UNIVERZITET U NOVOM SADU

Prirodno-matematički fakultet

KORNELIJA G. MESAROŠ

DIPLOMSKI RAD IZ KVANTNE MEHANIKE

T e m a: FEROELEKTRIK U SPOLJAŠNJEM ELEKTROMAGNETNOM POLJU

U Novom Sadu, Juna 1974. godine

M E N T O R:

Dr. BRATISLAV TOŠIĆ,

vanredni profesor

Zahvaljujem se Dr. Bratislavu Tošiću na izboru teme i svestranoj pomoći pri izradi diplomskog rada. Takodje se zahvaljujem i asistentu Darku Kapor na korisnim savetima i sugestijama pri pisanju diplomskog rada.

U V O D

Cilj ovog rada je da se feroelektrični kristali tipa KDP analiziraju kao sistem fermiona sa dvočestičnim interakcijama. Ovakav prelaz ima svoja preimućstva koja se ukratko mogu rezimirati na sledeći način:

1. Prilaz je najopštiji mogući i ne zahteva pravljenje modela koji opet zahtevaju dopunske predpostavke.
2. Ovako tretiranje dopušta i analizu opštijeg slučaja nego što je protonski sistem sa dva podnivoa, a eksperimentalni rezultati govore da realističnije teorije treba da baziraju multinivovskim šemama.
3. Pošto je proton naelektrisana čestica on u elektromagnetnom polju menja svoj impuls, a to može da dovede do interesantnih promena osobina feroelektričnih ekscitacija.

U ovom diplomskom radu osnovna pažnja biće udeljena problemima navedenim pod brojem 3.

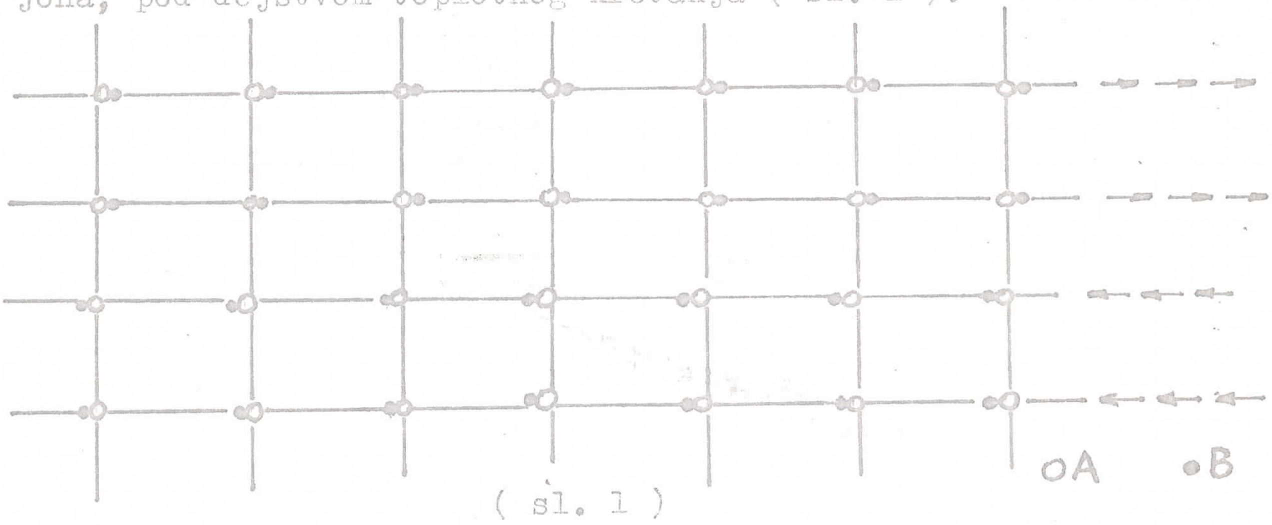
I GLAVA

OPŠTE O FEROELEKTRICIMA

1. Feroelektrik kao sistem uredjenih "bondova".

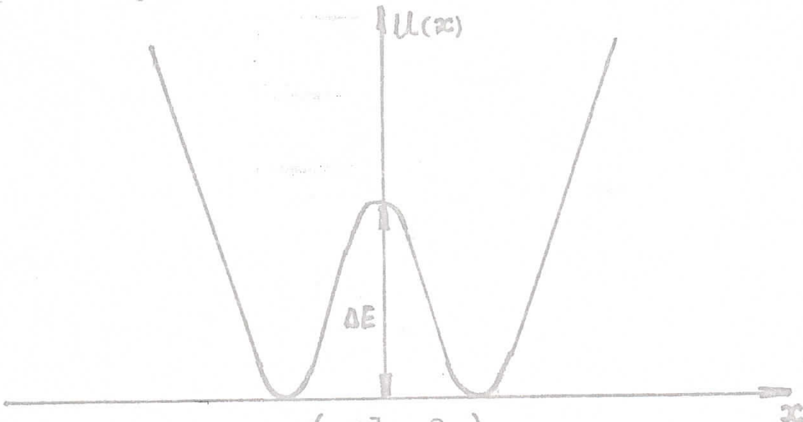
Feroelektrici su kristalne materije kod kojih se ispod neke temperature ili u nekim intervalima temperature, pojavljuje spontana elektronska polarizacija i u odsustvu spoljašnjeg polja.
Izmedju feroelektrika i feromagnetizma postoji formalna sličnost i otuda je naziv feroelektrika uslovljena tom sličnošću.
Tipični predstavnici feroelektričnih kristala su kalijum dihidrofosfat (KH_2PO_4), titanbarijum i natrijumkalijum tartarat tetrahidrat (Senjetova so).
Na osnovu tačnih strukturnih ispitivanja, pre svega na osnovu električnih i optičkih osobina kristala, sve feroelektrike delimo u dve grupe prema karakteru faznog prelaza. U prvoj grupi su oni feroelektrični kristali, koji imaju prelaz tipa "uredjenje-neuredjenje", a u drugoj grupi su feroelektrični kristali čiji su fazni prelazi tipa "prelaza pomeraja".
U kritičnoj tačci feroelektrici ispoljavaju diskontinuitet nekih fizičkih osobina, kao što su električna polarizacija, unutrašnja energija, a karakterišu se dielektričnom propustljivošću ε i veličinom toplotnog kapaciteta c. Na osnovu ovih veličina se i odredjuje fazni prelaz pojedinih feroelektrika.
Joni u feroelektričnim kristalima rasporedjeni su u uredjenim lancima i ovakva veza u stručnoj literaturi naziva se "bond", što u engleskom jeziku izmedju ostalog znači - veza. Posmatrajmo sada jone feroelektrika kao sistem uredjenih "bondova", u cilju objašnjenja fizičke pozadine podele feroelektrika na pomenuta dva tipa.

Kod feroelektrika tipa "uredjenje-neuredjenje" laki (B) joni rešetke mogu prelaziti iz jednog položaja ravnoteže u drugi, koji se nalaze na malom medjusobnom rastojanju izmedju dva teška (A) jona, pod dejstvom toplotnog kretanja (sl. 1).



(sl. 1)

Da bi jon prešao iz jedne potencijalne jame u drugu, mora da savlada potencijalnu barijeru ΔE (sl. 2).



(sl. 2)

Ako su laki joni sasvim blizu teških jona, onda grupa AB može da se posmatra kao električni dipol i tada je kristal spontano polarizovan. Laki joni (B) mogu bez ikakvog spoljašnjeg polja preći iz jednog ravnotežnog stanja u drugo i to procesom porasta temperature. Porastom temperature, toplotno kretanje lakih jona može toliko porasti, da tom stečenom energijom mogu savladati visinu potencijalne barijere i preći u neko drugo ravnotežno stanje. U kritičnoj tački i iznad nje, verovatnoća nalaženja jona i u jednoj i u drugoj potencijalnoj jami je ista, tako da dolazi do potpune depolarizacije kristala i on se tada nalazi u paraelektričnom stanju.

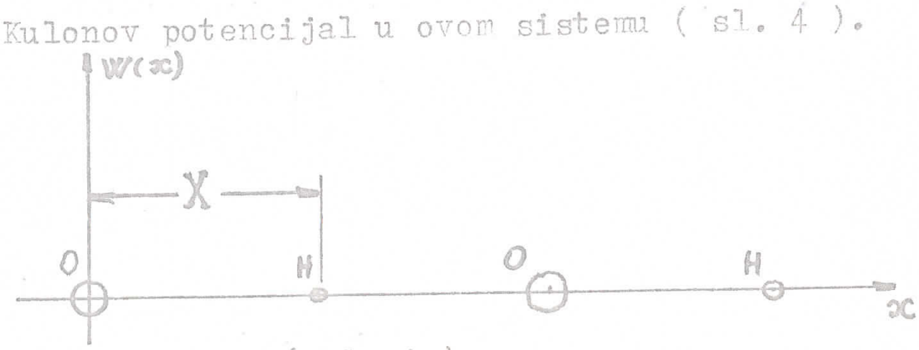
Za razliku od prvog tipa feroelektrika, feroelektrici tipa "prelaza pomeraja", u fazi spontane polarizacije stvaraju inducirane (trenutne) dipole, na račun velikog anharmonijskog kretanja jona u rešetci. Spontana polarizacija nastaje u tom slučaju ako preovlade efekti dugog dosega tj. elektrostatičkih sila dugog dosega, ali to je u slučaju složene situacije, kada postoje uzajamni efekti anharmonijske sile kratkog dosega i elektrostatičke sile dugog dosega

2. Objašnjenje W-potencijala

Kalijum dihidrofosfat (KH_2PO_4) je feroelektrik tipa "uredjenje-neuredjenje", sa vodoničnom vezom. Smatra se da kretanje proton uslovljava feroelektrične osobine. U ovom slučaju feroelektričnu ulogu jona (B) imaju protoni u vodoničnim vezama. U kristalu vodonik i kiseonik su vezani u lancima tj. u sistem uredjenih "bondova" (sl. 3).

(sl. 3)

Ako su joni na rastojanju većem od dimenzije jezgra, onda izmedju njih deluje Kulonova sila, kao sila izmedju dva naelektrisanja. Posmatrajmo Kulonov potencijal u ovom sistemu (sl. 4).



(sl. 4)

Neka je rastojanje izmedju jona kiseonika (O) "a" i neka ova tri naelektrisanja leže na x-osi. Neka je y-osa potencijal W i neka se koordinatni početak nalazi u kiseoniku, a vodonik neka se nalazi na rastojanju X od koordinatnog početka tj. od jona kiseonika. Kulonov potencijal tada ima vrednost:

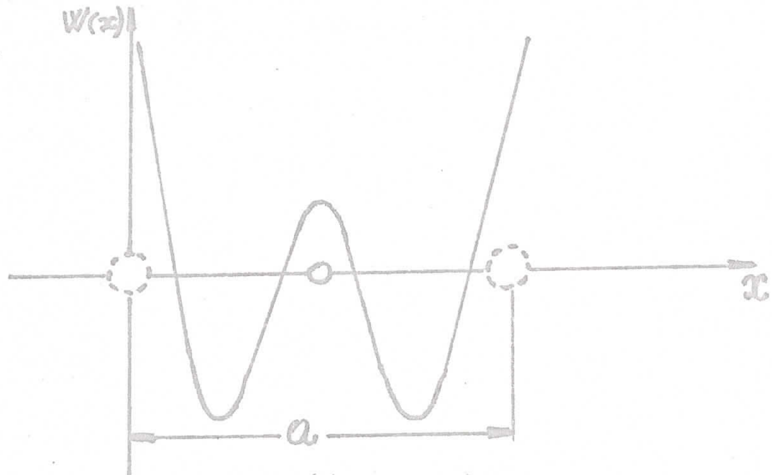
$$W = -\frac{W_0}{x} - \frac{W_0}{a-x} \qquad (I.2.1)$$

Maksimalnu vrednost potencijala nalazimo izjednačavanjem prvog izvoda potencijala sa nulom.

$$\frac{dW}{dx} = -W_0 \cdot a \frac{a-2x}{x^2(a-x)^2} = 0 \qquad (I.2.2)$$

$$x_{max} = \frac{a}{2} \Rightarrow W_{max} = \frac{4W_0}{a} \qquad (I.2.3)$$

Nacrtajmo potencijal koji će se dobiti za ovaj sistem "bondova" (sl. 5).



(sl. 5)

U blizini jezgra deluju sile jezgra, te potencijal menja znak (Odbojne sile deluju kao r^{-12}).

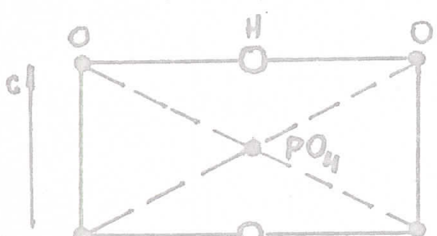
Ovakav potencijal naziva se potencijalom dvostruko simetrične jame.

3. Razni modeli u teoriju feroelektrika

Istorijski prvu molekularnu teoriju faznog prelaza kalijum dihidrofosfata dao je Slejter. Slejter je predpostavio da svaki proton ima dva moguća položaja unutar OH veze i da se na četiri H veze pridružene svakoj PO_4 grupi mogu nalaziti samo dva protona u bližim položajima ovoj grupi. Ovo energetsko stanje karakteriše se parametrom $\mathcal{E}_0$. Zanemarujući više energetske konfiguracije Slejter je uspeo da objasni opaženu promenu entropije na temperaturi prelaza predvidjajući fazni prelaz prve vrste.

Kako se prema opštoj klasifikaciji i eksperimentalnim rezultatima očekivalo da je u pitanju fazni prelaz druge vrste, kasnije je Takagi usavršio ovaj model. Medjutim i ovako usavršen model nije mogao da objasni izotopski efekat u feroelektriku.

Prema Slejteru ako se dva jona H nalaze blizu dva "gornja" jona (sl. 6) O, onda se grupi KH_2PO_4 asocira dipol u pravcu ose (-c). Ako se joni H (protoni) približe nižim O, onda je dipol ose (+c). Ove konfiguracije smatraju se energetski ekvivalentne i one se uzimaju kao konfiguracije nulte energije. U slučaju kada se jedan jon H nalazi blizu "gornjeg", a drugi blizu "donjeg" jona O, odgovaraju dipolima orijentisanim upravno na osu (c). Takvih konfiguracija ima četiri, koje su takodje energetski ekvivalentne i vezane su sa energijom $\mathcal{E}_0$. Drugim rečima, energija kristala bez spoljašnjeg polja se odredjuje brojem dipola orijentisanih upravno na osu (c), koji se množi konstantnom energijom $\mathcal{E}_0$.



(sl. 6)

$$P(\beta) = \sum_{j=1}^{N} \exp(-\beta j \mathcal{E}_0) \qquad (I.3.1)$$

$j = 1,2,3 \ldots N$ - BROJ FOSFATNIH GRUPA

$$\beta = \frac{1}{K_B \cdot T} \qquad (I.3.2)$$

Ne upuštajući se detaljno u složene Slejterove račune može se lako pokazati na drugi način, veze izmedju kritične temperature i Slejterovog parametra $\mathcal{E}_0$. Ako jednačina (I.3.1) predstavlja verovatnoću da sve N fosforne grupe imaju energiju $\mathcal{E}_0$, onda se temperatura prelaza može naći iz uslova da ova verovatnoća bude jednaka jedinici, tj. da na kritičnoj temperaturi svi dipoli budu upravni na osu (c).

$$P(\beta)=1 \tag{I.3.3}$$

Ako N teži beskonačnosi, onda se dobija Slejterov rezultat:

$$(K_B \cdot T_c)=\left(\frac{\varepsilon_0}{\ln 2}\right)^{-1} \tag{I.3.4}$$

Kasnije je Piren ceo problem tretirao kvantno mehanički, uvodeći kinetičku energiju protona. On je to pokušao sa potencijalom, koji ima jedan minimum. Neposredno posle ovoga Bline je uveo model po kome proton tunelira kvantno mehanički u potencijalu sa dva minimuma. Ovu ideju su kasnije poopštili japanski teoretčari Macubara i Tokanaga i nezavisno od njih De - Žen.
Iz radova ovih poslednjih teoretičara potekla je ideja kvazi - spina. Ne upuštajući se detaljno u izvodjenje kazi-spinskog Hamiltonijana i na osnovu prvih principa ideja ovog modela može se lako demonstrirati na jednočestičnom potencijalu vodonika unutar vodonične veze.

Hamiltonijan za jedan proton glasi:

$$H_p = E_{Kp} + U_p(x) \tag{I.3.5}$$

i ako su talasne funkcije protona u levoj, odnosno desnoj potencijalnoj jami, onda se u reprezentaciji ova dva stanja protona jednočestični Hamiltonijan može napisati u matričnom obliku:

$$\begin{pmatrix} \langle L|H_p|L\rangle & \langle L|H_p|D\rangle \\ \langle D|H_p|L\rangle & \langle D|H_p|D\rangle \end{pmatrix} \tag{I.3.6}$$

Po prirodi problema $\Psi_L(x)$ i $\Psi_D(x)$ su realne funkcije, pa je iz simetrije problema i:

$$\langle L|H_p|L\rangle=\langle D|H_p|D\rangle=E_0 \tag{I.3.7}$$

Matrica (I.3.6) se onda može pisati u obliku:

$$E_0\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}+\Omega\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}=E_0 I(2\times 2)+2\,\Omega\,\hat{S}_x \tag{I.3.8}$$

Interakcija izmedju protona opisuje se Isingovim modelom:

$$H_{p-p} = -\sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \qquad (I.3.9)$$

Totalni Hamiltonijan je onda:

$$H = -2\Omega \sum_i S_i^x - \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \qquad 2\Omega = -2\Omega_0 \qquad (I.3.10)$$

Kasnije su ovaj model poopštili Villain i Stamenković uvodeći interakciju protona sa teškim jonima. Na kraju Stamenković i Novaković su razvili dinamičku teoriju feroelektrika sa vodoničnom vezom u kojoj su dobijene kompletne kolektivne frekvencije sistema zajedno sa njihovim vremenom poluživota. Ovo je omogućilo formulaciju diferencijalnog efikasnog preseka za rasejanje sporih neutrona, koja treba da omogući uvid u slaganje teorije sa praksom.

II G L A V A

FEROELEKTRIK KAO SISTEM SA DVOČESTICNIM FERMIONSKIM INTERAKCIJAMA

1. Hamiltonijan i Pauli - operatori

Najuspešnija teorija koja objašnjava mikrofenomene u feroelektricima, čiji je tipičan predstavnik kalijum dihidrofosfat (KH_2PO_4), bazira na ideji sistema "OHO bondova". Ako odbacimo sva ostala moguća kretanja u feroelektricima i baziramo samo na O-H-O - vezi, onda se ovo može posmatrati kao sistem fermiona sa dvočestičnim interakcijama. Pri tome su ti fermioni protoni za svaki čvor rešetke. U reprezentaciji druge kvantizacije Hamiltonijan za dvočestične fermionske interakcije ima oblik:

$$H = H_2 + H_4 \tag{II.1.1}$$

$$H_2 = \sum_{\vec{n} f} E_{\vec{n} f}\, a^+_{\vec{n} f} a_{\vec{n} f} \tag{II.1.2}$$

$$H_4 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} f} W_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2, f_3 f_4)\, a^+_{\vec{n} f_1} a^+_{\vec{m} f_2} a_{\vec{m} f_3} a_{\vec{n} f_4} \tag{II.1.3}$$

U formuli (II.1.2) i (II.1.3) $\vec{n}$ i $\vec{m}$ označavaju čvorove rešetke; f_1, f_2, f_3, f_4 predstavljaju skupove kvantnih brojeva, koji karakterišu stanje elektrona; $E_{\vec{n} f}$ su energije elektrona u stanju f i $W_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2, f_3 f_4)$ su matrični elementi operatora dvočestične interakcije po svojstvenim stanjima elektrona u čvorovima rešetke. Operatori $a^+_{\vec{n} f}$ i $a_{\vec{n} f}$ kreiraju, odnosno anihiliraju elektron na čvoru n u stanju f i to su Fermi - operatori, koji zadovoljavaju sledeće osobine:

$$a^+_{\vec{n} f} a_{\vec{n} f} + a^+_{\vec{n} 0} a_{\vec{n} 0} = 1 \tag{II.1.4}$$

$$\left.\begin{aligned}
&a^+_{\vec{n}\alpha} a_{\vec{m}\beta} + a_{\vec{m}\beta} a^+_{\vec{n}\alpha} = \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta_{\alpha\beta} \\
&a^{+2}_{\vec{n}\alpha} = a^2_{\vec{n}\alpha} = 0 \\
&a^+_{\vec{n}\alpha} a^+_{\vec{m}\beta} + a^+_{\vec{m}\beta} a^+_{\vec{n}\alpha} = 0 \\
&a_{\vec{n}\alpha} a_{\vec{m}\beta} + a_{\vec{m}\beta} a_{\vec{n}\alpha} = 0
\end{aligned}\right\} \tag{II.1.5}$$

Ako sa $H_{\vec n}$ označimo Hamiltonijan molekula na mestu n, onda njegov svojstveni problem možemo napisati kao:

$$H_{\vec n}\varphi^{f}_{\vec n} = E^{f}_{\vec n}\varphi^{f}_{\vec n} \tag{II.1.6}$$

Na osnovu ovog vidimo da su $E^{f}_{\vec n}$ energije izolovanog molekula, dok su funkcije $\varphi^{f}_{\vec n}$ svojstvene funkcije Hamiltonijana izolovanog molekula.

Matrični elementi $W_{\vec n\vec m}(f_1f_2,f_3f_4)$ data su kao:

$$W_{\vec n\vec m}(f_1f_2,f_3f_4)=\int \overset{*}{\varphi}{}^{f_1}_{\vec n}\,\overset{*}{\varphi}{}^{f_2}_{\vec m}\,W_{\vec n\vec m}\,\varphi^{f_3}_{\vec n}\,\varphi^{f_4}_{\vec m}\,d\tau_{\vec n}\,d\tau_{\vec m} \tag{II.1.7}$$

gde $d\tau_{\vec n}$ i $d\tau_{\vec m}$ predstavljaju elemente zapremine prostora koji zauzimaju molekuli na mestu $\vec n$ i $\vec m$. Talasne funkcije φ jako brzo opadaju sa rastojanjem pa se integral (II.1.6) može shvatiti bez velike pogreške kao integral po beskonačnoj zapremini.

Pri daljoj analizi mi ćemo smatrati da proton može da zauzme samo dva stanja, osnovno "0" i pobudjeno λ. Ovakva šema, naziva se šema sa dva nivoa.

Stanja koja proton može zauzeti data su po šemi (II.1.8):

f_1	f_2	f_3	f_4
0	0	0	0
λ	0	0	0
0	λ	0	0
0	0	λ	0
0	0	0	λ
λ	λ	0	0
λ	0	λ	0
λ	0	0	λ
0	λ	λ	0
0	λ	0	λ
0	0	λ	λ
λ	λ	λ	0
λ	λ	0	λ
λ	0	λ	λ
0	λ	λ	λ
λ	λ	λ	λ

(II.1.8)

Koristeći osobinu Fermi - operatora (II.1.4) i znajući da f uzima vrednosti $(0,\lambda)$, možemo prvi deo Hamiltonijana pisati u obliku:

$$\begin{aligned} H_2 &= \sum_{\vec{u}f} E_{\vec{u}f}\, a^+_{\vec{u}f} a_{\vec{u}f} = \\ &= \sum_{\vec{u}} E_{\vec{u}0}\, a^+_{\vec{u}0} a_{\vec{u}0} + \sum_{\vec{u}} E_{\vec{u}\lambda}\, a^+_{\vec{u}\lambda} a_{\vec{u}\lambda} = \\ &= \sum_{\vec{u}} E_{\vec{u}0}\left(1 - a^+_{\vec{u}\lambda} a_{\vec{u}\lambda}\right) + \sum_{\vec{u}} E_{\vec{u}\lambda}\, a^+_{\vec{u}\lambda} a_{\vec{u}\lambda} = \\ &= \sum_{\vec{u}} E_{\vec{u}0} + \sum_{\vec{u}} \left(E_{\vec{u}\lambda} - E_{\vec{u}0}\right) a^+_{\vec{u}\lambda} a_{\vec{u}\lambda} = \\ &= N E_0 + \sum_{\vec{u}} \left(E_{\vec{u}\lambda} - E_{\vec{u}0}\right) a^+_{\vec{u}\lambda} a_{\vec{u}\lambda} \end{aligned} \qquad (\text{II}.1.9)$$

U Hamiltonijanu (II.1.1) zgodnije je sa čestičnih operatora (Fermi - operatora) preći na kvazičestične operatore P, koji se definišu kao:

$$P^+_{\vec{u}} = a^+_{\vec{u}\lambda} a_{\vec{u}0} \qquad\qquad P_{\vec{u}} = a^+_{\vec{u}0} a_{\vec{u}\lambda} \qquad (\text{II}.1.10)$$

jer nam to daje mogućnost da veliki deo interakcija čestica, ubacimo u energiju gasa kvazičestica.

Fizički smisao novo uvedenih operatora je očigledan. Prema definiciji kvazičestičnih operatora, $P^+_{\vec{u}}$ opisuje proces u kome je nestao jedan proton u osnovnom stanju, a "rodio" se u pobudjenom stanju λ . Prema tome operator $P^+_{\vec{u}}$ kreira kvant pobudjenja sa energijom $E_\lambda - E_0$. Operator $P_{\vec{u}}$ opisuje proces u kome je isčezao proton u pobudjenom stanju λ , a "rodio" se u osnovnom stanju "0". Prema tome operator $P_{\vec{u}}$ uništeva (anihilira) kvant pobudjenja sa energijom $E_\lambda - E_0$.

Operatori $P_{\vec{u}}$ nemaju fermionske komutacione relacije, ni bozonske, a sa statističke tačke gledišta predstavljaju, sredinu izmedju Boze i Fermi - operatora. Ovakvi operatori nazivaju se Pauli - operatori.

Ako je protonu dopušteno da zauzme svega dva stanja " 0" i λ , onda zbog Paulijevog principa, za svaki čvor rešetke, kompletni fermionski prostor dat je ovako:

$$|1_0 \quad 0_\lambda\rangle \qquad |1_0 \quad 1_\lambda\rangle \tag{II.1.11}$$

$$|1_0 \quad 0_\lambda\rangle \qquad |0_0 \quad 1_\lambda\rangle \tag{II.1.12}$$

Na osnovu definicije Pauli - operatora možemo dokazati da su oni u podprostoru (II.1.11) identično jednaki nuli. U tom cilju primenimo operatore $P_{\vec{\mu}}^{+}$ i $P_{\vec{\mu}}$ na sve kombinacije stanja:

$$\left.\begin{aligned}
&P_{\vec{\mu}}^{+}|0_0 \quad 0_\lambda\rangle = a_{\vec{\mu}\lambda}^{+} a_{\vec{\mu}0}|0_0 \quad 0_\lambda\rangle = 0\\
&\qquad\qquad \text{zbog } a_{\vec{\mu}0}|0_0\rangle\\
&P_{\vec{\mu}}^{+}|1_0 \quad 1_\lambda\rangle = a_{\vec{\mu}\lambda}^{+} a_{\vec{\mu}0}|1_0 \quad 1_\lambda\rangle = 0\\
&\qquad\qquad \text{zbog } a_{\vec{\mu}\lambda}^{+}|1_\lambda\rangle\\
&P_{\vec{\mu}}|0_0 \quad 0_\lambda\rangle = a_{\vec{\mu}0}^{+} a_{\vec{\mu}\lambda}|0_0 \quad 0_\lambda\rangle = 0\\
&\qquad\qquad \text{zbog } a_{\vec{\mu}\lambda}|0_\lambda\rangle\\
&P_{\vec{\mu}}|1_0 \quad 1_\lambda\rangle = a_{\vec{\mu}0}^{+} a_{\vec{\mu}\lambda}|1_0 \quad 1_\lambda\rangle = 0\\
&\qquad\qquad \text{zbog } a_{\vec{\mu}0}^{+}|1_0\rangle
\end{aligned}\right\} \tag{II.1.13}$$

Činjenica da su Pauli - operatori u ovom podprostoru jednaki nuli, znači da nam ovaj podprostor ne može uticati na fizičke karakteristike sistema, pa ćemo ga zbog toga isključiti iz daljeg razmatranja.

U podprostoru (II.1.12) Pauli - operatori nisu u svim slučajevima jednaki nuli:

$$\left.\begin{aligned}
&P_{\vec{\mu}}^{+}|1_0 \quad 0_\lambda\rangle = a_{\vec{\mu}\lambda}^{+} a_{\vec{\mu}0}|1_0 \quad 0_\lambda\rangle = |0_0 \quad 1_\lambda\rangle\\
&P_{\vec{\mu}}^{+}|0_0 \quad 1_\lambda\rangle = a_{\vec{\mu}\lambda}^{+} a_{\vec{\mu}0}|0_0 \quad 1_\lambda\rangle = 0\\
&P_{\vec{\mu}}|1_0 \quad 0_\lambda\rangle = a_{\vec{\mu}0}^{+} a_{\vec{\mu}\lambda}|1_0 \quad 0_\lambda\rangle = 0\\
&P_{\vec{\mu}}|0_0 \quad 1_\lambda\rangle = a_{\vec{\mu}0}^{+} a_{\vec{\mu}\lambda}|0_0 \quad 1_\lambda\rangle = |1_0 \quad 0_\lambda\rangle
\end{aligned}\right\} \tag{II.1.14}$$

Bitno je uočiti da nas Pauli - operatori, delujući na odredjena stanja ne izvode iz tog prostora, što znači da delujući na funkciju stanja iz tog podprostora daju funkciju koja pripada tom istom podprostoru. Posledica ovih zaključaka je da se Hamiltonijan ne razmatra u celom prostoru, već samo u podprostoru (II.1.12).

Ako iskoristimo relacije (II.1.10) i (II.1.4) za Pauli - operatore dobijamo sledeće komutacione relacije:

a) $n = m$

$$P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + P_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{n}} = 1 \qquad (\text{II}.1.15)$$

dokaz:

$$a^{+}_{\vec{n}\lambda} \underbrace{a_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{n}0}}_{1 - a^{+}_{\vec{n}0} a_{\vec{n}0}} a_{\vec{n}\lambda} + a^{+}_{\vec{n}0} \underbrace{a_{\vec{n}\lambda} a^{+}_{\vec{n}\lambda}}_{1 - a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda}} a_{\vec{n}0} =$$

$$= a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} - a^{+}_{\vec{n}\lambda} a^{+}_{\vec{n}0} a_{\vec{n}0} a_{\vec{n}\lambda} + a^{+}_{\vec{n}0} a_{\vec{n}0} - a^{+}_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}0} =$$

$$= a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} + a^{+}_{\vec{n}0} a_{\vec{n}0} = 1$$

jer su druga dva člana u podprostoru (II.1.12) jednaki nuli.

$$P^{+2}_{\vec{n}} = 0 \qquad (\text{II}.1.16)$$

dokaz:

$$a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}0} | 0_0 \quad 1_\lambda \rangle = 0$$

$$a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}0} | 1_0 \quad 0_\lambda \rangle = 0$$

$$P^{2}_{\vec{n}} = 0 \qquad (\text{II}.1.17)$$

dokaz:

$$a^{+}_{\vec{n}0} a_{\vec{n}\lambda} a^{+}_{\vec{n}0} a_{\vec{n}\lambda} | 0_0 \quad 1_\lambda \rangle = 0$$

$$a^{+}_{\vec{n}0} a_{\vec{n}\lambda} a^{+}_{\vec{n}0} a_{\vec{n}\lambda} | 1_0 \quad 0_\lambda \rangle = 0$$

$$P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} \qquad (\text{II}.1.18)$$

dokaz:

$$P^+_{\vec u} P_{\vec u} = \underbrace{a^+_{\vec u \lambda} a_{\vec u 0} a^+_{\vec u 0}}_{1 - a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda}} a_{\vec u \lambda} =$$

$$= a^+_{\vec u \lambda} a_{\vec u \lambda} - a^+_{\vec u \lambda} a^+_{\vec u 0} a_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} = a^+_{\vec u \lambda} a_{\vec u \lambda} =$$

$$= 0 \text{ ili } 1$$

jer je drugi član u podprostoru (II.1.12) jednak nuli.

b) $u \neq m$

$$P_{\vec u} P^+_{\vec m} - P^+_{\vec m} P_{\vec u} = 0 \qquad (\text{II}.1.19)$$

dokaz:

$$a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} - a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} =$$

$$= a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} - a^+_{\vec u 0} a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} a_{\vec u \lambda} =$$

$$= a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} - a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} = 0$$

$$P_{\vec u} P_{\vec m} - P_{\vec m} P_{\vec u} = 0 \qquad (\text{II}.1.20)$$

dokaz:

$$a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} a^+_{\vec m 0} a_{\vec m \lambda} - a^+_{\vec m 0} a_{\vec m \lambda} a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} =$$

$$= a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} a^+_{\vec m 0} a_{\vec m \lambda} - a^+_{\vec u 0} a^+_{\vec m 0} a_{\vec m \lambda} a_{\vec u \lambda} =$$

$$= a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} a^+_{\vec m 0} a_{\vec m \lambda} - a^+_{\vec u 0} a_{\vec u \lambda} a_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} = 0$$

$$P^+_{\vec u} P^+_{\vec m} - P^+_{\vec m} P^+_{\vec u} = 0 \qquad (\text{II}.1.21)$$

dokaz:

$$a^+_{\vec u \lambda} a_{\vec u 0} a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} - a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} a^+_{\vec u \lambda} a_{\vec u 0} =$$

$$= a^+_{\vec u \lambda} a_{\vec u 0} a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} - a^+_{\vec u \lambda} a_{\vec u 0} a^+_{\vec m \lambda} a_{\vec m 0} = 0$$

Komutacione relacije (II.1.15) i (II.1.19) možemo zajedno pisati kao:

$$P_{\vec u} P^+_{\vec m} - P^+_{\vec m} P_{\vec u} = (1 - 2 P^+_{\vec u} P_{\vec u}) \delta_{\vec u \vec m} \qquad (\text{II}.1.22)$$

Iz ove diskusije proizilaze sledeće komutacione relacije za Pauli - operatore:

$$\left.\begin{aligned} &[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^{+}] = (1-2P_{\vec{n}}^{+}P_{\vec{n}})\,\delta_{\vec{n}\vec{m}} \\ &P_{\vec{n}}^{+2} = P_{\vec{n}}^{2} = 0 \\ &P_{\vec{n}}^{+}P_{\vec{n}} = a_{\vec{n}\lambda}^{+}a_{\vec{n}\lambda} = 0 \text{ ili } 1 \\ &[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P_{\vec{n}}^{+}, P_{\vec{m}}^{+}] = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (\text{II}.1.23)$$

Pauli - operatori imaju specifične komutacione relacije. Za jedan čvor (n=m) oni zadovoljavaju fermionske komutacione relacije, a za različite čvorove (n≠m) bozonske komutacione relacije. Posledica ovoga je da im komutacione relacije nisu invarijamte u odnosu na Furijè transformacije, kojom se prelazi sa prostora rešetke u prostor recipročne rešetke. To znači da ako izvršimo Furije transform:

$$P_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} P_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad (\text{II}.1.24)$$

operatori $P_{\vec{k}}$ i $P_{\vec{k}}^{+}$ ne zadovoljavaju iste komutacione relacije, kao operatori $P_{\vec{n}}$ i $P_{\vec{n}}^{+}$.

Uzimajući u obzir sva stanja koja protoni mogu zauzeti, drugi deo Hamiltonijana (II.1.3) možemo pisati u novom obliku:

$$\begin{aligned} H_4 = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2, f_3 f_4)\, a^{+}_{\vec{n}f_1} a^{+}_{\vec{m}f_2} a_{\vec{m}f_3} a_{\vec{n}f_4} = \\ = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(00,00)\, a^{+}_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{m}0} a_{\vec{m}0} a_{\vec{n}0} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,00)\, a^{+}_{\vec{n}\lambda} a^{+}_{\vec{m}0} a_{\vec{m}0} a_{\vec{n}0} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda,00)\, a^{+}_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{m}0} a_{\vec{n}0} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(00,\lambda 0)\, a^{+}_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{m}0} a_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{n}0} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(00,0\lambda)\, a^{+}_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{m}0} a_{\vec{m}0} a_{\vec{n}\lambda} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda,00)\, a^{+}_{\vec{n}\lambda} a^{+}_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{m}0} a_{\vec{n}0} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,\lambda 0)\, a^{+}_{\vec{n}\lambda} a^{+}_{\vec{m}0} a_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{n}0} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,0\lambda)\, a^{+}_{\vec{n}\lambda} a^{+}_{\vec{m}0} a_{\vec{m}0} a_{\vec{n}\lambda} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda,\lambda 0)\, a^{+}_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{n}0} + \end{aligned}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda,0\lambda)\, a^+_{\vec{n}0} a^+_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{m}0} a_{\vec{n}\lambda} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(00,\lambda\lambda)\, a^+_{\vec{n}0} a^+_{\vec{m}0} a_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda,\lambda 0)\, a^+_{\vec{n}\lambda} a^+_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{n}0} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda,0\lambda)\, a^+_{\vec{n}\lambda} a^+_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{m}0} a_{\vec{n}\lambda} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,\lambda\lambda)\, a^+_{\vec{n}\lambda} a^+_{\vec{m}0} a_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda,\lambda\lambda)\, a^+_{\vec{n}0} a^+_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda,\lambda\lambda)\, a^+_{\vec{n}\lambda} a^+_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{m}\lambda} a_{\vec{n}\lambda}. \qquad (II.1.25)$$

Koristeći Pauli-operatore po definiciji (II.1.10), osobine Fermi-operatora (II.1.4) i osobine Pauli-operatora (II.1.23), ovaj deo Hamiltonijana možemo pisati u sledećem obliku:

$$H_4=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(00,00)\left[1+P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}-P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}-P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}\right]+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,00)\left[P^+_{\vec{n}}-P^+_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}\right]+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(00,0\lambda)\left[P^+_{\vec{m}}-P^+_{\vec{m}}P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}\right]+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(00,\lambda 0)\left[P_{\vec{m}}-P_{\vec{m}}P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}\right]+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(00,0\lambda)\left[P_{\vec{n}}-P_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}\right]+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda,00)\, P^+_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,\lambda 0)\, P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,0\lambda)\left[P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}-P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}\right]+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda,\lambda 0)\left[P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}-\right.$$

$$\left.-P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}\right]+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda,0\lambda)\, P_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(00,\lambda\lambda)\, P_{\vec{n}}P_{\vec{m}}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda,\lambda 0)\, P^+_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda,0\lambda)\, P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,\lambda\lambda)\, P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}P_{\vec{m}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda,\lambda\lambda)\, P_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda,\lambda\lambda)\, P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}P^+_{\vec{m}}P_{\vec{m}}. \qquad (II.1.26)$$

Saberimo članove uz linearne, kvadratne, kubne i četvrti deo Hamiltonijana, stim što na potrebnim mestima zamenjujemo n sa m i uzimajući u obzir i prvi deo Hamiltonijana, ceo Hamiltonijan dobija oblik:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 \tag{II.1.27}$$

$$H_0 = E_0 N + \frac{1}{2} W_0 N \tag{II.1.28}$$

$$H_1 = A \sum_{\vec{n}} (P_{\vec{n}}^+ + P_{\vec{n}}) \tag{II.1.29}$$

$$H_2 = B \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} B^{(1)}_{\vec{n}\vec{m}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ + P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}) + \sum_{\vec{n}\vec{m}} B^{(2)}_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} \tag{II.1.30}$$

$$H_3 = \sum_{\vec{n}\vec{m}} C_{\vec{n}\vec{m}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}} + P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}) \tag{II.1.31}$$

$$H_4 = \sum_{\vec{n}\vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}} \tag{II.1.32}$$

U linearnom delu, kvadratnom delu i trećem delu Hamiltonijana, konstante A, $B^{(1)}_{\vec{n}\vec{m}}$ i $C_{\vec{n}\vec{m}}$ dobijene su na osnovu sledećeg rezona:

$$H_1 = A_1 \cdot \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ + A_2 \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}$$

adjungovanjem ovoga dobijamo:

$$H_1^+ = A_1^* \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + A_2^* \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+$$

pošto je $H_1 = H_1^+$ to sledi da je:

$$\underbrace{A_1^* = A_2 \quad i \quad A_1 = A_2^*}_{A_1 = A_2 = A}$$

Na analog način može se pokazati i za ostale dve konstante.

U jednačinama (II.1.29), (II.1.30), (II.1.31) i (II.1.32) konstante A, B, C, D su konstante date u funkciji $W_{\vec{n}\vec{m}}$ tj. interakcije medju čvorovima rešetke i imaju sledeće vrednosti:

$$A_1 = A_2 = A = \frac{1}{2} \sum_{\ell} \left[W_{\ell}(\lambda 0, 00) + W_{\ell}(0\lambda, 00) \right] = \frac{1}{2} \sum_{\ell} \left[W_{\ell}(00, \lambda 0) + W_{\ell}(00, 0\lambda) \right] \tag{II.1.33}$$

$$B_1 = B_2 = B^{(1)}_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{2} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda, 00) = \frac{1}{2} W_{\vec{n}\vec{m}}(00, \lambda\lambda) \tag{II.1.34}$$

$$B^{(2)}_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{2} \left[W_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda, 0\lambda) + W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0, \lambda 0) \right] \tag{II.1.35}$$

$$C_1 = C_2 = C_{\vec{u}\vec{\omega}} = \frac{1}{2}\Big[-W_{\vec{u}\vec{\omega}}(\lambda 0, 00) - W_{\vec{u}\vec{\omega}}(0\lambda, 00) + W_{\vec{u}\vec{\omega}}(\lambda\lambda, \lambda 0) + W_{\vec{u}\vec{\omega}}(\lambda\lambda, 0\lambda)\Big] = \frac{1}{2}\sum_{\vec{u}\vec{\omega}}\Big[-W_{\vec{u}\vec{\omega}}(00, \lambda 0) - W_{\vec{u}\vec{\omega}}(00, 0\lambda) + W_{\vec{u}\vec{\omega}}(\lambda 0, \lambda\lambda) + W_{\vec{u}\vec{\omega}}(0\lambda, \lambda\lambda)\Big] \qquad (\text{II}.1.36)$$

$$D_{\vec{u}\vec{\omega}} = \frac{1}{2}\Big[W_{\vec{u}\vec{\omega}}(00,00) - W_{\vec{u}\vec{\omega}}(\lambda 0, 0\lambda) - W_{\vec{u}\vec{\omega}}(0\lambda, \lambda 0) + W_{\vec{u}\vec{\omega}}(\lambda\lambda, \lambda\lambda)\Big] \qquad (\text{II}.1.37)$$

2. Stabilizacija Hamiltonijana sistema

Pojava člana H_1 u Hamiltonijanu, koji je linearan po Pauli - operatorima, označava da osnovno stanje sistema nije dobro odabran i da H_0 ne predstavlja energiju osnovnog stanja sistema. Iz ovog proizilazi da vakuum sistem, sadrži u sebi kvazičestice, te prema tome nije pravi vakuum.

Unitarnom transformacijom Hamiltonijana ili, drugim rečima, rotacijom Hilbertovog prostora, postiže se da vakuum u zarotiranom prostoru, bude i realno vakuum, tj. da u sebi ne sadrži kvazičestce. Unitarna transformacija ne menja svojstvene vrednosti Hamiltonijana. Ovakvu rotaciju Hilbertovog prostora koja nas dovodi do stvarnog vakuuma u literaturi obično nazivaju stabilizacija Hamiltonijana sistema.

Da bismo se oslobodili člana H_1, umesto starih Pauli - operatora (II.4.10) uvedimo nove Pauli - operatore, koji se dobijaju unitarnom transformacijom.

$$\left.\begin{array}{ll} Q^+_{\vec{u}} = b^+_{\vec{u}\lambda} b_{\vec{u}0} & Q^+_{\vec{u}} Q_{\vec{u}} = b^+_{\vec{u}\lambda} b_{\vec{u}\lambda} \\ Q_{\vec{u}} = b^+_{\vec{u}0} b_{\vec{u}\lambda} & b^+_{\vec{u}0} b_{\vec{u}0} = 1 - b^+_{\vec{u}\lambda} b_{\vec{u}\lambda} = 1 - Q^+_{\vec{u}} Q_{\vec{u}} \end{array}\right\} \qquad (\text{II}.2.1)$$

$$\begin{pmatrix} a_{\vec{u}0} \\ a_{\vec{u}\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\vec{u}0} \\ b_{\vec{u}\lambda} \end{pmatrix} \qquad (\text{II}.2.2)$$

gde α i β zadovoljavaju relaciju:

$$\alpha^2+\beta^2=1 \qquad (\text{II}.2.3)$$

Iz unitarne transformacije sledi:

$$\left.\begin{aligned} a_{\vec{\mu}0} &= \alpha b_{\vec{\mu}0}-\beta b_{\vec{\mu}\lambda} \\ a_{\vec{\mu}\lambda} &= \beta b_{\vec{\mu}0}+\alpha b_{\vec{\mu}\lambda} \end{aligned}\right\} \qquad (\text{II}.2.4)$$

adjungovanjem jednačina (II.2.4) dobijamo:

$$\left.\begin{aligned} a^{+}_{\vec{\mu}0} &= \alpha b^{+}_{\vec{\mu}0}-\beta b^{+}_{\vec{\mu}\lambda} \\ a^{+}_{\vec{\mu}\lambda} &= \beta b^{+}_{\vec{\mu}0}+\alpha b^{+}_{\vec{\mu}\lambda} \end{aligned}\right\} \qquad (\text{II}.2.5)$$

Izrazimo sada stare Pauli - operatore preko novih, istovremenim korišćenjem osobina novih Pauli - operatora, date jednačinama (II.2.1).

$$\begin{aligned} P^{+}_{\vec{\mu}} &= a^{+}_{\vec{\mu}\lambda}a_{\vec{\mu}0}=(\beta b^{+}_{\vec{\mu}0}+\alpha b^{+}_{\vec{\mu}\lambda})(\alpha b_{\vec{\mu}0}-\beta b_{\vec{\mu}\lambda})= \\ &=\alpha\beta-2\alpha\beta Q^{+}_{\vec{\mu}}Q_{\vec{\mu}}+\alpha^2Q^{+}_{\vec{\mu}}-\beta^2Q_{\vec{\mu}} \end{aligned} \qquad (\text{II}.2.6)$$

$$\begin{aligned} P_{\vec{\mu}} &= a^{+}_{\vec{\mu}0}a_{\vec{\mu}\lambda}=(\alpha b^{+}_{\vec{\mu}0}-\beta b^{+}_{\vec{\mu}\lambda})(\beta b_{\vec{\mu}0}+\alpha b_{\vec{\mu}\lambda})= \\ &=\alpha\beta-2\alpha\beta Q^{+}_{\vec{\mu}}Q_{\vec{\mu}}+\alpha^2Q_{\vec{\mu}}-\beta^2Q^{+}_{\vec{\mu}} \end{aligned} \qquad (\text{II}.2.7)$$

$$\begin{aligned} P^{+}_{\vec{\mu}}P_{\vec{\mu}} &= a^{+}_{\vec{\mu}\lambda}a_{\vec{\mu}\lambda}=(\beta b^{+}_{\vec{\mu}0}+\alpha b^{+}_{\vec{\mu}\lambda})(\beta b_{\vec{\mu}0}+\alpha b_{\vec{\mu}\lambda})= \\ &=\beta^2+(\alpha^2-\beta^2)Q^{+}_{\vec{\mu}}Q_{\vec{\mu}}+\alpha\beta(Q^{+}_{\vec{\mu}}+Q_{\vec{\mu}}) \end{aligned} \qquad (\text{II}.2.8)$$

Dobijeni izrazi za Pauli - operatore se zamene u Hamiltonijan i dobijena formula, sada po operatorima Q^{+} i Q uredi tako da se izdvoji konstantni deo, linearni deo, kvadratni deo, deo trećeg reda i deo četvrtog reda.

$$\begin{aligned} H^{1}_{0} &= E_0N+\tfrac{1}{2}W_0N+2A\alpha\beta+\beta^2(B+\beta^2N\bar{D})+\alpha^2\beta^2(2N\bar{B}_1+N\bar{B}_2)+ \\ &+2N\bar{C}\alpha\beta^3+\bar{D}N\beta^4 \end{aligned} \qquad (\text{II}.2.9)$$

$$H^{1}_{1}=E\sum_{\vec{\mu}}(Q^{+}_{\vec{\mu}}+Q_{\vec{\mu}}) \qquad (\text{II}.2.10)$$

$$H_2' = F \sum_{\vec{u}} Q^+_{\vec{u}} Q_{\vec{u}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{u}\vec{w}} G_{\vec{u}\vec{w}} (Q^+_{\vec{u}} Q^+_{\vec{w}} - Q_{\vec{u}} Q_{\vec{w}}) + \sum_{\vec{u}\vec{w}} K_{\vec{u}\vec{w}} Q^+_{\vec{u}} Q_{\vec{w}} \qquad (\text{II}.2.11)$$

$$H_3' = \sum_{\vec{u}\vec{w}} M_{\vec{u}\vec{w}} Q^+_{\vec{u}} Q^+_{\vec{w}} Q_{\vec{w}} + \sum_{\vec{u}\vec{w}} L_{\vec{u}\vec{w}} Q^+_{\vec{u}} Q_{\vec{u}} Q_{\vec{w}} \qquad (\text{II}.2.12)$$

$$H_4' = \sum_{\vec{u}\vec{w}} R_{\vec{u}\vec{w}} Q^+_{\vec{u}} Q_{\vec{u}} Q^+_{\vec{w}} Q_{\vec{w}} \qquad (\text{II}.2.13)$$

gde je:

$$E = A(\alpha^2 - \beta^2) + B\alpha\beta + \alpha\beta \overline{B}_1 (\alpha^2 - 2\beta^2) + \overline{B}_2 (\alpha^2 - \beta^2)\alpha\beta + \overline{C}\beta^2(3\alpha^2 - \beta^2) + 2\overline{D}\alpha\beta^3 \qquad (\text{II}.2.14)$$

$$F = -4A\alpha\beta + B(\alpha^2 - \beta^2) - 4\alpha^2\beta^2(2\overline{B}_1 - \overline{B}_2) + 2\overline{C}\alpha\beta(\alpha^3 - 3\beta^3) + 2\overline{D}(\alpha^2\beta^2 - \beta^4) \qquad (\text{II}.2.15)$$

$$G_{\vec{u}\vec{w}} = B^{(1)}_{\vec{u}\vec{w}} (\beta^4 + \alpha^4) + C_{\vec{u}\vec{w}} \beta(\alpha^2 - \beta^2) + \alpha^2\beta^2 (D_{\vec{u}\vec{w}} - B^{(2)}_{\vec{u}\vec{w}}) \qquad (\text{II}.2.16)$$

$$M_{\vec{u}\vec{w}} = -4B^{(1)}_{\vec{u}\vec{w}} \alpha^3\beta + 2B^{(2)}_{\vec{u}\vec{w}} \alpha\beta(4\beta^2 - \alpha^2) + C_{\vec{u}\vec{w}} (\alpha^4 + \beta^4) - 6C_{\vec{u}\vec{w}} \alpha^2\beta^2 + 2\alpha\beta D_{\vec{u}\vec{w}} (\alpha^2 - \beta^2) \qquad (\text{II}.2.18)$$

$$L_{\vec{u}\vec{w}} = 4B^{(1)}_{\vec{u}\vec{w}} \alpha\beta^3 + 2B^{(2)}_{\vec{u}\vec{w}} \alpha\beta(\beta^2 - \alpha^2) - 6C_{\vec{u}\vec{w}} \alpha^2\beta^2 - D_{\vec{u}\vec{w}} \alpha\beta(\alpha^2 - 2\beta^2) + C_{\vec{u}\vec{w}} \alpha^4 \qquad (\text{II}.2.19)$$

$$R_{\vec{u}\vec{w}} = 2\alpha^2\beta^2 (4B^{(1)}_{\vec{u}\vec{w}} + 2B^{(2)}_{\vec{u}\vec{w}} - D_{\vec{u}\vec{w}}) + 4C_{\vec{u}\vec{w}} \alpha\beta (\beta^2 - \alpha^2) + D_{\vec{u}\vec{w}} (\alpha^4 + \beta^4) \qquad (\text{II}.2.20)$$

Zatim se koeficijenti unitarne tranformacije α i β odrede tako da članovi linearni po Q i Q^{+} budu jednaki nuli.

Ovaj uslov eksplicitno glasi:

$$A(\alpha^2-\beta^2)+B\alpha\beta+\alpha B\overline{B}_1(\alpha^2-2\beta^2)+\overline{B}_2(\alpha^2-\beta^2)\alpha\beta+\overline{C}\beta^2(3\alpha^2-\beta^2)+$$
$$+2\overline{D}\alpha\beta^3=0 \qquad (\mathrm{II}.2.21)$$

U izrazima (II.2.14), (II.2.15) i (II.2.21) nadvučene konstante dobijene su po opštim pravilima:

$$\left.\begin{aligned}
&\sum_{\vec{u}\vec{m}} f_{\vec{u}\vec{m}} = \sum_{\vec{u}\vec{m}} f_{\vec{u}-\vec{m}} = N\cdot\overline{f}\\
&\sum_{\substack{\vec{u}\vec{m}\\ \vec{u}-\vec{m}=\vec{l}}} f_{\vec{u}-\vec{m}}\varphi_{\vec{u}} = \sum_{\vec{u}\vec{l}} f_{\vec{l}}\varphi_{\vec{u}} = \sum_{\vec{l}} f_{\vec{l}}\sum_{\vec{u}}\varphi_{\vec{u}} = \overline{f}\sum_{\vec{u}}\varphi_{\vec{u}}\\
&\sum_{\vec{u}\vec{m}} f_{\vec{u}-\vec{m}}\varphi_{\vec{u}}\xi_{\vec{m}} = \sum_{\vec{u}\vec{m}} f_{\vec{u}-\vec{m}}\varphi_{\vec{u}}\xi_{\vec{m}}
\end{aligned}\right\} \qquad (\mathrm{II}.2.22)$$

Koristeći jednačine (II.2.21) i (II.2.3) dobijamo dve jednačine sa dve nepoznate, čijim rešavanjem dobijamo izraze za α i β.

U tom cilju uvedimo smenu:

$$\alpha=\cos\varphi \quad ; \quad \beta=-\sin\varphi \qquad (\mathrm{II}.2.23)$$

i zamenom u jednačinu (II.2.21) dobijamo jednačinu po φ. U tako dobijenoj jednačini trigonometrijskih funkcija izrazimo preko dvostrukog ugla ($\sin 2\varphi$; $\cos 2\varphi$) i uvedimo smenu da je $tg\,2\varphi=x$, pa ćemo dobiti jednačinu četvrtog stepena po x, koja glasi:

$$a_0x^4+a_1x^3+a_2x^2+a_3x+a_4=0 \qquad (\mathrm{II}.2.24)$$

konstante a_i ($i=1,2,3,4$) su funkcije od A, B, $\overline{B}_1$, $\overline{B}_2$, $\overline{C}$ i D date izrazima:

$$a_0=-\left[\tfrac{1}{2}(\overline{D}+3\overline{B}_1+\overline{B}_2)^2+\overline{C}^2\right]$$

$$a_1=3\overline{C}^2+\tfrac{1}{2}\left(B+\frac{\overline{B}_1}{2}+\overline{D}\right)(\overline{D}+3\overline{B}_1+\overline{B}_2)$$

$$a_2 = \frac{1}{2}(\bar{D} + 3\bar{B}_1 + \bar{B}_2)^2 - \frac{1}{2}\left(B + \frac{\bar{B}_1}{2} + \bar{D}\right)^2 - \frac{9\bar{C}^2}{4} - \bar{C}(\bar{C} - 2A)$$

$$a_3 = -\frac{1}{2}\left(B + \frac{\bar{B}_1}{2} + \bar{D}\right)(D + 3\bar{B}_1 + \bar{B}_2) + (\bar{C} + 2A)\frac{\bar{C}}{2}$$

$$a_4 = \frac{1}{2}\left(B + \frac{\bar{B}_1}{2} + \bar{D}\right)^2 \qquad (\text{II}.2.25)$$

Smenom: $x = y - \frac{1}{4}\frac{a_1}{a_0}$ (II. 2. 26)

Gornja jednačina se svodi na:

$$y^4 + px^2 + qx + r = 0 \qquad (\text{II}.2.27)$$

čija su rešenja istovremeno i koreni kvadratnih jednačina:

$$y^2 + \frac{1}{2}p + \alpha_0 = \pm\sqrt{2\alpha_0}\left(y - \frac{q}{4\alpha_0}\right) \qquad (\text{II}.2.28)$$

gde je α_0 jedan koren jednačine:

$$8\alpha_1^3 + 8p\alpha_1^2 - (8r - 2p^2)\alpha_1 - q^2 = 0 \qquad (\text{II}.2.29)$$

Rešenje jednačine trećeg stepena dato je u obliku Kardanovog obrasca, koji za naš slučaj glasi:

$$\beta_0 = \sqrt[3]{-\frac{q_0}{2} + \sqrt{\frac{q_0^2}{4} + \frac{p_0^3}{27}}} + \sqrt{-\frac{q_0}{2} - \sqrt{\frac{q_0^2}{4} + \frac{p_0^3}{27}}} \qquad (\text{II}.2.30)$$

gde je β_0 dato u obliku:

$$\alpha_1 = \beta_0 - \frac{p_0}{3} = \beta_0 - \frac{1}{3}\left[\frac{b^2 - a^2 - d^2 - 2cc_1}{8} - \frac{3(2c_1\alpha + 2ab)^2}{512}\right] \qquad (\text{II}.2.31)$$

Konstante p_0 i q_0 date su u funkciji konstanti a, b, c i d.

Na osnovu svega proizilazi da rešenja nemaju praktične vrednosti jer iz njega ne vidimo koja rešenja zadovoljavaju našu jednačinu. Trebalo bi pomoću determinante sistema ispitati koja rešenja postoje, pa ih onda naći. Problem je praktično neizvodljiv i zato smo koristili metod približne aproksimacije, tražeći rešenje do odredjene tačnosti.

3. Razne aproksimacije u teoriji feroelektrika

Prelaskom na nove Fermi - operatore unitarnom transformacijom, koeficijenti α i β zadovoljavaju $\alpha^2 + \beta^2 = 1$. Uvedimo smenu

$$\alpha = \cos\varphi \quad i \quad \beta = -\sin\varphi$$

time smo zarotirali Hilbertov prostor za ugao φ. Rotacija Hilbertovog prostora se vrši zbog kvantnih uslova, tj. da bi isčezli članovi linearni po Q tj. da bi sistem bio stabilan. Hilbertov prostor je vektorski N - dimenzionalni prostor, medjutim, mi ćemo posmatrati rotaciju dvodimenzionalnog prostora u podprostoru Fermionskih - operatora.

$$\left.\begin{aligned} \vec{e}_1 &= a_0^+|0\rangle \\ \vec{e}_2 &= a_\lambda^+|0\rangle \end{aligned}\right\} \qquad (\text{II}.3.1)$$

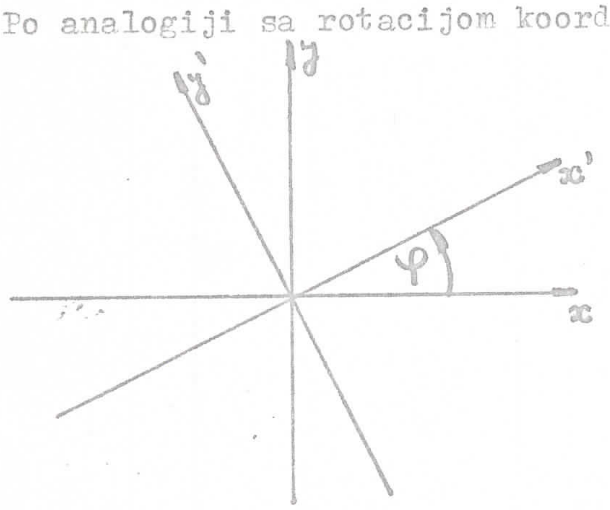
koji se mogu prikazati u sledećem obliku:

$$\begin{pmatrix} \vec{e}_1 \\ \vec{e}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{z}_1 \\ \vec{z}_2 \end{pmatrix} \qquad (\text{II}.3.2)$$

gde je:

$$\vec{z}_1 = b_0^+|0\rangle \quad i \quad \vec{z}_2 = b_\lambda^+|0\rangle \qquad (\text{II}.3.3)$$

Po analogiji sa rotacijom koordinatnog sistema u ravni:



$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$

vidi se da je:

$$\varphi = -\arcsin\beta \qquad (\text{II}.3.4)$$

Posmatrajmo jednačinu (II.2.21) i uzmimo da su konstante A i $\overline{C}$ reda veličine „ε", a konstante $\overline{B}$ i $\overline{D}$ reda veličine „1". Veličina „ε" predstavlja malu veličinu u odnosu na „1". Neka su konstante α i β odredjene do tačnosti:

$$\alpha = 1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2 \qquad \beta = \varepsilon + x\varepsilon^2 \qquad (\text{II}.3.5)$$

Ovako definisane veličine α i β zamenimo u jednačinu (II.2.21), stim što zanemarujemo veličine reda:

$$\left.\begin{aligned} A\mathcal{E} = \bar{C}\mathcal{E} = 0 \\ \bar{B}\mathcal{E}^2 = \bar{D}\mathcal{E}^2 = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (\text{II}.3.6)$$

Na osnovu ovih aproksimacija dobićemo vrednost za „$\mathcal{E}$", koja glasi:

$$\mathcal{E} = \frac{A}{B + 2\bar{B}_1 + \bar{B}_2} \qquad (\text{II}.3.7)$$

Za ovu aproksimaciju ugao rotacije Hilbertovog prostora iznosi:

$$\varphi_K = -\arcsin \frac{A}{B + 2\bar{B}_1 + \bar{B}_2} \qquad (\text{II}.3.8)$$

pošto je $A \ll B + 2\bar{B}_1 + \bar{B}_2$ (II.3.9)

sledi da je:

$$\varphi_K \approx 0 \qquad (\text{II}.3.10)$$

Vidimo da je rotacija Hilbertovog prostora mala, što znači da je sistem skoro stabilan. Pošto imamo vrednost za $\mathcal{E}$ možemo napisati vrednost konstante α:

$$\alpha = 1 - \frac{1}{2}\left[\frac{A}{B + 2\bar{B}_1 + \bar{B}_2}\right]^2 \qquad (\text{II}.3.11)$$

Uzmimo sada drugi slučaj. Neka su konstante $\bar{B}$ i $\bar{D}$ reda veličine „$\mathcal{E}$", a konstante A i $\bar{C}$ reda veličine „1". U ovom slučaju u jednačini (II.2.21) zanemarićemo članove:

$$\left.\begin{aligned} B\mathcal{E}^2 = \bar{D}\mathcal{E}^2 = 0 \\ A\mathcal{E}^2 = \bar{C}\mathcal{E}^2 = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (\text{II}.3.12)$$

Posle ovih aproksimacija jednačina (II.2.21) prelazi u oblik:

$$\mathcal{E}^2(3\bar{C} - 2A) + \mathcal{E}(B + 2\bar{B}_1 + \bar{B}_2) - A = 0 \qquad (\text{II}.3.13)$$

odavde je:

$$\mathcal{E}_{1,2} = -\frac{B + 2\bar{B}_1 + \bar{B}_2}{2(3\bar{C} - 2A)} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{B + 2\bar{B}_1 + \bar{B}_2}{3\bar{C} - 2A}\right)^2 + \frac{4A}{3\bar{C} - 2A}}$$

Zamenom ovih vrednosti za „$\mathcal{E}$" dobijamo za ugao rotacije φ_K. Očigledno je da je $\mathcal{E}_1 \approx 1$, što znači da je $\varphi_K \approx \frac{\pi}{2}$.

Vrednosti konstanti koje smo uzimali predstavljaju granične vrednosti, koje oni mogu imati.

Na ovaj način oslobodili smo se linearnog dela Hamiltonijana i naš Hamiltonijan sada ima oblik:

$$H = H_0 + H_2 + H_3 + H_4 \tag{II.3.15}$$

$$H_0 = \frac{1}{2} N W_0 + N E_0 \tag{II.3.16}$$

$$H_2 = \Omega \sum_{\vec{u}} Q^+_{\vec{u}} Q_{\vec{u}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{u}\vec{w}} l^{(1)}_{\vec{u}\vec{w}} (Q^+_{\vec{u}} Q^+_{\vec{w}} + Q_{\vec{u}} Q_{\vec{w}}) + + \sum_{\vec{u}\vec{w}} l^{(2)}_{\vec{u}\vec{w}} Q^+_{\vec{u}} Q_{\vec{w}} \tag{II.3.17}$$

$$H_3 = \sum_{\vec{u}\vec{w}} l^{(3)}_{\vec{u}\vec{w}} (Q^+_{\vec{u}} Q^+_{\vec{w}} Q_{\vec{w}} + Q^+_{\vec{u}} Q_{\vec{u}} Q_{\vec{w}}) \tag{II.3.18}$$

$$H_4 = \sum_{\vec{u}\vec{w}} l^{(4)}_{\vec{u}\vec{w}} Q^+_{\vec{u}} Q^+_{\vec{w}} Q_{\vec{w}} Q_{\vec{u}} \tag{II.3.19}$$

gde je:

$$\Omega = 2\alpha\beta A + (\alpha^2 - \beta^2) B - 8\alpha^2\beta^2 \overline{B_1} - 4\alpha^2\beta^2 \overline{B_2} + + 2\alpha\beta (3\beta^2 - \alpha^2) \overline{C} + 2\alpha\beta(\alpha^2 - \beta^2) \overline{D} \tag{II.3.20}$$

$$l^{(1)}_{\vec{u}\vec{w}} = 2[(\alpha^4 + \beta^4) B^{(1)}_{\vec{u}\vec{w}} - \alpha^2\beta^2 B^{(2)}_{\vec{u}\vec{w}} + \alpha\beta(\beta^2 - \alpha^2) C_{\vec{u}\vec{w}} + + \alpha^2\beta^2 D_{\vec{u}\vec{w}} \tag{II.3.21}$$

$$l^{(2)}_{\vec{u}\vec{w}} = -\alpha^2\beta^2 B^{(1)}_{\vec{u}\vec{w}} + \alpha^4 B^{(2)}_{\vec{u}\vec{w}} + 2\alpha\beta(\beta^2 - \alpha^2) C_{\vec{u}\vec{w}} + + 2\alpha^2\beta^2 D_{\vec{u}\vec{w}} \tag{II.3.22}$$

$$l^{(3)}_{\vec{u}\vec{w}} = [\beta^2(\beta^2 - 3\alpha^2) + \alpha^2(\alpha^2 - 3\beta^2)] C_{\vec{u}\vec{w}} + 2\alpha\beta(\alpha^2 - \beta^2) B_{\vec{u}\vec{w}} - - \alpha\beta(\alpha^2 - \beta^2) D_{\vec{u}\vec{w}} \tag{II.3.23}$$

$$l^{(4)}_{\vec{u}\vec{w}} = 8\alpha^2\beta^2 B^{(1)}_{\vec{u}\vec{w}} + 4\alpha^2\beta^2 B^{(2)}_{\vec{u}\vec{w}} + 4\alpha\beta(\alpha^2 - \beta^2) C_{\vec{u}\vec{w}} + + (\alpha^2 - \beta^2) D_{\vec{u}\vec{w}} \tag{II.3.24}$$

III G L A V A

FEROELEKTRIK U ELEKTROMAGNETNOM POLJU

1. Energija protona u elektromagnetnom polju i Hamiltonijan sistema

Ukupna energija protona u elektromagnetnom polju data je izrazom:

$$E=\frac{\vec{Q}^2}{2m_e}=\frac{\vec{p}^2}{2m_e}-\frac{e}{m_e\cdot c}\vec{p}\vec{A}+\frac{e^2\vec{A}^2}{2m_ec^2} \qquad (III.1.1)$$

Od tri člana koji figurišu u ovoj formuli, prvi član ušao je u Hamiltonijan, dok treći član $\frac{e^2\vec{A}^2}{2m_ec^2}$ definiše energiju

takozvanih "plazmenih" oscilacija i stoga ga nećemo uzeti u obzir, smatrajući da ćemo energiju sistema očitavati od nivoa "plazmenih" oscilacija.

Iz klasične elektrodinamike poznato je da je impuls $\vec{Q}$ protona u elektromagnetnom polju dat izrazom:

$$\vec{Q}=\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A} \qquad (III.1.2)$$

gde je $\vec{p}$ stvarni impuls protona; e - naelektrisanje protona; $\vec{A}$ - vektorski potencijal elektromagnetnog polja.

Na osnovu diskusije čitavog izraza za energiju protona, proizilazi da najviše pažnje zahteva član:

$$-\frac{e}{m_ec}\vec{p}\vec{A} \qquad (III.1.3)$$

To je operator interakcije izmedju protona u čvorovima rešetke i spoljašnjeg elektromagnetnog polja. U kristalu interakcija ovog tipa vrši svaki od protona na svakom od čvorova, pa je očigledno Hamiltonijan interakcije kristala dat sledećim izrazom:

$$H_{int} = -\frac{e}{m_e c}\sum_{\vec{n}} \vec{p}_{\vec{n}} \vec{A}_{\vec{n}} \qquad (III.1.4)$$

pri čemu je vektorski potencijal $\vec{A}_n$ dat izrazom:

$$\vec{A}_{\vec{n}} = \sum_{\vec{k}j} D(\vec{k}) \vec{l}_j(\vec{k}) (C^+_{\vec{k}j} + C_{-\vec{k}j}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad (III.1.5)$$

gde je $l_j(\vec{k})$ vektor polarizacije fotona, a

$$D(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{a^3|\vec{k}|}} \qquad (III.1.6)$$

Protonski impuls je jednočestični fermionski operator i u reprezentaciji druge kvantizacije može se predstaviti na sledeći način:

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{n}} = -i\hbar\sum_{f_1 f_2}\int [\varphi^{f_1 *}_{\vec{n}} \nabla_{\vec{n}} \varphi^{f_2}_{\vec{n}} \, d\tilde{r}_{\vec{n}}] a^+_{\vec{n}f_1} a_{\vec{n}f_2} \qquad (III.1.7)$$

Pošto po našoj predpostavci indeksi f_1 i f_2 mogu da uzimaju vrednosti 0 i λ, očigledno je da se operator impulsa $\hat{\vec{p}}_{\vec{n}}$, može izraziti preko Pauli - operatora. Predhodno operator impulsa napišimo u obliku:

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{n}} = \sum_{f_1 f_2} \vec{\Phi}_{f_1 f_2} a^+_{\vec{n}f_1} a_{\vec{n}f_2} \qquad (III.1.8)$$

gde je:

$$\vec{\Phi}_{f_1 f_2} = -i\hbar\int \varphi^*_{\vec{n}f_1} \nabla_{\vec{n}} \varphi_{\vec{n}f_2} \, d\tilde{r}_{\vec{n}} \qquad (III.1.9)$$

Uzimajući u obzir vrednosti koje mogu imati f_1 i f_2 dobijamo:

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{n}} = \vec{\Phi}_{00} a^+_{\vec{n}0} a_{\vec{n}0} + \vec{\Phi}_{\lambda 0} a^+_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}0} + \vec{\Phi}_{0\lambda} a^+_{\vec{n}0} a_{\vec{n}\lambda} + \vec{\Phi}_{\lambda\lambda} a^+_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} \qquad (III.1.10)$$

Zamenom Fermi - operatora Pauli - operatorima po (II.1.10), dobijamo nov izraz za operator impusa u obliku:

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{n}} = \vec{\Phi}_{00}(1 - P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}}) + \vec{\Phi}_{0\lambda} P_{\vec{n}} + \vec{\Phi}_{\lambda 0} P^+_{\vec{n}} + \vec{\Phi}_{\lambda\lambda} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} \qquad (III.1.11)$$

tj.

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{n}} = \vec{\Phi}_{00} + P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} (\vec{\Phi}_{\lambda\lambda} - \vec{\Phi}_{00}) + \vec{\Phi}_{0\lambda} P_{\vec{n}} + \vec{\Phi}_{\lambda 0} P^+_{\vec{n}} \qquad (III.1.12)$$

Prilikom zamene u Hamiltonijan interakcije član proporcionalan $\vec{\Phi}_{00}$, daje konstantnu popravku energije, pa ga nećemo uzimati u obzir, dok član proporcionalan $(\vec{\Phi}_{\lambda\lambda} - \vec{\Phi}_{00})$ odgovara procesima slepljivanja ili razgradjivanja fermionskih ekscitacija. Ovaj član nećemo uzimati u obzir zato što ćemo se u daljem računu zadržati na procesima prenosa ekscitacija, a kao što smo videli ovaj član ne opisuje takav proces.

Izvršimo sada Furije transformacije Pauli - operatora preostala u izrazu (III.1.12)

$$P_{\vec{u}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} P_{\vec{k}} e^{-i\vec{g}\vec{u}} \qquad (III.1.13)$$

$$P^{+}_{\vec{u}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} P^{+}_{\vec{k}} e^{-i\vec{g}\vec{u}} \qquad (III.1.14)$$

Kako je $\phi_{o\lambda} = -\phi_{\lambda o} \equiv \phi_{\lambda}$ to je izraz za operator impulsa:

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{u}} = \vec{\phi}_{\lambda} \frac{1}{N} (P_{\vec{k}} - P^{+}_{\vec{k}}) e^{-i\vec{g}\vec{u}} \qquad (III.1.15)$$

Sada je Hamiltonijan interakcije sa zamenjenim izrazom za impuls oblika:

$$H_{int} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{g}j} \vec{Y}^{\dagger}_{\vec{k}} \vec{l}_{j}(\vec{k}) (C^{+}_{\vec{k}j} + C_{-\vec{k}j}) e^{i\vec{u}(\vec{k}-\vec{g})} (P_{\vec{k}} - P^{+}_{\vec{k}}) \qquad (III.1.16)$$

gde je:

$$\vec{Y}^{\dagger}_{\vec{k}} = -\frac{e}{\mu_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{a^3 |\vec{k}| C}} \cdot \vec{l}_{j}(\vec{k}) \vec{\phi}_{\lambda} \qquad (III.1.17)$$

Na osnovu relacija (II. 2. 6) i (II. 2. 7) Pauli - operatore P i P^{+} možemo zameniti novim Pauli - operatorima Q i Q^{+}, pa je Hamiltonijan interakcije

$$H_{int} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{g}j} \vec{Y}^{\dagger}_{\vec{k}} (C^{+}_{\vec{k}j} + C_{-\vec{k}j}) e^{i\vec{u}(\vec{k}-\vec{g})} (\alpha^2 + \beta^2)(Q_{\vec{u}} - Q^{+}_{\vec{u}}) \qquad (III.1.18)$$

kako je $\sum_{\vec{u}} e^{i\vec{u}(\vec{k}-\vec{g})} = N\delta_{\vec{k}\vec{g}}$ to je krajnji izraz Hamiltonijana interakcije:

$$H_{int} = \sum_{\vec{k}j} \vec{Y}^{\dagger}_{\vec{k}} (C^{+}_{\vec{k}j} + C_{-\vec{k}j})(\alpha^2 + \beta^2)(Q_{\vec{u}} - Q^{+}_{\vec{u}}) \qquad (III.1.19)$$

Pauli - operatore ćemo približno zameniti Boze - operatorima

$$Q_{\vec{u}} = B_{\vec{u}} \quad ; \quad Q^{+}_{\vec{u}} = B^{+}_{\vec{u}} \qquad (III.1.20)$$

pa je

$$H_{int} = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} B^{+}_{\vec{k}} C_{\vec{k}} + X_{\vec{k}} C^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + X_{\vec{k}} B^{+}_{\vec{k}} C^{+}_{-\vec{k}} + X_{\vec{k}} B_{\vec{k}} C_{-\vec{k}} \qquad (III.1.21)$$

gde je $X_{\vec{k}}$ ravno modulu interakcije

$$X_{\vec{k}} = \vec{Y}^{\dagger}_{\vec{k}} (\alpha^2 + \beta^2)$$

Ovo je član koji treba dodati Hamiltonijanu (II. 3. 16). U tom istom izrazu nulti deo Hamiltonijana elektromagnetnog polja jednak je izrazu:

$$H_0=\sum_{\vec{k}} \hbar c k\, C_{\vec{k}}^{+} C_{\vec{k}} \qquad (\text{III}.1.22)$$

deo trećeg i četvrtog reda možemo zanemariti, a kvadratni deo Hamiltonijana (II.3.17) transformisaćemo na sledeći način:

$$H_2=C+D+E \qquad (\text{III}.1.23)$$

gde je:

$$C=\Omega\sum_{\vec{u}} Q_{\vec{u}}^{+} Q_{\vec{u}} \qquad (\text{III}.1.24)$$

$$D=\frac{1}{2}\sum_{\vec{u}\vec{\omega}} l_{\vec{u}\vec{\omega}}^{(1)}\left(Q_{\vec{u}}^{+} Q_{\vec{\omega}}^{+}+Q_{\vec{u}} Q_{\vec{\omega}}\right) \qquad (\text{III}.1.25)$$

$$E=\sum_{\vec{u}\vec{\omega}} l_{\vec{u}\vec{\omega}}^{(2)} Q_{\vec{u}}^{+} Q_{\vec{\omega}} \qquad (\text{III}.1.26)$$

Umesto operatora Q i Q^{+} uvedimo Boze - operatore po relaciji (III.1.20) čiji Furije transform ima oblik:

$$B_{\vec{u}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}} B_{\vec{q}}\, e^{i\vec{u}\vec{q}} \qquad (\text{III}.1.27)$$

$$B_{\vec{u}}^{+}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^{+}\, e^{-i\vec{k}\vec{u}} \qquad (\text{III}.1.28)$$

$$B_{\vec{\omega}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}} B_{\vec{q}}\, e^{i\vec{\omega}\vec{q}} \qquad (\text{III}.1.29)$$

$$B_{\vec{\omega}}^{+}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\vec{\omega}} \qquad (\text{III}.1.30)$$

Zamenimo izraze (III.1.27) i (III.1.28) u relaciju (III.1.24) pa je:

$$C=\frac{\Omega}{N}\sum_{\vec{k}\vec{q}} B_{\vec{k}}^{+} B_{\vec{q}} \underbrace{\sum_{\vec{u}} e^{i\vec{u}(\vec{q}-\vec{k})}}_{N\cdot\delta_{\vec{q}\vec{k}}} \qquad (\text{III}.1.31)$$

$$C=\Omega\sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^{+} B_{\vec{k}} \qquad (\text{III}.1.32)$$

U izrazu (III.1.25) zamenimo n sa k i m sa -k pa je:

$$D=\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}} l_{\vec{k}}\left(B_{\vec{k}}^{+} B_{-\vec{k}}^{+}+B_{\vec{k}} B_{-\vec{k}}\right) \qquad (\text{III}.1.33)$$

Uzimajući u obzir relacije (III.1.28) i (III.1.29), jednačinu (III.1.26) možemo pisati u obliku:

$$E=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\vec{g}} B^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{g}} \sum_{\vec{u}\vec{m}} l^{(2)}_{\vec{u}\vec{m}}\, e^{i\vec{g}\vec{m}-i\vec{k}\vec{u}}$$

$$u-m=p \Rightarrow m=u-p$$

$$E=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\vec{g}} B^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{g}} \sum_{\vec{p}\vec{u}} l_{\vec{p}}\, e^{-i\vec{g}\vec{p}}\cdot e^{i\vec{u}(\vec{g}-\vec{k})}$$

$$E=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\vec{g}} B^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{g}} K(\vec{k})\cdot N\cdot\delta_{\vec{k}\vec{g}}$$

$$E=\sum_{\vec{k}} B^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{k}}\cdot K(\vec{k}) \qquad (III.1.34)$$

gde je: $$K(\vec{k})=\sum_{\vec{p}\vec{u}} l_{\vec{p}}\cdot e^{-i\vec{g}\vec{g}} \qquad (III.1.35)$$

Sa ovako transformisanim članovima, kvadratni deo pišemo u obliku:

$$H_2=\sum_{\vec{k}}\left[\Omega+K(\vec{k})\right]B^{+}_{\vec{k}}B_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}} l_{\vec{k}}\left(B^{+}_{\vec{k}}B^{+}_{-\vec{k}}+B_{-\vec{k}}B_{\vec{k}}\right) \qquad (III.1.36)$$

Napišimo sada Boze - operatore $B_{\vec{k}}$ i $B^{+}_{\vec{k}}$ u funkciji zasad nepoznatih realnih i parnih funkcija $u_{\vec{k}}$ i $v_{\vec{k}}$, na sledeći način:

$$B_{\vec{k}}=u_{\vec{k}}b_{\vec{k}}+v_{\vec{k}}b^{+}_{-\vec{k}} \qquad (III.1.37)$$

$$B^{+}_{\vec{k}}=u_{\vec{k}}b^{+}_{\vec{k}}+v_{\vec{k}}b_{-\vec{k}} \qquad (III.1.38)$$

Za operatore $B_{\vec{k}}$ i $B^{+}_{\vec{k}}$ važi relacija

$$1=[B_{\vec{k}},B^{+}_{\vec{k}}]$$

Zamenom odgovarajućih izraza, dobijamo:

$$1=u^2_{\vec{k}}[b_{\vec{k}},b^{+}_{\vec{k}}]+u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}[b_{\vec{k}},b_{-\vec{k}}]+u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}[b^{+}_{-\vec{k}},b_{\vec{k}}]+ +v^2_{\vec{k}}[b^{+}_{-\vec{k}},b_{\vec{k}}] \qquad (III.1.39)$$

Za operatore $b_{\vec{k}}$ i $b^{+}_{\vec{k}}$ važe sledeće relacije:

$$\left.\begin{array}{ll}[b_{\vec{k}},b^{+}_{\vec{k}}]=1 & [b^{+}_{-\vec{k}},b_{\vec{k}}]=0\\ [b_{\vec{k}},b_{-\vec{k}}]=0 & [b^{+}_{-\vec{k}},b_{-\vec{k}}]=-1\end{array}\right\} \qquad (III.1.40)$$

Uzimajući u obzir komutacione relacije (III. 1.40) izraz (III.1.39) prelazi u oblik:

$$u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1 \qquad (III.1.41)$$

Nadjimo sada proizvode:

$$B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} = v_{\vec{k}}^2 + (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} b_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}^+ + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}} \qquad (III.1.42)$$

$$B_{\vec{k}}^+ B_{-\vec{k}}^+ = u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} + u_{\vec{k}}^2 b_{\vec{k}}^+ b_{-\vec{k}}^+ + 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}}^2 b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}} \qquad (III.1.43)$$

$$B_{-\vec{k}} B_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} + u_{\vec{k}}^2 b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}} + 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}}^2 b_{\vec{k}}^+ b_{-\vec{k}}^+ \qquad (III.1.44)$$

Zamenom ovih izraza u relaciji (III.1.36), kvadratni deo Hamiltonijana dobija oblik:

$$H_2 = \sum_{\vec{k}} (\gamma_{(\vec{k})} v_{\vec{k}}^2 + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \mu_{(\vec{k})}) + \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} \left[(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2)\gamma_{(\vec{k})} + 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \mu_{(\vec{k})} \right] + \sum_{\vec{k}} (b_{\vec{k}}^+ b_{-\vec{k}}^+ + b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}}) \left[u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \gamma_{(\vec{k})} + \frac{1}{2}(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2)\mu_{(\vec{k})} \right] \qquad (III.1.45)$$

gde je: $\gamma_{(\vec{k})} = \Omega + K(\vec{k})$ i $\mu_{(\vec{k})} = l_{\vec{k}}$

Izjednačavanjem koeficijenta uz zadnji član izraza (III.1.45) sa nulom i korišćenjem relacije (III.1.41), dobijamo dve jednačine sa dve nepoznate $u_{\vec{k}}$ i $v_{\vec{k}}$

$$\left. \begin{aligned} & u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \gamma_{(\vec{k})} + \frac{1}{2}(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2)\mu_{(\vec{k})} = 0 \\ & u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1 \end{aligned} \right\} \qquad (III.1.46)$$

Sistem jednačina (III.1.46) daje rešenje za $u_{\vec{k}}$ i $v_{\vec{k}}$ u obliku:

$$v_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{\gamma_{(\vec{k})}}{\sqrt{\gamma_{(\vec{k})}^2 - \mu_{(\vec{k})}^2}} - 1 \right)} \qquad (III.1.47)$$

$$u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{\gamma_{(\vec{k})}}{\sqrt{\gamma_{(\vec{k})}^2 - \mu_{(\vec{k})}^2}} + 1 \right)} \qquad (III.1.48)$$

Na osnovu ovih rešenja možemo formirati izraze:

$$u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = \frac{\gamma_{(\vec{k})}}{\sqrt{\gamma_{(\vec{k})}^2 - \mu_{(\vec{k})}^2}} \qquad (III.1.49)$$

$$u_{\vec{k}}^2 v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{\gamma_{(\vec{k})}^2}{\gamma_{(\vec{k})}^2 - \mu_{(\vec{k})}^2} - 1\right) \qquad (\text{III}.1.50)$$

$$u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\gamma_{(\vec{k})}^2}{\gamma_{(\vec{k})}^2 - \mu_{(\vec{k})}^2} - 1} \qquad (\text{III}.1.51)$$

Zamenom relacija (III.1.49), (III.1.50) i (III.1.51) u (III.1.45) dobijamo za kvadratni deo Hamiltonijana izraz:

$$H_2 = H_0 + H_d \qquad (\text{III}.1.52)$$

gde je:

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \gamma_{(\vec{k})}\left(\frac{1}{2}\frac{\gamma_{(\vec{k})}}{\sqrt{\gamma_{(\vec{k})}^2 - \mu_{(\vec{k})}^2}} - 1\right) - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\gamma_{(\vec{k})}^2}{\gamma_{(\vec{k})}^2 - \mu_{(\vec{k})}^2} - 1} \qquad (\text{III}.1.53)$$

$$H_d = \sum_{\vec{k}} \sqrt{\gamma_{(\vec{k})}^2 - \mu_{(\vec{k})}^2}\; b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} \qquad (\text{III}.1.54)$$

tj. $$H_d = \sum_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} \qquad (\text{III}.1.55)$$

gde je: $\mathcal{E}_{\vec{k}} = \dfrac{\partial H_d}{\partial b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}}$

U jednačini (III.1.24) takodje treba uvesti smene (III.1.37) i (III.1.38), nakon čega se dobija konačan oblik:

$$H_{int} = \sum_{\vec{k}} Z_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}} + Z_{\vec{k}} C_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + Z_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ C_{-\vec{k}}^+ + Z_{\vec{k}} b_{\vec{k}} C_{-\vec{k}} \qquad (\text{III}.1.56)$$

gde je $Z_{\vec{k}}$ dato u funkciji $X_{\vec{k}}$, $u_{\vec{k}}$.

$$Z_{\vec{k}} = X_{\vec{k}} \cdot u_{\vec{k}}$$

Nakon svih ovih razmatranja izraz kompletnog Hamiltonijana je:

$$H = \sum_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \hbar c k\, C_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} [Z_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}} + Z_{\vec{k}} C_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + Z_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ C_{-\vec{k}}^+ + Z_{\vec{k}} b_{\vec{k}} C_{-\vec{k}}] \qquad (\text{III}.1.57)$$

2. Dijagonalizacija Hamiltonijana

Da bi smo dijagonalizovali Hamiltonijan (III.1.57) prepišimo ga u nešto pogodnijem obliku:

$$H=\sum_{s,s'=1}^{2} M_{ss'}A_s^+A_{s'}+\frac{1}{2}\sum_{s,s'=1}^{2} N_{ss'}(A_s^+A_{s'}^+ + A_{s'}A_s) \qquad (\text{III}.2.1)$$

gde je:

$$\left.\begin{array}{ll} A_1=b & M_{11}=\varepsilon_{\vec{k}} \\ A_2=c & M_{22}=\hbar c k \\ N_{11}=N_{22}=0 & M_{12}=M_{21}=N_{12}=N_{21}=Z_{\vec{k}} \end{array}\right\} \qquad (\text{III}.2.2)$$

Jednačina kretanja za operator $A_s(t)$ glasi:

$$i\dot{A}_s(t)=[A_s,H]_{t=0}=\sum_{s'=1}^{2} M_{ss'}A_{s'}+\sum_{s'=1}^{2} N_{ss'}^{*}A_{s'}^{+} \qquad (\text{III}.2.3)$$

Da bi smo dokazali ovu relaciju potražimo komutator:

$$[A_s,A_{s''}^+A_{s'}]=A_sA_{s''}^+A_{s'}-A_{s''}^+A_{s'}A_s$$

$$A_sA_{s''}^+=\delta_{s''s}+A_{s''}^+A_s$$

$$[A_s,A_{s''}^+A_{s'}]=A_{s'}\delta_{s''s}+\cancel{A_{s''}^+A_sA_{s'}}-\cancel{A_{s''}^+A_sA_{s'}}$$

$$\sum_{s''s'=1}^{2} M_{s''s'}A_{s'}\delta_{s''s}=\sum_{s'=1}^{2} M_{ss'}A_{s'} \qquad (\text{III}.2.4)$$

i

$$[A_s,A_{s''}^+A_{s'}^+]=A_sA_{s''}^+A_{s'}^+-A_{s''}^+A_{s'}^+A_s$$

$$A_sA_{s''}^+=\delta_{s''s}A_{s''}^+A_s$$

$$[A_s,A_{s''}^+A_{s'}^+]=\delta_{s''s}A_{s'}^++A_{s''}^+A_sA_{s'}^+-A_{s''}^+A_{s'}^+A_s$$

$$A_sA_{s'}^+=\delta_{s's}A_{s'}^+A_s$$

$$[A_s,A_{s''}^+A_{s'}^+]=\delta_{s''s}A_{s'}^++\delta_{ss'}A_{s''}^++\cancel{A_{s''}^+A_{s'}^+A_s}-\cancel{A_{s''}^+A_{s'}^+A_s}$$

$$\frac{1}{2}\sum_{s''s'=1}^{2} N_{s''s'}^{*}\delta_{s''s'}A_{s'}^{+}+\frac{1}{2}\sum_{s''s'=1}^{2} N_{s''s'}^{*}\delta_{s's}A_{s''}^{+}=$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{s'=1}^{2} N_{ss'}^{*}A_{s'}^{+}+\frac{1}{2}\sum_{s''=1}^{2} N_{s''s}^{*}A_{s''}^{+}=$$

$$s''\to s' \qquad N_{s's}=N_{ss'}$$

$$= \sum_{s'=1}^{2} N_{ss'}^{*} A_{s'}^{+} \qquad (\text{III}.2.5)$$

Takodje je:

$$[A_s, A_{s''} A_{s'}] = A_s A_{s''} A_{s'} - A_{s''} A_{s'} A_s = 0$$

Na osnovu ovih rezultata imamo:

$$i \dot{A}_s(t) = \sum_{s'=1}^{2} (M_{ss'} A_{s'} + N_{ss'}^{*} A_{s'}^{+})$$

i time je dokazana relacija (III.2.3).

Sa Boze - operatora $A_s(t)$ prelazimo na nove Boze - operatore sledećom transformacijom:

$$A_s(t) = \sum_{\delta=1}^{2} (u_{s\delta} \xi_\delta e^{-iEt} + v_{s\delta}^{*} \xi_\delta^{+} e^{iEt}) \qquad (\text{III}.2.6)$$

Na osnovu jednačine (III.2.6) možemo napisati:

$$i \dot{A}_s(t) = E \sum_{\delta=1}^{2} (u_{s\delta} \xi_\delta e^{-iEt} - v_{s\delta}^{*} \xi_\delta^{+} e^{iEt}) \qquad (\text{III}.2.7)$$

$$A_{s'}(t) = \sum_{\delta=1}^{2} (u_{s'\delta} \xi_\delta e^{-iEt} + v_{s'\delta}^{*} \xi_\delta^{+} e^{iEt}) \qquad (\text{III}.2.8)$$

$$A_{s'}^{+}(t) = \sum_{\delta=1}^{2} (u_{s'\delta}^{*} \xi_\delta^{+} e^{iEt} + v_{s'\delta} \xi_\delta e^{-iEt}) \qquad (\text{III}.2.9)$$

gde su u i v proizvoljne funkcije. Da bi transformacija (III.2.6) bila kanonična, operatori ξ_δ, moraju biti Boze - operatori.

Uslove kanoničnosti transformacije izvedimo za momenat $t=0$.

$$A_s = \sum_{\delta=1}^{2} (u_{s\delta} \xi_\delta + v_{s\delta}^{*} \xi_\delta^{+}) \qquad (\text{III}.2.10)$$

$$A_{s'}^{+} = \sum_{\delta'=1}^{2} (u_{s'\delta'}^{*} \xi_{\delta'}^{+} + v_{s'\delta'} \xi_{\delta'}) \qquad (\text{III}.2.11)$$

odavde:

$$[A_s, A_{s'}^{+}] = \delta_{ss'} = \sum_{\delta\delta'=1}^{2} \{ u_{s\delta} u_{s'\delta'}^{*} [\xi_\delta, \xi_{\delta'}^{+}] + v_{s\delta}^{*} v_{s'\delta'} [\xi_\delta^{+}, \xi_{\delta'}] + u_{s\delta} v_{s'\delta'} [\xi_\delta, \xi_{\delta'}] + u_{s'\delta'}^{*} v_{s\delta}^{*} [\xi_\delta^{+}, \xi_{\delta'}^{+}] \} \qquad (\text{III}.2.12)$$

kako je:

$$\left.\begin{aligned} [\xi_\delta, \xi_{\delta'}^{+}] &= \delta_{\delta\delta'} \qquad [\xi_\delta, \xi_{\delta'}] = 0 \\ [\xi_\delta^{+}, \xi_{\delta'}] &= \delta_{\delta\delta'} \qquad [\xi_\delta^{+}, \xi_{\delta'}^{+}] = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (\text{III}.2.13)$$

to je:

$$\delta_{ss'} = \sum_{b=1}^{2} \left(u_{sb} u^{*}_{s'b} - v^{*}_{sb} v_{s'b} \right)$$

Osim toga

$$[A_s, A_{s'}] = 0 = \sum_{bb'=1}^{2} \left\{ u_{sb} u_{s'b'} [\xi_b, \xi_{b'}] + u_{sb} v^{*}_{s'b'} [\xi_b, \xi^{+}_{b'}] + u_{s'b'} v^{*}_{sb} [\xi^{+}_{b}, \xi_{b'}] + v^{*}_{sb} v^{*}_{s'b'} [\xi^{+}_{b}, \xi^{+}_{b'}] \right\} \qquad (III.2.15)$$

Na osnovu relacija (III.2.13) dobijamo izraz:

$$[A_s, A_{s'}] = \sum_{b=1}^{2} \left(u_{sb} v^{*}_{s'b} - u_{s'b} v^{*}_{sb} \right) = 0 \qquad (III.2.16)$$

Ako funkcije u i v zadovoljavaju relacije (III.2.14) i (III.2.16), ξ i ξ^{+} su Boze - operatori.

Da bi smo našli relaciju koja bi imala inverznu transformaciju, postupićemo na sledeći način:

$$A_s = \sum_{b=1}^{2} \left(u_{sb} \xi_b + v^{*}_{sb} \xi^{+}_{b} \right) \qquad (III.2.17)$$

$$A^{+}_{s} = \sum_{b=1}^{2} \left(u^{*}_{sb} \xi^{+}_{b} + v_{sb} \xi_b \right) \qquad (III.2.18)$$

prvu jednačinu (III.2.17) množimo sa $u^{*}_{sb'}$, a drugu (III.2.18) sa $v^{*}_{sb'}$, dobijene rezultate oduzmemo (drugu od prve) i izvršimo sumiranje po s na obe strane.

Rezultat je:

$$\sum_{s=1}^{2} \left(u^{*}_{sb'} A_s - v^{*}_{sb'} A^{+}_{s} \right) = \sum_{b=1}^{2} \xi_b \left[\sum_{s=1}^{2} \left(u_{sb} u^{*}_{sb'} - v_{sb} v^{*}_{sb'} \right) \right] + \sum_{b=1}^{2} \xi^{+}_{b} \left[\sum_{s=1}^{2} \left(u^{*}_{sb'} v^{*}_{sb} - u^{*}_{sb} v^{*}_{sb'} \right) \right] \qquad (III.2.19)$$

Ako uvedemo uslove:

$$\sum_{s=1}^{2} \left(u_{sb} u^{*}_{sb'} - v_{sb} v^{*}_{sb'} \right) = \delta_{bb'}$$

$$\sum_{s=1}^{2} \left(u^{*}_{sb'} v^{*}_{sb} - u^{*}_{sb} v^{*}_{sb'} \right) = 0$$

Onda inverzna transformacija glasi:

$$\xi_b = \sum_{s=1}^{2} \left(u^{*}_{sb} A_s - v^{*}_{sb} A^{+}_{s} \right) \qquad (III.2.20)$$

Ako izraze (III.2.8) i (III.2.9) zamenimo u izrazu (III.2.3) dobijamo:

$$\sum_{b=1}^{2}\{E u_{sb}\xi_b e^{-iEt}-E v_{sb}^{*}\xi_b^{+}e^{iEt}\}=$$

$$=\sum_{b=1}^{2}\{[\sum_{s'=1}^{2}M_{ss'}u_{s'b}+N_{ss'}^{*}v_{s'b}]\cdot\xi_b e^{-iEt}+$$

$$+[\sum_{s'=1}^{2}(M_{ss'}v_{s'b}^{*}+N_{ss'}^{*}u_{s'b}^{*})]\xi_b^{+}e^{iEt}\}$$

(III. 2. 21)

Ako koeficijente uz ξ i ξ^{+} izjednačimo sa nulom i uzmemo u obzir da su matrični elementi $M_{ss'}$ i $N_{ss'}$ realni, dobijamo:

$$E u_{sb}=\sum_{s'=1}^{2}(M_{ss'}u_{s'b}+N_{ss'}v_{s'b}) \quad (III. 2. 22)$$

$$-E v_{sb}=\sum_{s'=1}^{2}(N_{ss'}u_{s'b}+M_{ss'}v_{s'b}) \quad (III. 2. 23)$$

Sistem jednačina (III. 2. 22) i (III. 2. 23) je sistem homogenih linearnih jednačina po funkcijama u i v. Da bi on imao netrivijalna rešenja determinanta sistema mora biti jednaka nuli. Iz tog sistema jednačina stavljajući za s=1, a zatim s=2 dobijamo:

$$E u_{1b}=M_{11}u_{1b}+M_{12}u_{2b}+N_{11}v_{1b}+N_{12}v_{2b}$$
$$E u_{2b}=M_{21}u_{1b}+M_{22}u_{2b}+N_{21}v_{1b}+N_{22}v_{2b}$$
$$-E v_{1b}=M_{11}v_{1b}+M_{12}v_{2b}+N_{11}u_{1b}+N_{12}u_{2b}$$
$$-E v_{2b}=M_{21}v_{1b}+M_{22}v_{2b}+N_{21}u_{1b}+N_{22}u_{2b}$$

(III. 2. 24)

Zamenimo vrednosti za $M_{ss'}$ i $N_{ss'}$ iz (III. 2. 2) i sredimo jednačine:

$$(\mathcal{E}_{\vec{k}}-E)u_{1b}+Z_{\vec{k}}u_{2b}+0\cdot v_{1b}+Z_{\vec{k}}v_{2b}=0$$
$$Z_{\vec{k}}u_{1b}+(\hbar c k-E)u_{2b}+Z_{\vec{k}}v_{1b}+0\cdot v_{2b}=0$$
$$0\cdot u_{1b}+Z_{\vec{k}}u_{2b}+(\mathcal{E}_{\vec{k}}+E)v_{1b}+Z_{\vec{k}}v_{2b}=0$$
$$Z_{\vec{k}}u_{1b}+0\cdot u_{2b}+Z_{\vec{k}}v_{1b}+(\hbar c k+E)v_{2b}=0$$

(III. 2. 25)

Formirajmo determinantu sistema i izjednačimo je sa nulom:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{\vec{k}}-E & Z_{\vec{k}} & 0 & Z_{\vec{k}} \\ Z_{\vec{k}} & t_{ck}-E & Z_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & Z_{\vec{k}} & \varepsilon_{\vec{k}}+E & Z_{\vec{k}} \\ Z_{\vec{k}} & 0 & Z_{\vec{k}} & t_{ck}+E \end{vmatrix} = 0 \qquad (\text{III}.2.26)$$

Oduzmimo drugu kolonu od četvrte i zatim drugu vrstu od četvrte i dobijamo:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{\vec{k}}-E & Z_{\vec{k}} & 0 & 0 \\ Z_{\vec{k}} & t_{ck}-E & Z_{\vec{k}} & E-t_{ck} \\ 0 & Z_{\vec{k}} & \varepsilon_{\vec{k}}+E & 0 \\ 0 & E-t_{ck} & 0 & 2t_{ck} \end{vmatrix} = 0 \qquad (\text{III}.2.27)$$

Rešimo ovu determinantu:

$$(\varepsilon_{\vec{k}}-E)\begin{vmatrix} t_{ck}-E & Z_{\vec{k}} & E-t_{ck} \\ Z_{\vec{k}} & \varepsilon_{\vec{k}}+E & 0 \\ E-t_{ck} & 0 & 2t_{ck} \end{vmatrix} - Z_{\vec{k}}\begin{vmatrix} Z_{\vec{k}} & Z_{\vec{k}} & E-t_{ck} \\ 0 & \varepsilon_{\vec{k}}+E & 0 \\ 0 & 0 & 2t_{ck} \end{vmatrix} =$$

$$= (\varepsilon_{\vec{k}}-E) Z_{\vec{k}}\begin{vmatrix} Z_{\vec{k}} & E-t_{ck} \\ 0 & 2t_{ck} \end{vmatrix} + (\varepsilon_{\vec{k}}-E)(\varepsilon_{\vec{k}}+E)\begin{vmatrix} t_{ck}-E & E-t_{ck} \\ E-t_{ck} & 2t_{ck} \end{vmatrix} -$$

$$-Z_{\vec k}^2 \begin{vmatrix} \varepsilon_{\vec k}+E & 0 \\ 0 & 2tck \end{vmatrix} =$$

$$= -(\varepsilon_{\vec k}-E)2tck Z_{\vec k}^2 + (\varepsilon_{\vec k}^2-E^2)2tck(tck-E)-(\varepsilon_{\vec k}^2-E^2)(E-tck)^2-2tck Z_{\vec k}^2(\varepsilon_{\vec k}+E)=$$

$$= -2\varepsilon_{\vec k} tck Z_{\vec k}^2 + 2E tck Z_{\vec k}^2 - 2\varepsilon_{\vec k} tck Z_{\vec k}^2 - 2E tck Z_{\vec k}^2 + (\varepsilon_{\vec k}^2-E^2)[2(tck)^2-2tckE-E^2+2Etck-(tck)^2]=$$

$$= -4\varepsilon_{\vec k} tck Z_{\vec k}^2 + (\varepsilon_{\vec k}^2-E^2)[(tck)^2-E^2]=$$

$$= -4\varepsilon_{\vec k} tck Z_{\vec k}^2 + \varepsilon_{\vec k}^2 (tck)^2 - \varepsilon_{\vec k}^2 E^2 - (tck)^2 E^2 + E^4 =$$

$$= E^4 - E^2[\varepsilon_{\vec k}^2+(tck)^2] + \varepsilon_{\vec k}^2 (tck)^2 - 4\varepsilon_{\vec k} tck Z_{\vec k}^2 = 0 \qquad (\text{III}.2.28)$$

Ova jednačina daje rešenje za energiju u obliku .

$$E_{1,2} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\vec k}^2+(tck)^2}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{\varepsilon_{\vec k}^2-(tck)^2}{2}\right]^2 + 4\varepsilon_{\vec k} tck \cdot Z_{\vec k}^2}} \qquad (\text{III}.2.29)$$

Vrednosti $E_{1,2}$ predstavljaju energije dveju grana feroelektričnih ekscitacija. Rezultat svega ovoga je da se Hamiltonijan (III.1.57) dijagonalizuje po operatorima ξ i ima oblik:

$$H = \sum_{\vec k} \left[E_1(\vec k)\, \xi^+_{1\vec k} \xi_{1\vec k} + E_2(\vec k)\, \xi^+_{2\vec k} \xi_{2\vec k} \right] \qquad (\text{III}.2.30)$$

3. Ocena energije

Da bi smo odredjenije upoznali karakteristike feroelektričnih ekscitacija mi ćemo predpostaviti:

a) da je aproksimacija najbližih suseda dobra aproksimacija,

b) ograničimo se na oblast malih talasnih vektora i

c) posmatraćemo kristal proste kubne strukture.

Na osnovu a i c imamo:

$$\gamma(\vec k) = 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \qquad (\text{III}.3.1)$$

$$\mu(\vec k) = 2\mu(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \qquad (\text{III}.3.2)$$

gde su $\gamma(\vec k)$ i $\mu(\vec k)$ matrični elementi interakcije za najbliže susede i a- konstanta rešetke. Na osnovu predpostavke b, imamo:

$$\left.\begin{aligned} \gamma(\vec{k}) &= 6\gamma - \gamma a^2 k^2 \\ \mu(\vec{k}) &= 6\mu - \mu a^2 k^2 \end{aligned}\right\} \qquad (\text{III}.3.3)$$

Za slučaj $\gamma(\vec{k}) \gg \mu(\vec{k})$ imamo

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \gamma(\vec{k}) = \Omega + K(\vec{k}) \qquad (\text{III}.3.4)$$

Zamenimo li ovde vrednosti za $\gamma(\vec{k})$ dobijamo:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \Omega - 6\mathcal{K} + \frac{\hbar^2 k^2}{\frac{\hbar^2}{\mathcal{K} a^2}} \qquad (\text{III}.3.5)$$

jer je: $\mathcal{E}_{\vec{k}} = \Omega + K(\vec{k}) - \gamma(\vec{k})$

U izrazu (III.3.5) veličina

$$\frac{\hbar^2}{\mathcal{K} a^2} = 2m^* \qquad (\text{III}.3.6)$$

predstavlja dvostruku efektivnu masu ekscitacije, te konačno dobijamo:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = F_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \qquad (\text{III}.3.7)$$

gde je $\quad F_0 = \Omega - 6\mathcal{K} \qquad (\text{III}.3.8)$

Kako je

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{E}_{\vec{k}} &= F_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \approx 10^{-2}[eV] \\ \hbar c k &= 5[eV] \\ Z_{\vec{k}} &\approx 10^{-3}[eV] \end{aligned}\right] \qquad (\text{III}.3.9)$$

to možemo izvršiti procenu energija ekscitacije, datu jednačinom

$$E_{1,2} = \sqrt{\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}^2 + (\hbar c k)^2}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}^2 - (\hbar c k)^2}{2}\right]^2 + 4\mathcal{E}_{\vec{k}}\hbar c k |Z_{\vec{k}}|^2}}$$

Jednačina (III.3.10) daje nam dve grane feroelektričnih ekscitacija tj. vrednost energije $E_1(\vec{k})$ i $E_2(\vec{k})$. Pošto se u obe grane javlja član:

$$\sqrt{\left[\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}^2 - (\hbar c k)^2}{2}\right]^2 + 4\mathcal{E}_{\vec{k}}\hbar c k |Z_{\vec{k}}|^2} \qquad (\text{III}.3.10)$$

procenimo prvo njega,

$$\sqrt{\left[\frac{\varepsilon_{\vec{k}}^{2}-(\hbar c k)^{2}}{2}\right]^{2}+4\varepsilon_{\vec{k}}\hbar c k|Z_{\vec{k}}|^{2}}=\sqrt{\left[\frac{(\hbar c k)^{2}-\varepsilon_{\vec{k}}^{2}}{2}\right]^{2}+4\varepsilon_{\vec{k}}\hbar c k|Z_{\vec{k}}|^{2}}=$$

$$=\frac{(\hbar c k)^{2}-\varepsilon_{\vec{k}}^{2}}{2}\sqrt{1+\frac{16\varepsilon_{\vec{k}}\hbar c k|Z_{\vec{k}}|^{2}}{[(\hbar c k)^{2}-(\varepsilon_{\vec{k}})^{2}]^{2}}}=$$

Koristeći razvoj : $\sqrt{1+x^{2}}\approx 1+\frac{1}{2}x^{2}$ (III.3.11)

možemo dalje pisati:

$$=\frac{(\hbar c k)^{2}-\varepsilon_{\vec{k}}^{2}}{2}\left\{1+\frac{8\varepsilon_{\vec{k}}\hbar c k|Z_{\vec{k}}|^{2}}{[(\hbar c k)^{2}-(\varepsilon_{\vec{k}})^{2}]^{2}}\right\}=$$

$$=\frac{(\hbar c k)^{2}-(\varepsilon_{\vec{k}})^{2}}{2}+\frac{4\varepsilon_{\vec{k}}\hbar c k|Z_{\vec{k}}|^{2}}{(\hbar c k)^{2}+(\varepsilon_{\vec{k}})^{2}}=$$

Na osnovu brojčanih vrednosti (III.3.9) vidimo da je $\hbar c k\gg\varepsilon_{\vec{k}}$, to se prvi član može zanemariti u odnosu na drugi i dalje imamo:

$$=\frac{4\varepsilon_{\vec{k}}\hbar c k|Z_{\vec{k}}|^{2}}{(\hbar c k)^{2}}\frac{1}{1+\frac{\varepsilon_{\vec{k}}^{2}}{(\hbar c k)^{2}}}=$$

Koristeći razvoj: $\frac{1}{1+x}\approx 1-x$ (III.3.12)

dalje je:

$$=\frac{4\varepsilon_{\vec{k}}|Z_{\vec{k}}|^{2}}{\hbar c k}\left[1-\frac{\varepsilon_{\vec{k}}^{2}}{(\hbar c k)^{2}}\right] \qquad (III.3.13)$$

Posmatrajmo sada ceo izraz za energiju (III.2.29). Iz te jednačine, prva grana elementarnih ekscitacija ima vrednost:

$$E_{1}(\vec{k})=\sqrt{(\hbar c k)^{2}+\frac{4\varepsilon_{\vec{k}}|Z_{\vec{k}}|^{2}}{\hbar c k}-\frac{4\varepsilon_{\vec{k}}^{3}|Z_{\vec{k}}|^{2}}{(\hbar c k)^{3}}}=$$

$$=\hbar c k\sqrt{1+\frac{4\varepsilon_{\vec{k}}|Z_{\vec{k}}|^{2}}{(\hbar c k)^{3}}-\frac{4\varepsilon_{\vec{k}}^{3}|Z_{\vec{k}}|^{2}}{(\hbar c k)^{5}}}=$$

Korišćena je i jednačina (III.3.13):

Kako je $(\hbar c k)^{5}\gg\varepsilon_{\vec{k}}^{3}|Z_{\vec{k}}|^{2}$, to se poslednji član ispod korena može zanemariti. Korišćenjem razvoja (III.3.11) dalje imamo:

$$=\hbar c k\left\{1+\frac{2\varepsilon_{\vec{k}}|Z_{\vec{k}}|^{2}}{(\hbar c k)^{3}}\right\}=\hbar c k+2\frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{(\hbar c k)^{2}}|Z_{\vec{k}}|^{2}$$

Uzimajući u obzir relaciju (III.3.7) dobijamo konačan izraz za prvu granu elementarnih ekscitacija:

$$E_1(\vec{k}) = \hbar c k + 2F_0 \frac{|Z_{\vec{k}}|^2}{(\hbar c k)^2} + \frac{|Z_{\vec{k}}|^2}{m^* c^2} \qquad (\text{III}.3.14)$$

U ovom izrazu drugi član krivi ovu granu, a treći član je podiže. Da bismo dobili drugu granu elementarne ekscitacije, posmatrajmo vrednost za drugu energiju koju daje jednačina (III.2.29), uzimajući u obzir i jednačinu (III.3.13)

$$E_2(\vec{k}) = \sqrt{\mathcal{E}_{\vec{k}}^2 - \frac{4\mathcal{E}_{\vec{k}}|Z_{\vec{k}}|^2}{\hbar c k} - \frac{4\mathcal{E}_{\vec{k}}^3|Z_{\vec{k}}|^2}{(\hbar c k)^3}} =$$

kako je $\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}}{\hbar c k} \ll 1$, to je

$$\approx \mathcal{E}_{\vec{k}} \sqrt{1 - \frac{4|Z_{\vec{k}}|^2}{\hbar c k \, \mathcal{E}_{\vec{k}}}} \doteq$$

Korišćenjem razvoja (III.3.11)

$$= \mathcal{E}_{\vec{k}} \left\{1 - \frac{2|Z_{\vec{k}}|^2}{\hbar c k \, \mathcal{E}_{\vec{k}}}\right\} = \mathcal{E}_{\vec{k}} - 2\frac{1}{\hbar c k}|Z_{\vec{k}}|^2$$ POŠTO MOŽEMO UZETI $|Z_{\vec{k}}|^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}|Z_0|^2$

Dalje koristimo relaciju (III.3.7) i dobijamo konačan izraz za drugu granu elementarnih ekscitacija

$$E_2(\vec{k}) = F_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{\hbar|Z_0|^2}{m^* c} k \qquad (\text{III}.3.15)$$

Da bi se elementarne ekscitacije kretale bez trenja, postoji uslov koji glasi:

- Elementarne ekscitacije kreću se bez trenja ako im je minimum fazne brzine pozitivan:

$$v = \min \frac{E_p}{p} > 0 \qquad (\text{III}.3.16)$$

Za granu elementarnih ekscitacija $E_2(\vec{k})$ ovaj uslov je ispunjen ako je:

$$\frac{F_0 \hbar^2}{m^*} > \frac{\hbar^2 |Z_0|^4}{2m^{*2}c^2} \qquad (\text{III}.3.17)$$

Relacija (III.3.17) se može dokazati na sledeći način:

Grana elementarnih ekscitacija $E_2(\vec{k})$ je jednačina oblika:

$$E = c - bk + ak^2 \qquad (\text{III}.3.18)$$

gde je:

$$\left.\begin{aligned} C &= F_0 \\ b &= \frac{\hbar |Z_0|^2}{m^* C} \\ a &= \frac{\hbar^2}{2m^*} \end{aligned}\right\} \qquad (III.3.19)$$

Podelimo jednačinu (III.3.18) sa k

$$\frac{E}{k} = \frac{c}{k} - b + ak \qquad a, b, c > 0 \qquad (III.3.20)$$

Da bismo našli minimum, nadjimo prvi izvod jednačine (III.3.20) i izjednačimo je se nulom:

$$\frac{d}{dk}\left(\frac{E}{k}\right) = \frac{c}{k^2} + a = 0 \Rightarrow k = \sqrt{\frac{c}{a}} \qquad (III.3.21)$$

Pošto smo našli vrednost za k, za koje se dobija minimum, zamenimo tu vrednost (III.3.21) u jednačinu (III.3.20)

$$\left(\frac{E}{k}\right)_{k=\sqrt{\frac{c}{a}}} = c\sqrt{\frac{a}{c}} - b + a\sqrt{\frac{c}{a}} = 2\sqrt{ac} - b$$

Odavde dobijamo da je naš uslov zadovoljen ako je:

$$ac > \frac{b^2}{4} \qquad (III.3.22)$$

Ovo je uslov u opštim oznakama, zamenimo koeficijente u skladu jednačina (III.3.19) i dobijamo:

$$\frac{F_0 \hbar^2}{2m^*} > \frac{\hbar^2 |Z_0|^4}{4m^{*2} C^2} \qquad \text{tj.}$$

$$\frac{F_0 \hbar^2}{m^*} > \frac{\hbar^2 |Z_0|^4}{2m^{*2} C^2} \qquad (III.3.23)$$

Relacije (III.3.23) i (III.3.17) su identične, čime je naš uslov zadovoljen.

ZAKLJUČAK

U radu je ispitan feroelektrik tipa KDP u spoljašnjem lektromagnetnom polju. Pokazano je da kada se u kristalu pojav-juju elementarne ekscitacije hibridnog tipa, koje, grubo govoreći redstavljaju smešu feroelektričnih ekscitacija i transverzalnih otona. Nadjen je spektar ovih elementarnih ekscitacija i konsta-ovano je da grana koja odgovara deformisanim fotonskim ekscita-ijama dobija mali gep, koji je reda veličine interakcije atoma a svetlošću. Mnogo interesantnije ponašanje pokazuje deformisana rana feroelektričnih ekscitacija. Ispostavilo se da ova grana čak u harmonijskom aproksimaciji poseduje osobinu superfluidnosti, a je glavni zaključak ovog rada, kojà je interesantno za eksperi-nentalno ispitivanje, činjenica da se u spoljašnjem elektromagnet-om polju feroelektrične ekscitacije prostiru kroz kristal bez trenja.

REFERENCE

. J.C. SLATER J. SHEM. PHYS. 916 (1941)

. M. TOKUNAGA, T. MATSUBARA PROGR. THEORET. 36, 857 (1966)

. Y. TAKAGI J. PHYS. SOC. JAPAN 3.271 (1948)

. P.G. DE GENNES SOLID STATE COMMUN 1.132 (1963)

. R. BLINE J. PHYS. CHEM. SOLID 13, 204 (1960)

. J. PIRENNE PHYSICA 15 1019 (1949)

. K.K. KOBAJASHI J. PHYS. SOC. JAPAN 24, 497 (1967)

. J. VILAIN S. STAMENKOVIĆ PHYS. STAT. SOL 15, 585 (1966)

. S. STAMENKOVIĆ L. NOVAKOVIĆ PHUS. STAT. SOL 41, 135 (1970)

0. CHARLES KITTEL: UVOD U FIZIKU ČVRSTOG STANJA

11. Б.М. АГРАНОВИЧ: „ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ" – НАУКА, МОСКВА (1968)

2. Л.Н. ОВАНДЕР УФН 86, 3 (1965)

13. U. FANO PHYS. REV. 103, 1202 (1956)

14. J.J. HOPFIELD PHYS. REV. 112, 1555 (1958)

15. Б.М. АГРАНОВИЧ ЖЭТФ 37, 430 (1959)