DIPLOMSKI RAD

ZORAN D. KUZMANOVIĆ

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
UNIVERZITETA U NOVOM SADU

Zoran D. Kuzmanović

ANALIZA JEDNOG ANIZOTROPNOG FEROMAGNETIKA METODOM GREENOVIH FUNKCIJA

-diplomski rad-

NOVI SAD
1980

Zahvaljujem dr Mariju Škrinjaru na sugestiji o izboru teme i pomoći u toku rada.

Takodje se zahvaljujem dr Darku Kaporu na korisnim instrukcijama pri izradi rada.

Zoran D. Kuzmanović

SADRŽAJ:

1. U V O D

Magnetna svojstva se u većoj ili manjoj meri javljaju u svim materijalima. Prema ovim svojstvima čvrsta tela se mogu podeliti na slabe magnetike (dijamagnetici i paramagnetici) i jake magnetike (feromagnetici, antiferomagnetici i ferimagnetici). U ovom delu ćemo se zadržati na pitanjima vezanim za teoriju jakog magnetizma.

a. MAGNETNI MATERIJALI

Feromagnetici, antiferomagnetici i ferimagnetici usled odredjenih uslova unutrašnje uredjenosti materije, ispoljavaju veliki makroskopski magnetni moment čija je veličina reda $N\mu_B$ gde je N -broj atoma uzorka, a μ_B -Bohrov magneton.

Poznato je da se magnetizam kod čvrstih tela javlja ukoliko njihovu kristalnu rešetku sačinjavaju atomi sa nepopunjenim unutrašnjim ljuskama. Medjutim, nepopunjenost unutrašnjih ljusaka nije i jedini uslov pojave jakog magnetizma. Tako na primer, elementi prelazne grupe metala (nepopunjena 3d-podljuska) Sc, Ti i V su paramagnetici, Cr i Mn antiferomagnetici a Fe, Co i Ni feromagnetici.

Uopšte govoreći, magnetne osobine čvrstih tela zavise od raspodele gustine elektrona nepopunjenih unutrašnjih ljusaka kao i gustine provodnih elektrona u kristalnoj rešetki.

Ipak, savremena teorija nije u mogućnosti da formuliše neophodne i dovoljne uslove pojave jakog magnetizma na osnovu elektronske konfiguracije atoma koji grade kristalnu rešetku.

Ukupni magnetni moment uzorka grade kako sopstveni momenti atomskih elektrona tako i njihovi orbitalni momenti. Poznato je da je magnetno-mehanički odnos momenata slobodnog elektrona g (Landeov-faktor) u jedinicama $e/2mc$ 2 za sopstveni moment i 1 za orbitalni. Vrednosti dobijene merenjem Landeovog faktora g za magnetne materijale su veoma bliske vrednosti g slobodnog elektrona. Ovo ukazuje na to da magnetne momente jakih magnetnih materijala grade magnetni momenti elektrona nepopunjenih unutrašnjih ljusaka, dok orbitalni momenti tih elektrona nemaju značajnog uticaja. Pored ovoga može se pretpostaviti da je pojava makroskopskog magnetnog momenta posledica uredjenosti spinova elektrona nepopunjenih ljusaka atoma, a uzrok ove uredjenosti interakcija izmedju elektrona.

Ova pretpostavka koju je učinio Heisenberg (1928) postala je osnova savremene teorije jakog magnetizma.

Uredjenost spinova se javlja spontano ispod neke kritične temperature. Magnetni moment po jedinici zapremine , koji pri tome nastaje, naziva se spontana magnetizacija. Vrednost spontane magnetizacije zavisi od temperature i skoro da ne zavisi od veličine spoljašnjeg magnetnog polja. Najveća moguća teorijska vrednost magnetizacije naziva se magnetizacija zasićenja.

U prirodi nisu poznati jaki magnetni materijali u tečnom i gasovitom stanju što očigledno ukazuje na to da je pojava jakog magnetizma povezana na odredjeni način sa postojanjem kristalne rešetke. Uticaj kristalne strukture na magnetne osobine materije pokazuje se i time što pri odredjenoj orijentaciji kristala, magnetne karakteristike zavise od pravca u kome se one mere. Drugim rečima, magnetni materijali imaju magnetno-kristalografsku anizotropiju.

Relativna orijentacija spinova elektrona susednih atoma je posledica njihove interakcije. Opšta orijentacija spinova usled ove Coulombove interakcije je proizvoljna. Spin-spinska i spin-orbitalna interakcija u velikoj meri otklanjaju ovu degeneraciju po pravcima. Kao rezultat u kristalnoj rešetki se javlja nekoliko pravaca sa osobinom da je termodinamički potencijal sistema, čiji su spinovi (grupe spinova) usmereni u jednom od tih pravaca, minimalan. Ove pravce nazivamo ose lake magnetizacije. Tako se u proizvoljnom monokristalu u otsustvu spoljašnjeg magnetnog polja spinovi mogu orijentisati po jednoj od osa lake magnetizacije.

Magnetni momenti atoma u osnovi imaju spinsku prirodu. Na osnovu ovoga, moguće je opisati ponašanje elektrona nepopunjenih ljusaka atoma kao ponašanje sistema spinova koji se nalaze u čvorovima kristalne rešetke. Relativna orijentacija spinova je posledica takozvane interakcije izmene. Interakcija izmene predstavlja faktor zavisnosti energije sistema od prostorne simetrije talasne funkcije sistema i proporcionalna je veličini njegovog ukupnog spina. Ovo se može pokazati na primeru interakcije atoma vodonika. Pri paralelnoj orijentaciji spinova atoma oni se odbijaju, dok se pri antiparalelnoj orijentaciji privlače.

Kvantitativan račun je čak i sa ovako uprošćenim modelom realne materije prilično složen. U tom smislu, moguće je sa odredjenim stepenom tačnosti operatore spina elektrona zameniti klasičnim vektorima. Tada, u odnosu na magnetna svojstva, monokristal predstavlja sistem dipola koji su razmešteni u čvorovima kristalne rešetke i koji intereaguju energijom jednakoj energiji izmene. Ova, takozvana kvaziklasična šema daje prilično korektno kvalitativno i približno kvantitativno objašnjenje jakih magnetnih materijala.

Ako sa μ označimo magnetni moment atoma, a sa N broj atoma kristalne rešetke, magnetizacija zasićenja će biti:

$$M_o = \mu N \tag{1.1}$$

Merenja magnetizacije M uzoraka daju manje vrednocti od M_o. Ovo je posledica uticaja toplotnih oscilacija spinskih momenata atoma, magnetno-kristalografske anizotropije kao i uticaja konačnosti uzorka. Ukoliko uzorak stavimo u spoljašnje magnetno polje H njegova će magnetizacija rasti sa rastom polja. Veličina:

$$\chi(H) = \frac{\partial M}{\partial H} \tag{1.2}$$

naziva se magnetna susceptibilnost. Povećanjem polja spinovi počinju da skreću sa osa lake magnetizacije prema pravcu H i pri nekim vrednostima H svi će se orijentisati u pravcu polja. Dalje povećanje H sputava termodinamičke oscilacije spinskih momenata i u ovoj oblasti susceptibilnost opada sa rastom H. Magnetizacija zasićenja se postiže u graničnom slučaju kada $H \to \infty$ pri čemu susceptibilnost teži nuli.

Uredjenost spinova se narušava pri nekoj kritičnoj temperaturi i to pri Curievoj T_c za feromagnetike i Neelovoj T_N za antiferomagnetike. Očigledno je da se pri tim temperaturama izjednačavaju srednja termodinamička energija sa energijom interakcije izmene. Tipične vrednosti Curieve temperature za feromagnetike su reda $10^3\,{}^\circ K$, a energija $kT_c \sim 10^{-13}$ erga (k - Boltzmannova konstanta). Energija izmene J je reda e^2/a, gde je e naelektrisanje elektrona, a a konstanta rešetke. Za vrednosti $a = 2-3\ \mathring{A}$ dobijamo energiju izmene $J \sim 10^{-12} - 10^{-13}$ erga. Kao što se vidi, procene ove dve energije se slažu po redu veličine.

Energija magnetne anizotropije je uporediva sa energijom magnetne interakcije elektrona (spin-spinska i spin-orbitalna) i reda je veličine $\mu^2/a^3 \sim 10^{-16} - 10^{-17}$ erga. Ukoliko jak magnetik stavimo u spoljašnje magnetno polje H, ono će potpuno eliminisati anizotropiju kada je $H \gtrsim \mu/a^3$ odnosno $H \gtrsim 10^3 - 10^4$ ersteda, što se stvarno i opaža u eksperimentu. Magnetno-kristalografska anizotropija u mnogome zavisi od temperature.

Iz prethodnih procena može se primetiti da nije moguće sa klasične tačke gledišta opisati jake magnetike kao sistem magnetnih momenata razmeštenih u čvorovima rešetke sa čisto dipolnim interakcijama. Naime, energija dipolne interakcije je reda $\mu^2/a^2 \sim 10^{-16} - 10^{-17}$ erga, a odgovarajuće Curieve temperature $1 - 10^{-1}\ {}^\circ K$. Stoga u kvaziklasičnoj šemi prećutno stoji da dipoli intereaguju energijom jednakom energiji interakcije izmene.

U daljem tekstu prikazaćemo, koristeći se kvaziklasičnom aproksimacijom, modele feromagnetika, antiferomagnetika i ferimagnetika. Pri tome ćemo radi jednostavnosti zanemariti uticaj magnetne anizotropije.

Feromagnetici. Tipični predstavnici su prelazni metali: Fe, Co i Ni. Pri temperaturama manjim od Curieve svi spinovi u monokristalu su orijentisani paralelno pri čemu se javlja veliki spontani magnetni moment. U prisustvu spoljašnjeg magnetnog polja $\vec{H}$ spinovi, a takodje i rezultujući moment se orijentišu u pravcu polja.

U otsustvu spoljašnjeg polja, pravac rezultujućeg magnetnog momenta $\vec{M}$ nije odredjen. Medjutim, kako uvek postoji uticaj slabe anizotropije vektor $\vec{M}$ će se usmeriti u pravcu jedne od osa slabe magnetizacije.

Povećanjem temperature spontana magnetizacija se smanjuje i pri Curievoj temperaturi T_c i u otsustvu spoljašnjeg polja, isčezava. U Curievoj tački imamo fazni prelaz drugog reda. Iznad Curieve temperature ($T \gg T_c$) feromagnetik se ponaša kao klasični paramagnetik. U okolini Curieve temperature ($T \lessdot T_c$) zavisnost spontane magnetizacije od temperature je:

$$M_{(T)} \cong const. \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}} \tag{1.3}$$

a kada $T \to 0$ ova zavisnost ima stepeni karakter:

$$M_{(T)} = M_0 (1 - A_1 T^{\frac{3}{2}} - A_2 T^{\frac{5}{2}} - \dots) \tag{1.4}$$

gde su A_i neke konstante, a M_0 magnetizacija zasićenja.

Antiferomagnetici. Njihovi predstavnici u kiseline i soli prelaznih metala: FeO, CoO, $NiSO_4$, CoF_2, $RbMnF_3$ itd. Kristali antiferomagnetika se mogu prikazati kao skup dve ili nekoliko feromagnetnih podrešetaka postavljenih jedna na drugu tako da im je rezultujući magnetni moment jednak nuli pri temperaturama nižim od Neelove temperature T_N.

U otsustvu spoljašnjeg polja $\vec{H}$ ukupni magnetni moment feromagnetnih podrešetaka jednak je nulu. Medjutim, delujući nekim kritičnim spoljašnjim poljem dolazi do rezultujuće magnetizacije koja linearno raste povećanjem spoljašnjeg polja $\vec{H}$ sve do nekog kritičnog pri kome nastupa magnetizacija zasićenja. Pri temperaturama višim od Neelove T_N antiferomagnetik se ponaša kao paramagnetik. Pri temperaturi $T = T_N$ imamo fazni prelaz drugog reda.

Ferimagnetici. Njihovi tipični predstavnici su kompleksne soli prelaznih metala: $MnO \cdot Fe_2O_3$, $FeO \cdot Fe_2O_3$, $CoO \cdot Fe_2O_3$ itd. Kristali ferimagnetika se sastoje iz nekoliko magnetnih podrešetaka čiji se magnetni momenti ne kompenzuju u potpunosti. Pri raştu spoljašnjeg magnetnog polja H od nekog kritičnog, magnetni moment raste linearno sa rastom polja sve do drugog kritičnog pri kome se postiže magnetizacija zasićenja.

Pored predhodnih jakih magnetnih materijala možemo pomenuti i antiferomagnetike sa slabim feromagnetizmom kao i magnetne materijale sa spiralnim strukturama. Prve možemo posmatrati kao antiferomagnetike čiji magnetni momenti podrešetaka nisu strogo antiparalelni zbog uticaja magnetne anizotropije. Kod drugih se raspored spinova u kristalnoj rešetki karakteriše zavrtanjskom simetrijom, to jest, komponente spinskih vektora se periodično menjaju pri različitim položajima u odnosu na neki odredjeni kristalografski pravac.

b. HEISENBERGOV FEROMAGNETIK

Za opisivanje svojstava i veličina koje karakterišu feromagnetik neophodno je poznavati opšti oblik Hamiltonijana. Uzimajući u obzir pretpostavke koje su učinjene u prethodnoj analizi magnetnih materijala, uvodi se Heisenbergov model kao najprostiji oblik koji opisuje feromagnetne osobine izotropnog kristala. Hamiltonijan ovog modela eksplicitno uračunava samo interakcije odgovorne za orijentaciju spinova, zanemarujući spin-spinsku i spin-orbitalnu interakciju u poredjenju sa interakcijom izmene. U opštem slučaju, ako se kristal nalazi u spoljašnjem magnetnom polju $\vec{H}$ usmerenom u pravcu z-ose, Heisenbergov takozvani spinski Hamiltonijan kristala se može napisati kao:

$$\mathcal{H} = -g\mu_B H \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n},\vec{m}} J_{\vec{n},\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}} \vec{S}_{\vec{m}} \tag{1.5}$$

gde je g-Landeov faktor, μ_B-Bohrov magneton, $\vec{n}$, $\vec{m}$-vektori čvorovi kristalne rešetke, S-operator spina i $J_{\vec{n},\vec{m}}$-integral izmene koji se odnosi na interakciju $\vec{n}$-tog i $\vec{m}$-tog atoma i ima dimenzije energije. Osa z je uzeta za osu kvantizacije.

Osnovno stanje feromagnetika definiše se relacijom:

$$\sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z |0\rangle = NS|0\rangle \tag{1.6}$$

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

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

$$S_{\vec{n}}^{\pm} = S_{\vec{n}}^x \pm i S_{\vec{n}}^y \quad \text{i} \quad S_{\vec{n}}^z$$

zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[S_{\vec{n}}^+, S_{\vec{m}}^-] = 2S_{\vec{n}}^z \delta_{\vec{n},\vec{m}}; \quad [S_{\vec{n}}^{\pm}, S_{\vec{m}}^z] = \mp S_{\vec{n}}^{\pm} \delta_{\vec{n},\vec{m}}; \tag{1.7}$$

$$\{S_{\vec{n}}^+, S_{\vec{n}}^-\} = 2S(S+1) - 2(S_{\vec{n}}^z)^2; \quad (S_{\vec{n}}^{\pm})^{2S+1} = 0 ;$$

odakle je očigledno da oni nemaju ni bozonsku ni fermionsku kinematiku. Osim toga, često je neophodno pri kvantnomehaničkom rešavanju problema čvrstih tela izračunati fizičke veličine u prostoru recipročne rešetke (impulsnom prostoru) što zahteva upotrebu Fourier-transformacija. Medjutim, Fourier-transformacije za spinske operatore nisu kanonične, to jest, ne održavaju komutacione relacije (1.7). Drugim rečima, spinski operatori $S^{\pm}_{\vec{n}}$, $S^{z}_{\vec{n}}$ nemaju istu kinematiku kao njihovi Fourier-transformandi $S^{\pm}_{\vec{k}}$, $S^{z}_{\vec{k}}$.

Prvi pokušaj pri rešavanju ovog problema učinili su Holstein i Primakoff. Oni su spinske operatore pretstavili preko Bose-operatora na sledeći način:

$$S^{+}_{\vec{n}} = B^{-}_{\vec{n}}\sqrt{2S}\,; \quad S^{-}_{\vec{n}} = B^{+}_{\vec{n}}\sqrt{2S}\,; \quad S^{z}_{\vec{n}} = S - B^{+}_{\vec{n}}B^{-}_{\vec{n}}\,; \tag{1.8}$$

gde su $B^{+}_{\vec{n}}$ i $B^{-}_{\vec{n}}$ operatori kreacije odnosno anihilacije bozona. Na ovaj način se umesto Heisenbergovog feromagnetika analizira ekvivalentni bozonski sistem koji daje sledeći harmonijski zakon disperzije za magnone:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = g\mu_B H + S(J_0 - J_{\vec{k}})$$

gde je (1.9)

$$J_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} J_{0\vec{n}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}}$$

Pri niskim temperaturama ($T \to 0^{\circ}K$) i za slučaj kada je spoljašnje magnetno polje $|\vec{H}|=0$, koristeći zakon disperzije (1.9) razvijen po talasnim vektorima $\vec{k}$ zaključno sa kvadratnim članovima, za magnetizaciju:

$$\sigma = \frac{\langle S^{z}_{\vec{n}} \rangle}{S} \tag{1.10}$$

se dobija poznati Blochov zakon "tri polovine":

$$\sigma = 1 - \frac{1}{S}\left(\frac{kT}{\frac{2}{3}\pi S J_0}\right)^{\frac{3}{2}} \zeta(3/2) \tag{1.11}$$

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

Dobijeni Blochov zakon (1.11) je kasnije pretrpeo mnoge korekcije. Fundamentalnu teoriju ponašanja magnetizacije Heisenbergovog feromagnetika na niskim temperaturama postavio je Dyson. On je pokazao da Blochova formula za magnetizaciju ima korekcije dva tipa: članove proporcionalne $T^{\frac{5}{2}}$ i $T^{\frac{7}{2}}$ koji potiču od viših stepena talasnog vektora $\vec{k}$ razvoja zakona disperzije (1.9) i člana proporcionalnog T^4 koji potiče od anharmonijskih magnonskih efekata. Koristeći se boljom aproksimacijom spinskih operatora bozonskim, Dyson je dobio sledeću formulu za magnetizaciju pri niskim temperaturama:

$$\sigma = \sigma_{BL.} + \sigma_{ANH.} \tag{1.12}$$

gde su:

$$\sigma_{BL.} = 1 - \frac{1}{S}\left[\zeta(3/2)\,\tau^{\frac{3}{2}} + \frac{3}{4}\pi\,\zeta(5/2)\,\tau^{\frac{5}{2}} + \frac{33}{32}\pi^2\zeta(7/2)\,\tau^{\frac{7}{2}} + \cdots\right]$$

$$\sigma_{ANH.} = -\frac{1}{S}\,6\pi\,\zeta(3/2)\,\zeta(5/2)\,\tau^4; \qquad \tau = \frac{kT}{\frac{2}{3}\pi S J_0}$$

Što se tiče temperatura bliskih Curievoj temperaturi ($T \leqslant T_c^{\circ}$) u kojoj feromagnetik ima fazni prelaz druge vrste, u slučaju kada je $H=0$ i $S=\frac{1}{2}$ magnetizacija poprima sledeći oblik:

$$\sigma \cong \sqrt{3\tau_c^{\circ}\left(1 - \frac{\tau}{\tau_c^{\circ}}\right)} \tag{1.13}$$

gde su:

$$\tau = \frac{4kT}{J_0}; \qquad \tau_c^0 = \frac{1}{C_0};$$

$$C_0 = \frac{V}{N(2\pi)^3}\int \frac{d^3\vec{k}}{E_{\vec{k}}}; \quad E_{\vec{k}} = \frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}}{J_0}$$

V-zapremina kristala i k-Boltzmannova konstanta. Iz (1.13) je očigledno da se temperatura

$$T_c^0 = \frac{J_0}{4kC_0} \tag{1.14}$$

podudara sa Curievom pri kojoj magnetizacija iščezava. Korišćenjem relacije (1.14) moguće je teorijski proceniti Curievu temperaturu imajući u vidu da konstanta C_0 zavisi od geometrije kristalne rešetke.

U prethodnoj analizi zanemaren je uticaj magnetne anizotropije što se kod odredjenog broja realnih feromagnetnih materijala može učiniti. Medjutim, u prirodi postoje i feromagnetni materijali kod kojih magnetno-kristalografska anizotropija ima veliki uticaj na njihove magnetne osobine. Drugim rečima, magnetne karakteristike anizotropnog feromagnetika zavise od veličine magnetne anizotropije.

Problemima vezanim za anizotropni feromagnetik je i posvećen ovaj diplomski rad. Na osnovu analize magnetne stabilnosti anizotropnog sistema čiju strukturu čine primitivne kubne feromagnetne rešetke sa interakcijama izmedju najbližih suseda koja je data u radu [3] primenom metode Greenovih funkcija proučavano je ponašanje magnetizacije pri konačnim temperaturama ($T \to 0°K$ i $T \lessapprox T_c^0$). Dobijeni rezultati su poredjeni sa rezultatima Heisenbergovog izotropnog feromagnetika radi procene uticaja magnetne anizotropije na magnetizaciju.

2. ANIZOTROPNI FEROMAGNETIK I USLOVI STABILNOSTI

U ovom delu ćemo prikazati ukratko analizu anizotropnog feromagnetika koja je detaljno uradjena u radu [3].

Posmatra se kristalna struktura koju grade magnetni joni sa neparnim brojem elektrona koji formiraju primitivnu kubnu feromagnetnu rešetku. Interakcija izmene ovih magnetnih jona u osnovnom stanju je u opštem slučaju anizotropna. S druge strane, ova interakcija brzo opada sa rastojanjem, pa je moguće zadržati se na interakcijama izmene izmedju najbližih suseda. Razmatra se slučaj spina $S=\frac{1}{2}$ za koji je magnetni moment magnetnih jona u njihovom osnovnom stanju $\vec{M} = g\mu_B\vec{S}$.

Ako se pretpostavi da je lanac koji ujedinjuje dva susedna jona invarijantan u odnosu na grupu simetrije 4mm, odnosno osu rotacije četvrtog reda sa dvema normalnim ogledalskim ravnima, oblik Hamiltonijana interakcije će biti veoma jednostavan. Za par (i , j) jona čiji je lanac paralelan sa z-osom interakcija će biti sledećeg oblika:

$$\mathcal{H}_{ij} = J_{\parallel} S_i^z S_j^z + J_{\perp}(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \tag{2.1}$$

Odgovarajući oblici $\mathcal{H}_{ij}$ za lance paralelne sa x, odnosno y-osom dobijaju se cikličnom permutacijom x,y i z.

Interakcija (2.1) se smatra najopštijim oblikom interakcije dva slabo sparena spina čiji su lanci invarijantni u odnosu na osu rotacije četvrtog reda kao i dve normalne ogledalske ravni, uključujući prema tome magnetne dipolne interakcije kao i električne multipolne interakcije izmedju najbližih suseda. Ovo je uslovljeno činjenicom da se ponašanjem spina $S=\frac{1}{2}$ zabranjuje bilo koje sparivanje koje nije bilinearno s obzirom na komponente spina.

Ako se uvede smena:

$$J = -J_{\perp} \qquad J' = J_{\parallel} - J_{\perp} \tag{2.2}$$

izraz (2.1) se može pogodnije napisati kao:

$$\mathcal{H}_{ij} = -J\vec{S}_i\vec{S}_j + J'S_i^z S_j^z \tag{2.3}$$

U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja ukupni Hamiltonijan anizotropnog feromagnetika će biti:

$$\mathcal{H}_e = -J\sum_{i<j}\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j + J'\sum_i\sum_{\tau} S_i^{\tau} S_{i+\varepsilon_\tau}^{\tau} \tag{2.4}$$

gde se sumiranje vrši po najbližim susedima, pri čemu i uzima sve vrednosti ukupnog broja ekvivalentnih jona N, a τ vrednosti x,y,z; primer: spin $i+\varepsilon_\tau$ je sused spina i koji se nalazi u pozitivnom smeru x-ose na rastojanju a (a je konstanta rešetke). Može se primetiti da Hamiltonijan (2.4) u otsustvu anizotropije ($J'=0$ ili $J_{\parallel}=J_{\perp}$) postaje običan Heisenbergov Hamiltonijan primitivne kubne rešetke za koju se javlja feromagnetizam pri $J>0$.

U skladu sa izrazom (2.4), u opštem slučaju kada je $J'\neq 0$ u prostoru ne postoje privilegovani pravci što sledi iz invarijantnosti koordinatnih osa x,y i z celokupnog kristala. Medjutim, analizirajući uslove magnetne stabilnosti kao i energiju osnovnog stanja anizotropnog feromagnetika, pokazuje se da se za kubnu simetriju ovog problema kada $|\vec{H}| \to 0$ javljaju ose lake magnetizacije koje se poklapaju sa osama rotacije četvrtog reda elementarne ćelije (kocke).

U tom smislu, da bi magnetizacija bila paralelna sa nekim privilegovanim pravcem, uvodi se slabo spoljašnje magnetno polje $\vec{H}$ čiji su pravci u odnosu na ose rotacije četvrtog reda x, y i z primitivne kubne rešetke dati kosinusima uglova koji oni grade (l,m,n). Hamiltonijan anizotropnog feromagnetika će tada biti:

$$\mathcal{H} = -J\sum_{i<j}\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j + J'\sum_{i}\sum_{\alpha}S_i^{\alpha}S_{i+\varepsilon_\alpha}^{\alpha} - g\mu_B\sum_{i}\vec{H}\cdot\vec{S}_i \qquad (2.5)$$

Da bi se odredio spektar spinskih talasa uvodi se sistem ortogonalnih osa OXYZ čija je osa OZ paralelna sa pravcem spoljašnjeg magnetnog polja. Dalje, koristeći linearnu Holstein-Primakoffovu aproksimaciju spinskih operatora Bose-operatorima kreacije i anihilacije magnona (1.8) i prelazeći Fourier-transformacijama u impulsni prostor, dobija se sledeći kvadratni Hamiltonijan s obzirom na Bose-operatore:

$$\mathcal{H} = E_o + \sum_{\vec{k}}\omega_{\vec{k}}B^+_{\vec{k}}B_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}}B_{\vec{k}}B_{-\vec{k}} + \sum_{\vec{k}}\gamma^*_{\vec{k}}B^+_{\vec{k}}B^+_{-\vec{k}} \qquad (2.6)$$

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

$$E_o = (2J_\perp + J_\parallel)NS^2 - g\mu_B HNS \qquad (2.7)$$

klasična vrednost energije osnovnog stanja u kojem su svi spinovi usmereni u pravcu spoljašnjeg magnetnog polja. Ovako dobijena E_o poklapa se sa energijom osnovnog stanja izotropnog feromagnetika.

Hamiltonijan (2.6) se dijagonalizuje linearnom "uv" transformacijom pri čemu se dobija da je:

$$\mathcal{H} = E_0' + \sum_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}} \beta^+_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}} \tag{2.8}$$

gde su:

$$E_0' = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (\lambda_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}}) \tag{2.9}$$

$$\lambda_{\vec{k}} = \lambda_{-\vec{k}} = \pm \sqrt{\omega^2_{\vec{k}} - (\gamma_{\vec{k}} + \gamma_{-\vec{k}})^2} \tag{2.10}$$

$\beta^+_{\vec{k}}, \beta_{\vec{k}}$-operatori koji zadovoljavaju obične komutacione relacije za Bose-operatore i $\lambda_{\vec{k}}$ energija spinskih talasa. Energija E_0' data izrazom (2.9) je energija osnovnog stanja anizotropnog feromagnetika i ona uključuje u sebe klasičnu energiju osnovnog stanja izotropnog feromagnetika E_0 kao i kvantno-mehaničku nultu energiju.

Za analizu magnetne stabilnosti anizotropnog feromagnetika potrebno je ispitati uslove koje treba da zadovolje $J_{\parallel}$ i $J_{\perp}$ sa pravcem magnetizacije duž $\vec{H}$ pri čemu u graničnom slučaju $|\vec{H}| \to 0$.

Pre svega, energija spinskih talasa $\lambda_{\vec{k}}$ mora biti realna veličina. Zbog toga, koristeći izraz (2.10) imamo za svako $\vec{k}$ da je:

$$|\omega_{\vec{k}}| > |\gamma_{\vec{k}} + \gamma_{-\vec{k}}| \tag{2.11}$$

S druge strane, magnetna stabilnost feromagnetnog stanja se može obezbediti jedino ako se totalna energija sistema ne smanjuje usled eksitacije spinskih talasa. Tako za svako $\vec{k}$ moramo imati da je $\lambda_{\vec{k}} > 0$. Znajući da su $\omega_{\vec{k}}$ i $\lambda_{\vec{k}}$ istog znaka sledi da je:

$$\omega_{\vec{k}} > 0 \tag{2.12}$$

Dobijene nejednakosti (2.11) i (2.12) predstavljaju kriterijume za magnetnu stabilnost. Diskusijom ovih kriterijuma, koristeći se izrazima za $\omega_{\vec{k}}$, $\gamma_{\vec{k}}$ i $\lambda_{\vec{k}}$ datih preko $J_{\parallel}$ i $J_{\perp}$, dobijaju se sledeći uslovi:

$$J_{\perp} < 0 \qquad J_{\parallel} < 0 \tag{2.13}$$

Oba ova uslova (2.13) moraju biti zadovoljena da bi postojala stabilna feromagnetna konfiguracija. Ukoliko ovi uslovi nisu ispunjeni, za sve ostale kombinacije vrednosti $J_{\parallel}$ i $J_{\perp}$ ($J_{\parallel}>0, J_{\perp}>0$; $J_{\parallel}>0, J_{\perp}<0$; $J_{\parallel}<0, J_{\perp}>0$) javiće se antiferomagnetne konfiguracije.

Na kraju, analizirajući vrednosti energije osnovnog stanja anizotropnog feromagnetika (2.9) na temperaturama $0°K$ kada $|\vec{H}| \to 0$, može se videti da su uslovi magnetne stabilnosti (2.13) zadovoljeni za sva tri osnovna pravca elementarne ćelije i da najniža vrednost E_0' odgovara uvek pravcu [001]. Ovo znači da su ose lake magnetizacije upravo ose rotacije četvrtog reda elementarne ćelije: x,y,z.

3. GREENOVE FUNKCIJE ANIZOTROPNOG FEROMAGNETIKA

Imajući u vidu da najniža vrednost energije osnovnog stanja anizotropnog feromagnetika E_0' odgovara pravcu ose lake magnetizacije $[001]$, u slučaju kada $|\vec{H}| \to 0$, svi spinovi će biti orijentisani u tom pravcu. Magnetizacija će tada, za spin $S = \frac{1}{2}$ imati sledeći oblik:

$$\sigma_{1/2} = 2\langle S^z_{\vec{n}} \rangle \tag{3.1}$$

Da bi odredili srednju vrednost komponente spina u pravcu z-ose a samim tim i magnetizaciju anizotropnog feromagnetika, koristićemo se metodom Greenovih funkcija.

U tom smislu, ako dvovremensku, temperatursku, komutatorsku Greenovu funkciju:

$$\langle\langle S^\alpha_{(t)} | S^\beta_{(t')} \rangle\rangle = \theta(t-t') \langle [S^\alpha_{(t)}, S^\beta_{(t')}] \rangle \tag{3.2}$$

gde su:

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{za } t > t' \\ 0 & \text{za } t < t' \end{cases} \quad \text{i} \quad (\alpha, \beta = x, y, z)$$

diferenciramo po t i dobijeni izraz transformišemo Fourier-transformom po vremenu, dobićemo sledeću jednačinu za Greenove funkcije:

$$E \langle\langle S^\alpha_{\vec{m}} | S^\beta_{\vec{n}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \langle [S^\alpha_{\vec{m}}, S^\beta_{\vec{n}}] \rangle + \langle\langle [S^\alpha_{\vec{m}}, \mathcal{H}] | S^\beta_{\vec{n}} \rangle\rangle \tag{3.3}$$

U prethodnom izrazu $S^\alpha_{\vec{m}}, S^\beta_{\vec{n}}$ pretstavljaju komponente spinskih operatora, $\mathcal{H}$ je Hamiltonijan sistema, a parametar E energija elementarnih eksitacija.

Hamiltonijan anizotropnog feromagnetika (2.5) koji sadrži interakcije izmedju najbližih suseda, može se eksplicitno izraziti preko spinskih komponenata kao:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}J\sum_{i,j}\sum_{\kappa} S_i^{\kappa}S_j^{\kappa} + J'\sum_{i}\sum_{\kappa} S_i^{\kappa}S_{i+\varepsilon_\kappa}^{\kappa} - g\mu_B H\sum_{i}\sum_{\kappa} e_\kappa S_i^{\kappa} \quad (3.4)$$

gde su e_κ (κ = x,y,z) kosinusi pravaca $\vec{H}$ u odnosu na ose rotacije četvrtog reda elementarne ćelije. Komponente spinskih operatora za spin $S=\frac{1}{2}$ zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$\left.\begin{aligned} &[S_{\vec{m}}^{\alpha}, S_{\vec{n}}^{\beta}] = i\,\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{\vec{n}}^{\gamma}\,\delta_{\vec{n},\vec{m}} \\ &(S_{\vec{n}}^{x})^2 = (S_{\vec{n}}^{y})^2 = (S_{\vec{n}}^{z})^2 = \frac{1}{4} \end{aligned}\right\} \quad (3.5)$$

gde je:

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 1 & \text{za cikličnu permutaciju x,y,z} \\ -1 & \text{za permutaciju x,y,z koja nije ciklična} \end{cases}$$

Na osnovu (3.3), (3.4) i (3.5) dobijamo sledeću jednačinu:

$$E\langle\langle S_{\vec{m}}^{\alpha}|S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle = -\frac{1}{2\pi}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\langle S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\delta_{\vec{n},\vec{m}} - ig\mu_B H\sum_{\kappa}\varepsilon_{\alpha\kappa\gamma}e_\kappa\langle\langle S_{\vec{m}}^{\gamma}|S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle + \quad (3.6)$$
$$- iJ\sum_{i}\sum_{\kappa}\varepsilon_{\alpha\kappa\gamma}\langle\langle S_i^{\kappa}S_{\vec{m}}^{\gamma}|S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle + 2iJ'\sum_{\kappa}\varepsilon_{\alpha\kappa\gamma}\langle\langle S_{\vec{m}+\varepsilon_\kappa}^{\kappa}S_{\vec{m}}^{\gamma}|S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle$$

Najjednostavniji način za rešavanje prethodne jednačine je ako uvedemo srednju devijaciju spina definisanu kao:

$$\delta S_{\vec{n}}^{\alpha} = S_{\vec{n}}^{\alpha} - \langle S_{\vec{n}}^{\alpha}\rangle \qquad (\alpha = x,y,z) \quad (3.7)$$

pri čemu ćemo za Greenove funkcije koje figurišu u jednačini (3.6) dobiti sledeće relacije:

$$G_{\vec{m}\vec{n}}^{\alpha\beta} \equiv \langle\langle S_{\vec{m}}^{\alpha}|S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle = \langle\langle \delta S_{\vec{m}}^{\alpha}|\delta S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle \quad (3.8)$$

$$\langle\langle S_i^{\kappa}S_{\vec{m}}^{\gamma}|S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle = \langle S_i^{\kappa}\rangle\langle\langle\delta S_{\vec{m}}^{\gamma}|\delta S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle + \langle S_{\vec{m}}^{\gamma}\rangle\langle\langle\delta S_i^{\kappa}|\delta S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle +$$
$$+ \langle\langle\delta S_i^{\kappa}\delta S_{\vec{m}}^{\gamma}|\delta S_{\vec{n}}^{\beta}\rangle\rangle \quad (3.9)$$

Imajući u vidu relacije (3.8), (3.9) kao i (3.6) sledi da je:

$$
\begin{aligned}
&E G^{\alpha\beta}_{\vec m \vec n} + i g \mu_B H \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} e_\pi G^{\gamma\beta}_{\vec m \vec n} + iJ \sum_{\vec i} \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} \langle S^{\pi}_{\vec i} \rangle G^{\gamma\beta}_{\vec m \vec n} \\
&+ iJ \langle S^{\gamma}_{\vec m} \rangle \sum_{\vec i} \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} G^{\pi\beta}_{\vec i \vec n} - 2iJ' \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} \langle S^{\pi}_{\vec m + \varepsilon_\pi} \rangle G^{\gamma\beta}_{\vec m \vec n} + \\
&- 2iJ' \langle S^{\gamma}_{\vec m} \rangle \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} G^{\pi\beta}_{\vec m + \varepsilon_\pi, \vec n} = -\frac{1}{2\pi} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S^{\gamma}_{\vec m} \rangle \delta_{\vec n, \vec m} + \\
&- J \sum_{\vec i} \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} \langle\langle \delta S^{\pi}_{\vec i} \delta S^{\gamma}_{\vec m} | \delta S^{\beta}_{\vec n} \rangle\rangle + 2iJ' \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} \langle\langle \delta S^{\pi}_{\vec m + \varepsilon_\pi} \delta S^{\gamma}_{\vec m} | \delta S^{\beta}_{\vec n} \rangle\rangle
\end{aligned}
\tag{3.10}
$$

Ako sada aproksimiramo više Greenove funkcije nulom, rešavanje prethodne jednačine će se svesti na rešavanje matrične jednačine:

$$
\sum_{\vec i, \gamma} T^{\alpha\gamma}_{\vec m \vec i} G^{\gamma\beta}_{\vec i \vec n} = C^{\alpha\beta}_{\vec n \vec m} \tag{3.11}
$$

gde su matrični elementi:

$$
\begin{aligned}
T^{\alpha\gamma}_{\vec m \vec i} = &\Big(E\delta_{\alpha,\gamma} + i g \mu_B H \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} e_\pi + iJ_0 \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} \langle S^{\pi}_{\vec m} \rangle + \\
&- 2iJ' \sum_{\pi} \varepsilon_{\alpha\pi\gamma} \langle S^{\pi}_{\vec m} \rangle \Big) \delta_{\vec i, \vec m} + \sum_{\rho} iJ \langle S^{\rho}_{\vec m} \rangle \varepsilon_{\alpha\gamma\rho} + \\
&- \sum_{\rho} iJ' \langle S^{\rho}_{\vec m} \rangle \varepsilon_{\alpha\gamma\rho} \left(\delta_{\vec i, \vec m + \varepsilon_\gamma} + \delta_{\vec i, \vec m - \varepsilon_\gamma} \right)
\end{aligned}
\tag{3.12}
$$

$$
C^{\alpha\beta}_{\vec n \vec m} = -\frac{1}{2\pi} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S^{\gamma}_{\vec m} \rangle \delta_{\vec n, \vec m} \tag{3.13}
$$

Zbog invarijantnosti kristalne rešetke anizotropnog feromagnetika u odnosu na grupu translacija, Greenova funkcija (3.8) će zavisiti samo od razlike koordinata čvorova rešetke. Zbog toga se matrična jednačina (3.11) može lako rešiti ako predjemo u impulsni prostor koristeći sledeće Fourier-transformacije:

$$\left.\begin{aligned} T^{\alpha\gamma}_{\vec{m}i} &= \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} T^{\alpha\gamma}_{(\vec{q},E)}\, e^{i\vec{q}(\vec{m}-i)} \\ G^{\gamma\beta}_{i\vec{n}} &= \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} G^{\gamma\beta}_{(\vec{q},E)}\, e^{i\vec{q}(i-\vec{n})} \\ C^{\alpha\beta}_{\vec{n}\vec{m}} &= \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} C^{\alpha\beta}_{(\vec{q})}\, e^{i\vec{q}(\vec{m}-\vec{n})} \end{aligned}\right\} \tag{3.14}$$

Ovde N pretstavlja ukupan broj čvorova, a $\vec{q}$ talasni vektor. Za matrične elemente (3.12) dobijamo:

$$\begin{aligned} T^{\alpha\gamma}_{(\vec{q},E)} = {} & E\delta_{\alpha,\gamma} + ig\mu_B H\sum_{r}\varepsilon_{\alpha r\gamma}e_r + iJ_0\sum_{r}\varepsilon_{\alpha r\gamma}\langle S^r\rangle + \\ & + iJ_{\vec{q}}\,\varepsilon_{\alpha\gamma\rho}\langle S^\rho\rangle - iJ'_0\sum_{r}\varepsilon_{\alpha r\gamma}\langle S^r\rangle + iJ'_{q_\gamma}\varepsilon_{\alpha\gamma\rho}\langle S^\rho\rangle \end{aligned} \tag{3.15}$$

gde su:

$$J_0 = 6J, \quad J_{\vec{q}} = J\sum_{\vec{m}-i} e^{-i\vec{q}(\vec{m}-i)},$$
$$J'_0 = 2J', \quad J'_{q_\gamma} = 2J'\cos q_\gamma a,$$

a $\vec{m}, i$ vektori čvorova najbližih suseda koji se nalaze na rastojanju a. U slučaju kada je spoljašnje magnetno polje $\vec{H}$ paralelno sa pravcem z-ose ($He_x = He_y = 0$ i $He_z = H$), matrica prethodnih matričnih elemenata (3.15) se može napisati kao:

$$\hat{T}_{(\vec{q},E)} = \begin{pmatrix} E & i[g\mu_B H + \langle S^z\rangle(\alpha_{\vec{q}} - \beta_{q_y})] & i\langle S^y\rangle(\alpha_{\vec{q}} - \beta_{q_z}) \\ i[g\mu_B H + \langle S^z\rangle(\alpha_{\vec{q}} - \beta_{q_x})] & E & -i\langle S^x\rangle(\alpha_{\vec{q}} - \beta_{q_z}) \\ -i\langle S^y\rangle(\alpha_{\vec{q}} - \beta_{q_x}) & i\langle S^x\rangle(\alpha_{\vec{q}} - \beta_{q_y}) & E \end{pmatrix} \tag{3.16}$$

gde su:

$$\left.\begin{aligned} \alpha_{\vec{q}} &= J_0 - J_{\vec{q}} = J\sum_{r}(1 - e^{iq_r a}) \\ \beta_{\vec{q}_\gamma} &= J'_0 - J'_{\vec{q}_\gamma} = 2J'(1 - \cos q_\gamma a) \end{aligned}\right\} \tag{3.17}$$

Fourier-transformandi matričnih elemenata (3.13) će biti:

$$C^{\alpha\beta}_{(\vec{q})} = -\frac{1}{2\pi}\,\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\langle S^{\gamma}\rangle \tag{3.18}$$

za koje je ukupna matrica:

$\hat{T}(\vec{q},E)\,\hat{G}(\vec{q},E) = \hat{C}(\vec{q})$

$$\hat{C}_{(\vec{q})} = \frac{1}{2\pi}\begin{pmatrix} 0 & -\langle S^z\rangle & \langle S^y\rangle \\ \langle S^z\rangle & 0 & -\langle S^x\rangle \\ -\langle S^y\rangle & \langle S^x\rangle & 0 \end{pmatrix} \tag{3.19}$$

Rešavanjem matrične jednačine koja sadrži matrice (3.16) i (3.19), dobijamo veoma komplikovane Greenove funkcije $G^{\alpha\beta}_{(\vec{q},E)}$. Zbog toga ćemo u najnižoj aproksimaciji uzeti Tjablikovsko dekuplovanje za koje je:

$$\langle S^x\rangle = \langle S^y\rangle = 0 \tag{3.20}$$

s obzirom da je z-osa, osa kvantizacije.

Na osnovu aproksimacije (3.20) i uvodeći smenu:

$$\mathcal{E}_{\vec{q}} = g\mu_B H + \langle S^z\rangle(\alpha_{\vec{q}} - \beta_{q_y}) \tag{3.21}$$

matrice (3.16) i (3.19) će se transformisati u:

$$\hat{T}_{0(\vec{q},E)} = \begin{pmatrix} E & -i\mathcal{E}_{\vec{q}} & 0 \\ i\mathcal{E}_{\vec{q}} & E & 0 \\ 0 & 0 & E \end{pmatrix} \tag{3.22}$$

$$\hat{C}_{o(\vec{q})} = \frac{1}{2\pi}\begin{pmatrix} 0 & -\langle S^z\rangle & 0 \\ \langle S^z\rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.23}$$

Ako sada rešimo ovako dobijenu matričnu jednačinu:

$$\hat{T}_{o(\vec{q},E)}\hat{G}_{o(\vec{q},E)} = \hat{C}_{o(\vec{q})} \tag{3.24}$$

imaćemo da je:

$$\hat{G}_{o(\vec{q},E)} = \frac{1}{2\pi(E^2-\varepsilon_{\vec{q}}^2)}\begin{pmatrix} i\varepsilon_{\vec{q}}\langle S^z\rangle & -E\langle S^z\rangle & 0 \\ E\langle S^z\rangle & i\varepsilon_{\vec{q}}\langle S^z\rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.25}$$

odakle za Greenove funkcije $G^{\alpha\beta}_{o(\vec{q},E)}$ dobijamo sledeće izraze:

$$G^{xx}_{o(\vec{q},E)} = G^{yy}_{o(\vec{q},E)} = \frac{i}{2\pi}\,\frac{\varepsilon_{\vec{q}}\langle S^z\rangle}{E^2-\varepsilon_{\vec{q}}^2} \tag{3.26}$$

$$G^{xy}_{o(\vec{q},E)} = G^{yx}_{o(\vec{q},-E)} = \frac{i}{2\pi}\,\frac{iE\langle S^z\rangle}{E^2-\varepsilon_{\vec{q}}^2} \tag{3.27}$$

U daljem razmatranju koristićemo se Greenovom funkcijom (3.26) koja se pogodnije može napisati kao:

$$G^{xx}_{o(\vec{q},E)} = \frac{i}{2\pi}\,\frac{\langle S^z\rangle}{2}\left(\frac{1}{E-\varepsilon_{\vec{q}}+i\delta} - \frac{1}{E+\varepsilon_{\vec{q}}+i\delta}\right),\ \delta\to 0 \tag{3.28}$$

gde njen pol $E=\varepsilon_{\vec{q}}$ pretstavlja po definiciji, energiju elementarnih eksitacija (zakon disperzije za magnone) u aproksimaciji sa kojim je učinjeno dekuplovanje prethodnih Greenovih funkcija.

Spektralna intenzivnost Greenove funkcije (3.28) je data kao:

$$Q_{\vec{q}}(E)=\frac{2\mathrm{Re}\,G^{xx}_{(\vec{q},E)}}{e^{\frac{E_{\vec{q}}}{\theta}}-1}=\frac{\langle S^{z}\rangle}{2}\,\frac{\delta(E-E_{\vec{q}})-\delta(E+E_{\vec{q}})}{e^{\frac{E_{\vec{q}}}{\theta}}-1} \qquad (3.29)$$

$$\frac{1}{e^{\frac{E}{\theta}}-1}$$

Na osnovu teorije Greenovih funkcija [1], srednja vrednost proizvoda dva operatora preko spektralne intezivnosti je:

$$\langle S^{x}_{m}S^{x}_{n}\rangle=\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\int_{-\infty}^{\infty}Q_{\vec{q}}(E)\,e^{-i\vec{q}(\vec{m}-\vec{n})}dE=$$

$$=\frac{\langle S^{z}\rangle}{2N}\sum_{\vec{q}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dE\,e^{-i\vec{q}(\vec{m}-\vec{n})}}{e^{\frac{E_{\vec{q}}}{\theta}}-1}\left[\delta(E-E_{\vec{q}})-\delta(E+E_{\vec{q}})\right] \qquad (3.30)$$

Odavde, za $\vec{m}=\vec{n}$ na osnovu (3.1) i (3.5) ($\langle S^{x}_{\vec{n}}S^{x}_{\vec{n}}\rangle=\langle(S^{x}_{\vec{n}})^{2}\rangle=\frac{1}{4}$) dobijamo:

$$\frac{1}{\sigma_{1/2}}=\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\mathrm{cth}\,\frac{E_{\vec{q}}}{2\theta} \qquad (3.31)$$

Jednačina (3.31) odredjuje zavisnost magnetizacije od energije elementarnih eksitacija i temperature. S druge strane, na osnovu (3.21), energija elementarnih eksitacija preko magnetizacije takodje zavisi od temperature. Prema tome, da bi odredili magnetizaciju anizotropnog feromagnetika, potrebno je rešiti transcedentnu jednačinu (3.31).

4. PONAŠANJE MAGNETIZACIJE ANIZOTROPNOG FEROMAGNETIKA NA KONAČNIM TEMPERATURAMA

Odredjivanje magnetizacije anizotropnog feromagnetika $\sigma_{1/2}$ kao funkcije temperature svodi se u učinjenoj aproksimaciji na rešavanje transcedentne jednačine (3.31) koju možemo prelazeći sa sume na integral napisati kao:

$$\frac{1}{\sigma_{1/2}} = \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int cth \frac{\varepsilon_{\vec{q}}}{2\theta} d^3\vec{q} \tag{4.1}$$

ili:

$$\sigma_{1/2} = \frac{1}{1 + 2P_{1/2}} \tag{4.2}$$

gde je

$$P_{1/2} = \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\vec{q}}{e^{\frac{\varepsilon_{\vec{q}}}{\theta}} - 1} \tag{4.3}$$

a $a^3 = v = V/N$ -zapremina elementarne ćelije (kocke). Integracija se vrši u granicama prve Brillouinove zone.

a. SLUČAJ NISKIH TEMPERATURA, $T \to 0^\circ K$

U slučaju niskih temperatura za izračunavanje $\sigma_{1/2}$ pogodno je koristiti jednačinu (4.2). Kako veličina $P_{1/2}$ predstavlja odstupanje magnetizacije od magnetizacije zasićenja, kada $T \to 0^\circ K$ ona se može smatrati malom, usled čega jednačinu (4.2) možemo razviti u red. Ako se zaustavimo na prva dva člana imaćemo:

$$\sigma_{1/2} = 1 - 2P_{1/2} + O(P_{1/2}^2) \tag{4.4}$$

Pošto je $\mathcal{E}_{\vec{q}} \geqslant 0$, pri niskim temperaturama $e^{-\frac{\mathcal{E}_{\vec{q}}}{\theta}}$ će biti mala veličina, na osnovu čega izraz (4.3) za $P_{1/2}$ možemo napisati kao:

$$P_{1/2} = \frac{a^3}{(2\pi)^3} \sum_{n=0}^{\infty} \int e^{-\frac{(n+1)}{\theta}\mathcal{E}_{\vec{q}}} d^3\vec{q} \tag{4.5}$$

Pored ovoga, kada $T \to 0°K$ najveći uticaj na magnetizaciju $\sigma_{1/2}$ će imati spinski talasi sa malim talasnim vektorom $\vec{q}$, zbog čega zakon disperzije:

$$\mathcal{E}_{\vec{q}} = g\mu_B H + \frac{1}{2}\sigma_{1/2}(\alpha_{\vec{q}} - \beta_{q_y}) \tag{4.6}$$

možemo razviti u red po stepenima inteziteta talasnog vektora $|\vec{q}|$. Koristeći sferne koordinate, zakon disperzije (4.6) razvijen sa tačnošću do šestog stepena $q=|\vec{q}|$ imaće sledeći oblik:

$$\mathcal{E}_{\vec{q}} = g\mu_B H + \sigma_{1/2} J\left(\frac{A(\theta,\varphi)a^2}{2} q^2 + \frac{B(\theta,\varphi)a^4}{24} q^4 + \frac{C(\theta,\varphi)a^6}{720} q^6\right) \tag{4.7}$$

gde su:

$$A(\theta,\varphi) = \cos^2\varphi \sin^2\theta + t\sin^2\varphi \sin^2\theta + \cos^2\theta$$

$$B(\theta,\varphi) = -(\cos^4\varphi \sin^4\theta + t\sin^4\varphi \sin^4\theta + \cos^4\theta)$$

$$C(\theta,\varphi) = \cos^6\varphi \sin^6\theta + t\sin^6\varphi \sin^6\theta + \cos^6\theta$$

$$t = 1 - \frac{J'}{J} = \frac{J_{\parallel}}{J_{\perp}}$$

Zamenom (4.7) u (4.5), koristeći aproksimaciju:

$$e^{-\frac{(n+1)}{\theta}\sigma_{1/2}J\left(\frac{Aa^2}{2}q^2+\frac{Ba^4}{24}q^4+\frac{Ca^6}{720}q^6\right)} \cong$$

$$\cong e^{-\frac{(n+1)}{2\theta}\sigma_{1/2}JAa^2q^2}\left[1-\left(\frac{Ba^4}{24}q^4+\frac{Ca^6}{720}q^6\right)\frac{(n+1)}{\theta}\sigma_{1/2}J\right]$$

i imajući u vidu da kada $T \to 0°K$ granice integracije možemo proširiti na oblast svih vrednosti q (od $-\infty$ do $+\infty$), posle jednostavnog računa za $P_{1/2}$ dobijamo:

$$P_{1/2} = Z_{3/2}(\alpha)\left(\frac{\rho}{\sigma_{1/2}}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{t^{\frac{1}{2}}} + \frac{\pi}{4}Z_{5/2}(\alpha)\left(\frac{\rho}{\sigma_{1/2}}\right)^{\frac{5}{2}}\left(\frac{2}{t^{\frac{1}{2}}}+\frac{1}{t^{\frac{3}{2}}}\right) - \frac{\pi^2}{12}Z_{7/2}(\alpha)\left(\frac{\rho}{\sigma_{1/2}}\right)^{\frac{7}{2}}\left(\frac{2}{t^{\frac{3}{2}}}+\frac{1}{t^{\frac{5}{2}}}\right)$$

gde su: (4.8)

$$\rho = \frac{kT}{2\pi J}\ ; \qquad \alpha = \frac{g\mu_B H}{kT}\ ;$$

$$Z_{p(x)} = \sum_{n=0}^{\infty} n^{-p} e^{-(n+1)x}\ ; \qquad Z_{p(0)} = \zeta(p) = \sum_{n=0}^{\infty} n^{-p}$$

($\zeta(p)$ -Riemanova ceta-funkcija)

Na osnovu (4.8) može se zaključiti da ostatak $O(P_{1/2}^2)$ sadrži član nižeg stepena od $T^{\frac{7}{2}}$. Zbog toga će razvoj magnetizacije $\sigma_{1/2}$ po stepenima temperature biti tačan do člana $T^{\frac{5}{2}}$ zaključno. U tom smislu, ako zanemarimo član $T^{\frac{7}{2}}$, zamenom (4.8) u (4.4) dobijamo sledeću jednačinu:

$$\sigma_{1/2} = 1 - 2Z_{3/2}(\alpha)\left(\frac{\rho}{\sigma_{1/2}}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{t^{\frac{1}{2}}} - \frac{\pi}{2}Z_{5/2}(\alpha)\left(\frac{\rho}{\sigma_{1/2}}\right)^{\frac{5}{2}}\left(\frac{2}{t^{\frac{1}{2}}}+\frac{1}{t^{\frac{3}{2}}}\right) \qquad (4.9)$$

Prethodnu jednačinu rešavamo metodom iteracije. Ako za nultu aproksimaciju uzmemo $\sigma_{1/2}=1$, tada za magnetizaciju anizotropnog feromagnetika $\sigma_{1/2}$ pri niskim temperaturama dobijamo:

$$\sigma_{1/2} = 1 - 2Z_{3/2}(\alpha)\rho^{\frac{3}{2}}\frac{1}{t^{\frac{1}{2}}} - \frac{\pi}{2}Z_{5/2}(\alpha)\rho^{\frac{5}{2}}\left(\frac{2}{t^{\frac{1}{2}}}+\frac{1}{t^{\frac{3}{2}}}\right) \qquad (4.10)$$

Formula za magnetizaciju anizotropnog feromagnetika pri niskim temperaturama (4.10) za $J'=0$ ($t=1$) i $H=0$ prelazi u Blochovu formulu za magnetizaciju izotropnog feromagnetika (1.12) za slučaj $S=\frac{1}{2}$, koja u svom razvoju sadrži članove do $T^{\frac{5}{2}}$ zaključno. Na osnovu ovoga, poredeći (4.10) i (1.12) možemo zaključiti da koeficijenti $\frac{1}{t^{\frac{1}{2}}}$ uz $T^{\frac{3}{2}}$ i $\left(\frac{2}{t^{\frac{1}{2}}}+\frac{1}{t^{\frac{3}{2}}}\right)$ uz $T^{\frac{5}{2}}$ predstavljaju izvesnu korekciju magnetizacije feromagnetika pri niskim temperaturama koja potiče od uticaja magnetno-kristalografske anizotropije.

b. SLUČAJ VISOKIH TEMPERATURA, $T \leq T_c$, $H=0$

Jednačina (4.1) ne daje konačna rešenja za magnetizaciju anizotropnog feromagnetika $\sigma_{1/2}$ u slučaju kada je $H=0$ i $T\to\infty$. Ovo možemo pokazati na sledeći način. Kada je temperatura dovoljno velika imamo:

$$\operatorname{cth}\frac{\sigma_{1/2}(\alpha_{\xi}-\beta_{\xi_y})}{4\theta} \cong \frac{4\theta}{\sigma_{1/2}(\alpha_{\xi}-\beta_{\xi_y})}$$

Zamenom ovoga u (4.1) možemo videti da pri porastu temperature magnetizacija ne može ostati konačna. Drugim rečima, $\sigma_{1/2}\to 0$ kada $T\to T_c$, gde je T_c neka konstanta koja ima smisao Curieve temperature. Na osnovu ovoga, za $T\leq T_c$ imamo da je:

$$\sigma_{1/2} \ll 1 \text{ , odnosno } \frac{\sigma_{1/2}(\alpha_{\xi}-\beta_{\xi_y})}{4\theta} \ll 1$$

zbog čega tangens hiperbolični koji figuriše u jednačini (4.1) možemo prikazati sledećim razvojem:

$$\operatorname{cth}\xi = \frac{1}{\xi} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{2^{2n}B_{2n}}{(2n)!}\,\xi^{2n-1} \tag{4.11}$$

gde su B_{2n}-Bernulijevi brojevi ($B_2=\frac{1}{6}$, $B_4=-\frac{1}{30}$, $B_6=\frac{1}{42}$, itd.)

Zamenom (4.11) u (4.1) dobijamo:

$$\frac{1}{\sigma_{1/2}} = \frac{\tau}{\sigma_{1/2}} C + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2^{2n} B_{2n}}{(2n)!} C_{2n-1} \left(\frac{\sigma_{1/2}}{\tau} \right)^{2n-1} \tag{4.12}$$

gde su:

$$C = \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \xi}{E_{\xi}} \; ; \quad C_m = \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int E_{\xi}^m d^3 \xi \; ;$$

$$E_{\xi} = \frac{\alpha_{\xi} - \beta_{\xi}}{J} \; ; \quad \tau = \frac{4\theta}{J}$$

(τ je bezdimenziona temperatura).

Jednačina (4.12) se može pogodnije napisati u obliku:

$$\frac{\sigma_{1/2}}{\tau} = \sqrt{\frac{3}{\tau}(1 - \tau C)} \left\{ C_1 + 3 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{2^{2n} B_{2n}}{(2n)!} C_{2n-1} \left(\frac{\sigma}{\tau} \right)^{2n-2} \right\}^{-\frac{1}{2}} \tag{4.13}$$

i dalje rešavati metodom iteracije. Ako za nultu aproksimaciju uzmemo $\sigma_{1/2} = 0$ imaćemo da je:

$$\frac{\sigma_{1/2}}{\tau} = \sqrt{\frac{3}{\tau C_1}(1 - \tau C)} \tag{4.14}$$

pri čemu za magnetizaciju anizotropnog feromagnetika na visokim temperaturama ($T \leq T_c$, $H = 0$) dobijamo:

$$\sigma_{1/2} = \sqrt{\frac{3\tau}{C_1}\left(1 - \frac{\tau}{\tau_c}\right)} \cong \sqrt{\frac{3\tau_c}{C_1}\left(1 + \frac{\tau}{\tau_c}\right)} \tag{4.15}$$

gde je: $\tau_c = \dfrac{1}{C}$

Magnetizacija data izrazom (4.15) očigledno za $\tau = \tau_c$ isčezava ($\sigma_{1/2} \to 0$), zbog čega temperatura:

$$T_c = \frac{J}{4kC} \tag{4.16}$$

predstavlja upravo Curievu temperaturu na kojoj anizotropni feromagnetik ima fazni prelaz druge vrste. Na osnovu formule (4.16) moguće je teorijski izračunati vrednosti Curieve temperature anizotropnog feromagnetika koji je analiziran u drugom delu.

Ako sada uporedimo izraze (4.15) i (1.13) možemo primetiti da magnetizacija anizotropnog i izotropnog feromagnetika u blizini Curieve temperature imaju istu temperatursku zavisnost. Medjutim, zbog različitih zakona disperzije (4.6) i (1.9), vrednosti Curievih temperatura anizotropnog (T_c) i izotropnog feromagnetika (T_c°) će biti različite. Da bi odredili odnos Curievih temperatura T_c/T_c° koji se na osnovu (4.16) i (1.14) može prikazati kao:

$$\frac{T_c}{T_c^\circ} = \frac{C_\circ}{C} \tag{4.17}$$

potrebno je izračunati vrednosti konstanti C i $C_\circ$. S obzirom na složenost podintegralnih funkcija koje figurišu u izrazima za C (4.12) i $C_\circ$ (1.13), njihovo izračunavanje je veoma komplikovano. Zbog toga ćemo vrednosti konstanti C i $C_\circ$ izračunati približno koristeći aproksimaciju malih talasnih vektora $\vec{q}$ sa razvojem zakona disperzije do kvadratnih članova $q \cdot |\vec{q}|$ da bi procenili uticaj magnetno-kristalografske anizotropije na veličinu Curieve temperature.

Približne vrednosti konstanti C i $C_\circ$ će biti:

$$C \cong \frac{\sqrt{3}}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{t}} \quad , \quad C_\circ = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \tag{4.18}$$

čijom zamenom u (4.17) dobijamo:

$$T_c \cong \sqrt{t}\; T_c^\circ \tag{4.19}$$

Kao što se vidi iz (4.19) vrednost Curieve temperature će biti veća ili manja u zavisnosti od konstante anizotropije $t = \frac{J_{\parallel}}{J_{\perp}}$.

5. ZAKLJUČAK

U ovom radu je metodom Greenovih funkcija ispitano ponašanje magnetizacije na niskim i visokim temperaturama jednog uopštenog Heisenbergovog antiferomagnetika. Osnovne rezultate rada možemo rezimirati na sledeći način:

- na niskim temperaturama dobija se poznati Blochov zakon "tri polovine" ponašanja magnetizacije u zavisnosti od temperature sa renormalizovanim koeficijentima koji zavise od konstante anizotropije t;
- u oblasti visokih temperatura dobija se u Tjablikovskoj aproksimaciji fazni prelaz druge vrste, sa tim da Curieva temperatura zavisi od konstante anizotropije.

Najnovija eksperimentalna i teorijska istraživanja koja su data u radovima [4], [5] i [6], pokazuju da postoje materijali kao što su $K_2C_nF_n$, $(C_nH_{2n+1}NH_3)_2C_nCl_n$ (n=1,2,...6) čije se magnetne osobine mogu opisati sličnim Hamiltonijanom koji je razmatran u ovom radu.

Možemo prema tome zaključiti, da dalja detaljna istraživanja (sa većom tačnošću) pretstavljaju interes u cilju boljeg razumevanja magnetnih osobina anizotropnih magnetnih materijala.

LITERATURA

[1] S.V. Tjablikov, Metodi kvantovoj teorii magnetizma, Izd. "Nauka", Moskva (1965)

[2] M.J. Škrinjar, Magistarski rad, Beograd (1972)

[3] E. Beloritzky, R. Casalegno, and P. Fries, Phys. stat. sol. (b) 77, 495 (1976)

[4] K. Tsuru and N. Uryû, Physica 92b, 166-186, (1977)

[5] K. Tsuru and N. Uryû, Physica 92b, 79-84, (1977)

[6] L.J. de Jongh, J. Appl. Phys. 49(3), 1305, (1978)