U N I V E R Z I T E T U N O V O M S A D U

PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET

ANALIZA OPTIČKIH I MAGNETNIH OSOBINA VEZANIH DIPOLA

- doktorska disertacija -

Gordana N.KNEŽEVIĆ

Sarajevo, 1978.

Iskreno se zahvaljujem
prof. dr Bratislavu Tošiću
koji mi je predložio temu
za doktorsku disertaciju
i svojim savjetima i dis-
kusijama pružio dragocjenu
pomoć pri njenoj izradi.

G. Knežević

S A D R Ž A J

UVOD

Sistemi interagujućih dipola imaju čitav niz karakterističnih osobina gledano sa aspekta fizike. Kao što je poznato molekularni kristali kao najizrazitiji optički medijumi imaju unutrašnju dinamiku koja je uglavnom regulisana dipol-dipolnim silama. Takođe su poznati slučajevi dipolnog magnetizma koji se superponira na izmjenski magnetizam i može da utiče na karakter magnetnih fenomena. Postoje materijali u kojima sile izmjene nisu prisutne a oni ipak imaju magnetne osobine koje se pripisuju silama magnetne dipol-dipol interakcije.

Pored čisto fizičkih aplikacija materijala u kojima su primarne dipol-dipolne sile, fenomeni koji se dešavaju u ovakvim materijalima mogu da posluže za objašnjenje mnogih procesa u živoj materiji. Ovakvu ideju prvi je iskazao i na njoj insistirao Szent Györgyi. Ona je prihvaćena i razvijana od mnogih fizičara od kojih je na ovim problemima najviše radio Frölich. Na ideju da mehanizam dipolnih sila igra specifičnu ulogu u živoj materiji Szent Györgyi je došao polazeći od činjenice da je živa materija nastala u vodi kao medijumu, a voda, kao što znamo, predstavlja sistem električnih dipola. Takođe je poznato da svjetlost i optički fenomeni uopšte igraju značajnu ulogu u životu i razvoju žive materije (hlorofilna asimilacija i razni tipovi fotosinteza), a kao što je već rečeno za ponašanje elektromagnetnog zračenja u materiji i njegove transformacije opet su odgovorne dipol-dipolne sile.

Iz svih navedenih razloga disertacija je posvećena analizi nekih specifičnih fenomena u sistemima vezanih dipola. Lajtmotiv izbora ovih specifičnosti bila je u prvom redu ideja da se načini takav izbor koji bi eventualno našao aplikacije u biofizici. Osim čisto fizičke analize dipolnog magnetizma, koja je izvršena u drugoj glavi i koja je neophodna zbog toga što ovaj problem do danas u literaturi nije dovoljno korektno tretiran, svi ostali dijelovi disertacije usmjereni su na odabiranje onih karakteristika sistema vezanih dipola koje bi mogle da posluže kao osnova za razjašnjenje nekih procesa u živoj materiji. Tako je u trećoj glavi analizirana interakcija kvazičestičnih struja u sistemima vezanih dipola i ispostavilo se da samo u ovakvim sistemima interakcije struja-struja stvaraju nove kvazičestice koje mogu da budu uzrok izvjesnih transformacija u živoj materiji. U četvrtoj glavi analiziran je sistem koji sadrži i električne i magnetne dipole. Ispitane su njegove reakcije na upadno elektromagnetno zračenje i ispostavilo se da bi ovakav sistem mogao da predstavlja jedan relativno objektivan model za objašnjenje izvjesnih fenomena oka i viđenja.

Treba naglasiti da su izvršene analize pretežno fizičkog karaktera i da se na biofizičke doprinose pretenduje više izborom specifičnosti sistema dipola nego samim metodama analize.

I ELEMENTI KRISTALO - OPTIKE I KVANTNE TEORIJE MAGNETIZMA

I.1. Eksitoni u molekularnim kristalima

Eksitone možemo definisati kao bezstrujna kolektivna elektronska pobudjenja koja se javljaju u čvrstim tijelima različitog tipa: u molekularnim, jonskim i poluprovodničkim kristalima i u složenim organskim spojevima. Jedan od najjednostavnijih načina pobudjivanja eksitona je izlaganje kristala elektromagnetnom polju zračenja.

Ovdje ćemo razmotriti Frenkelove eksitone ili eksitone malog radijusa kod kojih su elektron i šupljina lokalizovani na istoj molekuli. Oni se najčešće javljaju u molekularnim kristalima. Poznato je da su molekularni kristali čvrsta tijela obrazovana od molekula (ili atoma inertnih gasova) medju kojima djeluju Van der Waalsove sile. Energija takvih molekularnih interakcija veoma je mala u poredjenju s energijom veze elektrona u molekulama. Medju molekularnim kristalima posebno mjesto imaju kristali obrazovani od anizotropnih molekula benzola, naftalina i antracena kod kojih je prekrivanje valnih funkcija elektrona susjednih molekula izuzetno malo.

Prvu teoriju optičkih osobina ovih kristala dali su Frenkel [1] i Peierls [2]. Ona danas ima uglavnom samo istorijski značaj. Polazi se od pretpostavke da su optičke osobine kristala odredjene osobinama izolovanih molekula, te da se interakcija medju molekulama može smatrati perturbacijom.

Hamiltonijan molekularnog kristala u koordinatnoj reprezentaciji je

$$H=\sum_n H_n+\frac{1}{2}\sum_{n,m}{}' V_{nm} \tag{I.1.1}$$

gdje je $n \equiv (\vec{n},\alpha)$, $m \equiv (\vec{m},\beta)$, $\vec{n}$ i $\vec{m}$ su vektori kristalne rešetke, a $\alpha,\beta = 1, 2, \ldots 6$ označavaju pojedine molekule u elementarnoj ćeliji kristala.

H_n je hamiltonijan izolovane molekule kristala. Neka operatori H_n imaju sistem vlastitih funkcija φ_n^f koje odgovaraju vlastitim vrijednostima ε_f. Ovdje je f skup kvantnih brojeva svakog stacionarnog stanja; f = 0 odgovara osnovnom stanju. Pretpostavlja se da stacionarna stanja slobodnih molekula nisu degenerisana.

Operator trenutne kulonske interakcije naboja koji obrazuju kristal označen je sa V_{nm}. Molekule smatramo neutralnim pa je u prvoj aproksimaciji V_{nm} odredjen dipol - dipol interakcijom molekula.

Smatraćemo da se molekule ne pomjeraju iz svojih ravnotežnih položaja. Tada je u nultoj aproksimaciji računa perturbacije valna funkcija osnovnog stanja kristala produkt valnih funkcija izolovanih molekula koje se nalaze u osnovnom stanju

$$\Psi^0=\prod_n \varphi_n^0 \tag{I.1.2}$$

Najniže elektronsko pobudjeno stanje takvog kristala možemo predstaviti kao takvo stanje u kome je jedna molekula pobudjena, a sve ostale se nalaze u osnovnom stanju. Ako je molekula n pobudjena, odgovarajuća valna funkcija kristala je

$$\Psi_n^f=\varphi_n^f\prod_{m\neq n}\varphi_m^0 \tag{I.1.3}$$

a energija $(N-1)\varepsilon_0+\varepsilon_f$.

Funkcije Ψ^{o} i Ψ_{n}^{f} bi trebalo antisimetrizirati po svim elektronima. Takva antisimetrizacija dovodi do dopunskih energetskih članova koji sadrže integrale prekrivanja valnih funkcija susjednih molekula. U molekularnim kristalima, posebno u onim koji se sastoje od molekula aromatskih spojeva, ti članovi su mali i možemo ih zanemariti.

Radi translatorne invarijantnosti energija kristala ne zavisi od toga koja je molekula pobudjena. Zato se kristal ne može opisivati pobudjenjima koja su lokalizovana na pojedinim molekulama. Pravilna stacionarna stanja pobudjenog kristala su linearne kombinacije lokalizovanih pobudjenih stanja od kojih je svako karakterisano svojim valnim vektorom. U slučaju kada svaka elementarna ćelija kristala sadrži samo po jednu molekulu ($\sigma = 1$) mjesto sistema funkcija (I.1.3) razmatraćemo drugi sistem ortonormiranih funkcija

$$\Psi_{\vec{k}}^{f}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{n}}\Psi_{\vec{n}}^{f}e^{i\vec{k}\vec{n}} \tag{I.1.4}$$

N je broj elementarnih ćelija u kristalu, odnosno u osnovnom zapreminskom elementu cikličnosti.

Energija kristala u prvoj aproksimaciji jednaka je srednjoj vrijednosti operatora H u stanjima koja odgovaraju valnim funkcijama nulte aproksimacije (I.1.2) i (I.1.4). Za energiju osnovnog stanja se nalazi

$$E_{0}=N\mathcal{E}_{0}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}}{}' V_{\vec{n}\vec{m}}(00;00) \tag{I.1.5}$$

Oznaka za matrični element je poseban slučaj opštije oznake

$$V_{nm}(fg;f'g')=\int \varphi_{n}^{f*}\varphi_{m}^{g*}V_{nm}\varphi_{m}^{f'}\varphi_{n}^{g'}d\tau_{n}d\tau_{m} \tag{I.1.6}$$

(gdje su m i n vektori kada je $\sigma = 1$).

Iz razlike energije pobudjenog stanja kristala i energije osnovnog stanja, nalazimo energiju pobudjenja kristala pri prelazu iz osnovnog u pobudjeno stanje [3]

$$\Delta E_f(\vec{k}) = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_0 + D_f + L_f(\vec{k}) \tag{I.1.7}$$

gdje je

$$D_f = \sum_{\vec{m}}{}' \left\{ V_{\vec{n}\vec{m}}(f0;f0) - V_{\vec{n}\vec{m}}(00;00) \right\} \tag{I.1.8}$$

izmjena energije interakcije svih molekula kristala i jednom od njih kada ova prelazi iz osnovnog u f-to pobudjeno stanje, dok je zonski priraštaj

$$L_f(\vec{k}) = \sum_{\vec{m}} M^f_{\vec{n}\vec{m}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} \tag{I.1.9}$$

odredjen matričnim elementom izmjene pobudjenja medju molekulama $\vec{n}$ i $\vec{m}$

$$M^f_{\vec{n}\vec{m}} = V_{\vec{n}\vec{m}}(f0;0f) \tag{I.1.10}$$

Translatorna simetrija kristala zajedno sa uslovima cikličnosti vodi na uslov za valni vektor

$$K_i = \frac{2\pi}{N_i a_i} \nu_i \;, \quad i = 1,2,3..,$$

a_i je konstanta rešetke, a cijeli brojevi ν_i zadovoljavaju

$$-\frac{N_i}{2} < \nu_i \leqslant \frac{N_i}{2}$$

Na taj način L_f zavisi od $N = N_1 N_2 N_3$ vrijednosti valnog vektora $\vec{k}$, pa nedegenerisanom pobudjenom stanju molekule u kristalu odgovara N različitih pobudjenih stanja čije energije formiraju jednu (f-tu) eksitonsku zonu. Svako od tih stanja predstavlja pobudjeno stanje cijelog kristala.

Frenkel je u svojim radovima razmatrao samo kristal sa jednom molekulom u elementarnoj ćeliji, dok je višemolekularne ćelije prvi proučavao Davidov [4] . U slučaju kada elementarna ćelija sadrži 6 molekula jednom nedegenerisanom pobudjenom stanju slobodne molekule u kristalu odgovara 6 eksitonskih zona. To je davidovsko cijepanje nivoa.

Za razliku od davidovskog poznato je i Bethe cijepanje na λ nivoa ukoliko se molekule kristala mogu pobuditi u λ različitih stanja, tako da ukupno može postojati $\lambda 6$ eksitonskih zona.

U dosadašnjim razmatranjima teorije eksitona slijedili smo radove Frenkela i Davidova, gdje se pri razmatranju pobudjenih stanja kristala primjenjuje metoda Heitler - Londona, tj. valna funkcija najnižeg pobudjenog stanja je superpozicija stanja kristala u kojima je jedna molekula pobudjena, a sve ostale se nalaze u osnovnom stanju. Uračunavanje u energiju i viših pobudjenih stanja, u kojima je pobuđeno nekoliko molekula kristala možemo provesti prelazom na reprezentaciju druge kvantizacije. Time se ujedno otvara mogućnost za primjenu metoda kvantne teorije polja.

Suština metoda druge kvantizacije sadržana je u pretpostavci da se hamiltonijan sistema interagujućih realnih čestica može svesti na ekvivalentni sistem slabo interagujućih kvazičestica. To se postiže na taj način da se glavni dio medjučestične interakcije uvede u dijagonalni dio transformisanog hamiltonijana. Da bi se taj metod mogao primjeniti za izračunavanje fizičkih veličina koje karakterišu sistem trebalo bi da se čestice pokoravaju Bose ili Fermi statistici. U stvari operatori stvaranja i poništavanja ekscitacija u molekulama nisu ni Fermi ni Bose operatori nego zadovoljavaju komutacione relacije za tzv. kvazi - Pauli operatore, koje se u posebnom slučaju dvonivoske šeme svode na komutacione relacije za Pauli operatore. Ova činjenica vodi na ozbiljne teškoće u primjeni metoda druge kvantizacije [5] . Naime komutacione relacije za Pauli (i kvazi-Pauli) operatore nisu invarijantne u odnosu na Fourierovu transformaciju koja omogućava da se na najjednostavniji način uzme u obzir translaciona simetrija kristala. Ako bi se i mogla naći neka druga transformacija, kanonska u odnosu na te operatore, koja vodi na normalne kolektivne koordinate, tada bi teškoća bila u tome što se ne bi mogle primjeniti standardne statističke formule za izračunavanje fizičkih karakteristika sistema, s obzirom da nije razvijena statistika za taj tip kvazičestica. Zato je potrebno Pauli operatore izraziti preko Bose ili Fermi operatora, na taj način se sistem pauliona, odnosno kvazipauliona, zamjenjuje ekvivalentnim sistemom bozona ili fermiona.

Hamiltonijan (I.1.1) se u reprezentaciji druge kvantizacije može napisati u obliku

$$H=\sum_{n,f}\varepsilon_f \alpha^+_{nf}\alpha_{nf}+\frac{1}{2}\sum_{m,n}{}'\sum_{fgf'g'}\alpha^+_{nf}\alpha^+_{mg}\alpha_{nf'}\alpha_{mg'}V_{nm}(fg;f'g') \tag{I.1.11}$$

gdje je matrični element dipol-dipolne interakcije medju molekulama kristala V_{nm} (f g;f' g') odredjen sa (I.1.6). Pri proračunu tih matričnih elemenata koriste se vlastite funkcije hamiltonijana slobodne molekule za koje pretpostavljamo da su medjusobno ortogonalne (što je opravdano zbog njihovog slabog prekrivanja).

Operatori stvaranja i poništavanja odvojenih molekula označeni su sa α^+_{nf} i α_{nf} . Ako se odnose na isto stanje f molekule n zadovoljavaju fermionske komutacione relacije, a ako se odnose na različite molekule ili razna pobudjena stanja jedne molekule, zadovoljavaju bozonske komutacione relacije. Svaki broj zaposjednuća N_{nf} koji je vlastita vrijednost operatora $\alpha^+_{nf}\alpha_{nf}$ jednak je nula ili jedan i pokazuje u kakvom stanju se nalazi n-ta molekula. Pošto se svaka molekula može nalaziti samo u jednom stanju, a ukupan broj molekula u kristalu je 6N, mora vrijediti

$$\sum_f N_{nf}=1, \qquad \sum_{nf} N_{nf}=6N \tag{I.1.12}$$

U slučaju kada je prvi pobudjeni nivo molekule znatno niži od slijedećeg pobudjenog nivoa moguće se ograničiti na takozvanu dvonivosku šemu kada se uzima da se molekula osim u osnovnom može naći u još samo jednom pobudjenom stanju. Neka f = 0 odgovara osnovnom stanju, a sa f ćemo označiti pobudjeni nivo molekule. Tada možemo uvesti nove operatore

$$P_{nf}=\alpha^{+}_{nf}\alpha_{no}\,,\quad P^{+}_{nf}=\alpha^{+}_{no}\alpha_{nf} \tag{I.1.13}$$

koji zadovoljavaju komutacione relacije za Pauli operatore

$$\begin{gathered}\left[P_{nf},P^{+}_{mf}\right]=(1-2P^{+}_{nf}P_{nf})\delta_{mn}\\ \left[P_{nf},P_{mg}\right]=\left[P^{+}_{nf},P^{+}_{mg}\right]=0\\ P^{2}_{nf}=P^{+2}_{nf}=0\quad P^{+}_{nf}P_{nf}=0,1\end{gathered} \tag{I.1.14}$$

Pauli operatori P^{+}_{nf} i P_{nf} su operatori stvaranja i poništavanja pobudjenja f na mjestu n. P^{+}_{nf} predstavlja poništavanje elektrona u osnovnom stanju na mjestu n i simultano stvaranje elektrona u stanju f, tj. prevodjenje elektrona iz stanja 0 u stanje f na mjestu n, dok P_{nf} odgovara prelazu molekule n iz pobudjenog f-tog u osnovno stanje.

Raniji uslov za broj molekula u datom stanju (I.1.12) očigledno prelazi u

$$\sum_{f}P^{+}_{nf}P_{nf}=1\,,\qquad \sum_{nf}P^{+}_{nf}P_{nf}=6N \tag{I.1.15}$$

Hamiltonijan (I.1.11) se sada može napisati u obliku (indeks f izostavljamo)

$$H=H_{0}+H_{int} \tag{I.1.16}$$

$$H_{0}=E_{0}+\sum_{n}\Delta P^{+}_{n}P_{n}+\sum_{nm}{}'\alpha_{nm}P^{+}_{n}P_{m}+\frac{1}{2}\sum_{nm}{}'\beta_{nm}(P^{+}_{n}P^{+}_{m}+P_{m}P_{n}) \tag{I.1.17}$$

$$H_{int}=\sum_{nm}{}'\gamma_{nm}P^{+}_{n}P^{+}_{m}P_{n}P_{m} \tag{I.1.18}$$

gdje je

$$E_{0}=N6\varepsilon_{0}+\frac{1}{2}\sum_{nm}{}'V_{nm}(00;00) \tag{I.1.19}$$

energija osnovnog stanja,

$$\Delta = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_0 + \sum_{n(\neq m)} \left\{ V_{nm}(0f;f0) - V_{nm}(00;00) \right\} \tag{I.1.20}$$

energija pobudjenja molekule u kristalu, a

$$\begin{aligned} \alpha_{nm} &= V_{nm}(f0;f0) = V_{nm}(0f;0f) \\ \beta_{nm} &= V_{nm}(00;ff) = V_{nm}(ff;00) \\ \gamma_{nm} &= \frac{1}{2}\left\{ V_{nm}(ff;ff) + V_{nm}(00;00) - 2V_{nm}(0f;0f) \right\} \end{aligned} \tag{I.1.21}$$

Pri tom su α, β i γ reda 0,01 - 0,1 eV, a $\Delta \sim 3$ - 5eV [3], gdje su sa α, β i γ označene interakcije sa najbližim susjedima.

Uvodjenjem Pauli operatora je glavni dio medjučestične interakcije, koja je u hamiltonijanu (I.1.11) bila sadržana u drugom članu, sada uključen u kvadratni dio hamiltonijana H_0. Dijagonalizacija kvadratne forme H_0 može se izvršiti tako da se Pauli operatori jednostavno zamjene Bose operatorima. Takav postupak predstavlja metod približne druge kvantizacije (ASQ), koga je iskazao Bloch, a razvili Bogoljubov i Tjablikov [6].

Zamjenom Pauli operatora sa Bose čini se greška budući da komutacione relacije za te dvije vrste operatora nisu iste. Ta greška se može smatrati zanemarivom ukoliko se radi o izuzetno malim koncentracijama. Naime, na niskim temperaturama je srednja vrijednost $\langle P^+_{nf} P_{nf} \rangle \ll 1$, pa kada razmatramo slabo pobudjena stanja kod kojih je koncentracija pobudjenja mala, iz (I.1.14) slijedi da je $[P_{nf}, P^+_{mf}] = \delta_{nm}$, a sve ostale kombinacije komutiraju. No u tom slučaju konzistentnost aproksimacije zahtjeva da se istovremeno odbaci H_{int}, tako da je metod ASQ u stvari potpuno korektan samo za opisivanje sistema neinteragujućih kvazičestica.

Radi jednostavnosti dalje ćemo se ograničiti na kristal sa jednom molekulom u elementarnoj ćeliji. Nakon zamjene Pauli operatora sa Bose i poslije izvršene unitarne transformacije hamiltonijan Ho se dijagonalizira i ima oblik

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} B^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} \tag{I.1.22}$$

Ovdje je $E_{\vec{k}}$ energija elementarnog pobudjenja - kulonskog eksitona, a $B^+_{\vec{k}}$ i $B_{\vec{k}}$ su Bose operatori stvaranja i poništavanja tih elementarnih pobudjenja. Agranović [7] je primjenom u-v transformacije Bogoljubova - Tjablikova dobio eksitonski spektar nulte aproksimacije (spektar koji ne sadrži članove proporcionalne koncentraciji eksitona)

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{(\Delta + \alpha_{\vec{k}})^2 - \beta^2_{\vec{k}}} \approx \Delta + \alpha_{\vec{k}} - \frac{\beta^2_{\vec{k}}}{2\Delta} \tag{I.1.23}$$

$$\alpha_{\vec{k}} = \sum_{m(\neq n)} \alpha_{\vec{m}\vec{n}} e^{i\vec{k}(\vec{m}-\vec{n})}; \quad \beta_{\vec{k}} = \sum_{m(\neq n)} \beta_{\vec{m}\vec{n}} e^{i\vec{k}(\vec{m}-\vec{n})}$$

U teoriji gdje se koristi metod Heitler - Londona, koji je ekvivalentan tome da se dijagonalizacija vrši uz dopunski uslov

$$\sum_n B^+_{nf} B_{nf} = 1 ,$$

nema posljednjeg člana u (I.1.23). Ako posmatramo kristal proste kubne strukture u aproksimaciji najbližih susjeda i za male valne vektore, za $E_{\vec{k}}$ dobijamo izraz

$$E_{\vec{k}} = \Delta_e + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \tag{I.1.24}$$

gdje je $\Delta_e = \Delta + 6\alpha$ (α je matrični element dipol - dipolne interakcije medju najbližim susjedima), $m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2\alpha}$ efektivna masa eksitona. U zavisnosti od znaka α ona može biti i pozitivna i negativna.

Operator (I.1.22) odgovara sistemu neinteragirajućih eksitona. Za opisivanje efekata koji nastaju kao posljedica interakcija, a u koje spadaju nelinearni odnosno anharmonijski efekti, potrebno je egzaktno izraziti Pauli operatore preko Bose operatora [8].

$$P_n=\Big[\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B_n^{+\nu}B_n^{\nu}\Big]^{\frac{1}{2}}B_n$$

$$P_n^+=B_n^+\Big[\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B_n^{+\nu}B_n^{\nu}\Big]^{\frac{1}{2}} \qquad (I.1.25)$$

Egzaktna Bose reprezentacija Pauli operatora vodi do beskonačno mnogo članova u transformisanom hamiltonijamu. U metodi ASQ su uz pretpostavku male koncentracije pauliona zadržani samo linearni članovi iz (I.1.25). Medjutim u [9] je pokazano da na taj način odredjen zakon disperzije (I.1.23) nije korektan. Naime, članovi višeg reda po Pauli operatorima poslije svodjenja na normalne produkte po Bose operatorima daju doprinos i kvadratnom dijelu hamiltonijana, tj. javlja se dopunska kinematička interakcija. To vodi na korekciju eksitonskog spektra (I.1.23) reda $\eta=\frac{\beta}{\Delta}$.

Hamiltonijan (I.1.17) opisuje sistem u kome se broj kvazičestica ne održava, jer zadnja dva člana ne komutiraju sa operatorom ukupnog broja eksitona. Problem neodržanja detaljno je razmotren u radovima [10] i [11], a posebno u [12]. U [10] je izložen metod prema kome se nekonzervativni članovi hamiltonijana eliminišu primjenom Weylovog identiteta. Pri odredjivanju energetskog spektra (I.1.23) eliminacija članova koji dovode do neodržanja broja kvazičestica vršila se primjenom u - v transformacije i to nakon prelaska sa Pauli na Bose operatore, dok se primjenom Weylovog identiteta eliminacija može izvršiti prije tog prelaza. Drugi način je svakako pravilniji jer uzima u obzir korekcije koje potiču od kinematičkog dijela interakcije [13]. Riječ je o interakcionim članovima koji se dobijaju nakon prelaska na Bose operatore i posljedica su nejednakih komutacionih relacija Pauli i Bose operatora. U [9] su te korekcije uračunate naknadno. Kod primjene Weylovog identiteta problem uračunavanja kinematičke interakcije uključen je u sam matematički aparat, što je omogućilo da se na jednostavniji način dobije korektan harmonijski spektar Frenkelovih eksitona

$$E_{\vec{k}}=\Delta+\mathcal{L}_{\vec{k}}+2\ell\frac{\beta^2}{\Delta}-\frac{\beta_{\vec{k}}^2}{2\Delta}+H_{\eta^2} \qquad (I.1.26)$$

I.2. Realističniji model optičkih pobudjenja - polaritoni

U prethodnom paragrafu smo pri razmatranju spektra elementarnih pobudjenja kristala uzimali u obzir samo trenutnu kulonsku interakciju elektrona koji pripadaju različitim molekulama. Medjutim, eksperimentalne činjenice su pokazale da je pojam eksitona koji je izveden na osnovu tako idealizovane pretpostavke nepotpun i da ne može da odrazi realnu fizičku situaciju u kristalu. Korektno razmatranje interakcije svjetlosti sa materijom zahtjeva uključivanje i interakcije optičkih pobuđenja sa poljem upadne svjetlosti kojom su ta pobuđenja i stvorena. Uključivanje te interakcije u stvari predstavlja uračunavanje efekta retardacije. Pri kulonskoj kalibraciji potencijala $\operatorname{div} \vec{A} = 0$ interakcija naboja u kristalu sa elektromagnetnim poljem svjetlosti svodi na interakciju tih naboja sa poljem transverzalnih fotona. Eksiton - foton interakcija može u pojedinim slučajevima da bude tako velika da po redu veličine dostigne i samu energiju eksitona odnosno fotona. Jasno je da tada svaki pokušaj da se eksitoni i fotoni tretiraju kao samostalne ekscitacije vodi do protivrječnosti.

Ove efekte prvi su razmatrali Neamtan [14] i Fano [15], ali prve kvantnomehaničke proračune dali su Hopfield i Agranovič. Hopfield [16] je predložio termin polariton da označi realna elementarna pobudjenja koja nastaju u kristalu izloženom spoljašnjem elektromagnetnom polju. Davidov [17] i Pekar [18] ih nazivaju svjetlosni eksitoni.

Agranovič [7] je koristeći metod približne druge kvantizacije i u - v transformaciju, uzimajući u obzir retardiranu interakciju, dao skoro potpunu teoriju tih pobudjenja. Nedostatak te teorije je da ne vodi računa o problemu neodržanja optičkih pobudjenja u molekularnim kristalima [12, 19].

Potpuni hamiltonijan sistema naboja i elektromagnetnog polja može se predstaviti u obliku

$$H = H_E + H_F + H_{EF} \tag{I.2.1}$$

Ovdje je H_E operator energije kristala pri uzimanju u obzir samo kulonske interakcije i dat je jednačinom (I.1.22), dok je H_F je hamiltonijan koji odgovara slobodnom elektromagnetnom polju

$$H_F = \sum_{\vec{k}, j=1,2} \hbar c k \, a^+_{\vec{k}j} a_{\vec{k}j} \tag{I.2.2}$$

Pošto je izvršena kulonska kalibracija, j označava transverzalne grane fotona. $a^+_{\vec{k}j}$ i $a_{\vec{k}j}$ su Bose operatori stvaranja i poništavanja fotona s energijom $\omega(k) = \hbar ck$ i jediničnim vektorom polarizacijom $\vec{l}_{\vec{k}_j}$ takvim da je $\vec{l}_{\vec{k}_1} \cdot \vec{l}_{\vec{k}_2} = 0$, $\vec{k} \cdot \vec{l}_{\vec{k}_j} = 0$ ($j = 1,2$).

Sa H_{EF} označena je interakciju molekulskih optički aktivnih elektrona i vektorskog potencijala spoljašnjeg elektromagnetnog polja. Kako je impuls elektrona u elektromagnetnom polju $\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$, hamiltonijan eksiton - foton interakcije je [20]

$$H_{EF} = -\frac{e}{mc} \sum_{\vec{n}} \vec{A}_{\vec{n}} \vec{p}_{\vec{n}} + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{\vec{n}} \vec{A}^2_{\vec{n}} \tag{I.2.3}$$

pri čemu je pretpostavljeno da se u svakoj elementarnoj ćeliji nalazi samo po jedna molekula i da svaka od njih ima samo po jedan optički aktivan elektron.

Operator $\vec{A}_{\vec{n}}$ vektorskog potencijala fotona koji su lokalizovani u zapremini V je [21]

$$\vec{A}_{\vec{n}} = \sum_{\vec{k}, j} \sqrt{\frac{2\pi \hbar c}{Vk}} \, \vec{l}_{\vec{k}j} (a_{\vec{k}j} + a^+_{-\vec{k}j}) e^{i\vec{k}\vec{n}} \tag{I.2.4}$$

Operator impulsa elektrona na čvoru rešetke $\vec{n}$ u reprezentaciji druge kvantizacije je

$$\begin{aligned} \vec{p}_{\vec{n}} &= \sum_{f_1 f_2} \vec{\pi}_{f_1 f_2} \alpha^+_{\vec{n}f_1} \alpha_{\vec{n}f_2} \\ \vec{\pi}_{f_1 f_2} &= \int \varphi^{f_1 *}_{\vec{n}} (-i\hbar \nabla_n) \varphi^{f_2}_{\vec{n}} \, d\tau_n \end{aligned} \tag{I.2.5}$$

Ovdje su φ_f vlastite funkcije hamiltonijana izolovane molekule, a $\alpha^+_{\vec{n}f}$ i $\alpha_{\vec{n}f}$ Fermi operatori stvaranja i poništavanja elektrona.

U slučaju dvonivoske šeme f_1 i f_2 imaju samo dvije vrijednosti O i f, pri čemu O označava osnovno, a f jedino pobudjeno stanje. Tada se prema (I.1.13) može sa Fermi operatora $\alpha^+_{\vec{n}f}$ i $\alpha_{\vec{n}f}$ preći na Pauli operatore, a zatim metodom ASQ na Bose operatore pa je

$$\vec{P}_{\vec{n}} = \vec{\pi}_{fo} B^+_{\vec{n}} + \vec{\pi}_{of} B_{\vec{n}} \tag{I.2.6}$$

gdje je $B^+_{\vec{n}}$ operator prelaza molekule $\vec{n}$ iz osnovnog u pobudjeno stanje.

Kada pomoću transformacije

$$B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

predjemo na operatore stvaranja i poništavanja eksitona, iz (I.2.3), (I.2.4) i (I.2.6) dobijamo izraz za operator eksiton - foton interakcije

$$H_{EF} = \sum_{\vec{k}j} \left\{ T_{\vec{k}j} (a_{\vec{k}j} + a^+_{-\vec{k}j})(B^+_{\vec{k}} - B_{\vec{k}}) + S_{\vec{k}} (a^+_{\vec{k}j} a_{\vec{k}j} + \frac{1}{2} a^+_{\vec{k}j} a^+_{-\vec{k}j} + \frac{1}{2} a_{\vec{k}j} a_{-\vec{k}j}) \right\} \tag{I.2.7}$$

gdje je

$$T_{\vec{k}j} = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{VCK}}\, \vec{\ell}_{\vec{k}j} \vec{\pi}_{of}, \qquad S_{\vec{k}} = \frac{2\pi\hbar N e^2}{mcVk} \tag{I.2.8}$$

i

$$\vec{\pi}_{fo} = -\vec{\pi}_{of}, \quad T_{\vec{k}j} = -T^*_{\vec{k}j}$$

Ukupni hamiltonijan sistema se može dijagonalizirati u-v transformacijom Bogoljubova i Tjablikova

$$\begin{aligned} B_{\vec{k}} &= \sum_{\mu} (u_{k\mu} \xi_{\mu} + v^*_{k\mu} \xi^+_{\mu}) \\ a_{\vec{k}j} &= \sum_{\mu} (u_{\vec{k}j\mu} \xi_{\mu} + v^*_{\vec{k}j\mu} \xi^+_{\mu}) \quad (j = 1,2) \end{aligned} \tag{I.2.9}$$

Koeficijenti transformacije u i v zadovoljavaju uslove ortogonalnosti i normiranja [22]

$$
\begin{aligned}
&\sum_i (u_{i\mu} u^*_{i\nu} - v_{i\mu} u^*_{i\nu}) = \delta_{\mu\nu} \\
&\sum_i (u_{i\mu} v_{i\nu} - v_{i\mu} u_{i\nu}) = 0
\end{aligned}
\tag{I.2.10}
$$

Transformisani hamiltonijan je

$$
H = H_0 + \sum_{\vec{k}\mu} E_\mu(\vec{k})\, \xi^+_\mu(\vec{k})\, \xi_\mu(\vec{k}) - \sum_{\vec{k}\mu} E_\mu(\vec{k}) |v_{\vec{k}\mu}|^2 - \sum_{\vec{k}j\mu} E_\mu(\vec{k}) |v_{\vec{k}j\mu}|^2
\tag{I.2.11}
$$

Za $\mu = 1,2$ dobijaju se dvije grane novih elementarnih pobudjenja - polaritona. Sa $\xi^+_\mu(\vec{k})$ i $\xi_\mu(\vec{k})$ su označeni operatori stvaranja i poništavanja elementarnih pobudjenja sa valnim vektorom $\vec{k}$ i energijom $E_\mu(\vec{k})$ koja predstavljaju realne ekscitacije kristala jer u sebi uključuju kako kulonsku interakciju, tako i interakciju elektromagnetnog polja sa naelektrisanjima molekula. Svaka od grana ovih elementarnih pobudjenja predstavlja "smjesu" fotona i eksitona. Iz (I.2.9) i (I.2.10) slijedi da operator stvaranja novih ekscitacija - polaritona ξ^+_μ predstavlja linearnu kombinaciju operatora stvaranja i poništavanja eksitona i fotona

$$
\begin{aligned}
\xi^+_\mu(\vec{k}) = {} & B^+_{\vec{k}} u_{\vec{k}\mu} + B^+_{-\vec{k}} u_{-\vec{k}\mu} - B_{\vec{k}} v_{\vec{k}\mu} - B_{-\vec{k}} v_{-\vec{k}\mu} + \sum_j \Big\{ a^+_{\vec{k}j} u_{\vec{k}j\mu} + a^+_{-\vec{k}j} u_{-\vec{k}j\mu} - \\
& - a_{\vec{k}j} v_{\vec{k}j\mu} - a_{-\vec{k}j} v_{-\vec{k}j\mu} \Big\}
\end{aligned}
\tag{I.2.12}
$$

Relativne vrijednosti u i v odredjuju doprinos eksitona i fotona novom hibridnom pobudjenju.

Kako je već napomenuto u prethodnom paragrafu u [9] i [10] je ukazano na nedostatke ASQ metode prema kojoj se izostavljaju članovi četvrtog reda po Pauli operatorima i ne uzima u obzir razlika izmedju Pauli i Bose komutacionih relacija. Ova pojednostavljenja su razlog da ni harmonijski energetski spektar polaritona, dobijen u [7] na sada opisani način, nije sasvim korektan.

Pravilniji postupak dobijanja zakona disperzije za polaritone proveden je u [19]. Hamiltonijan sistema (I.2.1) izražen je preko Pauli operatora, a onda su primjenom Weylovog identiteta eliminasni nekonzervativni članovi. Jednom jednostavnom transformacijom dijagonaliziran je fotonski dio hamiltonijana, a tek tada je prema (I.1.25) izvršen prelaz sa Pauli na Bose operatore, pa na njihove Fourierove komponente. Nakon izvršene dijagonalizacije tako dobijenog hamiltonijana nadjeni su korektni izrazi za energije polaritona.

I.3. Heisenbergov model u teoriji magnetizma

Za jako magnetne materije (feromagnetici, antiferomagnetici i ferimagnetici) karakteristična je, pri odredjenim uslovima, pojava spontane magnetne sredjenosti u materiji i kao posljedica pojava velikog makroskopskog momenta.

Magnetna svojstva materije zavise od raspodjele gustoće elektrona nepopunjenih ljuski kao i gustoće elektrona vodljivosti u kristalnoj rešetki. Medjutim, savremeno stanje teorije još ne dozvoljava formuliranje neophodnih i dovoljnih uslova postojanja u datoj materiji jakog magnetizma na osnovu elektronskih konfiguracija slobodnih atoma koji čine kristalnu rešetku razmatrane materije.

Magnetni momenti jako magnetnih materija sastoje se uglavnom od magnetnih momenata elektrona nepopunjenih ljuski, dok njihovi orbitalni momenti ne daju bitan doprinos. Dalje se može pretpostaviti da se makroskopski magnetni moment javlja radi postojanja, pri odredjenim uslovima, spinske sredjenosti elektrona unutrašnjih ljuski radi njihove medjusobne interakcije. Ova pretpostavka je osnova savremene teorije magnetizma koju su prvi iskazali Frenkel i Heisenberg.

Elektroni nepopunjenih ljuski opisuju se kao sistem spinova postavljenih u čvorove rešetke. Koeficijent proporcionalnosti koji odredjuje intenzitet interakcije medju spinovima raznih čvorova rešetke naziva se integral izmjene. On je po redu veličine jednak energiji izmjenske interakcije elektrona odgovarajućih čvorova, tj. reda je $\frac{e^2}{a} \sim 10^{-12} - 10^{-13} erg$.

Za opisivanje malih energija pobudjenja magnetno sredjenih kristala hamiltonov operator kristala koji sadrži kao potencijalnu energiju samo energiju kulonske interakcije elektrona i jezgri zamjenjuje se fenomenološkim Heisenbergovim hamiltonijanom u kojem se eksplicite uzimaju u obzir samo interakcije koje se odnose na orijentaciju spinova. Spin-spinska interakcija se pri tom zanemaruje u odnosu na izmjensku. Prilikom izvodjenja hamiltonijana Heisenbergovog modela opisaćemo postupak izložen u [23].

Uzimamo da se kristal sastoji iz N jednakih atoma postavljenih u čvorove rešetke. Elektrone nepopunjenih unutrašnjih ljuski (d ili f) i elektrone vodljivosti razmatramo približno kao nezavisne podsisteme, njihovu medjusobnu interakciju zanemarujemo. Ova interakcija se može smatrati malom kod magnetnih dielektrika kod kojih postoji dovoljno široka zabranjena zona; to ukazuje da je Heisenbergov model pogodniji za opisivanje magnetnih osobina dielektrika nego metala. Pretpostavimo da svaki atom ima samo po jedan d elektron, zanemarujemo orbitalni moment d elektrona a isto tako izostavljamo interakciju magnetnih momenata elektrona s orbitalnim i njihovu medjusobnu interakciju. Znači, da se realni feromagnetik modelira feromagnetnim dielektrikom čija je rešetka obrazovana od istovrstnih atoma, svaki ima u normalnom stanju po jedan elektron odgovoran za magnetizam. Osnovni energetski nivo sistema E_0 je u nultoj aproksimaciji karakterisan jediničnim vrijednostima brojeva zaposjednuća $N_{\vec{f}}$ elektrona u čvorovima

$$N_{\vec{f}} = n_{\vec{f},-\frac{1}{2}} + n_{\vec{f},+\frac{1}{2}} = 1$$

gdje je $n_{\vec{f}\sigma}$ $(\sigma = \pm\frac{1}{2})$ broj elektrona na čvoru $\vec{f}$ sa spinom $\sigma = \frac{1}{2}$ ili $\sigma = -\frac{1}{2}$. Nivo E_0 se može definisati zadavanjem z komponente spina elektrona na svakom čvoru.

Razvijanjem hamiltonijana sistema po stepenima spinskih operatora $S_{\vec{f}}^{\alpha}$ $(\alpha = x,y,z)$ dobija se

$$H = G_0 + \sum_{\vec{f}\alpha} G_\alpha(\vec{f}) S_{\vec{f}}^{\alpha} + \sum_{\vec{f}_1\vec{f}_2\alpha_1\alpha_2} G_{\alpha_1\alpha_2}(\vec{f}_1\vec{f}_2) S_{\vec{f}_1}^{\alpha_1} S_{\vec{f}_2}^{\alpha_2} +$$

$$+ \sum_{\substack{\vec{f}_1\vec{f}_2\vec{f}_3\\ \alpha_1\alpha_2\alpha_3}} G_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3}(\vec{f}_1\vec{f}_2\vec{f}_3) S_{\vec{f}_1}^{\alpha_1} S_{\vec{f}_2}^{\alpha_2} S_{\vec{f}_3}^{\alpha_3} + \cdots \qquad (I.3.1)$$

Pri sumiranju po čvorovima kristalne rešetke uzimaju se samo one kombinacije u kojima su svi indeksi različiti. One kombinacije koje imaju i neke indekse jednake mogu se primjenom komutacionih relacija za spinske operatore svesti na članove nižeg reda.

Koeficijenti razvoja $G_\alpha(\vec{f})$, $G_{\alpha_1\alpha_2}(\vec{f}_1\vec{f}_2)$ moraju zadovoljavati izvjesne uslove. Prije svega oni moraju biti realne funkcije svojih argumenata da bi operator H bio hermitski.

Pošto pretpostavljamo da u sistemu djeluju samo elektrostatske sile, koje ne zavise od orijentacije spinova, onda hamiltonijan (I.3.1) mora biti invarijantan u odnosu na rotaciju spinova, znači da on može sadržavati samo članove koji su skalarne funkcije spinskih vektora, tj ima oblik

$$H = G_0 + \sum_{\vec{f}_1\vec{f}_2} G(\vec{f}_1\vec{f}_2)\vec{S}_{\vec{f}_1}\vec{S}_{\vec{f}_2} + O(S_{\vec{f}_1}^{\alpha_1} S_{\vec{f}_2}^{\alpha_2} S_{\vec{f}_3}^{\alpha_3} S_{\vec{f}_4}^{\alpha_4}) \qquad (I.3.2)$$

Elektrostatska interakcija se ne mijenja pri promjeni orijentacije koordinatnih osa u prostoru direktne rešetke pa zaključujemo da je

$$G(\vec{f}_1,\vec{f}_2) = G(-\vec{f}_1,-\vec{f}_2)$$

U simetriziranom obliku hamiltonijan (I.3.2) pišemo na slijedeći način

$$H = G_0 - \frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}} J(\vec{f},\vec{g})\vec{S}_{\vec{f}}\vec{S}_{\vec{g}} \qquad (I.3.3)$$

gdje je $\mathcal{J}(\vec{f}, \vec{g})$ integral izmjene koji je jednak

$$\mathcal{J}(\vec{f},\vec{g}) = -G(\vec{g},\vec{f}) = -G(\vec{g},\vec{f}) = \mathcal{J}(\vec{g},\vec{f})$$

Hamiltonijan (I.3.3) je hamiltonijan Heisenbergovog modela feromagnetika. U slučaju kada se feromagnetik nalazi u spoljašnjem magnetnom polju $\mathcal{H}$ treba uključiti i član $-\mu \sum_{\vec{f}} \vec{\mathcal{H}} \vec{S}_{\vec{f}}$ gdje je μ magnetni moment atoma.

Uvešćemo operatore

$$S^{+} = S^{x} + iS^{y}, \quad S^{-} = S^{x} - iS^{y} \tag{I.3.4}$$

koji imaju osobinu da veličinu z projekcije spina povećavaju, odnosno smanjuju za jedinicu (z osa je uzeta u pravcu magnetizacije). Tada se hamiltonijan (I.3.3) može izraziti na slijedeći način

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{f}\vec{g}} \mathcal{J}(\vec{f},\vec{g}) \left\{ \frac{1}{2}(S^{+}_{\vec{f}} S^{-}_{\vec{g}} + S^{-}_{\vec{f}} S^{+}_{\vec{g}}) + S^{z}_{\vec{f}} S^{z}_{\vec{g}} \right\} \tag{I.3.5}$$

U slučaju kada je spin atoma jednak $S = \frac{1}{2}$ operatori S^{+} i S^{-} se svode na Pauli operatore.

Za proizvoljnu vrijednost spina operatori S^{+} i S^{-} se, kao i Pauli operatori, mogu izraziti preko Bose operatora na slijedeći način [24]

$$\begin{aligned} S^{+}_{\vec{f}} &= \sqrt{2S}\,(1 - \tfrac{1}{2S} B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}})\, B_{\vec{f}} + \cdots\cdots \\ S^{-}_{\vec{f}} &= \sqrt{2S}\, B^{+}_{\vec{f}} (1 - \tfrac{1}{2S} B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}}) + \cdots\cdots \end{aligned} \tag{I.3.6}$$

Za niskotemperaturnu analizu Heisenbergovog feromagnetika dovoljno je ograničiti se na prve članove razvoja

$$\begin{aligned} S^{+}_{\vec{f}} &= \sqrt{2S}\, B_{\vec{f}}, \quad S^{-}_{\vec{f}} = \sqrt{2S}\, B^{+}_{\vec{f}} \\ S^{z}_{\vec{f}} &= S - B^{+}_{\vec{f}} B_{\vec{f}} \end{aligned} \tag{I.3.7}$$

U ovoj aproksimaciji poznatoj kao Blochova, kvadratni dio hamiltonijana ima oblik

$$H=-\frac{1}{2}S^2NJ_0+SJ_0\sum_{\vec f}B^+_{\vec f}B_{\vec f}-S\sum_{\vec f\vec g}{}'J(\vec f,\vec g)B^+_{\vec f}B_{\vec g} \quad (I.3.8)$$

$$J_0=\sum_{\vec g}J(\vec f,\vec g)$$

Ovo je hamiltonijan koji opisuje sistem neinteragirajućih kvazičestica koje se zovu spinski talasi ili magnoni.

Na kraju ovog paragrafa napominjemo da je detaljno izvodjenje hamiltonijana Heisenbergovog modela (I.3.3) dato u [22] i [25]. Polazi se od hamiltonijana kristala u reprezentaciji druge kvantizacije, što je pogodno budući da je izmjenska interakcija efekt kvantne statistike. Medjutim, pri tom se javlja problem izbora jednočestičnih valnih funkcija. Ukoliko se kao jednočestične valne funkcije izaberu vlastite funkcije operatora energije izolovane molekule, javlja se problem neortogonalnosti tih funkcija. Naime, orbitalne valne funkcije koje opisuju stanja iste molekule su ortogonalne dok valne funkcije koje opisuju stanja različitih molekula nisu [26, 27], što dovodi do divergencije u matričnim elementima (katastrofa neortogonalnosti). Ovaj problem je moguće eliminisati pretpostavkom da su integrali prekrivanja tako mali da se valne funkcije mogu smatrati ortogonalnim, ili se može izvršiti ortogonalizacija valnih funkcija, što je u principu uvijek moguće [22].

I.4. Generalizacija Heisenbergovog modela

Magnetne interakcije

Opštiji Hamiltonijan od Heisenbergovog modela (I.3.3) može se dobiti ako se osim elektrostatskih interakcija elektrona nepopunjenih ljuski uzmu u obzir i druge interakcije, kao što su na primjer magnetne [28] .

Magnetne interakcije sastoje se iz interakcija spinskih magnetnih momenata medjusobno (spin-spinska interakcija) i iz interakcija spinskih i orbitalnih magnetnih momenata elektrona (spin - orbitalna interakcija). Obdje te interakcije proporcionalne su proizvodu magnetnih momenata, a obrnuto proporcionalne kubu rastojanja među njima, u kristalu su reda 10^{-16} - 10^{-17} erg za najbliže atome.

Sa postojanjem magnetne interakcije medju elektronima nepopunjenih ljuski vezana je pojava magnetne kristalografske anizotropije, koja se svodi na to da magnetne karakteristike kristala zavise od toga u kom se pravcu mjere. Naime, iako izmjenska interakcija medju elektronima prouzrokuje pojavu sredjenosti u medjusobnom rasporedu spinova, ona ne odredjuje pravac sumarnog spina u odnosu na kristalografske ose kristala. Posljedica postojanja i magnetnih interakcija osim izmjenskih je da u kristalu samo nekoliko pravaca ima osobinu da je termodinamički potencijal sistema minimalan pri orijentaciji spinova (ili grupa spinova) u jednom od tih pravaca. Ti pravci se zovu pravci lakog magnetisanja.

Hamiltonijan spin - spinske interakcije u prvoj aproksimaciji je kvadratna forma po spinskim operatorima $\vec{S}_{\vec{f}}$ i ima oblik dipolne interakcije

$$H_{dd}=\frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}}\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}}\left\{\vec{S}_{\vec{f}}\vec{S}_{\vec{g}}-3(\vec{S}_{\vec{f}}\vec{e}_{\vec{f}\vec{g}})(\vec{S}_{\vec{g}}\vec{e}_{\vec{f}\vec{g}})\right\} \tag{I.4.1}$$

$\vec{S}_{\vec{f}}$ i $\vec{S}_{\vec{g}}$ su operatori ukupnog spina na čvorovima kristalne rešetke $\vec{f}$ i $\vec{g}$. Koeficijenti $\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}}$ i $\vec{e}_{\vec{f}\vec{g}}$ koji karakterišu dipolnu interakciju medju magnetnim momentima su

$$\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}}=\frac{\mu^2}{|\vec{f}-\vec{g}|^3}\ ,\quad e^{\alpha}_{\vec{f}\vec{g}}=\frac{(\vec{f}-\vec{g})_{\alpha}}{|\vec{f}-\vec{g}|}\ ,\quad \alpha=x,y,z$$

a μ je magnetni moment atoma.

Hamiltonijan spin-orbitalne interakcije može se napisati u obliku bilinearne forme po spinskim operatorima $\vec{S}_{\vec{f}}$ i operatorima impulsa elektrona $\vec{p}_{\vec{f}}$ s realnim koeficijentima. Prema tome ukupni hamiltonijan nije invarijantan u odnosu na rotaciju spinova.

Eksperimentalno je pokazano da je u feromagnetnim kristalima srednji orbitalni magnetni moment po kristalu skoro uvijek jednak nuli [25]. Zato se može pretpostaviti da je anizotropni dio spinskog hamiltonijana u potpunosti vezan sa dipolnom interakcijom magnetnih momenata elektrona različitih čvorova, a da se spin-orbitalna interakcija može izostaviti. Tada se ukupni hamiltonijan koji opisuje feromagnetik kako sa izotropnim izmjenskim tako i sa dipol-dipolnim interakcijama, ako se uzme u obzir i energija usljed spoljašnjeg magnetnog polja $\mathcal{H}$, može napisati u obliku koga su predložili Holstein i Primakoff [29]

$$H_{HP} = -\mu \sum_{\vec{f}} \vec{\mathcal{H}} \vec{S}_{\vec{f}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{f}\vec{g}} \mathcal{J}_{\vec{f}\vec{g}} S_{\vec{f}} S_{\vec{g}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{f}\vec{g}} \mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} \left\{ \vec{S}_{\vec{f}} \vec{S}_{\vec{g}} - 3(\vec{S}_{\vec{f}} \vec{e}_{\vec{f}\vec{g}})(\vec{S}_{\vec{g}} \vec{e}_{\vec{f}\vec{g}}) \right\} \quad (I.4.2)$$

Spin-spinske (dipolne) interakcije pri analizi feromagnetika su uzete u obzir u radovima [30], [31], [32].

Zonska teorija i s-d izmjenski model

U Heisenbergovom modelu pretpostavljeno je da su atomni momenti koji obrazuju sredjenu fero - ili antiferomagnetnu strukturu lokalizovani oko čvorova kristalne rešetke. Mnogi rezultati dobijeni na osnovu ovog modela potvrdjeni su eksperimentalno. Medjutim, pošto je zanemarena interakcija elektrona nepopunjenih ljuski s elektronima vodljivosti, on ne može objasniti neke pojave koje se opažaju kod feromagnetnih metala, a više odgovara dielektricima (i metalima rijetkih zemalja s nepopunjenim f ljuskama).

Drugi pravac u teoriji jakog magnetizma je zonska teorija koju je razvio Frenkel. Zasniva se na modelu Fermi-gasa kolektiviziranih elektrona vodljivosti metala s uračunavanjem njihove izmjenske interakcije. Ona preuveličava efekt kolektivizacije elektrona, rezultat je da se gubi mogućnost objašnjenja dijela čisto magnetnih svojstava. Ovaj model prije svega objašnjava magnetna svojstva d metala i ferolegura sa spontanim momentima koji su uslovljeni spinovima elektrona nepopunjenih d ljuski atoma.

Hibridna varijanta teorije je s - d izmjenski model koga je kao Vonsovski. U tom modelu razmatraju se dvije grupe nivoa elektronskih sistema: d (ili f) nivoi elektrona unutrašnjih nepopunjenih ljuski i s nivoi valentnih elektrona. Interakcija medju elektronima koji se nalaze na d nivoima i s nivoima razmatra se kao mala smetnja. Uz te pretpostavke Vonsovski i Turov [33] su napisali hamiltonijan

$$H = H_d + H_s + H_{sd} \tag{I.4.3}$$

gdje su H_d i H_s operatori energije interakcije d odnosno s elektrona

$$H_d = -\frac{1}{2}\sum \mathcal{J}(\vec{f},\vec{g})\vec{S}_{\vec{f}}\vec{S}_{\vec{g}} \tag{I.4.4}$$

$$H_s = \sum E_{k\sigma} a^{+}_{k\sigma} a_{k\sigma} \tag{I.4.5}$$

Ovdje su $a^{+}_{k\sigma}$ i $a_{k\sigma}$ ($\sigma = \pm\frac{1}{2}$) fermi operatori stvaranja i poništavanja s elektrona sa valnim vektorom $\vec{k}$ i spinom σ, a $E_{k\sigma}$ je energija elektrona u stanju $k\sigma$. $\mathcal{J}$ je integral d-d izmjene, a $\vec{S}_{\vec{f}}$ spin elektrona na čvoru $\vec{f}$.

Energija interakcije d i s elektrona data je sa

$$H_{sd} = -\sum \mathcal{J}(\vec{f},\vec{g})\vec{S}_{\vec{f}}\vec{\sigma}_{\vec{g}} \tag{I.4.6}$$

tj. interakcija s i d elektrona se uzima kao izmjenska.

Utjecaj interakcije elektrona vodljivosti s elektronima nepopunjenih ljuski na svojstva prelaznih metala u okviru s-d izmjenskog modela razmatran je metodom Greenovih funkcija u [34].

Spin - fononski hamiltonijan

Spinski hamiltonijan (I.3.3) napisan je za slučaj kada svi atomi rešetke miruju. Medjutim, na temperaturama različitim od nule atomi vrše toplotno kretanje što dovodi do interakcije spinova sa oscilacijama rešetke ili fononima. Ovo ima za posljedicu promjenu sila izmjene. Pod uslovom da su amplitude oscilovanja atoma male u odnosu na konstantnu rešetke, integral izmjene se može razviti u red po stepenima atomskih pomaka pri čemu se kvadrati i viši stepeni pomaka zanemaruju. Na taj način se dobija

$$\mathcal{J}(\vec{f}-\vec{g})=\mathcal{J}_o(\vec{f}-\vec{g})+(\vec{u}_{\vec{f}}-\vec{u}_{\vec{g}})\nabla\mathcal{J}_o(\vec{f}-\vec{g}) \qquad (I.4.7)$$

gdje je $\mathcal{J}_o(\vec{f}-\vec{g})$ integral izmjene medju atomima $\vec{f}$ i $\vec{g}$ kada se oni nalaze u svojim ravnotežnim položajima, a $\vec{u}_{\vec{f}}$ i $\vec{u}_{\vec{g}}$ su pomaci tih atoma iz ravnotežnih položaja.

Uvrštavanjem dobijenog izraza (I.4.7) u hamiltonijan Heisenbergovog modela (I.3.3) dobijamo dodatni član koji odredjuje spin-fononsku interakciju. Prelazeći na operatore stvaranja i poništavanja fonona pomoću relacije (I.5.12) nalazimo spin - - fononski hamiltonijan

$$H_{sp}=-\frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}}\sum_{\vec{k}s}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{k}s}}}\,\vec{e}_{\vec{k}s}\nabla\mathcal{J}_o(\vec{f}-\vec{g})(b_{\vec{k}s}+b^{+}_{-\vec{k}s})(e^{i\vec{k}\vec{f}}-e^{i\vec{k}\vec{g}})\vec{S}_{\vec{f}}\vec{S}_{\vec{g}} \qquad (I.4.8)$$

Smisao pojedinih oznaka dat je u paragrafu I.5.

I.5. Mehaničke oscilacije u kristalima - translatorni i angularni fononi

Translatorni fononi

Razmotrićemo kristal sa jednim atomom (ili molekulom) u elementarnoj ćeliji. Neka je masa atoma M, a ravnotežni položaj odredjen je vektorom rešetke $\vec{n}$. Usljed termičkih vibracija dolazi do pomaka atoma iz čvorišta kristalne rešetke i taj otklon odredjen je vektorom $\vec{u}_{\vec{n}}$

Potencijalna energija kristala odredjena je trenutnim relativnim radijus - vektorima N atoma rešetke. Ako su pomaci mnogo manji od konstante kristalne rešetke, možemo izvršiti razvoj potencijalne energije u red po maloj veličini $u_{\vec{n}}$, pa u harmonijskoj aproksimaciji imamo

$$U=U_0+\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}\vec{n}\alpha\beta} U^{\alpha\beta}_{\vec{m}\vec{n}}\, u^{\alpha}_{\vec{m}}\, u^{\beta}_{\vec{n}} \tag{I.5.1}$$

$$m,n=1,2,\ldots N\,;\quad \alpha,\beta=x,y,z$$

gdje su koeficijenti

$$U^{\alpha\beta}_{\vec{m}\vec{n}}=U^{\alpha\beta}_{\vec{m}\vec{n}}=\left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^{\alpha}_{\vec{m}}\,\partial r^{\beta}_{\vec{n}}}\right)_0 ,$$

a U_0 je potencijalna energija kristala kada su svi atomi u čvorištima kristalne rešetke.

Jednačine za pomake $u_{\vec{n}}$ su

$$M\ddot{u}^{\beta}_{\vec{n}}=-\sum_{\vec{m},\alpha} U^{\alpha\beta}_{\vec{m}\vec{n}}\, u^{\alpha}_{\vec{m}} \tag{I.5.2}$$

$$n=1,2,\ldots N\,;\quad \beta=x,y,z$$

Rješenje ovog sistema od 3N jednačina tražimo u obliku

$$\vec{u}_{\vec{n}}(t)=\vec{e}_{\vec{k}}\, e^{i(\vec{k}\vec{n}-\omega_{\vec{k}}t)} \tag{I.5.3}$$

Jedinični vektori $\vec{e}_{\vec{k}}$ odredjuju smjer oscilovanja, a $\omega_{\vec{k}}$ frekvenciju oscilovanja.

Iz (I.5.3) i (I.5.2) dobijamo tri homogene linearne jednačine za odredjivanje komponenti vektora $\vec{e}_{\vec{k}}$. Iz uslova netrivijalnosti rješenja tih jednačina nalazimo sekularnu jednačinu

$$\left\| \sum_{\vec{n}} U^{\alpha\beta}_{\vec{m}\vec{n}} - M\omega^2_{\vec{k}}\,\delta_{\alpha\beta} \right\| = 0 \tag{I.5.4}$$

koja odredjuje frekvenciju $\omega^2_{\vec{k}}$ za svaku vrijednost $\vec{k}$. Ova jednačina ima tri korjena $\omega^2_{\vec{k}\lambda}\,(\lambda=1,2,3)$. Odgovarajuća tri rješenja odredjuju tri vektora $\vec{e}_{\vec{k}r}$ s komponentama $e^{\alpha}_{\vec{k}\lambda}$. Ti vektori su medjusobno ortogonalni, a normiramo ih uslovom

$$\sum_{\alpha} e^{\alpha}_{\vec{k}\lambda} e^{\alpha}_{\vec{k}\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} \tag{I.5.5}$$

Sve tri frekvencije $\omega_{\vec{k}\lambda}$ teže nuli kada $\vec{k} \to 0$, pa ta rješenja predstavljaju tri grane akustičkih oscilacija. U izotropnim kristalima jedan od vektora $\vec{e}_{\vec{k}\lambda}$ usmjeren je duž vektora $\vec{k}$, pa se odgovarajuće oscilacije nazivaju longitudinalnim. Druga dva vektora su okomita medjusobno i na valni vektor $\vec{k}$, oni odredjuju grane transverzalnih oscilacija.

Ukupna energija kristala je sada (izostavljamo konstantni član U_0)

$$E = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}} M \dot{\vec{u}}^2_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{m}\vec{n}\alpha\beta}{}' U^{\alpha\beta}_{\vec{m}\vec{n}} u^{\alpha}_{\vec{m}} u^{\beta}_{\vec{n}} \tag{I.5.6}$$

Pogodno je izvršiti transformaciju na nove koordinate s ciljem da se energija izrazi preko sume nezavisnih članova. Uvodimo kolektivne promjenljive $q_{\vec{k}r}$ pomoću izraza

$$\vec{u}_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{NM}}\sum_{\vec{k},\lambda} q_{\vec{k}\lambda}(t)\vec{e}_{\vec{k}\lambda} e^{i\vec{k}\vec{n}} \tag{I.5.7}$$

Da bi pomaci bili realni mora biti

$$q_{-\vec{k}\lambda} = q^{*}_{\vec{k}\lambda}, \quad \vec{e}_{-\vec{k}\lambda} = \vec{e}_{\vec{k}\lambda}$$

Sada je energija kristala

$$E = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\lambda} \dot{q}_{\vec{k}\lambda}\dot{q}^{*}_{\vec{k}\lambda} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\lambda} \omega^2_{\vec{k}\lambda} q_{\vec{k}\lambda} q^{*}_{\vec{k}\lambda} \tag{I.5.8}$$

Generalisani impuls koji odgovara koordinati $q_{\vec{k}r}$ je $\pi_{\vec{k}r} = \dot{q}^{*}_{\vec{k}r}$ pa je klasična Hamiltonova funkcija superpozicija nezavisnih oscilatora

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\lambda}(\pi_{\vec{k}\lambda}\pi^{*}_{\vec{k}\lambda} + \omega^2_{\vec{k}\lambda} q_{\vec{k}\lambda} q^{*}_{\vec{k}\lambda}) \tag{I.5.9}$$

Prelaz na kvantnu mehaniku vrši se zamjenom generalisanih koordinata i impulsa operatorima po pravilu

$$q_{\vec{k}r} \rightarrow \hat{q}_{\vec{k}r} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\vec{k}r}}} \left(b_{\vec{k}r} + b^{+}_{-\vec{k}r}\right)$$
$$\pi_{\vec{k}r} \rightarrow \hat{\pi}_{\vec{k}r} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}r}}{2}} \left(b^{+}_{\vec{k}r} - b_{-\vec{k}r}\right) \tag{I.5.10}$$

Ovdje su $b^{+}_{\vec{k}r}$ i $b_{\vec{k}r}$ operatori stvaranja i poništavanja fonona s valnim vektorom $\vec{k}$ i polarizacijom r. Oni zadovoljavaju komutacione relacije za Bose operatore.

Sada su Hamiltonov operator i vektor pomaka atoma iz ravnotežnog položaja

$$H = \sum_{\vec{k}r} \hbar\omega_{\vec{k}r} \left(b^{+}_{\vec{k}r} b_{\vec{k}r} + \frac{1}{2}\right) \tag{I.5.11}$$

i

$$\vec{u}_n = \sum_{\vec{k}r} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\vec{k}r}}}\, \vec{e}_{\vec{k}r} \left(b_{\vec{k}r} + b^{+}_{-\vec{k}r}\right) e^{i\vec{k}\vec{n}} \tag{I.5.12}$$

Dobijene rezultate možemo poopštiti i na slučaj kristala sa 6 atoma u elementarnoj ćeliji. Fononski spektar takvih kristala sastoji se iz 36 grana sa frekvencijama $w_{\vec{k}r}$, r = 1,2 ..., 36 . Frekvencije tri od tih grana teže nuli kada $\vec{k} \rightarrow 0$ i nazivaju se akustičkim granama. Ostalih 3 (6 - 1) grana oscilacija nazivaju se optičkim.

Angularni fononi

Nasuprot običnih fonona koji nastaju kao rezultat oscilacija atomskih ili molekularnih centara mase u rešetki, angularni fononi predstavljaju kolektivna pobudjenja u kristalu koja se javljaju u sistemima sa dipol-dipolnim interakcijama kao posljedica devijacija u orijentaciji dipola, Takva pobudjenja prvi je analizirao Davidov [35] ograničavajući se pri tom na promjene orijentacija samo u jednoj ravni. Daleko interesantniji slučaj trodimenzionalne rešetke razmotren je u [36].

Za razliku od drugih sistema koji se sastoje od orijentisanih elemenata, kao što su feromagnetici i sistemi sa kvadrupol- - kvadrupolnim interakcijama, ovdje nemamo diskretne promjene orijentacije individualnih elemenata, kao na primjer u slučaju spinova, nego kontinuirane. To je razlog da se teorija angularnih fonona može izgraditi na bazi klasičnih jednačina kretanja kao u slučaju običnih (translatornih) fonona ili u slučaju elektromagnetnog polja bez naboja.

Fizičke karakteristike sistema dipola zavise od njihovih orijentacija, stanje karakterisano minimalnim nivoom pobudjenja odgovara maksimalnom stepenu sredjenosti [37]. Orijentacija paralelnih dipola koja odgovara osnovnom stanju odredjuje se iz uslova minimalne potencijalne energije sistema. Razmotrićemo jednostavnu kubnu rešetku u aproksimaciji najbližih susjeda. U slučaju jednodimenzionalne rešetke se tada nalazi da je potencijalna energija minimalna kada su dipoli kolinearni sa rešetkom. Kod dvodimenzionalne rešetke potencijalna energija je minimalna kada su svi dipolni momenti u ravni rešetke i ne zavisi od njihovog smjera u toj ravni. U slučaju trodimenzionalne rešetke energija interakcije je nezavisna od orijentacije paralelnih dipola i uvijek je jednaka nuli. Znači da ovdje prisustvo dipol-dipol interakcije postaje evidentno samo kada je sistem pobudjen i kada se jave neki efekti kao posljedica stvaranja angularnih fotona.

Orijentacija dipola karakteriše se sa dva ugla α i β koji su definisani na slijedeći način: početni dipolni moment usmjeren je duž x-ose, prvo se izvrši rotacija dipola oko ose z za ugao α, a zatim oko nove ose y za ugao β. Moguće je na kraju izvršiti rotaciju molekule oko konačnog smjera dipolnog vektora za ugao γ, pa tada α, β i γ predstavljaju Eulerove uglove.

Kada se formira Lagrangeova funkcija sistema za rotacione stepene slobode molekule i nadju Lagrangeove jednačine kretanja, iz uslova da one imaju netrivijalna rješenja dobija se slijedeći izraz koji definiše frekvencije angularnih fonona

$$\begin{vmatrix} \mathcal{J}_z - \frac{T}{\omega^2} & \Pi_{yz} & \Pi_{xz} \\ \Pi_{yz} & \mathcal{J}_y - \frac{S}{\omega^2} & \Pi_{xy} \\ \Pi_{xz} & \Pi_{xy} & \mathcal{J}_x \end{vmatrix} = 0 \qquad (I.5.13)$$

gdje su $\mathcal{J}_{\vec{u}}$ i $\Pi_{\vec{u}\vec{v}}$ momenti i produkti inercije, respektivno

$$\mathcal{J}_{\vec{u}} = \sum m(\vec{u}\times\vec{r})^2$$
$$\Pi_{\vec{u}\vec{v}} = \sum m(\vec{u}\times\vec{r})(\vec{v}\times\vec{r}), \quad \vec{u}\neq\vec{v} \qquad (I.5.14)$$

Za jednodimenzionalnu rešetku je

$$S = T = 2d^2a^{-3}(2+\cos ka) \qquad (I.5.15)$$

za dvodimenzionalnu

$$S = 2d^2a^{-3}(1+\cos k_x a+\cos k_y a)$$
$$T = 2d^2a^{-3}(1+\cos k_x a-2\cos k_y a) \qquad (I.5.16)$$

i za trodimenzionalnu rešetku

$$S = 2d^2a^{-3}(\cos k_x a+\cos k_y a-2\cos k_z a)$$
$$T = 2d^2a^{-3}(\cos k_x a-2\cos k_y a+\cos k_z a) \qquad (I.5.17)$$

Ovdje je a konstanta kristalne rešetke i d električni dipolni moment.

Jednačina (I.5.13) odredjuje dva pozitivna rješenja za $\omega = \omega(k)$ koja predstavljaju dozvoljene frekvencije angularnih fonona.

Razmotrićemo poseban slučaj kada je raspodjela mase u molekulama simetrična pa je $\Pi_{rs} = 0$.

Hamiltonijan sistema angularnih fonona je moguće, analognim postupkom kao kod translatornih fonona, svesti na dijagonalan oblik koji predstavlja skup nezavisnih oscilatora

$$H=\sum_{\vec{k},i}(b^{+}_{\vec{k}i}b_{\vec{k}i}+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_{\vec{k}i} \tag{I.5.18}$$

Ovdje je izostavljena energija osnovnog stanja $-\frac{2Nd^2}{a^3}$; $b_{\vec{k}i}$ su Bose operatori.

U slučaju jednodimenzionalne rešetke frekvencije $\omega_{\vec{k}i}$ odredjene su sa

$$\omega_{\vec{k}i}=\sqrt{\frac{S(\vec{k})}{J_i}}\ ,\quad i=y,z \tag{I.5.19}$$

odakle se može zaključiti da u ovom slučaju angularni fononi imaju zakon disperzije sa dvije optičke grane koje su definisane za sve vrijednosti valnog vektora unutar prve Brillouinove zone.

Za male vrijednosti valnog vektora se nalazi

$$E_{ki}=\hbar\Delta_i+\frac{\hbar^2k^2}{2m_i}$$
$$\Delta_i=\hbar d\sqrt{\frac{6}{a^3J_i}}\ ,\ m_i=-\frac{\hbar}{d}\sqrt{\frac{6J_i}{a}} \tag{I.5.20}$$

tj. u slučaju jednodimenzionalne rešetke angularni fononi imaju negativnu efektivnu masu i procjep u zakonu disperzije, koji zavisi od geometrije molekule i rasporeda masa u molekuli, tj. od njenog momenta inercije.

Za dvodimenzionalnu rešetku u ravni x - y nalazi se da je jedna grana akustičkog tipa a druga optička. Kada $k\to 0$ za optičku granu je

$$\omega_2=\frac{d}{a}\sqrt{\frac{6}{aJ_y}}$$

a za akustičku

$$\omega_1=C(\varphi)K\ ,\ C(\varphi)=d\sqrt{\frac{3\sin^2\varphi_k-1}{aJ_z}}$$

Da bi veličina C (φ) koju interpretiramo kao brzina "angularnog zvuka" bila realna, vektor $\vec{k}$ ne smije odstupiti od + k_y ose više nego za 54° 30'.

U slučaju trodimenzionalne kristalne rešetke obje grane su akustičkog tipa. I ovdje postoje zabranjeni smjerovi prostiranja angularnih valova, tj. angularni zvuk se može prostirati samo u konusu oko k_y odnosno k_z ose čiji je poluotvor 54° 30'.

Ovo su bili rezultati za jednostavnu kubnu rešetku. Opštija teorija ovakvih fenomena može se naći u [38].

II DIPOLNI MAGNETIZAM

II.1. Čist dipolni hamiltonijan

Dipol-dipol interakcije u feromagneticima su obično dva ili tri reda veličine slabije od izmjenskih. Medjutim, s obzirom da one sa povećanjem rastojanja sporije opadaju od izmjenskih interakcija u mnogim realnim kristalima su vrlo značajne i mogu znatno uticati na termodinamičke osobine [39, 40, 41] . U nekim je čak materijalima dipolna energija porediva ili čak veća od izmjenske, to se posebno opaža u solima elemenata rijetkih zemalja [25].

Pošto su sistemi sa magnetnim dipolnim interakcijama do danas nedovoljno korektno teorijski tretirani, cilj nam je da izvršimo korektniju analizu pojava u ovakvim sistemima. Prethodno je potrebno izvršiti stabilizaciju hamiltonijana sistema.

Hamiltonijan feromagnetika sa dipolnim interakcijama kada se ovaj nalazi u konstantnom spoljašnjem magnetnom polju $\mathcal{H}$ je

$$H_{dd} = -\mu \sum_{\vec{f}} \vec{\mathcal{H}} \vec{S}_{\vec{f}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{f}\vec{g}} \mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} \left\{ \vec{S}_{\vec{f}} \vec{S}_{\vec{g}} - 3 (\vec{S}_{\vec{f}} \vec{e}_{\vec{f}\vec{g}})(\vec{S}_{\vec{g}} \vec{e}_{\vec{f}\vec{g}}) \right\} \quad \text{(II.1.1)}$$

Smisao oznaka jasan je iz paragrafa I.4.

Smatraćemo da se rešetka sastoji iz N ekvivalentnih čvorova, u svakom od njih se nalaze atomi iste vrste sa spinom S. Spoljašnje magnetno polje ćemo usmjeriti duž z ose.

Uvodjenjem operatora S^+ i S^- prema (I.3.4.) hamiltonijan (II.1.1.) može se napisati u obliku

$$H_{dd} = H^{(0)} + H^{(1)} + H^{(2)} + H^{(3)} + H^{(4)} \qquad \text{(II.1.2)}$$

gdje je

$$H^{(0)} = -NS\left[\mu\mathcal{H} - \tfrac{1}{2}SE_0\right]$$

$$H^{(1)} = \tfrac{1}{2}S\left[A\sum_{\vec f} S^+_{\vec f} + A^* \sum_{\vec f} S^-_{\vec f}\right]$$

$$H^{(2)} = \Delta_S \sum_{\vec f}(S - S^z_{\vec f}) + \tfrac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g} B_{\vec f\vec g} S^-_{\vec f} S^+_{\vec g} + \tfrac{1}{4}\sum_{\vec f\vec g}\left(C_{\vec f\vec g} S^+_{\vec f} S^+_{\vec g} + C^*_{\vec f\vec g} S^-_{\vec f} S^-_{\vec g}\right)$$

$$H^{(3)} = \tfrac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g}\left[D_{\vec f\vec g} S^-_{\vec f}(S - S^z_{\vec g}) + D^*_{\vec f\vec g} S^+_{\vec f}(S - S^z_{\vec g})\right]$$

$$H^{(4)} = \tfrac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g} E_{\vec f\vec g}(S - S^z_{\vec f})(S - S^z_{\vec g}) \qquad \text{(II.1.3)}$$

$$A = 3\sum_{\vec g} \mathcal{D}_{o\vec g}\, e^z_{o\vec g}(e^x_{o\vec g} - i e^y_{o\vec g})$$

$$\Delta_S = \mu\mathcal{H} + S\sum_{\vec g}\mathcal{D}_{o\vec g}\left[1 - 3(e^z_{o\vec g})^2\right]$$

$$B_{\vec f\vec g} = \mathcal{D}_{\vec f\vec g}\left[\tfrac{3}{2}(e^x_{\vec f\vec g})^2 + \tfrac{3}{2}(e^y_{\vec f\vec g})^2 - 1\right]$$

$$C_{\vec f\vec g} = \tfrac{3}{2}\mathcal{D}_{\vec f\vec g}\left[(e^x_{\vec f\vec g})^2 - (e^y_{\vec f\vec g})^2 - 2i e^x_{\vec f\vec g} e^y_{\vec f\vec g}\right]$$

$$D_{\vec f\vec g} = -3\mathcal{D}_{\vec f\vec g}\, e^z_{\vec f\vec g}\,(e^x_{\vec f\vec g} + i e^y_{\vec f\vec g})$$

$$E_{\vec f\vec g} = -\mathcal{D}_{\vec f\vec g}\left[1 - 3(e^z_{\vec f\vec g})^2\right], \quad E_0 = \sum_{\vec g} E_{o\vec g} \qquad \text{(II.1.4)}$$

U slučaju spina $S = \frac{1}{2}$ spinski operatori se mogu izraziti preko Pauli operatora [23].

$$S^- = Q^+, \quad S^+ = Q, \quad \tfrac{1}{2} - S^z = Q^+ Q \tag{II.1.5}$$

pri čemu operatori Q i Q^+ zadovoljavaju poznate komutacione relacije

$$\left[Q_{\vec{f}}, Q^+_{\vec{g}}\right] = (1 - 2Q^+_{\vec{f}} Q_{\vec{f}})\,\delta_{\vec{f}\vec{g}}$$

$$\left[Q_{\vec{f}}, Q_{\vec{g}}\right] = \left[Q^+_{\vec{f}}, Q^+_{\vec{g}}\right] = 0$$

$$Q^2_{\vec{f}} = Q^{+2}_{\vec{f}} = 0$$

Sada je hamiltonijan

$$H_{dd} = H^{(0)}_{1/2} + H^{(1)}_{1/2} + H^{(2)}_{1/2} + H^{(3)}_{1/2} + H^{(4)}_{1/2} \tag{II.1.6}$$

gdje je

$$H^{(0)}_{1/2} = -\tfrac{1}{2} N\mu\mathcal{H} - \tfrac{1}{8} N \sum_{\vec{g}} \mathcal{D}_{o\vec{g}} \left[1 - 3\,(e^z_{o\vec{g}})^2\right]$$

$$H^{(0)}_{1/2} = \tfrac{1}{4}\left[A \sum_{\vec{f}} Q_{\vec{f}} + \overset{*}{A} \sum_{\vec{f}} Q^+_{\vec{f}}\right]$$

$$H^{(2)}_{1/2} = \Delta_{1/2} \sum_{\vec{f}} Q^+_{\vec{f}} Q_{\vec{f}} + \tfrac{1}{2} \sum_{\vec{f}\vec{g}} B_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_f Q_g + \tfrac{1}{4} \sum_{\vec{f}\vec{g}} (C_{\vec{f}\vec{g}} Q_{\vec{f}} Q_{\vec{g}} + C^*_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_{\vec{f}} Q^+_{\vec{g}})$$

$$H^{(3)}_{1/2} = \tfrac{1}{2} \sum_{\vec{f}\vec{g}} (D_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_{\vec{f}} Q^+_{\vec{g}} Q_{\vec{g}} + D^*_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_{\vec{g}} Q_{\vec{g}} Q_{\vec{f}})$$

$$H^{(4)}_{1/2} = \tfrac{1}{2} \sum_{\vec{f}\vec{g}} E_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_{\vec{f}} Q_{\vec{f}} Q^+_{\vec{g}} Q_{\vec{g}} \tag{II.1.7}$$

Hamiltonijan (II.1.6.) sadrži članove linearne u odnosu na operatore stvaranja i poništavanja, tj. vakumsko stanje nije dobro definisano. Osim toga on ne komutira sa operatorom ukupnog broja zaposjednuća što znači da se broj kvazičestica - dipolnih magnona u sistemu ne održava.

U cilju stabilizacije hamiltonijana sa Pauli operatora Q i Q^+ preći ćemo na nove Pauli operatore P i P^+. U podprostoru fermionskih stanja $|0_0\, 1_1\rangle$, $|1_0\, 0_1\rangle$ Pauli operatori se mogu izraziti preko Fermi operatora na slijedeći način:

$$Q^+ = a_1^+ a_0\,, \quad Q = a_0^+ a_1\,, \quad Q^+ Q = a_1^+ a_1 \tag{II.1.8}$$

Prelaz na operatore P i P^+ vrši se unitarnom transformacijom sa Fermi operatora a_1 i a_0 na nove Fermi operatore b_1 i b_0 pri čemu je

$$\begin{aligned} &P^+ = b_1^+ b_0\,, \quad P = b_0^+ b_1\,, \quad P^+ P = b_1^+ b_1 \\ &b_1^+ b_1 + b_0^+ b_0 = 1 \end{aligned} \tag{II.1.9}$$

Unitarna transformacija ima oblik

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha^* & -\beta^* \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \tag{II.1.10}$$

uz uslov

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

Elemente unitarne transformacije α i β odredićemo tako da u novom hamiltonijanu nema člana linearnog po P. Uslov eliminacije glasi

$$\begin{aligned} &-\tfrac{1}{2}\alpha^2\left[1-2(|\alpha|^2-|\beta|^2)\right]A - \tfrac{1}{2}\beta^{*2}\left[1+2(|\alpha|^2-|\beta|^2)\right]A^* + 2\alpha\beta^*\Big[\Delta_{1/2}+|\beta|^2 E_0 + \\ &+\tfrac{1}{2}(|\alpha|^2-|\beta|^2)B_0\Big] + \alpha^3\beta C_0 - \alpha^*\beta^{*3}C_0^* = 0 \end{aligned} \tag{II.1.11}$$

gdje je

$$B_0 = \sum_{\vec{g}} B_{0\vec{g}}\,, \quad C_0 = \sum_{\vec{g}} C_{0\vec{g}}$$

Nakon stabilizacije hamiltonijan dipol-dipol interakcije je

$$\begin{aligned} H_{dd} = {} & \tilde{H}_0 + \tilde{\Delta}\sum_{\vec{f}} P_{\vec{f}}^+ P_{\vec{f}} + \tfrac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}} \tilde{B}_{\vec{f}\vec{g}} P_{\vec{f}}^+ P_{\vec{g}} + \tfrac{1}{4}\sum_{\vec{f}\vec{g}}(\tilde{C}_{\vec{f}\vec{g}} P_{\vec{f}} P_{\vec{g}} + \tilde{C}_{\vec{f}\vec{g}}^* P_{\vec{f}}^+ P_{\vec{g}}^+) + \\ & + \tfrac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}}(\tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}} P_{\vec{f}}^+ P_{\vec{g}}^+ P_{\vec{g}} + \tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}}^* P_{\vec{g}}^+ P_{\vec{g}} P_{\vec{f}}) + \tfrac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}} \tilde{E}_{\vec{f}\vec{g}} P_{\vec{f}}^+ P_{\vec{f}} P_{\vec{g}}^+ P_{\vec{g}} \end{aligned} \tag{II.1.12}$$

gdje je

$$\tilde{H}_0 = H^{(0)}_{1/2} + N\Big\{\Delta_{1/2}|\beta|^2 + \tfrac{1}{4}\alpha\beta(1-2|\beta|^2)A + \tfrac{1}{4}\alpha^*\beta^*(1-2|\beta|^2)A^* +$$
$$+ \tfrac{1}{4}C_0\alpha^2\beta^2 + \tfrac{1}{4}C_0^*\alpha^{*2}\beta^{*2} + \tfrac{1}{2}B_0|\alpha|^2|\beta|^2 + \tfrac{1}{2}E_0|\beta|^4\Big\}$$

$$\tilde{\Delta} = \Delta_{1/2}(|\alpha|^2-|\beta|^2) - \tfrac{1}{2}\alpha\beta\left[1+2(|\alpha|^2-|\beta|^2)\right]A - \tfrac{1}{2}\alpha^*\beta^*\left[1+2(|\alpha|^2-|\beta|^2\right]A^* -$$
$$-2B_0|\alpha|^2|\beta|^2 - C_0\alpha^2\beta^2 - C_0^*\alpha^{*2}\beta^{*2} + |\beta|^2(|\alpha|^2-|\beta|^2)E_0$$

$$\tilde{B}_{\vec{f}\vec{g}} = (|\alpha|^4+|\beta|^4)B_{\vec{f}\vec{g}} - \alpha^2\beta^2C_{\vec{f}\vec{g}} - \alpha^{*2}\beta^{*2}C^*_{\vec{f}\vec{g}} + \alpha^*\beta^*(|\alpha|^2-|\beta|^2)D_{\vec{f}\vec{g}} +$$
$$+\alpha\beta(|\alpha|^2-|\beta|^2)D^*_{\vec{f}\vec{g}} + 2|\alpha|^2|\beta|^2E_{\vec{f}\vec{g}}$$

$$\tilde{C}_{\vec{f}\vec{g}} = -2\alpha^2\beta^{*2}B_{\vec{f}\vec{g}} + \alpha^4C_{\vec{f}\vec{g}} + \beta^{*4}C^*_{\vec{f}\vec{g}} - 2\alpha\beta^{*3}D_{\vec{f}\vec{g}} + 2\alpha^3\beta^*D^*_{\vec{f}\vec{g}} +$$
$$+2\alpha^3\beta^*D^*_{\vec{f}\vec{g}} + 2\alpha^2\beta^{*2}E_{\vec{f}\vec{g}}$$

$$\tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}} = -2\alpha^*\beta(|\alpha|^2-|\beta|^2)B_{\vec{f}\vec{g}} + 2\alpha\beta^3C_{\vec{f}\vec{g}} - 2\alpha^{*3}\beta^*C^*_{\vec{f}\vec{g}} +$$
$$+2(|\alpha|^2-|\beta|^2)\left[\alpha^{*2}D_{\vec{f}\vec{g}} - \beta^2D^*_{\vec{f}\vec{g}} + \alpha^*\beta E_{\vec{f}\vec{g}}\right]$$

$$\tilde{E}_{\vec{f}\vec{g}} = 4|\alpha|^2|\beta|^2B_{\vec{f}\vec{g}} + 2\alpha^2\beta^2C_{\vec{f}\vec{g}} + 2\alpha^{*2}\beta^{*2}C^*_{\vec{f}\vec{g}} - 2\alpha^*\beta^*(|\alpha|^2-|\beta|^2)D_{\vec{f}\vec{g}} -$$
$$-2\alpha\beta(|\alpha|^2-|\beta|^2)D^*_{\vec{f}\vec{g}} + (|\alpha|^2-|\beta|^2)^2E_{\vec{f}\vec{g}} \qquad \text{(II.1.13)}$$

Procedura stabilizacije koju smo ovdje proveli vrijedi samo u slučaju kada je spin atoma jednak 1/2. Ako je spin $S > \frac{1}{2}$ postupak je analogan, samo je potrebno spinske operatore izraziti preko kvazi-Pauli operatora.

Stabilizaciju hamiltonijana u opštem slučaju proizvoljne vrijednosti spina $S \geqslant \frac{1}{2}$ možemo izvršiti i klasičnom rotacijom. Preći ćemo na nove spinske operatore $\vec{\sigma}$ korištenjem transformacije

$$S^a = \gamma^a \sigma^z + A^a \sigma^+ + \overset{*}{A}{}^a \sigma^- \quad , \quad a = x,y,z \tag{II.1.14}$$

Koeficijente transformacije odredićemo tako da se iz dobijenog hamiltonijana eliminišu linearni članovi. Da bi transformacija (II.1.14) bila unitarna i da bi bile sačuvane komutacione relacije za spinske komponente, vektori $\vec{\gamma}$, $\vec{A}$ i $\vec{A}^*$ moraju zadovoljavati uslove

$$\begin{aligned}
&\vec{\gamma}^2 = 1 \, , \; \gamma^a = \overset{*}{\gamma}{}^a \, , \; \vec{A}\cdot\vec{\gamma} = \vec{A}^*\vec{\gamma} = 0 \\
&\vec{A}\cdot\vec{A}^* = \tfrac{1}{2} \, , \; \vec{A}^2 = \vec{A}^{*2} = 0 \\
&\vec{\gamma}\times\vec{A} = i\vec{A} \, , \; |A^a|^2 = \tfrac{1}{4}\left[1-(\gamma^a)^2\right]
\end{aligned} \tag{II.1.15}$$

Hamiltonijan dipol-dipol interakcije (II.1.1) izražen preko operatora $\vec{\sigma}$ je

$$H_{dd} = H_s^{(0)} + H_s^{(1)} + H_s^{(2)} + H_s^{(3)} + H_s^{(4)} \, . \tag{II.1.16}$$

gdje je

$$H_s^{(0)} = -\mu NS \sum_a \mathcal{H}^a \gamma^a - \tfrac{1}{2} NS\mathcal{D}_0 + \tfrac{3}{2} NS^2 \sum_{\vec{g}ab} \mathcal{D}_{0\vec{g}} e^a_{0\vec{g}} e^b_{0\vec{g}} \gamma^a \gamma^b$$

$$\begin{aligned}
H_s^{(1)} = &\sum_{\vec{f}a}\Big[-\mu\mathcal{H}^a A^a + 3S\sum_{\vec{g}b}\mathcal{D}_{0\vec{g}} e^a_{0\vec{g}} e^b_{0\vec{g}} A^a \gamma^b\Big]\sigma^+_{\vec{f}} + \\
&+\sum_{\vec{f}a}\Big[-\mu\mathcal{H}^a \overset{*}{A}{}^a + 3S\sum_{\vec{g}b}\mathcal{D}_{0\vec{g}} e^a_{0\vec{g}} e^b_{0\vec{g}} \overset{*}{A}{}^a \gamma^b\Big]\sigma^-_{\vec{f}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_s^{(2)} = &\Big[\sum_a \mu\mathcal{H}^a\gamma^a + S\mathcal{D}_0 - 3S\sum_{\vec{g}ab}\mathcal{D}_{0\vec{g}} e^a_{0\vec{g}} e^b_{0\vec{g}} \gamma^a\gamma^b\Big]\sum_{\vec{f}}(S-\sigma^z_{\vec{f}}) - \\
&-\sum_{\vec{f}\vec{g}}\Big[\tfrac{1}{2}\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} - 3\sum_{ab}\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} e^a_{\vec{f}\vec{g}} e^b_{\vec{f}\vec{g}} \overset{*}{A}{}^a A^b\Big]\sigma^-_{\vec{f}}\sigma^+_{\vec{g}} + \\
&+\tfrac{3}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}ab}\Big[\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} e^a_{\vec{f}\vec{g}} e^b_{\vec{f}\vec{g}} A^a A^b \sigma^+_{\vec{f}}\sigma^+_{\vec{g}} + \mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} e^a_{\vec{f}\vec{g}} e^b_{\vec{f}\vec{g}} \overset{*}{A}{}^a \overset{*}{A}{}^b \sigma^-_{\vec{f}}\sigma^-_{\vec{g}}\Big]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_s^{(3)} = &-3\sum_{\vec{f}\vec{g}ab}\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} e^a_{\vec{f}\vec{g}} e^b_{\vec{f}\vec{g}} A^a\gamma^b \sigma^+_{\vec{f}}(S-\sigma^z_{\vec{g}}) - \\
&-3\sum_{\vec{f}\vec{g}ab}\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} e^a_{\vec{f}\vec{g}} e^b_{\vec{f}\vec{g}} \overset{*}{A}{}^a\gamma^b \sigma^-_{\vec{f}}(S-\sigma^z_{\vec{g}})
\end{aligned}$$

$$H_s^{(4)}=-\frac{1}{2}\sum_{fg}\mathcal{D}_{fg}(1-3\sum_{ab}e_{fg}^a e_{fg}^b \gamma^a\gamma^b)(S-\sigma_f^z)(S-\sigma_g^z)$$

$$\mathcal{D}_0=\sum_g \mathcal{D}_{0g}\ ,\ a,b=x,y,z$$

Stabilizaciju hamiltonijana provešćemo tako što ćemo odrediti minumum energije osnovnog stanja uz dopunski uslov

$$\sum_a(\gamma^a)^2=1 \qquad \text{(II.1.17)}$$

Da bi $H_s^{(0)}$ bilo minimalno $\vec{\gamma}$ i Lagrangeov multiplikator λ treba odrediti iz sistema jednačina

$$-\mu\mathcal{H}^a+3S\sum_{gb}\mathcal{D}_{0g}e_{0g}^a e_{0g}^b\gamma^b=2\lambda\gamma^a \qquad \text{(II.1.18)}$$

$$a,b=x,y,z$$

Ako nema spoljašnjeg magnetnog polja λ se odredjuje izjednačavanjem sekularne jednačine ovog sistema s nulom. Ukoliko je spoljašnje polje prisutno iz sistema (II.1.18) se odrede $\gamma^x,\gamma^y,\gamma^z$ kao funkcije od λ pa se zatim odredi λ iz zahtjeva da je $(\gamma^x)^2+(\gamma^y)^2+(\gamma^z)^2=1$. Nadjene vrijednosti γ^z odredjuju pravac stabilizovane ose kvantizacije.

U slučaju izotropnog hamiltonijana koji daje analitički zakon disperzije lako zaključujemo da klasična i kvantna stabilizacija daju isti rezultat. Pošto hamiltonijan dipol-dipol interakcije nije izotropan i ne daje analitičke zakone disperzije, cilj nam je da za ovaj slučaj uporedimo uslove klasične i kvantne stabilizacije (II.1.18) i (II.1.11).

Kada je spin atoma $S=\frac{1}{2}$ transformacija (II.1.14) se preko Pauli operatora izražava na slijedeći način

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}(Q+Q^+)&=\gamma^x(\tfrac{1}{2}-P^+P)+A^xP+A^{*x}P^+\\
\frac{1}{2i}(Q-Q^+)&=\gamma^y(\tfrac{1}{2}-P^+P)+A^yP+A^{*y}P^+\\
\frac{1}{2}-Q^+Q&=\gamma^z(\tfrac{1}{2}-P^+P)+A^zP+A^{*z}P^+
\end{aligned} \qquad \text{(II.1.19)}$$

Nakon uvodjenja fermi operatora b_0, b_1, a_0 i a_1 korištenjem (II.1.8) i (II.1.9) i izvršene unitarne transformacije (II.1.10) zaključujemo da je

$$\gamma^x = \alpha\beta + \alpha^*\beta^* \ , \ \gamma^y = i(\alpha^*\beta^* - \alpha\beta) \ , \ \gamma^z = |\alpha|^2 - |\beta|^2 \qquad \text{(II.1.20)}$$

i

$$A^x = \frac{1}{2}(\alpha^2 - \beta^{*2}) \ , \ A^y = \frac{1}{2i}(\alpha^2 + \beta^{*2}), \ A^z = -\alpha\beta^* \qquad \text{(II.1.21)}$$

S druge strane, u slučaju kada je spoljašnje magnetno polje usmjereno duž z-ose, klasični uslov stabilizacije (II.1.18) se korištenjem (II.1.4) može napisati u obliku

$$\begin{aligned} &A'\gamma^x - A''\gamma^y + (\mathcal{D}_0 - 4\lambda + E_0)\gamma^z = 2\mu\mathcal{H} \\ &(B_0 + C_0' + \mathcal{D}_0 - 4\lambda)\gamma^x - C_0''\gamma^y + A'\gamma^z = 0 \\ &-C_0''\gamma^x + (B_0 - C_0' + \mathcal{D}_0 - 4\lambda)\gamma^y - A''\gamma^z = 0 \\ &A = A' + iA'', \ C_0 = C_0' + iC_0'' \end{aligned} \qquad \text{(II.1.22)}$$

što se nakon zamjene koeficijenata γ^a iz (II.1.20) i eliminacije λ može svesti na kvantni uslov stabilizacije (II.1.11), dok stabilizovani hamiltonijan postaje jednak sa (II.1.12). Zaključujemo da kvantna i klasična rotacija dovode do istog rezultata.

Da bi se iz hamiltonijana (II.1.12) uklonili članovi koji ne održavaju broj kvazičestica koristićemo se Weylovim identitetom (vidjeti na primjer [9] i [17]).

$$H_{eq} = e^{-S} H_{dd} e^{S} = H_{dd} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left[S,\left[S,\left[S,\ldots\left[S,H_{dd}\right]\right]\ldots\right]\right.$$

gdje je

$$S = Y\sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{m}\vec{n}} X_{\vec{m}\vec{n}} P_{\vec{m}} P_{\vec{n}} - \text{c.c.} \qquad \text{(II.1.23)}$$

Ovdje je S antihermitski operator, čime je obezbjedjena unitarnost transformacije. Funkcije X i Y ćemo naknadno odrediti. Prisustvo člana linearnog po P u izrazu za S potrebno je zato što se u komutatoru $[H_{dd}, PP]$ opet javljaju članovi linearni po P koji se eliminišu odgovarajućim izborom funkcije Y.

Pošto transformisani hamiltonijan H_{eq} sadrži beskonačno mnogo članova, neophodno ga je izraziti u vidu razvoja po nekom malom parametru i definisati tačnost sa kojom se želi računati. Za mali parametar ćemo uzeti odnos koeficijenata $\tilde{B}_{\vec{f}\vec{g}}$, $\tilde{C}_{\vec{f}\vec{g}}$, $\tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}}$, $\tilde{E}_{\vec{f}\vec{g}}$ i veličine $\tilde{\Delta}$. Koeficijenti $\tilde{B}_{\vec{f}\vec{g}}$, $\tilde{C}_{\vec{f}\vec{g}}$, $\tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}}$ i $\tilde{E}_{\vec{f}\vec{g}}$ su reda $\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} \approx \frac{\mu^2}{a^3}$. Izborom dovoljno jakog spoljašnjeg magnetnog polja $\mathcal{H}$ može se postići da $\tilde{\Delta}$ bude veliko, odnosno da $\frac{\tilde{B}}{\tilde{\Delta}}$, $\frac{\tilde{C}}{\tilde{\Delta}}$, $\frac{\tilde{D}}{\tilde{\Delta}}$, $\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}$ bude reda $\varepsilon \ll 1$. Za tačnost do članova proporcionalnih sa ε potrebni su samo slijedeći komutatori

$$[S, H_{dd}] \quad i \quad [S, [S, H_{\Delta}]]$$

gdje je H_{Δ} dijagonalni član u hamiltonijanu (II.1.12).

Koeficijente Y i $X_{\vec{m}\vec{n}}$ odredjujemo tako da bi se iz transformisanog hamiltonijana uklonili članovi proporcionalni sa $P_{\vec{n}}$, $P^+_{\vec{n}}$, $P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}$ i $P^+_{\vec{n}} P^+_{\vec{m}}$. Uslovi eliminacije su

$$-\frac{1}{4}\tilde{C}_{\vec{f}\vec{g}} + \frac{1}{2} Y \tilde{D}^*_{\vec{f}\vec{g}} + (2\tilde{\Delta} + \tilde{E}_{\vec{f}\vec{g}}) X_{\vec{f}\vec{g}} + \sum_{\vec{m}} \tilde{B}_{\vec{m}\vec{g}} X_{\vec{f}\vec{m}} = 0$$

$$Y\tilde{\Delta} + \frac{1}{2} Y \tilde{B}_0 + \frac{1}{2} Y^* \tilde{C}_0 + \sum_{\vec{g}} \tilde{D}_{o\vec{g}} X_{o\vec{g}} = 0 \qquad \text{(II.1.24)}$$

Nakon prelaska u impulsni prostor i zadržavajući samo članove koji su proporcionalni prvom stepenu male veličine $\varepsilon = \frac{|\tilde{C}_{\vec{k}}|}{\tilde{\Delta}}$, $\tilde{C}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{g}} \tilde{C}_{og} e^{-i\vec{k}\vec{g}}$, možemo staviti $Y \approx 0$, a za $X_{\vec{k}}$ se dobija slijedeća integralna jednačina

$$X_{\vec{k}} = \frac{1}{2\tilde{\Delta} + \tilde{B}_{\vec{k}}} \left[\frac{1}{4} \tilde{C}_{\vec{k}} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \tilde{E}_{\vec{k}-\vec{q}} X_{\vec{q}} \right]$$

čije je rješenje

$$X_{\vec{k}} = \frac{1}{4(2\tilde{\Delta} + \tilde{B}_{\vec{k}})} \left[\tilde{C}_{\vec{k}} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\tilde{E}_{\vec{k}-\vec{q}} \tilde{C}_{\vec{q}}}{2\tilde{\Delta} + \tilde{B}_{\vec{q}}} \right]$$

odnosno imajući u vidu da je $\varepsilon \ll 1$

$$X_{\vec{k}} = \frac{\tilde{C}_{\vec{k}}}{8\tilde{\Delta}} + O(\varepsilon^2) \qquad \text{(II.1.25)}$$

Na taj način je transformisani hamiltonijan feromagnetika sa čistim dipolnim interakcijama

$$
\begin{aligned}
H_{eg} = {} & \tilde{H}_0 + 4N\tilde{\Delta}\sum_{\vec{g}}|X_{o\vec{g}}|^2 - \frac{1}{2}\sum_{\vec{g}}(\tilde{C}^*_{o\vec{g}}X_{o\vec{g}} + \tilde{C}_{o\vec{g}}X^*_{o\vec{g}})N + \\
& + \Big[\tilde{\Delta} - 16\tilde{\Delta}\sum_{\vec{g}}|X_{o\vec{g}}|^2 + 2\sum_{\vec{g}}(\tilde{C}^*_{o\vec{g}}X_{o\vec{g}} + \tilde{C}_{o\vec{g}}X^*_{o\vec{g}})\sum_{\vec{f}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}} + \\
& + \sum_{\vec{f}\vec{g}}\Big[\frac{1}{2}\tilde{B}_{\vec{f}\vec{g}} - \sum_{\vec{m}}(\tilde{C}^*_{\vec{m}\vec{f}}X_{\vec{m}\vec{g}} + \tilde{C}_{\vec{m}\vec{g}}X^*_{\vec{m}\vec{f}}) + 8\tilde{\Delta}X^*_{\vec{f}\vec{m}}X_{\vec{m}\vec{g}}\Big]P^+_{\vec{f}}P_{\vec{g}} + \\
& + \sum_{\vec{f}\vec{g}}\Big[\frac{1}{2}\tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}} + 2\tilde{D}^*_{\vec{f}\vec{g}}X_{\vec{f}\vec{g}} - \sum_{\vec{m}}\tilde{D}^*_{\vec{m}\vec{f}}X^*_{\vec{m}\vec{g}}\Big]P^+_{\vec{f}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}} + \\
& + \sum_{\vec{f}\vec{g}}\Big[\frac{1}{2}\tilde{D}^*_{\vec{f}\vec{g}} + 2\tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}}X_{\vec{f}\vec{g}} - \sum_{\vec{m}}\tilde{D}_{\vec{m}\vec{f}}X_{\vec{m}\vec{g}}\Big]P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}}P_{\vec{f}} + \\
& + \sum\Big[\frac{1}{2}\tilde{E}_{\vec{f}\vec{g}} + 16\tilde{\Delta}|X_{\vec{f}\vec{g}}|^2 - 2(X_{\vec{f}\vec{g}}\tilde{C}^*_{\vec{f}\vec{g}} + X^*_{\vec{f}\vec{g}}\tilde{C}_{\vec{f}\vec{g}}\Big]P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}} - \\
& - \sum_{\vec{f}\vec{g}\vec{m}}(\tilde{D}^*_{\vec{f}\vec{g}}X_{\vec{m}\vec{g}}P_{\vec{f}}P_{\vec{m}}P_{\vec{g}} + \tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}}X^*_{\vec{m}\vec{g}}P^+_{\vec{g}}P^+_{\vec{m}}P^+_{\vec{f}} - \\
& - \sum_{\vec{f}\vec{g}\vec{m}}(\tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}}X_{\vec{f}\vec{m}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{f}}P_{\vec{m}} + \tilde{D}^*_{\vec{f}\vec{g}}X^*_{\vec{f}\vec{m}}P^+_{\vec{m}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{g}}) + \\
& + 2\sum_{\vec{f}\vec{g}\vec{m}}(\tilde{C}_{\vec{m}\vec{g}}X^*_{\vec{f}\vec{g}} + \tilde{C}^*_{\vec{f}\vec{g}}X_{\vec{m}\vec{g}} - 8\tilde{\Delta}X^*_{\vec{f}\vec{g}}X_{\vec{m}\vec{g}})P^+_{\vec{f}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}}P_{\vec{m}} + \\
& + 2\sum_{\vec{f}\vec{g}\vec{m}}(\tilde{B}_{\vec{f}\vec{g}} - \tilde{E}_{\vec{f}\vec{g}})(X_{\vec{f}\vec{m}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}P_{\vec{m}}P_{\vec{g}} + X^*_{\vec{m}\vec{g}}P^+_{\vec{m}}P^+_{\vec{g}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}) + \\
& + 2\sum_{\vec{f}\vec{g}\vec{m}}(\tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}}X_{\vec{f}\vec{m}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}}P_{\vec{m}} + \tilde{D}^*_{\vec{f}\vec{g}}X^*_{\vec{f}\vec{m}}P^+_{\vec{m}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}})
\end{aligned}
\qquad \text{(II.1.26)}
$$

II.2. Jednodimenzionalna rešetka, spinovi duž lanca. Jednodimenzionalna rešetka sa dve podrešetke, spinovi vertikalno

U ovom paragrafu ćemo razmotriti sistem vezanih magnetnih dipola da bismo vidjeli da li dipolne interakcije mogu da vode na zakon disperzije sa procjepom u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja. Analizu ćemo provesti za slučaj jednodimenzionalne spinske rešetke, jer će upravo jednodimenzionalne strukture igrati važnu ulogu u razmatranjima koja će biti provedena u glavi III. Razmotrićemo odvojeno dva slučaja: kada su spinski vektori kolinearni sa rešetkom i kada su okomiti na nju.

Hamiltonijan dipol-dipol interakcije (I.4.1) se za jednodimenzionalnu rešetku konstante a u aproksimaciji najbližih susjeda može napisati u obliku

$$H_{dd}=\frac{\mu^2}{2a^3}\sum_f\Big\{\vec{S}_f\vec{S}_{f+a}-3(\vec{S}_f\vec{e}_{f,f+a})(\vec{S}_{f+a}\vec{e}_{f,f+a})+$$
$$+\vec{S}_f\vec{S}_{f-a}-3(\vec{S}_f\vec{e}_{f,f-a})(\vec{S}_{f-a}\vec{e}_{f,f-a})\Big\} \qquad \text{(II.2.1)}$$

Uz pretpostavku da su u osnovnom stanju svi spinovi paralelni odredićemo njihovu orijentaciju iz uslova da energija ima minimalnu vrijednost. Svi vektori spina su jednaki i dati izrazom

$$S=S(\sin\Theta\cos\varphi\,\vec{i}+\sin\Theta\sin\varphi\,\vec{j}+\cos\Theta\,\vec{k}) \qquad \text{(II.2.2)}$$

Neka se smjer kristalne rešetke podudara sa pravcem magnetizacije (osa z). Tada je

$$\vec{e}_{f,f+a}=\vec{k}\,,\quad \vec{e}_{f,f-a}=-\vec{k}$$

Slijedi da je

$$H_{dd}=\frac{N\mu^2}{a^3}S^2(1-3\cos^2\Theta) \qquad \text{(II.2.3)}$$

pa je energija minimalna kada je $\Theta = 0$, odnosno kada su svi spinovi usmjereni duž z ose, tj. duž kristalne rešetke.

Minimalna energija, tj. energija osnovnog stanja je

$$E_0=-2N\frac{\mu^2S^2}{a^3} \qquad \text{(II.2.4)}$$

U ovom slučaju kada su spinski vektori kolinearni sa rešetkom hamiltonijan dipol-dipol interakcije (II.2.1) izražen preko spinskih operatora S^+, S^- i S^z je

$$H_{dd}=-NS^2\frac{2\mu^2}{a^3}+4S\frac{\mu^2}{a^3}\sum_f(S-S_f^z)-\frac{\mu^2}{2a^3}\sum_f S_f^-(S_{f+a}^++S_{f-a}^+) \qquad \text{(II.2.5)}$$

Kako analizu magnonskih stanja vršimo u harmanijskoj aproksimaciji uvešćemo Blochovu aproksimaciju za spinske operatore

$$S_f^-=\sqrt{2S}\,B_f^+\;;\quad S_f^+=\sqrt{2S}\,B_f \qquad S-S_f^z=B_f^+B_f$$

gdje su B_f i B_f^+ Bose operatori.

Nakon prelaska u impulsni prostor dobijamo

$$H_{dd}=-NS^2\frac{2\mu^2}{a^3}+\sum_k E_k B_k^+ B_k \tag{II.2.6}$$

$$E_k=4S\frac{\mu^2}{a^3}\left(1+\frac{1}{2}\cos ka\right) \tag{II.2.7}$$

Za male valne vektore energija dipolnih magnona ima oblik

$$E_k=\Delta_\mu+\frac{\hbar^2k^2}{2m_\mu}, \qquad \Delta_\mu=\frac{6S\mu^2}{a^3}\ ; \quad m_\mu=-\frac{\hbar^2 a}{2S\mu^2} \tag{II.2.8}$$

Kao što se vidi za orijentaciju spinova kolinearno sa rešetkom, koja odgovara minimalnoj energiji osnovnog stanja u jednodimenzionalnoj strukturi, dipolni magnoni imaju procjep u zakonu disperzije i negativnu efektivnu masu.

Sada ćemo razmotriti složenu kristalnu rešetku koja se sastoji od dvije podrešetke s atomima čiji su magnetni momenti μ_1 i μ_2. Neka su spinovi okomiti na rešetku. Hamiltonijan dipol-dipolne interakcije u ovom slučaju ima oblik

$$\begin{aligned}H_{dd}=&-\frac{1}{2}\sum_{fg}{}'\mathcal{D}^{(1)}_{fg}\vec{S}_{1f}\vec{S}_{1g}+\frac{3}{2}\sum_{fg}{}'\mathcal{D}^{(1)}_{fg}(\vec{S}_{1f}\vec{e}^{(1)}_{fg})(\vec{S}_{1g}\vec{e}^{(1)}_{fg})-\\&-\frac{1}{2}\sum_{fg}{}'\mathcal{D}^{(2)}_{fg}\vec{S}_{2f}\vec{S}_{2g}+\frac{3}{2}\sum_{fg}{}'\mathcal{D}^{(2)}_{fg}(\vec{S}_{2f}\vec{e}^{(2)}_{fg})(\vec{S}_{2g}\vec{e}^{(2)}_{fg})-\\&-\frac{1}{2}\sum_{fg}\mathcal{D}^{(1,2)}_{fg}\vec{S}_{1f}\vec{S}_{2g}+\frac{3}{2}\sum_{fg}\mathcal{D}^{(1,2)}_{fg}(\vec{S}_{1f}\vec{e}^{(1,2)}_{fg})(\vec{S}_{2g}\vec{e}^{(1,2)}_{fg})\end{aligned} \tag{II.2.9}$$

gdje je

$$\mathcal{D}^{(1)}_{fg}=\frac{\mu_1^2}{|\vec{f}-\vec{g}|^3}\ ; \quad \mathcal{D}^{(2)}_{fg}=\frac{\mu_2^2}{|\vec{f}-\vec{g}|^3}\ ; \quad \mathcal{D}^{(1,2)}_{fg}=\frac{\mu_1\mu_2}{|\vec{f}-\vec{g}|^3}$$

Za linearnu kristalnu rešetku duž x ose je

$$\begin{aligned}H_{dd}=&-\frac{1}{2}\sum_{fg}\mathcal{D}^{(1)}_{fg}\vec{S}_{1f}\vec{S}_{1g}+\frac{3}{2}\sum_{fg}\mathcal{D}^{(1)}_{fg}S^x_{1f}S^x_{1g}-\frac{1}{2}\sum_{fg}\mathcal{D}^{(2)}_{fg}\vec{S}_{2f}\vec{S}_{2g}+\\&+\frac{3}{2}\sum_{fg}\mathcal{D}^{(2)}_{fg}S^x_{2f}S^x_{2g}-\frac{1}{2}\sum\mathcal{D}^{(1,2)}_{fg}\vec{S}_{1f}\vec{S}_{2g}+\frac{3}{2}\sum_{fg}\mathcal{D}^{(1,2)}_{fg}S^x_{1f}S^x_{2g}\end{aligned}$$

Preći ćemo sa S^x, S^y i S^z na spinske operatore S^+, S^- i $S-S^z$. Tada je efektivni hamiltonijan u Blochovoj aproksimaciji

$$
\begin{aligned}
H_{eff} = {} & S_1 \mathcal{D}_0^{(1)} \sum_f B_{1f}^+ B_{1f} + \tfrac{1}{2} S_1 \sum_{fg} \mathcal{D}_{fg}^{(1)} B_{1f}^+ B_{1g} + \tfrac{3S_1}{4} \sum_{fg} \mathcal{D}_{fg}^{(1)} (B_{1f}^+ B_{1g}^+ + B_{1f} B_{1g}) + \\
& + S_2 \mathcal{D}^{(2)} \sum_f B_{2f}^+ B_{2f} + \tfrac{1}{2} S_2 \sum_{fg} \mathcal{D}_{fg}^{(2)} B_{2f}^+ B_{2g} + \\
& + \tfrac{3}{4} S_2 \sum_{fg} \mathcal{D}_{fg}^{(2)} (B_{2f}^+ B_{2g}^+ + B_{2f} B_{2g}) + \\
& + \tfrac{1}{2} S_2 \mathcal{D}_0^{(1,2)} \sum_f B_{1f}^+ B_{1f} + \tfrac{1}{2} S_1 \mathcal{D}_0^{(1,2)} \sum_f B_{2f}^+ B_{2f} + \\
& + \tfrac{1}{4} \sqrt{S_1 S_2} \sum_{fg} \mathcal{D}_{fg}^{(1,2)} (B_{1f}^+ B_{2g} + B_{2f}^+ B_{1g}) + \\
& + \tfrac{3}{4} \sqrt{S_1 S_2} \sum_{2g} \mathcal{D}_{fg}^{(1,2)} (B_{1f}^+ B_{2g}^+ + B_{1f} B_{2g})
\end{aligned} \tag{II.2.10}
$$

Ovdje su B_1 i B_2 Bose operatori i

$$
\mathcal{D}_0^{(1)} = \frac{2\mu_1^2}{a^3}, \quad \mathcal{D}_0^{(2)} = \frac{2\mu_2^2}{a^3}, \quad \mathcal{D}_0^{(1,2)} = \mu_1\mu_2 \left[\frac{1}{b^3} + \frac{1}{(a-b)^3}\right]
$$

$$
\mathcal{D}_{01}^{(1)} = \frac{\mu_1^2}{a^3}, \quad \mathcal{D}_{0,-1}^{(1)} = \frac{\mu_1^2}{a^3}, \quad \mathcal{D}_{0,1}^{(2)} = \frac{\mu_2^2}{a^3}
$$

$$
\mathcal{D}_{0,-1}^{(2)} = \frac{\mu_2^2}{a^3}, \quad \mathcal{D}_{0,1}^{(1,2)} = \frac{\mu_1\mu_2}{b^3}, \quad \mathcal{D}_{0,-1}^{(1,2)} = \frac{\mu_1\mu_2}{(a-b)^3}
$$

Ovdje je a konstanta svake od podrešetki, b udaljenost između atoma različitih podrešetki $(a > b)$.

U aproksimaciji najbližih susjeda se nakon prelaska u impulsni prostor dobija

$$
\begin{aligned}
H_{eff} = \sum_k \Big\{ & X_{11}(k) B_{1k}^+ B_{1k} + X_{22}(k) B_{2k}^+ B_{2k} + X_{12}(k) B_{1k}^+ B_{2k} + X_{12}^*(k) B_{2k}^+ B_{1k} + \\
& + \tfrac{1}{2} Y_{11}(k) (B_{1k}^+ B_{1,-k}^+ + B_{1,-k} B_{1k}) + \tfrac{1}{2} Y_{22}(k) (B_{2k}^+ B_{2,-k}^+ + B_{2,-k} B_{2k}) + \\
& 3X_{12}(k) B_{1k}^+ B_{2,-k}^+ + 3X_{12}^*(k) B_{2,-k} B_{1k} \Big\}
\end{aligned} \tag{II.2.11}
$$

gdje je

$$X_{11}(k)=\frac{2S_1\mu_1^2}{a^3}+\frac{S_2\mu_1\mu_2}{2}\left[\frac{1}{b^3}+\frac{1}{(a-b)^3}\right]+\frac{S_1\mu_1^2}{a^3}\cos ka$$

$$X_{22}(k)=\frac{2S_2\mu_2^2}{a^3}+\frac{S_1\mu_1\mu_2}{2}\left[\frac{1}{b^3}+\frac{1}{(a-b)^3}\right]+\frac{S_2\mu_2^2}{a^3}\cos ka$$

$$X_{12}(k)=\frac{1}{4}\mu_1\mu_2\sqrt{S_1S_2}\,e^{ikb}\left[\frac{1}{b^3}+\frac{1}{(a-b)^3}e^{-ika}\right]$$

$$Y_{11}(k)=\frac{3S_1\mu_1^2\cos ka}{a^3}\ ;\quad Y_{22}(k)=\frac{3S_2\mu_2^2\cos ka}{a^3} \qquad \text{(II.2.12)}$$

Hamiltonijan (II.2.11) se dijagonalizira prelazom sa operatora $B_{1\nu}$ i $B_{2\nu}$ na nove Bose operatore $C_{1\nu}$ i $C_{2\nu}$ kanonskom transformacijom

$$B_{1\nu}=\sum_{s=1}^{2}\left\{u_{1s}(\nu)C_{s\nu}e^{-iEt}+v_{1s}^{*}(-\nu)C_{s,-\nu}^{+}e^{iEt}\right\}$$
$$B_{2\nu}=\sum_{s=1}^{2}\left\{u_{2s}(\nu)C_{s\nu}e^{-iEt}+v_{2s}^{*}(-\nu)C_{s,-\nu}^{+}e^{iEt}\right\} \qquad \text{(II.2.13)}$$

Iz Heisenbergovih jednačina kretanja za operatore B_ν dobijamo sistem jednačina za odredjivanje funkcija u i v

$$(X_{11}-E)u_{1s}+X_{12}u_{2s}+Y_{11}v_{1s}+3X_{12}v_{2s}=0$$
$$Y_{11}u_{1s}+3X_{12}u_{2s}+(X_{11}+E)v_{1s}+X_{12}v_{2s}=0$$
$$X_{12}^{*}u_{1s}+(X_{22}-E)u_{2s}+3X_{12}^{*}v_{1s}+Y_{22}v_{2s}=0$$
$$3X_{12}^{*}u_{1s}+Y_{22}u_{2s}+X_{12}^{*}v_{1s}+(X_{22}+E)v_{2s}=0$$

Iz uslova da bi ovaj sistem imao netrivijalna rješenja za nepoznate funkcije u i v nalazimo

$$E^4-(X_{11}^2+X_{22}^2-Y_{11}^2-Y_{22}^2-16|X_{12}|^2)E^2+(X_{11}^2-Y_{11}^2)(X_{22}^2-Y_{22}^2)-$$
$$-4|X_{12}|^2(5X_{11}X_{22}+5Y_{11}Y_{22}-3X_{11}Y_{22}-3X_{22}Y_{11})+64|X_{12}|^4=0 \qquad \text{(II.2.14)}$$

Ovu jednačinu rješavamo uz aproksimacije

$$X_{11} \approx \frac{S_2 \mu_1 \mu_2}{2} \left[\frac{1}{b^3} + \frac{1}{(a-b)^3} \right]$$

$$X_{22} \approx \frac{S_1 \mu_1 \mu_2}{2} \left[\frac{1}{b^3} + \frac{1}{(a-b)^3} \right]$$

$$X_{12} = \frac{1}{4} \mu_1 \mu_2 \sqrt{S_1 S_2}\, e^{ikb} \left[\frac{1}{b^3} + \frac{1}{(a-b)^3} e^{-ika} \right]$$

$$Y_{11} = Y_{22} = 0$$

i nalazimo zakon disperzije s tačnošću do k^2

$$E = \frac{1}{2} \mu_1 \mu_2 \sqrt{S_1^2 + S_2^2 - 4 S_1 S_2} \left[\frac{1}{b^3} + \frac{1}{(a-b)^3} \right] +$$

$$+ \frac{\mu_1 \mu_2 S_1 S_2}{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 - 4 S_1 S_2}} \left[1 + \frac{\frac{3}{4} S_1 S_2}{S_1^2 + S_2^2 - 4 S_1 S_2} \right] \frac{k^2 a^2}{b^3 + (a-b)^3} \qquad \text{(II.2.15)}$$

Znači da i u ovom slučaju dipolni magnoni imaju procjep u zakonu disperzije. Pri tom mora biti zadovoljen uslov $S_1 \gg 3{,}732\ S_2$.

Za prostu rešetku i spin normalan na pravac rešetke uopšte ne postoje fizička rješenja. Kao što se vidi, ako se radi o sistemu sa dvije podrešetke, elementarna pobudjenja postoje, ali u ograničenom domenu vrijednosti spinova $S_1 \gg 4\ S_2$. Ovakav rezultat je razumljiv jer više rešetki sa interakcijama izmedju sebe obogaćuju dinamičku sliku sistema i samim tim proširuju oblast njegove stabilnosti.

II.3. Termodinamička analiza čistog dipolnog sistema

Termodinamičku analizu izvršićemo polazeći od dipolnog hamiltonijana (II.1.26). Pošto ćemo se ograničiti na aproksimaciju reda $\mathcal{E} \sim \frac{D}{\Delta}$, izostavićemo članove koji bi dali doprinos reda $\mathcal{E}^2$ a isto tako izostavljamo članove koji daju doprinose proporcionalne kvadratu koncentracije. Tada se hamiltonijan (II.1.26) može napisati u obliku

$$H = H^{(0)}_{eq} + \Lambda \sum_{\vec f} P^+_{\vec f} P_{\vec f} + \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g}{}' \alpha_{\vec f \vec g} P^+_{\vec f} P_{\vec g} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g} \beta_{\vec f \vec g} P^+_{\vec f} P_{\vec f} P^+_{\vec g} P_{\vec g} + \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g \vec m}{}' \gamma_{\vec f \vec g \vec m} P^+_{\vec f} P^+_{\vec g} P_{\vec g} P_{\vec m} \qquad \text{(II.3.1)}$$

gdje je koristeći se sa (II.1.25)

$$\begin{aligned}
\Lambda &= \tilde{\Delta} + \frac{1}{4\Delta} \sum_{\vec g} |\tilde{C}_{0\vec g}|^2 \\
\alpha_{\vec f \vec g} &= \tilde{B}_{\vec f \vec g} - \frac{1}{4\Delta} \sum_{\vec m} \tilde{C}^*_{\vec m \vec f} \tilde{C}_{\vec m \vec g} \\
\beta_{\vec f \vec g} &= \tilde{E}_{\vec f \vec g} - \frac{1}{2\Delta} |\tilde{C}_{\vec f \vec g}|^2 \\
\gamma_{\vec f \vec g \vec m} &= \frac{1}{2\Delta} \tilde{C}_{\vec m \vec g} \tilde{C}^*_{\vec f \vec g}
\end{aligned} \qquad \text{(II.3.2)}$$

Magnetizaciju na niskim temperaturama ispitaćemo primjenom metoda koji je prvi puta korišten u [42] gdje je izvršena niskotemperaturna analiza feromagnetika sa izmjenskim interakcijama i na jednostavan način dobijen korektan Dysonov rezultat. Analogan postupak primjenjen je u [43] pri termodinamičkoj analizi sistema Frenkelovih eksitona. S obzirom da feromagnetik sa dipol-dipol interakcijama predstavlja sistem u kome se broj kvazičestica ne održava, nije moguća direktna primjena ovog ili nekog drugog standardnog metoda koji se koristi za rješavanje sličnih problema [44], nego je potrebno prvo iz hamiltonijana ukloniti članove koji dovode do neodržanja. To je razlog što termodinamičku analizu čistog dipolnog sistema ne vršimo polazeći od hamiltonijana (II.1.6) nego od transformisanog hamiltonijana (II.3.1).

Analizu magnetizacije izvršićemo pomoću dvovremenskih temperaturnih Greenovih funkcija. Pri tom ćemo dekuplovanje Greenove funkcije višeg reda vršiti primjenom Wickove teoreme [23,45]. S obzirom da Wickova teorema nije formulisana za Fourier likove Pauli operatora, potrebno je predhodno preći sa Pauli na Bose operatore. Prema tome metod koga ćemo primjeniti za analizu magnetizacije sastoji se u slijedećem: napisaćemo jednačine kretanja u impulsnom prostoru, egzaktnom Bose reprezentacijom [8] ćemo preći sa Pauli na Bose operatore, a zatim primjeniti Wickovu teoremu.

Jednačina kretanja za operator $P_{\vec{n}}$ glasi

$$E\langle\langle P_{\vec{f}}|P^+_{\vec{g}}\rangle\rangle=\frac{i}{2\pi}\langle[P_{\vec{f}},P^+_{\vec{g}}]\rangle+\langle\langle \Omega_{\vec{f}}|P^+_{\vec{g}}\rangle\rangle \qquad (II.3.3)$$

gdje je

$$\Omega_{\vec{f}}=[P_{\vec{f}},H], \quad \langle[P_{\vec{f}},P^+_{\vec{g}}]\rangle=(1-2\langle P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}\rangle)\delta_{\vec{f}\vec{g}}$$

Iz (II.3.1) je

$$\Omega_{\vec{f}}=\Lambda P_{\vec{f}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{g}}\alpha'_{\vec{f}\vec{g}}P_{\vec{g}}-\sum_{\vec{g}}\alpha'_{\vec{f}\vec{g}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}P_{\vec{g}}+\sum_{\vec{g}}\beta_{\vec{f}\vec{g}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}}P_{\vec{f}}+$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{g}\vec{m}}(\gamma'_{\vec{f}\vec{g}\vec{m}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}}P_{\vec{m}}+\gamma'_{\vec{g}\vec{f}\vec{m}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{f}}P_{\vec{m}}) \qquad (II.3.4)$$

Znak ' nad koeficijentima α,β,γ označava da se pri sumiranju oni anuliraju kada svi indeksi nisu različiti.

Nakon prelaska u impulsni prostor i u aproksimaciji najbližih susjeda iz (II.3.3) i (II.3.4) dobijamo

$$\left[E-\Lambda-\frac{1}{2}\tilde{B}_{\vec{k}}-\frac{|\tilde{C}_{\vec{k}}|^2}{8\tilde{\Delta}}-\frac{l\tilde{C}^2}{4\tilde{\Delta}}\right]\langle\langle P_{\vec{k}}|P^+_{\vec{k}}\rangle\rangle=$$
$$=\frac{i}{2\pi}(1-2\langle P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}\rangle)-\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\left[\tilde{B}_{\vec{k}+\vec{q}_2-\vec{q}_1}-\tilde{E}_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}-\frac{|\tilde{C}_{\vec{k}+\vec{q}_2-\vec{q}_1}|^2}{4\tilde{\Delta}}+\right.$$
$$\left.+\frac{l\varepsilon\tilde{C}}{2}+\frac{\varepsilon\tilde{C}^*_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}}{2}-\frac{\tilde{C}^*_{\vec{k}}\tilde{C}_{\vec{k}+\vec{q}_2-\vec{q}_1}}{4\tilde{\Delta}}+\frac{\tilde{C}\tilde{C}^*_{\vec{k}-\vec{q}_1}}{4\tilde{\Delta}}+\frac{\tilde{C}\tilde{C}^*_{\vec{q}_2-\vec{q}_1}}{4\tilde{\Delta}}\right]$$
$$\langle\langle P^+_{\vec{q}_2}P_{\vec{q}_1}P_{\vec{k}+\vec{q}_2-\vec{q}_1}|P_{\vec{k}}\rangle\rangle \qquad (II.3.5)$$

Ovdje je $\tilde{C}$ interakcija sa najbližim susjedima, l dimenzija i $\varepsilon=\frac{\tilde{C}}{\tilde{\Delta}}$.

Preći ćemo ćemo sada na Bose operatore B i B^+ koristeći egzaktnu Bose reprezentaciju Pauli operatora u aproksimaciji datoj sa

$$P=\left[\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B^{+\nu}B^{\nu}\right]^{\frac{1}{2}}B\approx B-B^+BB \qquad (II.3.6)$$

a zatim na njihove Fourier likove

$$P_{\vec{q}}=B_{\vec{q}}-\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2}B^+_{\vec{k}_2}B_{\vec{k}_1}B_{\vec{q}-\vec{k}_1+\vec{k}_2} \qquad (II.3.7)$$

tako da je

$$P^+_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_1} P_{\vec{k}+\vec{q}_2-\vec{q}_1} = B^+_{\vec{q}_2} B_{\vec{q}_1} B_{\vec{k}+\vec{q}_2-\vec{q}_1} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1} B^+_{\vec{q}_2} B_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}+\vec{q}_2-\vec{k}_1}$$

Ovdje su izostavljeni članovi koji daju doprinos proporcionalan kvadratu koncentracije, odnosno doprinos reda $(k_BT)^{7/2}$ u srednjem broju pauliona (k_B - Boltzmannova konstanta, T - - apsolutna temperatura).

Dekuplovanje bozonske Greenove funkcije vrši se primjenom Wickove teoreme na slijedeći način

$$\langle\langle B^+_{\vec{q}_2} B_{\vec{q}_1} B_{\vec{k}+\vec{q}_2-\vec{q}_1} | B^+_{\vec{k}} \rangle\rangle \approx \langle B^+_{\vec{q}_2} B_{\vec{q}_2} \rangle_0 (\delta_{\vec{q}_1\vec{q}_2} + \delta_{\vec{q}_1\vec{k}}) \langle\langle B_{\vec{k}} | B^+_{\vec{k}} \rangle\rangle \tag{II.3.8}$$

Tada je

$$\langle\langle P_{\vec{k}} | P^+_{\vec{k}} \rangle\rangle = (1-4C_0) \langle\langle B_{\vec{k}} | B^+_{\vec{k}} \rangle\rangle$$

gdje je

$$C_0 = \langle B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \rangle_0 = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \langle B^+_{\vec{q}} B_{\vec{q}} \rangle_0$$

Indeks nula označava da se pri izračunavanju srednje vrijednosti koristi hamiltonijan nulte aproksimacije, koji ne sadrži članove proporcionalne koncentraciji i statistika neinteragirajućih bozona.

Tako konačno dobijamo slijedeći izraz za Greenovu funkciju

$$\langle\langle B_{\vec{k}} | B^+_{\vec{k}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{1+2C_0}{E-E^{(1)}_{\vec{k}}} \tag{II.3.9}$$

gdje je

$$E^{(1)}_{\vec{k}} = E^{(0)}_{\vec{k}} - M(\vec{k}) \tag{II.3.10}$$

$$E^{(0)}_{\vec{k}} = \Lambda + \frac{1}{2}\tilde{B}_{\vec{k}} - \frac{|\tilde{C}_{\vec{k}}|^2}{8\tilde{\Delta}} + \frac{\ell \tilde{C}^2}{4\tilde{\Delta}} \tag{II.3.11}$$

$$M(\vec{k}) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \langle B^+_{\vec{q}} B_{\vec{q}} \rangle_0 \Big[\tilde{B}_{\vec{k}} + \tilde{B}_{\vec{q}} - \tilde{E}_0 - \tilde{E}_{\vec{k}-\vec{q}} - \frac{1}{2\tilde{\Delta}}(|\tilde{C}_{\vec{k}}|^2 + |\tilde{C}_{\vec{q}}|^2) - \\ - \frac{1}{4\tilde{\Delta}}(\tilde{C}_{\vec{k}}\tilde{C}^*_{\vec{q}} + \tilde{C}^*_{\vec{k}}\tilde{C}_{\vec{q}}) + \mathcal{E}(\tilde{C}^*_0 + \tilde{C}^*_{\vec{k}-\vec{q}}) + \ell\mathcal{E}\tilde{C}\Big] \tag{II.3.12}$$

Koeficijente zavisne od veklora $\vec{k}$ u aproksimaciji najbližih susjeda razvijamo do četvrtog stepena po k. Za kubnu rešetku konstante a je na primjer

$$\tilde{B}_{\vec{k}} = 2\tilde{B}\sum_i \cos ak_i = 2\tilde{B}\left(3 - \frac{a^2k^2}{2} + \frac{a^4k^4}{24}A_{\vec{k}}\right),$$

$$\tilde{E}_{\vec{k}-\vec{q}} = \tilde{E}\Big[6 - a^2q^2 - a^2k^2 + 2a^2\vec{k}\vec{q} + \frac{1}{12}a^4k^4A_{\vec{k}} +$$

$$+ \frac{1}{12}a^4q^4A_{\vec{q}} + \frac{1}{2}a^4(k_x^2q_x^2 + k_y^2q_y^2 + k_z^2q_z^2) -$$

$$- \frac{1}{3}a^4(k_x^3q_x + k_y^3q_y + k_z^3q_z + k_xq_x^3 + k_yq_y^3 + k_zq_z^3)\Big],$$

$$A_{\vec{k}} = \cos^4\varphi_k \sin^4\theta_k + \sin^4\varphi_k \sin^4\theta_k + \cos^4\theta_k$$

pri čemu su φ_k i θ_k ugaone koordinate vektora $\vec{k}$.

Pri računjanju energije $E^{(1)}_{\vec{k}}$ treba u izrazu za $M(\vec{k})$ srednju vrijednost $\langle B^+_{\vec{q}} B_{\vec{q}}\rangle_0$ zamijeniti sa $(\exp \frac{E_{\vec{q}}}{\theta} - 1)^{-1}$, $\theta = k_BT$. Na taj način se dobijaju sume oblika

$$S = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \frac{(qa)^{2s}}{e^{\frac{1}{\theta}(\Delta^* + \alpha^* a^2k^2 + \beta^* a^4k^4A_{\vec{k}})} - 1} \qquad \text{(II.3.13)}$$

koje se nakon prelaska na integraciju, poslije niza zamjena i integriranja svode na

$$S = \frac{1}{2}\left(\frac{\theta}{\alpha^*}\right)^{s+\frac{3}{2}} Z_{s+\frac{3}{2}}\left(\frac{\Delta^*}{\theta}\right)\Gamma\left(s+\frac{3}{2}\right)\frac{4\pi}{(2\pi)^3} -$$

$$- \frac{1}{2}\left(\frac{\theta}{\alpha^*}\right)^{s+\frac{5}{2}} Z_{s+\frac{5}{2}}\left(\frac{\Delta^*}{\theta}\right)\Gamma\left(s+\frac{7}{2}\right)\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\beta^*}{\alpha^*}\frac{12\pi}{5} +$$

$$+ \frac{1}{4}\left(\frac{\theta}{\alpha^*}\right)^{s+\frac{7}{2}} Z_{s+\frac{7}{2}}\left(\frac{\Delta^*}{\theta}\right)\Gamma\left(s+\frac{11}{2}\right)\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\beta^{*2}}{\alpha^{*2}}\frac{164\pi}{105} \qquad \text{(II.3.14)}$$

gdje su Γ gama funkcije a funkcije $Z_p(\frac{\Delta^*}{\theta})$ su date sa

$$Z_p\left(\frac{\Delta^*}{\theta}\right) = \sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m^p}e^{-m\frac{\Delta^*}{\theta}}$$

Zadržavajući se samo na članovima do trećeg stepena temperature dolazi se do slijedećeg izraza za energiju

$$E^{(1)}_{\vec{k}} = \tilde{\Delta} + 3\tilde{B} - \frac{15}{4}\frac{|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}} - \left[\frac{1}{2}\tilde{B} - \frac{3}{2}\frac{|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}}\right]a^2k^2 +$$
$$+ \frac{1}{24}\left(\tilde{B} - 3\frac{|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}}\right)a^4k^4 A_{\vec{k}} + \left[12(\tilde{E} - \tilde{B}) +\right.$$
$$\left. + 39\frac{|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}} + \left(\tilde{B} - \tilde{E} - 8\frac{|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}}\right)a^2k^2\right] Z_{3/2}\left(\frac{\Delta^*}{\Theta}\right)\tau^{3/2} +$$
$$+ \left[\tilde{E} - \tilde{B} - \frac{25}{4}\frac{|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}}\right] 3\pi\, Z_{5/2}\left(\frac{\Delta^*}{\Theta}\right)\tau^{5/2} \qquad \text{(II.3.15)}$$

gdje je

$$\Delta^* = \tilde{\Delta} + 3\tilde{B} - \frac{15}{4}\frac{|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}} \qquad \tau = \frac{\Theta}{4\pi\alpha^*}$$

$$\alpha^* = -\frac{1}{2}\left(B - 3\frac{|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}}\right)$$

Da bismo proračunali magnetizaciju

$$\sigma = 1 - 2\langle P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}}\rangle,$$

sa Pauli operatora preći ćemo na Bose operatore. Iz (II.3.6) je

$$P \approx B - B^+ B\, B$$

$$P^+ P \approx B^+ B - B^+ B^+ B\, B$$

pa je

$$\sigma = 1 - 2\langle B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}}\rangle + 2\langle B^{+2}_{\vec{n}} B^2_{\vec{n}}\rangle = 1 - 2\langle B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}}\rangle_1 + 4\langle B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}}\rangle_0^2 \qquad \text{(II.3.16)}$$

Spektralna intenzivnost Greenove funkcije (II.3.9) je

$$(1 + 2C_0)\,\delta(E - E^{(1)}_{\vec{k}})\left(e^{\frac{E^{(1)}_{\vec{k}}}{\Theta}} - 1\right)^{-1}$$

pa je srednji broj bozona (vidjeti formulu (26.5) iz [23])

$$\langle B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}}\rangle_1 = (1 + 2C_0)\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\left(e^{\frac{E^{(1)}_{\vec{k}}}{\Theta}} - 1\right)^{-1}$$

$$C_0 = \langle B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}}\rangle_0 = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\langle B^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}}\rangle_0 = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\left(e^{\frac{E^{(0)}_{\vec{k}}}{\Theta}} - 1\right)^{-1}$$

Slijedi da je

$$\sigma = 1 - \frac{2}{N}\sum_{\vec{k}}\left(e^{\frac{E^{(1)}_{\vec{k}}}{\Theta}} - 1\right)^{-1} - 4C_0\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\left(e^{\frac{E^{(0)}_{\vec{k}}}{\Theta}} - 1\right)^{-1} + 4C_0^2$$

Lako se pokaže da je suma poslednja dva člana reda $\theta^{\frac{7}{2}}$, pa ako se u proračunima zadržavamo samo na članovima proporcionalnim sa θ^3 , možemo uzeti da je

$$\sigma = 1 - \frac{2}{N}\sum_{\vec{k}}\left(e^{\frac{E_{\vec{k}}^{(1)}}{\theta}} - 1\right)^{-1} \tag{II.3.17}$$

gdje je $E_{\vec{k}}^{(1)}$ odredjeno sa (II.3.15).

Pri nalaženju sume u (II.3.17) koristimo se sa (II.3.14). Pri tome razvijamo po stepenima temperature i funkcije Z_p na slijedeći način

$$Z_p\left(\frac{\Delta^* + D_1\theta^{3/2}}{\theta}\right) = Z_p\left(\frac{\Delta^*}{\theta}\right) - Z_{p-1}\left(\frac{\Delta^*}{\theta}\right)D_1\theta^{\frac{1}{2}} +$$
$$+\frac{1}{2}Z_{p-2}\left(\frac{\Delta^*}{\theta}\right)D_1^2\theta - \frac{1}{6}Z_{p-3}\left(\frac{\Delta^*}{\theta}\right)D_1^3\theta^{3/2} + \ldots$$

Zadržavajući se na članovima proporcionalnim sa θ^3 dobijamo slijedeći izraz za magnetizaciju na niskim temperaturama

$$\sigma = 1 - 2Z_{3/2}\tau^{3/2} - \frac{12}{\pi}\left[\delta + \frac{|\tilde{C}|^2}{B\tilde{\Delta}}\left(3\delta + \frac{13}{4}\right)\right]Z_{1/2}Z_{3/2}\tau^2 -$$
$$-\left\{\frac{36}{\pi^2}\left[\delta^2 + \frac{|\tilde{C}|^2}{B\tilde{\Delta}}2\delta\left(3\delta + \frac{13}{4}\right)\right]Z_{-1/2}Z_{3/2}^2 + \frac{8\pi}{4}Z_{5/2}\right\}\tau^{5/2} -$$
$$-2Z_{3/2}^2\left\{\frac{36}{\pi^3}\left[\delta^3 + \frac{|\tilde{C}|^2}{B\tilde{\Delta}}3\delta^2\left(3\delta + \frac{13}{4}\right)\right]Z_{-3/2} + \frac{15}{2}\left[\delta + \frac{|\tilde{C}|^2}{B\tilde{\Delta}}\left(3\delta - \frac{5}{32}\right)\right]\right\}\tau^3 \tag{II.3.18}$$

gdje je

$$\delta = \frac{\tilde{E} - \tilde{B}}{\tilde{B}} \quad i \quad Z_p = Z_p\left(\frac{\Delta^*}{\theta}\right)$$

Sada prelazimo na proračun magnetizacije na visokim temperaturama. Iz (II.3.3) i (II.3.4) nalazimo

$$E\langle\langle P_{\vec{f}}|P_{\vec{g}}^+\rangle\rangle - \frac{i}{2\pi}\sigma\delta_{\vec{f}\vec{g}} + \Lambda\langle\langle P_{\vec{f}}|P_{\vec{g}}^+\rangle\rangle + \frac{1}{2}\sum_{\vec{m}}\alpha_{\vec{f}\vec{m}}\langle\langle P_{\vec{m}}|P_{\vec{g}}^+\rangle\rangle -$$
$$-\sum_{\vec{m}}\alpha_{\vec{f}\vec{m}}\langle\langle P_{\vec{f}}^+P_{\vec{f}}P_{\vec{m}}|P_{\vec{g}}^+\rangle\rangle + \sum_{\vec{m}}\beta_{\vec{f}\vec{m}}\langle\langle P_{\vec{m}}^+P_{\vec{m}}P_{\vec{f}}|P_{\vec{g}}^+\rangle\rangle +$$
$$+\frac{1}{4\tilde{\Delta}}\sum_{\vec{m}\vec{b}}{}'\tilde{C}_{\vec{m}\vec{b}}\tilde{C}_{\vec{f}\vec{b}}^*\langle\langle P_{\vec{b}}^+P_{\vec{b}}P_{\vec{m}}|P_{\vec{g}}^+\rangle\rangle + \frac{1}{4\tilde{\Delta}}\sum_{\vec{m}\vec{b}}\tilde{C}_{\vec{m}\vec{f}}\tilde{C}_{\vec{f}\vec{b}}^*\langle\langle P_{\vec{b}}^+P_{\vec{f}}P_{\vec{m}}|P_{\vec{g}}^+\rangle\rangle \tag{II.3.19}$$

Dekuplovanje ćemo vršiti metodom haotičnih faza (RPA) koja se sastoji u aproksimativnom izražavanju viših Greenovih funkcija preko nižih na slijedeći način (str. 258 iz [23])

$$\langle\langle P^+_{\vec f} P_{\vec f} P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle \approx \langle P^+_{\vec f} P_{\vec f} \rangle \langle\langle P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle = \frac{1-\sigma}{2} \langle\langle P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle$$

i $\langle\langle P^+_{\vec b} P_{\vec f} P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle = 0$ ako su indeksi b,f i m različiti.

Na taj način u aproksimaciji najbližih susjeda i zadržavajući se samo na prvom stepenu malog parametra ε dobijamo

$$\left[E - \Lambda - \frac{1-\sigma}{2} \beta_0\right] \langle\langle P_{\vec f} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \sigma \delta_{\vec f \vec g} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sigma \sum_{\vec m} \tilde{B}_{\vec f \vec m} \langle\langle P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle + \frac{1-2\sigma}{8\tilde{\Delta}} \sum_{\vec m \vec b} \tilde{C}_{\vec m \vec b} \tilde{C}^*_{\vec f \vec b} \langle\langle P_{\vec m} | P^+_{\vec g} \rangle\rangle \tag{II.3.20}$$

Nakon Fourier transformacije dobijamo za Greenovu funkciju

$$\langle\langle P_{\vec k} | P^+_{\vec k} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{\sigma}{E - E_{\vec k}} \tag{II.3.21}$$

gdje je

$$E_{\vec k} = \tilde{\Delta} + \frac{1}{2}\tilde{E}_0 + \frac{1}{8\tilde{\Delta}}(|\tilde{C}_{\vec k}|^2 - 2\ell\tilde{C}^2) + \frac{\sigma}{2}(\tilde{B}_{\vec k} - \tilde{E}_0 - \frac{|\tilde{C}_{\vec k}|^2}{2\tilde{\Delta}} + \frac{2\ell\tilde{C}^2}{\tilde{\Delta}}) \tag{II.3.22}$$

Spektralna intenzivnost Grenove funkcije (II.3.21) je $\sigma(e^{\frac{E_{\vec k}}{\theta}} - 1)^{-1}$ tako da je srednji broj pauliona

$$\langle P^+_{\vec n} P_{\vec n} \rangle = \frac{1-\sigma}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\vec k} \langle P^+_{\vec k} P_{\vec k} \rangle = \frac{1}{N} \sum \sigma (e^{\frac{E_{\vec k}}{\theta}} - 1)^{-1}$$

Odavde je

$$\sigma = 1 - \frac{2\sigma}{N} \sum_{\vec k} \frac{1}{e^{E_{\vec k}/\theta} - 1} \tag{II.3.23}$$

ili

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec k} \coth \frac{E_{\vec k}}{2\theta}$$

Uobičajeni način odredjivanja kritične temperature je iz analize magnetne susceptibilnosti u paramagnetnoj fazi [23, str. 267] . Pri tom se uzima da spoljašnje magnetno polje $\mathcal{H}$ teži nuli. S druge strane čisti dipolni hamiltonijan s kojim provodimo termodinamičku analizu dobijen je uz pretpostavku da je magnetno polje različito od nule. Zato ćemo pri odredjivanju kritične temperature razmatrati izraz za magnetizaciju u feromagnetnoj fazi i odrediti singularitete prvog izvoda $\frac{\partial \sigma}{\partial \theta}$. Uvrštavanjem (II.3.22) u (II.3.23) i razvojem magnetizacije u red po stepenima od $\frac{1}{\theta}$ nalazimo da je

$$\sigma_{1,2} \approx -\frac{\theta}{2\nu}\, sh\frac{R}{\theta} \pm \sqrt{\frac{\theta^2}{4\nu^2}\, sh^2\frac{R}{\theta} + \frac{2\theta}{\nu}\, sh^2\frac{R}{2\theta}} \qquad \text{(II.3.24)}$$

gdje su uvedene oznake

$$\nu = \tilde{E}_0 - \frac{l|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}}, \quad \tilde{E}_0 = -|\tilde{E}_0| \qquad R = \tilde{\Delta} + \tfrac{1}{2}\tilde{E}_0$$

Slijedi da $\frac{\partial \sigma}{\partial \theta}$ postaje beskonačno za vrijednost kritične temperature koja je odredjena sa

$$\theta_{1,2} = \frac{1}{2}\left[|\tilde{E}_0| + \frac{l|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}} \pm \sqrt{\frac{3}{4}|\tilde{E}_0|^2 + \frac{2l|\tilde{C}|^2}{\tilde{\Delta}}|\tilde{E}_0| - \tilde{\Delta}^2 + \tilde{\Delta}|\tilde{E}_0|}\right] \qquad \text{(II.3.25)}$$

Ako uzmemo u obzir da su koeficijenti $\tilde{C}$ i $\tilde{E}$ istog reda veličine, tj. proporcionalni sa $\mathfrak{D}$, i manji od $\tilde{\Delta}$, nalazimo da je kritična temperatura $\theta_c \approx 0,4\, |\tilde{E}|$. Treba medjutim napomenuti da kritična temperatura, u granicama opisanog postupka, postoji samo pod uslovom $|\tilde{E}_0| \gg \tilde{\Delta}$

II.4. Termodinamička analiza sistema sa dipolnim i izmjenskim interakcijama*)

Nakon što smo razmotrili čist dipolni hamiltonijan i proveli termodinamičku analizu sistema sa dipolnim interakcijama ispitaćemo efekte koje prisustvo dipol-dipol interakcija ima na Heisenbergov feromagnetik.

Polazimo od hamiltonijana (I.4.2) za feromagnetik sa izmjenskim i dipolnim interakcijama. Dipol-dipol interakcije su male u poredjenju sa interakcijama izmjene pa se hamiltonijan dipol-dipol spinske interakcije može razmatrati kao smetnja u

*) Rezultati ovog paragrafa publikovani su u [46]

odnosu na izmjenski dio hamiltonijana. Medjutim, kao što je pokazano u [47], račun smetnje se ne može direktno primjeniti. Potrebno je prethodno iz hamiltonijana (I.4.2) eliminisati članove linearne po S^+ i S^- i kvadratične članove oblika S^+S^+ i S^-S^-.

Taj problem je razmatran u [47]i provedena je stabilizacija hamiltonijana. Takodje je analiziran harmonijski spektar elementarnih pobudjenja sistema. Naš cilj je da proširimo i generalizujemo rezultate iz [47]. Izvršićemo stabilizaciju hamiltonijana za trikliničnu strukturu, a zatim eliminisati nekonzervativne članove primjenom Weylovog identiteta. Taj metod, za razliku od onog primjenjenog u [47], omogućava analizu ne samo harmonijskog spektra nego i termodinamičkih osobina sistema na niskim i visokim temperaturama.

Radi jednostavnosti razmotrićemo samo feromagnetik sa spinom $S = \frac{1}{2}$. U tom slučaju spinski operatori postaju Paulijevi, tj. $S^+ \rightarrow Q$, $S^- \rightarrow Q^+$, $\frac{1}{2} - S^z \rightarrow Q^+Q$ pa se hamiltonijan (I.4.2) može napisati u obliku

$$
\begin{aligned}
H_{HP} = &-\frac{1}{2} N\left\{\mu \mathcal{H} + \frac{1}{4}(\mathcal{J}_0 + \mathcal{D}_0) - \frac{3}{4}\sum_{\vec{g}} \mathcal{D}_{o\vec{g}}(e^z_{o\vec{g}})\right\} + \\
&+ \frac{3}{4}\sum_{\vec{f}}(\tilde{L}_0 Q^+_{\vec{f}} + \tilde{L}^*_0 Q_{\vec{f}}) + \tilde{A}\sum_{\vec{f}} Q^+_{\vec{f}} Q_{\vec{f}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}} \tilde{B}_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_{\vec{f}} Q_{\vec{g}} + \\
&+ \frac{1}{4}\sum_{\vec{f}\vec{g}}(\tilde{C}_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_{\vec{f}} Q^+_{\vec{g}} + \tilde{C}^*_{\vec{f}\vec{g}} Q_{\vec{f}} Q_{\vec{g}}) - \\
&- \frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}}(\tilde{D}_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_{\vec{f}} Q^+_{\vec{g}} Q_{\vec{g}} + \tilde{D}^*_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_{\vec{g}} Q_{\vec{g}} Q_{\vec{f}}) - \frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}} \tilde{E}_{\vec{f}\vec{g}} Q^+_{\vec{f}} Q_{\vec{f}} Q^+_{\vec{g}} Q_{\vec{g}}
\end{aligned}
\qquad (II.4.1)
$$

gdje je N broj atoma u kristalu i

$$\mathcal{J}_0 = \sum_{\vec{g}} \mathcal{J}_{o\vec{g}}, \quad \mathcal{D}_0 = \sum \mathcal{D}_{o\vec{g}},$$

$$\tilde{L}_0 = \sum_{\vec{g}} \mathcal{D}_{o\vec{g}} e^z_{o\vec{g}} (e^x_{o\vec{g}} + i e^y_{o\vec{g}})$$

$$\tilde{A} = \mu \mathcal{H} + \frac{1}{2}(\mathcal{J}_0 + \mathcal{D}_0) - \frac{3}{2}\sum_{\vec{g}} \mathcal{D}_{o\vec{g}} (e^z_{o\vec{g}})^2$$

$$\widetilde{B}_{\vec{f}\vec{g}} = \mathcal{J}_{\vec{f}\vec{g}} + \mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} - \frac{3}{2}\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}}\left[(e^x_{\vec{f}\vec{g}})^2 + (e^y_{\vec{f}\vec{g}})^2\right]$$

$$\widetilde{C}_{\vec{f}\vec{g}} = \frac{3}{2}\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}}\left[(e^x_{\vec{f}\vec{g}})^2 - (e^y_{\vec{f}\vec{g}})^2 + 2ie^x_{\vec{f}\vec{g}}e^y_{\vec{f}\vec{g}}\right]$$

$$\widetilde{D}_{\vec{f}\vec{g}} = 3\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}}e^z_{\vec{f}\vec{g}}(e^x_{\vec{f}\vec{g}} + ie^y_{\vec{f}\vec{g}})$$

$$\widetilde{E}_{\vec{f}\vec{g}} = \mathcal{J}_{\vec{f}\vec{g}} + \mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}} - 3\mathcal{D}_{\vec{f}\vec{g}}(e^z_{\vec{f}\vec{g}})^2 \tag{II.4.2}$$

Prelazeći u (II.4.1) sa Pauli operatora Q^+ i Q na nove Pauli operatore P^+ i P primjenom kononske transformacije

$$Q^+ = -\alpha\beta^*(1-2P^+P) + \alpha^2P^+ - \beta^{*2}P$$

$$Q^+Q = |\beta|^2 - 2\beta P^+ - \alpha^*\beta^*P + (|\alpha|^2 - |\beta|^2)P^+P \tag{II.4.3}$$

možemo iz dobijenog izraza za hamiltonijan (II.4.1) eliminisati članove linearne po P^+ i P. Uslov eliminacije se može napisati u obliku

$$3\alpha^2(1-4|\beta|^2)\widetilde{L}_0 - 3\beta^2\left[1-2(|\alpha|^2-|\beta|^2)\right]\widetilde{L}_0^* -$$
$$-2\alpha\beta\left[2\widetilde{A} - (|\alpha|^2-|\beta|^2)\widetilde{B}_0 - 2|\beta|^2\widetilde{E}_0\right] - 2\alpha^3\beta^*\widetilde{C}_0 + 2\alpha^*\beta^3\widetilde{C}_0^* = 0 \tag{II.4.4}$$

gdje je

$$\widetilde{B}_0 = \sum_{\vec{g}}\widetilde{B}_{0\vec{g}}\ ;\quad \widetilde{C}_0 = \sum_{\vec{g}}\widetilde{C}_{0\vec{g}}\ ;\quad \widetilde{E}_0 = \sum_{\vec{g}}\widetilde{E}_{0\vec{g}}$$

Stabilizacija hamiltonijana provedena je za trikliničnu strukturu. Funkcije α i β su proračunate numerički za kristalnu rešetku sa parametrima $a = 4$ Å, $b = 5$ Å, $c = 6$ Å, $\alpha = 30^\circ$, $\beta = 45^\circ$ i $\gamma = 60^\circ$. U aproksimaciji najbližih susjeda je uzeto $\mathcal{J}_0 = 9{,}02 \cdot 10^{-15}$ erg, $\mathcal{D}_0 = -0{,}70 \cdot 10^{-15}$ erg i $\widetilde{A}\ (\mathcal{H} \neq 0) = 8{,}65 \cdot 10^{-15}$ erg, što odgovara feromagneticima rijetkih zemalja [23]. Za dati izbor parametara uslov stabilizacije (II.4.4) je riješen numerički u Matematičkom institutu u Beogradu (IBM sistem 360/44 sa centralnom memorijom CPU 128 kB). Dobijena su rješenja

$$\alpha = 0{,}85 \cdot e^{i\frac{\pi}{10}}\ ;\quad \beta = 0{,}53 \tag{II.4.5}$$

Prema opštoj formuli koja povezuje spinore i tenzore (formula (58.10) iz [48]) je

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta^* \\ -\beta & \alpha^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} & i\sin\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} \\ i\sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} & \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} \end{pmatrix} \qquad (II.4.6)$$

pa zaključujemo da sistem postaje stabilan nakon rotacije za slijedeće Eulerove uglove: $\theta = 64^\circ$, $\varphi = 108^\circ$ i $\psi = -72^\circ$. Vrijednost ugla θ daje pravac nove ose kvantizacije u odnosu na pravac ose kvantizacije sistema u kome postoje samo izmjenske interakcije.

Nakon provedene stabilizacije hamiltonijan sistema je oblika

$$\begin{aligned} H_{HP} = {} & H_0 + A\sum_{f} P_f^+ P_f - \frac{1}{2}\sum_{fg} B_{fg} P_f^+ P_g + \\ & + \frac{1}{4}\sum_{fg}(C_{fg} P_f^+ P_g^+ + C_{fg}^* P_f P_g) - \frac{1}{2}\sum_{fg}(D_{fg} P_f^+ P_g^+ P_g + \\ & + D_{fg}^* P_g^+ P_g P_f) - \frac{1}{2}\sum_{fg} E_{fg} P_f^+ P_f P_g^+ P_g \end{aligned} \qquad (II.4.7)$$

Koeficijenti A...E se mogu izraziti preko odgovarajućih koeficijenata $\tilde{A}...\tilde{E}$ i α i β (formule (II.4.2) i (II.4.5)) u skladu sa (II.4.3). Njihovo dobijanje je jednostavno ali ih nećemo navoditi jer su dosta glomazni.

Da bismo uklonili nekonzervativne članove drugog reda (proporcionalne sa P^+P^+ i PP) primjenićemo Weylov identitet. Prelazimo na ekvivalentni hamiltonijan

$$H_{eq} = e^{-S} H_{HP} e^{S} \approx H_{HP} - [S, H_{HP}] + \frac{1}{2}[S,[S,H_{HP}]] \ldots \qquad (II.4.8)$$

gdje je

$$S = \sum_{\vec{n}\vec{m}} (X_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}} + Y_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}) - C.C. \qquad (II.4.9)$$

Nepoznate funkcije X i Y su po pretpostavci male da bi razvoj (II.4.8) bio moguć. Odredjujemo ih iz uslova da se iz ekvivalentnog hamiltonijana eliminišu nekonzervatini članovi, a isto tako i linearni članovi po P koji se javljaju pri proračunu komutatora [H,PP] . Zadržavajući u ekvivalentnom hamiltonijanu samo članove proporcionalne sa $(\mathcal{D}_0/\mathcal{J}_0)^2$ nalazimo da su koeficijenti X i Y odredjeni sa

$$X_0=\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\frac{D'_{\vec{q}}C'_{\vec{q}}+D''_{\vec{q}}C''_{\vec{q}}}{2\Delta_0\Delta_{\vec{q}}}-\frac{i}{N}\sum_{\vec{q}}\frac{D'_{\vec{q}}C''_{\vec{q}}-D''_{\vec{q}}C'_{\vec{q}}}{2\Delta_0\Delta_{\vec{q}}}$$
$$Y_{\vec{k}}=\left(\frac{C'_{\vec{k}}}{4\Delta_{\vec{k}}}+\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\frac{E_{\vec{k}-\vec{q}}C'_{\vec{q}}}{4\Delta_{\vec{k}}\Delta_{\vec{q}}}+i\left(-\frac{C''_{\vec{k}}}{4\Delta_{\vec{k}}}-\frac{1}{N}\sum\frac{E_{\vec{k}-\vec{q}}C''_{\vec{q}}}{4\Delta_{\vec{k}}\Delta_{\vec{q}}}\right)\right. \tag{II.4.10}$$

gdje je

$$Y_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}}Y_{o\vec{n}}e^{-i\vec{k}\vec{n}}\quad;\quad X_0=\sum_{\vec{n}}X_{o\vec{n}}$$
$$\Delta_{\vec{q}}=2A-B_{\vec{k}}$$
$$C_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}}C_{o\vec{n}}e^{-i\vec{k}\vec{n}}=C'_{\vec{k}}+iC''_{\vec{k}}$$
$$D_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}}D_{o\vec{n}}e^{-i\vec{k}\vec{n}}=D'_{\vec{k}}+iD''_{\vec{k}}$$
$$B_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}}B_{o\vec{n}}e^{-i\vec{k}\vec{n}}\quad;\quad E_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}}E_{o\vec{n}}e^{-i\vec{k}\vec{n}}.$$

Termodinamičku analizu sistema provešćemo sa hamiltonijanom

$$H=\mathcal{E}_0\sum_{\vec{f}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}}T_{\vec{f}\vec{g}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{g}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}}W_{\vec{f}\vec{g}}P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}} \tag{II.4.11}$$

koji je izdvojen iz ekvivalentnog hamiltonijana (II.4.8). Funkcije $\mathcal{E}_0, T_{\vec{f}\vec{g}}$ i $W_{\vec{f}\vec{g}}$ su date sa

$$\mathcal{E}_0=A-\frac{8}{N}\sum_{\vec{q}}\Delta_{\vec{q}}|Y_{\vec{q}}|^2+\frac{8}{N^2}\sum_{\vec{q}\vec{q}'}E_{\vec{q}-\vec{q}'}Y_{\vec{q}}\overset{*}{Y}_{\vec{q}'}+\frac{4}{N}\sum_{\vec{q}}Y_{\vec{q}}C_{\vec{q}}+\mathrm{Re}\,(X_0D_0)$$
$$T_{\vec{f}\vec{g}}=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}T_{\vec{k}}e^{i\vec{k}(\vec{f}-\vec{g})}$$
$$T_{\vec{k}}=-\frac{1}{2}B_{\vec{k}}+4\Delta_{\vec{k}}|Y_{\vec{k}}|^2-2\,\mathrm{Re}\,(Y_{\vec{k}}C_{\vec{k}})+\mathrm{Re}\,(X_0D_{\vec{k}})$$
$$W_{\vec{f}\vec{g}}=\frac{1}{2}E_{\vec{f}\vec{g}}-4(Y_{\vec{f}\vec{g}}C_{\vec{f}\vec{g}}+\overset{*}{Y}_{\vec{f}\vec{g}}\overset{*}{C}_{\vec{f}\vec{g}})+32A|Y_{\vec{f}\vec{g}}|^2-$$
$$-16E_{\vec{f}\vec{g}}|Y_{\vec{f}\vec{g}}|^2-8\sum_{\vec{n}}(Y_{\vec{f}\vec{g}}\overset{*}{Y}_{\vec{n}\vec{f}}+\overset{*}{Y}_{\vec{f}\vec{g}}Y_{\vec{n}\vec{f}})B_{\vec{n}\vec{g}} \tag{II.4.12}$$

Ispitivanje termodinamičkih osobina sistema provešćemo na sličan način kao u slučaju čistog dipolnog sistema. U hamiltonijan (II.4.11), medjutim, nismo uključili član sa $P^+_{\vec{f}}P^+_{\vec{g}}P_{\vec{g}}P_{\vec{m}}$

kakav je postojao u (II.3.1) pa će to dovesti do nekih razlika. Koristićemo se Greenovom funkcijom $\Gamma_{\vec{f}-\vec{g}}(E)=\langle\langle P_{\vec{f}} | P^+_{\vec{g}} \rangle\rangle$. Iz hamiltonijana (II.4.11) se dobija slijedeća jednačina za tu funkciju

$$(E-\mathcal{E}_0)\Gamma_{\vec{f}-\vec{g}}(E)=\frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{\vec{f}\vec{g}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}}T_{\vec{f}\vec{m}}\Gamma_{\vec{m}-\vec{g}}(E)-$$

$$-\sum_{\vec{m}}T_{\vec{f}\vec{m}}\langle\langle P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}P_{\vec{m}}|P_{\vec{g}}\rangle\rangle_E+\sum_{\vec{m}}W_{\vec{f}\vec{m}}\langle\langle P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}P_{\vec{f}}|P^+_{\vec{g}}\rangle\rangle_E \qquad \text{(II.4.13)}$$

U slučaju niskih temperatura ćemo primjenom formule (II.3.6) sa Pauli operatora P i P^+ preći na Bose operatore B i B^+. Primjenjujući zatim Wickovu teoremu za bozone, Greenove funkcije višeg reda se dekupluju na slijedeći način

$$\Gamma_{\vec{f}-\vec{g}}(E)=(1-4C_0)\,G_{\vec{f}-\vec{g}}(E)$$

$$\langle\langle P^+_{\vec{f}}P_{\vec{f}}P_{\vec{m}}|P_{\vec{g}}\rangle\rangle=C_0G_{\vec{m}-\vec{g}}(E)+\langle B^+_{\vec{f}}B_{\vec{m}}\rangle_0G_{\vec{f}-\vec{g}}(E) \qquad \text{(II.4.14)}$$

$$\langle\langle P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}P_{\vec{f}}|P^+_{\vec{g}}\rangle\rangle=C_0G_{\vec{f}-\vec{g}}(E)+\langle B^+_{\vec{m}}B_{\vec{f}}\rangle_0G_{\vec{m}-\vec{g}}(E)$$

gdje je

$$G_{\vec{f}-\vec{g}}(E)=\langle\langle B_{\vec{f}}|B^+_{\vec{g}}\rangle\rangle$$

$$C_0=\langle B^+_{\vec{f}}B_{\vec{f}}\rangle \qquad \text{(II.4.15)}$$

što vodi do konačnog izraza za Greenovu funkciju

$$G_{\vec{k}}(E)=\frac{1+2C_0}{E-\Omega_{\vec{k}}} \qquad \text{(II.4.16)}$$

gdje je

$$G_{\vec{k}}(E)=\sum_{\vec{n}}G_{\vec{n}}(E)e^{-i\vec{k}\vec{n}}$$

$$\Omega_{\vec{k}}=\mathcal{E}_{\vec{k}}-\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}(T_{\vec{k}}+T_{\vec{q}}-W_0-W_{\vec{k}-\vec{q}})\langle B^+_{\vec{q}}B_{\vec{q}}\rangle_0$$

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}=\mathcal{E}_0+\frac{1}{2}T_{\vec{k}}$$

$$\langle B^+_{\vec{q}}B_{\vec{q}}\rangle_0=(e^{\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}}{\theta}}-1)^{-1}$$

$$T_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}}T_{0\vec{n}}e^{-i\vec{k}\vec{n}}\quad;\quad W_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}}W_{0\vec{n}}e^{-i\vec{k}\vec{n}} \qquad \text{(II.4.17)}$$

Dok smo u slučaju čistog dipolnog sistema zakon disperzije (II.3.15) odredili s tačnošću do $\theta^{\frac{5}{2}}$ ovdje ćemo vršiti proračun energije $\Omega_{\vec{k}}$ s tačnošću do $\theta^{\frac{1}{2}}$ pa je zato dovoljno izvršiti razvoj koeficijenata zavisnih od vektora $\vec{k}$ samo do članova proporcionalnih sa k^2. U aproksimaciji efektivne mase je

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

pa nakon provedenog integriranja nalazimo da je

$$\Omega_{\vec{k}} = \mathcal{E}_{\vec{k}} + \frac{v_0(W_0 - T_0)}{\hbar^3}\left(\frac{m\theta}{2\pi}\right)^{3/2} Z_{3/2}\left(\frac{E_0}{\theta}\right) \qquad \text{(II.4.18)}$$

gdje je v_0 zapremina elementarne ćelije i

$$Z_p(x) = \sum_{m=1}^{\infty} e^{-mx} m^{-p}$$

Magnetizaciju na niskim temperaturama dobijamo iz (II.3.17)

$$\sigma = 1 - \frac{2}{N}\sum_{\vec{k}}\left(e^{\frac{\Omega_{\vec{k}}}{\theta}} - 1\right)^{-1}$$

Nalazi se da je

$$\sigma = 1 - 2v_0\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} Z_{3/2}\left(\frac{E_0}{\theta}\right)\theta^{3/2} +$$

$$+ 2v_0^2\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^3 |W_0 - T_0| Z_{1/2}\left(\frac{E_0}{\theta}\right) Z_{3/2}\left(\frac{E_0}{\theta}\right)\theta^2 \qquad \text{(II.4.19)}$$

Poslednji član u formuli (II.4.19) javlja se usljed anharmonijskih efekata u sistemu. Kao što se vidi on je proporcionalan sa θ^2 za razliku od anharmonijskih efekata u feromagnetiku u kome postoje samo izmjenske interakcije, gdje je anharmanijska korekcija proporcionalna sa θ^4. Ovaj rezultat je posljedica činjenice da su usljed dipol-dipolne interakcije kinematski koeficijent W i dinamički koeficijent T medjusobno različiti, ta razlika vodi na korekcije proporcionalne sa θ^2.

Na visokim temperaturama ćemo primjeniti Tjablikovljevo dekuplovanje Greenovih funkcija višeg reda

$$\langle\langle P^+_{\vec{f}} P_{\vec{f}} P_{\vec{m}} | P^+_{\vec{g}} \rangle\rangle_E \approx \frac{1-\sigma}{2}\Gamma_{\vec{m}-\vec{g}}(E)$$

$$\langle\langle P^+_{\vec{m}} P_{\vec{m}} P_{\vec{f}} | P_{\vec{g}} \rangle\rangle_E \approx \frac{1-\sigma}{2}\Gamma_{\vec{f}-\vec{g}}(E) \qquad \text{(II.4.20)}$$

Tada je iz II.4.13

$$\Gamma_{\vec{k}}(E)=\frac{i}{2\pi}\frac{\sigma}{E-F_{\vec{k}}} \tag{II.4.21}$$

gdje je

$$F_{\vec{k}}=\varepsilon_0+\frac{1}{2}W_0-\frac{\sigma}{2}(W_0-T_{\vec{k}})$$

pa je tada

$$\sigma=1-\frac{2\sigma}{N}\sum_{\vec{k}}\left[e^{\frac{1}{\theta}(R-\sigma\nu_{\vec{k}})}-1\right]^{-1}$$

$$R=\varepsilon_0+\frac{1}{2}W_0\ ;\quad \nu_{\vec{k}}=\frac{1}{2}(W_0-T_{\vec{k}}) \tag{II.4.22}$$

S obzirom da su rezultati ovog paragrafa (eliminacija nekonzervativnih efekata) bazirani na pretpostavci da je spoljašnje magnetno polje različito od nule, kritičnu temperaturu odredićemo na način opisan u II.3. Razvojem izraza za magnetizaciju u feromagnetnoj fazi u red po stepenima od $\frac{1}{\theta}$ nalazimo da je

$$\sigma\approx-\frac{\theta}{W_0}\,\mathrm{sh}\,\frac{R}{\theta}\pm\sqrt{\frac{\theta^2}{W_0^2}\mathrm{sh}^2\frac{R}{\theta}+\frac{4\theta}{W_0}\mathrm{sh}^2\frac{R}{2\theta}} \tag{II.4.23}$$

$$W_0\equiv-|W_0|<0$$

Prvi izvod $\frac{\partial\sigma}{\partial\theta}$ postaje beskonačan za vrijednost θ_c koja je približno jednaka $\frac{1}{2}|W|$. Kao i u slučaju čistog dipolnog sistema ni ovdje kritična temperatura ne postoji bezuslovno. U granicama primjenjenog postupka potreban uslov za postojanje kritične temperature je $|W_0|\gg\varepsilon_0$.

Članovi trećeg reda koji se javljaju u hamiltonijanu feromagnetika usljed dipol-dipol interakcija mogu dovesti do slijedećih efekata: do energetskog pomaka koji se može proračunati računom smetnje drugog reda i do procesa fuzije u kome dva elementarna pobudjenja daju jedno novo sa dvostrukim impulsom.

Provedeni postupak eliminacije članova koji ne održavaju broj čestica dao je ekvivalentni hamiltonijan koji, osim dijela (II.4.11) koga smo analizirali u vezi sa termodinamičkim osobinama sistema, sadrži i članove oblika P^+PPP i $P^+P^+P^+P$. Ti članovi mogu dati energetske pomake u zakonu disperzije elementarnih pobudjenja a takodje mogu dovesti do procesa fuzije tri elementarna pobudjenja u jedno sa trostukim impulsom. Konjugovani članovi $P^+P^+P^+P$ su odgovorni za procese dezintegracije jedne kvazičestice u tri nove. Analiziraćemo mogućnost ovakvih procesa.

Fuziju dvije kvazičestice analiziračemo pomoću slijedećeg dijela hamiltonijana (II.4.7)

$$H_{2\rightleftarrows 1} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}} D^*_{\vec{f}\vec{g}} P^+_{\vec{f}\vec{g}} P_{\vec{g}} P_{\vec{f}} + C.C. = -\frac{1}{2\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} D^*_{\vec{q}_1} P^+_{\vec{q}_1+\vec{q}} P_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_1} + C.C. \tag{II.4.24}$$

Ako hamiltonijan (II.4.24) prouzrokuje prelaz iz početnog stanja

$$|i\rangle = |0_{\vec{q}_1+\vec{q}_2}\rangle |n_{\vec{q}_1}\rangle |n_{\vec{q}_2}\rangle$$

u konačno stanje

$$\langle f| = \langle 1_{\vec{q}_1+\vec{q}_2}| \langle n_{\vec{q}_1}-1| \langle n_{\vec{q}_2}-1|$$

dobija se slijedeći izraz za vjerovatnost prelaza

$$W_{2\rightleftarrows 1} = \frac{1}{4}|D_{\vec{q}_1}|^2 \frac{n_{\vec{q}_1}}{N} n_{\vec{q}_2} \tag{II.4.25}$$

gdje su $n_{\vec{q}_1}$ i $n_{\vec{q}_2}$ brojevi elementarnih pobudjenja u početnom stanju.

Iz zakona održanja energije $\varepsilon_{\vec{q}_1+\vec{q}_2} = \varepsilon_{\vec{q}_1} + \varepsilon_{\vec{q}_2}$ uzetog u aproksimaciji efektivne mase, dobija se da u procesu fuzije ugao izmedju $\vec{q}_1$ i $\vec{q}_2$ može biti u intervalu

$$\Theta_{1,2} \in (0, \frac{\pi}{2})$$

Ako stavimo $D \sim 10^{-15}$ erg i $n_{q_1} = n_{q_2} = n = 10^{20}$ vjerovatnost ovog procesa je

$$W_{2\rightleftarrows 1} = \frac{1}{4}|D|^2 \frac{n}{N} n \sim 10^{-15}$$

što znači da u 10^{15} procesa kolizije jedan od njih vodi do fuzije kvazičestica.

Procese fuzije tri kvazičestice analiziraćemo pomoću članova četvrtog reda dobijenih u postupku eliminacije nekonzervativnih efekata

$$H_{3\rightleftarrows 1}=2\sum_{\vec{f}\vec{g}\vec{n}} Y_{\vec{f}\vec{g}}E_{\vec{f}\vec{n}}P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{n}}P_{\vec{f}}P_{\vec{g}}-2\sum_{\vec{f}\vec{g}\vec{n}} Y_{\vec{f}\vec{g}}B_{\vec{f}\vec{n}}P^{+}_{\vec{f}}P_{\vec{f}}P_{\vec{g}}P_{\vec{n}}+\mathrm{c.c.}=$$

$$=\frac{2}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2\vec{q}_3} Y_{\vec{q}_1}(E_{\vec{q}_1+\vec{q}_2}-B_{\vec{q}_2})P^{+}_{\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3}P_{\vec{q}_3}P_{\vec{q}_2}P_{\vec{q}_1}+\mathrm{c.c.} \qquad (\text{II}.4.26)$$

Vjerovatnost prelaza iz početnog stanja

$$|i\rangle=|0_{\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3}\rangle|n_{\vec{q}_1}\rangle|n_{\vec{q}_2}\rangle|n_{\vec{q}_3}\rangle$$

u konačno stanje

$$\langle f|=\langle 1_{\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3}|\langle n_{\vec{q}_1}-1_{\vec{q}_1}|\langle n_{\vec{q}_2}-1_{\vec{q}_2}|\langle n_{\vec{q}_3}-1_{\vec{q}_3}|$$

je

$$W_{3\rightleftarrows 1}=4|Y_{\vec{q}_1}(E_{\vec{q}_1+\vec{q}_2}-B_{\vec{q}_2})|^2\frac{n_{\vec{q}_1}n_{\vec{q}_2}}{N^2}n_{\vec{q}_3} \qquad (\text{II}.4.27)$$

Zakon sačuvanja energije $\varepsilon_{\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3}=\varepsilon_{\vec{q}_1}+\varepsilon_{\vec{q}_2}+\varepsilon_{\vec{q}_3}$ dozvoljava slijedeće intervale uglova za taj proces:

$$\theta_{23}\in(0,\pi)\ ;\ \theta_{12}\in(\arccos\frac{k_o^2}{q_1q_2},\pi)\ ;$$

$$\theta_{13}\in(0,\arccos(\frac{q_2}{q_1}\cos\theta_{23}))$$

Ako stavimo da je $\Delta_{\vec{q}}\sim 10^{-14}$ erg i $|E-B|,|C|\sim 10^{-15}$ erg nalazimo

$$W_{3\rightleftarrows 1}=\frac{1}{4}\left|\frac{C(E-B)}{\Delta}\right|^2\left|\frac{n}{N}\right|^2 n\sim 10^{-21}$$

što znači da je pri istim uslovima fuzija tri kvazičestice oko 10^6 puta manje vjerovatna nego fuzija dvije kvazičestice.

Na kraju možemo zaključiti da analiza dodatnih efekata u Heisenbergovom feromagnetiku koji su prouzrokovani prisustvom dipol-dipol interakcija, pokazuje da se mogu očekivati slijedeći efekti:

a) Rotacija ose kvantizacije. Ugao rotacije je veći što je dipol-dipol interakcija jača

b) Anharmonijska korekcija magnetizacije na niskim temperaturama koja je proporcionalna kvadratu temperature.

c) Porast kritične temperature.

d) Fuzija dvije ili tri kvazičestice i obrnuti procesi dezintegracije.

Svi ovi efekti su više izraženi kada interakcije izmjene nisu mnogo veće od dipol-dipol interakcija, tako da se može očekivati da se eksperimentalna potvrda spomenutih efekata dobije u slučaju slabih feromagnetika (rijetke zemlje).

Treba napomenuti da je postupak eliminacije nekonzervativnih efekata koji je ovdje primjenjen moguć samo ako se feromagnetik nalazi u dovoljno jakom spoljašnjem magnetnom polju. Ovaj postupak se takodje može smatrati dobrim kada nema spoljašnjeg magnetnog polja, ali samo za pobudjenja sa velikim valnim vektorima. Slučaj pobudjenja sa malim valnim vektorima bez spoljašnjeg magnetnog polja zahtijevao bi kvalitativno drugačiji postupak.

III SPECIFIČNI EFEKTI U SISTEMU DIPOLA

III.1. Interakcija struja-struja u harmonijskoj kvazičestičnoj aproksimaciji*)

Szent Györgyi [50,51] i Frölich [52] su više puta ukazivali da procesi koji se javljaju u sistemima kondenzirane materije sa dipol-dipol interakcijama mogu imati neke karakteristike koje bi mogle biti odgovorne za nastanak, razvoj i procese u živoj materiji. Takodje treba primjetiti da voda, koja se smatra za sredinu gdje su stvoreni prvi živi organizmi (str. 15 iz [51]) isto tako predstavlja sistem električnih dipola. Imajući to na umu cilj nam je da izdvojimo one osobine koje odgovaraju, na sasvim prirodan način, upravo sistemima sa dipol-dipol interakcijama, a koje bi mogle poslužiti kao teorijska osnova za objašnjenje nekih procesa u živoj materiji. Naravno, ovim ne pokušavamo formulirati novu biofizičku teoriju nego tražimo novi način posmatranja biofizičkih procesa. Naime, općenito se smatra da u tim procesima osnovnu ulogu igraju elektronske struje i električni biopotencijali. Ali očito je da su i drugi fizički mehanizmi (kao eksitonski mehanizmi i drugi) od ne manje važnosti za biofizičke procese. Zato ćemo potražiti efekte koji se javljaju usljed ostalih mnogobrojnih kvazičestičnih struja, a koji mogu biti od važnosti za bioorganizme. Kao što ćemo vidjeti kvazičestične struje vode na specifične efekte upravo u sistemima sa dipol-dipol interakcijama.

*) Rezultati ovog paragrafa biće publikovani u [49]

Razmotrićemo sistem bozonskih kvazičestica čiji je hamiltonijan oblika

$$H = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} B^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{k}} \tag{III.1.1}$$

i metodom Greenovih funkcija ćemo istražiti struje elementarnih pobudjenja u takvom sistemu.

U koordinatnoj reprezentaciji gustoća struje vjerovatnosti definiše se kao

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^{*}(\vec{r},t)\nabla_{\vec{r}}\Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t)\nabla_{\vec{r}}\Psi^{*}(\vec{r},t)\right] \tag{III.1.2}$$

U reprezentaciji druge kvantizacije struja se izražava preko operatora stvaranja i poništavanja. Za sistem Bose čestica sa hamiltonijanom (III.1.1) uzećemo operator gustoće struje

$$\vec{j}_{\vec{a}}(t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[B^{+}_{\vec{a}}(t)\nabla_{\vec{a}}B_{\vec{a}}(t) - B_{\vec{a}}(t)\nabla_{\vec{a}}B^{+}_{\vec{a}}(t)\right] \tag{III.1.3}$$

gdje je $\vec{a}$ diskretni vektor kristalne rešetke.

Da bismo istražili osobine operatora $\vec{j}_{\vec{a}}$ analiziraćemo odgovarajuću simetriziranu Greenovu funkciju

$$G_{\vec{a}-\vec{b}}(t-t') = \frac{\hbar}{4mi}\Big\{\langle\langle B^{+}_{\vec{b}}(t') \mid \nabla_{\vec{a}}B_{\vec{a}}(t)\rangle\rangle - \langle\langle B_{\vec{a}}(t) \mid \nabla_{\vec{b}}B^{+}_{\vec{b}}(t')\rangle\rangle +$$
$$+ \langle\langle \nabla_{\vec{a}}B_{\vec{a}}(t) \mid B^{+}_{\vec{b}}(t')\rangle\rangle - \langle\langle \nabla_{\vec{b}}B_{\vec{b}}(t') \mid B^{+}_{\vec{a}}(t)\rangle\rangle\Big\} \tag{III.1.4}$$

Nakon Fourier transformacija prostor-impuls i vrijeme-energija i pod pretpostavkom da je sredina homogena, tj. da važi zakon održanja impulsa, dobijamo Fourierovu komponentu Greenove funkcije

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{\hbar\vec{k}}{2m}\left\{\langle\langle B_{\vec{k}} \mid B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle_{E} + \langle\langle B_{\vec{k}} \mid B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle_{-E}\right\} \tag{III.1.5}$$

Za sistem čiji je hamiltonijan oblika (III.1.1) i na osnovu opše jednačine

$$E\langle\langle \hat{A} \mid \hat{B}\rangle\rangle_{E} = \frac{i}{2\pi}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle + \langle\langle[\hat{A},H] \mid \hat{B}\rangle\rangle_{E} \tag{III.1.6}$$

dobijamo

$$\langle\langle B_{\vec{k}} \mid B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle_{E} = \frac{i}{2\pi}\,\frac{1}{E-\varepsilon_{\vec{k}}} \tag{III.1.7}$$

pa se (III.1.5) svodi na

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{i\hbar\vec{k}}{4\pi m}\left[\frac{1}{E-\varepsilon_{\vec{k}}+i\delta} - \frac{1}{E+\varepsilon_{\vec{k}}+i\delta}\right], \qquad \text{(III.1.8)}$$

$$\delta \to 0^{+}$$

Na osnovu spektralne teoreme [23] srednja vrijednost kvazičestične struje na temperaturi Θ nalazi se kao

$$\langle \vec{j}_{\vec{k}} \rangle = 2\int_{-\infty}^{+\infty} dE \; \mathrm{Re}\, G_{\vec{k}}(E)\,\left(e^{\frac{E}{\Theta}}-1\right)^{-1} \qquad \text{(III.1.9)}$$

pa iz (III.1.8) i (III.1.9) slijedi da je

$$\langle \vec{j}_{\vec{k}} \rangle = \frac{\hbar\vec{k}}{2m}\,\mathrm{ctgh}\,\frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{2\Theta} \qquad \text{(III.1.10)}$$

Na analogan način ćemo naći srednju vrijednost operatora gustoće vjerovatnosti. U koordinatnoj reprezentaciji gustoća vjerovatnosti je

$$\rho(\vec{r},t) = \Psi^{+}(\vec{r},t)\,\Psi(\vec{r},t) \qquad \text{(III.1.11)}$$

a u reprezentaciji druge kvantizacije gustoća vjerovatnosti postaje operator

$$\rho_{\vec{a}}(t) = B^{+}_{\vec{a}}(t)\,B_{\vec{a}}(t) \qquad \text{(III.1.12)}$$

Iz analize odgovarajuće Greenove funkcije

$$D_{\vec{a}\vec{b}}(t-t') = \langle\langle B_{\vec{a}}(t) | B_{\vec{b}}(t') \rangle\rangle + \langle\langle B_{\vec{b}}(t') | B_{\vec{a}}(t) \rangle\rangle \qquad \text{(III.1.13)}$$

nalazimo

$$\langle \rho_{\vec{k}} \rangle = \mathrm{ctgh}\,\frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{2\Theta} \qquad \text{(III.1.14)}$$

Na osnovu rezultata (III.1.10) i (III.1.14) možemo razmatrati uslove pod kojima vrijedi jednačina kontinuiteta za srednje vrijednosti operatora $\vec{j}_{\vec{k}}$ i $\rho_{\vec{k}}$.

U koordinatnoj reprezentaciji jednačina kontinuiteta glasi

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) + \mathrm{div}\,\vec{j}(\vec{r},t) = 0 \qquad \text{(III.1.15)}$$

odnosno nakon Fourier transformacija prostor-impuls i vrijeme-energija

$$\frac{E}{\hbar}\rho(\vec{k},E)-\vec{k}\vec{j}(\vec{k},E)=0 \qquad \text{(III.1.16)}$$

tako da su njen statistički ekvivalent nakon zamjene

$$\rho(\vec{k},E)\to\langle\rho_{\vec{k}}(\mathcal{E}_{\vec{k}})\rangle \qquad \vec{j}(\vec{k},E)\to\langle\vec{j}_{\vec{k}}(\mathcal{E}_{\vec{k}})\rangle$$
$$E\to\mathcal{E}_{\vec{k}} \qquad \text{(III.1.17)}$$

svodi na

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}-\frac{\hbar^2k^2}{2m}=0 \qquad \text{(III.1.18)}$$

Na osnovu dobijenih rezultata zaključujemo da je jednačina kontinuiteta zadovoljena samo ako energija bozona ima vrijednost

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

što je tačno samo u slučaju slobodnih bozona, odnosno za idealan Bose gas. Ovo se može lako razumjeti. Ako čestice izmedju sebe interaguju onda vrijeme njihovog života postaje konačno, tj. one poslije izvjesnog vremena nestaju pa jednačina kontinuiteta, koja odražava očuvanje broja čestica, mora da se naruši.

Važno je ipak uočiti da čak i kada čestice medjusobno ne interaguju kao što je ovdje pretpostavljeno (vidjeti (III.1.1)), jednačina kontinuiteta može da bude narušena, na primjer kao posljedica prisustva energetskog procjepa (gepa). Zaista ako zakon disperzije ima procjep, tada je

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}=\Delta+\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

gdje je Δ energija potrebna da se pobudi izolovana molekula ili atom u sistemu, i jednačina kontinuiteta se narušava. To znači da ukupan broj kvazičestica u sistemu nije konstantan već one nestaju ili se radjaju nove.

Ovaj slučaj u kome prisustvo energetskog procjepa različitog od nule u zakonu disperzije narušava jednačinu kontinuiteta detaljnije ćemo analizirati jer narušenje jednačine kontinuiteta znači mogućnost stvaranja dopunskih pobudjenja u sistemu u odnosu na već postojeća.

Na osnovu (III.1.10) zaključujemo da struja vjerovatnosti bozonskih pobudjenja zavisi od temperature. Znači da ako u sistemu imamo dvije ili više struja bozonskih pobudjenja onda mijenjanjem temperature možemo utjecati na interakciju ovih struja medjusobno. Prema tome ako usljed narušavanja jednačine kontinuiteta mogu da se stvore neka nova pobudjenja sa različitim osobinama od primarnih, ona očigledno mogu da budu samo rezultat interferencije struja početnih pobudjenja. Postojanje novih interferentnih pobudjenja kao i njihove osobine, ako se ona uopšte pojave, analiziraćemo pomoću Greenove funkcije tipa struja-struja koju definišemo na slijedeći način

$$\Gamma_{\vec{a}-\vec{b}}(t-t') = \langle\langle \vec{J}_{\vec{a}}(t) | \vec{J}_{\vec{b}}(t') \rangle\rangle \tag{III.1.19}$$

Na osnovu (III.1.3) možemo pisati

$$\begin{aligned}\Gamma_{\vec{a}-\vec{b}}(t-t') = -\frac{\hbar^2}{4m^2}\Big\{ &\langle\langle B_{\vec{a}}(t)\nabla_{\vec{a}}B^+_{\vec{a}}(t) | B_{\vec{b}}(t')\nabla_{\vec{b}}B^+_{\vec{b}}(t')\rangle\rangle + \\ &+\langle\langle B^+_{\vec{a}}(t)\nabla_{\vec{a}}B_{\vec{a}}(t) | B^+_{\vec{b}}(t')\nabla_{\vec{b}}B_{\vec{b}}(t')\rangle\rangle - \\ &-\langle\langle B_{\vec{a}}(t)\nabla_{\vec{a}}B^+_{\vec{a}}(t) | B^+_{\vec{b}}(t')\nabla_{\vec{b}}B_{\vec{b}}(t')\rangle\rangle - \\ &-\langle\langle B^+_{\vec{a}}(t)\nabla_{\vec{a}}B_{\vec{a}}(t) | B_{\vec{b}}(t')\nabla_{\vec{b}}B^+_{\vec{b}}(t')\rangle\rangle\Big\}\end{aligned} \tag{III.1.20}$$

Izvršićemo Fourier transformaciju prostor-impuls vodeći pri tome računa da zbog homogenosti prostora mora vrijediti zakon održanja impulsa. Nakon inverzne transformacije dobijamo

$$\begin{aligned}\Gamma_{\vec{k}} = \frac{\hbar}{4m^2N}\sum_{\vec{k}_2\vec{k}_3}\Big[&\langle\langle B_{\vec{k}_2+\vec{k}}B^+_{\vec{k}_2} | B_{\vec{k}_3}B^+_{\vec{k}_3+\vec{k}}\rangle\rangle\,\vec{k}_2(\vec{k}_3+\vec{k}) + \\ &+\langle\langle B^+_{\vec{k}_2-\vec{k}}B_{\vec{k}_2} | B^+_{\vec{k}_3}B_{\vec{k}_3-\vec{k}}\rangle\rangle\,\vec{k}_2(\vec{k}_3-\vec{k}) + \\ &+\langle\langle B_{\vec{k}_2+\vec{k}}B^+_{\vec{k}_2} | B^+_{\vec{k}_3}B_{\vec{k}_3-\vec{k}}\rangle\rangle\,\vec{k}_2(\vec{k}_3-\vec{k}) + \\ &+\langle\langle B^+_{\vec{k}_2-\vec{k}}B_{\vec{k}_2} | B_{\vec{k}_3}B^+_{\vec{k}_3+\vec{k}}\rangle\rangle\,\vec{k}_2(\vec{k}_3+\vec{k})\Big]\end{aligned} \tag{III.1.21}$$

Ovdje je N broj atoma u kristalu.

Funkcija $\Gamma_{\vec{k}}$ kao i funkcije na desnoj strani jednačine zavise od razlike vremena $t - t'$. Nakon Fourier transformacije vrijeme--energija i inverzne transformacije imamo

$$\Gamma_{\vec{k}}(E) = \frac{\hbar^2}{4m^2N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\Big[\vec{q}_1(\vec{q}_2+\vec{k})\langle\langle B_{\vec{q}_1+\vec{k}}B^+_{\vec{q}_1}|B_{\vec{q}_2}B^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}\rangle\rangle_E +$$
$$+\vec{q}_1(\vec{q}_2-\vec{k})\langle\langle B_{\vec{q}_1+\vec{k}}B^+_{\vec{q}_1}|B^+_{\vec{q}_2}B_{\vec{q}_2-\vec{k}}\rangle\rangle_E +$$
$$+\vec{q}_1(\vec{q}_2-\vec{k})\langle\langle B^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}B_{\vec{q}_1}|B^+_{\vec{q}_2}B_{\vec{q}_2-\vec{k}}\rangle\rangle +$$
$$+\vec{q}_1(\vec{q}_2+\vec{k})\langle\langle B^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}B_{\vec{q}_1}|B_{\vec{q}_2}B^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}\rangle\rangle_E\Big] \qquad \text{(III.1.22)}$$

S obzirom da je hamiltonijan sistema kvazičestica u harmonijskoj aproksimaciji dat sa (III.1.1) jednačine za Greenove funkcije na desnoj strani ove jednačine su

$$(E+\varepsilon_{\vec{q}_1}-\varepsilon_{\vec{q}_1+\vec{k}})\langle\langle B_{\vec{q}_1+\vec{k}}B^+_{\vec{q}_1}|B_{\vec{q}_2}B^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}\rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi}\mathcal{K}_1$$
$$(E+\varepsilon_{\vec{q}_1}-\varepsilon_{\vec{q}_1+\vec{k}})\langle\langle B_{\vec{q}_1+\vec{k}}B^+_{\vec{q}_1}|B^+_{\vec{q}_2}B_{\vec{q}_2-\vec{k}}\rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi}\mathcal{K}_2$$
$$(E+\varepsilon_{\vec{q}_1-\vec{k}}-\varepsilon_{\vec{q}_1})\langle\langle B^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}B_{\vec{q}_1}|B^+_{\vec{q}_2}B_{\vec{q}_2-\vec{k}}\rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi}\mathcal{K}_3 \qquad \text{(III.1.23)}$$
$$(E+\varepsilon_{\vec{q}_1-\vec{k}}-\varepsilon_{\vec{q}_1})\langle\langle B^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}B_{\vec{q}_1}|B_{\vec{q}_2}B^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}\rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi}\mathcal{K}_4$$

gdje je

$$\mathcal{K}_1 = \langle[B_{\vec{q}_1+\vec{k}}B^+_{\vec{q}_1}, B_{\vec{q}_2}B^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}]\rangle = \delta_{\vec{q}_1\vec{q}_2}(\langle B^+_{\vec{q}_1}B_{\vec{q}_1}\rangle - \langle B^+_{\vec{q}_1+\vec{k}}B_{\vec{q}+\vec{k}}\rangle)$$
$$\mathcal{K}_2 = \langle[B_{\vec{q}_1+\vec{k}}B^+_{\vec{q}_1}, B^+_{\vec{q}_2}B_{\vec{q}_2-\vec{k}}]\rangle = \delta_{\vec{q}_2,\vec{q}_1+\vec{k}}(\langle B^+_{\vec{q}_1}B_{\vec{q}_1}\rangle - \langle B^+_{\vec{q}_1+\vec{k}}B_{\vec{q}+\vec{k}}\rangle)$$
$$\mathcal{K}_3 = \langle[B^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}B_{\vec{q}_1}, B^+_{\vec{q}_2}B_{\vec{q}_2-\vec{k}}]\rangle = \delta_{\vec{q}_1\vec{q}_2}(\langle B^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}B_{\vec{q}_1-\vec{k}}\rangle - \langle B^+_{\vec{q}_1}B_{\vec{q}_1}\rangle)$$
$$\mathcal{K}_4 = \langle[B^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}B_{\vec{q}_1}, B_{\vec{q}_2}B^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}]\rangle = \delta_{\vec{q}_2,\vec{q}_1-\vec{k}}(\langle B^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}B_{\vec{q}_1-\vec{k}}\rangle - \langle B^+_{\vec{q}_1}B_{\vec{q}_1}\rangle)$$

(III.1.24)

Iz (III.1.22), (III.1.23) i (III.1.24) nalazimo konačno za Fourierovu komponentu Greenove funkcije jednačinu

$$\Gamma_{\vec{k}}(E)=\frac{i\hbar^2}{8\pi m^2}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\left\{\frac{(\bar{N}_{\vec{q}}-\bar{N}_{\vec{q}+\vec{k}})\vec{q}(2\vec{q}+\vec{k})}{E-(\mathcal{E}_{\vec{q}+\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{q}})}+\right.$$

$$\left.+\frac{(\bar{N}_{\vec{q}}-\bar{N}_{\vec{q}+\vec{k}})\vec{q}(2\vec{q}-\vec{k})}{E-(\mathcal{E}_{\vec{q}}-\mathcal{E}_{\vec{q}-\vec{k}})}\right\} \qquad \text{(III.1.25)}$$

gdje je

$$\bar{N}_{\vec{q}}\equiv\langle B^{+}_{\vec{q}}B_{\vec{q}}\rangle=(e^{\frac{\mathcal{E}_{\vec{q}}}{\theta}}-1)^{-1}$$

srednji broj bozona na temperaturi θ.

Na osnovu formule (III.1.19) nije teško zaključiti da funkcija Γ opisuje procese interakcije izmedju dvije struje elementarnih ekscitacija, preciznije procese interferencije izmedju dva talasa pobudjenja u kristalu. Prema tome polovi funkcije Γ (formula (III.1.25)) daju, ukoliko postoje, energije novih pobudjenja koja nastaju usljed interferencije. Takodje je na osnovu (III.1.25) očigledno da takva pobudjenja mogu da nastanu samo na temperaturama $\theta > 0$. Intenzitet interakcije raste s temperaturom pa ćemo analizu provesti samo za oblast visokih temperatura. Provodeći sumiranje po $\vec{q}$ u (III.1.25) ispitaćemo mogućnost nastajanja interferentnih pobudjenja. Rezultat će svakako zavisiti od oblika zakona disperzije $\mathcal{E}_{\vec{k}}$ za primarna bozonska pobudjenja.

Ako bozonska pobudjenja imaju linearan zakon disperzije $\mathcal{E}_{\vec{k}}=\hbar v k$, gdje je v brzina prostiranja pobudjenja (kao što je slučaj kod fotona i akustičkih fonona), može se pokazati da funkcija $\Gamma_{\vec{k}}(E)$ nema polova u kompleksnoj E ravni bez obzira na dimenzionalnost sredine. To znači da interakcija struja ovakvih bozonskih pobudjenja ne daje nova pobudjenja.

Takodje se može pokazati da funkcija $\Gamma_{\vec{k}}(E)$ nema dopunskih polova ni u slučaju bozonskih pobudjenja sa kvadratnim zakonom disperzije bez energetskog procjepa, tj. sa energijom $\mathcal{E}_{\vec{k}}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$.

Takva pobudjenja su na primjer magnoni koji se javljaju u magnetnim materijama ako je spoljašnje magnetno polje jednako nuli.

U oba navedena slučaja dokaze izostavljamo zbog njihove glomaznosti.

Treći tip bozonskih ekscitacija u kondenzovanoj materiji su ekscitacije sa energetskim procjepom, tj. kvazičestice sa zakonom disperzije $\mathcal{E}_{\vec{k}}=\Delta+\frac{\hbar^2k^2}{2m}$. Kao što smo vidjeli za ekscitacije sa energetskim procjepom narušava se statistička jednačina kontinuiteta pa zato ovdje postoje najveće šanse da se kao rezultat interakcije dvije struje ovih pobudjenja pojave neka nova interferentna pobudjenja. Analizu polova Greenove funkcije $\Gamma_{\vec{k}}(E)$ vršimo, kao što je već napomenuto, na visokim temperaturama, tj takvim da je $\Theta\gg\left|\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right|$, ali istovremeno $\Theta\ll\Delta$. Za ovakve temperature srednji broj bozona se može aproksimativno izraziti kao

$$\langle B^+_{\vec{k}}B_{\vec{k}}\rangle\equiv\bar{N}_{\vec{k}}=\frac{1}{e^{\frac{\Delta}{\Theta}+\frac{\hbar^2k^2}{2m\Theta}}-1}\approx$$

$$\approx e^{-\left(\frac{\Delta}{\Theta}+\frac{\hbar^2k^2}{2m\Theta}\right)}\approx e^{-\frac{\Delta}{\Theta}}\left(1-\frac{\hbar^2k^2}{2m\Theta}\right) \qquad \text{(III.1.26)}$$

Analizu ćemo provesti za slučaj jedno, dvo i trodimenzionalne kristalne rešetke.

U slučaju jednodimenzionalne strukture u formuli (III.1.25) sa sume prelazimo na integral po pravilu

$$\frac{1}{N}\sum_{q}=\frac{a}{2\pi}\int_{-\mu_0}^{\mu_0}dq$$

gdje je $\mu_0=\frac{\pi}{a}\sim10^8\ \mathrm{cm}^{-1}$ granični vektor prve Brillouinove zone. Koristeći aproksimaciju (III.1.26) dobijamo za Greenovu funkciju $\Gamma_k(E)$ izraz

$$\Gamma_k(E)=\frac{i}{2\pi}\,\frac{C_k(\Theta)}{E^2-E_k^2} \qquad \text{(III.1.27)}$$

gdje je

$$C_k(\Theta)=\frac{\hbar^6\mu_0^4k^2}{9m^4\Theta}e^{-\frac{E}{\Theta}} \tag{III.1.28}$$

i

$$E_k=\frac{\hbar^2\mu_0}{\sqrt{3}|m|}k \tag{III.1.29}$$

Znači da u ovom slučaju funkcija $\Gamma_k(E)$ ima pol, tj. dvije struje bozonskih pobudjenja svojom interferencijom stvaraju nove kvazičestice. Zakon disperzije tih interferentnih pobudjenja može se napisati u obliku

$$E_k=\hbar u k \tag{III.1.30}$$

gdje je

$$u=\frac{\hbar\mu_0}{\sqrt{3}|m|} \tag{III.1.31}$$

brzina prostiranja interferentnih pobudjenja.

Vidimo da pobudjenja koja su nastala interakcijom struja - - struja imaju linearan zakon disperzije i u tom pogledu su slična fononima ili fotonima a bitno se razlikuju od primarnih ekscitacija. Važno je primjetiti da rezultat ne zavisi od znaka efektivne mase kvazičestica.

U slučaju dvodimenzionalne rešetke u izrazu (III.1.25) sa sume na integral se prelazi po pravilu

$$\frac{1}{N}\sum_{q}=\frac{a^2}{4\pi^2}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\mu_0}q\,dq\,,\quad \mu_0^2=\frac{4\pi}{a^2}$$

i uz aproksimaciju (III.1.26) se, poslije proračuna koje izostavljamo, nalazi

$$\Gamma_k(E)=-\frac{i}{2\pi}\frac{\hbar^2\mu_0^2}{2m^2}\frac{e^{-\frac{E}{\Theta}}}{\Theta}\left\{1+\frac{A^2}{\mu_0^4}\left(\frac{k^2}{2}+\frac{5}{3}kA+\frac{4}{3}A^2\right)+\right.$$
$$\left.+\frac{B^2}{\mu_0^4}\left(\frac{k^2}{2}-\frac{5}{3}kB+\frac{4}{3}B^2\right)\right\}^{-1} \tag{III.1.32}$$

$$A=\frac{mE}{\hbar^2k}-\frac{k}{2}\,,\quad B=\frac{mE}{\hbar^2k}+\frac{k}{2}$$

Pošto izraz u velikoj zagradi u formuli (III.1.32) ne može biti jednak nuli ni za kakvo E, u dvodimenzionalnoj rešetki $\Gamma_{\vec{k}}(E)$ nema polova što znači da se u ovom slučaju ne stvaraju interferentna pobudjenja.

U slučaju trodimenzionalne rešetke se nakon prelaska sa sume na integral po pravilu

$$\frac{1}{N}\sum_{q}=\frac{a^3}{8\pi^3}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\vartheta\,\sin\vartheta\int_0^{\mu_0}dq\,q^2$$

$$\mu_0^3=\frac{6\pi^2}{a^3}$$

i uz aproksimaciju (III.1.26) dolazi do rezultata

$$\Gamma_{\vec{k}}(E)=-\frac{i}{2\pi}\,\frac{3\hbar^2\mu_0^4}{5m^2\Theta}\,e^{-\frac{\Delta}{\Theta}}\,\frac{1}{1-\frac{5k\omega}{32\mu_0}\ln\frac{\mu_0^2-k\omega\mu_0+\Omega^2}{\mu_0^2+k\omega\mu_0+\Omega^2}}$$

$$\omega=\frac{2mE}{\hbar^2k},\quad \Omega=\frac{k^2}{4}(\omega^2+1) \qquad \text{(III.1.33)}$$

Uslov egzistencije interferentnih pobudjenja je

$$\frac{\mu_0^2-k\omega\mu_0+\Omega^2}{\mu_0^2+k\omega\mu_0+\Omega^2}=e^{\frac{32\mu_0}{5k\omega}}$$

i on očigledno nema rješenja ni za kakvo E.

Možemo dakle zaključiti da interakcija struja-struja može da stvori nove kvazičestice samo za pobudjenja koja imaju energetski procjep i to samo u slučaju jednodimenzionalne rešetke. Prema tome izazivači interferentnih pobudjenja pojavljuju se uglavnom u sistemima sa dipol-dipolnim interakcijama, kao što su Frenkelovi eksitoni, angularni fononi i dipolni magnoni.

Zakon disperzije za eksitone dat je relacijom (I.1.24), za angularne fonone relacijom (I.5.20) i za dipolne magnone u jednodimenzionalnoj rešetki relacijom (II.2.8). Vidi se da ove ekscitacije imaju energetski procjep što je dovoljan uslov za narušavanje statističkog ekvivalenta jednačine kontinuiteta, a s druge strane narušavanje jednačine kontinuiteta predstavlja potreban uslov za pojavu novih tipova pobudjenja.

Da bismo analizirali osobine interferentnih pobudjenja u sistemima električnih odnosno magnetnih dipola, razmotrićemo srednji kvadrat gustoće struje

$$s_{\vec{k}}^2 = \langle \vec{j}_{\vec{k}}^{\,2} \rangle \tag{III.1.34}$$

i transportnu funkciju koju definišemo kao

$$\tau_{\vec{a}-\vec{b}} = \langle \vec{j}_{\vec{a}} \vec{j}_{\vec{b}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle \vec{j}_{\vec{k}}^{\,2} \rangle e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})} \tag{III.1.35}$$

Na osnovu teoreme o srednjim vrijednostima [23]

$$s_{\vec{k}}^2 = 2\int_{-\infty}^{+\infty} dE \; \mathrm{Re}\, \Gamma_{\vec{k}}(E) \left(e^{\frac{E}{\theta}} - 1\right)^{-1} \tag{III.1.36}$$

Za jednodimenzionalnu kristalnu rešetku iz (III.1.27) slijedi

$$\Gamma_k(E) = \frac{i}{2\pi} C_k(\theta) \frac{1}{2E_k} \left\{ \frac{1}{E - E_{\vec{k}} + i\delta} - \frac{1}{E + E_{\vec{k}} + i\delta} \right\}$$

pa je

$$\mathrm{Re}\, \Gamma_k(E) = \frac{C_k(\theta)}{4E_k} \left[\delta(E - E_k) - \delta(E + E_k) \right] \tag{III.1.37}$$

Iz (III.1.36) i (III.1.37) je tada

$$s_k^2 = \frac{\sqrt{3}}{18} \frac{\hbar^4 \mu_0^3}{m^3} \frac{e^{-\frac{\Delta}{\theta}}}{\theta} k \; \mathrm{ctgh} \frac{\hbar^2 \mu_0 k}{2\sqrt{3}\, m\theta} \tag{III.1.38}$$

Za visoke temperature je $\hbar^2 \mu_0 k \ll 2\sqrt{3}\, m\theta$ pa se koristimo razvojem

$$\mathrm{ctgh}\, \varepsilon \approx \frac{1}{\varepsilon} + \frac{\varepsilon}{3}, \quad |\varepsilon| \ll 1$$

i nalazimo za srednji kvadrat gustoće struje

$$s_k^2 = s^2 + \xi(\theta) k^2 \tag{III.1.39}$$

gdje je

$$s^2 = \frac{1}{3} \left(\frac{\hbar \mu_0}{m} \right)^2 e^{-\frac{\Delta}{\theta}} \tag{III.1.40}$$

i

$$\xi(\Theta)=\frac{1}{27}\left(\frac{\hbar\mu_0}{m}\right)^4\left(\frac{\hbar}{2\Theta}\right)^2 e^{-\frac{\Delta}{\Theta}} \tag{III.1.41}$$

Tada je iz (III.1.35) transportna funkcija

$$\tau_{a-b}=\frac{1}{N}\sum_k\left[s^2+\xi(\Theta)k^2\right]e^{ik(a-b)}$$

odnosno nakon integriranja

$$\tau_l=\left[s^2+\frac{1}{3}\mu_0^2\,\xi(\Theta)\right]\delta_{l,0}+\frac{2\xi(\Theta)}{l^2}\left(\cos\mu_0 l-\frac{\sin\mu_0 l}{\mu_0 l}\right) \tag{III.1.42}$$

$$l=a-b$$

Pošto je $a-b\equiv l=l_0a$ gdje je l_0 cio broj i $\mu_0=\frac{\pi}{a}$, za $l\neq 0$ dobijamo dio transportne funkcije koji je odgovoran za "prebacivanje" struje sa čvora na čvor

$$\tau_l=(-1)^{l_0}\frac{2\xi(\Theta)}{l^2}\;,\quad l\neq 0 \tag{III.1.43}$$

Srednja vrijednost gustoće struje za visoke temperature je

$$\bar{v}=\sqrt{\overline{s_k^2}}=s\sqrt{1+\left(\frac{\hbar^2\mu_0 k}{6m\Theta}\right)^2}$$

Na visokim temperaturama je $\frac{\hbar^2\mu_0 k}{6m\Theta}\ll 1$ pa možemo staviti

$$\bar{v}\approx s \tag{III.1.44}$$

Iz (III.1.40) je očito da s jako zavisi od vrijednosti procjepa primarnih elementarnih pobudjenja koja su odgovorna za pojavu interferentnih pobudjenja. Za eksitone je zavisnost s od procjepa i temperature prikazana u slijedećoj tabeli

$\Delta(k_B)$	T (K)	s (cm/s)
10^4	$3\cdot10^2$	3,3
$2\cdot10^4$	$3\cdot10^2$	$19\cdot10^{-8}$
$4\cdot10^4$	$3\cdot10^2$	$6{,}434\cdot10^{-22}$
$4\cdot10^4$	10^3	0,119

U slučaju angularnih fonona čija je efektivna masa reda 10^{-25} gr, maksimalna vrijednost energetskog procjepa Δ_i je reda $9 \cdot 10^2$ k_B pa se na sobnoj temperaturi $T = 3 \cdot 10^2$ K nalazi da je $s \approx 1,3 \cdot 10^5$ cm/s. Realnija vrijednost za Δ_i je $5 \cdot 10^2$ k_B, tada je $s \approx 2,5 \cdot 10^5$ cm/s. Znači da je u slučaju angularnih fonona srednja gustoća struje mnogo manje osjetljiva na vrijednost procjepa nego u slučaju Frenkelovih eksitona.

Dipolni magnoni imaju ekstremno malu vrijednost konstante interakcije tako da pretpostavke za izvodjenje izraza (III.1.25) vrijede za temperature od 10^{-1} K do 1 K. Uzimajući $\mu \sim 10\mu_B \approx 10^{-19}$ erg/gauss (tabela 6 iz [23]), $a \sim 5 \cdot 10^{-8}$ cm i $S = 2$ iz (II.2.8) se nalazi da su energetski procjep i efektivna masa dipolnih magnona $\Delta_\mu \sim 10\, k_B$ i $|m_\mu| \sim 1,2 \cdot 10^{-24}$ gr . Tada se za temperaturu od 1 K dobija srednja vrijednost gustoće struje $s \approx 3,24 \cdot 10^{13}$ cm/s, a za $T = 0,4$ K je $s \approx 1,79$ cm/s. Vidi se da je ovdje opet jako izražena zavisnost brzine transporta od temperature i u tom pogledu dipolni magnoni su slični eksitonima.

Iz analize dobijenih izraza vidi se da $C_k(\Theta)$ teži nuli kada $\Theta \to 0$ i $\Theta \to \infty$ a ima maksimalnu vrijednost za $\Theta = \Delta$, tj. za temperaturu koja je jednaka veličini procjepa razmatranih elementarnih pobudjenja. Za eksitone je Δ reda nekoliko eV što odgovara tako visokim temperaturama da se više ne može govoriti o postojanju kristalne rešetke pa intenzitet interferentnih pobudjenja praktično raste s porastom temperature ali nikada ne dostiže svoj maksimum.

Transport ekscitacija sa čvora na čvor obrnuto je proporcionalan kvadratu rastojanja l izmedju čvorova. Osim toga znak transportne funkcije, tj. smjer transporta zavisi od izbora molekule. Naime, za dati čvor broj l_o za njegove najbliže susjede je ± 1 pa slijedi da τ_l ima negativan znak, što znači da se pobudjenje transportuje ka uočenom čvoru sa njegovih najbližih susjeda. Za slijedeće susjede $l_o = \pm 2$, transportna funkcija je pozitivna i transport se vrši od datog čvora ka njegovim slijedećim daljim susjedima. Naravno, zbog translacione invarijantnosti kristalnih osobina očigledno je da ne dolazi do nagomilavanja energije na jednom čvoru.

Karakteristike transporta medjutim zavise i od promjene temperature pa je tada očito da i najmanje narušenje bilo simetrije bilo toplotne ravnoteže (jedan dio lanca molekula se jača zagrije od ostalih dijelova) može da dovede do nagomilavanja interferentnih pobudjenja na specifičnoj tački rešetke i da možda na taj način prouzrokuje transformaciju same molekule.

Analiza struje interferentnih pobudjenja je pokazala da su u slučaju eksitona procesi transporta veoma spori (na sobnim temperaturama brzina je reda 20 Å/s) što znači da interferentno pobudjenje veoma dugo kruži oko molekule na kojoj je nastalo dok ne preskoči na slijedeći čvor. Jasno je da tada svakako mora doći do narušenja termodinamičke ravnoteže jer je u praksi nemoguće održati sistem u punoj toplotnoj izolaciji za tako duge vremenske intervale koji su potrebni za tako spor transportni proces. Sigurno je dakle da će doći do akumuliranja interferentnih pobudjenja na nekim mjestima u molekularnom lancu.

Pobudjenja nastala interferencijom struja angularnih fonona kreću se duž molekularnog lanca na sobnim temperaturama približno brzinom zvuka u tečnosti.

Možemo dakle zaključiti da rezultati istraživanja koje smo ovdje naveli pokazuju da sistemi vezanih dipola (električnog ili magnetnog tipa) u jednodimenzionalnim strukturama vode na narušavanje statističkog ekvivalenta jednačine kontinuiteta. To rezultira u stvaranju kvalitativno novih pobudjenja koja su rezultat interakcije struja primarnih pobudjenja.Ovdje na razmatramo fizičke aspekte tih rezultata pošto su jednodimenzionalne strukture praktično neinteresantne sa fizičkog stanovišta. Ipak, treba istaći da je rezultat dobijen uz zanemarivanje činjenice da u molekularnim kristalima postoji jaka anizotropija i privilegovani pravci koji se javljaju kao rezultat činjenice da dipol-dipolna interakcija ne zavisi samo od rastojanja izmedju dipola, već i od uglova koje dipoli izmedju sebe zaklapaju. Moguće je, prema tome, da se interferentna pobudjenja pojave u trodimenzionalnim strukturama duž njihovih pravaca anizotropije koji predstavljaju jednodimenzionalne strukture. Potvrda njihovog postojanja budućom analizom mogla bi biti važna za primjenu u fizici.

S druge strane jednodimenzionalne strukture i analiza pojava u njima mogu da imaju veliki praktični značaj u biofizici i makromolekularnoj fizici jer makromolekule i mnoge biološke strukture predstavljaju jednodimenzionalne lance molekula. Spomenućemo zato biofizičke aspekte dobijenih rezultata.

Na prvom mjestu treba napomenuti da je eksitonski mehanizam vrlo specifičan pošto eksitonska interferentna pobudjenja u opsegu temperatura koji odgovara živim organizmima pokazuju jako izraženu zavisnost transportnih osobina od vrste svjetlosti s kojom su eksitoni stvoreni. Na tim temperaturama se u slučaju dipolnih magnona ne može uopšte govoriti o postojanju interferentnih pobudjenja, dok transportne osobine interferentnih pobudjenja koja odgovaraju angularnih fononima ispoljavaju temperaturnu stabilnost transportnih osobina u spomenutoj oblasti temperatura.

Ovi zaključci koji se odnose na eksitone u skladu su sa idejama Szent Györgyja [50, 51, 53] koji je predskazao specifičnu ulogu eksitonskog mehanizma u biološkim sistemima, tj. u živoj materiji. On je istakao da se prenos impulsa, energije, informacija itd. vrši po "šavovima", tj. po jednodimenzionalnim lancima.

Ukoliko pobudjenja nastala interferencijom eksitonskih struja uopšte igraju neku ulogu u biološkim procesima, **onda** se, s obzirom na male brzine prenosa i transformisanja, ta uloga odnosi na rast, razvoj i neke genetske poruke jer su to dugotrajni procesi. Osim toga već je napomenuto da bilo kakvo narušenje simetrije ili toplotne ravnoteže vodi do akumuliranja interferentnih pobudjenja što može prouzrokovati bitne kvalitativne promjene molekula koje su na tim mjestima locirane, pa zato nije nemoguće očekivati da bi i karcinom mogao nastati kao posljedica akumuliranja interferentnih pobudjenja. Ova pobudjenja sigurno ne mogu da budu odgovorna za nervne impulse i biološke struje čija je brzina daleko veća od one koja karakteriše eksitonska interferentna pobudjenja.

U bržim biološkim procesima u živim organizmima nego što su genetski mogla bi eventualno učestvovati interferentna pobudjenja izazvana strujama angularnih fonona.

III.2. Reperkusije nelinearnih efekata na interakciju struja - struja

U prethodnom paragrafu ukazano je na ulogu koju u biološkim procesima, tačnije u transportnim procesima u bioorganizmima, igraju interferentna pobudjenja izazvana interakcijom dvaju eksitonskih struja. U razmatranjima koja su tu provedena korišten je hamiltonijan sistema eksitona u harmonijskoj aproksimaciji, što je ispravno samo pri vrlo niskim koncentracijama. Naime, samo ako pretpostavimo da je koncentracija pobudjenja mala sistem pauliona je ekvivalentan sistemu neinteragirajućih bozona čiji je hamiltonijan u harmonijskoj aproksimaciji dat sa (III.1.1). Medjutim, pri relativno visokim koncentracijama interakcija elementarnih pobudjenja ne može se zanemariti pa u takvim slučajevima metoda ASQ koja vodi na eksitonski hamiltonijan (III.1.1) očigledno nije primjenjiva. Tada je potrebno u hamiltonijanu eksitona osim kvadratičnih uzeti i članove višeg reda, tj. uključiti dinamičku interakciju.

U ovom paragrafu razmotrićemo posljedice nelinearnih, odnosno anharmonijskih efekata na interakciju kvazičestičnih struja. Pri tom ćemo se ograničiti na koncentracije kvazičestica koje nisu suviše visoke, tako da proračune možemo provoditi s tačnošću do članova proporcionalnih s prvim stepenom koncentracije.

Hamiltonijan sistema eksitona uzećemo u obliku

$$H=\Delta\sum_{\vec{n}} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}\vec{m}} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{m}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} P^+_{\vec{m}} P_{\vec{m}} \tag{III.2.1}$$

Ovdje su P^+_n i P_n operatori stvaranja i poništavanja eksitona koji zadovoljavaju komutacione relacije za Pauli operatore. Δ je energija ekscitacije izolirane molekule. Matrični elementi rezonantne interakcije $\alpha_{\vec{n}\vec{m}}$ i $\beta_{\vec{n}\vec{m}}$, mogu biti pozitivni i negativni i zadovoljavaju uslove

$$\alpha_{\vec{n}\vec{m}}=\alpha_{\vec{m}\vec{n}}; \quad \beta_{\vec{n}\vec{m}}=\beta_{\vec{m}\vec{n}}; \quad \alpha_{\vec{n}\vec{n}}=\beta_{\vec{n}\vec{n}}=0$$

Koeficijent $\alpha_{\vec{n}\vec{m}}$ karakteriše prelaz pobudjenja s molekule $\vec{n}$ na molekulu $\vec{m}$, odnosno transfer eksitona sa čvora na čvor, dok $\beta_{\vec{n}\vec{m}}$ opisuje dinamičku interakciju.

Članovi hamiltonijana koji sadrže PP i P^+P^+ izostavljeni su jer, kako je pokazano u [7], daju mal doprinos energiji.

Ako predjemo u impulsni prostor pomoću transformacije

$$P_{\vec{n}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} P_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

$$\alpha_{\vec{n}\vec{m}}=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}$$

$$\beta_{\vec{n}\vec{m}}=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}$$

hamiltonijan (III.2.1) ima oblik

$$H=\Delta\sum_{\vec{k}} P_{\vec{k}} P_{\vec{k}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} P^+_{\vec{k}} P_{\vec{k}} + \frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} \beta_{\vec{k}_1-\vec{k}_3} P^+_{\vec{k}_1} P^+_{\vec{k}_2} P_{\vec{k}_3} P_{\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \tag{III.2.2}$$

Pri tom Fourierove komponente Pauli operatora zadovoljavaju slijedeće komutacione relacije

$$\left[P_{\vec{k}}, P_{\vec{q}}^{+}\right] = \delta_{\vec{k}\vec{q}} - \frac{2}{N}\sum_{\vec{\mu}} P_{\vec{q}+\vec{\mu}}^{+} P_{\vec{k}+\vec{\mu}}$$

$$\left[P_{\vec{k}}, P_{\vec{q}}\right] = \left[P_{\vec{k}}^{+}, P_{\vec{q}}^{+}\right] = 0 \qquad \text{(III.2.3)}$$

uz dopunski uslov

$$\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} P_{\vec{q}_1+\vec{q}_2} P_{\vec{q}_1+\vec{\mu}} P_{\vec{q}_2+\vec{\nu}} = 0 \quad \text{za svako } \mu \text{ i } \nu .$$

Za odredjivanje energetskog spektra eksitona koristićemo se metodom Greenovih funkcija. Polazimo od jednačine kretanja

$$E \langle\langle P_{\vec{k}} | P_{\vec{k}}^{+} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \mathcal{K} + \langle\langle \left[P_{\vec{k}}, H\right] | P_{\vec{k}}^{+} \rangle\rangle_E \qquad \text{(III.2.4)}$$

gdje je

$$\mathcal{K} = \langle \left[P_{\vec{k}}, P_{\vec{k}}^{+}\right] \rangle = 1 - \frac{2}{N}\sum_{\vec{\mu}} \langle P_{\vec{k}+\vec{\mu}}^{+} P_{\vec{k}+\vec{\mu}} \rangle$$

Koristeći se sa (III.2.2) i (III.2.3) jednačinu (III.2.4) možemo napisati u obliku

$$E \langle\langle P_{\vec{k}} | P_{\vec{k}}^{+} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \mathcal{K} + (\Delta + \tfrac{1}{2}\alpha_{\vec{k}}) \langle\langle P_{\vec{k}} | P_{\vec{k}}^{+} \rangle\rangle -$$

$$- \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} (\alpha_{\vec{q}_2-\vec{q}_1+\vec{k}} - \beta_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}) \langle\langle P_{\vec{q}_2}^{+} P_{\vec{q}_1} P_{\vec{q}_2-\vec{q}_1+\vec{k}} | P_{\vec{k}}^{+} \rangle\rangle_E \qquad \text{(III.2.5)}$$

Da bismo Greenovu funkciju višeg reda u poslednjoj jednačini sveli na Greenove funkcije nižeg reda primjenom Wickove teoreme za bozone, prethodno ćemo u (III.2.5) sa Pauli operatora preći na Bose operatore korištenjem relacije (II.3.7)

$$P_{\vec{k}} = B_{\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} B_{\vec{q}_1}^{+} B_{\vec{q}_2} B_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}$$

Nakon dekuplovanja primjenom Wickove teoreme, s tačnošću do prvog stepena koncentracije, nalazi se da je

$$\langle\langle P_{\vec{k}} | P_{\vec{k}}^{+} \rangle\rangle = (1 - 4C_o) \langle\langle B_{\vec{k}} | B_{\vec{k}}^{+} \rangle\rangle \qquad \text{(III.2.6)}$$

gdje je

$$C_o = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \langle B_{\vec{q}}^{+} B_{\vec{q}} \rangle_o$$

i

$$\langle\langle P^+_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_1} P_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} | P^+_{\vec{k}} \rangle\rangle = \langle B^+_{\vec{q}_2} B_{\vec{q}_2} \rangle_0 (\delta_{\vec{q}_1\vec{q}_2} + \delta_{\vec{q}_1\vec{k}}) \langle\langle B_{\vec{k}} | B^+_{\vec{k}} \rangle\rangle \tag{III.2.7}$$

Zamjenom (III.2.6) i (III.2.7) u (III.2.5) za bozonsku Greenovu funkciju se dobija

$$\langle\langle B_{\vec{k}} | B^+_{\vec{k}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \mathcal{K} \frac{1+2C_0}{E-E_{\vec{k}}} \tag{III.2.8}$$

gdje je energija eksitona $E_{\vec{k}}$ odredjena sa

$$E_{\vec{k}} = E^{(0)}_{\vec{k}} - M(\vec{k})$$

$$E^{(0)}_{\vec{k}} = \Delta + \tfrac{1}{2}\alpha_{\vec{k}} \tag{III.2.9}$$

$$M(\vec{k}) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \langle B^+_{\vec{q}} B_{\vec{q}} \rangle_0 (\alpha_{\vec{k}} + \alpha_{\vec{q}} - \beta_0 - \beta_{\vec{k}-\vec{q}})$$

Nakon razvoja koeficijenata ovisnih o vektoru k do četvrtog stepena po k, zamjene $\langle B^+_{\vec{q}} B_{\vec{q}} \rangle_0$ sa $(e^{E^{(0)}_{\vec{q}}/\theta} - 1)^{-1}$ i integriranja korištenjem formule (II.3.14) nalazi se da se u aproksimaciji najbližih susjeda zakon disperzije eksitona može napisati u obliku

$$E_{\vec{k}} = E^{harm.}_{\vec{k}} + E^{anh.}_{\vec{k}} \tag{III.2.10}$$

Harmonijski članovi potiču samo iz kvadratnog dijela hamiltonijana po Pauli operatorima

$$E^{harm.}_{\vec{k}} = E^{(0)}_{\vec{k}} = \Delta + 3\alpha - \tfrac{1}{2}\alpha a^2 k^2 + \tfrac{1}{24}\alpha a^4 k^4 A_{\vec{k}} \tag{III.2.11}$$

gdje je

$$A_{\vec{k}} = \cos^4\varphi_{\vec{k}} \sin^4\theta_{\vec{k}} + \sin^4\varphi_{\vec{k}} \sin^4\theta_{\vec{k}} + \cos^4\theta_{\vec{k}}$$

Ako zadržimo samo članove do trećeg stepena temperature anharmonijska korekcija energije je

$$E^{anh}_{\vec{k}} = Z_{3/2}(12 - a^2k^2)(\beta-\alpha)\tau^{3/2} + Z_{5/2}\, 3\pi(\beta-\alpha)\tau^{5/2} \tag{III.2.12}$$

gdje je

$$Z_p = Z_p\left(\frac{\Delta_0}{\theta}\right), \quad Z_p(x) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\frac{x}{\theta}} n^{-p}$$

$$\tau = \left(-\frac{\theta}{2\pi\alpha}\right), \quad \Delta_0 = \Delta + 3\alpha$$

Prilikom odredjivanja zakona disperzije pretpostavljeno je da je efektivna masa eksitona pozitivna ($\alpha < 0$), kao i da je dinamička interakcija privlačna ($\beta < 0$).

Razmotrićemo sada uslove pod kojim za sistem eksitona s hamiltonijanom (III.2.1) vrijedi statistički ekvivalent jednačine kontinuiteta. Operator gustoće struje vjerovatnosti je u ovom slučaju

$$\vec{j}_{\vec{a}} = \frac{\hbar}{2mi}\left[P^+_{\vec{a}} \nabla_{\vec{a}} P_{\vec{a}} - P_{\vec{a}} \nabla_{\vec{a}} P^+_{\vec{a}}\right] \qquad \text{(III.2.13)}$$

Da bismo ispitali osobine ovog operatora postupićemo slično kao u III.1., tj. analiziraćemo simetriziranu Greenovu funkciju

$$G_{\vec{a}-\vec{b}}(t-t') = \frac{\hbar}{4mi}\Big\{\langle\langle P^+_{\vec{b}}(t') | \nabla_{\vec{a}} P_{\vec{a}}(t)\rangle\rangle - \langle\langle P_{\vec{a}}(t) | \nabla_{\vec{b}} P^+_{\vec{b}}(t')\rangle\rangle +$$

$$+ \langle\langle \nabla_{\vec{a}} P_{\vec{a}}(t) | P^+_{\vec{b}}(t')\rangle\rangle - \langle\langle \nabla_{\vec{b}} P^+_{\vec{b}}(t') | P_{\vec{a}}(t)\rangle\rangle\Big\} \qquad \text{(III.2.14)}$$

Nakon Fourierove transformacije prostor - impuls i vrijeme - - energija i inverznih transformacija nalazimo

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{\hbar\vec{k}}{2m}\left\{\langle\langle P_{\vec{k}} | P^+_{\vec{k}}\rangle\rangle_E + \langle\langle P_{\vec{k}} | P^+_{\vec{k}}\rangle\rangle_{-E}\right\}$$

odnosno primjenom relacija (III.2.6) i (III.2.8)

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{\hbar\vec{k}}{2m}\frac{i}{2\pi}(1-2C_0)\left\{\frac{1}{E-E_{\vec{k}}} + \frac{1}{E+E_{\vec{k}}}\right\} \qquad \text{(III.2.15)}$$

tako da je srednja vrijednost gustoće struje

$$\langle \vec{j}_{\vec{k}} \rangle = \frac{\hbar\vec{k}}{2m}(1-2C_0)\,\mathrm{ctgh}\,\frac{E_{\vec{k}}}{2\theta} \qquad \text{(III.2.16)}$$

Na isti način se nalazi da je srednja vrijednost gustoće vjerovatnosti

$$\langle \rho_{\vec{k}} \rangle = (1-2C_0)\,\mathrm{ctgh}\,\frac{E_{\vec{k}}}{2\theta} \qquad \text{(III.2.17)}$$

tako da je jednačina kontinuiteta za srednje vrijednosti operatora

$$E_{\vec{k}}\langle \rho_{\vec{k}}\rangle - \hbar \vec{k}\langle \vec{J}_{\vec{k}}\rangle = 0$$

zadovoljena samo za slobodne čestice. Prema tome za sistem eksitona sa zakonom disperzije (III.2.10) jednačina kontinuiteta se narušava a to, kao što je istaknuto u paragrafu III.1., znači mogućnost stvaranja dopunskih pobudjenja. S obzirom da se ta nova pobudjenja mogu eventualno javiti samo kao rezultat interferencije struja primarnih pobudjenja, analiziraćemo moguće efekte interakcije eksitonskih struja pomoću Greenove funkcije tipa struja - struja

$$\Gamma_{\vec{a}-\vec{b}}(t-t') = \langle\langle \vec{j}_{\vec{a}}(t) | \vec{j}_{\vec{b}}(t') \rangle\rangle \tag{III.2.18}$$

($\vec{a}$ i $\vec{b}$ su vektori kristalne rešetke).

Korištenjem (III.2.13) i uslova homogenosti prostora nalazimo da je Fourierov lik Greenove funkcije (III.2.18)

$$\begin{aligned}\Gamma_{\vec{k}}(E) = \frac{\hbar^2}{4m^2N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\Big[&\langle\langle P^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}P_{\vec{q}_1} | P^+_{\vec{q}_2}P_{\vec{q}_2-\vec{k}}\rangle\rangle_E\, \vec{q}_1(\vec{q}_2-\vec{k}) + \\ &+\langle\langle P_{\vec{q}_1+\vec{k}}P^+_{\vec{q}_1} | P_{\vec{q}_2}P^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}\rangle\rangle_E\, \vec{q}_1(\vec{q}_2+\vec{k}) + \\ &+\langle\langle P^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}P_{\vec{q}_1} | P_{\vec{q}_2}P^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}\rangle\rangle_E\, \vec{q}_1(\vec{q}_2+\vec{k}) + \\ &+\langle\langle P_{\vec{q}_1+\vec{k}}P^+_{\vec{q}_1} | P^+_{\vec{q}_2}P_{\vec{q}_2-\vec{k}}\rangle\rangle_E\, \vec{q}_1(\vec{q}_2-\vec{k})\Big]\end{aligned} \tag{III.2.19}$$

Jednačina za prvu Greenovu funkciju iz (III.2.19) je

$$E\langle\langle P^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}P_{\vec{q}_1} | P^+_{\vec{q}_2}P_{\vec{q}_2-\vec{k}}\rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\tau_1 + \langle\langle \left[P^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}P_{\vec{q}_1}, H\right] | P^+_{\vec{q}_2}P_{\vec{q}_2-\vec{k}}\rangle\rangle \tag{III.2.20}$$

gdje je

$$\tau_1 = \langle \left[P^+_{\vec{q}_1-\vec{k}}P_{\vec{q}_1},\; P^+_{\vec{q}_2}P_{\vec{q}_2-\vec{k}}\right]\rangle$$

a H je hamiltonijan sistema eksitona dat izrazom (III.2.2), tako da se nakon nalaženja komutatora dobija

$$\left[E-\frac{1}{2}(\alpha_{\vec q_1}-\alpha_{\vec q_1-\vec k})\right]\langle\langle P^+_{\vec q_1-\vec k}P_{\vec q_1}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle=\frac{i}{2\pi}\tau_1-$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2}(\alpha_{\vec q_1-\vec k}-\beta_{\vec k_2})\langle\langle P^+_{\vec q_1-\vec k}P^+_{\vec k_1-\vec k_2}P_{\vec k_1}P_{\vec q_1-\vec k_2}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle+$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2}(\alpha_{\vec q_1-\vec k-\vec k_2}-\beta_{\vec k_2})\langle\langle P^+_{\vec q_1-\vec k-\vec k_2}P^+_{\vec k_1}P_{\vec k_1-\vec k_2}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle \tag{III.2.21}$$

Greenove funkcije na desnoj strani ove jednačine dekuplovaćemo primjenom Wickove teoreme. Iako se Wickova teorema primjenjuje za svodjenje samo bozonskih Greenovih funkcija višeg reda na Greenove funkcije nižeg reda, ovdje nećemo prelaziti sa Pauli na Bose operatore. Može se pokazati da time ne činimo grešku s obzirom da sva razmatranja provodimo u aproksimaciji do prvog stepena koncentracije. Na taj način dobijamo

$$\langle\langle P^+_{\vec q_1-\vec k}P^+_{\vec k_1-\vec k_2}P_{\vec k_1}P_{\vec q_1-\vec k_2}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle=$$

$$=\langle P^+_{\vec q_1-\vec k-\vec k_2}P_{\vec k_1-\vec k_2}\rangle_0\,\delta_{\vec k_1,\vec q_1-\vec k}\langle\langle P^+_{\vec k_1}P_{\vec q_1}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle+$$

$$+\langle P^+_{\vec q_1-\vec k-\vec k_2}P_{\vec q_1}\rangle_0\,\delta_{\vec q_1-\vec k}\langle\langle P^+_{\vec k_1}P_{\vec k_1-\vec k_2}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle+$$

$$+\langle P^+_{\vec k_1}P_{\vec k_1-\vec k_2}\rangle_0\,\delta_{\vec k_2,0}\langle\langle P^+_{\vec q_1-\vec k-\vec k_2}P_{\vec q_1}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle+$$

$$+\langle P^+_{\vec k_1}P_{\vec q_1}\rangle_0\,\delta_{\vec k_1,\vec q_1}\langle\langle P^+_{\vec q_1-\vec k-\vec k_2}P_{\vec k_1-\vec k_2}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle$$

i analogan izraz za

$$\langle\langle P^+_{\vec q_1-\vec k-\vec k_2}P^+_{\vec k_1}P_{\vec k_1-\vec k_2}P_{\vec q_1}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle$$

Iz (III.2.21) tada nalazimo

$$\langle\langle P^+_{\vec q_1-\vec k}P_{\vec q_1}|P_{\vec q_2}P^+_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle=\frac{i}{2\pi}\,\frac{\tau_1}{E-(E_{\vec q_1}-E_{\vec q_1-\vec k})}+$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{\vec k_1}\frac{\langle\langle P^+_{\vec k_1-\vec k}P_{\vec k_1}|P^+_{\vec q_2}P_{\vec q_2-\vec k}\rangle\rangle}{E-(E_{\vec q_1}-E_{\vec q_1-\vec k})}\Big\{\bar N_{\vec q_1}(\alpha_{\vec k_1-\vec k}-\beta_{\vec q_1-\vec k_2}+\alpha_{\vec q_1}-\beta_{\vec k})+$$

$$+\bar N_{\vec q_1-\vec k}(\beta_{\vec q_1-\vec k}-\alpha_{\vec k_1}+\beta_{\vec k}-\alpha_{\vec q_1-\vec k})\Big\} \tag{III.2.22}$$

Ovu jednačinu rješavamo iteracijom i dobijamo da je

$$\langle\langle P^+_{\vec{q}-\vec{k}} P_{\vec{q}_1} | P^+_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_2-\vec{k}} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{\tau_1}{E-(E_{\vec{q}_1}-E_{\vec{q}_1-\vec{k}})} \left[1+\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1} \frac{f_1(\vec{q}_1,\vec{k}_1,\theta)}{E-(E_{\vec{k}_1}-E_{\vec{k}_1-\vec{k}})} \right]$$

(III.2.23)

gdje je

$$f_1(\vec{q}_1,\vec{k}_1,\theta) = \bar{N}_{\vec{q}_1}(\alpha_{\vec{k}_1-\vec{k}}-\beta_{\vec{q}_1-\vec{k}_1}+\alpha_{\vec{q}_1}-\beta_{\vec{k}})+$$
$$+\bar{N}_{\vec{q}_1-\vec{k}}(\beta_{\vec{q}_1-\vec{k}_1}-\alpha_{\vec{k}_1}+\beta_{\vec{k}}-\alpha_{\vec{q}_1-\vec{k}}) \qquad \text{(III.2.24)}$$

Na isti način nalazimo i ostale Greenove funkcije iz (III.2.19)

$$\langle\langle P_{\vec{q}_1+\vec{k}} P^+_{\vec{q}_1} | P_{\vec{q}_1} P^+_{\vec{q}_2+\vec{k}} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{\tau_2}{E-(E_{\vec{q}_1+\vec{k}}-E_{\vec{q}_1})} \left[1+\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1} \frac{f_2(\vec{q}_1,\vec{k}_1,\theta)}{E-(E_{\vec{k}_1+\vec{k}}-E_{\vec{k}_1})} \right]$$

$$\langle\langle P^+_{\vec{q}_1-\vec{k}} P_{\vec{q}_1} | P_{\vec{q}_2} P^+_{\vec{q}_2+\vec{k}} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{\tau_3}{E-(E_{\vec{q}_1}-E_{\vec{q}_1-\vec{k}})} \left[1+\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1} \frac{f_1(\vec{q}_1,\vec{k}_1,\theta)}{E-(E_{\vec{k}_1}-E_{\vec{k}_1-\vec{k}})} \right]$$

$$\langle\langle P_{\vec{q}_1+\vec{k}} P^+_{\vec{q}_1} | P^+_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}-\vec{k}} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{\tau_4}{E-(E_{\vec{q}_1+\vec{k}}-E_{\vec{q}_1})} \left[1+\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1} \frac{f_2(\vec{q}_1,\vec{k}_1,\theta)}{E-(E_{\vec{k}_1+\vec{k}}-E_{\vec{k}_1})} \right]$$

gdje je

$$f_2(\vec{q}_1,\vec{k}_1,\theta) = \bar{N}_{\vec{q}_1+\vec{k}}(\alpha_{\vec{k}_1}+\alpha_{\vec{q}_1+\vec{k}}-\beta_{\vec{k}}-\beta_{\vec{q}_1-\vec{k}_1})+$$
$$+\bar{N}_{\vec{q}_1}(\beta_{\vec{k}}-\alpha_{\vec{q}_1}+\beta_{\vec{q}_1-\vec{k}_1}-\alpha_{\vec{k}_1+\vec{k}}) \qquad \text{(III.2.25)}$$

Ako komutacione relacije za Pauli operatore približno zamjenimo komutatorima za Bose operatore, tj. stavimo

$$\tau_1 = \langle [P^+_{\vec{q}_1-\vec{k}} P_{\vec{q}_1}, P^+_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_2-\vec{k}}] \rangle = \delta_{\vec{q}_1,\vec{q}_2}(\bar{N}_{\vec{q}-\vec{k}}-\bar{N}_{\vec{q}_1})$$

$$\tau_2 = \langle [P_{\vec{q}_1+\vec{k}} P^+_{\vec{q}_1}, P_{\vec{q}_2} P^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}] \rangle = \delta_{\vec{q}_1,\vec{q}_2}(\bar{N}_{\vec{q}_1}-\bar{N}_{\vec{q}_1+\vec{k}})$$

$$\tau_3 = \langle [P^+_{\vec{q}_1-\vec{k}} P_{\vec{q}_1}, P_{\vec{q}_2} P^+_{\vec{q}_2+\vec{k}}] \rangle = \delta_{\vec{q}_1,\vec{q}_2+\vec{k}}(\bar{N}_{\vec{q}_1-\vec{k}}-\bar{N}_{\vec{q}_1})$$

$$\tau_4 = \langle [P_{\vec{q}_1+\vec{k}} P^+_{\vec{q}_1}, P^+_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_2-\vec{k}}] \rangle = \delta_{\vec{q}_2,\vec{q}_1+\vec{k}}(N_{\vec{q}_1}-N_{\vec{q}_1+\vec{k}})$$

iz (III.2.19) konačno nalazimo

$$\Gamma_{\vec{k}}(E)=\frac{\hbar}{4m^2N}\frac{i}{2\pi}\sum_{\vec{q}}\left\{\frac{(\bar{N}_{\vec{q}-\vec{k}}-\bar{N}_{\vec{q}})\vec{q}(2\vec{q}-\vec{k})}{E-(E_{\vec{q}}-E_{\vec{q}-\vec{k}})}\left[1+\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{f_1(\vec{q},\vec{k}_1,\theta)}{E-(E_{\vec{k}_1}-E_{\vec{k}_1-\vec{k}})}\right]+\right.$$

$$\left.+\frac{(\bar{N}_{\vec{q}}-\bar{N}_{\vec{q}+\vec{k}})\vec{q}(2\vec{q}+\vec{k})}{E-(E_{\vec{q}+\vec{k}}-E_{\vec{q}})}\left[1-\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{f_2(\vec{q},\vec{k}_1,\theta)}{E-(E_{\vec{k}_1+\vec{k}}-E_{\vec{k}_1})}\right]\right\} \tag{III.2.26}$$

Da bismo vidjeli da li dvije eksitonske struje svojom interferencijom daju nova pobudjenja provešćemo integriranje po $\vec{q}$ u Greenovoj funkciji (III.2.26). Polovi te funkcije, ako postoje, daju energije interferentnih pobudjenja.

S obzirom da je u aproksimaciji efektivne mase

$$E^{(0)}_{\vec{k}}=E^{harm.}_{\vec{k}}=\Delta_0+\frac{\hbar^2k^2}{2m}\,,\quad m=-\frac{\hbar^2}{\alpha a^2}$$

a da, kao i u III.1., analizu vršimo na temperaturama za koje je

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m}\ll\theta\ll\Delta_0$$

srednji broj eksitona u stanju k odredjen je sa

$$\bar{N}_k=\left(e^{\frac{\Delta_0}{\theta}+\frac{\hbar^2k^2}{2m\theta}}-1\right)^{-1}\approx e^{-\frac{\Delta_0}{\theta}}\left[1-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right] \tag{III.2.27}$$

Uz ovu aproksimaciju i uz uslov $\mu_0\gg k$ (μ_0 je granični vektor prve Brilloninove zone), nalazi da je Greenova funkcija $\Gamma_{\vec{k}}(E)$ u slučaju trodimenzionalne kristalne rešetke nema realnih polova ni za jedno E, što znači da se ne javljaju interferentna pobudjenja. U slučaju jednodimenzionalne rešetke za Greenovu funkciju dobijamo izraz

$$\Gamma_k(E)=\frac{i}{2\pi}\frac{C_k(\theta)}{E^2-\tilde{E}_k^2} \tag{III.2.28}$$

gdje je

$$C_k(\theta)=\frac{\hbar^2\mu_0^4k^2}{9m^4\theta}e^{-\frac{\Delta_0}{\theta}}\Phi \tag{III.2.29}$$

$$\tilde{E}_k=\frac{\hbar^2\mu_0k}{\sqrt{3}\,m}\Phi\left\{\frac{1-2e^{-\frac{\Delta_0}{\theta}}\Phi^{-1}\left[1+\frac{3\pi^2}{10\theta}(\alpha-2\beta)\right]}{1+2e^{-\frac{\Delta_0}{\theta}}\Phi^{-1}\left[1+\frac{\pi^2}{10\theta}(\alpha-\frac{2}{3}\beta)-\frac{2(\alpha-\beta)}{\theta}\right]}\right\}^{\frac{1}{2}} \tag{III.2.30}$$

$$\Phi = 1 - 2\frac{\alpha - \beta}{\alpha} Z_{3/2}\left(\frac{\Delta_0}{\Theta}\right)\left(-\frac{\Theta}{2\pi\alpha}\right)^{3/2}$$

Slijedi da u slučaju jednodimenzionalne kristalne rešetke dvije eksitonske struje svojom interferencijom stvaraju nove kvazičestice čiji je zakon disperzije linearan i dat sa (III.2.30).

Očito je da se ako je temperatura niska izraza (III.2.29) i (III.2.30) svode na odgovarajuće izraze (III.1.28) i (III.1.29) u harmonijskoj kvazičestičnoj aproksimaciji. Naravno i u harmonskoj aproksimaciji smo vidjeli da interferentna pobudjenja mogu da nastanu samo na temperaturama različitim od nule.

Proračuni pokazuju da anharmonijski efekti dovode do vrlo malih korekcija energije interferentnih pobudjenja. Na temperaturama koje odgovaraju živim organizmima anharmonijski efekti gotovo ne utječu na zakon disperzije interferentnih pobudjenja pa to opravdava primjenu harmonijske kvazičestične aproksimacije prilikom analize transportnih procesa u bioorganizmima.

IV POKUŠAJ MIKROTEORIJSKE ANALIZE PROCESA VIĐENJA

IV.1. O mehanizmima koji djeluju u procesu viđenja

U ovoj glavi disertacije pokušaćemo da analiziramo neke fizičke procese koji bi mogli da imaju značaja za mikroteorijsko objašnjenje procesa viđenja.

Prije nego što pristupimo fizičkoj teoriji za koju očekujemo da bi mogla da da izvjesne ideje u vezi sa procesima u oku navešćemo neke osnovne fizičke i fizičko-hemijske karakteristike oka da bismo mogli da ukažemo na moguće aplikacije teorijskih razmatranja koja će biti izvršena u ovoj glavi.

Funkcionalno najvažniji dio oka je retina (mrežnjača). U njoj se odigravaju različiti fizički i hemijski procesi. Histološko ispitivanje retine pokazuje da je formirana iz dva koncentrična dijela: pigmentnog epitela i optičkog dijela. Optički dio retine sastoji se iz devet slojeva u kojima su tri fundamentalna tipa ćelija: fotoreceptorske, asocijativne i ganglijske. Glavni dio fotoreceptorskih ćelija su nastavci citoplazme koji su zbog svog oblika dobili nazive štapići i čunjići (čepići). Oni su u stvari modificirane živčane ćelije i mogu se smatrati dijelom nervnog sistema. Njihovi vanjski segmenti su osjetljivi na svjetlost. Štapići funkcionišu po slabom svjetlu pa služe za razlikovanje svjetla i tame, dok čunjići funkcionišu na jakom svjetlu i odgovorni su za gledanje boja. (Više o građi retine kao i cijelog oka može se naći na primjer u [54] i [55]).

Da bi svjetlost došla do fotosenzibilnih spoljašnjih segmenata štapića i čunjića, ona mora proći kroz unutrašnje slojeve ćelija (asocijativne i ganglijske) kao i kroz tijela samih fotoreceptora pa ove ćelije, prema tome, moraju biti prozračne za svjetlost.

Spoljašnji segmenti štapića i čunjića sadrže složene lipoproteinske materije-pigmente. Oni su dosta istraživani, ali problem kako molekula pigmenta inicira reakciju na pobuđenje još nije riješen. Poznato je da pigmenti imaju osobinu da selektivno apsorbuju dijelove vidljivog spektra pa je zato glavni problem u razmatranju procesa viđenja određivanje kako molekule pigmenta nakon apsorpcije fotona izazivaju reakciju, odnosno nervne impulse.

Pigment iz štapića je izolovan i zove se rodopsin. Pod uticajem svjetlosti rodopsin prelazi u nepostojan spoj limirodopsin koji se dalje automatski razlaže prolazeći kroz nekoliko stadija dok se rodopsin opet ne obnovi, odnosno dolazi do disocijacije i regeneracije molekula rodopsina. Slični fotohemijski procesi vrše se i u čunjićima. Prema Young-Helmoltzovoj teoriji [55] u njima postoje tri tipa vidnih pigmenata koji su osjetljivi na svjetlost pojedinih talasnih dužina - crvenu, zelenu i plavu. Ostale boje koje vidimo zavise od relativnog broja tri vrste čunjića koji su stimulisani.

Eksperimentalno je zapaženo da postoji potencijalna razlika između prednjeg pozitivnog i zadnjeg negativnog dijela oka. Čak i kada oko nije obasjano svjetlošću registruje se razlika potencijala od oko 6-8 mV [56], taj potencijal se naziva potencijalom mrežnjače. Nastaje od potencijala koji se stvaraju u fotoreceptorskim i asocijativnim ćelijama retine kao posljedica različitih koncentracije neorganskih jona s dvije strane dielektrične ćelijske membrane, odnosno u tkivnoj tečnosti i citoplazmi. Ako se oko naglo osvijetli, pojavljuje se niz promjena u potencijalu mrežnjače koje je moguće registrirati elektroretinogramom.

Na taj način se može reći da fotoreceptori svjetlosnu energiju pretvaraju u električnu. Međutim uloga molekula pigmenata u tom procesu nije još sasvim poznata. Prema jonskoj teoriji promjena potencijala retine je direktna posljedica različitih koncentracija jona produkata raspada molekula. Ova teorija je poslednjih godina napuštena. Vjeruje se da se uloga pigmenta sastoji u promjeni permeabiliteta ćelijske membrane, što dozvoljava prolaz jona i prouzrokuje depolarizaciju membrane spoljašnjih segmenata štapića i čunjića. Javljaju se lokalne struje koje teku prema mjestu nadražaja iz susjednih oblasti, koje tako postaju depolarizovane. Na mjestu depolarizacije dolazi do trenutne ponovne polarizacije. Na taj način se duž površine ćelije prostire val depolarizacije i repolarizacije, odnosno uspostavlja se nervni impuls. To se ispoljava kao akcioni potencijal, tj. brza promjena električnog potencijala retine pri njenoj depolarizaciji i ponovnoj polarizaciji.

Prema tome može se reći da se proces viđenja odvija kroz slijedeće stadije: apsorpcija svjetlosti, fotohemijske reakcije, promjena permeabiliteta membrane i na kraju promjena potencijala retine.

Treba napomenuti da je uočeno da nakon apsorpcije fotona prođe nekoliko milisekundi prije nego što poteče jonska struja. Međutim poslednjih godina je upotrebom veoma intenzivnog snopa svjetlosti dobijen potencijal koji nema primjetno kašnjnje u odnosu na svjetlost i koji je, za razliku od akcionog potencijala o kome je bilo riječi, nazvan rani receptorski potencijal [57]. Traje nekoliko ms, amplituda mu je linearno proporcionalna s brojem molekula. Maksimalnu vrijednost dostiže kada je energija svjetlosti upravo dovoljna da zasiti pigment. Polaritet i vremenska promjena ranog receptorskog potencijala, koji potiče od rodopsina i njegovih međuspojeva, ukazuje da je taj potencijal posljedica reverzibilnih promjena distribucije naelektrisanja unutar samih molekula.

Kao što je već rečeno dipolni potencijal oka je oko 6-8 mV. Na osnovu ovog pokušaćemo da izračunamo broj dipola u jedinici zapremine oka. Da bismo ovu vrijednost procjenili naći ćemo prvo srednji dipol oka vodeći računa o tome da je oko grubo posmatrano amorfna sredina, da dipoli nisu svi uređeni kao u kristalu, pa da prema tome treba izračunati raspored dipola i iz tog rasporeda srednji dipol na osnovu zahtjeva da energija dipol-dipol interakcije bude minimalna.

S obzirom da je eksperimentalno uočeno da potencijal oka potiče od mrežnjače, odnosno od onog njenog dijela koji sadrži fotoreceptorske ćelije, taj dio mrežnjače ćemo razmatrati kao sistem električnih dipola. Uzećemo da su svi dipoli istog intenziteta. Stavimo referentni dipol $\vec{\mathcal{D}}_0$ u kordinatni početak i usmjerimo ga duž z ose. Neka se na kraju vektora $\vec{r} = r(\vec{i}\sin\theta\cos\varphi + \vec{j}\sin\theta\sin\varphi + \vec{k}\cos\theta)$ nalazi dipol $\vec{\mathcal{D}} = \mathcal{D}(\vec{i}\sin\beta\cos\alpha + \vec{j}\sin\beta\sin\alpha + \vec{k}\cos\beta)$, pri čemu su uglovi α i β funkcije vektora $\vec{r}$. Tada interakciju dipola $\vec{\mathcal{D}}_0$ i $\vec{\mathcal{D}}$

$$W(\vec{r}) = \frac{\vec{\mathcal{D}}_0\vec{\mathcal{D}}}{r^3} - \frac{3(\vec{r}\vec{\mathcal{D}})(\vec{r}\vec{\mathcal{D}}_0)}{r^5} \qquad \text{(IV.1.1)}$$

možemo predstaviti kao

$$W(\vec{r}) = \frac{\mathcal{D}^2}{r^3}\left[(1-3\cos^2\theta)\cos\beta - \frac{3}{2}\sin 2\theta\cos(\alpha-\varphi)\sin\beta\right]$$

Ako W predstavimo kao funkciju od α i β uslov ekstrema interakcije svodi se na sistem

$$\frac{\partial W}{\partial\alpha} = \frac{3\mathcal{D}^2}{2r^3}\sin 2\theta\sin\beta\sin(\alpha-\varphi) = 0$$

$$\frac{\partial W}{\partial\beta} = -\frac{\mathcal{D}^2}{r^3}\left[(1-3\cos^2\theta)\sin\beta + \frac{3}{2}\sin 2\theta\cos(\alpha-\varphi)\cos\beta\right] = 0$$

čije je rješenje

$$\alpha = \varphi\,, \quad \mathrm{tg}\,\beta = \frac{3\sin\theta\cos\theta}{3\cos^2\theta-1} \qquad \text{(IV.1.2)}$$

pa je tada ekstremalna interakcija dipola

$$W_M(\vec{r}) = -\frac{\mathfrak{D}^2}{r^3}\sqrt{1+3\cos^2\theta} \qquad \text{(IV.1.3)}$$

Ukupni dipolni moment nalazimo kao

$$\vec{\mathfrak{D}} = \int d^3\vec{r}\,\vec{\mathfrak{D}}(\vec{r})$$

Za dipol $\vec{\mathfrak{D}}(\vec{r})$ postavljen tako da je interakcija minimalna na osnovu (IV.1.2) je

$$\vec{\mathfrak{D}} = \int d^3\vec{r}\,\mathfrak{D}\left[\vec{i}\cos\varphi\,\frac{3\sin\theta\cos\theta}{\sqrt{3\cos^2\theta+1}} + \right.$$

$$\left. + \vec{j}\sin\varphi\,\frac{3\sin\theta\cos\theta}{\sqrt{3\cos^2\theta+1}} + \vec{k}\,\frac{3\cos^2\theta-1}{\sqrt{3\cos^2\theta+1}}\right]$$

što se nakon integriranja svodi na

$$\vec{\mathfrak{D}} = \vec{k}\mathfrak{D}\,\frac{4\pi}{3}(R_2^3-R_1^3)\left[1-\frac{\sqrt{3}}{2}\ln\frac{\sqrt{3}+1}{\sqrt{3}-1}\right]. \qquad \text{(IV.1.4)}$$

gdje su R_1 i R_2 unutrašnji i spoljašnji radijus dipolnog sloja mrežnjače.

Oko kao amorfni medijum nema svojstvo translacione invarijantnosti. Međutim na osnovu (IV.1.4) zaključujemo da taj sistem haotično raspoređenih dipola možemo zamjeniti sa uređenom strukturom-kristalom, pri čemu je intenzitet efektivnog dipolnog momenta približno jednak 14% od stvarnog.

Ako se za procjenu dipolnog potencijala oka koristimo jednostavnim relacijama $V=Ed$ i $E=\frac{\varepsilon}{\mathfrak{D}R^3}$, uzimajući u obzir rezultat (IV.1.4), nalazimo da se broj dipola u jedinici zapremine može izračunati iz približne relacije

$$n = \frac{\varepsilon R V}{4\pi d^2 \mathfrak{D}\cdot 0{,}14}$$

gdje je ε dielektrična konstanta, V potencijal mrežnjače, $\mathfrak{D}$ srednja vrijednost jednog dipola oka, a R i d srednji radijus i debljina razmatranog dijela mrežnjače. Uzimajući $\varepsilon \approx 80$, $\mathfrak{D} \approx 10^{-18}$ statC cm, $R\approx 1{,}2$ cm, $d\approx 0{,}1$ mm, nalazimo da je $n \approx 1{,}25\cdot 10^{19}$.

Osim toga što eksperimentalne činjenice pokazuju da oko ima ukupni dipolni moment različit od nule, pretpostavićemo da ima i neke magnetne osobine i da se može opisati hamiltonijanom Heisenbergovog modela. Razmatranja, analogna onim koja su provedena za sistem električnih dipola, pokazuju da u ovom slučaju ekstrem interakcije odgovara paralelno postavljenim spinovima, što znači da oko možemo tertirati kao izotropnu magnetnu sredinu.

Prema tome pokušaćemo da damo osnove mikroteorije procesa viđenja razmatrajući oko kao sistem električnih i magnetnih dipola, uzimajući uz to u obzir da atomi i molekule vrše stalne oscilacije oko svojih ravnotežnih položaja. Pri tom ćemo smatrati da u složenoj strukturi kao što je oko postoji τ vrsta molekula (atoma), odnosno razmatraćemo ekvivalentni kristal sa τ podrešetki. Pretpostavićemo da su sve rešetke optički i magnetno aktivne. Znači da svjetlost kojom ozračujemo oko pobuđuje u njemu eksitone. Tako stvoreni eksitoni interaguju sa poljem upadne svjetlosti, a ta interakcija pošto sadrži kvadratne članove sa po jednim eksitonskim i jednim fotonskim operatorom dovodi do hibridizacije optičkih pobuđenja. Osim toga, s obzirom da atomi i molekule vrše pomake iz svojih ravnotežnih položaja, javljaju se mehanička pobuđenja-fononi, koji isto tako interaguju sa eksitonima. Budući da uzimamo u obzir i magnetne osobine oka interakcija svjetlosti sa spinskim podsistemom dovodi takođe do hibridizacije i promjene svojstava i magnona i fotona. Konačno možemo reći da su realno postojeće ekscitacije "smjesa" eksitona, magnona, fotona i fonona, tj. hibridizirane ekscitacije koje imaju osobine svih tih pobuđenja. Na taj način se osim eksiton-fonon, eksiton-foton i magnon-foton interakcija, o kojima je bilo riječi, može govoriti i o magnon-eksiton odnosno magnon-fonon interakciji. Znači da se može govoriti o povezanosti dielektričnih, magnetnih i mehaničkih osobina razmatranog sistema koji se sastoji od oka i upadne svjetlosti.

Iz svega što je rečeno moguće je zaključiti da je za formiranje mikroteorije viđenja neophodno prvo formulirati modelni hamiltonijan za oko, a zatim na bazi tog hamiltonijana naći vezu između mjerljivih veličina: magnetnog i dipolnog momenta i mehaničkog pomaka. Prilikom formuliranja hamiltonijana razmatramo, kao što je već napomenuto, sistem koji sadrži spinske valove, eksitone, fonone i transverzalne fotone, a osim toga uzimamo u obzir interakciju između spinskih valova i fotona, između eksitona i fotona, kao i između eksitona i fonona.

IV.2. Magneto-optičko-mehanički fenomeni koji se hipotetički mogu dešavati u oku prilikom apsorpcije svjetlosti

Hamiltonijan spinskog podsistema

Budući da umjesto oka razmatramo ekvivalentnu složenu kristalnu rešetku koja se sastoji iz N elementarnih ćelija sa po τ magnetoaktivnih molekula (atoma), radijus-vektor svakog spina možemo predstaviti kao

$$\vec{r}_g = \vec{n} + \vec{\varrho}_\theta(\vec{n}) \ , \ (g \equiv n\theta) \ , \quad \theta = 1,2,\ldots \tau \tag{IV.2.1}$$

$\vec{n}$ je radijus-vektor elementarne ćelije kristala, a indeks θ označava atome u elementarnoj ćeliji. Smatraćemo da vrijednosti spina i magnetnog momenta atoma zavise samo od vrste atoma, označavamo ih sa S_θ i μ_θ.

Pretpostavićemo da se spinski podsistem može opisati hamiltonijanom Heisenbergovog modela

$$H_s = -\sum_g \mu_g \vec{\mathcal{H}}_g \vec{\sigma}_g - \frac{1}{2}\sum_{gg'} \mathcal{J}_{gg'} \vec{\sigma}_g \vec{\sigma}_{g'} \tag{IV.2.2}$$

$$\mathcal{J}_{gg'} = \mathcal{J}_{g'g} \equiv \mathcal{J}_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}')$$

Ovdje je $\vec{\mathcal{H}}_g = \vec{\mathcal{H}}$ konstantno spoljašnje magnetno polje, $\vec{\sigma}_g$ su spinski operatori, a $\mathcal{J}_{gg'}$ integrali izmjenske interakcije.

Stabilizaciju hamiltonijana (IV.2.2) izvršićemo prelaskom na nove spinske operatore $\vec{S}$ pomoću transformacije

$$\sigma_g^a = \gamma_\theta^a S_g^z + \mathcal{A}_\theta^a S_g^+ + \mathcal{A}_\theta^{*a} S_g^- , \quad a = x,y,z \tag{IV.2.3}$$

Iz uslova unitarnosti ove transformacije

$$\sum_a (\sigma^a)^2 = \sum_a (S^a)^2$$

i iz zahtjeva da komutacione relacije za komponente spina moraju biti sačuvane nalazi se da vektori $\vec{\gamma}, \vec{\mathcal{A}}$ i $\vec{\mathcal{A}}^*$ zadovoljavaju slijedeće uslove

$$\vec{\gamma}_\theta^2 = 1 , \quad \vec{\gamma}_\theta = \vec{\gamma}_\theta^* , \quad \vec{\mathcal{A}}_\theta \vec{\mathcal{A}}_\theta^* = \frac{1}{2} , \quad \vec{\mathcal{A}}_\theta^2 = 0$$

$$\vec{\gamma}_\theta \vec{\mathcal{A}}_\theta = 0 \qquad \vec{\gamma}_\theta \times \vec{\mathcal{A}} = i \vec{\mathcal{A}}_\theta$$

$$\vec{\mathcal{A}}_\theta \times \vec{\mathcal{A}}_\theta^* = \frac{i}{2} \vec{\gamma}_\theta \quad , \; |\mathcal{A}_\theta^a|^2 = \frac{1}{4}\left[1 - (\gamma_\theta^a)^2\right]$$

Nakon zamjene (IV.2.3) u (IV.2.2) hamiltonijan H_S se može napisati u obliku

$$H_S = H_S^{(0)} + H_S^{(1)} + H_S^{(2)} + H_S^{(3)} + H_S^{(4)} \tag{IV.2.4}$$

gdje je

$$H_S^{(0)} = -N\left\{ \sum_{\theta a} \mu_\theta S_\theta \mathcal{H}^a \gamma_\theta^a + \frac{1}{2} \sum_{\theta\theta' a} S_\theta S_{\theta'} J_{\theta\theta'}^{(0)} \gamma_\theta^a \gamma_{\theta'}^a \right\}$$

$$H_S^{(1)} = -\sum_{\vec{n}\theta a} \mathcal{A}_\theta^{*a} \left[\mu_\theta \mathcal{H}^a + \sum_{\theta'} S_{\theta'} J_{\theta\theta'}^{(0)} \gamma_{\theta'}^a \right] S_{\vec{n}\theta}^- -$$

$$- \sum_{\vec{n}\theta a} \mathcal{A}_\theta^a \left[\mu_\theta \mathcal{H}^a + \sum_{\theta'} S_{\theta'} J_{\theta\theta'}^{(0)} \gamma_{\theta'}^a \right] S_{\vec{n}\theta}^+$$

$$H_S^{(2)} = \sum_{\vec{n}\theta a} \gamma_\theta^a \left[\mu_\theta \mathcal{H}^a + \sum_{\theta'} S_{\theta'} J_{\theta\theta'}^{(0)} \gamma_{\theta'}^a \right] (S_\theta - S_{\vec{n}\theta}^z) -$$

$$- \sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta' a} J_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}') \mathcal{A}_\theta^{*a} \mathcal{A}_{\theta'}^a S_{\vec{n}\theta}^- S_{\vec{n}'\theta'}^+ -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta' a} \Big[J_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}') \mathcal{A}_\theta^{*a} \mathcal{A}_{\theta'}^{*a} S_{\vec{n}\theta}^- S_{\vec{n}'\theta'}^- +$$

$$+ J_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}') \mathcal{A}_\theta^a \mathcal{A}_{\theta'}^a S_{\vec{n}'\theta'}^+ S_{\vec{n}\theta}^+ \Big]$$

$$H_S^{(3)}=\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta' a} J_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}')\left[\mathcal{A}_\theta^{*a}\gamma_{\theta'}^{a}S_{\vec{n}\theta}^{-}(S_{\theta'}-S_{\vec{n}'\theta'}^{z})+\mathcal{A}_\theta^{a}\gamma_{\theta'}^{a}(S_{\theta'}-S_{\vec{n}'\theta'}^{z})S_{\vec{n}\theta}^{+}\right]$$

$$H_S^{(4)}=-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta' a} J_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}')\gamma_\theta^{a}\gamma_{\theta'}^{a}(S_\theta-S_{\vec{n}\theta}^{z})(S_{\theta'}-S_{\vec{n}'\theta'}^{z})$$

$$J_{\theta\theta'}(0)=\sum_{\vec{l}} J_{\theta\theta'}(\vec{l}) \ , \quad \vec{l}=\vec{n}-\vec{n}'$$

Stabilizacija hamiltonijana (IV.2.4) vrši se tako što se traži minimum energije osnovnog stanja $H_S^{(0)}$ uz dopunski uslov

$$\sum_a (\gamma_\theta^a)^2-1=0 \tag{IV.2.5}$$

Na taj način se nalazi slijedeći sistem jednačina koje određuju γ_θ^a i Lagrangeove multiplikatore λ_θ

$$\mu_\theta \mathcal{H}^a+\sum_{\theta'} S_{\theta'} J_{\theta\theta'}(0)\gamma_{\theta'}^a=\lambda_\theta\gamma_\theta^{a*} \tag{IV.2.6}$$

$$a=x,y,z \ ; \qquad \theta=1,2,\dots\tau$$

Tada je $H_S^{(1)}=0$, a energija osnovnog stanja je

$$H_S^{(0)}=-N\left[\sum_\theta S_\theta\lambda_\theta-\frac{1}{2}\sum_{\theta\theta' a} S_\theta S_{\theta'} J_{\theta\theta'}(0)\gamma_\theta^a\gamma_{\theta'}^a\right] \tag{IV.2.7}$$

U daljim analizama ćemo koristiti samo kvadratični dio stabilizovanog hamiltonijana koji izražen preko Bose operatora $B_{\vec{n}\theta}$ u Blochovoj aproksimaciji

$$S_{\vec{n}\theta}^{+}=\sqrt{2S_\theta}\,B_{\vec{n}\theta} \ , \quad S_\theta-S_{\vec{n}\theta}^{z}=B_{\vec{n}\theta}^{+}B_{\vec{n}\theta}$$

ima oblik

$$H_S^{(2)}=\sum_{\vec{n}\theta}\lambda_\theta B_{\vec{n}\theta}^{+}B_{\vec{n}\theta}-\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta'} J_{\theta\theta'}^{(1)}(\vec{n}-\vec{n}')B_{\vec{n}\theta}^{+}B_{\vec{n}\theta'}-$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta'}\left[J_{\theta\theta'}^{(2)}(\vec{n}-\vec{n}')B_{\vec{n}\theta}^{+}B_{\vec{n}'\theta'}^{+}+C.C.\right] \tag{IV.2.8}$$

gdje je

$$\mathfrak{J}^{(1)}_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}') = 2\sum_a \mathfrak{J}_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}')\overset{*}{\mathcal{A}}{}^a_\theta \mathcal{A}^a_{\theta'}$$

$$\mathfrak{J}^{(2)}_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}') = 2\sum_a \mathfrak{J}_{\theta\theta'}(\vec{n}-\vec{n}')\mathcal{A}^a_\theta \mathcal{A}^a_{\theta'}$$

Dijagonalizaciju hamiltonijana (IV.2.8) vršimo pomoću dvije kanonske transformacije. Prvo vršimo Fourierovu transformaciju

$$B_{\vec{n}\theta} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} B_\theta(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\vec{n}} \tag{IV.2.9}$$

a zatim prelazimo na nove Bose operatore β_ν kanonskom transformacijom

$$B_\theta(\vec{k}) = \sum_\nu \left[u^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k})\beta_\nu(\vec{k}) + \overset{*}{v}{}^{(S)}_{\theta\nu}(-\vec{k})\beta^+_\nu(-\vec{k})\right] \tag{IV.2.10}$$

pri čemu koeficijenti transformacije zadovoljavaju slijedeće uslove kanoničnosti i postojanja inverzne transformacije

$$\sum_\nu \left[u^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k})\overset{*}{u}{}^{(S)}_{\theta'\nu}(\vec{k}) - \overset{*}{v}{}^{(S)}_{\theta\nu}(-\vec{k})v^{(S)}_{\theta'\nu}(-\vec{k})\right] = \delta_{\theta\theta'}$$

$$\sum_\theta \left[u^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k})\overset{*}{u}{}^{(S)}_{\theta\nu'}(\vec{k}) - v^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k})\overset{*}{v}{}^{(S)}_{\theta\nu'}(\vec{k})\right] = \delta_{\nu\nu'}$$

$\nu,\ \nu' = 1,2,\ldots\tau$

Tada hamiltonijan (IV.2.8) postaje

$$H^{(2)}_S = \sum_{\vec{k}\nu} E^{(S)}_\nu(\vec{k})\beta^+_\nu(\vec{k})\beta_\nu(\vec{k}) \tag{IV.2.11}$$

Energije spinskih valova $E^{(S)}_\nu(\vec{k})$ kao i transformacione funkcije $u^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k})$ i $v^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k})$ određene su sistemom jednačina

$$E^{(S)}_\nu(\vec{k})u^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k}) = \sum_{\theta'=1}^{\tau}\left\{\left[\lambda_\theta\delta_{\theta\theta'} - \mathfrak{J}^{(1)}_{\theta\theta'}(\vec{k})\right]u^{(S)}_{\theta'\nu}(\vec{k}) - \overset{*}{\mathfrak{J}}{}^{(2)}_{\theta\theta'}(\vec{k})v^{(S)}_{\theta'\nu}(\vec{k})\right\}$$

$$-E^{(S)}_\nu(\vec{k})v^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k}) = \sum_{\theta'=1}^{\tau}\left\{-\mathfrak{J}^{(2)}_{\theta\theta'}(\vec{k})u^{(S)}_{\theta'\nu}(\vec{k}) + \left[\lambda_\theta\delta_{\theta\theta'} - \overset{*}{\mathfrak{J}}{}^{(1)}_{\theta\theta'}(\vec{k})\right]v^{(S)}_{\theta'\nu}(\vec{k})\right\}$$

(IV.2.12)

Hamiltonijan eksitonskog podsistema

Izvešćemo sada opšti eksitonski hamiltonijan u harmonijskoj aproksimaciji. Za razliku od I.glave gdje smo se ograničili na dvonivosku šemu i jednu molekulu u elementarnoj ćeliji, ovdje razmatramo slučaj multinivoske šeme i τ molekula (atoma) u ćeliji. Pretpostavićemo da upadna svjetlost može pobuđivati molekule sredine u stanja $f = 0,1,\ldots F$, pri čemu su f skupovi kvantnih brojeva koji karakterišu stanja elektronskog podsistema, 0 označava osnovno stanje. Pretpostavićemo da je ovaj skup isti za svako θ . Takođe pretpostavljamo da kristal ima centar inverzije i da se ovaj poklapa s centrom inverzije svake molekule.

Polazimo od hamiltonijana elektronskog podsistema koji se može napisati u obliku

$$H_\varepsilon = \sum_{fg} E_g(f)\alpha_g^+(f)\alpha_g + \frac{1}{2}\sum_{\substack{gg' \\ f,f',f'',f'''}} \Phi_{gg'}(ff'f''f''')\alpha_g^+(f)\alpha_g(f')\alpha_{g'}^+(f'')\alpha_{g'}(f''') \tag{IV.2.13}$$

$$f, f', f'', f''' = 0,1,2,\ldots F$$

Veličine $E_g(f) = E_\theta(f)$ su vlastite vrijednosti hamiltonijana izolovane molekule

$$H_g\Psi_f(\vec{\xi}_g) = E_g(f)\Psi_f(\vec{\xi}_g)$$

gdje je $\vec{\xi}_g = \vec{\xi}_\theta$ skup unutrašnjih koordinata molekule na mjestu g, a $\alpha_g^+(f)$ i $\alpha_g(f)$ su Fermi operatori stvaranja i poništavanja elektrona na mjestu g u stanju f. Veličine $\Phi_{gg'}(f\,f'\,f''\,f''')$ su matrični elementi operatora dipol-dipolne interakcije

$$V_{gg'} = \frac{e^2}{|\vec{\rho}_g - \vec{\rho}_{g'}|^3}\left\{\vec{\xi}_g\,\vec{\xi}_{g'} - 3\,\frac{[(\vec{\rho}_g - \vec{\rho}_{g'})\vec{\xi}_g][(\vec{\rho}_g - \vec{\rho}_{g'})\vec{\xi}_{g'}]}{|\vec{\rho}_g - \vec{\rho}_{g'}|^2}\right\}$$

u bazisu koji čine funkcije $\Psi_f(\vec{\xi}_g)$, tj.

$$\Phi_{gg'}(f,f',f'',f''') =$$

$$= \int d^3\vec{\xi}_g\, d^3\vec{\xi}_{g'}\,\Psi_f^*(\vec{\xi}_g)\,\Psi_{f''}^*(\vec{\xi}_{g'})\,V_{gg'}\,\Psi_{f'''}(\vec{\xi}_{g'})\,\Psi_{f'}(\vec{\xi}_g)$$

Zbog slabog prekrivanja valnih funkcija molekula hamiltonijan (IV.2.13) zatvoren je u podprostoru fermionskih stanja koji je definiran uslovom

$$\sum_{f=0}^{F} \alpha_g^+(f)\alpha_g(f) = 1 \tag{IV.2.14}$$

Zahvaljujući ovoj činjenici možemo uvesti kvazi-Pauli operatore

$$\mathcal{P}_g^+(f) = \alpha_g^+(f)\,\alpha_g(0)\ , \qquad \mathcal{P}_g(f) = \alpha_g^+(0)\,\alpha_g(f) \tag{IV.2.15}$$

koji stvaraju i poništavaju pobuđenja tipa $f \neq 0$ na molekuli g. Iz komutacionih relacija za Fermi iperatore $\alpha_g(f)$ i uslova (IV.2.14) nalazimo da kvazi-Pauli operatori zadovoljavaju slijedeće komutacione relacije [5]

$$\begin{aligned}
&\left[\mathcal{P}_g(f), \mathcal{P}_{g'}^+(f')\right] = \left\{\left[1 - \sum_{f'=1}^{F} \mathcal{P}_g^+(f')\mathcal{P}_g(f')\right]\delta_{ff'} - \mathcal{P}_g^+(f')\mathcal{P}_g(f)\right\}\delta_{gg'} \\
&\left[\mathcal{P}_g(f), \mathcal{P}_{g'}(f')\right] = \left[\mathcal{P}_g^+(f), \mathcal{P}_{g'}^+(f')\right] = 0 \\
&\mathcal{P}_g(f)\mathcal{P}_g(f') = \mathcal{P}_g^+(f)\mathcal{P}_g^+(f') = 0 \\
&\mathcal{P}_g(f)\mathcal{P}_g^+(f') = 0
\end{aligned} \tag{IV.2.16}$$

Osim toga vrijede relacije

$$\begin{aligned}
&\alpha_g^+(f)\alpha_g(f') = \mathcal{P}_g^+(f)\mathcal{P}_g(f')\ , \quad f, f' \neq 0 \\
&\alpha_g^+(0)\alpha_g(0) = 1 - \sum_{f=1}^{F} \mathcal{P}_g^+(f)\mathcal{P}_g(f)
\end{aligned} \tag{IV.2.17}$$

Hamiltonijan (IV.2.13) izrazićemo preko kvazi-Pauli operatora. Prvi član je

$$\sum_{gf} E_g(f)\alpha_g^+(f)\alpha_g(f) = \sum_g \left[E_g(0)\alpha_g^+(0)\alpha_g(0) + \sum_{f=1}^{F} E_g(f)\alpha_g^+(f)\alpha_g(f)\right] =$$

$$= N\sum_{\theta=1}^{\tau} E_\theta(0) + \sum_{\vec{n}} \sum_{\theta=1}^{\tau} \sum_{f=1}^{F} \left[E_\theta(f) - E_\theta(0)\right]\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}^+(f)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f)$$

U drugom članu hamiltonijana (IV.2.13) izdvojićemo prvo članove kod kojih je jedan, dva, tri ili četiri indeksa f jednako nuli, tako da će svi indeksi f po kojima se sumira biti različiti od nule. Pri tom će svi članovi sa neparnim brojem indeksa f različitih od nule biti ravni nuli, jer su tada zbog postojanja centra inverzije matrični elementi $\Phi_{gg'}$ jednaki nuli [58]. U preostalim članovima preći ćemo sa Fermi operatora na kvazi-Pauli operatore ali ćemo pri tom, pošto se zadržavamo na harmonijskoj aproksimaciji, odbacivati produkte sa četiri kvazi-Pauli operatora. Na taj način nalazimo

$$\frac{1}{2}\sum_{gg'}\Phi_{gg'}(0000)\alpha_g^+(0)\alpha_g(0)\alpha_{g'}^+(0)\alpha_g(0)\approx$$

$$\approx\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta'}\Phi_{\vec{n}-\vec{n}'}^{\theta\theta'}(0000)-\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta'}\Phi_{\vec{n}-\vec{n}'}^{\theta\theta'}(0000)\sum_{f=1}^{F}\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}^+(f)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f)$$

$$\frac{1}{2}\sum_{gg'ff'}\Phi_{gg'}(ff'00)\alpha_g^+(f)\alpha_g(f')\alpha_{g'}^+(0)\alpha_g(0)\approx$$

$$\approx\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta'}\sum_{ff'=1}^{F}\Phi_{\vec{n}-\vec{n}'}^{\theta\theta'}(ff'00)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}^+(f)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f')$$

$$\frac{1}{2}\sum_{gg'f''f'''}\Phi_{gg'}(00f''f''')\alpha_g^+(0)\alpha_g(0)\alpha_{g'}^+(f'')\alpha_{g'}(f''')\approx$$

$$\approx\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta'}\sum_{ff'}\Phi_{\vec{n}-\vec{n}'}^{\theta\theta'}(00ff')\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}^+(f)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f')$$

$$\frac{1}{2}\sum_{gg'ff''}\Phi_{gg'}(f0f''0)\alpha_g^+(f)\alpha_g(0)\alpha_{g'}^+(f'')\alpha_{g'}(0)=$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{nn'\theta\theta'}\sum_{ff'}\Phi_{\vec{n}\vec{n}'}^{\theta\theta'}(f0f'0)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}^+(f)\,\mathcal{P}_{\vec{n}'\theta'}^+(f')$$

$$\frac{1}{2}\sum_{gg'f'f'''}\Phi_{gg'}(0f'0f''')\alpha_g^+(0)\alpha_g(f')\alpha_{g'}^+(0)\alpha_{g'}(f''')=$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta'}\sum_{ff'}\Phi_{\vec{n}\vec{n}'}^{\theta\theta'}(0f0f')\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f')\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f)$$

$$\frac{1}{2}\sum_{gg'ff'''}\Phi_{gg'}(f00f''')\alpha_g^+(f)\alpha_g(0)\alpha_{g'}^+(0)\alpha_{g'}(f''') =$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta'}\sum_{ff'}\Phi_{\vec{n}-\vec{n}'}^{\theta\theta'}(f00f')\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}^+(f)\mathcal{P}_{\vec{n}'\theta'}(f')$$

$$\frac{1}{2}\sum_{gg'f'f''}\Phi_{gg'}(0f'f''0)\alpha_g^+(0)\alpha_g(f')\alpha_{g'}^+(f'')\alpha_{g'}(0) =$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta'}\sum_{ff'}\Phi_{\vec{n}-\vec{n}'}^{\theta\theta'}(0f'f0)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}^+(f)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta'}(f')$$

Kvazi-Pauli operatori se mogu na slijedeći način izraziti preko Bose operatora [5]

$$\mathcal{P}_g(f)=\left[1-\sum_{f'\neq 0,f}^{F}Z_g(f')\right]Y_g^{\frac{1}{2}}(f)\mathcal{B}_{\vec{n}\theta}(f)$$

$$Z_g(f)=\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}\mathcal{B}_g^{+\nu+1}(f)\mathcal{B}_g^{\nu+1}(f)$$

$$Y_g(f)=\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}\mathcal{B}_g^{+\nu}(f)\mathcal{B}_g^{\nu}(f)$$

U najnižoj aproksimaciji koja je dozvoljena na niskim temperaturama kada je koncentracija kvazičestica mala, može se uzeti da je

$$\mathcal{P}_g\approx\mathcal{B}_g\,,\quad \mathcal{P}_g^+\approx\mathcal{B}_g^+ \tag{IV.2.18}$$

gdje su $\mathcal{B}_g$ Bose operatori, pa hamiltonijan eksitonskog podsistema u harmonijskoj aproksimaciji ima oblik

$$H_E=H_E^{(0)}+H_E^{(2)}$$

gdje je

$$H_E^{(0)}=N\sum_{\theta}\left[E_{\theta}(0)+\frac{1}{2}\mathcal{L}_{\theta}(0000)\right] \tag{IV.2.19}$$

i

$$H_E^{(2)}=\sum_{\vec{n}\theta ff'}\Delta_{\theta}(f)\mathcal{B}_{\vec{n}\theta}^+(f)\mathcal{B}_{\vec{n}\theta}(f)+\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta' ff'}X_{\vec{n}-\vec{n}'}^{\theta\theta'}(ff')\mathcal{B}_{\vec{n}\theta}^+(f)\mathcal{B}_{\vec{n}\theta'}(f')+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{n}'\theta\theta' ff'}\Big[\Phi^{\theta\theta'}_{\vec{n}\vec{n}'}(f0f'0)\mathcal{B}^{+}_{\vec{n}\theta}(f)\mathcal{B}^{+}_{\vec{n}'\theta'}(f')+$$

$$+\Phi^{\theta\theta'}_{\vec{n}-\vec{n}}(0f0f')\mathcal{B}_{\vec{n}'\theta'}(f')\mathcal{B}_{\vec{n}\theta}(f)\Big] \qquad \text{(IV.2.20)}$$

$$\Delta_{\theta}(f)=E_{\theta}(f)-E_{\theta}(0)-\mathcal{L}_{\theta}(0000)+\frac{1}{2}\Big[\mathcal{L}_{\theta}(ff00)+\mathcal{L}_{\theta}(00ff)\Big]$$

$$X^{\theta\theta'}_{\vec{n}-\vec{n}'}(ff')=\frac{1}{2}\Big\{\Phi^{\theta\theta'}_{\vec{n}\vec{n}'}(f00f')+\Phi^{\theta\theta'}_{\vec{n}\vec{n}}(0f'f0)+$$

$$+\Big[\mathcal{L}_{\theta}(ff'00)+\mathcal{L}_{\theta}(00ff')\Big]\delta_{\vec{n}\vec{n}'}(1-\delta_{ff'})\Big\}$$

$$\mathcal{L}_{\theta}(ff'f''f''')=\sum_{\vec{l}\theta'}\Phi^{\theta\theta'}_{\vec{l}}(ff'f''f'''),\qquad \vec{l}=\vec{n}-\vec{n}'$$

Poslije Fourierove transformacije

$$\mathcal{B}_{\vec{n}\theta}(f)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}}\mathcal{B}_{\theta f}(\vec{k})e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

hamiltonijan $H_E^{(2)}$ postaje

$$H_E^{(2)}=\sum_{\vec{k}\theta\theta' ff'}\Big[M^{\theta\theta'}_{ff'}(\vec{k})\mathcal{B}^{+}_{\theta f}(\vec{k})\mathcal{B}_{\theta' f'}(\vec{k})+\frac{1}{2}N^{\theta\theta'}_{ff'}(\vec{k})\mathcal{B}_{\theta' f'}(\vec{k})\mathcal{B}_{\theta f}(-\vec{k})+$$

$$+\frac{1}{2}N^{*\theta\theta'}_{ff'}(\vec{k})\mathcal{B}^{+}_{\theta f}(\vec{k})\mathcal{B}^{+}_{\theta' f'}(-\vec{k})\Big] \qquad \text{(IV.2.21)}$$

gdje je

$$M^{\theta\theta'}_{ff'}(\vec{k})=\Delta_{\theta}(f)\delta_{\theta\theta'}\delta_{ff'}+\sum_{\vec{l}}X^{\theta\theta'}_{\vec{l}}(ff')e^{i\vec{k}\vec{l}}$$

$$N^{\theta\theta'}_{ff'}(\vec{k})=\sum_{\vec{l}}\Phi^{\theta\theta'}_{\vec{l}}(0f0f')e^{i\vec{k}\vec{l}}$$

Budući da razmatramo hamiltonijan u harmonijskoj aproksimaciji eliminaciju članova hamiltonijana (IV.2.21) koji dovode do neodržanja broja eksitona u sistemu možemo izvršiti primjenom u-v transformacije, odnosno prelazom na nove Bose operatore $\widetilde{\mathcal{B}}_{\theta\mu}(\vec{k})$ smjenom

$$\mathcal{B}_{\theta f}(\vec{k})=\sum_{\mu=1}^{F}\left\{u_{f\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)\tilde{\mathcal{B}}_{\theta\mu}(\vec{k})+\overset{*}{v}{}_{f\mu}^{(\beta)}(-\vec{k},\theta)\tilde{\mathcal{B}}_{\theta\mu}^{+}(-\vec{k})\right\} \qquad (IV.2.22)$$

pri čemu funkcije $u^{(\beta)}$ i $v^{(\beta)}$ zadovoljavaju uslove kanoničnosti

$$\sum_{\mu=1}^{F}\left\{u_{f\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)\,\overset{*}{u}{}_{f'\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)-\overset{*}{v}{}_{f\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)\,v_{f'\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)\right\}=\delta_{ff'}$$

i postojanja inverzne transformacije

$$\sum_{f=1}^{F}\left\{u_{f\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)\,\overset{*}{u}{}_{f\mu'}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)-\overset{*}{v}{}_{f\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)\,v_{f\mu'}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)\right\}=\delta_{\mu\mu'}$$

Harmonijski eksitonski hamiltonijan može se sada izraziti kao

$$H_{\varepsilon}^{(2)}=\sum_{k\theta\theta'\mu}\Psi_{\theta\theta'}(\vec{k},\mu)\tilde{\mathcal{B}}_{\theta\mu}^{+}(\vec{k})\tilde{\mathcal{B}}_{\theta'\mu}(\vec{k}) \qquad (IV.2.23)$$

Funkcije $\Psi_{\theta\theta'}(\vec{k},\mu)$, $u_{f\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)$ i $v_{f\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)$ određuju se iz sistema jednačina

$$\Psi_{\theta\theta'}(\vec{k},\mu)\,u_{f\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)=\sum_{f'=1}^{F}\left\{M_{ff'}^{\theta\theta'}(\vec{k})\,u_{f'\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)+\overset{*}{N}{}_{ff'}^{\theta\theta'}(\vec{k})\,v_{f'\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)\right\}$$

$$-\Psi_{\theta\theta'}(\vec{k},\mu)\,v_{f\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)=\sum_{f'=1}^{F}\left\{N_{ff'}^{\theta\theta'}(\vec{k})\,u_{f'\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)+\overset{*}{M}{}_{ff'}^{\theta\theta'}(\vec{k})\,v_{f'\mu}^{(\beta)}(\vec{k},\theta)\right\}$$
$$(IV.2.24)$$

Sekularna jednačina sistema (IV.2.24) daje F rješenja $\Psi_{\theta\theta'}(\vec{k},\mu)$, $\mu=1,2,\dots F$, a za svako od njih dobiju se funkcije $u^{(\beta)}$ i $v^{(\beta)}$.

Dijagonalizacija hamiltonijana (IV.2.23) vršimo prelaskom na Bose operatore $C_{\mu\eta}(\vec{k})$ transformacijom

$$\tilde{\mathcal{B}}_{\theta\mu}(\vec{k})=\sum_{\eta}\Lambda_{\theta\eta}(\vec{k},\mu)\,C_{\mu\eta}(\vec{k})$$

$$\sum_{\eta}\Lambda_{\theta\eta}(\vec{k},\mu)\overset{*}{\Lambda}_{\theta'\eta}(\vec{k},\mu)=\delta_{\theta\theta'}, \quad \eta=1,2,\dots\tau \qquad (IV.2.25)$$

pa konačno dobijamo

$$H_\varepsilon^{(2)} = \sum_{\vec{k}\mu\eta} W_{\mu\eta}(\vec{k}) C_{\mu\eta}(\vec{k}) C_{\mu\eta}(\vec{k}) \qquad \text{(IV.2.26)}$$

$\mu = 1,2,\dots F \qquad \eta = 1,2,\dots \tau$

Eksitonske energije $W_{\mu\eta}(\vec{k})$ određene su sistemom jednačina

$$W_{\mu\eta}(\vec{k}) \Lambda_{\theta\eta}(\vec{k},\mu) = \sum_{\theta'=1}^{\tau} \Psi_{\theta\theta'}(\vec{k},\mu) \Lambda_{\theta'\eta}(\vec{k},\mu) \qquad \text{(IV.2.27)}$$

<u>Hamiltonijan elektromagnetnog polja</u>

U hamiltonijan elektromagnetnog polja u kristalu uključićemo i efekte retardacije, tako da možemo pisati

$$H_F^{(2)} = \frac{\tau \Omega_0}{8\pi} \sum_{\vec{n}} \left\{ \vec{\mathcal{E}}^2_{\vec{n}}(t) + \vec{\mathcal{H}}^2_{\vec{n}}(t) \right\} + \frac{\tau e^2}{2 m_e c^2} \sum_{\vec{n}} \vec{A}^2_{\vec{n}} \qquad \text{(IV.2.28)}$$

U ovoj formuli Ω_0 je zapremina elementarne ćelije, m_e je masa elektrona, a c brzina svjetlosti. $\vec{\mathcal{E}}_{\vec{n}}(t)$ i $\vec{\mathcal{H}}_{\vec{n}}(t)$ su električno i magnetno polje svjetlosti

$$\vec{\mathcal{E}}_{\vec{n}}(t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}_{\vec{n}}(t), \quad \vec{\mathcal{H}}_{\vec{n}}(t) = \mathrm{rot}\, \vec{A}_{\vec{n}}(t)$$

$$\mathrm{div}\, \vec{A}_{\vec{n}}(t) = 0 \qquad \text{(IV.2.29)}$$

Pošto se koristimo Coulombovom kalibracijom potencijala, (IV.2.28) je u stvari hamiltonijan polja transverzalnih fotona.

Vektorski potencijal $\vec{A}_{\vec{n}}$ usljed velike valne dužine svjetlosti (str. 104 iz [3]) zavisi samo od $\vec{n}$ a ne od θ i može se na slijedeći način izraziti preko fotonskih operatora $a_j(\vec{k})$ i $a^+_j(\vec{k})$

$$\vec{A}_{\vec{n}}(t) = \sum_{\vec{k}j} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{\tau N \Omega_0 k}}\, \vec{l}_j(\vec{k}) \Big[a_j(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{n} - i\omega_j(\vec{k})t} +$$

$$+ a^+_j(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{n} + i\omega_j(\vec{k})t} \Big], j = 1,2 \qquad \text{(IV.2.30)}$$

gdje je $\omega_j(\vec{k}) = ck$ frekvencija svjetlosti, a $\vec{l}_j(\vec{k})$ su vektori polarizacije.

Zamjenom (IV.2.30) i (IV.2.29) u (IV.2.28) dobijamo

$$H_F = H_F^{(0)} + H_F^{(2)}$$

$$H_F^{(0)} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}j} \hbar\omega_j(\vec{k}) \qquad \text{(IV.2.31)}$$

$$H_F^{(2)} = \sum_{\vec{k}j}\left[\hbar\omega_j(\vec{k}) + \hbar\tilde{\omega}_j(\vec{k})\right]a_j^+(\vec{k})a_j(\vec{k}) +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}j}\hbar\tilde{\omega}_j(\vec{k})\left[a_j^+(\vec{k})a_j^+(-\vec{k}) + a_j(-\vec{k})a_j(\vec{k})\right] \qquad \text{(IV.2.32)}$$

gdje je $\tilde{\omega}_j(k) = \frac{2\pi e^2}{\Omega_0 m_e c k}$

Nakon transformacije

$$a_j(\vec{k}) = u_j^{(F)}(\vec{k})\,\gamma_j(\vec{k}) + v_j^{(F)}(\vec{k})\,\gamma_j^+(-\vec{k})$$

$$\left[u_j^F(\vec{k})\right]^2 = \frac{1}{2}\left\{\frac{1+\tilde{\omega}_j(\vec{k})\,\omega_j^{-1}(\vec{k})}{\left[1+2\tilde{\omega}_j(\vec{k})\,\omega_j^{-1}(\vec{k})\right]^{\frac{1}{2}}} + 1\right\} \qquad \text{(IV.2.33)}$$

$$\left[v_j^F(\vec{k})\right]^2 = \frac{1}{2}\left\{\frac{1+\tilde{\omega}_j(\vec{k})\,\omega_j^{-1}(\vec{k})}{\left[1+2\tilde{\omega}_j(\vec{k})\,\omega_j^{-1}(\vec{k})\right]^{\frac{1}{2}}} - 1\right\}$$

hamiltonijan (IV.2.32) postaje dijagonalan i ima oblik

$$H_F^{(2)} = \sum_{\vec{k}j} E_j^{(F)}\,\gamma_j^+(\vec{k})\,\gamma_j(\vec{k}) \qquad \text{(IV.2.34)}$$

gdje je

$$E_j^{(F)}(\vec{k}) = \hbar\omega_j(\vec{k})\left[1+2\tilde{\omega}_j(\vec{k})\,\omega_j^{-1}(\vec{k})\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{(IV.2.35)}$$

Vektorski potencijal, električno i magnetno polje svjetlosti izraženi preko novih fotonskih operatora $\gamma_j(\vec{k})$ su

$$\vec{A}_{\vec{n}}(0) = \sum_{\vec{k}j} \left[u_j^{(F)}(\vec{k}) + v_j^{(F)}(\vec{k})\right] \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{\tau N \Omega_0 k}}\, \vec{l}_j(\vec{k}) \left[\gamma_j(\vec{k}) + \gamma_j^{+}(-\vec{k})\right] e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

$$\vec{\mathcal{E}}_{\vec{n}}(0) = \sum_{\vec{k}j} \left[u_j^{(F)}(\vec{k}) - v_j^{(F)}(\vec{k})\right] i \sqrt{\frac{2\pi\hbar k}{\tau N \Omega_0}}\, \vec{l}_j(\vec{k}) \left[\gamma_j(\vec{k}) - \gamma_j^{+}(-\vec{k})\right] e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

$$\vec{\mathcal{H}}_{\vec{n}}(0) = \sum_{\vec{k}j} \left[u_j^{(F)}(\vec{k}) + v_j^{(F)}(\vec{k})\right] i \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{\tau N \Omega_0 k}} \left[\vec{k} \times \vec{l}_j(\vec{k})\right] \left[\gamma_j(\vec{k}) + \gamma_j^{+}(-\vec{k})\right] e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

(IV.2.36)

Hamiltonijan fononskog podsistema

Hamiltonijan fononskog podsistema glasi

$$H_{\Phi} = H_{\Phi}^{(0)} + H_{\Phi}^{(2)}$$

$$H_{\Phi}^{(0)} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}\lambda} \hbar \Omega_{\lambda}(\vec{k})$$

$$H_{\Phi}^{(2)} = \sum_{\vec{k}\lambda} \hbar \Omega_{\lambda}(\vec{k})\, b_{\lambda}^{+}(\vec{k})\, b_{\lambda}(\vec{k}) , \qquad \text{(IV.2.37)}$$

$$\lambda = 1, 2, \ldots 3\tau$$

gdje je $\Omega_r(\vec{k}) = v_r k$ frekvencija fonona za r-tu granu oscilacija.

(IV.2.37) je u stvari poopštenje izraza (I.5.11) na slučaj molekula (atoma) u elementarnoj ćeliji.

Hamiltonijan interakcije spinskog podsistema sa elektromagnetnim poljem

Pretpostavićemo da se interakcija elektromagnetnog polja svjetlosti sa spinskim podsistemom može shvatiti kao interakcija magnetnih dipola sa tim poljem [60]. Riječ je o tzv. direktnoj interakciji koja se svodi na interakciju efektivnog spinskog momenta nepopunjene ljuske sa magnetnim poljem upadne svjetlosti. Ovaj prilaz ima dobru stranu u tome što se u mehanizam interakcije uključuju sumarna svojstva elektrona nepopunjenih ljuski s obzirom da i postojeći modeli u teoriji magnetizma uračunavaju sumarna svojstva elektrona nepopunjenih ljuski koji određuju magnetne osobine [25]. Hamiltonijan interakcije spinskog podsistema sa elektromagnetnim poljem je tada

$$H_{SF} = -\sum_{\vec{n}\theta a} \mu_\theta \mathcal{H}^a_{\vec{n}} \sigma^a_{\vec{n}\theta} \qquad a = x,y,z \tag{IV.2.38}$$

gdje su komponente spinskog operatora $\sigma^a_g = \sigma^a_{\vec{n}\theta}$ određene sa (IV.2.3), a magnetno polje svjetlosti $\mathcal{H}^a_{\vec{n}}$ sa (IV.2.36). Kada se S^+_n , S^-_n i S^z_n izraze preko magnonskih operatora u Blochovoj aproksimaciji, zamjenom (IV.2.3) i (IV.2.36) u (IV.2.38) dobija se hamiltonijan koji osim članova sa po jednim fotonskim i jednim magnonskim operatorom sadrži i članove sa jednim fotonskim i dva spinska operatora oblika a B^+B koje zanemarujemo kao formu višeg reda. Kvadratični dio hamiltonijana (IV.2.38) ima oblik

$$H^{(2)}_{SF} = -i\sum_{\theta a \vec{k} j} 2\mu_\theta \sqrt{\frac{\pi S_\theta \hbar c}{\tau \Omega_o k}} \left[\vec{k}\times\vec{l}_j(\vec{k})\right]^a \left[a_j(\vec{k}) + a^+_j(-\vec{k})\right] \times$$
$$\times\left[A^a_\theta B_\theta(-\vec{k}) + A^{*a}_\theta B^+_\theta(\vec{k})\right] \tag{IV.2.39}$$

ili nakon zamjene operatora B i a operatorima β i γ koji dijagonaliziraju hamiltonijan spinskog odnosno fotonskog podsistema u skladu sa (IV.2.10) i (IV.2.33)

$$H^{(2)}_{SF} = \sum_{\vec{k}\nu j}\Big\{\overset{*}{R}_{\nu j}(\vec{k})\big[\beta^+_\nu(\vec{k})\,\gamma_j(\vec{k})$$
$$+\beta_\nu(\vec{k})\,\gamma^+_j(-\vec{k})\big] + R_{\nu j}(\vec{k})\big[\beta_\nu(\vec{k})\,\gamma^+_j(\vec{k}) + \beta_\nu(\vec{k})\,\gamma_j(-\vec{k})\big]\Big\} \tag{IV.2.40}$$

gdje je

$$R_{\nu j}(\vec{k}) = 2i\sum_{\theta a}\sqrt{\frac{S_\theta \pi \hbar c}{\tau \Omega_o k}}\left[u^{(F)}_j(\vec{k}) + v^{(F)}_j(\vec{k})\right] \times$$
$$\times\left[u^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k}) + v^{(S)}_{\theta\nu}(\vec{k})\right]\mu_\theta A^a_\theta\left[\vec{k}\times\vec{l}_j(\vec{k})\right]^a \tag{IV.2.41}$$

$$\left[R_{\nu j}(\vec{k})\right]_{max} \approx 10^{-13} - 10^{-14}\,\mathrm{erg}$$

Hamiltonijan eksiton-fonon interakcije i

metastabilna hibridizacija optičkih i mehaničkih pobuđenja

Hamiltonijan eksitonskog podsistema (IV.2.26) napisan u prostoru rešetke glasi

$$H_E^{(2)} = \sum_{\mu\eta\vec{n}\vec{n}'} W_{\mu\eta}(\vec{n}-\vec{n}')\, C^+_{\mu\eta}(\vec{n})\, C_{\mu\eta}(\vec{n}') \qquad \text{(IV.2.42)}$$

Ovaj izraz izveden je pod pretpostavkom da se sve molekule nalaze u svojim ravnotežnim položajima, tj. nisu uzete u obzir njihove oscilacije. Oscilovanje molekula oko ravnotežnih položaja matematički možemo izraziti na slijedeći način

$$W_{\mu\eta}(\vec{n}-\vec{n}') = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} W_{\mu\eta}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{n}')} \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} W_{\mu\eta}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}(\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}\eta} - \vec{n}' - \vec{u}_{\vec{n}'\eta})}$$

gdje je $\vec{u}_{\vec{n}\eta}$ pomak molekule (atoma) tipa η u ćeliji $\vec{n}$ iz ravnotežnog položaja. Smatrajući da su ti pomaci vrlo mali koristićemo se razvojem

$$W_{\mu\eta}(\vec{n}-\vec{n}') \approx \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} W_{\mu\eta}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{n}')}\left[1 + i\vec{k}(\vec{u}_{\vec{n}\eta} - \vec{u}_{\vec{n}'\eta})\right] \qquad \text{(IV.2.43)}$$

Ako ovaj izraz vratimo u polazni hamiltonijan (IV.2.42) dobićemo dodatni član koji upravo i karakteriše eksiton-fonon interakciju

$$H_{E\Phi} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\mu\eta\vec{n}\vec{n}'} W_{\mu\eta}(\vec{k})\, i\vec{k}\,(\vec{u}_{\vec{n}\eta} - \vec{u}_{\vec{n}'\eta})\, e^{ik(\vec{n}-\vec{n}')}\, C^+_{\mu\eta}(\vec{n})\, C_{\mu\eta}(\vec{n}')$$

$$\text{(IV.2.44)}$$

Operatore pomaka razložićemo preko fononskih operatora b_r i b_r^+ [59]

$$\vec{u}_{\vec{n}\eta}=\sum_{\vec{q}r}\sqrt{\frac{\hbar}{2Nm_{\eta}\Omega_{r}(\vec{q})}}\,\vec{e}_{\eta}^{\,r}(\vec{q})\left[b_{r}(-\vec{q})+b_{r}^{+}(\vec{q})\right]e^{-i\vec{q}\vec{n}} \qquad \text{(IV.2.45)}$$

Ovdje je $\vec{e}_{\eta}^{\,r}(\vec{q})$ vektor polarizacije r-te fononske grane ($r=1,2,\ldots 3$), a m_{η} masa molekule tipa η.

Poslije uvrštavanja (IV.2.45) u (IV.2.44) i izvršene Fourierove transformacije eksitonskih operatora

$$C_{\mu\eta}(\vec{n})=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}}C_{\mu\eta}(\vec{k})e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

dobijamo

$$H_{E\Phi}=\sum_{\mu\eta r\vec{k}\vec{q}}\sqrt{\frac{\hbar}{2Nm_{\eta}\Omega_{r}(\vec{q})}}\,i\vec{e}_{\eta}^{\,r}(\vec{q})\left[b_{r}(-\vec{q})+b_{r}^{+}(\vec{q})\right]$$

$$C_{\mu\eta}^{+}(\vec{k}-\vec{q})C_{\mu\eta}(\vec{k})\left[\vec{k}W_{\mu\eta}(\vec{k})-(\vec{k}-\vec{q})W_{\mu\eta}(\vec{k}-\vec{q})\right] \qquad \text{(IV.2.46)}$$

U daljim proračunima koristićemo se samo najvećim članom eksitonske energije, tj. stavićemo

$$W_{\mu\eta}(\vec{k})\approx W_{\mu\eta}(\vec{k}-\vec{q})\approx\Delta_{\eta}(\mu)$$

pa je tada

$$H_{E\Phi}=\sum_{\mu\eta r\vec{k}\vec{q}}Z_{\mu\eta}^{r}(\vec{q})C_{\mu\eta}^{+}(\vec{k})C_{\mu\eta}(\vec{k}-\vec{q})\left[b_{r}(\vec{q})+b_{r}^{+}(-\vec{q})\right] \qquad \text{(IV.2.47)}$$

$$Z_{\mu\eta}^{r}(\vec{q})=-i\sqrt{\frac{\hbar}{2Nm_{\eta}\Omega_{r}(\vec{q})}}\left[\vec{e}_{\eta}^{\,r}(\vec{q})\,\vec{q}\,\right]\Delta_{\eta}(\mu) \qquad \text{(IV.2.48)}$$

Relacije (IV.2.47) i (IV.2.48) su generalizacija odgovarajućih izraza nađenih u [61] i [62] na slučaj multinivoske šeme i τ molekula u elementarnoj ćeliji.

Očigledno je da hamiltonijan (IV.2.47) opisuje efekte interakcije eksitona samo sa longitudinalnim fononima, pa ćemo iz razmatranja izostaviti transverzalne fonone. Znači da u slijedećim formulama indeks r ima vrijednosti $1,2,\ldots\tau$.

Sada je ukupni hamiltonijan koji opisuje eksitonski podsistem, fononski podsistem i njihovu interakciju

$$\tilde{H}=\sum_{\mu\eta\vec{k}} W_{\mu\eta}(\vec{k})C^{+}_{\mu\eta}(\vec{k})C_{\mu\eta}(\vec{k})+\sum_{\lambda\vec{k}}\hbar\Omega_{\lambda}(\vec{k})b^{+}_{\lambda}(\vec{k})b_{\lambda}(\vec{k})+$$

$$+\sum_{\mu\eta\lambda\vec{k}\vec{q}} Z^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{q})C^{+}_{\mu\eta}(\vec{k})C_{\mu\eta}(\vec{k}-\vec{q})\left[b_{\lambda}(\vec{q})+b^{+}_{\lambda}(-\vec{q})\right]+H^{(0)} \tag{IV.2.49}$$

Energija osnovnog stanja je

$$H^{(0)}=N\sum_{\eta}\left[E_{\eta}(0)+\frac{1}{2}\mathcal{L}_{\eta}(0)\right]+\frac{1}{2}\sum_{\lambda\vec{k}}\hbar\Omega_{\lambda}(\vec{k}) \tag{IV.2.50}$$

gdje je

$$\mathcal{L}_{\eta}(0)\equiv\mathcal{L}_{\eta}(0000)\ ,\ E_{\eta}(0)=-|E_{\eta}(0)|$$

Da bi se i član hamiltonijana (IV.2.49) koji opisuje eksiton-fonon interakciju mogao napisati tako da bude kvadratičan po eksitonskim i fononskim operatorima izvršićemo unitarnu transformaciju hamiltonijana H

$$H_{eq}=e^{-S}\tilde{H}e^{S}\approx\tilde{H}-[S,H]+\frac{1}{2}\left[S,\left[S,\tilde{H}\right]\right] \tag{IV.2.51}$$

pri čemu se funkcija S bira u obliku

$$S=S_1-S_1^{+} \tag{IV.2.52}$$

$$S_1=\sum_{f\theta\vec{k}} X_{f\theta}(\vec{k})C_{f\theta}(\vec{k})+\sum_{\lambda f\theta\vec{k}} Y^{\lambda}_{f\theta}(\vec{k})C_{f\theta}(\vec{k})\,b_{\lambda}(-\vec{k})$$

$$X_{f\theta}(\vec{k})=X_{f\theta}(0)\,\delta_{\vec{k},0}$$

$$f=1,2,\dots F\ ;\ \theta=1,2,\dots\tau\ ;\ \lambda=1,2,\dots\tau$$

Nepoznate funkcije X i Y su po pretpostavci male tako da je razvoj (IV.2.51) moguć. Odredićemo ih iz uslova da transformisani hamiltonijan ne sadrži članove linearne po eksitonskim operatorima.

S obzirom da nas interesuju samo oni članovi hamiltonijana koji dovode do hibridizacije pobuđenja prilikom traženja komutatora zanemarujemo anharmonijske dodatke koji su proporcionalni sa tri ili više operatora. Ako linearni član ekvivalentnog hamiltonijana eliminišemo uslovom

$$X_{\mu\eta}(0)W_{\mu\eta}(0)+\sum_{\lambda\vec{k}} Z^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})Y^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})=0 \quad , \tag{IV.2.53}$$

nalazimo da je

$$H_{eq}=H^{(0)}_{eq}+H^{(E)}_{eq}+H^{(\Phi)}_{eq}+H^{(2)}_{E\Phi} \tag{IV.2.54}$$

Ovdje su $H^{(E)}_{eq}$ i $H^{(\Phi)}_{eq}$ ekvivalentni hamiltonijani eksitonskog odnosno fononskog podsistema

$$\begin{aligned} H^{(E)}_{eq}=&\sum_{\vec{k}\mu\eta} W_{\mu\eta}(\vec{k})C^{+}_{\mu\eta}(\vec{k})C_{\mu\eta}(\vec{k})+\\ &+\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\mu\eta\lambda f\theta}\Big\{\Big[Y^{\lambda}_{f\theta}(\vec{k})L^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})+\overset{*}{Y}{}^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})\overset{*}{L}{}^{\lambda}_{f\theta}(\vec{k})\Big]C^{+}_{\mu\eta}(\vec{k})C_{f\theta}(\vec{k})+\\ &+Y^{\lambda'}_{f\theta}(\vec{k})\Pi^{\lambda}_{\mu\eta}(-\vec{k})C_{f\theta}(-\vec{k})C_{\mu\eta}(\vec{k})+\overset{*}{Y}{}^{\lambda}_{f\theta}(\vec{k})\Pi_{\mu\eta}(-\vec{k})C^{+}_{f\theta}(-\vec{k})C^{+}_{\mu\eta}(\vec{k})\Big\} \end{aligned} \tag{IV.2.55}$$

i

$$\begin{aligned} H^{(\Phi)}_{eq}=&\sum_{\vec{k}\lambda}\hbar\Omega_{\lambda}(\vec{k})b^{+}_{\lambda}(\vec{k})b_{\lambda}(\vec{k})+\\ &+\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\mu\eta\lambda\lambda'}\Big\{\Big[Y^{\lambda'}_{\mu\eta}(\vec{k})L^{\lambda}_{\mu\eta}(-\vec{k})+\overset{*}{Y}{}^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})\overset{*}{L}{}^{\lambda'}_{\mu\eta}(-\vec{k})\Big]b^{+}_{\lambda}(\vec{k})b_{\lambda'}(\vec{k})+\\ &+Y^{\lambda'}_{\mu\eta}(\vec{k})\Pi^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})b_{\lambda}(\vec{k})b_{\lambda'}(-\vec{k})+\overset{*}{Y}{}^{\lambda'}_{\mu\eta}(\vec{k})\overset{*}{\Pi}{}^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})b^{+}_{\lambda}(\vec{k})b^{+}_{\lambda'}(-\vec{k})\Big\} \end{aligned} \tag{IV.2.56}$$

gdje je

$$\begin{aligned} \Pi^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})&=\overset{*}{X}_{\mu\eta}(0)Z^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})\\ L^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})&=\overset{*}{X}_{\mu\eta}(0)Z^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})+\overset{*}{Y}{}^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})\Big[W_{\mu\eta}(\vec{k})+\hbar\Omega_{\lambda}(\vec{k})\Big] \end{aligned} \tag{IV.2.57}$$

Dio hamiltonijana (IV.2.54) koji opisuje eksiton-fonon interakciju je

$$\begin{aligned} H^{(2)}_{E\Phi}=&-\sum_{\mu\eta\lambda\vec{k}}\Big[\Pi^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})C^{+}_{\mu\eta}(\vec{k})b_{\lambda}(\vec{k})+\overset{*}{\Pi}{}^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})b^{+}_{\lambda}(\vec{k})C_{\mu\eta}(\vec{k})\Big]-\\ &-\sum_{\mu\eta\lambda\vec{k}}\Big[L^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})C^{+}_{\mu\eta}(\vec{k})b^{+}_{\lambda}(-\vec{k})+\overset{*}{L}{}^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})b_{\lambda}(-\vec{k})C_{\mu\eta}(\vec{k})\Big] \end{aligned} \tag{IV.2.58}$$

Za eksitone sa pozitivnom efektivnom masom je $\mathcal{L}$ (0000) = - | $\mathcal{L}$ (0000)| pa se ekvivalentna energija osnovnog stanja može napisati u obliku

$$H_{eq}^{(0)}=\sum_{\vec{k}}\Big\{-\sum_{\eta}\Big[|E(0)|+\frac{1}{2}|\mathcal{L}_{\eta}(0)|\Big]+$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{r}\hbar\Omega_{r}(\vec{k})+\sum_{\mu\eta r}|Y^{r}_{\mu\eta}(\vec{k})|^{2}\Big[W_{\mu\eta}(\vec{k})+\hbar\Omega_{r}(\vec{k})\Big]+$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\mu\eta r}\Big[\overset{*}{X}_{\mu\eta}(0)Y^{r}_{\mu\eta}(\vec{k})Z^{r}_{\mu\eta}(\vec{k})+\overset{*r}{Y}_{\mu\eta}(\vec{k})X_{\mu\eta}(0)\overset{*r}{Z}_{\mu\eta}(\vec{k})\Big]\Big\}$$

odakle nalazimo drugi uslov za određivanje koeficijenata X i Y

$$\frac{1}{2}|\mathcal{L}_{\eta}(0)|=\sum_{\mu r}|Y^{r}_{\mu\eta}(\vec{k})|^{2}\Big[W_{\mu\eta}(\vec{k})+\hbar\Omega_{r}(\vec{k})\Big] \qquad \text{(IV.2.59)}$$

pa je

$$H_{eq}^{(0)}=-\sum_{\vec{k}}\Big\{|E(0)|-\frac{1}{2}\sum_{r}\hbar\Omega_{r}(\vec{k})-$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{\mu\eta r}\Big[\overset{*}{X}_{\mu\eta}(0)Y^{r}_{\mu\eta}(\vec{k})Z^{r}_{\mu\eta}(\vec{k})+\overset{*r}{Y}_{\mu\eta}(\vec{k})X_{\mu\eta}(0)\overset{*r}{Z}_{\mu\eta}(\vec{k})\Big]\Big\} \qquad \text{(IV.2.60)}$$

Da bismo procjenili efekte provedene unitarne transformacije, razmotrićemo slučaj kada se u svakoj elementarnoj ćeliji nalazi samo po jedna molekula (τ=1) i kada postoji samo jedan pobuđeni eksitonski nivo (F=1). Tada se uslovi (IV.2.53) i (IV.2.59) svode na

$$\frac{1}{2}|\mathcal{L}(0)|=|Y(\vec{k})|^{2}\Big[W(\vec{k})+\hbar\Omega(\vec{k})\Big]$$
$$X(0)W(0)+\sum_{\vec{k}}Z(\vec{k})\,Y(\vec{k})=0$$

Ako stavimo da je $W(\vec{k})+\hbar\Omega(\vec{k})\approx\Delta$, nalazimo da je

$$Y(\vec{k})=Y(0)\approx\sqrt{\frac{|\mathcal{L}(0)|}{2\Delta}}$$
$$X\approx\frac{i}{2}\sqrt{\frac{|\mathcal{L}(0)|\hbar N\omega_{D}}{m v^{2}\Delta}} \qquad \text{(IV.2.61)}$$

gdje je ω_D Debyeva frekvencija.

Koeficijent Y je reda 10^{-1}. Iako je X reda 10^9 treba uzeti u obzir da svaki član u koji ulazi X ima jedno sumiranje po k manje nego ostali članovi zbog prisustva Croneckerovog simbola tako da su stvarno doprinosi od X reda $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Tada je red veličine koeficijenata u hamiltonijanu eksiton-fonon interakcije

$$\left[\Pi^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})\right]_{max} \approx 10^{-15} - 10^{-16} \quad \text{erg}$$

$$\left[L^{\lambda}_{\mu\eta}(\vec{k})\right] \approx 10^{-13} - 10^{-14} \quad \text{erg}$$

Iz (IV.2.50), (IV.2.60) i (IV.2.61) se nalazi da je promjena energije osnovnog stanja

$$H^{(0)}_{eq} - H^{(0)} = \sum_{\vec{k}} \left(1 - \frac{\hbar\omega_D}{2mv^2}\right) \frac{1}{2} |\mathcal{L}(0)| \qquad \text{(IV.2.62)}$$

pa zaključujemo da eksiton-fonon hibridizacija predstavlja metastabilno stanje sistema jer je $|H^{(o)}_{eq}| > |H^{(o)}|$.

Iz formule (IV.2.55) napisane za slučaj $F = \eta = 1$ slijedi da za X i Y određene sa (IV.2.61) energija svakog eksitonskog nivoa dobija priraštaj reda $\frac{1}{2}|\mathcal{L}(0)|$. Prema tome hamiltonijan eksitonskog podsistema možemo napisati u obliku

$$H^{(2)}_{E} = \sum_{\mu\eta\vec{k}} E^{(E)}_{\mu\eta}(\vec{k}) C^{+}_{\mu\eta}(\vec{k}) C_{\mu\eta}(\vec{k}) \qquad \text{(IV.2.63)}$$

gdje je

$$E^{(E)}_{\mu\eta}(\vec{k}) \approx W_{\mu\eta}(\vec{k}) + \frac{1}{2}|\mathcal{L}_{\eta}(0)|$$

$$\mu = 1,2,\ldots F \; ; \quad \eta = 1,2,\ldots \tau$$

Iz (IV.2.56) nalazimo da je i korekcija fononske energije usljed eksiton-fonon hibridizacije isto reda $\frac{1}{2}|\mathcal{L}(0)|$, pa je hamiltonijan fononskog podsistema

$$H_{\Phi}^{(2)} = \sum_{r\vec{k}} E_r^{(\Phi)}(\vec{k})\, b_r^{+}(\vec{k})\, b_r(\vec{k})$$

$$E_r^{(\Phi)}(\vec{k}) \approx \hbar\Omega_r(\vec{k}) + \frac{1}{2}|\mathcal{L}_r(0)| \qquad \text{(IV.2.64)}$$

$$r = 1,2,\ldots \tau$$

Ovdje je pretpostavljeno da je $\mathcal{L}_{r+1} > \mathcal{L}_r$ (r=1,2,... τ) za $\Omega_{r+1} > \Omega_r$ što je, prema energetskom bilansu, plauzibilno.

Iz (IV.2.64) zaključujemo da svi longitudinalni fononi postaju optički. Od fonona koji imaju Debyeve frekvencije dobijaju se fononi sa frekvencijama u visokom infracrvenom regionu, tj. $\Omega_r \sim 10^{14} - 10^{15}$, pri čemu gornja granica odgovara izuzetno jakoj dipol-dipol interakciji.

Interakcija eksitona sa poljem transverzalnih fotona

Interakcija između eksitona i elektromagnetnog polja realizuje se preko mehanizma retardirane interakcije elektrona u elektromagnetnom polju. Impuls elektrona u elektromagnetnom polju je $\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$, a energija

$$\frac{p^2}{2m_e} - \frac{e\vec{p}\vec{A}}{m_e c} + \frac{e^2}{2m_e c^2}\vec{A}^2$$

Prvi član ulazi u energiju izolovane molekule i karakteriše eksitonska stanja, treći član popravlja spektar H_F, dok drugi član predstavlja eksiton-foton interakciju. Kada operator impulsa napišemo u reprezentaciji druge kvantizacije, hamiltonijan eksiton-foton interakcije je

$$H_{EF} = -\frac{e}{m_e c}\sum_{\vec{n}\theta f f'} \vec{P}_{\theta}(ff')\,\alpha^{+}_{\vec{n}\theta}(f)\,\alpha_{\vec{n}\theta}(f')\,\vec{A}_{\vec{n}} \qquad \text{(IV.2.65)}$$

$$f, f' = 0,1,2,\ldots F$$

gdje je $\vec{P}_{\theta}(ff')$ matrični element elektronskog impulsa u bazisu koji čine funkcije $\Psi_f(\vec{\xi}_g)$:

$$\vec{P}_\theta(ff')=-i\hbar\int d^3\xi_\theta\,\Psi_f^*(\vec{\xi}_\theta)\nabla_{\xi_\theta}\Psi_{f'}(\vec{\xi}_\theta)$$

$$\vec{P}_\theta(ff')=\vec{P}_\theta^*(f'f)\quad;\quad\vec{P}_\theta(ff)=0 \tag{IV.2.66}$$

Sume po f u formuli (IV.2.65) rastavljamo tako da se sumira samo po $f\neq 0$, a zatim uvodimo kvazi-Pauli operatore u skladu sa (IV.2.15), pa dobijamo

$$H_{EF}=-\frac{e}{m_e c}\Big\{\sum_{\vec{n}\theta f}\Big[\vec{P}_\theta(f0)\mathcal{P}^+_{\vec{n}\theta}(f)+\vec{P}_\theta(0f)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f)\Big]\vec{A}_{\vec{n}}+$$

$$+\sum_{\vec{n}\theta f f'}\vec{P}_\theta(ff')\mathcal{P}^+_{\vec{n}\theta}(f)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f')\vec{A}_{\vec{n}}\Big\} \tag{IV.2.67}$$

Pošto nam je cilj da dobijemo hamiltonijan koji sadrži samo kvadratne članove po operatorima eksitona i fotona, zadržaćemo samo prvi član u formuli (IV.2.67) u kome ćemo operatore $\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}$ zamjeniti Bose operatorima $\mathcal{B}_{\vec{n}\theta}$, a zatim ćemo korištenjem relacija (IV.2.22) i (IV.2.25) uvesti operatore $C_{\mu\eta}$ koji dijagonaliziraju hamiltonijan eksitonskog podsistema. Vektorski potencijal $\vec{A}_{\vec{n}}$ izrazićemo preko fotonskih operatora γ_j prema formuli (IV.2.36). Na taj način dobijamo hamiltonijan eksiton-foton interakcije u obliku

$$H^{(2)}_{EF}=\sum_{\vec{k}\mu\eta j}\Big\{\overset{*}{T}{}^j_{\mu\eta}(\vec{k})\Big[C^+_{\mu\eta}(\vec{k})\gamma_j(\vec{k})+C^+_{\mu\eta}(\vec{k})\gamma^+_j(-\vec{k})\Big]+$$

$$+T^j_{\mu\eta}(\vec{k})\Big[C_{\mu\eta}(\vec{k})\gamma^+_j(\vec{k})+C_{\mu\eta}(\vec{k})\gamma_j(-\vec{k})\Big]\Big\} \tag{IV.2.68}$$

gdje je

$$T^j_{\mu\eta}(\vec{k})=-\sum_{\theta f}\frac{e}{m_e}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{T\Omega_0 Ck}}\Big[u_j^{(F)}(\vec{k})+v_j^{(F)}(\vec{k})\Big]\Lambda_{\theta\eta}(\vec{k},\mu)$$

$$\vec{\ell}_j(\vec{k})\Big[u^{(B)}_{f\mu}(\vec{k},\theta)\vec{P}_\theta(0f)+v^{(B)}_{f\mu}(\vec{k},\theta)\vec{P}^{+}_\theta(0f)\Big] \tag{IV.2.69}$$

$$\Big[T^j_{\mu\eta}(\vec{k})\Big]_{max}\approx 10^{-12}-10^{-13}\,\mathrm{erg}$$

Prema tome mikroskopski mehanizam interakcije oka sa elektromagnetnim poljem upadne svjetlosti opisaćemo hamiltonijanom slijedećeg oblika

$$H^{(2)} = H_S^{(2)} + H_E^{(2)} + H_F^{(2)} + H_{\Phi}^{(2)} + H_{SF}^{(2)} + H_{E\Phi}^{(2)} + H_{EF}^{(2)} \qquad \text{(IV.2.70)}$$

gdje su hamiltonijan spinskog posistema $H_S^{(2)}$, hamiltonijan eksitonskog podsistema $H_E^{(2)}$, hamiltonijan elektromagnetnog polja svjetlosti $H_F^{(2)}$, hamiltonijan fononskog podsistema $H^{(2)}$, hamiltonijan interakcije svjetlosti sa spinskim podsistemom $H_{SF}^{(2)}$, hamiltonijan eksiton-fonon interakcije $H_E^{(2)}$ i hamiltonijan eksiton-foton interakcije $H_{EF}^{(2)}$ dati jednačinama (IV.2.11), (IV.2.63), (IV.2.34), (IV.2.64), (IV.2.40), (IV.2.58) i (IV.2.68) respektivno.

Hamiltonijan (IV.2.70) sadrži (F+2)+2 tipa Bose operatora. Tako par $C^+_{\mu\eta}$ i $C_{\mu\eta}$ opisuje pobuđivanje i deekscitaciju molekule tipa η u stanju μ. Broj pobuđenih stanja molekule je F a postoji τ vrsta molekula (atoma) pa se zato pobuđenja molekula opisuju sa F τ operatora. Osim toga u sistemu postoji τ tipova spinskih valova, τ tipova longitudinalnih fonona, kao i dva tipa transverzalnih fotona, znači ukupno τ (F+2)+2 tipa Bose kvazičestica.

Izrazi (IV.2.40), (IV.2.58) i (IV.2.68) pokazuju da u sistemu dolazi do mješanja amplituda, tj. do hibridizacije spinskih valova, eksitona, fotona i fonona. Određivanje spektra hibridnih pobuđenja svodi se na dijagonalizaciju hamiltonijana (IV.2.70). Pošto $H^{(2)}$ sadrži samo kvadratne članove može se dijagonalizirati u-v transformacijom. Preći ćemo na nove Bose operatore $\varphi_\varrho(\vec{k})$ i $\varphi^+_\varrho(\vec{k})$ kanonskim transformacijama

$$
\begin{aligned}
C_{\mu\eta}(\vec{k}) &= \sum_{\varrho}\left[u^{\varrho}_{\mu\eta}(\vec{k})\varphi_{\varrho}(\vec{k}) + v^{*\varrho}_{\mu\eta}(-\vec{k})\varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k})\right]\\
\gamma_j(\vec{k}) &= \sum_{\varrho}\left[u^{\varrho}_{j}(\vec{k})\varphi_{\varrho}(\vec{k}) + v^{*\varrho}_{j}(-\vec{k})\varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k})\right]\\
\beta_{\nu}(\vec{k}) &= \sum_{\varrho}\left[u^{\varrho}_{\nu}(\vec{k})\varphi_{\varrho}(\vec{k}) + v^{*\varrho}_{\nu}(-\vec{k})\varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k})\right]\\
b_{r}(\vec{k}) &= \sum_{\varrho}\left[u^{\varrho}_{r}(\vec{k})\varphi_{\varrho}(\vec{k}) + v^{*\varrho}_{r}(-\vec{k})\varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k})\right]
\end{aligned}
\tag{IV.2.71}
$$

$\varrho = 1,2\ldots\tau(F+2)+2$; $\mu = 1,2\ldots F$;

$\eta\nu = 1,2,\ldots\tau$; $r = 1,2,\ldots\tau$; $j = 1,2$

Uslovi kanoničnosti ovih transformacija su

$$
\begin{aligned}
\sum_{\varrho}\left\{u^{\varrho}_{\mu\eta}(\vec{k})\,u^{*\varrho}_{\mu'\eta'}(\vec{k}) - v^{*\varrho}_{\mu\eta}(-\vec{k})\,v^{\varrho}_{\mu'\eta'}(-\vec{k})\right\} &= \delta_{\mu\mu'}\,\delta_{\eta\eta'}\\
\sum_{\varrho}\left\{u^{\varrho}_{j}(\vec{k})\,u^{*\varrho}_{j'}(\vec{k}) - v^{*\varrho}_{j}(-\vec{k})\,v^{\varrho}_{j'}(-\vec{k})\right\} &= \delta_{jj'}\\
\sum_{\varrho}\left\{u^{\varrho}_{\nu}(\vec{k})\,u^{*\varrho}_{\nu'}(\vec{k}) - v^{*\varrho}_{\nu}(-\vec{k})\,v^{\varrho}_{\nu'}(-\vec{k})\right\} &= \delta_{\nu\nu'}\\
\sum_{\varrho}\left\{u^{\varrho}_{r}(\vec{k})\,u^{*\varrho}_{r'}(\vec{k}) - v^{*\varrho}_{r}(-\vec{k})\,v^{\varrho}_{r'}(-\vec{k})\right\} &= \delta_{rr'}
\end{aligned}
\tag{IV.2.72}
$$

Hamiltonijan (IV.2.70) izražen preko novih Bose operatora glasi

$$
H^{(2)} = \sum_{\varrho\vec{k}} E_{\varrho}(\vec{k})\,\varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k})\,\varphi_{\varrho}(\vec{k}) \tag{IV.2.73}
$$

Iz Heisenbergovih jednačina kretanja za operatore $C_{\mu\eta}$, β_ν, γ_j i b_r nalazi se da su energije novih pobuđenja E_ϱ i transformacione funkcije u^ϱ i v^ϱ određene sistemom jednačina

$$
\left[E^{(E)}_{\mu\eta}(\vec{k}) - E_{\varrho}(\vec{k})\right]u^{\varrho}_{\mu\eta}(\vec{k}) + \sum_{j}\overset{*}{T}{}^{j}_{\mu\eta}(\vec{k})\left[u^{\varrho}_{j}(\vec{k}) + v^{\varrho}_{j}(\vec{k})\right] +
$$

$$
+ \sum_{r}\left[\overset{*}{\Pi}{}^{r}_{\mu\eta}(\vec{k})\,u^{\varrho}_{r}(\vec{k}) + \overset{*}{L}{}^{r}_{\mu\eta}(\vec{k})\,u^{\varrho}_{r}(\vec{k})\right] = 0
$$

$$
\left[E^{(F)}_{j}(\vec{k}) - E_{\varrho}(\vec{k})\right]u^{\varrho}_{j}(\vec{k}) + \sum_{\mu\eta}\left[T^{j}_{\mu\eta}(\vec{k})\,u^{\varrho}_{\mu\eta}(\vec{k}) + \overset{*}{T}{}^{j}_{\mu\eta}(-\vec{k})\,v^{\varrho}_{\mu\eta}(\vec{k})\right] +
$$

$$
+ \sum_{\nu}\left[R_{\nu j}(\vec{k})\,u^{\varrho}_{\nu}(\vec{k}) + \overset{*}{R}_{\nu j}(-\vec{k})\,v^{\varrho}_{\nu}(\vec{k})\right] = 0
$$

$$\left[E_\nu^{(S)}(\vec{k})-E_\varrho(\vec{k})\right]u_\nu^\varrho(\vec{k})+\sum_j \overset{*}{R}_{\nu j}(\vec{k})\left[u_j^\varrho(\vec{k})+v_j^\varrho(\vec{k})\right]=0$$

$$\left[E_h^{(\Phi)}(\vec{k})-E_\varrho(\vec{k})\right]u_h^\varrho(\vec{k})+\sum_{\mu\eta}\left[\Pi_{\mu\eta}^h(\vec{k})\,u_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})+\overset{*}{L}{}_{\mu\eta}^h(-\vec{k})\,v_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})\right]=0$$

$$\left[E_{\mu\eta}^{(E)}(\vec{k})+E_\varrho(\vec{k})\right]v_j^\varrho(\vec{k})+\sum_{\mu\eta}\left[\overset{*}{T}{}_{\mu\eta}^j(-\vec{k})\,v_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})+T_{\mu\eta}^j(\vec{k})\,u_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})\right]+$$
$$+\sum_\nu\left[\overset{*}{R}_{\nu j}(-\vec{k})\,v_\nu^\varrho(\vec{k})+R_{\nu j}(\vec{k})\,u_\nu^\varrho(\vec{k})\right]=0$$

$$\left[E_j^{(F)}(\vec{k})+E_\varrho(\vec{k})\right]v_j^\varrho(\vec{k})+\sum_{\mu\eta}\left[\overset{*}{T}{}_{\mu\eta}^j(-\vec{k})\,v_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})+T_{\mu\eta}^j(\vec{k})\,u_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})\right]+$$
$$+\sum_\nu\left[\overset{*}{R}_{\nu j}(-\vec{k})\,v_\nu^\varrho(\vec{k})+R_{\nu j}(\vec{k})\,u_\nu^\varrho(\vec{k})\right]=0$$

$$\left[E_\nu^{(S)}(\vec{k})+E_\varrho(\vec{k})\right]v_\nu^\varrho(\vec{k})+\sum_j R_{\nu j}(-\vec{k})\left[v_j^\varrho(\vec{k})+u_j^\varrho(\vec{k})\right]=0$$

$$\left[E_h^{(\Phi)}(\vec{k})+E_\varrho(\vec{k})\right]v_h^\varrho(\vec{k})+\sum_{\mu\eta}\left[\overset{*}{\Pi}{}_{\mu\eta}^h(-\vec{k})\,v_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})+L_{\mu\eta}^h(\vec{k})\,u_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})\right]=0$$

(IV.2.74)

uz uslov normiranja

$$\sum_{\mu\eta}\left[u_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})\,\overset{*}{u}{}_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})-v_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})\,\overset{*}{v}{}_{\mu\eta}^\varrho(\vec{k})\right]+$$
$$+\sum_\nu\left[u_\nu^\varrho(\vec{k})\,\overset{*}{u}{}_\nu^\varrho(\vec{k})-v_\nu^\varrho(\vec{k})\,\overset{*}{v}{}_\nu^\varrho(\vec{k})\right]+$$
$$+\sum_j\left[u_j^\varrho(\vec{k})\,\overset{*}{u}{}_j^\varrho(\vec{k})-v_j^\varrho(\vec{k})\,\overset{*}{v}{}_j^\varrho(\vec{k})\right]+$$
$$+\sum_h\left[u_h^\varrho(\vec{k})\,\overset{*}{u}{}_h^\varrho(\vec{k})-v_h^\varrho(\vec{k})\,\overset{*}{v}{}_h^\varrho(\vec{k})\right]=1 \qquad \text{(IV.2.75)}$$

(IV.2.74) je sistem od $2\,[\tau\,(F+2)+2\,]$ homogenih jednačina čija je sekularna jednačina stepena $\tau\,(F+2)+2$ po E^2 i daje $\tau\,(F+2)+2$ pozitivna rješenja za energije hibridnih pobuđenja $E_\varrho(k)$.

IV.3. Veza između električnih, magnetnih i mehaničkih osobina oka

Iz mikroteorijske analize sistema oko+elektromagnetno polje svjetlosti slijedi da eksitoni, magnoni, fotoni i fononi uslijed interakcije u toj mjeri mjenjaju svoje osobine da je za opisivanje sistema neophodno uvesti nova pobuđenja koja su, može se tako reći, njihovi hibridi. Pošto su osobine tih novih, realno postojećih, pobuđenja određene osobinama eksitona, magnona, fonona i fotona, može se zaključiti da postoji veza između magnetnih, dielektričnih i mehaničkih karakteristika oka. Ta veza koja je izvedena na osnovu mikroteorijske analize mora se odraziti i na makroskopskom planu, odnosno mora postojati povezanost između makroskopskih veličina koje karakterišu magnetne, dielektrične i mehaničke osobine oka. Tu prije svega mislimo na magnetni i dipolni moment i pomake molekula iz ravnotežnih položaja.

Da bismo odredili vezu između te tri veličine pretpostavićemo da na sistem djeluju slabe spoljašnje struje. Sa ovim strujama interagiraće elektromagnetno polje svjetlosti koja pada na oko. Hamiltonijan te interakcije je [63]

$$\tilde{H}_{ext}(t) = -\frac{1}{c}\sum_{g}\vec{A}_{g}(0)\,\vec{j}_{ext}(g,t) = -\frac{\tau}{c}\sum_{\vec{n}}\vec{A}_{\vec{n}}(0)\,\vec{j}_{ext}(\vec{n},t) \tag{IV.3.1}$$

gdje je $\vec{j}_{ext}$ gustoća spoljašnjih struja, a $\vec{A}_{\vec{n}}(0)$ vektorski potencijal elektromagnetnog polja svjetlosti dat sa (IV.2.36). Smatra se da $\vec{j}_{ext} \to 0$ kada $t \to -\infty$. Pošto u razmatranom sistemu u stvari postoji $\tau\,(F+2)+2$ tipova Bose kvazičestica koje u sebi nose nešto od osobina i eksitona i spinskih valova i fonona i fotona, ispravnije je govoriti ne o interakciji elektromagnetnog polja svjetlosti sa spoljašnjim strujama nego o interakciji tih elementarnih pobuđenja sa spoljašnjim strujama. Ta interakcija mijenja električna i magnetna svojstva sistema.

Nakon uvođenja operatora $\varphi_\varrho(\vec{k})$ i $\varphi^+_\varrho(\vec{k})$ koji stvaraju i poništavaju hibridna pobuđenja sistema korištenjem relacije (IV.2.71), dobijamo da je u reprezentaciji interakcije

$$H_{ext}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t}\,\tilde{H}_{ext}(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t}=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{n}\vec{k}a\varrho}\left[h^a(\vec{k},\varrho)\,\varphi_\varrho(\vec{k},t)+h^{*a}(-\vec{k},\varrho)\,\varphi^+_\varrho(-\vec{k},t)\right]j^a_{ext}(\vec{n},t)\,e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad \text{(IV.3.2)}$$

gdje je

$$h^a(\vec{k},\varrho)=\sum_j\sqrt{\frac{2\pi\hbar T}{C\,\Omega\,k}}\left[u_j^{(F)}(\vec{k})+v_j^{(F)}(\vec{k})\right]\left[u_j^\varrho(\vec{k})+v_j^\varrho(\vec{k})\right]\ell^a_j(\vec{k}) \qquad \text{(IV.3.3)}$$

$$\varphi_\varrho(k,t)=e^{\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t}\,\varphi_\varrho(k)\,e^{-\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t}$$

Odredićemo sada srednje vrijednosti magnetnog i dipolnog momenta sistema kao i pomaka molekula uzete po ravnotežnom ansamblu koji je karakterisan interakcijom (IV.3.2).

Magnetni moment

Ukupni magnetni moment sistema je

$$\vec{\mathcal{M}}=\sum_g\mu_g\vec{\sigma}_g=\sum_{\vec{n}\theta}\mu_\theta\vec{\sigma}_{\vec{n}\theta} \qquad \text{(IV.3.4)}$$

pri čemu su spinski operatori određeni sa (IV.2.3). U Blochovoj aproksimaciji za spinske operatore komponenta magnetnog momenta može se napisati u obliku

$$\mathcal{M}^a=\mathcal{M}^a_0+\mathcal{M}^a_1 \qquad (a=x,y,z) \qquad \text{(IV.3.5)}$$

$$\mathcal{M}^a_0=\sum_{\vec{n}\theta}S_\theta\mu_\theta\gamma^a_\theta-\sum_{\vec{n}\theta}\mu_\theta\gamma^a_\theta B^+_{\vec{n}\theta}B_{\vec{n}\theta}$$

$$\mathcal{M}^a_1=\sum_{\vec{n}\theta}\mu_\theta\sqrt{2S_\theta}\,(A^a_\theta B_{\vec{n}\theta}+A^{*a}_\theta B^+_{\vec{n}\theta})$$

Pošto $\mathcal{M}_0^a$ sadrži samo konstantan i kvadratičan član po operatorima, u najnižoj aproksimaciji nije osjetljiv na interakciju (IV.3.2), pa ćemo zato analizirati samo linearni dio magnetnog momenta $\mathcal{M}_1^a$. Razmotrićemo magnetni moment po jednoj molekuli

$$\mathcal{M}_{1\theta}^{a}(\vec{n}) = \mu_\theta \sqrt{2S_\theta}\,(\mathcal{A}_\theta^{a} B_{\vec{n}\theta} + \overset{*}{\mathcal{A}}{}_\theta^{a} B_{\vec{n}\theta}^{+})$$

u kome operatore $B_{\vec{n}\theta}$ korištenjem relacija (IV.2.9) i IV.2.10) izražavamo preko operatora koji dijagonaliziraju hamiltonijan spinskog podsistema, a zatim uvodimo operatore φ_ϱ koji dijagonaliziraju hamiltonijan cijelog sistema. Na taj način nalazimo da je u reprezentaciji interakcije

$$\mathcal{M}_{1\theta}^{a}(\vec{n},t) = e^{\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t}\,\mathcal{M}_{1\theta}^{a}(\vec{n})\,e^{-\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\varrho} \left[m_\theta^{a}(\vec{k},\varrho)\varphi_\varrho(\vec{k},t) + \overset{*}{m}{}_\theta^{a}(-\vec{k}\varrho)\varphi_\varrho^{+}(-\vec{k},t) \right] e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad \text{(IV.3.6)}$$

gdje je

$$m_\theta^{a}(\vec{k},\varrho) = \mu_\theta\sqrt{2S_\theta} \sum_{\nu} \Big\{ u_\nu^{\varrho}(\vec{k}) \left[\mathcal{A}_\theta^{a} u_{\theta\nu}^{(s)}(\vec{k}) + \overset{*}{\mathcal{A}}{}_\theta^{a} v_{\theta\nu}^{(s)}(\vec{k}) \right] +$$

$$+ v_\nu^{\varrho}(\vec{k}) \left[\mathcal{A}_\theta^{a} \overset{*}{u}{}_{\theta\nu}^{(s)}(\vec{k}) + \mathcal{A}_\theta^{a} \overset{*}{v}{}_{\theta\nu}^{(s)}(-\vec{k}) \right] \Big\} \qquad \text{(IV.3.7)}$$

Srednja vrijednost $\mathcal{M}_1^a(\vec{n},t)$ po neravnotežnom ansamblu kada djeluje smetnja $H_{ext}(t)$ data je sa

$$\langle \mathcal{M}_{1\theta}^{a}(\vec{n},t) \rangle_{ext} = \langle \hat{S}^{-1}(t)\,\mathcal{M}_{1\theta}^{a}(\vec{n},t)\,\hat{S}(t) \rangle \qquad \text{(IV.3.8)}$$

Ovdje je $S(t)$ S-matrica sistema (matrica raspršenja)

$$\hat{S}(t) = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' H_{ext}(t')} \qquad \text{(IV.3.9)}$$

gdje je H_{ext} dato sa (IV.3.2), a T je Dysonov operator sređivanja po vremenu. Simbol $\langle \ldots \rangle$ označava usrednjenje po ravnotežnom ansamblu, tj.

$$\langle \ldots \rangle = \mathrm{Sp}\,(\ \ldots\ )\ \exp \frac{F - H^{(2)}}{k_B T}$$

gdje je F slobodna energija sistema.

Dalje ćemo se ograničiti na slučaj linearne reakcije sistema jer pretpostavljamo da su smetnja slabe spoljašnje struje. Pošto je matrica raspršenja unitarna u aproksimaciji linearnoj po H_{ext} je

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

pa je srednja vrijednost komponente magnetnog momenta pod djelovanjem smetnje [64]

$$\langle \mathcal{M}^{a}_{1\theta}(\vec{n},t) \rangle_{ext} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' \langle\langle \mathcal{M}^{a}_{1\theta}(\vec{n},t) | H_{ext}(t') \rangle\rangle \qquad \text{(IV.3.10)}$$

pri čemu je uzeto u obzir da je $\langle \mathcal{M}^{a}_{1}(\vec{n},t) \rangle = 0$ jer je linearno po operatorima.

Nakon uvrštavanja (IV.3.2) i (IV.3.6) u (IV.3.10) i uzimajući u obzir da je hamiltonijan $H^{(2)}$ dijagonalan po operatorima φ i φ^{+}, kao i da vrijedi zakon održanja impulsa, možemo pisati

$$\langle \mathcal{M}^{a}_{1\theta}(\vec{n},t) \rangle_{ext} = \frac{1}{N\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' \sum_{\vec{n}'\vec{k}b\varrho} j^{b}_{ext}(\vec{n}',t') e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{n}')} \times$$

$$\times \Big\{ m^{a}_{\theta}(\vec{k},\varrho) \overset{*}{h}{}^{b}(\vec{k},\varrho) \langle\langle \varphi_{\varrho}(\vec{k},t) | \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k},t') \rangle\rangle +$$

$$+ m^{a}_{\theta}(-\vec{k},\varrho) h^{b}(-\vec{k},\varrho) \langle\langle \varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k},t) | \varphi_{\varrho}(-\vec{k},t') \rangle\rangle \Big\} \qquad \text{(IV.3.11)}$$

Izvršićemo Fourierove transformacije

$$\langle \mathcal{M}^{a}_{1\theta}(\vec{n},t) \rangle_{ext} = \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \langle \mathcal{M}^{a}_{1\theta}(\vec{k},\omega) \rangle_{ext} e^{i(\vec{k}\vec{n}-\omega t)}$$

$$j^{b}_{ext}(\vec{n}',t') = \sum_{\vec{k}'} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, j^{b}_{ext}(\vec{k}',\omega) e^{i(\vec{k}'\vec{n}'-\omega t')}$$

$$\langle\langle \varphi_{\varrho}(\vec{k},t) | \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k},t') \rangle\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \langle\langle \varphi_{\varrho}(\vec{k}) | \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega'} e^{-i\omega'(t-t')}$$

$$\langle\langle \varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k},t) | \varphi_{\varrho}(-\vec{k},t') \rangle\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \langle\langle \varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k}) | \varphi_{\varrho}(-\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega'} e^{-i\omega'(t-t')}$$

pa dobijamo

$$\sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \langle \mathcal{M}^{a}_{1\theta}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} e^{i(\vec{k}\vec{n}-\omega t)} =$$

$$= \frac{1}{\hbar} \int d\omega d\omega' \sum_{\vec{k}b\varrho} \frac{j^{b}_{ext}(\vec{k},\omega)}{\omega'-\omega-i\delta} \Big\{ m^{a}_{\theta}(\vec{k},\varrho) \overset{*}{h}{}^{b}(\vec{k},\varrho) \langle\langle \varphi_{\varrho}(\vec{k}) | \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega'} +$$

$$+ \overset{*}{m}{}^{a}_{\theta}(-\vec{k},\varrho) h^{b}(-\vec{k},\varrho) \langle\langle \varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k}) | \varphi_{\varrho}(-\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega'} \Big\} e^{i(\vec{k}\vec{n}-\omega t)} \qquad \text{(IV.3.12)}$$

pri čemu je uzeto u obzir da je

$$\sum_{\vec{n}'} e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{n}'} = \delta_{\vec{k}'\vec{k}}$$

$$\int_{-\infty}^{t} dt' e^{i(\omega'-\omega)t'} = \int_{-\infty}^{t} dt' e^{i(\omega'-\omega-i\delta)t'} = \frac{e^{i(\omega'-\omega)t}}{i(\omega'-\omega-i\delta)} \,, \quad \delta \to +0$$

Poslije inverzne Fourierove transformacije jednačina (IV.3.12) postaje

$$\langle \mathcal{M}^{a}_{1\theta}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} = \frac{1}{\hbar} \sum_{b\varrho} \int d\omega' \frac{j^{b}_{ext}(\vec{k},\omega)}{\omega'-\omega-i\delta} \Big\{ m^{a}_{\theta}(\vec{k},\varrho) \overset{*}{h}{}^{b}(\vec{k},\varrho) \langle\langle \varphi_{\varrho}(\vec{k}) | \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega'} +$$

$$+ \overset{*}{m}{}^{a}_{\theta}(-\vec{k},\varrho) h^{b}(-\vec{k},\varrho) \langle\langle \varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k}) | \varphi_{\varrho}(-\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega'} \Big\} \qquad \text{(IV.3.13)}$$

Koristićemo osim toga relaciju

$$\frac{1}{\omega'-\omega-i\delta} = \mathcal{P}\frac{1}{\omega'-\omega} + i\pi\,\delta(\omega'-\omega)$$

($\mathcal{P}$ oznaka za glavnu vrijednost) i činjenicu da su Greenove funkcije $\langle\langle \varphi_{\varrho}(\vec{k}) | \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega}$, i $\langle\langle \varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k}) | \varphi_{\varrho}(-\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega}$, analitičke u gornjoj poluravni [45] pa je

$$\mathcal{P}\int d\omega' \frac{\langle\langle \varphi_{\varrho}(\vec{k}) | \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega'}}{\omega'-\omega} = \mathcal{P}\int d\omega' \frac{\langle\langle \varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k}) | \varphi_{\varrho}(-\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega'}}{\omega'-\omega} = 0 \qquad \text{(IV.3.14)}$$

Iz (IV.2.73) slijedi da je

$$\langle\langle \varphi_{\varrho}(\vec{k}) | \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega} = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \Omega_{\varrho}(\vec{k}) + i\delta} \qquad \text{(IV.3.15)}$$

$$\Omega_{\varrho}(\vec{k}) = \hbar^{-1} E_{\varrho}(\vec{k}) \,, \quad \delta \to 0$$

Osim toga vrijedi

$$\langle\langle \varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k}) | \varphi_{\varrho}(-\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega} = \langle\langle \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k}) | \varphi_{\varrho}(\vec{k}) \rangle\rangle_{\omega} = \langle\langle \varphi_{\varrho}(\vec{k}) | \varphi^{+}_{\varrho}(\vec{k}) \rangle\rangle_{-\omega}$$

Tada je konačno

$$\langle \mathcal{M}^{a}_{1\theta}(\vec{k},\omega) \rangle_{ext} = \sum_{b} M^{ab}_{\theta}(\vec{k},\omega)\, j^{b}_{ext}(\vec{k},\omega) \qquad \text{(IV.3.16)}$$

gdje je

$$M^{ab}_{\theta}(\vec{k},\omega) = \frac{1}{2\hbar} \sum_{\varrho} \left\{ \frac{m^{a}_{\theta}(\vec{k},\varrho)\, h^{*b}(\vec{k},\varrho)}{\Omega_{\varrho}(\vec{k}) - \omega - i\delta} + \frac{m^{*a}_{\theta}(-\vec{k},\varrho)\, h^{b}(-\vec{k},\varrho)}{\Omega_{\varrho}(\vec{k}) + \omega - i\delta} \right\}$$

(IV.3.17)

U vektorskom obliku jednačina (IV.3.16) može se napisati kao

$$\langle \vec{\mathcal{M}}_{1\theta}(\vec{k},\omega) \rangle_{ext} = \hat{M}_{\theta}(\vec{k},\omega)\, \vec{j}_{ext}(\vec{k},\omega) \qquad \text{(IV.3.18)}$$

gdje je $\hat{M}_{\theta}(\vec{k},\omega)$ tenzor čije su komponente date sa (IV.3.17)

Dipolni moment

Potražićemo sada operator dipolnog momenta sistema. Kao jednočestični operator totalni dipolni moment može se predstaviti u obliku

$$\vec{\mathcal{D}} = \sum_{gff'} \vec{\mathcal{D}}_{g}(ff')\, \alpha^{+}_{g}(f)\, \alpha_{g}(f') \; , \; f,f' = 0,1,2,\ldots F \qquad \text{(IV.3.19)}$$

gdje su $\vec{\mathcal{D}}_{g}(ff')$ matrični elementi operatora $e\vec{\xi}_{g}$ po funkcijama $\Psi_{f}(\vec{\xi}_{g})$. Pošto $\vec{\xi}_{g}$ ne zavisi od indeksa ćelije $\vec{n}$ već samo od indeksa molekule unutar ćelije θ

$$\vec{\mathcal{D}}_{g}(ff') \equiv \vec{\mathcal{D}}_{\theta}(ff') = \int d^{3}\vec{\xi}_{\theta}\, \Psi^{*}_{f}(\vec{\xi}_{\theta})\, e\, \vec{\xi}_{\theta}\, \Psi_{f'}(\vec{\xi}_{\theta}) \qquad \text{(IV.3.20)}$$

Dalje možemo pisati

$$\vec{\mathcal{D}} = \sum_{\vec{n}\theta} \Big\{ \vec{\mathcal{D}}_{\theta}(00)\, \alpha^{+}_{\vec{n}\theta}(0)\, \alpha_{\vec{n}\theta}(0) + \sum_{f} \vec{\mathcal{D}}_{\theta}(f0)\, \alpha^{+}_{\vec{n}\theta}(f)\, \alpha_{\vec{n}\theta}(0) + $$
$$+ \sum_{f} \vec{\mathcal{D}}_{\theta}(0f)\, \alpha^{+}_{\vec{n}\theta}(0)\, \alpha_{\vec{n}\theta}(f) + \sum_{ff'} \vec{\mathcal{D}}_{\theta}(ff')\, \alpha^{+}_{\vec{n}\theta}(f)\, \alpha_{\vec{n}\theta}(f') \Big\}$$

(IV.3.21)

Fermi operatore stvaranja i poništavanja elektrona α^+ i α izrazićemo preko kvazi-Pauli operatora prema (IV.2.15), a osim toga ćemo uzeti u obzir da operator dipola nema dijagonalnih elemenata, pa dobijamo

$$\vec{\mathcal{D}}=\sum_{\vec{n}\theta ff'}\vec{\mathcal{D}}_{\theta}(ff')\mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(f)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f')(1-\delta_{ff'})+$$
$$+\sum_{\vec{n}\theta f}\left\{\vec{\mathcal{D}}_{\theta}(f0)\mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(f)+\vec{\mathcal{D}}_{\theta}(0f)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(f)\right\} \qquad \text{(IV.3.22)}$$

Pošto je operator dipolnog momenta hermitski $\vec{\mathcal{D}}_{\theta}(f0)=\vec{\mathcal{D}}^{*}_{\theta}(0f)$.

Kao i u slučaju magnetnog momenta razmatraćemo samo dio od $\mathcal{D}$ koji je linearan po operatorima $\mathcal{P}$ u kome ćemo, uz pretpostavku male koncentracije kvazičestica, kvazi-Pauli operatore zamjeniti Bose operatorima. Komponenta na jedan čvor rešetke je

$$\mathcal{D}_{1\theta}(\vec{n})=\sum_{f}\left[\mathcal{D}^{a}_{\theta}(0f)\mathcal{B}_{\vec{n}\theta}(f)+\mathcal{D}^{*a}_{\theta}(0f)\mathcal{B}^{+}_{\vec{n}\theta}(f)\right] \qquad \text{(IV.3.23)}$$

Ako uzmemo u obzir relacije (IV.2.22), (IV.2.25) i (IV.2.71), operator $\mathcal{D}^{a}_{1\theta}(\vec{n})$ u reprezentaciji interakcije je

$$\mathcal{D}^{a}_{1\theta}(\vec{n},t)=e^{\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t}\,\mathcal{D}^{a}_{1\theta}(\vec{n})\,e^{-\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t}=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}\varrho}\left[d^{a}_{\theta}(\vec{k}\varrho)\varphi_{\varrho}(\vec{k},t)+d^{*a}_{\theta}(-\vec{k},\varrho)\varphi^{+}_{\varrho}(-\vec{k},t)\right]e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad \text{(IV.3.24)}$$

gdje je

$$d^{a}_{\theta}(\vec{k},\varrho)=\sum_{f\mu\eta}\Big\{\Lambda_{\theta\eta}(\vec{k},\mu)\,u^{\varrho}_{\mu\eta}(\vec{k})\left[\mathcal{D}^{a}_{\theta}(0f)\,u^{(B)}_{f\mu}(\vec{k},\theta)+\mathcal{D}^{*a}_{\theta}(0f)\,v^{(B)}_{f\mu}(\vec{k},\theta)\right]+$$
$$+\Lambda^{+}_{\theta\eta}(-\vec{k},\mu)\,v^{\varrho}_{\mu\eta}(\vec{k})\left[\mathcal{D}^{*a}_{\theta}(0f)\,u^{*(B)}_{f\mu}(-\vec{k},\theta)+\mathcal{D}^{a}_{\theta}(0f)\,v^{*(B)}_{f\mu}(-\vec{k},\theta)\right]\Big\}$$

$$\text{(IV.3.25)}$$

Na isti način kao i u slučaju magnetnog momenta za srednju vrijednost dipolnog momenta po neravnotežnom ansamblu dobijamo relaciju

$$\langle\vec{\mathcal{D}}_{1\theta}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext}=\hat{D}_{\theta}(\vec{k},\omega)\,\vec{j}_{ext}(\vec{k},\omega) \qquad \text{(IV.3.26)}$$

pri čemu su komponente tenzora $\hat{D}_{\theta}(\vec{k},\omega)$ date sa

$$D_{\theta}^{ab}(\vec{k},\omega)=\frac{1}{2\hbar}\sum_{\varrho}\left[\frac{d_{\theta}^{a}(\vec{k},\varrho)\overset{*}{h}{}^{b}(\vec{k},\varrho)}{\Omega_{\varrho}(\vec{k})-\omega-i\delta}+\frac{\overset{*}{d}{}_{\theta}^{a}(-\vec{k},\varrho)h^{b}(-\vec{k},\varrho)}{\Omega_{\varrho}(\vec{k})+\omega+i\delta}\right] \quad \text{(IV.3.27)}$$

$$\delta\to+0$$

Srednji pomak

Komponenta operatora mehaničkog pomaka (IV.2.45) nakon uvođenja operatora φ koji dijagonaliziraju hamiltonijan cijelog sistema prema (IV.2.71) je

$$u_{\theta}^{a}(\vec{n})=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}\varrho}\left[P_{\theta}^{a}(\vec{k},\varrho)\varphi_{\varrho}(\vec{k})+\overset{*}{P}{}_{\theta}^{a}(-\vec{k},\varrho)\varphi_{\varrho}^{+}(-\vec{k})\right]e^{i\vec{k}\vec{n}} \quad \text{(IV.3.28)}$$

$$a=x,y,z$$

gdje je

$$P_{\theta}^{a}(\vec{k},\varrho)=\sum_{\lambda}\sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\theta}v_{\lambda}k}}\,e_{\theta\lambda}^{a}(\vec{k})\left[u_{\lambda}^{\varrho}(\vec{k})+v_{\lambda}^{\varrho}(\vec{k})\right]. \quad \text{(IV.3.29)}$$

U reprezentaciji interakcije operator $u_{\theta}^{a}(\vec{n})$ postaje

$$u_{\theta}^{a}(\vec{n},t)=e^{\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t}\,u_{\theta}^{a}(\vec{n})\,e^{-\frac{i}{\hbar}H^{(2)}t}$$

Srednju vrijednost operatora pomaka po neravnotežnom ansamblu kada djeluje smetnja $H_{ext}(t)$ određujemo na isti način kao u slučaju magnetnog i dipolnog momenta i nalazimo da je

$$\langle\vec{u}_{\theta}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext}=\hat{\mathcal{K}}_{\theta}(\vec{k},\omega)\,\vec{j}_{ext}(\vec{k},\omega) \quad \text{(IV.3.30)}$$

gdje je

$$\langle\vec{u}_{\theta}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext}=\frac{1}{2\pi N}\sum_{\vec{n}}\int dt\,\langle u_{\theta}^{a}(\vec{n},t)\rangle\,e^{-i\vec{k}\vec{n}+i\omega t} \quad \text{(IV.3.31)}$$

a $\hat{\mathcal{K}}_{\theta}(\vec{k},\omega)$ je tenzor čije su komponente određene sa

$$\mathcal{K}_{\theta}^{ab}(\vec{k},\omega)=\frac{1}{2\hbar}\sum_{\varrho}\left[\frac{P_{\theta}^{a}(\vec{k},\varrho)\overset{*}{h}{}^{b}(\vec{k},\varrho)}{\Omega_{\varrho}(\vec{k})-\omega-i\delta}+\frac{\overset{*}{P}{}_{\theta}^{a}(-\vec{k},\varrho)h^{b}(-\vec{k},\varrho)}{\Omega_{\varrho}(\vec{k})+\omega-i\delta}\right]$$

(IV.3.32)

Eliminacijom vektora spoljašnjih struja $\vec{J}_{ext}(\vec{k},\omega)$ iz (IV.3.18), (IV.3.26) i (IV.3.32) dobijamo relacije koje povezuju srednje vrijednosti dipolnog i magnetnog momenta i mehaničkog pomaka koji su indukovani elektromagnetnim poljem upadne svjetlosti.

$$
\begin{aligned}
\langle \vec{\mathcal{M}}_{1\theta}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} &= \hat{M}_\theta(\vec{k},\omega)\hat{D}_\theta^{-1}(\vec{k},\omega)\langle \vec{\mathcal{D}}_{1\theta}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} \\
\langle \vec{\mathcal{M}}_{1\theta}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} &= \hat{M}_\theta(\vec{k},\omega)\hat{\mathcal{K}}_\theta^{-1}(\vec{k},\omega)\langle \vec{u}_\theta(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} \qquad \text{(IV.3.33)} \\
\langle \vec{\mathcal{D}}_{1\theta}(\vec{k},\omega)\rangle_{ext} &= \hat{D}_\theta(\vec{k},\omega)\hat{\mathcal{K}}_\theta^{-1}(\vec{k},\omega)\langle \vec{u}_\theta(\vec{k},\omega)\rangle_{ext}
\end{aligned}
$$

Iz (IV.3.33) se vidi da se kao posljedica hibridizacije elementarnih pobuđenja u sistemu javlja direktna interakcija između dipolnog momenta, magnetnog momenta i mehaničkog pomaka, a to su veličine koje karakterišu dielektrične, magnetne i mehaničke osobine oka. Magneto-optički tenzor $\hat{M}\,\hat{D}^{-1}$ [65] odražava povezanost magnetnih i dielektričnih karakteristika sredine (oka). Veza između magnetnih i mehaničkih karakteristika oka određena je tenzorom $\hat{M}\hat{\mathcal{K}}^{-1}$, a između dielektričnih i mehaničkih osobina tenzorom $\hat{D}\hat{\mathcal{K}}^{-1}$.

U relaciji (IV.2.69) se matrični element impulsa $\vec{P}_\theta(0f)$ uzet između osnovnog i f-tog pobuđenog stanja može predstaviti preko matričnog elementa dipolnog momenta na slijedeći način

$$
\vec{P}_\theta(0,f) = \frac{im}{e\hbar} E_f\, \vec{D}_\theta(0f)
$$

Tada se, ako je frekvencija perturbacije ω bliska frekvenciji hibridnih pobuđenja Ω_{ϱ_0}, iz (IV.2.74), (IV.3.17), (IV.3.27), (IV.3.32) i (IV.3.33) nalazi da je, ukoliko u sistemu dolazi do hibridizacije eksitona i fonona

$$
\frac{\langle \mathcal{M}^a_{1\theta}\rangle_{ext}}{\langle \mathcal{D}^a_{1\theta}\rangle_{ext}} \sim \frac{\Omega_{\varrho_0}-\hbar^{-1}E^{(E)}}{\Omega_{\varrho_0}-\hbar^{-1}E^{(S)}}\, \mathcal{A}^a_\theta\left[\vec{k}\times\vec{l}_j(\vec{k})\right]^a, \qquad \text{(IV.3.34)}
$$

a ukoliko do hibridizacije ne dolazi

$$\frac{\langle \mathcal{M}^{a}_{1\theta} \rangle_{ext}}{\langle \mathcal{D}^{a}_{1\theta} \rangle_{ext}} \sim \frac{\Omega \varrho_0 - \hbar^{-1} E^{(E)}}{\Omega \varrho_0 - \hbar^{-1} E^{(S)}} \frac{\mathcal{A}^{a}_{\theta} \left[\vec{k} \times \vec{\ell}_j (\vec{k}) \right]^{a}}{\mathcal{D}^{a}_{\theta}(0f)\, \ell^{a}_j (\vec{k})} \tag{IV.3.35}$$

Osim toga je

$$\frac{\langle \mathcal{D}^{a}_{1\theta} \rangle_{ext}}{\langle u^{a}_{\theta} \rangle_{ext}} \sim \frac{\Omega \varrho_0 - \hbar^{-1} E^{(\Phi)}}{\Omega \varrho_0 - \hbar^{-1} E^{(S)}} \mathcal{A}^{a}_{\theta} \left[\vec{k} \times \vec{\ell}_j (\vec{k}) \right]^{a} \tag{IV.3.36}$$

i

$$\frac{\langle \mathcal{D}^{a}_{1\theta} \rangle_{ext}}{\langle u^{a}_{\theta} \rangle_{ext}} \sim \frac{\Omega \varrho_0 - \hbar^{-1} E^{(\Phi)}}{\Omega \varrho_0 - \hbar^{-1} E^{(E)}} \tag{IV.3.37}$$

Možemo zaključiti da je pojačanje magnetnog momenta, ukoliko u sistemu dolazi do hibridizacije eksitona i fonona, uslovljeno isključivo rezonancijom upadne svjetlosti sa spinskom frekvencijom, tj. za male frekvencije upadne svjetlosti. Ukoliko, međutim, do eksiton-fonon hibridizacije ne dolazi, porast indukovanog magnetnog momenta moguć je ne samo za male frekvencije, nego i za visoke ali ako je eksiton-foton vezivanje malo.

Nezavisno od toga da li eksiton-fonon hibridizacija postoji dipolni moment se može pojačati dvojako:

a) rezonancijom sa eksitonskom frekvencijom (visoke frekvencije),

b) ako je za neke smjerove valnog vektora upadne svjetlosti spin-foton vezivanje zanemarivo malo.

Indukovani mehanički moment može se pojačati ili slabljenjem spin-foton veze ili usljed rezonance sa fononskom frekvencijom.

Računi koji su izvedeni u poslednja dva paragrafa ne mogu se direktno primjeniti na oko u smislu bilo kakve kvantitativne teorije. Razlozi zbog kojih kvantitativni rezultati ne mogu da se očekuju od ovog prilaza su prije svega činjenica da koristimo kristalnu strukturu a ona može da bude samo veoma gruba aproksimacija za materiju oka. Osim toga u račun je uvedena pretpostavka o tome da oko ima i magnetne osobine mada do danas nemamo pouzdanih podataka o tome.

Dobijeni rezultati mogu ipak da navedu na izvjesne ideje o tome kako se, zašto i kojim mehanizmom mijenja polarizacija oka o kojoj je bilo riječi u prvom paragrafu ove glave. Pošto polarizacija bitno zavisi od veličine dipola i njihove uređenosti, a u slučaju kada oko prima svjetlost praktično zavisi od indukovanih dipola, rezultati do kojih smo došli mogu kvalitativno da objasne uzroke promjene srednjeg indukovanog dipola, pa i same polarizacije. Rezultati ukazuju na to da su promjene dipolnog momenta bitno korelisane sa promjenama magnetnog momenta i da porast dipola nije isključivo vezan za rezonancu sa spoljašnjom svjetlošću već može biti izazvan i slabljenjem interakcije magnetnog momenta sa spoljašnjom svjetlošću. Prema tome možemo zaključiti da su promjene veličine srednjeg indukovanog dipola, a samim tim i promjene polarizacije oka, bitno povezane sa magnetnim osobinama, tj. sa promjenom indukovanog magnetnog momenta oka.

Rezultati takođe pokazuju da dipolni moment, što je i razumljivo, zavisi od stanja mehaničkih oscilacija u oku i da je indukovani dipolni moment proporcionalan indukovanom mehaničkom momentu (za slučaj kada se javlja metastabilna hibridizacija). Ova veza nije tako kompleksna kao veza između dipolnog i magnetnog momenta i uzajamne promjene jednog i drugog zavise isključivo od rezonance sa spoljašnjom svjetlošću. Činjenica je međutim da rezonance srednjeg mehaničkog pomaka koje mogu da se dese u infracrvenom regionu na osnovu (IV.3.33) mogu da utiču na srednji indukovani dipol i da mijenjaju polarizaciju.

Na kraju treba istaći da optički fononi koji nastaju kao rezultat metastabilne hibridizacije imaju frekvence koje leže u infracrvenom domenu, ali da za jaku dipol-dipol interakciju zalaze u oblast crvene boje u vidljivom spektru. Odavde bi se eventualno moglo zaključiti da je crvena boja (kao jedna od tri osnovne boje u oku) rezultat metastabilne hibridizacije i rezonance sa optičkim fononima pomenutog tipa.

ZAKLJUČAK

Rezultati do kojih se došlo u disertaciji mogu se rezimirati na slijedeći način:

a) U drugoj glavi izložen je metod korektnog tretmana sistema spinova u kome vladaju i dipolne i izmjenske sile. Do sada se u literaturi prenebregavala činjenica da prisustvo dipolnih sila zahtjeva, ukoliko se žele korektni teorijski rezultati, stabilizaciju hamiltonijana i eliminaciju efekata neodržanja. Ovdje su pomenute operacije izvršene i analizirane su termodinamičke i ostale osobine sistema i pri niskim i pri visokim koncentracijama spinskih talasa. Jedan dio ove glave posvećen je čistom dipolnom magnetizmu i to sa ciljem da se dobiju one karakteristike dipolnog magnetizma koje su od značaja za ponašanje kvazičestičnih struja u ovakvim sistemima.

b) Treća glava analizira osobine kvazičestičnih struja u sistemima vezanih dipola. Formulisan je statistički ekvivalent kvantno-mehaničke jednačine kontinuiteta i pokazano je da se ovakva, statistička, jednačina kontinuiteta narušava isključivo u sistemima sa dipol-dipolnim interakcijama. Pokazano je da za račun ovog neodržavanja u sistemu nastaju nove kvazičestice koje su rezultat interakcije struja-struja. Ova, interferentna, pobuđenja imaju zanimljive transportne osobine pa se došlo do zaključka da narušenje simetrije i termodinamičke ravnoteže dovodi do nagomilavanja ovih pobuđenja na pojedinim molekulama sistema, što može da ima za posljedicu bitnu transformaciju samih molekula. Pošto se trenjem narušava i simetrija i toplotna ravnoteža, rezultati koji su ovdje dobijeni povezani su sa izvjesnim teorijama o trenju kao uzroku nastanka kancerogenih obolenja. Pošto trenje, prema dobijenim rezultatima, prouzrokuje nagomilavanje energije na pojedinim molekulama, a ovo nagomilavanje opet može bitno da transformiše molekulu, ne bi trebalo eliminisati iz razmatranja mogućnost da kancerogena obolenja nastaju nagomilavanjem interferentnih pobuđenja na molekuli.

c) U četvrtoj glavi posmatran je sistem električnih dipola i spinova koji bi trebalo da predstavlja model za objašnjenje nekih procesa u oku. Takođe su uzete u obzir i mehaničke oscilacije i razmatrana je mogućnost metastabilne hibridizacije mehaničkih i elektromagnetnih talasa. U procesu hibridizacije u sistemu se umjesto akustičkih pojavljuju optički fononi čije su frekvencije regulisane silama dipolne interakcije i padaju u oblast crvene i infracrvene svjetlosti. Spoljašnja svjetlost koja pada na ovakav sistem indukuje dipolni, magnetni i mehanički moment sistema. Ovi indukovani momenti povezani su međusobno tenzorima čiji je eksplicitni, veoma komplikovan, oblik naveden u disertaciji. Procjena ponašanja ovih tenzora pokazala je da indukovani električni dipol može da se mijenja ne samo zahvaljujući rezonanci sa upadnom svjetlošću već i sa promjenom veličine magnetnog odnosno mehaničkog momenta. Ovi rezultati mogu da posluže kao objašnjenje za mehanizam promjene polarizacije oka, a nije isključeno da bi detaljnije analize pomenutih veza između momenata bacile više svjetla na teoriju tri boje koja postoji za oko.

Mada u disertaciji nema kvantitativnih rezultata analize osobina vezanih dipola (ovo bi zahtjevalo upotrebu računara), dobijeni kvalitativni rezultati sa sigurnošću ukazuju na jedno: sistemi interagujućih dipola imaju čitav niz samo njima svojstvenih specifičnosti i mnoge od ovih specifičnosti mogu da posluže kao osnova za razjašnjavanje izvjesnih pojava u živoj materiji.

DODATAK

Stabilizacija hamiltonijana koji opisuje elektronski podsistem u dielektriku

Pošto se u većem dijelu disertacije koristi Bogoljubovljev metod druge kvantizacije za sisteme u kojima je prekrivanje elektronskih valnih funkcija zanemarivo, ovdje ćemo izložiti osnove tog metoda.

Razmotrićemo dielektrik u čijoj se svakoj elementarnoj ćeliji nalazi σ molekula, tako da su položaji molekula određeni sa

$$\vec{r}_{\vec{n}\theta} = \vec{n} + \vec{\xi}_{\theta} \qquad (n \equiv \vec{n}\theta), \tag{D.1}$$

gdje je $\vec{n}$ vektor koji karakteriše položaj elementarne ćelije, a brojevi $\theta = 1,2,\ldots \sigma$ određuju molekulu u ćeliji.

Kristalnu rešetku ćemo razmatrati u adijabatskoj aproksimaciji, što znači da ne uzimamo u obzir toplotne vibracije molekula. Tada je hamiltonijan elektronskog podsistema oblika

$$H = \sum_{n} H_n + \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' V_{nm} \tag{D.2}$$

$$(n \equiv \vec{n}\theta, \quad m \equiv \vec{m}\omega)$$

Ovdje je H_n hamiltonijan molekule na mjestu n, a V_{nm} je operator međumolekularne interakcije koji se u slučaju neutralnih molekula svodi na dipol-dipol interakciju. Sumira se po svih 6 N molekula kristala.

Hamiltonijan (D.2) ima slijedeći oblik u reprezentaciji druge kvantizacije [6]

$$H=\sum_{nf_1f_2}\Omega_n(f_1f_2)\alpha_n^+(f_1)\alpha_n(f_2)+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\substack{nm\\f_1f_2f_3f_4}}\Phi_{nm}(f_1f_2f_3f_4)\alpha_n^+(f_1)\alpha_n(f_2)\alpha_m^+(f_3)\alpha_m(f_4) \qquad (D.3)$$

$$\Omega_n\equiv\Omega_\theta\ ,\quad \Phi_{nm}\equiv\Phi^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}$$

Indeks f=0,1,2,...F karakteriše stanje elektrona. Fermi operatori stvaranja i poništavanja elektrona koji pripada molekuli $n\equiv\vec{n}\theta$ u stanju f $\alpha_n^+(f)$ i $\alpha_n(f)$ zadovoljavaju uslov

$$\sum_{f=0}^{F}\alpha_n^+(f)\alpha_n(f)=1 \qquad (D.4)$$

Pri računanju matričnih elemenata

$$\Omega_n(f_1f_2)=\int\varphi_n^*(f_1)H_n\varphi_n(f_2)d\tau_n$$

i

$$\Phi_{nm}(f_1f_2f_3f_4)=\int\varphi_n^*(f_1)\varphi_m^*(f_2)V_{nm}\varphi_m(f_3)\varphi_n(f_4)d\tau_n d\tau_m$$

koriste se valne funkcije izolovane (slobodne) molekule.

U cilju stabilizacije hamiltonijana, odnosno eliminacije članova proporcionalnih sa $\alpha_n^+(f)\alpha_n(0)$ i $\alpha_n^+(0)\alpha_n(f)$, sa Fermi operatora $\alpha_n(f)$ preći ćemo na nove Fermi operatore $a_n(\mu)$ slijedećom unitarnom transformacijom

$$\alpha_n=\sum_{\mu=0}^{F}u^{\theta}_{f\mu}a_n(\mu) \qquad (D.5)$$

pri čemu elementi matrice transformacije zadovoljavaju slijedeći uslov unitarnosti

$$\sum_f u^{*\theta}_{f\mu_1}u^{\theta}_{f\mu_2}=\delta_{\mu_1\mu_2} \qquad (D.6)$$

Hamiltonijan elektronskog podsistema izražen preko novih Fermi operatora glasi

$$H=\sum_{n\mu_1\mu_2} A_n(\mu_1\mu_2)\,a_n^+(\mu_1)\,a_n(\mu_2)+$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\substack{nm\\ \mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}} B_{nm}(\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4)\,a_n^+(\mu_1)\,a_n(\mu_2)\,a_m^+(\mu_3)\,a_m(\mu_4) \tag{D.7}$$

gdje je

$$A_n(\mu_1\mu_2)=\sum_{f_1f_2}\Omega_n(f_1f_2)\,\overset{*\theta}{u}_{f_1\mu_1}\,\overset{\theta}{u}_{f_2\mu_2}$$
$$B_{nm}(\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4)=\sum_{f_1f_2f_3f_4}\Phi_{nm}(f_1f_2f_3f_4)\,\overset{*\theta}{u}_{f_1\mu_1}\,\overset{\theta}{u}_{f_2\mu_2}\,\overset{*\theta}{u}_{f_3\mu_3}\,\overset{\theta}{u}_{f_4\mu_4} \tag{D.8}$$
$$A_n\equiv A_\theta\,,\qquad B_{nm}\equiv B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}$$

U formuli (D.7) izdvojićemo članove u kojima je jedan, dva, tri ili četiri indeksa μ jednako nuli, tako da će svi indeksi μ po kojima se sumira biti različiti od nule. Pri tom ćemo uzeti u obzir da uslov (D.4) izražen preko novih Fermi operatora glasi

$$a_n^+(0)\,a_n(0)+\sum_{\mu\neq 0}a_n^+(\mu)\,a_n(\mu)=1\,, \tag{D.9}$$

kao i da iz (D.7) slijedi da koeficijenti A i B zadovoljavaju uslove

$$\overset{*}{A}_n(\mu_1\mu_2)=A_n(\mu_2\mu_1)$$
$$\overset{*}{B}_{nm}(\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4)=B_{nm}(\mu_4\mu_3\mu_2\mu_1) \tag{D.10}$$
$$B_{nm}(\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4)=B_{nm}(\mu_3\mu_4\mu_1\mu_2)$$

Tada se hamiltonijan (D.7) može napisati u obliku

$$H=H_0+H_1+H_2+H_3+H_4 \tag{D.11}$$

gdje je

$$H_0=N\Big[\sum_\theta A_\theta(00)+\frac{1}{2}\sum_{\theta\omega}B^{\theta\omega}(0000)\Big] \tag{D.12}$$

$$H_1=\sum_{\vec{n}\theta\mu}\Big[A_\theta(\mu 0)+\sum_\omega B^{\theta\omega}(\mu 000)\Big]a^+_{\vec{n}\theta}(\mu)\,a_{\vec{n}\theta}(0)+$$
$$+\sum_{\vec{n}\theta\mu}\Big[A_\theta(0\mu)+\sum_\omega B^{\theta\omega}(0\mu 00)\Big]a^+_{\vec{n}\theta}(0)\,a_{\vec{n}\theta}(\mu) \tag{D.13}$$

$$H_2 = -\sum_{\vec{n}\theta\mu}\Big[A_\theta(00) + \sum_\omega B^{\theta\omega}(0000)\Big] a^+_{\vec{n}\theta}(\mu)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu) +$$

$$+ \sum_{\vec{n}\theta\mu_1\mu_2}\Big[A_\theta(\mu_1\mu_2) + \sum_\omega B^{\theta\omega}(\mu_1\mu_2 00)\Big] a^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu_2) +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}\Big[B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1 0 \mu_2 0)\, a^+_{\vec{n}\theta}(0)\, a^+_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\, a_{\vec{m}\omega}(0) +$$

$$+ 2B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1 00 \mu_2)\, a^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a_{\vec{n}\theta}(0)\, a^+_{\vec{m}\omega}(0)\, a_{\vec{m}\omega}(\mu) +$$

$$+ B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(0\mu_1 0\mu_2)\, a^+_{\vec{n}\theta}(0)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a^+_{\vec{m}\omega}(0)\, a_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\Big] \tag{D.14}$$

$$H_3 = \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2\mu_3}}\Big[B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2\mu_3 0)\, a^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu_2)\, a^+_{\vec{m}\omega}(\mu_3)\, a_{\vec{m}\omega}(0) +$$

$$+ B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2 0\mu_3)\, a^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu_2)\, a^+_{\vec{m}\omega}(0)\, a_{\vec{m}\omega}(\mu_3)\Big] -$$

$$- \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2}}\Big[B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu 000)\, a^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a_{\vec{n}\theta}(0)\, a^+_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\, a_{\vec{m}\omega}(\mu_2) +$$

$$+ B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(0\mu_1 00)\, a^+_{\vec{n}\theta}(0)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a^+_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\, a_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\Big] \tag{D.15}$$

$$H_4 = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2}} B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(0000)\, a^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a^+_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\, a_{\vec{m}\omega}(\mu_2) -$$

$$- \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2\mu_3}} B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2 00)\, a^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu_2)\, a^+_{\vec{m}\omega}(\mu_3)\, a_{\vec{m}\omega}(\mu_3) +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}} B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4)\, a^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu_2)\, a^+_{\vec{m}\omega}(\mu_3)\, a_{\vec{m}\omega}(\mu_4) \tag{D.16}$$

$$B^{\theta\omega} = \sum_{\vec{l}} B^{\theta\omega}_{\vec{l}}\,, \quad \vec{l} = \vec{n} - \vec{m}$$

Uvešćemo operatore stvaranja i poništavanja pobuđenja tipa μ na mjestu $\vec{n}\,\theta$

$$\mathcal{P}^+_{\vec{n}\theta}(\mu) = a^+_{\vec{n}\theta}(\mu)\, a_{\vec{n}\theta}(0)$$
$$\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu) = a^+_{\vec{n}\theta}(0)\, a_{\vec{n}\theta}(\mu) \tag{D.17}$$

koji zadovoljavaju komutacione relacije za kvazi-Pauli operatore (IV.2.16), a osim toga i relaciju

$$a^{+}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\,a_{\vec{n}\theta}(\mu_2) = \mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu_2)$$

Uvođenjem kvazi-Pauli operatora relacije (D.13), (D.14), (D.15) i (D.16) mogu se napisati kao

$$H_1 = \sum_{\vec{n}\theta\mu}\Big[A_\theta(\mu 0) + \sum_\omega B^{\theta\omega}(\mu 000)\Big]\mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(\mu) + \sum_{\vec{n}\theta\mu}\Big[A_\theta(0\mu) + \sum_\omega B^{\theta\omega}(0\mu 00)\Big]\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu) \tag{D.18}$$

$$\begin{aligned} H_2 = {} & \sum_{\vec{n}\theta\mu}\Delta_\theta(\mu)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(\mu)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu) + \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2}} X^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\,\mathcal{P}_{\vec{m}\omega}(\mu_2) + \\ & + \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2}}\Big[B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1 0 \mu_2 0)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{m}\omega}(\mu_2) + \\ & + B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(0\mu_1 0\mu_2)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\,\mathcal{P}_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\Big] \end{aligned} \tag{D.19}$$

$$\Delta_\theta(\mu) = \Big\{A_\theta(\mu\mu) - A_\theta(00) + \sum_\omega\Big[B^{\theta\omega}(\mu\mu 00) - B^{\theta\omega}(0000)\Big]\Big\}$$

$$X^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2) = B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1 00\mu_2) + \Big[A_\theta(\mu_1\mu_2) + \sum_\omega B^{\theta\omega}(\mu_1\mu_2 00)\Big]\,\delta_{\vec{n}\vec{m}}\,\delta_{\theta\omega}(1-\delta_{\mu_1\mu_2})$$

$$\begin{aligned} H_3 = {} & \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2\mu_3}}\Big[B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2 0\mu_3)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu_2)\,\mathcal{P}_{\vec{m}\omega}(\mu_3) + \\ & + B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2\mu_3 0)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{m}\omega}(\mu_3)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(\mu_2)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\Big] - \\ & - \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2}}\Big[B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1 000)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\,\mathcal{P}_{\vec{m}\omega}(\mu_2) + \\ & + B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(0\mu_1 00)\,\mathcal{P}^{+}_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\,\mathcal{P}_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\,\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\Big] \end{aligned} \tag{D.20}$$

$$H_4=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2}} B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(0000)\mathcal{P}^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\mathcal{P}^+_{\vec{m}\omega}(\mu_2)\mathcal{P}_{\vec{m}\omega}(\mu_2)-$$

$$-\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2\mu_3}} B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2 00)\mathcal{P}^+_{\vec{n}\theta}(\mu)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu_2)\mathcal{P}^+_{\vec{m}\omega}(\mu_3)\mathcal{P}_{\vec{m}\omega}(\mu_3)+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\theta\omega\\ \mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}} B^{\theta\omega}_{\vec{n}-\vec{m}}(\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4)\mathcal{P}^+_{\vec{n}\theta}(\mu_1)\mathcal{P}_{\vec{n}\theta}(\mu_2)\mathcal{P}^+_{\vec{m}\omega}(\mu_3)\mathcal{P}_{\vec{m}\omega}(\mu_4) \tag{D.21}$$

Na taj način je sistem interagirajućih fermiona opisan hamiltonijanom (D.11) sveden na sistem slabo interagirajućih kvazičestica.

Postupak stabilizacije hamiltonijana provešćemo tako što ćemo odrediti minimum energije osnovnog stanja (D.12) uz dopunski uslov

$$\sum_f \overset{*}{u}{}^{\theta}_{f0}\, u^{\theta}_{f0}-1=0 \tag{D.22}$$

Na taj način se iz **transformisanog hamiltonijana izraženog** preko kvazičestičnih operatora $\mathcal{P}$ **eliminišu članovi koji sadrže** samo jedan kvazi-Pauli operator.

Uslov minimuma svodi se na

$$\delta T=\frac{\partial T}{\partial \overset{*}{u}{}^{\theta}_{f0}}\,\delta\overset{*}{u}{}^{\theta}_{f0}+\frac{\partial T}{\partial u^{\theta}_{f0}}\,\delta u^{\theta}_{f0}=0 \tag{D.23}$$

gdje je

$$T=N\sum_\theta\Big\{\sum_{f_1f_2}\Omega_\theta(f_1f_2)\overset{*}{u}{}^{\theta}_{f_10}\,u^{\theta}_{f_20}+\frac{1}{2}\sum_{f_1f_2f_3f_4\omega}\Phi^{\theta\omega}(f_1f_2f_3f_4)\overset{*}{u}{}^{\theta}_{f_10}\,u^{\theta}_{f_20}\,\overset{*}{u}{}^{\omega}_{f_30}\,u^{\omega}_{f_40}-$$

$$-\sum_f\lambda_\theta\overset{*}{u}{}^{\theta}_{f0}\,u^{\theta}_{f0}+\lambda_\theta\Big\} \tag{D.24}$$

Da bi H_0 bilo minimalno transformacione funkcije u_θ i Lagrangeove multiplikatore λ_θ treba odrediti iz slijedećeg sistema jednačina

$$\sum_{f_2}u^{\theta}_{f_20}\Big[\Omega_\theta(f_1f_2)+\sum_{f_3f_4\omega}\Phi^{\theta\omega}(f_1f_2f_3f_4)\,\overset{*}{u}{}^{\omega}_{f_30}\,u^{\omega}_{f_40}\Big]=\lambda_\theta u^{\theta}_{f_10} \tag{D.25}$$

$$f_1\,f_2\,f_3\,f_4=1,2,\ldots F\quad;\quad \theta,\omega=1,2,\ldots 6$$

Tada je $H_1=0$, a minimalna energija osnovnog stanja je

$$H_0 = N\Big[\sum_{\theta}\lambda_{\theta} - \frac{1}{2}\sum_{\substack{f_1f_2f_3f_4\\ \theta\omega}} \Phi^{\theta\omega}(f_1f_2f_3f_4)\, \overset{*\theta}{u}_{f_1 0}\, \overset{\theta}{u}_{f_2 0}\, \overset{*\omega}{u}_{f_3 0}\, \overset{\omega}{u}_{f_4 0}\Big] \tag{D.26}$$

L I T E R A T U R A

1. I.Frenkel, Phys.Rev. 37 , 1276 (1931)

2. R.Peierls, Ann.Phys. 13 , 5, 905 (1932)

3. V.M.Agranovič, Teorija eksitonov, "Nauka", Moskva (1968)

4. A.S.Davidov, ŽETF , 18 , 210, (1948)

5. D.Lalović, B.Tošić, R.Žakula, Phys.Rev. 178 , 1472 (1969)

6. N.N.Bogoliubov, Lectures on Quantum Statistics, Macdonald Co, London, 1967

7. V.M.Agranovič, ŽETF, 37 , 430 (1959)

8. V.M.Agranovič, B.S.Tošić, ŽETF , 53 , 149 (1967)

9. B.S.Tošić, Phys.Stat.Sol.(b), 48 K, 129 (1971)

10. B.S.Tošić, M.M.Marinković, Phys.Letters, 51 A, 127 (1975)

11. M.M.Marinković, B.S.Tošić, Phys.Stat.Sol.(b), 67 , 435 (1975)

12. M.M.Marinković, Doktorska disertacija, Novi Sad, 1975

13. F.J.Dyson, Phys.Rev. 102 , 1217 (1956)

14. S.M.Neamten, Phys.Rev. 92 , 1362 (1953), 94 , 327 (1954)

15. U.Fano, Phys.Rev. 103 , 1202 (1956)

16. J.J.Hopfield, Phys.Rev. 112 , 1955 (1958)

17. A.S.Davidov, Teorija molekularnih eksitonov, "Nauka", Moskva, 1968

18. S.I.Pekar, ŽETF, 18 , 210 (1948)

19. M.M.Marinković, J.Maksimov, Ž.Škrbić, Physicy, 90 C, 585 (1975)

20. W.Heitler, The Quantum Theory of Radiation, Oxford, 1954

21. A.S.Davidov, Kvantovaja mehanika, "Nauka", Moskva, 1973

22. N.N.Bogoliubov, Izabranie trudi, "Nauka dumka", Kiev , 1970

23. S.V.Tjablikov, Metodi kvantovoj teorii magnetizma, "Nauka", Moskva

24. R.Đorđević, S.D.Stojanović, R.B.Žakula, J.of Low.Temp. Phys. 6 (3/4), 287 (1971)

25. S.V.Vonsovski, Magnetizm, "Nauka", Moskva, 1971

26. R.M.Uajt, Kvantovaja teorija magnetizma, "Mir", Moskva, 1972

27. D.C.Mattis, The Theory of Magnetism, Harper and Row, New York, Evanston, London

28. S.V.Vonsovski, K.B.Vlasov, E.A.Turov, ŽETF, 29 , 37 (1955)

29. T.Holstein, H.Primakoff, Phys.Rev. 58 , 1098 (1940)

30. W.Haubenreiser, Phys.Lett. 6 , 43 (1963)

31. C.W.Haas, Phys.Rev. 132 , 228 (1963)

32. F.Leoni, C.R.Natoli, Phys.Rev. B 4 , 2243 (1971)

33. S.V.Vonsovski, E.A.Turov, ŽETF, 24 , 419 (1953)

34. R.A.Tahir-Kheli, D.ter Haar, Phys.Rev. 130, 108 (1963)

35. A.S.Davidov, ŽETF, 20 , 760 (1950)

36. B.Tošić, M.Marinković, R.Žakula, Rev.of Res. of Sci. 6 , 83 (1976) , Univ. Novi Sad

37. L.Landau, E.Lifšic, Statistička fizika, Naučna knjiga, Beograd, 1960

38. G.Venkataraman, V.Sahni, Rev.of Mod.Phys. 42 , 409 (1970)

39. A.H.Cooke, D.T.Edmonds, C.B.P.Finn, W.P.Wolf, Proc. Phys.Soc. 74 (6), 791 (1959)

40. E.Becker, M.Plischke, Phys.Rev. B1 , 314 (1970)

41. R.B.Griffiths, Phys.Rev. 176 , 655 (1968)

42. M.L.Kulić, B.S.Tošić, Phys.Stat.Sol (b) 56 , K 79 (1973)

43. M.M.Marinković, Phys.Stat.Sol. (b) 69 , 291 (1975)

44. F.J.Dyson, Phys.Rev. 102 , 1230 (1956)

45. V.L.Bonch-Bruevich, S,V,Tjablikov, The Green Function Method in Statistical Mechanics, North Holland Publ.Co, Amsterdam, 1962

46. G.Knežević, B.Nikin, B.Tošić, Physica 80 A, 333 (1978)

47. B.Nikin, B.S.Tošić, V.M.Zeković, Phys.Stat.Sol. 45 , 449 (1974)

48. L.D.Landau, E.M.Lifšic, Kvantovaja mehanika, Moskva, 1963

49. G.Knežević, M.Marinković, B.Tošić, On Some Specific Properties of Systems Endowed with Dipole-Dipole Interactions, primljeno za publikovanje u Int.J.of Q.Chem.

50. A.Szent Györgyi, Bioenergetics, Academic Press, New York, 1957

51. A.Szent Györgyi, Bioelectronics, Academic Press, New York, 1968

52. H.Frölich, Int.J.of Q.Chem. 2 , 641 (1968)

53. A.Szent Györgyi, Introd. to a Submolecular Biology, Academic Press, New York, 1960

54. A.W.Ham, Histology, J.B.Lippincott Co, Philadelphia, Toronto, 1974

55. A.C.Guyton, Medicinska fiziologija, Medicinska knjiga, Beograd, Zagreb, 1963

56. B.A.Houssai, Human Physiology, Mc Graw-Hill Book Co.Inc, New York, Toronto, London, 1955

57. R.A.Cone, W.L.Pak, Principles of Receptor Physiology, ed.by R.Loewenstein, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1971

58. B.S.Tošić, FTT , 9 , 1713 (1967)

59. A.S.Davidov, Teorija tverdogo tela, Nauka, Moskva, 1976

60. F.G.Bass, M.I.Kaganov, ŽETF , 37 , 1390 (1959)

61. D.V.Kapor, S.D.Stojanović, M.J.Škrinjar, B.S.Tošić, Phys.Stat.Sol. (b) 74 , 103 (1976)

62. S.D.Stojanović, M.J.Škrinjar, B.S.Tošić, Phys.Lett. 59 A, 5, 396 (1976)

63. I.E.Djaloshinskii, L.P.Pitaievski, ŽETF , 36 , 1797 (1959)

64. D.N.Zubarev, Neravnovesnaja statističeskaja termodinamika, Nauka, Moskva, 1971

65. G.Davidović-Ristovski, Doktorska disertacija, Beograd, 1977