UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET

ELEKTRONSKA-MAGNETNA REZONANCA

NOVI SAD 1978

Zahvaljujem se profesoru dr Bratislavu Tošiću na pružanju svestrane pomoći i datoj sugestiji prilikom izrade ovog rada.

E L E K T R O N S K A - M A G N E T N A

R E Z O N A N C A

I G L A V A

HAMILTONIJAN SISTEMA SA L-S SPREGOM

II G L A V A

STATISTIČKE OSOBINE SISTEMA SA L-S INTERAKCIJOM

U V O D

Efekti spin-orbitalne interakcije izučavaju se poslednjih nekoliko godina u vezi sa magneto-optičkim fenomenima u magnetnim dielektricima. Problemi, ideje i razni prilazi analizi ovih fenomena izloženi su u monografiji /1/.

Predmet ovoga rada je formulacija kompletne teorije jednoelektronskih pobudjenja koji nastaju usled spin-orbitalne interakcije, Dobijeni rezultati mogu se direktno primeniti na gasove ili na kristale sa izvanredno malim L-S kuplovanjem. Formulisanje ovakve teorije predstavlja neophodnu osnovu za formiranje odgovarajuće teorije jako vezanih sistema (kristala), pošto stanja izolovanog atoma predstavljaju osnovu za definisanje kristalnog Hamiltonijana.
Ekscitacije koje će biti analizirane u ovom radu nastaju usled promene orijentacije i spinskog i orbitalnog momenta. Ovo su niskoenergetske ekscitacije pa zbog toga toplotni efekti bitno definišu stanje sistema. Spin-orbitalna interakcija se uzima kao glavni mehanizam koji karakteriše osobine ovih ekscitacija.

§ 1. STABILIZACIJA HAMILTONIJANA ELEKTRONSKOG PODSISTEMA

Pre nego što predjemo na analizu jednoelektronskog pobudjenja u izolovanom atomu, izložićemo opštu šemu za analizu pobudjenja u elektronskom podsistemu dielektrika.
Osnovna ideja kojom se ovde može rukovoditi je činjenica da se elektronske talasne funkcije susednih molekula slabo prekrivaju pa se zbog toga prilikom analize ne mora koristiti ceo prostor Fermijonskih stanja već samo jedan njegov karakteristični podprostor.

Ako se u dielektriku ograničimo samo dvočestičnim interakcijama onda se Hamiltonijan sistema može pisati u obliku:

$$H = \sum_{a,\mu,\nu} \Omega_{\mu\nu}(a) f^{+}_{\mu}(a) f_{\nu}(a) + \frac{1}{2} \sum_{a b \mu \mu' \nu \nu'} \Phi_{ab}(\mu\mu'\nu\nu') \cdot f^{+}_{\mu}(a) f_{\mu'}(a) f^{+}_{\nu}(b) f_{\nu'}(b) \qquad \text{I.1.1.}$$

U ovoj formuli f i f^{+} su Fermi operatori koji kreiraju elektrone u stanju μ na datom čvoru a i oni zadovoljavaju poznate Fermijonske komutacione relacije

$$\left\{ f_{\mu}(a), f^{+}_{\nu}(b) \right\} = \delta_{\mu\nu} \delta_{ab} \qquad \text{I.1.2.}$$

Predpostavićemo da se svaki od molekula može ekscitirati na $\Gamma + 1$ način pa zato:

$$\mu, \mu', \nu, \nu' \in (0, 1, 2 \ldots \Gamma); \quad \alpha, \beta \in (1, 2 \ldots L) \qquad \text{I.1.3.}$$

Takodje predpostavimo da je rešetka složena pa možemo pisati:

$$a \equiv \vec{n} + \vec{\rho}_{\alpha}(\vec{n}) \quad ; \quad b \equiv \vec{m} + \vec{\rho}_{\beta}(\vec{m}) \qquad \text{I.1.4.}$$

Gde α i β uzimaju L vrednosti što znači da se posmatrana rešetka sastoji od L podrešetki. Veličine $\Omega_{\mu\nu}(\alpha)$ karakterišu stanja energije izolovanog molekula. Hamiltonijan izolovanog molekula ima oblik:

$$H_a \equiv H_{\alpha} = H^{(0)}_{\alpha} + H^{(int)}_{\alpha} \qquad \text{I.1.5.}$$

Treba naglasiti da Hamiltonijan izolovanog molekula ne zavisi od indeksa kristalne ćelije n već samo od indeksa podrešetke

Pretpostavlja se da svojstveni problem Hamiltonijana možemo da rešimo:

$$H_{\alpha}^{(0)} \psi_{\mu}(\vec{\xi}_{\alpha}) = E_{\mu}(\alpha) \psi_{\mu}(\vec{\xi}_{\alpha}) \qquad \text{I.1.6.}$$

Tada su veličine $\Omega_{\mu\nu}(a) = \Omega_{\mu\nu}(\alpha)$ date sa

$$\Omega_{\mu\nu}(a) = \Omega_{\mu\nu}(\alpha) = \int d^3\vec{\xi}_{\alpha}\, \overset{*}{\psi}_{\mu}(\vec{\xi}_{\alpha}) \left[H_{\alpha}^{(0)} + H_{\alpha}^{(int)}\right] \psi_{\nu}(\vec{\xi}_{\alpha}) \qquad \text{I.1.7.}$$

Gde su $\vec{\xi}_{\alpha}$ skupovi unutrašnjih koordinata molekula na mestu α . Ako izmedju molekula deluju potencijalne energije oblika $V_{\vec{n}-\vec{m}}^{\alpha\beta}$ onda su matrični elementi ove interakcije dati sa:

$$\Phi_{ab}(\mu\mu'\nu\nu') \equiv \phi_{\vec{n}-\vec{m}}^{\alpha\beta}(\mu\mu'\nu\nu') = \int d^3\vec{\xi}_{\alpha}\, d^3\vec{\xi}_{\beta}\, \overset{*}{\psi}_{\mu}(\vec{\xi}_{\alpha})\, \overset{*}{\psi}_{\nu}(\vec{\xi}_{\beta}) \cdot V_{\vec{n}-\vec{m}}^{\alpha\beta}\, \psi_{\nu'}(\vec{\xi}_{\beta})\, \psi_{\mu'}(\vec{\xi}_{\alpha}) \qquad \text{I.1.8.}$$

Hamiltonijan I.1.1. zatvoren je u Fermijonskom podprostoru koji je izdvojen uslovom

$$\overset{*}{\vec{f}}{}^{\alpha}(\vec{n})\, \vec{f}^{\alpha}(\vec{n}) = 1 \qquad \text{I.1.9.}$$

Gde su $\vec{f}^{*}$ i $\vec{f}$ vektori dati sa

$$\vec{f}^{\alpha}(\vec{n}) = \begin{Vmatrix} f_0^{\alpha}(\vec{n}) \\ f_1^{\alpha}(\vec{n}) \\ \vdots \\ f_r^{\alpha}(\vec{n}) \end{Vmatrix} ; \qquad \overset{*}{\vec{f}}{}^{\alpha}(\vec{n}) = \begin{Vmatrix} \overset{+}{f}{}_0^{\alpha}(\vec{n}) & \overset{+}{f}{}_1^{\alpha}(\vec{n}) \dots \overset{+}{f}{}_r^{\alpha}(\vec{n}) \end{Vmatrix} \qquad \text{I.1.10.}$$

Od Fermi operatora f^{+} i f preći ćemo na nove Fermi operatore φ^{+} i φ .

$$\left\{ \varphi_{\theta}^{\alpha}(\vec{n}), \overset{+}{\varphi}{}_{\omega}^{\beta}(\vec{m}) \right\} = \delta_{\theta\omega}\, \delta_{\alpha\beta}\, \delta_{\vec{n}\vec{m}}$$

Da bi transformacija bila unitarna mora važiti uslov:

$$\overset{*}{\vec{f}}{}^{\alpha}(\bar{n})\,\vec{f}^{\alpha}(\bar{n}) = \overset{*}{\vec{\varphi}}{}^{\alpha}(\bar{n})\,\vec{\varphi}^{\alpha}(\bar{n})$$

I.1.11.

gde su vektori $\overset{*}{\vec{\varphi}}$ i $\vec{\varphi}$ dati sa

$$\vec{\varphi}^{\alpha}(\bar{n}) = \left\| \begin{matrix} \varphi_0^{\alpha}(\bar{n}) \\ \vdots \\ \varphi_{\theta}^{\alpha}(\bar{n}) \\ \vdots \\ \varphi_{\Gamma}^{\alpha}(\bar{n}) \end{matrix} \right\| ; \quad \overset{*}{\vec{\varphi}}{}^{\alpha}(\bar{n}) = \left\| \overset{+}{\varphi}{}_0^{\alpha}(\bar{n}) \ldots \overset{+}{\varphi}{}_{\theta}^{\alpha}(\bar{n}) \ldots \overset{+}{\varphi}{}_{\Gamma}^{\alpha}(\bar{n}) \right\| \qquad \text{I.1.12.}$$

Transformaciju sa f na φ izrazićemo na sledeći način:

$$\vec{f}^{\alpha}(\bar{n}) = \hat{U}^{\alpha}\,\vec{\varphi}^{\alpha}(\bar{n}) \; ; \; \overset{*}{\vec{f}}{}^{\alpha}(\bar{n}) = \overset{*}{\vec{\varphi}}{}^{\alpha}(\bar{n})\,\hat{U}^{\alpha +} \qquad \text{I.1.13.}$$

Zbog unitarnosti transformacije mora važiti

$$\overset{*}{\vec{f}}{}^{\alpha}(\bar{n})\,\vec{f}^{\alpha}(\bar{n}) = \overset{*}{\vec{\varphi}}{}^{\alpha}(\bar{n})\,\hat{U}^{\alpha +}\hat{U}^{\alpha}\,\vec{\varphi}^{\alpha}(\bar{n}) = 1 \qquad \text{I.1.14.}$$

Odakle sledi da je $\hat{U}$ unitarna matrica tj.

$$\hat{U}^{\alpha +}\hat{U}^{\alpha} = \hat{1} \; ; \; \hat{U}^{\alpha +} = \hat{U}^{\alpha -1} \; ; \; \sum_{K=0}^{\Gamma} \overset{*}{\mathcal{U}}{}_{Ki}^{\alpha}\,\mathcal{U}_{Kj}^{\alpha} = \delta_{ij} \qquad \text{I.1.15.}$$

Transformaciju I.1.13. možemo napisati eksplicitnije u obliku:

$$\overset{+}{f}{}_{\mu}^{\alpha}(\bar{n}) = \sum_{\theta=0}^{\Gamma} \overset{*}{\mathcal{U}}{}_{\mu\theta}^{\alpha}\,\overset{+}{\varphi}{}_{\theta}^{\alpha}(\bar{n}) \; ; \; f_{\nu}^{\beta}(\bar{m}) = \sum_{\omega=0}^{\Gamma} \mathcal{U}_{\nu\omega}^{\beta}\,\varphi_{\omega}^{\beta}(\bar{m}) \qquad \text{I.1.16.}$$

Zamenom I.1.16. u I.1.1.dobijamo:

$$H = \sum_{\bar{n}\alpha\theta\omega} X_{\theta\omega}^{\alpha}\,\overset{+}{\varphi}{}_{\theta}^{\alpha}(\bar{n})\,\varphi_{\omega}^{\alpha}(\bar{n}) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}\alpha\beta\theta\theta'\omega\omega'} Y_{\bar{n}-\bar{m}}^{\alpha\beta}(\theta\theta'\omega\omega')\,\overset{+}{\varphi}{}_{\theta}^{\alpha}(\bar{n})\,\varphi_{\theta'}^{\alpha}(\bar{n})\,\overset{+}{\varphi}{}_{\omega}^{\beta}(\bar{m})\,\varphi_{\omega'}^{\beta}(\bar{m})$$

I.1.17.

Gde su novi matrični elementi dati sa :

$$X^{\alpha}_{\theta\omega} = \sum_{\mu\nu} \Omega_{\mu\nu}(\alpha) \overset{*}{\mathcal{U}}{}^{\alpha}_{\mu\theta} \mathcal{U}^{\alpha}_{\nu\omega}$$

$$Y^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta\theta'\omega\omega') = \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \Phi^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\mu\mu'\nu\nu') \overset{*}{\mathcal{U}}{}^{\alpha}_{\mu\theta} \mathcal{U}^{\alpha}_{\mu'\theta'} \overset{*}{\mathcal{U}}{}^{\beta}_{\nu\omega} \mathcal{U}^{\beta}_{\nu'\omega'}$$

I.1.18.

Od Fermi operatora f^+ i f možemo preći na kvazi-Pauli operatore P i P^+ koji kreiraju pobudjenje tipa μ na molekul koji se nalazi na čvoru $\bar{n}$ α
Obrazci za prelazak sa f na P su:

$$P^{\alpha}_{\mu}(\bar{n}) = \overset{+}{f}{}^{\alpha}_{0}(\bar{n}) f^{\alpha}_{\mu}(\bar{n}) \; ; \quad \overset{+}{P}{}^{\alpha}_{\mu}(\bar{n}) = \overset{+}{f}{}^{\alpha}_{\mu}(\bar{n}) f^{\alpha}_{0}(\bar{n})$$
$$\mu \neq 0$$

$$\overset{+}{P}{}^{\alpha}_{\mu}(\bar{n}) P^{\alpha}_{\nu}(\bar{n}) = \overset{+}{f}{}^{\alpha}_{\mu}(\bar{n}) f^{\alpha}_{\nu}(\bar{n})$$

$$\overset{+}{f}{}^{\alpha}_{0}(\bar{n}) f^{\alpha}_{0}(\bar{n}) = 1 - \sum_{\mu=1}^{\Gamma} \overset{+}{f}{}^{\alpha}_{\mu}(\bar{n}) f^{\alpha}_{\mu}(\bar{n}) = 1 - \sum_{\mu=1}^{\Gamma} \overset{+}{P}{}^{\alpha}_{\mu}(\bar{n}) P^{\alpha}_{\mu}(\bar{n})$$

I.1.19.

Od Fermi operatora φ^+ i φ može se preći na kvazi-Pauli operatore Q^+ i Q po formuli

$$Q^{\alpha}_{\theta}(\bar{n}) = \overset{+}{\varphi}{}^{\alpha}_{0}(\bar{n}) \varphi^{\alpha}_{\theta}(\bar{n}) \; ; \quad \overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n}) = \overset{+}{\varphi}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n}) \varphi^{\alpha}_{0}(\bar{n})$$
$$\theta \neq 0$$

$$\overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n}) Q^{\alpha}_{\omega}(\bar{n}) = \overset{+}{\varphi}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n}) \varphi^{\alpha}_{\omega}(\bar{n})$$

$$\overset{+}{\varphi}{}^{\alpha}_{0}(\bar{n}) \varphi^{\alpha}_{0}(\bar{n}) = 1 - \sum_{\theta=1}^{\Gamma} \overset{+}{\varphi}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n}) \varphi^{\alpha}_{\theta}(\bar{n}) = 1 - \sum_{\theta=1}^{\Gamma} \overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n}) Q^{\alpha}_{\theta}(\bar{n})$$

I.1.20.

Naš cilj je da odredimo koeficiente $U_{\mu\nu}$ unitarne matrice $\hat{U}$ tako da iz Hamiltonijana I.1.17. isčeznu članovi linearni po operatore Q^+ i Q .

Prethodnu sumu I.1.17. treba razviti i koristeći formule I.1.20. izraziti I.1.17. preko operatora Q^+ i Q .
U tom cilju iz Hamiltonijana I.1.17. izdvojićemo energiju osnovnog stanja i ona ima oblik:

$$H_0 = N\left\{\sum_{\alpha} X^{\alpha}_{00} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta} Y^{\alpha\beta}(0000)\right\} \qquad \text{I.1.21.}$$

Linearni delovi Hamiltonijana I.1.17. imaju oblik

$$H_1 = \sum_{\vec{n}\alpha\Theta} \overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\Theta}(\vec{n})\left\{X^{\alpha}_{\Theta 0} + \frac{1}{2}\sum_{\beta} Y^{\alpha\beta}(\Theta 000) + \frac{1}{2}\sum_{\beta} Y^{\beta\alpha}(00\Theta 0)\right\} +$$

$$+ \sum_{\vec{n}\alpha\Theta} Q^{\alpha}_{\Theta}(\vec{n})\left\{X^{\alpha}_{0\Theta} + \frac{1}{2}\sum_{\beta} Y^{\alpha\beta}(0\Theta 00) + \frac{1}{2}\sum_{\beta} Y^{\beta\alpha}(000\Theta)\right\}$$

I.1.22.

Koeficiente $U_{\mu\nu}$ unitarne matrice $\hat{U}$ odredićemo tako da energija osnovnog stanja sistema I.1.21. ima ekstremnu vrednost. Pošto koeficienti $U_{\mu 0}$ koji ulaze u sastav H_0 nisu medjusobno nezavisni već zadovoljavaju uslov

$$\sum_{\mu} \overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0} U^{\alpha}_{\mu 0} = 1 \qquad \text{I.1.23.}$$

prilikom traženja ekstremne vrednosti H_0 moramo koristiti Lagranžev metod neodredjenih množitelja.
To znači da ćemo relaciju $\sum_{\mu} \overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0} U^{\alpha}_{\mu 0} - 1 = 0$ pomnožiti neodredjenim faktorima $\mathcal{L}_{\alpha}$, rezultat sumirati po α i sve to dodati formuli h_0.

$$h_0 = \frac{H_0}{N} = \sum_{\alpha}\left\{X^{\alpha}_{00} + \frac{1}{2}\sum_{\beta} Y^{\alpha\beta}(0000)\right\} =$$

$$= \sum_{\alpha}\left\{\sum_{\mu\nu} \Omega_{\mu\nu}(\alpha)\overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0} U^{\alpha}_{\nu 0} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\sum_{\beta}\sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \Phi^{\alpha\beta}(\mu\mu'\nu\nu')\overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0} U^{\alpha}_{\mu' 0} \overset{*}{U}{}^{\beta}_{\nu 0} U^{\beta}_{\nu' 0}\right\}$$

$$h_0 = \sum_{\alpha\mu\nu} \Omega_{\mu\nu}(\alpha)\overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0} U^{\alpha}_{\nu 0} +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\mu\mu'\nu\nu'} \Phi^{\alpha\beta}(\mu\mu'\nu\nu')\overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0} U^{\alpha}_{\mu' 0} \overset{*}{U}{}^{\beta}_{\nu 0} U^{\beta}_{\nu' 0}$$

Tako dobijamo formu R koja ima oblik:

$$R=\sum_{\alpha\mu\nu}\Omega_{\mu\nu}(\alpha)\overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0}U^{\alpha}_{\nu 0}+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\mu\mu'\nu\nu'}\Phi^{\alpha\beta}(\mu\mu'\nu\nu')\overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0}U^{\alpha}_{\mu' 0}\overset{*}{U}{}^{\beta}_{\nu 0}U^{\beta}_{\nu' 0}-$$

$$-\sum_{\alpha\mu}\mathcal{X}_{\alpha}\overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0}U^{\alpha}_{\mu 0}+\sum_{\alpha}\mathcal{X}_{\alpha}$$

I.1.24.

Ekstremum energije osnovnog stanja dobije se ako varijaciju forme R izjednačimo sa nulom.

$$\delta R=\frac{\partial R}{\partial U^{\gamma}_{\lambda 0}}\delta U^{\gamma}_{\lambda 0}+\frac{\partial R}{\partial \overset{*}{U}{}^{\gamma}_{\lambda 0}}\delta \overset{*}{U}{}^{\gamma}_{\lambda 0}=0$$ I.1.25.

Što se svodi na

$$\frac{\partial R}{\partial U^{\gamma}_{\lambda 0}}=0\quad;\quad\frac{\partial R}{\partial \overset{*}{U}{}^{\gamma}_{\lambda 0}}=0$$ I.1.26.

Posle sredjivanja uslova I.1.26. za odredjivanje funkcije i neodredjenih Lagranževih množitelja $\mathcal{X}_{\alpha}$ dobijamo sledeće sisteme jednačina:

$$\mathcal{X}_{\alpha}U^{\alpha}_{\mu 0}=\sum_{\nu}U^{\alpha}_{\nu 0}\Big\{\Omega_{\mu\nu}(\alpha)+\frac{1}{2}\sum_{\beta\mu'\nu'}\big[\Phi^{\alpha\beta}(\mu\nu\mu'\nu')+$$

$$+\Phi^{\beta\alpha}(\mu'\nu'\mu\nu)\big]\overset{*}{U}{}^{\beta}_{\mu' 0}U^{\beta}_{\nu' 0}\Big\}$$

I.1.27.

$$\mathcal{X}_{\alpha}\overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0}=\sum_{\nu}\overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\nu 0}\Big\{\Omega_{\nu\mu}(\alpha)+\frac{1}{2}\sum_{\beta\mu'\nu'}\big[\Phi^{\alpha\beta}(\nu\mu\nu'\mu')+$$

$$+\Phi^{\beta\alpha}(\nu'\mu'\nu\mu)\big]\overset{*}{U}{}^{\beta}_{\nu' 0}U^{\beta}_{\mu' 0}\Big\}$$

I.1.28.

Na osnovu simetrije koeficienata Φ i Ω lako se može zaključiti da su uslovi I.1.27. i I.1.28. ekvivalentni, pa ćemo u daljem koristiti jedan od njih, recimo I.1.27.

Koristeći formulu I.1.27. lako pokazujemo da je H_1 koja je data formulom I.1.22. ravno nuli, pa prema tome ona transformacija koja minimizira energiju osnovnog stanja istovremeno nas oslobadja linearnih članova Hamiltonijana po Q i Q^+.

Treba napomenuti da uslov I.1.27. daje $L(\Gamma+1)$ vrednost za Lagranžev množitelj .

Da bi energija osnovnog stanja koja sada ima oblik

$$H_0 = N\sum_{\alpha} \mathcal{X}_\alpha - \frac{1}{2}N\sum_{\alpha\beta\mu\mu'\nu\nu'} \Phi^{\alpha\beta}(\mu\mu'\nu\nu')\, \overset{*}{U}{}^{\alpha}_{\mu 0}\, U^{\alpha}_{\mu' 0}\, \overset{*}{U}{}^{\beta}_{\nu 0}\, U^{\beta}_{\nu' 0} \qquad \text{I.1.29.}$$

bila minimalna od $L(\Gamma+1)$ vrednostima $\mathcal{X}_\alpha$, u formulu I.1.29. moramo uključiti L_{min} vrednosti za $\mathcal{X}_\alpha$ koji se dobijaju iz rekularne jednačine sistema I.1.27. .
Kao rezultat ukazane procedure mi Hamiltonijan I.1.17. dobijamo u obliku:

$$H = H_0 + H_2 + H_3 + H_4 \qquad \text{I.1.30.}$$

Gde je H_0 dato formulom I.1.29.

Kvadratni deo Hamiltonijana ima oblik:

$$H_2 = H_2^{(1)} + H_2^{(2)} + H_2^{(3)} \qquad \text{I.1.31.}$$

$$H_2^{(1)} = \sum_{\bar{n}\alpha\theta\omega} \Delta^{\alpha}_{\theta\omega}\, \overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n})\, Q^{\alpha}_{\omega}(\bar{n}) \;; \qquad \theta,\omega \in (1,2,\dots\Gamma)$$

$$\Delta^{\alpha}_{\theta\omega} = X^{\alpha}_{\theta\omega} - X^{\alpha}_{00}\,\delta_{\theta\omega} + \frac{1}{2}\sum_{\beta}\Big[Y^{\alpha\beta}(\theta\omega 00) + Y^{\beta\alpha}(00\theta\omega) - Y^{\alpha\beta}(0000)\delta_{\theta\omega} - Y^{\beta\alpha}(0000)\delta_{\theta\omega}\Big]$$

$$H_2^{(2)} = \sum_{\bar{n}\bar{m}\alpha\beta\theta\omega} R^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta\omega)\, \overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n})\, Q^{\beta}_{\omega}(\bar{m}) \;; \qquad \theta,\omega \in (1,2\dots\Gamma)$$

$$R^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta\omega) = \frac{1}{2}\left[Y^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta 0 0 \omega) + Y^{\beta\alpha}_{\bar{m}-\bar{n}}(0\omega\theta 0)\right]$$

$$H_2^{(3)} = \sum_{\bar{n}\bar{m}\alpha\beta\theta\omega}\left[S^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta,\omega)\overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n})\overset{+}{Q}{}^{\beta}_{\omega}(\bar{m}) + \overset{*}{S}{}^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta,\omega)Q^{\beta}_{\omega}(\bar{m})Q^{\alpha}_{\theta}(\bar{n})\right]$$

$$\theta,\omega \in (1,2\ldots r)$$

$$S^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta,\omega) = \frac{1}{2}Y^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta 0 \omega 0)$$

$$\overset{*}{S}{}^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta,\omega) = Y^{\beta\alpha}_{\bar{m}-\bar{n}}(0\omega 0\theta)$$

Kubna forma Hamiltonijana može se napisati kao:

$$H_3 = H_3^{(1)} + H_3^{(2)} \qquad \text{I.1.32.}$$

Gde je:

$$H_3^{(1)} = -\frac{1}{2}\sum_{\bar{n}\bar{m}\alpha\beta\theta\theta'}\Big\{\left[Y^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta 000) + Y^{\beta\alpha}_{\bar{m}-\bar{n}}(00\theta 0)\right]\overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n})\overset{+}{Q}{}^{\beta}_{\theta'}(\bar{m})Q^{\beta}_{\theta'}(\bar{m}) +$$

$$+\left[Y^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(0\theta 00) + Y^{\beta\alpha}_{\bar{n}-\bar{m}}(000\theta)\right]\overset{+}{Q}{}^{\beta}_{\theta'}(\bar{m})Q^{\beta}_{\theta'}(\bar{m})Q^{\alpha}_{\theta}(\bar{n})\Big\}$$

I. 1.33.

$$H_3^{(2)} = \frac{1}{2}\sum_{\bar{n}\bar{m}\alpha\beta\theta\theta'\omega}\Big\{\left[Y^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta\theta'\omega 0) + Y^{\beta\alpha}_{\bar{m}-\bar{n}}(\omega 0\theta\theta')\right]\overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n})Q^{\alpha}_{\theta'}(\bar{n})\overset{+}{Q}{}^{\beta}_{\omega}(\bar{m}) +$$

$$+\left[Y^{\alpha\beta}_{\bar{n}-\bar{m}}(\theta'\theta 0\omega) + Y^{\beta\alpha}_{\bar{m}-\bar{n}}(0\omega\theta\theta')\right]\overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\bar{n})Q^{\alpha}_{\theta'}(\bar{n})Q^{\beta}_{\omega}(\bar{m}) + CC\Big\}$$

I. 1.34.

Forme četvrtog reda imaju oblik:

$$H_4 = H_4^{(1)} + H_4^{(2)} + H_4^{(3)}$$

$$H_4^{(1)}=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha\beta\theta\omega} Y^{\alpha\beta}_{\vec{n}-\vec{m}}(0\,0\,0\,0)\,\overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\vec{n})\,Q^{\alpha}_{\theta}(\vec{n})\,\overset{+}{Q}{}^{\beta}_{\omega}(\vec{m})\,Q^{\beta}_{\omega}(\vec{m})$$

$$H_4^{(2)}=-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha\beta\theta\theta'\omega}\Big[Y^{\alpha\beta}_{\vec{n}-\vec{m}}(\theta\theta'00)+$$

$$+Y^{\beta\alpha}_{\vec{m}-\vec{n}}(0\,0\,\theta\theta')\Big]\,\overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\vec{n})\,Q^{\alpha}_{\theta'}(\vec{n})\,\overset{+}{Q}{}^{\beta}_{\omega}(\vec{m})\,Q^{\beta}_{\omega}(\vec{m})$$

$$H_4^{(3)}=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha\beta\theta\theta'\omega\omega'} Y^{\alpha\beta}_{\vec{n}-\vec{m}}(\theta\theta'\omega\omega')\,\overset{+}{Q}{}^{\alpha}_{\theta}(\vec{n})\,Q^{\alpha}_{\theta'}(\vec{n})\,\overset{+}{Q}{}^{\beta}_{\omega}(\vec{m})\,Q^{\beta}_{\omega'}(\vec{m})$$

I.1.35.

Kao što vidimo prelaskom sa Fermi operatora na kvazi-Pauli operatpre mi smo jedan deo elektronskih interakcija uključili u Hamiltonijan gasa pobudjenjem, tj. kao što se vidi iz formula I.1.31. u kvadratni deo Hamiltonijana po Q^{+} i Q uključeni su i članovi proporcionalni Y a oni su opet proporcionalni .
Zbog toga se ovakav prelaz uvek vrši prilikom analiza dielektrika. On nam omogućuje da sa minimalnih matematičkih komplikacija ocenimo kakve doprinose daju medjuelektronske interakcije energije elektronskog pobudjenja u dielektriku.

Komutacione relacije za kvazi-Paulijonske operatore mogu se naći u (ref. 4.) i one glase:

$$\Big[Q_{\alpha}(\vec{n}),\overset{+}{Q}_{\beta}(\vec{m})\Big]=\delta_{\vec{n}\vec{m}}\Big[\Big(1-\sum_{\mu=1}^{r}\overset{+}{Q}_{\mu}(\vec{n})Q_{\mu}(\vec{n})\Big)\delta_{\alpha\beta}-$$
$$-\overset{+}{Q}_{\beta}(\vec{n})Q_{\alpha}(\vec{n})\Big] \qquad \text{I.1.36.}$$

$$Q_{\alpha}(\vec{n})\,\overset{+}{Q}_{\beta}(\vec{n})=0\;;\;\Big[\overset{+}{Q}_{\alpha}(\vec{n}),\overset{+}{Q}_{\beta}(\vec{m})\Big]=\Big[Q_{\alpha}(\vec{n}),Q_{\beta}(\vec{m})\Big]=0$$

$$\overset{+}{Q}_{\alpha}(\vec{n})\,\overset{+}{Q}_{\beta}(\vec{n})=Q_{\alpha}(\vec{n})Q_{\beta}(\vec{n})=0$$

§ 2. JEDNOELEKTRONSKI HAMILTONIJAN KOD L-S INTERAKCIJE

Analizira se samo jedan elektron. Karakteristike njegovih stanja su n,l,m,s - energetski, orbitalni, magnetni i spinski kvantni broj, respektivno. Hamiltonijan atoma u adijabatskoj aproksimaciji dat je sa:

$$H = H_c + H_S + H_{cs} \tag{I.2.1.}$$

gde je $H_c = T + U$ - suma kinetičke i potencijalne energije elektrona i zavisi od prostornih koordinata, $H_S = -\mu_B \mathcal{H} S^z$ spinski deo hamiltonijana za slučaj kada se atom nalazi u spoljašnjem magnetnom polju konstantne jačine .

$\mu_B = 2\frac{\pi e\hbar}{mc}$ - udvojeni Borov magneton

Spin je S=1/2, a μ_B je magnetni moment atoma. Interakcioni hamiltonijan H_{cs} zavisi i od konfiguracionih i od spinskih promenljivih.

Stanja elektrona označićemo sa:

$|0\rangle \equiv |n_0 \ell_0 m_0 \uparrow\rangle$ - osnovno stanje

$|1\rangle \equiv |n_f \ell_f m_f \uparrow\rangle$ - stanje pobudjeno po orbiti, spin u osnovnom stanju

$|2\rangle \equiv |n_0 \ell_0 m_0 \downarrow\rangle$ - stanje pobudjeno po spinu, nepobudjeno po orbiti

$|3\rangle \equiv |n_f \ell_f m_f \downarrow\rangle$ - stanje pobudjeno i po orbiti i po spinu

I.2.2.

Kao što se vidi, pretpostavlja se prelazak u samo jedno pobudjeno stanje po orbiti, tj. u stanje n_f, l_f, m_f.

Stanja $|\mu\rangle = |n \ell m s\rangle$ su direktan produkt konfiguracionog stanja $|n \ell m\rangle$ i spinskog stanja $|S\rangle$ tj:

$$|\mu\rangle = |n\ell m\rangle |s\rangle \tag{I.2.3.}$$

Takodje više relacije:

$$H_c |n \ell m\rangle = E_{n\ell m} |n \ell m\rangle \; ; H_s |s\rangle = E_s |S\rangle \tag{I.2.4.}$$

Uvodeći operatore kreacije i anihilacije elektrona u stanju μ $\quad a_\mu \equiv a_{n\ell ms} \quad \overset{+}{a}_\mu \equiv \overset{+}{a}_{n\ell ms}$

I.2.5.

gde je:
$$\{a_\mu, a_\nu^+\} = \delta_{\nu\mu} \ ; \ \{a_\mu, a_\nu\} = \{a_\mu^+, a_\nu^+\} = 0 \ ; \ a_\mu^2 = a_\mu^{+2} = 0$$
$$\sum_{\mu=0}^{3} a_\mu^+ a_\mu = 1 \qquad \text{I.2.6.}$$

Hamiltonijan I.2.1. možemo napisati u reprezentaciji druge kvantizacije kao:
$$H = \sum_{\mu,\nu=0}^{3} H_{\mu\nu} a_\mu^+ a_\nu \ ; \ H_{\mu\nu} = \langle \mu | H | \nu \rangle \qquad \text{I.2.7.}$$

Ako indeks μ razbijemo na konfiguracioni deo $\mu_c \equiv (n\ell m)$ i spinski deo $\mu_s \equiv (s)$ za matrične elemente $H_{\mu\nu}$ možemo , konkretnije, pisati:

$$H_{\mu\nu} = \langle \mu | H | \nu \rangle = \langle \mu_s \mu_c | H | \nu_c \nu_s \rangle = \langle \mu_c | H_c | \nu_c \rangle \langle \mu_s | \nu_s \rangle +$$
$$+ \langle \mu_s | H_s | \nu_s \rangle \langle \mu_c | \nu_c \rangle + \langle \mu_s \mu_c | H_{cs} | \nu_c \nu_s \rangle$$

tj.
$$H_{\mu\nu} = E_{\mu c} \delta_{\mu c, \nu_c} \delta_{\mu_s, \nu_s} + E_{\mu_s} \delta_{\mu_c, \nu_c} \delta_{\mu_s, \nu_s} + W(\mu_s \mu_c \nu_c \nu_s) \qquad \text{I.2.8.}$$
$$W(\mu_s \mu_c \nu_c \nu_s) = \langle \mu_s \mu_c | H_{cs} | \nu_c \nu_s \rangle$$

Pretpostavićemo da se orbitalna stanja menjaju samo po magnetnom kvantnom broju m, tj.
$$n_f = n_0 \ ; \ \ell_f = \ell_0 \ ; \ m_f \neq m_0 \ ; \ E_{n_f \ell_f m_f} \equiv E_{n_0 \ell_0 m_0} \equiv E_0 \qquad \text{I.2.9.}$$

Hamiltonijan interakcije je tipa $\vec{L}$-$\vec{S}$ tj.
$$H_{cs} = R \vec{L} \vec{S} = R(L^x S^x + L^y S^y + L^z S^z) ; \ L^x = \frac{L^+ + L^-}{2} \ ; \ L^y = \frac{L^+ - L^-}{2}$$
$$S^x = \frac{S^+ + S^-}{2} \ ; \ S^y = \frac{S^+ - S^-}{2} \qquad \text{I.2.10.}$$
$$R = \frac{Z e^2 \hbar^2}{2 m^2 c^2 r_B^3} \ ; \ r_B = \frac{\hbar^2}{m e^2}$$

Ovde je: Ze - naelektrisanje jezgra
m - masa elektrona
c - brzina svetlosti

U promenljivi $L^{\pm}$ i $S^{\pm}$ možemo konačno pisati: 14

$$H_{cs} = R\left(L^z S^z + \frac{L^+S^- + L^-S^+}{2}\right) \qquad \text{I.2.11.}$$

Operatori uz I.2.11. deluju na aktuelna stanja I.2.2. na sledeći način:

$$L_z|n_o l_o m_o \uparrow\rangle = m_o|n_o l_o m_o \uparrow\rangle \; ; \; S^z|n_o l_o m_o\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|n_o l_o m_o \uparrow\rangle$$

$$L_z|n_o l_o m_f \uparrow\rangle = m_f|n_o l_o m_f \uparrow\rangle \; ; \; S^z|n_o l_o m_f\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|n_o l_o m_f \uparrow\rangle$$

$$L_z|n_o l_o m_o \downarrow\rangle = m_o|n_o l_o m_o \downarrow\rangle \; ; \; S^z|n_o l_o m_o\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|n_o l_o m_o \downarrow\rangle$$

$$L_z|n_o l_o m_f \downarrow\rangle = m_f|n_o l_o m_f \downarrow\rangle \; ; \; S^z|n_o l_o m_f\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|n_o l_o m_f \downarrow\rangle$$

$$L^+|n_o l_o m_o \uparrow\rangle = \sqrt{(l_o - m_o)(l_o + m_o + 1)}\,|n_o l_o m_o + 1 \uparrow\rangle$$

$$L^+|n_o l_o m_f \uparrow\rangle = \sqrt{(l_o - m_f)(l_o + m_f + 1)}\,|n_o l_o m_f + 1 \uparrow\rangle$$

$$L^+|n_o l_o m_o \downarrow\rangle = \sqrt{(l_o - m_o)(l_o + m_o + 1)}\,|n_o l_o m_o + 1 \downarrow\rangle$$

$$L^+|n_o l_o m_f \downarrow\rangle = \sqrt{(l_o - m_f)(l_o + m_f + 1)}\,|n_o l_o m_f + 1 \downarrow\rangle$$

$$L^-|n_o l_o m_o \uparrow\rangle = \sqrt{(l_o + m_o)(l_o - m_o + 1)}\,|n_o l_o m_o - 1 \uparrow\rangle$$

$$L^-|n_o l_o m_f \uparrow\rangle = \sqrt{(l_o + m_f)(l_o - m_f + 1)}\,|n_o l_o m_f - 1 \uparrow\rangle$$

$$L^-|n_o l_o m_o \downarrow\rangle = \sqrt{(l_o + m_o)(l_o - m_o + 1)}\,|n_o l_o m_o - 1 \downarrow\rangle$$

$$L^-|n_o l_o m_f \downarrow\rangle = \sqrt{(l_o + m_f)(l_o - m_f + 1)}\,|n_o l_o m_f - 1 \downarrow\rangle$$

$$S^+|n_o l_o m_o \uparrow\rangle = 0 \qquad S^-|n_o l_o m_o \uparrow\rangle = |n_o l_o m_o \downarrow\rangle$$

$$S^+|n_o l_o m_f \uparrow\rangle = 0 \qquad S^-|n_o l_o m_f \uparrow\rangle = |n_o l_o m_f \downarrow\rangle$$

$$S^+|n_o l_o m_o \downarrow\rangle = |n_o l_o m_o \uparrow\rangle \qquad S^-|n_o l_o m_o \downarrow\rangle = 0$$

$$S^+|n_o l_o m_f \downarrow\rangle = |n_o l_o m_f \uparrow\rangle \qquad S^-|n_o l_o m_f \downarrow\rangle = 0$$

I.2.12.

Na osnovu I.2.12.,I.2.8.,i I.2.3. možemo naći sve matrične elemente $H_{\mu\nu}$

$$[0\equiv(n_0 l_0 m_0\uparrow);\ 1\equiv(n_0 l_0 m_f\uparrow);\ 2\equiv(n_0 l_0 m_0\downarrow);\ 3\equiv(n_0 l_0 m_f\downarrow)]$$

$$H_{00}=E_0-\frac{\mu_B\mathcal{H}}{2}+\frac{Rm_0}{2};\ H_{01}=0;\ H_{02}=0;\ H_{03}=\frac{R}{2}\sqrt{(l_0+m_f)(l_0-m_f+1)}\,\delta_{m_0,m_f-1}$$

$$H_{10}=0;\ H_{11}=E_0-\frac{\mu_B\mathcal{H}}{2}+\frac{Rm_f}{2};\ H_{12}=\frac{R}{2}\sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)}\,\delta_{m_f,m_0-1};\ H_{13}=0$$

$$H_{20}=0;\ H_{21}=\frac{R}{2}\sqrt{(l_0-m_f)(l_0+m_f+1)}\,\delta_{m_0,m_f+1};\ H_{22}=E_0+\frac{\mu_B\mathcal{H}}{2}-\frac{Rm_0}{2};\ H_{23}=0$$

$$H_{30}=\frac{R}{2}\sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)}\,\delta_{m_f,m_0+1};\ H_{31}=0;\ H_{32}=0;\ H_{33}=E_0+\frac{\mu_B\mathcal{H}}{2}-\frac{Rm_f}{2}$$

I.2.13

Kao što se vidi iz I.2.13. postoje dve bitno različita slučaja:

1. $m_f=m_0+1$ ovde m_0 mora biti $m_0\neq l_0$
2. $m_f=m_0-1$ $m_0\neq -l_0$

i svaki ćemo odvojeno analizirati.

Za slučaj $m_f=m_0+1$ matrične elemente $H_{\mu\nu}$ označićemo sa $H_{\mu\nu}^{(A)}$, pa na osnovu I.2.13. možemo pisati:

$$H_{00}^{(A)}=E_0-\frac{\mu_B\mathcal{H}}{2}+\frac{Rm_0}{2};\ H_{01}^{(A)}=0;\ H_{02}^{(A)}=0;\ H_{03}^{(A)}=\frac{R}{2}\sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)}$$

$$H_{10}^{(A)}=0;\ H_{11}^{(A)}=E_0-\frac{\mu_B\mathcal{H}}{2}+\frac{R(m_0+1)}{2};\ H_{12}^{(A)}=0;\ H_{13}^{(A)}=0$$

$$H_{20}^{(A)}=0;\ H_{21}^{(A)}=0;\ H_{22}^{(A)}=E_0+\frac{\mu_B\mathcal{H}}{2}-\frac{Rm_0}{2};\ H_{23}^{(A)}=0$$

$$H_{30}^{(A)}=\frac{R}{2}\sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)};\ H_{31}^{(A)}=0;\ H_{32}^{(A)}=0;\ H_{33}^{(A)}=E_0+\frac{\mu_B\mathcal{H}}{2}-\frac{R(m_0+1)}{2}$$

I.2.14.

Za slučaj $m_f = m_0 - 1$ matrične elemente $H_{\mu\nu}$ označićemo sa $H_{\mu\nu}^{(B)}$ pa na osnovu I.2.13. možemo pisati:

$$H_{00}^{(B)} = E_0 - \frac{\mu_B \mathcal{H}}{2} - \frac{Rm_0}{2} \; ; \; H_{01}^{(B)} = 0 \; ; \; H_{02}^{(B)} = 0 \; ; \; H_{03}^{(B)} = 0$$

$$H_{10}^{(B)} = 0 \; ; \; H_{11}^{(B)} = E_0 - \frac{\mu_B \mathcal{H}}{2} - \frac{R(m_0-1)}{2} \; ; \; H_{12}^{(B)} = -\frac{R}{2}\sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)} \; ; \; H_{13}^{(B)} = 0$$

$$H_{20}^{(B)} = 0 \; ; \; H_{21}^{(B)} = -\frac{R}{2}\sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)} \; ; \; H_{22}^{(B)} = E_0 + \frac{\mu_B \mathcal{H}}{2} + \frac{Rm_0}{2} \; ; \; H_{23}^{(B)} = 0$$

$$H_{30}^{(B)} = 0 \; ; \; H_{31}^{(B)} = 0 \; ; \; H_{32}^{(B)} = 0 \; ; \; H_{33}^{(B)} = E_0 + \frac{\mu_B \mathcal{H}}{2} + \frac{R(m_0-1)}{2}$$

I.2.15.

§ 3. STABILIZACIJA JEDNOELEKTRONSKOG HAMILTONIJANA

Hamiltonijan sistema koji ima oblik:

$$H=\sum_{\mu,\nu=0}^{3} H_{\mu\nu}\, a_{\mu}^{+} a_{\mu} \qquad \text{I.3.1.}$$

može se trasformisati prelaskom na nove Fermi-operatore i tako da mu energija osnovnog stanja bude minimalna.

Uvedemo vektore:

$$\vec{a}=\begin{Vmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{Vmatrix} ; \quad \vec{a}^{+}=\| a_0^{+} a_1^{+} a_2^{+} a_3^{+} \| ; \quad \vec{\alpha}=\begin{Vmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{Vmatrix} ; \quad \vec{\alpha}^{+}=\| \alpha_0^{+} \alpha_1^{+} \alpha_2^{+} \alpha_3^{+} \|$$

$$\vec{a}^{+}\vec{a}=1$$

I matricu:

$$\hat{\Psi}=\begin{Vmatrix} \Psi_{00} & \Psi_{01} & \Psi_{02} & \Psi_{03} \\ \Psi_{10} & \Psi_{11} & \Psi_{12} & \Psi_{13} \\ \Psi_{20} & \Psi_{21} & \Psi_{22} & \Psi_{23} \\ \Psi_{30} & \Psi_{31} & \Psi_{32} & \Psi_{33} \end{Vmatrix}$$

Od operatora a_{μ} predjemo na operatore α_{μ}

$\vec{a}=\hat{\Psi}\vec{\alpha}$; uslov unitarnosti $\vec{a}^{+}\vec{a}=\vec{\alpha}^{+}\vec{\alpha}=1$ jer je $\vec{a}^{+}\vec{a}=1$ I.3.2.

Sledi: $\vec{a}^{+}\vec{a}=\vec{\alpha}^{+}\hat{\Psi}^{+}\hat{\Psi}\vec{\alpha}$ tojest:

$$\hat{\Psi}^{+}\Psi=1 \qquad \text{I.3.3.}$$

pa je $\hat{\Psi}$ unitarna matrica, tj.

$$\sum_{k=0}^{3} \overset{*}{\Psi}_{ki}\,\Psi_{kj}=\delta_{ij} \quad ; \quad i,j\in(0,1,2,3) \qquad \text{I.3.4.}$$

Tada:

$$a_{\mu}=\sum_{\theta=0}^{3}\Psi_{\mu\theta}\,\alpha_{\theta} \quad ; \quad a_{\mu}^{+}=\sum_{\theta=0}^{3}\overset{*}{\Psi}_{\mu\theta}\,\alpha_{\theta}^{+} \qquad \text{I.3.5.}$$

a I.3.1. postaje:

$$H=\sum_{\theta,\omega=0}^{3}\phi_{\theta\omega}\,\alpha_{\theta}^{+}\alpha_{\omega} \quad ; \quad \phi_{\theta\omega}=\sum_{\mu,\nu=0}^{3} H_{\mu\nu}\,\Psi_{\mu\theta}\,\Psi_{\nu\omega} \qquad \text{I.3.6.}$$

Napišimo

$$H=\phi_{00}\alpha_0^+\alpha_0+\sum_{\theta=1}^{3}\phi_{\theta 0}\alpha_\theta^+\alpha_0+\sum_{\theta=1}^{3}\phi_{0\theta}\alpha_0^+\alpha_\theta+\sum_{\theta,\omega=1}^{3}\phi_{\theta\omega}\alpha_\theta^+\alpha_\omega$$

i ispunimo uslov $\alpha_0^+\alpha_0=1-\sum_{\theta\omega=1}^{3}\alpha_\theta^+\alpha_\omega\delta_{\theta\omega}$, pa možemo pisati:

$$H=\phi_{00}+\sum_{\theta=1}^{3}\phi_{\theta 0}\alpha_\theta^+\alpha_\theta+\sum_{\theta=1}^{3}\phi_{0\theta}\alpha_0^+\alpha_\theta+\sum_{\theta\omega=1}^{3}[\phi_{\theta\omega}-\phi_{00}\delta_{\theta\omega}]\alpha_\theta^+\alpha_\omega \qquad \text{I.3.7.}$$

Na osnovu I.3.6. vidi se da je:

$$\phi_{00}=\sum_{\mu,\nu=0}^{3}H_{\mu\nu}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\psi_{\nu 0} \qquad i \ iz \ I.3.4. \quad \sum_{\mu=0}^{3}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\psi_{\mu 0}=1$$

pa ćemo ekstremum energije osnovnog stanja dobiti izjednačujući sa nulom varijaciju funkcije:

$$R=\sum_{\mu,\nu=0}^{3}H_{\mu\nu}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\psi_{\nu 0}-\mathcal{X}\sum_{\mu=0}^{3}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\psi_{\mu 0}+\mathcal{X} \qquad \text{I.3.8.}$$

$$\delta R=\frac{\partial R}{\partial\psi_{\lambda 0}}\delta\psi_{\lambda 0}+\frac{\partial R}{\partial\overset{*}{\psi}_{\lambda 0}}\delta\overset{*}{\psi}_{\lambda 0}=0 \qquad \text{I.3.9.}$$

$$\frac{\partial R}{\partial\overset{*}{\psi}_{\lambda 0}}=\sum_{\mu,\nu=0}^{3}H_{\mu\nu}\psi_{\nu 0}\delta_{\mu\lambda}-\mathcal{X}\sum_{\mu=0}^{3}\psi_{\mu 0}\delta_{\mu\lambda}=\sum_{\nu=0}^{3}H_{\lambda\nu}\psi_{\nu 0}-\mathcal{X}\psi_{\lambda 0}$$

$$\frac{\partial R}{\partial\psi_{\lambda 0}}=\sum_{\mu\nu=0}^{3}H_{\mu\nu}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\delta_{\nu\lambda}-\mathcal{X}\sum_{\mu=0}^{3}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\delta_{\mu\lambda}=\sum_{\mu=0}^{3}H_{\mu\lambda}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}-\mathcal{X}\overset{*}{\psi}_{\lambda 0}$$

tj.

$$\mathcal{X}\psi_{\mu 0}=\sum_{\nu=0}^{3}H_{\mu\nu}\psi_{\nu 0} \quad ; \quad \mathcal{X}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}=\sum_{\nu=0}^{3}H_{\nu\mu}\overset{*}{\psi}_{\nu 0}$$

$$\mu\in(0,1,2,3) \qquad \text{I.3.10.}$$

$$\phi_{00}=\sum_{\mu,\nu=0}^{3}H_{\mu\nu}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\psi_{\nu 0}=\sum_{\mu=0}^{3}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\sum_{\nu=0}^{3}H_{\mu\nu}\psi_{\nu 0}=\sum_{\mu=0}^{3}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\mathcal{X}\psi_{\mu 0}=\mathcal{X}\sum_{\mu=0}^{3}\overset{*}{\psi}_{\mu 0}\psi_{\mu 0}=\mathcal{X}$$

To znači da je:

$$\phi_{00}=\mathcal{X} \qquad \text{I.3.11.}$$

$$\phi_{\theta 0} = \sum_{\substack{\mu,\nu=0 \\ \theta\neq 0}}^{3} H_{\mu\nu} \overset{*}{\psi}_{\mu\theta} \psi_{\nu 0} = \sum_{\mu=0}^{3} \overset{*}{\psi}_{\mu\theta} \sum_{\nu=0}^{3} H_{\mu\nu} \psi_{\nu 0} = \mathcal{X} \sum_{\mu=0} \overset{*}{\psi}_{\mu\theta} \psi_{\mu 0} = \mathcal{X} \delta_{\theta,0} = 0,$$

jer je $\theta \neq 0$

$$\phi_{0\theta} = \sum_{\substack{\mu,\nu=0 \\ \theta\neq 0}}^{3} H_{\mu\nu} \overset{*}{\psi}_{\mu 0} \psi_{\nu\theta} = \sum_{\nu=0}^{3} \psi_{\nu\theta} \sum_{\mu=0}^{3} H_{\mu\nu} \overset{*}{\psi}_{\mu 0} = \mathcal{X} \sum_{\nu=0}^{3} \psi_{\nu\theta} \overset{*}{\psi}_{\nu 0} = \mathcal{X} \delta_{\theta,0} = 0,$$

jer je $\theta \neq 0$

Konačno dobijemo:

$$H = \mathcal{X}_{min.} + \sum_{\theta,\omega=1}^{3} \left[\phi_{\theta\omega} - \mathcal{X}_{min.} \delta_{\theta\omega} \right] \alpha_\theta^+ \alpha_\omega \qquad \text{I.3.12.}$$

Energija I.3.12. je minimizirana, jer je od četiri moguće vrednosti za $\mathcal{X}$ koje daje sistem jednačina I.3.10. uzeta najmanja vrednost $\mathcal{X}_{min.}$

Primenjujući ove opšte formule na slučaj $m_f = m_0 + 1$ dobijemo:

$$H_A = \mathcal{X}_A + \sum_{\theta=1}^{3} \Delta_\theta^{(A)} \mathcal{P}_\theta^{+(A)} \mathcal{P}_\theta^{(A)}$$

$$\mathcal{X}_A = E_0 - \frac{1}{4} R - \frac{1}{2} \sqrt{\varphi_A^2 + R^2 \psi_A^2} \; ; \; \varphi_A = \mu_B \mathcal{H} - R\left(m_0 + \frac{1}{2}\right)$$

$$\Delta_1^{(A)} = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varphi_A^2 + R^2 \psi_A^2} - \varphi_A + R \right\} \; ; \; \Delta_2^{(A)} = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varphi_A^2 + R^2 \psi_A^2} + \varphi_A + R \right\}$$

$$\Delta_3^{(A)} = \frac{\rho_A^2 H_{00}^{(A)} + H_{33}^{(A)} - R \psi_A \rho_A}{1 + \rho_A^2} \; ; \; \rho_A = \frac{\varphi_A - \sqrt{\varphi_A^2 + R^2 \psi_A^2}}{R \psi_A}$$

I.3.13.

Za slučaj $m_f = m_0 - 1$ dobijemo:

$$H_B = \mathcal{X}_B + \sum_{\theta=1}^{3} \Delta_\theta^{(B)} \mathcal{P}_\theta^{+(B)} \mathcal{P}_\theta^{(B)}$$

$$\mathcal{X}_B = E_0 - \frac{1}{4} R - \frac{1}{2} \sqrt{\varphi_B^2 + R^2 \psi_B^2} \; ; \; \varphi_B = \mu_B \mathcal{H} - R\left(m_0 - \frac{1}{2}\right)$$

$$\Delta_1^{(B)} = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varphi_B^2 + R^2 \psi_B^2} - \varphi_B + R \right\} \; ; \; \Delta_2^{(B)} = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varphi_B^2 + R^2 \psi_B^2} + \varphi_B + R \right\}$$

$$\Delta_3^{(B)} = \frac{\rho_B^2 H_{11}^{(B)} + H_{22}^{(B)} - R \psi_B \rho_B}{1 + \rho_B^2} \; ; \; \rho_B = \frac{\varphi_B - \sqrt{\varphi_B^2 + R^2 \psi_B^2}}{R \psi_B}$$

I.3.14.

Na kraju, navešćemo energije P-elektrona $(\ell_o = 1)$ u slučaju kada je spoljašnje magnetno polje $\mathcal{H}$ ravno nuli:

$$m_o = -1 \; ; \; \Delta_1^{(A)} = R \; ; \; \Delta_2^{(A)} = \frac{3}{2} R \; ; \; \Delta_3^{(A)} = \frac{3}{2} R \; ; \; \rho_A = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$m_o = 0 \; ; \; \Delta_1^{(A)} = \frac{3}{2} R \; ; \; \Delta_2^{(A)} = R \; ; \; \Delta_3^{(A)} = \frac{3}{2} R \; ; \; \rho_A = -\sqrt{2}$$

$$m_o = 1 \; ; \; \Delta_1^{(B)} = \frac{3}{2} R \; ; \; \Delta_2^{(B)} = R \; ; \; \Delta_3^{(B)} = \frac{3}{2} R \; ; \; \rho_B = -\sqrt{2}$$

$$m_o = 1 \; ; \; \Delta_1^{(B)} = R \; ; \; \Delta_2^{(B)} = \frac{3}{2} R \; ; \; \Delta_3^{(B)} = \frac{3}{2} R \; ; \; \rho_B = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

I.3.15.

Kao što se vidi u ovom slučaju pojavljuju se parovi degenerisanih stanja.

II G L A V A

STATISTIČKE OSOBINE SISTEMA SA L-S INTERAKCIJOM

§ 1. TERMODINAMIČKE KARAKTERISTIKE SISTEMA

Ovde ćemo analizirati termodinamičke osobine sistema jednoelektronskih pobudjenja koja su definisana u predhodnoj glavi, pretpostavljajući da sistem sa okolinom vrši razmenu energije. Skup kvazi-paulionskih stanja je sledeći:

$$J_p \equiv \{|0_1 0_2 0_3\rangle, |1_1 0_2 0_3\rangle, |0_1 1_1 0_3\rangle, |0_1 0_2 1_3\rangle\} \qquad \text{II.1.1.}$$

Zbog pretpostavljene razmene energije sa termostatom koristićemo statistički operator za kanonički ansambl tj.:

$$\hat{\eta} = e^{\frac{F-H}{\tau}}; \quad H = \mathcal{X} + \sum_{\lambda=1}^{3} \Delta_\lambda \mathcal{P}_\lambda^+ \mathcal{P}_\lambda \qquad \text{II.1.2.}$$

gde je F slobodna energija sistema i $\tau = k_B \cdot T$ temperatura u energetskim jedinicama. Koristeći uslov normiranja $S_p \hat{\eta} = 1$ i izračunavajući $S_p\, e^{-\frac{H}{\tau}}$ po svim stanjima II.1.1. dobijamo:

$$F = \mathcal{X} - \tau \ln\left(1 + \sum_{\lambda=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\lambda}{\tau}}\right) \qquad \text{II.1.3.}$$

Takodje je interesantno da izračunamo srednje vrednosti kvazi-Paulionskih okupacionih brojeva

$$\langle \mathcal{P}_\lambda^+ \mathcal{P}_\lambda \rangle = S_p(\mathcal{P}_\lambda^+ \mathcal{P}_\lambda \hat{\eta}) = e^{-\frac{\Delta_\lambda}{\tau}}\left(1 + \sum_{\omega=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\omega}{\tau}}\right) \qquad \text{II.1.4.}$$

$$\lambda \in (1,2,3)$$

i parametar uredjenosti sistema:

$$\sigma = 1 - \sum_{\lambda=1}^{3} \langle \mathcal{P}_\lambda^+ \mathcal{P}_\lambda \rangle = \left(1 + \sum_{\lambda=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\lambda}{\tau}}\right)^{-1} \qquad \text{II.1.5.}$$

Unutrašnja energija sistema je data sa:

$$\langle H \rangle = S_p(H \hat{\eta}) = \mathcal{X} + \sigma \sum_{\lambda=1}^{3} \Delta_\lambda e^{-\frac{\Delta_\lambda}{\tau}} \qquad \text{II.1.6.}$$

a entropija sistema je:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial \tau} \approx \frac{\langle H \rangle - F}{\tau} = \ln \sigma^{-1} + \sigma \tau^{-1} \sum_{\lambda=1}^{3} \Delta_\lambda e^{-\frac{\Delta_\lambda}{\tau}} \qquad \text{II.1.7.}$$

Sa ciljem da procenimo ponašanje sistema na visokim temperaturama, tj. kada je $\Delta\lambda << 1$, eksponent ćemo razložiti na sledeći način $e^{-\frac{\Delta\lambda}{\tau}} \approx 1 - \frac{\Delta\lambda}{\tau}$ i u ovoj aproksimaciji dolazimo do rezultata:

$$\sigma = \frac{1}{4}\left(1 - \frac{\tau_c}{\tau}\right)^{-1} ; \quad \tau_c = \frac{1}{4}\sum_{\lambda=1}^{3} \Delta_\lambda \qquad \text{II.1.8.}$$

Takodje se vidi da na istoj temperaturi singularitet* ima i entropija $S = -\frac{\partial F}{\partial \tau}$, tako na temperaturi $\tau = \tau_c$ može da se očekuje fazni prelaz druge vrste.

Termodinamičku analizu sistema završićemo ispitivanjem termodinamičkog ponašanja toplotnog momenta sistema $\vec{I} = \vec{L} + \vec{S}$
U reprezentaciji druge kvantizacije operator $\vec{I}$ može da se napiše kao:

$$\vec{I} = \sum_{\mu,\nu=0}^{3} \langle \mu | \vec{I} | \nu \rangle a_\mu^+ a_\nu$$

Koristeći formule iz predhodnog paragrafa preći ćemo na kvazi-Paulionsku reprezentaciju, pa tako, za slučaj $m_f = m_0 + 1$ dobijamo:

$$I_A^+ = (1+\rho_A)^{-\frac{1}{2}}\left[(\gamma_A + \rho_A)P_1^{+(A)} + (1+\gamma_A\rho_A)P_2^{(A)} + (\gamma_A - \rho_A)P_3^{+(A)} + (1-\gamma_A\rho_A)P_1^{+(A)}P_3^{(A)}\right]$$

$$I_A^- = (I_A^+)^+ ; \quad I_A^z = m_0 + \frac{1}{2} + P_1^{+(A)}P_1^{(A)} - P_2^{+(A)}P_2^{(A)} \qquad \text{II.1.9.}$$

*Singularitet u II.1.8. je u stvari prevojna tačka parametara uredjenosti σ koja u upotrebljenoj aproksimaciji degeneriše u singularitet.

Odgovarajuće formule za slučaj $m_f = m_0 - 1$ dobijaju se zamenom indeksa A indeksima B . U izrazu za I^z umesto $m_0 + \frac{1}{2}$ treba da se piše $m_0 - \frac{1}{2}$.

Kao što se vidi, jedino operator I^z ima različitu od nule ravnotežnu srednju vrednost. Pošto je Hamiltonijan sistema dijagonalan, srednje vrednosti tipa $\langle P_\lambda^+ P_\omega \rangle ; \lambda \neq \omega$ ravne su nuli. Prema tome:

$$\langle I^z \rangle = m_0 - \frac{1}{2} + \langle P_1^+ P_1 \rangle - \langle P_2^+ P_2 \rangle \qquad \text{II.1.10.}$$

U visokotemperaturskoj aproksimaciji $\frac{\Delta_\lambda}{\tau} \ll 1$; $e^{-\frac{\Delta_\lambda}{\tau}} \approx 1 - \frac{\Delta_\lambda}{\tau}$ dobijamo:

$$\langle I_A^z \rangle \approx m_0 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \frac{\tau - \Delta_1^{(A)}}{\tau - \tau_c^{(A)}} - \frac{1}{4} \frac{\tau - \Delta_2^{(A)}}{\tau - \tau_c^{(A)}} \; ; \; \tau_c^{(A)} = \frac{1}{4} \sum_{\lambda=1}^{3} \Delta_\lambda^{(A)}$$

$$\langle I_B^z \rangle \approx m_0 - \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \frac{\tau - \Delta_1^{(B)}}{\tau - \tau_c^{(B)}} - \frac{1}{4} \frac{\tau - \Delta_2^{(B)}}{\tau - \tau_c^{(B)}} \; ; \; \tau_c^{(B)} = \frac{1}{4} \sum_{\lambda=1}^{3} \Delta_\lambda^{(B)} \qquad \text{II.1.11.}$$

Srednje vrednosti $\langle I_A^z \rangle$ i $\langle I_B^z \rangle$ izčezavaju na temperaturama

$$\tau_z^{(A)} = \tau_c^{(A)} + \frac{1}{4} \frac{\Delta_1^{(A)} - \Delta_2^{(A)}}{m_0 + \frac{1}{2}} \; ; \; \tau_z^{(B)} = \tau_c^{(B)} + \frac{1}{4} \frac{\Delta_1^{(B)} - \Delta_2^{(B)}}{m_0 - \frac{1}{2}} \qquad \text{II.1.12.}$$

koje su analogne Kiri-tačci u teoriji feromagnetik. Kao što je poznato , u Kiri-tačci srednja vrednost S postaje ravna nuli. Za slučaj $\ell_0 = 1$; $\mathcal{H} = 0$ dobijamo:

$$\tau_c^{(A,B)} = R \; ; \; \tau_z^{(A,B)} = \frac{3}{2} R \qquad \text{II.1.13.}$$

§ 2. GRINOVA FUNKCIJA SISTEMA

Kvazi-Pauli operatori zadovoljavaju komutacione relacije:

$$[\mathcal{P}_\alpha(\bar{n}), \mathcal{P}_\beta^+(\bar{m})] = \delta_{\bar{n}\bar{m}} [(1-\sum_{\mu=1}^{3} \mathcal{P}_\mu^+(\bar{n}) \mathcal{P}_\mu(\bar{n}))\delta_{\alpha\beta} - \mathcal{P}_\beta^+(\bar{n}) \mathcal{P}_\alpha(\bar{n})]$$

$$\mathcal{P}_\alpha(\bar{n}) \mathcal{P}_\beta^+(\bar{n}) = 0 \;; \quad [\mathcal{P}_\alpha^+(\bar{n}), \mathcal{P}_\beta^+(\bar{m})] = [\mathcal{P}_\alpha(\bar{n}), \mathcal{P}_\beta(\bar{m})] = 0$$
$$\alpha \neq \beta$$

$$\mathcal{P}_\alpha^+(\bar{n}) \mathcal{P}_\beta^+(\bar{n}) = \mathcal{P}_\alpha(\bar{n}) \mathcal{P}_\beta(\bar{n}) = 0$$

II.2.1.

Takodje ćemo koristiti formulu:

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

II.2.2.

Potražićemo sada Grinovu funkciju za Hamiltonijan oblika:

$$H = H_0 + \sum_{\lambda=1}^{3} \Delta_\lambda \mathcal{P}_\lambda^+ \mathcal{P}_\lambda$$

II.2.3.

gde su $\mathcal{P}_\lambda^+$ i $\mathcal{P}_\lambda$ kvazi-Pauli operatori.Ovde se indeks čvora $\bar{n}$ ne pojavljuje.

Na osnovu opšte teorije dvovremenskih Grinovih funkcija imamo:

$$E \langle\langle \mathcal{P}_\alpha | \mathcal{P}_\beta^+ \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \langle (1 - \sum_{\mu=1}^{3} \mathcal{P}_\mu^+ \mathcal{P}_\mu)\delta_{\alpha\beta} - \mathcal{P}_\beta^+ \mathcal{P}_\alpha \rangle +$$

$$+ \sum_{\lambda=1}^{3} \Delta_\lambda \langle\langle [\mathcal{P}_\alpha, \mathcal{P}_\lambda^+ \mathcal{P}_\lambda] | \mathcal{P}_\beta^+ \rangle\rangle$$

II.2.4.

$$[\underset{A}{\mathcal{P}_\alpha}, \underset{B}{\mathcal{P}_\lambda^+} \underset{C}{\mathcal{P}_\lambda}] = [\mathcal{P}_\alpha, \mathcal{P}_\lambda^+] \mathcal{P}_\lambda + \mathcal{P}_\lambda^+ [\mathcal{P}_\alpha, \mathcal{P}_\lambda] =$$

$$= (1 - \sum_{\mu=1}^{3} \mathcal{P}_\mu^+ \mathcal{P}_\mu) \mathcal{P}_\lambda \delta_{\alpha\lambda} - \mathcal{P}_\lambda^+ \mathcal{P}_\alpha \mathcal{P}_\lambda = \mathcal{P}_\lambda \delta_{\alpha\lambda}$$

II.2.5.

Jednačina II.2.4. postaje:

$$(E-\Delta_\alpha)\langle\langle \mathcal{P}_\alpha \mid \mathcal{P}_\beta^+ \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\Big[\Big(1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu}\Big)\delta_{\alpha\beta} - N_{\alpha\beta}\Big]$$

$$N_{\alpha\beta} = \langle \mathcal{P}_\beta^+ \mathcal{P}_\alpha \rangle \; ; \quad N_{\alpha\alpha} = \langle \mathcal{P}_\alpha^+ \mathcal{P}_\alpha \rangle$$

$$\langle\langle \mathcal{P}_\alpha \mid \mathcal{P}_\beta^+ \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \; \frac{\big(1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu}\big)\delta_{\alpha\beta} - N_{\alpha\beta}}{E-\Delta_\alpha + i\delta} \qquad \text{II.2.6.}$$

$$N_{\alpha\beta} = 2\int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(e^{\frac{E}{\tau}}-1\right)^{-1} \mathrm{Re}\,\langle\langle \mathcal{P}_\alpha \mid \mathcal{P}_\beta^+ \rangle\rangle$$

$$N_{\alpha\beta} = \Big[\Big(1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu}\Big)\delta_{\alpha\beta} - N_{\alpha\beta}\Big]\varphi_\alpha \; ; \quad \varphi_\alpha = \frac{1}{e^{\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}-1} \qquad \text{II.2.7.}$$

$$(1+\varphi_\alpha)N_{\alpha\beta} = \varphi_\alpha\Big(1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu}\Big)\delta_{\alpha\beta}$$

$$N_{\alpha\beta} = \frac{\varphi_\alpha}{1+\varphi_\alpha}\Big(1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu}\Big)\delta_{\alpha\beta} \qquad \text{II.2.8.}$$

$$1+\varphi_\alpha = 1 + \frac{1}{e^{\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}-1} = \frac{e^{\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}-1+1}{e^{\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}-1} = \frac{e^{\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}}{e^{\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}-1} \qquad \text{II.2.8.}$$

$$\frac{\varphi_\alpha}{1+\varphi_\alpha} = e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}$$

II.2.9.

$$N_{\alpha\beta} = e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}\Big(1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu}\Big)\delta_{\alpha\beta}$$

$$N_{\alpha\alpha} = \langle \mathcal{P}_\alpha^+ \mathcal{P}_\alpha \rangle = e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}\Big(1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu}\Big)$$

II.2.10.

Ako relaciju II.2.10. sumiramo po α , imamo:

$$\sum_{\alpha=1}^{3} N_{\alpha\alpha} = \Big(1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu}\Big)\sum_{\alpha=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}} \;; \quad \sum_{\mu} N_{\mu\mu} \equiv \sum_{\alpha} N_{\alpha\alpha}$$

$$\sum_{\alpha=1}^{3} N_{\alpha\alpha}\Big(1+\sum_{\alpha=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}\Big) = \sum_{\alpha=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}$$

$$\sum_{\alpha=1}^{3} N_{\alpha\alpha} \equiv \sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu} = \frac{\sum_{\alpha=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}}{1+\sum_{\alpha=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}} \qquad \text{II.2.11.}$$

Zamenimo II.2.11. u II.2.10. dobijemo:

$$N_{\alpha\alpha} = e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}\left\{1 - \frac{\sum_{\alpha=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}}{1+\sum_{\alpha=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}}\right\}$$

i konačno

$$N_{\alpha\alpha} = \langle \mathcal{P}_\alpha^+ \mathcal{P}_\alpha \rangle = \frac{e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}}{1+\sum_{\mu=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\mu}{\tau}}} \qquad \text{II.2.12.}$$

Znači:

$$\Gamma_{\alpha\beta}(E) = \frac{i}{2\pi}\,\frac{\Big(1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu}\Big)\delta_{\alpha\beta} - N_{\alpha\beta}}{E-\Delta_\alpha+i\delta}\,; \quad N_{\alpha\alpha} = \langle \mathcal{P}_\alpha^+ \mathcal{P}_\alpha\rangle\,; \qquad \text{II.2.13.}$$
$$\delta \to +0 \qquad\qquad N_{\alpha\beta} = \langle \mathcal{P}_\beta^+ \mathcal{P}_\alpha \rangle$$

$$N_{\alpha\beta} = e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}\delta_{\alpha\beta}\Big(1+\sum_{\mu=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\mu}{\tau}}\Big)^{-1} \qquad \text{II.2.14.}$$

$$1-\sum_{\mu=1}^{3} N_{\mu\mu} = \Big(1+\sum_{\mu=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\mu}{\tau}}\Big)^{-1} \qquad \text{II.2.15.}$$

Konačan izraz za Grinovu funkciju, posle zamene II.2.14. i II.2.15. u II.2.13. je:

$$\Gamma_{\alpha\beta}(E) \equiv \langle\langle \mathcal{P}_\alpha | \mathcal{P}^+_\beta \rangle\rangle_E = \delta_{\alpha\beta} \frac{i}{2\pi} \frac{1 - e^{-\frac{\Delta_\alpha}{\tau}}}{1 + \sum\limits_{\mu=1}^{3} e^{-\frac{\Delta_\mu}{\tau}}} \frac{1}{E - \Delta_\alpha + i\delta} \qquad \delta \to +0$$

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\Omega) \equiv \langle\langle \mathcal{P}_\alpha | \mathcal{P}^+_\beta \rangle\rangle_\Omega = \delta_{\alpha\beta} \frac{i}{2\pi} \frac{1 - e^{-\frac{\hbar\Omega_\alpha}{\tau}}}{1 + \sum\limits_{\mu=1}^{3} e^{-\frac{\hbar\Omega_\mu}{\tau}}} \frac{1}{\Omega - \Omega_\alpha + i\delta} \qquad \delta \to +0$$

$$E = \hbar\Omega \quad ; \quad \Delta_\alpha = \hbar\Omega_\alpha$$

II.2.16.

§ 3. NELINEARNI ODZIV SISTEMA I INDUKOVANI MOMENT

Ona je oblika (za periodično magnetno polje h)

$$H_{int} = -g_L \vec{h}\vec{L} - g_s \vec{h}\vec{S} \qquad \text{II.3.1.}$$

Ako je $\vec{h} = \vec{h}(t)$ i ovu funkciju razvijemo u Furije-integral

$$\vec{h}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, \vec{h}(\Omega)\, e^{-i\Omega t} \qquad \text{II.3.2.}$$

onda možemo pisati:

$$H_{int} = -g_L \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, e^{-i\Omega t}\left[h^x(\Omega)L^x + h^y(\Omega)L^y + h^z(\Omega)L^z\right] -$$

$$-g_s \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, e^{-i\Omega t}\left[h^x(\Omega)S^x + h^y(\Omega)S^y + h^z(\Omega)S^z\right] =$$

$$= -g_L \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, e^{-i\Omega t}\left[\frac{h^x(\Omega) - i h^y(\Omega)}{2}L^+ + \frac{h^x(\Omega) + i h^y(\Omega)}{2}L^- + h^z(\Omega)L^z\right] -$$

$$-g_s \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, e^{-i\Omega t}\left[\frac{h^x(\Omega) - i h^y(\Omega)}{2}S^+ + \frac{h^x(\Omega) + i h^y(\Omega)}{2}S^- + h^z(\Omega)S^z\right]$$

i konačno:

$$H_{int} = -\int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, e^{-i\Omega t}\left\{h^z(\Omega)(g_L L^z + g_s S^z) + \frac{1}{2}h^-(\Omega)(g_L L^+ + g_s S^+) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}h^+(\Omega)(g_L L^- + g_s S^-)\right\} \qquad \text{II.3.3.}$$

$$h^+(\Omega) = h^x(\Omega) + i h^y(\Omega) \quad ; \quad h^-(\Omega) = h^x(\Omega) - i h^y(\Omega)$$

Potražimo sada u reprezentaciji druge kvantizacije operatore: L^z, L^+, L^-, S^z, S^+ i S^-

$$L^z = \sum_{\mu,\nu=0}^{3} \langle\mu|L^z|\nu\rangle a_\mu^+ a_\nu \quad ; \quad S^z = \sum_{\mu,\nu=0}^{3} \langle\mu|S^z|\nu\rangle a_\mu^+ a_\nu \qquad \text{II.3.4.}$$

$$L^\pm = \sum_{\mu,\nu=0}^{3} \langle\mu|L^\pm|\nu\rangle a_\mu^+ a_\nu \quad ; \quad S^\pm = \sum_{\mu,\nu=0}^{3} \langle\mu|S^\pm|\nu\rangle a_\mu^+ a_\nu$$

Na osnovu možemo pisati:

$$L^z_{00}=L^z_{22}=m_0\ ;\ L^z_{11}=L^z_{33}=m_f\ ;\ L^z_{\mu\nu}=0 \text{ za } \mu\neq\nu$$

$$S^z_{00}=S^z_{11}=+\frac{1}{2}\ ;\ S^z_{22}=S^z_{33}=-\frac{1}{2}\ ;\ S^z_{\mu\nu}=0 \text{ za } \mu\neq\nu$$

$$L^+_{01}=\sqrt{(l_0-m_f)(l_0+m_f+1)}\,\delta_{m_0,m_f+1}\ ;\ L^+_{10}=\sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)}\,\delta_{m_f,m_0+1}$$

$$L^+_{23}=\sqrt{(l_0-m_f)(l_0+m_f+1)}\,\delta_{m_0,m_f+1}\ ;\ L^+_{32}=\sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)}\,\delta_{m_f,m_0+1}$$

$$L^-_{01}=\sqrt{(l_0+m_f)(l_0-m_f+1)}\,\delta_{m_0,m_f-1}\ ;\ L^-_{10}=\sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)}\,\delta_{m_f,m_0-1}$$

$$L^-_{23}=\sqrt{(l_0+m_f)(l_0-m_f+1)}\,\delta_{m_0,m_f-1}\ ;\ L^-_{32}=\sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)}\,\delta_{m_f,m_0-1}$$

$$S^+_{02}=1\ ;\ S^+_{13}=1\ ;\ S^-_{20}=1\ ;\ S^-_{31}=1 \qquad \text{II.3.5.}$$

Svi ostali matrični elementi operatora $L^\pm$ i $S^\pm$ ravni su nuli.

Razmotrimo slučaj $m_f = m_0 + 1$. Tada je:

$$L^z_{00}=L^z_{22}=m_0\ ;\ L^z_{11}=L^z_{33}=m_0+1\ ;\ L^+_{10}=\sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)}$$

$$L^+_{32}=\sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)}\ ;\quad L^-_{01}=\sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)}$$

$$L^-_{23}=\sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)}\ ; \qquad \text{II.3.6.}$$

Svi ostali L^z, $L^\pm$ su ravni nuli, a spinski matrični elementi ostaju kao u II.3.5.

Razmotrimo slučaj $m_f = m_0 - 1$. Tada je:

$$L^z_{00}=L^z_{22}=m_0\ ;\ L^z_{11}=L^z_{33}=m_0-1\ ;\ L^+_{01}=\sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)}$$

$$L^+_{23}=\sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)}\ ;\quad L^-_{10}=\sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)}$$

$$L^-_{32}=\sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)}\ ; \qquad \text{II.3.7.}$$

Svi ostali L^z, $L^\pm$ su ravni nuli, a spinski matrični elementi ostaju isti kao u II.3.5.

Hamiltonijan spoljašnje perturbacije za slučaj $m_f = m_0+1$ ima oblik:

$$H_{int}^{m_0+1} = -\int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, e^{-i\Omega t}\Big\{h^z(\Omega)(m_0 g_L+\tfrac{1}{2}g_s)a_0^+a_0 + h^z(\Omega)(m_0 g_L+g_L+\tfrac{1}{2}g_s)a_1^+a_1 +$$
$$+ h^z(\Omega)(m_0 g_L-\tfrac{1}{2}g_s)a_2^+a_2 + h^z(\Omega)(m_0 g_L+g_L-\tfrac{1}{2}g_s)a_3^+a_3 +$$
$$+ h^x(\Omega)g_L \mathcal{X}^{m_0+1}(a_1^+a_0+a_0^+a_1+a_3^+a_2+a_2^+a_3)+$$
$$+ h^x(\Omega)g_s(a_2^+a_0+a_0^+a_2+a_3^+a_1+a_1^+a_3)\Big\}$$

$$\mathcal{X}^{m_0+1} = \sqrt{(l_0-m_0)(l_0+m_0+1)}$$

II.3.8.

Hamiltonijan spoljašnje perturbacije za slučaj $m_f = m_0-1$ ima oblik:

$$H_{int}^{m_0-1} = -\int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, e^{-i\Omega t}\Big\{h^z(\Omega)(m_0 g_L+\tfrac{1}{2}g_s)a_0^+a_0 + h^z(\Omega)(m_0 g_L-g_L+\tfrac{1}{2}g_s)a_1^+a_1 +$$
$$+ h^z(\Omega)(m_0 g_L-\tfrac{1}{2}g_s)a_2^+a_2 + h^z(\Omega)(m_0 g_L-g_L-\tfrac{1}{2}g_s)a_3^+a_3 +$$
$$+ h^x(\Omega)g_L \mathcal{X}^{m_0-1}(a_1^+a_0+a_0^+a_1+a_3^+a_2+a_2^+a_3) +$$
$$+ h^x(\Omega)g_s(a_2^+a_0+a_0^+a_2+a_3^+a_1+a_1^+a_3)\Big\}$$

$$\mathcal{X}^{m_0-1} = \sqrt{(l_0+m_0)(l_0-m_0+1)}$$

II.3.9.

Prelazeći na kvazi-Pauli operatore možemo konačno pisati:

$$H_{int}^{(t)} = -\int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, e^{-i\Omega t}\left[H_0(\Omega)+H_1(\Omega)+H_2(\Omega)\right] \qquad \text{II.3.10.}$$

gde je:

$$H_0(\Omega) = h^z(\Omega)\left[(m_0\pm 1)g_L+\tfrac{1}{2}g_s+(g_L-g_s)\rho^2(1+\rho^2)^{-1}\right]$$

$$H_1(\Omega) = \hbar^x(\Omega)\left[\frac{g_L\gamma + g_S\rho}{\sqrt{1+\rho^2}}\left(\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}_1^+\right) + \frac{g_S + g_L\rho\gamma}{\sqrt{1+\rho^2}}\left(\mathcal{P}_2 + \mathcal{P}_2^+\right)\right] +$$

$$+ \hbar^z(\Omega)\,\frac{(g_L - g_S)\rho}{1+\rho^2}\left(\mathcal{P}_3 + \mathcal{P}_3^+\right)$$

$$H_2(\Omega) = \hbar^z(\Omega)\left\{\left[\frac{(g_S - g_L)\rho^2}{1+\rho^2} + R_L\right]\mathcal{P}_1^+\mathcal{P}_1 + \left[\frac{(g_S - g_L)\rho^2}{1+\rho^2} - g_S\right]\mathcal{P}_2^+\mathcal{P}_2 +\right.$$

$$\left. + \frac{(g_L - g_S)(1-\rho^2)}{1+\rho^2}\mathcal{P}_3^+\mathcal{P}_3\right\} + \hbar^x(\Omega)\left\{\frac{g_S - g_L\rho\gamma}{\sqrt{1+\rho^2}}\left(\mathcal{P}_1^+\mathcal{P}_3 + C_oC\right) +\right.$$

$$\left. + \frac{g_L\gamma - g_S\rho}{\sqrt{1+\rho^2}}\left(\mathcal{P}_2^+\mathcal{P}_3 + C_oC\right)\right\} \qquad \text{II.3.11.}$$

Za slučajeve $m_f = m_0 + 1$ i $m_f = m_0 - 1$ u poslednjim formulama treba, respektivno, pisati indekse A i B .

U aproksimaciji linearne reakcije (ako zanemarimo srednje vrednosti tipa $\langle \mathcal{P}\mathcal{P}^+\mathcal{P}\mathcal{P}^+\rangle$) samo oni delovi operatora I^+ i I^- koji su linearni po $\mathcal{P}$ i $\mathcal{P}^+$ imaju korekcije koje su različite od nule.

Efektivni interakcioni Hamiltonijan je sledeći:

$$V(t) = -\int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, e^{-i\Omega t}\left\{h_1(\Omega)\left[\mathcal{P}_1(t) + C_oC\right] + h_2(\Omega)\left[\mathcal{P}_2(t) + C_oC\right]\right\}$$

$$\mathcal{P}_\theta(t) = e^{-\frac{Ht}{i\hbar}}\,\mathcal{P}_\theta\, e^{\frac{Ht}{i\hbar}}$$

$$h_1(\Omega) = \hbar^x(\Omega)\,\frac{g_L\gamma + g_S\rho}{\sqrt{1+\rho^2}}\,; \quad h_2(\Omega) = \hbar^x(\Omega)\,\frac{g_S + g_L\rho\gamma}{\sqrt{1+\rho^2}}$$

II.3.12.

U skladu sa opštom teorijom linearne reakcije (vidi ref. /5/ str. 135-141) možemo pisati

$$\langle J^{\pm}(t)\rangle_{n.eq.} = \langle \hat{S}^{-1}(t,t_0)\, J^{\pm}(t)\, \hat{S}(t,t_0)\rangle_{eq.} \qquad \text{II.3.13.}$$

gde je $\hat{S}(t, t_0)$ "es" matrica sistema:

$$\hat{S}^{\pm 1}(t,t_0)=\hat{T}\,e^{\pm\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'V(t')}\approx 1\pm\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'V(t') \qquad \text{II.3.14.}$$

gde je $\hat{T}$ Dajsonov hronološki operator i

$$J^{+}(t)=j_1\mathcal{P}_1^{+}(t)+j_2\mathcal{P}_2(t)\,;\quad J^{-}(t)=j_1\mathcal{P}_1(t)+j_2\mathcal{P}_2^{+}(t)$$

$$j_1=\frac{\Psi+\rho}{\sqrt{1+\rho^2}}\,;\qquad j_2=\frac{1+\Psi\rho}{\sqrt{1+\rho^2}} \qquad \text{II.3.15.}$$

Predpostavljajući da se interakcija uključuje adijabatski tj. $t_0\rightarrow -\infty$, dobijamo:

$$\langle J^{\pm}(t)\rangle_{n.eq.}=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\langle\langle J^{\pm}(t)|V(t')\rangle\rangle \qquad \text{II.3.16.}$$

gde je $\langle\langle J^{\pm}(t)|V(t')\rangle\rangle$ dvovremenska, temperaturska Grinova funkcija. Grinova funkcija $\langle\langle J^{\pm}(t)|V(t')\rangle\rangle$ izražena je preko kvazi-Paulionskih Grinovih funkcija

$$\Gamma_{\theta\omega}(t)=\langle\langle\mathcal{P}_\theta(t)|\mathcal{P}_\omega^{+}(0)\rangle\rangle;\ \Gamma_{\theta\omega}(t)=\int_{-\infty}^{+\infty}d\Omega\,\Gamma_{\theta\omega}(\Omega)e^{-i\Omega t} \qquad \text{II.3.17.}$$

Izraz za Grinovu funkciju Γ je sledeći:

$$\Gamma_{\theta\omega}(\Omega)=\lim_{\delta\to+0}\frac{i}{2\pi}\,\frac{\sigma\delta_{\theta\omega}-\langle\mathcal{P}_\omega^{+}\mathcal{P}_\theta\rangle}{\Omega-\Omega_\theta+i\delta}\,;\quad \Omega_\theta=\hbar^{-1}\Delta_\theta \qquad \text{II.3.18.}$$

Koristeći spektralnu teoremu:

$$\langle\mathcal{P}_\omega^{+}\mathcal{P}_\theta\rangle=2\int_{-\infty}^{+\infty}d\Omega\,\left(e^{\frac{\hbar\Omega}{\tau}}-1\right)^{-1}\mathrm{Re}\,\Gamma_{\theta\omega}(\Omega)=\frac{\sigma\delta_{\theta\omega}-\langle\mathcal{P}_\omega^{+}\mathcal{P}_\theta\rangle}{e^{\frac{\hbar\Omega}{\tau}}-1}$$

mi konačno dobijamo

$$\langle\mathcal{P}_\omega^{+}\mathcal{P}_\theta\rangle=\delta_{\theta\omega}\,\sigma\,e^{-\frac{\Delta_\theta}{\tau}};\ \Gamma_{\theta\omega}(\Omega)=\lim_{\delta\to 0}\frac{i\sigma}{2\pi}\delta_{\theta\omega}\,\frac{1-e^{-\frac{\Delta_\theta}{\tau}}}{\Omega-\Omega_\theta+i\delta} \qquad \text{II.3.19.}$$

Kombinujući formule (II.3.12., II.3.15., II.3.16., II.3.19.) za Furije likove indukovanih momenata

$$\langle J^{\pm}(\Omega)\rangle_{n.eq.}=(2\pi)^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty}dt\,e^{i\Omega t}\langle J^{\pm}(t)\rangle_{n.eq.} \qquad \text{II.3.20.}$$

dobijamo sledeće izraze:

$$\langle J^{+}(\Omega)\rangle_{n.eq.} = \frac{\sigma}{2\hbar}\left[\frac{j_2 h_2(\Omega)(1-e^{-\frac{\hbar\Omega_2}{\tau}})}{\Omega-\Omega_2} - \frac{j_1 h_1(\Omega)(1-e^{-\frac{\hbar\Omega_1}{\tau}})}{\Omega+\Omega_1}\right.$$

$$\langle J^{-}(\Omega)\rangle_{n.eq.} = \frac{\sigma}{2\hbar}\left[\frac{j_1 h_1(\Omega)(1-e^{-\frac{\hbar\Omega_1}{\tau}})}{\Omega-\Omega_1} - \frac{j_2 h_2(\Omega)(1-e^{-\frac{\hbar\Omega_2}{\tau}})}{\Omega+\Omega_2}\right. \qquad \text{II.3.21.}$$

Iz dobijenih formula zaključujemo da je spoljašnja stimulacija najefektivnija za T=0 . Na visokim temperaturama, kada je $\frac{\Omega_\theta}{\tau} \ll 1$, rezonantni delovi indukovanih momenata su

$$\langle J^{+}(\Omega)\rangle_{n.eq.} \approx \frac{j_2 h_2(\Omega)}{2}\cdot\frac{\Omega_2}{\tau}\frac{1}{\Omega-\Omega_2}$$

$$\langle J^{-}(\Omega)\rangle_{n.eq.} \approx \frac{j_1 h_1(\Omega)}{2}\frac{\Omega_1}{\tau}\frac{1}{\Omega-\Omega_1} \qquad \text{II.3.22.}$$

i kao što se vidi oni opadaju linearno sa porastom temperature.

ZAKLJUČAK

Analiza sistema jednoelektronskih pobudjenja koja se sastoje u diskretnim promenama orijentacije spina i orbitalnog momenta pokazala je da u sistemu postoje tri tipa eksitacije. One zadovoljavaju specifičnu, kvazi-Paulionsku kinematiku, a ova opet na bitan način odredjuje statističke i termodinamičke osobine sistema. Dinamičko ponašanje sistema bitno je uslovljeno spin-orbitalnom interakcijom. Ova činjenica daje mogućnost da se Hamiltonijan sistema svede na dijagonalnu formu. Druga posledica pomenute činjenice, tj. da spin-orbitalna interakcija odredjuje dinamiku sistema, su male energije elementarnih eksitacija, koje su reda veličine 30÷50 K_B . To znači da toplotni kvanti mogu i da ekscitiraju sistem i da bitno utiču na njegove termodinamičke karakteristike.

Izračunate su slobodna i unutrašnja energija sistema a takodje i njegova entropija, parametar uredjenosti i ravnotežna srednja vrednost z-komponente totalnog momenta. Pokazano je da parametar uredjenosti ima singularitet na temperaturi $\mathcal{T}_c$ a da srednja vrednost z-komponente totalnog momenta iščezava na temperaturi $\mathcal{T}_z$. Temperatura $\mathcal{T}_z$ je viša nego temperatura $\mathcal{T}_c$. Prema tome dolazimo do zaključka da se u sistemu mogu očekivati dva tipa faznih prelaza.

Linearna reakcija sistema na spoljašnju perturbaciju koja je proporcionalna magnetnom polju, takodje je analizirana. Pokazano je da spoljašnja stimulacija dovodi do pojave indukovanih momenata $\langle J^+(\Omega)\rangle_{n.eq.}$ i $\langle J^-(\Omega)\rangle_{n.eq.}$. Ovi indukovani momenti maksimalni su za T=0 i linearno opadaju kada temperatura raste.

Rezultati izložene analize direktno se mogu primeniti na gasove ili na kristale sa veoma slabim kuplovanjem izmedju suseda. Rezultati se mogu koristiti kao osnova za formulaciju opštije teorije spin-orbitalnih interakcija u kristalima, naročito za slučaj magnetnih dielektrika.

L I T E R A T U R A:

1. E.G. Petrov: "Teorija magnetnih eksitona", Naukovaja Dumka, Kiev, 1976. (in Russian)
2. N.N. Bogoliubov: "Lekcije iz kvantne statistike", Macdonald Tech. and Scientific, London, 1967.
3. L.I. Schiff: "Kvantna mehanika" , Mc. Graw-Hill Bock Comp. New York-London-Toronto, 1955.
4. D.I. Lalović, B.S. Tošić and R.B. Žakula: "Phys.Rev. 178,1472" (1969).
5. D.N.Zubarev: "Neravnotežna statistička termodinamika", Nauka, Moscow, 1971 (in Russian).