D-106

KRAVCEV VLADIMIR

D I P L O M S K I   R A D

ANALIZA TERMODINAMIČKIH KARAKTERISTIKA FEROMAGNETIKA SA DVE PODREŠETKE

Zahvaljujem se Dr Bratislavu Tošiću na pomoći prilikom izbora teme, korisnim i konkretnim savetima prilikom izrade ovoga rada

Novi Sad, Oktobar 1973. godine

U V O D

Cilj ovoga rada je da se izvrši termodinamička analiza feromagnetika sa dve podrešetke. Prilikom ove analize biće uglavnom korišćen metod dvovremenskih temparaturskih funkcija Grina. Jednačine za funkcije Grina biće zapisivane preko Furije likova spinskih operatora. Na niskim temparaturama Furije likovi spinskih operatora biće izraženi preko Boze operatora i dekuplovanje lanca jednačina vršiće se na osnovu Vikove teoreme. Na visokim temperaturama dekuplovanje će se vršiti standardnom aproksimacijom haotičnih faza. Ovakav prilaz biće prvo testiran na primeru feromagnetika sa prostom rešetkom, s ciljem da se na niskim temparaturama dobije poznati Dajsonov rezultat, a na visokim, takodje poznat rezultat ~~Bej~~ Tjablikova. Na kraju isti metod biće primenjen na feromagnetik sa dve podrešetke sa ciljem da se ispitaju njegove termodinamičke osobine.

Библиотека Природно-математичког факултета Нови Сад

I GLAVA

ELEMENTI TEORIJE MAGNETIZMA I OPIS MAGNETIČNIH METODA KOJE ĆE SE KORISTITI

I-1. VRSTE MAGNETNIH MATERIJALA

Klasična podela magnetnih materijala na različite tipove bazira na pojmu magnetne suseptibilnosti χ koja predstavlja koeficijent proporcionalnosti izmedju magnetnog momenta M materijala i spoljašnjeg magnetnog polja $\mathcal{H}$ u kome se magnetik nalazi. Pošto se magnetni momenti uvek orijentišu duž spoljašnjeg polja veza izmedju magnetng momenta spoljašnjeg polja se može napisati u skalarnom obliku na sledeći način:

$$M = \chi \mathcal{H}$$

Ako je χ negativna veličina onda se takav materijal naziva dijamagnetni ili prosto dijamegnetikom. Ako je χ pozitivna veličina onda razlikujemo dva slučaja:

a/ χ pozitivno i malo - tada je materijal paramagnetan

b/ χ pozitivno i veliko - tada je materijal feromagnetan.

Ova fonomenološka podela magnetnih materijala je dosta gruba ali ipak dobra da magnetike razvrsta u tri osnovne klase. Finiju podelu možemo praviti samo na osnovu mikroskopskih karakteristika magnetnih materijala. Pošto će cilj našeg rada biti ispitivanje feromagnetnih materijala mi ćemo ovu finiju podelu izvršiti samo za ovu klasu magnetika. Medjutim, pre nego što predjemo na klasifikaciju feromagnetika moramo pre ~~toga~~ svega razjasniti koji su atomski fenomeni odgovorni za pojavu magnetizma uopšte.

Prva ideja za mikroskopsko objašnjenje magnetnih fenomena bila je Veberova ideja o magnetiku kao sistemu uredjenih elementarnih magneta. Ova ideja, ima taj nedostatak što se o prirodi ovih elementarnih magneta malo objašnjavalo a još manje o prorodi sila izmedju njih. Ono što je dobro i što je i danas osnovna teorija magnetizma je to da se magnetik razmatra kao sistem uredjenih objekata koji se povišenjem temperature ili nekim spoljnim mehaničkim dejstvom može "razurediti" tj. feromagnetici i pojave u njima danas se razmatraju u granicama opštih order-disorder teorija.

Savremena mikroteorija magnetizma prihvatajući Veberovu ideju o sistemu uredjenih elemenata sa magnetnim svojstvima i imala je zadatak da utvrdi koji su ti uredjeni elementi i kakva je priroda sila koja izmedju njih deluje. Odgovor na prvo pitanje pronadjen je relativno lako na osnovu eksperimenata i poznavanja strukture omotača atoma feromagnetnih materijala, i konstatovano da su elementi odgovorni za megnetne fenomene spinovi elektrona nepopunjenih 3d ljuski za jake magnetike /F_e,C_o,N_i/ i spinovi nepopunjenih 4f ljuski za slabe feromagnetike /retke zemlje/. Odgovor na drugo pitanje pronadjen je nešto teže. U početku se mislilo da je magnetizam posledica dipol-dipolnih interakcija izmedju magnetnih momenata elektrona nepopunjenih ljuski ali se ispostavilo da je konstanta ovih interakcija reda veličine $10K_B$ /K_B Bolcmanova konstanta/ i zbog toga ova ideja nije mogla da se održi, jer eksperiment pokazuje da su tačke prelaza u feromagneticima reda veličine $1000K_B$. Pošto je tačka prelaza, grubo govoreći, reda veličine konstante interacija izmedju atoma očigledno je da ako bi ideja o dipol-dipolnim interakcijama bila dobra onda ne bismo imali ni jedan feromagnetik sa tačkom prelaza višem od 10-20^{o}K. Druga ideja izgledala je u neku ruku paradoksalna i zasnivala se na mišljenju da su za magnetne fenomene odgovorne električne sile izmedju elektrona. Kao što je poznato u kvantno-mehaničkoj interpretaciji elektroni se medjusobno ne razlikuju, a talasna funkcija za sistem od 2 elektrona mora biti antisimetrična kombinacija talasnih funkcija svakog od ovih elektrona da bi bio zadovoljen Paulijev princip isključenja. Ako energiju interakcije izmedju dva elektrona usrednjimo po aktisimetričnim funkcijama onda se u ovoj srednjoj energiji pojavljuje jedan dopunski član koji se klasično uopšte ne može objasniti i taj dopunski član naziva se energija izmene. Ocenjivanje reda veličine energije izmene pokazalo je da je ona za par elektrona iznosi 1000K_{B} i ovo je konačno rešilo dilemu o prirodi sila interakcije u magnetizmu, tj. konačno se zna da su sile interakcije u magnetizmu sile izmene izmedju elektrona tj. da su one čisto kvantnomehaničkog porekla. Otuda je savremeno gledanje na magnetne fenomene sledeće: feromagnet je sistem uredjenih spinova koji izmedju sebe deluju silama izmene.

Na osnovu ovoga izvršena je finija klasifikacija feromagnetnih materijala.

Ako magnetni kristal ima prostu rešetku sastavljenu od spinova iste veličine S onda se takav kristal naziva feromagnetik.

Ako je magnetni kristal sastavljen od dve podrešetke pri čemu obadve imaju spinove iste veličine ali antiparalelne, onda je takav kristal antiferomagnetik.

Magnetni kristali sa više podrešetki od kojih je svaka sastavljena od različitih spinova nazivaju se ferimagnetici.

Posebnu klasu feromagnetika koju čine kristali sa više podrešetki a koji imaju različite spinove, ali su svi spinovi u svim podrešetkama medjusobno paralelni ponakad se u lìtaraturi nazivaju feromagneticima sa n podrešetki.

Naša dalja istraživanja biće posvećena magnetnom kristalu sa dve podrešetke i paralelnim spinovima u obe podrešetke koji ćemo u daljem tekstu nazivati feromagnetikom sa dve podrešetke.

I-2. ~~SISTEM~~ SPINSKI OPERATORI I HAJZENBERGOV MODEL

Kao što smo videli u prethodnom paragrafu za pojavu magnetizma odgovorni su spinovi elektrona nepopunjenih unutrašnjih ljuski. Treba odmah napomenuti da iako svaki elektron ima spin $S = \frac{1}{2}$ to ne znači da elektroni nepopunjenih ljuski učestvuju u magnetnim fenomenima sa svojim spinovima individualno. Svi elektroni nepopunjene ljuske kada su atomi vezani u kristal, u zavisnosti od prirode sila kojom su vezani atomi stvaraju jedan sumarni tzv. efektivni spin ljuski i ovi efektivni spinovi i interakcija izmedju njih obrazuju magnetni kristal koji ne mora da se poklapa sa hemijskom kristalnom rešetkom. Ovaj efektivni spin ~~obrazuje~~ ОДРЕЂУЈЕ se eksperimentalno od kristala do kristala. Drugim rečima, na osnovu eksperimentalnih činjenica, zna se da efektivni spin nije sumarni spin svih elektrona 3d ljuski nego spin jednog dela ovih elektrona koji svoje spinove nisu sparili antiparalelno. Medjutim, nezavisno od ovoga, očigledno da se u magnetizmu mora raditi sa spinovima jednakim i većim od 1/2 pa je zbog toga neophodno ~~uporediti~~ УПОЗНАТИ sa osobinama spinskih operatora za spin proizvoljnog intenziteta S.

Poznato je da je spin čisto kvantno mehaničko svojstvo elementarnih čestica i može se shvatiti kao neki unutrašnji momenat elementarnih čestica. Mada ovakva ideja u neku ruku negira ~~ne gleda~~ elementarnost čestica ona ~~bar~~ u jednom elementu sebe potpuno opravdava. Radi se naime o tome da ako se spin shvati kao momenat i komutacione relacije za spinske operatore definišu kao komutacione relacije za komponente momenta onda ovo ne dolazi u protivurečnost ni sa eksperimentom ni sa preciznijim teorijama spina kao efekta relativističkih kvantno-mehaničkih fenomena.

Operator spina je vektorski operator i može se napisati kao suma vektora duž komponenata pravouglog koordinatnog sistema tj.:

$$\vec{S} = S^x \vec{i} + S^y \vec{j} + S^z \vec{k} \quad \ldots \quad /I.2.1/$$

ovde su $\vec{i}$, $\vec{j}$ i $\vec{k}$ ortovi pravouglog sistema S^x, S^y i S^z komponente spina. Najlakše je zapamtiti komutacione relacije za spinske operatore po analogiji sa vektorskim produktima ortova osa tj.; na osnovu:

$$\vec{i} \times \vec{j} = \vec{k} \; ; \; \vec{j} \times \vec{k} = \vec{i} \; ; \; \vec{k} \times \vec{i} = \vec{j} \quad \ldots \quad /I.2.2/$$

Mi po analogiji možemo pisati

$$[S^x, S^y] = iS^z \; ; \; [S^y, S^z] = iS^x \; ; [S^z, S^x] = iS^y \ldots /I.2.3/$$

treba odmah napomenuti da su komutacione relacije /I.2.3/ opšte komutacione relacije za komponente momenta u kvantnoj mehanici ispisane u sistemu jedinica $\hbar = C = 1$.

Dalje transformisanje komutacionih relacija za spinske operatore vršićemo u punoj analogiji sa komutacionim relacijama za orbitalni momenat elektrona. Kao što znamo iz teorije orbitalnog momenta, ako z osu odaberemo za osu kvantizacije onda operatori $L^+ = L^x + iL^y$ i $L^- = L^x - iL^y$ delujući u sistemu svojstvenih funkcija operatora L^z povećavaju odnosno smanjuju L^z projekciju za jedinicu i to tako što je operator L^+ povećava a L^z smanjuje.

Ako magnet shvatimo kao sistem uredjenih spinova i to tako da u osnovnom stanju z projekcije svih spinova imaju maksimalnu vrednost S (S je intenzitet spina), a pobudjenja magnetnog sistema shvatimo kao narušavanje ovoga reda u osnovnom stanju tj. kao menjanje vrednosti z projekcije spina, onda je jasno da uvodjenjem operatora $S^+ = S^x + iS^y$ i $S^- = S^x - iS^y$ ima fizičkog smisla jer su upravo oni odgovorni za menjanje veličine z projekcije. Zbog toga ćemo ovde navesti komutacionu relaciju za operator S^+ i S^-.

$$S^+S^- = (S^x+iS^y)(S^x-iS^y) = (S^x)^2+(S^y)^2 - i[S^x,S^y]$$
$$S^-S^+ = (S^x-iS^y)(S^x+iS^y) = (S^x)^2+(S^y)^2 + i[S^x,S^y]$$

Ako ove dve relacije oduzmemo i za komutator $[S^x, S^y]$ zamenimo njegovu vrednost iz (I.2.3) dobićemo

$$[S^+,S^-] = 2S^z \quad . \; . \; . \; . \qquad /I.2.4/$$

Ako gornju jednačinu saberemo i za komutator $[S^x, S^y]$ zamenimo njegovu vrednost iz (I.2.3) dobićemo

$$\{S^+,S^-\} = 2(S^x)^2+2(S^y)^2 = 2[(S^x)^2+(S^y)^2+(S^z)^2]-2(S^z)^2$$

tj.

$$\{S^+,S^-\} = 2S(S+1)-2(S^z)^2 \quad . \; . \; . \; . \qquad /I.2.5/$$

Pri dobijanju rezultata (I.2.5) korišćena je činjenica da su svojstvene vrednosti kvadrata operatora S date kao S (S+1) što je u punoj analogiji sa teorijom orbitalnog momenta.

Do sada dobijene formule u kojima su date komutacione relacije za spinske operatore definišu tzv. kinematiku spinskih sistema. Pošto je magnet sistem uredjenih spinova ali na raznim čvorovima kristalne rešetke neophodno je spinske operatore snabdeti još jednim indeksom koji označava čvor rešetke u kome se nalazi atom. Spinski operatori za razne čvorove deluju svaki u svom prostoru talasnih funkcija i očigledno je da zbog toga za različite čvorove oni moraju da komutiraju. Zbog toga ako sa $\vec{n}$ i $\vec{m}$ obeležimo dva različita čvora rešetke i sa $\vec{S}_{\vec{n}}$ i $\vec{S}_{\vec{m}}$ spinove u tim čvorovima, onda relaciju (I.2.4) možemo generalisati na sledeći način:

$$[S^+_{\vec{n}}, S^-_{\vec{m}}] = 2S^z_{\vec{n}}\delta_{n,m}$$

Pošto smo ovde rešili problem kinematike spinskih operatora postavlja se pitanje kakav oblik treba da ima Hamiltonijan sistema uredjenih spinova po čvorovima rešetke. Ovakav Hamiltonijan se može izvesti na osnovu najopštijih razmatranja. Hamiltonijan kao operator energije mora biti skalarna veličina, pa je očigledno da je Hamiltonijan za dva spina na dva čvora rešetke $\vec{n}$ i $\vec{m}$ proporcionalan skalarnom proizvodu $\overline{S}_{\vec{n}} \cdot \overline{S}_{\vec{m}}$ spinova u ovim čvorovima. Faktor proporcionalnosti je kao što smo već videli posledica sile izmene izmedju elektrona i obeležava se sa $I_{\vec{n},\vec{m}}$ i naziva se intégral izmene. Prema tome, pošto je za dva čvora $H_{\vec{n},\vec{m}} = -\frac{1}{2} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{m}}$ očigledno je da će ukupni Hamiltonijan kristala biti suma izraza $H_{\vec{n}\vec{m}}$ po svim čvorovima rešetke, tj.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}} \vec{S}_{\vec{m}} \qquad - \ (\vec{n} \neq \vec{m}) \qquad /I.2.7./$$

Treba napomenuti da je faktor 1/2 došao usled toga što je interakcija u smeru $\vec{mn}$ ista kao interakcija u smeru $\vec{nm}$ pa bi bez ovog faktora energija fila udvojena. Znak - je izabran zbog toga da bi sistem imao negativnu energiju osnovnog stanja tj. da bi se nalazio u potencijalnoj jami a ne u potencijalnom bedemu. Ako se posmatrani sistem nalazi u spoljašnjem magnetnom polju $\vec{\mathcal{H}}$ onda je Hamiltonijan (I.2.7) ima dodatni član koji predstavlja sumu energija po čvorovima koja dolazi usled prisustva magnetnog polja. Kao što je poznato spinovi se uvek orijentišu duž magnetnog polja pa je energija koja dolazi usled prisustva magnetnog polja data sa $-\mu_B \vec{S}_{\vec{n}} \vec{\mathcal{H}} = -\mu_B S^z_{\vec{n}} \mathcal{H}$ za jedan čvor rešetke a za ceo kristal kao suma po svim čvorovima.

Prema tome kompletan Hamiltonijan sistema za sistem spinova u magnetnom polju pri čemu uzimamo z osu za osu kvantizacije ima oblik:

$$H = -\mu_B \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}} \vec{S}_{\vec{m}} \quad \ldots \quad /I.2.8./$$

u ovoj formuli μ_B je magnetni momenat atoma dat u borovim magnetonima.

Dobijeni izraz /I.2.8) za Hamiltonijan sistema predstavlja Hamiltonijan Hajzembergovog izotropnog modela. Integrali izmene $I_{\vec{m}\vec{n}}$ su simetrične funkcije koeficijenata $\vec{n}$ i $\vec{m}$ tj. $I_{\vec{n}\vec{m}} = I_{\vec{m}\vec{n}}$ ... /I.2.9./

i zavisi od intenziteta razlike $|\vec{n} - \vec{m}|$. Ovo je očigledno na osnovu činjenice da je $I_{\vec{n}\vec{m}}$ došlo usled sila izmedju elektrona koje su centralnog karaktera (kulonovske sile). Takodje znamo da je energija $I_{\vec{n}\vec{m}}$ energija izmene izmedju elektrona i eksciplitni oblik za integrale izmene mogao bi se dobiti opštim računima kojim se ovakva veličine izračunavaju. Ispostavlja se medjutim da su talasne funkcije elektrona nepopunjenih atomskih ljuski za atome vezane u kristal u toj meri definisane da nikakvo modeliranje ovih talasnih funkcija do danas nije dalo zadovoljavajuće rezultate, pri izračunavanju integrala izmene. Zbog toga se veličine $I_{\vec{n}\vec{m}}$ na sadašnjem stadijumu razvoja teorije uzimaju kao fenomenološki parametri i na osnovu eksperimenta zna se da su reda veličine $1000K_B$ za jake feromagnetike (F_e, C_o, N_i) i reda veličine $100K_B$ za retke zemlje. Ovi podaci dolaze iz eksperimentalnih rezultata za temperature prelaza feromagnetika. Finija eksperimentalna istraživanja pokazuju da integrali izmene eksponencijalno opadaju sa porastom veličine $|\vec{n}-\vec{m}|$ pa se zbog toga u teoriji magnetizma aproksimacija najbližih suseda može smatrati za veoma dobru i realnu aproksimaciju.

Hamiltonijan Hajzenbergovog feromagnetika može se generalisati na više raznih načina.

Ako posmatrani kristal ima složenu magnetnu ćeliju (tj.ima više podrešetki) onda se Hamiltonijan sistema za više podrešetki dobija odgovarajući usložnjavanjem vektora $\vec{n}$ i $\vec{m}$ u Hamiltonijanu /I.2.8) tj.:

$$\vec{n} \to \vec{n} + \vec{r}_{\alpha} \qquad \vec{m} \to \vec{m} + \vec{r}_{\beta} \quad \ldots\ldots \quad /I.2.10./$$

gde su $\vec{n}$ i $\vec{m}$ sada vektori složene ćelije a vektori $\vec{r}_{\alpha}$ i $\vec{r}_{\beta}$ vektori atoma unutar ćelije. Ovakav slučaj, kada α i β uzimaju samo dve vrednosti mi ćemo u daljem radu detaljno analizirati jer to će biti slučaj feromagnetika sa dve podrešetke.

Ako se uzme u obzir da na povišenim temperaturama atomi počinju da osciluju oko svojih ravnotežnih položaja i ako želimo da ovaj efekat uzmemo u obzir onda u Hamiltonijanu (I.2.8) treba razložiti integral izmene po stepenima pomeraja atoma iz njihovih ravnotežnih položaja. Pošto oscilovanje atoma karakterišu kvazičestice nazvane fononi, uračunavanje ovog efekta na napred opisani način dovelo bi nas do jednog opštijeg Hamiltonijana koji pored članova ~~prostih~~ датих u formuli (I.2.8) sadrži još i Hamiltonijan sistema fonona i Hamiltonijan interakcije izmedju spinova i fonona.

Poznata je činjenica da su magnetni materijali uglavnom metali što znači da oni pored lokalizovanih spinova u 3d ljuskama imaju i slobodne (valentne) elektrone sa svojim spinovima tako da je očigledno da u njima uvek egzistira interakcija izmedju sistema lokalizovanih elektrona i sistema valentnih elektrona. Model koji uzima u obzir ovu interakciju naziva se S-d model ili model Vonsovskog. (Detalje ovog modela videti u referenci [1].

Već smo napomenuli da ~~pojedine~~ поред interakcije izmene izmedju spinova postoji i dipol-dipolna interakcija koja je za dva reda veličine manja od interakcije izmene. Uzimanje u obzir i ovih interakcija generališe formulu (I.2.8) na taj način što se na desnoj strani dodaju dopunski članovi koji karakterišu dipol-dipolnu interakciju. Ovakav model nosi naziv

Hajzebergov model sa ~~dodatnim~~ dipolnim interakcijama i detalji ovog modela mogu se naći u referenci [1]

Mi ćemo se za sada zadržati na Hajzembergovom modelu feromagnetika sa prostom rešetkom tj. na Hamiltonijanu (I.2.8). Pošto se, kao što smo već rekli procesi u feromagnetiku sastoje od narušavanja uredjenosti sistema usled povećane temparature ili mehaničkih dejstava, a to s druge strane znači otklanjanje z projekcije spinova po čvorovima od maksimalne vrednosti $(S^z)_{max} = S$ potrebno je Hamiltonijan (I.2.8) izraziti preko operatora S^+ i S^- koji povećavaju odnosno smanjuju z projekciju i operatora $S-S^z$ koji očigledno predstavlja meru odstupanja z projekcije od njene maksimalne vrednosti. Ovo ćemo postići na sledeći način:

Pošto je

$$S^+ = S^x + iS^y \, ; \quad S^- = S^x - iS^y \quad \ldots \qquad /I.2.11./$$

odavde lako nalazimo da je:

$$S^x = \frac{S^+ + S^-}{2} \, ; \quad S^y = \frac{S^+ - S^-}{2i} \qquad /I.2.12./$$

Na osnovu ovoga, izraza (I.2.8) možemo transformisati:

$$H = -\mu\mathcal{H}\sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}}\vec{S}_{\vec{m}} =$$

$$= \mu\mathcal{H}\sum_{\vec{n}}[S-(S-S^z_{\vec{n}})] - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}(S^x_{\vec{n}}S^x_{\vec{m}} + S^y_{\vec{n}}S^y_{\vec{m}} + S^z_{\vec{n}}S^z_{\vec{m}}) =$$

$$= -\mu\mathcal{H}S\sum_{\vec{n}} 1 + \mu\mathcal{H}\sum(S-S^z_{\vec{n}}) -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \frac{(S^+_{\vec{n}}+S^-_{\vec{n}})(S^+_{\vec{m}}+S^-_{\vec{m}}) - (S^+_{\vec{n}}-S^-_{\vec{n}})(S^+_{\vec{m}}-S^-_{\vec{m}})}{4} -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}[S-(S-S^z_{\vec{n}})][S-(S-S^z_{\vec{m}})] =$$

$$= -\mu \mathcal{H} S \sum_{\vec{n}} 1 - \frac{1}{2} S^2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} +$$

$$+ \frac{S}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S^z_{\vec{n}}) + \frac{S}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S^z_{\vec{m}}) -$$

$$- \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} (S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} + S^-_{\vec{m}} S^+_{\vec{n}}) -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} (S - S^z_{\vec{n}})(S - S^z_{\vec{m}})$$

DAĻE IMAMO:

$\sum_{\vec{n}} 1 = N$ - GDE JE N BROJ ATOMA U KRISTALU

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} = \sum_{\vec{n}\vec{e}} I_{\vec{e}} \sum_{\vec{e}} I_{\vec{e}} \sum_{\vec{n}} 1 = N \sum_{\vec{e}} I_{\vec{e}} = N J_0$$

$$(\vec{e} = \vec{n} - \vec{m})$$

GDE JE:

$$J_0 = \sum_{\vec{e}} I_{\vec{e}} \quad \ldots\ldots \qquad /I.2.13./$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} (S - S^z_{\vec{n}}) = \sum_{\vec{n}\vec{e}} I_{\vec{e}} (S - S^z_{\vec{n}}) = \sum_{\vec{n}} (S - S^z_{\vec{n}}) \sum_{\vec{e}} I_{\vec{e}} =$$

$$= J_0 \sum_{\vec{n}} (S - S^z_{\vec{n}})$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} (S - S^z_{\vec{m}}) \underset{\vec{n} \rightleftharpoons m}{=} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{m}-\vec{n}} (S - S^z_{\vec{n}}) = \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} (S - S^z_{\vec{n}}) =$$

$$= J_0 \sum_{\vec{n}} (S - S^z_{\vec{n}})$$

$$-\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}}\left(S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} + S^-_{\vec{m}} S^+_{\vec{n}}\right) =$$

$$= \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} S^-_{\vec{m}} S^+_{\vec{n}} \underset{\vec{m} \rightleftarrows \vec{n}}{=}$$

$$= \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{m}-\vec{n}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} =$$

$$= \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} = 2\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}}$$

NA OSNOVU OVOGA IMAMO KONAČNO:

$$H = H_0 + H_2 + H_4 \quad \dots. \qquad /I.2.14./$$

GDE JE:

$$H_0 = -N\left(\mu \mathcal{H} S + \frac{1}{2} J_0 S^2\right) \quad \dots. \qquad /I.2.15/$$

$$H_2 = \left(\mu \mathcal{H} + S J_0\right)\sum_{\vec{n}} \left(S - S^z_{\vec{n}}\right) - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} \quad \dots, \qquad /I.2.16/$$

$$H_4 = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \left(S - S^z_{\vec{n}}\right)\left(S - S^z_{\vec{m}}\right) \quad \dots. \qquad /I.2.17./$$

Kao što vidimo sada nam je Hamiltonijan sistema Hajzembergovog feromagnetika izražen preko operatora koji odgovaraju fizičkim procesima u sistemu uredjenih spinova a to su S^- i S^+ koji menjaju vrednost z projekcije i operator $S-S^z$ koji je mera promene z projekcije. Hamiltonijan H_0 je energija osnovnog stanja feromagnetika tj. ona energija kada su sve z projekcije u svim čvorovima medjusobno jednake i jednake intenzitetu ~~sistema~~ spina S.

I.3. PAULI I KVAZI-PAULI OPERATORI

Hamiltonijan (I.2.14) deluje u prostoru stanja koja su karakterisana spinskim talasnim funkcijama. Pošto nas u procesima koji se odigravaju u magnetnim interakcijama interesuju promene z projekcije onda je očigledno da su spinske talasne funkcije su u stvari svojstvene funkcije operatora z projekcije spina. Pošto za dati spin S, z projekcija može imati 2S+1 vrednost onda je očigledno da su talasne funkcije za jedan atom u čvoru

$$|S\rangle, |S-1\rangle, |S-2\rangle \ldots, |-S+2\rangle, |-S+1\rangle, |-S\rangle$$

prema tome Hilbertov prostor stanja za jedan čvor ima 2S+1 dimenziju. Pošto osnovno stanje feromagnetika definišemo kao stanje maksimalne vrednosti z projekcije funkcija $|S\rangle_{\vec{n}}$ je funkcija osnovnog stanja za svaki od čvorova $\vec{n}$. Funkciju osnovnog stanja za ceo kristal dobijamo kao produkt funkcija $|S\rangle_{\vec{n}}$ po svim čvorovima tj.

$$|\text{OSNOVNO STANJE}\rangle = \prod_{\vec{n}} |S\rangle_{\vec{n}} \quad \ldots \quad /I.3.1/$$

Operatori S^+ i S^- ~~nemaju~~ menjaju projekciju za jedinicu pa je

$$S^+|S-m\rangle \sim |S-m+1\rangle$$

$$; \quad S^-|S-m\rangle \sim |S-m-1\rangle$$

Magnetne pojave mogu se matematički analizirati pomoću spinskih operatera koji deluju u prostoru obrazovanim od spinskih talasnih funkcija. Mi ćemo medjutim u ovom radu sve analize vršiti ne pomoću spinskih operatora već pomoću Pauli i kvazi-Pauli operatora. Razlog za ovo je činjenica da su pojave magnetizma u ostvari pojave u elektronskom podsistemu kristala pri čemu ovaj podsistem obrazuju samo elektroni nepopunjenih atomskih ljuski. Pošto su Pauli - kvazi-Pauli operatori konstruisani od kreacionih i anihilacionih elektronskih operatora onda je jasno da ako uvedemo ove operatore mi imamo jednu sliku feromagnetika koja je bliža realnoj situaciji pa zato pri analizi uvek imamo bolju kontrolu fizičkih procesa nego ako radimo sa spinskim operatorima. Mi ćemo prvo uvesti pojam Pauli operatora i dati njihove osobine a zatim ćemo uvesti opštije kvazi-Pauli operatore i dati njihove komutacione relacije. Posle toga ostaje samo da se nadje korespondencija izmedju spinskih stanja i paulionskih i kvazi-paulionskih stanja pa da se feromagnetik analizira u paulionskoj odnosno kvazi-paulinskoj slici.

Ako sistem fermiona ima na raspoloženju samo dva nivoa koji ćemo okarakterisati kvantnim brojevima 0 (osnovno stanje) i 1 (pobudjeno stanje), onda Hilbertov prostor za ovakav slučaj sadrži samo četiri talasne funkcije, i to:

$$|0_0 0_1\rangle ; |1_0 1_1\rangle , |0_0 1_1\rangle ; |1_0 0_1\rangle \quad \ldots \quad /I.3.2./$$

Ako sa a_1, a_1^+, a_o i a_o^+ obeležimo Fermi operatore koji kreiraju i anihiliraju elektrone u stanjima 0 i 1 onda od svih Fermi operatora možemo obrazovati sledeće operatore:

$$P^+ = a_1^+ a_0 \qquad P = a_0^+ a_1 \quad \ldots \quad /I.3.3./$$

čiji je fizički smisao očigledan. Operator P^+ na osnovu definicije karakteriše proces u kome je nestao elektron u osnovnom stanju a rodio se elektron u pobudjenom stanju. Prema tome, operator P^+ se može shvatiti kao operator radjanja jednog kvanta ekscitacije posmatranog sistema. Operator P kao što se vidi opisuje proces u kome je iščezao elektron iz pobudjenog stanja i rodio se u osnovnom stanju. Prema tome operator P je operator anihilacije jednog kvanta pobudjenja sistema.

Pošto za Fermi operatore važe sledeće relacije:

$$a_0|0_0\rangle = 0 \qquad a_1|0_1\rangle = 0$$
$$a_0^+|0_0\rangle = |1_0\rangle \qquad a_1^+|0_1\rangle = |1_1\rangle$$
$$a_0|1_0\rangle = |0_0\rangle \qquad a_1|1_1\rangle = |0_1\rangle$$
$$a_0^+|1_0\rangle = 0 \qquad a_1^+|1_1\rangle = 0$$

očigledno je da su operatori P^+ i P na stanjima: $|0_0\ 0_1\rangle$ i $|1_0\ 1_1\rangle$ uvek ravni nuli, pa prema tome od celog prostora (I.3.2) ostaju kao aktuelna samo stanja $|1_0\ 0_1\rangle$ (osnovno stanje) i $|0_0\ 1_1\rangle$ (pobudjeno stanje). Očigledno je da u ovom podprostoru važi sledeće relacija:

$$a_0^+a_0 + a_1^+a_1 = 1 \quad \ldots \qquad /I\ 3.5./$$

Na osnovu ovoga i komutacionih relacija za Fermi operatore mi možemo da izvedemo komutacione relacije za Pauli operatore.

Komutaciona relacija za Fermi operatore su sledeće:

$$\{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij}\ ;\ \{a_i, a_j\} = \{a_i^+, a_j^+\} = 0$$
$$a_i^2 = a_i^{+2} = 0 \qquad a_i^+a_i \qquad /I\ 3.6./$$

$a_i^+\ a_i$ - ima svojstvene vrednosti 0 il

Potražićemo prvo antikomutator.

$$P^+P + PP^+ = a_1^+a_0a_0^+a_1 + a_0^+a_1a_1^+a_0 =$$
$$= a_1^+(1 - a_0^+a_0)a_1 + a_0^+(1 - a_1^+a_1)a_0 = a_1^+a_1 + a_0^+a_0 + a_1^+a_0^+a_0a_1 +$$
$$+ a_0^+a_1^+a_1a_0$$

Pošto su u prostoru $|1_0\ 0_1\rangle$ i $|0_0 1_1\rangle$ poslednja dva operatora gornjeg izraza uvek ravni nuli ostaje, uz korišćenje formule (I.3.5) da je:

$$P^+P + PP^+ = 1 \quad \ldots \qquad /I\ 3.7./$$

Takodje je korisno naći vezu izmedju elektronskog i paulijonskog okupacionog broja.

$$P^+P = a_1^+a_0a_0^+a_1 = a_1^+(1 - a_0^+a_0)a_1 = a_1^+a_1 - a_1^+a_0^+a_1a_0$$

Znači:

$$P^+P = a_1^+a_1 \quad \ldots \qquad /I\ 3.8./$$

Dalje imamo:

$$P^2 = a_0^+ a_1 a_0^+ a_1 = -a_0^+ a_0^+ a_1 a_1 = -(a_0^+)^2 (a_1)^2 = 0$$

$$P^{+2} = a_1^+ a_0 a_1^+ a_0 = -a_1^+ a_1^+ a_0 a_0 = -(a_1^+)^2 (a_0)^2 = 0$$

Prema tome za jedan čvor $\vec{n}$ Pauli operateri zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$\{ P_{\vec{n}}, P_{\vec{n}}^+ \} = 1 \;;\; P_{\vec{n}}^2 = P_{\vec{n}}^{+2} = 0 \;;\; P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = a_{1\vec{n}}^+ a_{1\vec{n}} \quad \ldots \quad /I.3.9/$$

Može se pokazati na osnovu komutacionih relacija (I.1.6) da za različite čvorove Pauli operatori komutiraju u svim kombinacijama pa prema tome možemo konačno pisati da su komutacione relacije za Pauli operatore

$$\left.\begin{aligned} &[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^+] = (1 - 2P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}})\delta_{\vec{n},\vec{m}} \;;\; [P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P_{\vec{n}}^+, P_{\vec{m}}^+] = 0 \\ &P_{\vec{n}}^2 = P_{\vec{n}}^{+2} = 0 \qquad P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = a_{1\vec{n}}^+ a_{1\vec{n}} = 0 \text{ i } 1 \end{aligned}\right\} \ldots /I.3.10/$$

Očigledno je da Pauli operatori imaju samo dva moguća stanja $|0\rangle$ i $|1\rangle$. Ovoliko stanje imaju i spinski operateri za slučaj spina $S = \frac{1}{2}$ tj. spinske talasne funkcije su $|1/2\rangle$ i $|-1/2\rangle$. Pošto su paulionski i spinski prostor istih dimenzija možemo napraviti korespondenciju izmedju ova dva prostora.

$$|0\rangle \rightarrow |1/2\rangle \qquad\qquad |1\rangle \rightarrow |-1/2\rangle$$

Kao što vidimo paulionskom vakumu $|0\rangle$ odgovara spinsko osnovno stanje $|1/2\rangle$; pobudjenom paulionskom stanju $|1\rangle$ odgovara pobudjeno spinsko stanje $|-1/2\rangle$. Ovo odmah daje veze izmedju spinskih i Pauli operatora.

$$P^+ = S^- \qquad P = S^+ \qquad /I.3.11./$$

Pošto z projekcija u slučaju spina S = 1/2 uzima samo dve vrednosti i to +1/2 i -1/2, okupacioni paulionski broj takodje dve vrednosti 0 i 1 očigledno je da izmedju spinskih i Pauli operatora postoji još i ova veza:

$$\frac{1}{2} - S_z = P^+ P \quad \ldots \quad /I.3.12./$$

Ako sistem fermiona ima raspoloženja 2S nivoa onda je broj mogućih stanja ravan sumi binomnih koeficijenata binoma dignutog na stepen 2S tj.

$$\text{BROJ STANJA} = \sum_{\nu=0}^{2S} \binom{2S}{\nu} \quad \ldots \quad /I.3.14./$$

Od svih ovih stanja, ako usvojimo činjenicu da ako se jedan fermion nalazi u nekom stanju f_1 onda se on ne može nalaziti i u nekom drugom stanju f_2, istovremeno fizičkog smisla imaju samo sledeća stanja:

$$|1_0 0_1 0_2 \ldots 0_{2S}\rangle$$
$$|0_0 1_1 0_2 \ldots 0_{2S}\rangle \quad \ldots \quad /I\ 3.13./$$
$$|0_0 0_1 1_2 \ldots 0_{2S}\rangle$$
$$|0_0 0_1 0_2 \ldots 1_{2S}\rangle$$

Ako kreacione i anihilacione operatore elektrona obeležimo sa a_0^+, a_0, a_1^+, a_1, a_2^+, a_2 ... a_{2S}^+, a_{2S} onda po analogiji sa prethodnog slučaja možemo uvesti operatore koji kreiraju kvante pobudjenja tipa 1, tipa 2, tipa 2S i to na sledeći način:

$$P_1^+ = a_1^+ a_0 \,;\; P_2^+ = a_2^+ a_0 ,\; P_\mu^+ = a_\mu^+ a_0 \ldots P_{2S}^+ = a_{2S}^+ a_0 \qquad /I.3.15./$$

Odgovarajući anihilacioni operateri dati su sa

$$P_1 = a_0^+ a_1 \,;\; P_2 = a_0^+ a_2 \,;\; P_\mu = a_0^+ a_\mu \ldots P_{2S} = a_0^+ a_{2S} \ldots /I.3.16/$$

Ovakvi operateri nazivaju se kvazi-Pauli operateri i za njih u prostoru (I.3.14) važe sledeće komutacione relacije: (vidi referencu [2]).

$$[P_{\mu\vec{f}}, P_{\nu\vec{g}}^+] = \delta_{\vec{f}\vec{g}}\Big[\delta_{\mu\nu}\Big(1 - \sum_{\omega=1}^{2S} \hat{N}_{\omega\vec{g}}\Big) - P_{\nu\vec{g}}^+ P_{\mu\vec{g}}\Big]$$

$$[P_{\mu\vec{f}}, P_{\nu\vec{g}}] = [P_{\mu\vec{f}}^+, P_{\nu\vec{g}}^+] = 0 \qquad \ldots \quad /I.3.17./$$

$$P_{\mu\vec{f}} P_{\nu\vec{f}} = P_{\mu\vec{f}}^+ P_{\nu\vec{f}}^+ = 0$$

$$P_{\mu\vec{f}} P_{\nu\vec{f}} = 0 \quad (\mu \neq \nu) \,; \qquad P_{0\vec{g}} = P_{0\vec{g}}^+ = 1 \quad (\text{DEF.})$$

Spinski operateri za spin $S > 1/2$ mogu se izraziti preko kvazi-Pauli operatera (vidi referencu[3]).

$$S_{\vec{q}}^{+} = \sum_{\mu=1}^{2S} a_\mu P_{\mu-1\vec{q}}^{+} P_{\mu\vec{q}}$$

$$S_{\vec{q}}^{-} = \sum_{\mu=1}^{2S} a_\mu P_{\mu\vec{q}}^{+} P_{\mu-1\vec{q}} \qquad \ldots \quad /I\,3.18./$$

$$S_{\vec{q}}^{z} = S - \sum_{\mu=1}^{2S} \mu P_{\mu\vec{q}}^{+} P_{\mu\vec{q}}$$

$$a_\mu = \left[\mu(2S+1-\mu)\right]^{1/2} \; ; \quad a_{2S+\mu} = 0, \quad \mu = 1, 2 \ldots$$

Ovaj način izražavanja spinskih operatera preko kvazi Pauli operatera, gde se u stvari svaoj promeni projekcije spina korespondira po jedan par operatora čini fizičku sliku pojava u feromagnetiku daleko jasnijom. Kao što ćemo kasnije videti populacioni broj kvazi Pauliona tipa 1 koji odgovara promeni z projekcije spina od S na S-1 proporcionalan je $T^{3/2}$ (T - apsolutna temperatura) dok su populacioni brojevi ostalih vrsta kvazi Pauliona proporcionalni $e^{-\frac{const}{K_B T}}$ i znači zanemarljivo mali na niskim temperaturama. Ovo tačno odražava fizičku sliku u feromagnetu jer je očigledno da se najlakše i sa najmanje energije može pobuditi prelaz iz S u S-1, dok ostali prelazi S u S-2 i td. zahtevaju mnogo više energije. Ova činjenica nalazi svoj odraz u napred navedenoj temperaturskoj zavisnosti populacionih brojeva kvazi Pauliona.

I.4 - METOD FUNKCIJE GRINA

Analizu fenomena u feromagneticima vršićemo metodom dvovremenskih temperaturskih funkcija Grina, pa je zato korisno navesti osnovne elemente teorije ovakvih funkcija. Ovo što će dalje biti izvedeno uzeto je iz reference[1].

Ako imamo dva operatora A(t) i B(t) gde je t vreme, onda se dvovremenska temperaturska funkcija Grina definiše na sledeći način:

$$\langle\langle A(t)|B(t')\rangle\rangle = \theta(t-t')\langle[A(t),B(t')]\rangle \quad \ldots \quad /I.4.1./$$

gde je θ (t-t') Hevisajdova funkcija definisana na sledeći način:

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{za } t > t' \\ 0 & \text{za } t < t' \end{cases} \quad \ldots \quad /I.4.2./$$

Simbol $\langle \ldots \rangle$ označava statističku srednju vrednost po Gibsovom ansamblu

$$\langle \alpha \rangle = \frac{Sp\,\alpha e^{-\beta H}}{Sp\,e^{-\beta H}} \quad \ldots \quad /I.4.3/$$

gde je H - Hamiltonijan sistema i $\beta = \frac{1}{K_B T}$

Ako jednačinu (I.4.1) defirenciramo po t dobijamo:

$$\frac{d}{dt}\langle\langle A(t)|B(t')\rangle\rangle = \delta(t-t')\langle[A(t),B(t)]\rangle + \theta(t-t')\langle[\frac{dA_t}{dt},B(t')]\rangle \quad \ldots \quad /I.4.4./$$

Na osnovu definicije (I.4.2) očigledno je da je izvod Hevisajdove funkcije ravan delta-funkciji. Pošto je, u skladu sa Hajzembergovom jednačinom kretanja

$$i\frac{dA(t)}{dt} = [A,H]_t, \quad \ldots \quad /I.4.5./$$

jednačina (I.4.4) svodi se na:

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

Po definiciji (I.4.1) izraz $\theta(t-t')\langle[A,H]_t,B(t')\rangle$ je neka nova funkcija Grina $\langle\langle[A,H]_t|B(t')\rangle\rangle$ to znači:

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(t)|B(t')\rangle\rangle = i\delta(t-t')\langle[A(t),B(t)]\rangle + \langle\langle[A,H]_t|B(t')\rangle\rangle \quad \ldots \quad /I.4.6./$$

Kao što vidimo, funkcija Grina $\langle\langle A|B\rangle\rangle$ izražava se preko nove funicije Grina $\langle\langle [A,H]|B\rangle\rangle$ i tako dalje. Na ovaj način ~~je~~ za funkciju Grina $\langle\langle A|B\rangle\rangle$ ~~ovakvim postupkom~~ dobijamo beskonačan lanac jednačina. Da bi se lanac završio mi moramo na osnovu neke aproksimacije više funkcija Grina, na primer $\langle\langle [A,H]|B\rangle\rangle$ izraziti preko nižih funkcija Grina $\langle\langle A|B\rangle\rangle$ i kada se to učini lanac se zatvara i možemo ga rešiti po traženoj funkciji $\langle\langle A|B\rangle\rangle$

Jednačinu (I.4.6) je zgodnije napisati u energetskoj reprezentaciji tj. u Furije~~likovima~~ Grinovih funkcija u transformaciji vreme-energija.

Ako uzmemo:

$$\langle\langle A(t)|B(t')\rangle\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \langle\langle A|B\rangle\rangle_E \, e^{-iE(t-t')}$$

$$\langle\langle [A,H]_t|B(t')\rangle\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \langle\langle [A,H]|B\rangle\rangle_E \, e^{-iE(t-t')}$$

i po definiciji delta-funkcije

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

onda se, zamenom u (I.4.6) dobija, posle oslobodjenja od intergrala po energiji

$$E\langle\langle A|B\rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi}\langle [A,B]\rangle + \langle\langle [A,H]|B\rangle\rangle \quad \ldots \quad /I\ 4.7./$$

Jednačina (I.4.7) je osnovna jednačina za traženje funkcije Grina. Pošto operater A i B zavise od koordinata, u homogenoj i izotopnoj sredini njihov produkt zavisiće od razlike koordinata. To znači da u jednačini (I.4.7) možemo izvršiti Furije transformaciju prostor-impuls.

Znači:

$$\langle\langle A(\vec{r})|B(\vec{r}\,')\rangle\rangle_E = \int d^3\vec{k}\, \langle\langle A(\vec{k})|B(\vec{k})\rangle\rangle_E \, e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

$$\langle\langle [A,H]_{\vec{r}}|B(\vec{r}\,')\rangle\rangle_E = \int d^3\vec{k}\, \langle\langle [A,H]_{\vec{k}}|B(\vec{k})\rangle\rangle_E \, e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

$$\langle [A,B]\rangle_{\vec{r}-\vec{r}\,'} = d^3\vec{k}\, \langle [A,B]\rangle_{\vec{k}} \, e^{-i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

i ako ovo uvrstimo u (I.4.7) dobijamo, posle oslob~~odjenja~~ AKA 44 od integrala po $\vec{k}$:

$$E\langle\langle A(\vec{k})|B(\vec{k})\rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi}\langle [A,B]\rangle_{\vec{k}} + \langle\langle [A,H]_{\vec{k}}|B(\vec{k})\rangle\rangle_E \quad /I\ 4\ 8./$$

Poznata je činjenica da [redacted] funkcija Grina $\langle\langle A(\vec{k})|B(\vec{k})\rangle\rangle_E$ definiše energiju elementarnih ekscitacija i njihovo vreme života. Energija elementarnih ekscitacija je apscisa pola Grinove funkcije u kompleksnoj E ravni dok je vreme života ekscitacije ravno recipročnoj vrednosti ordinate pola Grinove funkcije.

Važan pojam u teoriji Grinove funkcije je spektralna intenzivnost Grinove funkcije koja se definiše kao:

$$J(E,\vec{k}) = \frac{1}{e^{\frac{E}{\theta}}-1}\left[G(E+i\varepsilon)-G(E-i\varepsilon)\right]_{\varepsilon\to+0} =$$

$$= \frac{\langle[A,B]_{\vec{k}}\rangle}{e^{\frac{E}{\theta}}-1}\,\delta(E-E_{\vec{k}}) \quad \ldots \qquad /I.4.9./$$

gde je $E_{\vec{k}}$ realni deo pola Grinove funkcije.

Pomoću spektralne intenzivnosti može se naći srednja vrednost operatora BA na sledeći način:

$$\langle B(\vec{k})A(\vec{k})\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(E,\vec{k})\,dE =$$

$$= \frac{\langle[A,B]_{\vec{k}}\rangle}{e^{\frac{E_{\vec{k}}}{\theta}}-1} \quad , \ldots , \qquad /I.4.10./$$

Na osnovu svega ovoga, možemo zaključiti da nam poznavanje Grinove funkcije omogućava da nadjemo energiju elementarnih sitacija u sistemu, vreme života, elementarnih ekscitacija i, na osnovu formule (I.4.1o) i populacioni broj elementarnih ekscitacija kao funkciju temparature. Ovo poslednje znači da ne moramo znati statistik[redacted] elementarnih ekscitacija koje istražujemo, jer nam nalaženje funkcije Grina automatski rešava taj problem.

GLAVA II

ANALIZA HAJZENBERGOVOG FEROMAGNETIKA U KVAZI-PAULINSKOJ SLICI

II.1 - PRELAZ OD KVAZI-PAULI OPERATORA NA BOZE-OPERATORE

Za dalja izračunavanja potrebno je izraziti Pauli- i kvazi-Pauli operatore pomoću Boze-operatora. Ovo je korisno zbog toga, što se pri prelasku iz prostora rešetke u prostor recipročne rešetke Pauli i kvazi-Pauli operatori ne transformišu kanonički (njihove komutacione relacije nisu invarijantne u odnosu na Furije transformaciju), dok je za Boze operatore ovakva transformacija kanonička. Ovo je prvi razlog da se Pauli- i kvazi-Pauli operatori zamene Boze-operatorima, ali nije i glavni. Mnogo je važnije to, da se jedino pravilno dekuplovanje lanca za funkciju Grina može izvršiti primenom Vikłove teoreme, koja je za Boze operatore poznata i formulisana, dok za Furije likove Pauli i kvazi-Pauli operatora ne postoje. Pošto ćemo u daljoj analizi biti prinudjeni da lanac jednačina za funkciju Grina dekuplujemo, jasno je da je jedini način da se ovo pravilno izvrši taj, što ćemo kvazi-Paulionske Grinove funkcije izraziti pomoću Bozonskih funkcija Grina.

Ovde nećemo ulaziti u detalje računa kojim se Pauli i kvazi-Pauli operatori egzaktno predstavljaju pomoću Boze operatora B^+ i B, već ćemo samo izložiti osnovnu ideju i dati krajnje formule.

Pauli operatore treba predstaviti kao funkcije Boze-operatora na primer:

$$P = f(\overset{+}{B}, B) \qquad P^+ = \overset{+}{f}(\overset{+}{B}, B) \quad \ldots \qquad /II.1.1./$$

tako da u prostoru bozonskih stanja

$$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle \ldots |N\rangle \ldots |\infty\rangle \quad \ldots \qquad /II.1.2./$$

funkcije f i $\overset{+}{f}$ zadovoljavaju sve komutatione relacije (I.3.10) tj. tako da u prostoru (II.1.2) važi:

$$[f(\overset{+}{B}_{\vec{n}}, B_{\vec{n}}), \overset{+}{f}(\overset{+}{B}_{\vec{m}}, B_{\vec{m}})] = [1 - 2\overset{+}{f}(\overset{+}{B}_{\vec{n}}, B_{\vec{n}}) f(\overset{+}{B}_{\vec{n}} B_{\vec{n}})] \delta_{\vec{n}\vec{m}}$$

$$[f(\overset{+}{B}_{\vec{n}} B_{\vec{n}}), f(\overset{+}{B}_{\vec{m}}, B_{\vec{n}})] = [\overset{+}{f}(\overset{+}{B}_{\vec{n}}, B_{\vec{n}}), \overset{+}{f}(\overset{+}{B}_{\vec{m}} B_{\vec{n}})] = 0$$

$$f^2(\overset{+}{B}_{\vec{n}}, B_{\vec{n}}) = \overset{+}{f}{}^2(\overset{+}{B}_{\vec{n}}, B_{\vec{n}}) = 0$$

$$\overset{+}{f}(\overset{+}{B}_{\vec{n}} B_{\vec{n}}) f(\overset{+}{B}_{\vec{n}} B_{\vec{n}}) = 0 \text{ ili } 1$$

~~Eksplitni~~ Eksplicitni izraz za funkcije f nadjeni su u referenci [4] i formule (II.1.1) ~~eksplitno~~ eksplicitno glase:

$$\left.\begin{aligned} P_{\vec{n}} &= \Big[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(1+\nu)!} \overset{+}{B}{}^{\nu}_{\vec{n}} B^{\nu}_{\vec{n}}\Big]^{1/2} B_{\vec{n}} \\ \overset{+}{P}_{\vec{n}} &= \overset{+}{B}_{\vec{n}} \Big[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(1+\nu)!} \overset{+}{B}{}^{\nu}_{\vec{n}} B^{\nu}_{\vec{n}}\Big]^{1/2} \\ \overset{+}{P}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} &= \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(1+\nu)!} \overset{+}{B}{}^{\nu+1}_{\vec{n}} B^{\nu+1}_{\vec{n}} \end{aligned}\right\} \quad \ldots \quad /II.1.3/$$

Kao što vidimo, Pauli operatori se iz~~r~~ražavaju preko beskonačnog ~~Bozonskog~~ reda.

Analogna ideja korišćena je u referenci [2], pa su tamo dobijene egzaktne bozonske reprezentacije za kvazi-Pauli operatore. Ove formule glase:

$$\mathcal{P}_{\mu\vec{q}} = \Big(\hat{1} - \sum_{\mu' \neq 0, \mu} \hat{Z}_{\mu'\vec{q}}\Big) \hat{Y}^{1/2}_{\mu\vec{q}} B_{\mu\vec{q}}$$

$$\overset{+}{\mathcal{P}}_{\mu\vec{q}} = \Big(\hat{1} - \sum_{\mu' \neq 0, \mu} \hat{Z}_{\mu'\vec{q}}\Big) \overset{+}{B}_{\mu\vec{q}} \hat{Y}^{1/2}_{\mu\vec{q}}$$

$$\overset{+}{\mathcal{P}}_{\mu\vec{q}} \mathcal{P}_{\mu\vec{q}} = \hat{Z}_{\mu\vec{q}} \qquad \mu = 1, 2 \ldots 2S$$

$$\sum_{\mu=1}^{2S} Z_{\mu\vec{q}} = 0 \text{ ili } 1 \qquad /II.1.4/$$

$$[B_{\mu_1\vec{q}_1}, \overset{+}{B}_{\mu_2\vec{q}_2}] = \delta_{\vec{q}_1\vec{q}_2} \delta_{\mu_1\mu_2}$$

$$[B_{\mu_1\vec{q}_1}, B_{\mu_2\vec{q}_2}] = [\overset{+}{B}_{\mu_1\vec{q}_2}, \overset{+}{B}_{\mu_2\vec{q}_2}] = 0$$

$$Z_{\mu\vec{q}} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-2)^p}{(1+p)!} \overset{+}{B}{}^{p+1}_{\mu\vec{q}} B^{p+1}_{\mu\vec{q}}$$

$$\hat{Y}_{\mu\vec{q}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2)^n}{(1+n)!} \overset{+}{B}{}^{n}_{\mu\vec{q}} B^{n}_{\mu\vec{q}}$$

Na osnovu formula (II.1.3) i (II.1.4) mi ćemo u daljem radu zamenjivati Pauli i kvazi-Pauli operatore Boze operatorima sa tačnošću koja nam je potrebna.

II.2 - HAJZE~~N~~MBERGOV FEROMAGNETIK NA NISKIM TEMPERATURAMA

Nisku temparatursku analizu Hajzembergovog feromagneta izvršićemo sa tačnošću do prvog stepena koncentracije elementarnih ekscitacija ili što je isto sa tačnošću do $T^{9/2}$ u izrazu za magnetizaciju sistema. Cilj nam je da na matematički lakši način dobijemo poznate Dajsonove rezultate (vidi referencu [5] i [6]). Kad na ovaj način testiramo ispravnost metoda koji ćemo primenjivati mi ćemo ~~na~~ taj metod u sledećoj glavi primeniti na složeniji sistem, tj. na feromagnetik sa dve podrešetke da bismo se upoznali sa njegovim termodinamičkim osobinama. Ovde ćemo odvojeno razmatrati slučaj spina $S = 1/2$ i spina $S > 1/2$.

a/ Spin $S = 1/2$

Zamenom (I.3.11) i (I.3.12) u (I.2.14) dobijemo Hamiltonijan Hajzembergovog modela u Paulionskoj reprezentaciji.

$$H = -N\left(\frac{1}{2}\mu\mathcal{H} + \frac{1}{8}J_0\right) + \left(\mu\mathcal{H} + \frac{1}{2}J_0\right)\sum_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{m}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P^{+}_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} P_{\vec{n}} \quad \ldots \quad /II.2.1./$$

Dalje ćemo analizirati funkciju Grina $\langle\langle P_{\vec{f}} | P^{+}_{\vec{g}} \rangle\rangle$ za koju, na osnovu (I.4.7) možemo pisati:

$$E\langle\langle P_{\vec{f}} | P^{+}_{\vec{g}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\delta_{\vec{f},\vec{g}}\left(1 - 2\langle P^{+}_{\vec{f}} P_{\vec{f}}\rangle\right) + \langle\langle \Omega_{\vec{f}} | P^{+}_{\vec{g}} \rangle\rangle \quad \ldots \quad /II.2.2./$$

gde je

$$\Omega_{\vec{f}} = [P_{\vec{f}}, H] = \left(\mu\mathcal{H} + \frac{1}{2}J_0\right)P_{\vec{f}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{m}} I_{\vec{f}\vec{m}} P_{\vec{m}} + \sum_{\vec{m}} I_{\vec{f}\vec{m}} P^{+}_{\vec{f}} P_{\vec{f}} P_{\vec{m}} - \sum_{\vec{m}} I_{\vec{f}\vec{m}} P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} P_{\vec{f}} \quad \ldots \quad /II.2.3./$$

Posle Furije transformacija

$$P_{\vec{f}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} P_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{f}}; \quad P^{+}_{\vec{f}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} P^{+}_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{f}}$$

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

i uzimajući u obzir da je:

$$\langle\langle P_{\vec{k}} | P^{+}_{\vec{g}} \rangle\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{g}} \langle\langle P_{\vec{k}} | P^{+}_{\vec{k}} \rangle\rangle$$

$$\langle\langle \Omega_{\vec{k}} | P^{+}_{\vec{g}} \rangle\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{g}} \langle\langle \Omega_{\vec{k}} | P^{+}_{\vec{k}} \rangle\rangle$$

jednačinu (II.2.2) možemo pisati kao:

$$E\langle\langle P_{\vec{k}} | P^{+}_{\vec{k}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\left(1 - 2\langle P^{+}_{\vec{f}} P_{\vec{f}}\rangle\right) + \langle\langle \Omega_{\vec{k}} | P^{+}_{\vec{k}} \rangle\rangle \quad \ldots \quad /II.2.4./$$

gde je

$$\Omega_{\vec{k}} = \left(\mu\mathcal{H} + \frac{1}{2}J_0 - \frac{1}{2}J_{\vec{k}}\right)P_{\vec{k}} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\left(J_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} - J_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}\right) \times P^{+}_{\vec{q}_1} P_{\vec{q}_2} P_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \quad \ldots \quad /II.2.6./$$

gde je:

$$J_{\vec{\lambda}} = \sum_{\vec{l}} I_{\vec{l}}\, e^{i\vec{\lambda}\vec{l}} \qquad \ldots \qquad /II.2.6./$$

Na osnovu formule (II.13) mi ćemo Pauli operatore izraziti preko Boze operatore sa sledećom tačnošću:

$$\left.\begin{aligned} P_{\vec{f}} &= B_{\vec{f}} - B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} B_{\vec{f}} \\ P^{+}_{\vec{f}} &= B^{+}_{\vec{f}} - B^{+}_{\vec{f}} B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} \\ P^{+}_{\vec{f}} P_{\vec{f}} &= B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} - B^{+}_{\vec{f}} B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} B_{\vec{f}} \end{aligned}\right\} \qquad \ldots \qquad /II.2.7./$$

što posle Furije transformacija daje:

$$\left.\begin{aligned} P_{\vec{k}} &= B_{\vec{k}} - N^{-1} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} B^{+}_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}-\vec{k}_1+\vec{k}_2} \\ P^{+}_{\vec{k}} &= B^{+}_{\vec{k}} - N^{-1} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} B^{+}_{\vec{k}-\vec{k}_1+\vec{k}_2} B_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_2} \end{aligned}\right\} \qquad /II.2.8/$$

zamenjujući (II.1.8) u (II.2.5) i dekupujući bozonske funkcije Grina sa četiri Boze operatora, na osnovu Vikove teoreme tj.:

$$\frac{1}{N} \sum_{q_1 q_2} \langle\langle B^{+}_{\vec{q}_2} B_{\vec{q}_1} B_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | B^{+}_{\vec{k}} \rangle\rangle =$$

$$\frac{1}{N} \sum_{q_1 q_2} \langle B^{+}_{\vec{q}_2} B_{\vec{q}_2} \rangle_0 (\delta_{q_1, q_2} + \delta_{q_1, \vec{k}}) \langle\langle B_{\vec{k}} | B^{+}_{\vec{k}} \rangle\rangle =$$

$$\langle\langle B_{\vec{k}} | B^{+}_{\vec{k}} \rangle\rangle \cdot 2C_0 \; ; \qquad C_0 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle B^{+}_{\vec{q}} B_{\vec{q}} \rangle_0$$

i tako dalje, za bozonsku funkciju Grina dobijamo izraz:

$$\langle\langle B_{\vec{k}} | B^{+}_{\vec{k}} \rangle\rangle = \frac{1+2C_0}{E - E^{(1)}_{\vec{k}}} \qquad \ldots \qquad /II.2.9./$$

gde je:

$$E^{(1)}_{\vec{k}} = \mu \mathcal{H} + \frac{1}{2}(J_0 - J_{\vec{k}}) + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (J_{\vec{k}} + J_{\vec{q}} - J_{\vec{k}-\vec{q}} - J_0) \langle B^{+}_{\vec{q}} B_{\vec{q}} \rangle_0 \quad \ldots \quad /II.2.10./$$

Izraz (II.2.1o) predstavlja zakon disperzije za spinske talase u fero magnetiku sa spinom S = 1/2. Na osnovu formule (I.4.1o) i formule (II.2.9) za srednji bozonski broj $\langle B^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{k}} \rangle$ dobijamo sledeći izraz:

$$\langle B^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{k}} \rangle = \frac{1+2C_0}{e^{\frac{E^{(1)}_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} \qquad \ldots \qquad /II.2.11./$$

Magnetizacija σ se definiše kao

$$\sigma = \frac{\langle S^{z}_{\vec{f}} \rangle}{S} = 1 - 2\langle P^{+}_{\vec{f}} P_{\vec{f}} \rangle =$$

$$= 1 - 2\langle B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} \rangle + 2\langle B^{+}_{\vec{f}} B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} B_{\vec{f}} \rangle =$$

$$= 1 - 2\langle B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} \rangle + 4\langle B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} \rangle_0^2 \qquad \ldots \qquad /II.2.12./$$

Na osnovu (II.2.11) imamo:

$$\langle B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle B^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\frac{E^{(1)}_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} +$$

$$+ 2C_0 \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\frac{E^{(1)}_{\vec{k}}}{\theta}} - 1}$$

i pošto je

$$\langle B_{\vec f}^{+} B_{\vec f} \rangle_0 = C_0$$

dobijamo konačno:

$$\sigma = 1 - \frac{2}{N} \sum_{\vec k} \frac{1}{e^{\frac{E_{\vec k}^{(1)}}{\theta}} - 1} \quad . \quad . \quad . \qquad /II.2.13./$$

Ako veličine $J_{\vec k}$ razvijemo sa tačnošću do šestog stepena intenziteta talasnog vektora $\vec k$, onda po formuli (II.2.13) dobijamo poznati Dajsonov izraz za megnetizaciju:

$$\sigma = 1 - 2 Z_{3/2}\left(\frac{\mu \mathcal{H}}{\theta}\right) \tau^{3/2} - \frac{3\pi}{2} Z_{5/2}\left(\frac{\mu \mathcal{H}}{\theta}\right) \tau^{5/2} -$$

$$- \frac{33\pi^2}{16} Z_{7/2}\left(\frac{\mu \mathcal{H}}{\theta}\right) \tau^{7/2} - 6\pi Z_{3/2}\left(\frac{\mu \mathcal{H}}{\theta}\right) Z_{5/2}\left(\frac{\mu \mathcal{H}}{\theta}\right) \tau^{4} + O\left(\tau^{9/2}\right) ; \qquad /II.2.14./$$

gde je:

$$\theta = K_B T \; ; \; Z_p\left(\frac{\mu \mathcal{H}}{\theta}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-m\frac{\mu \mathcal{H}}{\theta}}}{m^p} \; ; \; \tau = \frac{\theta}{2\pi I} \quad . \quad . \qquad /II.2.15./$$

b/ Spin S > 1/2

Pre nego što predjemo na izračunavanje ne linearnih efekata u termodinamičkim karakteristikama feromagnetika sa spinom većim od 1/2, mi ćemo razmotriti problem feromagnetika u harmoniskoj aproksimaciji. Zamenom (I.3.18) u (I.2.14), uz korišćenje (II.1.4) i zadržavanje samo onih delova Hamiltonijana koji su kvadratni po Boze operatorima, mi dobijamo:

$$H = (\mu \mathcal{H} + S J_0) \sum_{\vec n} B_{1\vec n}^{+} B_{1\vec n} - S \sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n \vec m} B_{1\vec n}^{+} B_{1\vec m} +$$

$$+ (\mu \mathcal{H} + S J_0) \sum_{\nu=2}^{2S} \sum_{\vec n} B_{\nu \vec n}^{+} B_{\nu \vec n} \quad . \quad . \quad . \quad . \qquad /II.2.16./$$

Ako izvršimo Furije transformacije operatora

$$B_{\nu \vec k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n} B_{\nu \vec n} e^{i\vec k \vec n} \quad . \quad . \quad . \qquad /II.2.17./$$

onda je:

$$\sum_{\vec n} B_{\nu \vec n}^{+} B_{\nu \vec n} = \frac{1}{N} \sum_{\vec k \vec k'} B_{\nu \vec k'}^{+} B_{\nu \vec k} \sum_{\vec n} e^{i\vec n(\vec k' - \vec k)} =$$

$$\frac{1}{N} N \sum_{\vec k \vec k'} B_{\nu \vec k'}^{+} B_{\nu \vec k} \delta_{\vec k, \vec k'} = \sum_{\vec k} B_{\nu \vec k}^{+} B_{\nu \vec k}$$

i

$$\sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n - \vec m} B_{1\vec n}^{+} B_{1\vec m} = \frac{1}{N} \sum_{\vec k \vec k'} B_{1\vec k'}^{+} B_{1\vec k} \sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n - \vec m} e^{i\vec n \vec k - i\vec m \vec k'} \underset{\vec n - \vec m = \vec \ell}{=}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec k' \vec k} B_{1\vec k}^{+} B_{1\vec k} \sum_{\vec \ell \vec n} I_{\vec \ell} e^{i\vec \ell \vec k} e^{i\vec n(\vec k - \vec k')} =$$

$$= \sum_{\vec k} J_{\vec k} B_{1\vec k}^{+} B_{1\vec k} \quad ; \quad J_{\vec k} = \sum_{\vec \ell} I_{\vec \ell} e^{-i\vec \ell \vec k}$$

Znači, dijagonalizovani Hamiltonijan ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{k}} [\mu\mathcal{H} + S(J_0 - J_{\vec{k}})] B^{+}_{1\vec{k}} B_{1\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \sum_{\nu=2}^{2S} [\mu\mathcal{H} + S J_0]\nu B^{+}_{\nu\vec{k}} B_{\nu\vec{k}} \quad . \quad . \quad . \quad /II.2.18./$$

Zakon disperzije za odgovarajuće vrste Bozona dobijamo kao

$$E_{\nu\vec{k}} = \frac{\partial H}{\partial\langle B^{+}_{\nu\vec{k}} B_{\nu\vec{k}}\rangle} \quad ; \quad \nu = 1,2, \ldots 2S \qquad /II.2.19./$$

Na osnovu ovoga vidimo da je

$$\left.\begin{aligned} E_{1\vec{k}} &= [\mu\mathcal{H} + S(J_0 - J_{\vec{k}})] \\ E_{\nu\vec{k}} &= (\mu\mathcal{H} + \nu S J_0) \quad \nu = 2,3,\ldots 2S \end{aligned}\right\} \qquad /II.2.20./$$

što znači da su populacioni brojevi

$$\left.\begin{aligned} \langle B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}}\rangle &\sim T^{3/2} \\ \langle B^{+}_{\nu\vec{n}} B_{\nu\vec{n}}\rangle &\sim e^{-\frac{\nu S J_0}{K_B T}} \end{aligned}\right\} \quad \nu = 2,3 \ldots 2S \qquad /II.2.21/$$

Ovo je potvrda za ono što smo ranije već napomenuli a to je da su na niskim temperaturama najčešće promene projekcije tipa S u S-1, kojima odgovara bozonski populacioni broj $\langle B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}}\rangle \sim T^{3/2}$. Ostale promene projekcije kojima odgovaraju populacioni brojevi

$$\langle B^{+}_{\nu\vec{n}} B_{\nu\vec{n}}\rangle \sim e^{-\frac{\nu S J_0}{K_B T}} \quad \nu = 2,3 \ldots 2S$$

vrlo su retko aktuelne, što se odražava činjenicom da su odgovarajući bozonski populacioni brojevi na niskim temperaturama eksponencijalno mali i kao takvi zanemarljivi. Ovo jeste osnovna prednost prelaska na kvazi-Paulionsku sliku jer nam u njoj matematika odmah odražava fiziku situacije.

Na osnovu ovoga odmah možemo da zaključmo kakvu funkciju Grina treba koristiti ako feromagnet analiziramo na niskim temperaturama. Ova funkcija Grina ima oblik:

$$G_{\vec{f}\vec{g}} = \langle\langle S^{+}_{\vec{f}} \mid \mathcal{P}^{+}_{1\vec{g}} \rangle\rangle \qquad /II.2.22./$$

Desni operator u izrazu za $G_{\vec{f}\vec{g}}$ znači obaranje projekcije od S na S-1 i to je kao što smo videli najaktuelniji proces na niskim temperaturama.

Jednačina za funkciju Grina (II.2.22) ima oblik

$$E\langle\langle S^{+}_{\vec{f}} \mid \mathcal{P}^{+}_{2\vec{g}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\langle [S^{+}_{\vec{f}}, \mathcal{P}^{+}_{2\vec{g}}] \rangle + \langle\langle \Omega_{\vec{f}} \mid \mathcal{P}^{+}_{1\vec{g}} \rangle\rangle \quad \ldots \quad /II.2.23./$$

gde je:

$$\Omega_{\vec f}^{+} = [S_{\vec f}, H] \qquad /II.2.24./$$

Posle izražavanja operatora $\Omega_{\vec f}$ pomoću kvazi-Pauli operatora uz zadržavanje samo operatora tipa $\mathcal{P}_1$, jer svi ostali daju eksponencionalno male doprinose, mi dobijamo posle prelaska na Boze-operatore sledeću jednačinu u impulsnom prostoru:

$$\langle\langle B_{1\vec k} | B_{1\vec k}^{+} \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \frac{1+2C_{10}}{E - E_{1\vec k}} \qquad /II.2.25./$$

gde je:

$$C_{10} = \langle B_{1\vec n}^{+} B_{1\vec n} \rangle_0 = \frac{1}{H} \sum_{\vec k} \frac{1}{e^{\mu\mathcal{H} + S(J_0 - J_{\vec k})} - 1} \qquad /II.2.26/$$

i

$$E_{1\vec k} = \mu\mathcal{H} + S(J_0 - J_{\vec k}) + \frac{1}{H} \sum_{\vec q} \langle B_{2\vec q}^{+} B_{1\vec q} \rangle_0 (J_{\vec k} + J_{\vec q} - J_{\vec k - \vec q} - J_0) \qquad /II.2.27./$$

što na sličan način kao i ranije daje za magnetizaciju ~~da je Sonov~~ Dajsonov rezultat

$$\sigma = 1 - \frac{1}{S}\Big\{ \tau^{3/2} Z_{3/2}\Big(\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}\Big) + \frac{3\pi}{4} \tau^{5/2} Z_{5/2}\Big(\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}\Big) + \qquad /II.2.28./$$

$$+ \frac{33\pi^2}{32} \tau^{7/2} Z_{7/2}\Big(\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}\Big) + 6\pi Z_{3/2}\Big(\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}\Big) Z_{5/2}\Big(\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}\Big)\tau^4 \Big\} \qquad /II.2.29./$$

$$\tau = 4\pi S I$$

Na ovaj način pokazali smo da se i u slučaju proizvodnog spina u kvazi-Paulionskoj slici relativno lako dobija Dajsonov rezultat.

II.3 - HAJZENBERGOV FEROMAGNETIK U OKOLINI TEMPERATURE PRELAZA

Videli smo da je na niskim temparaturama aktuelan isključivo proces promene projekcije od S u S-1 dok su ostali procesi, tj. promene projekcije S u S-2 i td., zanemarljivi. U okolini tačke prelaza, gde su toplotni kvanti $K_B T$ veliki, očigledno je da svi procesi promene projekcije imaju ravnopravnu ulogu, a ti procesi opisani su pojedinim članovima izraza za S^- u kvazi-Paulionskoj slici. Na osnovu formule (I.3.18) ovi članovi su:

$$\mathcal{P}_1^{+}, \quad \mathcal{P}_2^{+}\mathcal{P}_1, \quad \mathcal{P}_3^{+}\mathcal{P}_2, \ \dots \ \mathcal{P}_{2S}^{+}\mathcal{P}_{2S-1}$$

pa ovo indicira sledeći sistem funkcija Grina za istraživanje osobina feromagnetika u okolini tačke prelaza.

$$\left.\begin{aligned} G^{(1)}_{\vec f\vec g} &= \langle\langle S^+_{\vec f} \mid \mathcal{P}^+_{2\vec g} \rangle\rangle \\ G^{(2)}_{\vec f\vec g} &= \langle\langle S^+_{\vec f} \mid \mathcal{P}^+_{2\vec g}\mathcal{P}_{1\vec g} \rangle\rangle \\ G^{(\nu)}_{\vec f\vec g} &= \langle\langle S^+_{\vec f} \mid \mathcal{P}^+_{\nu+1,\vec g}\mathcal{P}_{\nu\vec g} \rangle\rangle \\ G^{(2S)}_{\vec f\vec g} &= \langle\langle S^+_{\vec f} \mid \mathcal{P}^+_{2S,\vec g}\mathcal{P}_{2S-1,\vec g} \rangle\rangle \end{aligned}\right\} \quad \ldots /II.3.1./$$

Ispitujući sistem jednačina za funkcije Grina uz korišćenje i aproksimacije slučajnih faza, koja se sastoji u sledećem načinu dekuplovanja lanca Grinovih funkcije:

$$\langle\langle \mathcal{P}^+_{\vec g}\mathcal{P}_{\vec g}\mathcal{P}_{\vec f} \mid \mathcal{P}^+_{\vec g} \rangle\rangle \cong \langle \mathcal{P}^+_{\vec g}\mathcal{P}_{\vec g} \rangle \langle\langle \mathcal{P}_{\vec f} \mid \mathcal{P}^+_{\vec g} \rangle\rangle \quad \ldots /II.3.2./$$

i u suštini znači zamenom spoljnog potencijala interakcije $I_{\vec n\vec m}$ jednim efektivnim potencijalom koji zavisi od temperature i ima oblik: $I_{\vec n\vec m} = I_{\vec n\vec m}\langle \mathcal{P}^+_{\vec n}\mathcal{P}_{\vec n} \rangle$, za funkcije $G^{(\nu)}_{\vec f\vec g}$ dobijamo sledeći sistem jednačina:

$$\left.\begin{aligned} G^{(\nu)}_{\vec k} &= \frac{i}{2\pi} A^{(\nu)}(E - E_{\nu\vec k}) \\ A^{(1)} &= 1 - N_1 - \sum_{p=2}^{2S} N_p \\ A^{(\nu)} &= N_{\nu-1} - N_\nu; \qquad \nu = 2,3,4 \ldots 2S \\ E_{\nu\vec k} &= S(J_0 - J_{\vec k})\sigma \\ N_\nu &= \langle \mathcal{P}^+_{\nu\vec n}\mathcal{P}_{\nu\vec n} \rangle \end{aligned}\right\} \quad \ldots /II.3.3./$$

Pomoću spektralnih intenzivnosti funkcije Grina $G^{(\nu)}_{\vec k}$ nalazimo da je

$$\left.\begin{aligned} N_\nu &= A^{(\nu)}\varphi \quad ; \quad \nu = 1,2,\ldots 2S \\ \varphi &= \frac{1}{N}\sum_{\vec k} \frac{1}{e^{\frac{S(J_0 - J_{\vec k})}{\theta}} - 1} \end{aligned}\right\} \quad /II.3.4./$$

a odavde izraz za magnetizaciju koji ima sledeći oblik:

$$G = \frac{1}{S}\,\frac{(S-\varphi)(1+\varphi)^{2S+1} + (1+S+\varphi)\,\varphi^{2S+1}}{(1+\varphi)^{2S+1} - \varphi^{2S+1}} \quad \ldots /II.3.5./$$

i poklapa se sa odgovarajućim izrazom koji je u referenci [7] dobijen pomoću spinskih operatora. Treba napomenuti da se ovde pretpostavljalo da je spoljašnje magnetno polje $\mathcal{H} = 0$.

Na ovaj način pokazali smo da ~~smo~~ se pomoću kvazi-Pauli operatora mogu reprodukovati rezultati dobijeni veoma glomaznom procedurom računa sa spinskim operatorima. Prema tome, mi smo u ovoj glavi testirali prilaz feromagnetnim fenomenima pomoću kvazi-Pauli operatora i mnogo jednostavnijim računom dobili već poznate i priznate rezultate za feromagnetik sa prostom rešetkom. Pošto je ovaj prilaz na ovaj način proveren kao dobar, mi ćemo ga u sledećoj glavi primeniti na feromagnetik sa dve podrešetke.

III GLAVA

ANALIZA HAJZENBERGOVOG FEROMAGNETIKA SA DVE PODREŠETKE

III.1 - FEROMAGNETIK SA DVE PODREŠETKE U HARMONISKOJ APROKSIMACIJI

Kao što smo već rekli, Hamiltonijan feromagnetika sa dve podrešetke može se dobiti iz Hamiltonijana (I.2.8) odgovarajućim "usložnjavanjem" vektora $\vec{n}$ i $\vec{m}$. Izvršićemo prelaz

$$\vec{n} \to \vec{n} + \vec{u}_\alpha \qquad \alpha, \beta = 1,2$$
$$\vec{m} \to \vec{m} + \vec{u}_\beta \qquad \ldots \qquad /\mathrm{III.1.1.}/$$

i osim toga prepostavićemo da atomi raznih podrešetki imaju različite magnetne momente μ_1 i μ_2. Tada se formula (I.2.8) može napisati na sledeći način:

$$H = -\mathcal{H}\sum_{\vec{n}\alpha} \mu_\alpha S^z_{\vec{n}\alpha} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta} I_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}\bar{S}_{\vec{n}\alpha}\bar{S}_{\vec{m}\beta} =$$
$$= -\mathcal{H}\sum_{\vec{n}}\left(\mu_1 S^z_{\vec{n}1} + \mu_2 S^z_{\vec{n}2}\right) - \sum_{\vec{n}\vec{m}}\left(I_{\vec{n}_1\vec{m}_1}\bar{S}_{\vec{m}_1} + I_{\vec{n}_2\vec{m}_2}\bar{S}_{\vec{n}_2}\bar{S}_{\vec{m}_2} + \right.$$
$$\left. + I_{\vec{n}_1\vec{m}_2}\bar{S}_{\vec{n}_1}\bar{S}_{\vec{m}_2} + I_{\vec{n}_2\vec{m}_1}\bar{S}_{\vec{n}_2}\bar{S}_{\vec{m}_1}\right) \quad \ldots \quad /\mathrm{III.1.2.}/$$

Ako uvedemo oznake:

$$I_{\vec{n}_1\vec{m}_1} = I^{11}_{\vec{n}\vec{m}} \qquad I_{\vec{n}_2\vec{m}_2} = I^{22}_{\vec{n}\vec{m}} \qquad I_{\vec{n}_1\vec{m}_2} = I_{\vec{n}_2\vec{m}_1} = I^{12}_{\vec{n}\vec{m}} \quad \cdots /\mathrm{III.1.3.}/$$

onda se Hamiltonijan (III.1.2) može napisati u obliku:

$$H = -\mu_1\mathcal{H}\sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}1} - \mu_2\mathcal{H}\sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}2} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I^{11}_{\vec{n}\vec{m}}\bar{S}_{\vec{n}1}\bar{S}_{\vec{m}1} -$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I^{22}_{\vec{n}\vec{m}}\bar{S}_{\vec{n}2}\bar{S}_{\vec{m}2} - \sum_{\vec{n}\vec{m}} I^{12}_{\vec{n}\vec{m}}\bar{S}_{\vec{n}1}\bar{S}_{\vec{m}2} \quad \ldots \quad /\mathrm{III.1.4.}/$$

Dalje je neophodno da ovaj Hamiltonijan transformišemo tako da u njemu figurišu operatori S_1^-, S_2^-, S_1^+, S_2^+ koji menjaju vrednost z projekcija po podrešetkama i operatori $S_1 - S_1^z$ i $S_2 - S_2^z$ koji predstavljaju meru odstupanja z projekcija od njihovih maksimalnih vrednosti S_1 i S_2. Transformacija, koja je potpuno analogna onoj koja je izvršena za feromagnetik sa prostom rešetkom dovodi nas do Hamiltonijana (III.1.4) napisanog u sledećem obliku:

$$H = H_0 + H_2 + H_4 \quad , \quad , \quad . \quad /\mathrm{III.1.5.}/$$

gde je:

$$H_0 = -N\{\mu_1 S_1 \mathcal{H} + \mu_2 S_2 \mathcal{H} + \frac{1}{2} S_1^2 J_0^{11} + \frac{1}{2} S_2^2 J_0^{22} + S_1 S_2 J_0^{12}\}$$

$$H_2 = (\mu_1 \mathcal{H} + S_1 J_0^{11} + S_2 J_0^{12}) \sum_{\vec{n}} (S_1 - S^z_{\vec{n}}) +$$

$$+ (\mu_2 \mathcal{H} + S_2 J_0^{22} + S_1 J_0^{12}) \sum_{\vec{n}} (S_2 - S^z_{\vec{n}2}) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I^{11}_{\vec{n}\vec{m}} S^-_{\vec{n}1} S^+_{\vec{m}1} -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I^{22}_{\vec{n}\vec{m}} S^-_{\vec{n}2} S^+_{\vec{m}2} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} (S^-_{\vec{n}1} S^+_{\vec{m}2} + S^-_{\vec{n}2} S^+_{\vec{m}1}) I^{12}_{\vec{n}\vec{m}}$$

$$H_4 = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I^{11}_{\vec{n}\vec{m}} (S_1 - S^z_{\vec{n}1})(S_1 - S^z_{n2}) -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I^{22}_{\vec{n}\vec{m}} (S_2 - S^z_{\vec{n}2})(S_2 - S^z_{\vec{m}2}) -$$

$$- \sum_{\vec{n}\vec{m}} I^{12}_{\vec{n}\vec{m}} (S_1 - S^z_{\vec{n}1})(S_2 - S^z_{n2})$$

$$J_0^{11} = \sum_{\vec{n}} I^{11}_{\vec{n}0}$$

$$J_0^{22} = \sum_{\vec{n}} I^{22}_{\vec{n}0}$$

$$J_0^{12} = \sum_{\vec{n}} I^{12}_{\vec{n}0} \qquad /III.1.6./$$

U ovom paragrafu izvršićemo analizu Hamiltonijana u Blohovoj aproksimaciji, a to znači da ćemo zadržati samo Hamiltonijan H_2 i operatore u njemu zameniti Boze operatorima na sledeći način:

$$\left.\begin{array}{l} S^-_{\vec n_1} = \sqrt{2S_1}\, B^+_{\vec n_1} \;;\; S^+_{\vec n_1} = \sqrt{2S_1}\, B_{\vec n_1} \;;\; S_1 - S^z_{\vec n_1} = B^+_{\vec n_1} B_{\vec n_1} \\ S^-_{\vec n_2} = \sqrt{2S_2}\, B^+_{\vec n_2} \;;\; S^+_{\vec n_2} = \sqrt{2S_2}\, B_{\vec n_2} \;;\; S_2 - S^z_{\vec n_2} = B^+_{\vec n_2} B_{\vec n_2} \end{array}\right\} \quad \ldots /III.1.7/$$

Posle ovoga Hamiltonijan H_2 možemo napisati na sledeći način:

$$H_2 = \Delta_1 \sum_{\vec n} B^+_{\vec n 1} B_{\vec n 1} - S_1 \sum_{\vec n \vec m} I^{11}_{\vec n \vec m} B^+_{\vec n 1} B_{\vec m 1} + \Delta_2 \sum_{\vec n} B^+_{\vec n 2} B_{\vec n 2} - S_2 \sum_{\vec n \vec m} I^{22}_{\vec n \vec m} B^+_{\vec n 2} B_{\vec m 2} - \sqrt{S_1 S_2} \sum_{\vec n \vec m} I^{12}_{\vec n \vec m} \left(B^+_{\vec n 1} B_{\vec m 2} + B^+_{\vec n 2} B_{\vec m 1}\right)$$

gde je:

$$\Delta_1 = \mu_1 \mathcal{H} + S_1 J_0^{11} + S_2 J_0^{12} \;; \qquad \Delta_2 = \mu_2 \mathcal{H} + S_2 J_0^{22} + S_1 J_0^{12} \quad \ldots /III.1.9/$$

Posle Furije transformacija operatora B_1 i B_2

$$B_{1\vec n} = \frac{1}{\sqrt N} \sum_{\vec k} B_{1\vec k}\, e^{i\vec k \vec n} \;; \quad B_{2\vec n} = \frac{1}{\sqrt N} \sum_{\vec k} B_{2\vec k}\, e^{i\vec k \vec n} \quad \ldots /III.1.10/$$

izraz (III.1.8) se svodi na:

$$H_2 = \sum_{\vec k} \left\{ (\Delta_1 - S_1 J^{11}_{\vec k}) B^+_{1\vec k} B_{1\vec k} + (\Delta_2 - S_2 J^{22}_{\vec k}) B^+_{2\vec k} B_{2\vec k} - \sqrt{S_1 S_2}\, J^{12}_{\vec k} \left(B^+_{1\vec k} B_{2\vec k} + B^+_{2\vec k} B_{1\vec k}\right)\right. \quad \ldots /III.1.11/$$

gde je:

$$J^{11}_{\vec k} = \sum_{\vec n} I^{11}_{\vec n 0}\, e^{i\vec k \vec n} \;; \quad J^{22}_{\vec k} = \sum_{\vec n} I^{22}_{\vec n 0}\, e^{i\vec k \vec n} \quad J^{12}_{\vec k} = \sum_{\vec n} I^{12}_{\vec n 0}\, e^{i\vec k \vec n} \quad /III.1.12/$$

Hamiltonijan (III.1.11) treba dijagonalizovati još jedanput zbog prisustva trećeg člana koji nije dijagonalan. U stvari dovoljno je dijagonalizovati samo izraz pod znakom sume, koji ćemo napisati u sledećem obliku:

$$h = E_1 B_1^+ B_1 + E_2 B_2^+ B_2 + E_{12} (B_1 B_2 + B_2^+ B_1) = \left(B_1^+ \; B_1^+\right) \begin{pmatrix} E_1 & E_{12} \\ E_{12} & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad \ldots /III.1.13/$$

gde su uvedene oznake:

$$\left.\begin{array}{l} E_1 = \Delta_1 - S_1 J^{11}_{\vec k} \;; \quad E_2 = \Delta_2 - S_2 J^{22}_{\vec k} \\ E_{12} = \sqrt{S_1 S_2}\, J^{12}_{\vec k} \\ B_1 \equiv B_{1\vec k} \;; \quad B_2 \equiv B_{2\vec k} \end{array}\right\} \quad \ldots /III.1.14/$$

Kvadratna forma (III.1.13) može se dijagonalizovati pomoću unitarne matrice oblika:

$$\left.\begin{array}{l} U=\begin{pmatrix}\alpha & -\beta\\ \beta & \alpha\end{pmatrix} \;;\; U^{-1}=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ -\beta & \alpha\end{pmatrix} \\ \alpha^2+\beta^2=1 \end{array}\right\} \quad \ldots \quad /III.1.15./$$

Pošto su E_1, E_2 i E_{12} реални matrica U ima realne elemente pa je prema tome ona samo specijalni slučaj unitarnih matrica, koje se nazivaju ortogonalnim matricama. Ako uvedemo oznake

$$\left.\begin{array}{l} (B_1^+ B_2^+)\equiv\vec{B}^+ \;;\; \begin{pmatrix}B_1\\ B_2\end{pmatrix}\equiv\vec{B} \\ \begin{pmatrix}E_1 & E_{12}\\ E_{12} & E_2\end{pmatrix}\equiv M \end{array}\right\} \quad \ldots \quad /III.1.16./$$

kvadratnu formu h možemo dalje transformisati:

$$h=\vec{B}^+M\vec{B}=\vec{B}^+U^{-1}UMU^{-1}UB=$$
$$\vec{C}^+UMU^{-1}\vec{C}=\vec{C}^+\Lambda\vec{C} \quad \ldots \quad /III.1.17./$$

gde je:

$$\vec{C}^+=(C_1^+C_2^+) \;;\; \vec{C}=\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix} \;;\; \Lambda=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix} \quad \ldots \quad /III.1.18./$$

Znači da, s obzirom na (III.1.17), od operatora B prelazimo na nove Boze operatore transformacijom

$$\begin{pmatrix}B_1\\ B_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha & -\beta\\ \beta & \alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix};\quad \begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ -\beta & \alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix} \quad \ldots \quad /III.1.19/$$

Pošto je: $\vec{C}^+\Lambda\vec{C}=\lambda_1C_1^+C_1+\lambda C_2^+C_2 \quad \ldots \quad /III.1.20/$

to znači da ćemo koeficijente α i β ortogonalne matrice U odrediti tako da h bude dijagonalno po operatorima C.

Izjednačujući jezgra u (III.1.17) dobijamo posle množenja sa U s desna: $UM=\Lambda U$

tj.

$$\begin{pmatrix}\alpha & -\beta\\ \beta & \alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix}E_1 & E_{12}\\ E_{12} & E_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha & -\beta\\ \beta & \alpha\end{pmatrix}$$

što se svodi na sledeći sistem linearnih jednačina po α i β

$$(E_1-\lambda_1)\alpha-E_{12}\beta=0 \qquad (E_2-\lambda_2)\alpha+E_{12}\beta=0$$
$$E_{12}\alpha+(\lambda_1-E_2)\beta=0 \qquad E_{12}\alpha+(E_1-\lambda_2)\beta=0$$

Lako se vidi da uslovi za netrivijalnost rešenja α i β u oba sistema daju iste vrednosti za λ:

$$\lambda_{1,2}=\frac{E_1+E_2}{2}\pm\sqrt{\left(\frac{E_1-E_2}{2}\right)+\left(E_{12}\right)^2} \quad \ldots \quad /III.1.21/$$

Dalje sledi

$$\frac{\beta}{\alpha}=\frac{E_1-\lambda_2}{E_{12}}=\frac{E_1-E_2}{E_{12}}+\sqrt{\left(\frac{E_1-E_2}{E_{12}}\right)^2+1}=L \quad \ldots \quad /III.1.22/$$

tj., s obzirom na (III.1.15)

$$\alpha=\frac{1}{\sqrt{1+L^2}} \;;\; \beta=\frac{L}{\sqrt{1+L^2}} \quad \ldots \quad /III.1.23/$$

Na osnovu ovih rezultata, možemo konačno pisati

$$H = \sum_{\vec{K}} \left\{ \lambda_1(\vec{K}) C^{+}_{1\vec{K}} C_{1\vec{K}} + \lambda_2(\vec{K}) C^{+}_{2\vec{K}} C_{2\vec{K}} \right\} \quad \ldots \quad /III.1.23/$$

gde je:

$$\lambda_{1,2}(\vec{K}) = \frac{\Delta_1 + \Delta_2 - S_1 J^{11}_{\vec{K}} - S_2 J^{22}_{\vec{K}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta_1 \Delta_2 - S_1 J^{11}_{\vec{K}} + S_2 J^{22}_{\vec{K}}}{2}\right)^2 + S_1 S_2 (J^{12}_{\vec{K}})^2} \quad \ldots \quad /III.1.24/$$

Formule transformacije od operatora B na operatore C su:

$$\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1+L^2}} \begin{pmatrix} 1 & -L \\ L & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$$

što se svodi na:

$$B_{1\vec{K}} = \frac{C_{1\vec{K}} - L_{\vec{K}} C_{2\vec{K}}}{\sqrt{1 + L_{\vec{K}}^2}} \; ; \; B_{2\vec{K}} = \frac{L_{\vec{K}} C_{1\vec{K}} + C_{2\vec{K}}}{\sqrt{1 + L_{\vec{K}}^2}} \quad \ldots \quad /III.1.25/$$

$$L_{\vec{K}} = \frac{\Delta_1 - \Delta_2 - S_1 J^{11}_{\vec{K}} + S_2 J^{22}_{\vec{K}}}{\sqrt{S_1 S_2}\, J^{12}_{\vec{K}}} + \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2 - S_1 J^{11}_{\vec{K}} + S_2 J^{22}_{\vec{K}}}{\sqrt{S_1 S_2}\, J^{12}_{\vec{K}}}\right)^2}$$

Kao što vidimo u feromagnetiku sa dve podrešetke imamo dve vrste magnona čije su energije $\lambda_1(\vec{K})$ i $\lambda_2(\vec{K})$ definisane jednačinom (III.1.24).

Pošto su formule veoma glomazne mi ćemo u njima izvršiti sledeće uprošćavanje:

a/ pretpostavljajući simetričan raspored spinova i jedne i druge podrešetke i to tako da je spin jedne podrešetke okružen spinovima druge podrešetke kao najbližim susedima, mi možemo I^{11} i I^{22} zanemariti u odnosu na I^{12};

b/ pretpostavićemo da je spoljašnje magnetno polje ravno nuli i da spinovi obe podrešetke imaju isti intenzitet $S_1 = S_2 = S$.

To ovaj uprošćeni slučaj opšte formule se svode na:

$$\lambda_1(\vec{K}) = S\,(J^{12}_0 + J^{12}_{\vec{K}}) \quad \ldots \quad /III.1.27/$$

$$\lambda_2(\vec{K}) = S\,(J^{12}_0 - J^{12}_{\vec{K}}) \quad \ldots \quad /III.1.28/ \qquad L_{\vec{K}} = 1 \quad \ldots \quad /III.1.29/$$

i transformacione formule glase:

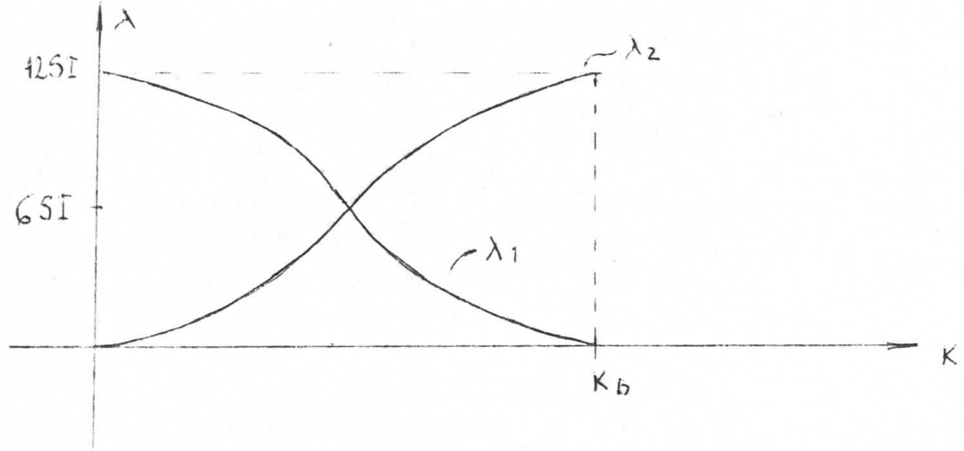
$$B_{1\vec{K}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_{1\vec{K}} - C_{2\vec{K}}) \; ; \; B_{2\vec{K}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_{1\vec{K}} + C_{2\vec{K}}) \quad \ldots \quad /III.1.30/$$

Kao što vidimo energija $\lambda_2(\vec{K}) \to 0$ kada $\vec{k} \to 0$ dok energija $\lambda_1(\vec{K}) \to 0$ kad $\vec{k}$ teži graničnom impulsu prve Briluenove zone $k_x, k_y, k_z = \frac{\pi}{a}$ gde je „a" konstanta rešetke. U aproksimaciji najbližih suseda:

$$\lambda_1(\vec{K}) = SI\,[6 + 2(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)]$$

$$\lambda_2(\vec{K}) = SI\,[6 - 2(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)]$$

što se grafički može predstaviti:



Na osnovu slike je jasno, zbog pune simetrije zakona disperzije, da su obe vrste elementarnih ekscitacija iste populacije, pri čemu za ekscitacije tipa "2" osnovni doprinos daje oblast malih talasnih vektora dok za ekscitacije tipa "1" osnovni doprinos daje oblast talasnih vektora, u okolini graničnog vektora prve Briluenove zone. Zbog toga ćemo pri daljem izračunavanju koristiti ovu činjenicu i uvek pisati:

$$\langle C^{+}_{1\vec{k}} C_{1\vec{k}} \rangle = \langle C^{+}_{2\vec{k}} C_{2\vec{k}} \rangle = n^{(0)}_{\vec{k}} \quad \ldots \quad /III.1.31/$$

Ovaj zaključak se može naći i u referenci 1.

III.2 - TERMODINAMIČKE OSOBINE NA NISKIM TEMPERATURAMA

Analiza izvršena u prethodnom paragrafu odnosila se na slučaj feromagnetika sa dve podrešetke i različitim spinovima u svakoj od podrešetki. Ispitivati za ovakav sistem termodinamičke karakteristike i na visokim i na niskim temperaturama predstavlja veoma glomazan posao sa matematičke tačke gledišta.

Zbog toga ćemo mi razmatrati uprošćen slučaj feromagnetika sa dve podrešetke i to sa sledećim uprošćenjima:

a/ spoljašnje magnetno polje je ravno nuli,

b/ spinovi u obe podrešetke su medjusobno jednaki i ravni S = 1/2, tako da spinske operatore možemo zameniti Pauli-operatorima, c/ spinovi jedne podrešetke okruženi su spinovima druge kao najbližim susedima, što znači da se $I^{11}_{\vec{n}\vec{m}}$ i $I^{22}_{\vec{n}\vec{m}}$ mogu zanemariti u odnosu na $I^{12}_{\vec{n}\vec{m}}$. Takodje ćemo pretpostaviti da obe podrešetke imaju prostu kubnu strukturu.

Hamiltonijan (III.1.5) tada postaje:

$$H=\frac{1}{2}J_0^{12}\sum_{\vec{n}}P^{+}_{\vec{n}1}P_{\vec{n}1}+\frac{1}{2}J_0^{12}\sum_{\vec{n}}P^{+}_{2\vec{n}}P_{2\vec{n}}-$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}I^{12}_{\vec{n}\vec{m}}\left(P^{+}_{\vec{n}1}P_{\vec{m}2}+P^{+}_{\vec{n}2}P_{\vec{m}1}\right)-$$
$$-\sum_{\vec{n}\vec{m}}I^{12}_{\vec{n}\vec{m}}P^{+}_{\vec{n}1}P_{\vec{n}1}P^{+}_{\vec{m}2}P_{\vec{m}2} \qquad \ldots /III.2.1./$$

Da bismo formirali sistem jednačina za funkcije Grina treba naći komutatore operatora P_{1} i P_{2} sa Hamiltonijanom (III.2.1). Koristeći komutacione relacije za Pauli operatore lako nalazimo.

$$[P_{\vec{e}1},H]=\frac{1}{2}J_0^{12}P_{\vec{e}1}-\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}}I^{12}_{\vec{e}\vec{m}}P_{\vec{m}2}+$$
$$+\sum_{\vec{m}}I^{12}_{\vec{e}\vec{m}}P^{+}_{\vec{e}1}P_{\vec{e}1}P_{\vec{m}2}-\sum_{\vec{m}}I^{12}_{\vec{e}\vec{m}}P^{+}_{\vec{m}2}P_{\vec{m}2}P_{\vec{e}1}$$
$$[P_{\vec{e}2},H]=\frac{1}{2}J_0^{12}P_{\vec{e}2}-\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}}I^{12}_{\vec{e}\vec{m}}P_{\vec{m}1}+$$
$$+\sum_{\vec{m}}I^{12}_{\vec{e}\vec{m}}P^{+}_{\vec{e}2}P_{\vec{e}2}P_{\vec{m}1}-\sum_{\vec{m}}I^{12}_{\vec{e}\vec{m}}P^{+}_{\vec{m}1}P_{\vec{m}1}P_{\vec{e}2}$$

Posle Furije transformacija

$$P_{\vec{e}1}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{K}}P_{1\vec{K}}e^{i\vec{K}\vec{e}}\ ;\ P_{\vec{e}2}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{K}}P_{2\vec{K}}e^{-i\vec{K}\vec{e}}$$
$$\Omega_{\vec{e}1}=[P_{\vec{e}1},H]=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{K}}\Omega_{1\vec{K}}e^{i\vec{K}\vec{e}}\ ;\ \Omega_{\vec{e}2}=[P_{\vec{e}2},H]=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{K}}\Omega_{2\vec{K}}e^{-i\vec{n}\vec{e}}$$
$$I^{12}_{\vec{e}\vec{m}}=\frac{1}{N}\sum_{\vec{K}}J^{12}_{\vec{K}}e^{i\vec{K}(\vec{e}-\vec{m})}$$

nalazimo da je:

$$\Omega_{1\vec{K}}=\frac{1}{2}J_0^{12}P_{1\vec{K}}-\frac{1}{2}J^{12}_{\vec{K}}P_{2\vec{K}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\Big\{J^{12}_{\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}P^{+}_{1\vec{q}_2}P_{1\vec{q}_1}P_{2,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}-$$
$$-J^{12}_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}P^{+}_{2\vec{q}_2}P_{2\vec{q}_1}P_{1,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}\Big\}$$
$$\Omega_{2\vec{K}}=\frac{1}{2}J_0^{12}P_{2\vec{K}}-\frac{1}{2}J^{12}_{\vec{K}}P_{1\vec{K}}+\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\Big\{J^{12}_{\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}P^{+}_{2\vec{q}_2}P_{2\vec{q}_1}P_{1,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}-$$
$$-J^{12}_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}P^{+}_{1\vec{q}_2}P_{1\vec{q}_1}P_{2,\vec{K}-\vec{q}_2+\vec{q}_2}\Big\} \qquad \ldots /III.2.3./$$

Na osnovu formule (III.2.3) i formule (I.4.8) možemo formulisati sledeći zatvoren sistem jednačina za funkcije Grina:

$$
\begin{aligned}
&(E - \tfrac{1}{2}J_0^{12})\langle\langle P_{1\vec k} | P^+_{1\vec k}\rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\left(1 - 2\langle P^+_{1\vec e} P_{1\vec e}\rangle\right) - \frac{1}{2} J^{12}_{\vec k}\langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle + \\
&+ \frac{1}{N}\sum_{\vec q_1 \vec q_2}\Big\{J^{12}_{\vec k - \vec q_1 + \vec q_2}\langle\langle P^+_{1\vec q_2} P_{1\vec q_1} P_{2,\vec k-\vec q_1+\vec q_2} | P^+_{1\vec k}\rangle\rangle - J^{12}_{\vec q_1 - \vec q_2}\langle\langle P^+_{2\vec q_2} P_{2\vec q_1} P_{1\vec k - \vec q_1 + \vec q_2}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle\Big\} \\
&(E - \tfrac{1}{2}J_0^{12})\langle\langle P_{2\vec k} | P^+_{2\vec k}\rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\left(1 - 2\langle P^+_{2\vec e} P_{2\vec e}\rangle\right) - \frac{1}{2} J^{12}_{\vec k}\langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle + \\
&+ \frac{1}{N}\sum\Big\{J^{12}_{\vec k - \vec q_1 + \vec q_2}\langle\langle P^+_{2\vec q_2} P_{2\vec q_1} P_{1,\vec k-\vec q_1+\vec q_2} | P^+_{2\vec k}\rangle\rangle - J_{\vec q_1 - \vec q_2}\langle\langle P^+_{1\vec q_2} P_{1\vec q_1} P_{2\vec k - \vec q_1 + \vec q_2}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle\Big\} \\
&(E - \tfrac{1}{2}J_0^{12})\langle\langle P_{1\vec k} | P^+_{2\vec k}\rangle\rangle = -\frac{1}{2} J^{12}_{\vec k}\langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle + \\
&+ \frac{1}{N}\sum\Big\{J^{12}_{\vec k - \vec q_1 + \vec q_2}\langle\langle P^+_{1\vec q_2} P_{1\vec q_1} P_{2\vec k-\vec q_1+\vec q_2} | P^+_{2\vec k}\rangle\rangle - J^{12}_{\vec q_1 - \vec q_2}\langle\langle P^+_{2\vec q_2} P_{2\vec q_1} P_{1\vec k - \vec q_1 + \vec q_2}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle\Big\} \\
&(E - \tfrac{1}{2}J_0^{12})\langle\langle P_{2\vec k} | P^+_{1\vec k}\rangle\rangle = -\frac{1}{2} J^{12}_{\vec k}\langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle + \\
&+ \frac{1}{N}\sum_{\vec q_1 \vec q_2}\Big\{J^{12}_{\vec k - \vec q_1 + \vec q_2}\langle\langle P^+_{2\vec q_2} P_{2\vec q_1} P_{1\vec k-\vec q_1+\vec q_2} | P^+_{1\vec k}\rangle\rangle - J^{12}_{\vec q_1 - \vec q_2}\langle\langle P^+_{1\vec q_2} P_{1\vec q_2} P_{2,\vec k - \vec q_1 + \vec q_2}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle\Big\}
\end{aligned}
\tag{III.2.4}
$$

Po analogiji sa transformacionim formulama od operatora C na operatore B zgodno je od sistema jednačina (III.2.4) preći na nov sistem jednačina u kome figurišu funkcije:

$$
\begin{aligned}
\Gamma_{11}(\vec k) &= \frac{1}{2}\Big\{\langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle + \langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle + \\
&+ \langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle + \langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle\Big\} \\
\Gamma_{22}(\vec k) &= \frac{1}{2}\Big\{\langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle - \langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle \\
&- \langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle + \langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle\Big\} \\
\Gamma_{12}(\vec k) &= \frac{1}{2}\Big\{-\langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle + \langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle - \\
&- \langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle + \langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle\Big\} \\
\Gamma_{21}(\vec k) &= \frac{1}{2}\Big\{-\langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle - \langle\langle P_{1\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle + \\
&+ \langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{1\vec k}\rangle\rangle + \langle\langle P_{2\vec k}|P^+_{2\vec k}\rangle\rangle\Big\}
\end{aligned}
\tag{III.2.5}
$$

Ovaj novi sistem jednačina ima oblik:

III.2.6.

gde je:

$$E_K^{(1)} = \frac{1}{2}\left(J_0'^2 - J_K'^2\right) \qquad E_K^{(2)} = \frac{1}{2}\left(J_0'^2 + J_{\vec{K}}'^2\right) \qquad /III.2.7./$$

U ovom sistemu jednačina zamenićemo Pauli operatore Boze operatorima i to na sledeći način:

$$\left.\begin{aligned} P_{i\vec{e}} &= B_{i\vec{e}} - B^+_{i\vec{e}} B_{i\vec{e}} B_{i\vec{e}} \\ P^+_{i\vec{e}} &= B^+_{i\vec{e}} - B^+_{i\vec{e}} B^+_{i\vec{e}} B_{i\vec{e}} \end{aligned}\right\} \quad \ldots \quad (III\ 28)$$

$$i = 1,2$$

što posle Furije transformacija daje:

$$\begin{aligned} P_{i\vec{k}} &= B_{i\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} B^+_{i\vec{q}_2} B_{i\vec{q}_1} B_{i,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \\ P^+_{i\vec{k}} &= B^+_{i\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} B^+_{i,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} B_{i\vec{q}_1} B_{i\vec{q}_2} \end{aligned} \qquad (III\ 29)$$

$$i = 1,2$$

Od operatora B prećićemo na operatore C po formuli (III.1.30):

$$B_{1\vec{k}} = \sum_{i=1}^{2} \theta_i C_{i\vec{k}} \quad ; \quad B^+_{1\vec{k}} = \sum_{i=1}^{2} \theta_i C^+_{i\vec{k}}$$

$$B_{2\vec{k}} = \sum_{i=1}^{2} W_i C_{i\vec{k}} \quad ; \quad B^+_{2\vec{k}} = \sum_{i=1}^{2} W_i C^+_{i\vec{k}}$$

gde je:

$$\theta_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \theta_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\omega_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \omega_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad /III.2.11./$$

/III.2.6./

$$(E - E^{(1)}_{\vec{K}})\Gamma_{11}(\vec{K}) = \frac{1}{2\pi}\left(1 - \langle P^{+}_{1\vec{e}} P_{1\vec{e}}\rangle - \langle P^{+}_{2\vec{e}} P_{2\vec{e}}\rangle\right) +$$

$$+ \frac{1}{2N}\sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2}\Big\{\big(J^{12}_{\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} - J^{12}_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}\big)\big(\langle\langle P^{+}_{1\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{1\vec{K}}\rangle\rangle +$$

$$+ \langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_1} P_{1,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{2\vec{K}}\rangle\rangle + \langle\langle P^{+}_{1\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2,\vec{K}-\vec{q}_1,\vec{q}_2} | P^{+}_{2\vec{K}}\rangle\rangle +$$

$$+ \langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_1} P_{1,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{1\vec{K}}\rangle\rangle$$

$$(E - E^{(2)}_{\vec{K}})\Gamma_{22}(\vec{K}) = \frac{1}{2\pi}\left(1 - \langle P^{+}_{2\vec{e}} P_{2\vec{e}}\rangle - \langle P_{2\vec{e}} P_{2\vec{e}}\rangle\right) +$$

$$+ \frac{1}{2N}\sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2}\Big\{\big(J^{12}_{\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} + J^{12}_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}\big)\big(\langle\langle P^{+}_{1\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{2\vec{K}}\rangle\rangle -$$

$$- \langle\langle P^{+}_{1\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{2\vec{K}}\rangle\rangle - \langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_1} P_{1\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{1\vec{K}}\rangle\rangle\big)$$

$$(E - E^{(1)}_{\vec{K}})\Gamma_{12}(\vec{K}) = \frac{1}{2N}\sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2}\big(J^{12}_{\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} - J^{12}_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}\big)\big(-\langle\langle P^{+}_{1\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{1\vec{K}}\rangle\rangle +$$

$$+ \langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_1} P_{1,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{2\vec{K}}\rangle\rangle + \langle\langle P^{+}_{1\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{2\vec{K}}\rangle\rangle -$$

$$\langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_1} P_{1,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{1\vec{K}}\rangle\rangle\big)$$

$$(E - E^{(2)}_{\vec{K}})\Gamma_{21}(\vec{K}) = \frac{1}{2N}\sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2}\big(J^{12}_{\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} + J^{12}_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}\big)\big(-\langle\langle P_{2\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{1\vec{K}}\rangle\rangle$$

$$- \langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{2\vec{K}}\rangle\rangle + \langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_1} P_{1\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{1\vec{K}}\rangle\rangle +$$

$$+ \langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_1} P_{1,\vec{K}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^{+}_{2\vec{K}}\rangle\rangle\big)$$

tada formule (III.2.9) postaju

$$
\begin{aligned}
P_{1\vec{k}} &= \sum_i \theta_i C_{i\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2 i_1 i_2 i_3} \theta_{i_1}\theta_{i_2}\theta_{i_3} C^+_{i_1,\vec{q}_2} C_{i_3,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} C_{i_2\vec{q}_1} \\
P_{2\vec{k}} &= \sum_i \omega_i C_{i\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2 i_1 i_2 i_3} \omega_{i_1}\omega_{i_2}\omega_{i_3} C^+_{i_1,\vec{q}_2} C_{i_2,\vec{q}_1} C_{i_3,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \\
P^+_{1\vec{k}} &= \sum_i \theta_i C^+_{i\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2 i_1 i_2 i_3} \theta_{i_1}\theta_{i_2}\theta_{i_3} C^+_{i_3,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} C^+_{i_2,\vec{q}_1} C_{i_1,\vec{q}_2} \qquad /III.2.12/ \\
P^+_{2\vec{k}} &= \sum_i \omega_i C^+_{i\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2 i_1 i_2 i_3} \omega_{i_1}\omega_{i_2}\omega_{i_3} C^+_{i_3,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} C^+_{i_2,\vec{q}_1} C_{i_1\vec{q}_2}
\end{aligned}
$$

Zamenjujući (III.2.12) u sistemu jednačina (III.2.6) i zadržavajući samo Grinove funkcije sa četiri Boze operatora C, posle dekuplovanja funkcija Grina na bazi Vik-ove teoreme, tipa:

$$
\begin{aligned}
&\langle\langle C^+_{i_1\vec{k}_2} C_{i_2\vec{k}_1} C_{i_3,\vec{k}-\vec{k}_1+\vec{k}_2} | C^+_{i_4,\vec{k}} \rangle\rangle \cong \\
&\cong \langle C^+_{i_1\vec{k}_2} C_{i_4\vec{k}_2}\rangle_0 \,\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\,\delta_{i_1 i_2} \langle\langle C_{i_3,\vec{k}} | C^+_{i_4,\vec{k}}\rangle\rangle + \\
&+ \langle C^+_{i_1\vec{k}_2} C_{i_1\vec{k}_2}\rangle_0 \,\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}}\,\delta_{i_1,i_3} \langle\langle C_{i_2,\vec{k}} | C^+_{i_4\vec{k}}\rangle\rangle = \\
&= n^{(0)}_{\vec{k}_2}\left(\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\delta_{i_1,i_2}\langle\langle C_{i_3,\vec{k}} | C^+_{i_4\vec{k}}\rangle\rangle + \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}}\delta_{i_1 i_3}\langle\langle C_{i_2\vec{k}} | C^+_{i_4\vec{k}}\rangle\rangle\right)
\end{aligned}
$$

i

$$
\begin{aligned}
&\langle\langle C_{i_1\vec{k}} | C^+_{i_2,\vec{k}-\vec{k}_1+\vec{k}_2} C^+_{i_3,\vec{k}_1} C_{i_4\vec{k}_2}\rangle\rangle = \\
&= \langle C^+_{i_4\vec{k}_2} C_{i_4\vec{k}_2}\rangle_0 \,\delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\,\delta_{i_3 i_4} \langle\langle C_{i_1\vec{k}} | C^+_{i_2\vec{k}}\rangle\rangle + \\
&+ \langle C^+_{i_4\vec{k}_2} C_{i_4\vec{k}_2}\rangle_0 \,\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}}\,\delta_{i_2,i_4} \langle\langle C_{i_1\vec{k}} | C^+_{i_3,\vec{k}}\rangle\rangle = \\
&= n^{(0)}_{\vec{k}_2}\left(\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\delta_{i_3,i_4}\langle\langle C_{i_1\vec{k}} | C^+_{i_2\vec{k}}\rangle\rangle + \delta_{\vec{k}_1\vec{k}}\delta_{i_2 i_4}\langle\langle C_{i_1\vec{k}} | C^+_{i_3\vec{k}}\rangle\rangle\right)
\end{aligned}
$$

dobijamo :

$$\langle\langle C_{1\vec{k}} | C^{+}_{1\vec{k}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{1+2n^{(0)}}{E-(1-2n^{(0)})E^{(1)}_{\vec{k}}}$$

$$\langle\langle C_{2\vec{k}} | C^{+}_{2\vec{k}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{1+2n^{(0)}}{E-(1-2n^{(0)})E^{(2)}_{\vec{k}}}$$

$$\langle\langle C_{1\vec{k}} | C^{+}_{2\vec{k}} \rangle\rangle = 0 \; ; \; \langle\langle C_{2\vec{k}} | C^{+}_{2\vec{k}} \rangle\rangle = 0 \qquad \ldots /III.2.13./$$

Treba napomenuti da je u formulama (III.2.13)

$$n^{(0)} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} n^{(0)}_{\vec{k}} \qquad \ldots /III.2.14./$$

i da je učinjena aproksimacija:

$$\langle P^{+}_{1\vec{e}} P_{1\vec{e}} \rangle = \langle P^{+}_{2\vec{e}} P_{2\vec{e}} \rangle = \langle B^{+}_{1\vec{e}} B_{1\vec{e}} \rangle_0 =$$
$$= \langle B^{+}_{2\vec{e}} B_{2\vec{e}} \rangle_0 = n^{(0)} \qquad \ldots /III.2.15./$$

Na osnovu spektralnih intenzivnosti funkcije Grina $\langle\langle c_{1k} | c^{+}_{1k} \rangle\rangle$ i $\langle\langle c_{2k} | c^{+}_{2k} \rangle\rangle$ i zaključka sa kraja prethodnog paragrafa nalazimo da je:

$$\langle C^{+}_{1\vec{k}} C_{1\vec{k}} \rangle = \langle C^{+}_{2\vec{k}} C_{2\vec{k}} \rangle = \frac{1+2n^{(0)}}{e^{\frac{(1-2n^{(0)})E^{(1)}_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} \qquad \ldots /III.2.16./$$

Očigledno da je

$$\langle C^{+}_{1\vec{k}} C_{2\vec{k}} \rangle = \langle C^{+}_{2\vec{k}} C_{1\vec{k}} \rangle = 0 \qquad \ldots /III.2.17./$$

Magnetizaciju možemo izračunati po formulama:

$$\sigma = 1 - \langle P^{+}_{1\vec{e}} P_{1\vec{e}} \rangle - \langle P^{+}_{2\vec{e}} P_{2\vec{e}} \rangle =$$
$$= 1 - \langle B^{+}_{1\vec{e}} B_{1\vec{e}} \rangle - \langle B^{+}_{2\vec{e}} B_{2\vec{e}} \rangle + 2\langle B^{+}_{1\vec{e}} B_{1\vec{e}} \rangle^2_0 + 2\langle B^{+}_{2\vec{e}} B_{2\vec{e}} \rangle^2_0 =$$
$$= 1 - \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\frac{(1-2n^{(0)})E^{(1)}_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} \qquad \ldots /III.2.18./$$

Prelazeći od sume na integral i razvijajući funkciju $E^{(1)}_{k}$ u red po stepenima $\vec{k}$ sa tačnošću do šestog stepena intenziteta talasnog vektora k i znajući da je:

$$n^{(0)} = \zeta_{3/2}\,\tau^{3/2} + \frac{3\pi}{4}\,\zeta_{5/2}\,\tau^{5/2} + \frac{33\pi^2}{32}\,\tau^{7/2}$$

$$\zeta_p = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p}\ ; \quad \tau = \frac{\theta}{2\pi I} \qquad /\mathrm{III}.2.19./$$

konačno dobijamo:

$$\sigma = \sigma_H + \sigma_{A.H}$$

$$\sigma_H = 1 - 2\zeta_{3/2}\,\tau^{3/2} - \frac{3\pi}{2}\,\zeta_{5/2}\,\tau^{5/2} - \frac{33\pi^2}{16}\,\zeta_{7/2}\,\tau^{7/2}$$

$$\sigma_{A.H} = -6\,\zeta_{3/2}^2\,\tau^3 - 12\pi\,\zeta_{3/2}\,\zeta_{5/2}\,\tau^4 + O(\tau^{9/2}) \ . \ . \ /\mathrm{III}.2.20./$$

Kao što vidimo, magnetizaciju feromagnetika sa dve podrešetke, uz aproksimacije koje su ovde izvršene (bitno je zanemarivanjem I^{11} i I^{22} u odnosu na I^{12}), brže opada sa temperaturom nego u feromagnetiku sa prostom rešetkom, jer kao što vidimo ima negativnu korekciju proporcionalna trećem stepenu apsolutne temparature. Kao što smo videli ranije u feromagnetiku sa prostom rešetkom prva negativna ~~rešetka~~ korekcija je proporcionalna četvrtom stepenu temperature.

III.3 - PONAŠANJE U OKOLINI TEMPERATURE PRELAZA

Da bismo izvršili analizu termodinamičkog ponašanja feromagnetika sa dve podrešetke u temperaturskom intervalu od T = 0 do temperature prelaza koristićemo metod haotičnih faza (RPA), koji se, kao što je već napomenuto ranije, sastoji u zameni stvarnog potencijala $I_{\vec{n}\vec{m}}$ jednim efektivnim potencijalom koji zavisi od temperature.

Analizu ćemo izvršiti za feromagnetik sa dve podrešetke čiji je Hamiltonijan dat sa (III.2.1). Za dalji račun možemo koristiti već dati sistem jednačina (III.2.6), ali ćemo ga dekuplovati drukčije nego na niskim temperaturama.

Dekuplovanje funkcija Grina sa četiri Pauli operatora koje figurišu u (III.2.6) izvršićemo na sledeći način:

$$\begin{aligned}
&\langle\langle P^{+}_{1\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \mid P^{+}_{2\vec{k}} \rangle\rangle \cong \langle P^{+}_{1\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_2} \rangle \langle\langle P_{2\vec{k}} \mid P^{+}_{1\vec{k}} \rangle\rangle \delta_{\vec{q}_1\vec{q}_2} \\
&\langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_1} P_{1,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \mid P^{+}_{2\vec{k}} \rangle\rangle \cong \langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_2} \rangle \langle\langle P_{1\vec{k}} \mid P^{+}_{2\vec{k}} \rangle\rangle \delta_{\vec{q}_1\vec{q}_2} \\
&\langle\langle P^{+}_{1\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_1} P_{2,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \mid P^{+}_{2\vec{k}} \rangle\rangle \cong \langle P_{2\vec{q}_2} P_{1\vec{q}_2} \rangle \langle\langle P_{2\vec{k}} \mid P^{+}_{1\vec{k}} \rangle\rangle \delta_{\vec{q}_1\vec{q}_2} \\
&\langle\langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_1} P_{1,\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \mid P^{+}_{1\vec{k}} \rangle\rangle \cong \langle P^{+}_{2\vec{q}_2} P_{2\vec{q}_2} \rangle \langle\langle P_{1\vec{k}} \mid P^{+}_{1\vec{k}} \rangle\rangle \delta_{\vec{q}_1\vec{q}_2} \quad /III.3.1./
\end{aligned}$$

Pošto je:

$$\langle P^{+}_{1\vec{k}} P_{1\vec{k}} \rangle = \langle P^{+}_{2\vec{k}} P_{2\vec{k}} \rangle \equiv \langle P^{+}_{\vec{k}} P_{\vec{k}} \rangle \quad \ldots /III.3.2./$$

i

$$\sigma = 1 - \langle P^{+}_{1\vec{l}} P_{1\vec{l}} \rangle - \langle P^{+}_{2\vec{l}} P_{2\vec{l}} \rangle = 1 - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle P^{+}_{\vec{k}} P_{\vec{k}} \rangle \quad \ldots /III.3.3./$$

posle dekuplovanja (III.3.1) sistem jednačina (III.2.6) postaje:

$$\Gamma_{11}(\vec{k}) = \frac{i}{2\pi} \frac{\sigma}{E - \sigma E_{k}^{(1)}} \qquad \Gamma_{12}(\vec{k}) = 0$$

$$\Gamma_{22}(\vec{k}) = \frac{i}{2\pi} \frac{\sigma}{E - \sigma E_{\vec{k}}^{(2)}} \qquad \Gamma_{22}(\vec{k}) = 0$$

Pomoću ~~spektralnih~~ spektralnih intenzivnosti funkcija Γ_{11} i Γ_{22} nalazimo da je:

$$\langle P^{+}_{1\vec{k}} P_{1\vec{k}} \rangle = \langle P^{+}_{2\vec{k}} P_{2\vec{k}} \rangle \equiv \langle P^{+}_{\vec{k}} P_{\vec{k}} \rangle = \frac{\sigma}{e^{\frac{\sigma E_{\vec{k}}^{(1)}}{\theta}} - 1} \quad \ldots /III.3.5./$$

Zamenom (III.3.5) u (III.3.3) dobijamo:

$$\sigma = 1 - \sigma \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\frac{\sigma E_{\vec{k}}^{(1)}}{\theta}} - 1} \quad \ldots /III.3.6./$$

Pošto je u okolini tačke prelaza $\sigma \approx 0$, mi možemo izvršiti sledeći razvoj:

$$\left.\begin{aligned}
&e^{\frac{\sigma E_{k}^{(1)}}{\theta}} - 1 \cong \frac{\sigma X_{\vec{k}}}{\theta} + \frac{1}{2} \frac{\sigma^2 X_{\vec{k}}^2}{\theta^2} + \frac{1}{6} \frac{\sigma^3 X_{\vec{k}}^3}{\theta^3} \\
&X_{\vec{k}} = \frac{J_0^{12}}{2}\left(1 - \frac{J_{\vec{k}}^{12}}{J_0}\right)
\end{aligned}\right\} \quad \ldots /III.3.7./$$

Zamenom (III.3.7) u (III.3.6) dobijamo, uz korišćenje aproksimacije najbližih suseda:

$$\sigma = \sqrt{\frac{2\theta}{I^{12}}\left(1 - \theta \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{X_{\vec{k}}}\right)} \quad \ldots /III.3.8./$$

Za prostu kubnu strukturu je:

$$\frac{2}{N}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{X_{\vec{k}}}\approx\frac{1}{I}$$

tako da možemo pisati:

$$\sigma=\sqrt{2\left(1-\frac{\theta}{\theta_c}\right)} \qquad \ldots \qquad /III.3.9./$$

gde je

$$\theta_c=I^{12} \qquad \ldots \qquad /III.3.10./$$

Kao što vidimo temperatura prelaza za feromagnetik sa dve podrešetke ravna je integralu izmene za najbliže susede, tj. rezultat je isti kao kod feromagnetika sa prostom rešetkom.

Na kraju ovoga paragrafa pogledajmo šta daje formula (III.3.6) za magnetizaciju na niskim temperaturama.

Iz (III.3.6) sledi:

$$\sigma^{(RPA)}=\frac{1}{1+\frac{2}{N}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{e^{\frac{E_k^{(1)}}{\theta}}-1}}= \qquad \ldots \qquad /III.3.11./$$

$$=\frac{1}{1+\left(2\zeta_{3/2}\tau^{3/2}+\frac{3\pi}{2}\zeta_{5/2}\tau^{5/2}+\frac{33\pi^2}{16}\zeta_{7/2}\tau^{7/2}+6\zeta_{3/2}^2\tau^3+12\pi\zeta_{3/2}\zeta_{5/2}\tau^4\right.}$$

što daje:

$$\sigma^{(RPA)}=\sigma_H^{(RPA)}+\sigma_{AH}^{(RPA)} \qquad \ldots \qquad /III.3.12./$$

$$\sigma_H^{(PPA)}=1-2\zeta_{3/2}\tau^{3/2}-\frac{3\pi}{2}\zeta_{5/2}\tau^{5/2}-\frac{33\pi^2}{16}\zeta_{7/3}\tau^{7/2} \qquad \ldots \qquad /III.3.13./$$

$$\sigma_{AH}^{(PPA)}=-2\zeta_{3/2}^2\tau^3-6\zeta_{3/2}\zeta_{5/2}\tau^4+O\left(\tau^{9/2}\right) \qquad \ldots \qquad /III.3.14./$$

Kao što se vidi anharmonijska korekcija je manja nego u formuli (III.2.2o). Ovaj pogrešan rezultat je posledica lošijeg dekuplovanja (III.3.1). Ovo dekuplovanje lošije je zato što za Furije likove Pauli operatora nemamo Vikovu teoremu a pri dekuplovanju je ona korišćena kao da se radi o Boze operatorima.

Z A K L J U Č A K

Analiza feromagnetika sa dve podrešetke koja je ovde izvršena pokazala je da u njemu magnetizacija brže opada sa porastom temperature nego u feromagnetiku sa prostom rešetkom. Dok feromagnetik sa prostom rešetkom u slučaju spina S=1/2 ima prvu anharmonijsku korekciju $\delta\sigma = -6\pi\zeta_{3/2}\zeta_{5/2}\tau^4$ dotle feromagnetik sa dve podrešetke u slučaju kada se integrali izmene u podrešetkama mogu zanemariti u odnosu na integral izmene izmedju podrešetki ima anharmonijsku korekciju.

$$\delta\sigma = -6\zeta_{3/2}^2\tau^3 - 12\pi\zeta_{3/2}\zeta_{5/2}\tau^4$$

Ovo je osnovni i bitno nov zaključak koji je dobijen kao rezultat izvršenih analiza. Što se tiče tačke prelaza, postoji puna analogija izmedju feromagnetika sa prostom rešetkom i feromagnetika sa dve podrešetke.

Treba na kraju napomenuti da su analize feromagnetika sa dve podrešetke izvršene za slučaj spinova S=1/2 u obe podrešetke. Detaljnija analiza koja uključuje dve podrešetke sa različitim spinovima S_1 i S_2 zahteva upotrebu mnogo glomaznijih računa, ali je metodološki potpuno ista.

Факултета НОВИ САД

L I T E R A T U R A

[1] S.V. Tjablikov, Metodi kvantne teorije magnetizma, 1965, Moskva (na ruskom)

[2] D.I. Lalović, B. S. Tošić, R.B. Žakula, Phys. Rev Vol. 178, No. 3, 1472, 1969.

[3] R.B. Žakula, D. I. Lalović, Phys. Stat. Sol. 4o, 235 (1970)

[4] V.M. Agranovič, B.S. Tošić, ŠETF 53, 149 (1967)

[5] F. Dyson, Phys. Rev., 1o2, 1217 (1956)

[6] F. Dyson, Phys. Rev. 1o2, 123o (1956)

[7] R.A. Tahir-Kheli, D. ter. Haar, Phys. Rev. 127, 88 (1962)

БИБЛИОТЕКА Природно-математичког факултета НОВИ САД