UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

IVIĆ ZORAN

# HIBRIDNE EKSITACIJE U ANTIFEROELEKTRICIMA KOD ELEKTRODIPOLNIH I MAGNETNODIPOLNIH PRELAZA

DIPLOMSKI RAD

Zahvaljujem se Dr. Mariu Škrinjaru na svesrdnoj pomoći koju mi je pružio pri izboru temę i izradi ovog diplomskog rada .

S A D R Ž A J : strana

# U V O D

Cilj ovog diplomskog rada je da se ispitaju optičke i magnetne karakteristike kristala sa složenom magnetnom rešetkom. Posmatraćemo kristale koji sadrže jone željeza (sa nepopunjenom 3d ljuskom), ili jone iz grupe retkih zemalja (sa nepopunjenom 4f ljuskom). Ovi kristali, pri hladjenu ispod neke temperature, prelaze u magnetno uredjena stanja. Temperatura prelaza se naziva Kirijeva temperatura (Tc) ukoliko je uredjeno stanje feromagnetno, a temperatura Nila (Tn) ako je to uredjeno stanje antiferomagnetno.

Interakcija svetlosti sa takvim kristalima poseduje niz osobina, koje su povezane kako sa elektronskom strukturom izolovanih jona tako i sa kolektivnim osobinama pobudjenih stanja uslovljenih magnetnim uredjenjem.

Dalje ćemo posmatrati antiferomagnetne dielektrike (AFD) u čiji sastav elementarne ćelije ulaze dvovalentni i trovalentni joni željeza, koji poseduju magnetne momente (spisnske) različite od nule.

Kolektivna pobudjenja AFD, kao i u slučaju molekularnih kristala, možemo uporediti sa pobudjenjima izolovanih jona. Spektar pobudjenih stanja pri kojima se preorijentišu samo spinovi jona, karakterišu spinski talasi ili magnoni. Pobudjenja u optičkoj oblasti spektra, vezana su sa izmenom orbitalnog kretanja elektrona 3d ljuske paramagnetnih jona, sa promenom ili bez promene spina elektrona. U prilog tome govore sličnosti u apsorpcionim spektrima kristala, koji sadrže jednake paramagnetne jone i različite nemagnetne jone (ligande).

Dvovalentni joni atoma Ni, Co, Fe i Mn imaju u 3d ljusci 8, 7, 6, 5 elektrona ume to 10. Elektroni 3d ljuske nalaze se unutar atoma, tako da radijalne funkcije nemaju čvorova što dovodi do slabog prekrivanja talasnih funkcija 3d elektrona susednih jona. Usled toga kolektivna pobudjenja, sa dobrom tačnošću, se mogu opisivati u Hajtler - Londonovoj aproksimaciji.

Pri poredjenju spektra kristala sa pobudjenim stanjima paramagnetnih jona, treba uzeti u obzir date ekscitacije odgovaraju prelazima medju stanjima jednake parnosti 3d ljuske. Često su ti prelazi propraćeni promenom spina, na prm. kod $Mn^{++}$ svi prelazi su mogući uz izmenu spina elektrona.

Prelazi pod dejstvom svetlosti, medju stanjima različite multipolnosti, zabranjeni su (po spinu) u nultoj aproksimaciji teorije perturbacija, tj. bez uračunavanja spin - orbitalne interakcije. Prelazi medju stanjima iste parnosti zabranjeni su u elektrodipolnoj aproksimaciji.

Prelazi sa izmenom spina ostvaruju se na račun slabe spinorbitalne interakcije u sredjem kristalnom polju, kojeg stvaraju magnetni jon okružen katjonima. Energija takve interakcije je znatno manja od energije Kulonovske interakcije unutar jona, te se zato u apsorpcionom spektru kristala pojavljuju uske linije slabog intenziteta, koje odgovaraju jedno-elektronskim prelazima sa promenom spina. Osnovna apsorpcija svetlosti dolazi na račun dvočestičnih prelaza u kojima, zajedno sa elektronskim eksitacijama, učestvuju spinska pobudjenja - magnoni. Obrazovanju takvih dvočestičnih pobudjenja dogovaraju široke linije apsorpcije.

U daljnjem radu razmatraćemo samo jednočestične pre-laze, koji odgovaraju elektro - dipolnim ili na magnetodipolnim prelazima kod paramagnetnih jona AFD.

# I GLAVA

# HIBRIDIZACIJA ELEMENTARNIH EKSITACIJA U AFD

## 1. 1. Hamiltonijon AFD u konstantnom magnetnom polju i magnetni eksitoni

Pretpostavimo da se kristal nalazi u stalnom magnetnom polju jačine $\vec{H}_o$. U osnovnom stanju paramagnetnog jona njegov spin jednak je s, a u pobudjenom stanje je s - 1. Operator energije pobudjenih stanja (Hamiltonijan) kristala, pri malom broju eksitacija možemo napisati u obliku ( [1] , glava XIII) :

$$\hat{H}_{ME} = \sum_{\vec{n}\alpha, f} (\epsilon_\alpha^f + D_\alpha^f)\, \hat{B}^+_{\vec{n}\alpha}(f)\, \hat{B}_{\vec{n}\alpha}(f) + \sum_{\substack{\vec{n}\alpha, \vec{m}\beta \\ f, g}} M_{\vec{n}\alpha, \vec{m}\beta}(f,g)\, \hat{B}^+_{\vec{n}\alpha}(f)\, \hat{B}_{\vec{m}\beta}(g) \qquad (I.\ 1.\ 1.)$$

gde indeks $\alpha = 1,2,\dots\sigma$ - prebrojava magnetne podrešetke, a g, f = 1,2,...$\lambda$ prebrojavaju elektronske nivoe u magnetnim jonima i gde je:

$$\epsilon_\alpha^f = \epsilon_f - \mu_B [(s-1)g_f - s g_o]\, |\vec{H}_o| \cos\theta_\alpha \qquad (I.\ 1.2.)$$

energija f-te eksitacije jona $\alpha$, koji se nalazi u spoljašnjem magnetnom polju $\vec{H}_o$, a $g_f$ i $g_o$ su Landeovi faktori u pobudjenom i osnovnom stanju jona, $\theta_\alpha$ je srednji ugao, koji obrazuje spin sa pravcem magnetnog polja. $D_{\alpha}^{f}$ je promena energije interakcije jona $\alpha$ sa paramagnetnim jonima, koji ga okružuju, pri prelazu u f-to pobudjeno stanje. Ta veličina ima ulogu dopunskog kristalnog polja i izražava se preko integrala izmene $J_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\beta}(f)$ pomoću formule :

$$D_{\alpha}^{f} = \sum_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\beta} \left[ 2\cos^2\frac{\theta-\theta_i}{2} - 1 \right] J_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\beta}(f) \qquad \text{(I.1.3.)}$$

a $M_{n\alpha,m\beta}(f,g)$ su dati formulama:

$$M^{ff}_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\beta} \equiv \langle \varphi^{f}_{\vec{n}\alpha}\varphi^{(0)}_{\vec{m}\beta} | \hat{V}_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\beta} | \varphi^{f}_{\vec{m}\beta}\varphi^{(0)}_{\vec{n}\alpha} \rangle \qquad \text{(I.1.4.)}$$

- matrični element prelaza f-tog pobudjenja sa jona $\vec{m}\beta$ na jon $\vec{n}\alpha$.

$$M^{fg}_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\beta} \equiv \langle \varphi^{f}_{\vec{n}\alpha}\varphi^{(0)}_{\vec{m}\beta} | \hat{V}_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\beta} | \varphi^{g}_{\vec{m}\beta}\varphi^{(0)}_{\vec{n}\alpha} \rangle \qquad \text{(I.1.5.)}$$

- matrični element mešane f-te i g-te eksitacije stanja jona. $\hat{V}_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\beta}$ - je operator interakcije jona $\vec{n}\alpha$ i $\vec{m}\beta$, koji sadrži kako Kulonovu tako i interakciju izmene (videti [2]).

Operator (I.1.1) dijagonalizovati ćemo da bi dobili energije elementarnih eksitacija, ali uz pretpostavku da se pobudjuje samo jedan elektronski nivo tj. f=g = o, 1 : tako da u (I.1.1.) nestaju sume po f i g, odnosno

$$\hat{H}_{ME} = \sum_{\vec{n}\alpha} \Delta_{\alpha} \hat{B}^{+}_{\vec{n}\alpha} \hat{B}_{\vec{n}\alpha} + \sum_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\beta} M(\vec{n}\alpha-\vec{m}\beta) \hat{B}^{+}_{\vec{n}\alpha} \hat{B}_{\vec{m}\beta} , \qquad \text{(I.1.6.)}$$

$$\Delta_{\alpha} \equiv \epsilon^{f}_{\alpha} + D^{f}_{\alpha}$$

Dijagonalizaciju gornjeg hamiltonijona vršimo u dve etape:
prvo, pomoću Furije transformacije prelazimo u impulsni prostor:

$$\hat{B}_{\vec{m}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \hat{B}_{\vec{k}\lambda}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{m}_\lambda} \tag{I.1.7.}$$

a zatim prelazimo na nove operatore smenom:

$$\hat{B}_{\vec{k}\lambda} = \sum_{\mu} U_{\mu\lambda}(\vec{k})\, \hat{A}_{\mu}(\vec{k}) \tag{I.1.8.}$$

tako da dobijamo dijagonalni hamiltonijon:
($A_{\mu}(\vec{k})$ i $A^{+}_{\mu}(\vec{k})$ su t.z.v. operatori kreacije i anihilacije magnetnih eksitona)

$$\hat{H}_{ME} = \sum_{k,\mu} E_{\mu}(\vec{k})\, \hat{A}^{+}_{\mu}(\vec{k})\, \hat{A}_{\mu}(\vec{k}) \,. \tag{I.1.9.}$$

Indeks $\mu$ prebrojava eksitonske zone $\mu = 1,2\ldots 6$

Energiju t.z.v. magnetnih eksitona odredjujemo iz sistema jednačina

$$\sum_{\beta} \left[ \mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{k}) - \delta_{\alpha\beta} E_{\mu}(k) \right] . U_{\mu\beta}(\vec{k}) = 0 \tag{I.1.10.}$$

gde je

$$\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \Delta_{\alpha}\, \delta_{\alpha\beta} + L_{\alpha\beta}(\vec{k}) \tag{I.1.11.}$$

a veličina $L_{\alpha\beta}(\vec{k})$ je odredjena relacijom

(I.1.12.)

$$L_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}_\alpha - \vec{m}_\beta} M(\vec{n}_\alpha - \vec{m}_\beta)\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{n}_\alpha - \vec{m}_\beta)} \qquad \text{(I.1.12.)}$$

u slučaju kada imamo kristal sa dve podrešetke, gornje relacije se svode na

$$\hat{H}_{NE} = \sum_{\mu} E_\mu(\vec{k})\, \hat{A}_\mu^+(\vec{k})\, \hat{A}_\mu(\vec{k}) \qquad \text{(I.1.13.)}$$

gde je:

$$E_\mu(\vec{k}) = \frac{1}{2}\Big\{\epsilon_1(\vec{k}) + \epsilon_2(\vec{k}) - (-1)^\mu \sqrt{[\epsilon_1(\vec{k}) - \epsilon_2(\vec{k})]^2 + 4\,|\mathcal{L}_{12}(\vec{k})|^2}\Big\}, \qquad \text{(I.1.14.)}$$

a unitarna matrica data je izrazom

$$U_{\mu\alpha}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \cos\varkappa & -\sin\varkappa \\ \sin\varkappa & \cos\varkappa \end{pmatrix} \qquad \text{(I.1.15.)}$$

a $\varkappa$ je dato formulom:

$$\mathrm{tg}\,\varkappa = \frac{\epsilon_1(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k})}{\mathcal{L}_{12}(\vec{k})} \qquad \text{(I.1.16.)}$$

## I.2. Hamiltonijon interakcije AFD sa elektromagnetnim poljem

Ovaj hamiltonijon ćemo izračunati pri kulonovskoj kalibraciji za vektorski potencijal elektromagnetnog polja tj.:

$$\operatorname{div}\vec{A} = 0 \qquad (I.2.1.)$$

Zahvaljujući tome hamiltonijon sistema AFD i elektromagnetnog polja možemo napisati u obliku:

$$\hat{H} = \hat{H}_{me} + \hat{H}_f + \hat{H}_{int} \qquad (I.2.2.)$$

$\hat{H}_f$ je hamiltonijon polja poprečnih (transverzalnih) fotona, koji ima oblik:

$$\hat{H}_f = \sum_{\vec{k}j} \hbar c|\vec{k}|\, \hat{a}^+_{\vec{k}j} \hat{a}_{\vec{k}j} \qquad (I.2.3.)$$

gde $j=1,2$; dve grane polarizacije, a $\hat{a}^+_{\vec{k}j}$ i $\hat{a}_{\vec{k}j}$ su operatori kreacije i anihilacije fotona.

$E_f = \hbar\omega_k \equiv \hbar c|\vec{k}|$ energija fotona, a

$\hat{H}_{int}$ hamiltonijon interakcije AFD sa elektromagnetnim poljem je dat formulom:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{1}{c}\sum_{\vec{n}\alpha}\sum_{\nu}{}^{(\vec{n}\alpha)} \frac{e_\nu}{m_\nu}\hat{\vec{A}}(\vec{\rho}_\nu^{\,\vec{n}\alpha})\hat{\vec{p}}_\nu^{\,(\vec{n}\alpha)} + \frac{1}{2c^2}\sum_{\vec{n}\alpha}\sum_{\nu}\frac{e_\nu^2}{m_\nu}\hat{\vec{A}}^2(\vec{\rho}_\nu^{\,\vec{n}\alpha}) \qquad (I.2.4.)$$

gde indeks $\nu$ prebrojava sva naelektrisanja jona na mestu $\vec{n\alpha}$ (optički aktivni elektroni).

$$\vec{\rho}_\nu^{\,\vec{n}\alpha} = \vec{r}_{\vec{n}\alpha} + \vec{\rho}_\nu \qquad (I.2.5.)$$

gdje je $\vec{r}_{n\alpha}$ vektor položaja jona u kristalu AFD, a $\vec{\rho}_\nu$ vektor položaja elektrona u jonu, očigledno je da je $\vec{r}_{n\alpha} \gg \vec{\rho}_\nu$, odnosno $\vec{\rho}_\nu^{\,n\alpha} \approx \vec{r}_{n\alpha}$.

Sada ćemo $\hat{H}_{int}$ napisati kao zbir dva hamiltonijona:

$$\hat{H}_{int} = \hat{H}_{int}^{(1)} + \hat{H}_{int}^{(2)} \qquad (I.2.6.)$$

$$\hat{H}_{int}^{(2)} = \frac{1}{2c^2} \sum_{n\alpha} \frac{se^2}{m} \vec{A}^2(\vec{r}_{n\alpha}) \qquad (I.2.7.)$$

gdje je s broj elektrona.

Vektrorski potencijal elektromagnetnog polja u AFD može mo izraziti preko fotonskih operatora ($\hat{a}_{\vec{k}j}^{+}$ i $\hat{a}_{\vec{k}j}$) na sledeći način (videti [3] glava III) :

$$\hat{A}(\vec{\rho}_{\nu}^{\,n\alpha}) = \sum_{\vec{k}j} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{V|\vec{k}|c}\right)^{1/2} \vec{l}_{\vec{k}j} \left[\hat{a}_{\vec{k}j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{n\alpha}} (1 + i\vec{k}\cdot\vec{\rho}_0) + \hat{a}_{\vec{k}j}^{+} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_{n\alpha}} (1 - i\vec{k}\cdot\vec{\rho}_0)\right] \qquad (I.2.8.)$$

ovde smo uveli aproksimaciju $e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}_0} \simeq 1 + i\vec{k}\cdot\vec{\rho}_{\nu}^{\,n\alpha}$ koja se sasvim zadovoljavajuća u optičkoj oblasti spektra, jer je $\vec{k}\cdot\vec{\rho}$ reda veličine $10^{-2}$, $\vec{l}_{\vec{k}j}$ je vektor polarizacije, a $\hat{a}_{\vec{k}j}$ i $\hat{a}_{\vec{k}j}^{+}$ su operatori anihilacije i kreacije fotona sa talasnim vektorom $\vec{k}$.

Ako zamenimo jednačinu (I.2.8.) u (I.2.7.) i zanemarivši $\rho_0$ onda operator (I.2.7.) postaje:

$$\hat{H}_{int}^{(2)} = \frac{\hbar\omega_0^2}{4} \sum_{\vec{k}j} \left[2\hat{a}_{\vec{k}j}^{+}\hat{a}_{\vec{k}j} + \hat{a}_{\vec{k}j}\hat{a}_{-\vec{k}j} + \hat{a}_{\vec{k}j}^{+}\hat{a}_{-\vec{k}j}^{+}\right] \qquad (I.2.9.)$$

gde je

$$\omega_0^2 = \frac{4\pi e^2 N \sigma s}{m V} \qquad (I.2.10.)$$

takozvana plazmena učestanost.

Operator $H^{(2)}_{int}$ daje nam efekte retardovane interakcije zračenja i kristala.

Drugi deo hamiltonijona interakcije ( $H^{(1)}_{int}$ ) sadrži članove multipolnih zračenja, u prvoj aproksimaciji elektrodipolno, a u drugoj aproksimaciji magnetnodipolno i električno kvadrupolno zračenje itd.

Pošto posmatramo magnetne jone, koji poseduju spin, moramo hamiltonijanu (I.2.4.) dodati i relativistički član interakcije spina i spoljnog magnetnog polja.

U hamiltonijanu

$$\hat{H}^{(1)}_{int} = -\sum_{\vec{k},j}\left(\frac{2\pi\hbar}{V|\vec{k}|c}\right)^{1/2}\vec{e}_{\vec{k}j}\,\hat{a}_{\vec{k}j}\sum_{n\alpha} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{n\alpha}}\sum_{\nu}\frac{e_\nu}{m_\nu}\vec{p}_\nu^{\,n\alpha}\left(1+i\vec{\rho}_\nu\cdot\vec{k}\right)+E.c. \tag{I.2.11.}$$

prvi član nam predstavlja elektrodipolno zračenje:

$$H^{ed}_{int} = -\sum_{\vec{k},j}\left(\frac{2\pi\hbar}{VkC}\right)^{1/2}\vec{e}_{\vec{k}j}\cdot\hat{a}_{\vec{k}j}\cdot\sum_{n\alpha}\frac{e}{m}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{n\alpha}}\,\hat{\vec{p}}_{n\alpha}+E.C. \tag{I.2.12.}$$

gde je $\vec{p}_{n\alpha}$ ukupan impuls elektrona jona $\vec{n\alpha}$

$$\hat{\vec{p}}_{n\alpha} = \sum_{\nu}\hat{\vec{p}}_\nu^{\,n\alpha} \tag{I.2.12.a}$$

Sada ćemo operator impulsa izraziti u reprezentaciji druge kvanitizacije preko operatora kreacije i anihilacije eksitona, zadržavajući samo linearne članove:

$$\hat{\vec{p}}_{n\alpha} = \langle 0|\hat{\vec{p}}_{n\alpha}|f\rangle\hat{B}_{\vec{n}\alpha} + \langle f|\hat{\vec{p}}_{n\alpha}|0\rangle\hat{B}^{+}_{\vec{n}\alpha} \tag{I.2.13.}$$

Koristeći komutacione relacije za impuls i koordinatu $[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$, možemo izraziti matrične elemente operatora impulsa $\langle 0|\hat{\vec{p}}_{n\alpha}|f\rangle$ i $\langle f|\hat{\vec{p}}_{n\alpha}|0\rangle$ preko matričnih elemenata operatora dipolnog momenta jona.

Koristeći komutator $\frac{m}{i\hbar}[\hat{\vec{r}}_\alpha,\hat{H}_{n\alpha}]=\hat{\vec{p}}_{n\alpha}$, dobijamo:

$$\langle 0|\hat{\vec{p}}_{n\alpha}|f\rangle\hat{B}_{\vec{n}\alpha}=\frac{m}{i\hbar}\langle 0|[\hat{\vec{r}}_\alpha,\hat{H}_{n\alpha}]|f\rangle\hat{B}_{\vec{n}\alpha}$$

(I.2.14.a.)

$$\langle 0|\hat{\vec{p}}_{n\alpha}|f\rangle\hat{B}_{\vec{n}\alpha}=\frac{m}{i\hbar}(\epsilon_f-\epsilon_0)\langle 0|\hat{\vec{r}}|f\rangle\hat{B}_{\vec{n}\alpha}$$

odnosno

$$\langle 0|\hat{\vec{p}}_{\vec{n}\alpha}|f\rangle\hat{B}_{\vec{n}\alpha}=-im\omega_f\langle 0|\hat{\vec{r}}|f\rangle\hat{B}_{\vec{n}\alpha}$$

$$\langle f|\hat{\vec{p}}_{n\alpha}|0\rangle\hat{B}^+_{\vec{n}\alpha}=i\omega_f\, m\langle f|\hat{\vec{r}}|0\rangle\hat{B}^+_{\vec{n}\alpha} \qquad \text{(I.2.14.b.)}$$

Ako jednačina (I.2.14.b.) podelimo sa e i uzevši u obzir da je dipolni moment dat kao $\hat{\vec{d}}_{n\alpha}=e\hat{\vec{r}}_{n\alpha}$ dobijamo:

$$\langle f|\hat{\vec{p}}_{n\alpha}|0\rangle\hat{B}^+_{\vec{n}\alpha}=\frac{im\omega_f}{e}\hat{\vec{d}}_\alpha\hat{B}^+_{\vec{n}\alpha} \qquad \text{(I.2.15.)}$$

$$\langle 0|\hat{\vec{p}}_{n\alpha}|f\rangle\hat{B}_{\vec{n}\alpha}=-i\frac{m\omega_f}{e}\hat{\vec{d}}^*_\alpha\hat{B}_{\vec{n}\alpha}$$

Konačno, uvrštavanjem jednačina (I.2.15.) u jednačinu (I.2.12) dobijamo:

$$\hat{H}^{ed}_{int}=-i\omega_f\sum_{kj}\left(\frac{2\pi\hbar}{V\mathcal{H}c}\right)^{1/2}\vec{e}_{\vec{k}j}\,\hat{a}_{\vec{k}j}\sum_{n\alpha}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{n\alpha}}(\vec{d}_\alpha\hat{B}^+_{\vec{n}\alpha}-\vec{d}^*_\alpha\hat{B}_{\vec{n}\alpha}+\text{ec})$$

(I.2.16.)

Prelaskom u impulsni prostor pomoću Furije transformacije (I.1.7.), a zatim zamenivši operatore $\hat{B}_{\vec{n}\alpha}$ novim operatorima $\hat{B}_\mu(\vec{k})$ pomoću formule (I.1.8.) dobijamo konačni oblik za hamiltonijon interakcije:

$$H_{int}^{ed} = -\frac{i\sqrt{N}\,e_f}{\hbar}\sum_{\vec{k},j,\alpha,\mu}\left(\frac{2\pi\hbar}{V|\vec{k}|c}\right)^{1/2}\Big[u_{\mu\alpha}^{*}(\vec{k})(\vec{l}_{\vec{k}j}\cdot\vec{d}_{\alpha})\hat{a}_{\vec{k}j}\hat{A}_{\mu}^{+}(\vec{k}) -$$

$$-(\vec{l}_{\vec{k}j}\cdot\vec{d}_{\alpha}^{*})\,u_{\mu\alpha}(-\vec{k})\,a_{\vec{k}j}A_{\mu}(-\vec{k})\Big] + E.c. \qquad (I.2.17.)$$

Ovde ćemo uvesti sledeće oznake

$$\sum_{\alpha} u_{\mu\alpha}^{*}(\vec{k})\,\vec{d}_{\alpha} = \vec{P}_{\mu}(\vec{k})$$

$$\sum_{\alpha} u_{\mu\alpha}(\vec{k})\,\vec{d}_{\alpha}^{*} = \vec{P}_{\mu}^{*}(-\vec{k}) \qquad (I.2.18.)$$

u slučaju da kristal ima centar inverzije važi

$$\vec{P}_{\mu}(\vec{k}) = \vec{P}_{\mu}^{*}(-\vec{k}).$$

$$T_{j\mu}(\vec{k}) = -i\sqrt{N}\,\omega_f\left(\frac{2\pi\hbar}{V|\vec{k}|c}\right)^{1/2}\left(\vec{l}_{\vec{k}j}\cdot\hat{\vec{P}}_{\mu}(\vec{k})\right) \qquad (I.2.19.)$$

$$T_{j\mu}^{*}(\vec{k}) = i\sqrt{N}\,\omega_f\left(\frac{2\pi\hbar}{V|\vec{k}|c}\right)^{1/2}\left(\vec{l}_{\vec{k}j}\cdot\vec{P}_{\mu}^{*}(-\vec{k})\right)$$

tako da operator (I.2.17.) poprima sledeći oblik:

$$\hat{H}_{int}^{ed} = \sum_{j,\mu,\vec{k}}\Big\{T_{j\mu}(\vec{k})\big[\hat{a}_{\vec{k}j}\hat{A}_{\mu}^{+}(\vec{k}) + \hat{a}_{\vec{k}j}^{+}\hat{A}_{\mu}^{+}(-\vec{k})\big] +$$

$$+ T_{j\mu}^{*}(-\vec{k})\big[\hat{a}_{\vec{k}j}\hat{A}_{\mu}(-\vec{k}) + \hat{a}_{\vec{k}j}^{+}\hat{A}_{\mu}(\vec{k})\big]\Big\} \qquad (I.2.20.)$$

Potražimo hamiltonijon magnetnodipolnog zračenja

$$\hat{H}_{int}^{m.d.} = \mu_B\sum_{\vec{n}\alpha,\nu}\left(\hat{\vec{l}}_{\nu,\vec{n}\alpha} + 2\hat{\vec{S}}_{\nu,\vec{n}\alpha}\right)\vec{\mathcal{H}}(\vec{\rho}_{n\alpha}) \qquad (I.2.21.)$$

ovde je $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ Borov magneton, $\hat{\vec{l}}_{\nu,\vec{n}\alpha}$ i $\hat{\vec{S}}_{\nu,\vec{n}\alpha}$ su operatori orbitalnog i spinskog momenta $\nu$-tog elektrona n-tog jona, a $\vec{\mathcal{H}}$ operator jačine magnetnog polja, koji se može izraziti preko fotonskih operatora na sledeći način (videti [3], glava III):

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{\rho}_{n\alpha}) = i\sum_{\vec{k}j}\left(\frac{2\pi\hbar c}{V|k|}\right)^{1/2}(\vec{k}\times \vec{e}_{\vec{k}j})\left[\hat{a}_{\vec{k}j}e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}_{n\alpha}} - \hat{a}^{+}_{\vec{k}j}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\rho}_{n\alpha}}\right]$$

(I.2.22.)

ovdje ćemo, kao i ranije uvesti aproksimaciju:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}_{n\alpha}} \approx e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{n\alpha}} \equiv e^{i\vec{k}\cdot\vec{n\alpha}}$$ (I.2.23.)

a zatim prelazimo u reprezentaciju druge kvantizacije sa bazisnim funkcijama $\varphi_n^{(0)} \equiv |0\rangle i \varphi_n^f |f\rangle$. Za operatore $\hat{\vec{l}}_\nu$ i $\hat{\vec{S}}_\nu$ dobijamo izraze:

$$\hat{\vec{l}}_\nu = \langle f|\hat{\vec{l}}_\nu|0\rangle \hat{B}^{+}_{\vec{n}\alpha} + \langle 0|\hat{\vec{l}}_\nu|f\rangle \hat{B}_{\vec{n}\alpha}$$

(I.2.24.)

$$\hat{\vec{S}}_\nu = \langle f|\hat{\vec{S}}_\nu|0\rangle \hat{B}^{+}_{\vec{n}\alpha} + \langle 0|\hat{\vec{S}}_\nu|f\rangle \hat{B}_{\vec{n}\alpha},$$

a zatim kad izvršimo Furije transformaciju (I.1.7.), hamiltonijon magnetnodipolne interakcije postaje:

$$\hat{H}^{md}_{int} = i\mu_B\sum_{\vec{k}j}\left(\frac{2\pi\hbar c}{kV}\right)^{1/2}(\vec{k}\times\vec{e}_{kj})\Big\{(\vec{l}_\alpha + 2\vec{S}_\alpha)\left[\hat{a}_{\vec{k}j}\hat{B}^{+}_{\alpha}(\vec{k}) - \hat{a}^{+}_{\vec{k}j}\hat{B}^{+}_{\alpha}(-\vec{k})\right] + (\vec{l}^{\,*}_\alpha + 2\vec{S}^{*})\left[\hat{a}_{\vec{k}j}\hat{B}_{\alpha}(-\vec{k}) - \hat{a}^{+}_{\vec{k}j}\hat{B}_{\alpha}(\vec{k})\right]\Big\}$$

(I.1.25.)

gde su $\vec{l}_\alpha$ i $\vec{S}_\alpha$ dati formulama:

$$\vec{l}_\alpha = \sum_\nu \langle f|\hat{\vec{l}}_{\nu,n\alpha}|0\rangle$$

$$\vec{S}_\alpha = \sum_\nu \langle f|\hat{\vec{S}}_{\nu,n\alpha}|0\rangle$$

(1.2.26.)

$$\vec{l}_\alpha^{\,*} = \sum_\nu \langle 0 | \hat{\vec{l}}_{\nu, n\alpha} | f \rangle$$

$$\vec{S}_\alpha^{\,*} = \sum_\nu \langle 0 | \hat{\vec{S}}_{\nu, n\alpha} | f \rangle$$

Ako sada predjemo pomoću formule (I.1.8.) na nove operatore $\hat{A}_\mu(\vec{k})$ i ako uvedemo Oznake :

$$\sum_\alpha M_{\mu\alpha}^*(\vec{k}) (\hat{\vec{l}}_\alpha + 2\hat{\vec{S}}_\alpha) = \vec{L}_\mu(\vec{k})$$

$$\sum_\alpha M_{\mu\alpha}(-\vec{k}) (\hat{\vec{l}}_\alpha^{\,*} + 2\hat{\vec{S}}_\alpha^{\,*}) = \vec{L}_\mu^{\,*}(-\vec{k}) \qquad (I,2,27.)$$

$$M_{j\mu}(\vec{k}) = i\mu_B \left(\frac{2\pi\hbar c}{V|\vec{k}|}\right)^{1/2} (\vec{k} \times \vec{e}_{kj}) \cdot \vec{L}_\mu(\vec{k}) \qquad (I,2,28.)$$

operator (I,2,25.) postaje:

$$\hat{H}_{int}^{m\,d} = \sum_{k,j,\mu} \{ M_{j\mu}(\vec{k}) [\hat{a}_{\vec{k}j} \hat{A}_\mu^+(\vec{k}) - \hat{a}_{\vec{k}j}^+ \hat{A}_\mu^+(-\vec{k})] -$$

$$- M_{j\mu}^*(\vec{k}) [\hat{a}_{\vec{k}j} \hat{A}_\mu(-\vec{k}) - \hat{a}_{\vec{k}j}^+ \hat{A}_\mu(\vec{k})] \} \qquad (I,2,29.)$$

## I.3. Hibridne eksitacije u AFD

Ukupni hamiltonijon sistema je zbir svih gornjih hamiltonijona:

$$\hat{H} = \hat{H}_{NE} + \hat{H}_f + \hat{H}_{int}^{ed} + \hat{H}_{int}^{m\cdot d} + H_{int}^{(2)} \qquad (I.3.1.)$$

koji su dati jednačinama (I,1.9.), (1,2,3.), (1,2.9.), (I,2,20) i (I.2.29.). Kada odgovarajuće izraze uvrstimo u (1.3.1.) dobijamo:

$$\hat{H} = \sum_{k>0} \hat{H}_k + \sum_{k<0} \hat{H}_k \qquad (I.3.2.)$$

gdje je $\hat{H}_k$ dat izrazom:

$$\hat{H}_K = \sum_{\mu} E_{\mu}(\vec{k})\hat{A}^{+}_{\mu}(\vec{k})\hat{A}_{\mu}(\vec{k}) + \sum_{j=1,2}\Big[\Big(\hbar\omega_k + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\omega_k}\Big)\hat{a}^{+}_{\vec{k}j}\hat{a}_{\vec{k}j} + \frac{\hbar\omega_0^2}{4\omega_k}\big(\hat{a}_{\vec{k}j}\hat{a}_{-\vec{k}j} + \hat{a}^{+}_{\vec{k}j}a^{+}_{-\vec{k}j}\big)\Big] + \sum_{\mu,j}\Big\{X^{(k)}_{j\mu}\big[\hat{a}_{\vec{k}j}\hat{A}^{+}_{\mu}(\vec{k}) - a^{+}_{\vec{k}j}\hat{A}_{\mu}(\vec{k})\big] + Y_{j\mu}(\vec{k})\big[\hat{a}^{+}_{\vec{k}j}\hat{A}^{+}_{\mu}(-\vec{k}) - \hat{a}_{\vec{k}j}\hat{A}_{\mu}(-\vec{k})\big]\Big\} \qquad (I.3.3.)$$

a $X_{j\mu}(\vec{k})$, $Y_{j\mu}(\vec{k})$, $X^{*}_{j\mu}$ i $Y^{*}_{j\mu}(\vec{k})$ su dati kao:

$$X_{j\mu} = T_{j\mu}(\vec{k}) + M_{j\mu}(\vec{k}) \quad ; \quad X^{*}_{j\mu}(\vec{k}) = T^{*}_{j\mu}(\vec{k}) + M^{*}_{j\mu}(\vec{k})$$

$$(I.3.4.)$$

$$Y_{j\mu}(k) = T_{j\mu}(\vec{k}) - M_{j\mu}(\vec{k}) \quad ; \quad Y^{*}_{j\mu}(\vec{k}) = T^{*}_{j\mu}(\vec{k}) - M^{*}_{j\mu}(\vec{k})$$

polazeći od relacija (I.2.19.) i (I.2.28.) nalazimo sledeće relacije koje zadovoljavaju funkcije $X_{ju}(k)$ i $Y_{ju}(k)$ pod uslovom da je $\vec{L}_{j\mu}(\vec{k}) = \vec{L}^{*}_{j\mu}(k)$ :

$$X_{j\mu}(\vec{k}) = -X^{*}_{j\mu}(\vec{k}),$$

$$Y_{j\mu}(\vec{k}) = -Y^{*}_{j\mu}(\vec{k}) \qquad (I.3.5.)$$

Spektar hibridnih eksitacija koje nastaju u ovakvom sistemu, dobićemo posle dijagonalizacije kompletnog hamiltonijona sistema (I.3.3.). Ovu dijagonalizaciju izvršićemo prelazeći sa operatora $\hat{A}_{\mu}(k)$ i $\hat{a}_{kj}$ na nove operatore $\hat{\xi}_{\rho}(k)$ pomoću smena:

$$A_{\mu}(\vec{k}) = \sum_{\rho}\big[v_{\mu\rho}(\vec{k})\hat{\xi}_{\rho}(\vec{k}) + w^{*}_{\mu\rho}(-\vec{k})\xi^{+}_{\rho}(-\vec{k})\big]$$

$$A^{+}_{\mu}(\vec{k}) = \sum_{\rho}\big[v^{*}_{\mu\rho}(\vec{k})\xi^{+}_{\rho}(\vec{k}) + w_{\mu\rho}(-\vec{k})\hat{\xi}_{\rho}(-\vec{k})\big]$$

$$\hat{a}_{\vec{k}j} = \sum_{\rho}\big[v_{j\rho}(\vec{k})\hat{\xi}_{\rho}(\vec{k}) + w^{*}_{j\rho}(-\vec{k})\hat{\xi}^{+}_{\rho}(-\vec{k})\big]$$

$$\hat{a}^{+}_{\vec{k}j} = \sum_{\rho}\big[v^{*}_{j\rho}(\vec{k})\hat{\xi}^{+}_{\rho}(\vec{k}) + w_{j\rho}(-\vec{k})\hat{\xi}_{\rho}(-\vec{k})\big] \qquad (I.3.6.)$$

Pošto su $\hat{A}_u(k)$ i $d_{kj}$ Boze operatori onda i $\hat{\xi}_\rho(k)$ moraju biti takodje Boze operatori, tj. moraju da zadovoljavaju komutacione relacije ovog tipa:

$$\left[\hat{\xi}_\rho(\vec{k}), \xi^+_{\rho'}(\vec{k}')\right] = \delta_{\rho\rho'}\,\delta_{kk'}$$

(I.3.7.)

$$\left[\xi_\rho(\vec{k}), \xi_{\rho'}(\vec{k}')\right] = \left[\xi^+_\rho(\vec{k}), \xi^+_{\rho'}(\vec{k}')\right] = 0$$

Polazeći od relacija (I.3.7.) naći ćemo uslove koje moraju zadovoljavati funkcije $v_{\alpha\rho}(\vec{k})$ i $W_{\alpha\rho}(\vec{k})$, $\alpha = j, \mu$

$$\sum_\rho \left[v_{\alpha\rho}(\vec{k})\, v^*_{\alpha'\rho}(\vec{k}) - W_{\alpha\rho}(\vec{k})\, W^*_{\alpha'\rho}(\vec{k})\right] = \delta_{\alpha\alpha'} \qquad \text{(I.3.8.)}$$

$$\sum_\rho v_{\alpha\rho}(\vec{k})\, W^*_{\alpha'\rho}(\vec{k}) - W^*_{\alpha\rho}(\vec{k})\, v_{\alpha'\rho}(\vec{k})] = 0$$

Polazeći od Hajzenbergovih jednačina kretanja za operatore $\hat{a}_{\vec{k}j}, \hat{a}^+_{-\vec{k}j}, \hat{A}_\mu(\vec{k})$ i $\hat{A}^+_\mu(-\vec{k})$ i za opratore $\xi_\rho(\vec{k})$ i $\xi^+_\rho(-\vec{k})$ a znajući da nam dijagonalni hamiltonijon mora imati oblik:

$$\hat{H}_\rho = \sum_\rho E_\rho(\vec{k})\, \hat{\xi}^+(\vec{k})\, \hat{\xi}_\rho(\vec{k}) + \mathcal{E}_0 \qquad \text{(I.3.9.)}$$

dobijamo homogen sistem jednačina, iz koga odredjujemo energije elementarnih eksitacija i funkcije $v_{j\rho}(\vec{k}), v_{\mu\rho}(\vec{k}), W_{j\rho}(\vec{k})$ i $W_{\mu\rho}(\vec{k})$.

$$[E_\rho(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k})]\, v_{\mu\rho}(\vec{k}) - \sum_j \{X_{j\mu}(\vec{k})\, v_{j\rho}(\vec{k}) + Y_{j\mu}(\vec{k})\, W_{j\rho}(\vec{k})\} = 0$$

$$[E_\rho(\vec{k}) + E_\mu(\vec{k})]\, W_{\mu\rho}(\vec{k}) - \sum_j \{X_{j\mu}(\vec{k})\, W_{j\rho}(\vec{k}) + Y_{j\mu}(\vec{k})\, v_{j\rho}(\vec{k})\} = 0$$

$$[\varepsilon_\varrho(\vec{k}) - \hbar\omega_k] v_{j\varrho}(\vec{k}) - \frac{\hbar\omega_0^2}{2\omega_k}[v_{j\varrho}(\vec{k}) + w_{j\varrho}(\vec{k})] + $$
$$+ \sum_\mu \{X_{j\mu}(\vec{k}) v_{\mu\varrho}(\vec{k}) - Y_{j\mu}(\vec{k}) w_{\mu\varrho}(\vec{k})\} = 0$$

(I.3.10.)

$$[\varepsilon_\varrho(\vec{k}) + \hbar\omega_k] w_{j\varrho}(\vec{k}) + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\omega_k}[v_{j\varrho}(\vec{k}) + w_{j\varrho}(\vec{k})] + $$
$$+ \sum_\mu [X_{j\mu}(-\vec{k}) w_{\mu\varrho}(\vec{k}) - Y_{j\mu}(-\vec{k}) w_{\mu\varrho}(\vec{k})] = 0$$

Ovaj sistem posmatraćemo u dva slučaja:

a. kada su dozvoljeni elektro dipolni prelazi (tada su magnetno dipolni prelazi zanemarljivi),

b. kada su zabranjeni elektrodipolni prelazi (malo verovatni), te su magnetnodipolni prelazi dominantni.

U prvom slučaju $X_{j\mu}(\vec{k}) \approx T_{j\mu}(\vec{k})$; $Y_{j\mu}(\vec{k}) \approx T_{j\mu}(\vec{k})$ te sistem (I.3.10.) postaje:

$$[\varepsilon_\varrho(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k})] v_{\mu\varrho}(\vec{k}) = -\sum_j T_{j\mu}(\vec{k})[v_{j\varrho}(\vec{k}) + w_{j\varrho}(\vec{k})]$$
$$[\varepsilon_\varrho(\vec{k}) + E_\mu(\vec{k})] w_{\mu\varrho}(\vec{k}) = \sum_j T_{j\mu}(\vec{k})[v_{j\varrho}(\vec{k}) + w_{j\varrho}(\vec{k})]$$
$$[\varepsilon_\varrho(\vec{k}) - \hbar\omega_k] v_{j\varrho}(\vec{k}) = \frac{\hbar\omega_0^2}{2\omega_k}[v_{j\varrho}(\vec{k}) + w_{j\varrho}(\vec{k})] - $$
$$- \sum_\mu T_{j\mu}(\vec{k})[v_{\mu\varrho}(\vec{k}) - w_{\mu\varrho}(\vec{k})]$$
$$[\varepsilon_\varrho(\vec{k}) + \hbar\omega_k] w_{j\varrho}(\vec{k}) = -\left\{\frac{\hbar\omega_0^2}{2\omega_k}[v_{j\varrho}(\vec{k}) + w_{j\varrho}(\vec{k})] - \right.$$
$$\left. - \sum_\mu T_{j\mu}(\vec{k})[v_{\mu\varrho}(\vec{k}) - w_{\mu\varrho}(\vec{k})]\right\} \qquad \text{(I.3.11.)}$$

Podelivši prve dve jednačine u sistemu (I.3.11.) dobijamo:

$$\frac{\varepsilon_\varrho(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k})}{\varepsilon_\varrho(\vec{k}) + E_\mu(\vec{k})} V_{\mu\varrho}(\vec{k}) = + W_{\mu\varrho}(\vec{k}) \qquad \text{(I.3.12.)}$$

a delenjem druge dve jednačine dobijamo:

$$\frac{\varepsilon_\rho(\vec{k}) - \hbar\omega_k}{\varepsilon_\rho(\vec{k}) + \hbar\omega_k} V_{j\rho}(\vec{k}) = - W_{j\rho}(\vec{k}) \qquad (I.3.13.)$$

uvrstivši (I.3.12.) u drugu jednačinu sistema (I.3.11.) dobijamo

$$\left[\varepsilon_\rho^2(\vec{k}) - E_\mu^2(\vec{k})\right] v_{\mu\rho}(\vec{k}) - \sum_j 2 T_{j\mu}(\vec{k}) \hbar\omega_k \frac{\varepsilon_\rho(\vec{k}) + E_\mu(\vec{k})}{\varepsilon_\rho(\vec{k}) + \hbar\omega_k} v_{j\rho}(\vec{k}) = 0 \qquad (I.3.14.)$$

a uvrstivši (I.3.12.) u četvrtu jednačinu sistema (I.3.11.) dobijamo:

$$\left[\hbar^2\omega_k^2 - \varepsilon_\rho^2(\vec{k}) + \hbar^2\omega_0^2\right] v_{j\rho}(\vec{k}) + \sum_\mu 2 T_{j\mu}(\vec{k}) E_\mu(\vec{k}) \frac{\varepsilon_\rho(\vec{k}) + \hbar\omega_k}{\varepsilon_\rho(\vec{k}) + E_\mu(\vec{k})} v_{\mu\rho}(\vec{k}) = 0 \qquad (I.3.15.)$$

Kada iz (I.3.11.) izrazimo i uvrstimo u (I.3.15.), i uvedemo oznaku

$$A_{jj'}(\vec{k}) = \sum_\mu 4 T_{j\mu}(\vec{k}) T_{j'\mu}(\vec{k}) E_\mu(\vec{k}) \frac{\hbar\omega_k}{\varepsilon_\rho^2(\vec{k}) - E_\mu^2(\vec{k})} \qquad (I.3.16.)$$

dobijamo jednačinu:

$$\left[\hbar^2\omega_k^2 - \varepsilon_\rho^2(\vec{k}) + \hbar^2\omega_0^2\right] v_{j\rho}(\vec{k}) + \sum_{j=1} A_{jj'} v_{j'\rho}(\vec{k}) = 0 \qquad (I.3.17.)$$

Energijju $E_\varrho(k)$ dobijamo izjednačivši determinantu sistema (I.3.17.) sa nulom

$$\left[\hbar^2\omega_k^2+\hbar^2\omega_0^2-\mathcal{E}_\varrho^2(\vec{k})\right]^2+\left[\hbar^2\omega_k^2+\hbar^2\omega_0^2-\mathcal{E}_\varrho^2(\vec{k})\right](A_{11}+A_{22})+$$
$$+A_{11}A_{22}-A_{12}A_{21}=0 \qquad (I.3.18.)$$

U koliko su elektrodipolni prelazi zabranjeni onda sistem (I.3.10.) poprima ovaj oblik:

$$\left[\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})-E_\mu(\vec{k})\right]v_{\mu\varrho}(\vec{k})=\sum_j M_{j\mu}(\vec{k})\left[v_{j\varrho}(\vec{k})-w_{j\varrho}(\vec{k})\right]$$
$$\left[\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})+E_\mu(\vec{k})\right]w_{\mu\varrho}(\vec{k})=\sum_j M_{j\mu}(\vec{k})\left[v_{j\varrho}(\vec{k})-w_{j\varrho}(\vec{k})\right] \qquad (I.3.19.)$$
$$\left[\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})-\hbar\omega_k\right]v_{j\varrho}(\vec{k})=\frac{\hbar\omega_0^2}{2\omega_k}\left[v_{j\varrho}(\vec{k})+w_{j\varrho}(\vec{k})\right]-\sum_\mu M_{j\mu}(\vec{k})\left[v_{\mu\varrho}(\vec{k})+w_{\mu\varrho}(\vec{k})\right]$$
$$\left[\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})+\hbar\omega_k\right]w_{j\varrho}(\vec{k})=-\frac{\hbar\omega_0^2}{2\omega_k}\left[v_{j\varrho}(\vec{k})+w_{j\varrho}(\vec{k})\right]+\sum_\mu M_{j\mu}(\vec{k})\left[v_{\mu\varrho}(\vec{k})+w_{\mu\varrho}(\vec{k})\right]$$

Potpuno analogno kao i u prrethodnom slučaju dobijamo jednačine (I.3.12.) i (I.3.13.), a posle uvrštavanja i sredjivanja u sistemu (I.3.19.) dobijamo jednačine:

$$\left[\mathcal{E}_\varrho^2(\vec{k})-E_\mu^2(\vec{k})\right]v_{\mu\varrho}(\vec{k})-\sum_j 2M_{j\mu}(\vec{k})\,\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})\,\frac{\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})+E_\mu(\vec{k})}{\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})+\hbar\omega_k}\,v_{j\varrho}(\vec{k})=0 \qquad (1.3.20.)$$

i

$$\left[\hbar^2\omega_k^2+\hbar^2\omega_0^2-\mathcal{E}_\varrho^2(\vec{k})\right]v_{j\varrho}(\vec{k})-$$
$$-\sum_j 2M_{j\mu}(\vec{k})\,\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})\,\frac{\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})+\hbar\omega_k}{\mathcal{E}_\varrho(\vec{k})+E_\mu(\vec{k})}\,v_{\mu\varrho}(\vec{k})=0 \qquad (1.3.21.)$$

kada pomoću (I.3.20.) izrazimo $W_{uq}(k)$ i uvrstimo u (I.3.21.) dobijamo:

$$\left[\hbar^2\omega_k^2+\hbar^2\omega_0^2-\mathcal{E}_\rho^2(\vec{k})\right] v_{j\rho}(\vec{k}) - \sum_{j'=1}^{2} B_{jj'}\, v_{j'\rho}(\vec{k}) = 0 \tag{I.3.22.}$$

gde je $B_{jj'}(\vec{k})$ dato relacijom:

$$B_{jj'}(\vec{k}) = \sum_{\mu} 4 M_{j\mu}(\vec{k}) M_{j'\mu}(\vec{k}) \frac{\mathcal{E}_\rho^2(\vec{k})}{\mathcal{E}_\rho^2(\vec{k}) - E_\mu^2(\vec{k})} \tag{I.3.23.}$$

Pošto je (I.3.22.) homogen sistem jednačina po $W_{jq}(k)$ onda energiju $E_q(k)$ odredjujemo iz uslova da determinanta sistema mora biti jednaka nuli:

$$\left[\hbar^2\omega_k^2+\hbar^2\omega_0^2-\mathcal{E}_\rho^2(\vec{k})\right]^2 - \left[\hbar^2\omega_k^2+\hbar^2\omega_0^2-\mathcal{E}_\rho^2(\vec{k})\right](B_{11}+B_{22}) + B_{11}B_{22} - B_{12}B_{21} = 0 \tag{I.3.24.}$$

U jednačinama (I.3.18.) i (I.3.24.) u koeficijentima $A_{ij}$ i $B_{ij}$ koji su dati jednačinama (I.3.17.) i (I.3.23.) figurišu nepoznate energije $\mathcal{E}_\rho(k)$ tako da te jednačine možemo rešiti samo približno raznim numeričkim metodama.

U sistemu (I.3.10.), u opštem slučaju imaćemo determinantu $[2 \times (\sigma + 2)] \times [2 (\sigma + 2)]$, znači za energiju hibridnih eksitacija $E_q(k)$ imaćemo $2(\sigma + 2)$ rešenja, od kojih $\sigma + 2$ pozitivna i $\sigma+2$ negativna. Negativna rešenja za $E_q(k)$ nas ne zanimaju.

# II GLAVA

## MAGNETNE I OPTIČKE KARAKTERISTIKE AFD

### II. 1. Interakcija sa spoljašnjim strujama

Ispitaćemo neke makroskopske karakteristike AFD znajući da u njemu dolazi do hibridizacije optičkih i magnetnih pobudjenja. Optičke osobine sistema karakteriše srednji elektrodipolni moment, a magnetne osobine sistema karakteriše srednji magnetnidipolni moment, uz pretpostavku da se srednji elektrodipolni moment i srednji magnetnodipolni moment indukuju slabim spoljašnjim strujama $\vec{j}_{ekst}(\vec{n}, t)$. Ovo je opravdana pretpostavka pošto se sistem ne može nikad u potpunosti izolovati od slobodnih elektrona koji lutaju u prostoru. Hamiltonijon interakcije sa spoljašnjim strujama dat je izrazom:

$$\hat{H}_{ext}(t) = -\frac{1}{c}\sum_{\vec{n}\alpha} \hat{\vec{A}}_{n\alpha} \cdot \vec{j}_{ext}(\vec{n}\alpha, t) \equiv -\frac{\delta}{c}\sum_{n} \hat{\vec{A}}_{n} \cdot \vec{j}_{ext}(\vec{n}, t) \qquad (II.1.1.)$$

gde je $\hat{\vec{A}}_n$ vektorski potencijal elektromagnetnog polja u kristalu i dat je formulom:

$$\hat{\vec{A}}_n = \sum_{kj}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}\right)^{1/2} \vec{l}_{kj}\left[a_{kj}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}} + a^{+}_{kj}\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}}\right] \qquad (II.1.2.)$$

gde su $\hat a^+_{\vec k j}$ i $\hat a_{\vec k j}$ operatori kreacije i anihilacije fotona, a $\vec l_{\vec k j}$ vektor polarizacije.

Ovde ćemo operatore $\hat a_{\vec k j}$ izraziti pomoću operatora $\hat\xi^+_s(\vec k)$ i $\hat\xi_s(\vec k)$ preko relacija (I.3.6.), tako da hamiltonijan (II.1.1.) postaje

$$\hat H_{ext}(t) = -\frac{\sigma}{c}\sum_{\vec n,\vec k,j,s}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}\right)^{1/2}\vec l_{\vec k j}\Big[v_{js}(\vec k)\hat\xi_s(\vec k) + w^*_{js}(-\vec k)\hat\xi^+_s(-\vec k) + v^*_{js}(-\vec k)\hat\xi^+_s(-\vec k) + w_{js}(\vec k)\hat\xi_s(\vec k)\Big]e^{i\vec k\vec n}\,\vec j_{ext}(\vec n,t) \tag{II.1.3.}$$

gdje je $V = N\mathrm{v}$, a $\mathrm{v}$ je zapremina elementarne ćelije.

Kada uvedemo oznake:

$$\rho^X_s(\vec k) = \sum_j\left(\frac{2\pi\hbar\sigma^2}{\mathrm{v}\,\omega_k}\right)^{1/2} l^X_{\vec k j}\Big[v_{js}(\vec k) + w_{js}(\vec k)\Big]$$

$$\rho^{*X}_s(\vec k) = \sum_j\left(\frac{2\pi\hbar\sigma^2}{\mathrm{v}\,\omega_k}\right)^{1/2} l^X_{\vec k j}\Big[v^*_{js}(-\vec k) + w^*_{js}(-\vec k)\Big] \tag{II.1.4.}$$

$(X = x, y, z)$ operator (II.1.3.) poprima oblik:

$$\hat H_{ext}(t) = \frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec n,\vec k,s,X}\Big[\rho^X_s(\vec k)\hat\xi_s(\vec k) + \rho^{*X}_s(-\vec k)\hat\xi^+_s(-\vec k)\Big]e^{i\vec k\vec n}\,j^X_{ext}(\vec n,t) \tag{II.1.5.}$$

Ako gornji hamiltonijon izrazimo u reprezentaciji interakcije, on dobija oblik:

$$\hat H_{ext}(t) \equiv e^{\frac{it\hat H_d}{\hbar}}\,\hat H_{ext}(t)\,e^{-\frac{it\hat H_d}{\hbar}} =$$

$$= -\frac{1}{\sqrt N}\sum\Big[\rho^X_s(\vec k)\hat\xi_s(\vec k,t) + \rho^{*X}_s(\vec k)\hat\xi^+_s(\vec k,t)\Big]j^X_{ext}(\vec n,t)\,e^{i\vec k\vec n} \tag{II.1.6.}$$

Ovde operator $\hat{H}_d$ predstavlja hamiltonijon hibridnih eksitacija koji smo izračunali u prethodnom poglavlju i on je dat preko operatora $\hat{\xi}_\rho(\vec{k})$ i $\hat{\xi}_\rho^+(\vec{k})$ formulom (I.3.9.), a operatori $\hat{\xi}_\rho(\vec{k})$ su operatori anihilacije i kreacije hibridnih pobudjenja $(\xi_\rho(\vec{k}))$ u reprezentaciji interakcije

$$\hat{\xi}_\rho(\vec{k},t) = e^{\frac{itH_d}{\hbar}}\,\hat{\xi}_\rho(\vec{k})\,e^{-\frac{itH_d}{\hbar}} . \qquad (II.1.7.)$$

II. 2. Indukovani dipolni i magnetni moment sistema i magnetno optički tenzor

Operator dipolnog momenta jedinice zapremine (operator polarizacije) sistema dat je izrazom:

$$\hat{\vec{P}} = \frac{1}{v}\sum_{\alpha=1}^{6} e\,\hat{\vec{r}}_{n\alpha} , \qquad (II.2.1.)$$

a u reprezentaciji druge kvantizacije (linearno po eksitonskim operatorima) on poprima oblik:

$$\hat{\vec{P}}(\vec{n}) = \frac{1}{v}\sum_{\alpha}\vec{d}_\alpha\left(\hat{B}^+_{\vec{n}\alpha} + \hat{B}_{\vec{n}\alpha}\right) \qquad (II.2.2.)$$

gde je

$$\vec{d}_\alpha = \langle f\,|\,e\,\hat{\vec{r}}_{n\alpha}\,|\,0\rangle \qquad (II.2.3.)$$

- dipolni moment jona i ne zavisi od $\vec{n}$. Pošto izvršimo Furije transformaciju iz koordinantnog u impulsni prostor pomoću relacija (I.1.7.), a zatim predjemo sa operatora $\hat{S}(k)$ na operatore $\hat{A}_{\lambda}(k)$ pomoću transformacije (I.1.8.), i konačno predjemo na operatore anihilacije i kreacije hibridnih eksitacija $\hat{\xi}_{\rho}(\vec{k})$, operator dipolnog momenta (II.2.2.) u reprezentaciji interakcije dobija oblik:

$$\hat{P}^{x}(\vec{m},t)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k,\rho}\left[d_{\rho}^{x}(\vec{k})\hat{\xi}_{\rho}(\vec{k},t)+d_{\rho}^{x*}(-\vec{k})\hat{\xi}_{\rho}^{+}(-k)\right]e^{i\vec{k}\vec{m}} \qquad \text{(II.2.4.)}$$

gde su $d_q^{x}(k)$ i $d_q^{*x}(k)$ dati formulama:

$$d_{\rho}^{x}(\vec{k})=\frac{1}{V}\sum_{\lambda,\mu}d_{\lambda}^{x}\left[U_{\lambda\mu}(\vec{k})V_{\mu\rho}(\vec{k})+U_{\lambda\mu}^{*}(-\vec{k})W_{\mu\rho}(\vec{k})\right] \qquad \text{(II.2.5.)}$$

$$d_{\rho}^{x*}(\vec{k})=\frac{1}{V}\sum_{\lambda\mu}d_{\lambda}^{x}\left[U_{\lambda\mu}^{*}(-\vec{k})V_{\mu\rho}^{*}(-\vec{k})+U_{\lambda\mu}(\vec{k})W_{\mu\rho}^{*}(-\vec{k})\right]$$

Srednji indukovani dipolni moment izračunava se po formuli (videti opštu teoriju linearne reakcije koja je data u [4]).

$$\langle\hat{P}^{x}(\vec{m},t)\rangle_{ext}=\langle\hat{S}^{-1}(t)\,\hat{P}^{x}(\vec{m},t)\hat{S}(t)\rangle_{0} \qquad \text{(II.2.6.)}$$

gde je $\hat{S}(t)$ takozvana S matrica i data je relacijom:

$$\hat{S}(t)=\hat{T}\,e^{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\hat{H}_{ext}(t')} \qquad \text{(II.2.7.)}$$

$\hat{T}$ je Dajsanov operator hronologizacije, a $\langle\ldots\rangle_0$ je usrednjenje po Gibsovom kanoničkom ansamblu. $\hat{S}(t)$ ćemo razviti u red i zadržati ćemo se samo na linearnim članovima, tako da imamo:

$$\hat{S}(t)\approx 1+\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\hat{H}_{ext}(t')dt' \qquad \text{(II.2.8.)}$$

$$S^{-1}(t)\approx 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\hat{H}_{ext}(t')dt'$$

izraz (II.2.6.) u linearnoj aproksimaciji dobija oblik

$$\langle \hat{P}^x(\vec{m},t)\rangle_{ext} = \langle \hat{P}^x(\vec{m},t)\rangle_0 + \frac{1}{i\hbar}\langle \int_{-\infty}^{t} [\hat{H}_{ext}(t')\hat{P}^x(\vec{m},t) - \hat{P}^x(\vec{m},t)\hat{H}_{ext}(t')]dt'\rangle_0 \qquad (II.2.9.)$$

Gornji izraz za polarizaciju možemo napisati na sledeći način:

$$\langle \hat{P}^x(\vec{m},t)\rangle_{ext} = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \langle\langle \hat{P}^x(\vec{m},t)|\hat{H}_{ext}(t')\rangle\rangle dt' \qquad (II.2.10.)$$

gdje je $\langle\langle P^x(\vec{m},t)|\hat{H}_{ext}(t')\rangle\rangle$ retardovana Grinova funkcija, koja je po definiciji (videti [4]) data kao:

$$G(t-t',\vec{m}) \equiv \langle\langle \hat{P}^x(\vec{m},t)|\hat{H}_{ext}(t')\rangle\rangle \stackrel{def}{=} \Theta(t-t')\langle[\hat{P}^x(\vec{m},t),\hat{H}_{ext}(t')]\rangle_0 \qquad (II.2.11.)$$

a $\Theta(t-t')$ je Hevisajdova funkcija, koja je definisana na sledeći način:

$$\Theta(t-t') = \begin{cases} 1 & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases} \qquad (II.2.12.)$$

Sada ćemo izvršiti Furije transformacije oblika:

$$\vec{V}(\vec{k},\omega) = \frac{1}{2\pi N}\sum_{\vec{m}}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, V(\vec{m},t)\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{m}+i\omega t} \qquad (II.2.13.)$$

Posle kojih izraz za srednji indukovani dipolni moment (II.2.10=) postaje:

$$\langle \hat{P}^x(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} = \frac{i}{2\pi\hbar N}\sum_{\vec{m}}\int_{-\infty}^{+\infty}dt\int_{-\infty}^{+\infty}dt'\, G(t-t',\vec{m})\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{m}+i\omega t} \qquad (II.2.14.)$$

gde je $\langle \hat{P}^x(\vec{k},\omega)\rangle_{ext}$ Furije transformacija veličine $\langle P^x(\vec{n},t)\rangle_{ext}$ definisana jednačinom (II.2.13.). Kada u jednačinu (II.2.14.) zamenimo izraze za $P^x(\vec{n},t)$ i $H_{ext}(t')$, koji su dati pomoću relacija (II.2.4.) i (II.1.6.), ona postaje:

$$\langle P^x(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} = -\frac{i}{2\pi\hbar}\sum_{x',\rho}\int_{-\infty}^{+\infty}dt\int_{-\infty}^{+\infty}dt'\, j^{x'}(\vec{k},t)\{d_\rho^x(\vec{k})P_\rho^{*x'}(\vec{k})\langle\langle \xi_\rho(\vec{k},t)|\xi_\rho^+(\vec{k},t')\rangle\rangle$$

$$+ d_\rho^{*x}(-\vec{k})P_\rho^{x'}(-\vec{k})\langle\langle \xi_\rho^+(-\vec{k},t)|\xi_\rho(-\vec{k},t')\rangle\rangle\} e^{i\omega t} \quad (II.2.15.)$$

Da bi mogli izračunati srednji indukovani dipolni moment moramo prvo rešiti integral ovog oblika:

$$F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(t-t)y(t')dt \quad (II.2.16a)$$

Ako ovaj izraz transformišemo na sledeći način

$$F(\omega) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} F(t)e^{i\omega t}dt = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dt\int_{-\infty}^{\infty}dt'\, K(t-t')y(t')e^{i\omega t}, \quad (II.2.16b)$$

gornju jednačinu možemo napisati kao proizvod dva integrala, dakle ($t=t'+u$):

$$F(\omega) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}du\, K(u)\, e^{i\omega u}\int_{-\infty}^{+\infty}dt' y(t')e^{i\omega t'} = 2\pi\, K(\omega)y(\omega) \quad (II.2.17)$$

Koristeći jednačinu (II.2.17.) jednačina (II.2.15.) postaje:

$$\langle P^x(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} = -\frac{2\pi i}{\hbar}\sum_{x',\rho}\{d_\rho^x(\vec{k})\hat{P}_\rho^{*x'}(\vec{k})\langle\langle \hat{\xi}_\rho(\vec{k})|\hat{\xi}_\rho^+(\vec{k})\rangle\rangle_\omega + \quad (II.2.18)$$

$$+ d_\rho^{*x'}(-\vec{k})P_\rho^{x'}(-\vec{k})\langle\langle \hat{\xi}_\rho^+(-\vec{k})|\hat{\xi}_\rho(-\vec{k})\rangle\rangle\}\hat{j}_{ext}^{x'}(\vec{k},\omega)$$

što sažetije možemo napisati:

$$\langle \hat{\vec{P}}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} = \hat{D}(\vec{k},\omega)\,\vec{j}_{ext}(\vec{k},\omega) \quad (II.2.19)$$

Uzevši u obzir da su Grinove funkcije u izrazu (II.2.18.) date kao:

$$\langle\langle \hat{\xi}_{\rho}(\vec{k}) | \xi^{+}_{\rho}(\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega} = \frac{i}{2\hbar} \frac{1}{\omega - \Omega_{\rho}(\vec{k})} \qquad \text{(II.2.20.)}$$

i

$$\langle\langle \hat{\xi}^{+}_{\rho}(-\vec{k}) | \xi_{\rho}(-\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega} = -\frac{i}{2\hbar} \frac{1}{\omega + \Omega_{\rho}(-\vec{k})} \qquad \text{(II.2.21.)}$$

tada su komponente tenzora $\hat{D}(k,\omega)$ date jednačinom:

$$\hat{D}_{\kappa\kappa'}(\vec{k},\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\rho} \left[ \frac{d^{\kappa}_{\rho}(k) P^{*\kappa'}_{\rho}(\vec{k})}{\omega - \Omega_{\rho}(\vec{k})} - \frac{d^{*\kappa}_{\rho}(\vec{k}) P^{\kappa'}_{\rho}(-\vec{k})}{\omega + \Omega_{\rho}(-\vec{k})} \right] \qquad \text{(II.2.22.)}$$

Operator magnetnog dipla sistema po jedinici zapremine (magnetizacije sistema po jedinici zapremine) indukovanog spoljašnjim strujama dat je relacijom:

$$\hat{\vec{M}} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \mu_{\alpha} (\hat{\vec{l}}_{\alpha} + 2\hat{\vec{S}}_{\alpha}) \quad , \quad \hat{\vec{S}}_{\alpha} = \sum_{i} \hat{\vec{S}}_{i\alpha} \qquad \text{(II.2.23.)}$$

Posle prelaska na reprezentaciju druge kvantizacije ovaj izraz poprima oblik:

$$\hat{M} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha, f, f'} \mu_{\alpha} \langle f | \hat{\vec{l}}_{\alpha} + 2\hat{\vec{S}}_{\alpha} | f' \rangle \hat{a}^{+}_{nf} \hat{a}_{nf'} \qquad \text{(II.2.24.)}$$

gde su $\hat{a}_{nf}^{+}$ i $a_{nf}$ Fermi operatori kreacije odnosno anihilacije elektrona u stanju f na jonu $\vec{n}$. Ako posmatramo samo jedan pobudjeni nivo jona možemo preći na Paulijeve operatore (koje ćemo u sledećoj etapi aproksimirati sa Boze operatorima) relacijama:

$$\hat{A}_n = \hat{a}_n + \hat{a}_{nf}$$

$$\hat{P}_{n\lambda} = \hat{a}^{+}_{n\lambda}\, a_{n\lambda f} \tag{II.2.25.}$$

$$\hat{P}^{+}_{n\lambda} = \hat{a}^{+}_{n\lambda f}\, \hat{a}_{n\lambda 0}$$

(0- osnovno stanje a, f - pobudjeno stanje)

Uvodeći dalje nove iznake

$$\vec{m}_\lambda = \mu_\lambda \langle f | \hat{\vec{l}}_\lambda + 2\hat{\vec{S}}_\lambda | 0 \rangle$$

$$\vec{m}^{*}_\lambda = \mu_\lambda \langle 0 | \hat{\vec{l}}_\lambda + 2\hat{\vec{S}}_\lambda | f \rangle \tag{II.2.26.}$$

jednačina (II.2.24.) postaje $(\hat{P}_{n\lambda} \approx \hat{B}_{n\lambda})$:

$$\hat{\vec{M}} = \frac{1}{v}\sum_{\lambda} \vec{m}_\lambda \hat{B}^{+}_{n\lambda} + \vec{m}^{*}_\lambda \hat{B}_{n\lambda} \tag{II.2.27.}$$

Ako u poslednjem izrazu izvršimo transformacije operatora definisane jednačinama (I.1.7.) i (I.1.8.), te uvedemo iznake:

$$\vec{m}_\rho(\vec{k}) = \frac{1}{v}\sum_{\lambda\mu}\left[\vec{m}_\lambda u^{*}_{\lambda\mu}(-\vec{k})\, W_{\mu\rho}(\vec{k}) + \vec{m}^{*}_\lambda u_{\lambda\mu}(\vec{k})\, V_{\mu\rho}(\vec{k})\right]$$

$$\vec{m}^{*}_\rho(\vec{k}) = \frac{1}{v}\sum_{\lambda,\mu}\left[\vec{m}_\lambda u^{*}_{\lambda\mu}(-\vec{k})\, V^{*}_{\mu\rho}(-\vec{k}) + \vec{m}^{*}_\lambda u_{\lambda\mu}(\vec{k})\, W^{*}_{\mu\rho}(-\vec{k})\right] \tag{II.2.28.}$$

tada operator (II.2.24) posle prelaska na reprezentaciju interakcije, poprima oblik:

$$\hat{\vec{M}}(\vec{n},t) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k,\rho}\left[\vec{m}_\rho(\vec{k})\,\hat{\xi}_\rho(\vec{k},t) + \vec{m}^{*}_\rho(-\vec{k})\,\hat{\xi}^{+}_\rho(-\vec{k},t)\right] e^{i\vec{k}\vec{n}} \tag{II.2.29.}$$

Sada ćemo potražiti srednju indukovanu magnetizaciju sistema na isti način kao i srednju polarizaciju sistema. Polazeći od jednačine:

$$\langle \hat{\vec{M}}(\vec{n},t) \rangle_{ext} = \langle \hat{S}^{-1}(t)\, \hat{M}(\vec{n},t) \hat{S}(t) \rangle_0 \qquad (II.2.30.)$$

u linearnoj aproksimaciji dobijamo:

$$\langle \hat{\vec{M}}(n,t) \rangle_{ext} = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+t} \langle [\hat{\vec{M}}(\vec{n},t), \hat{H}_{ext}(t')] \rangle_0 \, dt' \qquad (II.2.31.)$$

Na isti čanin kao i u prethodnom slučaju za magnetizaciju sistema dobijamo:

$$\langle \hat{\vec{M}}(\vec{k},\omega) \rangle_{ext} = \frac{2\pi i}{\hbar} \sum_{\kappa',s} \{ m_s^{*\kappa}(k)\, P_s^{*\kappa'}(\vec{k}) \langle\langle \hat{\xi}_s(\vec{k}) | \hat{\xi}_s^{+}(\vec{k}) \rangle\rangle_\omega +$$

$$+ m_s^{*\kappa}(-\vec{k})\, P_s^{\kappa'}(-\vec{k}) \langle\langle \hat{\xi}_s^{+}(-\vec{k}) | \hat{\xi}_s(-\vec{k}) \rangle\rangle_\omega \}\, j^{\kappa'}(k,\omega) \qquad (II.2.32.)$$

ili, ako uvedemo tenzor $\hat{M}(\vec{k},\omega)$:

$$\langle \hat{\vec{M}}(\vec{k},\omega) \rangle_{ext} = \hat{M}(\vec{k},\omega)\, \vec{j}_{ext}(\vec{k},\omega) \qquad (II.2.33.)$$

komponente tenzora $m_{\kappa\kappa'}(\vec{k},\omega)$ su date relacijom

$$\langle \hat{M}_{\kappa\kappa'}(k,\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_s \Big[ \frac{m_s^{\kappa}(k) P_s^{*\kappa'}(\vec{k})}{\omega - \Omega_s(\vec{k})} - \qquad (II.2.34.)$$

$$- \frac{m_s^{*}(-\vec{k}) P_s^{\kappa'}(-\vec{k})}{\omega + \Omega_s(-\vec{k})} \Big]$$

Na kraju ćemo još pomoću jednačina (II.2.19.) i (II.2.33.) pronaći vezu izmedju srednjeg indukovanog električnog dipola sistema i srednjeg indukovanog magnetnog dipola sistema. Ako $\vec{j}_{ext}(\vec{k},\omega)$ izrazimo preko $\langle \hat{P}(k,\omega)\rangle_{ext}$, koristeći (II.2.19.) i zamenimo u (II.2.33.), dobijamo;

$$\langle \hat{\vec{M}}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} = \hat{M}(\vec{k},\omega)\,\hat{D}^{-1}(\vec{k},\omega)\langle \hat{\vec{P}}(k,\omega)\rangle_{ext} \quad (II.2.35.)$$

ili

$$\langle \hat{\vec{M}}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} = \hat{K}(\vec{k},\omega)\langle \hat{\vec{P}}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} \quad (II.2.36.)$$

gde je:

$$\hat{K}(\vec{k},\omega) = \hat{M}(\vec{k},\omega)\,\hat{D}^{-1}(\vec{k},\omega) \quad (II.2.37.)$$

takozvani magnetno-optički tenzor, koji povezuje indukovani magnetni moment sa indukovanim dipolnim momentom sistema. Pošto se oni kao makroskopske karakteristike sistema mogu direktno meriti, postoji mogućnost da se odrede osobine magnetnooptičkog tenzora sistema i uporede sa rezultatima teorijskih razmatranja.

Gruba procena magnetnooptičkog tenzora, u slučaju rezonance frekvence spoljašnjih struja sa frekvencom jedne grane hibridnih eksitacija $(\omega \sim \Omega_{\rho 0}(\vec{k}))$, daje nam sledeći odnos indukovane magnetizacije i polarizacije sistema:

$$\frac{\langle M^x(\vec{k},\omega)\rangle}{\langle P^y(\vec{k},\omega)\rangle} \sim \frac{m_\rho^{\,x}(\vec{k})}{d_\rho^{\,x}(\vec{k})} \quad . \quad (II.2.38.)$$

Sa obzirmo na definiciju veličina $m_q^x(k)$ i $d_q^x(\vec{k})$, zaključujemo da je odnos polarizacije i magnetizacije proporcionalan odnosu magnetnog i električnog dipolnog momenta prelaza elementarne ćelije kristala.

U slučaju kada je električnidipolni moment prelaza jona jednak nuli ( $\vec{d}_\lambda = 0$ ), kao kod kristala čiji se joni nalaze u centru inverzije kristalne rešetke, te je dipolni prelaz zabranjen po pranosti (na primer kod $K_b M_n F_3$), tada se električna polarizacija sistema može izraziti pomoću magnetno dipolnih prelaza sledećim izrazom (vidi [1] glava IX §46):

$$\hat{P}_x(\vec{n}) = \frac{1}{2v} \sum_{\lambda, a} K_a \tilde{m}^x_{a\lambda} \left( \hat{B}^+_{\vec{n}\lambda} + \hat{B}_{\vec{n}\lambda} \right), \qquad a = x, y, z \quad (II \cdot 2 \cdot 39)$$

gde je

$$\tilde{m}^x_{a\lambda} = \frac{e}{m\omega_\lambda} \langle f | l_a + 2S_a | 0 \rangle \quad (II \cdot 2 \cdot 40)$$

ako u formuli (II.2.39) predjemo sa operatora $\hat{B}_{n\lambda}$ na operatore hibridnih eksitacija $\hat{\xi}_\rho^{(k)}$ za polarizaciju sistema dobijamo sledeći izraz:

$$\hat{P}_x(\vec{n}) = \sum_{k, \rho} e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}} \left\{ \tilde{d}_\rho^{\,x}(\vec{k}) \hat{\xi}_\rho(\vec{k}) + \tilde{d}_\rho^{\,*x}(-\vec{k}) \hat{\xi}^+_\rho(-\vec{k}) \right\}$$

$$(II \cdot 2 \cdot 41)$$

gde smo uveli sledeću Oznaku

$$\tilde{d}_\rho^{\,x}(\vec{k}) = \frac{1}{2v} \sum_{\mu\lambda, a} K_a \tilde{m}^x_{a\lambda} \left\{ u^*_{\lambda\mu}(-\vec{k}) W_{\mu\rho}(\vec{k}) + u_{\lambda\mu}(\vec{k}) v_{\mu\rho}(\vec{k}) \right\}$$

$$\tilde{d}_\rho^{\,x*}(\vec{k}) = \frac{1}{2v} \sum_{\mu\lambda, a} K_a \tilde{m}^x_{a\lambda} \left\{ u_{\lambda\mu}(\vec{k}) W^*_{\mu\rho}(-\vec{k}) + u^*_{\lambda\mu}(-\vec{k}) v^*_{\mu\rho}(-\vec{k}) \right\}$$

$$(II \cdot 2 \cdot 42)$$

Komponente optičkog tenzora u ovom slučaju se odredjuju analognom procedurom kao i pri dobijanju tenzora (II.2.22.) te ćemo odmah napisati rezultat:

$$\tilde{D}_{xx'}(k,\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{\rho}\left[\frac{\tilde{d}_{\rho}^{\,x}(\vec{k})\,p_{\rho}^{*x'}(\vec{k})}{\omega - \Omega_{\rho}(\vec{k})} - \frac{\tilde{d}_{\rho}^{\,*x}(-\vec{k})\,p_{\rho}^{x'}(-\vec{k})}{\omega + \Omega_{\rho}(-\vec{k})}\right] \qquad (II.2.43)$$

Ako sa ovim tenzorom procenimo odnos magnetizacije i polarizacije kristala u oblasti rezonance dobijamo (analogno formuli (II.2.38).

$$\frac{\langle M^{x}(\vec{k},\omega)\rangle}{\langle P^{x}(\vec{k},\omega)\rangle} \sim \frac{m_{\rho}^{x}(\vec{k})}{\tilde{d}_{\rho}^{\,x}(\vec{k})} \qquad (II.2.44)$$

Sa obzirom na formulu (II.2.42) vidimo da se u ovom slučaju odnos magnetizacije i polarizacije izražava samo preko magnetnodipolnih prelaza u jonima elementarne ćelije za razliku od slučaja kada je dipolni moment različit od nule te važi formula (II.2.38.).

## ZAKLJUČAK

U ovom radu izvršena je analiza magnetnih i optičkih karakteristika kristala AFD, koji se nalazi u konstantnom magnetnom polju. Pokazalo se, da u interakciji takvih kristala i svetlosti, dolazi do stvaranja hibridnih eksitacija, koje predstavljaju smešu magnetnih eksitona, fotona i Frenkelovih eksitona. Razmatrali smo samo jednočestične eksitacije, koje odgovaraju elektrodipolnim i magnetnodipolnim prelazima kod paramagnetnih jona AFD.

Kao posledica hibridizacije elementarnih eksitacija, javlja se direktna zavisnost izmedju srednjeg magnetnog i srednjeg dipolnog momenta, koji su indukovani spoljašnjim strujama. Ta zavisnost je data pomoću magnetno-optičkog tenzora, koji je u ovom radu izražen preko mikroskopskih karakteristika sistema. Eksperimentalno se lako odredjuju srednji magnetni i srednji dipolni moment, pa se pomoću njih lako može doći i magnetno-optički tenzor.

Grubom procenom ovog tenzora, u slučaju rezonance frekvence spoljašnjih struja sa frekvencom jedne grane hibridnih eksitacija, zaključujemo da je on proporcionalan odnosu magnetnog i električnog dipolnog momenta prelaza elementarne ćelije kristala.

Kod kristala koji imaju jone u centru inverzije ($R_b\ M_n\ F_3$), električni dopol je jednak nuli, pa se magnetno-optički tenzor izražava samo preko magnetno dipolnih prelaza u jonima elementarne ćelije.

# LITERATURA


[1] А.С. ДАВЫДОВ : „ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА"
ИЗД. „НАУКА", МОСКВА 1976.

[2] Э.Г. ПЕТРОВ : „ТЕОРИЯ МАГНИТНЫХ ЭКСИТОНОВ"
ИЗД. „НАУКОВА ДУМКА", КИЕВ 1976.

[3] В.М. АГРАНОВИЧ : „ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ"
ИЗД. „НАУКА", МОСКВА, 1968.

[4] С.В. ТЯБЛИКОВ : „МЕТОДИ КАНТОВОЙ ТЕОРИИ МАГНЕТИЗМА"
ИЗД. „НАУКА", МОСКВА 1965.