UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
NASTAVNA GRUPA: FIZIKA

PREDMET: KVANTNA MEHANIKA
PREDMETNI NASTAVNIK: DR BRATISLAV TOŠIĆ

DIPLOMSKI RAD

TEMA: SISTEM SPINOVA SA DVA DEFEKTA

PAVLOVIĆ M. JOZO

NOVI SAD
1976.

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

Sadržaj :

Uvod

Glava I

Strana :

O magnetizmu uopšte

Glava II

Analiza jednodimenzionalnog lanca spinova sa dve primese

Uvod

Cilj ovog diplomskog rada je da se analiziraju procesi u sistemu spinova sa dva defekta. Konkretnije rečeno, defekti će biti primesni atomi, koji imaju efektivni spin različit od spina matrice. Rad ne pretenduje da reši sve probleme koji se pojavljuju u ovakvim sistemima, ali je intencija da se daju fundamentalne formule za elementarnu ekscitaciju u ovakvom sistemu, na osnovu kojih se mogu vršiti proračuni onih efekata koji mogu da budu od praktičnog interesa. Pri tome se u prvom redu misli na transport i primopredaju magnetne energije, jer primesni spinovi mogu da posluže kao odašiljači i antene za magnetnu energiju.

1. Paramagnetici, feromagnetici i dijamagnetici

Kvantna mehanika za orbitalni moment količine kretanja elektrona daje izraz:

$$|\vec{\ell}| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar \qquad \text{I 1.1.}$$

$$|\vec{\ell}_z| = m_\ell \hbar \,, \qquad m_\ell = 0, \pm 1, \ldots, \pm \ell \,, \qquad \text{I 1.2.}$$

a za orbitalni magnetni moment jednog elektrona u atomu:

$$|\vec{\mu}_\ell| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\mu_B \,, \qquad \left(\mu_B = \mu_0 e \frac{\hbar}{2m_e}\right) \qquad \text{I 1.3.}$$

$$\mu_{\ell_z} = -m_\ell \mu_B \qquad \text{I 1.4.}$$

Prema tome, sa mehaničkim momentom količine kretanja kvantovan je takođe i magnetni moment, što znači da kvantni brojevi određuju i magnetne osobine atoma. Zbog relacije I 1.3., atom vodonikovog tipa u najnižem energetskom stanju ($n=1$, $\ell=0$), nema magnetnog momenta. Međutim, eksperimentalni rezultati pokazuju da su atomi vodonikovog tipa, kao i atomi alkalnih elemenata, paramagnetični. Uhlenbeck i Goudsmit su 1925. god pokazali da se zbog toga elektronu, pored mase i naelektrisanja, mora pripisati još jedna karakteristika koju nazivamo spin elektrona. To svojstvo elektrona je u tome da se elektronu pripisuje da ima svoj sopstveni mehanički moment količine kretanja $\vec{S}$ (elektronski spin) i svoj sopstveni magnetni moment $\vec{\mu}_S$ (magnetni spinski moment količine kretanja). Analogno relacijama I 1.1. i I 1.2. sopstvene vrednosti za $\vec{S}$ date su izrazom:

$$|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\,\hbar \qquad \text{I 1.5.}$$

$$S_z = m_S \hbar \quad \text{(moguće vrednosti u pravcu polja, z-ose)} \qquad \text{I 1.6.}$$

Eksperimentalno je nađeno da spinski kvantni broj (S) ima samo jednu vrednost i to: $S = \frac{1}{2}$, što znači da je $m_S = \pm S = \pm \frac{1}{2}$.

Ukoliko bi se analogno orbitalnom magnetizmu (I 1.4.) izračunala z-komponenta spinskog magnetnog momenta, trebala bi da bude jednaka polovini Borovog magnetona. Pošto eksperimenti pokazuju da se radi o celom magnetonu, to će analogno relacijama I 1.3. i I 1.4. za spinski magnetizam biti:

$$\mu_s = 2\sqrt{s(s+1)}\,\mu_B \qquad I\ 1.7.$$

$$\mu_{s_z} = -2 m_s \mu_B \qquad I\ 1.8.$$

Znači, spin je kvantno-mehanička osobina mikročestica.

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

$$M = \chi \mathcal{H} \qquad I\ 1.9.$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial \mathcal{H}} \qquad I\ 1.10.$$

Ako je χ negativna veličina, onda se takav materijal naziva dijamagnetik, a ako je χ pozitivna veličina, razlikujemo dva slučaja:

a) χ je pozitivna i mala veličina, materijal je paramagnetik,

b) χ je pozitivna i velika veličina, materijal je feromagnetik.

Ova fenomenološka podela magnetnih materijala je dosta gruba, ali ipak dobra da magnetike razvrsta u tri spomenute osnovne klase. Finiju podelu možemo praviti samo na osnovu mikroskopskih karakteristika magnetnih materijala. Nas najviše interesuju feromagnetni materijali, pa ćemo ovu finiju podelu izvršiti samo za ovu klasu magnetika. Međutim, pre nego što pređemo na klasifikaciju feromagnetika, moramo razjasniti koji su atomski fenomeni odgovorni za pojavu magnetizma.

Prvu teoriju o prirodi magnetizma dao je Veber. On smatra da magnetik predstavlja skup uređenih elementarnih magneta i da sve magnetne pojave nastaju kao posledica razuređenja sistema elementarnih magneta. Veberova ideja ima nedostatak što je o prirodi ovih elementarnih magneta malo objašnjavala, a još manje o prirodi sila između njih. Dobra strana Veberove teorije je ta što magnet predstavlja sistem uređenih objekata, koji se sa povišenjem temperature ili nekim spoljnim mehaničkim dejstvom može „razurediti", što je i danas osnovna teorija magnetizma.

Prihvatajući Veberovu teoriju o magnetizmu kao sistemu uređenih elemenata sa magnetnim svojstvima, savremena mikroteorija magnetizma imala je za zadatak da utvrdi koji su to uređeni elementi i kakva je priroda sila koje između njih deluju. Odgovor na prvo pitanje pronađen je relativno lako na osnovu eksperimenata i poznavanja strukture omotača atoma feromagnetnih materijala. Konstatovano je da su elementi odgovorni za magnetne fenomene spinovi elektrona nepopunjenih 3d ljuski za jake magnetike (Fe, Co, Ni) i spinovi elektrona nepopunjenih 4f ljuski za slabe feromagnetike (lantanidi). Odgovor na drugo pitanje pronađen je nešto teže. U početku se mislilo da je magnetizam posledica dipol-dipolnih interakcija između magnetnih momenata elektrona nepopunjenih ljuski, ali se ispostavilo da je konstanta ovih interakcija reda veličine $10\,k_B$ (k_B – Bolcmanova konstanta), pa zbog toga ova ideja nije mogla da se održi, pošto eksperiment pokazuje da su tačke prelaza u feromagneticima reda veličine $1000\,k_B$. Kako je tačka prelaza, grubo govoreći, reda veličine konstante interakcije između atoma, očigledno je, ako bi ideja o dipol-dipolnim interakcijama bila dobra, da ne bismo imali ni jedan feromagnetik sa tačkom prelaza višom od 10–20 °K, što protivureči eksperimentalnim podacima.

Druga ideja se zasnivala na mišljenju da su za magnetne fenomene odgovorne električne sile između elektrona. Koa što je poznato u kvantno-mehaničkoj interpretaciji elektroni se međusobno ne razlikuju, gube svoju „individualnost", a talasna funkcija od dva elektrona mora biti antisimetrična kombinacija talasnih funkcija svakog od ovih elektrona, da bi bio zadovoljen Paulijev princip isključenja. Ako energiju interakcije između dva elektrona usrednjimo po antisimetričnim funkcijama, onda se u ovoj srednjoj energiji interakcije pojavljuje jedan dopunski član, koji se klasično uopšte ne može objasniti. Taj dopunski član se naziva energija izmene. Ona je proizvod kvantne mehanike tj. talasnih osobina elektrona i činjenice da se elektroni ne mogu međusobno razlikovati. Ocenjivanje reda veličine energije izmene pokazalo je da ona za par elektrona iznosi $1000\,k_B$, što je konačno rešilo dilemu o prirodi sila interakcije. Sada se zna da su sile interakcije u magnetizmu sile izmene između spinova elektrona, koje su čisto-kvantno mehaničkog porekla. Na osnovu ove ideje zaključujemo da je feromagnet sistem uređenih spinova koji između sebe interaguju kvantno-mehaničkim silama izmene. Na temperaturi od 0°K svi spinovi su usmereni u istom pravcu koji se naziva osa kvantizacije magneta. Povišenjem temperature ili dejstvom neke spoljne mehaničke sile, uređeni sistem spinova odstupa od svog prvobitnog pravca.

Dijamagnetici

U grupu dijamagnetika spadaju materijali sa negativnom susceptibilnošću ($\chi<0$). Veličina susceptibilnosti je veoma mala ($\chi\cong-10^{-6}$) i ne zavisi od temperature. Karakteristična osobina dijamagnetika je da su njegovi i atomi ili molekuli lišeni rezultujućeg magnetnog momenta.

Uobičajeno razmatranje dijamagnetizma (Lanžvenova teorija) se zasniva na Larmorovoj teoremi, koja iskazuje da magnetno polje u kome se nalazi atom izaziva dopunsko, rotaciono kretanje elektrona (oko pravca polja), koje se superponira sa prvobitnim kretanjem posmatranog elektrona oko jezgra. Na taj način se menja kvantno stanje elektrona. Tako indukovanoj električnoj struji, promenom spoljašnjeg magnetnog polja, odgovara određeni dopunski magnetni moment, koji je usmeren nasuprot primenjenom polju $\vec{\mathcal{H}}$ ($\vec{M}=-\chi\vec{\mathcal{H}}$). Zaključujemo da negativan doprinos dijamagnetizma dolazi zbog Lentzovog zakona. Pošto je dijamagnetizam opšta osobina svih atoma, on se javlja i kod paramagnetnih materijala, ali je maskiran mnogo jačim paramagnetnim efektom.

Dijamagnetizam se lako opaža u svim slučajevima kada atomi, joni ili molekuli nemaju rezultujući magnetni moment. U prisustvu spoljašnjeg magnetnog polja oni gube svoju magnetnu neutralnost.

Klasična Lanževenova teorija i kvantna teorija dijamagnetizma daju za magnetni moment isti rezultat.

Tipični predstavnici dijamagnetika su: inertni gasovi, skoro sva organska jedinjenja i njihove soli.

Paramagnetici

U grupu paramagnetika spadaju materijali sa pozitivnom susceptibilnošću ($\chi > 0$), čija je veličina mala ($10^{-3}-10^{-6}$) i obrnuto srazmerna temperaturi.

Atomi paramagnetnog materijala i kada se ne nalaze u spoljašnjem polju ($\vec{\mathcal{H}}$) imaju stalne magnetne momente. Pod dejstvom spoljašnjeg magnetnog polja magnetni momenti teže da se orijentišu u pravcu polja i time pozitivno doprinose magnetizmu materijala. U opštem slučaju u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja dezorijentišuće dejstvo toplotnog kretanja ne dozvoljava obrazovanje spontane uređene orijentacije konstantnih atomskih magnetnih momenata.

Pri spoljašnjem magnetnom polju jednakom nuli, rezultujuća magnetizacija u paramagneticima je uvek jednaka nuli. Magnetizacija se pojavljuje i počinje da raste uključivanjem i porastom spoljašnjeg magnetnog polja. Ako polje nije jako veliko, magnetizacija raste srazmerno spoljašnjem magnetnom polju, dok susceptibilnost ne zavisi od $\vec{\mathcal{H}}$, ali jako zavisi od temperature.

Tipični predstavnici paramagnetika su: gasovi čiji atomi ili molekuli imaju nekompenzovane magnetne momente (O_2, NO, NO_2), niz soli lantanida, neka jedinjenja prelaznih metala, alkalni metali i t d.

Feromagnetici

Feromagnetici predstavljaju jake magnetne materijale. Po savremenim teorijama se smatra da su osobine jakih magnetnih materijala uslovljene elektronima u nepopunjenim unutrašnjim ljuskama atoma kristalne rešetke, a one zavise i od raspodele gustine provodnih elektrona. Kristali su obavezno jaki magnetni materijali, a tečnosti i gasovi nisu. Uticaj kristalne strukture na magnetna svojstva ogleda se u postojanju magnetno-kristalne anizotropije. U kristalima postoji samo nekoliko pravaca duž kojih orijentacija spinova daje minimalan termodinamički potencijal, a ti pravci se nazivaju pravci lakog namagnetisanja. Gvožđe, koje ima kubnu, zapreminski centriranu rešetku, ima pravce lakog namagnetisanja duž ivica kocke. U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja energijski najpovoljniji raspored spinova u monokristalu je onaj kad je monokristal razdeljen na niz oblasti (domena) u kojima su spinovi usmereni u jednom pravcu. Znači, ponašanje elektrona iz nepopunjenih ljuski se može opisati sistemom spinova raspoređenih u čvorove rešetke, a interakcija između spinova se naziva integral izmene. Smatra se da je integral izmene po redu veličine jednak energiji izmene elektrona odgovarajućih čvorova kristalne rešetke.

Toplotni kvanti utiču na magnet težeći da ga „razurede", a na temperaturama na kojima je srednja toplotna energija reda veličine integrala izmene se narušava uređenost spinova. Ta temperatura za feromagnetik se naziva Kirijeva temperatura (T_c) i ona je reda veličine $T_c \sim 10^3$ °K. Jasno je da je tačka prelaza na Kirijevoj temperaturi, na kojoj dolazi do razgradnje magnetne rešetke.

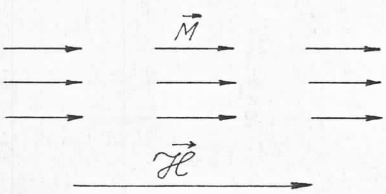
Tipični predstavnici feromagnetika su prelazni metali (Fe, Co, Ni, P_t, Cr, Mn), neki elementi iz grupe lantanida ($Ce, Nd, Sm, Eu, Tb, Ho, Er, Dy, Tm$) i legure Fe, Co i Ni. Finija klasifikacija jakih magnetnih materijala je: feromagnetici, antiferomagnetici i ferimagnetici.

a) Feromagnetici

Ako magnetni kristal ima prostu rešetku sastavljenu od spinova iste veličine S, onda se takav kristal naziva feromagnetik. Posebnu klasu feromagnetika koju čine kristali sa više podrešetki, koje imaju različite spinove, ali su svi spinovi u svim podrešetkama međusobno paralelni, nazivamo feromagneticima sa n podrešetki.

Na temperaturama nižim od Kirijeve tačke ($T < T_C$) u proseku su svi spinovi orijentisani u jednom pravcu, pa je rezultujući magnetni moment znatan. U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja ($\vec{\mathcal{H}}$), pravac rezultujućeg magnetnog momenta ($\vec{M}$) nije fiksiran, ali ako postoji makar i slaba anizotropija, vektor $\vec{M}$ je orijentisan duž jedne od osa lake magnetizacije.

Kada se feromagnet nalazi u spoljašnjem magnetnom polju, vektori $\vec{M}$ i $\vec{\mathcal{H}}$ su kolinearni (sl. 1.)



Sl. 1.

Za temperature $T \geq T_C$ nestaje spontane magnetizacije, feromagnet se ponaša kao paramagnetik, a χ je određeno Kiri-Vajsovim zakonom:

$$\chi = \frac{const}{T - T_C} \qquad \text{I 1.11.}$$

Jačina magnetne polarizacije (magnetizacija) tj. magnetni moment jedinice zapremine, pri temperaturama nižim od neke kritične naziva se spontana magnetizacija $M(T)$. Njena najveća vrednost je magnetizacija zasićenja M_o. Za temperature $T \leq T_C$ spontana magnetizacija je određena izrazom:

$$M(T) \cong const\sqrt{1 - \frac{T}{T_C}} \qquad \text{I 1.12.}$$

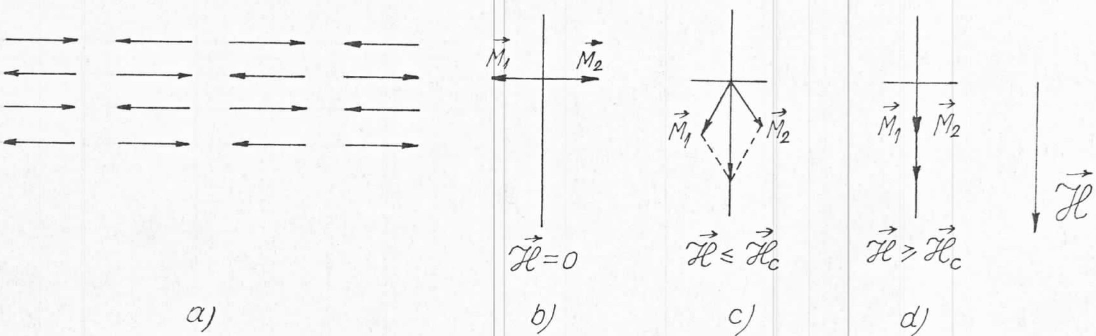
Kada $T \to 0$, spontana magnetizacija je data izrazom:

$$M(T) = M_o(1 - A_1 T^{\frac{3}{2}} - A_2 T^{\frac{5}{2}} - \dots) \qquad \text{I 1.13.}$$

gde su A_i - neke konstante.

b) Antiferomagnetici

Ako magnetni kristal sadrži dve podrešetke koje imaju antiparalelne spinove iste veličine, takav kristal se naziva antiferomagnetik. Antiferomagnetni raspored spinova, saglasno hipotezi Nela, može se predstaviti kao sprega dve ili više feromagnetnih podrešetki (sl. 2.). Sa slike se vidi da je rezultujuća magnetizacija jednaka nuli, pri $\vec{\mathcal{H}} = 0$.



Sl. 2.

Pri spoljašnjem polju manjem od nekog kritičnog ($\vec{\mathcal{H}} \leq \vec{\mathcal{H}}_c$), magnetizacija podrešetki nije usmerena u pravcu polja, već je rezultujuća magnetizacija kolinearna sa poljem. Pri $\vec{\mathcal{H}} = \vec{\mathcal{H}}_c$, magnetizacija podrešetki je u pravcu polja, a rezultanta je jednaka algebarskom zbiru: $\vec{M}_1 + \vec{M}_2$. Očigledno je da se u ovom slučaju antiferomagnetik ponaša kao feromagnetik. Analogno feromagneticima, antiferomagnetici se pri $T > T_n$, ponašaju kao paramagnetici.

T_n - Nelova temperatura, $\vec{\mathcal{H}}_c$ - kritično magnetno polje

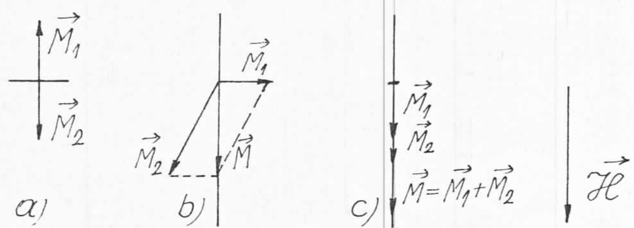
Karakteristike antiferomagnetika su još: maksimalna susceptibilnost pri $T = T_n$, stroga zavisnost susceptibilnosti od temperature i veći uticaj anizotropije nego kod feromagnetika.

Tipični predstavnici antiferomagnetika su: soli i oksidi Fe, Co i Ni (FeO, CoF_2, $NiSO_4$), kao i MnO, MnF_2, $KNiF_3$, Ti_2O_3 itd.

c) Ferimagnetici

Ferimagnetik predstavlja kristal koji se sastoji od nekoliko magnetnih podrešetki sa spinovima različitih veličina i orijentacija.

Za ferimagnetike, po hipotezi Nela, karakteristično je postojanje nekoliko podrešetki sa rezultujućim magnetnim momentom različitim od nule, koji potiče usled različitog broja „levih" i „desnih" čvorova i različitih veličina spinova, kao i nekolinearnog rasporeda momenata podrešetki. Ponašanje ferimagnetika sa dve podrešetke sa rezultujućim momentima $\vec{M}_1$ i $\vec{M}_2$ u magnetnom polju prikazano je na sl. 3.



Sl. 3.

$\vec{\mathcal{H}}_1$ i $\vec{\mathcal{H}}_2$ – kritične vrednosti magnetnog polja

Sl. 3. predstavlja šematski prikaz rasporeda spinova u izotropnom ferimagnetiku: a – u slabim poljima ($\vec{\mathcal{H}} \leq \mathcal{H}_1$), b – u jakim poljima ($\vec{\mathcal{H}}_1 \leq \vec{\mathcal{H}} \leq \vec{\mathcal{H}}_2$), c – u veoma jakim poljima ($\vec{\mathcal{H}} \geq \vec{\mathcal{H}}_2$). Kod ferimagnetika koji sadrže više od od dve podrešetke, spontana magnetizacija može da padne na nulu pre Kirijeve tačke, na tzv. temperaturi kompenzacije. Na temperaturi $T>T_c$, ferimagnetici se ponašaju kao paramagnetici. Zavisnost susceptibilnosti χ od temperature je data Kiri-Nelovim zakonom:

$$\chi^{-1} = \chi_0^{-1} + \frac{T}{C} - \frac{\Delta}{T-T_c} \qquad \text{I } 1.14.$$

gde su χ_0, C i Δ – konstante

Predstavnici ferimagnetika su kompleksne soli prelaznih metala ($MnO \cdot Fe_2O_3$, $3Y_2O_3 \cdot 5Fe_2O_3$).

Ovim razmatranjem nisu iscrpljeni svi tipovi magnetnih struktura. Kod nekih materijala zapažene su tzv. spiralne strukture kod kojih se komponente spinova periodično menjaju pri pomeranju duž nekog kristalografskog pravca. Kod ovih struktura moguć je prelaz iz jednog oblika u drugi, a nije lako izvršiti njihovu klasifikaciju. U skladu sa ovim, imaju dve tačke faznih prelaza. Na nekoj karakterističnoj temperaturi T_1 dešava se prelaz iz feromagnetnog u antiferomagnetno stanje, a na temperaturi T_2 u paramagnetno stanje. Materijali ovog tipa strukture su neki lantanidi.

I 2. Feromagnetici i Hajzenbergov model

Videli smo u predhodnom paragrafu da su za pojavu magnetizma odgovorni spinovi elektrona nepopunjenih unutrašnjih ljuski. Iako svaki elektron ima spin $S=\frac{1}{2}$, to ne znači da elektroni nepopunjenih ljuski učestvuju u magnetnim fenomenima sa svojim spinovima individualno. Svi elektroni nepopunjene ljuske, kada su atomi vezani u kristal, u zavisnosti od prirode sila kojim su vezani atomi, stvaraju jedan sumarni tzv. efektivni spin. Ovi efektivni spinovi i interakcija između njih obrazuju magnetni kristal, koji ne mora da se poklapa sa hemijskom kristalnom rešetkom. Efektivni spin se određuje eksperimentalno za svaki kristal posebno. Drugim rečima, na osnovu eksperimentalnih činjenica, zna se da efektivni spin nije sumarni spin svih elektrona 3 d ljuski, nego spin jednog dela ovih elektrona, koji svoje spinove nisu sparili antiparalelno. Međutim, nezavisno od ovoga, očigledno je da se u magnetizmu mora raditi sa spinovima jednakim i većim od $\frac{1}{2}$, pa je zbog toga neophodno upoznati se sa osobinama spinskih operatora za spin proizvoljnog intenziteta S.

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

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

Ovde su $\vec{i}, \vec{j}$ i $\vec{k}$ – ortovi pravouglog sistema, S^x, S^y i S^z – komponente spina

Komutacione relacije za spinske operatore su :

$$[S^x, S^y] = i\,S^z,\ [S^y, S^z] = i\,S^x,\ [S^z, S^x] = i\,S^y \qquad \ldots \quad I\,2.2.$$

Komutacione relacije I 2.2. su opšte komutacione relacije za komponente momenata u kvantnoj mehanici i ispisane su u sistemu jedinica $\hbar = c = 1$.

Dalje transformisanje komutacionih relacija za spinske operatore vršićemo u punoj analogiji sa komutacionim relacijama za orbitalni moment elektrona.

Ako magnet shvatimo kao sistem uređenih spinova i to i to tako da u osnovnom stanju z-projekcije svih spinova imaju maksimalnu vrednost spina S (S-intenzitet spina), a pobuđenja magnetnog sistema shvatimo kao narušavanje ovog reda u osnovnom stanju tj kao menjanje vrednosti z-projekcije spina, onda je jasno da uvođenje operatora :

$$S^{+}=S^{x}+iS^{y}$$
$$S^{-}=S^{x}-iS^{y} \qquad \ldots \quad I\ 2.3.$$

ima fizičkog smisla, jer su upravo oni odgovorni za menjanje veličine z-projekcije. Zbog toga ćemo ovde navesti komutacione relacije za operatore S^{+} i S^{-} :

$$S^{+}S^{-}=(S^{x}+iS^{y})(S^{x}-iS^{y})=(S^{x})^{2}+(S^{y})^{2}-i[S^{x},S^{y}] \qquad \ldots \quad I\ 2.4.$$
$$S^{-}S^{+}=(S^{x}-iS^{y})(S^{x}+iS^{y})=(S^{x})^{2}+(S^{y})^{2}+i[S^{x},S^{y}] \qquad \ldots \quad I\ 2.5.$$

S^{+} – kreacioni operator spina, koji povećava projekciju spina za jedinicu

S^{-} – anihilacioni operator spina, koji smanjuje projekciju spina za jedinicu

Oduzimanjem i sabiranjem I 2.4 i I 2.5. i koristeći I 2.2. dobijamo :

$$[S^{+},S^{-}]=2S^{z} \qquad \ldots \quad I\ 2.6.$$
$$\{S^{+},S^{-}\}=2[(S^{x})^{2}+(S^{y})^{2}+(S^{z})^{2}]-2(S^{z})^{2}=2S(S+1)-2(S^{z})^{2} \qquad \ldots \quad I\ 2.7.$$

Pri dobijanju izraza I 2.7. korišćena je činjenica da su svojstvene vrednosti kvadrata operatora S date kao S(S+1) što je u punoj analogiji sa teorijom orbitalnog momenta. Dobijene komutacione relacije za spinske operatore definišu tzv. kinematiku spinskih sistema.

Pošto je magnet sistem uređenih spinova na raznim čvorovima kristalne rešetke, neophodno je spinske operatore snabdeti još jednim indeksom koji označava čvor rešetke u kome se nalazi atom, npr. $\vec{S}_{\vec{n}}$ i $\vec{S}_{\vec{m}}$ su spinovi u čvorovima rešetke. Spinski operatori za razne čvorove deluju svaki u svom prostoru talasnih (vektora) funkcija i očigledno je da zbog toga za različite čvorove oni moraju da komutiraju.

Rešili smo problem kinematike spinskih operatora, sada se postavlja pitanje kakav oblik treba da ima hamiltonijan sistema uređenih spinova po čvorovima rešetke.

Žiromagnetni odnos (odnos magnetnog momenta prema mehaničkom) jednak je 2 za sopstveni moment elektrona, a 1 za orbitalni moment. Zato uzimamo da je doprinos orbitalnog momenta mali i da se makroskopski moment sastoji samo od magnetnih momenata elektrona nepopunjenih ljuski (spinova). Uzrok pojave uređenja spinova je interakcija elektrona. Znači, osnovnu ulogu u feromagnetizmu igra interakcija izmene među elektronima nepopunjenih unutrašnjih ljuski. Prvi su ovakav model predložili 1928. god. Hajzenberg i Frenkel. Ovaj model, koji je nazvan Hajzenbergov model, je osnova kvantne teorije jakog magnetizma. Ne upuštajući se dublje u analizu Hajzenbergovog modela, pokazaćemo kako se može dobiti hamiltonijan ovog modela. Hamiltonijan, kao operator energije, mora biti skalarna veličina, pa je očigledno da je hamiltonijan za dva spina na dva čvora rešetke $\vec{n}$ i $\vec{m}$ proporcionalan skalarnom proizvodu spinova $(\vec{S}_{\vec{n}}\cdot\vec{S}_{\vec{m}})$ u ovim čvorovima. Faktor proporcionalnosti je, kao što smo već videli, posledica sila izmene između elektrona i obeležava se sa $I_{\vec{n}\vec{m}}$ i naziva se integral izmene. Prema tome, pošto je za dva čvora:

$$H_{\vec{n},\vec{m}} = -\frac{1}{2} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}} \vec{S}_{\vec{m}} \qquad \dots \quad I\,2.8.$$

ukupni hamiltonijan kristala će biti suma izraza $H_{\vec{n},\vec{m}}$ po svim čvorovima rešetke:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\,\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}}\cdot\vec{S}_{\vec{m}} \quad , \quad \vec{n}\neq\vec{m} \qquad \dots \quad I\,2.9.$$

Treba napomenuti da je faktor $\frac{1}{2}$ došao usled toga što je interakcija u smeru $\vec{m}\vec{n}$ ista kao interakcija u smeru $\vec{n}\vec{m}$, pa bi bez ovog faktora energija bila udvojena. Znak minus je uzet da bi sistem imao negativnu energiju osnovnog stanja tj. da bi se nalazio u potencijalnoj jami.

Ako se posmatrani sistem nalazi u spoljašnjem magnetnom polju $\vec{\mathcal{H}}$, onda hamiltonijan I 2.9. ima dodatni član, koji predstavlja sumu energija po čvorovima, koja dolazi usled prisustva magnetnog polja. Spinovi se uvek orijentišu duž magnetnog polja, pa je energija koja dolazi usled prisustva magnetnog polja (dodatna energija) za jedan čvor rešetke data:

$$\delta H = -\mu S_{\vec{n}} \mathcal{H} = -\mu S_{\vec{n}}^{z} \mathcal{H} \qquad \ldots \text{ I 2.10.}$$

Ukupna vrednost dodatne energije za ceo kristal je jednaka sumi poslednjeg izraza po svim čvorovima rešetke:

$$\delta H = -\sum_{\vec{n}} \mu S_{\vec{n}}^{z} \mathcal{H} = -\mu \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^{z} \qquad \ldots \text{ I 2.11.}$$

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

$$H = -\mu \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^{z} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}} \cdot \vec{S}_{\vec{m}} \qquad \ldots \text{ I 2.12.}$$

μ - magnetni moment atoma dat u Borovim magnetonima

Ovaj izraz I 2.12. predstavlja hamiltonijan Hajzenbergovog izotropnog modela feromagnetnog sistema. Integrali izmene $I_{\vec{n}\vec{m}}$ su simetrične funkcije koeficijenata $\vec{n}$ i $\vec{m}$, pa možemo napisati:

$$I_{\vec{n}\vec{m}} = I_{\vec{m}\vec{n}} \qquad \ldots \text{ I 2.13.}$$

Oni zavise od intenziteta razlike $|\vec{n} - \vec{m}|$:

$$I_{\vec{n}\vec{m}} = I_{\vec{n}-\vec{m}} \qquad \ldots \text{ I 2.14.}$$

Ovo je očigledno na osnovu činjenice da je $I_{\vec{n}\vec{m}}$ došlo usled sila između elektrona koje su centralnog karaktera (Kulonovske sile).

Integrali izmene se mogu izračunati na osnovu poznavanja talasnih funkcija elektrona u nepopunjenim ljuskama. Međutim, ispostavlja se da su talasne funkcije elektrona nepopunjenih ljuski za atome vezane u kristal u toj meri definisane da nikakvo modeliranje ovih talasnih funkcija do danas nije dalo zadovoljavajući rezultat pri izračunavanju integrala izmene. Zbog toga se veličine $I_{\vec{n}\vec{m}}$ na sadašnjem stadijumu razvoja teorije uzimaju kao fenomenološki parametri i na osnovu eksperimenata se zna da su reda veličine $1000\, k_B$ za jake feromagnetike (Fe, Co i Ni), a reda veličine $100\, k_B$ za lantanide. Ovi podaci dolaze iz eksperimentalnih rezultata za temperature prelaza feromagnetika. Finija eksperimentalna istraživanja pokazuju da integrali izmene eksponencijalno opadaju sa porastom rastojanja između čvorova rešetke: $|\vec{n}-\vec{m}|$, pa se zbog toga u teoriji magnetizma aproksimacija najbližih suseda može smatrati za veoma dobru i realnu aproksimaciju.

Pošto se procesi u feromagnetiku sastoje od narušavanja uređenosti sistema spinova usled povećanja temperature ili mehaničkih dejstava, a to istovremeno znači odklanjanje z-projekcije spinova po čvorovima od maksimalne vrednosti ($S^z_{max}=S$), potrebno je hamiltonijan I 2.12. izraziti preko operatora S^+ i S^-, koji povećavaju odnosno smanjuju z-projekciju, i operatora $S-S^z$, koj predstavlja meru odstupanja z-projekcije od njene maksimalne vrednosti.

Sabiranjem i oduzimanjem jednačina I 2.3. dobijamo:

$$S^x=\frac{1}{2}(S^+ + S^-) \qquad S^y=\frac{1}{2i}(S^+ - S^-) \qquad \text{I 2.15.}$$

Hamiltonijan I 2.12. možemo transformisati, koristeći I 2.3., I 2.15. kao i sledeće relacije:

$$S^z_{\vec{n}} = S-(S-S^z_{\vec{n}})$$
$$\vec{S}_{\vec{n}} = S^x_{\vec{n}}\vec{i}+S^y_{\vec{n}}\vec{j}+S^z_{\vec{n}}\vec{k} \qquad \text{I 2.16.}$$
$$\vec{S}_{\vec{n}}\cdot\vec{S}_{\vec{m}} = S^x_{\vec{n}}S^x_{\vec{m}}+S^z_{\vec{n}}S^z_{\vec{m}}+S^y_{\vec{n}}S^y_{\vec{m}}$$

Na osnovu ovoga dobijamo:

$$H=-\mu\mathcal{H}\sum_{\vec{n}}[S-(S-S^z_{\vec{n}})]-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}I_{\vec{n}\vec{m}}(S^x_{\vec{n}}S^x_{\vec{m}}+S^y_{\vec{n}}S^y_{\vec{m}}+S^z_{\vec{n}}S^z_{\vec{m}}) \qquad \text{I 2.17.}$$

$$\vec{S}_{\vec{n}}\cdot\vec{S}_{\vec{m}}=S^x_{\vec{n}}S^x_{\vec{m}}+S^y_{\vec{n}}S^y_{\vec{m}}+S^z_{\vec{n}}S^z_{\vec{m}}=\frac{1}{2}(S^+_{\vec{n}}+S^-_{\vec{n}})\cdot\frac{1}{2}(S^+_{\vec{m}}+S^-_{\vec{m}})+\frac{1}{2i}(S^+_{\vec{n}}-S^-_{\vec{n}})\cdot\frac{1}{2i}(S^+_{\vec{m}}-S^-_{\vec{m}})+[S-(S-S^z_{\vec{n}})][S-(S-S^z_{\vec{m}})]$$
$$\vec{S}_{\vec{n}}\cdot\vec{S}_{\vec{m}}=\frac{1}{2}(S^-_{\vec{n}}S^+_{\vec{m}}+S^-_{\vec{m}}S^+_{\vec{n}})+S^2-S(S-S^z_{\vec{n}})-S(S-S^z_{\vec{m}})+(S-S^z_{\vec{n}})(S-S^z_{\vec{m}}) \qquad \text{I 2.18.}$$

Uvrštavanjem izraza I 2.18 u I 2.17. dobijamo:

$$H=-\mu\mathcal{H}S\sum_{\vec{n}}1+\mu\mathcal{H}\sum_{\vec{n}}(S-S^z_{\vec{n}})-\frac{1}{2}S^2\sum_{\vec{n}\vec{m}}I_{\vec{n}\vec{m}}+\frac{S}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}I_{\vec{n}\vec{m}}(S-S^z_{\vec{n}})+\frac{S}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}I_{\vec{n}\vec{m}}(S-S^z_{\vec{m}})-$$
$$-\frac{1}{4}\sum_{\vec{n}\vec{m}}(S^-_{\vec{n}}S^+_{\vec{m}}+S^-_{\vec{m}}S^+_{\vec{n}})-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}(S-S^z_{\vec{n}})(S-S^z_{\vec{m}}) \qquad \text{I 2.19.}$$

Pošto je $\sum_{\vec n} 1 = N$, gde je N - broj atoma u kristalu, dobijamo:

a) $\sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n - \vec m} = \sum_{\vec n \vec l} I_{\vec l} = \sum_{\vec l} I_{\vec l} \sum_{\vec n} 1 = N \sum_{\vec l} I_{\vec l} = N \cdot J_0 \,, \quad J_0 = \sum_{\vec l} I_{\vec l} \,, \ \vec l = \vec n - \vec m$

b) $\sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n \vec m}(S - S^z_{\vec n}) = \sum_{\vec n \vec l} I_{\vec l}(S - S^z_{\vec n}) = \sum_{\vec n}(S - S^z_{\vec n}) \sum_{\vec l} I_{\vec l} = J_0 \sum_{\vec n}(S - S^z_{\vec n})$

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

$\vec m \rightleftarrows \vec n$

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

$\vec m \rightleftarrows \vec n$

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

Koristeći a, b, c i d, jednačina I 2.19. dobija oblik:

$$H = -\mu S N \mathcal{H} + \mu \mathcal{H} \sum_{\vec n}(S - S^z_{\vec n}) - \frac{1}{2} S^2 N J_0 + \frac{S}{2} J_0 \sum_{\vec n}(S - S^z_{\vec n}) + \frac{S}{2} J_0 \sum_{\vec n}(S - S^z_{\vec n}) -$$
$$- \frac{1}{4} \sum_{\vec n \vec m} 2 I_{\vec n \vec m} S^-_{\vec n} S^+_{\vec m} - \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n \vec m}(S - S^z_{\vec n})(S - S^z_{\vec m})$$

$$H = -N\left(\mu \mathcal{H} S + \frac{1}{2} J_0 S^2\right) + (\mu \mathcal{H} + S J_0) \sum_{\vec n}(S - S^z_{\vec n}) - \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n \vec m} S^-_{\vec n} S^+_{\vec m} - \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n \vec m}(S - S^z_{\vec n})(S - S^z_{\vec m})$$

$$H = H_0 + H_2 + H_4 \qquad \dots \quad I\ 2.20.$$

gde smo uveli oznake:

$$H_0 = -N\left(\mu \mathcal{H} S + \frac{1}{2} J_0 S^2\right) \qquad \dots \quad I\ 2.21.$$

$$H_2 = (\mu \mathcal{H} + S J_0) \sum_{\vec n}(S - S^z_{\vec n}) - \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n \vec m} S^-_{\vec n} S^+_{\vec m} \qquad \dots \quad I\ 2.22.$$

$$H_4 = -\frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m} I_{\vec n \vec m}(S - S^z_{\vec n})(S - S^z_{\vec m}) \qquad \dots \quad I\ 2.23.$$

Dobili smo hamiltonijan feromagnetika (I 2.20.) izražen preko spinskih operatora kreacije i anihilacije S^+ i S^- (spinski hamiltonijan). H_0 - je energija osnovnog stanja feromagnetika, to je ona energija kada su sve z-projekcije spinova u svim čvorovima jednake (S).

Operator $S - S^z_{\vec n}$ daje nam meru odstupanja z-projekcije spina od njene maksimalne vrednosti. Kada se operatori S^+ i S^- primene na neku funkciju stanja, oni povećavaju ili smanjuju vrednost z-projekcije. Svojstvene vrednosti operatora S^z mogu biti:

$S, S-1, S-2, \dots, -S+2, -S+1, -S$, a ima ih $2S+1$.

Iz izraza I 2.6. ($[S^+_{\vec{n}}, S^-_{\vec{m}}] = 2S^z_{\vec{n}}\delta_{\vec{n}\vec{m}}$) se vidi da spinski operatori ne zadovoljavaju ni bozonske ni fermionske komutacione relacije, pa zbog toga uvodimo Blohovu aproksimaciju, pomoću koje spinske operatore zamenjujemo Boze operatorima γ^+ i γ, na sledeći način:

$$S^+_{\vec{n}} = \sqrt{2S}\,\gamma_{\vec{n}}$$
$$S^-_{\vec{n}} = \sqrt{2S}\,\gamma^+_{\vec{n}} \qquad \dots \text{I 2.24.}$$
$$S - S^z_{\vec{n}} = \gamma^+_{\vec{n}}\gamma_{\vec{n}}$$

$\gamma^+_{\vec{n}}$ - kreacioni boze operator, on delujući na stanja sa n bozona kreira jednu kvazičesticu: $\gamma^+_{\vec{n}}|n> = \sqrt{n+1}\,|n+1>$ . . . . . I 2.25.

$\gamma_{\vec{n}}$ - anihilacioni boze operator, on delujući na stanja sa n bozona uništava jednu kvazičesticu: $\gamma_{\vec{n}}|n> = \sqrt{n}\,|n-1>$ . . . . I 2.26.

Komutacione relacije za boze operatore su:

$$[\gamma_{\vec{n}}, \gamma^+_{\vec{m}}] = \delta_{\vec{n},\vec{m}}\ , \quad [\gamma_{\vec{n}}, \gamma_{\vec{m}}] = [\gamma^+_{\vec{n}}, \gamma^+_{\vec{m}}] = 0 \qquad \dots \text{I 2.27.}$$

Zamenom izraza I 2.24. u hamiltonijan Hajzenbergovog modela (spinski hamiltonijan I 2.20), dobija se hamiltonijan u Blohovoj aproksimaciji (bozonski hamiltonijan): $H = H_0 + H_2$

H_4 - smo zanemarili, jer je: $(S-S^z_{\vec{n}})(S-S^z_{\vec{m}}) = 0$, pošto nas Blohova aproksimacija obavezuje da odbacimo u računu sve kvadratne članove po $\gamma^+\gamma$.

$$H = H_0 + (\mu\mathcal{H} + SJ_0)\sum_{\vec{n}}\gamma^+_{\vec{n}}\gamma_{\vec{n}} - S\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}\gamma^+_{\vec{n}}\gamma_{\vec{m}} \qquad \dots \text{I 2.28.}$$

gde je:

$$H_2 = (\mu\mathcal{H} + SJ_0)\sum_{\vec{n}}\gamma^+_{\vec{n}}\gamma_{\vec{n}} - S\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}\gamma^+_{\vec{n}}\gamma_{\vec{m}} \qquad \dots \text{I 2.29.}$$

Videli smo da je maksimalna vrednost z-projekcije: S, a minimalna: - S, prema tome operator $S-S^z$ može da uzme sledeće vrednosti: 0, 1, 2, ... , 2S. Međutim, bozonski okupacioni broj ($\gamma^+\gamma$), koji je zamenio operator $S-S^z$, može da ima beskonačno mnogo vrednosti : $0,1,2,3,\ldots,\infty$. To znači, da je Blohova aproksimacija dobra dok je broj bozona manji ili najviše jednak $2S$ tj. $\gamma^+\gamma \leq 2S$, jer za veći broj od $2S$ ne postoje odgovarajuća fizička stanja.

Pošto se ekscitiranost magnetnog kristala meri brojem bozona u feromagnetiku, očigledno je da se Blohova aproksimacija može primeniti samo na slabo ekscitirani sistem, odnosno na sistem na niskim temperaturama, za koji bozonski okupacioni brojevi uzimaju najniže vrednosti $(0,1,2,\ldots,2S)$. Na visokim temperaturama, kada je sistem jako ekscitiran, Blohova aproksimacija se ne sme primeniti, jer bozonski okupacioni broj uzima vrednosti iznad $2S$, a to vodi u nefizička stanja.

I 4. Magnetizacija na niskim temperaturama

Elementarna ekscitacija u feromagnetiku se može slikovito predstaviti na sledeći način. Jedan spin iz sistema paralelnih spinova usled povećanja temperature ili nekog spoljašnjeg mehaničkog uzroka promeni svoju z-projekciju, odnosno njegova projekcija odstupa od maksimalne vrednosti. Pošto su u kristalu spinovi među sobom povezani silama izmene, ekscitacija jednog spina prenese se na susedni spin, sa ovog opet na sledeći itd. Posle izvesnog vremena svi spinovi u sistemu manje ili više odklone odklone odklone svoju z-projekciju od njene maksimalne vrednosti. Ovakav talas „zaljuljanih" spinova naziva se spinski talas i predstavlja ekscitaciju vezanog kolektiva spinova. Na osnovu ove predstave, ekscitacije u feromagnetiku nazivaju se spinski talasi, a ako su one kvantovane, tada se spinski talasi nazivaju magnoni. Energija spinskog talasa zavisi od njegovog impulsa (kvazi-impulsa kristalne rešetke), a ta zavisnost se naziva zakon disperzije za magnone

Da bismo našli zakon disperzije mi ćemo hamiltonijan I 2.29. dijagonalizovati prelazeći od Boze operatora u prostoru direktne rešetke ($\gamma^+_{\vec n}$ i $\gamma_{\vec n}$) na Boze operatore u prostoru recipročne rešetke ($\gamma^+_{\vec k}$ i $\gamma_{\vec k}$, gde je $\vec k$ - talasni vektor) Furije transformacijom :

$$\gamma_{\vec n} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec k}\gamma_{\vec k}\, e^{i\vec k\vec n}\,, \quad \gamma^+_{\vec n} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec k}\gamma^+_{\vec k}\, e^{-i\vec k\vec n} \qquad \ldots \quad I\,3.1.$$

Zamenom I 3.1. u hamiltonijan u Blohovoj aproksimaciji (I 2.29.), koja je dobra samo na niskim temperaturama, dobijamo:

$$H_2 = \frac{\mu\mathcal{H}+SI}{N}\sum_{\vec k\vec k'}\gamma^+_{\vec k'}\gamma_{\vec k}\sum_{\vec n} e^{i\vec n(\vec k-\vec k')} - \frac{S}{N}\sum_{\vec k\vec k'}\gamma^+_{\vec k'}\gamma_{\vec k}\sum_{\vec n\vec m} I_{\vec n-\vec m}\, e^{i(\vec k\vec m-\vec k'\vec n)} \qquad \ldots \quad I\,3.2.$$

Pošto je: $\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} e^{i\vec{k}\vec{m}-i\vec{k}'\vec{n}} = \sum_{\vec{\ell}} I_{\vec{\ell}} e^{-i\vec{k}\vec{\ell}} \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{n}(\vec{k}-\vec{k}')}$ . . . I 3.3.

$$\sum_{\vec{\ell}} I_{\vec{\ell}} e^{-i\vec{k}\vec{\ell}} = \sum_{\vec{n}} I_{\vec{n},0} e^{-i\vec{k}\vec{n}} = \mathcal{J}_{\vec{k}} \qquad \text{I 3.4.}$$

$$\sum_{\vec{n}} e^{in(\vec{k}-\vec{k}')} = N\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \qquad \text{I 3.5.}$$

Koristeći I 3.3., I 3.4. i I 3.5. konačno dobijamo:

$$H_2 = \sum_{\vec{k}} [\mu\mathcal{H} + S\mathcal{J}_0 - S\mathcal{J}_{\vec{k}}]\gamma^+_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}} \qquad \text{I 3.6.}$$

Zakon disperzije odnosno energiju jedne kvazi-čestice ćemo dobiti kao parcijalni izvod H_2 po okupacionom broju $\gamma^+_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}}$:

$$E_{\vec{k}} = \frac{\partial H_2}{\partial \gamma^+_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}}} = \mu\mathcal{H} + S(\mathcal{J}_0 - \mathcal{J}_{\vec{k}}) \qquad \text{I 3.7.}$$

Za trodimenzioni kristal proste kubne strukture u aproksimaciji najbližih suseda je očigledno:

$$\mathcal{J}_0 = \sum_{\vec{\ell}} I_{\vec{\ell}} = 6I \qquad , \quad \vec{n} = n_x C + n_y C + n_z C$$

$$\mathcal{J}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} I_{\vec{n},0} e^{-i\vec{k}\vec{n}} = (I_{01})_x e^{-ick_x} + (I_{0,-1})_x e^{ick_x} + (I_{01})_y e^{-ick_y} + (I_{0,-1})_y e^{ick_y} +$$

$$+ (I_{01})_z e^{-ick_z} + (I_{0,-1})_z e^{ick_z} = 2I(\cos k_x C + \cos k_y C + \cos k_z C)$$

gde je I - vrednost integrala izmene za najbliže susede, a C - konstanta rešetke. Sada možemo zakon disperzije pisati:

$$E_{\vec{k}} = \mu\mathcal{H} + 6SI - 2SI(\cos k_x C + \cos k_y C + \cos k_z C) \qquad \text{I 3.8}$$

Ako se ograničimo na oblast malih talasnih vektora: $k_i C \ll 1$, $i = x, y, z$, tada se svaki od kosinusa može razviti u red po formuli:

$$\cos k_i C \cong 1 - \tfrac{1}{2} k^2 C^2 \qquad \text{I 3.9.}$$

Na osnovu ovoga, za male talasne vektore, zakon disperzije za magnone postaje:

$$E_{\vec{k}} = \mu \mathcal{H} + 6SI - 2SI\left(1 - \tfrac{1}{2}k_x^2C^2 + 1 - \tfrac{1}{2}k_y^2C^2 + 1 - \tfrac{1}{2}k_z^2C^2\right)$$

$$E_{\vec{k}} = \mu \mathcal{H} + SIC^2k^2 \qquad \ldots \qquad I\ 3.10.$$

$$E_{\vec{k}} = \mu \mathcal{H} + SIC^2k^2 \frac{2\hbar^2}{2\hbar^2} = \mu \mathcal{H} + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \frac{1}{\frac{\hbar^2}{2SIC^2}} = \mu \mathcal{H} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$E_{\vec{k}} = \mu \mathcal{H} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \qquad \ldots \qquad I\ 3.11.$$

gde je : $\quad m^* = \dfrac{\hbar^2}{2SIC^2}$ – efektivna masa magnona $\quad \ldots \quad I\ 3.12.$

Prema tome za male talasne vektore spinski talas za magnon se ponaša kao slobodna čestica sa masom m^*.

U slučaju da je spoljašnje magnetno polje jednako nuli, obrazac $I\ 3.11.$ se može napisati :

$$E_{\vec{k}} = SIC^2k^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \qquad \ldots \qquad I\ 3.13.$$

Kao što vidimo, energija spinskih talasa u oblasti malih talasnih vektora, predstavlja kinetičku energiju nekakvih kvazičestica (magnona) sa efektivnom masom $m^* = \dfrac{\hbar^2}{2SIC^2}$.

Pri objašnjavanju feromagnetika upoznali smo se sa pojmovima spontana magnetizacija i magnetizacija zasićenja, a sada ćemo na osnovu nađenog zakona disperzije ($I\ 3.10$ i $I\ 3.11.$) izvesti izraz za relativnu magnetizaciju na jedan čvor rešetke na niskim temperaturama.

Relativna magnetizacija se definiše :

$$\sigma = \frac{\langle S_{\vec{n}}^z \rangle}{S} = \frac{\langle S - \gamma_{\vec{n}}^+ \gamma_{\vec{n}} \rangle}{S} = 1 - \frac{1}{S} \langle \gamma_{\vec{n}}^+ \gamma_{\vec{n}} \rangle \qquad \ldots \qquad I\ 3.14.$$

Koristili smo da je prema $I\ 2.24.$: $\quad S - S_{\vec{n}}^z = \gamma_{\vec{n}}^+ \gamma_{\vec{n}}$

Simbol $\langle\ \rangle$ označava usrednjavanje po Gibsovom ansamblu tj. :

$$\langle A \rangle = \frac{Sp\, A\, e^{-\beta H}}{Sp\, e^{-\beta H}} \qquad \ldots \qquad I\ 3.15.$$

gde je H - hamiltonijan sistema, a β - recipročna vrednost temperature u energetskim jedinicama:

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \equiv \frac{1}{\theta}, \quad \theta = k_B T \qquad \ldots \quad I\ 3.16.$$

Koristeći I 3.1. dobijamo:

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

$$\langle \gamma_{\vec{n}}^{+} \gamma_{\vec{n}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\frac{E_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} \qquad \ldots \quad I\ 3.17.$$

Ako spinske talase smatramo nezavisnim, broj magnona u stanju određene vrednosti $\vec{k}$, dat je Boze - Ajnštajnovom statistikom, koju smo već iskoristili pri dobijanju I 3.17, a koja je data sa:

$$\langle \gamma_{\vec{k}}^{+} \gamma_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} \qquad \ldots \quad I\ 3.18.$$

Sa sume prelazimo na integrale po pravilu: $\sum_{\vec{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k}$, gde je $V = N \cdot C^3$ - zapremina kristala, i uvrštavamo I 3.17. u I 3.14., pa možemo pisati:

$$\sigma = 1 - \frac{1}{SN} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\frac{E_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} = 1 - \frac{1}{SN} \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\vec{k}}{e^{\frac{E_{\vec{k}}}{\theta}} - 1}$$

$E_{\vec{k}}$ zamenimo prema I 3.10, a integral rešavamo u sfernim koordinatama:

$$\sigma = 1 - \frac{1}{SN} \frac{NC^3}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \int_0^{k_{max}} \frac{k^2 \, dk}{e^{\frac{\mu\mathcal{H} + SIC^2k^2}{\theta}} - 1}$$, uvodimo smenu: $ck = q$

$$\sigma = 1 - \frac{1}{S} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{q_{max}} \frac{q^2 \, dq}{e^{\frac{\mu\mathcal{H} + SIq^2}{\theta}} - 1}$$, zatim uvodimo smenu: $x = \frac{SI q^2}{\theta}$, $q = \left(\frac{\theta}{SI}\right)^{1/2} \cdot x^{1/2}$

Pošto su temperature niske uzima se aproksimacija: $x_r = \frac{SI q_{max}^2}{\theta} \approx \infty$

$$\sigma = 1 - \frac{1}{4\pi^2 S} \left(\frac{\theta}{SI}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}} \, dx}{e^{x + \frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}} - 1} \qquad I\ 3.19.$$

Ovaj integral rešavamo na taj način što ga svodimo na gama funkciju (Γ):

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{e^{x+\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}} - 1} = \int_0^{\infty} dx \, x^{\frac{1}{2}} \frac{e^{-(x+\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta})}}{1 - e^{-(x+\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta})}} = \int_0^{\infty} dx \, x^{\frac{1}{2}} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-m(x+\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta})} = \sum_{m=1}^{\infty} e^{-m\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}} \int_0^{\infty} dx \, x^{\frac{1}{2}} e^{-mx}$$

Posle smene: $mx = y$, $x^{\frac{1}{2}} dx = \frac{1}{m^{3/2}} y^{\frac{1}{2}} dy$, dobijamo integral:

$$\sum_{m=1}^{\infty}\frac{e^{-\frac{m\mu\mathcal{H}}{\theta}}}{m^{\frac{3}{2}}}\int_0^{\infty}dy\,y^{\frac{1}{2}}e^{-y}=\sum_{m=1}^{\infty}\frac{e^{-\frac{m\mu\mathcal{H}}{\theta}}}{m^{\frac{3}{2}}}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$$

Pošto je: $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$, imamo da je:

$$\int_0^{\infty}\frac{x^{\frac{1}{2}}dx}{e^{x+\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}}-1}=\frac{\sqrt{\pi}}{2}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{e^{-\frac{m\mu\mathcal{H}}{\theta}}}{m^{\frac{3}{2}}} \quad \ldots \quad I\ 3.20.$$

Zamenom I 3.20 u I 3.19 dobijamo izraz za magnetizaciju:

$$\sigma=1-\frac{1}{4\pi^2 S}\left(\frac{\theta}{SI}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{e^{-\frac{m\mu\mathcal{H}}{\theta}}}{m^{\frac{3}{2}}}$$

$$\sigma=1-\frac{1}{S}Z_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}\right)\tau^{\frac{3}{2}} \quad \ldots \quad I\ 3.21.$$

gde smo uveli oznake: $Z_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\mu\mathcal{H}}{\theta}\right)=\sum_{m=1}^{\infty}\frac{e^{-\frac{m\mu\mathcal{H}}{\theta}}}{m^{\frac{3}{2}}}$

$$\tau=\frac{\theta}{4\pi SI}\ ,\quad \theta=k_B T$$

U slučaju da je $\mathcal{H}=0$, magnetizacija na niskim temperaturama (I 3.21.) je:

$$\sigma=1-\frac{1}{S}\zeta_{\frac{3}{2}}\,\tau^{\frac{3}{2}} \quad \ldots \quad I\ 3.22.$$

gde je: $\zeta_{\frac{3}{2}}=\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m^{3/2}}$ – Rimanova ceta funkcija

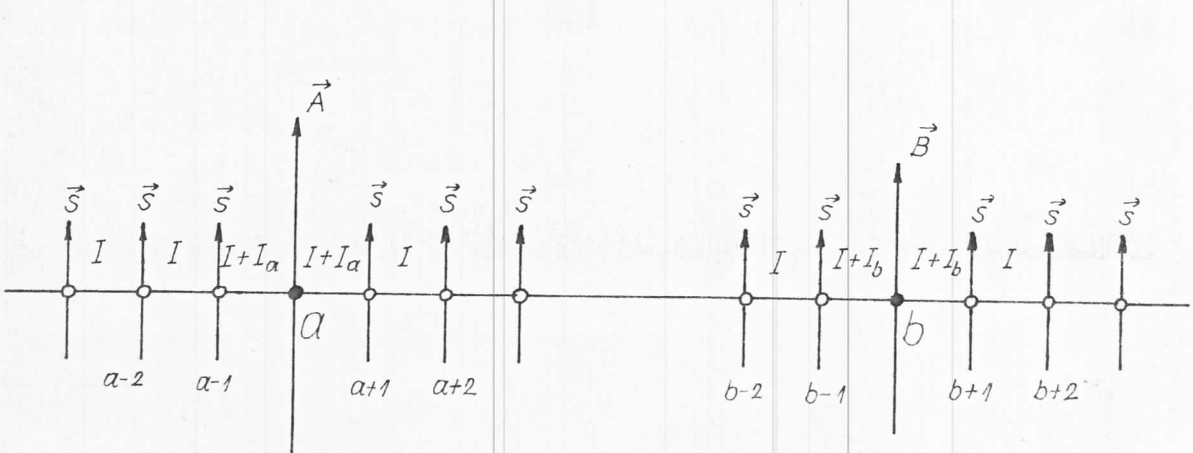
Izrazi I 3.21. i I 3.22. predstavljaju poznati „Blohov zakon $T^{\frac{3}{2}}$".

Kao što vidimo na niskim temperaturama magnetizacija feromagnetika opada kao $T^{\frac{3}{2}}$, a ovo je posledica kvadratnog zakona disperzije za magnone. Znamo da je kod fonona, gde je energija linearna funkcija impulsa, srednji fononski broj proporcionalan trećem stepenu temperature, pa magnetizacija ima sasvim drugačiju zavisnost nego magnetizacija spinskih talasa.

II 1. Hamiltonijan jednodimenzionalne rešetke sa dve primese

Dosadašnja razmatranja se odnose na kristal sa idealnom strukturom (beskonačni kristal čije su sve translacione karakteristike invarijantne). Kada je u kristalu narušena simetrija (npr. kristal ima primese tj. umetnute atome, povišena temperatura kristala i dr.), tada je i translaciona invarijantnost narušena, zakon održanja impulsa prestaje da važi, a na mestima narušavanja strukture u računu treba uvek uzimati u obzir dopunske granične uslove. Mi ćemo razmatrati kristal u kome se nalaze dve primese, koje imaju svoje posebne spinove, koji interaguju silama izmene sa spinovima osnovne rešetke. Te sile izmene se razlikuju od sila izmene za dva identična spina jednodimenzionalne rešetke. Ispitivanje strukture sa narušenom simetrijom ima veći značaj nego analiza idealne kristalne strukture, jer praktično idealne strukture i nema.

Posmatrajmo sistem spinova u jednodimenzionalnoj rešetci (sl. 4.) Neka se na mestu a nalazi prvi primesni atom, čiji je spin obeležen sa $\vec{A}_a$, a na mestu b se nalazi drugi primesni atom sa spinom $\vec{B}_b$. Znači, proučavamo sistem spinova kristalne strukture sa dva defekta.



Sl. 4.

Hamiltonijan idealnog kristala, rešetke bez primesa dat je relacijom I 2.9. koja glasi:

$$H_{id} = -\frac{1}{2}\sum_{nm} I_{nm}\vec{S}_n \cdot \vec{S}_m$$

Za najbliže susede on ima oblik:

$$H_{id} = -\frac{1}{2} I \sum_{n} \vec{S}_n (\vec{S}_{n+1} + \vec{S}_{n-1}) \quad \ldots \quad II\ 1.1.$$

I - integral izmene za identične spinove (za najbliže susede)

$\vec{n}$ - vektori čvorova rešetke, nema potrebe strelicom ih označavati, jer razmatramo jednodimenzionalnu rešetku.

Idealni hamiltonijan za naš slučaj je:

$$H_{id} = -\frac{1}{2} I \sum_{n=-\frac{N}{2}+1}^{a-2} \vec{S}_{\vec{n}} (\vec{S}_{n+1} + \vec{S}_{n-1}) - \frac{1}{2} I \sum_{n=a+2}^{b-2} \vec{S}_n (\vec{S}_{n+1} + \vec{S}_{n-1}) - \frac{1}{2} I \sum_{n=b+2}^{N/2} \vec{S}_n (\vec{S}_{n+1} + \vec{S}_{n-1}) -$$

$$- \frac{1}{2} I \vec{S}_a (\vec{S}_{a+1} + \vec{S}_{a-1}) - \frac{1}{2} I \vec{S}_{a-1} (\vec{S}_a + \vec{S}_{a-2}) - \frac{1}{2} I \vec{S}_{a+1} (\vec{S}_{a+2} + \vec{S}_a) -$$

$$- \frac{1}{2} I \vec{S}_b (\vec{S}_{b+1} + \vec{S}_{b-1}) - \frac{1}{2} I \vec{S}_{b-1} (\vec{S}_b + \vec{S}_{b-2}) - \frac{1}{2} I \vec{S}_{b+1} (\vec{S}_{b+2} + \vec{S}_b) \quad \ldots \quad II\ 1.2.$$

$\vec{S}_a$ i $\vec{S}_b$ - spinovi na mestima a i b za idealnu kristalnu strukturu (bez primesa)

U hamiltonijanu II 1.2. svi spinovi su paralelni i iste su veličine, a integral izmene (I) ima istu vrednost između svaka dva spina. Međutim, u konkretnom slučaju (sl. 4.), zbog prisustva primesa u magnetnom materijalu, hamiltonijan dobija novi oblik ($H_{def.}$), jer se moraju uzeti u račun interakcije spina $\vec{A}_a$ sa sa susednim spinovima mesta a $(I+I_a)$, kao i interakcije spina $\vec{B}_b$ sa susednim spinovima mesta b $(I+I_b)$. Uzimajući u obzir sve interakcije između spinova, hamiltonijan deformacije (H_{def}) ima oblik:

$$H_{def.} = -\frac{1}{2}(I+I_a)\vec{A}_a(\vec{S}_{a+1} + \vec{S}_{a-1}) - \frac{1}{2}(I+I_a)\vec{S}_{a-1}\vec{A}_a - \frac{1}{2} I \vec{S}_{a-1}\vec{S}_{a-2} - \frac{1}{2}(I+I_a)\vec{S}_{a+1}\vec{A}_a - \frac{1}{2} I \vec{S}_{a+1}\vec{S}_{a+2} -$$

$$- \frac{1}{2}(I+I_b)\vec{B}_b(\vec{S}_{b+1} + \vec{S}_{b-1}) - \frac{1}{2}(I+I_b)\vec{S}_{b-1}\vec{B}_b - \frac{1}{2} I \vec{S}_{b-1}\vec{S}_{b-2} - \frac{1}{2}(I+I_b)\vec{S}_{b+1}\vec{B}_b - \frac{1}{2} I \vec{S}_{b+1}\vec{S}_{b+2} -$$

$$-\frac{1}{2}I\sum_{n=-\frac{N}{2}+1}^{a-2}\vec{S}_n(\vec{S}_{n+1}+\vec{S}_{n-1})-\frac{1}{2}I\sum_{n=a+2}^{b-2}\vec{S}_n(\vec{S}_{n+1}+\vec{S}_{n-1})-\frac{1}{2}I\sum_{n=b+2}^{\frac{N}{2}}\vec{S}_n(\vec{S}_{n+1}+\vec{S}_{n-1})-$$

$$-\frac{1}{2}I\vec{S}_a(\vec{S}_{a+1}+\vec{S}_{a-1})-\frac{1}{2}I\vec{S}_{a-1}(\vec{S}_a+\vec{S}_{a-2})-\frac{1}{2}I\vec{S}_{a+1}(\vec{S}_{a+2}+\vec{S}_a)-$$

$$-\frac{1}{2}I\vec{S}_b(\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_{b-1})-\frac{1}{2}I\vec{S}_{b-1}(\vec{S}_b+\vec{S}_{b-2})-\frac{1}{2}I\vec{S}_{b+1}(\vec{S}_{b+2}+\vec{S}_b)+$$

$$+\frac{1}{2}I\vec{S}_a(\vec{S}_{a+1}+\vec{S}_{a-1})+\frac{1}{2}I\vec{S}_{a-1}(\vec{S}_a+\vec{S}_{a-2})+\frac{1}{2}I\vec{S}_{a+1}(\vec{S}_{a+2}+\vec{S}_a)+$$

$$+\frac{1}{2}I\vec{S}_b(\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_{b-1})+\frac{1}{2}I\vec{S}_{b-1}(\vec{S}_b+\vec{S}_{b-2})+\frac{1}{2}I\vec{S}_{b+1}(\vec{S}_{b+2}+\vec{S}_b) \quad \ldots \quad \text{II } 1.3.$$

Hamiltonijan kristala sa primesama smo dopunili do idealne strukture, dodavši relaciji II 1.3. poslednja dva reda. Tada je :

$$H_{def.}=H_{id.}+H_{int.} \quad \ldots \quad \text{II } 1.4.$$

Kako je H_{id} dato relacijom II 1.2., konstatujemo na osnovu II 1.3 i II 1.4. da je :

$$H_{int}=-\frac{1}{2}(I+I_a)\vec{A}_a(\vec{S}_{a+1}+\vec{S}_{a-1})+\frac{1}{2}I\vec{S}_a(\vec{S}_{a+1}+\vec{S}_{a-1})-\frac{1}{2}(I+I_a)\vec{S}_{a-1}\vec{A}_a-\frac{1}{2}I\vec{S}_{a-1}\vec{S}_{a-2}+\frac{1}{2}I\vec{S}_{a-1}(\vec{S}_a+\vec{S}_{a-2})-$$

$$-\frac{1}{2}(I+I_a)\vec{S}_{a+1}\vec{A}_a-\frac{1}{2}I\vec{S}_{a+1}\vec{S}_{a+2}+\frac{1}{2}I\vec{S}_{a+1}(\vec{S}_{a+2}+\vec{S}_a)-$$

$$-\frac{1}{2}(I+I_b)\vec{B}_b(\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_{b-1})+\frac{1}{2}I\vec{S}_b(\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_{b-1})-\frac{1}{2}(I+I_b)\vec{S}_{b-1}\vec{B}_b-\frac{1}{2}I\vec{S}_{b-1}\vec{S}_{b-2}+\frac{1}{2}I\vec{S}_{b-1}(\vec{S}_b+\vec{S}_{b-2})-$$

$$-\frac{1}{2}(I+I_b)\vec{S}_{b+1}\vec{B}_b-\frac{1}{2}I\vec{S}_{b+1}\vec{S}_{b+2}+\frac{1}{2}I\vec{S}_{a+1}(\vec{S}_{b+2}+\vec{S}_b) \quad \ldots \quad \text{II } 1.5.$$

Pošto je :

$$H_{int}=H_{int}^{(a)}+H_{int}^{(b)} \quad \ldots \quad \text{II } 1.6.$$

gde je $H_{int}^{(a)}$ – hamiltonijan interakcije feromagneta sa primesom u čvoru rešetke a, iz II 1.5. dobijamo :

$$H_{int}^{(a)}=-\frac{1}{2}I(\vec{A}_a\vec{S}_{a+1}+\vec{A}_a\vec{S}_{a-1}+\vec{S}_{a-1}\vec{A}_a+\vec{S}_{a+1}\vec{A}_a)-\frac{1}{2}I_a(\vec{A}_a\vec{S}_{a+1}+\vec{A}_a\vec{S}_{a-1}+\vec{S}_{a-1}\vec{A}_a+\vec{S}_{a+1}\vec{A}_a)+ \quad \text{II } 1.7.$$

$$+\frac{1}{2}I(\vec{S}_a\vec{S}_{a+1}+\vec{S}_a\vec{S}_{a-1}-\vec{S}_{a-1}\vec{S}_{a-2}+\vec{S}_{a-1}\vec{S}_a+\vec{S}_{a-1}\vec{S}_{a-2}-\vec{S}_{a+1}\vec{S}_{a+2}+\vec{S}_{a+1}\vec{S}_{a+2}+\vec{S}_{a+1}\vec{S}_a)$$

$$H_{int}^{(b)}=-\frac{1}{2}I(\vec{B}_b\vec{S}_{b+1}+\vec{B}_b\vec{S}_{b-1}+\vec{S}_{b-1}\vec{B}_b+\vec{S}_{b+1}\vec{B}_b-\frac{1}{2}I_b(\vec{B}_b\vec{S}_{b+1}+\vec{B}_b\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_{b-1}\vec{B}_b+\vec{S}_{b+1}\vec{B}_b)+$$

$$+\frac{1}{2}I(\vec{S}_b\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_b\vec{S}_{b-1}-\vec{S}_{b-1}\vec{S}_{b-2}+\vec{S}_{b-1}\vec{S}_b+\vec{S}_{b-1}\vec{S}_{b-2}-\vec{S}_{b+1}\vec{S}_{b+2}+\vec{S}_{b+1}\vec{S}_{b+2}+\vec{S}_{b+1}\vec{S}_b \quad \text{II } 1.8.$$

Za čvor kristalne rešetke a sa prvom primesom, interakcije između spinova $\vec{A}_a$ i $\vec{S}_{a+1}$ i interakcije između spinova $\vec{S}_{a+1}$ i $\vec{A}_a$ su jednake :

$$\vec{A}_a \vec{S}_{a+1} = \vec{S}_{a+1} \vec{A}_a , \quad [\vec{A}_a , \vec{S}_{a+1}] = 0 , \text{ a takođe je:}$$

$$\vec{A}_a \vec{S}_{a-1} = \vec{S}_{a-1} \vec{A}_a , \quad [\vec{A}_a , \vec{S}_{a-1}] = 0 \qquad \text{II } 1.9.$$

$$\vec{S}_a \vec{S}_{a+1} = \vec{S}_{a+1} \vec{S}_a , \quad [\vec{S}_a , \vec{S}_{a+1}] = 0$$

Analogne relacije važe za čvor rešetke b (mesto druge primese) :

$$\vec{B}_b \vec{S}_{b+1} = \vec{S}_{b+1} B_b , \quad [\vec{B}_b , \vec{S}_{b+1}] = 0$$

$$\vec{B}_b \vec{S}_{b-1} = \vec{S}_{b-1} \vec{B}_b , \quad [\vec{B}_b , \vec{S}_{b-1}] = 0 \qquad \text{II } 1.10.$$

$$\vec{S}_b \vec{S}_{b+1} = \vec{S}_{b+1} \vec{S}_b , \quad [\vec{S}_b , \vec{S}_{b+1}] = 0$$

U II 1.7. primenimo II 1.9. , a u II 1.8. primenimo II 1.10. i nakon prostih matematičkih transformacija dobijamo :

$$H_{int}^{(a)} = -(I+I_a)\vec{A}_a(\vec{S}_{a+1}+\vec{S}_{a-1}) + I\vec{S}_a(\vec{S}_{a+1}+\vec{S}_{a-1}) \qquad \text{II } 1.11.$$

$$H_{int}^{(b)} = -(I+I_b)\vec{B}_b(\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_{b-1}) + I\vec{S}_b(\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_{b-1}) \qquad \text{II } 1.12$$

$$H_{int}^{(a)} = \{I\vec{S}_a - (I+I_a)\vec{A}_a\}\{\vec{S}_{a+1}+\vec{S}_{a-1}\} \qquad \text{II } 1.13.$$

$$H_{int}^{(b)} = \{I\vec{S}_b - (I+I_b)\vec{B}_b\}\{\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_{b-1}\} \qquad \text{II } 1.14.$$

Prema II 1.6., II 1.12. i II 1.14. ukupni hamiltonijan interakcije jednodimenzionalne rešetke sa dve primese je :

$$H_{int} = \{I\vec{S}_a - (I+I_a)\vec{A}_a\}\{\vec{S}_{a+1}+\vec{S}_{a-1}\} + \{IS_b - (I+I_b)\vec{B}_b\}\{\vec{S}_{b+1}+\vec{S}_{b-1}\} \qquad \text{II } 1.15.$$

Zbog prisustva primesa ili porasta temperature rešetke, z-projekcija spina se odklanja od maksimalne vrednosti. Za izučavanje pojava u feromagnetiku treba što tačnije odrediti veličinu ovog otklanjanja spina u funkciji uzroka koji je doveo do promene projekcije spina.
Idealni hamiltonijan ćemo izraziti preko operatora ; S^+, S^-, A^+, A^-, B^+ i B^-, koji menjaju vrednost z-projekcije, a izražavaju realni fizički proces

u feromagnetiku i preko operatora: $S-S^z$, $A-A^z$ i $B-B^z$, koji predstavljaju meru odstupanja z-projekcija spinova ($\vec S, \vec A$ i $\vec B$) od njihovih maksimalnih vrednosti.

Najpre ćemo na osnovu I 2.16. i I 2.15. odrediti skalarni proizvod spinova $\vec A$ i $\vec S$:

$$\vec A\cdot\vec S = (A^x\vec i + A^y\vec j + A^z\vec k)(S^x\vec i+S^y\vec j+S^z\vec k) = A^xS^x+A^yS^y+A^zS^z =$$

$$= \frac{1}{2}(A^++A^-)\cdot\frac{1}{2}(S^++S^-)+\frac{1}{2i}(A^+-A^-)\cdot\frac{1}{2i}(S^+-S^-)+[A-(A-A^z)][S-(S-S^z)] =$$

$$= \frac{1}{4}(A^++A^-)(S^++S^-)-\frac{1}{4}(A^+-A^-)(S^+-S^-)+AS-A(S-S^z)-S(A-A^z)+(A-A^z)(S-S^z)=$$

$$\vec A\cdot\vec S = \frac{A^-S^++A^+S^-}{2}+AS-A(S-S^z)-S(A-A^z)+(A-A^z)(S-S^z) \quad \dots \quad \text{II } 1.16.$$

Analogno kao i II 1.16. dobijamo:

$$\vec B\cdot\vec S = \frac{B^-S^++B^+S^-}{2}+BS-B(S-S^z)-S(B-B^z)+(B-B^z)(S-S^z) \quad \dots \quad \text{II } 1.17.$$

$$\vec S\cdot\vec S = \frac{S^-S^++S^+S^-}{2}+S^2-S(S-S^z)-S(S-S^z)+(S-S^z)(S-S^z) \quad \dots \quad \text{II } 1.18.$$

$$\vec A_a \vec S_{a+1} = \frac{A_a^-S_{a+1}^++A_a^+S_{a+1}^-}{2}+AS-A(S-S^z_{a+1})-S(A-A^z_a)+(A-A^z_a)(S-S^z_{a+1}) \quad \dots \quad \text{II } 1.19.$$

$$\vec S_a \vec S_{a-1} = \frac{S_a^-S_{a-1}^++S_a^+S_{a-1}^-}{2}+S^2-S(S-S^z_{a-1})-S(S-S^z_a)+(S-S^z_a)(S-S^z_{a-1}) \quad \dots \quad \text{II } 1.20.$$

Uvrštavanjem II 1.16. – II 1.20. i analognih relacija njima u II 1.11. i II 1.12. dobijamo:

$$H^{(a)}_{int} = -(I+I_a)\Big\{\frac{A_a^-S_{a+1}^++A_a^+S_{a+1}^-}{2}+\frac{A_a^-S_{a-1}^++A_a^+S_{a-1}^-}{2}+2SA-A(S-S^z_{a+1})-S(A-A^z_a)-$$
$$-A(S-S^z_{a-1})-S(A-A^z_a)+(A-A^z_a)(S-S^z_{a+1})+(A-A^z_a)(S-S^z_{a-1})\Big\}+$$
$$+I\Big\{\frac{S_a^-S_{a+1}^++S_a^+S_{a+1}^-}{2}+\frac{S_a^-S_{a-1}^++S_a^+S_{a-1}^-}{2}+2S^2-S(S-S^z_a)-S(S-S^z_{a+1})-S(S-S^z_a)-$$
$$-S(S-S^z_{a-1})+(S-S^z_a)(S-S^z_{a+1})+(S-S^z_a)(S-S^z_{a-1})\Big\} \quad \dots \quad \text{II } 1.21.$$

$$H^{(b)}_{int} = -(I+I_b)\Big\{\frac{B_b^-S_{b+1}^++B_b^+S_{b+1}^-}{2}+\frac{B_b^-S_{b-1}^++B_b^+S_{b-1}^-}{2}-2BS-B(S-S^z_{b+1})-S(B-B^z_b)-$$
$$-B(S-S^z_{b-1})-S(B-B^z_b)+(B-B^z_b)(S-S^z_{b+1})+(B-B^z_b)(S-S^z_{b-1})\Big\}+$$
$$+I\Big\{\frac{S_b^-S_{b+1}^++S_b^+S_{b+1}^-}{2}+\frac{S_b^-S_{b+1}^++S_b^+S_{b-1}^-}{2}+2S^2-S(S-S^z_b)-S(S-S^z_{b+1})-S(S-S^z_b)-$$
$$-S(S-S^z_{b-1})+(S-S^z_b)(S-S^z_{b+1})+(S-S^z_b)(S-S^z_{b-1})\Big\} \quad \dots \quad \text{II } 1.22.$$

A_a^+ i A_a^- – kreacioni i anihilacioni operatori spina atoma prve primese na mestu a

B_b^+ i B_b^- – kreacioni i anihilacioni operatori spina atoma druge primese na mestu b

A_a^z i B_b^z – z projekcije spinskih operatora atoma prve i druge primese.

Posle elementarnih matematičkih operacija II 1.21. i II 1.22. pišemo u obliku:

$$H_{int}^{(a)} = -2AS(I+I_a) + 2IS^2 + 2S(I+I_a)(A-A_a^z) + (I+I_a)A[(S-S_{a+1}^z)+(S-S_{a-1}^z)] - 2SI(S-S_a^z) -$$
$$-SI[(S-S_{a+1}^z)+(S-S_{a-1}^z)] - \frac{I+I_a}{2}A_a^-(S_{a+1}^+ + S_{a-1}^+) - \frac{I+I_a}{2}(S_{a+1}^- + S_{a-1}^-)A_a^+ + \frac{I}{2}S_a^-(S_{a+1}^+ + S_{a-1}^+) +$$
$$+\frac{I}{2}(S_{a+1}^- + S_{a-1}^-)S_a^- - (I+I_a)(A-A_a^z)[(S-S_{a+1}^z)+(S-S_{a-1}^z)] + I(S-S_a^z)[(S-S_{a+1}^z)+(S-S_{a-1}^z)]$$

II 1.23.

$$H_{int}^{(b)} = -2BS(I+I_b) + 2IS^2 + 2S(I+I_b)(B-B_b^z) + (I+I_b)B[(S-S_{b+1}^z)+(S-S_{b-1}^z)] - 2SI(S-S_a^z) -$$
$$-SI[(S-S_{b+1}^z)+(S-S_{b-1}^z)] - \frac{I+I_b}{2}B_b^-(S_{b+1}^+ + S_{b-1}^+) - \frac{I+I_b}{2}(S_{b+1}^- + S_{b-1}^-)B_b^+ + \frac{I}{2}S_b^-(S_{b+1}^+ + S_{b-1}^+) +$$
$$+\frac{I}{2}(S_{b+1}^- - S_{b-1}^-)S_b^+ - (I+I_b)(B-B_b^z)[(S-S_{b+1}^z)+(S-S_{b-1}^z)] + I(S-S_b^z)[(S-S_{a+1}^z)+(S-S_{b-1}^z)]$$

II 1.24.

Preostalo nam je da H_{id} (II 1.1.) izrazimo u funkciji operatora S^+, S^- i $S-S^z$. Ako II 1.20 zamenimo u II 1.1. dobijamo:

$$H_{id} = -\frac{1}{2}I\sum_n\Big\{\frac{S_n^-S_{n+1}^+ + S_n^+S_{n+1}^-}{2} + S^2 - S(S-S_{n+1}^z) - S(S-S_n^z) + (S-S_n^z)(S-S_{n+1}^z) +$$
$$+\frac{S_n^-S_{n-1}^+ + S_n^+S_{n-1}^-}{2} + S^2 - S(S-S_{n-1}^z) - S(S-S_n^z) + (S-S_n^z)(S-S_{n-1}^z) =$$
$$= -\frac{1}{2}I\sum_n\Big\{\frac{S_n^-S_{n+1}^+ + S_n^+S_{n+1}^-}{2} + \frac{S_n^-S_{n-1}^+ + S_n^+S_{n-1}^-}{2} + 2S^2 - S(S-S_n^z) - S(S-S_{n+1}^z) - S(S-S_n^z) -$$
$$-S(S-S_{n-1}^z) + (S-S_n^z)(S-S_{n+1}^z) + (S-S_n^z)(S-S_{n-1}^z)\Big\} =$$

$$H_{id} = -NS^2I + 2SI\sum_n(S-S_n^z) - \frac{1}{2}I\sum_n S_n^-(S_{n+1}^+ + S_{n-1}^+) + \frac{1}{2}I\sum_n(S-S_n^z)[(S-S_{n+1}^z)+(S-S_{n-1}^z)] \quad \ldots \text{II } 1.25.$$

N – ukupan broj atoma u kristalu

U II 1.25. nema člana: $-\frac{1}{2}ISN\sum_n(S-S_{n+1}^z)(S-S_{n-1}^z)$, jer je prema Blohovoj aproksimaciji: $(S-S_{n+1}^z)(S-S_{n-1}^z)=0$

Prema II 1.4. je totalni hamiltonijan jednodimenzionalne kristalne rešetke sa dve primese:

$$H = H_{id} + H_{int} \quad \ldots \text{II } 1.26.$$

a pošto je: $H_{int} = H_{int}^{(a)} + H_{int}^{(b)}$, kompletan hamiltonijan je:

$$H = H_{id} + H_{int}^{(a)} + H_{int}^{(b)} \quad \text{II } 1.27.$$

U II 1.27. zamenimo II 1.25., II 1.23. i II 1.24., na taj način dobijamo totalni hamiltonijan rešetke sa dva defekta, izražen preko operatora: $A^+, A^-, B^+, B^-, S^+, S^-, A-A^z$, $B-B^z$ i $S-S^z$ (spinski hamiltonijan):

$$H=-NS^2I+2SI\sum_n(S-S_n^z)-\frac{1}{2}I\sum_n S_n^-(S_{n+1}^++S_{n-1}^+)-\frac{1}{2}\sum_n(S-S_n^z)[(S-S_{n+1}^z)+(S-S_{n-1}^z)]-$$
$$-2AS(I+I_a)+2IS^2+2S(I+I_a)(A-A_a^z)+(I+I_a)A[(S-S_{a+1}^z)+(S-S_{a-1}^z)]-2SI(S-S_a^z)-$$
$$-SI[(S-S_{a+1}^z)+(S-S_{a-1}^z)]-\frac{I+I_a}{2}A_a^-(S_{a+1}^++S_{a-1}^+)-\frac{I+I_a}{2}(S_{a+1}^-+S_{a-1}^-)A_a^++\frac{I}{2}S_a^-(S_{a+1}^++S_{a-1}^+)+$$
$$+\frac{I}{2}(S_{a+1}^-+S_{a-1}^-)S_a^--(I+I_a)(A-A_a^z)[(S-S_{a+1}^z)+(S-S_{a-1}^z)+I(S-S_a^z)][(S-S_{a+1}^z)+(S-S_{a-1}^z)]-$$
$$-2BS(I+I_b)+2IS^2+2S(I+I_b)(B-B_b^z)+(I+I_b)B[(S-S_{b+1}^z)+(S-S_{b-1}^z)]-2SI(S-S_a^z)-$$
$$-SI[(S-S_{b+1}^z)+(S-S_{b-1}^z)]-\frac{I+I_b}{2}B_b^-(S_{b+1}^++S_{b-1}^+)-\frac{I+I_b}{2}(S_{b+1}^-+S_{b-1}^-)B_b^++\frac{I}{2}S_b^-(S_{b+1}^++S_{b-1}^+)+$$
$$+\frac{I}{2}(S_{b+1}^--S_{b-1}^-)S_b^+-(I+I_b)(B-B_b^z)[(S-S_{b+1}^z)+(S-S_{b-1}^z)]+I(S-S_b^z)[(S-S_{b+1}^z)+(S-S_{b-1}^z)$$

II 1.28.

Preći ćemo na Blohovu aproksimaciju, što znači da spinske operatore u hamiltonijanu $H_{id}+H_{int}=H$ zamenjujemo Boze operatorima: α^+, α, β^+, β, γ^+ i γ. Prema I 2.24. imamo:

$$A^+=\sqrt{2A}\,\alpha \qquad B^+=\sqrt{2B}\,\beta \qquad S^+=\sqrt{2S}\,\gamma$$
$$A^-=\sqrt{2A}\,\alpha^+ \qquad B^-=\sqrt{2B}\,\beta^+ \qquad S^-=\sqrt{2S}\,\gamma^+ \qquad \ldots \text{ II 1.29.}$$
$$A-A^z=\alpha^+\alpha \qquad B-B^z=\beta^+\beta \qquad S-S^z=\gamma^+\gamma$$

Zamenom II 1.29. u II 1.25, II 1.23. i II 1.24. dobijamo:

$$H_{id}=-NS^2I+2SI\sum_n\gamma_n^+\gamma_n-SI\sum_n\gamma_n^+(\gamma_{n+1}+\gamma_{n-1}) \qquad \ldots \text{ II 1.30}$$

Izraz II 1.30. smo aproksimirali stavljajući, kao što je već poznato, da je:

$$(S-S_n^z)(S-S_{n+1}^z)=0\,,\quad (S-S_n^z)(S-S_{n-1}^z)=0 \qquad \ldots \text{ II 1.31.}$$

$$H_{int}^{(a)}=2S^2I-2SA(I+I_a)+2S(I+I_a)\alpha_a^+\alpha_a+A(I+I_a)(\gamma_{a+1}^+\gamma_{a+1}+\gamma_{a-1}^+\gamma_{a-1})\mp2SI\gamma_a^+\gamma_a-SI(\gamma_{a+1}^+\gamma_{a+1}+\gamma_{a-1}^+\gamma_{a-1})-$$
$$-\sqrt{AS}(I+I_a)\alpha_a^+(\gamma_{a+1}+\gamma_{a-1})-\sqrt{SA}(I+I_a)(\gamma_{a+1}^++\gamma_{a-1}^+)\alpha_a+SI\gamma_a^+(\gamma_{a+1}+\gamma_{a-1})+SI(\gamma_{a+1}^++\gamma_{a-1}^+)\gamma_a$$

II 1.32.

$$H_{int}^{(b)} = 2S^2I - 2SB(I+I_b) + 2S(I+I_b)\beta_b^+\beta_b + B(I+I_b)(\gamma_{b+1}^+\gamma_{b+1} + \gamma_{b-1}^+\gamma_{b-1}) - 2SI\gamma_b^+\gamma_b - SI(\gamma_{b+1}^+\gamma_{b+1} + \gamma_{b-1}^+\gamma_{b-1}) -$$

$$- \sqrt{SB}\,(I+I_b)\beta_b^+(\gamma_{b+1} + \gamma_{b-1}) - \sqrt{SB}\,(I+I_b)(\gamma_{b+1}^+ + \gamma_{b-1}^+)\beta_b + SI\gamma_b^+(\gamma_{b+1} + \gamma_{b-1}) + SI(\gamma_{b+1}^+ + \gamma_{b-1}^+)\gamma_b$$

II 1.33.

Pri dobijanju formula II 1.32 i II 1.33. smo koristili II 1.31. i analogne relacije.

Prema II 1.27., sabiranjem II 1.30, II 1.32. i II 1.33., dobijamo bozonski hamiltonijan feromagnetika sa dve primese. On je ekvivalentan Hajzenbergovom modelu u Blohovoj aproksimaciji.

II 2. Hamiltonijan jednodimenzionalne rešetke sa dve primese u impulsnom prostoru

Da bismo hamiltonijane II 1.30., II 1.32 i II 1.33. dijagonalizovali prelazimo sa Boze operatora u prostoru direktne rešetke (α_a^+, α_a, β_b^+, β_b, γ_n^+ i γ_n) na boze operatore u prostoru recipročne rešetke (α_q^+, α_k, β_q^+, β_k, γ_q^+ i γ_k) pomoću Furije transformacije:

$$\gamma_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \gamma_k e^{iknc} \qquad \text{II } 2.1.$$

$$\gamma_n^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \gamma_q^+ e^{-iqnc} \qquad \text{II } 2.2.$$

$$\alpha_a = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \alpha_k e^{ikac} \qquad \text{II } 2.3.$$

$$\alpha_a^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \alpha_q^+ e^{-iqac} \qquad \text{II } 2.4.$$

$$\beta_b = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \beta_k e^{ikbc} \qquad \text{II } 2.5.$$

$$\beta_b^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \beta_q^+ e^{-iqbc} \qquad \text{II } 2.6.$$

α_q^+ i α_k – kreacioni i anihilacioni boze operatori prvog primesnog atoma u prostoru recipročne rešetke

β_q^+ i β_k – kreacioni i anihilacioni boze operatori drugog primesnog atoma u prostoru recipročne rešetke

γ_q^+ i γ_k – kreacioni i anihilacioni boze operatori jednodimenzionalne rešetke u impulsnom prostoru

$\vec{k}, \vec{q}$ – talasni vektori, c – konstanta rešetke

Zamenom II 2.1. i II 2.2. u (II 2.9.) II 1.30. dobijamo:

$$H_{id} = -NS^2 I + \frac{2SI}{N} \sum_{qk} \gamma_q^+ \gamma_k \sum_n e^{inc(k-q)} - SI\Big(\sum_n \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \gamma_q^+ e^{-iqnc} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \gamma_k e^{ik(n+1)c} +$$

$$+ \sum_n \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \gamma_q^+ e^{-iqnc} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \gamma_k e^{ik(n-1)c} \Big) =$$

$$= -NS^2I + \frac{2SI}{N}\sum_{q\,k}\gamma_q^+\gamma_k\sum_n e^{inc(k-q)} - \frac{SI}{N}\sum_{q,k}\gamma_q^+\gamma_k\left(e^{ikc}+e^{-ikc}\right)\sum_n e^{inc(k-q)} =$$

$$= -NS^2I + \frac{2SI}{N}\sum_{q,k}\gamma_q^+\gamma_k N\delta_{k,q} - \frac{SI}{N}\sum_{q,k}\gamma_q^+\gamma_k\cdot(2\cos kc)\cdot N\delta_{k,q}$$

Osobina Kronekerovog simbola $(\delta_{k,q})$ je da skida jednu sumu, pa imamo:

$$H_{id} = -NS^2I + \sum_k 2SI(1-\cos kc)\gamma_k^+\gamma_k \qquad \ldots \; II\,2.7.$$

Ovde smo koristili Ojlerov obrazac:

$$e^{ikc} + e^{-ikc} = 2\cos kc \qquad \ldots \; II\,2.8.$$

kao i da je:

$$\sum_n e^{inc(k-q)} = N\delta_{k,q} \qquad \ldots \; II\,2.9.$$

Zamenom II 2.1.– II 2.4. u II 1.32 i posle jednostavnih računskih radnji dobijamo:

$$H_{int}^{(a)} = 2S^2I - 2SA(I+I_a) + \frac{2S(I+I_a)}{N}\sum_{kq}\alpha_q^+ e^{ica(k-q)} + \frac{2SI}{N}\sum_{kq} e^{ica(k-q)} +$$

$$+ 2\,\frac{A(I+I_a)-SI}{N}\sum_{kq}\gamma_q^+\gamma_k\cos c(k-q)e^{ica(k-q)} - \frac{2\sqrt{SA}\,(I+I_a)}{N}\sum_{kq}\alpha_q^+\gamma_k\cos ck\, e^{ica(k-q)} -$$

$$- \frac{2\sqrt{2S}\,(I+I_a)}{N}\sum_{kq}\gamma_q^+\alpha_k\cos cq\, e^{ica(k-q)} + \frac{2SI}{N}\sum_{kq}\gamma_q^+\gamma_k\cos ck\, e^{ica(k-q)} +$$

$$+ \frac{2SI}{N}\sum_{kq}\gamma_q^+\gamma_k\cos cq\, e^{ica(k-q)} \qquad \ldots \; II\,2.10.$$

Poslednji izraz smo dobili koristeći da je:

$$\alpha_a^+\alpha_a = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_q\alpha_q^+ e^{-iqac}\cdot\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k\alpha_k e^{-ikac} = \frac{1}{N}\sum_{kq}\alpha_q^+\alpha_k e^{iac(k-q)} \qquad \ldots \; II\,2.11.$$

$$\gamma_{a+1}^+\gamma_{a+1} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_q\gamma_q^+ e^{-iq(a+1)c}\,\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k\gamma_k e^{ik(a+1)c} = \frac{1}{N}\sum_{kq}\gamma_q^+\gamma_k e^{ic(a+1)(k-q)} \qquad \ldots \; II\,2.12$$

$$\gamma_{a-1}^+\gamma_{a-1} = \frac{1}{N}\sum_{kq}\gamma_q^+\gamma_k e^{ic(a-1)(k-q)} \qquad \ldots \; II\,2.13$$

$$\gamma_{a+1}^+\gamma_{a+1} + \gamma_{a-1}^+\gamma_{a-1} = \frac{1}{N}\sum_{kq}\gamma_q^+\gamma_k e^{ica(k-q)}\cdot 2\cos c(k-q) \qquad \ldots \; II\,2.14.$$

$$\alpha_a^+ \gamma_{a+1} = \frac{1}{N}\sum_{kq} \alpha_q^+ \gamma_k e^{iac(k-q)} e^{ikc} \; ; \; \alpha_a^+ \gamma_{a-1} = \frac{1}{N}\sum_{kq} \alpha_q^+ \gamma_k e^{iac(k-q)} e^{-ikc} \quad \ldots \text{II } 1.15.$$

$$\alpha_a^+ (\gamma_{a+1} + \gamma_{a-1}) = \frac{1}{N}\sum_{kq} \alpha_q^+ \gamma_k e^{ica(k-q)} \cdot 2\cos ck \quad \ldots \text{II } 2.16.$$

$$(\gamma_{a+1}^+ + \gamma_{a-1}^+)\alpha_a = \frac{1}{N}\sum_{kq} \gamma_q^+ \alpha_a e^{ica(k-q)} \cdot 2\cos cq \quad \ldots \text{II } 2.17.$$

$$\gamma_a^+ (\gamma_{a+1} + \gamma_{a-1}) = \frac{1}{N}\sum_{kq} \gamma_q \gamma_k e^{ica(k-q)} 2\cos ck \quad \ldots \text{II } 2.18.$$

$$(\gamma_{a+1}^+ + \gamma_{a-1}^+)\gamma_a = \frac{1}{N}\sum_{kq} \gamma_q^+ \gamma_k e^{ica(k-q)} \cdot 2\cos cq \quad \ldots \text{II } 2.20.$$

Formulu II 2.10. možemo napisati u skraćenom obliku:

$$H_{int}^{(a)} = 2S^2 I - 2SA(I+I_a) + \frac{1}{N}\sum_{kq} R_1(k,q)\alpha_q^+ \alpha_k + \frac{1}{N}\sum_{kq} R_2(k,q)\gamma_q^+ \gamma_k +$$

$$+ \frac{1}{N}\sum_{kq} R_3(k,q)\alpha_q^+ \gamma_k + \frac{1}{N}\sum_{kq} R_4(k,q)\gamma_q^+ \alpha_k \quad \ldots \text{II } 2.21.$$

gde smo uveli oznake:

$$R_1(k,q) = 2S(I+I_a)e^{ica(k-q)}$$

$$R_2(k,q) = \{2SI(\cos ck + \cos cq) - 2SI + 2[A(I+I_a) - SI]\cos c(k-q)\} e^{ica(k-q)}$$

$$R_3(k,q) = -2\sqrt{SA}(I+I_a)e^{ica(k-q)} \cdot \cos ck \quad \ldots \text{II } 2.22.$$

$$R_4(k,q) = -2\sqrt{SA}(I+I_a)e^{ica(k-q)} \cdot \cos cq$$

Zamenom II 2.1., II 2.2., II 2.5. i II 2.6 u II 1.33., sličnim postupkom kao za $H_{int}^{(a)}$, koristeći analogne relacije relacijama II 2.11.—II 2.20, dobijamo:

$$H_{int}^{(b)} = 2S^2 I - 2SB(I+I_b) + \frac{1}{N}\sum_{kq} T_1(k,q)\beta_q^+ \beta_k + \frac{1}{N}\sum_{kq} T_2(k,q)\gamma_q^+ \gamma_k +$$

$$+ \frac{1}{N}\sum_{kq} T_3(k,q)\beta_q^+ \gamma_k + \frac{1}{N}\sum_{kq} T_4(k,q)\gamma_q^+ \beta_k \quad \ldots \text{II } 2.23.$$

gde smo uveli oznake :

$$T_1(k,q) = 2S(I+I_b)e^{icb(k-q)}$$

$$T_2(k,q) = \{2SI(\cos ck + \cos cq) - 2SI + 2[B(I+I_b) - SI]\cos c(k-q)\} e^{icb(k-q)}$$

$$T_3(k,q) = -2\sqrt{SB}(I+I_b)e^{icb(k-q)}\cos ck \qquad \ldots \quad II\ 2.24.$$

$$T_4(k,q) = -2\sqrt{SB}(I+I_b)e^{icb(k-q)}\cos cq$$

Pošto je prema II 1.27. : $H = H_{id} + H_{int}^{(a)} + H_{int}^{(b)}$, a prema II 2.7., II 2.21. i II 2.23, zamenimo H_{id}, $H_{int}^{(a)}$ i $H_{int}^{(b)}$, na taj način smo dobili totalni hamiltonijan jednodimenzionalne rešetke sa dve primese u impulsnom prostoru, koji ima oblik :

$$H = -NS^2I + \sum_k 2SI(1-\cos kc)\gamma_k^+\gamma_k + 2S^2I - 2SA(I+I_a) +$$

$$+ \frac{1}{N}\sum_{kq} R_1(k,q)\alpha_q^+\alpha_k + \frac{1}{N}\sum_{kq} R_2(k,q)\gamma_k^+\gamma_k + \frac{1}{N}\sum_{kq} R_3(k,q)\alpha_q^+\gamma_k +$$

$$+ \frac{1}{N}\sum_{kq} R_4(k,q)\gamma_q^+\alpha_k + 2S^2I - 2SB(I+I_b) + \frac{1}{N}\sum_{kq} T_1(k,q)\beta_q^+\beta_k +$$

$$+ \frac{1}{N}\sum_{kq} T_2(k,q)\gamma_q^+\gamma_k + \frac{1}{N}\sum_{kq} T_3(k,q)\beta_q^+\gamma_k + \frac{1}{N}\sum_{kq} T_4(k,q)\gamma_q^+\beta_k$$

II 2. 25.

II 3. Grinova funkcija sistema

Totalni hamiltonijan sistema (II 2.25) možemo napisati u obliku:

$$H = H_0 + H_2 + H_{int} \qquad \text{II } 3.1.$$

gde je:

$$H_0 = -NS^2I + 4S^2I - 2SA(I+I_a) - 2SB(I+I_b) \qquad \text{II } 3.2.$$

$$H_2 = \sum_k E(k)\gamma_k^+\gamma_k, \qquad E(k) = 2SI(1-\cos ck) \qquad \text{II } 3.3.$$

$$H_{int} = \frac{1}{N}\sum_{kq}\{R_1(k,q)\alpha_q^+\alpha_k + T_1(k,q)\beta_q^+\beta_k + [R_2(k,q)+T_2(k,q)]\gamma_q^+\gamma_k +$$

$$+R_3(k,q)\alpha_q^+\gamma_k + T_3(k,q)\beta_q^+\gamma_k + R_4(k,q)\gamma_q^+\alpha_k + T_4(k,q)\gamma_q^+\beta_k\} \qquad \text{II } 3.4.$$

Uvodimo Grinovu funkciju:

$$G(p) = \langle\langle \gamma_p | \gamma_p^+ \rangle\rangle \quad i \quad G_x = \langle\langle \gamma_x | \gamma_p^+ \rangle\rangle \qquad \text{II } 3.5.$$

Poznato nam je da pol funkcije Grina definiše energiju elementarnih ekscitacija i njihovo vreme života. Energija elementarnih ekscitacija sistema je apscisa pola Grinove funkcije u kompleksnoj E ravni tj. realni deo pola Grinove funkcije, a imaginarni deo predstavlja recipročno vreme života te naše elementarne ekscitacije. Nas interesuje energija sistema sa dve primese, zbog toga smo uveli Grinovu funkciju II 3.5.

Pošto je u sistemu narušena translaciona simetrija, ovde ne mora da važi: $\langle\langle \gamma_p | \gamma_{p'}^+ \rangle\rangle = \langle\langle \gamma_p | \gamma_p^+ \rangle\rangle \delta_{p,p'}$

Opšta jednačina za funkciju Grina u energetskoj reprezentaciji je:

$$E\langle\langle A | B \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \langle [A,B] \rangle + \langle\langle [A,H] | B \rangle\rangle \qquad \text{II } 3.6.$$

Za naš slučaj imamo da je: $A = \gamma_p$, $B = \gamma_p^+$, a komutator $[\gamma_p, \gamma_p^+] = 1$ (po definiciji boze operatora), tada je jednačina II 3.6.:

$$E \langle\langle \gamma_p | \gamma_p^+ \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} + \langle\langle [\gamma_p, H] | \gamma_p^+ \rangle\rangle \qquad \ldots \; II\ 3.7.$$

Kao što vidimo, funkcija Grina : $G(p) = \langle\langle \gamma_p | \gamma_p^+ \rangle\rangle$, se izražava preko nove funkcije Grina : $\langle\langle [\gamma_p, H] | \gamma_p^+ \rangle\rangle$, koju treba izraziti preko nižih funkcija Grina $G_x = \langle\langle \gamma_x | \gamma_p^+ \rangle\rangle$. Da bismo to uradili vidimo prema II 3.7. da treba naći komutator :

$$[\gamma_p, H] = \gamma_p H - H \gamma_p \qquad \ldots \; II\ 3.8.$$

Kada u II 3.8. zamenimo hamiltonijan i izračunamo komutator :

$$[\gamma_p, \gamma_k^+ \gamma_k] = \gamma_p \gamma_k^+ \gamma_k - \gamma_k^+ \gamma_k \gamma_p = \gamma_p \gamma_k^+ \gamma_k - \gamma_k^+ \gamma_p \gamma_k + \gamma_k^+ \gamma_p \gamma_k - \gamma_k^+ \gamma_k \gamma_p =$$

$$= (\gamma_p \gamma_k^+ - \gamma_k^+ \gamma_p)\gamma_k + \gamma_k^+ (\gamma_p \gamma_k - \gamma_k \gamma_p) = [\gamma_p, \gamma_k^+]\gamma_k + \gamma_k^+ [\gamma_p, \gamma_k] = \delta_{p,k} \gamma_k$$

$$[\gamma_p, \gamma_k^+ \gamma_k] = \delta_{p,k} \gamma_k \qquad \ldots \; II\ 3.9.$$

kao i još nekoliko analognih komutatora, dobijamo da je :

$$[\gamma_p, H] = E(p)\gamma_p + \frac{1}{N} \sum_k \{ [R_2(k,p) + T_2(k,p)]\gamma_k + R_4(k,p)\alpha_k + T_4(k,p)\beta_k \} \quad \ldots \; II\ 3.10.$$

Na sličan način dobijamo komutacione relacije :

$$[\alpha_k, H] = \frac{1}{N} \sum_q \{ R_1(q,k)\alpha_q + R_3(q,k)\gamma_q \} \qquad \ldots \; II\ 3.11$$

$$[\beta_k, H] = \frac{1}{N} \sum_q \{ T_1(q,k)\beta_q + T_3(q,k)\gamma_q \} \qquad \ldots \; II\ 3.12.$$

Zamenom II 3.10. u II 3.7. imamo :

$$[E - E(p)] \langle\langle \gamma_p | \gamma_p^+ \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} + \frac{1}{N} \sum_k \{ [R_2(k,p) + T_2(k,p)] \langle\langle \gamma_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle + R_4(k,p) \langle\langle \alpha_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle +$$
$$+ T_4(k,p) \langle\langle \beta_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle \} \qquad \ldots \; II\ 3.13.$$

$E(p)$ je prema II 3.3. : $\quad E(p) = 2SI(1 - \cos cp)$

U II 3.13 se pojavljuje funkcije Grina : $\langle\langle \alpha_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle$ i $\langle\langle \beta_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle$, koje, koristeći II 3.6., II 3.11., II 3.12. i znajući : $[\alpha_k, \gamma_p^+] = [\beta_k, \gamma_p^+] = 0$, možemo pisati :

$$E \langle\langle \alpha_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle = \frac{1}{N} \sum_q \{ R_1(q,k) \langle\langle \alpha_q | \gamma_p^+ \rangle\rangle + R_3(q,k) \langle\langle \gamma_q | \gamma_p^+ \rangle\rangle \} \quad II\ 3.14.$$

$$E \langle\langle \beta_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle = \frac{1}{N} \sum_q \{ T_1(q,k) \langle\langle \beta_q | \gamma_p^+ \rangle\rangle + T_3(q,k) \langle\langle \beta_q | \gamma_p^+ \rangle\rangle \} \quad II\ 3.15.$$

Iz II 3.14. i II 3.15. se vidi da su funkcije $\langle\langle \alpha_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle$ i $\langle\langle \beta_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle$ proporcionalne izrazima: $\frac{1}{N}\sum_{q}(R_1+R_3)$ i $\frac{1}{N}\sum_{q}(T_1+T_3)$. Ako izraze II 3.14. i II 3.15. uvrstimo u II 3.13., doprinosi ovih funkcija biće reda: $\frac{1}{N^2}\sum_{kq}(R_1+R_3)R_4$ i $\frac{1}{N^2}\sum_{kq}(T_1+T_3)T_4$, tj. proporcionalni su kvadratnoj interakciji, pa ćemo te doprinose zanemariti. Znači ako radimo u aproksimaciji linearnoj po interakciji, jednačina II 3.13. se svodi na:

$$[E-E(p)]\langle\langle \gamma_p | \gamma_p^+ \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} + \frac{1}{N}\sum_{k} W(k,p)\langle\langle \gamma_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle \quad \ldots \text{ II } 3.16.$$

gde je:

$$W(k,p) = R_2(k,p) + T_2(k,p) \quad \ldots \text{ II } 3.17.$$

Prema II 3.5. je $G(k) = \langle\langle \gamma_k | \gamma_p^+ \rangle\rangle$, pa imamo:

$$[E-E(p)]G(p) = \frac{i}{2\pi} + \frac{1}{N}\sum_{k} W(k,p)G(k)$$

$$G(p) = \frac{i}{2\pi}\frac{1}{E-E(p)} + \frac{1}{N}\sum_{k}\frac{W(k,p)}{E-E(p)}G(k) \quad \ldots \text{ II } 3.18.$$

Jednačinu II 3.18. dalje rešavamo metodom iteracije. Nulte iteracije za funkcije Grina bi bile:

$$\overset{(0)}{G}(p) = \frac{i}{2\pi}\frac{1}{E-E(p)}, \quad \overset{(0)}{G}(k) = \frac{i}{2\pi}\frac{1}{E-E(k)} \quad \ldots \text{ II } 3.19.$$

U prvoj aproksimaciji je:

$$\overset{(1)}{G}(p) = \frac{i}{2\pi}\frac{1}{E-E(p)} + \frac{1}{N}\sum_{k}\frac{W(k,p)}{E-E(p)}\frac{i}{2\pi}\frac{1}{E-E(k)}$$

$$\overset{(1)}{G}(p) = \overset{(0)}{G}(p) + \overset{(0)}{G}(p)\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{W(k,p)}{E-E(k)}$$

$$\overset{(1)}{G}(p) = \overset{(0)}{G}(p)\left\{1 + \frac{1}{N}\sum_{k}\frac{W(k,p)}{E-E(k)}\right\} \quad \ldots \text{ II } 3.20.$$

Pošto ceo račun izvodimo u prvoj aproksimaciji po interakciji možemo pisati da je:

$$1 + \frac{1}{N}\sum_{k}\frac{W(k,p)}{E-E(k)} \cong \frac{1}{1 - \frac{1}{N}\sum_{k}\frac{W(k,p)}{E-E(k)}} \quad \ldots \text{ II } 3.21.$$

Zamenom izraza II 3.21. u II 3.20. konačno dobijamo:

$$\overset{(1)}{G}(p)=\overset{(0)}{G}(p)\frac{1}{1-\frac{1}{N}\sum\limits_{k}\frac{W(k,p)}{E-E(k)}}=\frac{i}{2\pi}\frac{1}{E-E(p)}\frac{1}{1-\frac{1}{N}\sum\limits_{k}\frac{W(k,p)}{E-E(k)}} \quad \ldots \text{II } 3.22.$$

Funkcija $\overset{(1)}{G}(p)$ (II 3.22.) ima dva pola i to:

a) $$E=E(p)=2SI(1-\cos cp) \quad \ldots \text{II } 3.23.$$

Ovaj pol Grinove funkcije nas ne interesuje, jer je to energija magnona u idealnoj rešetci.

b) Drugi pol Grinove funkcije, koji ćemo analizirati je:

$$\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{W(k,p)}{E-E(k)}=1 \quad \ldots \text{II } 3.24.$$

Jednačina II 3.24. daće nam dopunske energije usled prisustva primesnih atoma sa spinovima $\vec{A}_a$ i $\vec{B}_b$.

Ovde je zgodno preći sa sume na integral po pravilu:

$$\frac{1}{N}\sum_{k}=\frac{L}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}}dk \quad \ldots \text{II } 3.25.$$

$L=Nc$ – dužina lanca

Takođe, treba uzeti u obzir da je:

$$W(k,p)\equiv W(kc,pc) \quad i \quad E(k)\equiv E(kc) \quad \ldots \text{II } 3.26.$$

Sada se izraz II 3.24. svodi na:

$$\frac{1}{N}\frac{L}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}}\frac{W(kc,pc)}{E-E(kc)}dk=1 \quad \ldots \text{II } 3.27.$$

Uzećemo smenu: $pc=x$, $kc=y$, $dk=\frac{1}{c}dy$, a granice integracije su: za $k=-\frac{\pi}{c}$, $y=-\pi$, a za $k=\frac{\pi}{c}$, $y=\pi$. Konačno dobijamo integral oblika:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{W(x,y)}{E-E(y)}dy=1 \quad \ldots \text{II } 3.28.$$

II 4. Analiza dopunskih energetskih nivoa

Preostalo nam je da rešimo integralnu jednačinu oblika:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{W(x,y)}{E-E(y)}\,dy = 1 \qquad \text{II 4.1.}$$

Iz ove jednačine dobićemo rešenja $E=E(x)$, koja će dati dopunske energetske nivoe, koji se pojavljuju kao posledica prisustva primesa.

U jednačini II 4.1. je prema II 3.17.:

$$W(k,p) = R_2(k,p) + T_2(k,p)$$, a prema II 2.22., II 2.24. i II 3.3.:

$$R_2(k,p) = \{2SI(\cos ck + \cos cp) - 2SI + 2[A(I+I_a) - SI]\cos c(k-p)\}e^{ica(k-p)}$$

$$T_2(k,p) = \{2SI(\cos ck + \cos cp) - 2SI + 2[B(I+I_b) - SI]\cos c(k-p)\}e^{icb(k-p)}$$

$$E(k) = 2SI(1-\cos ck)$$

Koristeći smene: $x=pc$ i $y=kc$, i tada izraz $W(x,y)$ uvrstimo u II 4.1., dobijamo:

$$\frac{1}{2\pi}\left(\int_{-\pi}^{\pi}\frac{R_2(\frac{y}{c},\frac{x}{c})}{E-E(y)}\,dy + \int_{-\pi}^{\pi}\frac{T_2(\frac{y}{c},\frac{x}{c})}{E-E(y)}\,dy\right) = 1$$

$$\frac{1}{2\pi}\left(\mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2\right) = 1 \qquad \text{II 4.2.}$$

Ovde smo označili sa:

$$\mathcal{J}_1 = \int_{-\pi}^{\pi}\{2SI(\cos y + \cos x) - 2SI + 2[A(I+I_a) - SI]\cos(y-x)\}e^{ia(y-x)}\frac{1}{E-E(y)}\,dy \qquad \text{II 4.3.}$$

$$\mathcal{J}_2 = \int_{-\pi}^{\pi}\{2SI(\cos y + \cos x) - 2SI + 2[B(I+I_b) - SI]\cos(y-x)\}e^{ib(y-x)}\frac{dy}{E-E(y)} \qquad \text{II 4.4.}$$

Ovde je: $E(y) = 2SI(1-\cos y)$ $\qquad$ II 4.5.

Integrale II 4.3. i II 4.4. rešavamo u aproksimaciji malih talasnih vektora, što znači da možemo koristiti:

$$\sin y \cong y, \quad \sin ay \cong ay$$
$$\cos y \cong 1 - \tfrac{1}{2}y^2, \quad \cos ay \cong 1 - \tfrac{1}{2}a^2y^2 \qquad \text{II 4.6.}$$

Koristimo trigonometrijsku formulu: $\cos(y-x)=\cos y\cos x+\sin y\sin x$, kao i Ojlerov obrazac: $e^{iay}=\cos ay+i\sin ay$

Sada se $\mathcal{J}_1$ raspada na osam integrala, koji se svode na integrale oblika: $\int_{-\pi}^{\pi}\frac{y^n dy}{y^2-z^2}$, gde je $n=1,2,3$ i 4, a oni se rešavaju višestrukom parcijalnom integracijom, znajući tablični integral:

$$\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dy}{y^2-z^2}=\frac{1}{2z}\ln\left|\frac{\pi-z}{\pi+z}\right| \qquad \ldots\ \text{II}\ 2.7.$$

Sa z smo obeležili:

$$z^2=\frac{E}{SI}\,,\quad z=\sqrt{\frac{E}{SI}} \qquad \ldots\ \text{II}\ 4.8.$$

Nakon dužeg računanja dobijemo rešenje integrala $\mathcal{J}_1$:

$$\mathcal{J}_1=\frac{1}{zSI}\Big\{2SIe^{-iax}\Big[-1+\frac{\pi^2}{4}+\frac{a^2\pi^2}{2}-\frac{a^2\pi^4}{8}+ia\pi-i\frac{a\pi^3}{4}\Big]+ \qquad \text{II}\ 4.9.$$

$$+2[A(I+I_a)-SI]\Big[i\cos x\cdot\Big(\frac{a\pi}{2}-\frac{a\pi^3}{4}\Big)-i\frac{a\pi^2}{2}\cdot\sin x+\Big(-\frac{1}{2}+\frac{\pi^2}{4}+\frac{a^2\pi^2}{4}-\frac{a^2\pi^4}{8}\Big)\cos x+\Big(\frac{\pi}{2}+\frac{a\pi^3}{4}\Big)\sin x\Big]\Big\}\cdot\ln\frac{\pi-z}{\pi+z}$$

Koristeći aproksimaciju $\pi^2<<\pi^4$ i $\pi^3<\pi^4$, većina članova otpada, pa dobijamo:

$$\mathcal{J}_1=\frac{1}{zSI}\Big\{-2SI\cdot\frac{a^2\pi^4}{8}e^{-iax}-2[A(I+I_a)-SI]\cdot\frac{a^2\pi^4}{8}\cdot\cos x\Big\}\cdot\ln\left|\frac{\pi-z}{\pi+z}\right|$$

$$\mathcal{J}_1=\frac{1}{zSI}\,\alpha(x,a)\cdot\ln\frac{1-\frac{z}{\pi}}{1+\frac{z}{\pi}} \qquad \text{II}\ 4.10.$$

, a analogno je:

$$\mathcal{J}_2=\frac{1}{zSI}\,\beta(x,b)\cdot\ln\frac{1-\frac{z}{\pi}}{1+\frac{z}{\pi}} \qquad \ldots\ \text{II}\ 4.11$$

gde smo uveli oznake:

$$\alpha(x,a)=-2SI\frac{a^2\pi^4}{8}\cdot e^{-iax}-2[A(I+I_a)-SI]\frac{a^2\pi^4}{8}\cdot\cos x \qquad \ldots\ \text{II}\ 4.12.$$

$$\beta(x,b)=-2SI\frac{b^2\pi^4}{8}e^{-ibx}-2[B(I+I_b)-SI]\frac{b^2\pi^4}{8}\cos x \qquad \ldots\ \text{II}\ 4.13.$$

Zamenom II 4.10. i II 4.11. u II 4.2. je:

$$\frac{1}{zSI}\Big[\alpha(x,a)\ln\frac{1-\frac{z}{\pi}}{1+\frac{z}{\pi}}+\beta(x,b)\ln\frac{1-\frac{z}{\pi}}{1+\frac{z}{\pi}}\Big]=2\pi \qquad \ldots\ \text{II}\ 4.14.$$

Predpostavićemo da je $z<<1$, tada je lako pokazati da je:

$$\ln\left|\frac{\pi - z}{(\pi + z)}\right| = \ln\frac{1-\frac{z}{\pi}}{1+\frac{z}{\pi}} \cong -2\frac{z}{\pi} + \frac{z^2}{\pi^2} \qquad \ldots \quad II\ 4.15.$$

Uvrštavanjem izraza II 4.15. i II 4.8. u jednačinu II 4.14. dolazimo do izraza za određivanje energije:

$$E = 4\pi^2 SI\left\{1 + \frac{\pi^2 SI}{\alpha(x,a)+\beta(x,b)}\right\}^2 \qquad \ldots \quad II\ 4.16.$$

Pošto su funkcije $\alpha(x,a)$ i $\beta(x,b)$ veoma komplikovane, predpostavićemo da su primese veoma udaljene jedna od druge tj. da se jedna nalazi na jednom kraju lanca, a druga na drugom kraju, tada dobijamo, sabiranjem II 4.12. i II 4.13., sledeći izraz:

$$\alpha(x,a)+\beta(x,b) = -\frac{\pi^4}{8}\left\{2SI(a^2e^{-iax}+b^2e^{-ibx}) - 2SI(a^2+b^2)\cos x + 2A(I+I_a)a^2\cos x + 2B(I+I_b)b^2\cos x\right\} \quad II\ 4.17.$$

Na osnovu ovog zbira, koji figuriše u relaciji II 4.16 zaključujemo da je energija elementarnih ekscitacija kompleksna veličina, odnosno da u sistemu postoji prigušenje. Ako su a i b simetrični tj. $b=-a$, što zamenjujemo u II 4.17., tada $\alpha(x,a)+\beta(x,b)$ postaje realno:

$$\alpha(x,a)+\beta(x,b) = -\frac{\pi^4}{8}\left\{4SI\,a^2\cos ax - 4SI\,a^2\cos x + [2A(I+I_a)+2B(I+I_b)]a^2\cos x\right\} \quad \ldots\ II\ 4.18.$$

Predpostavićemo da su integrali izmene I_a i I_b mnogo veći od I ili $I \ll I_a, I_b$, tako da sada formula II 4.18. postaje:

$$\alpha(x,a)+\beta(x,b) \cong -\frac{\pi^2}{4}(AI_a + BI_b)a^2\cos x \qquad \ldots \quad II\ 4.19.$$

Zamenom poslednje relacije u II 4.16., za energiju dobijamo formulu:

$$E = 4\pi^2 SI\left\{1 - \frac{4SI}{(AI_a+BI_b)a^2\cos x}\right\}^2 \qquad \ldots \quad II\ 4.20.$$

Analizom ovog izraza, vidimo da energija ima najveću vrednost kada je $x=0$, $\cos x = 1$, i ta energija iznosi: $E_{max} = 4\pi^2 SI\left\{1 - \frac{4SI}{(AI_a+BI_b)a^2}\right\}^2$, a energija je jednaka nuli pod uslovom da je:

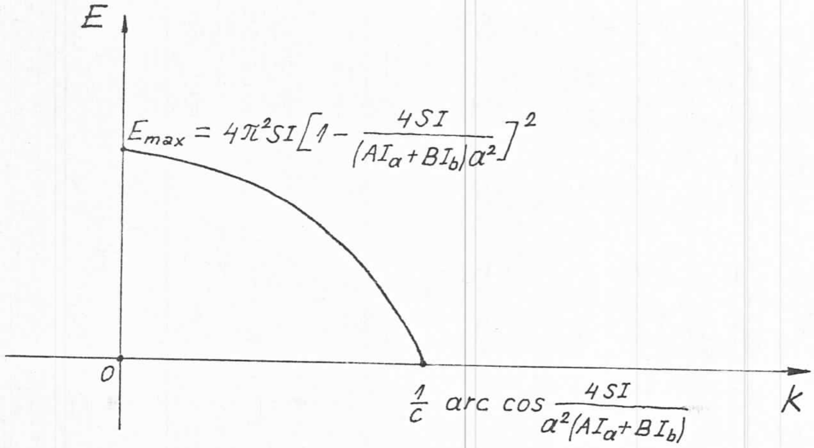
$$1 - \frac{4SI}{(AI_a+BI_b)a^2\cos x} = 0 \qquad \ldots \quad II\ 4.21.$$

Rešavanjem poslednje jednačine (II 4.21.) dobijamo da je:

$$X = \arccos \frac{4SI}{a^2(AI_a+BI_b)} \qquad \ldots \text{II } 4.22.$$

Pošto je $X = kc$, imamo izraz za talasni vektor: $k = \frac{1}{c}\arccos\frac{4SI}{a^2(AI_a+BI_b)}$

Sada možemo grafički predstaviti funkcionalnu zavisnost: $E = E(k)$



Kao što vidimo za predpostavljeni slučaj dopunski spinski talasi nisu definisani u celoj Briluenovoj zoni već samo za: $k \in \left(0, \frac{1}{c}\arccos\frac{4SI}{a^2(AI_a+BI_b)}\right)$.

Lako je uočiti, da u ovom slučaju elementarne ekscitacije imaju negativnu disperziju, što znači da energija opada sa porastom talasnog vektora i da dopunske elementarne ekscitacije imaju negativnu efektivnu masu (m_o). Polazeći od jednačine II 4.20. naći ćemo izraz za efektivnu masu:

$$E = 4\pi^2 SI\left\{1 - \frac{4SI}{(AI_a+BI_b)a^2\cos X}\right\}^2 = 4\pi^2 SI\left[1 - \frac{8SI}{(AI_a+BI_b)a^2\cos X} + \frac{16S^2I^2}{(AI_a+BI_b)^2a^4\cos^2 X}\right]$$

U aproksimaciji malih talasnih vektora je: $\cos X \approx 1 - \frac{X^2}{2}$, $\cos^2 X = 1 - X^2$, pa imamo:

$$E \cong 4\pi^2 SI\left\{1 - \frac{8SI}{(AI_a+BI_b)a^2}\cdot\left(1+\frac{1}{2}X^2\right) + \frac{16S^2I^2}{(AI_a+BI_b)^2a^4}\cdot(1+X^2)\right\}$$

Poslednji član zanemarujemo, jer je $a \sim 10^8$, pa je a^4 jako veliko:

$$E = 4\pi^2 SI\left\{1 - \frac{8SI}{(AI_a+BI_b)a^2} - \frac{4SI}{(AI_a+BI_b)a^2}X^2\right\}, \qquad X^2 = c^2k^2$$

$$E = 4\pi^2 SI\left[1 - \frac{8SI}{(AI_a+BI_b)a^2}\right] - 4\pi^2 SI\,\frac{\hbar^2k^2}{2m_o} \qquad \ldots \text{II } 4.23.$$

Iz ove jednačine je očigledno da je efektivna masa data izrazom:

$$m_o = \frac{\hbar^2 a^2(AI_a+BI_b)}{32\pi^2S^2I^2c^2} \qquad \ldots \text{II } 4.24.$$

Uopšte u oblasti malih talasnih vektora energija dopunskih elementarnih ekscitacija je kvadratna funkcija talasnog vektora i ima oblik II 4.23.

Zaključak

Prilikom analize sistema spinova sa dve primese razmatran je slučaj jednodimenzionalne spinske matrice sa dva „primesna" spina. Mada je ovaj slučaj dosta daleko od struktura koje se pojavljuju u prirodi, on ipak može da da kvalitativnu ocenu dopunskih efekata do kojih dovodi prisustvo novih spinova.

Rezultati analize pokazuju da prisustvo primesa s jedne strane može da menja karakteristike spinskih talasa u čistoj matrici, ali da osim toga dovodi do dopunskih pobuđenja, koja se u čistoj matrici ne pojavljuju.

Akcenat analize, koja je ovde izvršena, stavljen je na ove dopunske ekscitacije, a ispitani su njihovi zakoni disperzije. U opštem slučaju ove elementarne ekscitacije imaju prigušenje, pa se ne mogu smatrati vremenski relevantnom karakteristikom sistema. U radu je ispitan slučaj simetričnog rasporeda primesa, kada je vreme života dopunskih ekscitacija praktično beskonačno dugo i ispitane su energetske karakteristike sistema pod ovim uslovima.

Pokazano je da dopunske elementarne ekscitacije ne mogu da egzistiraju za sve vrednosti talasnog vektora u prvoj Briluenovoj zoni, već samo u oblasti malih talasnih vektora. Nađen je zakon disperzije za ove ekscitacije i pronađeno je da je njihova efektivna masa negativna, što znači da prilikom porasta impulsa, energija dopunskih ekscitacija opada. Ovo znači, s tačke gledišta daljih aplikacija dobijenih rezultata, da je ponašanje dopunskih ekscitacija analogno ponašanju eksitona sa negativnom disperzijom, pa bi dalje razvijanje ove teorije moglo da ide već utabanim putevima, koji su razrađeni za optička pobuđenja sistema.

Literatura:

1. S.V. Tyablikov : The Metods of Quantum Theory in Magnetism, Izd. Nauka, Moscow 1965.
2. Charles Kittel : Uvod u fiziku čvrstog stanja, „Savremena administracija", Beograd 1972.
3. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц : Квантовоя механика физматгиз, Москва 1963.
4. В.М. Агранович : Теория экситонов, „Наука", Москва 1968.
5. A. S. Davidov : Quantum Mechanics, Moscow 1963.