoa $E=\tilde{E}_k$ paramagnetna tečnost postaje nestabilna sa težnjom da jojse spinovi feromagnetno orijentišu.

ZAKLJUČAK

Analize koje su izvršene pokazale su da kinematička interakcija spinskih talasa dovodi do pojave dopunskog energetskog nivoa u sistemu spinskih talasa i da je uloga ovog nivoa značajna samo u okolini temperature prelaza.

Zahvaljujući postojanju ovog nivoa u feromagnetiku se ne vrši čist fazni prelaz druge vrste (kao što to sledi iz teorija koje koriste spinske operatore) već fazni prelaz prve vrste blizak faznom prelazu druge vrste. U zavisnosti od kristalne strukture ovaj fazni prelaz može da bude ili tipa fero - antifero, kao u lantanidima, ili tipa fero - para pri čemu u paramagnetnoj fazi na višim temperaturama dolazi do čistog faznog prelaza prve vrste tipa paramagnetni kristal - paramagnetna tečnost. Ukoliko se ocenjuju ova dva pomenuta rezultata onda je prvi bliži istini jer neki brojni rezultati za ovaj slučaj uklapaju se na zadovoljavajući način u rezultate eksperimenata za fero - antifero prelaz u lantanidima.

LITERATURA:

1. С.В. ТЯБЛИКОВ: Методы квантовой теории магнетизма, издание: Наука - Москва, (1975)
2. В.М. АГРАНОВИЧ, Б.С. ТОШИЧ: ЖЭТФ 53 149, (1967)
3. F.J. DYSON: Phys. Rev. 102 1217, 1230 (1956)
4. L.D. LANDAU, E.M. LIFŠIC: Statistička fizika, Naučna knjiga - Beograd (1960)
5. В.Г. ВАКС: Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектрика, Наука-Москва (1973.)
6. К.П. БЕЛОВ, М.А. БЕЛЯНЧИКОВА, Р.З. ЛЕВИТИН, С.А. НИКИТИН: Феро и антиферомагнетици в лантаноидах, Наука - Москва (1965)