

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

MR DARKO KAPOR

NOVI ASPEKTI ANALIZE
FEROELEKTRIKA TIPO KDP

- Doktorska disertacija -

NOVI SAD
1979.

Ova teza je uradjena na Institutu za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu. Koristim priliku da na ovom mestu zahvalim svima koji su mi pružali pomoć i podršku u radu, doprinoseći time da on bude uspešno priveden kraju.

Posebnu zahvalnost izražavam mentoru teze profesoru dr Bratislavu Tošiću, koji me je još od diplomskog rada sa puno strpljenja uvodio u samostalan naučni rad, a rezultat toga je i ova teza. Profesor dr Slobodan Carić me je upoznao sa fizikom čvrstog stanja i u njemu sam sve vreme imao dragocenog savetnika, a profesor dr Lazar Marinkov me je uvek učio da cenim vezu teorije i eksperimenta, usmerivši me time u radu.

Osećam se obaveznim da naglasim široku materijalnu podršku koju mi je pružao SIZ za naučni rad SAP Vojvodine.

Što se tiče tehničke opreme rada, svi komplimenti idu Milanu Vujoševiću, tehničkom saradniku Instituta za fiziku.

S A D R Ž A J

I GLAVA:	Feroelektrik tipa KDP i Izingov model u poprečnom polju	1
II GLAVA:	Teorijska i eksperimentalna istra- živanja povezana sa Izingovim mode- lom u poprečnom polju	21
III GLAVA:	Formulisanje efektivnog hamiltoni- jana	38
IV GLAVA:	Niskotemperatursko ponašanje siste- ma i uticaj kinematickih efekata	57
V GLAVA:	Ispitivanje oblasti faznog prelaza	79
UMESTO ZAKLJUČKA	121
PRILOG:	Bozonske reprezentacije spinskih operatora	123
REFERENCE	128
ABSTRAKT (na engleskom jeziku)	136

U V O D

Ovaj rad ima za cilj da polazeći od jednostavnog modela za feroelektrične tipa KDP, ispita neke nove efekte sadržane u samom modelu i njihov mogući uticaj na osobine realnih materijala. Razlozi za ovo istraživanje su dvojaki: feroelektrici kao materijali sa izuzetnim dielektričnim osobinama su veoma interesantni za tehnološke primene, ali nedovoljno poznavanje mikroskopskih mehanizama u njima u priličnoj meri umanjuje njihovu primenu i čini je zavisnom od empirije. S druge strane Izingov model u poprečnom polju, koji će nam biti polazna tačka u istraživanju, može se koristiti i za opisivanje niza drugih fizičkih fenomena, a i sam po себи predstavlja jedan od najjednostavnijih modela kvantne statističke fizike. Oba ova aspekta pokušaćemo da osvetlimo u ovom radu.

U I glavi smo demonstrirali vezu izmedju feroelektričnih osobina kristala tipa KDP i Izingovog modela u poprečnom polju. Ovaj model već skoro 15 godina pobudjuje pažnju istraživača, i II glava rezimira rezultate dosadašnjeg teorijskog rada na modelu, kao i eksperimentalne činjenice koje potvrđuju opravdanost njegove primene na konkretnе materijale. Polazeći od Izingovog modela u poprečnom polju, mi smo u III glavi formulisali novi modelni hamiltonijan, zadržavajući samo neke od interakcija. Smatramo da je on bliži realnom feroelektriku KDP nego polazni model. Diskutovaћemo statičke karakteristike modela i energiju elementarnih ekscitacija kako u oblasti niskih temperaturi (IV glava) tako i u okolini tačke faznog prelaza (V glava). Primenjujući novorazvijene tehnike dekuplovanja Grinovi funkcijske, istaknuћemo nove efekte, koji nisu mogli biti uočeni standardnim tehnikama i ispitati mogućnost eksperimentalne provere postojanja ovih efekata.

I GLAVA

FEROELEKTRIK TIPO KDP I IZINGOV MODEL U POPREČNOM POLJU

Kristal kao sistem velikog broja čestica, najpogodnije se tretira metodama statističke fizike [HIII, LII, LV, TII], pomoću kojih možemo dobiti informaciju o makroskopskim osobinama sistema i ne poznajući detaljno ponašanje svake čestice. U slučajevima kada sistem nije jako pobudjen (niske temperature, slaba polja), efekti ponašanja celokupnog sistema interagujućih čestica se mogu jednostavnije opisati uvodjenjem sistema slabo interagujućih kvazičestica koje predstavljaju energetski nisko-ležeća stanja pobudjenog sistema (elementarne ekscitacije). Na višim temperaturama (ili u jačim poljima) moramo uzeti u obzir i interakciju kvazičestica. Dalje pojednostavljenje, karakteristično za fiziku čvrstog stanja, sastoji se u tome da se za objašnjenje pojedinih osobina kristala, formira model na taj način što se apstrahuju sve osobine koje na datu pojavu nemaju bitnijeg uticaja. Pri formulisanju modela osnovni problem je na koji način od mnoštva interakcija koje deluju u sistemu, izdvojiti one koje su bitne za pojavu od interesa, a potom utvrditi i granice primenljivosti modela. U fizici čvrstog stanja postoji veliki broj manje ili više uopštenih modela, vezanih za opisivanje pojedinih fizičkih osobina u određenim grupama materijala [K I].

Ovaj rad se bavi jednim od modela fizike čvrstog stanja, sa ciljem da utvrdi u kojoj meri on može da posluži za opisivanje osobina realnih kristala. Stoga ćemo se u ovoj glavi zadržati na nastanku samog modela i zatim pratiti njegov razvoj. Reč je o Izingovom (Ising) modelu u poprečnom polju (medjunarodna skraćenica koju ćemo i mi nadalje koristiti je IMTF = Ising Model in the Transverse Field), koji je prvobitno formulisan u cilju opisivanja feroelektričnih osobina kalijum dihidrofosfata KH_2PO_4 (skraćeno KDP) i njemu izomorfnih kristala.

Fazni prelazi u feroelektricima. Fenomen feroelektriciteta je danas precizno definisan i predstavlja pojavu spontane polarizacije (bez prisustva spoljašnjeg električnog polja) kod

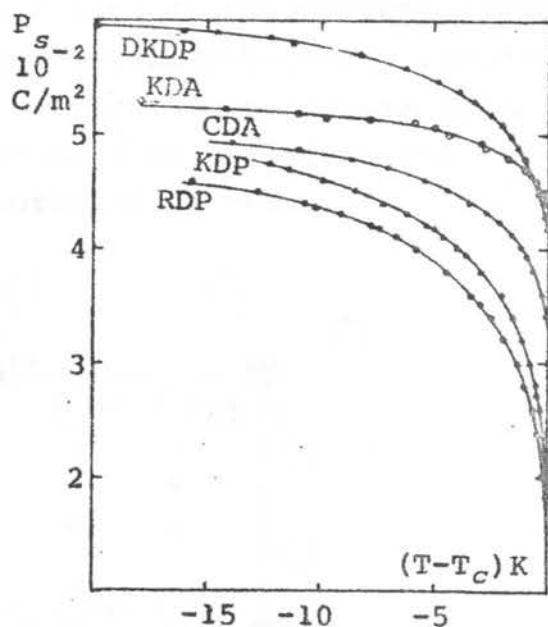
kristala, pri čemu smer polarizacije može biti preveden u suprotni dejstvom spoljašnjeg električnog polja [SIII, LVI]. Spontana polarizacija postoji samo u izvesnoj oblasti temperatūra, i na određenoj temperaturi T_c dolazi do faznog prelaza. Sa porastom temperature, kristal iz faze koja se karakteriše prisustvom spontane polarizacije (tzv. feroelektrična faza), prelazi u paraelektričnu fazu u kojoj bez prisustva spoljašnjeg električnog polja nema polarizacije. U teoriji faznih prelaza se veličina koja postoji u jednoj fazi, a u drugoj je identički jednaka nuli, naziva *parametar uredjenosti*. U teoriji feroelektriciteta to je najčešće spontana polarizacija ili neka, njoj proporcionalna veličina.

S obzirom da je teoriji faznih prelaza i kritičnih fenomena, posvećena obimna literatura poslednjih godina, umesto izlaganja teorije, pozvaćemo se na nekoliko referenci. Monografija [SIV] predstavlja već klasičan pregled podataka iz ove oblasti, dok su modernija dostignuća detaljno izložena u monografiji [M I]. Dva pregledna članka [G 6, M 3] se posebno odnose na fazne prelaze u feroelektricima. Mi ćemo u nastavku analizirati pojave koje prate fazne prelaze na konkretnom primeru kristala KDP. Prvo ćemo dati pregled osnovnih podataka, a potom detaljnije razmotriti one karakteristične osobine koje su dovele do formulisanja IMTF.*

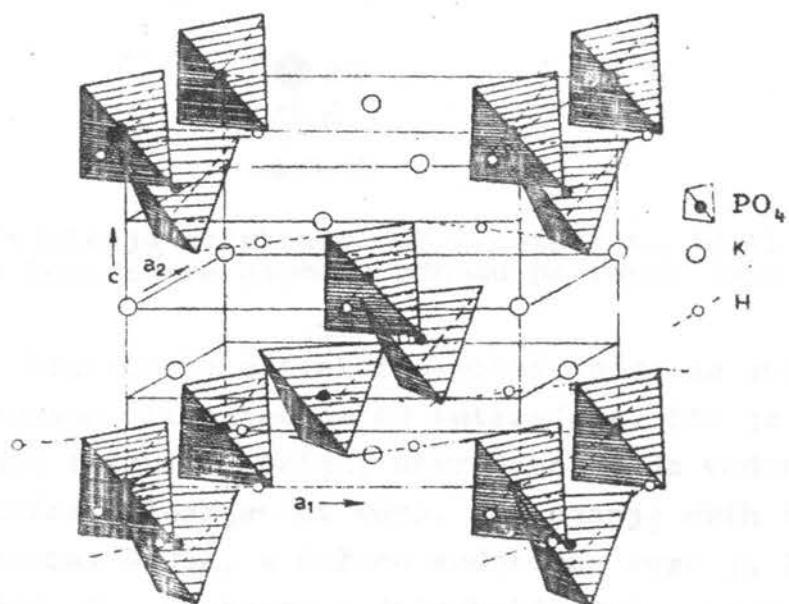
Feroelektrične osobine KDP otkrili su Buš (Busch) i Šerer (Scherer) 1938. godine. Kristal KDP je jednoosni (uniaksijalni) feroelektrik kod kojeg se ispod temperature $T_c = 122\text{K}$ javlja spontana polarizacija u pravcu c-ose. Dielektrična konstanta sledi zakon Kiri (Curie) - Vajsa (Weiss) $\epsilon = C/(T - T_0)$ sve do 250K iznad T_c , i važi $T_c \approx T_0$. (Ova činjenica je dugo godina bila izvor nedoumica u vezi sa vrstom faznog prelaza kod KDP.) Na temperaturi T_c anomaliju pokazuju još elastične, elektro-optičke i piezoelektrične osobine [J I, F I, Ž I].

* Kao jedan od osnovnih izvora podataka o feroelektricima i danas služi monografija [J I]. U njoj su navedene praktično sve izvorne reference objavljene pre njenog publikovanja (1962.). Stoga ćemo se u prvoj glavi pozivati na originalne reference samo u onim slučajevima kada se radi o podacima koji su objavljeni posle izdavanja [J I].

Sl.I.1. Spontana polarizacija feroelektrika tipa KDP u funkciji $T - T_c$ [C^{-1}]. Pune linije su povućene prema rezultatima aproksimacije klastera [V I].

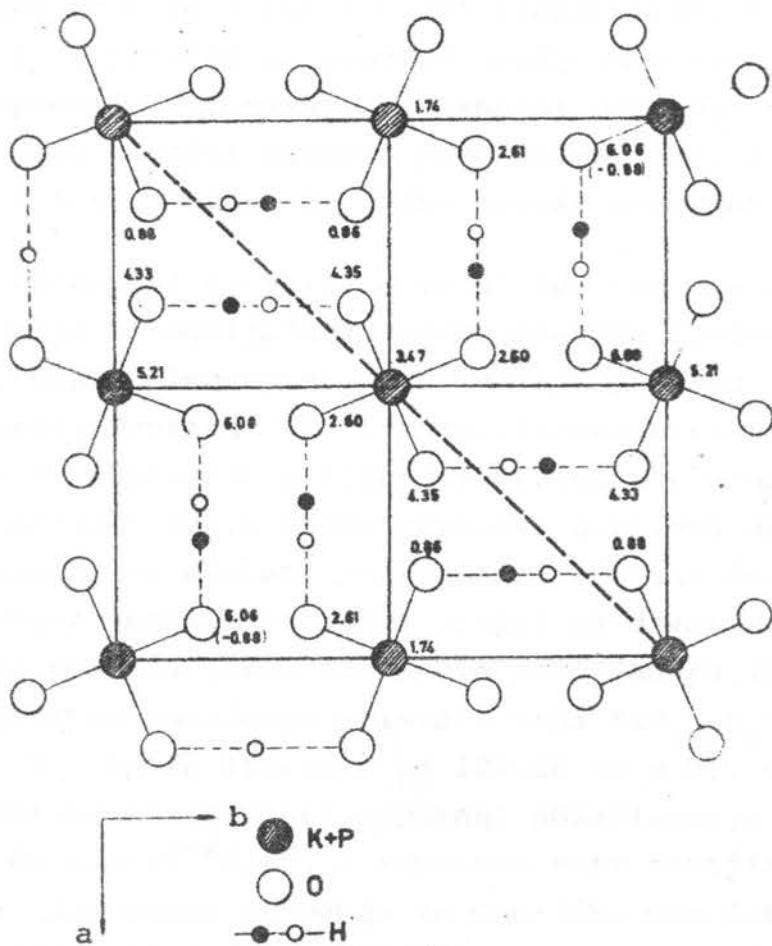


Struktura kristala KDP. Osnovni podaci o strukturi kristala KDP [J I] su dobijeni difrakcijom x-zraka i neutrona (ovaj drugi metod je pogodniji za određivanje položaja atoma vodonika). U paraelektričnoj fazi, kristal ima simetriju tetragonalnog sistema (tačkasta grupa $\bar{4}2m$), dok ispod tačke prelaza pripada rombičnom sistemu (tačkasta grupa $mm\bar{2}$). Struktura na sobnoj temperaturi je prikazana na slici I.2.



Sl.I.2. Elementarna celija kristala KDP [J I]. Ovaj izbor osa odgovara prostornoj grupi $I\bar{4}2d$. Kiseonički tetraedri su posebno obeleženi.

Četiri kiseonika čine skoro pravilan tetraedar u čijem se centru nalazi fosfor. P i K joni su naizmenično raspoređeni na razmaku $c/2$ duž pravaca paralelnih c-osi. Izmedju kiseonika koji pripadaju susednim tetraedrima pomerenim jedan u odnosu na drugi za $c/4$, uspostavljaju se vodonične veze |H I|. Ove vodonične veze grade ravni normalne na c-osu.



Sl.I.3. Projekcija strukture KDP kristala na (001) ravan. Cifre označavaju koordinate atoma u odnosu na ravan date u angstremima |N I|.

Neutronska difrakcija pokazuje da su uvek dva protona lokalizovana bliže jednom od tetraedara, što je u skladu i sa hemijskom formulom. Dalje, utvrđeno je da vodonici imaju dva ravnotežna položaja duž veze. Rastojanje ovih ravnotežnih položaja iznosi 0.35 \AA , a dužina vodonične veze je $2.533 \pm 0.07\text{ \AA}$ |J I|. Iznad T_c neutronska difrakcija daje sliku raspodele vodonika "izdužene" duž veze sa centrom u centru veze (što dopušta različita tumačenja ponašanja protona - vidi kraj II glave)

Ispod T_c se dužina vodoničnih veza ne menja, ali su sada vodonici strogo lokalizovani bliže dva "gornja" ili dva "donja" kiseonika odgovarajućeg tetraedra u većini veza. Ovaj raspored se može promeniti delovanjem spoljašnjeg električnog polja duž c-ose. K i P joni se pomeraju u odnosu na svoje položaje u paralelektričnoj fazi za 0.04 \AA i 0.08 \AA respektivno, u suprotnom smerovima. S obzirom da se protoni uredjuju u ravni normalnoj na pravac spontane polarizacije, osnovni doprinos spontanoj polarizaciji daju dipolni momenti preostalih jona, ali ćemo pokazati da je uticaj protona na fazni prelaz presudan.

Izotopski efekat. Kristal KDP ima dosta izomorfnih jedinjenja koja se dobijaju zamenom vodonika deuterijumom, ili pak K i P srodnim elementima. Ova jedinjenja mogu imati feroelektrične (vidi Tablicu I.1) ili antiferoelektrične osobine |B I, J I|. (Predstavnik antiferoelektrika ove grupe je $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$, poznat pod nazivom ADP.) Karakteristika cele ove grupe kristala je veliki izotopski efekat. Pri zameni vodonika deuterijumom, neke od osobina vezanih za fazni prelaz se drastično menjaju. Situacija je postala jasna tek posle rada Samare (Samara) |S 7| koji je ispitivao ponašanje kristala tipa $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$. Sa porastom x , T_c raste linearno od 122.5K ($x = 0$), do 223K ($x = 1$). Maksimalna vrednost spontane polarizacije raste od $5 \times 10^{-2} \text{ C/m}^2$ do $6.2 \times 10^{-2} \text{ C/m}^2$, a suprotno svim ranijim rezultatima i konstanta Kiri-Vajsa se menja za oko 40%. Ove činjenice jasno ukazuju na primarni značaj protonskog sistema za fazni prelaz.

(Odavde se može zaključiti da je pravi parametar uređenosti vezan za uredjivanje protona u vezama, dok je spontana polarizacija sekundarni efekat. Ovakvi feroelektrici se nazivaju "nesvojstveni" feroelektrici |D 5|. Kako kod KDP pravi parametar uređenosti i spontana polarizacija imaju istu simetriju |B I|, ove dve veličine su uzajamno proporcionalne tako da nema razlike u opisivanju faznih prelaza preko bilo koje od njih dve.)

TABLICA I.1.

Materijal	(Skraćeni naziv)	Vrsta prelaza	T_c [K] (Ref.)	$P_{S\max}$ [10^{-2}C/m^2] (Ref.)	$P_S(T_c)/P_S(0)$ (Ref.)	$\frac{T_c - T_o}{T_c}$	c [K]
KH_2PO_4	KDP	I	123 V I	5.1 V I	0.365 F 2	10^{-4} F 2	3200 V I
KD_2PO_4	DKDP	I	222 V I	6.1 V I	0.724 F 2	0.07 F 2	4000 V I
RbH_2PO_4	RDP	II	146.8 F 2	5.6 Z I	0	0	3000 V I
KH_2AsO_4	KDA	I	96.15 F 2	5.0 Z I	0.862 F 2	0.020 F 2	2500 C 1
KD_2AsO_4	DKDA	I	161.0 F 2		0.922 F 2	0.050 F 2	5400 V I
CsH_2AsO_4	CDA	I	145.5 S24	5.40 F 2	0.600 F 2	0.002 F 2	3200 V 3
CsD_2AsO_4	DCDA	I	190.2 S24	6.28 F 2	0.701 F 2	0.006 F 2	3600 V I
RbH_2AsO_4	RDA	I	109.75 F 2		0.755 F 2	0.016 F 2	3100 V 3

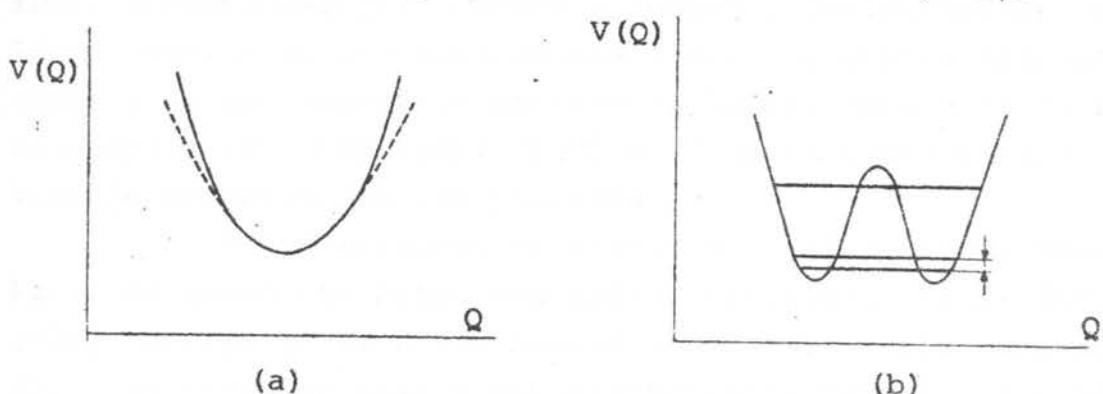
Karakteristike faznog prelaza kod feroelektrika tipa KDP

Vrsta i tip faznog prelaza. Pitanje vrste faznog prelaza |K I, SIV| je dugo vremena bilo otvoreno, jer kriva $P_s(T)$ ima veoma oštar uspon, tako da se smatralo da je reč o faznom prelazu II vrste (tzv. neprekidnom faznom prelazu |LII|). Danas je nepobitno utvrđeno da je reč o faznom prelazu I vrste na atmosferskom pritisku |B 3, S 9, W 2|, ali da KDP ima trikritičnu tačku |M I| u prostoru parametara pritisak, temperatura i električno polje, na oko $2.5 \times 10^8 \text{ Pa}$ tako da iznad tog pritiska fazni prelaz postaje fazni prelaz II vrste |B 2, S 9, W 2|. (Napomenimo da sa daljim povećanjem pritiska dolazi do potpunog gušenja pojave feroelektriciteta |S 6|.)

Kada se govori o faznim prelazima kod feroelektrika, možemo u principu razlikovati dva tipa faznih prelaza, zavisno od mehanizma koji dovodi do faznog prelaza |B I, V I|. Prvu grupu čine tzv. fazni prelazi pomerajnog (displacive) tipa čiji je tipičan primer fazni prelaz kod BaTiO_3 , |C 3|. Drugu grupu čine fazni prelazi tipa "uredjeno-neuredjeno" (order-disorder) a primer su fazni prelazi kod triglicin sulfata (TGS) i KDP. Kod prvih, pod uticajem anharmonijskih efekata, odredjeni optički mod oscilovanja rešetke (u terminologiji dinamike rešetke: odredjena fononska grana) postaje nestabilan tako da mu frekvencija oscilovanja teži nuli kad $\vec{k} \rightarrow 0$ ("mod se kondenzuje"). Taj mod oscilovanja se naziva "soft mode" - meki mod. Kada $\omega \rightarrow 0$, kristal menja strukturu i atomi ostaju "zamrznuti" u položajima koji odgovaraju pomeranjima u mekom modu, tako da novonastala struktura poseduje dipolni moment različit od nule.

Kod prelaza tipa "uredjeno-neuredjeno", sistem obično poseduje permanentne dipolne momente koji pod dejstvom dipol-dipol interakcije kao i kratkodometnih sila teže da se urede, dok se tome suprotstavlja termička ekscitacija. Ova dva dejstva su u kompeticiji, i dok na višim temperaturama preovladjuje neuredjenost, na niskim temperaturama je stabilnija faza koja se karakteriše spontanom polarizacijom |SIV|. Ova dva granična slučaja mehanizma faznog prelaza se mogu veoma dobro okarakterisati oblikom potencijala u kojem se kreću joni odgovorni za fazni prelaz u datom kristalu. Kod pomerajnih prelaza, joni se kreću u anharmonijskom potencijalu sa jednim minimumom, dok se kod

prelaza tipa "uredjeno-neuredjeno" joni kreću u potencijalu sa dva minimuma kao što je prikazano na slici I.4 |B I|.



Sl.I.4. Oblik potencijala za slučaj faznog prelaza:
a) Pomerajnog tipa
b) Tipa "uredjeno-neuredjeno"

Ustanovljeni su kvantitativni kriterijumi za ocenu tipa prelaza (vrednost Kiri-Vajsove konstante, veličina entropije, itd) |V I|. Po ovim kriterijumima KDP sigurno spada u feroelektrične sa faznim prelazom tipa "uredjeno-neuredjeno" iako kod njega ne postoje permanentni dipoli već do pojave dipolnih momenata dolazi kao posledica uređivanja protona. Ideja o mekom modu se može proširiti na KDP |B I| ali tada meki mod tj. eksicitaciju čiji zakon disperzije teži nuli kad $\vec{k} \rightarrow 0$, ne predstavljaju fononi već pseudo-spinska pobudjenja. Druga mogućnost je da se posmatraju kolektivne protonске eksicitacije kuplovane sa optičkim modom koji postaje mek, ali treba uočiti da frekvencija tog moda ne teži nuli zbog anharmoničkih efekata, već zbog interakcije sa protonima |K11|. Zbog ovoga se poneki put govorи da je fazni prelaz kod KDP mešovitog tipa. Bez obzira koji se pristup prihvati, bitno je uočiti suštinsku ulogu protona u samom mehanizmu faznog prelaza.

Prve teorije feroelektrika tipa KDP. U vreme kada još nisu bili poznati ni svi eksperimentalni podaci o strukturi KDP, Slejter (Slater) |S14| je formulisao prvu teoriju za objašnjenje faznog prelaza kod KDP. Posmatrao je sistem vodoničnih veza, postavljajući dva zahteva: a) da se u svakoj vezi nalazi jedan i samo jedan proton i b) da se u blizini svakog tetraedra mogu naći samo dva protona. Pripisao je različitim konfiguracijama odredjene energije i izračunao slobodnu energiju približ-

nim metodima. Fazni prelaz ima karakteristike kako prelaza prve, tako i prelaza druge vrste [F I]. Ovaj model je kasnije tačno rešen metodom matrice prenosa u jednoj i dve dimenzije [LIII, LIV]. Kasnije su izvršene generalizacije u smislu uzimanja u obzir i manje verovatnih protonskih konfiguracija [T 4, S11] i najopštiji tzv. SUS model [S13] se i danas često koristi za testiranje eksperimentalnih podataka [V 4].

U medjuvremenu se razvio još jedan metod, veoma efikasan za tumačenje eksperimentalnih rezultata. To su fenomenološke teorije [G I, F I]. Smatra se da isti izraz može da opiše slobodnu energiju kako u paraelektričnoj, tako i u feroelektričnoj fazi [LII]. Slobodna energija se razvija u red po parametru uredjenosti, a koeficijenti su funkcije temperature. S obzirom da je slobodna energija skalar, u razvoju se javljaju takve funkcije parametra uredjenosti koje su invarijantne u odnosu na transformacije simetrije samog kristala [Ž I]. Ova teorija može sa relativno malim brojem parametara da objasni niz eksperimentalnih podataka, kao i da predvidja nove makroskopske efekte. Treba imati na umu da su fenomenološke teorije ekvivalentne aproksimaciji molekularnog polja [SIV] što znači da daju dobre rezultate "dalje" od faznog prelaza. Prema Ginzburgovom (Гинзбург) kriterijumu [M I], oblast temperatura oko faznog prelaza u kojoj ne važi teorija molekularnog polja je obrnuto proporcionalna dometu interakcije. Kod feroelektrika, s obzirom na dipol-dipol interakciju, ove teorije treba da daju rezultate koji se slažu sa eksperimentom čak vrlo blizu samog prelaza. Ovo međutim, nije sasvim sigurno za slučaj KDP, jer smo već istakli značaj kratkodometnih interakcija.

Teorije Slejterovskog tipa i fenomenološke teorije su od značaja jer mogu da daju nove informacije od interesa za praksu. One međutim, ne mogu da objasne izotopski efekat, što znači da ne daju dovoljnu informaciju o mikroskopskom mehanizmu faznog prelaza.

Uticaj tunelovanja protona. U isto vreme kada je nastajala savremena teorija pomerajnih faznih prelaza [C 3], među istraživačima kristala KDP se pod uticajem izotopskog efekta stvaralo uverenje da u tadašnjim teorijama protonski sistem nije

dobro tretiran i da bi trebalo uzeti u obzir i kinetičku energiju protona. Polazeći od eksperimentalnih podataka, Blinc je 1960. godine [B 5] izneo hipotezu da se proton unutar veze nalazi u potencijalnoj jami sa dva minimuma, i što je još bitnije da ima mogućnost da kao laka čestica tuneluje izmedju ta dva minimuma.

Ako je potencijalna barijera dovoljno visoka, osnovno stanje je dvostruko degenerisano i odgovara lokalizaciji čestice u levoj ili desnoj strani jame. Kada proton tuneluje kroz barijeru, tunelovanje uklanja degeneraciju i od najnižeg stanja nastaje dublet koji čine dva stanja sa veoma bliskim energijama. Ostala stanja čestice imaju daleko više energije nego što je razlika energija stanja u dubletu [L I]. Eksperimenti ukazuju da je razmak izmedju ova dva nivoa reda veličine 200 cm^{-1} , dok se sledeći energetski nivo nalazi na 2000 cm^{-1} kod KDP [B 5, D 2]. U takvoj situaciji se ovaj sistem može dobro aproksimirati sistemom koji ima samo dva energetska nivoa.

Klasičan dvonivoski sistem se opisuje Izingovim modelom [HIII]. Obično se ova dva stanja predstavljaju svojstvenim funkcijama operatora z-projekcije spina $\frac{1}{2} + \hat{S}^z$. Interakcija izmedju spinova teži da ih uredi tako da svi pokazuju u istom smeru, a ovome doprinosi i spoljašnje magnetno polje \vec{H} duž z-ose. S druge strane termička ekscitacija ima za posledicu da menja smer projekcije spina. Ako sa $I_{\vec{n}\vec{m}}^{zz}$ označimo interakciju izmene a sa μ magnetni moment koji odgovara pojedinom spinu, hamiltonijan Izingovog modela za feromagnetik se definiše na sledeći način

$$\hat{H} = - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}^{zz} \hat{S}_n^z \hat{S}_m^z - \mu H \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^z \quad (\text{I.1})$$

De Žen (de Gennes) [D 2] je intuitivno uočio da se tunelovanje, koje takodje ima za posledicu prelazak sistema iz jednog stanja u drugo, može prikazati uvodjenjem komponente \hat{S}^x . Na postuliranju modela radilo je mnogo autora, medju kojima je vredno spomenuti od naših istraživača ekipu iz Instituta "Jožef Štefan" u Ljubljani na čelu sa dr R. Blincom [B I] i dr Lj. Novakovića iz Instituta "Boris Kidrič" u Vinči [N I]. Danas je prihvaćen pristup formulisanju modela koji su prvi dali Tokunaga

(Tokunaga) i Macubara (Matsubara) [T 6] a koji koristi formalizam druge kvantizacije [TII].

Formulisanje IMTF. Posmatraćemo samo protonski sistem i smatraćemo da je operator energije (hamiltonijan) dobro definisan jednočestičnim i dvočestičnim interakcijama. Uvedimo operator polja $\hat{\psi}^+$ na sledeći način

$$\hat{\psi}^+(\vec{r}) = \sum_i [\hat{a}_L^{i+} \phi_L^i(\vec{r}) + \hat{a}_D^{i+} \phi_D^i(\vec{r})] \quad (I.2)$$

Ovde su ϕ_L^i , ϕ_D^i talasne funkcije protona lokalizovanog u levoj ili desnoj strani jame u i-toj vezi, a \hat{a}_L^{i+} i \hat{a}_D^{i+} operatori koji kreiraju protone u levoj ili desnoj strani jame respektivno. U slučaju protona to su Fermi-operatori. Zbog zahteva da se u vezi može nalaziti samo jedna čestica

$$\hat{a}_L^{i+} \hat{a}_L^i + \hat{a}_D^{i+} \hat{a}_D^i = 1 \quad (I.3)$$

statistika nije bitna, tako da izvodjenje važi i za Boze-česticu kao što je deuteron. Zanemarićemo prekrivanje talasnih funkcija koje odgovaraju levoj i desnoj strani jame, sem u slučaju kada se javljaju u istom čvoru. Koristeći komutacione relacije operatora i relaciju (I.3) možemo definisati operatore

$$\begin{aligned} \hat{S}^z &= \frac{1}{2} (\hat{a}_L^+ \hat{a}_L - \hat{a}_D^+ \hat{a}_D) \\ \hat{S}^x &= \frac{1}{2} (\hat{a}_L^+ \hat{a}_D + \hat{a}_D^+ \hat{a}_L) \\ \hat{S}^y &= \frac{1}{2i} (\hat{a}_L^+ \hat{a}_D - \hat{a}_D^+ \hat{a}_L) \end{aligned} \quad (I.4)$$

koji zadovoljavaju sve relacije za komponente operatora spina 1/2. Mi ćemo ovako definisanu veličinu nazivati pseudo-spin |N I| da ne bismo zaboravili njeno fizičko poreklo.

Koristeći operatore (I.4) možemo hamiltonijan sistema izraziti na sledeći način

$$\begin{aligned} \hat{H}_{prot} &\equiv -2\Gamma \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^x - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} [I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^z + \\ &+ L_{\vec{n}\vec{m}} (\hat{S}_{\vec{n}}^x \hat{S}_{\vec{m}}^z + \hat{S}_{\vec{n}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^x) + K_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}}^x \hat{S}_{\vec{m}}^x] \end{aligned} \quad (I.5)$$

Pokušajmo da ovim izrazima pridamo određeni fizički smisao. $S_{\vec{n}}^z$ opisuje lokalizovanje protona na jednoj od strana jame. Tačnije, on je proporcionalan razlici naseljenosti leve i desne strane jame. Odatle zaključujemo da je dipolni moment sistema proporcionalan $\langle S_{\vec{n}}^z \rangle$. $S_{\vec{n}}^x$ opisuje tunelovanje protona iz jednog u drugi ravnotežni položaj, a $S_{\vec{n}}^y$ je operator gustine struje verovatnoće protona iz jedne strane jame u drugu.

Odavde možemo odrediti i fizički smisao pojedinih članova hamiltonijana. Prvi član hamiltonijana daje razliku energija u dubletu, tako da odgovara energiji tunelovanja protona. Drugi član opisuje proton-proton interakciju u kojoj su sadržane kako kratko dometne interakcije tako i dipol-dipol interakcija*. Treći i četvrti član opisuju uticaj tunelovanja na uređivanje i tunelovanje drugih protona. U suštini, kod feroelektričnog KDP zbog zahteva da sistem bude invarijantan na transformaciju ($S_{\vec{n}}^z \rightarrow -S_{\vec{n}}^z$, $S_{\vec{n}}^x \rightarrow S_{\vec{n}}^x$) sledi da mora biti $L_{\vec{n}\vec{m}} = 0$. $K_{\vec{n}\vec{m}}$ je mnogo manje od $I_{\vec{n}\vec{m}}$ i u aproksimaciji u kojoj je ovaj izraz izведен i njega treba zanemariti**. Stoga ćemo nadalje posmatrati izraz

$$\hat{H} \equiv -2\Gamma \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^x - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^z \quad (\text{I.6})$$

Da bi uređenje bilo feroelektrično, mora da važi $I_{\vec{n}\vec{m}} > 0$, i $\Gamma > 0$. Nadalje ćemo smatrati da je ovaj uslov ispunjen.

Na koji način može ovaj model da opiše fazni prelaz? Već smo rekli da je spontana polarizacija proporcionalna srednjoj vrednosti $\langle S^z \rangle$, tako da je $\langle S^z \rangle$ parametar uređenosti. U sistemu deluju dve različite težnje. Interakcija $I_{\vec{n}\vec{m}}$ teži da sistemu da minimalnu energiju na taj način što će sve spinove usmeriti u istom smeru, dok termičko pobudjivanje i pojava tunelovanja teže da ovu uređenost poremete. Zavisno od toga koji od ova dva efekta preovlada, sistem je u paraelektričnom

* Može se pokazati da se kratko-dometne interakcije prikazuju četvorospinskom interakcijom $|B|I|$ ali se mogu u dobroj aproximaciji predstaviti i hamiltonijanom (I.6).

** Ovaj član se može pojaviti sa značajnim doprinosom usled interakcije sa fononima $|V|I|$.

ili feroelektričnom režimu. Kvantna priroda modela se manifestuje u činjenici da i na $T = 0K$ sistem nije u potpunosti uređen zbog efekta tunelovanja.

Ovaj model može da objasni izotopski efekat, jer Γ zavisi od mase čestice koja tuneluje, kao i od dužine veze $|B\ I|$. U rafiniranim teorijama $|K_{11}|$ i konstanta proton-proton interakcije zavisi od mase čestice.

Moguć je i drugi pristup izvodjenju izraza (I.6). Naime, u izrazu za operator polja, može se praviti razvoj ne po lokalizovanim funkcijama, već po simetričnim i antisimetričnim funkcijama, koje odgovaraju energetskim nivoima dobijenim posle razdvajanja degenerisanog osnovnog stanja $|B\ I|$. Strožiji pristup je obradjen u monografiji $|V\ I|$.

Već smo napomenuli da spontana polarizacija nastaje usled pomeranja teških jona. Prema tome, kretanje teških jona se u principu ne može zanemariti. Zato je predložen drugi model $|M\ 4, E\ 5|$ kod kojeg se posmatraju pomeraji celokupne elementarne ćelije. Uvode se normalne koordinate i bira mod koji po simetriji odgovara mekom modu. U određenoj aproksimaciji se deo hamiltonijana koji odgovara mekom modu može izraziti preko pseudospinskih operatora. Kao rezultat se ponovo dobija izraz (I.6) uz dodatak četvorospinske interakcije. Mora se uzeti u obzir i uticaj ostalih fononskih grana. Osnovna razlika ove formulacije je u tome što sada jedan pseudo-spin opisuje ponašanje celokupne elementarne ćelije.

Ni do danas nije eksperimentalno potvrđeno koja od ove dve formulacije modela ima prednost $|LVI|$. Kod prve formulacije, prednost je očiglednost u opisivanju ponašanja protona, ali ostaje problem generalizacije mekog moda na protonске eksicitacije, ili pak tretiranja interakcije pseudo-spinova sa fononima. Kod druge formulacije nema takvih problema jer hamiltonian (I.6) već opisuje ponašanje celokupne elementarne ćelije, ali zato mikroskopski mehanizam postaje mnogo složeniji. U principu makroskopski rezultati su isti, ako se da drugačije tumačenje mikroskopskih parametara. S obzirom da je veći broj eksperimentalnih radova odredjivao parametre hamiltonijana u skladu sa prvom formulacijom, i mi ćemo je prihvativi nadalje.

Naziv modela je došao od činjenice da se S^x ponaša kao spoljašnje polje koje deluje poprečno u odnosu na pravac duž kojeg se uredjuju spinovi.

Nas će interesovati ponašanje sistema u odsustvu makroskopskog električnog polja [V I]. To znači da smatramo da se uzorak nalazi izmedju ploča kratko spojenog kondenzatora. Kako makroskopsko polje u kristalu nije identično sa poljem spoljašnjih nanelektrisanja [K I, V I], pretpostavićemo da je od interakcije $I_{\vec{n}\vec{m}}$ već odbijen deo koji kompenzuje efekat spoljašnjeg polja [P15].

Interakcija sa makroskopskim poljem duž z-ose (c-ose kristala) se opisuje dodatnim članom hamiltonijana

$$\hat{H}_{int} = -p\epsilon \sum_n \hat{S}_n^z \quad (I.7)$$

gde je p dipolni moment koji interaguje sa poljem. Ovaj izraz unosi čitav niz matematičkih poteškoća, i zato ga mi od početka eliminišemo iz računa. Ovo ujedno znači da se nećemo zanimati različitim efektima vezanim za dejstvo polja kao što su napr. statička i dinamička susceptibilnost, protonска provodljivost, itd. Na kraju ovog odeljka koji se odnosi samo na formulisanje modela, sumiraćemo nekoliko njegovih prednosti na kojima insistira većina autora koji se njime bave. Prvo, velika anharmoničnost samog potencijala ne dozvoljava perturbacioni pristup. Prelaskom na formulaciju preko pseudo-spinova, ova anharmoničnost se potpuno gubi iz hamiltonijana. Dalje, posle uvođenja pseudo-spinova, mogu se koristiti razne tehnike dobro razradjene u teoriji magnetizma. S obzirom da hamiltonijan sadrži i deo koji predstavlja hamiltonijan Izingovog modela, ovaj deo može poslužiti kao nulta aproksimacija s obzirom da je veoma dobro proučen. Niže ćemo videti, da se ovaj model može primeniti uvek kada u dvonivoskom sistemu postoji neka interakcija koja prouzrokuje "preskakanje" iz jednog stanja u drugo.

Makroskopske vrednosti parametara hamiltonijana.
Prikazali smo na koji način je iz potrebe da se opiše ponašanje feroelektrika tipa KDP, nastao Izingov model u poprečnom polju. Na kraju II glave, ćemo izneti eksperimentalne rezultate koji

govore u prilog ovom modelu, a ovde ćemo se zadovoljiti time da citiramo eksperimentalne vrednosti za mikroskopske parametre koji figurišu u hamiltonijanu (I.6). Vrednosti parametara možemo odrediti tako što ispitamo osobine modela u nekoj od aproksimacija i uporedimo ih sa eksperimentalnim rezultatima. Najčešće se proračun izvodi u aproksimacijama efektivnog polja (molekularno polje ili aproksimacija klastera) i haotičnih faza. Kod aproksimacije molekularnog polja i haotičnih faza, najčešće se porede rezultati tzv. Kobajašijevog (Kobayashi) hamiltonijana jer on sadrži i interakciju sa fononima, a rezultati su izraženi preko Γ i $I(0)$. Kod aproksimacije klastera se direktno dobijaju veličine interakcija prvih i drugih suseda koji okružuju kiseonički tetraedar. Ako sa U označimo interakciju dva protona koji pripadaju istom tetraedru a nalaze se u istoj ravni (normalnoj na c -osu), a sa V interakciju protona koji su u ravnima razmaknutim za $c/4$, $|V|/3$ rezultati koje je dobio Vaks (Вакс) sa saradnicima su sledeći*: $\Gamma/k_B = 140\text{K}$, $U/k_B = -1970\text{K}$, $V/k_B = 2090\text{K}$. U slučaju deuterona, većina teorija daje dobro slaganje sa eksperimentom ako je $\Gamma = 0$, drugim rečima ako se pretpostavi da deuterон nema mogućnost tunelovanja.

U priloženoj tablici je jedan skup parametara koji odgovara novijim istraživanjima [C 1]

TABLICA I.2.

Kristal	KDP	DKDP	RDP	CDA	KDA
$\Gamma/k_B \text{ K}$	97	0	121	57	38
$-U/k_B \text{ K}$	992	1484	1200	1022	816
$V/k_B \text{ K}$	1054	1580	1274	1086	858

Za nas su mnogo interesantniji rezultati koji se odnose na "integralne" karakteristike sistema, dakle Γ i $I(0)$, zbog toga jer nam je tu olakšano poredjenje naših rezultata, s obzirom da mi strukturu kristala aproksimiramo kubnom strukturom. Istovremeno ćemo navesti i vrednost parametra $x = \Gamma/I(0)$.

* U celoj tezi ćemo energetske parametre deliti sa Boltzmanovom (Boltzmann) konstantom i izražavati u Kelvinima (K), jer je ovo uobičajena praksa u teoriji faznih prelaza.

L. Novaković je još 1966. [N 5] na osnovu rezultata infracrvenih merenja procenio da na sobnoj temperaturi parametri iznose $\Gamma/k_B \sim 250\text{K}$, $I(0)/k_B \sim 1000\text{K}$, $x = 0.25 - 0.20$. Najverovatnije su rezultati eksperimenata pogrešno interpretirani jer kasniji rezultati daju nižu vrednost za x .

Polazeći od Kobajašijevog izraza za dielektričnu konstantu [K11], Holakovski (Holakowski) sa saradnicima [H 8] je odredio $\Gamma/k_B = 100.8\text{K}$, što uz $T_c = 122\text{K}$ daje $I(0)/k_B = 590\text{K}$ $x = 0.17$ [v I].

Trenutno se opšte prihvaćenim smatraju Pirsijevi (Peercy) rezultati dobijeni kombinovanjem rezultata Ramanovih spektara i dielektričnih merenja pod povišenim pritiscima [P 3, P 4]. On je odredio kako konstantu proton-proton interakcije $I(0)$, tako i efektivnu konstantu $I(0)^*$ koja je renormalizovana usled interakcije sa fononima. Tako za KDP imamo vrednosti $\Gamma/k_B = 123.75\text{K}$, $I(0)/k_B = 495.02\text{K}$ i $I(0)^*/k_B = 647.55\text{K}$ [P 3]. Za RDP je odredio sledeće parametre $\Gamma/k_B = 112.82\text{K}$ i $I(0)^*/k_B = 680.65\text{K}$. Ovo daje vrednosti $x = 0.25 - 0.19$ za KDP i $x = 0.17$ za RDP.

Mogućnosti primene IMTF. Kada je jednom ustanovljen kao model za opisivanje feroelektričnih fenomena kod kristala tipa KDP, IMTF je postepeno počeo da živi svojim životom. Sam model kao model predstavlja veliki izazov za statističku fiziku jer je do danas poznato tačno rešenje samo u jednoj dimenziji, tako da se svaki novi približni tretman tretira i na ovom modelu. Na taj način se stiže do novih teorijskih rezultata koji mogu da pobude dalji eksperimentalni interes. S druge strane, eksperimentalni rad na kristalima tipa KDP, ne jenjava, tako da postoji puna povratna pozitivna sprega teorije i eksperimenta upravo preko IMTF.

Ako se posmatra sam model, može se uočiti da se u fizici čvrstog stanja (i ne samo u njoj) javlja niz situacija koje se mogu opisati ovim hamiltonijanom. Mi ćemo ovde navesti slučajeve u kojima se sve ovaj model može primeniti, a dosta dobar pregled eksperimentalnih potvrda za primenu ovog modela može se naći kod Stinčkomba (Stinchcombe) [S 22] (reference do 1973.).

Kod feroelektrika sa vodoničnim vezama kod kojih je

efekat tunelovanja bitan, ovaj hamiltonijan je prvo uveden. Tu spadaju KDP i njemu izomorfni kristali, kao i $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$. Dalje, postoje i sistemi sa prelazom tipa uredjeno-neuredjeno kod kojih je tunelovanje slabo, ($x \ll 1$). To su napr. NaNO_2 , NaNO_3 , TGS. Dalje, model se može generalisati i na slučaj asimetrične potencijalne jame, kao što se pretpostavlja da postoji kod senjetove soli |ž 2|.

Model se može isto tako generalisati i na slučaj antiferoelektrika sa dve podrešetke |L14|. Tako formulisan model se može primeniti i na teoriju Frenkelovih eksitona (u dvonivoskoj aproksimaciji) kod molekularnih kristala sa dva molekula po elementarnoj čeliji, kao što je slučaj kod antracena |L14|.

Sledeću primenu model je našao kod jedinjenja retkih zemalja V grupe sa strukturom tipa NaCl (Tr, Y). Kristalno polje jona ima singletno osnovno stanje, a može se uzeti da je i prvo pobudjeno stanje singlet, ili što je obično slučaj, triplet čiji je najniži nivo mnogo bliži osnovnom stanju |W 1|. Ovaj model se neki put naziva "singlet-singlet" model. Za paramagnetu fazu se može formulisati hamiltonijan identičan sa IMTF, pri čemu S^z opisuje populaciju dva najniža energetska nivoa, dok izingovski član hamiltonijana opisuje magnetnu interakciju, a član sa tunelovanjem, razdvajanje nivoa usled kristalnog polja.

Kod feromagnetika sa jakom jednoosnom anizotropijom kod kojih dominira jedno- ili dvodimenzionalni karakter interakcije, kao što su $\text{Dy}(\text{C}_2\text{H}_5\text{SO}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ ili $\text{FeCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, CoCl_2 , EuS ili $\text{Cu}(\text{NH}_4)\text{B}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ može se dovesti spolja poprečno magnetsko polje i na taj način simulirati sistem koji je dobro opisan sa IMTF |S22|.

Vanadati retkih zemalja i njihovi izomorfi (DyVO_4 , TbVO_4 , TmAsO_4) imaju strukturni prelaz kao posledicu interakcije niskoležećih elektronskih nivoa sa fononima. Prilikom faznog prelaza, kvadrupolni momenti se polarišu u x-y pravcima. Pauli-matrice se mogu uvesti tako da njihova svojstvena stanja odgovaraju ovim dvema polarizacijama, fazni prelaz se karakteriše sa $\langle S^z \rangle \neq 0$. Ovaj sistem se može opisati Kobajašijevim hamiltonijanom, koji se razdvajanjem spinских i fononskih operatora prevodi u IMTF. Sama pojava se naziva kooperativni Jan-Telerov

(Jan-Teller) efekat [S 8, E 2, E 3].

Posebno su zanimljivi materijali sa vodoničnim vezama kod kojih vodonične veze leže u ravnima, a i polarizacija isto tako leži u tim ravnima. Ovde je izrazit dvodimenzioni karakter problema [F 3]. Jedno od tih jedinjenja je tzv. SCD ($\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) koja ima antiferoelektrični prelaz "blago" I vrste. Poredjenjem rezultata koje za ponašanje specifične topote daje dvodimenzioni IMTF [G 5] nadjeno je izuzetno slaganje, i potvrđena primenljivost IMTF na ovaj sistem, mada drugi rezultati to dovode u sumnju [S 5].

Drugi takav sistem je jaka organska kiselina H_2SQ (3,4-dihidroxy-3-cyclobutene-1,2-dione = $\text{C}_4\text{H}_2\text{O}_4$) [S10]. Proračun karakteristika faznog prelaza za IMTF u dve dimenzije metodom klastera dao je izuzetno dobro kvantitativno slaganje sa eksperimentom [Z 1].

Naravno, javili su se i drugi teorijski modeli, koji se mogu povezati sa IMTF. Bišop (Bishop) i Krumhānsl (Krumhansl) [B 4] su model primenili na slučaj strukturalnih faznih prelaza, a Lajžerović (Lajzerowicz) i Pfeti (Pfeuty) na problem interagujućih lanaca [L 8].

U kvantnoj teoriji polja danas se često razmatra diskretizacija prostora, tako što se sa hamiltonijana formulisanih za kontinuirane promenljive prelazi na hamiltonijane definisane na rešetci [S 1]. Tako se napr. diskretizacijom tzv. $(\phi_2)^4$ teorije i zadržavanjem samo određenog broja diskretnih stanja jednočestičnog dela hamiltonijana, ponovo dolazi do IMTF u jednoj dimenziji [G 2, D 3].

Oblast istraživanja teze i druge moguće oblasti istraživanja. U ovoj tezi postavili smo sebi dosta ograničen cilj. Uzimajući za fizičku osnovu modela feroelektrične fenome-ne kod kristala tipa KDP, ispitaćemo temperatursku zavisnost $\langle S_n^z \rangle$ i $\langle S_n^x \rangle$ u različitim temperaturskim režimima, a isto tako i energiju elementarnih ekscitacija. Kao mali parametar računa poslužiće nam $x = \Gamma/I(0)$, i radićemo u aproksimaciji koja zanemaruje članove reda x^3 . Hamiltonijan ćemo posmatrati u najjednostavnijoj formi jer nam je želja da proverimo da li su približne metode koje smo razvili primenljive za ovaj slučaj i

u kojoj meri su rezultati adekvatni.

Zbog gore navedenog, ovde ćemo u cilju kompletnosti navesti niz problema kojima se nećemo baviti. Pre svega, već smo naglasili da se pomeranje teških jona mora uzeti u obzir za dobijanje dobre slike o faznom prelazu. Spomenuli smo već teoriju lokalnog moda, koja ovo pomeranje ugradjuje u sam hamiltonijan. Češći je drugi pristup u kojem se posmatra interakcija pseudo-spinskih ekscitacija sa fononskim granama koje su bitne za fazni prelaz. Prvi su interakciju sa optičkim modom duž c-ose posmatrali Vilen (Villain) i Stamenković [V 5] ali je njihov izraz za hamiltonijan detaljno obrazložio Kobajaši [K 11] po kojem onda on nosi ime. Pored hamiltonijana fononskog sistema i IMTF koji opisuje protonski sistem javlja se i član pseudo-spin-fonon interakcije linearan po $\langle \hat{S}^z \rangle$, i pomaku atoma. Njegova pojava dovodi do renormalizacije konstanti u hamiltonijanu [B I]. Eksperimenti su pokazali da postoji mešanje ("kuplovanje") sa optičkim modom duž c-ose, kao i sa jednim akustičkim modom. Pri faznom prelazu dolazi do kondenzacije ovog mešanog moda, ali ne usled anharmonijskog efekta (kao kod pomerajnih faznih prelaza) već usled uredjivanja protonskog podsistema.

Većina eksperimentalno ispitanih uzoraka nije idealno čista već sadrži odredjene prime se, medju njima i deuterijum. Danas se tehnološki mogu proizvesti uzorci sa precizno definisanom koncentracijom prime se, pri čemu se smatra da je njihova raspodela unutar uzorka potpuno proizvoljna. Iz ovog razloga je teorija neuredjenih sistema [E 4] našla plodno tlo kod IMTF. Ispituje se zavisnost statičkih i dinamičkih osobina od koncentracije deuterijuma [L 7, P 11, P 13]. Pri ovome se koriste standardne metode razradjene za neuredjene sisteme (VCA, CPA). U poslednje vreme se ovome pridaje veliki interes jer eksperimenti ukazuju [C 4] da verovatno tu leži put ka rešenju problema centralnog pika [B 8].

U našem radu posmatraćemo monodomenski monokristal, isključivši time iz računa niz zanimljivih problema koji se odnose na ponašanje domena u feroelektričnim kristalima [H IV].

Značaj istraživanja feroelektrika. Na kraju ove glave pokušaćemo da osvetlimo kakav značaj imaju danas istraživanja

feroelektričnih fenomena. Već je dovoljno reči bilo o tome koliki se značaj pridaje teoriji faznih prelaza uopšte, tako da želimo da istaknemo kakav je praktični značaj feroelektrika. Nažalost, danas još uvek feroelektrici imaju veliku primenu kao nelinearni dielektrici kod kojih se efekti nelinearnosti izuzetno dobro manifestuju. Same feroelektrične osobine još su uvek u drugom planu, jer su dosta teško primenljive u praksi. Naime, feroelektrici su osetljivi kako na spoljašnja polja, tako i na temperature reda veličine sobnih, i problem stabilisanja uredaja baziranih na njihovim osobinama, leži pre svega u upoznavanju mikroskopskih mehanizama koji iza svega leže. Upravo stoga teorijska, kao i eksperimentalna istraživanja su danas u punom zamahu, i odatle izbor ove materije za temu ovog doktorata.

II GLAVA

TEORIJSKA I EKSPERIMENTALNA ISTRAŽIVANJA POVEZANA SA IZINGOVIM MODELOM U POPREČNOM POLJU

U ovoj glavi daćemo pregled teorijskih radova posvećenih proučavanju ponašanja IMTF, a na kraju ćemo rezimirati eksperimentalna istraživanja koja su doprinela afirmaciji samog modela.

Kao prvo ćemo analizirati radove koji koriste metod samousaglašenog (self-consistent) ili efektivnog polja [SII], sa posebnim akcentom na aproksimaciji molekularnog polja. Ova aproksimacija je jednostavna i omogućiće nam da kvalitativno proučimo sve bitne crte modela. Zatim ćemo rezimirati rezultate radova koji su generalisali na IMTF odredjene tehničke razradjene za slučaj Izingovog modela. S obzirom da je IV glava posvećena niskotemperaturskom ponašanju modela, posebno ćemo se zadržati na niskotemperaturskom razvoju. Prikazaćemo rezultate dobijene novim tehnikama razvijenim poslednjih godina. Većina radova će biti analizirana kratko, a pregled kvantitativnih rezultata koji se odnose na graničnu vrednost parametra x je dat u Tablici II.1. U posebnu grupu smo izdvojili radove koji se bave metodom dijagonalizacije hamiltonijana, metodom jednačina kretanja i Grinovih (Green) funkcija. Njima smo posvetili posebnu pažnju s obzirom da je reč o metodu koji smo i mi koristili u ovom radu. Imajući u vidu da različiti autori koriste različite konvencije pri formulisanju hamiltonijana, mi smo sve citirane rezultate prilagodili konvenciji definisanoj izrazom (I.6).

Metod samousaglašenog polja i opšte osobine IMTF.
 Teorijsko istraživanje na određenom modelu obično počinje primenom metoda efektivnog (samousaglašenog) polja [SII]. U ovom metodu se jedan deo interakcija posmatranog pseudo-spina (odnosno čestice) sa drugim pseudo-spinovima zamenjuje interakcijom sa nekim efektivnim poljem. Oblik tog polja se određuje iz uslova samousaglašenosti procedure. Najjednostavnija je u tom smislu aproksimacija molekularnog polja (MFA). Ona u potpunosti

zanemaruje korelaciju izmedju fluktuacija (odstupanja od srednje vrednosti) $|B|, |V|$. Ova aproksimacija daje dobru kvalitativnu sliku, kada je reč o IMTF, iako su dobijene vrednosti parametara previsoke u odnosu na tačnije pristupe.

U ovoj aproksimaciji hamiltonijan IMTF glasi $|B|, |V|$

$$H_{MFA} = - \sum_{\vec{n}} \vec{F} \cdot \vec{S}_{\vec{n}} + \frac{1}{2} N I(0) \langle S^z \rangle^2 \quad (\text{II.1})$$

gde smo uveli vektor molekularnog polja

$$\vec{F} = (2\Gamma; 0; I(0)\langle S^z \rangle); \quad F = |\vec{F}| = \sqrt{4\Gamma^2 + I(0)^2 \langle S^z \rangle^2}$$

N je broj čvorova u kristalu, a $I(0)$ je definisano kao

$$I(0) = \sum_{\vec{n}} I_{\vec{n}\vec{m}} = \sum_{\vec{n}-\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}}$$

Izračunavajući statističku sumu ovog sistema $|V|$ nalazimo sa-mousaglašene jednačine za srednje vrednosti komponenti pseudospina:

$$\langle \vec{S}_{\vec{n}} \rangle \equiv \langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \cdot \frac{\vec{F}}{F} \cdot \theta \frac{F}{2\Theta} \quad \Theta = k_B T \quad (\text{II.2a})$$

$$\langle S^x \rangle = \frac{\Gamma}{F} \theta \frac{F}{2\Theta} \quad \langle S^y \rangle = 0 \quad \langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \cdot \frac{I(0) \langle S^z \rangle}{F} \theta \frac{F}{2\Theta} \quad (\text{II.2b})$$

U dobijanju gornjih rezultata koristili smo translacionu invarijantnost kristala ($\langle \vec{S} \rangle$ i \vec{F} ne zavise od čvora).

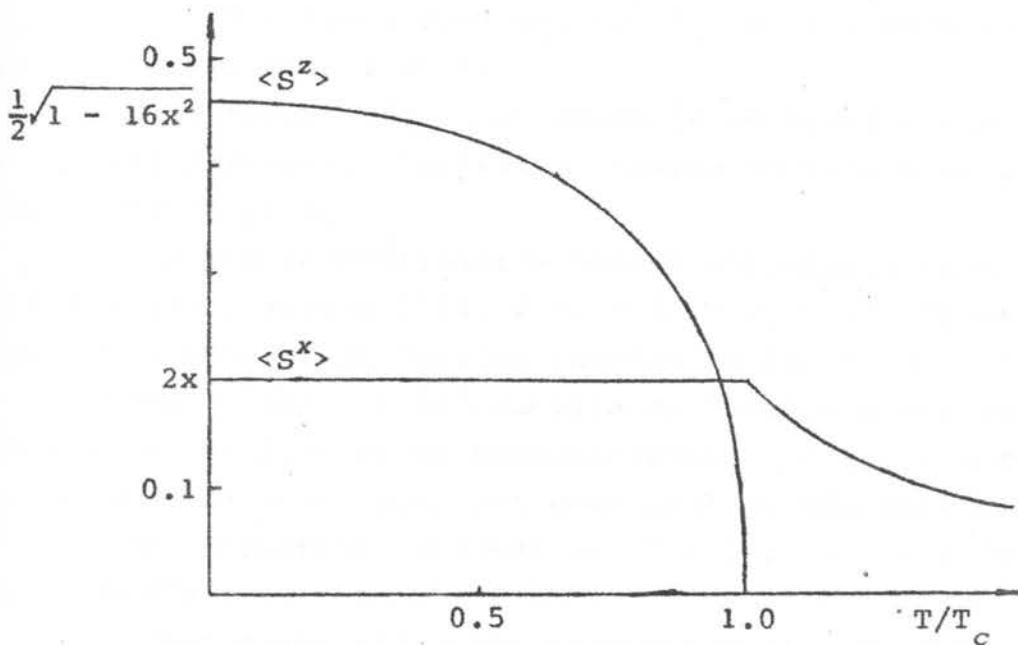
Vidimo da bez obzira na temperaturu, uvek postoji srednja vrednost x-komponente $\langle S^x \rangle \neq 0$. S druge strane, pored rešenja $\langle S^z \rangle = 0$, (koje minimizira slobodnu energiju sistema na visokim temperaturama), postoji još jedno rešenje za $\langle S^z \rangle$ koje sledi iz jednačine

$$\frac{2F}{I(0)} = \theta \frac{F}{2\Theta} \quad (\text{II.3})$$

ali samo pod uslovom da je temperatura niža od temperature T_c odredjene uslovom

$$\frac{4\Gamma}{I(0)} = \theta \frac{\Gamma}{T_c} \quad \Theta_c = k_B T_c \Rightarrow kT_c = \frac{2\Gamma}{\ln \frac{1+4\Gamma/I(0)}{1-4\Gamma/I(0)}} \quad (\text{II.4})$$

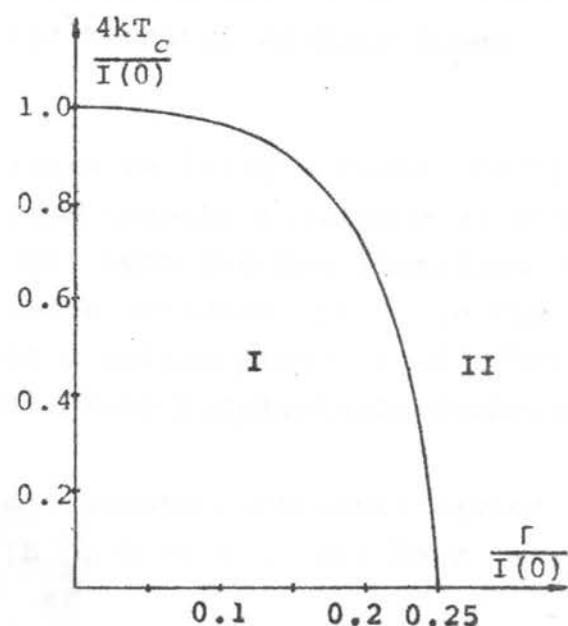
$\langle S^z \rangle = 0$ odgovara paraelektričnoj fazi, a $\langle S^z \rangle \neq 0$ feroelektričnoj fazi. $\langle S^z \rangle$ je parametar uredjenosti i zaključujemo da je fazni prelaz druge vrste.



Sl.II.1. $\langle S^z \rangle$ i $\langle S^x \rangle$ u funkciji temperature, za $x = \Gamma/I(0) = 0.1$ (Uočiti da je $\langle S^x \rangle$ konstantno ispod T_c).

Uočimo da uslov $T < T_c$ ne osigurava automatski $\langle S^z \rangle \neq 0$. Kvantne fluktuacije parametra uredjenosti koje su posledica tunelovanja, dozvoljavaju čak i na $T = 0K$ da sistem dosegne uredjeno stanje, samo ako je Γ manje od kritične vrednosti Γ_c . (U MFA $\Gamma_c = I(0)/4$).

Sl.II.2. Fazni dijagram parametara $T - \Gamma$. Oblast I predstavlja oblast u kojoj se javlja uredjeno stanje. U oblasti II sistem je uvek neuredjen.



Sve do sada navedene činjenice su sasvim opšte i važe generalno za IMTF, a mi smo koristili aproksimaciju molekularnog polja samo u cilju njihovog demonstriranja. Ono što je karakteristično za MFA su konkretan oblik temperaturske zavisnosti $\langle S^z \rangle$ i $\langle S^x \rangle$ kao i vrednost za T_c i Γ_c , koje su prikazane na slikama II.1 i II.2.

Izotopski efekat se veoma jasno manifestuje već u MFA jer svi parametri eksplisitno zavise od vrednosti parametra tunelovanja |N 8|.

Dalja generalizacija metoda samousaglašenog polja je aproksimacija klastera |SII, V I, B 6, V 2, V 3|. Klaster je grupa određenog broja čestica izmedju kojih se sve interakcije uračunavaju tačno, a interakcija sa ostalim česticama izvan klastera se izražava preko samousaglašenog polja. U aproksimaciji konstantne veze (constant coupling) se posmatra klaster od dve čestice. Rezultati dobijeni na $T = 0K$, za $d = 1$ |W 1|, su negde izmedju rezultata MFA i RPA.

Najprirodniji izbor klastera u slučaju KDP su četiri pseudo-spina koji opisuju ponašanje četiri protona oko jednog kiseoničkog tetraedra |B 6, V I, V 2|. U računu postoji niz parametara kao što su energija tunelovanja, interakcije prvih i drugih suseda i samousaglašena poprečna i longitudinalna polja. Ako se zanemari tunelovanje, mogu se reprodukovati rezultati svih teorija Slejterovskog tipa, određenim izborom parametara. Podešavanjem svih parametara može se postići veoma dobro slaganje sa eksperimentom |V 4, F 2, C 1|. Fazni prelaz je I vrste, ali sa porastom parametra Γ dobija karakter prelaza druge vrste |V I|.

Rezultati metoda razvijenih za Izingov model. Mnogi autori su pokušali da na IMTF primene tehnike razvijene za slučaj Izingovog modela posmatrajući pri tome deo hamiltonijana $\approx S^x$ kao malu perturbaciju. Još 1963. Fišer (Fischer) |F 5| je razmatrao transverzalnu susceptibilnost u nultom polju $((\partial \langle S^x \rangle / \partial \Gamma)_{\Gamma=0})$ i pokazao kako se ona može izraziti preko korelacionih funkcija odgovarajućeg Izingovog modela.

Niz autora je posmatrao visokotemperaturski razvoj susceptibilnosti i magnetizacije |E 1, O 1, Y 1| pri čemu je

parametar razvoja odnos $I(0)/k_B T$ a koeficijenti razvoja su funkcije $x = \Gamma/I(0)$. Rezultati se razlikuju zbog razlike dužine redova i zbog različitog metoda analize redova. Fazni prelaz u sistemu je II vrste, a parametri prelaza zavise od dimenzije sistema (za razliku od MFA). Tunelovanje snižava tačku prelaza, a povećanje dimenzije je povećava. Tačke krive $T(\Gamma)/T(0)$ u funkciji Γ/Γ_c leže sve na istoj krivoj $|Y 1|$ što govori u prilog hipotezi univerzalnosti kritičnih fenomena $|SIV|$.

Za nas su od posebnog interesa Pfetijeva (Pfeuty) [P 6, P 7] istraživanja osnovnog stanja IMTF (na $T = 0K$) metodom teorije perturbacija [MII]. Posmatrane su kako uredjena ($x < x_c$) tako i neuredjena oblast ($x > x_c$) i ispitivano kritično ponašanje $\omega(\vec{k})$, $\langle S^z \rangle$ i $\langle S^x \rangle$ kada $x \rightarrow x_c$. Citiraćemo analitičke rezultate za d-dimenzionu hiperkubnu rešetku ($d = 1$) u uredjenom stanju

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= \frac{1}{2} - 4x^2 - 16x^4 \frac{4d^2 + 6d - 3}{(2d - 1)^2} - \\ &- 64x^6 \frac{72d^4 + 12d^3 + 86d^2 - 140d + 43}{(2d - 1)^2 (3d - 1)^2} + O(x^8) \end{aligned} \quad (\text{II.5a})$$

$$\langle S^x \rangle = 2x \left[1 + \frac{8x^2}{2d - 1} + \frac{192x^4}{(3d - 2)(2d - 1)} + \dots \right] \quad (\text{II.5b})$$

$$- \frac{E_0}{N} = \frac{I(0)}{8} \left[1 + 16x^2 + \frac{64x^4}{(2d - 1)} + \dots \right] \quad (\text{II.5c})$$

Isto tako je ispitana i energija prvog pobudjenog stanja (za $d \neq 1$)

$$\begin{aligned} \frac{\omega(\vec{k})}{I(0)} &= \frac{1}{2} - 4x^2 \frac{1 + \gamma(\vec{k})d}{d - 1} - \\ &- 16x^4 d^2 \frac{(d - 2)\gamma^2(\vec{k}) - 2\gamma(\vec{k})}{(d - 1)^3} \end{aligned} \quad (\text{II.6})$$

Ove rezultate, kao i numeričke rezultate koji slede iz njih (vidi Tablicu II.1) smo citirali detaljno s obzirom da se IV glava ovog rada upravo odnosi na oblast koju je ispitivao Pfeti.

U jednoj dimenziji se ovakav hamiltonijan može dijagonalizovati egzaktно [K10, P 5, P 9]. Transformacijom Jordana

(Jordan) i Vignera (Wigner) se izraz (I.6) prevodi u hamiltonijan sistema neinteragujućih fermiona. Energija elementarnih ekscitacija (na $T = 0K$) je data sa

$$\omega^2(\vec{k}) = 4\Gamma^2 + \frac{1}{16}I(0)^2 - I(0)\Gamma \cos k \quad (\text{II.7})$$

Vidimo da u spektru elementarnih ekscitacija postoji precep ("gep") koji iščezava za kritičnu vrednost parametra $x_c = 1/8$. Energija osnovnog stanja se može izraziti preko eliptičkih integrala II vrste. Analizirajući korelace funkcije, može se zaključiti da na $T = 0K$ nema uredjenog stanja za $x > x_c$, dok je za $x < x_c$, $\langle S^z \rangle$ dato izrazom

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2}(1 - 64x^2)^{1/8} \quad (\text{II.8})$$

Uočavamo kritični eksponent $1/8$ koji je karakteristika Izin-govog modela u dve dimenzije |HIII|.

Savremena teorija faznih prelaza. Od savremenijih metoda spomenimo metod renormalizacione grupe (RG) |M I|. Osnovna ideja se sastoji u tome da se promenom skale posmatranja, eliminiše eksplicitno pojavljivanje irelevantnih stepena slobode. Pri ovome se menjaju parametri koji definišu interakciju u hamiltonijanu sve dok ne stignemo do fiksne tačke u prostoru parametara. Vrednost parametara u fiksnoj tački se može povezati sa kritičnim parametrima i kritičnim eksponentima sistema. Danas se RG za kvantne sisteme tipa IMTF razvija ili preko klasične Landau (Ландау)-Ginzburg-Vilsonove (Wilson) funkcionele za statističku sumu |H 7, L13, B11, Y 3| ili se konstruiše RG u direktnom prostoru |U 1, F 4, F 6, J 2, D 3|. Osnovna ideja ovog drugog postupka se sastoji u tome da se na rešetci konstruišu novi veći blokovi takvi da rešetka sastavljena od blokova ima istu formu kao i polazna rešetka. Problem je na koji način definisati pseudo-spin koji reprezentuje ceo blok, i tu se upravo danas razvijaju novi pristupi.

Radovi na izračunavanju kritičnih eksponenata |SIV| ukazali su na dublju vezu izmedju Izin-govog modela i IMTF. Ova veza je posledica kvalitativnih svojstava samog modela (koji je sa svoje strane ekvivalentan jednom drugom kvantnom modelu - XY

modelu |S26| i ima opštije značenje |P 8, S27, H 7|. Naime, osnovno stanje d-dimenzionog IMTF ekvivalentno je $d + 1$ dimenzionom Izingovom modelu, u tom smislu da su kritični eksponenti jednaki u oba slučaja, pri čemu Γ ima ulogu temperature. Za $d > 3$ ovi eksponenti imaju klasične (MFA) vrednosti. Kritično ponašanje u d dimenzija na konačnoj temperaturi može biti isto kao i kritično ponašanje d dimenzionog Izingovog modela. U blizini $T = 0K$ i x_c može doći do pojave tzv "crossover-a" tj. do prelaska sa kritičnog ponašanja koje karakteriše d -dimenzioni sistem na kritično ponašanje koje karakteriše $d + 1$ dimenzioni sistem |P 8|.

Spomenimo još i teoriju jednoosnih feroelektrika sa dipol-dipol interakcijama |L11|. Pokazano je (tehnikom koja je prethodila razvoju RG) da su korekcije u odnosu na kritično ponašanje MFA tipa samo logaritamske. Ova teorija se danas intenzivno proverava pre svega na TGS |S21| s obzirom da on ispunjava sve navedene uslove veoma dobro.

Metodi jednačina kretanja i Grinovih funkcija. U posebnu grupu izdvajamo tehnike koje se odnose na dijagonalizaciju hamiltonijana, rešavanje jednačina kretanja i metod Grinovih funkcija (GF). Ovi metodi su na neki način uzajamno ekvivalentni jer je nalaženje energije elementarnih ekscitacija ekvivalentno nalaženju dijagonalnog oblika hamiltonijana. Dalje, jednačine kretanja se koriste i za formulisanje jednačina koje opisuju vremensku evoluciju GF |D I, TII, TIII|. Najčešće se dobija sistem jednačina koji se na nekom mestu mora prekinuti (mora se izvršiti dekuplovanje sistema jednačina). Kod jednačina kretanja se vrši linearizacija oko neke nulte vrednosti, kod metoda GF se linearizacija može izvršiti na više načina. Ovaj postupak odgovara odbacivanju nedijagonalnih delova hamiltonijana posle kanonske transformacije.

Svi metodi omogućuju nalaženje energije elementarnih ekscitacija. Kod dijagonalizacije hamiltonijana i jednačina kretanja, ovo je očigledno dok se kod GF, energija elementarnih ekscitacija određuje kao pol GF. Osnovna prednost metoda GF je u tome što je primenljiv u širokom temperaturskom opsegu. Nedostatak ovog metoda je u činjenici da je veoma teško posle

procedure dekuplovanja utvrditi kolika je greška unesena u račun ovim postupkom.

Prvi radovi posvećeni istraživanju IMTF bili su rđeni na ovaj način. De Žen [D 2] je na $T = 0\text{K}$ izvršio linearizaciju jednačina kretanja komponenti pseudo-spina, oko kvaziklasičnog osnovnog stanja, i tako odredio zakon disperzije. Za slučaj konačnih temperatura, ovaj pristup su generalisali Brout i saradnici [B10] koji su formirali jednačine kretanja za odstupanje komponenti pseudo-spina od njihove MFA vrednosti i posle linearizacije jednačina za Furije (Fourier)-transforme, odredili zakon disperzije. U teoriji sistema više čestica ovaj pristup nosi naziv aproksimacija haotičnih faza (random phase approximation = RPA). Pri poredjenju sa eksperimentalnim rezultatima se obično ne ide dalje od ove aproksimacije, tako da ćemo navesti RPA rezultate.

Energija elementarnih ekscitacija data je izrazom

$$\omega(\vec{k})^2 = 4\Gamma \left[\Gamma - \frac{I(\vec{k})}{2} \langle S^x \rangle \right] + I(0)^2 \langle S^z \rangle^2 \quad (\text{II.9})$$

gde su $\langle S^z \rangle$ i $\langle S^x \rangle$ zadati MFA vrednošću (II.2b). Za $T > T_c$, $\langle S^z \rangle = 0$ i

$$\omega(0)^2 = 4\Gamma \left| \Gamma - \frac{I(0)}{2} \langle S^x \rangle \right|$$

što daje $\omega(0)^2 \approx T - T_c$ za $T \rightarrow T_c$. Za $T < T_c$, izraz postaje

$$\omega(\vec{k})^2 = 4\Gamma^2 \left[1 - \gamma(\vec{k}) \right] + I(0)^2 \langle S^z \rangle^2$$

Konačno, uočimo da za $T \rightarrow T_c$, $\omega(\vec{k}) \approx k$ i ima diskontinuitet na T_c .

Ovo se slaže sa koncepcijom mekog moda, [C 3] pri čemu je ovde meki mod pseudo-spinska ekscitacija, ali za razliku od spinskih talasa, kod Hajsenbergovog feromagneta, ove ekscitacije postoje i iznad T_c .

Metod dijagonalizacije hamiltonijana, kanonskim transformacijama koristili su napr. [P 6, N 3, N 6] dobijajući pri tom obično spektar sličan spinskim talasima.

Metod GF vodi poreklo iz kvantne teorije polja, i postoji više načina uvodjenja ovog metoda u teoriju sistema više čestica.

U skladu sa opštom teorijom |A I| može se za sistem sa hamiltonijanom tipa $\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}_{int}$ za dva operatora \hat{A} i \hat{B} formulisati GF kao

$$\sigma_{nm}^{(s)}(\sigma - \sigma') = \frac{\text{Tr}\{e^{-\beta H_o} T[U(\beta, 0) A_n(\sigma) B_m(\sigma')] \}}{\text{Tr}\{e^{-\beta H_o} U(\beta, 0)\}}; \quad \beta = \theta^{-1} \quad (\text{II.10})$$

Nadalje se operator U razvija i koriste različiti približni metodi za izračunavanje GF. Ukoliko sam \hat{H}_{int} sadrži u sebi mali parametar, onda se vrši razvoj po stepenima \hat{H}_{int} do željene tačnosti. Druga mogućnost je da se procene članovi čiji doprinosi dominiraju i da se oni potpuno prosumiraju. Ovo je olakšano primenom Vikove (Wick) teoreme i formulisanjem dijagramskih tehnika.

Tako je u radu |H 9| posmatran IMTF kuplovan sa fonomima a pseudo-spinski operatori su reprezentovani preko "drone" fermiona. U prvoj aproksimaciji su reproducovani delimično MFA, a delimično RPA rezultati. Vreme života nije bilo moguće odrediti.

Usledio je niz radova baziran na VLP dijagramskoj tehnici za spinske operatore |I I|. Kao parametar razvoja se tretira $1/r_0^3$ gde je r_0 domet interakcije, ili $1/z$ gde je z broj suseda. Tada nulti član odgovara MFA, prvi aproksimaciji spinskih talasa itd. Slobodna energija, $\langle S^z \rangle$ i $\langle S^x \rangle$ su izračunati do $1/z^2$ |S22, Š 1, S12|. Konstatovano je da je fazni prelaz II vrste.

Dvovremenske temperaturski zavisne funkcije Grina.
 Detaljnije ćemo diskutovati radove uradjene metodom dvovremenskih temperaturski zavisnih GF |TII, TIII, D I| (za detalje vidi IV glavu). Furije transform po vremenskim i prostornim koordinatama GF može da da bitnu informaciju: realni deo pola ove funkcije pretstavlja energiju elementarnih ekscitacija, a njegov imaginarni deo recipročnu vrednost vremena života kvazičestica. S druge strane, poznajući GF dva operatora možemo odrediti i njihovu korelacionu funkciju, a samim tim i srednje vrednosti veličina koje su od interesa.

Kada se postave jednačine za vremensku evoluciju GF,

potrebno je izvršiti dekuplovanje na određen način. Rezimiramo rezultate preglednog rada [R 1].

Posmatrajmo sledeći skup antikomutatorskih GF

$$\langle\langle S_{\frac{g}{2}}^{\alpha} | S_{\frac{f}{2}}^{-} \rangle\rangle \quad \alpha = +, -, z$$

Jedna od mogućnosti dekuplovanja je Tjablikovsko dekuplovanje

$$\langle\langle S_{\frac{g}{2}}^{\pm} S_{\frac{m}{2}} | S_{\frac{f}{2}}^{-} \rangle\rangle = \langle S_{\frac{m}{2}}^z \rangle \langle\langle S_{\frac{g}{2}}^{\pm} | S_{\frac{f}{2}}^{-} \rangle\rangle$$

Kao rezultat se za energiju elementarnih ekscitacija i samousaglašene jednačine za određivanje srednje vrednosti komponenti spina dobijaju MFA rezultati.

Druga procedura dekuplovanja koja se danas naziva RPA, ili simetrizovano dekuplovanje se može definisati na sledeći način [Y 2]

$$\langle\langle \hat{A}\hat{B} | \hat{S}_{\frac{f}{2}}^{-} \rangle\rangle = \langle \hat{A} \rangle \langle\langle \hat{B} | \hat{S}_{\frac{f}{2}}^{-} \rangle\rangle + \langle \hat{B} \rangle \langle\langle \hat{A} | \hat{S}_{\frac{f}{2}}^{-} \rangle\rangle$$

gde su \hat{A} i \hat{B} bilo koja dva spinska operatora. U ovome slučaju se dobija kao rezultat tačno energija elementarnih ekscitacija u RPA. Treba uočiti da se kao jedno od rešenja uvek dobija $\omega = 0$, i to je razlog zbog čega većina autora izbegava komutatorsku GF.

Poseban problem RPA procedure predstavlja činjenica da se samousaglašene jednačine ne mogu formulisati jednoznačno, već zavise od izbora pravila suma. Naime u RPA sva pravila suma ne mogu biti istovremeno ispunjena [A 3, A 4, A 5]. Tako su Konvent (Konwent) [K12], Stasjuk (Стасюк) i Levicki (Левицкий) [S19] koristili pristup veoma sličan našem, ali su zbog različitih pravila suma dobili sa istom energijom elementarnih ekscitacija potpuno različite samousaglašene jednačine. Razlog tome je što se posle RPA dekuplovanja pojavljuju dodatni integrali kretanja. Na razradi korektnije procedure se veoma mnogo radi [K14] i definišu se različiti kriterijumi čiji je osnovni cilj da se procedura dekuplovanja konzistentno primeni. Isto tako, u RPA dekuplovanju, bez dodatnih pretpostavki nije bilo moguće izračunati vreme života. Svi gore navedeni autori ukazuju da model ima fazni prelaz II vrste.

Bilo je pokušaja da se egzaktno dekupluju i više GF. Tako su Pfeti [P 6] kao i Kinel (Kühnel) sa saradnicima [K15] pokazali da se u tom slučaju može pojaviti i konačno vreme života.

Vang (Wang) i Kuper (Cooper) [W 1] su koristili RPA za singlet-singlet model, ali su isto tako uveli i TSCA aproksimaciju koja je ekvivalentna Kalenovom (Callen) dekuplovanju [T I]. Sličnu ideju je koristio i Pink (Pink) [P10]. Kamjenjarz (Kamieniarz) je primenio metod standardnog bazisa (SBO) [H 6] za slučaj opšteg spina [K 3] kao i metod spektralne gustine (SDM) [K 4, K 2]. Posebno je interesantan rad u kojem je praktično svim gore navedenim tehnikama ispitana klasični limes $S \rightarrow \infty$ (pri čemu su nulte srednje vrednosti generisane Monte Karlo metodom [P14]).

U kojoj meri odredjene tehnike mogu da daju dobre rezultate najbolje se vidi poredjenjem njihovih rezultata sa jednostavnim aproksimacijama tipa MFA ili pak sa tačno rešivim slučajem $d = 1$. Zato ovde dajemo Tablicu II.1 koja rezimira rezultate većine gore citiranih radova. Rezultati se odnose na veličinu x_c , dakle graničnu vrednost x ispod koje na $T = 0\text{K}$ može da postoji feroelektrična faza.

Pri radu sa hamiltonijanom koji uključuje u sebe i interakciju sa fononima, takodje se koristi ili tehnika jednacina kretanja ili metod GF. Dekuplovanje je obično takvo da se izvrši razdvajanje spinskih i fononskih promenljivih postupkom analognim RPA [V 5, Y 2, S19, K11]. I kod neuredjenih sistema metod GF je jedan od osnovnih [L 7, P11, P13].

Jedan interesantan pristup baziran na metodu GF je tzv. SPAS teorija [S15, S16, S17]. Cilj te teorije je da se od početka formuliše hamiltonian koji bi obuhvatio kako pomjerajne fazne prelaze tako i prelaze tipa uredjeno-neuredjeno.

Rezimirajmo konačno šta je metod GF dao u ovoj oblasti. Većina autora se opredeljuje za ovaj metod jer on omogućava ispitivanje u širokoj temperaturskoj oblasti i u tom pogledu ne-ma nikakvih ograničenja. Najčešće se računa u linearnoj aproksimaciji (Tjablikovsko ili RPA dekuplovanje). Kao rezultat se pojavljuje fazni prelaz II vrste, i dosta dobro se reprodukuju statičke osobine sistema, tj. krive polarizacije u funkciji tem-

TABLICA II.1

x_c	d	Tip rešetke	Metod izračunavanja	Referenca
$1/4 = 0.25$	∞	Proizvoljan	M F A	[B10]
$1/4 = 0.25$		Proizvoljna	Dijagonalizacija hamiltonijana metodom Bogoljubova (Боголюбов)	[P 6, W 1]
$1/8 = 0.125$	1	Niz sa cikl. gran. usl.	Egzaktna dijagonalizacija transformacijom Jordana i Vignera	[P 5, P 9]
0.1596 0.1316	1	"	RG u direktnom prostoru. Prvi rezultat odgovara slučaju 2 spina po bloku, drugi 7 spinova po bloku	[D 3, J 2]
0.18	1	"	RG u direktnom prostoru, varijacioni metod (vrednost za x lošija, ali kritični eksponent bolji)	[D 3]
0.137	1	"	Metod GF Pinkovo dekuplovanje	[P10]
0.1022 0.1248	1	"	RG u direktnom prostoru, decimacija	[U 1]
0.1261 0.1123	1	"	RG u direktnom prostoru, perturbacioni račun sa 3 spina po bloku	[U 1]
0.1932	2	KV	RG u direktnom prostoru	[F 6]
0.1383	2	T	RG u direktnom prostoru	[F 7]
0.2050 0.1217 0.1231 0.0965 0.3279	2	KV T H	RG u direktnom prostoru, varijacioni pristup. Različiti rezultati odgovaraju različitoj veličini bloka i obliku	[F 4]
0.192 0.21	2 3	KV PK	Visokotemperaturski razvoj	[E 1]
0.1903 0.1986 0.2143 0.2214 0.2258	2 3 3 3 3	KV T PK ZCK PCK	Visokotemperaturski razvoj	[Y 1]

0.2397 0.2424 0.2430	3	PK ZCK PCK	Opšta vrednost spina. Metod funkcija Grina, operatori standardnog bazisa	K 3
0.223 0.229 0.236	3	PK ZCK PCK	Aproksimacija klastera, aproksimacija konstantne veze	W 1
0.226 0.230 0.238	3	PK ZCK PCK	Dijagramna tehnika VLP (proračun do članova reda $1/z$ izveo G.Kamjenjarz)	K 5, S22
0.209 0.218 0.223	3	PK ZCK PCK	Metod spektralne gustine (SDM)	K 4
0.210 0.219 0.223	3	PK ZCK PCK	Korigovani SDM	K 5
0.219 0.227 0.233	3	PK ZCK PCK	Metod funkcije Grina, Pinkovo dekuplovanje	K 5
0.18 0.215	2 3	KV PK	Metod Grinovih funkcija (simetrizovano dekuplovanje)	P 6

Vrednost x_c ($T = 0K$) izračunate različitim teorijskim metodama.

Usvojene skraćenice za tip rešetke:

$d = 2$ KV = kvadratna mreža

T = trijangularna mreža

H = heksagonalna mreža

$d = 3$ PK = prosta kubna rešetka

ZCK = zapreminski centrirana kubna rešetka

PCK = površinski centrirana kubna rešetka

perature su bliže eksperimentalnim krivima nego MFA rezultati. RPA implicira kvazičestičnu sliku, jer je vreme života beskonačno. Poseban problem pretstavlja zadovoljenje pravila suma, tj kinematičkih osobina spinskih operatora. Gore izložene činjenice su nas i inspirisale da formulišemo teoriju preko GF ali u takvoj bozonskoj reprezentaciji koja će izbeći bar neke od nedostataka gore opisanih proračuna.

Eksperimentalna provera IMTF. Na kraju uvodnog dela trebalo bi dati pregled eksperimentalnih metoda koji se koriste u istraživanju feroelektrika. Ovome je posvećena obimna literatura (dobri pregledi su dati u referencama |B I, LVI, N 4|. S obzirom na prevashodno teorijski karakter teze, ograničićemo se na iznošenje onih eksperimentalnih rezultata koji su dali potvrdu primenljivosti IMTF u slučaju feroelektrika tipa KDP. Razlog zašto ovo činimo tek sada, je da se prilikom objašnjenja eksperimentalnih rezultata, moramo služiti rezultatima koji su polazeći od modela dobijeni u određenoj aproksimaciji. Zato detaljniju analizu možemo izvršiti poznajući detaljnije rezultate MFA i RPA za IMTF, s obzirom da se poredjenje eksperimentalnih rezultata vrši najčešće sa ovim rezultatima. Videćemo da niz eksperimentalnih činjenica ukazuje u prilog primene Izingovog modela u poprečnom polju za objašnjenje feroelektričnih osobina kristala KDP.

"Najklasičnija" su svakako dielektrična statička merenja. Posmatra se temperaturska zavisnost krive histerezisa $P(E)$ monodomenskog kristala i odatle se ekstrapolacijom određuje spontana polarizacija i susceptibilnost. Na taj način možemo dobiti informaciju o vrsti prelaza i temperaturi prelaza T_c |F I, S 6, N 4|. Nažalost, u blizini prelaza dolaze do izražaja efekti nelinearnosti indukovane polarizacije, tako da rezultati nisu potpuno pouzdani. Danas je ova tehnika dosta usavršena i može se dobiti precizna informacija o veličini spontane polarizacije i temperaturi prelaza, a primer su precizna merenja na deuterizovanim uzorcima |S 7|. Ovim metodom je utvrđeno da je prelaz I vrste, ali sa relativno malim skokom polarizacije ($P_s(T_c)/P_s(0) = 0.38$) tako da IMTF koji pokazuje prelaz druge vrste u većini približnih tretmana, ipak može biti primjenjen

kvantitativno, sem u okolini T_c .

Posebno treba istaći da se rezultati četvoročestične klaster aproksimacije izuzetno dobro slažu sa eksperimentalnim rezultatima [V I, C 1]. Ipak, ovo nije sasvim pouzdan dokaz, jer se rezultati dielektričnih merenja (kao i drugih merenja) mogu isto tako veoma dobro objasniti i SUS - modelom u kojem se tunelovanje ne uzima u obzir [V 4].

Presudno je pitanje za razmatranje IMTF oblik potencijala u kojem se kreće proton. Dugo vremena nije bilo pouzdano utvrđeno da li je reč o potencijalu sa jednim minimumom pri čemu se položaj tog minimuma menja pri prolasku sistema kroz T_c , ili je reč o potencijalu sa dva minimuma s tim što je iznad T_c statistička popunjenošć oba minimuma podjednaka dok je ispod T_c proton lokalizovan u jednom od tih minimuma. Rana neutronska istraživanja nisu mogla da daju odgovor na ovo pitanje [J I]. Primenom moderne procedure utvrđivanja na stare podatke dobijene difrakcijom neutrona, utvrđeno je da se stvarno radi o potencijalnoj jami sa dva minimuma [N 2]. Navećemo još nekoliko dokaza dobijenih rezonantnim metodama, čija je karakteristika da odražavaju lokalne osobine. One su veoma osetljive na okruženje posmatrane čestice. Kod DKDP je tako posmatrana kvadrupolna nuklearna rezonanca [B I, K I] deuterona i pokazano je da se konstanta interakcije ne menja pri snižavanju temperature ispod T_c . Ovo znači da se okruženje deuterona ne menja bitno, tj. da se on u obe faze nalazi praktično na istom mestu u vezi. Kod KDP nije moguće koristiti ovaj metod jer proton ne poseduje kvadrupolni moment, i stoga je korišćena dvostruka nuklearna rezonanca $H^1 - O^{17}$, koja je dala isti rezultat.

S druge strane mogu se posmatrati i infracrveni spektrovi. Pod uticajem termalnih ekscitacija menja se dipolni moment jona, tako da dolazi do apsorpcije zračenja u delu spektra koji odgovara oscilatornim nivoima molekula. Konkretno, oscilatorični nivoi protona u H vezi su veoma osetljivi kako na dužinu veze tako i na položaj protona u njoj [B I]. Posmatranje IC apsorpcije je pokazalo da ne dolazi do bitne promene položaja protona u vezi.

Sledeći problem se odnosi na to da li postoji tune-lovanje protona unutar veze. Naime, da li je potrebno i opravda-

no uvoditi član koji opisuje tunelovanje ($\approx S^X$) ili se sistem može jednostavno opisati Izingovim modelom. Već sam izotopski efekt ukazuje na dinamiku protona, ali veoma bitnu informaciju u prilog primene IMTF su dala dielektrična merenja pod povišenim pritiscima.

Eksperimenti pod povišenim pritiskom [S 6] pokazali su da je $\frac{\partial T_c}{\partial p} < 0$ i da kriva $T_c(p)$ za neku vrednost teži nuli pod uglom 90° . IMTF može ovo da objasni uz opravdane pretpostavke $\frac{\partial J}{\partial p} < 0$ i $\frac{\partial \Gamma}{\partial p} > 0$ koristeći MFA rezultat. Kao kontrast imamo ponašanje feroelektrika kod kojih tunelovanje nije bitno, i kod i kod kojih se eksperimentalna činjenica $\frac{\partial T_c}{\partial p} > 0$ može objasniti ponašanjem Izingovog modela ($\Gamma = 0$). Što se pojave trikritične tačke tiče, teorija klastera dozvoljava ovu mogućnost [V I] i verovatno će se uskoro pojaviti i radovi koji će ispitati i kvantitativno slaganje ove teorije sa eksperimentalnim vrednostima.

Rasejanje svetlosti može da da takođe veoma korisnu informaciju. Kada se pod uticajem termalnih ekscitacija deforme elektronska polarizibilnost jona, može doći do apsorpcije (ili emisije) zračenja uz kreaciju (ili anihilaciju) odredjene vrste fonona. Posmatrajući samo efekte prvog reda, imamo Brilu enovo (Brillouin) rasejanje sa pobudjivanjem akustičkog fonona ($\tilde{\nu} \sim 0.05 \text{ cm}^{-1}$) dok Ramanovi (Raman) spektri nastaju neelastičnim rasejanjem svetlosti uz pobudjivanje optičkih fonona ($\tilde{\nu} \sim 10 - 3000 \text{ cm}^{-1}$). Postoji i Rejljevo (Raileigh) koje nastaje na nehomogenostima sredine kroz koju prolazi svetlost.

Temperaturska promena mekog moda kod KDP je registrovana prvo u paraelektričnoj fazi pomoću Ramanove spektroskopije [K 6] a kasnije i Briluenovim rasejanjem [B 9]. Ovaj metod je vrlo pogodan jer je spektralna raspodela intenziteta proporcionalna imaginarnom delu generalisane susceptibilnosti, dok je totalna intenzivnost proporcionalna statičkoj ($\omega = 0$) vrednosti realnog dela susceptibilnosti. Spektralna raspodela mekog moda je dobro prikazana izrazom za prigušeni harmonijski oscilator. Prigušenje je veoma veliko, ali sa povećanjem pritiska ono opada [P 2] tako da se pouzdano može tvrditi da je reč o ekscitaci-

jama koje se prostiru kroz kristal.

Dalje, Pirsi [P 3] je uočio da ovaj oblik susceptibilnosti upravo odgovara izrazu koji sledi iz Kobajašijeve teorije za ekscitacije koje su mešavina protonskih eksitacija i optičke fononske grupe koja odgovara pomeranju teških jona duž c-ose. Ovo mu je pomoglo da odredi vrednost mikroskopskih parametara u hamiltonijanu (vidi I glavu) i kombinujući ih sa rezultatima merenja na visokim pritiscima, pokazao da je teorija u dobrom slaganju sa eksperimentom.

Dalje treba navesti da se rezultati koji se tiču napr. DKDP slažu sa rezultatima koji se odnose na Izingov model, drugim rečima, tunelovanje je zanemarljivo. Gore navedene činjenice ukazuju istovremeno na neophodnost i opravdanost primene IMTF u slučaju feroelektrika KDP. Da bi se objasnili svi detalji eksperimenta potrebno je naravno model dalje razradjivati. Jedan od načina je uvodenje i drugih interakcija koje u kristalima mogu da postoje (interakcija sa optičkim i akustičkim fononima, dugodometne interakcije itd.). Druga mogućnost je da se sam model ispita novim pristupima. Mi smo se odlučili za ovaj drugi pristup. Naime, pošto smo prethodnom diskusijom pokazali da IMTF zaslužuje i dalje pažnju kao model za feroelektrične tipa KDP (a i druge materijale), mi ćemo u narednim glavama pokušati da razvijemo jedan novi teorijski pristup sa ciljem da polazeći samo od IMTF pokušamo da objasnimo neke činjenice koje su nedostajale do sada opisanim teorijskim pristupima (ili barem većem delu ovih pristupa).

III GLAVA

FORMULISANJE EFEKTIVNOG HAMILTONIJANA

U prethodnim glavama smo se upoznali sa fizičkim idejama koje leže u osnovi modela opisanog hamiltonijana

$$\hat{H} = -2\Gamma \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^x - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^z \quad (\text{III.1})$$

Formulišimo još jednom precizno cilj našeg ispitivanja. Ispitacemo energetski spektar elementarnih ekscitacija i temperatursku zavisnost $\langle S_{\vec{n}}^z \rangle$ i $\langle S_{\vec{n}}^x \rangle$ u dva različita temperaturska režima, za koje ćemo formulisati odgovarajuće aproksimacije. Posmatraćemo monodomenski kristal sa tzv. hiperkubnom rešetkom konstante a . To je d -dimenzionalna rešetka kod koje za bilo koja dva orta duž osa važi $\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{i,j}$ ($i, j = 1, 2, 3, \dots, d$). Ograničićemo se na interakciju samo izmedju najbližih suseda. Kristal ćemo smatrati beskonačnim i idealnim, što znači da nema narušenja translacione simetrije. Tada važi

$$I_{\vec{n}, \vec{m}} = I_{\vec{n}-\vec{m}} = I_{|\vec{n}-\vec{m}|}$$

Smatraćemo da su pseudo-spinovi smešteni samo u čvorove rešetke i u svakom čvoru se nalazi samo po jedan pseudo-spin.

Sve ove pretpostavke predstavljaju idealizaciju u odnosu na konkretne fizičke uslove koji se javljaju kod većine materijala opisanih ovim modelom. Što se tipa rešetke tiče, pozнато је [S14] да је димензија рејтке од daleko већег утицаја него тип рејтке. Из овог разлога можемо smatrati da pretpostavka о hiperkubnoj рејтци са pseudo-spinovima у чворовима рејтке неће mnogo uticati на применијивост добијених rezultata. S druge strane, kod feroelektrika, sigurno nije ispravno posmatrati само interakcije najbližih suseda, zbog postojanja dugometne dipol-dipol interakcije [D 4]. U ovom posebnom slučaju uspeh Slejterove [S14] i SUS [S13] teorije, ukazuju da kratkodometne

interakcije igraju znatnu ulogu kod materijala KDP tipa. Sve gore navedene pretpostavke imaju za osnovni cilj da pojednostave računsku stranu problema.

Od teorijskih metoda koristićemo reprezentaciju druge kvantizacije, tačnije formalizam Pauli-operatora (vidi Prilog) i metod dvovremenskih, temperaturski zavisnih funkcija Grina |D I, TII, TIII|. Tokom izlaganja ćemo skicirati osnovne karakteristike ovih metoda.

Da bismo mogli što korisnije primeniti ove metode, potrebno je da hamiltonijan (III.1) dovedemo na formu pogodniju za rad sa ovim metodama. To ćemo postići izvodeći dve unitarne transformacije hamiltonijana. U cilju dobijanja generalnih rezultata, ove transformacije ćemo izvesti za slučaj opšteg spina S , a tek kasnije diskutovati slučaj $S = 1/2$.*

Prvi korak je eliminacija člana linearног по $S_{\vec{n}}^x$. Ovo se najlakše postiže rotacijom koordinatnog sistema za ugao ϕ koji odredujemo iz gore navedenog uslova. Ovaj postupak se u nešto drugačijoj formi često koristi u literaturi. Obično se istovremeno sa rotacijom vrši i linearizacija jednačina kretanja |V 5, K11| ili pak linearizacija samog hamiltonijana |S19| ili se rotacija vrši tako da se jedna osa novog sistema poklopi sa pravcem molekularnog polja |N I|. Tada se zahteva da srednja vrednost x-komponente spina posle rotacije bude nula. Kao posledica tog zahteva ugao rotacije postaje temperaturski zavisan. Umesto toga, mi vršimo rotaciju na $T = 0$ K. Ugao koji ćemo dobiti već je koristio de Gennes |D 2| pri svojoj konstrukciji poluklasičnog osnovnog stanja, kao i Blinc i Svetina |B 6| koji su taj ugao odredili iz varijacionog pristupa za nalaženje osnovnog stanja hamiltonijana (III.1). Razlog za različite rezultate u prethodno navedenim slučajevima i u poslednja dva i u našem tretmanu je u tome što mi zahtevamo da se ne anulira $\langle S_{\vec{n}}^x \rangle$, već da član koji sadrži $S_{\vec{n}}^x$ više ne postoji u hamiltonijanu.

Rotacija oko y-ose za ugao ϕ indukuje unitarnu transformaciju opisanu operatorom |MII|

*Do sada su poznata samo dva pokušaja tretmana posmatranog hamiltonijana u opštem slučaju |N 7, K 3|, tako da dobijeni rezultati imaju veću vrednost jer mogu poslužiti kao osnova za dalja istraživanja.

$$\hat{U}_1 = \exp[-i\phi \sum_l \hat{S}_l^y] \quad (\text{III.2})$$

Pri ovoj unitarnoj transformaciji se ne menja spektar hamiltonijana

$$\hat{H}' = \hat{U}_1 \hat{H} \hat{U}_1^\dagger \quad (\text{III.3})$$

Srednje vrednosti operatora $\hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha'} = \hat{U}_1 \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha} \hat{U}_1^\dagger$, $\alpha = x, y, z$ izračunate po kanonskom ansamblu sa hamiltonijanom \hat{H}' biće iste kao i srednje vrednosti operatora $\hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha}$ izračunate po kanonskom ansamblu sa operatorom \hat{H}

$$\langle \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha'} \rangle_{\hat{H}'} = \text{Tr} \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha'} e^{-\frac{\hat{H}'}{\theta}} = \text{Tr} \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha} e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}} = \langle \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha} \rangle_{\hat{H}} \quad (\theta = k_B T) \quad (\text{III.4})$$

Mi ćemo veličine posle transformacije (veličine sa primom) izražavati preko polaznih veličina.

Unitarne transformacije ćemo izvoditi koristeći identitet [MII]

$$\exp(-i\hat{A}) \hat{B} \exp(i\hat{A}) = B + \sum_{v=1}^{\infty} \underbrace{\frac{(-i)^v}{v!} [\hat{A}, [\hat{A}, \dots, [\hat{A}, \hat{B}]] \dots]}_v \quad (\text{III.5})$$

Ovo daje kao rezultat

$$\sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^{z'} = \sin \phi \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^x + \cos \phi \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^z \quad (\text{III.6a})$$

$$\sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^{x'} = \cos \phi \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^x - \sin \phi \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^z \quad (\text{III.6b})$$

Ovakav rezultat se mogao očekivati jer se \vec{S} u odnosu na rotaciju ponaša kao vektor. Nadalje ćemo izostavljati operatorske oznake sem u slučajevima kada je potrebno naglasiti operatorski karakter odredjene veličine.

Izraz za hamiltonijan nalazimo ako (III.2) uvrstimo u (III.3)

$$H' = -2\Gamma \cos \phi \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^x + 2\Gamma \sin \phi \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z - \frac{1}{2} \cos^2 \phi \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^z S_{\vec{m}}^z - \\ - \sin \phi \cos \phi \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^z S_{\vec{m}}^x - \frac{1}{2} \sin^2 \phi \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^x S_{\vec{m}}^x \quad (\text{III.7})$$

U bilo kojoj reprezentaciji spinskih operatora Boze-operatorima koristi se operator

$$\hat{\sigma}_{\vec{n}} = S - \hat{S}_{\vec{n}}^z$$

koji opisuje meru odstupanja z-projekcije spina od njene maksimalne vrednosti, tako da ćemo i mi izraziti $\hat{S}_{\vec{n}}^z$ u (III.7) preko ovog operatora.

$$H' = N [2\Gamma S \sin \phi - \frac{1}{2} S^2 \Gamma I(0) \cos^2 \phi] - \cos \phi [2\Gamma + S I(0) \sin \phi] \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^x + \\ + [S I(0) \cos^2 \phi - 2\Gamma \sin \phi] \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sin^2 \phi \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^x S_{\vec{m}}^x + \\ + \sin \phi \cos \phi \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \sigma_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{m}}^x - \frac{1}{2} \cos^2 \phi \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} \quad (\text{III.8})$$

N označava broj čvorova u rešetci (podrazumeva se termodinamički limes). Uveli smo i standardnu oznaku

$$I(0) = \sum_{\vec{n}} I_{\vec{n}\vec{n}} = \sum_{\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} = \sum_{\vec{n}-\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}}$$

Iz (III.8) sledi da je uslov za eliminaciju člana linearnog po $S_{\vec{n}}^x$

$$\sin \phi = -\frac{2\Gamma}{S I(0)} \quad (\text{III.9})$$

Druge rešenje $\cos \phi = 0$, može da opiše samo paraelektričnu fazu |K12|.

U cilju jednostavnijeg prelaska na bozonsku reprezentaciju, već ovde hamiltonijan izražavamo preko operatora |M II, T III|

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

Smisao ovih operatora je sledeći: kada deluju na vektore stanja $|S, m\rangle$ koji su zajednički svojstveni vektori operatora \hat{S}^2 i \hat{S}^z , oni ih prevode u vektore $|S, m \pm 1\rangle$. U stručnom žargonu se kaže da oni podižu ili obaraju projekciju z-komponente spina. Definišimo još parametar x

$$x = \frac{\Gamma}{I(0)} \quad (\text{III.10})$$

tako da hamiltonijan i komponente totalnog spina možemo napisati na sledeći način

$$\begin{aligned} H' = -N &|2x\Gamma + \frac{1}{2}S^2 I(0)| + SI(0) \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} - \frac{1}{2S^2} x^2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- + S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) - \\ &- \frac{x^2}{S^2} \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m} \\ nm}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ - \frac{1}{2}(1 - \frac{4x^2}{S^2}) \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} - \\ &- \frac{x}{S} \sqrt{1 - \frac{4x^2}{S^2}} \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m} \\ nm}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} + \sigma_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) \end{aligned} \quad (\text{III.11})$$

$$\sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z' = NS(1 - \frac{4x^2}{S^2})^{1/2} - \frac{x}{S} \sum_{\vec{n}} (S_{\vec{n}}^- + S_{\vec{n}}^+) - (1 - \frac{4x^2}{S^2})^{1/2} \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} \quad (\text{III.12a})$$

$$\sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^x' = 2Nx + \frac{1}{2}(1 - \frac{4x^2}{S^2})^{1/2} \sum_{\vec{n}} (S_{\vec{n}}^+ + S_{\vec{n}}^-) - \frac{2x}{S} \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} \quad (\text{III.12b})$$

Izabrali smo pozitivan znak za $\cos\phi$, jer tako nalazimo uobičajeni izraz za spontanu polarizaciju.

Parametar x koji smo definisali u (III.10) predstavljaće za nas mali parametar po kojem ćemo vršiti razvoj. Ideja o razvoju po malom parametru x u feroelektričnoj fazi već je uspešno korišćena u perturbacionom razvoju [P 6, P 7]. U feroelektričnoj fazi ovaj parametar je mali, tačnije on mora biti mali da bi uopšte postojalo uredjeno stanje. To se dobro vidi iz Tablice II.1 u kojoj su date teorijske vrednosti za x_c koje odgovara graničnoj vrednosti x na $T = 0$ K, dok na konačnim temperaturama x mora biti još manje. Analiza citiranih eksperimentalnih podataka za vrednosti parametara u hamiltonijanu ukazuje da je ovo stvarno slučaj. Mi ćemo nadalje posmatrati samo oblast uredjenog stanja, i smatraćemo da je $x \ll 1$, tako

da možemo zadržati samo ograničen broj članova u razvoju po x . Kada budemo vršili numeričke proračune, moraćemo da vodimo računa o tačnosti sa kojom radimo, tj. o veličini članova koji su zanemareni.

Energiju merimo u jedinicama $I(0)$. U hamiltonijanu se javljaju članovi reda veličine $I_{\frac{1}{\hbar^2}} \approx I(0)$, $xI(0) = \Gamma$, $x^2I(0) \approx x\Gamma$ itd. Procenimo koliki je doprinos pojedinih članova hamiltonijana. Od posebnog je interesa član $\approx S^\pm \sigma$ koji ima koeficijent reda $xI(0)$. Ako za neperturbovani hamiltonijan uzmemos član $\approx S^z$, onda on u drugoj popravci teorije perturbacija ima doprinos reda veličine $x^2I(0)$, što je isto kao doprinos člana $\approx S^-S^+$ u prvoj popravci teorije perturbacija.

Naš cilj je da izbegnemo perturbacioni račun. Umesno toga izvešćemo još jednu unitarnu transformaciju sa ciljem da eliminišemo član $\approx S^\pm \sigma$. Pokazalo se da se ova transformacija ne može izvesti egzaktno do kraja [K 7, K 8], tako da ćemo izraz (III.5) aproksimirati sa dva prva dva člana. Iz zahteva da se pomenuti član hamiltonijana anulira u dатој aproksimaciji, određemo aproksimaciju po malom parametru x u kojoj ćemo izračunavati energiju sistema i srednje vrednosti komponenti spina.

Sada će biti

$$\hat{H}'' = \hat{U}_2 H' \hat{U}_2 \quad \langle S_{\frac{1}{\hbar^2}}^z \rangle_H \equiv \langle S_{\frac{1}{\hbar^2}}^z \rangle_{H''} \quad (\text{III.13})$$

pri čemu zahtevamo da operator unitarne transformacije ima oblik

$$\hat{U}_2 = \exp[-(\hat{W} + \hat{V})] \quad (\text{III.14})$$

Da bi \hat{U}_2 bio unitaran, moraju \hat{W} i \hat{V} biti antiermitski operatori. Proizvoljan operator \hat{A} se transformiše na sledeći način

$$\hat{A}'' = \hat{U}_2 \hat{A} \hat{U}_2^+ \approx \hat{A} - [\hat{W}, \hat{A}] - [\hat{V}, \hat{A}] \quad (\text{III.15})$$

Operatore \hat{W} i \hat{V} možemo napisati na sledeći način

$$\hat{W} = \hat{W}_1 - \hat{W}_1^+ \quad \text{i} \quad \hat{V} = \hat{V}_1 - \hat{V}_1^+$$

\hat{W}_1 ćemo izabrati tako da eliminisemo član $\approx \hat{S}^\pm \hat{\sigma}$

$$\hat{W}_1 = \sum_{\vec{I} \neq \vec{r}} X_{\vec{I} \vec{r}} \sigma_{\vec{I}} S_{\vec{I}}^+ \quad (\text{III.16})$$

$X_{\vec{I} \vec{r}}$ je realna funkcija rastojanja sa osobinom

$$X_{\vec{I} \vec{I}} = 0$$

Operator \hat{V} moramo uvesti zato što se pri izračunavanju komutatora $[\hat{W}, \hat{H}']$ ponovo javljaju članovi $\approx S^z$. U cilju njihove eliminacije, \hat{V}_1 definišemo kao

$$V_1 = Y \sum_{\vec{I}} S_{\vec{I}}^+ \quad (\text{III.17})$$

Sada je lako izračunati

$$\sigma_n'' = U_2 \sigma_n' U_2 \approx \sigma_n - Y(S_n^- + S_n^+) - \sum_l X_{n\vec{l}} (S_n^- \sigma_{\vec{l}} + \sigma_{\vec{l}} S_n^+) \quad (\text{III.18a})$$

$$\begin{aligned} S_n^+'' &= U_2 S_n^+ U_2 \approx S_n^+ - 2YS + 2Y\sigma_n + \sum_l X_{n\vec{l}} S_n^+ S_{\vec{l}}^+ - \\ &- \sum_{\vec{l}} X_{n\vec{l}} S_{\vec{l}}^- S_n^+ - 2S \sum_{\vec{l}} X_{n\vec{l}} \sigma_{\vec{l}} + 2 \sum_{\vec{l}} X_{n\vec{l}} \sigma_n^- \sigma_{\vec{l}} \end{aligned} \quad (\text{III.18b})$$

$$S_n^-'' = (S_n^+'')^+ \quad (\text{III.18c})$$

Koristeći osobinu |MII| da se \hat{H}'' dobijen posle unitarne transformacije može jednostavno napisati kao H' u kojem su sve veličine bez prima zamenjene veličinama sa ("") (ovo važi za sve algebarske izraze), \hat{H}'' možemo izraziti preko polaznih promenljivih.

$$H'' = \sum_{i=0}^9 H_i \quad (\text{III.19a})$$

$$H_0 = -NI(0) [2x^2 + \frac{1}{2}S^2] \quad (\text{III.19b})$$

$$H_1 = -SI(0) \sum_n \left[Y + \frac{2x^2}{S^2} \sum_{\vec{l}} X_{\vec{l} \vec{n}} \frac{I_{\vec{n}\vec{l}}}{I(0)} \right] (S_n^- + S_n^+) \quad (\text{III.19c})$$

$$H_2 = I(0) \left[S + 4Yx \left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right)^{1/2} \right] \sum_n \sigma_n^- \quad (\text{III.19d})$$

$$H_3 = \frac{x}{S} \left[2 \left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right)^{1/2} - \frac{x}{S} \right] \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ \quad (\text{III.19e})$$

$$H_4 = \frac{x}{S} \left[\left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right)^{1/2} - \frac{x}{2S} \right] \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- + S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) \quad (\text{III.19f})$$

$$H_5 = \sum_{\vec{n}\vec{m}} \left\{ I_{\vec{n}\vec{m}} \left[-SX(0) + \left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right) Y + \left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right)^{1/2} \frac{x}{S} \right] - \frac{4x^2}{S} \sum_{\vec{l}} I_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{n}} - \right. \\ \left. - \frac{2x^2}{S^2} I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} \right\} (S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}}^+ + \sigma_{\vec{m}}^- S_{\vec{n}}^+) \quad (\text{III.19g})$$

$$H_6 = - \frac{x^2}{S^2} \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} \left[I_{\vec{m}\vec{l}} (X_{\vec{m}\vec{n}} - X_{\vec{n}\vec{l}}) - I_{\vec{m}\vec{n}} X_{\vec{n}\vec{l}} \right] (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- S_{\vec{l}}^+ + S_{\vec{l}}^- S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) \quad (\text{III.19h})$$

$$H_7 = - \frac{x^2}{S^2} \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{m}\vec{l}} (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- S_{\vec{l}}^- + S_{\vec{l}}^+ S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) \quad (\text{III.19i})$$

$$H_8 = - \left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right)^{1/2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \left\{ I_{\vec{n}\vec{m}} \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right)^{1/2} - \frac{8x}{S} Y \right] + \right. \\ \left. + 8x \sum_{\vec{l}} I_{\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{n}} \right\} \sigma_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}}^+ \quad (\text{III.19j})$$

$$H_9 = \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} \left[\left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right) I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{l}} - \frac{4x^2}{S^2} I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{m}\vec{l}} \right] (S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}}^+ \sigma_{\vec{l}}^- + \sigma_{\vec{l}}^- \sigma_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) \quad (\text{III.19k})$$

Ovaj izraz je već napisan u konciznoj formi korišćenjem osobina hiperkubne rešetke (vidi prilog u [P 7]).

Iz zahteva da H_1 i H_5 budu identički jednaki nuli, odredjujemo oblik funkcija $X_{\vec{l}\vec{n}}$ i Y . To će nam s druge strane odrediti aproksimaciju po malom parametru x kao što je već ranije rečeno.

Izjednačavajući koeficijent u H_1 sa nulom, nalažimo

$$Y = - \frac{2x^2}{S^2} \sum_{\vec{l}} \frac{I_{\vec{n}\vec{l}}}{I(0)} X_{\vec{n}\vec{l}} \quad (\text{III.20})$$

odnosno, procenu $Y \approx x^2 X$.

Pri analizi izraza H_5 treba obratiti pažnju na prvi član u H_9 , koji za $\vec{m} = \vec{l}$, takodje daje doprinos u H_5 . Mi ćemo ga za sada uzeti samo za procenu, uvodeći koeficijent α

uz član tog reda veličine u jednačini. Tako stižemo do izraza

$$\left| Y \left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right) + \frac{x}{S} \left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right)^{1/2} - Sx(0) \right| I_{\overrightarrow{nm}} + \\ + \left| \alpha \left(1 - \frac{4x^2}{S^2} \right) - \frac{2x^2}{S^2} \right| I_{\overrightarrow{nm}} X_{\overrightarrow{nm}} + \frac{4x^2}{S^2} \sum_I I_{\overrightarrow{nI}} X_{\overrightarrow{Im}} = 0$$

Odavde sledi dimenziona procena

$$X | 1 + x^2 + x^2 (1 - 4x^2) + \alpha (1 - 4x^2) | \approx x \sqrt{1 - 4x^2}$$

tj.

$$X \approx \frac{x \sqrt{1 - x^2}}{a + bx^2} \approx Ax + Bx^3$$

Odlučujemo se za aproksimaciju $X \approx x$, tj. zanemarujemo članove reda x^3 i viših stepena po x . Samim tim u ovoj aproksimaciji je $Y \equiv 0$.

Razjasnimo detaljnije šta implicira ova aproksimacija. $\langle S_n^z \rangle$ i $\langle S_n^x \rangle$ kao bezdimenzionalne veličine računamo do x^2 , a energiju do $x^2 I(0)$. Prema tome kod numeričkih računa smatramo x^3 kao granicu tačnosti sa kojom računamo. S druge strane, Pfeuty [P 7] je pokazao da je sledeći član u razvoju za $\langle S_n^z \rangle$ proporcionalan tek x^4 . Stoga smo se odlučili za ovu aproksimaciju.

Operator unitarne transformacije je sada dat izrazom

$$\hat{U}_2 = \exp(-\hat{W}) ; \quad \hat{W} = \sum_I X_{\overrightarrow{Ir}} (\sigma_r^+ S_I^+ - S_I^- \sigma_r^-) \quad X \approx x \quad (\text{III.21})$$

U radovima [K 7, K 8] je od početka uvedena ova transformacija, zajedno sa pretpostavkom $X \approx x$, koja se "intuitivno" nametala. S druge strane u ovim radovima nije razjašnjeno da li bi član $\approx x^2$ imao uticaja. $\langle S_n^z \rangle$ i $\langle S_n^x \rangle$ je bilo računato samo do članova $\approx x$, što je dovelo napr. do netačnog zaključka da $\langle S_n^z \rangle \rightarrow \frac{1}{2}$ kad $T \rightarrow 0$ K.

Imajući na umu aproksimaciju u kojoj radimo, možemo detaljnije da analiziramo sam hamiltonijan. Zadržavajući u svim koeficijentima samo izraze reda do $x^2 I(0)$, nalazimo

$$\begin{aligned}
H'' &= U_2 H' U_2^+ = H_0 + SI(0) \sum_{\vec{n}} U_2 \sigma_{\vec{n}} U_2^+ - \frac{x^2}{2S^2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} \times \\
&\times U_2 (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- + S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) U_2^+ - \frac{x^2}{S^2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} U_2 S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ U_2^+ - \frac{1}{2}(1 - \frac{4x^2}{S^2}) \times \\
&\times \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} U_2 \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} U_2^+ - \frac{x}{S} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} U_2 (S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} + \sigma_{\vec{m}} S_{\vec{n}}^+) U_2^+ \approx \\
&\approx H_0 + SI(0) \sum_{\vec{n}} \{ \sigma_{\vec{n}} - [\hat{W}, \sigma_{\vec{n}}] + \frac{1}{2}[W, [W, \sigma_{\vec{n}}]] \} - \frac{x^2}{2S^2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} \times \\
&\times (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- + S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) - \frac{x^2}{S^2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ - \frac{1}{2}(1 - \frac{4x^2}{S^2}) \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} \{ \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} - \\
&- [W, \sigma_{\vec{n} \vec{m}}] + \frac{1}{2}[W, [W, \sigma_{\vec{n} \vec{m}}]] \} - \frac{x}{S} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} \{ S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} + \sigma_{\vec{m}} S_{\vec{n}}^+ - \\
&- [W, S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} + \sigma_{\vec{m}} S_{\vec{n}}^+] \} \tag{III.22}
\end{aligned}$$

Izračunavši ove komutatore (što je verovatno najmukotrpniji deo posla) nalazimo

$$H'' - H_0 = \sum_{i=1}^{12} H_i \tag{III.23a}$$

$$H_1 = SI(0) \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} \tag{III.23b}$$

$$H_2 = \sum_{\vec{n} \vec{m}} \left\{ -\frac{x^2}{S^2} + [SX(0) + \frac{2x}{S}] X_{\vec{n} \vec{m}} - X_{\vec{n} \vec{m}} X_{\vec{n} \vec{m}} \right\} I_{\vec{n} \vec{m}} S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ \tag{III.23c}$$

$$H_3 = -\frac{x^2}{2S^2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- + S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) \tag{III.23d}$$

$$H_4 = -[SX(0) + \frac{x}{S}] \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} (S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} + \sigma_{\vec{m}} S_{\vec{n}}^+) \tag{III.23e}$$

$$H_5 = \sum_{\vec{n} \vec{m}} \left\{ -\frac{1}{2}(1 - \frac{4x^2}{S^2}) I_{\vec{n} \vec{m}} + [2S^2 X(0) + 4x] \sum_{\vec{l}} I_{\vec{m} \vec{l}} X_{\vec{j} \vec{k}} \right\} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} \tag{III.23f}$$

$$H_6 = \sum_{\vec{n} \vec{m} \vec{l}} I_{\vec{n} \vec{m} \vec{l}} (X_{\vec{n} \vec{m}} + X_{\vec{m} \vec{l}}) [SX(0) + \frac{2x}{S} - \frac{3}{2} X_{\vec{n} \vec{l}}] S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} S_{\vec{l}}^+ \tag{III.23g}$$

$$H_7 = \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} I_{\vec{n}\vec{m}} \{ (X_{\vec{m}\vec{l}} - X_{\vec{n}\vec{l}}) [\frac{1}{2}SX(0) + \frac{x}{S}] - \frac{1}{2}X_{\vec{n}\vec{m}}X_{\vec{m}\vec{l}} \} \times \\ \times (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- \sigma_{\vec{l}} + \sigma_{\vec{l}} S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) \quad (\text{III.23h})$$

$$H_8 = \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{l}} (S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} \sigma_{\vec{l}} + \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{m}} S_{\vec{n}}^+) \quad (\text{III.23i})$$

$$H_9 = \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} \{ I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{l}} [\frac{4x}{S} + 2SX(0)] + 2S \sum_{\vec{x}} I_{\vec{n}\vec{x}} X_{\vec{m}\vec{x}} X_{\vec{x}\vec{l}} \} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} \sigma_{\vec{l}} \quad (\text{III.23j})$$

$$H_{10} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}\vec{x}} I_{\vec{n}\vec{m}} [2X_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{x}} + (X_{\vec{n}\vec{x}} + X_{\vec{m}\vec{x}}) \times \\ \times (X_{\vec{n}\vec{l}} + X_{\vec{m}\vec{l}})] S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{x}} S_{\vec{m}}^+ \quad (\text{III.23k})$$

$$H_{11} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}\vec{x}} (I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{x}} + I_{\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{n}} X_{\vec{n}\vec{x}} - I_{\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{n}} X_{\vec{n}\vec{l}}) \times \\ \times (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{x}} + \sigma_{\vec{x}} \sigma_{\vec{l}} S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) \quad (\text{III.23l})$$

$$H_{12} = 2 \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}\vec{x}} I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{x}} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{x}} \quad (\text{III.23m})$$

Na isti način nalazimo i komponente totalnog spina

$$\sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z = NS(1 - \frac{2x^2}{S^2}) - \frac{x}{S} \sum_{\vec{n}} (S_{\vec{n}}^- + S_{\vec{n}}^+) + [4xX(0) + \frac{2x^2}{S^2} - 1] \times \\ \times \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\frac{2x}{S} - X_{\vec{n}\vec{m}}) X_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ - \frac{x}{S} \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- + S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) + \\ + \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} (S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} + \sigma_{\vec{m}} S_{\vec{n}}^+) - \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\frac{4x}{S} X_{\vec{n}\vec{m}} + 2S \sum_{\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{n}}) \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} (X_{\vec{l}\vec{m}} - X_{\vec{n}\vec{m}}) (\sigma_{\vec{m}} S_{\vec{l}}^+ S_{\vec{n}}^+ + S_{\vec{n}}^- S_{\vec{l}}^- \sigma_{\vec{m}}) - \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} (X_{\vec{n}\vec{m}} + X_{\vec{m}\vec{l}}) \times \\ \times S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} S_{\vec{l}}^+ + 2 \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{l}} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} \sigma_{\vec{l}} \quad (\text{III.24a})$$

$$\sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^x = 2Nx + \sum_{\vec{n}} [\frac{1}{2}(1 - \frac{2x^2}{S^2}) - S \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{n}}] (S_{\vec{n}}^- + S_{\vec{n}}^+) - \\ - [\frac{2x}{S} + 2SX(0)] \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- + S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) +$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\vec{n}\vec{m}} [x_{\vec{n}\vec{m}} \left[\frac{2x}{S} + SX(0) + x_{\vec{n}\vec{m}} \right] (S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} + \sigma_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) + \\
& + \frac{1}{4} \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\vec{l} \\ \vec{n}\vec{m}\vec{l}}} (2x_{\vec{m}\vec{l}} x_{\vec{l}\vec{n}} - x_{\vec{n}\vec{m}} x_{\vec{l}\vec{n}} - 3x_{\vec{n}\vec{m}} x_{\vec{l}\vec{m}}) (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- S_{\vec{l}}^+ + S_{\vec{l}}^- S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) + \\
& + \frac{1}{4} \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\vec{l} \\ \vec{n}\vec{m}\vec{l}}} x_{\vec{n}\vec{m}} (x_{\vec{n}\vec{l}} + x_{\vec{m}\vec{l}}) (S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^- S_{\vec{l}}^- + S_{\vec{l}}^+ S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{n}}^+) + \\
& + 2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} x_{\vec{n}\vec{m}} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} - 2 \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\vec{l} \\ \vec{n}\vec{m}\vec{l}}} x_{\vec{n}\vec{m}} x_{\vec{m}\vec{l}} (S_{\vec{n}}^- \sigma_{\vec{m}} \sigma_{\vec{l}} + \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{m}} S_{\vec{n}}^+) \quad (\text{III.24b})
\end{aligned}$$

Primetimo da smo u cilju uzimanja u obzir svih članova koji daju doprinos u datoj aproksimaciji, morali uzeti u obzir i sledeći član u izrazu (III.5).

Formule (III.23) i (III.24) predstavljaju osnovne formule za svaki račun izведен u aproksimaciji do članova reda x^2 . Dalji generalni tretman bi trebalo izvesti koristeći bozonsku reprezentaciju tzv. kvazi-pauli operatora $|L 9|$. Ovo je skopčano sa velikim matematičkim teškoćama i nadalje se zadovoljavamo slučajem spina $\frac{1}{2}$ kada direktno možemo uvesti tzv. Pauli operatore $|T_{II}, T_{III}|$

$$S_{\vec{n}}^- = P_{\vec{n}}^+ \quad S_{\vec{n}}^+ = P_{\vec{n}}^- \quad \sigma_{\vec{n}} = P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- \quad (\text{III.25})$$

Ovi operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije

$$\begin{aligned}
[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^+] &= \delta_{\vec{n}, \vec{m}} (1 - 2P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^-) \\
[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^-] &= [P_{\vec{n}}^+, P_{\vec{m}}^+] = 0 \quad P_{\vec{n}}^2 = P_{\vec{m}}^2 = 0 \quad (\text{III.26})
\end{aligned}$$

Detaljnije se o Pauli-operatorima i njihovim bozonskim reprezentacijama govori u prilogu.

Hamiltonian izražen preko Pauli-operatora ima sledeći oblik

$$H'' - H_0 = \sum_{i=1}^{12} H_i \quad (\text{III.27a})$$

$$H_1 = \frac{1}{2} I(0) \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- \quad (\text{III.27b})$$

$$H_2 = \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \left\{ \left[\frac{1}{2} X(0) + 4x \right] X_{\vec{n}\vec{m}} - 4x^2 - X_{\vec{n}\vec{m}}^2 \right\} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \quad (\text{III.27c})$$

$$H_3 = -2x^2 \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{m} \\ nm}} I_{\vec{n}\vec{m}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ + P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{n}}) \quad (\text{III.27d})$$

$$H_4 = -\left[\frac{1}{2}X(0) + 2x\right] \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{m} \\ nm}} I_{\vec{n}\vec{m}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- + P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}) \quad (\text{III.27e})$$

$$H_5 = \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{m} \\ nm}} \left\{ \left[\frac{1}{2}X(0) + 4x \right] \sum_{\substack{\vec{l} \\ l}} I_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{m}} - \frac{1}{2}(1 - 16x^2) I_{\vec{n}\vec{m}} \right\} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}} \quad (\text{III.27f})$$

$$H_6 = \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{l} \\ nm}} I_{\vec{n}\vec{l}} (X_{\vec{n}\vec{m}} + X_{\vec{m}\vec{l}}) \left[\frac{1}{2}X(0) + 4x - \frac{3}{2}X_{\vec{n}\vec{l}} \right] P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{l}} \quad (\text{III.27g})$$

$$\begin{aligned} H_7 = & \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{m} \\ nm}} I_{\vec{n}\vec{m}} \left\{ \left[\frac{1}{4}X(0) + 2x \right] (X_{\vec{m}\vec{l}} - X_{\vec{n}\vec{l}}) - \frac{1}{2}X_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{m}\vec{l}} \right\} \times \\ & \times (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- + P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{n}}^-) \end{aligned} \quad (\text{III.27h})$$

$$H_8 = \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{l} \\ nm}} I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{l}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- + P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}) \quad (\text{III.27i})$$

$$H_9 = \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{l} \\ nm}} \left\{ [X(0) + 8x] I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{m}\vec{l}} + \sum_{\substack{\vec{k} \\ k}} I_{\vec{n}\vec{k}} X_{\vec{k}\vec{m}} X_{\vec{k}\vec{l}} \right\} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- \quad (\text{III.27j})$$

$$H_{10} = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{m} \\ \vec{l} \neq \vec{r}}} I_{\vec{n}\vec{m}} (X_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{r}} + X_{\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{r}}) P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- P_{\vec{r}}^+ P_{\vec{r}}^- \quad (\text{III.27k})$$

$$\begin{aligned} H_{11} = & -\frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{m} \\ \vec{l} \neq \vec{r}}} (2I_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{m}\vec{r}} - I_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{r}} X_{\vec{n}\vec{m}}) \times \\ & \times (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- P_{\vec{r}}^+ P_{\vec{r}}^- + P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^-) \end{aligned} \quad (\text{III.27l})$$

$$H_{12} = 2 \sum_{\substack{\vec{n} \neq \vec{m} \\ \vec{l} \neq \vec{r}}} I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{r}} \sigma_{\vec{n}}^z \sigma_{\vec{m}}^z \sigma_{\vec{l}}^z \sigma_{\vec{r}}^z \quad (\text{III.27m})$$

Na ovom mestu uvodimo više aproksimacija. Kao prvo, zanemarujemo sve izraze koji sadrže proizvode više od četiri Pauli-operatora. Razlog je taj što ćemo energiju računati u aproksimaciji linearnoj po srednjem broju Pauli-operatora $\bar{N} = \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- \rangle$ a srednje vrednosti komponenti spina u aproksimaciji kvadratnoj po \bar{N} . Ovo je automatski regulisano linearnim (po \bar{N}) dekuplovanjem Grinovih funkcija. U takvom dekuplovanju članovi sa više od četiri Pauli-operatora ne daju doprinos. Da bi smo račun izvršili korektno, potrebno je da prethodno sve izraze dovedemo na formu normalnog produkta, jer u protivnom nismo uračunali sve moguće doprinose koji sadrže najviše četiri

Pauli-operatora.

Da procenimo doprinos pojedinih članova hamiltonijanu, ponovo koristimo teoriju perturbacije. Za neperturbovani hamiltonijan biramo $H_1 = I(0)$. Tada članovi H_3 , H_4 i H_7 daju doprinos tek u drugoj popravci teorije perturbacije. Kako je ova popravka reda veličine $|V|^2/\Delta E_0$, vidimo da članovi H_3 i H_7 unose u energiju popravke reda $x^4 I(0)$, a H_4 popravku reda $x^2 I(0)$. Stoga zadržavamo samo ovaj poslednji član.

Posle procedure dovodenja proizvoda na forme normalnih produkata, i zanemarivanja članova koji daju doprinos reda veličine $x^3 I(0)$ i manji, preostaje nam sledeći izraz za hamiltonijan

$$H_{ef}'' = H_0 + H_{2d} + H_{2m} + H_3 + H_{4d} + H_{4m} \quad (\text{III.28a})$$

$$H_0 = -NI(0) (2x^2 + \frac{1}{8}) \quad (\text{III.28b})$$

$$H_{2d} = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} I(0) - \sum_I I_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{n}} X_{\vec{n}\vec{l}} + \frac{1}{2} [X(0) + 8x] \sum_I I_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{n}} \right\} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{l}}^- \quad (\text{III.28c})$$

$$H_{2m} = \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \left\{ \frac{1}{2} [X(0) + 8x] X_{\vec{n}\vec{m}} - 4x^2 - X_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{m}\vec{n}} \right\} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \quad (\text{III.28d})$$

$$H_3 = \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \left[X_{\vec{n}\vec{m}} - 2x - \frac{1}{2} X(0) \right] (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- + P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^-) \quad (\text{III.28e})$$

$$\begin{aligned} H_{4d} = & \sum_{\vec{n}\vec{m}} \left\{ \frac{1}{2} [X(0) + 8x] \sum_I I_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{n}} - 3 \sum_I I_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{m}\vec{l}} + \right. \\ & \left. + I_{\vec{n}\vec{m}} \left[X_{\vec{n}\vec{m}} - 2x - \frac{1}{2} X(0) \right] \right\} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^- \end{aligned} \quad (\text{III.28f})$$

$$H_{4m} = - \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} I_{\vec{n}\vec{l}} \left[\frac{1}{2} X(0) (X_{\vec{m}\vec{n}} + X_{\vec{m}\vec{l}}) + 2X_{\vec{m}\vec{n}} X_{\vec{m}\vec{l}} \right] P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{l}}^- \quad (\text{III.28g})$$

Već smo ranije objasnili, da ćemo umesto primene teorije perturbacija, odrediti funkciju $X_{\vec{l}\vec{n}}$ tako da eliminisemo član H_3 . Ovo daje sledeću jednačinu

$$I_{\vec{n}\vec{m}} \left[X_{\vec{n}\vec{m}} - 2x - \frac{1}{2} X(0) \right] = 0 \quad (\text{III.29})$$

Ova jednačina je pojednostavljena forma opšte jednačine |K 7|

$$I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} - \frac{1}{2} I(0) X_{\vec{n}\vec{m}} - 2x I_{\vec{n}\vec{m}} = 0$$

koja se može rešavati metodama za rešavanje integralnih jednačina [K 7, S18] i postoji njen opšte rešenje u slučaju hiperkubne rešetke bez ograničenja na broj suseda. U slučaju interakcije samo izmedju najbližih suseda, sumiranjem po $\vec{n} - \vec{m}$, jednostavno nalazimo

$$X(0) = [2x + \frac{1}{2}X(0)] \cdot 2d$$

odnosno

$$X(0) = -4x \frac{d}{d-1} \rightarrow X(\vec{k}) = -\frac{4x}{d-1} \sum_{i=1}^d \cos k_i a \quad (\text{III.30})$$

gde je $X(\vec{k})$ Furije lik funkcije $X_{\vec{n}\vec{m}}$, a a konstanta rešetke.

Na ovom mestu je verovatno potreban komentar o opštosti pristupa. Naime, već je rečeno, da u generalnom slučaju takodje postoji rešenje gornje jednačine i to praktično u svim slučajevima. Drugim rečima, naše rešenje, koje ne važi za slučaj $d=1$, nije posledica lošeg pristupa već samo aproksimacije najbližih suseda. Mi ćemo i dalje raditi u toj aproksimaciji, ali je dobro imati na umu da su moguća i opštija rešenja. Kao mogućnost za dalji razvoj teorije ostaje da se ceo problem diskutuje i u slučaju interakcije većeg dometa, jer tad postoji rešenje jednačine za $d=1$, što opet omogućuje poredjenje sa tačnim rešenjem [P 9, P 5].

Koristeći jednačinu (III.29), izraz za hamiltonijan (III.28) se može pojednostaviti

$$H_{2d} = \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- \quad (\text{III.31a})$$

$$H_{2m} = \Gamma \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \quad (\text{III.31b})$$

$$H_{4d} = - \sum_{\vec{n}\vec{m}} A_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^- \quad (\text{III.31c})$$

$$H_{4m} = - \sum_{\vec{n}\vec{m}} C_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^- \quad (\text{III.31d})$$

Ovde smo uveli označke

$$\Delta = I(0) \left[\frac{1}{2} + 4x^2 + xX(0) \right] \quad (\text{III.32a})$$

$$A_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{2}[1 + 4xX(0)]I_{\vec{n}\vec{m}} + [X(0) + 2x] \sum_I I_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{m}} \quad (\text{III.32b})$$

$$C_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} = X_{\vec{n}\vec{l}} \left\{ \frac{1}{2} I(0) (X_{\vec{n}\vec{m}} + X_{\vec{m}\vec{l}}) + 2 I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{m}\vec{l}} \right\} \quad (\text{III.32c})$$

Moramo obratiti pažnju na to da je hamiltonijan formulisan preko Pauli-operatora, a da ćemo nadalje koristiti bozonske reprezentacije za Pauli-operatore. U sumama su neki od članova identički jednaki nuli zbog osobina samih Pauli-operatora. Konkretno u H_{4d} ne može postojati član sa $\vec{n} = \vec{m}$ (zbog $P_{\vec{n}}^2 = 0$). Kada Pauli-operatore izrazimo preko Boze-operatora po približnim formulama, anuliranje ovog člana više nije automatski osigurano. U teoriji magnetizma najčešće nema ovih situacija, jer je obično koeficijent ispred operatora jednak nuli za $\vec{n} = \vec{m}$. Mi se ovde moramo osigurati da ovaj uslov bude ispunjen time što ćemo uvesti u sume faktor $(1 - \delta_{\vec{n}, \vec{m}})$ koji je jednak nuli kada je $\vec{n} = \vec{m}$. U izrazu za H_{4m} ne može se zbog osobina Pauli-operatora javiti član sa $\vec{n} = \vec{m}$ i $\vec{m} = \vec{l}$, a ni član sa $\vec{n} = \vec{l}$, zbog koeficijenta $X_{\vec{n}\vec{l}}$. Stoga ćemo hamiltonijan napisati u konačnoj formi kao

$$H_{ef}'' = H_0 + H_{2d} + H_{2m} + H_{4d} + H_{4m} \quad (\text{III.33a})$$

$$H_0 = -NI(0)(2x^2 + \frac{1}{8}) \quad (\text{III.33b})$$

$$H_{2d} = \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- \quad (\text{III.33c})$$

$$H_{2m} = \Gamma \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \quad (\text{III.33d})$$

$$H_{4d} = - \sum_{\vec{n}\vec{m}} (1 - \delta_{\vec{n}, \vec{m}}) A_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^- \quad (\text{III.33e})$$

$$H_{4m} = - \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{n}, \vec{m}}) (1 - \delta_{\vec{n}, \vec{l}}) (1 - \delta_{\vec{m}, \vec{l}}) C_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{l}}^- \quad (\text{III.33f})$$

Ovaj efektivni izraz za hamiltonijan ćemo još nazivati četvoropaulionskom (4P) aproksimacijom. Nadalje ćemo računati samo sa ovim efektivnim hamiltonijanom.

Ako sada ponovimo celu proceduru uvođenja Pauli-operatora, dovodenja na normalne produkte i zadržavanja čla-

nova koji daju doprinos zaključno do reda x^2 , možemo napisati sledeće izraze za komponente totalnog spina

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z &= \frac{1}{2}N(1 - 8x^2) - 2x \sum_{\vec{n}} (P_{\vec{n}}^+ + P_{\vec{n}}^-) + [2xX(0) + 8x^2 - \\ &- \frac{1}{2}X(0)^2 - 1] \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- + \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} (4x - X_{\vec{n}\vec{m}}) P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- - 2x \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} \times \\ &\times (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ + P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{n}}^-) + \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- + P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^-) - \sum_{\vec{n}\vec{m}} \{ [4x - \\ &- X(0)] X_{\vec{n}\vec{m}} + \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{m}} \} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^- - \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{m}} (X_{\vec{n}\vec{l}} + X_{\vec{m}\vec{l}}) \times \\ &\times P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{l}}^- - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{m}} (X_{\vec{m}\vec{l}} - X_{\vec{n}\vec{l}}) (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- + P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{l}}^- P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{n}}^-) \quad (\text{III.34a}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^x &= 2Nx + \frac{1}{2} \{ 1 - 8x^2 - X(0) [\frac{1}{2}X(0) + 2x] \} \sum_{\vec{n}} (P_{\vec{n}}^+ + P_{\vec{n}}^-) - \\ &- [4x + X(0)] \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- + \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ + P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{n}}^-) + \\ &+ \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} [4x + \frac{1}{2}X(0) + X_{\vec{m}\vec{n}}] (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- P_{\vec{m}}^- + P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{n}}^- P_{\vec{n}}^-) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} (2X_{\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{n}} - X_{\vec{m}\vec{n}} X_{\vec{l}\vec{n}} - 3X_{\vec{m}\vec{n}} X_{\vec{l}\vec{m}}) (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{l}}^- - P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^-) + \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{m}} (X_{\vec{n}\vec{l}} + X_{\vec{m}\vec{l}}) (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{l}}^- + P_{\vec{l}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^-) + 2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^- \quad (\text{III.34b}) \end{aligned}$$

Usrednjavanje vršimo po kanonskom ansamblu opisanom hamiltonijonom H_{ef}^* . Zbog translacione invarijantnosti važi

$$\langle \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z \rangle_{H_{ef}^*} = N \langle S_{\vec{n}}^z \rangle_{H_{ef}^*}$$

Dalje uočimo da H_{ef}^* komutira sa operatorom $\hat{N}_{tot} = \sum_{\vec{n}} \hat{P}_{\vec{n}}^+ \hat{P}_{\vec{n}}^-$ koji ima smisao operatora ukupnog broja popunjenošći paülionskih kvazičestica. U tom slučaju, pri usrednjavanju u izrazima za $\langle S_n^z \rangle$ i $\langle S_{\vec{n}}^x \rangle$ ostaju samo srednje vrednosti članova koji komutiraju sa \hat{N}_{tot} i konačan izraz je

$$\begin{aligned}
 & \langle S_{\vec{n}}^z \rangle_H \equiv \langle S_{\vec{n}}^z \rangle_{H_{ef}''} = \frac{1}{2} - 4x^2 + [2xX(0) + 8x^2 - \frac{1}{2}X(0)^2 - 1]\bar{N} + \\
 & + [2x - \frac{1}{2}X(0)]\frac{1}{N} \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \rangle - \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}\vec{m}} (1 - \delta_{\vec{n},\vec{m}}) \{ [4x - X(0)]X_{\vec{n}\vec{m}} + \\
 & + \sum_{\vec{l}} \{ X_{\vec{n}\vec{l}} X_{\vec{l}\vec{m}} \} \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{l}}^- \rangle - \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{n},\vec{l}})(1 - \delta_{\vec{n},\vec{m}})(1 - \delta_{\vec{l},\vec{m}}) \times \\
 & \times X_{\vec{n}\vec{m}} (X_{\vec{n}\vec{l}} + X_{\vec{m}\vec{l}}) \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{l}}^- \rangle \} \quad (III.35a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \langle S_{\vec{n}}^x \rangle_H \equiv \langle S_{\vec{n}}^x \rangle_{H_{ef}''} = 2x - [4x + X(0)]\bar{N} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \rangle + \\
 & + \frac{1}{N} 2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{n}}^- \rangle \quad (III.35b)
 \end{aligned}$$

Ovde smo uveli oznaku $\bar{N} = \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- \rangle$.

Da bismo na jednom mestu kompletirali opšte izraze koji će nam biti potrebni u daljem računu, napisaćemo ovde i Hajzenbergovu (Heisenberg) jednačinu kretanja za Pauli-operator $\hat{P}_{\vec{F}}$

$$\begin{aligned}
 \frac{idP_{\vec{F}}}{dt} &= [P_{\vec{F}}, H_{ef}''] = \Delta P_{\vec{F}} + \Gamma \sum_{\vec{m}} X_{\vec{F}\vec{m}} P_{\vec{m}}^- - \\
 &- 2\Gamma \sum_{\vec{m}} X_{\vec{F}\vec{m}} P_{\vec{F}}^+ P_{\vec{F}}^- P_{\vec{m}}^- - 2 \sum_{\vec{m}} (1 - \delta_{\vec{F},\vec{m}}) A_{\vec{F}\vec{m}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{F}}^- - \\
 &- \sum_{\vec{m}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{F},\vec{m}})(1 - \delta_{\vec{F},\vec{l}})(1 - \delta_{\vec{m},\vec{l}}) C_{\vec{F}\vec{m}\vec{l}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{l}}^- - \\
 &- \sum_{\vec{n}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{n},\vec{F}})(1 - \delta_{\vec{n},\vec{l}})(1 - \delta_{\vec{F},\vec{l}}) C_{\vec{n}\vec{F}\vec{l}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{F}}^- P_{\vec{l}}^- \quad (III.36)
 \end{aligned}$$

U ovoj jednačini je zanemaren član koji sadrži proizvod pet Pauli-operatora. Zadržavanje ovog člana bi predstavljalo previšenje tačnosti jer smo već zanemarili operator H_0 , koji bi dao isti takav doprinos u jednačinu kretanja.

Primetimo da smo izabrali sistem jedinica u kojem je $\hbar = 1$, drugim rečima energija i frekvencija imaju istu dimenziju.

Uporedimo već sada dobijene rezultate sa rezultatima koje daju druge teorije. Izraz za H_0 (III.33b) je rezultat

za energiju osnovnog stanja u aproksimaciji molekularnog polja |B10|, a istovremeno to je izraz za energiju osnovnog stanja do članova reda x^2 i u strožijoj teoriji |P 6|.

S druge strane Δ predstavlja deo energije elementarnih ekscitacija koji ne zavisi od impulsa |P 6|. Izraz za $\langle S_{\pm}^x \rangle$ sadrži u sebi član $2x$ što odgovara rezultatu aproksimacije molekularnog polja u celoj temperaturskoj oblasti koja odgovara uređenoj fazi. Prvi član u $\langle S_{\pm}^z \rangle$ predstavlja rezultat koji odgovara vrednosti za $\langle S_{\pm}^z \rangle$ u MFA na $T = 0K$ |B10|. Vidimo, da se već iz opštih izraza može uočiti slaganje sa jednostavnijim pristupima.

IV GLAVA

NISKOTEMPERATURSKO PONAŠANJE SISTEMA I
UTICAJ KINEMATIČKIH EFEKATA

Ova glava je posvećena razmatranju ponašanja sistema opisanog ekvivalentnim hamiltonijanom na niskim temperaturama, znači u blizini osnovnog stanja. U ovoj temperaturskoj oblasti je bozonski formalizam veoma pogodan jer ako je $\bar{n} \ll 1$, možemo izraze za Pauli-operatore u ATR dobro aproksimirati sa prva dva člana. Prvo ćemo ispitati "harmonijski" hamiltonian, a potom popravke koje daju ostali delovi hamiltonijana (prvi korači u ovom pravcu činjeni su u radovima [K 7, K 8]). Na kraju ćemo proučiti uticaj kinematičkih efekata novom tehnikom do sada primenjenom u oblasti feromagnetizma [T11] i teoriji eksitona [H 5]. Problem ćemo tretirati generalno, a potom analizirati navedene posebne slučajeve.

Koristićemo metod dvovremenskih, temperaturski zavisnih funkcija Grina [D I, TII, TIII]. Konkretno, posmatraćemo komutatorsku, retardovanu Grinovu funkciju za dva operatora $A_{\vec{n}}(t)$ i $B_{\vec{m}}(t')$ definisani relacijom

$$\begin{aligned} G_{\vec{n}\vec{m}}(t, t') &\equiv \langle\langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) | \hat{B}_{\vec{m}}(t') \rangle\rangle \equiv \\ &\equiv \theta(t-t') \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(t')] \rangle \end{aligned} \quad (\text{IV.1})$$

Podrazumeva se kvantnomehaničko statističko usrednjavanje po kanonskom ansamblu sa hamiltonijanom \hat{H}_{ef} . S obzirom da hamiltonian ne zavisi eksplicitno od vremena, Grinova funkcija zavisi samo od razlike $t-t'$, tako da je jednostavnije operator $\hat{B}_{\vec{m}}$ posmatrati u vremenu $t'=0$. Kako su dati operatori "vezani" za čvorove idealne kristalne rešetke, Grinova funkcija takodje zavisi samo od razlike $\vec{n}-\vec{m}$ tako da možemo uvesti Furije transforme kako po vremenu, tako i po prostornim koordinatama. Jednačina za vremensku evoluciju Grinove funkcije (u daljem tekstu: jednačina kretanja) glasi

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle A_{\vec{n}}(t) | B_{\vec{m}}(t') \rangle\rangle \equiv i\delta(t-t') \langle [\hat{A}_{\vec{n}}, \hat{B}_{\vec{m}}] \rangle + \\ + \langle\langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{H}(t)] | \hat{B}_{\vec{m}}(t') \rangle\rangle \quad (\text{IV.2})$$

(Nadalje ćemo umesto "Grinova funkcija" koristiti skraćenicu GF).

Koristeći približan izraz za Pauli-operatore

$$P_{\vec{k}} = B_{\vec{k}} - B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}^- B_{\vec{k}} \quad P_{\vec{k}}^+ = B_{\vec{k}}^+ - B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}^- B_{\vec{k}} \quad P_{\vec{k}}^- = B_{\vec{k}}^- B_{\vec{k}}^+ - B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}^- B_{\vec{k}}^- B_{\vec{k}} \quad (\text{IV.3})$$

sve veličine izražavamo preko Boze-operatora. Stoga odmah na početku definišemo odgovarajuće bozonske veličine: Grinove funkcije

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \langle\langle B_{\vec{n}}(t) | B_{\vec{m}}^+(0) \rangle\rangle \quad D_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \langle\langle B_{\vec{n}}^+(t) | B_{\vec{m}}(0) \rangle\rangle \quad (\text{IV.4a})$$

srednju vrednost bozonskog broja popunjenoosti u impulsnom i direktnom prostoru

$$\bar{n}_{\vec{p}} = \langle B_{\vec{p}}^+ B_{\vec{p}} \rangle \quad \bar{n} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} \quad (\text{IV.4b})$$

i veličinu c_i ("koncentraciju") koja predstavlja srednju vrednost broja popunjenoosti sistema neinteragujućih bozona sa zakonom disperzije $\omega_i(\vec{k})$

$$c_i = \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \left(\exp \left[-\frac{\omega_i(\vec{p})}{\theta} \right] - 1 \right)^{-1} \quad (\text{IV.5})$$

Ovde je potrebno razrešiti sledeći problem: po kojem ansamblu se izračunavaju srednje vrednosti koje figurišu u definicijama (IV.4) i (IV.5). Najjednostavniji postupak bi bio da se od početka i hamiltonian formuliše preko Boze-operatora, i onda traže jednačine kretanja bozonskih funkcija Grina. Ovim postupkom ne mogu da se obuhvate svi kinematički efekti koji su posledica različitih komutacionih relacija Boze i Pauli-operatora. Stoga postupamo na sledeći način: postavljamo egzaktну jednačinu kretanja za GF Pauli-operatora, polazeći od hamil-

tonijana formulisanog preko Pauli-operatora. Tek u ovoj jednacini vršimo prelaz (IV.3). Opravdanje za ovakav postupak može se dati na sledeći način: prilikom dekuplovanja GF primenom Vikove teoreme, javljaju se srednje vrednosti izračunate po dijagonalnom kvadratnom delu hamiltonijana (prema terminologiji teorije fonona i eksitona, ovo je "harmonijski" hamiltonijan). On ima isti oblik kao da se od samog početka u hamiltonijanu prešlo na Boze-operatore, ali samo zato što smo hamiltonijan strogo formulisali u obliku normalnih produkata. Upravo stoga smo toliko pažnje posvetili formulisanju hamiltonijana u prethodnoj glavi.

Uvodeći GF za Pauli-operatore

$$F_{\vec{f}\vec{g}}(t) \equiv \langle\langle P_{\vec{f}}(t) | P_{\vec{g}}^+(0) \rangle\rangle \quad (\text{IV.6a})$$

$$R_{\vec{n}\vec{f}\vec{l}\vec{g}}(t) = \langle\langle P_{\vec{n}}^+(t) P_{\vec{f}}(t) P_{\vec{l}}(t) | P_{\vec{g}}^+(0) \rangle\rangle \quad (\text{IV.6b})$$

i koristeći jednačinu (III.36) možemo postaviti jednačinu kretanja za funkciju $F_{\vec{f}\vec{g}}(t)$

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} F_{\vec{f}\vec{g}}(t) &= i\delta(t)\delta_{\vec{f}\vec{g}}(1 - 2\bar{N}) + \Delta F_{\vec{f}\vec{g}}(t) + \Gamma \sum_m X_{\vec{f}\vec{m}} F_{\vec{m}\vec{g}}(t) - 2\Gamma \sum_m X_{\vec{f}\vec{m}} \times \\ &\times R_{\vec{f}\vec{m}\vec{g}}(t) - 2 \sum_m (1 - \delta_{\vec{f}, \vec{m}}) A_{\vec{f}\vec{m}} R_{\vec{m}\vec{m}\vec{f}\vec{g}}(t) - \sum_{\vec{m}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{f}, \vec{m}}) \times \\ &\times (1 - \delta_{\vec{f}, \vec{l}})(1 - \delta_{\vec{m}, \vec{l}}) C_{\vec{f}\vec{m}\vec{l}} R_{\vec{m}\vec{m}\vec{l}\vec{g}}(t) - \\ &- \sum_{\vec{h}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{n}, \vec{f}})(1 - \delta_{\vec{n}, \vec{l}})(1 - \delta_{\vec{f}, \vec{l}}) C_{\vec{n}\vec{f}\vec{l}} R_{\vec{n}\vec{f}\vec{l}\vec{g}}(t) \quad (\text{IV.7}) \end{aligned}$$

Nadalje nećemo uvek pisati eksplicitno vremensku zavisnost.

Uvodimo smenu (IV.3). Detaljan postupak ćemo prikazati na primeru funkcije $F_{\vec{l}\vec{g}}(t)$

$$\begin{aligned} F_{\vec{l}\vec{g}} &= \langle\langle B_{\vec{l}} - B_{\vec{l}}^+ B_{\vec{l}} B_{\vec{l}} | B_{\vec{g}}^+ - B_{\vec{g}}^+ B_{\vec{g}}^+ B_{\vec{g}} \rangle\rangle = \langle\langle B_{\vec{l}} | B_{\vec{g}}^+ \rangle\rangle - \\ &- \langle\langle B_{\vec{l}} | B_{\vec{g}}^+ B_{\vec{g}}^+ B_{\vec{g}} \rangle\rangle - \langle\langle B_{\vec{l}}^+ B_{\vec{l}} B_{\vec{l}} | B_{\vec{g}}^+ \rangle\rangle + \langle\langle B_{\vec{l}}^+ B_{\vec{l}} B_{\vec{l}} | B_{\vec{g}}^+ B_{\vec{g}}^+ B_{\vec{g}} \rangle\rangle \end{aligned}$$

Kao što smo naglasili, interesuje nas najniža temperaturska zavisnost energetskog spektra u slučaju kada zanemarujemo kinema-

tičke energetske nivoe, tako da dekuplovanje vršimo u aproksimaciji linearnoj po \bar{n} . S druge strane, ispitivanje uticaja kinematičkih nivoa je skopčano sa matematičkim poteškoćama, tako da će nas zanimati samo temperaturski nezavisan doprinos. Formalno posmatrano, pojava kinematičkih nivoa je povezana sa izrazima tipa GDG . Stoga prilikom dekuplovanja zanemarujemo izraze tipa $\bar{n}GDG$, koji bi dali temperaturski zavisne kinematičke nivoe. (Ovo bi inače predstavljalo previše previše tačnosti u odnosu na aproksimaciju (IV.3)).

U skladu sa Vikovom teoremom |D I, TII, TIII| nalazimo

$$\langle\langle B_I^+ B_g^+ B_g^- \rangle\rangle = 2 \langle B_g^+ B_g^- \rangle \langle\langle B_I^+ B_g^+ \rangle\rangle$$

Odavde sledi

$$F_{Ig}(t) = (1 - 4\bar{n}) G_{Ig}(t) + 2G_{Ig}(t) D_{Ig}(t) G_{Ig}(t). \quad (\text{IV.8})$$

Uvodeći prostorne Furije-likove, uz predpostavku cikličnih graničnih uslova

$$G_{Ig}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{I}-\vec{g})} \quad D_{Ig}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} D(\vec{k}) e^{-i\vec{k}(\vec{I}-\vec{g})} \quad (\text{IV.9})$$

možemo pisati

$$\begin{aligned} F_{Ig}(t) &= (1 - 4\bar{n}) \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}(\vec{I}-\vec{g}) + i\vec{k}(\vec{I}-\vec{f})} + \\ &+ \frac{2}{N^3} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3} G(\vec{k}_1, t) D(\vec{k}_2, t) G(\vec{k}_3, t) \times \\ &\times e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{k}_3)(\vec{I}-\vec{g}) + i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{k}_3)(\vec{I}-\vec{f})} \end{aligned} \quad (\text{IV.10})$$

Analognim postupkom nalazimo

$$\begin{aligned} R_{mnn\bar{g}}(t) &\equiv \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}(\vec{I}-\vec{g})} \left[e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{f})} + e^{i\vec{k}(\vec{m}-\vec{f})} \right. \\ &\times \left. \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} e^{i\vec{p}(\vec{n}-\vec{m})} \right] - \frac{2}{N^3} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3} G(\vec{k}_1, t_1) D(\vec{k}_2, t_2) G(\vec{k}_3, t_3) \times \\ &\times e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{k}_3)(\vec{I}-\vec{g}) + i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)(\vec{m}-\vec{f}) + i\vec{k}_3(\vec{n}-\vec{f})} \end{aligned} \quad (\text{IV.11})$$

$$\begin{aligned}
 R_{\vec{n}\vec{k}\vec{l}\vec{g}}(t) = & \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}(\vec{k}-\vec{g})} \left[e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{k})} \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} e^{i\vec{p}(\vec{k}-\vec{n})} + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} e^{i\vec{p}(\vec{l}-\vec{n})} \right] - \frac{2}{N^3} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3} G(\vec{k}_1, t) D(\vec{k}_2, t) G(\vec{k}_3, t) \times \\
 & \times e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{k}_3)(\vec{k}-\vec{g}) + i\vec{k}_2(\vec{k}-\vec{n}) + i\vec{k}_3(\vec{l}-\vec{k})} \tag{IV.12}
 \end{aligned}$$

Ovde je potreban komentar o primeni Vikove teoreme. Njen formalni dokaz se zasniva na primeni Dajsonovog (Dyson) T -operatora vremenskog uredjivanja. Njegova funkcija je da osigura da operatori uvek slede u rastućem vremenskom poretku. Kod retardovane GF, ovo je osigurano pojavom step-funkcije, bar u linearnej aproksimaciji u kojoj mi radimo. Drugim rečima, primena Vikove teoreme u našem radu je potpuno opravdana, a pitanje hamiltonijana po kojem se izračunavaju srednje vrednosti je već diskutovano.

Kada rezultate (IV.10,11,12) uvrstimo u (IV.7) i izvršimo inverznu Furije-transformaciju, nalazimo linearizovanu jednačinu koja je osnova za dalji račun

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} [(1 - 4\bar{n})G(\vec{k}, t) + \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} G(\vec{k}_1, t) D(\vec{k}_2, t) G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, t)] = \\
 = i\delta(t)(1 - 2\bar{n}) + \phi_1(\vec{k})G(\vec{k}, t) + \\
 + \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2) G(\vec{k}_1, t) D(\vec{k}_2, t) G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, t) \tag{IV.13}
 \end{aligned}$$

Primetimo da smo u duhu uvedenih aproksimacija u prvom članu sa desne strane izvršili aproksimaciju $\bar{N} \approx \bar{n}$.

Na ovom mestu se manifestuje potreba uvodjenja Kronekerovih simbola. U izrazima u kojima figurišu samo Boze-operatori, pojavili su se parazitski članovi koji ne mogu postojati u polaznom hamiltonijanu. Njih bi morali isključiti izdvajanjem pojedinih čvorova prilikom sumiranja po rešetci. S druge strane Furije-transformaciju moramo vršiti sumirajući po svim čvorovima, inače gubimo translacionu invarijantnost. Uvođenjem kombinacija Kronekerovih simbola, sumiranje se formalno vrši po svim čvorovima, a ipak su iz računa isključeni para-

zitski članovi, koji nisu posledica samog prelaska na Boze-operatore, već pruranog presecanja beskonačnog bozonskog reda.

Sada možemo eksplicitno izračunati koeficijente $\phi_1(\vec{k})$ i $\phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2)$:

$$\begin{aligned}
 \phi_1(\vec{k}) = & \Delta + \Gamma X(\vec{k}) - \bar{n}[4\Delta + 6\Gamma X(\vec{k}) + 2 \sum_{\vec{f}} A_{\vec{f}\vec{n}} - 4A_{\vec{f}\vec{f}} + \\
 & + \sum_{\vec{f}\vec{m}} C_{\vec{f}\vec{n}\vec{m}} e^{i\vec{k}(\vec{m}-\vec{f})} - 2 \sum_{\vec{n}} C_{\vec{f}\vec{n}\vec{n}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{f})} - 2 \sum_{\vec{f}\vec{n}} C_{\vec{f}\vec{f}\vec{n}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{f})}] + \\
 & + \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} [-2\Gamma X(\vec{p}) - 2 \sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}\vec{f}} e^{i(\vec{k}-\vec{p})(\vec{n}-\vec{f})} + 2 \sum_{\vec{n}} C_{\vec{f}\vec{f}\vec{n}} e^{i\vec{p}(\vec{n}-\vec{f})} + \\
 & + 2 \sum_{\vec{n}} C_{\vec{n}\vec{f}\vec{f}} e^{i\vec{p}(\vec{f}-\vec{n})} - \sum_{\vec{n}\vec{m}} C_{\vec{n}\vec{f}\vec{m}} e^{i\vec{p}(\vec{m}-\vec{n})} - \sum_{\vec{f}\vec{m}} C_{\vec{f}\vec{n}\vec{m}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{f})+i\vec{p}(\vec{m}-\vec{n})} - \\
 & - \sum_{\vec{f}\vec{m}} C_{\vec{n}\vec{f}\vec{m}} e^{i\vec{k}(\vec{m}-\vec{f})-i\vec{p}(\vec{f}-\vec{n})}] \quad (IV.14a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2) = & \Delta + \Gamma X(\vec{k}) + 2\Gamma X(\vec{k}+\vec{k}_2-\vec{k}_1) - 2A_{\vec{f}\vec{f}} + \\
 & + 2 \sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}\vec{f}} e^{i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)(\vec{n}-\vec{f})} - \sum_{\vec{n}} C_{\vec{n}\vec{f}\vec{f}} e^{i\vec{k}_2(\vec{f}-\vec{n})} - \sum_{\vec{n}} C_{\vec{f}\vec{n}\vec{n}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{f})} - \\
 & - 2 \sum_{\vec{n}} C_{\vec{f}\vec{f}\vec{n}} e^{i(\vec{k}+\vec{k}_2-\vec{k}_1)(\vec{n}-\vec{f})} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} C_{\vec{n}\vec{f}\vec{m}} e^{i\vec{k}_2(\vec{f}-\vec{n})+i(\vec{k}+\vec{k}_2-\vec{k}_1)(\vec{m}-\vec{f})} + \\
 & + \sum_{\vec{f}\vec{m}} C_{\vec{f}\vec{n}\vec{m}} e^{i(\vec{k}+\vec{k}_2-\vec{k}_1)(\vec{n}-\vec{f})} \quad (IV.14b)
 \end{aligned}$$

Koristeći jednačinu za funkciju X (III.29) i osobine hiperkubne rešetke (vidi prilog II u radu [P 7]) kao što je napr.,

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} I(\vec{k}) X(\vec{p}-\vec{k}) X(\vec{r}-\vec{k}) = 0$$

izračunaćemo sume koje nas zanimaju. Navećemo nekoliko karakterističnih, a sve ostale se računaju na isti način.

$$A_{\vec{f}\vec{f}} = 4X\Gamma + 3\Gamma X(0) + \frac{1}{2}I(0)X(0)^2 \quad (IV.15a)$$

$$\sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}\vec{f}} e^{i\vec{r}(\vec{n}-\vec{f})} = I(\vec{r}) \left[\frac{1}{2} + 2xX(0) \right] + \\ + [2x + X(0)] I(\vec{r}) X(\vec{r}) \quad (\text{IV.15b})$$

$$\sum_{\vec{n}} C_{\vec{f}\vec{n}\vec{n}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{f})} = \sum_{\vec{n}} C_{\vec{f}\vec{f}\vec{n}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{f})} = [\Gamma + \frac{1}{4} I(0) X(0)] X(\vec{k}) \quad (\text{IV.15c})$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} C_{\vec{n}\vec{f}\vec{m}} e^{i\vec{r}(\vec{m}-\vec{f}) + i\vec{p}(\vec{f}-\vec{n})} = \frac{1}{2} I(0) X(\vec{p}-\vec{r}) [X(\vec{p}) + X(\vec{r})] \quad (\text{IV.15d})$$

Rezultat je sledeći:

$$\phi_1(\vec{k}) = \omega_0(\vec{k}) - \bar{n} [3I(0) + 2\Gamma X(\vec{k})] + \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} \{ 2\Gamma X(\vec{p}) - I(\vec{k}-\vec{p}) - \\ - 4\Gamma X(\vec{k}-\vec{p}) - [2x + X(0)] I(\vec{k}-\vec{p}) X(\vec{k}-\vec{p}) - \frac{3}{2} I(0) X(\vec{p}) X(\vec{k}-\vec{p}) - \\ - \frac{1}{2} I(0) X(\vec{k}) X(\vec{k}-\vec{p}) \} \quad (\text{IV.16a})$$

$$\phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2) = \frac{1}{2} I(0) + I(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) - 4x\Gamma - 5\Gamma X(0) - I(0) X(0)^2 + \\ + 4\Gamma X(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) - \Gamma X(\vec{k}_2) - \frac{1}{4} I(0) X(0) [2X(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1) + X(\vec{k}_2) + \\ + X(\vec{k})] + \frac{1}{2} I(0) [X(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) X(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1) + X(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) X(\vec{k}_1) + \\ + X(\vec{k} - \vec{k}_1) X(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1) + X(\vec{k} - \vec{k}_1) X(\vec{k}_2)] + \\ + 2[2x + X(0)] I(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) X(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \quad (\text{IV.16b})$$

Uveli smo oznaku

$$\omega_0(\vec{k}) = \Delta + \Gamma X(\vec{k}) = \frac{1}{2} I(0) + 4x\Gamma + \Gamma X(0) + \Gamma X(\vec{k}) \quad (\text{IV.17})$$

Može se lako videti da je ovo upravo energija koja odgovara kvadratnom delu hamiltonijana dijagonalnog u \vec{k} -prostoru.

Sledeći korak je Furije transformacija po vremenu.

Uvodeći Furije-transforme

$$G(\vec{k}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\vec{k}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (\text{IV.18a})$$

$$D(\vec{k}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} D(\vec{k}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (\text{IV.18b})$$

$$\delta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} d\omega \quad (\text{IV.18c})$$

nalazimo sledeću jednačinu koju zadovoljava Furije-transform GF

$$[(1 - 4\bar{n})\omega - \phi_1(\vec{k})]G(\vec{k}, \omega) + \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} [\omega - \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2)] \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \times \\ \times G(\vec{k}_1, \omega_1) D(\vec{k}_2, \omega_2) G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega - \omega_1 - \omega_2) = \frac{i}{2\pi}(1 - 2\bar{n})$$

Oslobadjamo se faktora $(1 - 4\bar{n})$ uz ω sa leve strane jednačine množeći celu jednačinu sa $(1 + 4\bar{n}) \approx (1 - 4\bar{n})^{-1}$ u duhu aproksimacije u kojoj radimo. Uvodeći oznaku

$$\phi(\vec{k}) = (1 + 4\bar{n})\phi_1(\vec{k}) \quad (\text{IV.19})$$

i zanemarujući proizvode oblika $\bar{n}GDG$, konačno nalazimo

$$[\omega - \phi(\vec{k})]G(\vec{k}, \omega) + \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} [\omega - \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2)] \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 G(\vec{k}, \omega_1) \times \\ \times D(\vec{k}_2, \omega_2) G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega - \omega_2 - \omega_1) = \frac{i}{2\pi}(1 + 2\bar{n}) \quad (\text{IV.20})$$

Koristimo sledeću osobinu Furije-transforma bozonskih GF

$$D(\vec{k}, -\omega) = G(\vec{k}, \omega) \quad (\text{IV.21})$$

i izvodimo sledeću seriju transformacija

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 D(\vec{k}_2, \omega_2) G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega - \omega_2 - \omega_1) = (\omega_2 \rightarrow -\omega') = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' D(\vec{k}_2, -\omega') G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega + \omega' - \omega_1) = (\omega' \rightarrow \omega_2) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 G(\vec{k}_2, \omega_2) G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega + \omega_2 - \omega_1)$$

Tako nalazimo jednačinu koja će biti osnova cele dalje analize niskotemperaturskog ponašanja sistema

$$[\omega - \phi(\vec{k})]G(\vec{k}, \omega) + \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} [\omega - \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2)] \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 G(\vec{k}_1, \omega_1) \times \\ \times G(\vec{k}_2, \omega_2) G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega + \omega_2 - \omega_1) = \frac{i}{2\pi} (1 + 2\bar{n}) \quad (\text{IV.22})$$

Napisaćemo je u nešto drugačijoj formi iz koje se preglednije vide različite mogućnosti približnog rešavanja ove jednačine

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1 + 2\bar{n}}{\omega - \phi(\vec{k})} \left\{ 1 - \frac{2\pi}{i} \cdot \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} [\omega - \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2)] \times \right. \\ \times \left. \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 G(\vec{k}_1, \omega_1) G(\vec{k}_2, \omega_2) G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega + \omega_2 - \omega_1) \right\} \quad (\text{IV.23})$$

U ovoj jednačini je $\phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2)$ dato sa (IV.16b) a $\phi(\vec{k})$ je

$$\phi(\vec{k}) = \omega_0(\vec{k}) + \bar{n}[-I(0) + 16x\Gamma + 4\Gamma X(0) + 2\Gamma X(k)] + \\ + \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} \{ 2\Gamma X(\vec{p}) - I(\vec{k}-\vec{p}) - 4\Gamma X(\vec{k}-\vec{p}) - [2x + X(0)] I(\vec{k}-\vec{p}) X(\vec{k}-\vec{p}) - \\ - \frac{3}{2} I(0) X(\vec{p}) X(\vec{k}-\vec{p}) - \frac{1}{2} I(0) X(\vec{k}) X(\vec{k}-\vec{p}) \} \quad (\text{IV.24})$$

Pre prelaska na različite aproksimacije, ispitajmo kako se izražavaju komponente spina u ovoj aproksimaciji. Već smo naglasili da komponente spina računamo do članova reda \bar{n}^2 , što u slučaju $d = 3$, koji će nas najviše interesovati, daje razvoj polarizacije do T^3 . Polazeći od ATR, imamo

$$\langle P_n^+ P_m^- \rangle = \bar{n} - 2\bar{n}^2 \quad (\text{IV.25a})$$

$$\langle P_n^+ P_m^+ \rangle = (1 - 4\bar{n}) \langle B_n^+ B_m^- \rangle = (1 - 4\bar{n}) \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} e^{i\vec{p}(\vec{m}-\vec{n})} \quad (\text{IV.25b})$$

$$\langle P_n^+ P_m^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{n}}^- \rangle = \bar{n}^2 + \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} \bar{n}_{\vec{p}_1} \bar{n}_{\vec{p}_2} e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)(\vec{n} - \vec{m})} \quad (\text{IV.25c})$$

$$\langle P_n^+ P_m^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{l}}^- \rangle = \bar{n} \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} e^{i\vec{p}(\vec{l} - \vec{n})} +$$

$$+ \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} \bar{n}_{\vec{p}_1} \bar{n}_{\vec{p}_2} e^{i\vec{p}_1(\vec{m}-\vec{n}) + i\vec{p}_2(\vec{l}-\vec{m})} \quad (\text{IV.25d})$$

Ako ovo uvrstimo u (III.35), nalazimo

$$\begin{aligned} \langle S_{\vec{n}}^z \rangle &= \frac{1}{2} - 4x^2 + [2xX(0) + 8x^2 - \frac{1}{2}X(0)^2 - 1]\bar{n} + \\ &+ [2x - \frac{1}{2}X(0)]\frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} X(\vec{p}) + [2 - 8xX(0) - 16x^2 + X(0)^2]\bar{n}^2 - \\ &- 8x\bar{n} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} X(\vec{p}) - \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} \bar{n}_{\vec{p}_1} \bar{n}_{\vec{p}_2} \times \\ &\times X(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) [4x - X(0) + X(\vec{p}_2 - \vec{p}_1) + X(\vec{p}_2) + X(\vec{p}_1)] \quad (\text{IV.26a}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle S_{\vec{n}}^x \rangle &= 2x - [4x + X(0)]\bar{n} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} X(\vec{p}) + 4[2x + X(0)]\bar{n}^2 - \\ &- 4\bar{n} \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}} X(\vec{p}) + 2\frac{1}{N^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} \bar{n}_{\vec{p}_1} \bar{n}_{\vec{p}_2} X(\vec{p}_2 - \vec{p}_1) \quad (\text{IV.26b}) \end{aligned}$$

Ovo je opšta formula za niskotemperatursku oblast, a zavisno od aproksimacije ćemo davati drugačije vrednosti za \bar{n} .

Jednačina (IV.23) se može rešavati različitim aproksimacijama. Ako se $\phi(\vec{k})$ aproksimira sa $\omega_0(\vec{k})$ imamo standardnu harmonijsku aproksimaciju za slučaj niskih temperatura, koja postaje tačna na $T = 0K$. Dalje, zanemarujući još uvek doprinos kinematickih nivoa, možemo izračunati i $\phi(\vec{k})$ u harmonijskoj aproksimaciji dobijajući tako prve anharmonijske popravke |K 7, K 8|. Drugi član u velikoj zagradi opisuje uticaj kinematickih efekata koji se javlja tek sa ovako uvedenom procedurom dekuplovanja. Energetski nivoi koji se tada pojavljuju vode poreklo iz "kinematike" i stoga su nazvani "kinematicki energetski nivoi". Dalju analizu upravo sprovodimo gore navedenim redosledom aproksimacija.

Kao što smo već rekli, najjednostavnija je harmonijska aproksimacija. Fizički smisao ove aproksimacije je da posmatramo sistem neinteragujućih bozona sa zakonom disperzije $\omega_0(\vec{k})$ u cilju nalaženja osnovne temperaturske zavisnosti srednjeg bozonskog broja popunjenoosti \bar{n} . GF koja opisuje ovaj slučaj je

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k})}$$

a sama procedura je formalno ekvivalentna zameni $\bar{n} = c_0$.

Prethodno ćemo ispitati ponašanje sistema na $T = 0K$. Energija ekscitacija je tačno data sa $\omega_0(\vec{k})$. Vrednosti za $\langle S^z \rangle$ i $\langle \hat{S}^x \rangle$ su tačno vrednosti koje daje aproksimacija molekularnog polja $|B10|$, ali su to istovremeno prvi članovi Pfetijevog perturbacionog razvoja po x na $T = 0K$. Tačnije, Pfeti je pokazao da su to upravo kompletni doprinosi članova reda x^2 . S druge strane, tek viši članovi imaju doprinos koji zavisi od dimenzionalnosti rešetke. To znači da ćemo, ako potražimo kritičnu vrednost parametra tunelovanja, za koju više ne postoji feroelektrična faza ni na $T = 0K$, iz uslova $\langle S^z \rangle = 0$, dobiti rezultat $x_c = 1/2\sqrt{2} = 0,35$. Ovo je naravno veoma visoka vrednost i što je još bitnije ne zavisi od dimenzije rešetke.

Ukoliko analiziramo izraz za energiju elementarnih eksitacija napisan u sledećoj formi

$$\omega_0(\vec{k}) = \frac{I(0)}{2} \left[1 - 8x^2 \frac{1 + \gamma(\vec{k})d}{d - 1} \right] \quad \gamma(\vec{k}) = \frac{I(\vec{k})}{I(0)}$$

uočavamo da se ovaj rezultat slaže sa Pfetijevim rezultatom |P 6|, dok se rezultat RPA dobija kada se prepostavi da $d \rightarrow \infty$ |B10|. Ako kritičnu vrednost parametra tunelovanja x_c tražimo iz uslova da "gep" u zakonu disperzije tj. $\omega_0(0)$ iščezava za $x = x_c$ |P6|, nalazimo

$$x_c = \frac{1}{\sqrt{8}} \sqrt{\frac{d - 1}{d + 1}}$$

Ovo daje sledeće vrednosti za x_c

d	2	3	4	∞
x_c	$\frac{1}{\sqrt{24}} = 0.20$	$\frac{1}{4} = 0.25$	$\sqrt{\frac{3}{40}} = 0.27$	$\frac{1}{2\sqrt{2}} = 0.35$

Vrednost je još uvek previsoka u poređenju sa drugim rezultatima citiranim u Tablici II.1. Ovo je jasno ako se ima u vidu da je red po x ustvari veoma kratak, tako da su rezultati veoma

zadovoljavajući ako se uzme u obzir da radimo samo sa prva dva člana razvoja po x .

Račun koji se odnosi na harmonijsku aproksimaciju na konačnim temperaturama, kao i proračun anharmoničkih korekcija ćemo izvesti za specijalan slučaj $d = 3$, iz dva razloga. Prvi je zato što želimo da omogućimo poređenje sa eksperimentalnim rezultatima dobijenim na realnim materijalima, a sa druge strane račun u višoj dimenziji uvodi samo dodatne matematičke komplikacije sa višestrukim integracijama, a ne daje bitno nove rezultate. Za $d = 3$, ranije uvedene aproksimacije konkretno znače da niskotemperaturski razvoj možemo vršiti do članova reda T^3 a to opet zahteva da sve funkcije od \vec{k} razvijamo do članova reda k^4 |D I, K 7, K 8, N I|.

U tom slučaju možemo uvesti

$$\frac{\omega_0(k)}{\theta} = \alpha + \frac{2x\Gamma}{\theta} \cdot \frac{k^2 a^2}{2} - \frac{2x\Gamma}{\theta} A k^4 a^4 \quad (\text{IV.27})$$

gde su

$$\alpha = \frac{\frac{1}{2} I(0) - 8x\Gamma}{\theta}$$

$$A = \frac{1}{4!} (\sin^4 u \sin^4 \phi + \sin^4 u \cos^4 \phi + \cos^4 u) \quad (\text{IV.28})$$

u i ϕ su uglovi koje vektor \vec{k} zaklapa sa koordinatnim osama. Uvodeći bezdimenzionu promenljivu s

$$s = \frac{2x\Gamma}{\theta} \cdot \frac{1}{2} k^2 a^2 \quad (\text{IV.29})$$

zaključujemo da po prelasku na s , svako $k^2 a^2$ "vredi" $\theta = kT$, dok je element zapremine u \vec{k} -prostoru

$$a^3 k^2 dk = \left(\frac{\theta}{2x\Gamma}\right)^{3/2} \sqrt{2\sqrt{s}} ds$$

Primenjujući razvoj

$$\frac{1}{e^{\omega/\theta} - 1} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{n\omega}{\theta}} \quad (\text{IV.30})$$

prelazeći sa sume na integral i pomerajući granice integracije po k do beskonačnosti (što je sasvim opravdano u niskotemperaturskoj aproksimaciji), nalazimo

$$\bar{n} \approx c_0 = \left(\frac{\theta}{4\pi x\Gamma}\right)^{3/2} Z_{3/2}(\alpha) + \left(\frac{\theta}{4\pi x\Gamma}\right)^{5/2} Z_{5/2}(\alpha) \quad (\text{IV.31})$$

gde smo uveli Rimanovu (Riemann) zeta-funkciju.

$$Z_p(\alpha) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-na}}{n^p} \quad (\text{IV.32})$$

Niskotemperaturska aproksimacija važi u oblasti temperatura u kojoj je ispunjen uslov

$$\theta \ll 4\pi x\Gamma$$

Imajući na umu da većina eksperimentalnih podataka daje energiju tunelovanja reda veličine 100K, ovaj kriterijum je zadovoljen u oblasti temperatura

$$\theta \ll 1250x$$

što bitno zavisi od odnosa proton-proton interakcije i energije tunelovanja. Tako procenjujemo da je taj interval reda $\theta \ll 12,5K$ za slučaj $x=0,01$, dok uzima vrednost $\theta \ll 250K$ kada je $x=0,20$.

Gore opisana procedura je formalno analogna računanju harmonijskih efekata kod Hajzenbergovog (Heisenberg) feromagneta [TII, TIII] tako da se nismo mnogo na njoj zadržavali.

U navedenoj aproksimaciji je dovoljno koristiti približan izraz za $X(\vec{p})$

$$X(\vec{p}) = -6x + xp^2a^2$$

ukoliko se pojavljuje u sumama po \vec{p} uz $\bar{n}_{\vec{p}}$. Tada možemo iskoristiti rezultat [K 7]

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}}^{(o)} p^2 a^2 = 15\pi \left(\frac{\theta}{4\pi x\Gamma}\right)^{5/2} Z_{5/2}(\alpha) \quad (\text{IV.33})$$

Kod dvostrukih suma se doprinos reda T^3 još jednostavnije izračunava

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} \bar{n}_{\vec{p}_1}^{(o)} \bar{n}_{\vec{p}_2}^{(o)} X(\vec{p}_2 - \vec{p}_1) \approx \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2} \bar{n}_{\vec{p}_1} \bar{n}_{\vec{p}_2} X(0) = c_0^2 X(0)$$

Na ovaj način možemo izračunati

$$\begin{aligned} \langle S_{\vec{n}}^z \rangle^{(o)} &= \frac{1}{2} - 4x^2 - (1 + 52x^2)c_0 + 15x^2 \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}^{(o)} p^2 a^2 + \\ &+ 2(1 + 34x^2)c_0^2 = \frac{1}{2} - 4x^2 - (1 + 52x^2)Z_{3/2}(\alpha) \left(\frac{\Theta}{4\pi x \Gamma}\right)^{3/2} + \\ &+ [-1 + 52x^2 + 75\pi x^2] Z_{5/2}(\alpha) \left(\frac{\Theta}{4\pi x \Gamma}\right)^{5/2} + \\ &+ 2(1 + 34x^2) Z_{3/2}^2(\alpha) \left(\frac{\Theta}{4\pi x \Gamma}\right)^3 \end{aligned} \quad (\text{IV.34a})$$

$$\begin{aligned} \langle S_{\vec{n}}^x \rangle^{(o)} &= 2x - 4x c_0 - 4x c_0^2 - x \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}^{(o)} p^2 a^2 = \\ &= 2x - 4x Z_{3/2}(\alpha) \left(\frac{\Theta}{4\pi x}\right)^{3/2} - x [(1 + 15\pi) Z_{5/2}(\alpha) \left(\frac{\Theta}{4\pi x \Gamma}\right)^{5/2} - \\ &- 4 Z_{3/2}^2(\alpha) \left(\frac{\Theta}{4\pi x \Gamma}\right)^3] \end{aligned} \quad (\text{IV.34b})$$

Uočimo da za razliku od rezultata koji se dobijaju kod Hajzenbergovog feromagneta, ovde već u harmonijskoj aproksimaciji se javlja doprinos reda T^3 . Ovo nije rezultat lošeg metoda analize (jer ovaj metod u slučaju Heisenberg-ovog feromagneta ne daje takav rezultat [K16]), već posledica specifičnosti modela. Naime, kod Hajzenbergovog modela $\omega_0(\vec{k}) \rightarrow 0$ kad $k \rightarrow 0$, dok se ovde u sistemu javlja "gep" tako da ne dolazi do poništavanja efekata kinematičke i dinamičke interakcije u dатој апроксимацији.

Sledeći korak je da se izračuna doprinos celokupnog člana $\phi(\vec{k})$. U prvoj aproksimaciji ćemo to uraditi tako što ćemo vrednost izraza $\phi(\vec{k})$ izračunati u harmonijskoj aproksimaciji. Vodeći računa o tačnosti sa kojom radimo, nalazimo

$$\begin{aligned} \phi(\vec{k}) &= \frac{1}{2} I(0) - 8x\Gamma + 2x\Gamma \frac{k^2 a^2}{2} - 2x\Gamma A k^4 a^4 - c_0 [2I(0) + 104x\Gamma] + \\ &+ [\frac{I(0)}{18} - 27x\Gamma] \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}^{(o)} p^2 a^2 + \frac{k^2 a^2}{2} c_0 [\frac{I(0)}{3} + 42x\Gamma] \end{aligned} \quad (\text{IV.35})$$

Srednju vrednost bozonskog broja popunjenoosti izračunavamo po kanonskom ansamblu neinteragujućih bozonskih kvazi-čestica sa zakonom disperzije $\phi(\vec{k}) = \omega_1(\vec{k})$. Uvodimo oznake

$$\frac{\omega_1(k)}{\theta} = \alpha + \beta + \frac{k^2 a^2}{2\theta} [2x\Gamma + B(\theta)] - k^4 a^4 A \frac{2x\Gamma}{\theta} \quad (\text{IV.36a})$$

$$\beta = \frac{1}{\theta} \left\{ \left[\frac{I(0)}{18} - 27x\Gamma \right] \frac{1}{N} \sum_p n_p^{(o)} p^2 a^2 - c_0 [2I(0) + 104x\Gamma] \right\} \quad (\text{IV.36b})$$

$$B(\theta) = c_0 \left[\frac{I(0)}{3} + 42x\Gamma \right] \quad (\text{IV.36c})$$

Postupajući na isti način kao i ranije nalazimo

$$c_1 = \left[1 - \frac{3}{2} \cdot \frac{B(\theta)}{2x\Gamma} \right] Z_{3/2}(\alpha+\beta) \left(\frac{\theta}{4\pi x\Gamma} \right)^{3/2} + \frac{3\pi}{4} Z_{5/2}(\alpha+\beta) \left(\frac{\theta}{4\pi x\Gamma} \right)^{5/2} \quad (\text{IV.37})$$

U niskotemperaturskoj aproksimaciji možemo razviti Z-funkcije na sledeći način

$$Z_p(\alpha+\beta) \approx Z_p(\alpha) - \left[u \left(\frac{\theta}{4\pi x\Gamma} \right)^{1/2} + v \left(\frac{\theta}{4\pi x\Gamma} \right)^{3/2} \right] \quad (\text{IV.38})$$

gde su funkcije u i v date izrazima

$$u = -\frac{2I(0) + 104x\Gamma}{4\pi x\Gamma} Z_{3/2}(\alpha) \quad (\text{IV.39a})$$

$$v = -\frac{\frac{2}{3}I(0) + 327x\Gamma}{4x\Gamma} Z_{5/2}(\alpha) \quad (\text{IV.39b})$$

Na prvi pogled izgleda da su ove funkcije unele doprinos reda $1/x^2$ što bi bio veliki doprinos, ali ne treba zaboraviti da su one množene sa faktorom $Z_p \approx e^{-1/x^2}$ koji je uvek mnogo manji od 1. Posle sredjivanja nalazimo

$$c_1 = c_0 + \frac{I(0) + 52x\Gamma}{2\pi x\Gamma} Z_{3/2}(\alpha) \left(\frac{\theta}{4\pi x\Gamma} \right)^2 - \left[\frac{\frac{2}{3}I(0) + 327x\Gamma}{4x\Gamma} \times \right. \\ \left. \times Z_{1/2}(\alpha) Z_{5/2}(\alpha) - \frac{\frac{1}{2}I(0) + 66x\Gamma}{4x\Gamma} Z_{3/2}^2(\alpha) \right] \left(\frac{\theta}{4\pi x\Gamma} \right)^2 \quad (\text{IV.40})$$

Prema teoremi o spektralnoj intenzivnosti [TII, TIII] biće

$$\bar{n}^{(1)} = (1 + 2c_0)c_1 \approx c_1 + 2c_0^2 \quad (\text{IV.41})$$

gde smo za dobijanje konačnog rezultata iskoristili uslov da računamo sa tačnošću do T^3 . Kada ovo uvrstimo u (IV.26) nalazimo

$$\langle S_{\frac{z}{n}}^z \rangle^{(1)} = \langle S_{\frac{z}{n}}^z \rangle^{(0)} - (1 + 52x^2)(c_1 - c_0) \quad (\text{IV.42a})$$

$$\langle S_{\frac{x}{n}}^x \rangle^{(1)} = \langle S_{\frac{x}{n}}^x \rangle^{(0)} - 4x(c_1 - c_0) \quad (\text{IV.42b})$$

Analizirajući ovaj rezultat, uočavamo da je $\langle S^x \rangle$ u celoj oblasti proporcionalno x , dok $\langle S^z \rangle$ ima doprinos reda 1 kao i doprinos reda x^2 .

Analogni račun sa nižom tačnošću smo izveli ranije [K 7, K 8]. Ne samo što je tačnost bila niža, već su i vrednosti koeficijenata bile drugačije jer smo uzeli u obzir i doprinos niza članova koji realno ne figurišu u hamiltonijanu (vidi III glavu).

Mogući eksperimentalni test koji se odnosi na merenje veličina $\langle S^z \rangle$ i $\langle S^x \rangle$ je veoma teško izvesti na niskim temperaturama, jer je u takvim eksperimentalnim uslovima teško razdvojiti različite moguće doprinose. Moguća eksperimentalna provera se odnosi na merenje niskotemperaturskog ponašanja specifične toplote. Naime, u dатој aproksimaciji je

$$\begin{aligned} -\frac{\langle H \rangle}{N} = & [\frac{1}{2}I(0) - 8x\Gamma]c_1 - 2[\frac{1}{2}I(0) + 12x\Gamma]c_0^2 + \\ & + 2x\Gamma \frac{1}{N} \sum_p \bar{n}_p^{(0)} p^2 a^2 \end{aligned} \quad (\text{IV.43})$$

Polazeći od

$$C_v = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \theta} \quad (\text{IV.44})$$

možemo izračunati vodeće članove u niskotemperaturskom ponašanju specifične toplotе. Pokazuje se da postoje članovi reda $T^{1/2}$, T , $T^{3/2}$, T^2 itd. Treba primetiti da je Loles (Lawless) [L12] prvi registrovao članove $\approx T^{3/2}$ u niskotemperaturskom razvoju specifične toplotе ali ih je objasnio efektom domenskih zidova. Dalje razvijanje ove teorije je od posebnog interesa jer su feroelektrici veoma zapaženi kao dobri detektori infracrvenog zračenja

i zbog toga je izraz za njihovu specifičnu toplotu bitan.

Drugo poredjenje se može izvršiti sa ponašanjem Hajzenbergovog feromagneta. Kao što smo već napomenuli, analognu proceduru za slučaj Hajzenbergovog feromagneta [K16] reproducuje Dajsonov rezultat [D 6] koji je u odličnoj saglasnosti sa eksperimentima. Prema toj teoriji nema doprinosa reda T^3 u niskotemperaturskom razvoju magnetizacije, dok je prvi doprinos anharmoničkih članova reda T^4 . Iako je forma hamiltonijana napisanog preko Pauli-operatora (III.33) formalno identična (sem poslednjeg člana), fizički smisao samih koeficijenata je bitno drugačiji i odatle takva razlika u ponašanju.

Prelazimo na analizu pojave kinematičkih nivoa. Naime, zbog različitih komutacionih relacija Pauli-operatora i spinskih operatora, može doći do pojave novih energetskih nivoa, ili do drugih promena prouzrokovanih kinematičkom interakcijom. Ove pojave se eksplicitno manifestuju tek pri gore uvedenoj proceduri dekuplovanja GF. Već smo rekli da ćemo posmatrati samo temperaturski nezavisne kinematičke efekte, tako da jednačinu (IV.23) možemo aproksimirati sledećom jednačinom

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k})} \left\{ 1 - \frac{2\pi}{i} \cdot \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} [\omega - \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2)] \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \times \right. \\ \left. \times G^{(o)}(\vec{k}_1, \omega_1) G^{(o)}(\vec{k}_2, \omega_2) G^{(o)}(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega + \omega_2 - \omega_1) \right\} \quad (\text{IV.45})$$

gde je

$$G^{(o)}(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k})} = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k})} - i\pi\delta[\omega - \omega_0(\vec{k})] \right\} = \\ = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k})} + \frac{1}{2}\delta[\omega - \omega_0(\vec{k})] \quad (\text{IV.46})$$

Ovde smo iskoristili činjenicu da je reč o retardovanoj GF. U prvom članu sa leve strane se podrazumeva glavna vrednost pri izračunavanju integrala.

Sada (IV.46) možemo napisati na sledeći način

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k})} \times$$

$$\times \left\{ 1 - \frac{2\pi}{i} \cdot \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} [\omega - \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2)] I \right\} \quad (\text{IV.47})$$

Integral I se javlja uvek pri radu sa kinematičkim nivoima u linearnoj aproksimaciji [T11] ali se obično ne objašnjava njegovo konkretno izračunavanje. Zato ćemo mu ovde posvetiti nešto više pažnje

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 G^{(o)}(\vec{k}_1, \omega_1) G^{(o)}(\vec{k}_2, \omega_2) \times \\ \times G^{(o)}(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega + \omega_2 - \omega_1) = \sum_{i=1}^8 I_i \quad (\text{IV.48})$$

Izračunajmo nekoliko članova sume (IV.48)

$$I_1 = \left(\frac{1}{2}\right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \delta[\omega_1 - \omega_0(\vec{k}_1)] \delta[\omega_2 - \omega_0(\vec{k}_2)] \delta[\omega + \omega_2 - \omega_1 - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)] = \\ = \frac{1}{8} \delta[\omega + \omega_0(\vec{k}_2) - \omega_0(\vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)] \quad (\text{IV.49a})$$

$$I_2 = \frac{i}{2\pi} \left(\frac{1}{2}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \delta[\omega_1 - \omega_0(\vec{k}_1)] \times \\ \times \delta[\omega_2 - \omega_0(\vec{k}_2)] \frac{1}{\omega + \omega_2 - \omega_1 - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} = \\ = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\omega + \omega_0(\vec{k}_2) - \omega_0(\vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} \quad (\text{IV.49b})$$

$$I_3 = \frac{i}{2\pi} \left(\frac{1}{2}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \delta[\omega_1 - \omega_0(\vec{k}_1)] \delta[\omega + \omega_2 - \omega_1 - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)] \times$$

$$\times \frac{1}{\omega_2 - \omega_0(\vec{k}_2)} = - \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\omega + \omega_0(\vec{k}_2) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k}_1)} \quad (\text{IV.49c})$$

$$I_4 = \frac{i}{2\pi} \left(\frac{1}{2}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \delta[\omega - \omega_0(\vec{k}_2)] \delta[\omega + \omega_2 - \omega_1 - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)] \frac{1}{\omega_1 - \omega_0(\vec{k}_1)} =$$

$$= \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\omega + \omega_0(\vec{k}_2) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k}_1)} \quad (\text{IV.49d})$$

Odatde sledi da je $I_3 + I_4 = 0$. Svi ostali integrali koji se pojavljaju u sumi su jednaki nuli. Naprimer

$$\begin{aligned} I_5 &= \frac{1}{2} \left(\frac{i}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \cdot \frac{1}{\omega_2 - \omega_0(\vec{k}_2)} \\ &\times \frac{1}{\omega - \omega_1 + \omega_2 - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} \delta[\omega_1 - \omega_0(\vec{k}_1)] = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{i}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \cdot \frac{1}{\omega_2 - \omega_0(\vec{k}_2)} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k}_1) + \omega_2 - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{i}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1) + \omega_0(\vec{k}_2)} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{\omega_2 - \omega_0(\vec{k}_2)} - \right. \\ &\left. - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{\omega_2 + \omega - \omega_0(\vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} \right] \equiv 0 \quad (\text{IV.50}) \end{aligned}$$

Konačni rezultat za I postaje

$$\begin{aligned} I &= \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\omega + \omega_0(\vec{k}_2) - \omega_0(\vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} + \\ &+ \frac{1}{8} \delta[\omega + \omega_0(\vec{k}_2) - \omega_0(\vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)] \quad (\text{IV.51}) \end{aligned}$$

Ako ovaj izraz uvrstimo u (IV.47), dobijamo jednačinu koja opisuje uticaj kinematičkih efekata. Polovi dobijene GF predstavljaju kinematičke energetske nivoe u temperaturski nezavisnoj aproksimaciji.

$$\begin{aligned} G(\vec{k}, \omega) &= \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k})} \times \\ &\times \left\{ 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \frac{\omega - \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_2, \vec{k}_1)}{\omega + \omega_0(\vec{k}_2) - \omega_0(\vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} - \frac{2\pi \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{N^2}}{i} \times \right. \end{aligned}$$

$$\times \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} [\omega - \phi_2(\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2)] \delta[\omega + \omega_0(\vec{k}_2) - \omega_0(\vec{k}_1) - \omega_0(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)] \quad (\text{IV.52})$$

Veoma je bitno uočiti da su polovi kompleksni, što znači da kvazičestice imaju konačno vreme života. Drugim rečima, ovaj postupak dekuplovanja već u linearnoj aproksimaciji može da opiše i efekte prigušenja.

Sume koje se javljaju u ovom izrazu su veoma složene, i moramo pribegći daljim aproksimacijama da bismo procenili doprinos kinematičkih nivoa.

Najgrublja aproksimacija je svakako da se u svim izrazima zadrže samo članovi reda $I(0)$. Ovo daje

$$G(\vec{k}, \omega) \equiv G_o^k(\omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \frac{1}{2}I(0)} \left\{ 1 - \frac{1}{2} - \frac{2\pi}{4} \left[\omega - \frac{1}{2}I(0) \right] \times \right. \\ \left. \times \delta\left[\omega - \frac{1}{2}I(0)\right] + \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} I(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \right\} = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\omega - \frac{1}{2}I(0)} \quad (\text{IV.53})$$

U ovoj aproksimaciji vreme života je beskonačno i radi se o sistemu neinteragujućih kvazičestica sa zakonom disperzije $\omega = \frac{1}{2}I(0)$. Bitno je uočiti faktor $1/2$ ispred izraza za GF. Ako ovaj rezultat uporedimo sa rezultatom harmonijske aproksimacije u kojoj su takodje zadržani samo članovi reda $I(0)$, dobijamo neobičnu sliku

$$c_o^s = \bar{n}^s = \left[\exp \frac{I(0)}{2\theta} - 1 \right]^{-1} \quad c_o^k = \bar{n}^k = \frac{1}{2} \left[\exp \frac{I(0)}{2\theta} - 1 \right]^{-1} \quad (\text{IV.54})$$

Prema tome, vrednost c_o se pod uticajem kinematičkih efekata smanjuje za faktor 2. Imajući u vidu kako u ovoj aproksimaciji glase izrazi za $\langle S_{\vec{n}}^z \rangle$ i $\langle S_{\vec{n}}^x \rangle$

$$\langle S_{\vec{n}}^z \rangle = \frac{1}{2} - 4x^2 - \bar{n} \left[1 + \frac{8x^2 d^2 + d - 1}{(d - 1)^2} \right] \quad (\text{IV.55a})$$

$$\langle S_{\vec{n}}^x \rangle = 2x - [4x + X(0)] \bar{n} = 2x \left[1 + \frac{2}{d - 1} \bar{n} \right] \quad (\text{IV.55b})$$

možemo diskutovati sledeći izraz

$$\frac{\langle S_{\vec{n}}^z \rangle^k - \langle S_{\vec{n}}^z \rangle^s}{\langle S_{\vec{n}}^z \rangle^s} \approx [1 + 4x^2 \frac{d^2 + d - 1}{(d - 1)^2}] \frac{e^{-\frac{I(0)}{2\theta}}}{\langle S_{\vec{n}}^z \rangle_{T=0}} \quad (\text{IV.56})$$

Prema tome, $\langle S^z \rangle^k$ i $\langle S^x \rangle^k$ se poklapaju sa $\langle S^z \rangle^s$ i $\langle S^x \rangle^s$ na $T = 0K$, a sa porastom temperature, njihova razlika eksponencijalno raste. Ovo se bolje slaže sa eksperimentalnim podacima o skoro horizontalnom hodu krive polarizacije u većem delu feroelektrične faze.

Kao finiju aproksimaciju možemo posmatrati i uticaj članova reda $xI(0) = \Gamma$. Prethodni rezultat ukazuje da je i u tom slučaju vreme života beskonačno s obzirom da ω_0 nema članove ovog reda. Stoga pol GF tražimo u obliku $\tilde{\omega} = \frac{1}{2}I(0) + a\Gamma$.

Zadržavajući veličine reda Γ nalazimo

$$G^k(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k})} \cdot \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{M(\vec{k})}{[\omega - \frac{1}{2}I(0)]^2} \right\} \quad (\text{IV.57})$$

gde je

$$\begin{aligned} M(\vec{k}) = & \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} I(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) [4\Gamma + \Gamma X(0) + \\ & + \Gamma X(\vec{k}_1) - \Gamma X(\vec{k}_2) - \Gamma X(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)] \end{aligned} \quad (\text{IV.58})$$

Smatrajući doprinos kinematičkih nivoa malim, možemo pisati

$$\begin{aligned} G^k(\vec{k}, \omega) = & \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_0(\vec{k})} \times \\ & \times \frac{[\omega - \frac{1}{2}I(0)]^2}{[\omega - \frac{1}{2}I(0) - \sqrt{M(\vec{k})}] [\omega - \frac{1}{2}I(0) + \sqrt{M(\vec{k})}]} \end{aligned} \quad (\text{IV.59})$$

Striktno zadržavajući samo članove reda Γ , ovaj izraz se pojednostavljuje

$$G^k(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{4} \left[\frac{1}{\omega - \frac{1}{2}I(0) - \sqrt{M(\vec{k})}} + \frac{1}{\omega - \frac{1}{2}I(0) + \sqrt{M(\vec{k})}} \right] \quad (\text{IV.60})$$

Vidimo da su polovi GF, tj. energija kvazičestica pomereni u

odnosu na rezultat dobijen bez uračunavanja kinematičkih nivoa. Popravka je reda Γ i data je sa

$$\sqrt{M}(\vec{k}) = \Gamma \left[\frac{2}{d(d-1)} \sum_{i=1}^d \cos k_i a \right]^{\nu^2} \quad (\text{IV.61})$$

Vidimo da tokom integracije po Briluenovoj (Brillouin) zoni samo polovina tačaka daje doprinos energiji, dok drugi deo Briluenove zone daje doprinos vremenu života, tačnije, prouzrokuje da kvazičestice dobiju konačno vreme života. Ovo je veoma bitno sa kvalitativnog aspekta, jer se amortizovanje teško realizuje u linearnoj teoriji, ali kvantitativno efekt je veoma mali.

Ako se u ω_0 uzmu u obzir članovi reda $x\Gamma$, javlja se GF sa tri pola pri čemu jedan od polova odgovara energiji u harmonijskoj aproksimaciji bez prisustva kinematičkih nivoa, a druga dva su u odnosu na njega pomereni za $\pm\sqrt{M}$. Korektni račun sa ovim doprinosima ne bi bitno izmenio kvalitativnu sliku koju smo upravo formirali.

Rezimirajmo rezultat ove glave. Reprezentovanje Pauli-operatora Boze-operatorima je veoma jednostavno u slučaju niskih temperatura i može da reprodukuje kvalitativno ponašanje sistema, dok su kvantitativna odstupanja pre svega posledica kratkoće reda po x . Uticaj kinematičkih nivoa se manifestuje tako da kriva polarizacije u oblasti niskih temperatura zadržava konstantnu vrednost u većoj temperaturskoj oblasti. Čak i na niskim temperaturama pobudjenja imaju konačno vreme života. Ono je proporcionalno Γ iz čega zaključujemo da je reč o čisto kvantno-mehaničkom efektu.

V GLAVA

ISPITIVANJE OBLASTI FAZNOG PRELAZA

U ovoj glavi ćemo ispitati oblast temperaturna bliskih temperaturi prelaza T_c , pri čemu ćemo se prelazu približavati iz oblasti nižih temperatura, dakle iz feroelektrične faze. U ovoj oblasti je broj popunjenošti bozonskih kvazičestica kojima reprezentujemo Pauli-operatore veliki, tako da se pri promeni ATR moramo poslužiti celim izrazom (P 3). Hamiltonijan (III.33) ćemo prvo analizirati metodom GF u aproksimaciji Tjablikova (Таблицов) [T.II, T.III]. S obzirom da se ovaj hamiltonijan razlikuje od polaznog hamiltonijana (I. 6), očekujemo da ćemo dobiti rezultate koji će se razlikovati od rezultata dobijenih ovim metodom opisanih u II glavi. Ovi rezultati će predstavljati nultu aproksimaciju za ispitivanje uticaja kinematičkih nivoa na fazni prelaz. Ujedno, pokušaćemo da samu teoriju kinematičkih nivoa u blizini faznog prelaza rigoroznije zasnujemo [T12]. Pokazaćemo da se dobijeni rezultati mogu proširiti i na celokupni hamiltonijan koji odgovara aproksimaciji do x^2 , dakle na hamiltonijan dat izrazom (III.27).

Da se ne bismo stalno pozivali na prethodne glave, preprišimo jednačinu kretanja GF Pauli-operatora $F_{\vec{F}\vec{g}}(t)$ (IV.6a), pri čemu nećemo svuda pisati eksplicitnu vremensku zavisnost

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} F_{\vec{F}\vec{g}} &= i \delta(t) \delta_{\vec{F}\vec{g}} (1 - 2\bar{N}) + \Delta F_{\vec{F}\vec{g}} + \\ &+ \Gamma \sum_m X_{\vec{F}\vec{m}} F_{\vec{m}\vec{g}} - 2\Gamma \sum_m X_{\vec{F}\vec{m}} R_{\vec{F}\vec{m}\vec{g}} - 2 \sum_m (1 - \delta_{\vec{F}, \vec{m}}) A_{\vec{F}\vec{m}} R_{\vec{m}\vec{m}\vec{F}\vec{g}} - \\ &- \sum_{\vec{m}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{F}, \vec{m}}) (1 - \delta_{\vec{F}, \vec{l}}) (1 - \delta_{\vec{m}, \vec{l}}) C_{\vec{F}\vec{m}\vec{l}} R_{\vec{m}\vec{l}\vec{F}\vec{g}} - \\ &- \sum_{\vec{n}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{n}, \vec{F}}) (1 - \delta_{\vec{n}, \vec{l}}) (1 - \delta_{\vec{n}, \vec{l}}) C_{\vec{n}\vec{F}\vec{l}} R_{\vec{n}\vec{l}\vec{F}\vec{g}} \end{aligned} \quad (V.1)$$

Tjablikov [TIII] je predložio sledeće dekuplovanje viših GF

$$\begin{aligned} R_{\vec{m}\vec{m}\vec{m}\vec{g}}(t) &= \langle\langle P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{m}}^- | P_{\vec{g}}^+ \rangle\rangle \approx \\ &\approx \langle P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}^- \rangle \langle\langle P_{\vec{m}}^- | P_{\vec{g}}^+ \rangle\rangle = \bar{N} F_{\vec{m}\vec{g}}(t) \end{aligned} \quad (V.2)$$

Srednja vrednost sa desne strane se izračunava sa kanonskim ansamblom koji je opisan celim hamiltonijanom (III.33). Sve ostale više GF koje sadrže četiri Pauli-operatora smatraju se manjim i zanemaruju u poređenju sa (V.2). U skladu sa ovom aproksimacijom, u formulama za $\langle S_{\vec{n}}^z \rangle$ i $\langle S_{\vec{n}}^x \rangle$ zanemarujuemo izraze tipa $N \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \rangle$ u poređenju sa \bar{N}^2 . Na taj način, polazeći od (V.1) i (III.35a,b) nalazimo

$$\begin{aligned} i \frac{dF_{\vec{k}\vec{g}}}{dt} = & i \delta(t) \delta_{\vec{k}, \vec{g}} (1 - 2\bar{N}) + [\Delta - 2\bar{N} \sum_{\vec{m}} (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{m}}) A_{\vec{k}\vec{m}}] F_{\vec{k}\vec{g}} + \\ & + (1 - 2\bar{N}) \Gamma \sum_{\vec{m}} X_{\vec{k}\vec{m}} F_{\vec{m}\vec{g}} - \bar{N} \sum_{\vec{m}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{m}}) (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{l}}) \times \\ & \times (1 - \delta_{\vec{m}, \vec{l}}) C_{\vec{k}\vec{m}\vec{l}} F_{\vec{l}\vec{g}} \end{aligned} \quad (V.3)$$

$$\begin{aligned} \langle S_{\vec{n}}^z \rangle = & \frac{1}{2} - 4x^2 + [2xX(0) + 8x^2 - \frac{1}{2}X(0)^2 - 1]\bar{N} + [2x - \frac{1}{2}X(0) - \\ & - 2X(0)\bar{N}] \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \rangle - 4xX(0)\bar{N}^2 \end{aligned} \quad (V.4a)$$

$$\begin{aligned} \langle S_{\vec{n}}^x \rangle = & 2x - [2x + X(0)]\bar{N} + \\ & + \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \rangle + 2X(0)\bar{N}^2 \end{aligned} \quad (V.4b)$$

Uvodimo Furije-transform GF $F_{\vec{k}\vec{g}}(t)$ po vremenu i prostornim koordinatama

$$F_{\vec{k}-\vec{g}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{k}-\vec{g})} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} F(\vec{k}, \omega) \quad (V.5)$$

Nakon ovoga, rešenje (V.3) glasi

$$F(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1 - 2\bar{N}}{\omega - \omega_T(\vec{k})} \quad (V.6)$$

Energija elementarnih ekscitacija u aproksimaciji Tjablikova data je izrazom

$$\begin{aligned} \omega_T(\vec{k}) = & \Delta - 2\bar{N} \sum_{\vec{n}} (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{n}}) A_{\vec{k}\vec{n}} + (1 - 2\bar{N}) \Gamma X(\vec{k}) - \\ & - \bar{N} \sum_{\vec{m}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{m}}) (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{l}}) (1 - \delta_{\vec{m}, \vec{l}}) C_{\vec{k}\vec{m}\vec{l}} e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{f})} \end{aligned} \quad (V.7)$$

što se, koristeći već izračunate sume (IV.15) može napisati kao

$$\omega_T(\vec{k}) = \omega_0(\vec{k}) - \bar{N} [I(0) + 2\Gamma X(0) - \\ - 8x\Gamma + I(0)X(0)^2 + \frac{1}{2}I(0)X(0)X(\vec{k})] \quad (V.8)$$

ili još kompaktnije

$$\omega_T(\vec{k}) = I(0) [\omega'_0(\vec{k}) - \bar{N}\lambda(\vec{k})] \quad (V.9a)$$

$$\omega'_0(\vec{k}) = \frac{\omega_0(\vec{k})}{I(0)} = \frac{1}{2} - 4x^2 \frac{1 + d\gamma(\vec{k})}{d - 1} \quad (V.9b)$$

$$\lambda(\vec{k}) = 1 + 8x^2 \frac{3d - 1 + d^2\gamma(\vec{k})}{(d - 1)^2} \quad (V.9c)$$

Uvodeći oznaku

$$\bar{N}_{\vec{k}} = \langle P_{\vec{k}}^+ P_{\vec{k}}^- \rangle$$

nalazimo za srednje vrednosti komponenti spina

$$\langle S_{\vec{n}}^z \rangle = 16x^2 \frac{d}{d - 1} \bar{N}^2 - [1 + 8x^2 \frac{d^2 + d - 1}{(d - 1)^2}] \bar{N} + \\ + \frac{1}{2} - 4x^2 - 8x^2 d \cdot \frac{2d - 1}{(d - 1)^2} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \gamma(\vec{p}) \bar{N}_{\vec{p}} - \\ - 32x^2 \frac{d^2}{(d - 1)^2} \bar{N} \times \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \gamma(\vec{p}) \bar{N}_{\vec{p}} \quad (V.10a)$$

$$\langle S_{\vec{n}}^x \rangle = 2x \left[1 + \frac{2}{d - 1} \bar{N} - 4 \frac{d}{d - 1} \bar{N}^2 + \right. \\ \left. + \frac{2d}{d - 1} \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \bar{N}_{\vec{p}} \gamma(\vec{p}) \right] \quad (V.10b)$$

Polazeći od jednačine (V.6) i koristeći teoremu o spektralnoj intenzivnosti |TII, TIII| dobijamo jednačinu

$$\bar{N}_{\vec{k}} = \frac{1 - 2\bar{N}}{e^{\frac{\omega_T(\vec{k})/\theta}{k}} - 1}$$

koja se može dalje koristiti na različite načine. Napisaćemo

dva oblika koji su pogodni za određivanje \bar{N} .

$$\frac{\bar{N}}{1 - 2\bar{N}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [e^{\omega_T(\vec{k})/\theta} - 1]^{-1} \quad (\text{V.11a})$$

$$1 - 2\bar{N} = \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \coth \frac{\omega_T(\vec{k})}{2\theta} \right]^{-1} \quad (\text{V.11b})$$

Opšti oblik jednačine kada se izvrši prelazak na kontinuum, glasi

$$\frac{\bar{N}}{1 - 2\bar{N}} = \left(\frac{a}{2\pi} \right)^d \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \dots \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dq_1 \dots dq_d}{e^{\omega_T(\vec{k})/\theta} - 1} \quad (\text{V.12})$$

Reč je o transcedentnoj samousaglašenoj jednačini za određivanje \bar{N} , pri čemu rešenje ima fizičkog smisla samo u intervalu $[0,1]$. Ovu jednačinu bismo mogli rešavati numerički, no integrali su bar dvostruki a opštег metoda rešavanja nema. (Napomenimo da je P. Pfeti u svojoj tezi izvodio numeričku integraciju pri rešavanju slične samousaglašene jednačine i pokazalo se da uloženi trud i utrošeno računsko vreme nisu u srazmeri sa popravkama koje se dobijaju u odnosu na jednostavnije približne tretmane.)

Pre nego pristupimo približnom rešavanju jednačine (V.11) zanimljivo bi bilo uporediti dobijene rezultate sa drugim rezultatima dobijenim metodom funkcija Greena [K12, S19, R.1] u aproksimaciji haotičnih faza. S obzirom da većina autora zadržava u hamiltonijanu i članove proporcionalne $P_n^+ P_m^+$ jasno je da se energija dobija kao kvadratni koren iz određenog izraza. Naš hamiltonijan je oslobođen ovih članova, tačnije oni ne daju doprinos u aproksimaciji do $x^2 I(0)$. Da bismo ipak izvršili poređenje, u izraz za energiju elementarnih ekscitacija dobijen u RPA (II. 9) uključujemo naše izraze za $\langle S_n^z \rangle$ (V.4a) i $\langle S_n^x \rangle$ (V.4b). Zadržavajući samo članove do reda x^2 i linearne po \bar{N} , nalazimo novi izraz za energiju elementarnih ekscitacija

$$\frac{\omega^2}{I(0)^2} = \frac{1}{4} - 4x^2 \gamma(\vec{k}) - \bar{N} \left\{ 1 + 8x^2 \frac{d^2 + d - 1}{(d - 1)^2} + 4x^2 \gamma(\vec{k}) \frac{d + 1}{d - 1} - \right.$$

$$= 2x \left[\frac{2d}{d-1} - \gamma(\vec{k}) \right] \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} X(\vec{p}) \bar{N}_{\vec{p}}$$

Ako bismo dalje, razvili koren po binomnoj formuli, i uporedili sa izrazom (V. 9) možemo uočiti da naš izraz za energiju ima niz članova koji zavise od dimenzije sistema, koji se najavljaju u gore dobijenoj formuli. Možemo zaključiti, da se procedurom koju mi koristimo, u linearном dekuplovanju uključuje mnogo veći doprinos viših članova hamiltonijana nego što je to uobičajeno. Mi ćemo ovu jednačinu rešavati u aproksimacijama koje se sastoje u tome da se rezultat integracije u \vec{k} -prostoru svih funkcija od \vec{k} zameni vrednošću date funkcije u određenoj tačci Briluenove zone. Kvalitet aproksimacije zavisi naravno od izbora tačke u kojoj posmatramo vrednosti funkcije. Mi ćemo posmatrati dva slučaja, koji je analogan aproksimaciji molekularnog polja kod jednostavnijih sistema, zanemarićemo svaku zavisnost od \vec{k} , tj. sve funkcije od \vec{k} ćemo smatrati identički jednakim nuli. Ovo ustvari znači da diskutujemo slučaj kada je $k_i = \pi/2a$ za $i = 1, \dots, d$. U drugom slučaju ćemo posmatrati vrednost svih funkcija u centru Briluenove zone, tj. u tačci $k_i = 0$, $i = 1, \dots, d$. Drugim rečima, mi smo uzeli nulti član iz aproksimacije efektivne mase. Opravdanje za ovakav postupak uopšte je da ćemo čak i u ovako jednostavnim slučajevima biti suočeni sa nizom računskih problema kod rešavanja jednačine.

U ovim graničnim slučajevima se formule pojednostavljaju i mi ih navodimo za oba slučaja:

a) $k_i = \frac{\pi}{2a}$

$$\omega_0' = \frac{1}{2} - 4x^2 \frac{1}{d-1} \quad \lambda = 1 + 8x^2 \frac{3d-1}{(d-1)^2}$$

$$\langle S_n^z \rangle = \frac{1}{2} - 4x^2 - [1 + 8x^2 \frac{d^2 + d - 1}{(d-1)^2}] \bar{N} + 16x^2 \frac{d}{d-1} \bar{N}^2$$

$$\langle S_n^x \rangle = 2x(1 + \frac{1}{d-1} \bar{N} - 4 \frac{d}{d-1} \bar{N}^2)$$

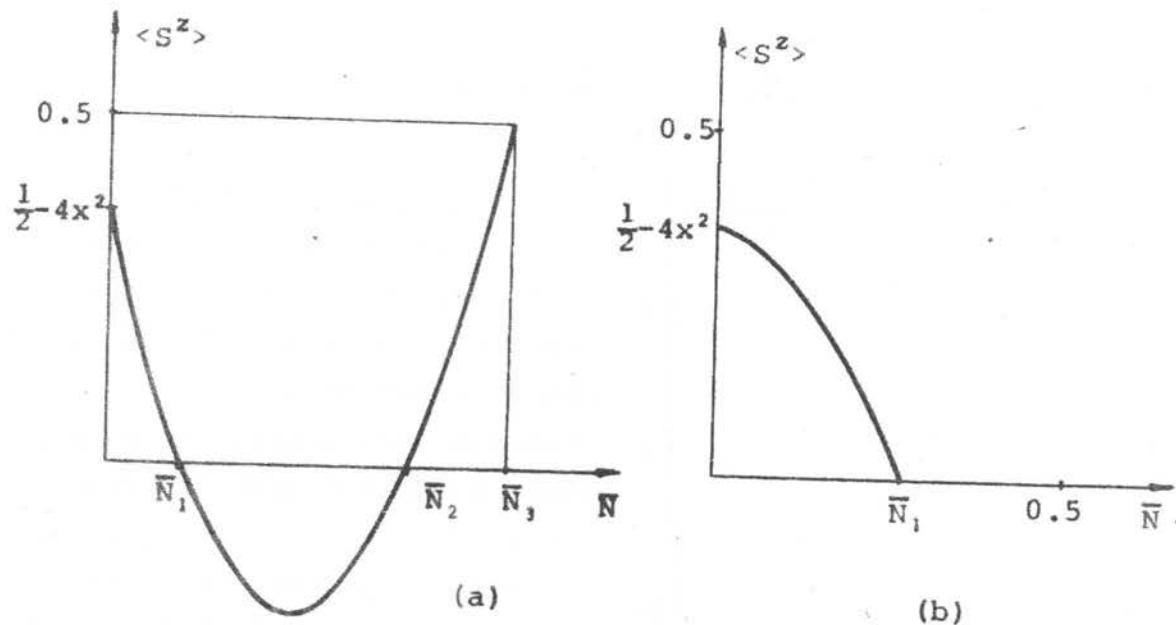
b) $k_i = 0$

$$\omega_0' = \frac{1}{2} - 4x^2 \frac{d+1}{d-1} \quad \lambda = 1 + 8x^2 \frac{d^2 + 3d - 1}{(d-1)^2}$$

$$\langle S_{\bar{N}}^z \rangle = \frac{1}{2} - 4x^2 - [1 + 8x^2 \frac{3d^2 - 1}{(d-1)^2}] \bar{N} - 16x^2 \frac{d(d+1)}{(d-1)^2} \bar{N}^2$$

$$\langle S_{\bar{N}}^x \rangle = 2x(1 - 2\bar{N} - 4 \frac{d}{d-1} \bar{N}^2)$$

Vec smo naglasili da se \bar{N} kreće u intervalu od 0 do 1. Bližu informaciju možemo dobiti posmatrajući kako se $\langle S_{\bar{N}}^z \rangle$ ponaša u funkciji \bar{N} . U oba slučaja radi se o paraboli. Primjenjujući Vietove (Viete) obrasce na jednačinu $\langle S_{\bar{N}}^z \rangle = 0$, uočavamo ponašanje prikazano na slici V.1.



Sl.V.1. $\langle S_{\bar{N}}^z \rangle$ u funkciji \bar{N} . a) za $k_i = \frac{\pi}{2a}$, b) za $k_i = 0$.

a) $k_i = \pi/2a$. Parabola ima otvor naviše, a oba korena jednačine su pozitivna. U principu postoje dve oblasti vrednosti za \bar{N} od interesa: $[0, \bar{N}_1]$ i $[\bar{N}_2, \bar{N}_3]$. Vrednost \bar{N}_3 je određena uslovom $\langle S_{\bar{N}}^z \rangle < 1/2$. Proverom se lako utvrđuje da za sve slučajevе od interesa važi $\langle S_{\bar{N}}^z \rangle < 0$ u tački $\bar{N} = 1$, što znači da je dovoljno da se jednačina (V.12) rešava u intervalu $[0, \bar{N}_1]$.

b) $k_i = 0$. U ovom slučaju parabola je okrenuta temenom naviše i postoji samo jedan pozitivan koren \bar{N}_1 , tako da je u intervalu od interesa $[0, \bar{N}_1]$ uvek ispunjen uslov $\langle S_{\bar{N}}^z \rangle < 1/2$.

Nećemo navoditi eksplicitne vrednosti za \bar{N}_1 , ali se lako vidi da je u oba slučaja $\bar{N}_1 < 1/2$. Nama će biti pogodnije

da samousaglašenu jednačinu rešavamo u intervalu $[0, 1/2]$. Ova diskusija, iako elementarna, je u velikoj meri pojednostavila račun, smanjivši interval na polovinu.

U cilju dalje kvalitativne analize, razmotrićemo detaljnije transcendentnu jednačinu (V.11) koja sada dobija jednostavniji oblik

$$\bar{N} = \left[e^{\frac{I(0)}{\theta} (\omega'_0 - \bar{N}\lambda)} + 1 \right]^{-1}$$

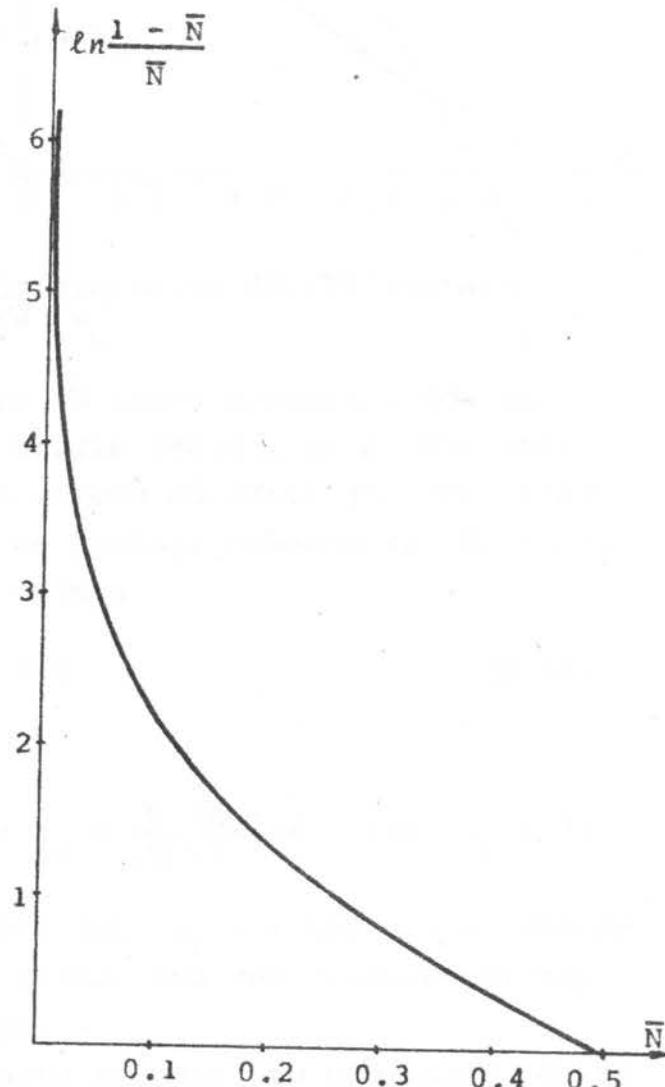
pri čemu se podrazumevaju vrednosti funkcija od \vec{k} izračunate u gore izabranim tačkama. Jednačinu možemo prepisati na način koji je pogodan za grafičko rešavanje

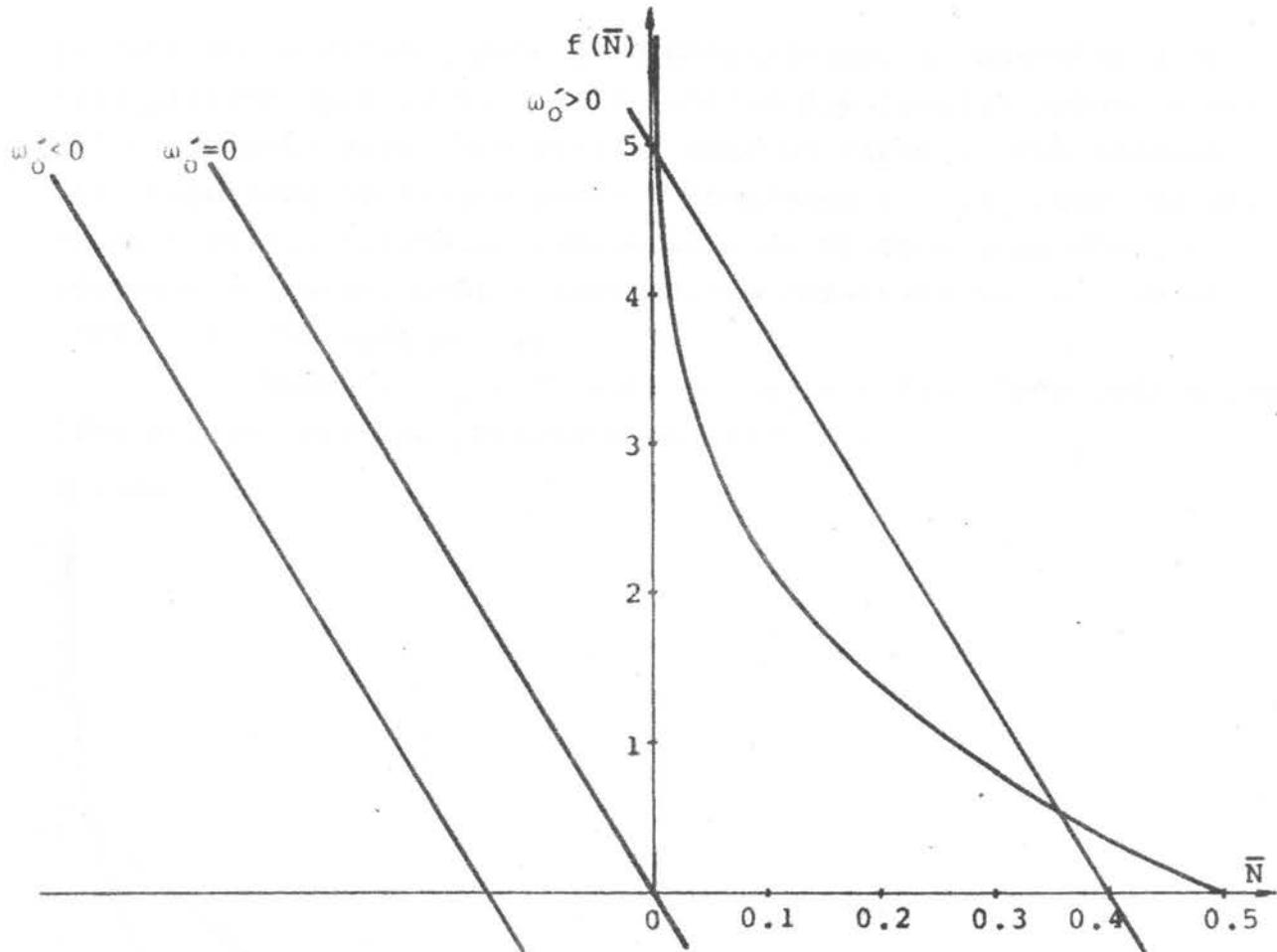
$$\ln \frac{1 - \bar{N}}{\bar{N}} = \frac{I(0)}{\theta} (\omega'_0 - \lambda \bar{N}) \quad (\text{V.13})$$

Kriva sa leve strane jednačine prikazana je na slici V.2. Za $\bar{N} \rightarrow 0$, ona teži beskonačnosti, dok za $\bar{N} = 0.5$ ona ima vrednost nula. (Zbog toga je ova vrednost izabrana za početak intervala.)

Desna strana jednačine predstavlja pravu čiji položaj zavisi od parametara ω'_0 , λ i θ . Prava preseca \bar{N} -osu u tački $\bar{N} = \omega'_0 / \lambda$, a pri zadatim ω'_0 i λ , njen nagib zavisi od temperaturе. Kako su λ i θ uvek pozitivni, tangens pravca je uvek negativan. Da li će prava preseći krivu, tj. da li uopšte postoji rešenje jednačine (vrednost za \bar{N}), zavisi od znaka parametra ω'_0 .

Sl.V.2. $\ln \frac{1 - \bar{N}}{\bar{N}}$ u funkciji \bar{N}





Sl.V.3. Grafičko rešavanje jednačine (V.13) zavisno od znaka parametra w_0' .

Za $w_0' < 0$ ne postoji rešenje za \bar{N} (nema preseka), dok za $w_0' > 0$, presek može postojati. Drugim rečima, to je potreban, ali ne i dovoljan uslov. Odatle možemo odrediti graničnu vrednost parametra x_c iznad koje ne postoji rešenje za \bar{N} , znači nema uredjenosti u sistemu. Iz uslova

$$w_0' > 0 \quad (\text{V.14})$$

sledi

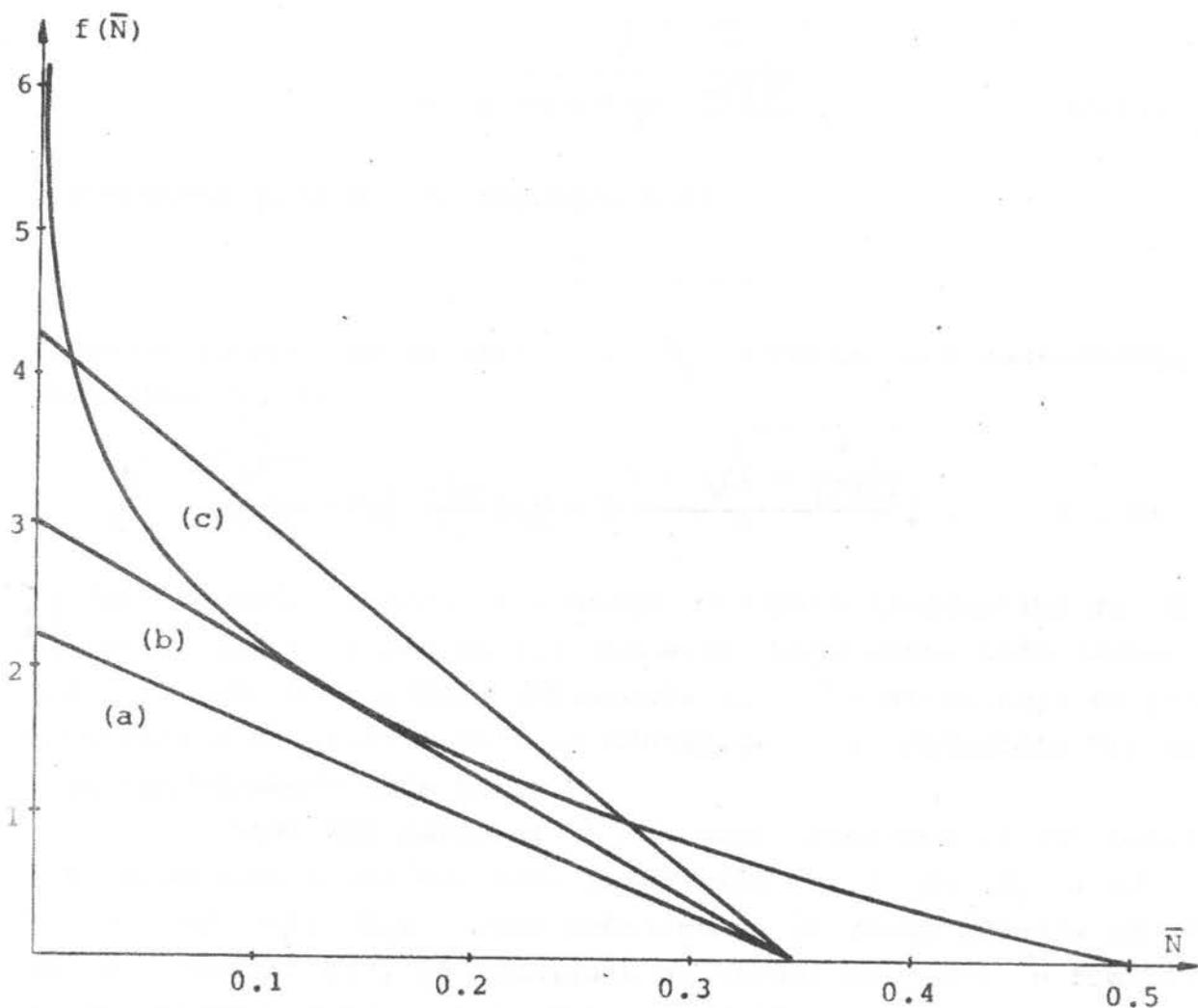
$$x_c = \sqrt{\frac{d-1}{8}} \quad (\text{za } \vec{k}_i = \pi/2a); \quad x_c = \frac{1}{\sqrt{8}} \sqrt{\frac{d-1}{d+1}} \quad (\text{za } \vec{k}_i = 0)$$

Prvo rešenje nema fizičkog smisla jer $x_c \rightarrow \infty$ kad $d \rightarrow \infty$. Što se tiče slučaja $\vec{k} = 0$, ovaj isti primer smo već diskutovali kod niskotemperaturske aproksimacije.

Činjenica da x_c raste sa porastom dimenzije d se slaže kvalitativno sa predviđanjima drugih pristupa, a moguće

je dati dosta dobro jednostavno objašnjenje. Sa porastom dimenzije sistema (pri istoj jačini interakcije izmedju parova suseda) raste broj najbližih suseda, tako da raste ukupna interakcija koja teži da sistem održi u uredjenom stanju. Stoga je potrebno povećati parametar tunelovanja da bi se sistem doveo u neuredjeno stanje. Loši kvantitativni rezultati se mogu objasniti kratkoćom reda po x .

Kada je $\omega'_0 > 0$, uvek je $\omega'_0/\lambda < 0.5$. Tada možemo razlikovati tri slučaja prikazana na slici V.4



Sl.V.4. Grafičko rešavanje jednačine (V.13) za $\omega'_0 > 0$ u zavisnosti od parametra θ

Za velike vrednosti θ (Sl.V.4a), nema preseka dve krive, dakle nema rešenja za \bar{N} na visokim temperaturama. Za određenu vrednost temperature θ_c prava tangira krivu i postoji samo jedno rešenje \bar{N}_c . Ispod θ_c postoje dva preseka, tj. dve vrednosti

\bar{N} koje se sa porastom temperature sve više razlikuju. Parametar uredjenosti se menja u funkciji temperature tako što $\langle S^z \rangle$ skače od nule na neku konačnu vrednost na temperaturi T_c . Reč je prema tome, o faznom prelazu I vrste. Kada se dobijena rešenja za \bar{N} uvrste u jednačinu za $\langle S^z \rangle$, uočavamo da samo jedna grana rešenja ima fizičkog smisla, tj. opisuje uobičajeno ponašanje spontane polarizacije (porast sa snižavanjem temperature).

Izjednačavajući vrednost izvoda leve i desne strane u tački \bar{N}_c , nalazimo da je

$$\bar{N}_c = \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{4\theta_c}{\lambda I(0)}}}{2} \quad (\text{V.15})$$

što postoji samo ako je ispunjen uslov

$$\frac{\lambda}{4} > \theta/I(0)$$

Temperaturu prelaza nalazimo ako \bar{N}_c uvrstimo u transcedentnu jednačinu (V.13)

$$\sqrt{1 - \frac{4\theta_c}{\lambda I(0)}} = \operatorname{th} \frac{1}{2} \cdot \frac{I(0)}{\theta_c} |w_0| - \lambda \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{4\theta_c}{\lambda I(0)}}}{2} \quad (\text{V.16})$$

Mi ćemo se nadalje koristiti ovako dobijenim vrednostima za θ_c , ali treba imati na umu da ova jednačina daje dosta lošu zavisnost T_c od x u smislu neslaganja sa rezultatima koji su prezentirani u II glavi a koji se odnose na Γ -T dijagram. Ovo je rezultat kratkoće reda po x .

Kada smo odredili \bar{N}_c možemo jednačinu (V.15) rešavati numerički u dva odvojena intervala: od 0 do \bar{N}_c i od \bar{N}_c do 0,5 (ili \bar{N}_1). Odmah uočavamo da je grana rešenja od \bar{N}_c do \bar{N}_1 "nefizička", tj. dobijaju se izrazi za $\langle S^z \rangle$ u funkciji temperature koji nemaju nikakvog fizičkog smisla. Sam postupak razdvajanja na dva intervala je potreban, jer numerički metodi koje smo koristili zahtevaju da u posmatranom intervalu postoji samo jedno rešenje date jednačine.

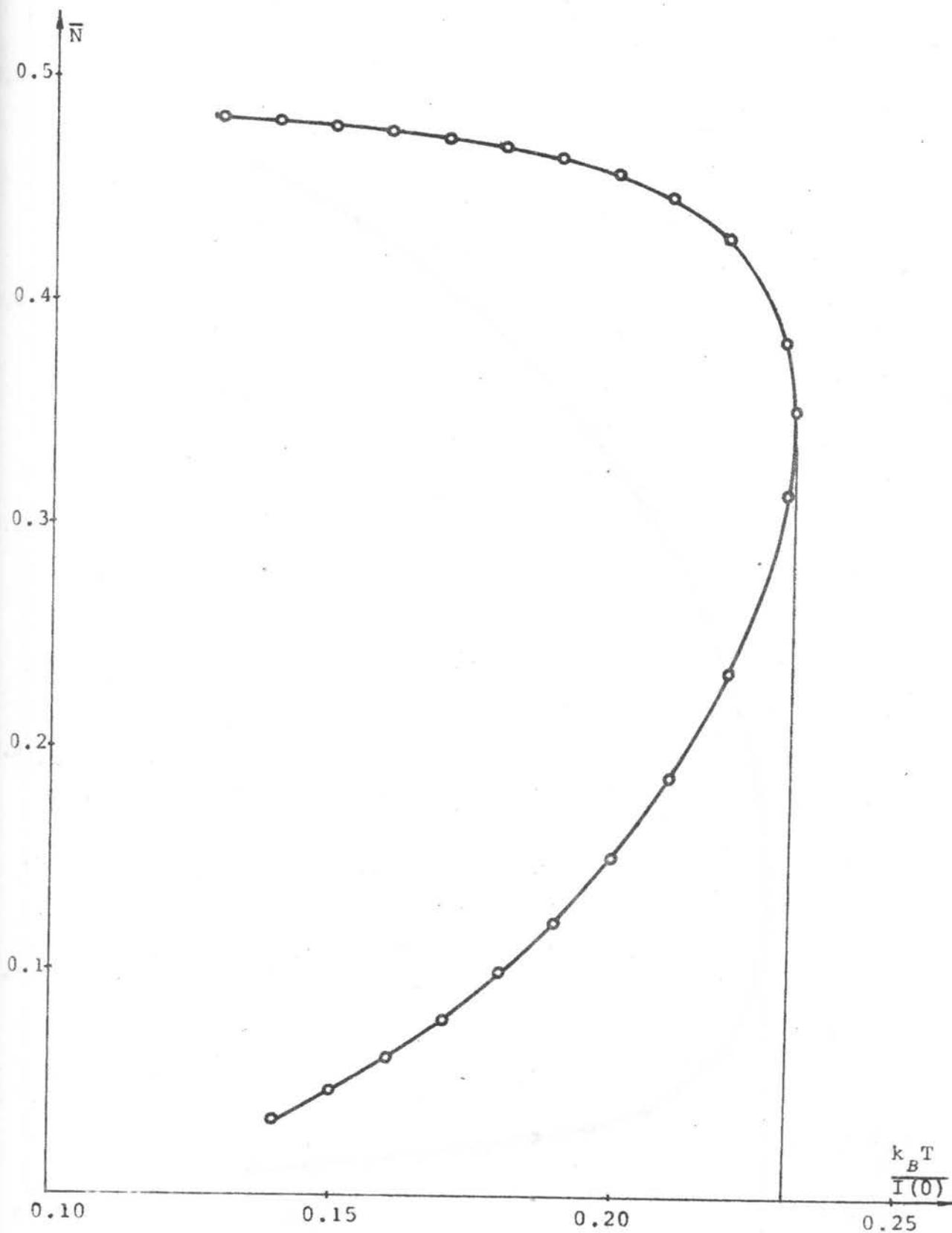
Jednačina (V.15) je rešavana numeričkim metodom koji je kombinacija metoda dihotomije i Njutnovog (Newton) metoda na stacionarnom kalkulatoru HP-97 programom MA 1 - 08 za rešavanje transce-

dentnih jednačina [HII]. Program ima mogućnost selekcije tačnosti sa kojom računa koren transcedentne jednačine, i mi smo za tačnost birali x^3 . Istovremeno, izračunavanje je prekidano uvek kada je dobijena vrednost $\bar{N} < x^3$ jer su onda rezultati nepouzdani. Dobijene vrednosti za \bar{N} su dalje korišćene za izračunavanje $\langle S^z \rangle$ i $\langle S^x \rangle$.

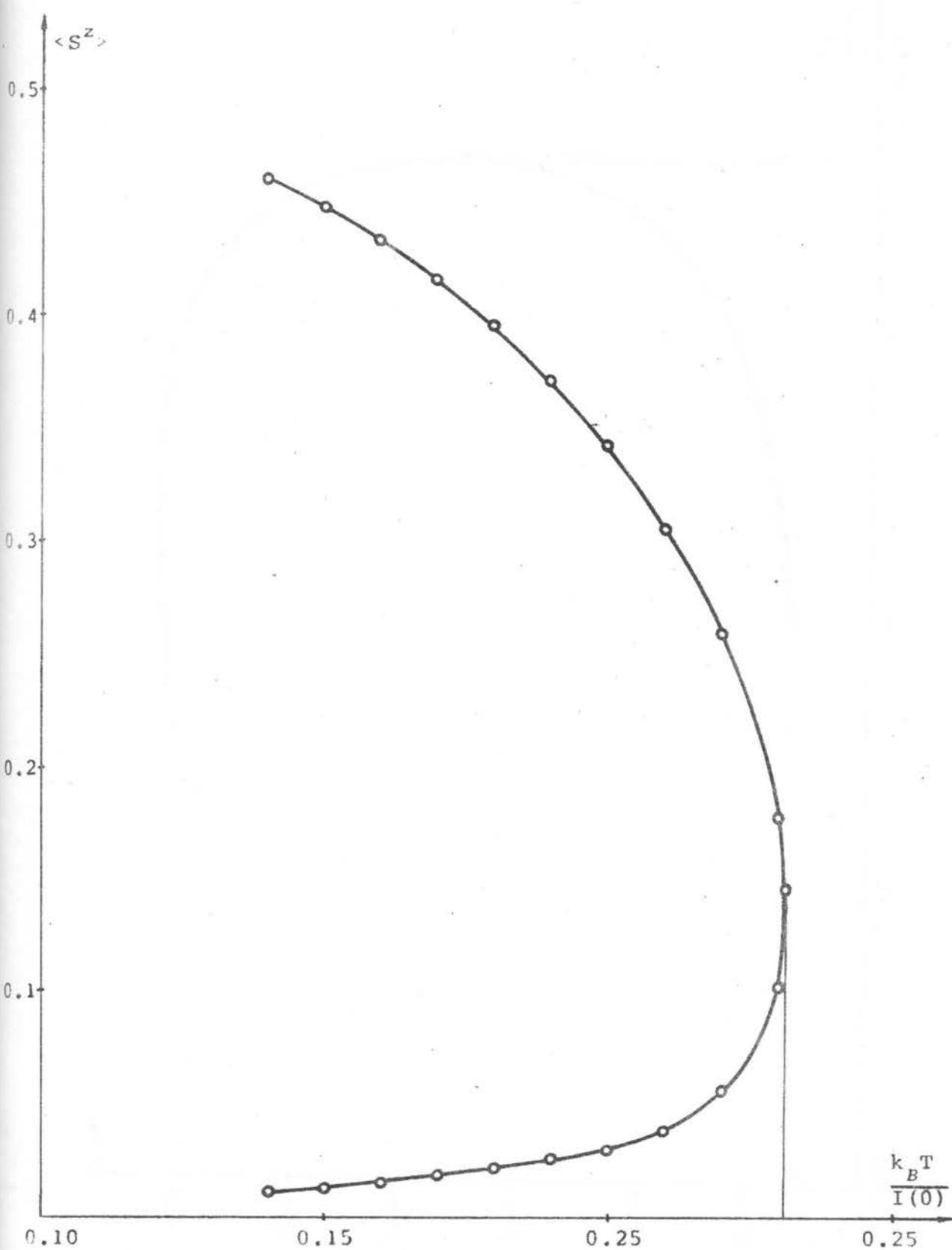
Račun je sproveden za vrednosti $x = 0.01, 0.03$ i 0.05 . Razlog za izbor ovako malih vrednosti je taj, što za veće vrednosti x rezultati vrlo brzo padaju ispod granice tačnosti. Videćemo da T_c opada sa porastom x , tako da bi već u okolini prelaza dospeli u oblast temperatura u kojima aproksimacije primjene u izračunavanju kinematičkih nivoa ne važe. Ovo dalje implicira da se i sa gore uvedenim vrednostima x ne može posmatrati celokupna oblast temperatura, već moramo uvesti određeni kriterijum "visokih" temperatura. Smatraćemo u ovom smislu "visokim" temperaturama sve temperature iznad temperature za koju $\langle S^z \rangle$ dostiže 90% maksimalne vrednosti (na $T = 0K$).

Izračunavanje je vršeno za dimenzije $d = 2, 3, 4$. Prva dva slučaja su od fizičkog interesa, a $d = 4$ je izabrana jer se očekuje da tu preovlada MF ponašanje [M I]. Isto tako smo posmatrali i granične slučajeve kad $d \rightarrow \infty$ i $x \neq 0$ (što odgovara aproksimaciji molekularnog polja [SIV]) i $x = 0$ što odgovara Izingovom modelu.

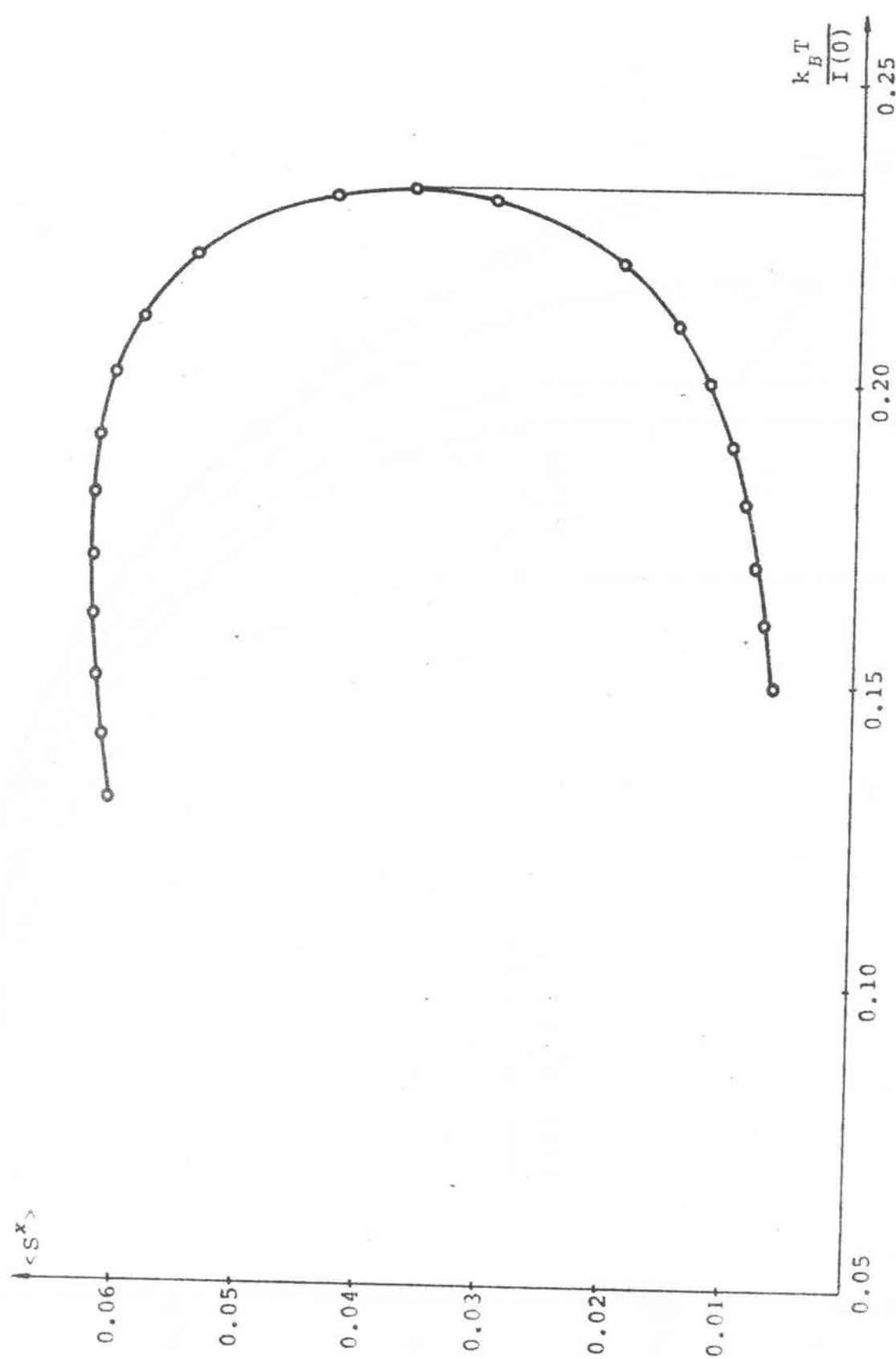
Rezultati su prikazani u priloženim graficima, pri čemu smo zbog ograničenog prostora izdvojili samo one bitne za analizu. Grafici prikazuju \bar{N} ; $\langle S^z \rangle$ i $\langle S^x \rangle$ u funkciji temperature, tačnije u funkciji bezdimenziione promenljive $k_B T/I(0)$. Prvo su pokazane obe grane rešenja na jednom primeru, a potom su date vrednosti $\langle S^z \rangle$ samo za fizičku granu rešenja i to za određenu dimenziju, sa x kao parametrom, ili za datu vrednost x sa dimenzijom kao parametrom. Na istom grafiku su prikazane krive koje odgovaraju obema aproksimacijama $k_i = \pi/2a$ i $k_i = 0$.



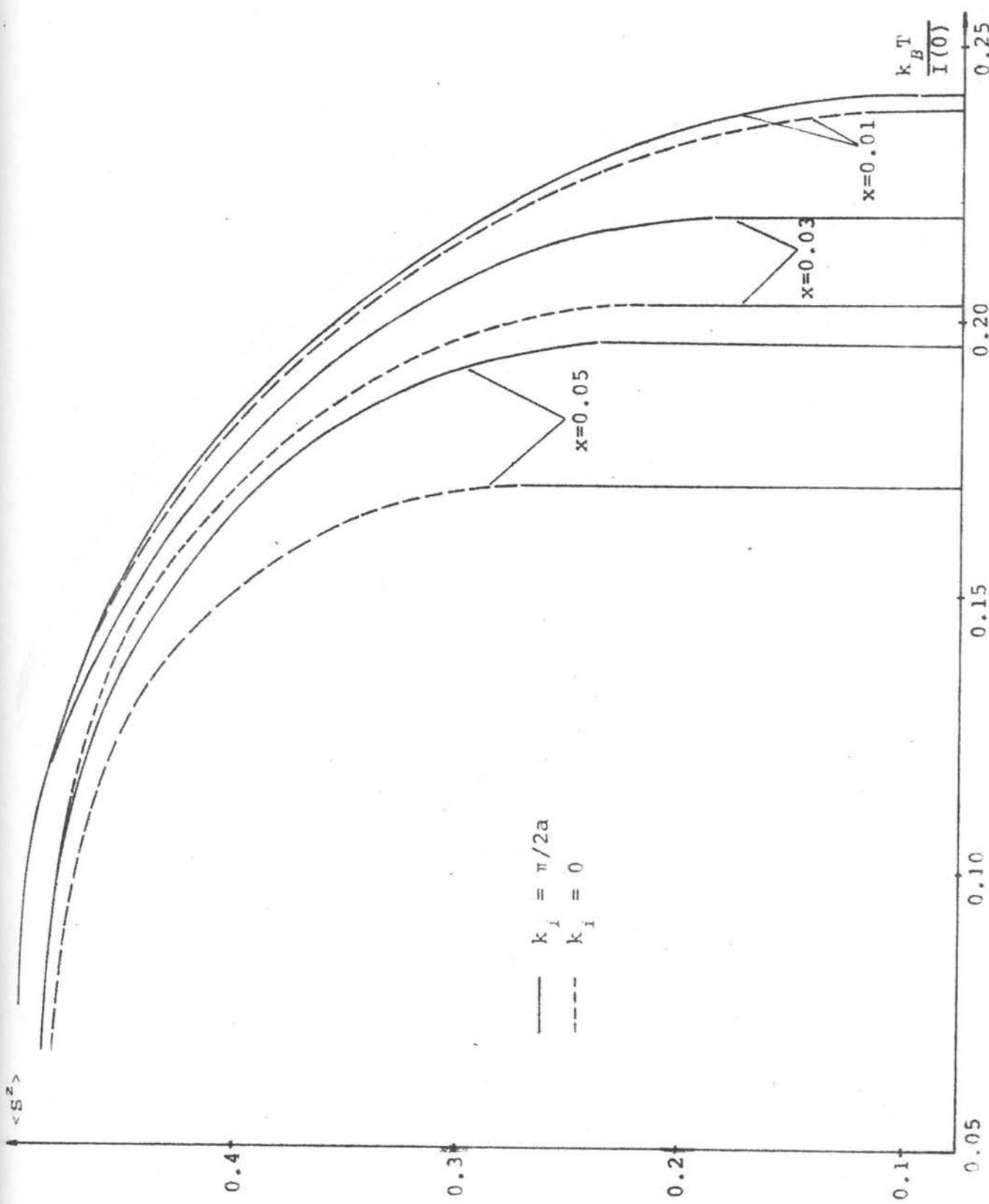
Sl.V.5. \bar{N} u funkciji $\frac{k_B T}{I(0)}$ za $d = 3$ u slučaju
 $k_i = \pi/2a$



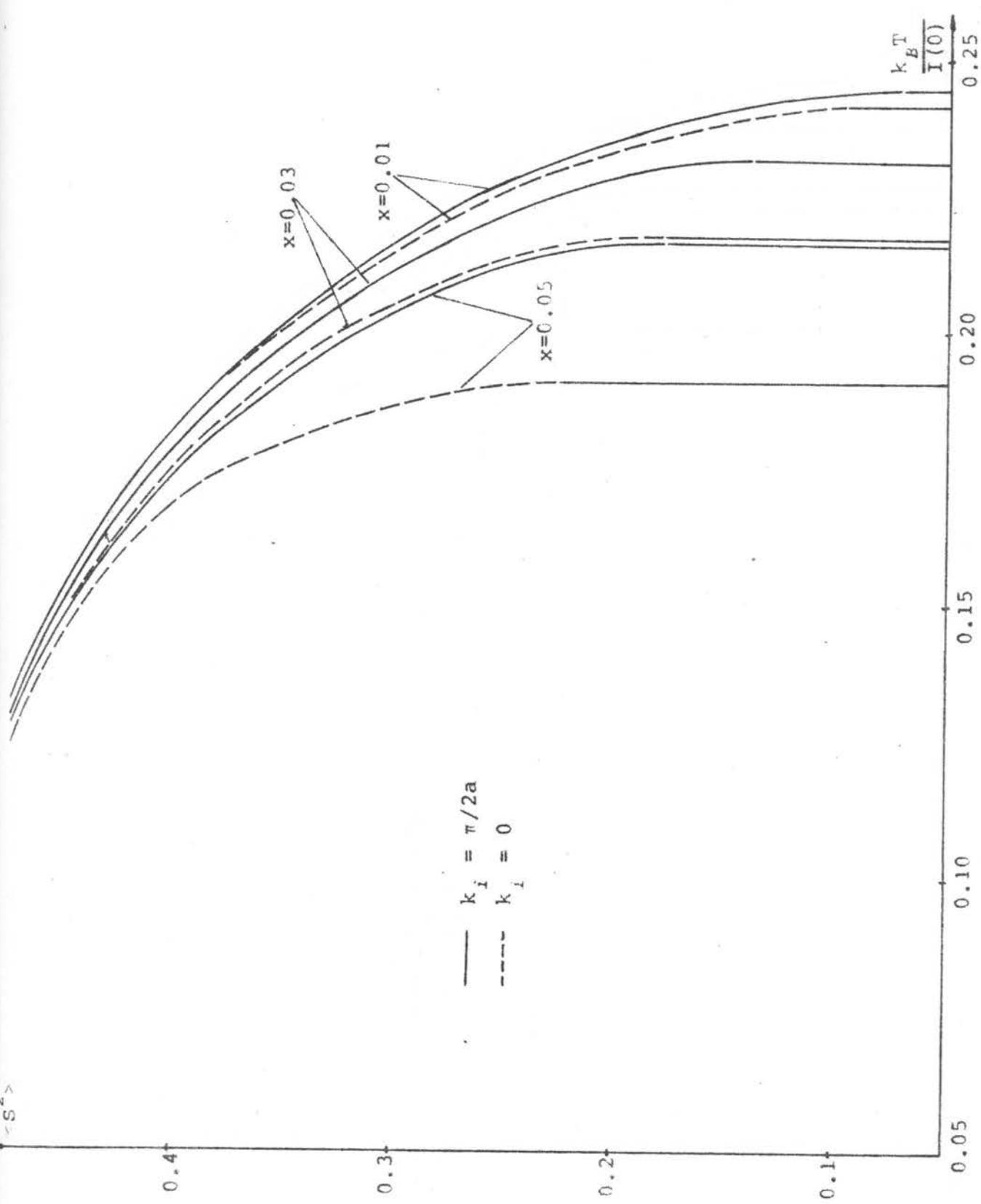
Sl.V.6. "Fizičko" i "nefizičko" rešenje za $\langle S^z \rangle$ u funkciji $kT/0$ za $d = 3$, $x = 0.03$ u slučaju $k_i = \pi/2a$



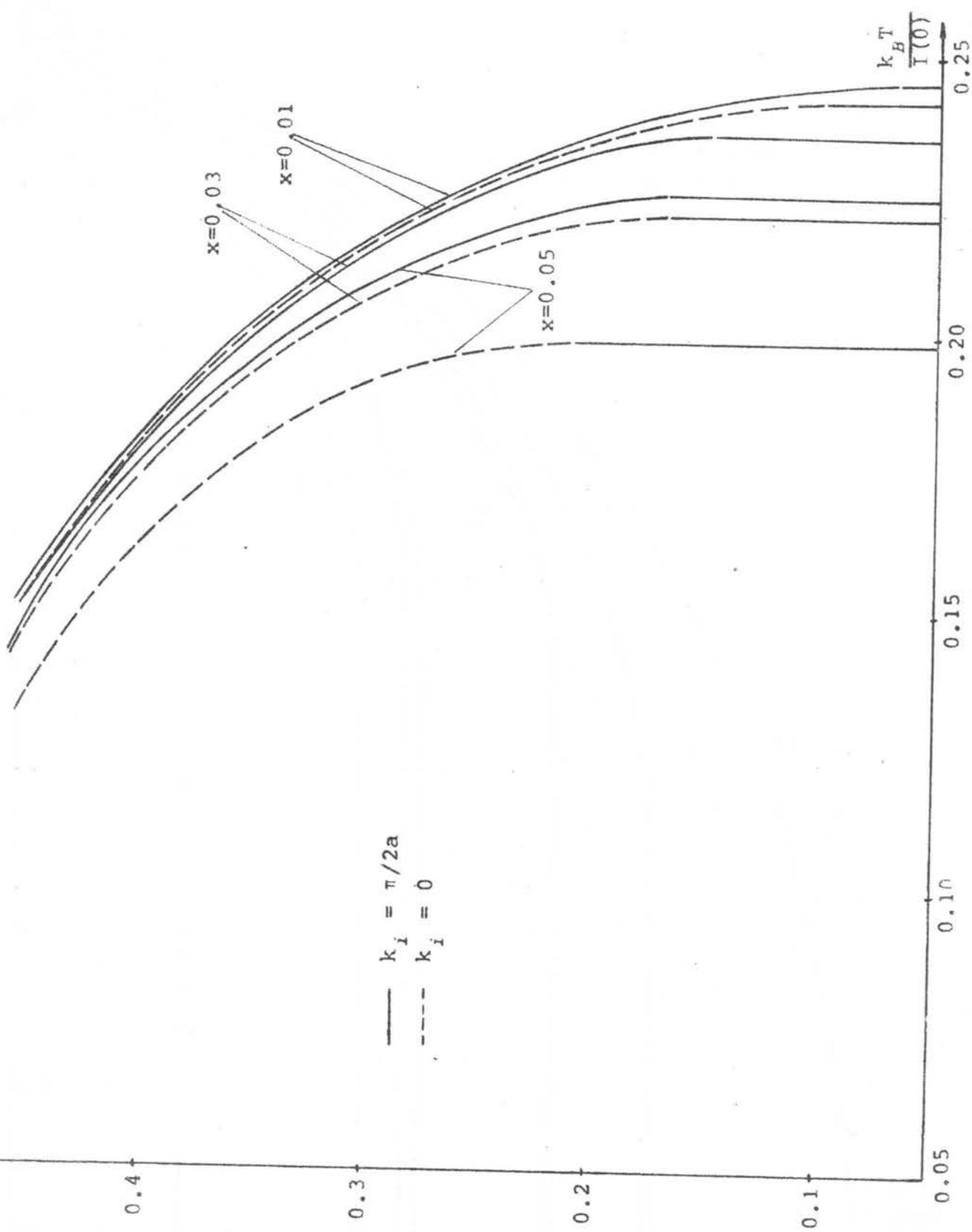
S1.V.7. "Fizičko" i "nefizičko" rešenje za $\langle S^x \rangle$ u funkciji kT/θ za $d = 3$ i $x = 0.03$ u slučaju $k_i = \pi/2a$



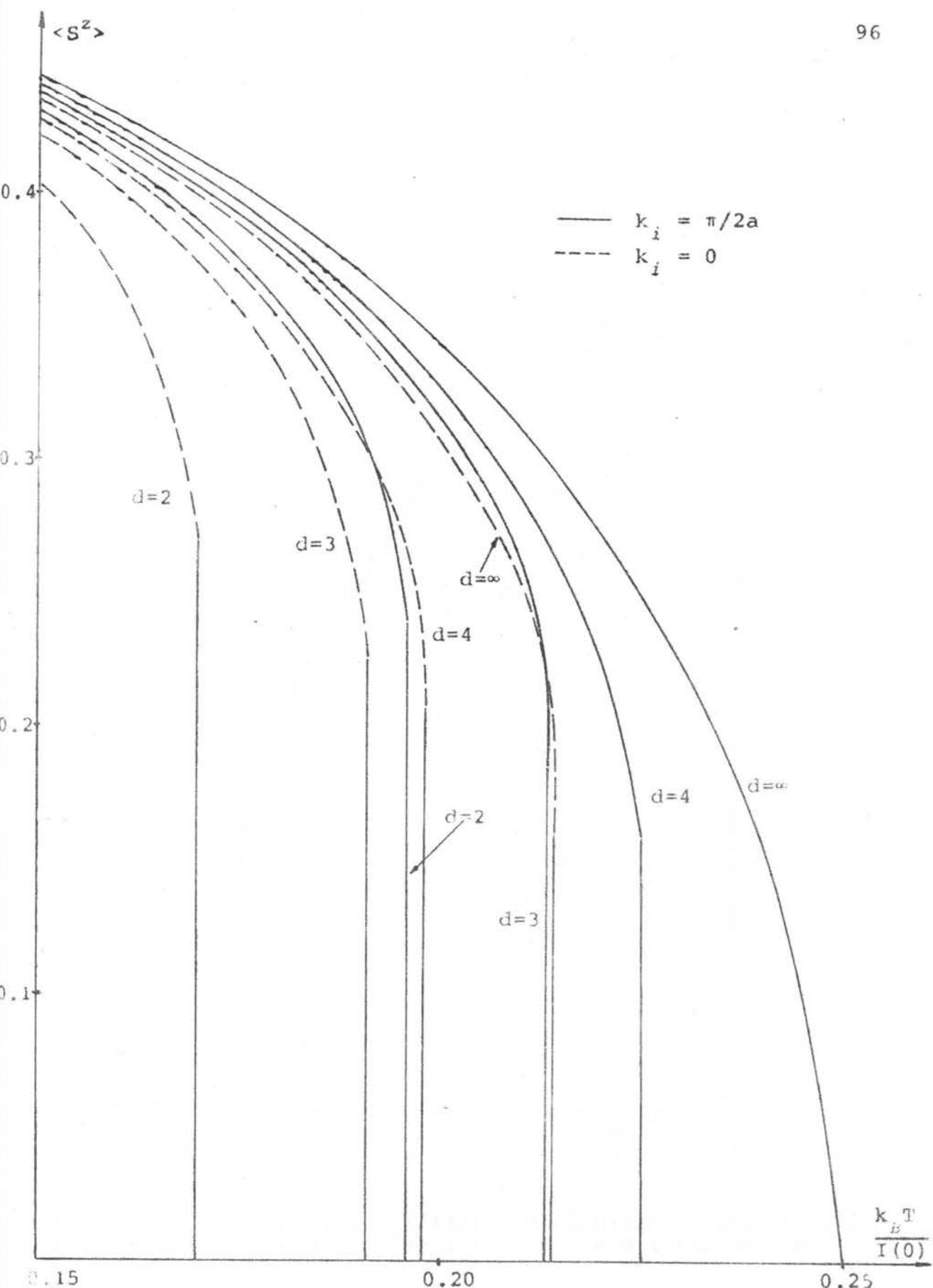
Sl.V.8. $\langle S^z \rangle$ u funkciji $k_B T / I(0)$ za $d = 2$, x kao parametar



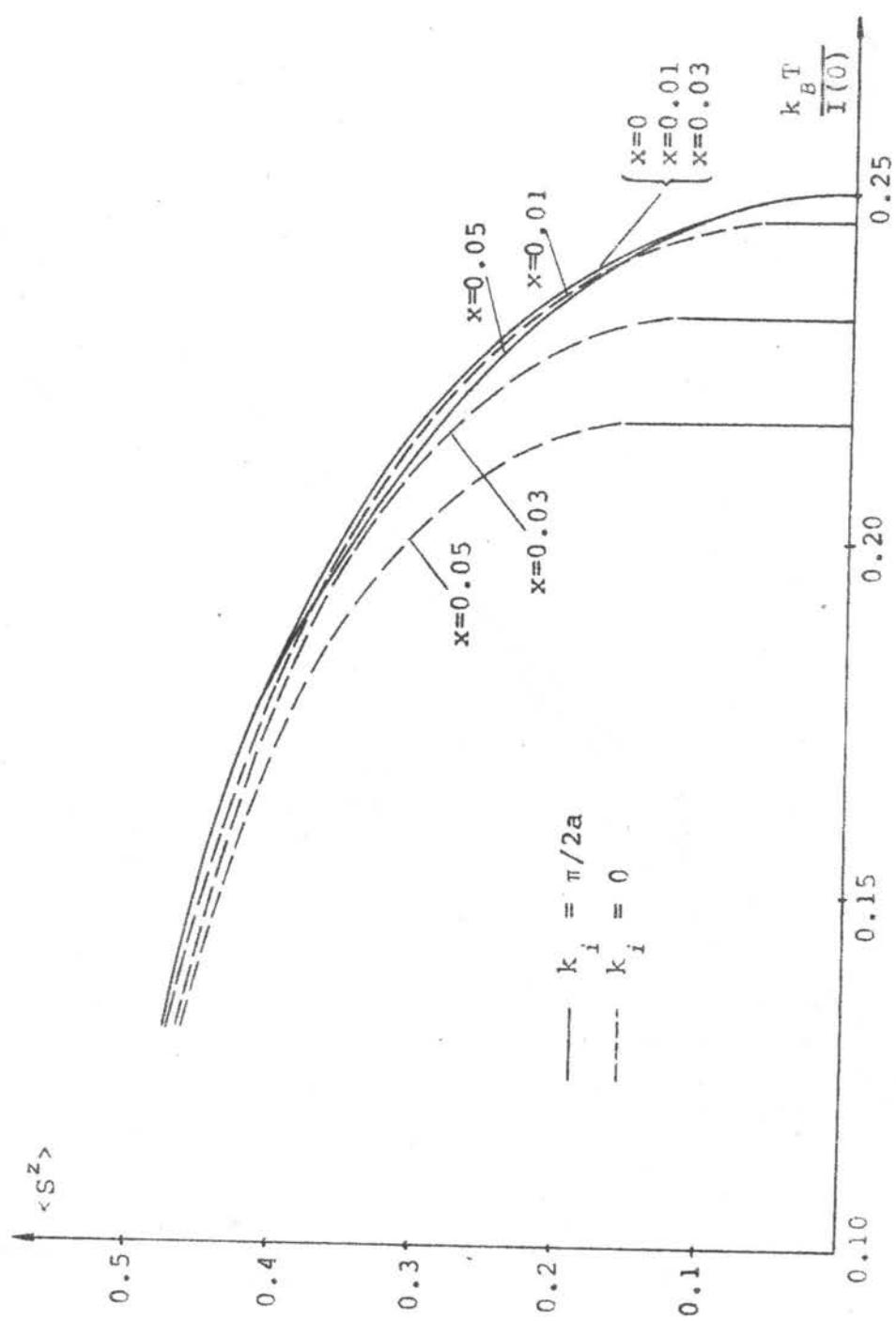
Sl.V.9. $\langle S^2 \rangle$ u funkciji $k_B T / I(0)$ za $d = 3$, x kao parametar



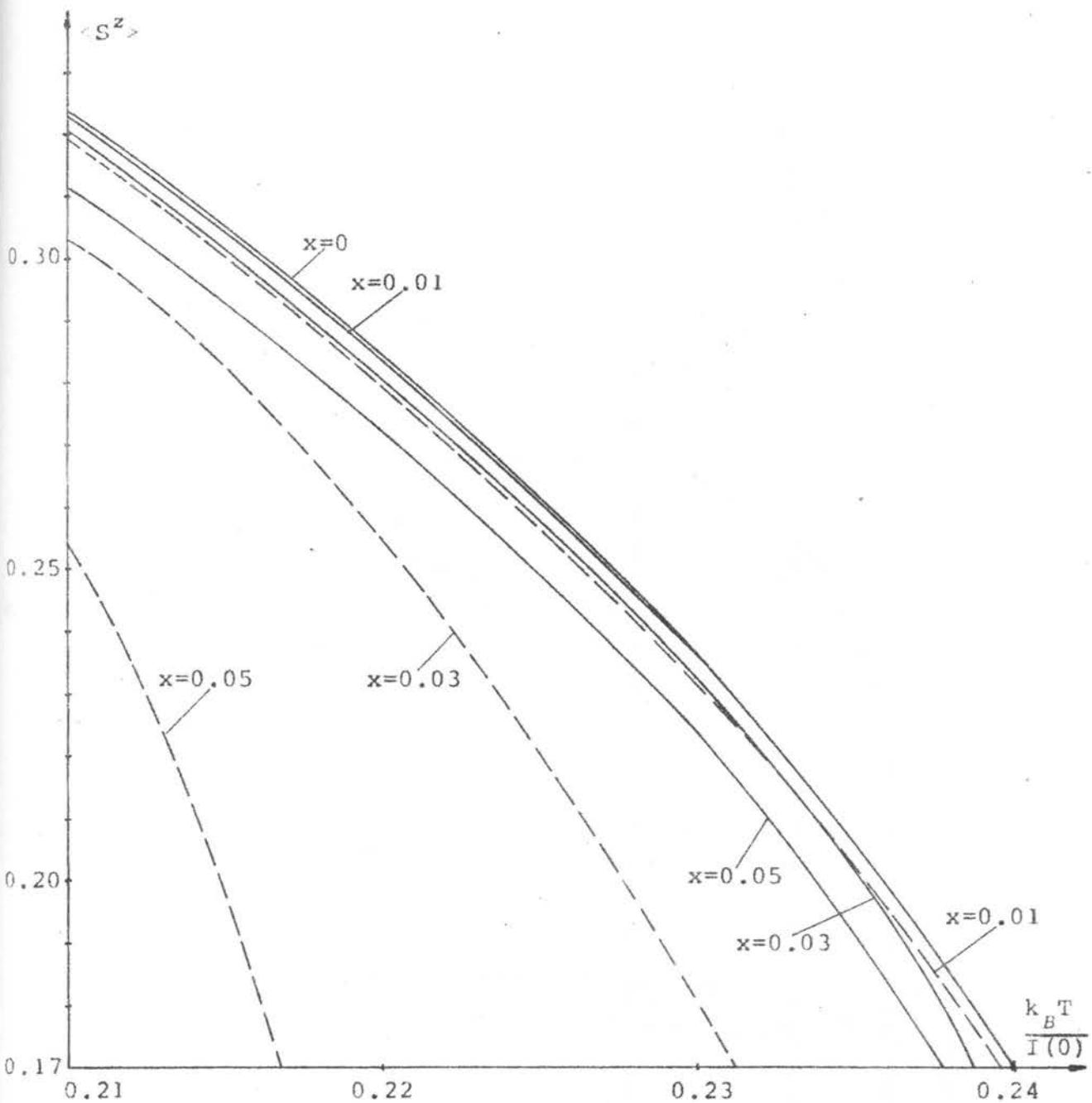
Sl.V.10. $\langle S^z \rangle$ u funkciji $k_B T / I(0)$ za $d = 4$, x kao parametar



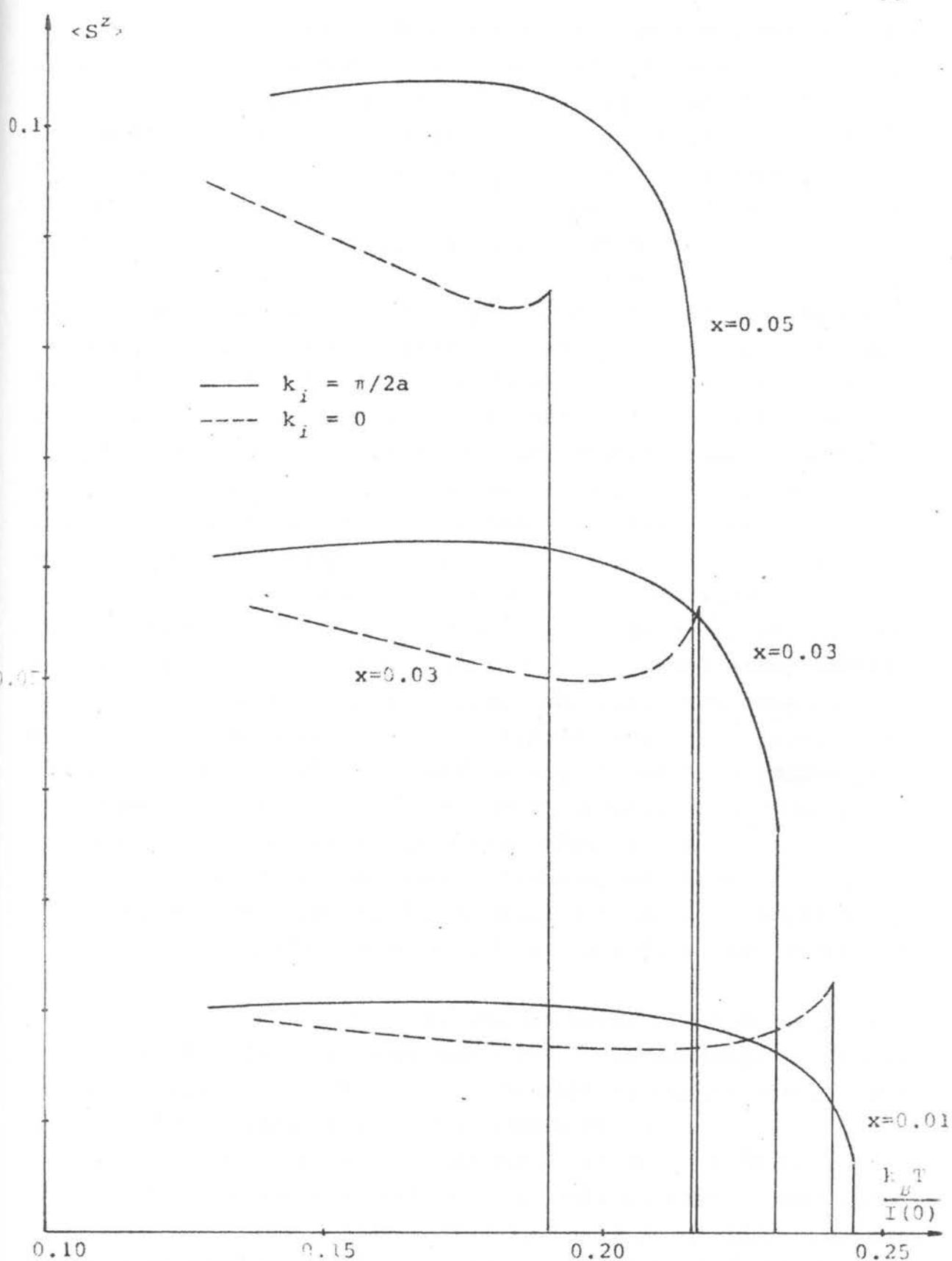
Sl.V.11. $\langle S^z \rangle$ u funkciji $k_B T / I(0)$ za $x = 0.05$ i d kao parametar



Sl.V.12. $\langle S^z \rangle$ u funkciji $\frac{k_B T}{I(0)}$ u aproksimaciji MFA (d = ∞) za $x = 0.01, 0.03$ i 0.05 , kao i slučaj $x = 0$ (Izingov model)



Sl.V.13. $\langle S^z \rangle$ u funkciji $k_B T / I(0)$ u aproksimaciji MFA ($d = \infty$) za $x = 0.01, 0.03$ i 0.05 i u slučaju $x = 0$ (Izingov model)
(Uvećana razmara)



Sl.V.14. $\langle S^x \rangle$ u funkciji $\frac{k_B T}{I(0)}$ za $d = 3$, za $x = 0.01$,
0.03 i 0.05

Analizirajući dobijene grafike možemo izvući sledeće zaključke. U obe posmatrane aproksimacije ($k_i = \pi/2a$ i $k_i = 0$), porast spontane polarizacije se odvija skokovito, tj. fazni prelaz je prve vrste. Potrebna je detaljna numerička analiza jednačine (V.12) da bi se ovaj zaključak proverio u opštem slučaju, ali smatramo da je ovaj rezultat posledica 4P - aproksimacije a ne posledica Tjablikovskog dekuplovanja. U prilog tome govori činjenica da kad se u obzir uzmu svi delovi hamiltonijana, dakle i oni zanemareni u 4P - aproksimativnom izrazu, fazni prelaz dobija više karakter prelaza II vrste. Većina teorijskih radova iz ove oblasti, pokazuje da je fazni prelaz kod IMTF prelaz II vrste. Zbog toga bi bilo poželjno ispitati efektivni hamiltonijan 4P - aproksimacije i drugim tehnikama. Ukoliko bi se potvrdio ovaj rezultat o faznom prelazu I vrste, to bi značilo da hamiltonijan 4P - aproksimacije bolje opisuje realnu situaciju kod kristala KDP tipa.

Za datu dimenziju, vrednost T_c se smanjuje sa porastom x . Fizičko objašnjenje je da tunelovanje pogoduje razredjivanju sistema, tako da sistem već na nekoj nižoj temperaturi gubi uredjenost dugog dometa. Isto tako, kao posledica tunelovanja, spinovi nikad ne mogu dostići potpunu paralelnu orientaciju, drugim rečima osnovno stanje je samo delimično polarizovano. Štaviše, kriva $\langle S^z \rangle$ koja odgovara većoj vrednosti x je uvek ispod krive za neku nižu vrednost x .

Što se tiče ponašanja sistema, pri promeni dimenzije, T_c raste sa porastom d , što se može objasniti porastom broja suseda, čime jača interakcija koja teži da sistem održi uređenim.

Navedene osobine se kvalitativno slažu sa rezultatima drugih teorijskih i eksperimentalnih istraživanja citiranih u I i II glavi. Niže ćemo videti da postoje kvantitativna neslaganja, kao posledica kratkoće redova po x .

Interesantno je posmatrati granične slučajeve. Za $x = 0$, IMTF prelazi u Izingov model. Kada se izvrši ovaj prelaz u jednačinama (V.8), (V.9) i (V.11), dobijaju se jednačine koje odgovaraju aproksimaciji molekularnog polja za Izingov model. Dekuplovanje Tjablikova je ekvivalentno MFA za IM |TII, HIII|. Razumljivo je da kriva za $\langle S^z \rangle$ u funkciji temperature, predstavlja

tavlja gornju granicu svih krivih za $\langle S^z \rangle$ koje su dobijene za slučaj IMTF. U ovom slučaju, fazni prelaz je II vrste, kao što je dobro poznato [HIII].

Što se tiče graničnog slučaja $d \rightarrow \infty$, $x \neq 0$, ponašanje rezultata je bitno različito, zavisno od toga da li se posmatra aproksimacija $k_i = 0$, ili $k_i = \pi/2a$. Drugi slučaj odgovara aproksimaciji molekularnog polja za 4P efektivni hamiltonian i fazni prelaz je ponovo II vrste. Kada se vrednosti funkcija od \vec{k} zamene vrednostima u tački $\vec{k} = 0$, dobijamo fazni prelaz I vrste. Ako uporedimo rezultate dobijene za konačne vrednosti d , vidimo da su vrednosti $\langle S^z \rangle$ dobijene u slučaju konačnih vrednosti d uvek niže od odgovarajuće vrednosti u graničnom slučaju. Objasnjenje možemo potražiti u činjenici da $d \rightarrow \infty$ implicira povećanje broja suseda, što je ekvivalentno povećavanju dometa interakcije, odnosno rešavanju problema u aproksimaciji molekularnog polja. S druge strane, aproksimacija molekularnog polja, zanemaruje korelacije fluktuacija, i samim tim previše vrednosti za spontanu polarizaciju i temperaturu prelaza [V I].

Ostaje još da uporedimo rezultate dobijene u dve aproksimacije za izračunavanje funkcija od \vec{k} u samousaglašenim jednačinama. Prvo, vrednosti za T_c , kao i vrednosti za $\langle S^z \rangle$ za isto T su uvek niže za $\vec{k} = 0$, u istoj dimenziji i za isto x . S druge strane, skok spontane polarizacije je uvek veći, tj. prelaz ima izraženiji karakter faznog prelaza I vrste. Iz ovih dveju aproksimacija teško je proceniti realnu situaciju koja se javlja pri rešavanju samousaglašenih jednačina, ali je vrlo verovatno da bi se integracijom po celoj Briluenovoj zoni, prelaz "izgadio", tj. da su karakteristike sistema negde na prelazu izmedju karakteristika dobijenih u ove dve aproksimacije.

Dosadadašnje razmatranje je bilo prvenstveno kvalitativno. Videli smo da je novi rezultat našeg pristupa činjenica da model poseduje fazni prelaz I vrste. Karakteristike faznog prelaza se kvalitativno slažu sa drugim teorijskim istraživanjima. Svi ovi rezultati su pre svega posledica oblika efektivnog hamiltonijana, Tjablikovskog dekuplovanja i eventualno aproksimacije u kojoj izračunavamo funkcije od \vec{k} . Sada ćemo

pokušati da proverimo kvantitativno slaganje sa eksperimentalnim rezultatima merenja na feroelektricima tipa KDP. Ovi rezultati su dati u Tablici I.1.

Samim tim što je fazni prelaz I vrste, što je realna situacija, imamo opravdanje da poređimo naše rezultate sa eksperimentalnim. Ipak, imajući u vidu relativno grube aproksimacije koje smo izvršili, ne možemo zahtevati izuzetno veliko slaganje, već ćemo se zadovoljiti procenom redova veličine odgovarajućih parametara.

Nama na raspolaganju stoje odredjeni parametri koji karakterišu mikroskopske osobine sistema, tačnije hamiltonijan. Da bi smo ih uporedili sa eksperimentalnim rezultatima, formiraćemo odredjene bezdimenzione parametre. Jedan bitan parametar je tzv. "oština" prelaza koja je okarakterisana odnosom

$$\frac{P_s(T_c)}{P_s(0)} = \frac{\langle S^z \rangle T_c}{\langle S^z \rangle (0)}$$

Vidimo da ovu veličinu direktno nalazimo iz rezultata naših proračuna. Mi smo temperaturu merili u bezdimenzionim promenljivim $k_B T / I(0)$. Mi ne znamo $I(0)$, ali zato je naš parametar još jedna bezdimenziona veličina $x = \Gamma / I(0)$. Eksperimenti daju direktnu vrednost za T_c . Što se tiče $I(0)$ i Γ , njih obično nalazimo uvodeći neku od aproksimacija pri rešavanju jednačina za IMTF. Ovde ćemo koristiti vrednosti dobijene "fitovanjem" eksperimentalnih podataka za aproksimaciju klastera $|V_1, V_2|$, iz koje je uzet podatak za $\Gamma / k_B T_c |F_2|$.

Vrednosti za $\langle S^z \rangle (T_c) / \langle S^z \rangle (0)$ su za slučaj $d = 3$ date u Tablici V.1.

Tablica V.1.

$$\frac{\langle S^z \rangle (T_c)}{\langle S^z \rangle (0)}$$

x	0.01	0.03	0.05
$k_i = \pi/2a$	0.14226	0.28304	0.37673
$k_i = 0$	0.18863	0.35803	0.46445

Ako oštiranu prelazu izaberemo za osnovni kriterijum, vidimo da vrednosti iz tablice odgovaraju faznom prelazu kod kristala KDP,

dok su 2-3 puta manje nego vrednost za druge kristale iz ove grupe. Ako iskoristimo teorijsku vrednost za $k_B T_c / I(0)$ i eksperimentalnu vrednost za $\Gamma / k_B T_c$, nalazimo $x = 0.19$. Ovo je za red veličine veće od teorijske vrednosti.

Poredjenje se može izvršiti i na drugi način. Pretpostavimo da je data vrednost za x . Ako prema njoj odredimo $k_B T_c / I(0)$ možemo dobiti dobro slaganje, ali je tada oština prelaza dva do tri puta niža od eksperimentalne vrednosti.

Ovu kratku analizu možemo rezimirati na sledeći način. Što se tiče samog KDP kristala, vrednosti za x koje smo mi koristili su mnogo niže od realnih vrednosti. Zbog toga slaganje naših rezultata sa eksperimentalnim, nije izuzetno dobro. Kada su u pitanju drugi kristali iz ove grupe, slaganje je bolje u smislu da se veličine slažu po redu veličine, iako nema idealnog kvantitativnog poklapanja.

Treba imati na umu da smo se mi zadržali samo na članovima reda x^2 a s obzirom da su moguće i veće vrednosti x , teško je očekivati bolje slaganje sa eksperimentalnim rezultatima. Drugim rečima, teorija je unutar sebe konzistentna, ali za postizanje bolje kvantitativne saglasnosti sa eksperimentalnim rezultatima treba je razvijati dalje.

Poredjenje sa rezultatima drugih teorijskih radova je otežano činjenicom da se u velikoj većini radova demonstrira pojava faznog prelaza II vrste, tako da je smisao temperature T_c drugačiji. Ipak, izvršićemo poredjenje sa rezultatima visokotemperaturskog razvoja |O1, Y1|, koji se obično smatraju veoma tačnim. Obe grupe autora su posmatrale veće vrednosti za x i u mogućnosti smo da izvršimo poredjenje samo za $x = 0.05$. Za $d = 2$, jedna grupa autora je odredila $k_B T_c / I(0) = 0.12$ |Y 1| a druga grupa $k_B T_c / I(0) = 0.14$. Naši rezultati za $d = 2$ su 0.17 ($k_i = 0$) i 0.19 ($k_i = \pi/2a$). Za $d = 3$, obe grupa autora za prostu kubnu rešetku dobijaju rezultat $k_B T_c / I(0) = 0.18$, dok su naši rezultati 0.19 ($k_i = 0$) odnosno 0.216 ($k_i = \pi/2a$). Vidimo da naš metod daje previšenu vrednost u odnosu na visokotemperaturski razvoj, a nižu u odnosu na aproksimaciju molekularnog polja |B10|. Ovo je opšta karakteristika rezultata dobijenih u RPA ili sličnim postupcima. Uzrok leži u tome da ovi metodi uračunavaju deo uticaja fluktuacija, ali ne u potpunosti.

Sada ćemo detaljnije ispitati okolinu prelaza koristeći ATR. U blizini tačke prelaza moramo koristiti ceo bozonski red. Njega ćemo uvesti u račun koristeći pomoćnu GF definisanu na bozonskom prostoru stanja. Ako se izabere pogodno dekuplovanje, ova funkcija daje isti zakon disperzije kao i GF Pauli-operatatora $F(\vec{k}, \omega)$ u aproksimaciji Tjablikova. U tom slučaju se može uspostaviti veza izmedju ove dve funkcije. Procedura zahteva neka dopunska objašnjenja u odnosu na dosadašnje primene, mada se karakteristične crte računa sa kinematičkim nivoima javljaju i ovde.

Pomoćnu GF definišemo preko Boze-operatora

$$L_{\vec{f}\vec{g}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\langle \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{f}}(t)} \hat{P}_{\vec{f}}(t) | P_{\vec{g}}^+(0) \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{g}}(0)} \rangle\rangle \quad (\text{V.17})$$

Ovde $\hat{P}_{\vec{f}}(t)$ i $\hat{P}_{\vec{f}}^+(t)$ treba shvatiti kao simboličnu oznaku za izraz (P. 3) definisan preko Boze-operatora. Ova GF ima dve osnovne crte: može se povezati sa GF Pauli-operatatora $F_{\vec{f}\vec{g}}(t)$, a s druge strane jednostavno se izražava preko bozonskih GF: $G_{\vec{f}\vec{g}}(t)$ i $D_{\vec{f}\vec{g}}(t)$ definisanih relacijama (IV.4a). Prvo ćemo se pozabaviti ovim drugim problemom.

Polazeći od identiteta na prostoru stanja bozonskog broja popunjenošti, i koristeći algebarske transformacije, možemo pisati

$$\begin{aligned} \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{f}}} f_{\vec{f}}^{1/2} &\equiv (1 + \hat{n}_{\vec{f}}) f_{\vec{f}} = \\ &= 1 - \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} \hat{B}_{\vec{f}}^{+v+1} \hat{B}_{\vec{f}}^{v+1} \end{aligned} \quad (\text{V.18})$$

Sada se funkcija $L_{\vec{f}\vec{g}}(t)$ eksplicitno izražava preko Boze-operatatora kao

$$\begin{aligned} L_{\vec{f}\vec{g}}(t) &\equiv \langle\langle B_{\vec{f}}(t) | P_{\vec{g}}^+(0) \rangle\rangle - \\ &- \langle\langle \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} \hat{B}_{\vec{f}}^+(t)^{v+1} B_{\vec{f}}(t)^{v+2} | P_{\vec{g}}^+(0) \rangle\rangle - \\ &- \langle\langle B_{\vec{f}}(t) \Big| \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} B_{\vec{g}}^+(0)^{v+2} B_{\vec{g}}(0)^{v+1} \rangle\rangle + \langle\langle \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} \times \end{aligned}$$

$$\times B_F^+(t)^{v+1} B_F^+(t)^{v+2} \mid \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\mu}{(\mu+1)!} B_g^+(0)^{\mu+2} B_g^+(0)^{\mu+1} \gg \quad (V.19)$$

Ovaj izraz pojednostavljujemo primenom Vikove teoreme [TII, T III]. Kao i u prethodnoj glavi, zanimaće nas temperaturski nezavisni kinematički nivoi, što znači da pri dekuplovanju zadržavamo izraze tipa GDG, a zanemarujemo izraze tipa \bar{n} GDG i višeg reda.

U ranijim primenama [T12, P12] je ovaj postupak bio izведен "intuitivno", tako da smo smatrali za potrebno da celu proceduru rigoroznije izvedemo.

Posmatrajmo drugi član sa desne strane jednačine (V.19) (postupak sa trećim članom je potpuno analogan). Koristimo nezavisnost statističkog usrednjavanja i sumiranja po v .

$$\begin{aligned} & \ll \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} B_F^+(t)^{v+1} B_F^+(t)^{v+2} \mid B_g^+(0) \gg = \\ & = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} \ll B_F^+(t)^{v+1} B_F^+(t)^{v+2} \mid B_g^+(0) \gg \end{aligned}$$

Kada vršimo kontrakcije (sparivanja) u vremenu t , uvek preostaje jedan nesparen operator $\hat{B}_F^+(t)$ koji sa operatom $\hat{B}_g^+(0)$ daje GF $G_{\hat{F}\hat{G}}^+(t)$. S obzirom da se ovaj nespareni operator može izabrati na $(v+2)$ načina, rezultat sparivanja je

$$\begin{aligned} & \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} (v+2) \ll B_F^{+v+1} B_F^{v+1} \gg G_{\hat{F}\hat{G}}^+(t) = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+2)!} (v+2)! \bar{n}^{v+1} \times \\ & \times G_{\hat{F}\hat{G}}^+(t) = \sum_{v=0}^{\infty} (v+2) (-2)^{v-\bar{n}+1} G_{\hat{F}\hat{G}}^+ \end{aligned} \quad (V.20)$$

gde smo koristili rezultat iz [T10]. Zbir prva tri člana sa desne strane je

$$\begin{aligned} & [1 - 2 \sum_{v=0}^{\infty} (v+2) (-2)^{v-\bar{n}+1}] G_{\hat{F}\hat{G}}^+(t) = \\ & = [1 + \sum_{v=0}^{\infty} (v+2) (-2\bar{n})^{v+1}] G_{\hat{F}\hat{G}}^+(t) \end{aligned} \quad (V.21)$$

Uvodeći oznaku $y = -2\bar{n}$, možemo izvesti sumiranje

$$1 + \sum_{v=0}^{\infty} (v+2)y^{v+1} = 1 + \frac{d}{dy} \sum_{v=0}^{\infty} y^{v+2} = 1 + \frac{d}{dy} \frac{y^2}{1-y} = \frac{1}{(1-y)^2}$$

Konačno, suma (V.21) postaje

$$\frac{1}{(1+2n)^2} G_{\vec{F}\vec{g}}(t) \quad (\text{V.22})$$

Ovaj račun važi pod uslovom uslovom da je $\bar{n} < 1/2$. Kasnije ćemo videti da je u većem delu oblasti definisanosti \bar{n} ovaj uslov ispunjen. Mi ćemo kao dodatnu aproksimaciju smatrati da je ovaj uslov ispunjen uvek, tačnije da je rezultat sumiranja jednak (V.22) bez obzira da li je uslov ispunjen.

Poslednji član može da sadrži sparivanje tri operatora u različitim vremenima. Pri primeni Viškove teoreme možemo da izdvojimo samo jedan operator $\hat{B}_{\vec{f}}(t)$ za sparivanje sa $\hat{B}_{\vec{g}}^+(0)$ ili kombinaciju $\hat{B}_{\vec{f}}^+(t)\hat{B}_{\vec{f}}(t)\hat{B}_{\vec{f}}^+(t)$ za sparivanje sa odgovarajućom kombinacijom u $t = 0$. U prvom slučaju se pomenuti operator može izdvojiti na $(v+2)$ načina sa leve strane, što daje

$$\begin{aligned} & \left\langle \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} (v+2) B_{\vec{f}}^{+v+1} B_{\vec{f}}^{v+1} \right\rangle \times \\ & \times \left\langle \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\mu}}{(\mu+1)!} (\mu+2) B_{\vec{g}}^{+\mu+1} B_{\vec{g}}^{\mu+1} \right\rangle G_{\vec{F}\vec{g}}(t) \end{aligned}$$

Kombinacija tri operatora se može izvršiti na $(v+2)(v+1)/2$ načina. Tako nalazimo

$$\begin{aligned} & \left\langle \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} \cdot \frac{(v+2)(v+1)^2}{2} B_{\vec{f}}^{+v} B_{\vec{f}}^v \right\rangle \times \\ & \times \left\langle \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\mu}}{(\mu+1)!} \cdot \frac{(\mu+2)(\mu+1)^2}{2} B_{\vec{g}}^{+\mu} B_{\vec{g}}^{\mu} \right\rangle \times \\ & \times \langle \langle B_{\vec{f}}^+(t) B_{\vec{f}}(t) B_{\vec{f}}^+(t) | B_{\vec{g}}^+(0) B_{\vec{g}}^+(0) B_{\vec{g}}^+(0) \rangle \rangle \end{aligned}$$

Ovakvim postupkom smo izbegli probleme mešanja dvostrukih sumi. Naime, svaka sumacija ostaje celo vreme unutar "svog" znaka srednje vrednosti.

Sredjivanjem dobijenih izraza nalazimo

$$\sum_{v=0}^{\infty} (v+2)(-2)^{v-n+1} G_{\vec{F}\vec{g}}(t) = \frac{4\bar{n}^2 (1+\bar{n})^2}{(1+2\bar{n})^4} G_{\vec{F}\vec{g}}(t) \quad (V.23)$$

$$\sum_{v=0}^{\infty} (v+2)(v+1)^2(-2\bar{n})^{\frac{v+1}{2}} 2G_{\vec{F}\vec{g}}(t) D_{\vec{F}\vec{g}}(t) G_{\vec{F}\vec{g}}(t) = \frac{2}{(1+2\bar{n})^6} G_{\vec{F}\vec{g}}(t) D_{\vec{F}\vec{g}}(t) G_{\vec{F}\vec{g}}(t) \quad (V.24)$$

Sabirajući (V.22), (V.23) i (V.24) nalazimo izraz za pomoćnu GF $L_{\vec{F}\vec{g}}(t)$ u aproksimaciji do članova reda GDG:

$$L_{\vec{F}\vec{g}}(t) = \Omega_1(\bar{n}) G_{\vec{F}\vec{g}}(t) + \Omega_2(\bar{n}) G_{\vec{F}\vec{g}}(t) D_{\vec{F}\vec{g}}(t) G_{\vec{F}\vec{g}}(t) \quad (V.25a)$$

$$\Omega_1(\bar{n}) = \frac{1 + 4\bar{n} + 8\bar{n}^2 + 8\bar{n}^3 + 4\bar{n}^4}{(1+2\bar{n})^4} \quad (V.25b)$$

$$\Omega_2(\bar{n}) = \frac{2}{(1+2\bar{n})^6} \quad (V.25c)$$

Sledeći korak je povezivanje GF Pauli-operatora $\hat{F}_{\vec{F}\vec{g}}(t)$ sa pomoćnom GF $L_{\vec{F}\vec{g}}(t)$. Račun ćemo takodje izvesti detaljnije. Polazimo od jednačine kretanja GF $L_{\vec{F}\vec{g}}(t)$:

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt} L_{\vec{F}\vec{g}}(t) &= i\delta(t) \delta_{\vec{F}\vec{g}} K_1 + \\ &+ \langle\langle \sqrt{1+\hat{n}_{\vec{F}}} \hat{P}_{\vec{F}}, \hat{H}_{eff} \rangle\rangle | \hat{P}_{\vec{g}}^+ \sqrt{1+\hat{n}_{\vec{g}}} \rangle \rangle \quad (V.26) \end{aligned}$$

Ovde je

$$K_1 = \langle \sqrt{1+\hat{n}_{\vec{F}}} \hat{P}_{\vec{F}}, \hat{P}_{\vec{g}}^+ \sqrt{1+\hat{n}_{\vec{g}}} \rangle \quad (V.27)$$

K_1 nećemo eksplisitno izračunavati, jer se bitna aproksimacija upravo sastoji u tome da se K_1 zameni drugim, odgovarajućim izrazom. Veću pažnju posvetićemo izračunavanju komutatora koji figuriše u jednačini kretanja

$$[\sqrt{1+\hat{n}_{\vec{F}}} \hat{P}_{\vec{F}}, H] = \sqrt{1+\hat{n}_{\vec{F}}} [\hat{P}_{\vec{F}}, H] + [\sqrt{1+\hat{n}_{\vec{F}}}, H] \hat{P}_{\vec{F}} \quad (V.28)$$

Prvi komutator sa desne strane smo već izračunali (III.36). Kod izračunavanja drugog člana sa desne strane treba imati na umu da je $\hat{N}_{\vec{F}}$ funkcija od $\hat{n}_{\vec{F}}$, tako da važi

$$[\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}, \hat{P}_{\vec{r}}^+ \hat{P}_{\vec{r}}^-] = \delta_{\vec{r}, \vec{F}} [\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}, \hat{P}_{\vec{F}}^+ \hat{P}_{\vec{F}}^-] = 0$$

Vodeći računa o relacijama ermitovosti, dovoljno je izračunati samo jedan komutator

$$\begin{aligned} [\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}, \hat{P}_{\vec{r}}^+] &= \delta_{\vec{r}, \vec{F}} [\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}, \hat{P}_{\vec{F}}^+] = \\ &= \delta_{\vec{r}, \vec{F}} [\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}, \hat{B}_{\vec{F}}^+ f_{\vec{F}}^{1/2}] = \delta_{\vec{r}, \vec{F}} [\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}, \hat{B}_{\vec{F}}^+] f_{\vec{F}}^{1/2} \end{aligned}$$

Njega ćemo izračunati delujući na odgovarajući vektor stanja $|n_{\vec{F}}\rangle$. Ako je $n_{\vec{F}}$ neparan broj, rezultat je 0 zbog osobina operatora $\hat{f}_{\vec{F}}^{1/2}$. Za $n_{\vec{F}}$ parno nalazimo

$$\begin{aligned} [\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}, \hat{P}_{\vec{F}}^+] |n_{\vec{F}}\rangle &= [\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}, \hat{B}_{\vec{F}}^+] \hat{f}_{\vec{F}}^{1/2} |n_{\vec{F}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{\vec{F}} + 1}} \times \\ &\times (\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}} \hat{B}_{\vec{F}}^+ - \hat{B}_{\vec{F}}^+ \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}) |n_{\vec{F}}\rangle = (\sqrt{n_{\vec{F}} + 2} - \sqrt{n_{\vec{F}} + 1}) |n_{\vec{F}} + 1\rangle \end{aligned}$$

Pod pretpostavkom $n_{\vec{F}} \gg 1$, izraz u zagradi postaje

$$\sqrt{n_{\vec{F}} + 2} - \sqrt{n_{\vec{F}} + 1} = \sqrt{n_{\vec{F}} + 1} (1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{n_{\vec{F}} + 1} - 1) \approx 0 + R(\frac{1}{\sqrt{n_{\vec{F}}}})$$

Prema tome pokazali smo da približno važi relacija

$$[\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}, \hat{P}_{\vec{F}}^+] \approx \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}} [\hat{P}_{\vec{F}}^+, \hat{H}] \quad (V.29)$$

Jednačina kretanja (V.26) postaje

$$\begin{aligned} i \frac{dL_{\vec{F}\vec{g}}(t)}{dt} &= i\delta(t) \delta_{\vec{F}, \vec{g}} K_1 + \\ &+ \langle \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}} [\hat{P}_{\vec{F}}^+, \hat{H}] | P_{\vec{g}}^+ / \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{g}}} \rangle \quad (V.30) \end{aligned}$$

Sada vršimo "aproksimaciju Tjablikova" po Pauli-operatorima, tj. aproksimaciju

$$\hat{P}_{\vec{m}}^+ \hat{P}_{\vec{m}}^- \hat{P}_{\vec{F}}^+ + \langle \hat{P}_{\vec{m}}^+ \hat{P}_{\vec{m}}^- \rangle \hat{P}_{\vec{F}}^+ = \bar{N} \hat{P}_{\vec{F}}^+ \quad (V.31)$$

U duhu ove aproksimacije zanemarujuemo poslednji član u jednačini kretanja

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} \ll \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}} P_{\vec{F}}} | \hat{P}_{\vec{g}}^+ \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{g}}} \gg &= i \delta(t) \delta_{\vec{F}, \vec{g}} K_1 + [\Delta - 2\bar{N}] \times \\
 \times \sum_{\vec{m}} (1 - \delta_{\vec{F}, \vec{m}}) A_{\vec{F}\vec{m}}] \ll \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}} P_{\vec{F}}} | \hat{P}_{\vec{g}}^+ \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{g}}} \gg &+ (1 - 2\bar{N}) \times \\
 \times \Gamma \sum_{\vec{m}} X_{\vec{F}\vec{m}} \ll \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}} P_{\vec{m}}} | P_{\vec{g}}^+ \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{g}}} \gg - \\
 - \bar{N} \sum_{\vec{m}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{F}, \vec{m}}) (1 - \delta_{\vec{F}, \vec{l}}) (1 - \delta_{\vec{m}, \vec{l}}) C_{\vec{F}\vec{m}\vec{l}} \times \\
 \times \ll \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}} P_{\vec{l}}} | \hat{P}_{\vec{g}}^+ \sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{g}}} \gg & \quad (V.32)
 \end{aligned}$$

Kao posledica dekuplovanja, javljaju se GF definisane istovremeno sa tri različita čvora, i to takve da se ne mogu izraziti iz viših jednačina kretanja. Drugim rečima, gruba aproksimacija narušila je translacionu invarijantnost. Naš cilj je da u aproksimaciji Tjablikova dobijemo za GF $L(\vec{k}, \omega)$ isti zakon disperzije kao i za $F(\vec{k}, \omega)$. Stoga čineći opet grešku reda $1/\sqrt{n_{\vec{F}}}$ zamenjujemo $\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{F}}}$ sa $\sqrt{1 + \hat{n}_{\vec{m}}}$. Na taj način nađazimo sledeću jednačinu kretanja

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} L_{\vec{F}\vec{g}}(t) = i \delta(t) \delta_{\vec{F}, \vec{g}} K_1 + [\Delta - 2\bar{N}] \sum_{\vec{m}} (1 - \delta_{\vec{F}, \vec{m}}) A_{\vec{F}, \vec{m}}] L_{\vec{F}\vec{g}}(t) + \\
 + (1 - 2\bar{N}) \Gamma \sum_{\vec{m}} X_{\vec{F}\vec{m}} L_{\vec{m}\vec{g}}(t) - \\
 - \bar{N} \sum_{\vec{m}\vec{l}} (1 - \delta_{\vec{F}, \vec{m}}) (1 - \delta_{\vec{F}, \vec{l}}) (1 - \delta_{\vec{m}, \vec{l}}) C_{\vec{F}\vec{m}\vec{l}} L_{\vec{l}\vec{g}}(t) & \quad (V.33)
 \end{aligned}$$

Posle Furije-transformacije po prostornim koordinatama i vremenu, lako se vidi da funkcija $L(\vec{k}, \omega)$ zadovoljava jednačinu istog tipa kao i $F(\vec{k}, \omega)$ ali sa drugačijim korelatorom. Zakon disperzije je u oba slučaja isti. Ako primetimo da operator $\sqrt{1 + \hat{n}} P P^+ \sqrt{1 + \hat{n}}$ ima svojstvene vrednosti $(1 + 2\bar{n})$, možemo uvesti dekuplovanje funkcije $L_{\vec{F}\vec{g}}(t)$

$$L_{\vec{F}\vec{g}}(t) \approx (1 + 2\bar{n}) \ll P_{\vec{F}} | P_{\vec{g}}^+ \gg \quad (V.34)$$

Ovde smo u cilju procene opet posmatrali sve operatore na istom čvoru.

Posle ovog dekuplovanja, uočavamo da se funkcija $F(\vec{k}, \omega)$ javlja u dve jednačine i daje isti zakon disperzije. Ovo je moguće ako se te dve jednačine poklapaju, tj. ako važi

$$K_1 = (1 + 2\bar{n})(1 - 2\bar{N}) \quad (\text{V.35})$$

Prema tome procedura dekuplovanja (V.34) je ekvivalentna zameni (V.35). U tom slučaju sva potrebna informacija je sadržana u jednačinama za funkciju $L(\vec{k}, \omega)$ pod uslovom da se izvrši aproksimacija (V.35). Stoga ćemo dalje posmatrati samo funkciju $L(\vec{k}, \omega)$. Ako u jednačini kretanja (V.26) izvršimo aproksimaciju (V.35) i Furije-transformišemo po prostornim koordinatama i vremenu, nalazimo

$$L(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{(1 + 2\bar{n})(1 - 2\bar{N})}{\omega - \omega_T(\vec{k})} \quad (\text{V.36})$$

Ovde je $\omega_T(\vec{k})$ data izrazom (V.9).

Prednost dobijenih izraza je u tome što su sve veličine izražene preko Boze-operatora. Koristeći relaciju (V.25), možemo $L(\vec{k}, \omega)$ izraziti preko funkcija $G(\vec{k}, \omega)$ i $D(\vec{k}, \omega)$

$$\begin{aligned} L(\vec{k}, \omega) &= \Omega_1(\bar{n})G(\vec{k}, \omega) + \Omega_2(\bar{n})\frac{1}{N^2} \times \\ &\times \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 G(\vec{k}_1, \omega_1)G(\vec{k}_2, \omega_2)G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega + \omega_2 - \omega_1) \end{aligned} \quad (\text{V.37})$$

Transformacije korišćene pri dobijanju gornjeg izraza su analogne sa transformacijama korišćenim pri analizi kinematičkih nivoa u niskotemperaturskoj aproksimaciji. Konačni rezultat je

$$\begin{aligned} G(\vec{k}, \omega) &= \frac{1}{\Omega_1(\bar{n})}L(\vec{k}, \omega) \left[1 - \frac{\Omega_2(\bar{n})}{L(\vec{k}, \omega)} \cdot \frac{1}{N^2} \times \right. \\ &\times \left. \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 G(\vec{k}_1, \omega_1)G(\vec{k}_2, \omega_2)G(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1, \omega + \omega_2 - \omega_1) \right] \end{aligned} \quad (\text{V.38})$$

Za dalji račun potrebno je da ispitamo vezu srednjeg broja popunjenoštvi bozona \bar{n} i srednjeg broja popunjenoštvi Pauliona \bar{N} . Polazeći od ATR relacija, i vodeći računa o aproksimaciji (V.35), dobijamo

simaciji u kojoj mi radimo, nalazimo

$$\bar{N} = \left\langle \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} B_{\vec{k}}^{v+1} B_{-\vec{k}}^{v+1} \right\rangle = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} (v+1)! \bar{n}^{v+1} = \frac{\bar{n}}{1 + 2\bar{n}}$$

što se može iskazati na sledeći način

$$\bar{N} = \frac{\bar{n}}{1 + 2\bar{n}} \Rightarrow \bar{n} = \frac{\bar{N}}{1 - 2\bar{N}} \Rightarrow (1 - 2\bar{N})(1 + 2\bar{n}) = 1 \quad (\text{V.39})$$

Vidimo da se ovim postiže pojednostavljenje izraza (V.36) za funkciju $L(\vec{k}, \omega)$.

Ovu formulu možemo jednostavno testirati. U aproksimaciji Tjablikova $\Omega_1 = 1$, $\Omega_2 = 0$. Ovo je prema (V.38)

$$G_T(\vec{k}, \omega) = L_T(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_T(\vec{k})} \quad (\text{V.40})$$

Koristeći teoremu o spektralnoj intenzivnosti nalazimo

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\omega_T(\vec{k})/\theta} - 1} \quad (\text{V.41})$$

što prema (V.39) upravo daje rezultat aproksimacije Tjablikova. Odavde vidimo da smo reprodukovali traženi rezultat, tj. da je izbor dekuplovanja (V.34) bio korektan.

Posmatrajmo opšti slučaj opisan jednačinom (V.38). Za nultu aproksimaciju biramo

$$\begin{aligned} G^{(o)}(\vec{k}, \omega) &= \frac{1}{\Omega_1(\bar{n}^{(o)})} L_T(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\Omega_1^{(o)}} \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_T^{(o)}(\vec{k})} + \frac{\pi}{1} \delta[\omega - \omega_T^{(o)}(\vec{k})] \right\} \end{aligned} \quad (\text{V.42})$$

Koristeći poznate integrale po ω , nalazimo u sledećoj aproksimaciji $G^{(k)}(\vec{k}, \omega)$:

$$\begin{aligned} G^{(k)}(\vec{k}, \omega) &= \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_T^{(o)}(\vec{k})} \cdot \frac{1}{\Omega_1^{(o)}} \left(1 - \frac{\Omega_2^{(o)}}{4\Omega_1^{(o)}} [\omega - \omega_T^{(o)}(\vec{k})] \right) \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \frac{1}{\omega + \omega_T^{(o)}(\vec{k}_2) - \omega_T^{(o)}(\vec{k}_1) - \omega_T^{(o)}(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} + \right. \end{aligned}$$

$$+ \frac{2\pi}{i} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \delta[\omega + \omega_T^{(o)}(\vec{k}_2) - \omega_T^{(o)}(\vec{k}_1) - \omega_T^{(o)}(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)] \} \quad (V.43)$$

Ovde indeks o označava veličine izračunate u Tjablikovskoj aproksimaciji bez uzimanja u obzir kinematičkih efekata. Iz ove jednačine možemo u principu odrediti novu vrednost bozonskog broja popunjenošti \bar{n} , a preko njega i \bar{N} , $\langle S^z \rangle$ i $\langle S^x \rangle$.

Ocenimo doprinos kinematičkih nivoa. Pre svega radićemo u kvazičestičkoj aproksimaciji, tj. zanemarićemo član sa δ -funkcijom u jednačini (V.43). (U slučaju za koji ćemo izvoditi numerički proračun, ovaj član je identički jednak nuli.) Tada se (V.43) svodi na

$$G^{(k)}(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_T^{(o)}(\vec{k})} \cdot \frac{1}{\Omega_1^{(o)}} \left[1 - \frac{\Omega_2^{(o)}}{4\Omega_1^{(o)} N^3} \cdot \frac{1}{N^2} \times \right. \\ \left. \times \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \frac{\omega - \omega_T^{(o)}(\vec{k})}{\omega + \omega_T^{(o)}(\vec{k}_2) - \omega_T^{(o)}(\vec{k}_1) - \omega_T^{(o)}(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} \right]. \quad (V.44)$$

Pretpostavimo da se izraz u srednjoj zagradi može napisati na sledeći način:

$$G^{(k)}(\vec{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_T^{(o)}(\vec{k})} \left[\frac{A(\vec{k})}{\omega - \tilde{\omega}(\vec{k})} + B(\vec{k}) \right] \frac{1}{\Omega_1^{(o)}} \quad (V.45)$$

Bozonski broj popunjenošti uz uračunavanje kinematičkih efekata dat je sa

$$\bar{n} = \frac{1}{\Omega_1^{(o)}} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left\{ \left[\frac{A(\vec{k})}{\omega_T^{(o)}(\vec{k}) - \tilde{\omega}(\vec{k})} + B(\vec{k}) \right] \times \right. \\ \left. \times \frac{1}{e^{\frac{\omega_T^{(o)}(\vec{k})/\theta}{N}} - 1} - \frac{A(\vec{k})}{\omega_T^{(o)}(\vec{k}) - \tilde{\omega}(\vec{k})} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\tilde{\omega}(\vec{k})/\theta}{N}} - 1} \right\} \quad (V.46)$$

a energija koja odgovara kinematičkim nivoima je upravo $\tilde{\omega}(\vec{k})$.

Osnovni problem je rešavanje jednačine

$$\frac{A(\vec{k})}{\omega - \tilde{\omega}(\vec{k})} + B(\vec{k}) = 1 - \frac{\Omega_2^{(o)}}{4\Omega_1^{(o)} N^3} \cdot \frac{1}{N^2} \times$$

$$\times \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \frac{\omega - \omega_T^{(o)}(\vec{k})}{\omega_T^{(o)}(\vec{k}_2) - \omega_T^{(o)}(\vec{k}_1) - \omega_T^{(o)}(\vec{k} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1)} \quad (V.47)$$

U ovoj jednačini se javlja višestruki singularni integral. Stoga pribegavamo istim aproksimacijama kao i u prethodnom računu. Znači, funkcije talasnog vektora zamenjujemo njihovim vrednostima izračunatim u karakterističnim tačkama Briluenove zone. U tom slučaju više nema sumiranja po \vec{k}_1 i \vec{k}_2 , tako da se jednačina pojednostavljuje

$$\begin{aligned} \frac{A}{\omega - \tilde{\omega}} + B &= 1 - \frac{\Omega_2^{(o)}}{4\Omega_1^{(o)3}} \cdot \frac{\omega - \omega_T^{(o)}}{\omega - \omega_T^{(o)}} \\ B &= 1 - \frac{\Omega_2^{(o)}}{4\Omega_1^{(o)3}} \quad A = 0 \end{aligned} \quad (V.48)$$

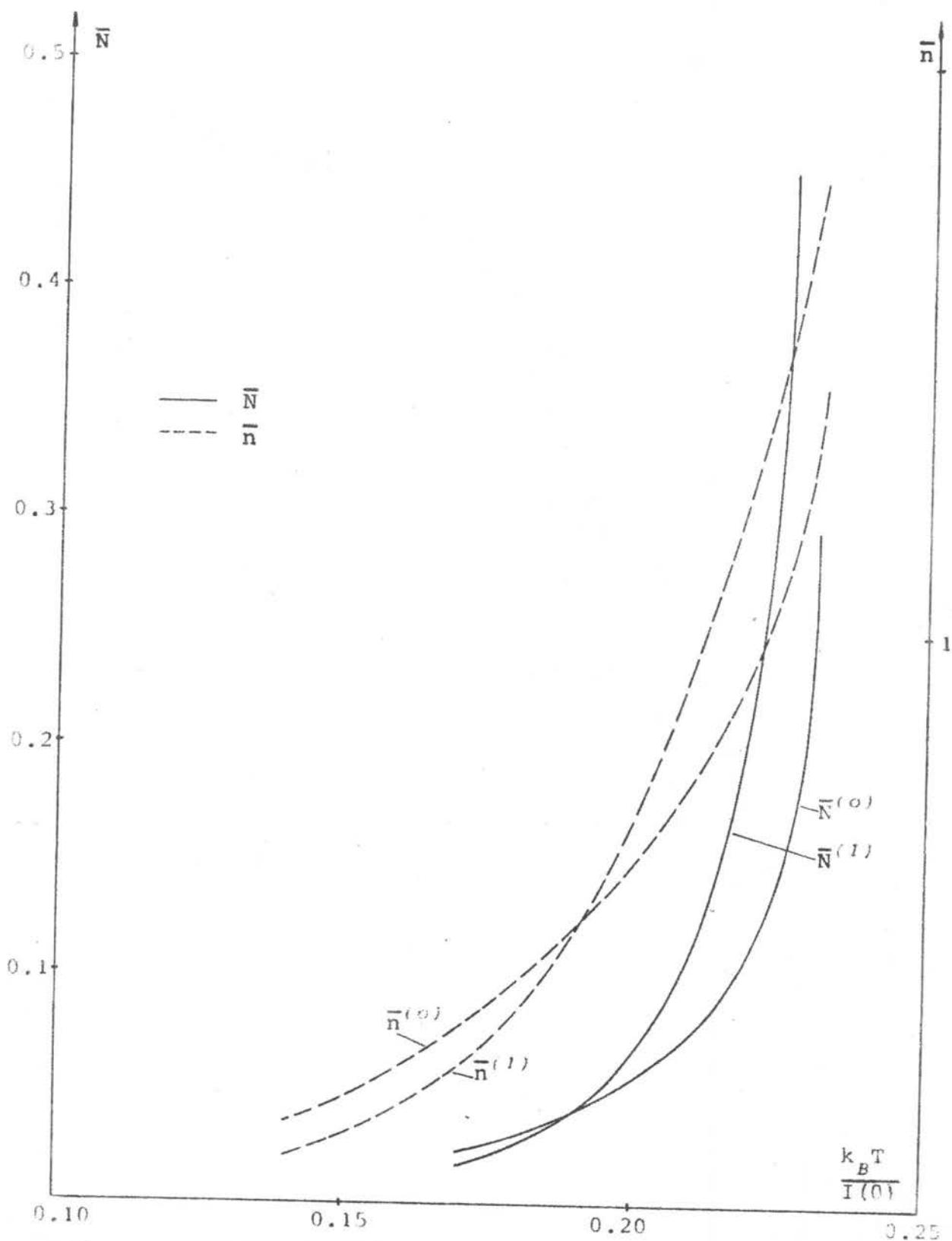
Kao što vidimo u ovoj aproksimaciji, nema dodatnih energetskih nivoa, ali je zato bozonski broj popunjenoštvi renormalizovan jednim temperaturski zavisnim faktorom

$$\bar{n} = \frac{1}{\Omega_1^{(o)}} \left(1 - \frac{\Omega_2^{(o)}}{4\Omega_1^{(o)3}} \right) \frac{1}{e^{\omega_T^{(o)}/\theta} - 1} \quad (V.49)$$

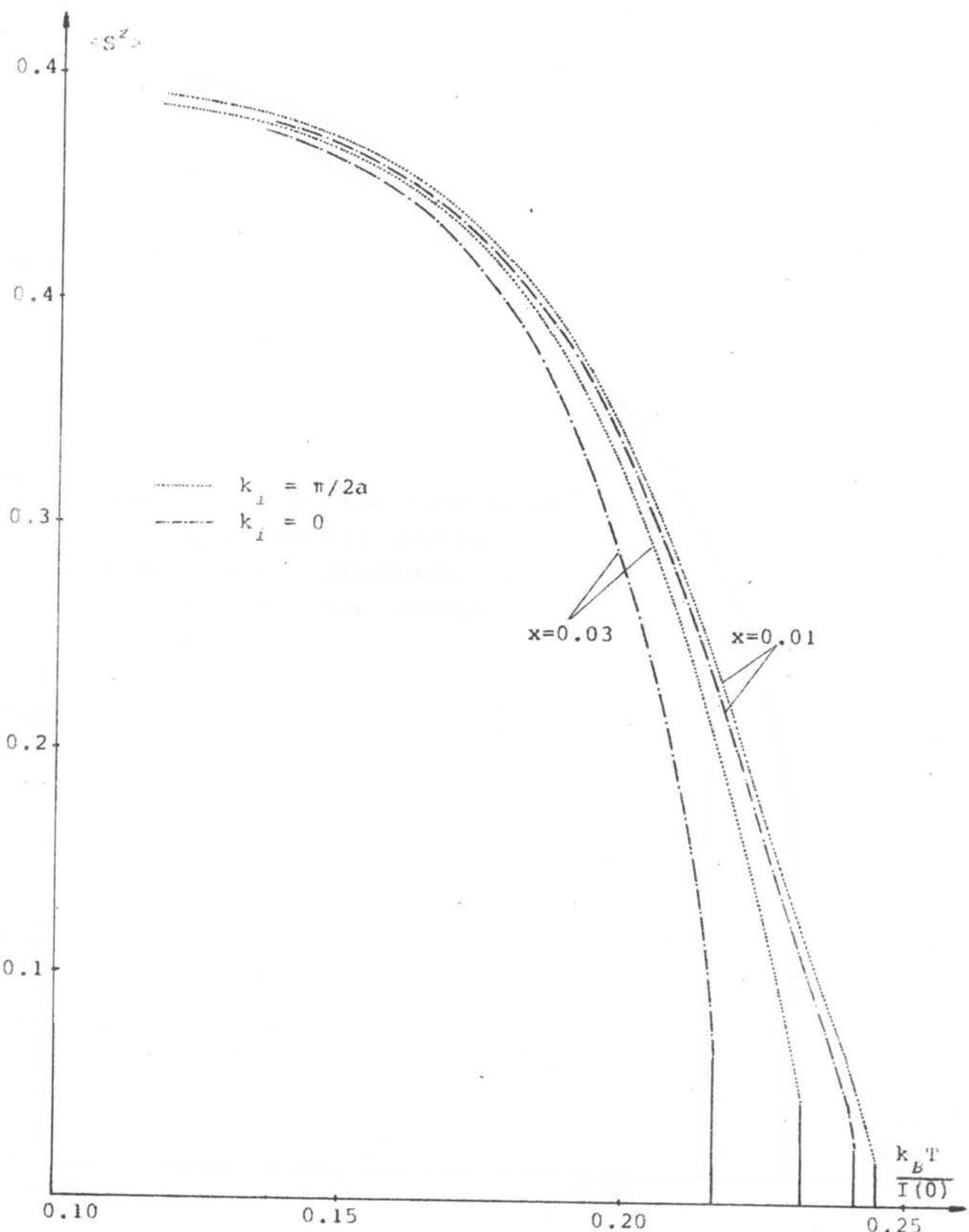
Vreme života je beskonačno.

Koristeći jednačine (V.9), (V.10), (V.39) i (V.49), izveli smo numerički proračun za slučaj $d = 3$. Rezultati su prikazani na seriji priloženih grafika.

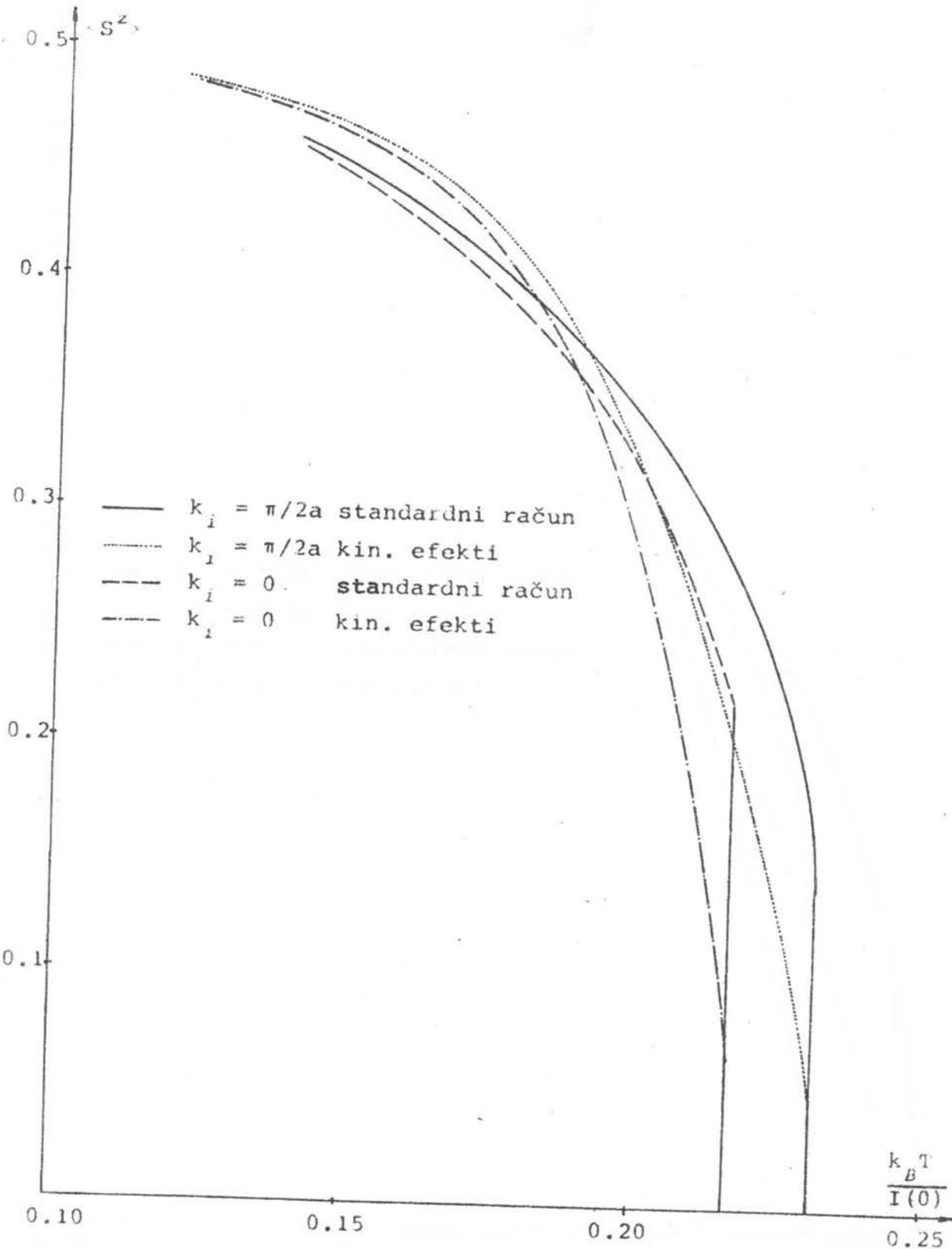
Najbitnija informacija je sadržana na graficima koji prikazuju temperatursku zavisnost spontane polarizacije $\langle S^z \rangle$. Uočavamo da se kao rezultat ovog prilaza dobija fazni prelaz I vrste. Ovo se u posmatranoj aproksimaciji i moglo očekivati, jer se uticaj kinematičke interakcije ogleda samo u renormalizaciji srednje vrednosti bozonskog broja popunjenoštvi, a ne u pojavi novih energetskih nivoa. Samim tim položaj i vrsta faznog prelaza su u potpunosti diktirani nultom aproksimacijom korišćenom pri proračunu kinematičkih nivoa, a to je aproksimacija Tjablikova. Mnogo je bitniji podatak, da je skok polarizacije na T_c mnogo manji, a sam hod krive polarizacije u funkciji temperature više podseća na fazni prelaz II vrste. Kakvo objaš-



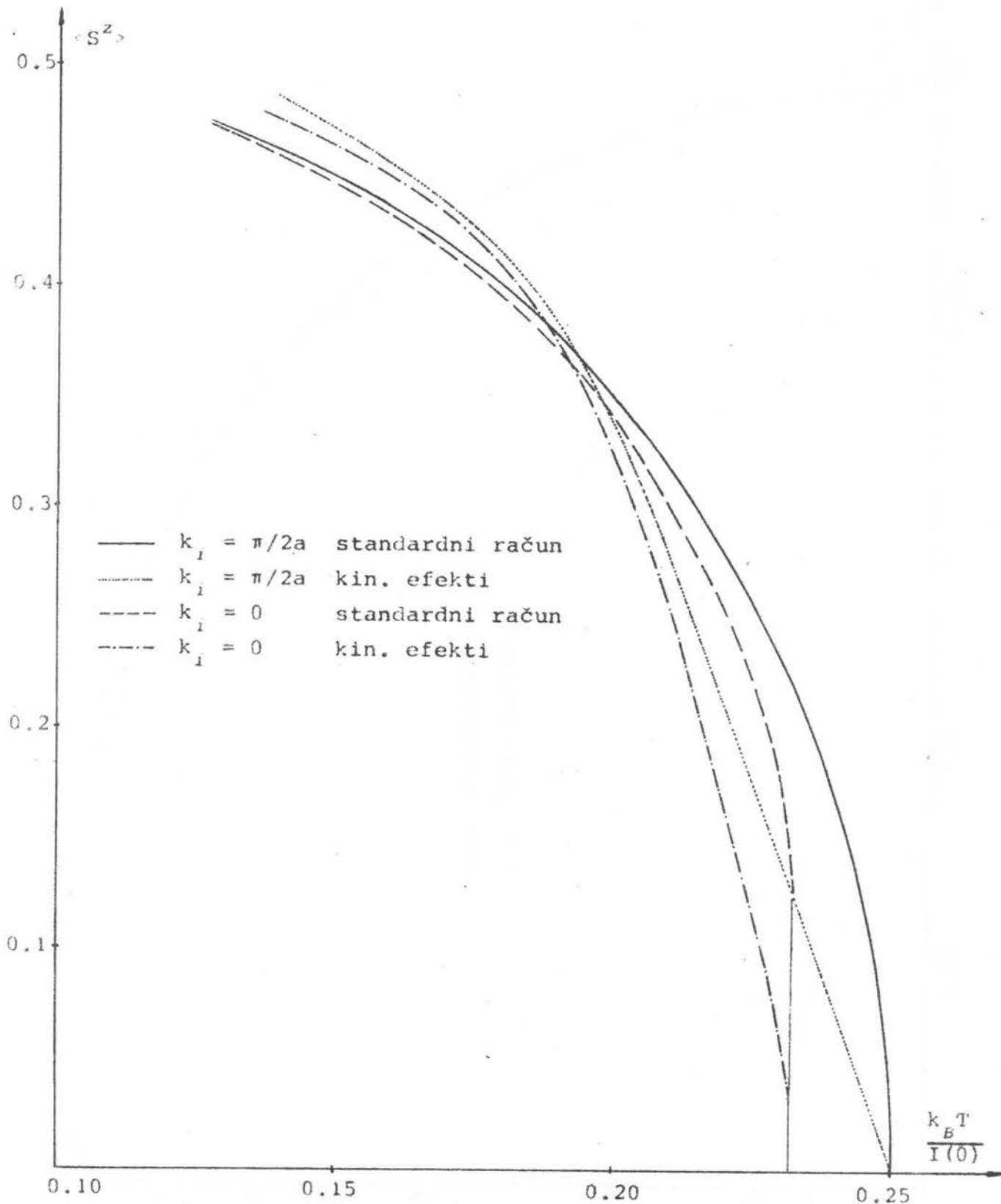
Sl.V.15. \bar{N} i \bar{n} u funkciji $\frac{k_B T}{I(0)}$. Rezultati standardnog tret-kata ($\bar{N}^{(0)}$ i $\bar{n}^{(0)}$) i uz uračunavanje doprinosa kinematičkih efe-



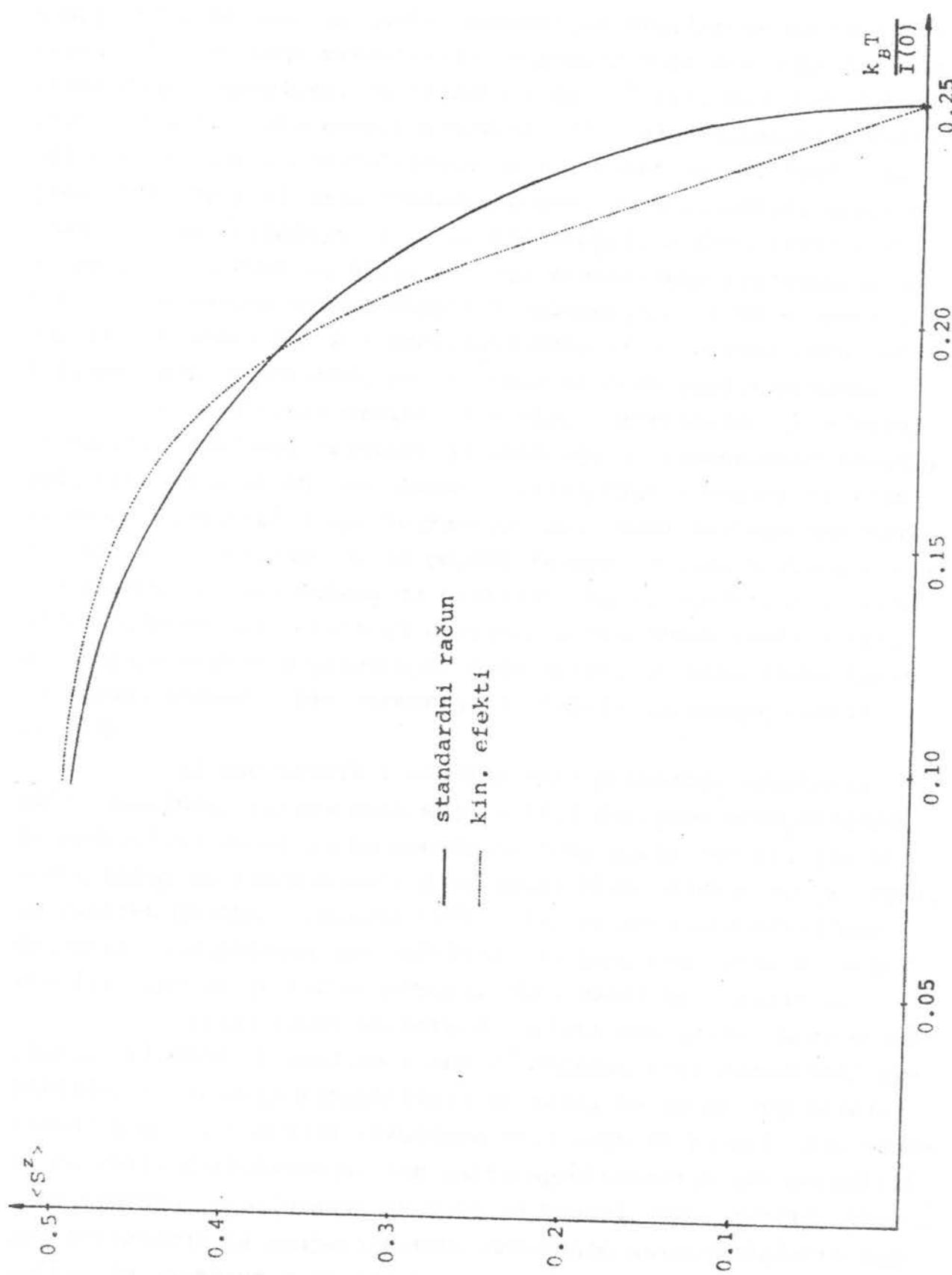
Sl.V.16. $\langle S^z \rangle$ u funkciji $k_B T / I(0)$ posle uračunavanja doprinosa kinematičkih efekata za $d = 3$ i $x = 0.01$ i 0.03 .



Sl.V.17. $\langle S^z \rangle$ u funkciji $k_B T/I(0)$ za $d = 3$ i $x = 0.03$. Poredjene rezultata standardnog tretmana i uz uračunavanje doprinosa kinematičkih efekata.



Sl.V.18. $\langle S^z \rangle$ u funkciji $k_B T/I(0)$ za $x = 0.03$ i $d \rightarrow \infty$. Poređenje rezultata standardnog tretmana i uz uračunavanje doprinosova kinematičkih efekata.



Sl.V.19. $\langle S^z \rangle$ u funkciji $\frac{k_B T}{I(0)}$, za Izingov model ($x = 0$). Poredjenje rezultata standarnog tretmana i uz uračunavanje kinetičkih efekata.

njenje se može dati za ovakvo ponašanje? Vratimo se na hamiltonijan (III.27) koji predstavlja celokupni doprinos IMTF izražen preko Pauli-operatora, do članova reda $x^2 I(0)$. Ako uočimo uslove pod kojima smo izveli proračun $\langle S^z \rangle$ uz uračunavanje kinematičkih efekata, možemo videti da su jedini delovi hamiltonijana (III.27) koji daju doprinos u ovoj aproksimaciji, upravo članovi koji pripadaju H_{ef} . Drugim rečima, možemo tvrditi da je proračun u kome su uzete u obzir kinematičke interakcije ekvivalentan računu sa celokupnim hamiltonijanom IMTF u aproksimaciji linearnoj po \bar{n} (znači zaključno sa članovima reda GDG) i istovremeno kvadratnoj po x . Kako sa ovim hamiltonijanom $|B|$ treba očekivati prelaz II vrste, u aproksimaciji u kojoj mi radimo, dobijeni rezultat je neka vrsta "kompromisa" izmedju rezultata koji bi dao celokupan hamiltonijan i rezultata koji slede iz izbora nulte aproksimacije. Zbog ovog razloga smo ranije naveli da smatramo da je pojava faznog prelaza I vrste u našem računu osobina vezana za efektivni hamiltonijan, a ne ceo IMTF. Uočavamo da rezultati dobijeni u graničnim slučajevima, potvrđuju ovakvo objašnjenje, mada ostaje problematično kakav je smisao kinematičkih korekcija u slučaju Izingovog modela ($x = 0$).

Mi smo naveli i grafike koji prikazuju ponašanje $\langle S^x \rangle$. Nažalost, informacija koju o njoj dobijamo ovom metodom je nedovoljna da se njeno ponašanje detaljnije ispita, jer u stvari imamo na raspolaganju samo jedan član razvoja po x . Ipak, za razliku od MFA rezultata $\langle S^x \rangle = 2x$, mi dobijamo odredjenu temperatursku promenu ove veličine. Iz gore navedenih razloga smatrali smo da je teško izvršiti neku detaljniju analizu.

Rezimirajući ukratko rezultate ove glave, možemo zaključiti sledeće. Formulisali smo u temperaturski nezavisnoj aproksimaciji teoriju kinematičkih efekata, na strožijoj matematičkoj osnovi, i dobili rezultate koji mogu da posluže kao osnova za dalja istraživanja. Kao nultu aproksimaciju smo koristili Tjablikovsko dekuplovanje GF i to je mogući izvor kvantitativnog neslaganja sa eksperimentom. Rešavanje samousaglašenih jednačina je izvedeno u specijalnim slučajevima kada su funkcije

talasnog vektora zamenjene nijhovom vrednošću u jednoj po-

sebnoj tačci Briluenove zone. Ovo umanjuje opštost zaključka, ali imamo osnova da verujemo da je činjenica da je fazni prelaz I vrste osobina efektivnog hamiltonijana a ne načina rešavanja samousaglašenih jednačina. Sa ovim hamiltonijanom smo uspeli da kvalitativno reprodukujemo većinu osobina feroelektrika tipa KDP, a smatramo da je osnovni izvor kvantitativnih neslaganja sa eksperimentom pre svega kratkoća reda po x .

UMESTO ZAKLJUČKA

Na kraju svake glave posvećene originalnom delu rada mi smo rezimirali šta je uradjeno u toj glavi. Ovde ćemo pokušati da stvorimo generalnu šemu onoga što se ovom tezom želelo postići a na onome ko čita tezu je da proceni u kojoj meri smo i uspeli.

Cilj nam je bio dvojak: da jedan novi formalizam za dekuplovanje GF primenimo na jedan specifičan model, i da samim tim doprinesemo istraživanju samog modela. Reč je o Izingovom modelu u poprečnom polju, koji je od znatnog interesa za istraživanje niza materijala, dakle o veoma zanimljivom modelu, koji je sa aspekta statističke fizike interesantan i sam po sebi zbog toga što je veoma jednostavan, ali istovremeno i veoma sadržajan.

Nezavisno od modela, uspeli smo da metodiku o kojoj je reč razradimo i rigoroznije zasnujemo nego što je to bio do sada slučaj. Potom smo ovu metodiku primenili na naš slučaj. Pоказали smo da u oblasti niskih temperatura možemo da u granicama naših aproksimacija (pre svega ograničava nas aproksimacija po malom parametru x) reprodukujemo do sada poznate rezultate u polaznoj aproksimaciji, dok smo idući korak dalje, utvrdili egzistenciju dodatnih energetskih nivoa, čije se prisustvo može manifestovati upravo tokom krive polarizacije u funkciji temperature.

U oblasti temperatura bliških temperaturi prelaza, dobili smo već u nultoj aproksimaciji značajan rezultat: fazni prelaz je I vrste. Ovo se ne slaže sa teorijskim rezultatima dobijenim za IMTF ali je skoro izvesno da je ova osobina posledica naše interpretacije IMTF, tj. selekcije odredjenih interakcija kao bitnih. To bi onda značilo da je ova verzija modela bliža realnoj situaciji. S druge strane efekat kinematičkih nivoa je takav da oni impliciraju prelaz II vrste jer je reč upravo o tome da se posmatra ponašanje celukupnog hamitonijana IMTF.

Radeći na formulisanju teorije koja još uvek zahteva niz aproksimacija, stalno se nametala misao da li je moguće naći neki drugačiji pristup koji bi omogućio da se izbegnu sve te aproksimacije. Mislimo da odgovor leži u rezultatu koji je naveden u Prilogu, gde je pokazano kako se u opštem slučaju može prikazati koren iz operatorskog reda preko drugog operatorskog reda. Ovo je bila mala posledica rada na tezi, ali danas uvidjamo da je ovo bitan rezultat i već preliminarni računi pokazuju da je to pravi put kojim treba ići pogotovo kada je reč o ispitivanju niskotemperaturskih osobina. Namera nam je da u ovom pravcu nastavimo rad.

Rezultati dobijeni u tezi omogućuju proširenje istraživanja na izračunavanje korelacionih funkcija |P 7|, detaljniju diskusiju ponašanja $\langle S^x \rangle$ |L10| kao i generalizaciju na više vrednosti pseudo-spina ($S > 1/2$).

Kada je reč o primeni na realne sisteme, ne jednom smo naglasili značaj spin-fonon interakcije |K11|. Stoga, planiramo da istraživanja nastavimo u tom smeru, jer se već pokazalo da tako dobijene hibridizovane ekscitacije mogu interagovati sa kinematičkim nivoima i dati zanimljive rezultate.

Problem objašnjenja postojanja trikritične tačke se možda može takodje tražiti u okviru ovog modela, ali je potrebno preispitati način uvodjenja pritiska kao dodatnog parametra u naše jednačine.

Posmatrajući ovaj "zaključak" u celini, izgleda kao da je ova teza postavila više pitanja nego što je dala odgovora. No da bi se postavilo pravo pitanje, treba bar nazirati odgovor. A nauka može napredovati samo postavljanjem pravih pitanja.

P R I L O G

BOZONSKIE REPREZENTACIJE SPINSKIH OPERATORA

U ovom ćemo Prilogu dati kratak pregled problematike vezane za reprezentovanje operatora koji odgovaraju spinu 1/2, Boze operatorima. S obzirom na postojanje iscrpnih preglednih radova [G 2, G 4] (videti takodje i [TII]) nećemo insistirati na svim detaljima, već nam je osnovni cilj da ukažemo na značaj i pogodnosti reprezentacije Arganoviča-Tošića (ATR) [A 2] koju smo koristili u samom radu.

Sistem N spinova 1/2 čije komutacione relacije zadovoljavaju standardne komutacione relacije za operator angularnog momenta [MII] deluje u 2^N dimenzionom Hilbertovom (Hilbert prostoru koji je direktni produkt N dvodimenzionih Hilbertovih prostora koji odgovaraju pojedinačnim operatorima spina. Za bazis unutar ovih prostora možemo izabrati napr. zajedničke svojstvene funkcije operatora \hat{S}_m^2 i \hat{S}_m^z . Potpuno ekvivalentno je uvesti umesto njih Pauli-operatore [TII, TIII] koji takodje deluju u dvodimenzionim prostorima stanja, a veza izmedju Pauli-operatora i spinskih operatora (samo za slučaj spina 1/2) je data relacijama

$$\hat{S}_m^- \rightarrow \hat{P}_m^+ \quad \hat{S}_m^+ \rightarrow \hat{P}_m^- \quad \hat{S}_m^z \rightarrow \frac{1}{2} - \hat{P}_m^+ \hat{P}_m^- \quad (\text{P } 1)$$

Osnovni problem koji treba razrešiti je sledeći: mogu li se spinskim operatorima pridruživati odgovarajuće konstrukcije Boze operatora koje daju ekvivalentne rezultate delujući u prostoru stanja operatora broja popunjenoštvi bozona. Drugim rečima, ove kombinacije deluju u Hilbertovom prostoru koji je direktni produkt prostora stanja koji odgovaraju pojedinoj vrsti Boze-operatora. Kako svojstvene funkcije operatora broja popunjenoštvi $\hat{n}_m = \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^-$ uzimaju vrednosti $n_m = 0, 1, 2, 3, \dots$, jasno je da je osnovni problem ovog preslikavanja različita dimenzionalnost ova dva prostora.

Pri ovom preslikavanju se uvek javljaju novi članovi bozonskog hamiltonijana koji ne vode poreklo iz polaznog

hamiltonijana, dakle iz dinamike problema, već su posledica različitih komutacionih relacija spinskih i Boze-operatora. Ova druga interakcija se naziva kinematička interakcija, za razliku od napred pomenuće dinamičke interakcije.

Prve približne reprezentacije

Blohova (Bloch)

$$\hat{P}_{\vec{m}} = \hat{B}_{\vec{m}} \quad \hat{P}_{\vec{m}}^+ = \hat{B}_{\vec{m}}^+ \quad \hat{P}_{\vec{m}}^+ \hat{P}_{\vec{m}} = \hat{B}_{\vec{m}}^+ \hat{B}_{\vec{m}}$$

i Holštajn-Primakova (Holstein, Primakoff)

$$\hat{P}_{\vec{m}} = \sqrt{1 - \hat{B}_{\vec{m}}^+ \hat{B}_{\vec{m}}} \cdot \hat{B}_{\vec{m}} \approx \hat{B}_{\vec{m}} - \frac{1}{2} \hat{B}_{\vec{m}}^+ \hat{B}_{\vec{m}} \hat{B}_{\vec{m}} \quad \hat{P}_{\vec{m}}^+ = (\hat{P}_{\vec{m}})^+$$

imaju osnovni nedostatak što uvode tzv. nefizička stanja. Kada deluju u dvodimenzionom prostoru stanja, rezultati su tačni, ali kinematička interakcija prouzrokuje "izlazak" iz ovog prostora, tako da više nije očuvana relacija $(\hat{S}_{\vec{m}}^-)^2 = 0$.

Kao moguće rešenje Dajson |D 6| je predložio neermitsku reprezentaciju kojom je uspeo da ispita niskotemperatursko ponašanje Hajzenbergovog feromagnetika. Iako je u datom slučaju ova reprezentacija dala ispravan rezultat, ni ona nije primenljiva u okolini faznog prelaza.

Reprezentacija Arganovića-Tošića |A 2| je prvobitno formulisana za slučaj dvonivoske šeme eksitonskog sistema. Polazna ideja je bila da se predpostavi sledeća forma

$$\hat{P}_{\vec{m}} = \left(\sum_{v=0}^{\infty} a_v \hat{B}_{\vec{m}}^{+v} \hat{B}_{\vec{m}}^v \right)^{1/2} \hat{B}_{\vec{m}} \quad \hat{P}_{\vec{m}}^+ = (\hat{P}_{\vec{m}})^+ \quad (P 2)$$

Ovaj izraz ima smisla samo ako operatori deluju u bazisu broja popunjenošći bozona \hat{n} . Kako je

$$\hat{B}_{\vec{m}}^{+v} \hat{B}_{\vec{m}}^v = \hat{n}_{\vec{m}} (\hat{n}_{\vec{m}} - 1) (\hat{n}_{\vec{m}} - 2) \dots (\hat{n}_{\vec{m}} - v + 1)$$

svaki sledeći član reda ima svojstvenu vrednost jedaku nuli na većem podprostoru stanja sa $n_{\vec{m}} < v$. Na taj način red možemo tretirati kao konvergirajući. Pod ovom predpostavkom, možemo iz uslova

$$\hat{P}_{\vec{m}}^+ \hat{P}_{\vec{m}}^- + \hat{P}_{\vec{m}}^- \hat{P}_{\vec{m}}^+ = 1$$

odrediti oblik koeficijenata a_v

$$a_v = \frac{(-2)^v}{(v+1)!}$$

Konačno možemo pisati

$$\hat{P}_{\vec{m}} = \hat{f}_{\vec{m}}^{1/2} \hat{B}_{\vec{m}} \quad \hat{f}_{\vec{m}} = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} \hat{B}_{\vec{m}}^{+v} \hat{B}_{\vec{m}}^v \quad \hat{P}_{\vec{m}}^+ = \left(\hat{P}_{\vec{m}} \right)^+ \quad (\text{P } 3)$$

Ovako definisani operatori zadovoljavaju sve komutacione relacije, pravila suma kao i uslov $(\hat{P}_{\vec{m}})^2 = 0$, a reprezentacija je ermitska.

Pokazana je pozitivna definisanost operatora $\hat{f}_{\vec{m}}$ tj. pokazano je da njegov svojstveni problem ima sledeća rešenja

$$\hat{f}_{\vec{m}} |n_{\vec{m}}\rangle = \frac{1}{2} [1 - (-1)^{\frac{n_{\vec{m}}-1}{2}}] \frac{1}{n_{\vec{m}}+1} |n_{\vec{m}}\rangle = \begin{cases} 0 & n_{\vec{m}} \text{ neparno} \\ \frac{1}{n_{\vec{m}}+1} |n_{\vec{m}}\rangle & n_{\vec{m}} \text{ parno} \end{cases}$$

Odavde se lako vidi da je

$$\hat{N}_{\vec{m}} |n_{\vec{m}}\rangle = \begin{cases} 0 & n_{\vec{m}} \text{ neparno} \\ 1 & n_{\vec{m}} \text{ parno} \end{cases}$$

Prema tome, svojstvenom stanju $|0\rangle_{\vec{m}}$ broja popunjenoosti Pauli-operatora $\hat{N}_{\vec{m}} = \hat{P}_{\vec{m}}^+ \hat{P}_{\vec{m}}^-$ odgovara skup svih stanja sa neparnom vrednošću $n_{\vec{m}}$, dok stanju $|1\rangle_{\vec{m}}$ odgovara skup svih stanja sa parnim $n_{\vec{m}}$ [T 8].

Istovremeno uočavamo i nedostatke ATR. Jedan je beskonačna degeneracija svojstvenih stanja. Ovaj problem je nedavno rešen [G 3, G 4] tako što je pokazano da se ceo prostor bozonskih stanja može razbiti na 2^N dimenzione podprostore. Tada se matrica koja predstavlja hamiltonijan javlja u obliku blok matrice. Ako se na pogodan način uvede statistička težina koja odgovara pojedinom bloku, onda statistička suma u termo-dinamičkom limesu konvergira.

Drugi problem je nepogodnost rada sa kvadratnim

korenem operatorskog reda. Razvijanje korena po binomnom obrazcu ne daje dobar rezultat. I ovde treba primeniti istu logiku kao kod formulisanja problema. Predpostavljamo da se red može razviti na sledeći način

$$\left(\sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(v+1)!} \hat{B}_m^{+v} \hat{B}_m^v \right)^{1/2} = \sum_{v=0}^{\infty} b_v \hat{B}_m^{+v} \hat{B}_m^v \quad (P\ 4)$$

Delovanjem na bazisne vektore $|n_m\rangle$ mogu se koeficienti izračunati član po član. Za niskotemperaturski režim, kada važi uslov $\bar{n} \ll 1$, dovoljno je znati samo prve članove, dok u slučaju visokih temperatura moramo koristiti ceo red (P 3) naprimer uvodjenjem pomoćne funkcije, kao što je to ovde radjeno.

Pokušaji da se odredi analitička forma koeficijenata b_v , tek su nedavno urodili plodom. To su uradili A. Ivić i autor [K 9] i nezavisno od njih Goldhirš (Goldhirsch) sa saradnicima [G 4]. Skiciraćemo prvi pristup.

Koristeći osobine operatora f , problem se svodi na određivanje koeficijenata b reda sa sledećom osobinom

$$\sum_{v=0}^n b_v \frac{1}{(n-v)!} = \begin{cases} 0 & n \text{ neparno} \\ \frac{1}{n! \sqrt{n+1}} & n \text{ parno} \end{cases} \quad (P\ 5)$$

Ako predpostavimo tri dobro definisana rada

$$A(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad B(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \quad C(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$$

onda iz uslova

$$B(x)C(x) = A(x)$$

sledi

$$a_n = \sum_{v=0}^n b_v c_{n-v}$$

Za nalaženje traženog rezultata treba predpostaviti

$$C(x) = e^x \quad a_n = \begin{cases} 0 & \text{za } n \text{ neparno} \\ \frac{1}{n! \sqrt{n+1}} & \text{za } n \text{ parno} \end{cases}$$

Ovde zaključujemo da je traženi koeficient dat izrazom

$$b_v = \frac{(-1)^v}{v!} \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{1}{\sqrt{2k+1}} \binom{v}{2k} = \frac{(-1)^v}{v!} \sum_{k \text{ parno}}^n \frac{1}{\sqrt{k+1}} \binom{v}{k} \quad (\text{P } 6)$$

a istovremeno dobijamo i procenu

$$|b_v| < \frac{2^{v-1}}{v!} \quad v > 2 \quad (\text{P } 7)$$

Prvih nekoliko članova reda su

$$b_0 = 1$$

$$b_1 = -1$$

$$b_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$$

$$b_3 = -\frac{1}{6} \left(1 + \sqrt{3} \right)$$

a koristeći procenu (P 7) vidimo da je već $|b_5| \ll 0.1$.

Goldhirš i saradnici su ovaj isti rezultat izveli na drugi način pretpostavljajući diferencijabilnost funkcija definisanih na skupu celih brojeva definisanih na pogodan način.

ATR je razvijena i prvobitno korišćena u teoriji Frenkelovih (Френкель) eksitona, pre svega za korigovanje rezultata tzv. "približne druge kvantizacije" |T 9|, za istraživanje kinematičkih nivoa |P12| i eksiton-foton interakcije |H 5|. U teoriji Hajzenbergovog feromagnetika reproducovan je Dajsonov rezultat |K16|, analizirani su kinematički nivoi |T11| i proučavane različite hibridizovane ekscitacije |D 7|. Ovim radom smo pokazali da se metod uspešno može koristiti i u teoriji feroelektričnih fenomena.

ATR je predložena kao alternativa formalizmu Hubarda-Stratonoviča (Hubbard, Стратонович) |H 7| za formulisanje LGW funkcionele |G 3| kvantnih sistema. Moguća je generalizacija na slučaj opštег spina, tj. date su bozonske reprezentacije za tzv. kvazi-Pauli operatore.

Izračunavanje koeficijenata b_v omogućuje da se domen primenljivosti ATR znatno proširi, i prvi pokušaji koji su do sada vršeni u tom pravcu u oblasti niskih temperatura ukazuju da su mogućnosti zaista velike.

R E F E R E N C E

Reference navedene i korišćene u ovom radu su klasifikovane na sledeći način. Grupisane su abecednim redom po prvom slovu prezimena prvog autora. Unutar svake grupe su prvo navedene monografije i udžbenici, a potom originalni i pregledni članci, teze i mogući drugi izvori informacija. Sve referenčne su označene početnim slovom prezimena prvog autora i brojem unutar grupe, pri čemu rimski broj označava monografiju ili udžbenik, a arapski ostali tip reference.

Nazivi knjiga su uvek citirani u originalu, a ukoliko je u radu korišćen prevod date knjige, i on je citiran pod istom referencom. Članci su citirani na sledeći način: autor(i), naziv časopisa, tom, strana, godina izdanja. Skraćenice naziva časopisa su prema konvenciji prihvaćenoj od strane Evropskog fizičkog društva (EPS).

- [A 1] А.Л.Абрикосов, Л.П.Горнов, И.Е.Дзялошинский: Методы квантовой теории поля в статистической физике, ГИФМЛ, Москва (1962)
- [A 2] В.М.Агранович, Б.С.Тошич: ЖЭТФ 53, 149 (1967)
- [A 3] В.Л.Аксенов, Г.Конвент, Ю.Шрайбер: Препринт Р17-11369 СИЯИ, дубна (1978)
- [A 4] V.L.Aksenov, J.Schreiber: Phys.Lett. A 69, 56 (1978)
- [A 5] V.L.Aksionov, H.Konwent, J.Schreiber: phys.stat.sol.(b) 88, K43 (1978)
- [B 1] R.Blinic, B.Žekš: Soft Modes in Ferroelectrics and Anti-ferroelectrics, NHPC, Amsterdam (1974)
Р.Блинц, Б.Жекш: Сегнетозлектрики и антисегнетозлектрики "Мир", Москва (1975)
- [B 2] P.Bastie, M.Vallade, C.Vettier, C.M.Zeyen: Phys.Rev.Lett. 40, 337 (1978)
- [B 3] J.W.Benepe and W.Reese: Phys.Rev. B 3, 3032 (1971)
- [B 4] A.R.Bishop and J.A.Krumhansl: Phys.Rev. B 12, 2824 (1975)
- [B 5] R.Blinic: J.Phys.Chem.Solids 13, 204 (1960)
- [B 6] R.Blinic and S.Svetina: Phys.Rev. 147, 423, 430 (1966)
- [B 7] R.Blinic and B.Žekš: Adv.Phys. 21, 694 (1972)
- [B 8] R.Blinic: J.Magn.Res. 30, 251, (1978)
- [B 9] E.M.Brody and H.Z.Cummins: Phys.Rev.Lett. 21, 1263 (1968)
- [B10] R.Brouet, K.A.Müller and H.Thomas: Sol.St.Commun. 4, 507 (1966)
- [B11] T.W.Burkhardt and J.D.Gunton: Phys.Rev. A 9, 2802 (1974)
- [C 1] M.Chabin and F.Gilleta: Ferroel. 15, 149 (1977)
- [C 2] B.K.Chaudhuri and M.Saha: Ferroel. 18, 213 (1978)
- [C 3] W.Cochran: Adv.Phys. 9, 387 (1960)
- [C 4] E.Courtens: Preprint IBM Res.Lab. Zurich, (1978)
- [D 1] S.Doniach and E.H.Sondheimer: Green's Functions for Solid State Physicists, W.A. Benjamin, Reading (1974)
- [D 2] P.G.de Gennes: Sol.St.Commun. 1, 132 (1963)
- [D 3] S.D.Drell, M.Weinstein and Sh.Yankielowicz: Phys.Rev.D 16, 1769 (1977)
- [D 4] M.Dumont: Physica A 89, 419 (1977)
- [D 5] V.Dvořák: Ferroel. 7 1 (1974)
- [D 6] F.J.Dyson: Phys.Rev. 102, 1217, 1230 (1956)
- [D 7] G.S.Davidović-Ristovski, Lj.M.Ristovski, B.S.Tošić: Physica, NIHPC, 95B, 335 (1978)

- | E 1 | R.J.Elliott and C.Wood: J.Phys. C 4, 2359 (1971)
- | E 2 | R.J.Elliott, A.P.Young, S.R.P.Smith: J.Phys. C 4, L317 (1971)
- | E 3 | R.J.Elliott, R.T.Harley, W.Hayes and S.R.P.Smith: Proc. Roy.Soc. A 328, 217 (1972)
- | E 4 | R.J.Elliott, J.A.Krumhansl, D.P.Leath: Rev.Mod.Phys. 46, 465 (1974)
- | E 5 | R.J.Elliott and A.P.Young: Ferroel. 7, 23 (1974)

- | F 1 | E.Fatuzzo and W.J.Merz: Ferroelectricity, NHPC, Amsterdam (1967)
- | F 2 | C.W.Fairall and W.Reese: Phys.Rev.B 11, 2066 (1975)
- | F 3 | J.Feder: Ferroel. 12, 71 (1976)
- | F 4 | A.Fernandez-Pacheco: Preprint SLAC PUB - 2099, (Stanford 1978); Preprint SLAC PUB - 2117 (Stanford 1978)
- | F 5 | M.E.Fisher: J.Math.Phys. 4, 124 (1963)
- | F 6 | Z.Friedman: Phys.Rev.Lett. 36, 1326 (1976)
- | F 7 | Z.Friedman: Phys.Rev.B 17, 1429 (1978)

- | G 1 | J.Grindlay: An Introduction to the Phenomenological Theory of Ferroelectricity, Pergamon Press, Oxford (1970)
- | G 2 | P.Garbaczewski: Phys.Rep. 36, 65 (1978)
- | G 3 | I.Goldhirsch, E.Levich and V.Yakhot: Phys.Lett. A 62, 273 (1977)
- | G 4 | I.Goldhirsch, E.Levich and V.Yakhot: Preprint, Weizmann Institute, Rehovoth (1978)
- | G 5 | A.Ya.Gordon: phys.stat.sol.(b) 89, K69 (1978)
- | G 6 | R.B.Griffiths: Ferroel. 7, 71 (1974)

- | H I | W.C.Hamilton, J.A.Ibers: Hydrogen Bonding in Solids, W.A.Benjamin Inc., New York (1968)
- | HII | Hewlit-Packard Manual: Math Pack I
- | HIII | K.Huang: Statistical Mechanics, J.Wiley, New York (1963)
Н.Хуанг: Статистическая механика, "Мир", Москва (1976)
- | HIV | A.Hubert: Theorie der Domänwände in Geordnete Medie, Springer-Verlag, Berlin (1974)
А.Хуберт: Теория доменных стенок в упорядоченных средах, "Мир", Москва (1977)
- | H 5 | D.Hadžiahmetović, M.Pirić, B.S.Tošić: phys.stat.sol.(b) 83, 497 (1977)
- | H 6 | S.B.Haley and P.Erdős: Phys.Rev. B 5, 1106 (1972)
- | H 7 | J.A.Hertz: Phys.Rev.B 14, 1165 (1976)
- | H 8 | J.Holakovský, B.Brezina and O.Pacherová: phys.stat.sol.(b) 53, K69 (1972)

- | H 9 | G.D. Houston and H.C. Bolton: J.Phys. C 4, 2097 (1971)
- | I I | Ю.А.Изюмов, Ф.А.Нассан-оглы, Ю.Х.Скрябин: Половине методи
в теории ферромагнетизма, Наука, Москва (1974)
- | J I | F.Jona and G.Shirane: Ferroelectric Crystals, Pergamon
Press, Oxford (1962)
Ф.Йона, Д.Ширане: Сегнетозлентрические кристаллы, "Мир"
Москва (1965)
- | J 2 | R.Jullien, P.Pfeuty, J.N.Fields and S.Doniach: Phys.
Rev.B 18, 3568 (1978)
- | K I | C.Kittel: Introduction to Solid State Physics (III ed.),
J.Willey, New York
C.Kittel: Uvod u fiziku čvrstog stanja, Savremena admi-
nistracija, Beograd (1970)
- | K 2 | C.V.Kalashnikov and E.S.Fradkin: phys.stat.sol.(b) 59,
9 (1973)
- | K 3 | G.Kamieniarz: J.Phys.C 9, 4003 (1976)
- | K 4 | G.Kamieniarz: Acta Phys. Pol. A 52, 243 (1977)
- | K 5 | G.Kamieniarz: phys.stat.sol.(b) 87, 455 (1978)
- | K 6 | I.P.Kaminow and T.C.Damen: Phys.Rev.Lett. 20, 1105 (1968)
- | K 7 | D.Kapor: Feroelektrik tipa KDP u spoljašnjem elektromag-
netnom polju, Magistarski rad, Prirodno-matematički fa-
kultet u Beogradu, Beograd (1975)
- | K 8 | D.Kapor: phys.stat.sol.(b) 74, 497 (1976)
- | K 9 | D.Kapor and A.Ivić: phys.stat.sol.(b) 90, K157 (1978)
- | K10 | Sh.Katsura: Phys.Rev. 127, 1508 (1962)
- | K11 | K.Kobayashi: J.Phys.Soc. Japan. 24, 497 (1968)
- | K12 | H.Konwent: phys.stat.sol.(b) 28, 39 (1968)
- | K13 | H.Konwent and W.Weller: Acta Phys.Pol. A 41, 717 (1972)
- | K14 | Ю.В.Нозицкий, Р.Р.Левицкий: УФЖ 23, 661 (1978)
- | K15 | A.Kühnel, S.Wendt and J.Wesselinowa: phys.stat.sol.(b)
84, 653 (1977)
- | K16 | M.L.Kulić, B.S.Tošić: phys.stat.sol.(b) 56, K79 (1973)
- | K17 | P.C.Kwok and T.D.Schultz: J.Phys. C 2, 1196 (1969)
- | L I | Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц: Квантовая механика (III изд.)
"Наука", Москва (1974) str. 219
- | LII | Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц: Статистическая физика (часть 1)
(III изд.), "Наука", Москва (1976)
- | LIII | E.H.Lieb u Lectures in Theoretical Physics, Mathematical
Methods in Theoretical Physics XI D, Boulder, Colorado
(1969)

- [LIV] E.H.Lieb and Y.Wu: *u Phase Transitions and Critical Phenomena* (Eds. C.Domb and M.S.Green), Vol.1, Academic Press, London (1972)
- [LV] E.M.Лифшиц, Л.П.Питавеский: Статистическая физика, (часть 2), "Наука", Москва, (1978)
- [LVI] M.E.Lines and A.M.Glass: *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials*, Clarendon Press, Oxford (1977)
- [L 7] E.J.S.Lage and R.B.Stinchcombe: *J.Phys. C* 9, 3295, 3681 (1976)
- [L 8] J.Lajzerowicz, P.Pfeuty: *J.de Physique* T32, C-5, 193 (1971)
- [L 9] D.I.Lalović, B.S.Tošić and R.B.Žakula: *Phys.Rev.* 178, 1472 (1969)
- [L10] L.Lam and A.Bunde: *J.Phys. C* 10, 693 (1977)
- [L11] I.Larkin and D.E.Khmelnitskii: *Sov.Phys. JETP* 29, 1123 (1969)
- [L12] W.N.Lawless: *Phys.Rev.Lett.* 36, 478 (1976)
- [L13] I.D.Lawrie: *J.Phys. C* 11, 1123 (1978)
- [L14] P.P.Левицкий, С.И.Сороков: Препринт ИТФ-77-53Р, Киев, (1977)
- [M I] S.K.Ma: *Modern Theory of Critical Phenomena*, Benjamin New Jork (1976)
- [MII] A.Messiah: *Mécanique Quantique II*, Dunod, Paris (1964)
A.Messiah: *Quantum Mechanics II*, NHPC, Amsterdam (1970)
- [M 3] T.Mitsui, F.Nakamura and M.Tokunaga: *Ferroel.* 5, 18 (1973)
- [M 4] M.A.Moore and H.C.W.L.Williams: *J.Phys. C* 5, 3169, 3185, 3222 (1972)
- [N I] L.Novaković: *The Pseudo-Spin Method in Magnetism and Ferroelectricity*, Pergamon Press, Oxford (1975)
- [N 2] R.J.Nelness, V.R.Eriksson, K.P.Rouse: *Sol.St.Commun.* 11, 1261 (1972)
- [N 3] R.E.Nettleton: *phys.stat.sol.(b)* 24, 561 (1967)
- [N 4] R.E.Nettleton: *Ferrol.* 1, 3, 87, 93, 111, 121, 127, 207, 227 (1970) *ibid* 2, 5, 77, 93 (1971)
- [N 5] L.Novaković: *J.Phys.Chem.Solids* 27, 1469 (1966)
- [N 6] L.Novaković, S.Stamenković and A.Vlahov: *J.Phys.Chem. Solids* 32, 487 (1971)
- [N 7] L.Novaković and G.S.Shukla: *Fizika* 4, 29 (1972)
- [N 8] L.Novaković and S.Zeković: *Fizika* 10, 165 (1978)
- [O 1] J.Oitmaa and M.Plischke: *J.Phys. C* 9 2093 (1976)

- |P 1| K.N.Pak: phys.stat.sol.(b) 74, 673 (1976)
- |P 2| P.S.Pearcy: Phys.Rev.Lett. 31, 379 (1973)
- |P 3| P.S.Pearcy: Phys.Rev. B 9, 4868 (1974)
- |P 4| P.S.Pearcy: Sol.St.Commun. 16, 439 (1975)
- |P 5| P.Pfeuty: Ann.Phys. 57, 79 (1970)
- |P 6| P.Pfeuty: Thése de Doctorat, Paris (1970)
- |P 7| P.Pfeuty and R.J.Elliott: J.Phys. C 4, 2370 (1971)
- |P 8| P.Pfeuty: J.Phys. C 9, 3993 (1976)
- |P 9| С.А.Пинин, В.М.Цукерник: ЖЭТФ 50, 1377 (1966)
- |P10| D.A.Pink: Phys.Rev.Lett. 33, 897 (1974)
- |P11| R.Pirc and P.Prelovšek: Phys.Rev. B 15, 4303 (1977)
- |P12| M.Pirić, M.M.Marinković, B.S.Tošić: phys.stat.sol.(b) 83, 497 (1977)
- |P13| P.Prelovšek and R.Pirc: J.Phys C 10, 861 (1977)
- |P14| P.Prelovšek and I.Sega: J.Phys. C 11, 2103 (1978)
- |P15| E.Pytte and H.Thomas: Phys.Rev. 175, 610 (1968)
- |R 1| V.Ramakrishnan and T.Tanaka: Phys.Rev. B 16, 422 (1977)
- |R 2| G.Roy and B.K.Chakrabarti: J.Phys. C 10, 3885 (1977)
- |S I| B.Simon: The $P(\phi)_2$ Euclidian (Quantum) Field Theory, Princeton Univ. Press, Princeton (1974)
Б.Саймон: Модель $P(\phi)_2$ Евклидовой квантовой теории поля, "Мир", Москва (1976)
- |SII| J.S.Smart: Effective Field Theories of Magnetism, W.B.Saunders, Philadelphia (1966)
Дж.Смарт: Эффективное поле в теории магнетизма "Мир", Москва (1968)
- |SIII| A.C.Сонин, Б.А.Струков: Введение в сегнетоэлектичество, Высшая школа, Москва (1970)
- |SIV| H.E.Stanley: Introduction to the Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford (1971)
Г.Стенли: Фазовые переходы и критические явления, "Мир", Москва (1973)
- |S 5| S.R.Salinas and J.F.Nagle: J.Phys.Soc.Japan 41, 1643 (1976)
- |S 6| G.A.Samara: Ferroel. 5, 25 (1973)
- |S 7| G.A.Samara: Ferroel. 7, 221 (1974)
- |S 8| J.R.Sandercock, S.B.Palmer, R.J.Elliott, W.Hayes, S.R.P.Smith and A.P.Young: J.Phys. C 5, 3126 (1972)
- |S 9| V.H.Schmidt, A.B.Western and A.G.Baker: Phys.Rev.Lett. 37, 839 (1976)

- [S10] D.Semingsen and J.Feder: Sol.St.Commun. 15, 1369 (1974)
- [S11] M.Senko: Phys.Rev. 121, 1599 (1961)
- [S12] E.F.Shender: Phys.Lett. A 49, 367 (1974)
- [S13] H.B.Silsbee, E.A.Uehling and V.H.Schmidt: Phys.Rev. 133, A 165 (1964)
- [S14] J.C.Slater: J.Chem.Phys. 9, 16 (1941)
- [S15] S.Stamenković, N.M.Plakida, V.L.Aksienov and T.Siklós: Phyc.Rev. B 14, 5080 (1976)
- [S16] S.Stamenković, N.M.Plakida, V.L.Aksienov and T.Siklós: Acta Phys.Acad.Sc. Hungar. 42, 265 (1977),
ibid 43, 99 (1977)
- [S17] S.Stamenković, N.M.Plakida, V.L.Aksienov and T.Siklós: Preprint KFKI - 1978 - 68, Budimpešta (1978)
- [S18] S.Stamenković, S.D.Stojanović and R.B.Žakula: phys.stat.sol.(b) 80, 661 (1977)
- [S19] И.В.Стасюк, Р.Р.Левицкий: УФЖ 14, 1100 (1969),
ibid 15, 460 (1970)
- [S20] I.V.Stasyuk, R.R.Levitskiy: Preprint ITF -70 - 14,
Kiev (1970)
- [S21] D.Stauffer: Ferroel. 18, 199 (1978)
- [S22] R.B.Stinchcombe: J.Phys. C 6, 2459, 2434, 2507 (1973)
- [S23] S.D.Stojanović, J.P.Šetrajčić, M.J.Škrinjar and
B.S.Tošić: phys.stat.sol.(b) 79, K 85 (1976)
- [S24] Б.А.Струков, А.Баддур, В.Н.Зиненко, А.В.Миценко,
Б.А.Коптсик: ФТТ 15, 1388, 2018 (1973)
- [S25] B.A.Strukov, V.G.Vaks, A.Baddur, V.I.Zinenko
and V.A.Koptsić: Ferroel. 7, 195 (1974)
- [S26] M.Suzuki: Phys.Lett. 34 A, 94 (1971)
- [S27] M.Suzuki: Progr.Theor.Phys. 56, 1454 (1976)
- [Š 1] Е.Ф.Шендер: ЖЭТФ 66, 2198 (1974)
- [T I] R.A.Tahir-Kheli: u Phase Transitions and Critical Phenomena, (Eds C.Domb and M.S.Green), Vol. Vb, Academic Press, London (1976)
- [T II] Bratislav S.Tošić: Statistička fizika (Autorizovana skripta), Institut za fiziku, Novi Sad (1978)
- [T III] С.В.Тябликов: Методы квантовой теории магнетизма, Наука, Москва (1965)
- [T 4] Y.Takagi: Phys.Rev. 85, 315 (1952)
- [T 5] M.J.Tello, E.H.Bocanegra, J.Peraza and J.Manas-Dias:
J.Phys.Soc. Japan 41, 1681 (1976)
- [T 6] M.Tokunaga and T.Matsubara: Progr.Theor.Phys.
35, 581 (1966)

- |T 7| M.Tokunaga: Progr.Theor.Phys. 36, 857 (1966)
- |T 8| B.S.Tošić and J.Vujaklija: phys.stat.sol.(b) 45, K 113 (1971)
- |T 9| B.S.Tošić: phys.stat.sol.(b) 48, K 129 (1971)
- |T10| B.S.Tošić, J.B.Vujaklija: phys.stat.sol.(b) 52, K 108 (1972)
- |T11| B.S.Tošić, M.M.Marinković: phys.stat.sol.(b) 76, K 85 (1976)
- |T12| B.S.Tošić, M.M.Marinković, S.Berar: phys.stat.sol.(b) 81, 245 (1977)
- |U 1| G.Um: Phys.Rev. B 15, 2376 (1977) *ibid* 17, 3670 (1978)
- |V 1| В.Вакс: Введение в микроскопическую теорию сегнетозленктриков, Наука, Москва (1973)
- |V 2| В.Вакс, В.И.Зиненко: ЖЭТФ 64, 650 (1973)
- |V 3| V.G.Vaks, N.E.Zein, A.B.Strukov: phys.stat.sol.(a) 30, 801 (1975)
- |V 4| M.Vallade: Phys.Rev. B 12, 3755 (1976)
- |V 5| J.Villain, S.Stamenković: phys.stat.sol. 15, 585 (1966)
- |W 1| Y.L.Wang and B.R.Cooper: Phys.Rev. 172, 539 (1968)
- |W 2| A.B.Western, A.G.Baker, C.A.Bacon and V.H.Schmidt: Phys.Rev. B 17, 4461 (1978)
- |Y 1| A.Yanase, Y.Takeshige and M.Suzuki: J.Phys.Soc.Japan 41, 1108 (1976)
- |Y 2| A.P.Young and R.J.Elliott: J.Phys. C 7, 2721 (1974)
- |Y 3| A.P.Young: J.Phys. C 8, L 309 (1975)
- |Z 1| V.I.Zinenko: phys.stat.sol. (b) 78, 721 (1976)
- |Ž 1| И.С.Желудев: Основы сегнетозлентричества, "Атомиздат" Москва (1973)
- |Ž 2| B.Žekš, G.C.Shukla and R.Blinic: Phys.Rev. B 3, 2306 (1971)

NEW ASPECTS OF THE ANALYSIS OF THE KDP-TYPE FERROELECTRICS

DARKO KAPOR
Ph.D.Thesis

Institute of Physics, Faculty of Sciences

ABSTRACT

The present thesis is devoted to the development of new theoretical methods based on the Green's functions (GF) formalism, and their application to the ferroelectrics of KDP-type. Chapter I introduces the Ising model in the transverse field (IMTF), with particular emphasis on the description of ferroelectric properties of KDP, while the next chapter gives a review of the up-to-date theoretical studies of the model.

The formulation of the problem discussed in the thesis is given in Chapter III. In order to simplify the form of the Hamiltonian, two unitary transformations are performed with the aim to eliminate the terms $\sim \hat{S}^x$ and $(S - \hat{S}^z)\hat{S}^x$. This can not be done exactly, so we introduce the first approximation: the dimensionless quantities are calculated up to x^2 , and the energy up to $x^2 I(0)$, where $x = \Gamma/I(0)$ is supposed to be a small parameter. When dealing with the spin $1/2$, one can express the Hamiltonian in terms of Pauli-operators. We retain the products of four operators only, because they are sufficient for the linear decoupling approximation. In this way we have formulated an effective Hamiltonian (III.33) which, together with the expressions for $\langle \hat{S}_n^z \rangle$ and $\langle \hat{S}_n^x \rangle$ (III.35) represents the basis for subsequent calculations.

In the Chapters IV and V we have applied the formalism of double-time temperature dependant Green's functions. Chapter IV is devoted to the study of low-temperature properties of the model. In this case, one can express Pauli-operators in terms of Bose-operators very simply, keeping only first two terms of Agranovich-Tošić representation (ATR). We have discussed the

energy of elementary excitations at $T = 0K$, reproducing Pfeuty's results [P 6]. The low-temperature expansion of $\langle \hat{S}_n^z \rangle$ gives a term proportional to $T^{3/2}$ and all higher terms up to T^3 already in the harmonic approximation, while the contribution of the anharmonic terms gives rise to terms T^2 and T^3 . Different commutation relations of Bose- and spin-operators introduce the possibility of existence of new energy levels, (kinematical levels) but in our approximation, this produces only a renormalization of spontaneous polarization. We obtain less temperature dependant behaviour in the low-temperature region which agrees experimental facts.

In the vicinity of the phase transition (Chapter V), one has to include all terms of ATR. This can be done by introducing an auxillary GF defined in space of boson states, and demonstrating equivalence of the results (in Tyablikov decoupling) with the results obtained for Paulion's GF. In this way we are left with boson's GF only. As the zero-order approximation, we performed Tyablikov decoupling of Paulion's GF. The self-consistent equations were solved numerically, with results of integration over Brillouin zone substituted with the values of functions calculated in one particular point ($k_i = 0$ or $k_i = \pi/2a$). The results indicate the first-order transition. When the effects of kinematical interaction are included (introducing the influence of the other parts of the Hamiltonian), the transition tends to a second - order one, indicating that the type of the transition is the property of the approximate Hamiltonian introduced in Chapter III.

In the Appendix, a review of boson representations for spin-operators is given, with the emphasis on Agranovich-Tošić representation. A new approach to this representation is proposed.

The thesis contains 137 pages, 25 figures and 172 references.