



UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI
FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU



Analiza Hajzenbergovog feromagneta u Švingerovoj bozonskoj reprezentaciji

-master rad-

Mentor: dr Slobodan Radošević

Kandidat: Vujadin Mrkajić

Novi Sad, 2015

Sadržaj

Uvod	6
1 Hajzebergov feromagnet i Boze Ajnštajnova kondenzacija	7
1.1 Hajtler Londonov metod za dobijanje interakcije izmene	7
1.2 Hajzenbergov model	9
1.3 Aproksimacija srednjeg polja za Hajzenbergov feromagnet	10
1.4 Boze - Ajnštajnova kondenzacija	13
2 Bozonizacija spinskih operatora	17
2.1 Teorija spinskih talasa	18
2.1.1 Feromagnetni spinski talasi	18
2.1.2 Kvantno - mehanički pristup teoriji feromagnetnih spinskih talasa . .	20
2.1.3 Termodinamika gasa idealnih magnona	22
2.2 Švingerovi bozoni	24
2.2.1 Jednačine Hajzenbergovog feromagneta u teoriji srednjeg polja izražene pomoću Švingerovih bozona	25
2.2.2 Neuređena oblast	29
2.2.3 Kritično ponašanje kada $T \rightarrow T_c^+$	31
2.2.4 Uređena oblast	33
3 Numerička analiza rezultata i poređenje sa QMT i LSW	35
3.1 Jednodimenzionalni slučaj	37
3.2 Dvodimenzionalni slučaj	39
3.3 Trodimenzionalni slučaj	41
4 Zaključak	43

Uvod

Još od kad su ljudi došli u kontakt sa magnetima postavlja se pitanje koje je fizičko poreklo interakcije koja dovodi do ove pojave. Nakon što je ustanovljena podela materijala na dijamagnetne, paramagnetne i feromagnetne, došlo se do pitanja šta dovodi do uređenog stanja unutar magnetika ispod kritične temperature T_c . Pokazalo se da paramagnetni materijali pri dejstvu spoljašnjeg magnetnog polja pokazuju uređenu strukturu, što implicira da bi feromagnetni materijali trebali posedovati neko unutrašnje magnetno polje. Da se dobije temperatura faznog prelaza T_c postoji više načina i razmatranja, iz kojih se može izdvojiti opšti termodinamički uslov, a to je da slobodna energija ima minimalnu vrednost:

$$F = U - TS = \text{minimum} \quad (1)$$

Kasnijim kvantno-mehaničkim razmatranjima interakcije spinova unutar materijala se doslo do mikročestičnog objašnjenja ove pojave. U prvoj glavi ovog rada je na samom početku prikazan Hajtler-Londonov metod za dobijanje interakcije izmene. On polazi od osnovnih fizičkih razmatranja interakcija molekula vodonika (radi jednostavnosti) i dolazi do eksplicitne zavisnosti interakcije izmene od integrala izmene, Kulonovog integrala i integrala preklapanja. Ovaj rezultat se može preneti i na druge materijale. U nastavku su navedene osnovne osobine Hajzenbergovog modela. Kasnije će biti izvršena analiza ovog modela za feromagnetni slučaj. Kako se rad zasniva na analizi Hajzenbergovog modela u Švingerovoj bozonskoj reprezentaciji u aproksimaciji srednjeg polja data je osnova ove aproksimacije. Ispostavilo se da se uređeno stanje pri ovakvoj aproksimaciji javlja kada dođe do Boze - Ajnštajnovе kondenzacije.

Druga glava, kao što joj i sam naziv kaže, govori o bozonizaciji spinskih operatora. Dati su uslovi pod kojim se spinski operatori mogu prikazati u bozonskoj reprezentaciji, na koji način se sprovodi bozonizacija, kao i pogodnosti korišćenja ove reprezentacije. Teorija spinskih talasa neposredno uvodi kvazičestice magnone, koji su po svojim osobinama bozoni. Ova teorija je predstavljena poluklasično, kada se spinovi posmatraju u okviru vektorskog modela, a nakon toga i na kvantno - mehanički način u Holštajn - Primakovoj reprezentaciji. Ova reprezentacija nije rotaciono invajantna i daje dobra slaganja pri niskim temperaturama. U nastavku druge glave se uvode Švingerovi bozoni. Preostali deo rada će biti zasnovan na analizi Hajzenbergovog feromagneteta u okviru ove reprezentacije. Na početku su date jednačine Hajzenbergovog modela u okviru reprezentacije, tj. data je bozonizacija modela. Pošto je aproksimacija izvršena za slučaj srednjeg polja, uveden je parametar λ kojim se na elegantan način obezbeđuje važenje ove aproksimacije. Nakon toga je dijagonalizovan Hamiltonijan i određena je energija. Izračunata je slobodna energija na osnovu koje su dobijene najvažnije jednačine u radu, a to su jednačina za operator veze i jednačina totalnog spina. Nastavak

analize je podeljen po oblastima za neuređenu fazu, kristično ponašanja kada temperatura teži kritičnoj vrednosti i uređenu fazu. Za jednodimenzionalni i dvodimenzionalni slučaj ne postoji dugodomentno uređenje što je u skladu sa Mermin-Vagnerovom teoremom. Jedina mogućnost egzistencije dugodometnog uređenja se dešava u trodimenzionalnom slučaju.

Treća glava je posvećena numeričkoj analizi. Dobijeni su grafički prikazi slobodne energija za jedno-, dvo- i trodimenzionalni slučaj. Rezultati su upoređeni sa rezultatima dobijenim Monte Carlo simulacijom kvantnog Hazenbergovog feromagneta (*QMC*) i teorijom linearnih spinskih talasa (*LSW*). Nakon toga je nartan grafički prikaz disperzicionog spektra u uređenoj i neuređenoj fazi.

Glava 1

Hajzebergov feromagnet i Boze Ajnštajnova kondenzacija

1.1 Hajtler Londonov metod za dobijanje interakcije izmene

U ovom radu polazište pri računanju veličina karakterističnih za magnetne materijale će biti Hamiltonijan Hajzenbergovog modela, koji je dat sa [2,15]:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.1)$$

gde J_{ij} predstavlja interakciju izmene. Da bi se shvatila pojava magnetnih osobina jedan od osnovnih zadataka je objasniti mehanizam koji dovodi do interakcije spinova na susednim čvorovima, odnosno matematičkim aparatom opisati interakciju izmene. Prvi pokušaj objašnjenja su bile fenomenološke teorije, od kojih je jedna od najpoznatijih fenomenološka teorija Vajsovogovog feromagneta[15,16]. Za različite vrste materijala interakcija izmene ima različit mehanizam nastanka, pa tako postoje direktna interakcija izmene, indirektna interakcija izmene [2] i druge. Jedan od načina da se opiše interakcija među spinovima je Hajtler Londonov metod [2] direktne interakcije izmene koji polazi od najopštijih interakcija između dva atoma vodonika koji grade molekul H_2 . Hamiltonijan sistema se može razdvojiti na neperturbativni deo H_0 i perturbativni H_1 :

$$H = H_0 + H_1, \quad (1.2)$$

$$H_0 = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{1a}} + \frac{1}{r_{2b}} \right), \quad (1.3)$$

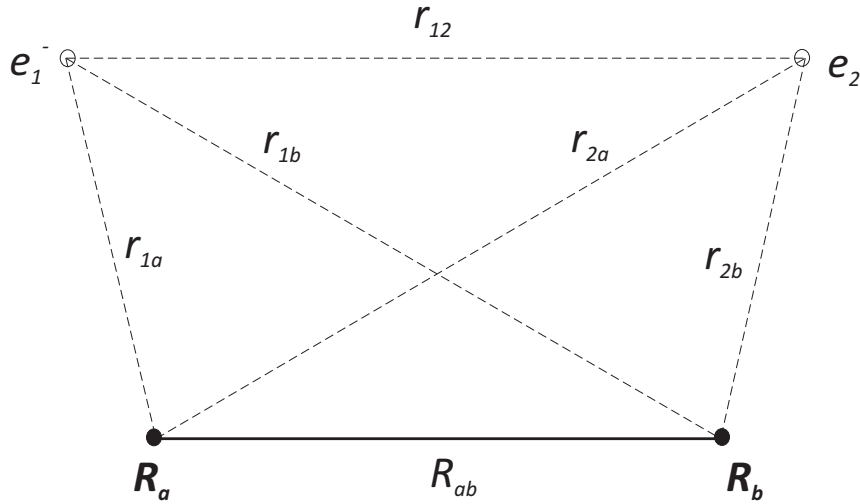
$$H_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1b}} - \frac{1}{r_{2a}} \right). \quad (1.4)$$

Nakon toga se uvode funkcije stanje koje su definisane relacijom

$$|q\rangle^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_a^{(1)}\rangle |\phi_b^{(2)}\rangle \pm |\phi_a^{(2)}\rangle |\phi_b^{(1)}\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|q_1\rangle \pm |q_2\rangle). \quad (1.5)$$

Neperturbovani deo opisuje situaciju kada su atomi na beskonačnim rastojanjima (izolovani atomi), pa su im funkcije međusobno ortogonalne, odnosno ne dolazi do preklapanja. Perturbativnim delom je opisano preklapanje talasnih funkcija koje nisu više međusobno ortogonalne. Informaciju o neortogonalnosti nam daje integral preklapanja:

$$L = \langle \phi_a^{(1,2)} | \phi_b^{(1,2)} \rangle = \int d^3r \phi_a^{*(1,2)}(\mathbf{r}) \phi_b^{(1,2)}(\mathbf{r}). \quad (1.6)$$



Slika 1.1: Šematski prikaz molekula vodonika H_2 , sa označenim vektorima položaja protona i međusobnim udaljenostima čestica sistema

Zanemarujemo se članovi $|\phi_a^{(1)}\rangle|\phi_a^{(2)}\rangle$ i $|\phi_b^{(1)}\rangle|\phi_b^{(2)}\rangle$ koji opisuju situaciju gde se oba elektrona nalaze, odnosno pripadaju istom atomu. Funkcija stanja u ovom slučaju će imati oblik

$$|q\rangle = c_1|q_1\rangle + c_2|q_2\rangle. \quad (1.7)$$

Problem se dalje može rešavati varijacionim metodom i postavlja se uslov,

$$\frac{\partial E_V}{\partial c_{1,2}} = 0, \quad (1.8)$$

gde je

$$E_V = \frac{\langle q|H|q\rangle}{\langle q|q\rangle} = E_V(c_1, c_2). \quad (1.9)$$

Pri računanju energije sistema, pojavljuju se sledeći karakteristični integrali. Jedan je Kulonov integral:

$$V = \langle q_1|H|q_1\rangle = \langle q_2|H|q_2\rangle = \int \int d^3r_1 d^3r_2 H |\phi_a(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_b(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (1.10)$$

i izmzenski integral

$$X = \langle q_1|H|q_2\rangle = \langle q_2|H|q_1\rangle = \int \int d^3r_1 d^3r_2 \phi_a^*(\mathbf{r}_1) \phi_b^*(\mathbf{r}_2) H_1 \phi_a(\mathbf{r}_2) \phi_b(\mathbf{r}_1). \quad (1.11)$$

Pri računu treba obratiti pažnju na simetričnost talasnih funkcija. Na kraju se dobija izraz za energiju [2]:

$$E_{\pm} = \frac{V \pm X}{1 \pm L^2}. \quad (1.12)$$

Kada su X i L različiti od nule, pojavljuju se dve vrednosti energije, odnosno $E_+ \neq E_-$ koji opisuju spinsko uređenje. Originalni Hamiltonijan H se može zameniti efektivnim izmenschkim Hamiltonijanom \tilde{H} koji je oblika

$$\tilde{H} = J_0 - J_{12} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (1.13)$$

gde je

$$J_{12} = \frac{1}{\hbar^2} (E_+ - E_-) = -\frac{2VL^2 - X}{\hbar^2(1 - L^4)}. \quad (1.14)$$

Znak J_{12} zavisi od vrednosti integrala L, V i X . Kako su vrednosti $L \ll 1$ i $X < 0$, onda je vrednost J_{12} negativna, tj. energetski je povoljnije singletno stanje (nalazi se na nižoj energiji).

Efektivni Hamiltonijan \tilde{H} može biti generalizovan na N više elektronskih atoma. Na ovaj način se dolazi do Hamiltonijana Hajzenbergovog modela

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.15)$$

o kome će biti više reči u nastavku rada.

1.2 Hajzenbergov model

Hajzenbergov model je definisan jednačinom (1.15) i pretpostavlja egzistenciju permanentnih, lokalizovanih momenata koji međusobno interaguju pomoću direktne ili indirektno izmenschke interakcije. Komutacione relacije [2,14,15,18] između spinskih operatora su:

$$\begin{aligned} [S_i^x, S_j^y]_- &= i\hbar S_i^z \delta_{ij}, \\ [S_i^y, S_j^z]_- &= i\hbar S_i^x \delta_{ij}, \\ [S_i^z, S_j^x]_- &= i\hbar S_i^y \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Komutacione relacije mogu se objediniti na sledeći način:

$$\mathbf{S} \times \mathbf{S} = i\hbar \mathbf{S}. \quad (1.17)$$

Definišu se operatori:

$$S^+ = S^x + iS^y; \quad S^- = S^x - iS^y, \quad (1.18)$$

koji su poznati kao podižući i spuštajući operatori. Iz ovih operatora se mogu dobiti operatori S_i^x i S_i^y :

$$S_i^x = \frac{1}{2}(S_i^+ + S_i^-); \quad S_i^y = \frac{1}{2i}(S_i^+ - S_i^-). \quad (1.19)$$

Na osnovu prethodnih jednačina, kao i opštih osobina, odnosno algebre spinskih operatora, dobijaju se sledeće jednačine:

$$[S_i^z, S_j^+]_- = \hbar\delta_{ij}S_i^+; \quad [S_i^z, S_j^-]_- = -\hbar\delta_{ij}S_i^-; \quad (1.20)$$

$$[S_i^+, S_j^-]_- = 2\hbar\delta_{ij}S_i^z; \quad (1.21)$$

$$S_i^+ S_i^- = \hbar^2 S(S+1) + \hbar S_i^z - (S_i^z)^2; \quad S_i^- S_i^+ = \hbar^2 S(S+1) - \hbar S_i^z - (S_i^z)^2; \quad (1.22)$$

$$\prod_{m_S=-S}^{+S} (S_i^z - \hbar m_S) = 0; \quad (1.23)$$

$$(S_i^+)^{2S+1} = (S_i^-)^{2S+1} = 0. \quad (1.24)$$

Skalarni proizvod $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ iz Hajzenbergovog Hamiltonijana može biti izražen pomoću navedenih operatora kao

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z. \quad (1.25)$$

Izmenski integral između čvorova rešetke i na jednom čvoru se definiše kao:

$$J_{ij} = J_{ji}; \quad J_{ii} = 0. \quad (1.26)$$

Konačno se dobija izraz za Hamiltonijan Hajzenbergovog modela

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} (S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z) \quad (1.27)$$

Koristeći (1.20) i (1.21) može se pokazati da važe sledeće komutacione relacije:

$$[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \mathbf{S}_i]_- = i\hbar \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j \quad (i \neq j), \quad (1.28)$$

$$[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \mathbf{S}_j]_- = i\hbar \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j \quad (i \neq j). \quad (1.29)$$

Iz ovoga sledi da totalni spin $\sum_i \mathbf{S}_i$ komutira sa Hamiltonijanom Hajzenbergovog modela i samim tim je očuvana veličina.

1.3 Aproksimacija srednjeg polja za Hajzenbergov feromagnet

Glavna pretpostavka teorije srednjeg polja je da interakcija između spinova doprinosi povećanju magnetnog polja H_m unutar magnetika koji se dodaje spoljašnjem magnetnom

polju h . Ako se pretpostavi da je polje H_m proporcionalno magnetizaciji, odnosno $H_m = \lambda M(T, H)$, ukupno magnetno polje koje "vidi" svaki pojedinačni spin će biti jednako:

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{h} + \lambda \mathbf{M}(T, h), \quad (1.30)$$

pa je polazni Hamiltonijan oblika [15]:

$$H = -g\mu_B \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_{eff}. \quad (1.31)$$

Parametar λ se naziva parametar srednjeg polja. Magnetizacija samog polja se dobija pomoću particione funkcije Z [15], na osnovu koje se dobija izraz za Gibbs-ov potencijal:

$$G(T, h) = -kT \ln Z, \quad (1.32)$$

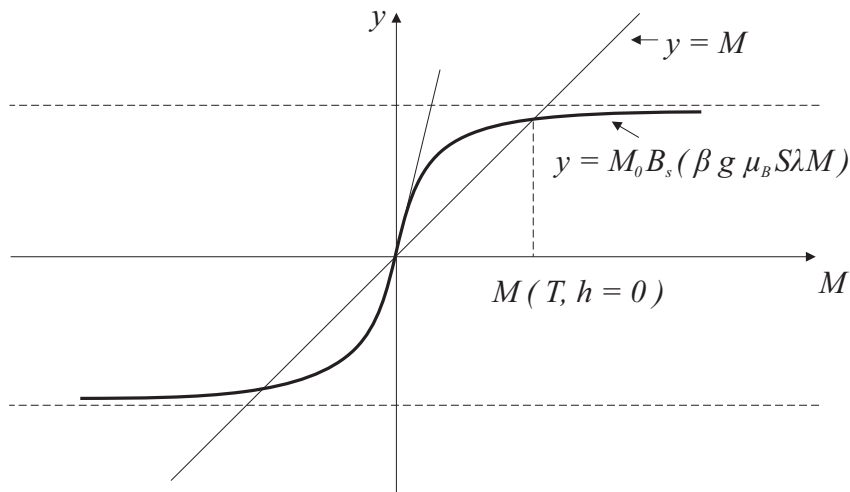
pa se iz njega izražava magnetizacija kao:

$$M = \left(\frac{\partial G}{\partial \mathbf{h}} \right)_T = M_0 B_S \left(S \frac{g\mu_B \mathbf{H}_{eff}}{kT} \right), \quad (1.33)$$

gde je $M_0 = NSg\mu_B$ i predstavlja najveću moguću vrednost magnetizacije, odnosno saturacionu magnetizaciju, dok je sa B_S označena Brillouenova funkcija [15]. Ako se u jednačinu (1.33) stavi da je $h = 0$, dobija se

$$\mathbf{M} = M_0 B_S (\beta g \mu_B S \lambda \mathbf{M}). \quad (1.34)$$

Jednačina (1.34) je implicitna jednačina, jer se magnetizacija pojavljuje kao argument Brillouenove funkcije.



Slika 1.2: Grafičko rešenje jednačine (1.34). Rešenje za koje je $M \neq 0$, postoji pri dovoljno niskim temperaturama na kojima je nagib Brillouenove funkcije veći od jedinice.

Daljim razmatranjem se može dobiti izraz za kritičnu temperaturu teorije srednjeg polja koja ima oblik

$$T_c = \lambda \frac{Ng^2 \mu_B^2 S(S+1)}{3k} \quad (1.35)$$

Pri razmatranju Hajzenbergovog modela ne mora se obratiti pažnja na prirodu konstante λ . Osnovna ideja za ovaj model je da postoji izmenska interakcija između spinova lokalizovanih na čvorovima i i j , kao što je već rečeno. Aproksimacija srednjeg polja za Hajzenbergov Hamiltonijan predstavlja jednu od takozvanih klaster aproksimacija, gde se računa interakcija između spinova u klasteru, dok se ostali spinovi u sistemu, odnosno njihove komponente posmatraju kao:

$$S_{iz} = \langle S_z \rangle \text{ i } S_{ix} = S_{iy} = 0. \quad (1.36)$$

Takođe se uzima da klaster sadrži jedan spin, pa je klaster Hamiltonijan oblika:

$$H_i = \left(-2 \sum_i J_{ij} \langle S_z \rangle - g\mu_B h \right) S_{iz}. \quad (1.37)$$

Jasno je da dinamika opisana relacijom (1.37) opisuje ponašanje pojedinačnog spina u efektivnom magnetnom polju veličine

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{h} + 2 \frac{\tilde{J}_0}{g\mu_B} \langle S_z \rangle = \mathbf{h} + 2 \frac{\tilde{J}_0}{N(g\mu_B)^2} \mathbf{M}, \quad (1.38)$$

gde je $\tilde{J}_0 \equiv \sum_j J_{ij}$.

Upoređujući jednačinu (1.38) sa (1.30) vidi se da je vrednost konstante λ data izrazom:

$$\lambda = 2\tilde{J}_0/N(g\mu_B)^2, \quad (1.39)$$

pa iz toga sledi da je kritična temperatura:

$$T_c = \frac{2}{3k} \tilde{J}_0 S(S+1). \quad (1.40)$$

U slučaju razmatranja najbližih suseda, što je čest slučaj, interakcija J_{ij} kao i efektivno polje odnoseće se samo na z najbližih suseda, pa je $\tilde{J}_0 = zJ$, usled čega se izraz za kritičnu temperaturu redukuje na

$$\frac{kT_c}{J} = \frac{3}{2} z S(S+1). \quad (1.41)$$

Jednačine (1.40) i (1.41) predviđaju da će dve rešetke imati iste vrednosti kritičnih temperatura ukoliko imaju isti koordinacioni broj z . To praktično znači da prosta kubna i trougaona ravanska rešetka imaju istu kritičnu temperaturu T_c , jer su im isti koordinacioni brojevi $z = 6$, gde nisu izračunati efekti dimenzionalnosti koji su veoma bitni pri opisivanju kritičnih pojava u sistemima.

Može se reći da je aproksimacija srednjeg polja pojednostavljenje u smislu da se originalni višespinski problem redukuje na jednospinski. Kao rezultat ovog pojednostavljenja izvodi se zaključak da su fero-, feri- i antiferomagnetni opisani kao da se radi o paramagnetu koji se nalazi u efektivnom temperaturski zavisnom polju.

Rečeno je da se ostatak rešetke od uočenog spina posmatra tako što se pretpostavlja da su vrednosti ostalih spinova na čvorovima takvi da su im vrednosti usrednjene. Drugim

rečima, zanemaruju se fluktuacije varijabli od njihovih srednjih vrednosti. To znači da ako se posmatra identitet vezan za proizvod dva operatora [1]:

$$A \cdot B = A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle + (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle), \quad (1.42)$$

gde uglasta zagrada simbolizuje termodinamičko usrednjavanje i nakon toga se formalno izvrši zanemarivanje fluktuacija varijabli od njihovih srednjih vrednosti, dobija se izraz:

$$A \cdot B \rightarrow A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle. \quad (1.43)$$

Jednačina (1.43) će biti iskorišćena pri aproksimaciji srednjeg polja Hajzenbergovog feromagneta u reprezentaciji Švingerovih bozona. Primenjujući ovu aproksimaciju dobija se da proizvod kreacionih i anihilacionih operatora izčezava, tj.:

$$S_i^+ S_j^- \rightarrow 0. \quad (1.44)$$

Takođe važi jednakost:

$$\langle S_i^+ \rangle = \langle S_i^- \rangle = 0, \quad (1.45)$$

koja takođe odražava karakteristike aproksimacije srednjeg polja. Pojedanostavljenije sadržano u jednačinama (1.43), (1.44) i (1.45) je to da je originalni višespinski problem redukovano na jednospinski problem. Kao rezultat svega navedenog dobija se da su fero-, feri- i antiferomagneti opisani kao da se radi o paramagnetu koji se nalazi u efektivnom temperaturski zavisnom polju.

1.4 Boze - Ajnštajnova kondenzacija

Predstavljanjem Hajzenbergovog Hamiltonijana u reprezentaciji Švingerovih bosona, rešenje za dugodometno uređenje bi označavalo postojanje Boze-Ajnšteinove kondenzacije [1,3,5] što će biti pokazano kasnije. Stoga, treba izneti osnovne pojmove vezane za ovaj fenomen.

Statistička suma N identičnih bozonskih čestica koje međusobno ne interaguju i nalaze se u zapremini V je data sa [9,16]:

$$Z^{(B/F)} = \prod_{\mathbf{p}} (1 - e^{-\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu}{\theta}})^{-1}, \quad (1.46)$$

gde oznaka \mathbf{p} označava impuls. Veliki termodinamički potencijal je

$$\Phi = -\theta \ln Z = \theta \sum_{\mathbf{p}} \ln(1 - e^{-\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu}{\theta}}). \quad (1.47)$$

Srednji broj popunjenosti, odnosno srednji broj čestica u stanju \mathbf{p} je definisan kao

$$\langle n_{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu}{\theta}} - 1}, \quad (1.48)$$

i predstavlja Boze-Ajnštajnovu raspodelu, dok je ukupan broj čestica u sistemu

$$N = \sum_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu)} - 1}. \quad (1.49)$$

U ovom izrazu je $\beta = 1/k_B T$. Uvodi se nova veličina, a to je aktivnost ili fugacitet $z = e^{\frac{\mu}{\theta}}$, pa prethodna jednačina dobija oblik:

$$N = \sum_{\mathbf{p}} \frac{ze^{-\beta\varepsilon_{\mathbf{p}}}}{1 - ze^{-\beta\varepsilon_{\mathbf{p}}}}. \quad (1.50)$$

Pre nego što se pređe sa sume na integral u impulsnom prostoru, treba zapaziti da pri $z \rightarrow 1$ ($\mu = 0$), članovi koji odgovaraju impulsu $\mathbf{p} = 0$ divergiraju, tako da član sa $\mathbf{p} = 0$ ne sme biti zanemaren, naprotiv, on ima važnu ulogu kao i ostatak sume. Kada se u sumi razdvoje članovi za $\mathbf{p} = 0$ i $\mathbf{p} \neq 0$, dobija se član

$$N_0 = \langle n_0 \rangle = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} = \frac{1}{z^{-1} - 1} = \frac{z}{1 - z} \quad (1.51)$$

koji se odnosi na srednji broj popunjenosti nivoa sa $\mathbf{p} = 0$. Taj član daje doprinos ako je $\langle n_0 \rangle/V$ konačan broj, tj. ako konačan broj čestica zaposedne taj nivo. U tom slučaju se javlja Boze-Ajnštajnova kondenzacija. Detaljnija analiza jednačina se odnosi na određivanje fugaciteta z kao funkcije temperature i specifične zapremine, odnosno gustine. Polazi se od jednačine [16]:

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1 - z}, \quad (1.52)$$

gde je $v = V/N$, a $\lambda_T = (2\pi\hbar^2/m\theta)^{1/2}$ termalna talasna dužina. Da bi se rešila data jednačina, treba analizirati funkciju $g_{3/2}(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}}$. Za realne vrednosti z između 0 i 1 funkcija je ograničena, pozitivna i monotono rastuća, pa će od interesa biti vrednosti

$$0 \leq z \leq 1. \quad (1.53)$$

Za male vrednosti z , funkcija se razvija u red. Ako je $z = 1$ izvod funkcije divergira, dok je vrednost funkcije konačna i iznosi

$$g_{3/2}(1) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3/2}} = \xi(3/2) = 2.612, \quad (1.54)$$

gde je $\xi(z)$ Rimanova zeta funkcija [16]. Funkcija $g_{3/2}(z)$ u intervalu između 0 i 1 uzima vrednosti

$$g_{3/2}(z) \leq 2.612. \quad (1.55)$$

Ako se prepíše jednačina (1.52) u sledećem obliku

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{V} = \frac{N_0}{V} = \frac{1}{v} - \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z), \quad (1.56)$$

da bi veličina N_0/V bila pozitivna, mora biti ispunjen uslov

$$\frac{\lambda_T^3}{v} > g_{3/2}(1). \quad (1.57)$$

U oblasti temperatura koje zadovoljavaju uslov deo čestica zauzima stanje $\mathbf{p} = 0$, tj. dolazi do pojave Boze-Ajnštajnovne kondenzacije. Oblast definisana uslovom (1.57) naziva se oblašću kondenzacije. Ona je odvojena od ostalog dela $p-v-T$ prostora dvodimenzionalnom površi (T-V površinom) određenom jednačinom

$$\frac{\lambda_T^3}{v} = g_{3/2}(1). \quad (1.58)$$

Za datu vrednost v definiše se kritična temperatura T_c

$$kT_c = \frac{2\pi\hbar^2/m}{[vg_{3/2}(1)]^{2/3}}. \quad (1.59)$$

Kao što se vidi iz jednačine (1.59), T_c je temperatura pri kojoj termalna talasna dužina $\lambda_c^3 = vg_{3/2}(1) \rightarrow \lambda_c \sim \bar{a}$ reda veličine kao i srednje rastojanje između čestica. Za datu temperaturu, može se definisati kritična zapremina kao:

$$v_c = \frac{\lambda_T^3}{g_{3/2}(1)}. \quad (1.60)$$

Na osnovu prethodne dve jednačine vidi se da je oblast kondenzacije definisana uslovima za $T < T_c$ i $v < v_c$.

Može se odrediti i zavisnost $N_0 = \langle n_0 \rangle$ od temperature. Iz (...2.20) sledi da je

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1-z}, \quad (1.61)$$

ili

$$N = N_{\mathbf{p} \neq 0} + N_{\mathbf{p}=0}, \quad (1.62)$$

gde $N_{\mathbf{p} \neq 0} = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z)$ predstavlja broj čestica sa impulsom različitim od nule, dok $N_{\mathbf{p}=0}$ označava broj čestica sa impulsom $\mathbf{p} = 0$. Ako je $z = 1$, tada je $N_{\mathbf{p} \neq 0} = N_{\mathbf{p} \neq 0}^{max} = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(1)$, što znači da je to maksimalan broj bozona koji mogu biti u ekscitovanim stanjima.

Postavlja se pitanje šta će se desiti ako temperaturu snizimo ispod kritične vrednosti $T < T_c$ tako da maksimalan broj čestica koje se mogu smestiti u stanjima sa impulsima $\mathbf{p} \neq 0$ postane manji od ukupnog broja čestica u sistemu, tj. $N_{\mathbf{p} > 0}^{max} < N$. Tada će deo bozona biti u stanjima $\mathbf{p} \neq 0$, a preostali bozoni će se nužno smestiti u stanje sa impulsom $\mathbf{p} = 0$ čiji se broj može odrediti iz

$$N_0 = N - N_{\mathbf{p} \neq 0}^{max}. \quad (1.63)$$

Ubacivanjem dobijenih izraza u jednačinu (1.62) i sređivanjem, dobija se da je tražena zavisnost oblika:

$$N_0(T) = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \right]. \quad (1.64)$$

Na osnovu dobijene zavisnosti (1.64) se može zaključiti da snižavanjem temperature raste broj kondenzovanih bozona i da su na temperaturi $T = 0$ praktično svi bozoni kondenzovani. Sa druge strane, u oblasti $T > T_c$ svi bozoni se nalaze u ekscitovanim stanjima, dok je nivo određen sa $\mathbf{p} = 0$ prazan. O Boze-Ajnštajnovoj kondenzaciji se ponekad govori kao o kondenzaciji u prostoru impulsa. To znači da do Boze-Ajnštajnovne kondenzacije ne dolazi usled međučestične interakcije, nego usled svojstva simetričnosti talasne funkcije. Mnogi sistemi koji doživljavaju Boze-Ajnštajnovu kondenzaciju pokazuju specifična svojstva, pa se smatra da je ovo poseban oblik egzistencije materije. U intervalu u kom se dešava kondenzacija $0 \leq T \leq T_c$, aktivnost z ima vrednost $z = e^{\beta\mu} = 1$, što znači da je vrednost hemijskog potencijala

$$\mu = 0. \tag{1.65}$$

Ovaj zaključak će biti iskorišćen u nastavku rada.

Glava 2

Bozonizacija spinskih operatora

U ovoj glavi će biti dobijene najvažnije relacije u okviru *SBMFT*. Hajzenbergov spinski hamiltonijan se transformiše u hamiltonijan izražen pomoću boze operatora. Bitno je obrazložiti zašto se spinski sistemi pokušavaju opisati u okviru bozonskih reprezentacija. Osnovni argument za to je da se spinovi na niskim temperaturama ponašaju kao bozoni [17,18].

Neka je dato N spinskih operatora \mathbf{S}_n pridruženih čvorovima rešetke \mathbf{n} . Vektori standardnog bazisa su definisani na sledeći način:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_n^2 |S, m\rangle_n &= S(S+1) |S, m\rangle_n, \\ S_n^z |S, m\rangle_n &= m |S, m\rangle_n. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Ovi vektori čine bazis u $2S+1$ -dimenzionalnom Hilbertovom prostoru, dok je odgovarajući Hilbertov prostor za ceo sistem direktni proizvod Hilbertovih prostora pojedinačnih spinova

$$\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_{S_1} \otimes \mathcal{H}_{S_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{S_N}. \quad (2.2)$$

Sa druge strane, skup boze operatora B_n koji zadovoljavaju komutacione relacije:

$$[B_n, B_m^\dagger] = \delta_{n,m}, \quad [B_n, B_m] = [B_n^\dagger, B_m^\dagger] = 0 \quad (2.3)$$

deluju u bozonskom Hilbertovom beskonačno dimenzionalnom prostoru:

$$\mathcal{H}_B = \mathcal{H}_{B_1} \otimes \mathcal{H}_{B_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{B_N}, \quad (2.4)$$

čiji su bazisni vektori $|n\rangle_m$ svojstveni vektori operatora

$$n_m = B_m^\dagger B_m. \quad (2.5)$$

Da bi našli vezu ovih prostora potrebno je naći način da se definišu određene funkcije boze operatora takve da kada deluju u prostoru \mathcal{H}_B imaju iste komutacione relacije kao spinski operatori, ali i iste statističke srednje vrednosti. Ukoliko je to ispunjeno, moguće je prelaz sa spinskih na bozonske operatore.

Ako je ispunjen uslov da je $\langle S^z \rangle \simeq S$, onda važi:

$$[S_n^\dagger, S_m^-] \simeq 2S \delta_{n,m}, \quad (2.6)$$

a time je izražen smisao prelaska na bozonsku reprezentaciju, jer je gornji uslov ispunjen pri niskim temperaturama i tada se spinovi ponašaju kao bozoni.

Prvi korak je sledeća smena:

$$S_n^- \rightarrow \sqrt{2S}B_n^\dagger, \quad S_n^+ \rightarrow \sqrt{2S}B_n. \quad (2.7)$$

U teoriji sistema čestica ova transformacija se naziva približna druga kvantizacija, a u teoriji magnetizma to odgovara neinteragujućim spinskim talasima, odnosno Blohovej aproksimaciji [18]. Reč je o tome da kreacioni operator kreira pobuđenje koje se prenosi kroz rešetku i naziva se spinski talas - magnon. Pri tome se zanemaruju članovi sa više od dva boze - operatora. Zanemarivanje viših članova upravo odgovara zanemarivanju interakcije među magnonima.

Već ovde se javlja problem dimenzionalnosti prostora, jer očigledno ovakav pristup uvodi stanje sa z - projekcijom većom od S , tako da se obično govori o fizičkim $n \leq S$ stanjima i potprostoru nefizičkih stanja. Na osnovu toga sledeći zadatak je razdvajanje ova dva prostora, kako bi se eliminisao uticaj nefizičkih stanja [1,3,5,7].

2.1 Teorija spinskih talasa

Pre svega treba napomenuti da je teorija spinskih talasa egzaktna na niskim temperaturama u okviru Hajzenbergovog modela čistih feromagnetna. U aproksimaciji srednjeg polja efektivno polje (1.30) deluje na spinove. Pretpostavlja se da se spinovi ili magnetni momenti orijentišu u pravcu efektivnog polja. Činjenica da se usled povećanja temperature smanjuje termička srednja vrednost magnetnih momenata može se interpretirati na sledeći način, a to je da se momenti otklanjaju i precesiraju oko pravca unutrašnjeg efektivnog magnetnog polja. U ovom slučaju magnetni momenti se posmatraju kao vektori uzimajući klasično razmatranje.

2.1.1 Feromagnetni spinski talasi

Klasična jednačina kretanja za spin na poziciji i rešetke je [12]:

$$\hbar \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \boldsymbol{\mu}_i \times \mathbf{H}_{eff} = g\mu_B \mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_{eff}. \quad (2.8)$$

Koristeći formulu za efektivno polje, i stavljajući da je spoljašnje polje jednako nuli, $h = 0$, dolazi se do jednačine:

$$\hbar \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \mathbf{S}_i \times \left(2 \sum_j J_{ij} \mathbf{S}_j \right). \quad (2.9)$$

Ista jednačina se pojavljuje ako koristimo kvantno - mehaničku jednačinu kretanja za operator \mathbf{S}_i , izraženu pomoću komutatora [1,12]:

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{S}_i]. \quad (2.10)$$

Klasično gledano, ova jednačina predstavlja jednačinu kretanja precesije spina u odnosu na pravac koji potiče od efektivnog polja okolnih momenata. Da bi se odredila njegova ugaona frekvencija, pretpostaviće se da su spinovi veoma malo nagnuti, a vrednost im se razlikuje veoma malo od ravnotežne vrednosti \mathbf{S}_0 zajedničke za sve čvorove rešetke,

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{S}_0 + \delta\mathbf{S}_i, \quad (2.11)$$

gde je $\delta\mathbf{S}_i$ mala po intenzitetu i normalna na \mathbf{S}_0 . Zamenjujući izraz (2.11) u jednačinu kretanja, zanemarujući članove drugog reda po $\delta\mathbf{S}_i$, dobija se:

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d\delta\mathbf{S}_i}{dt} &= 2 \sum_j J_{ij} [\delta\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_0 + \mathbf{S}_0 \times \delta\mathbf{S}_j] \\ &= 2 \sum_j J_{ij} [\delta\mathbf{S}_i - \delta\mathbf{S}_j] \times \mathbf{S}_0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

U sistemima koji su uniformni pri osnovnom stanju precesiono kretanje se može predstaviti propagacijom talasa, tako da se rešenje može tražiti u obliku

$$\delta\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \left[\mathbf{A}_k e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i - \omega_k t)} + \mathbf{A}_k^* e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i - \omega_k t)} \right]. \quad (2.13)$$

Zamenjujući prethodnu jednačinu u jednačinu kretanja (2.12), dolazi se do

$$-i\hbar\omega_k \mathbf{A}_k = 2 \sum_j J_{ij} [1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)}] \mathbf{A}_k \times \mathbf{S}_0. \quad (2.14)$$

Slična jednačina se dobija i za kompleksno konjugovanu amplitudu. Bira se amplituda vektora koja zadovoljava sledeći uslov

$$-i\mathbf{A}_k = \mathbf{A}_k \times \mathbf{e}_0, \quad (2.15)$$

gde je \mathbf{e}_0 jedinični vektor u pravcu magnetizacije, $\mathbf{e}_0 = \mathbf{S}_0/S$, a to će biti pravac z - ose. Prethodnom jednačinom dobija se da je \mathbf{A}_k normalan na pravac z - ose, tako da se može raspisati pomoću realnog dela A_k kao

$$\mathbf{A}_k = A_k (\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}), \quad (2.16)$$

gde su $\hat{\mathbf{x}}$ i $\hat{\mathbf{y}}$ jedinični vektori u x i y pravcu, respektivno. Zamenjujući poslednju jednačinu u (2.13) za $\delta\mathbf{S}_i$ dobija se

$$\delta S_i^x = A_k \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i - \omega_k t), \quad \delta S_i^y = A_k \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i - \omega_k t). \quad (2.17)$$

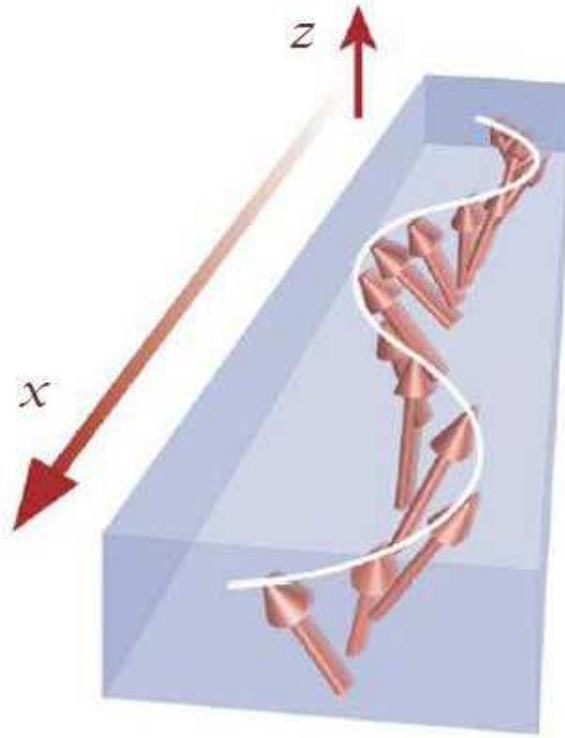
Ova rešenja odgovaraju situaciji da spinovi precesiraju fazno-korelirano u ravni normalnoj na pravac magnetizacije. Ova propagirajuća precesija u spinskim sistemima je poznata pod nazivom spinski talasi kao što je prikazano na Sl.2.1.

Vraćajući se u jednačinu (2.14) ugaona frekvencija precesiranja spinova datog spinskog talasa može biti određena iz

$$\hbar\omega_k = 2S \sum_j J_{ij} [1 - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)}]. \quad (2.18)$$

Razvojem eksponenta u poslednjoj jednačini za velike vrednosti talasne dužine, odnosno za male vrednosti talasnog broja k , na primeru kubne rešetke, gde su sve kristalografske ose ekvivalentne, disperziona relacija u k prostoru ima oblik:

$$\hbar\omega_k \sim k^2. \quad (2.19)$$



Slika 2.1: Trodimenzionalni vizuelni prikaz fazno - korelisane propagirajuće precesije spinova oko z - ose poznata pod nazivom spinski talasi

2.1.2 Kvantno - mehanički pristup teoriji feromagnetnih spinskih talasa

Klasični spinski talasi u kvantno-mehaničkom pristupu su predstavljeni magnonima. Polazište ovog pristupa je u tome da je stanje sa maksimalnom projekcijom spina duž određenog (izabranog) pravca svojstveno stanje Hajzenbergovog Hamiltonijana. Energija stanja sa maksimalnom spinskom projekcijom je u opštem slučaju:

$$E = - \sum_{i,j} J_{ij} S^2. \quad (2.20)$$

Uvode se bazisna stanja $|n_j\rangle$, gde n_j predstavlja broj spinskih devijacija, odnosno obrtanja spinova na čvoru j . To znači da se povećanjem n_j za 1 smanjuje spinska projekcija S_{jz} za 1. Podižući i spuštajući operatori su definisani komutacionim relacijama

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j}, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad \text{i} \quad [a_i^-, a_j^-] = 0. \quad (2.21)$$

Ovi operatori deluju na sledeći način:

$$\begin{aligned} a_j |n_j\rangle &= \sqrt{n_j} |n_j - 1\rangle \\ a_j^\dagger |n_j\rangle &= \sqrt{n_j + 1} |n_j + 1\rangle \\ a_j^\dagger a_j |n_j\rangle &= n_j |n_j\rangle \end{aligned} \quad (2.22)$$

Obrtanje spina redukuje, odnosno smanjuje z -komponentu spina na čvoru, tj.

$$S_{jz} = S - n_j, \quad (2.23)$$

gde S predstavlja vrednost totalnog spina na čvoru. Kako se obrtanje spina prenosi na druge čvorove, ovaj proces se može predstaviti kvazičesticom zvanom magnon, a operatori a_j i a_j^\dagger mogu biti shvaćeni kao magnonski kreacioni i anihilacioni operatori, respektivno. Više od jednog magnona mogu postojati na istom čvoru, zavisno od totalnog spina, što dovodi do zaključka da ove kvazičestice ne zadovoljavaju Paulijev princip isključenja. To direktno znači da se magnoni ponašaju kao bozoni. Spinski operatori kreacije i anihilacije se mogu preko novih operatora izraziti kao [12]:

$$S_j^\dagger = \hbar\sqrt{2S}\left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j, \quad (2.24)$$

$$S_j^- = \hbar\sqrt{2S}a_j^\dagger\left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2}. \quad (2.25)$$

Relacije (2.24) i (2.25) su poznate pod nazivom transformacija Holštajn-Primakova. Nakon formulisanja transformacije može se uvesti niskotemperaturna aproksimacija. Ona se zasniva na pretpostavci da je ukupan broj obrnutih spinova u sistemu mali u poređenju sa totalnim brojem spinova. Ovaj slučaj se može zapisati kao:

$$\left\langle \sum_j \left(1 - \left(\frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2}\right) \right\rangle \approx N \quad (2.26)$$

gde uglavna zagrada predstavlja očekivanu vrednost. Koren u izrazu može se aproksimirati sa

$$\left(\frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \approx 1. \quad (2.27)$$

Greška pri ovakvoj aproksimaciji bi bila prilično velika posmatrajući pojedinačan čvor j ukoliko je vrednost S mala. Međutim, greška će biti mala ukoliko se ispuni uslov:

$$\frac{\langle \sum_j (a_j^\dagger a_j) \rangle}{2NS} \ll 1. \quad (2.28)$$

Ispunjavanjem ovog uslova se kreacioni i anihilacioni operator se mogu aproksimirati sa:

$$S_j^\dagger \approx \hbar\sqrt{2S}a_j, \quad (2.29)$$

$$S_j^- \approx \hbar\sqrt{2S}a_j^\dagger. \quad (2.30)$$

U slučaju Hajzenbergovog feromagneta, osnovno stanje je stanje gde su svi spinovi paralelni nekom pravcu, najčešće se uzima pravac z ose. Definiše se kvantno stanje $|0\rangle$, koje zadovoljava sledeću jednačinu.

$$S_i^z|0\rangle = S|0\rangle \quad (2.31)$$

za svaki čvor rešetke. Korišćenjem transformacije Holštajn - Primakova i zanemarivanjem članova višeg reda, Hamiltonijan se može aproksimativno zapisati kao

$$H = -J \sum_{\langle n, n+\lambda \rangle} S^2 - JS \sum_{\langle n, n+\lambda \rangle} \left[a_n^\dagger a_{n+\lambda} + a_{n+\lambda}^\dagger a_n - a_n^\dagger a_n - a_{n+\lambda}^\dagger a_{n+\lambda} \right] \quad (2.32)$$

Kako je sistem translatorno invarijantan Hamiltonijan možemo dijagonalizovati Furijeovom transformacijom. Za bozonske operatore transformacija će imati oblik

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} a_{\mathbf{k}} \quad \text{i} \quad a_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} a_{\mathbf{k}}^\dagger. \quad (2.33)$$

Uvrštavanjem u jednačinu (2.32) dobija se:

$$H = -JS^2 N \frac{z}{2} - JS \sum_{n, n+\lambda} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{1}{N} e^{i\mathbf{n}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{q})} [e^{i\lambda\cdot\mathbf{q}} - 1] a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \quad (2.34)$$

$$= -JS^2 N \frac{z}{2} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \quad (2.35)$$

gde je u opštem slučaju:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = JSz(1 - \gamma(\mathbf{k})), \quad (2.36)$$

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta}. \quad (2.37)$$

Na ovaj način je dobijen Hamiltonijan kvadratan po bozonskim kreacionim i anihilacionim operatorima. Aproksimacija je vezana za najniže ekscitacije sistema. Najvažnija osobina na ovaj način dobijena je zavisnost disperzije od talasnog vektora za male vrednosti talasnog vektora. Za vrednosti $\mathbf{k} \ll 1$ dobija se $\varepsilon(\mathbf{k}) = JSk^2 + \mathcal{O}(k^4)$, što ukazuje da su ekscitacije bez procepa, ponašaju kao Goldstone-ovi modovi. To je posledica izbora osnovnog stanja, jer dolazi do narušenja kontinualne simetrije Hamiltonijana usled spinske rotacije [12]. Sa druge strane činjenica da disperzija ima kvadratnu zavisnost od talasnog vektora, reflektuje se slamanjem vremensko-inverzione simetrije osnovnog stanja feromagneta.

2.1.3 Termodinamika gasa idealnih magnona

Odstupanje od vrednosti saturacione magnetizacije usled dejstva kreacionih i anihilacionih opratora, gledajući u odnosu na z - pravac, na konačnim temperaturama dato je izrazom [12]:

$$\langle S_{tot}^z \rangle = -NS + \sum_i \langle a_i^\dagger a_i \rangle = -NS + \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.38)$$

Zamenom sume integralom i korišćenjem Boze-Ajnštajnovne raspodele za broj magnona, ukupan broj termički ekscitovanih magnona je određen sa

$$N_{SW} = V \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1}, \quad (2.39)$$

pa se za magnetizaciju dobija:

$$M = \frac{1}{V} g \mu_B \langle S_{tot}^z \rangle = \frac{N}{V} g \mu_B S \left[1 - \frac{V}{NS} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_k} - 1} \right]. \quad (2.40)$$

Na osnovu ove formule se temperaturska zavisnost magnetizacije može odrediti numerički. Na niskim temperaturama se može uzeti dugotalasna aproksimacija, koja se odnosi na oblik disperzione relacije, pa se integral u uglastoj zagradi može zapisati kao

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{k_{max}} 4\pi \mathbf{k}^{(d-1)} dk \frac{1}{e^{\beta D k^2} - 1} \quad (2.41)$$

gde je k_{max} talasni broj koji određuje integraciju unutar prve Brillueneve zone, dok D predstavlja konstantu vezanu za dugotalasnu aproksimaciju [12], pomoću koje se disperziona relacija za spinske talase može predstaviti kao

$$\hbar \omega_k \approx D k^2 \quad (2.42)$$

Integracijom izraza dobija se za $d = 3$:

$$M = \frac{N}{V} g \mu_B S \left[1 - \frac{V}{NS} \zeta(3/2) \left(\frac{k_B T}{4\pi D} \right)^{3/2} \right]. \quad (2.43)$$

Kao što je rečeno odstupanje magnetizacije od njene saturacione vrednosti je usled termički ekscitovanih magnona. Na niskim temperaturama magnetizacija opada sa stepenom $3/2$ u zavisnosti od temperature.

Unutrašnja energija gasa magnona (kojeg razmatramo kao gas bozona) se računa takođe preko Boze-Ajnštajnovne raspodele kao:

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_k \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{V}{(2\pi)^d} \int \frac{\hbar \omega_k}{e^{\hbar \omega_k / k_B T} - 1} d^d k. \quad (2.44)$$

Slično kao i u slučaju magnetizacije, temperaturska zavisnost magnonskog gasa pri niskim temperaturama ima oblik za $d = 3$:

$$E = a N \frac{1}{4\pi^2} \frac{(k_B T)^{5/2}}{(2JS)^{3/2}} \frac{3\pi^{1/2}}{4} \zeta(5/2). \quad (2.45)$$

Kao što se vidi energija ima zavisnost temperature sa stepenom $5/2$. Na osnovu ovoga zaključuje se da je zavisnost specifične toplote od temperature

$$C = N k_B A \left(\frac{k_B T}{2JS} \right)^{3/2}, \quad (2.46)$$

gde je A konstanta [12].

2.2 Švingerovi bozoni

Jedan od načina bozonizacije Hajzenbergovog modela je predstavljanje modela pomoću reprezentacije Švingerovih bozona. Švingerovi bozoni reprezentuju spinske operatore na sledeći način:

$$\begin{aligned} S^x + iS^y &= b_{\uparrow}^{\dagger}b_{\downarrow}, \\ S^x - iS^y &= b_{\downarrow}^{\dagger}b_{\uparrow}, \\ S^z &= \frac{1}{2}(b_{\uparrow}^{\dagger}b_{\uparrow} - b_{\downarrow}^{\dagger}b_{\downarrow}). \end{aligned} \quad (2.47)$$

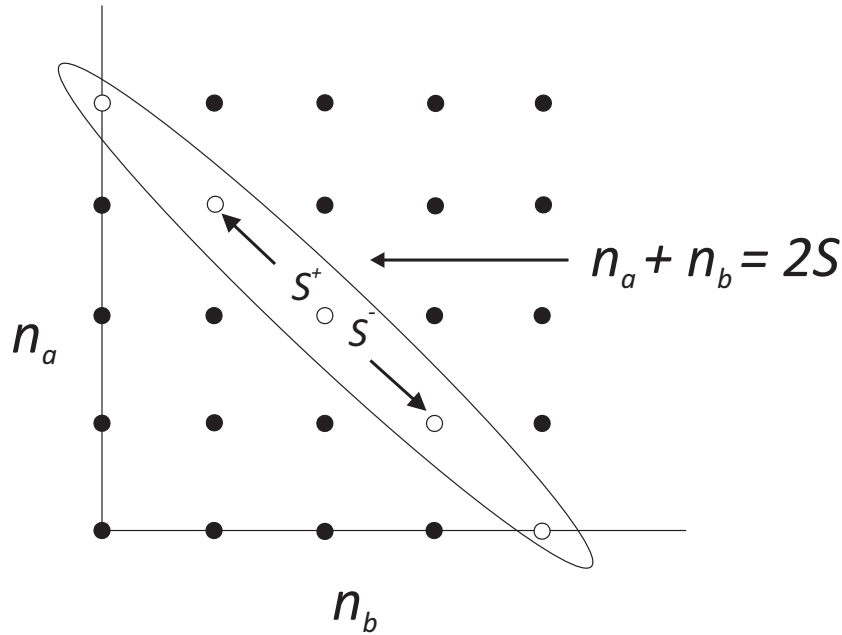
Spinske komponente zadovoljavaju komutacione relacije (1.16). Moduo spina S je definisan fizičkim potprostorom:

$$|n_{b_{\uparrow}}, n_{b_{\downarrow}}\rangle : n_{b_{\uparrow}} + n_{b_{\downarrow}} = 2S. \quad (2.48)$$

Potprostor se može odrediti nametanjem ograničenja, tako što se definiše projektor P_S , za koji važi:

$$P_S(b_{\uparrow}^{\dagger}b_{\uparrow} + b_{\downarrow}^{\dagger}b_{\downarrow} - 2S) = 0. \quad (2.49)$$

Ovim ograničenjem su izdvojena fizički moguća stanja od ostalih (matematički mogućih).



Slika 2.2: Projekcija potprostora spina S na Fokovski prostor Švingerovih bozona, predstavljen zaokruženim skupom nepopunjenih tačaka koji označava prostor fizički mogućih stanja

U datom projektovanom potprostoru, spinski moduo je definisan pomoću kvadratnog operatora spina kao:

$$\mathbf{S}^2 P_S = S(S + 1)P_S. \quad (2.50)$$

Spinska stanja su određena preko bozonskih operatora,

$$|S, m\rangle = \frac{(b_{\uparrow}^{\dagger})^{S+m}}{\sqrt{(S+m)!}} \frac{(b_{\downarrow}^{\dagger})^{S-m}}{\sqrt{(S-m)!}} |0\rangle, \quad (2.51)$$

gde $|S, m\rangle$ označava svojstveno stanje operatora \mathbf{S}^2 i S^z , a sa $|0\rangle$ je označen vakuum u reprezentaciji Švingerovih bozona. Na primer, spinsko stanje za spin $-\frac{1}{2}$ pomoću notacije druge kvantizacije je izražen kao:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &= b_{\uparrow}^{\dagger}|0\rangle \\ |\downarrow\rangle &= b_{\downarrow}^{\dagger}|0\rangle. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Reprezentacija Švingerovih bozona ima svojih prednosti i mana u poređenju sa drugim reprezentacijama. Ova reprezentacija je korisna za računanje matrice elemenata spinskih operatora. Nije nužno da na ovaj način dođe do pojednostavljenja pri računici spinskih korelacija nefokovskih talasnih funkcija. Lokalna ograničenja (2.48) Hilbertovog prostora uvode korelacije između b_{\uparrow} i b_{\downarrow} okupacionih brojeva. U teoriji srednjeg polja reprezentacijom Švingerovih bozona je opisana efektivnim neinteragujućim Boze kvazičesticama gde su korelacije između različitih bozona b_{\uparrow} i b_{\downarrow} zanemarene. Takođe, u teoriji srednjeg polja lokalno ograničenje je preneseno na usrednjene vrednosti proizvoda operatora po čvoru rešetke.

2.2.1 Jednačine Hajzenbergovog feromagneta u teoriji srednjeg polja izražene pomoću Švingerovih bozona

U prethodnom delu su date komutacione relacije za Švingerove bozone i predstavljeni su spinski operatori Hajzenbergovog modela u ovoj reprezentaciji. Polazi se od jednačine (1.27), u kojoj se operatori S^+ i S^- zamenjuju Švingerovim operatorima.

Hamiltonijan (1.27) raspisan na ovaj način ima oblik

$$\begin{aligned} H = & - J \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2} (b_{i\uparrow}^{\dagger} b_{i\downarrow} b_{j\downarrow}^{\dagger} b_{j\uparrow} + b_{i\downarrow}^{\dagger} b_{i\uparrow} b_{j\uparrow}^{\dagger} b_{j\downarrow}) \\ & + J \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{4} (b_{i\uparrow}^{\dagger} b_{i\uparrow} b_{j\uparrow}^{\dagger} b_{j\uparrow} - b_{i\uparrow}^{\dagger} b_{i\uparrow} b_{j\downarrow}^{\dagger} b_{j\downarrow} - b_{i\downarrow}^{\dagger} b_{i\downarrow} b_{j\uparrow}^{\dagger} b_{j\uparrow} + b_{i\downarrow}^{\dagger} b_{i\downarrow} b_{j\downarrow}^{\dagger} b_{j\downarrow}). \end{aligned} \quad (2.53)$$

Uvodi se operator veze

$$B_{ij}^{\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} b_{i\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma}, \quad (2.54)$$

gde je $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Takođe se zapaža da je

$$b_{i\uparrow}^{\dagger} b_{i\uparrow} b_{j\uparrow}^{\dagger} b_{j\uparrow} + b_{i\downarrow}^{\dagger} b_{i\downarrow} b_{j\downarrow}^{\dagger} b_{j\downarrow} = 2(S^2 + S_i^z S_j^z).$$

Kada se u Hamiltonijanu (2.52) iskoristi relacija (2.53), kao i relacija ograničenja (2.48), dobija se Hamiltonijan u bikvadratnom obliku po Boze operatorima:

$$H = -2J \sum_{\langle i,j \rangle} : B_{ij}^\dagger B_{ij} : + \frac{NzJ}{2} S^2, \quad (2.55)$$

gde je N broj čvorova rešetke, z broj najbližih suseda, dok $::$ predstavlja normalno uređenje operatora, tj. kreacioni operatori su prebačeni na levu stranu. Ovaj Hamiltonijan je rotaciono invarijantan, a generalizaciju na $SU(N)$ su sprovedi Arovas i Auerbach za feromagnetni model [1]. Aproksimacija srednjeg polja se naknadno uvodi. Naime, aproksimacija se sastoji u zanemarivanju fluktuacija operatora (po analogiji sa interakcijom pojedinačnog spina sa srednjim magnetnim poljem). Vršiti se na taj način da se ograničenje (2.48) uzima u obzir samo za srednje vrednosti spina obračunatog za čitavu rešetku. Ovo se elegantno izvodi uključivanjem Lagranževog množitelja λ . Nakon toga se pravi Hartri-Fokova dekompozicija Hamiltonijana (2.54), kojom se dolazi do Hamiltonijana srednjeg polja, koji ima oblik:

$$\begin{aligned} H_{MF} = & \lambda \sum_i \left[\sum_\sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} - 2S \right] \\ & - 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \{ \langle B_{ij}^\dagger \rangle B_{ij} + \langle B_{ij} \rangle B_{ij}^\dagger \} \\ & + 2J \sum_{i,j} \langle B_{i,j}^\dagger \rangle \langle B_{ij} \rangle + \frac{NzJ}{2} S^2, \end{aligned} \quad (2.56)$$

gde uglaste zagrade $\langle \dots \rangle$ označavaju termičko usrednjavanje, a relacija je dobijena tako što je iskorišćena jednačina (1.43). Smisao Lagranževog množitelja se vidi iz jednačine (2.55), jer je definisan tako da bude ispunjen zahtev da je

$$\left\langle \sum_\sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} \right\rangle = 2S. \quad (2.57)$$

Arovas i Auerbach su pretpostavili da je $\langle B_{ij} \rangle$ realan i uniforman [5], pa se na osnovu tih osobina definiše amplituda srednjeg polja izražena preko operatora veze kao

$$B = \langle B_{ij}^\dagger \rangle = \langle B_{ij} \rangle. \quad (2.58)$$

Ovaj izraz je posledica aproksimacije srednjeg polja, jer ovaj uslov je ispunjen za takozvane tačke sedla, odnosno statične tačke gde konfiguracija operatora veze mora odgovarati navedenoj pretpostavci.

Nenulta vrednost za B ukazuje da postoji kratkodometna interakcija, jer je sam operator B definisan kao proizvod Švingerovih bozona na susednim čvorovima. U nastavku će biti dati uslovi kada dolazi do dugodometne interakcije [3]. Kako su b_\uparrow i b_\downarrow dekuplovani Hamiltonijan u aproksimaciji srednjeg polja može biti dijagonalizovan pomoću Furijeove transformacije.

Hamiltonijan postaje usled relacije (2.57)

$$H_{MF} = \lambda \sum_{i\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} - 2\lambda SN - 2JB \sum_{\langle i,j \rangle} (B_{ij} + B_{ij}^\dagger) + NzJB^2 + \frac{NzJ}{2} S^2. \quad (2.59)$$

Da bi se dijagonalizovao Hamiltonijan treba izvršiti Furijeovu transformaciju prvog i trećeg člana. Menja se notaciju pisanja sume da bi se označili vektori operatora na susednim čvorovima:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \rightarrow \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}} .$$

Transformacije Švingerovih bozona su:

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{n},\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}}, & b_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta},\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} b_{\mathbf{l},\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta})} \\ b_{\mathbf{n},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} b_{\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}}, & b_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} b_{\mathbf{l},\sigma} e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta})} \end{aligned} \quad (2.60)$$

Furijeova transformacija prvog člana daje

$$\sum_{i\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} = \sum_{k\sigma} b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}, \quad (2.61)$$

jer je i sam član pre transformacije dijagonalan. Koristeći relaciju za diskretni oblik δ -funkcije

$$\sum_{\mathbf{n}} e^{i(\mathbf{l}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{n}} = N\delta_{\mathbf{l},\mathbf{k}}, \quad (2.62)$$

Furijeova transformacija trećeg člana u Hamiltonijanu će dati:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} (B_{ij} + B_{ij}^\dagger) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k},\sigma} \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}}. \quad (2.63)$$

Nakon Furijeove transformacije Hamiltonijan u aproksimaciji srednjeg polja postaje dijagonalizovan i ima oblik

$$H_{MF} = \lambda \sum_{\mathbf{k},\sigma} b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k},\sigma} - 2\lambda SN - JB \sum_{\mathbf{k},\sigma} b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k},\sigma} \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}} + NzJB^2 + \frac{NzJ}{2} S^2. \quad (2.64)$$

Definisanjem novih veličina [3]:

$$\Lambda = \frac{\lambda}{JBz} - 1, \quad (2.65)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\boldsymbol{\delta}} (1 - e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}}), \quad (2.66)$$

Hamiltonijan se elegantnije može zapisati kao

$$H_{MF} = \frac{NzJ}{2} S^2 - 2\lambda SN + NzjB^2 + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (2.67)$$

gde je

$$\omega_k = JBz(\varepsilon_k + \Lambda) = JBz(\varepsilon_k - 1) + \lambda \quad (2.68)$$

zakon disperzije.

Sledeći korak je da se nađu izrazi za unutrašnju i slobodnu energiju, obračunate po čvoru rešetke. Za izračunavanje slobodne energije se polazi od izraza

$$F = \frac{NzJ}{2}S^2 - 2\lambda SN + NzjB^2 + 2kT \sum_{\mathbf{k}} \ln(1 - e^{-\beta\omega_k}). \quad (2.69)$$

gde su članovi ispred člana sa sumom identični kao i članovi u (2.67). Poznato je da je Boze - Ajnštajnova statistika određena izrazom

$$n_k = \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1} \quad (2.70)$$

Kombinacijom izraza (2.68) i (2.69) dobija se izraz za slobodnu energiju obračunat po čvoru rešetke kao

$$f = \frac{F}{N} = \frac{zJ}{2}S^2 - 2\lambda S + zJB^2 - \frac{2}{N\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln(1 + n_k). \quad (2.71)$$

Minimiziranjem slobodne energije po λ i B , dobijamo izraze za S i B :

$$\frac{\partial f}{\partial \lambda} = 0 \Rightarrow S = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_k, \quad (2.72)$$

$$\frac{\partial f}{\partial B} = 0 \Rightarrow B = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_k n_k. \quad (2.73)$$

Kako je Hamiltonijan kvadratan po boze operatorima, unutrašnju energiju nalazimo kao srednju vrednost Hamiltonijana u aproksimaciji srednjeg polja.

$$U = \langle H_{MF} \rangle = \left\langle \frac{NzJ}{2}S^2 - 2\lambda SN + NzjB^2 + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \omega_k b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle. \quad (2.74)$$

Srednja vrednost će se odnositi samo na izraz sa sumom. Ako se članovi ispred člana sa sumom označe sa C , odnosno $C = \frac{NzJ}{2}S^2 - 2\lambda SN + NzjB^2$, izraz za unutrašnju energiju postaje

$$\begin{aligned} U &= C + \left\langle \sum_{\mathbf{k},\sigma} \omega_k b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle \\ &= C + \left\langle \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(JBz(\varepsilon_k - 1) + \lambda \right) b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Zamenom izraza za S i B iz jednačina (2.71) i (2.72), dobija se izraz za unutrašnju energiju obračunatu po čvoru rešetke:

$$u = \frac{U}{N} = JzB^2 + \frac{Jz}{2}S^2. \quad (2.76)$$

U predhodnom delu su date osnovne jednačine aproksimacije srednjeg polja u Švingerovoj bozonskoj reprezentaciji na osnovu kojih će biti vršena dalja analiza.

2.2.2 Neuređena oblast

Sume dobijene u prethodnom odeljku (2.71) i (2.72), koje predstavljaju i osnovne jednačine aproksimacije srednjeg polja, mogu se prevesti u integralni oblik unutar prve Brillueneve zone recipročnog prostora. Konačno se dobijaju sledeći integrali:

$$S = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{e^{\tilde{\beta}(\varepsilon_{\mathbf{k}+\Lambda)} - 1}}, \quad (2.77)$$

$$B = S - \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{e^{\tilde{\beta}(\varepsilon_{\mathbf{k}+\Lambda)} - 1}}, \quad (2.78)$$

gde d označava prostornu dimenzionalnost, a parametar $\tilde{\beta}$ je definisan kao $\tilde{\beta} = JBz/k_B T$. Prelaz za sume u integral je izvršen pomoću veze

$$\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^d} \int F(\mathbf{k}) d^d k, \quad (2.79)$$

gde je uzeto da je rastojanje između susednih spinova jedinično. Veličina $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ ima vrednost jednaku nuli, samo za $\mathbf{k} = 0$, dok za ostale \mathbf{k} -ove ima pozitivne vrednosti, pa se može napisati da je $\varepsilon_{\mathbf{k}} \geq 0$. Ovaj izraz implicira da je i vrednost hemijskog potencijala Λ takođe $\Lambda \geq 0$. Integral (2.76) je nerešiv za vrednost temperature od $T = 0$ za bilo koju dimenziju d . Ovo se dešava zato što član $\tilde{\beta}$ u imeniocu sadrži T . To znači da ne postoji nulto temperaturno rešenje. Za $d = 1$ i $d = 2$, postoji rešenje za svaku temperaturu veću od nule, disperzioni spektar sadrži gap što implicira da je sistem neuređen, a simetrija je ostala sačuvana pošto je Hamiltonijan rotaciono invarijantan. Ovaj zaključak se slaže sa Mermin-Wagner-ovom teoremom [1,13] koja kaže da sistemu sa kratkodometnom interakcijom ne može biti spontano narušena simetrija za $d = 1$ i $d = 2$. Do zaključka da je sistem neuređen može se doći i razmatranjem spin-spin korelacione funkcije koja eksponencijalno izčezava za velika rastojanja. U slučaju $d = 1$ pri niskim temperaturama doprinos će dati male vrednosti impulsa k . Disperziona relacija se može zapisati u obliku

$$\omega_{\mathbf{k}} = JBz(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{1}{4z}\kappa^2), \quad (2.80)$$

gde je

$$\kappa^2 = 4z\left(\frac{\lambda}{JBz} - 1\right) \quad (2.81)$$

i predstavlja inverznu korelacionu dužinu $\kappa = 1/\xi$. Za korelacionu funkciju se uzima opšti izraz

$$\langle S_i^{\dagger} S_j^- \rangle = |R_{ij}|^2 + S\delta_{ij}, \quad (2.82)$$

gde je R_{ij} funkcija oblika

$$R_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_{ij}}. \quad (2.83)$$

Na osnovu rečenog, za jednodimenzionalni slučaj funkcija R_{ij} se može aproksimovati na sledeći način

$$R_{ij} \sim \int_0^\infty dk \frac{e^{ik|i-j|}}{\frac{1}{4}\kappa^2 + k^2} = S e^{-\frac{1}{2}\kappa|i-j|}, \quad (2.84)$$

jer je u slučaju niskih temperatura, to jeste za male vrednosti \mathbf{k} :

$$\begin{aligned} \varepsilon &\approx JS \left(\frac{1}{4}\kappa^2 + \mathbf{k}^2 + \dots \right), \\ n(\varepsilon) &\approx T/\varepsilon. \end{aligned} \quad (2.85)$$

Ako se iskoristi ova aproksimacija u izrazu (2.80) dobija se izraz za spin-spin korelacionu funkciju u obliku:

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle_{MF} \sim \frac{1}{2} S^2 e^{-|i-j|/\xi}. \quad (2.86)$$

Odavde se može zaključiti da korelacija opada eksponencijalno sa rastojanjem, a to je upravo znak da je sistem neuređen.

Što se tiče slobodne energije i susceptibilnosti za jednodimenzionalni slučaj, pri niskotemperaturskom režimu rezultati se slažu sa egzaktnim Bete - anzac rezultatima [10], s tim što postoji razlika u numeričkim faktorima. Naime, susceptibilnost u slučaju aproksimacije srednjeg polja ima sledeći oblik [4,10]:

$$\chi_{MF} = -\frac{1}{N} \frac{d^2 f(h)}{dh^2} = -\frac{1}{4N} \frac{d^2 f(h)}{d\lambda^2} = \frac{1}{4NT} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}(n_{\mathbf{k}} + 1). \quad (2.87)$$

Razvijajući izraz u niskotemperaturskom režimu za, $d = 1$, dobija se sledeća temperaturska zavisnost

$$\chi_{MF} = \frac{1}{2T} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} n_{\mathbf{k}}(n_{\mathbf{k}} + 1) \sim \frac{JS^4}{T^2}. \quad (2.88)$$

Egzaktno rešenje za $S = \frac{1}{2}$ u slučaju Hajzenbergovog feromagneta je izračunao Takahaši koristeći Beteovo rešenje [4], i dobio je izraz:

$$\chi^{S=\frac{1}{2}} \sim \frac{J}{24T^2} \sim \frac{2}{3} \chi^{MF}. \quad (2.89)$$

Ovo neslaganje je posledica jednačine ograničenja (2.48) kao i prebrojavanja bozona (pri razmatranju se uzima da postoje dva nezavisna boze operatora po čvoru rešetke). U slučaju kada je $d = 2$ i $z = 2$ (kvadratna rešetka) važi da je

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = 1 - \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y), \quad (2.90)$$

jer je uzeto da rastojanje između susednih čvorova ima jediničnu vrednost, tj.

$$|\boldsymbol{\delta}| = a = 1. \quad (2.91)$$

Što se tiče jednačine (2.71), ona će u ovom slučaju [1] biti:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} &\approx \frac{T}{4JS\pi} \int_{1-\pi}^1 d\varepsilon_k \frac{1}{4(1-\varepsilon_k)} \\ &= \frac{T}{JS\pi} \ln(16\pi/\kappa^2) + \mathcal{O}(T^2) = S. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Za inverznu korelacionu dužinu se dobija izraz:

$$\kappa \approx \sqrt{16\pi} e^{-\frac{2\pi JS^2}{T}}. \quad (2.93)$$

Što se tiče spin korelacione funkcije na velikim razdaljinama će R_{ij} biti:

$$\begin{aligned} R_{ij} &\approx \frac{T}{JS} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_{ij}}}{\frac{1}{4\kappa^2 + k^2}} \\ &\approx (|\mathbf{x}_{ij}\xi|)^{-1/2} e^{-|\mathbf{x}_{ij}|\kappa/2} \left(1 + \frac{2}{|\mathbf{x}_{ij}|\kappa + \dots}\right), \end{aligned} \quad (2.94)$$

gde je $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$. Na osnovu ovih relacija spin- spin korelaciona funkcija će imati oblik:

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle \propto \frac{\xi}{|\mathbf{x}_{ij}|} e^{-|\mathbf{x}_{ij}|/\xi}. \quad (2.95)$$

Zaključak je da se korelaciona dužina eksponencijalno povećava sa smanjenjem temperature i nema dugodometne uređenosti na bilo kojoj konačnoj temperaturi ($T > 0$), što je kako je napomenuto u skladu sa Mermin- Vagnerovom teoremom.

2.2.3 Kritično ponašanje kada $T \rightarrow T_c^+$

Za temperature veće od kritične, $T > T_c$ disperzioni spektar poseduje procep, jer je hemijski potencijal $\Lambda > 0$. Kada $T \rightarrow T_c^+$ i hemijski potencijal ide u nulu za $T = T_c$, tako da su kritične osobine određene ponašanjem hemijskog potencijala Λ pri snižavanju temperature do kritične vrednosti T_c :

$$\begin{aligned} 1d: & \quad \Lambda \sim T^2, \\ 2d: & \quad \Lambda \sim T e^{-const/T}, \end{aligned} \quad (2.96)$$

što će biti pokazano numerički. Kritična temperatura za slučaj $d > 2$ se dobija zamenjujući $\Lambda = 0$ u jednačinama (2.71) i (2.72):

$$S = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{e^{\tilde{\beta}_c \varepsilon_k} - 1}, \quad (2.97)$$

$$B_c = S - \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\varepsilon_k}{e^{\tilde{\beta}_c \varepsilon_k} - 1}. \quad (2.98)$$

Ako se iz jednačine (2.96) izrazi $\tilde{\beta}_c$ u funkciji od S i ubaci u jednačinu (2.97) može se dobiti izraz za B_c , a samim tim i vrednost kritične temperature kao:

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{z B_c}{\tilde{\beta}_c} \quad (2.99)$$

Kako se vrednost za B smanjuje sa povećanjem temperature, to implicira da je $\tilde{\beta} < \tilde{\beta}_c$. Za određenu vrednost $\tilde{\beta}$ integrali (2.71) i (2.72) nisu nužno analitične funkcije od Λ . Stoga se definiše integral koji je analitična funkcija od $\tilde{\beta}$ oblika:

$$I(\beta) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{e^{\tilde{\beta}\varepsilon_k} - 1}. \quad (2.100)$$

Za vrednost $\tilde{\beta} = \tilde{\beta}_c$, integral ima vrednost $I(\tilde{\beta}_c) = S$. Pravi se razlika integrala $I(\tilde{\beta}) - I(\tilde{\beta}_c)$:

$$I(\tilde{\beta}) - I(\tilde{\beta}_c) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left[\frac{1}{e^{\tilde{\beta}\varepsilon_k} - 1} - \frac{1}{e^{\tilde{\beta}_c\varepsilon_k + \Lambda} - 1} \right]. \quad (2.101)$$

Za vrednost $\tilde{\beta} \approx \tilde{\beta}_c$, glavni doprinos integralu dolazi od male vrednosti ε , jer je Λ malo. Gustina stanja za malu vrednost ε se ponaša kao $\varepsilon^{d/2-1}$. Razvojem imenioca dobija se da se desna strana jednačine (2.100) ponaša kao [3]:

$$\sim \frac{\Lambda}{\tilde{\beta}} \int_0^{\varepsilon_{max}} d\varepsilon \frac{\varepsilon^{d/2-2}}{\varepsilon + \Lambda} \sim \frac{1}{\tilde{\beta}} \Lambda^{d/2-1}, \quad 2 < d < 4. \quad (2.102)$$

Kako je leva strana jednačine (2.100) proporcionalna razlici $\tilde{\beta}_c - \tilde{\beta}$, to znači da je $\Lambda \sim (\tilde{\beta}_c - \tilde{\beta})^s$, gde je $s = 2/(d-2)$ za slučaj $2 < d < 4$.

Kompletna dosadašnja analiza, sa obzirom da se govori o bozonima blizu kritične temperature, je bazirana na ponašanju idealnog Boze gasa blizu temperature kondenzacije, što je u ovom slučaju T_c . Međutim, u ovom slučaju se radi o interagujućem Boze gasu, a efekti interakcije su opisani veličinom B . Vrednost B pri temperaturi T_c je maksimalna i konačna. Dolazi se do zaključka da je $B - B_c \sim \tilde{\beta}_c - \tilde{\beta}$. S obzirom da je $\tilde{\beta}_c - \tilde{\beta} \sim t$, gde je $t = (T - T_c)/T$, to znači da je takođe $B - B_c \sim t$, pa se iz ranije analize dolazi do zaključka da je

$$\Lambda \sim t^s \quad (2.103)$$

gde je $s = \frac{2}{d-2}$ za $2 < d < 4$.

Spin-spin korelaciona funkcija koja je potrebna za izražavanje susceptibilnosti i korelacione dužine je data izrazom [3]:

$$G(R) = \langle S(0)S(R) \rangle = \frac{3}{2} [S\delta_{R,0} + |g(R)|^2], \quad (2.104)$$

gde je

$$g(R) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{ikR}}{e^{\tilde{\beta}(\varepsilon_k + \Lambda)} - 1}. \quad (2.105)$$

Kao što se vidi za $R = 0$, iz jednačine (2.104) dobija se $g(0) = S$, a samim tim

$$G(0) = \frac{3}{2} S(S+1). \quad (2.106)$$

Ova jednačina pokazuje dobru spinsku zavisnost, s tim što se zapaža numeričko odstupanje za faktor $\frac{3}{2}$. Ovo neslaganje proizilazi usled ograničenja koja se odnose samo na usrednjene vrednosti, kao što je ranije navedeno.

2.2.4 Uređena oblast

Kako se razmatrani sistem sastoji iz fiksiranog broja bozona, očekivano je pojavljivanje Boze-Ajnštajnovne kondenzacije pri kritičnoj temperaturi. Upravo pojava Boze -Ajnštajnovne kondenzacije odgovara izostanku (nemogućnosti određivanja) rešenja jednačine (2.72) ispod T_c . Ispostavlja se da se kondenzacija u Švinger bozonskoj teoriji javlja usled narušenja rotacione simetrije i usled feromagnetskog uređenja spinskog sistema.

Polazi se od razmatranja u kom se kondenzacija pojavljuje u oba kanala b_\uparrow i b_\downarrow u jednakoj meri. To znači da je

$$\langle b_\uparrow^\dagger b_\uparrow \rangle = \langle b_\downarrow^\dagger b_\downarrow \rangle = S, \quad (2.107)$$

što dalje implicira da je $\langle S^z \rangle = 0$. Ako se iz jednačine (2.71) izuzme član sa $\mathbf{k} = 0$, a ostatak sume transformiše u integral, dobija se izraz:

$$S = \rho + \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{e^{\tilde{\beta}(\varepsilon_k + \Lambda)} - 1}, \quad (2.108)$$

gde član

$$\rho = \frac{1}{N} \langle b_{0\uparrow}^\dagger b_{0\uparrow} \rangle = \frac{1}{N} \frac{1}{e^{\tilde{\beta}\Lambda} - 1}, \quad (2.109)$$

predstavlja gustinu kondenzovanog stanja. Iznad kritične temperature, prestaje egzistencija kondenzovane faze, pa je $\rho = 0$, dok za temperature niže od kritične ρ uzima konačne vrednosti. Jednačina za određivanje B ostaje nepromenjena za $\mathbf{k} = 0$, jer je u tom slučaju $\varepsilon_k = 0$. Stavljajući $\Lambda = 0$ za $T < T_c$, za ρ se dobija izraz:

$$\rho = S - \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{e^{\tilde{\beta}\varepsilon_k} - 1} = S - I(\tilde{\beta}), \quad (2.110)$$

$$B = S - \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\varepsilon_k}{e^{\tilde{\beta}\varepsilon_k} - 1}. \quad (2.111)$$

Za kondenzacionu regiju važi

$$|b_{0\uparrow}^\dagger| = |b_{0\uparrow}| = |b_{0\downarrow}^\dagger| = |b_{0\downarrow}| = \sqrt{N\rho}. \quad (2.112)$$

U idealnom slučaju pri $T = 0$, gustina stanja će biti jednaka $\rho = S$. Sa druge strane, ukoliko se izabere slučaj u kom su faze Boze polja jednake, $\langle S^x \rangle$ će imati srednju vrednost

$$\langle S^x \rangle = \frac{1}{N} |b_{0\uparrow}|^2 = \rho, \quad (2.113)$$

a u tom slučaju će biti $\langle S^y \rangle = 0$. Ako se uzme ovakav izbor sistem će biti feromagnetno uređen u pravcu x - ose, pri čemu je magnetizacija jednaka $m = \rho$. Međutim, bilo kakav drugi izbor faza će usloviti rotaciju u $x - y$ ravni, dok će amplituda magnetizacije ostati nepromenjena. Ovo izlaganje dovodi do zaključka da je sistem uređen u transferzalnom

pravcu, što se može pokazati i pomoću spin-spin korelacione funkcije, koja je u ovom slučaju oblika:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \langle S_{\perp}(0) \cdot S_{\perp}(R) \rangle = \rho^2 = m^2, \quad (2.114)$$

a takođe važi da $\lim_{R \rightarrow \infty} \langle S^z(0) \cdot S^z(R) \rangle \rightarrow 0$. U ovom slučaju feromagnetno uređenje se postiže usled narušenja rotacione simetrije u transferzalnom pravcu, odnosno u $x - y$ ravni. Feromagnetno uređenje se može ostvariti i u pravcu z - ose. To se postiže ukoliko se doda spoljašnje polje malog intenziteta h , pa se na kraju računa postavi uslov da vrednost polja izčezava. Ako se postave ovakvi uslovi (doda se spoljašnje magnetno polje), dva kanala neće biti ekvivalentna što se tiče gustine stanja [3]. Usled dejstva polja kanali b_{\uparrow} i b_{\downarrow} neće imati jednaku gustinu, nego će biti:

$$n_{b_{\uparrow}} = S + m, \quad n_{b_{\downarrow}} = S - m. \quad (2.115)$$

Zbog toga, umesto jednačine (2.71), u razmatranje se uzimaju dve jednačine posebno za svaki kanal:

$$\langle b_{i\uparrow}^{\dagger} b_{i\uparrow} \rangle = S + m = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\tilde{\beta}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \Lambda - h)} - 1}, \quad (2.116)$$

$$\langle b_{i\downarrow}^{\dagger} b_{i\downarrow} \rangle = S - m = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\tilde{\beta}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \Lambda + h)} - 1}, \quad (2.117)$$

gde parametar h označava magnetno polje (proporcionalan je polju). Jednačina (2.72) za B ostaje nepromenjena u prisustvu polja. Usled dejstva polja, za $h > 0$ samo kanal b_{\uparrow} bozona prelazi u oblast Boze-Ajnštajnovne kondenzacije, dok za jednačinu (2.115) postoji rešenje za odgovarajuću vrednost magnetizacije, a kanal b_{\downarrow} bozona ne doživljava kondenzaciju. Za uređeno stanje se stavlja da je $\Lambda = h$, nakon toga se suma pretvara u integral izbacivanjem člana za $k = 0$ (govori se o b_{\uparrow} kanalu) koji u stvari predstavlja gustinu kondenzacije ρ . Nakon toga se nameće uslov da $h \rightarrow 0$, pa se dolazi do jednačine:

$$\rho = S + m - I(\tilde{\beta}), \quad (2.118)$$

gde je

$$m = S - I(\tilde{\beta}). \quad (2.119)$$

Jednačina dobijena za magnetizaciju (2.118) je ista kao i jednačina (2.109), što znači da dobijeni rezultat ne zavisi od izbora na koji se narušava simetrija.

Glava 3

Numerička analiza rezultata i poređenje sa QMT i LSW

Ova glava rada obuhvata numeričko resavanje jednačina koje su dobijene pri analizi Hajzenbergovog feromagneta u reprezentaciji Švingerovih bozona pri aproksimaciji srednjeg polja. Analiza je uradjena u programskom jeziku *Wolfram Mathematica 10*. Cilj je bio da se dobiju bozonski disperzioni spektri za jedno-, dvo- i trodimenzionalnu rešetku, kao i da se nacрта zavisnost slobodne energije od temperature. Za svaku dimenziju rešetke je nacrtan disperzioni spektar za određene temperature, kao i zavisnost slobodne energije od temperature. Numerička analiza za slobodnu energiju je rađena na osnovu integralnog oblika jednačine (2.70) koja je data sa:

$$f_{SBMFT} = \frac{zJ}{2}S^2 - 2\lambda S + 2JB^2 - \frac{2}{N\beta} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \ln \left(1 + \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1} \right). \quad (3.1)$$

Nakon toga su upoređeni rezultati sa rezultatima dobijenim pomoću *LSW* (eng. Linear Spin-Wave) i *QMC* (eng. Quantum Monte Carlo). Rezultati, odnosno grafički prikaz slobodne energije je dobijen na osnovu relacije [20]:

$$f_{LSW} = \frac{zJ}{2}S^2 + T \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \ln \left(1 - e^{-\beta\omega_k^{LSW}} \right), \quad (3.2)$$

gde je u ovom slučaju

$$\omega_{\mathbf{k}}^{LSW} = JSz \left(1 - \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \cos k_i \right), \quad (3.3)$$

a d predstavlja dimenziju rešetke. Rezultati za *QMC* su uzeti iz [22], a dobijeni su pomoću *ALPS* paketa.

Da bi se nacrtale navedene zavisnosti definisane jednačinama (2.67) i (2.70) potrebno je odrediti vrednosti operatora veze B i hemijskog potencijala u određenom opsegu temperatura od interesa. Problem pri određivanju operatora veze je taj što je dobijena jednačina (2.72) data u implicitnom obliku. Za svaku dimenziju uzeta je vrednost spina $S = 1/2$, vrednost interakcije izmene $J = 1$ i za Bolcmanovu konstanu je uzeta vrednost $k_B = 1$ radi

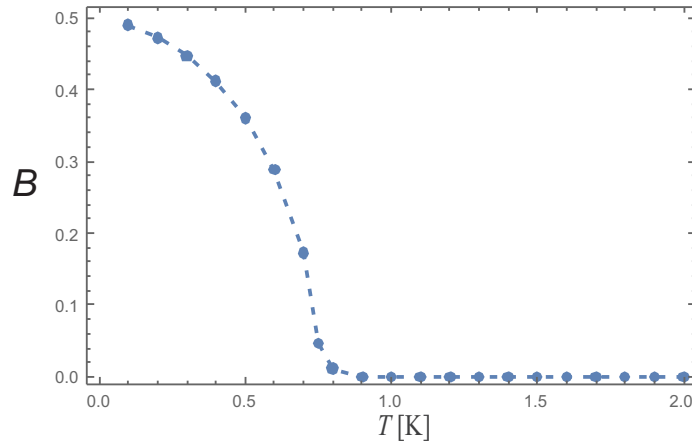
jednostavnosti. Broj najbližih suseda zavisi od dimenzije rešetke. Jednačina (2.72) se rešava rekurentno, na način da se za fiksiranu temperaturu izabere neka vrednost parametra λ i stavljanjem u jednačinu (2.72) dobija se da B konvergira ka određenoj vrednosti. Ubacivanjem vrednosti za λ i B u jednačinu (2.71) se dobija informacija o njihovoj ispravnosti, jer je vrednost za S unapred odabrana. Ukoliko vrednosti nisu odgovarajuće (ispravne) postupak se ponavlja uzimajući drugu vrednost za λ . Postupak je završen kada se ubacivanjem B i λ u jednačinu (2.71) dobija odabrana vrednost spina $S = 1/2$. Kada se dođe do zaključka da su dobijene vrednosti ispravne, ubacuju se u izraz za slobodnu energiju (2.70) te se dobija vrednost slobodne energije za izabranu temperaturu. Nakon toga se uzima sledeća temperatura i ceo postupak ponavlja. Proces se završava kada se izračunaju tražene veličine za izabrane temperature iz željenog opsega. Nakon toga se crtaju grafici zavisnosti $\omega = \omega(\mathbf{k})$ i $f = f(T)$

3.1 Jednodimenzionalni slučaj

U slučaju kada je $d = 1$ broj najbližih suseda je $z = 2$. Geometrijski faktor ε_k se može zapisati kao:

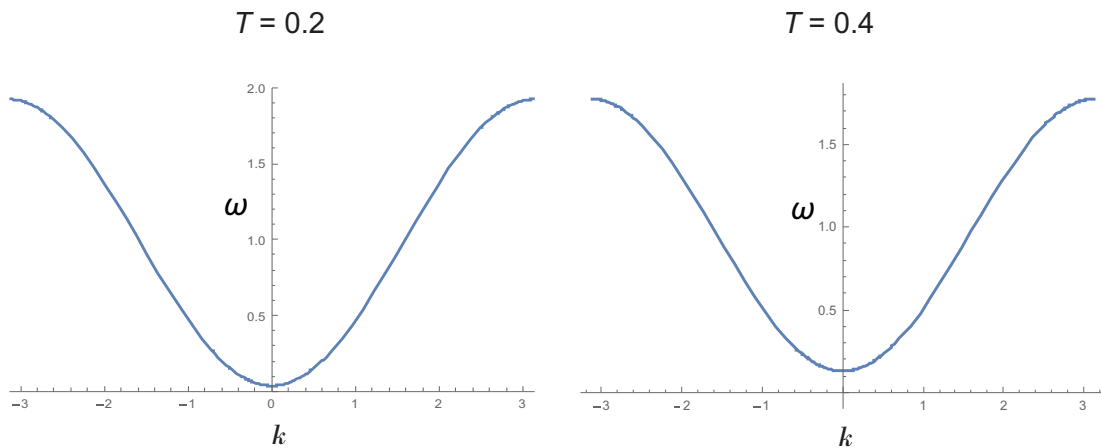
$$\varepsilon_{k_x} = 1 - \cos k_x. \quad (3.4)$$

Vrednost B opada sa povećanjem temperature od svoje maksimalne vrednosti $B(T = 0.1) = 0.489293$ do nule pri temperaturi od oko $T = 0.7$.



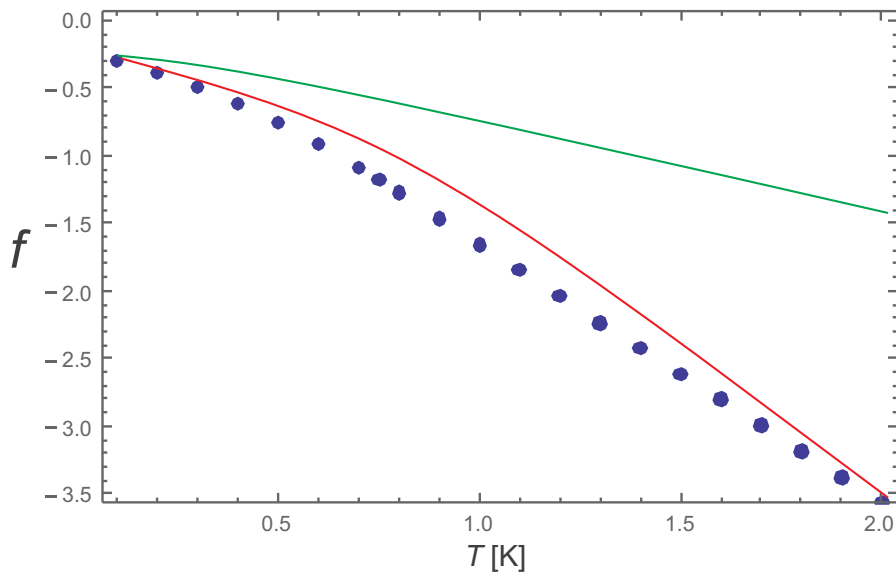
Slika 3.1: Grafik zavisnosti $B = B(T)$ za dimenziju $d = 1$

Postojanje nenulte vrednosti za B nije u neskladu sa Mermin-Vagnerovom teoremom, zato što on karakteriše kratkodometno uređenje. Parametar λ uzima približno konstantne vrednosti u opsegu temperatura za koje je $B \neq 0$. Nakon toga raste sa porastom temperature, što je u skladu sa teorijom.



Slika 3.2: Disperzioni spektar Švingerovih bozona za dimenziju $d = 1$ na temperaturama $T = 0.2$ i $T = 0.4$

Disperzije za Švingerove bozone su prikazane na Sl. 3.2 za temperature $T = 0.2$ i $T = 0.4$. Pri ovim temperaturama su vrednosti $B \neq 0$ i $\lambda \neq 0$. Uočava se gep pri vrednosti $k = 0$ što ukazuje na odsustvo dugodometnog uređenja.



Slika 3.3: Zavisnost slobodne energije od temperature za $D = 1$. Na grafiku su upoređeni rezultati dobijeni pomoću *LSW* (označeni crvenom linijom), *QMC* (označeni zelenom linijom) i *SBMFT* (označeni plavim tačkama)

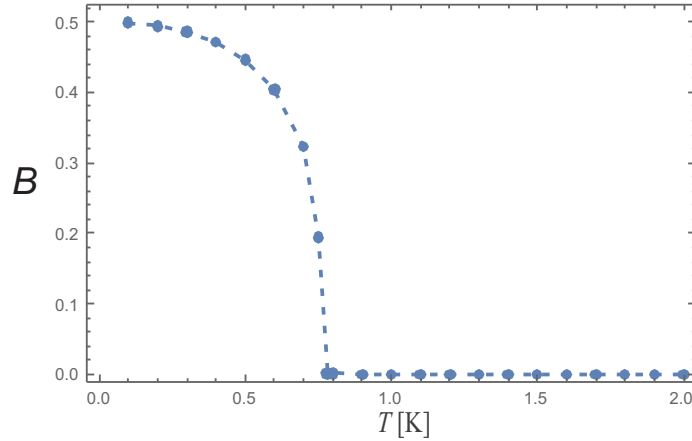
Slobodna energija opada sa temperaturom kao što je prikazano na Sl. 3.3. U poređenju sa *QMC* i *LSW* pokazuje dobra slaganja na niskim temperaturama.

3.2 Dvodimenzionalni slučaj

U slučaju kada je $d = 2$ broj najbližih suseda je $z = 4$. Geometriški faktor ε_k se može zapisati kao:

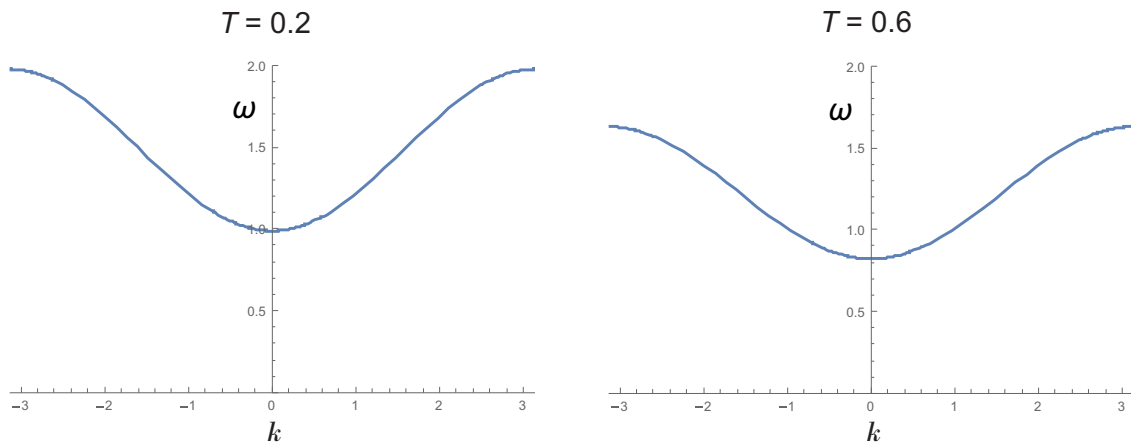
$$\varepsilon_{k_x, k_y} = 1 - \frac{\cos k_x + \cos k_y}{2}. \quad (3.5)$$

Vrednost B opada sa povećanjem temperature od svoje maksimalne vrednosti $B(T = 0.1) = 0.498631$ do nule pri temperaturi od oko $T = 0.8$ kao što je prikazano na Sl. 3.4.



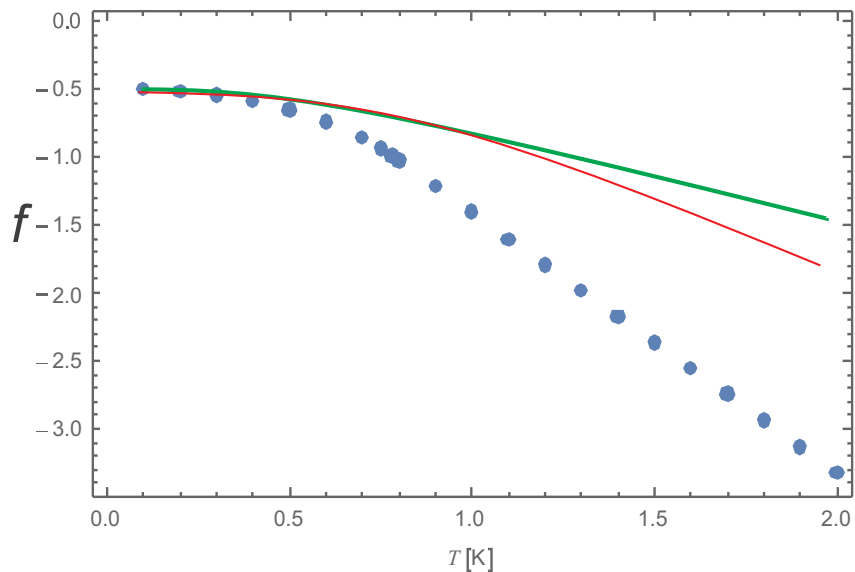
Slika 3.4: Grafik zavisnosti $B = B(T)$ za dimenziju $d = 2$

Na osnovu ovoga možemo zaključiti da kratkodometno uređenje nestaje na većoj temperaturi u odnosu na $d = 1$. Parametar λ se ponaša kao u jednodimenzionalnom slučaju, s tim što uzima veće vrednosti.



Slika 3.5: Disperzioni spektar Švingerovih bozona za dimenziju $d = 2$ na temperaturama $T = 0.2$ i $T = 0.6$

Disperzije za Švingerove bozone su prikazane na Sl. 3.5 za temperature $T = 0.2$ i $T = 0.6$. Pri ovim temperaturama su vrednosti $B \neq 0$ i $\lambda \neq 0$. Uočava se gap pri vrednosti $k_x = 0$ i $k_y = 0$ što ukazuje na odsustvo dugodometnog uređenja.



Slika 3.6: Zavisnost slobodne energije od temperature za $d = 2$. Na grafiku su upređeni rezultati dobijeni pomoću *LSW* (označeni crvenom linijom), *QMC* (označeni zelenom linijom) i *SBMFT* (označeni plavim tačkama)

Slobodna energija opada sa temperaturom kao i u $d = 1$ što je prikazano na grafiku Sl. 3.6. U poređenju sa *QMC* i *LSW* pokazuje dobra slaganja na niskim temperaturama, s tim da je slaganje izraženo i na većim temperaturama u odnosu na $d = 1$. Na većim temperaturama se uočava značajno neslaganje.

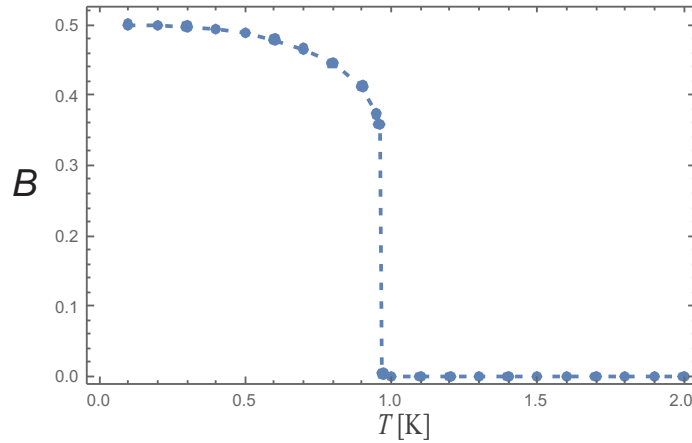
3.3 Trodimenzionalni slučaj

U slučaju kada je $d = 3$ broj najbližih suseda je $z = 6$. Geometrijski faktor ε_k se može zapisati kao:

$$\varepsilon_{k_x, k_y, k_z} = 1 - \frac{\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z}{3}. \quad (3.6)$$

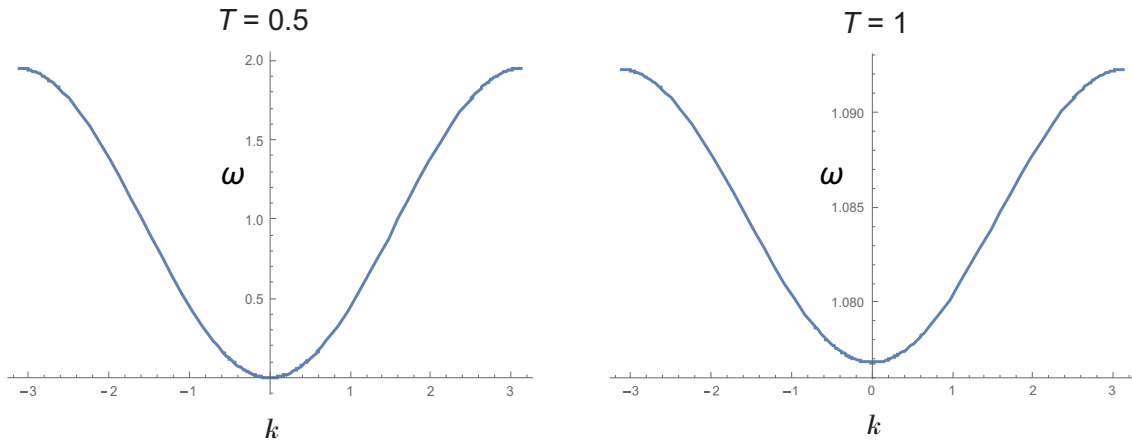
Pri $D = 3$ razlikuju se dve faze. To su uređena pri kojoj je $\Lambda = 0$ iz jednačine (), a ima ulogu hemijskog potencijala, odnosno $\lambda = JBz$ i neuređenu za koju je $\Lambda \neq 0$.

U uređenoj fazi je $B \neq 0$, dok je u neuređenoj $B = 0$.



Slika 3.7: Grafik zavisnosti $B = B(T)$ za dimenziju $d = 3$

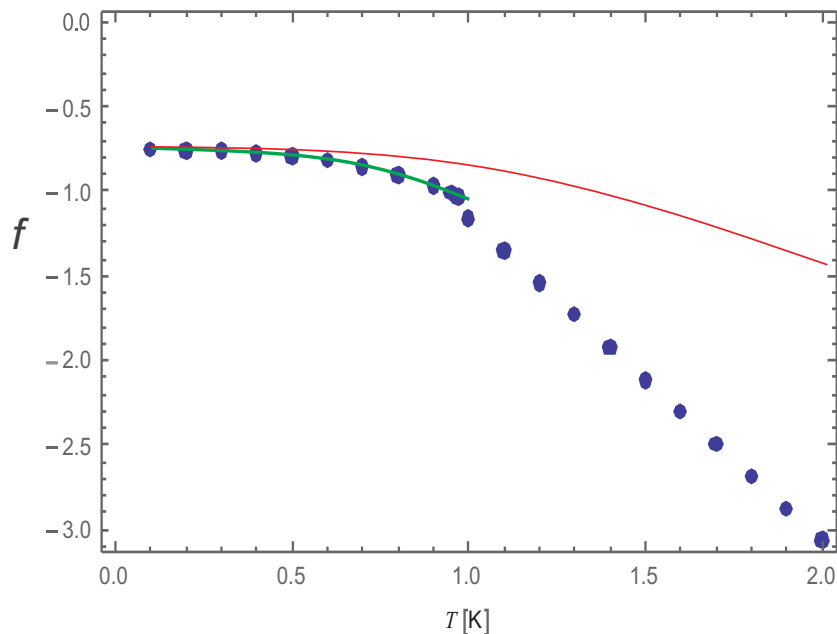
Uređena faza poseduje dugodometno uređenje, što se može zaključiti na osnovu grafika disperzije Sl. 3.8, jer se uočava egzistencija Goldstonovog moda pri $k_x, k_y, k_z = 0$.



Slika 3.8: Disperzioni spektar Švingerovih bozona za $d = 3$ na temperaturama $T = 0.5$ i $T = 1$

Neuređenu fazu karakteriše odsustvo Goldstonovog moda, jer disperzija poseduje gep, što se vidi na Sl. 3.8. Temperatura pri kojoj $B \rightarrow 0$ je temperatura pri kojoj prestaje uređena

faza, dešava se fazni prelaz i predstavlja kritičnu temperaturu i u ovom slučaju je dobijeno da ona iznosi $T_C = 0.98$, kao što je prikazano na Sl. 3.7. Ovaj rezultat se dobro slaže sa *QMC* kome je $T_C = 0.839(1)$ [19].



Slika 3.9: Zavisnost slobodne energije od temperature za $d = 3$. Na grafiku su upređeni rezultati dobijeni pomoću *LSW* (označeni crvenom linijom), *QMC* (označeni zelenom linijom) i *SBMFT* (označeni plavim tačkama)

Slobodna energija opada sa temperaturom što je prikazano na slici Sl.3.9. U poređenju sa *QMC* pokazuje naročito dobra slaganja u intervalu temperature od $T = 0.1$ do $T = 1$. Sa *LSW* pokazuje dobra slaganja u oblasti niskih temperatura.

Glava 4

Zaključak

Cilj ovog rada je bio da se analitički i numerički analizira dobro poznati Hajzenbergov feromagnet. Analiza je urađena u okviru Švingerove bozonske reprezentacije u aproksimaciji srednjeg polja. Kao što je navedeno prvi zadatak je bio bozonizacija modela, s obzirom da je originalni model prikazan pomoću spinskih operatora. Pre *SBMFT* analize iznesena je analiza u okviru teorije spinskih talasa, gde je korišćena Holstein - Primakoff-a transformacija, koja je dosta izučavana, pa je služila u obliku linearizovane teorije spinskih talasa kao drugi oblik reprezentacije sa kojom su poređeni rezultati.

Aproksimacija spiskih talasa je uvedena na elegantan način pomoću Lagrange- ovog množitelja λ koji je uveden da bi se obezbedilo važenje jednačine ograničenja Švingerovih bozona u odnosu na usrednjene vrednosti operatora na čvorovima. Lagrange- ov množitelj λ ima ulogu hemijskog potencijala. On pokazuje tendenciju rasta, što se ne krši sa ranije uvedenim hemijskim potencijalom μ , Glava 1, kada je uveden pojam Boze - Ajnštajnovе kondenzacije gde je pokazano da ima maksimalnu vrednost $\mu = 0$, i opada sa porastom temperature. Kada se formalno uporede relacije za broj popunjenosti stanja klasičnih bozona i bozona u okviru *SBMFT* vidi se da se oni odnose kao $\Lambda = -\mu$, pa se otklanjaju sve nesuglasice u vezi sa navedenim. Pri računanju izraza za slobodnu energiju trebalo se voditi računa o tome da je bilo neophodno pomnožiti deo izraza sa numeričkim faktorom 2, da bi se dobili ispravni rezultati, jer je reprezentacija uvedena na taj način da postoji duplo veći broj bozona. Minimizacijom slobodne energije u odnosu na λ i B su dobijeni izrazi za S i B koji su ključni za nastavak analize. Dobijanjem pomenutih izraza dalja analiza je obuhvatila posmatranje uređene oblasti, oblasti kada temperatura teži kritičnoj vrednosti i uređene oblasti. Pokazano je da za jedno- i dvodimenzionalni slučaj ne postoji mogućnost dugodometnog uređenja. To je pokazano time što disperzioni spektar pokazuje gep, a sa druge strane spin korelaciona funkcija eksponencijalno opada sa povećanjem rastojanja između spinova. U ovoj oblasti B opada od neke konačne vrednosti do nule. On pokazuje kratkodometno uređenje sistema, pa je u skladu sa gore navedenim zaključcima. Mogućnost egzistencije uređene faze se dešava u trodimenzionalnom slučaju. Ovom uređenju odgovara pojava Boze kondenzacije. Navedeno je da je model rotaciono invarijantan, pa da bi bio ispunjen uslov pojave uređenosti sistema, invarijantnost modela je morala biti narušena. Postoji više načina kako se ovo može izvesti, međutim, sami rezultati ne zavise od izbora narušenja simetrije što je i pokazano. U temperaturskom opsegu u kom egzistira uređena faza vrednost parametra Λ je $\Lambda = 0$ što je u skladu sa teorijom.

U trećoj glavi je data numerička analiza dobijenih rezultata. Numerika je urađena za sve tri dimenzije. Pokazano je da B opada sa temperaturom u sva tri slučaja, s tim što mu vrednost dostiže nultu na većim temperaturama u odnosu na porast dimenzionalnosti sistema. U jedno- i dvodimenzionalnom slučaju, disperzioni spektri pokazuju gep, na osnovu kog zaključujemo da se radi o neuređenom stanju. Parametar λ , odnosno Λ raste sa povećanjem temperature. U trodimenzionalnom slučaju B i λ pokazuju isto ponašanje kao u prethodnim slučajevima, s tim što je vrednost Λ za početne temperature $\Lambda = 0$. Na ovaj način je omogućeno određivanje kritične temperature T_C koja pokazuje dobro slaganje sa ranijim rezultatima dobijenim pomoću *QMC*. Disperzioni spektar pokazuje odsustvo gepa, što ukazuje na dugodometno uređenje. Na kraju je upoređena zavisnost slobodne energije od temperature za *SBMFT*, *LSW* i *QMC*. U sve tri dimenzije se pokazalo dobro slaganje pri niskim temperaturama, međutim, vidljivo je neslaganje na višim temperaturama. Treba istaći da je *SBMFT* pogodan za analizu neuređenog stanja, jer se analiza izvodi na relativno jednostavan način.

Literatura

- [1] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag, (1994)
- [2] W. Nolting, A. Ramakanth, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer-Verlag, (2009)
- [3] S. Sarker, C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy, Michael Ma, Phys. Rev. B, **40** 7, (1989)
- [4] M. Takahashi, Prog. Theor. Phys., **91** ,1, (1994)
- [5] P. Arovas, A. Auerbach, Phys. Rev. B, **38**, 1, (1988)
- [6] *Schwinger Boson Mean Field Theory of the Quantum Heisenberg Model* P. Arovas, A. Auerbach, u zborniku "Field Theories in Condensed Matter Physics", urednik Z. Tešanović, Addison - Wesley (1990)
- [7] P. Arovas, A. Auerbach, J. Appl. Phys. **67**, 9, (1990)
- [8] [http://www.pmaweb.caltech.edu/mcc/Ph127/a/Lecture 13.pdf](http://www.pmaweb.caltech.edu/mcc/Ph127/a/Lecture%2013.pdf)
- [9] [http://www.physics.udel.edu/glyde/PHYS813/Lectures/chapter 7.pdf](http://www.physics.udel.edu/glyde/PHYS813/Lectures/chapter%207.pdf), Bose systems
- [10] A. G. Izergin, *Introduction to the Bethe Ansatz Solvable Models* (1998)
- [11] P. W . Anderson, *Theory of Magnetic Exchange Interactions: Exchange in Insulators and Semiconductors*
- [12] <http://www-thphys.physics.ox.ac.uk/people/JohnChalker/qtcm/lecture-notes.pdf>
- [13] N.Mermin, H.Wagner, Phys. Rev. B **17**, 1133, (1996)
- [14] Sava Milošević, *Osnovi fenomenološke termodinamike* (Univerzitet u Beogradu, 1979)
- [15] H. E. Stanley, *Introduction to phase transition and critical phenomena*, (Clarendon press, Oxford, 1971)
- [16] Ivan Živić, *Statistička mehanika*, (Prirodno - matematički fakultet, Univerzitet u Kragujevcu, Kragujevac, 2006)
- [17] P. Garbaczewski, Phys. Repts. **36**, 65 (1978)
- [18] Grupa autora, *Jubilej Zvonka Marića*, Institut za fiziku, Beograd (1992)

- [19] S. Wessel, Phys. Rev. B **81**, 052405 (2010)
- [20] M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. **87**, 233 (1986)
- [21] <http://alps.comp-phys.org/>
- [22] S. Radošević, neobjavljeno.

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj:

RBR

Identifikacioni broj:

IBR

Tip dokumentacije:

Monografska dokumentacija

TD

Tip zapisa:

Tekstualni štampani materijal

TZ

Vrsta rada:

Master rad

VR

Autor:

Vujadin Mrkajić

AU

Mentor:

Dr Slobodan Radošević

MN

Naslov rada:

Analiza Hajzenbergovog feromagneta u Švingerovoj bozonskoj reprezentaciji

NR

Jezik publikacije:

srpski (latinica)

JP

Jezik izvoda:

srpski/engleski

JI

Zemlja publikovanja:

Republika Srbija

ZP

Uže geografsko područje:

Vojvodina

UGP

Godina:

2015.

GO

Izdavač:

Autorski reprint

IZ

Mesto i adresa:

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

MA

Fizički opis rada:

FO

Naučna oblast:

Fizika

NO

Naučna disciplina:

Teorijska fizika kondenzovane materije

ND

Predmetna odrednica/ ključne reči:

Hajzenbergov feromagnet, Švingerova bozonska reprezentacija

PO

UDK

Čuva se:

Biblioteka departmana za fiziku, PMF-a u Novom Sadu

ČU

Važna napomena:

Nema

VN

Izvod:

IZ

Datum prihvatanja teme od NN veća:

DP

Datum odbrane:

DO

Članovi komisije:

KO

Predsednik:

Dr Milan Pantić

član:

član:

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCE AND MATHEMATICS

KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document type:

Monograph publication

DT

Type of record:

Textual printed material

TR

Content code:

Final paper

CC

Author:

Vujadin Mrkajić

AU

Mentor/comentor:

Dr Slobodan Radošević

MN

Title:

Heisenberg ferromagnet and Schwinger boson representation

TI

Language of text:

Serbian (Latin)

LT

Language of abstract:

English

LA

Country of publication:

Republic of Serbia

CP

Locality of publication:

Vojvodina

LP

Publication year:

2015.

PY

Publisher:

Author's reprint

PU

Publication place:

Faculty of Science and Mathematics, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

PP

Physical description:

PD

Scientific field:

Physics

SF

Scientific discipline:

Solid state theory

SD

Subject/ Key words:

Heisenberg ferromagnet, Schwinger boson representation

SKW

UC

Holding data:

Library of Department of Physics, Trg Dositeja Obradovića 4

HD

Note:

none

N

Abstract:

AB

Accepted by the Scientific Board:

ASB

Defended on:

DE

Thesis defend board:

DB

President:

Dr Milan Pantić

Member:

Member: