U N I V E R Z I T E T   U   N O V O M   S A D U
P R I R O D N O - M A T E M A T I Č K I   F A K U L T E T
K a t e d r a   z a   f i z i k u

Zatezalo D. Miodrag

FRELIHOVA TRANSFORMACIJA U MODELU VONSOVSKOG I DOKAZ DA FEROMAGNETICI NE MOGU BITI SUPERPROVODNICI

D I P L O M S K I   R A D

Diplomski rad - 9 (devet)
Odbrana rada - 9 (devet)
Zaključno - 9 (devet)

N. Sad
30. VI 73

Komisija
1) Radojević Vojislav
2) Tošić Bratislav
3) Škrinjar Mario

NOVI SAD
1973.godine

Zahvaljujem se profesoru
Dr BRATISLAVU S. TOŠIĆU
na svesrdnoj pomoći pri
pisanju rada, kao i pri
izboru same teme

S A D R Ž A J

- . -

U V O D

Poznata je stvar da se u elektronskom gasu analiza fenomena može vršiti perturbacionim metodama ili konkretnije metodom funkcije Grina i Fejnmanovih dijagrama. Ovi metodi daju dobre rezultate i konvergentan perturbacioni red za sve pojave u slabo neidealnom elektronskom gasu, osim za one elektrone koji se nalaze u uskom sloju oko granice Fermi površine. U ovoj oblasti impulsa za elektrone sa suprotno usmerenim impulsima u perturbacionom redu se pojavljuju singulariteti poznati u literaturi pod nazivom "opasni dijagrami". Pošto u ovom slučaju perturbacioni red ne konvergira, a da bi se ispak izvršila analiza ovih elektrona i njihovog ponašanja došlo se na ideju da objekat čije ponašanje treba analizirati nije jedan elektron kao individua nego par elektrona sa suprotno orjentisanim spinovima i suprotno usmerenim impulsima. Takvi parovi, poznati pod imenom kuperovski parovi, očigledno imaju spin ravan nuli i kao takvi mogu da vrše boze-kondenzaciju, a ova opet uslovljava pojavu superfluidnosti, tj. proticanje ovih parova bez trenja. Pošto su ovi parovi naelektrisani i kreću se kroz kristal bez trenja očigledno je da je ovaj fenomen u stvari fenomen superprovodnosti.

Osnovno pitanje koje se u ovom slučaju postavlja je pitanje stabilnosti ovakvih parova tj. objašnjenje koji mehanizam u kristalu stvara privlačnu silu izmedju dva elektrona u paru, jer kao što je poznato elektroni se odbijaju kulonovskom silom.

Objašnjenje za ovo je dao Frelih /7/, pokazavši da elektron-fonon interakcija u oblasti impulsa bliskih granica Fermi površine stvara jedan dodatni privlačni potencijal koji je veći po apsolutnoj vrednosti od Kulonovog odbijanja tako da rezultujući privlačni potencijal drži par na okupu kao jedinku.

Hamiltonijan interakcije izmedju slobodnih /valentnih/ elektrona i lokalizovanih spinova 3d i 4f /oblika/ nivoa ima istu matematičku strukturu kao i hamiltonijan elektron-fonon interakcije. Pošto je to tako, moguće je izvršiti transformaciju hamiltonijana s-d modela analogno onoj koju je izvršio Frelih u hamiltonijanu elektron-fonon interakcije i analizirati do kakvih efekata dovodi interakcija slobodnih elektrona sa lokalizovanim spinovima.

Cilj ovog rada je da se ispita kakav efektivni potencijal stvara s-d interakcija, tj. da li je on privlačan ili odbojan,koga je reda veličine da bi se na osnovu toga našlo objašnjenje eksperimentalne činjenice da feromagnetici nisu superprovodnici.

I GLAVA

MODEL VONSOVSKOG ZA INTERAKCIJU VALENTNIH ELEKTRONA SA LOKALIZOVANIM SPINOVIMA

§1. Elementi teorije magnetizma

Čvrsta tela dele se prema magnetnim svojstvima na slabe i jake magnetne materijale. Jaki magnetni materijali se dalje dele na fero, feri i anti-feromagenetike, i to prema svojstvima koja ih izdvajaju u posebnu grupu, tj. u jake magnetne materijale. Ovi magnetni materijali u prvom redu feromagnetici i ferimagnetici se karakterišu postojanjem velikog makroskopskog momenta u uzorku, koji je pod odredjenim uslovima rezultat specifičnog magnetnog uredjenja.

Tipični predstavnici feromagnetika su prelazni metali /Fe, Co, Ni, Pt, Cr, Mn/, zatim neki elementi iz grupe retkih zemalja /Ce, Nd, Sm, En, Tb, Cd, Ho, Er, Dy, Tn/, zatim legure Fe, Co i Ni. Tipični feromagnetici su Fe, Co i Ni, njihove soli i oksidi, /FeO, CoF_2, Ni SO_4/ su antiferomagnetici, a kompleksne soli prelaznih metala /MnO. Fe_2O_3, i td./ su ferimagnetici.

Po savremenim teorijama se smatra da su osobine jakih magnetnih materijala uslovljene elektronima u nepopunjenim unutrašnjim oblacima atoma kristalne rešetke materijala, jer samo takvi kristali pokazuju osobine jakih magnetnih materijala. Ipak je sigurno da postojanje nepopunjenih unutrašnjih nivoa nije dovoljan uslov egzistencije pomenutih svojstava, pošto svi prelazni elementi imaju nepopunjene unutrašnje oblake, ali su najčešće paramagnetici, sem Fe, Co i Ni feromagnetici i Pd i Pt koji su antiferomagnetici. Znači, osobine jakih magnetnih materijala su uslovljene elektronima nepopunjenih oblaka i zavise od raspodele gustine provodnih elektrona. Ali, formulisanje neophodnih i dovoljnih uslova za postojanje jakog magnetizma na osnovu elektronskih konfiguracija slobodnih elektrona je svakako neizvodljivo.

Žiromagnetni odnos /odnos magnetnog momenta prema mehaničkom/ u jedinicama $\frac{e}{2mc}$ jednak je 2 za sopstveni moment elektrona a 1 za orbitalni. Zato možemo uzeti da je doprinos orbitalnih momenata mali i da se makroskopski moment sastoji samo od magnetnih momenata elektrona nepopunjenih oblaka, i to uz pretpostavku da je rezultujući magnetni moment uslovljen, pri odredjenim uslovima, spinskim uredjenjem elektrona nepopunjenih oblaka. Uzrok pojave uredjenja, očigledno je interakcija elektrona. Prvi su ovakav model predložili Frenkel i Hajzenberg /1928.g./ i on je osnova savremene kvantne teorije jakog magnetizma.

Jačina magnetne polarizacije /magnetizacije/ tj. magnetni moment jedinice zapremine pri temperaturama nižim od jedne kritične, naziva se spontana magnetizacija, i ona je funkcija temperature, a gotovo ne zavisi od primenjenog polja. Njena najveća vrednost je magnetizacija zasićenja. Jedno je sigurno, da su jaki magnetni materijali obavezno kristali, jer nisu primećeni kod tečnosti ili gasova. Uticaj kristalne strukture na magnetna svojstva ogleda se u postojanju magnetno-kristalne anizotropije. U kristalima postoji samo nekoliko pravaca duž kojih orijentacija spinova daje minimalan termodinamički potencijal, ti pravci se nazivaju pravci lakog namagnetisanja. Gvoždje, koje ima kubnu zapreminski centriranu rešetku ima pravce lakog namagnetisanja duž ivica kocke. U odsustvu spoljašnjeg polja /magnetnog/ energetski najpovoljniji raspored spinova u monokristalu jek onaj kada je monokristal razdeljen na niz oblasti u kojima su spinovi usmereni u jednom pravcu. Veličine i medjusobni položaj ovih oblasti spontane magnetizacije /domena/ odredjen je uslovom minimuma termodinamičkog potencijala.

Znači, pri odredjenim uslovima može se ponašanje elektrona iz nepopunjenih oblaka opisati sistemom spinova rasporedjenim u čvorovima rešetke. Interakcija /uzajamno dejstvo/ spinova naziva se integral razmene. Smatra se da je integral razmene po redu veličine jednak energiji razmene elektrona odgovarajućih čvorova. No, račun i sa ovako uprošćenim modelom je dosta složen. Nekada se operatori spina mogu/zanemariti/ zameniti klasičnim vektorima i tada se model posmatra kao sistem dipola vezanih energijom veličine energije razmene. Ta takozvana klasična šema dozvoljava da se daju dosta dobri kvalitativni rezultati, a donekle i kvantitativni. Sam model se može još uprostiti ako se interakcija magnetnih momenata zameni sa nekim efektivnim poljem koje je proporcionalno integralu razmene i srednjoj magnetizaciji.

Ako je N broj atoma u jedinici zapremine, a μ magnetni moment atoma onda je magnetizacija zasićenja

$$M_o = N \cdot \mu$$

izmerene vrednosti su manje, a razlika je uslovljena toplotnim oscilovanjem spinskih momenata atoma, anizotropijom i efektom krajeva uzoraka. Ako se uzorak smesti u spoljašnje magnetno polje jačine H, magnetizacija raste. Veličina

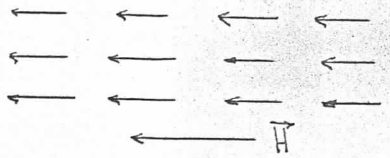
$$\chi(H) = \frac{\partial M}{\partial H}$$

se naziva magnetna susceptibilnost.

Na temperaturama na kojima je srednja toplotna energija reda veličine integrala razmene narušava se uredjenost spinova, takva temperatura za feromagnetike se naziva Kirijeva temperatura /Tc/, i reda je veličine $\sim 10^3$ °K, pa je zato integral razmene $I \sim 10^{-13}$ erga, dok je energija magnetne anizotropije uporediva sa energijom magnetnih interakcija elektrona /spin-spinsko i spin-orbitalno/. Očigledno da je Tc temperatura pri kojoj je srednja toplotna energija istog reda veličine kao i integral razmene. Uticaj energije anizotropije umanjuje spoljašnje polje, a ona sama zavisi od temperature. Kako je energija dipolnog uzajamnog dejstva reda veličine 10^{-16}-10^{-17} erga, a njoj odgovara Kirijeva temperatura 1-10^{-1} °K, te se slučaj dipolnog magnetizma posmatra retko. Ako se zanemari uticaj magnetne anizotropije radi jednostanvnosti, a koriste kvazi-klasične aproksimacije modeli jakih magnetnih materijala mogu se predstaviti na sledeći način:

FEROMAGNETICI

Pri temepraturama koje su niže od Kirijeve tačke svi spinovi u proseku su orijentisani u jednom pravcu, te je rezultujući magnetni moment znatan. U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja pravac rezultujućeg magnetnog momenta nije fiksiran, no ako postoji makar i slaba anizotropija vektor $\vec{M}$ je orijentisan duž jedne od osa lake magnetizacije. Ako se feromagnet nadje u spoljašnjem magnetnom polju $\vec{H}$ vektori $\vec{M}$ i $\vec{H}$ postaju kolinearni /sl. 1./.



Sl. 1

Na Kirijevoj temperaturi nestaje spontane magnetizacije, a za visoke temepratare feromagnetik se ponaša slično klasičnom paramagnetiku dok je njegova susceptibilnost odredjena Kiri - Vajsovim zakonom:

$$\chi = \frac{const}{T - T_c}$$

Spontana magnetizacija za $T \leqslant T_c$ odredjena je izrazom

$$M(T) \cong const\sqrt{1 - T/T_c}$$

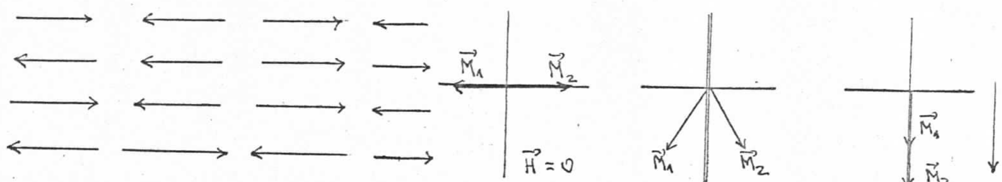
pri $T \to 0$

$$M(T) = M_0(1 - A_1 T^{3/2} - A_2 T^{5/2} \ldots)$$

gde su A_i neke konstante, a M_0 - magnetizacija zasićenja.

ANTIFEROMAGNETICI

Antiferomagnetni raspored spinova saglasno hipotezi Nela može se predstaviti kao sprega dve ili više feromagnetnih podrešetki /Sl. 2./. Kako se vidi sa slike koja predstavlja šematski prikaz antiferomagnetika sa dve podrešetke, rezultujuća magnetizacija pri $\vec{H} = 0$ je nula, dok pri polju, koje je manje od nekog kritičnog, magnetizacija podrešetki nije usmerena u pravcu polja već je rezultujuća magnetizacija kolinearna sa poljem. Pri $\vec{H} = \vec{H}c$ magnetizacija podrešetki je u pravcu polja tj. rezultanta je jednaka algebarskom zbiru. Očito u ovom slučaju antiferomagnetik se ponaša kao feromagnetik. Isto tako kao i feromagnetici i antiferomagnetici se pri $T > Tn$ ponašaju kao paramagnetici, gde je Tn - Nelova temperatura.



Sl. 2

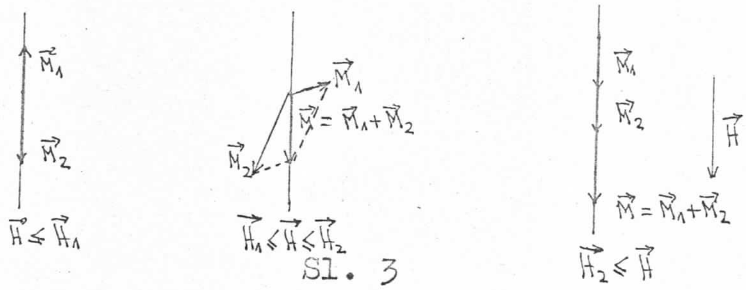
Opšte karakteristike antiferomagnetika su još maksimum susceptibilnosti pri $T = Tn$, stroga zavisnost susceptibilnosti od temperature i veći uticaj anizotropije nego što je to bio kod feromagnetika.

SLABI FEROMAGNETICI

Ova grupa magnetnih materijala, koji se zovu još i antiferomagnetici sa slabim feromagnetizmom, čine prelaz izmedju dve opisane vrste i kod njih je pri $\vec{H} = 0$ $\vec{M} = 0$ što je uslovljeno anizotropijom i nestrogom paralelnošću spinova podrešetki /okrenute podrešetke za $\sim 1^{\circ}$/.

FERIMAGNETICI

Za ferimagnetike po hipotezi Nela karakteristično je postojanje nekoliko podrešetki sa rezultujućim magnetnim momentom različitim od nule, koji potiče usled različitog broja "levih" i "desnih" čvorova, različitih veličina spinova, kao i nekolinearnog rasporeda momenata podrešetki. Kako se ferimagnetici ponašaju u spoljašnjem magnetnom polju $\vec{H}$ dato je na slici 3.



Sl. 3

Radi jednostavnosti uzeli smo da imamo samo dve podrešetke sa rezultujućim momentima $\vec{M}_1$ i $\vec{M}_2$, a $\vec{H}_1$ i $\vec{H}_2$ su kritične vrednosti magnetnog polja. Zanemarili smo magnetnu anizotropiju. Broj podrešetki može da bude i veći, a interesantno je da kod tih ferimagnetika spontana magnetizacija može da padne na nulu, pre Kirijeve tačke, i to je tzv. temperatura kompenzacije, a rezultat je različite temperaturne zavisnosti magnetizacija podrešetki koje se u jednom trenutku kompenzuju. Više od te tačke kompenzacija se narušava, a rezultujući moment izčezava tek na Kirijevoj /temperaturi/ tački. Na višoj temperaturi od Kirijeve tačke ferimagnetici se ponašaju kao paramagnetici, a zavisnost susceptibilnosti od temperature je data Kiri - Nelovim zakonom.

$$\chi^{-1} = \chi_0^{-1} + \frac{T}{C} - \frac{\Delta}{T - T_c}$$

gde su χ_0, Δ i C neke konstante.

Mogući tipovi magnetnih struktura ne iscrpljuju se u ovim prostim slučajevima koji su napred razmatrani. U nizu materijala opažaju se tzv. spiralne strukture, kod kojih se komponente spinova periodično menjaju pri pomeranju duž nekog kristalografskog pravca. Po pravilu imaju jednu osu simetrije. Kod ovih struktura moguć je prelaz iz jednog oblika u drugi, a sem toga nije lako napraviti njihovu klasifikaciju. Materijali ovoga tipa strukture, na primer neke retke zemlje, imaju dve niskotemperaturne faze: pri jako niskim temperaturama odlikuju se feromagnetnim svojstvima, a pri višim antiferomagnetnim. U skladu sa tim imaju dve tačke faznih prelaza: na nekoj karakterističnoj temperaturi T_1 dešava se prelaz iz feromagnetnog stanja u antiferomagnetno stanje, a opet na temperaturi T_2 u paramagnetno stanje.

Pretpostavka o jako magnetnim materijalima, kao o sistemu spinova, rasporedjenih u čvorovima rešetki, dozvolio nam je da dobijemo niz važnih rezultata koji su potvrdjeni eksperimentalno. Kako ovaj model predstavlja uprošćenu sliku normalno je da daje rezultate koji ne odgovaraju eksperimentalnim. Može se reći da ovakav model bolje opisuje antiferomagnetike i ferimagnetike koji su poluprovodnici ili dielektrici. Tako, na primer, trebalo bi da su magnetni momenti slobodnih atoma ako ne jednaki onda vrlo bliski srednjim magnetnim momentima po čvoru u slučaju vrlo niskih temperatura i vrlo visokih spoljašnjih magnetnih polja. To slaganje je mnogo bolje za ferimagnetike i antiferomagnetike nego za atome metala koji nemaju popunjen 3d oblak /tzv.3d - metali/ na primer Fe, Co, Ni. Isto važi i za odstupanje od celobrojnih vrednosti u jedinicama srednjih magnetnih momenata. Zaključujemo da ovome neslaganju u znatnoj meri doprinosi zanemarivanje interakcije izmedju elektrona nepopunjenih oblaka i provodnih elektrona i zanemarivanje kolektivizacije elektrona nepopunjenih oblaka. Sve ovo je uslovilo stvaranje jedne nove teorije jakog magnetizma - tzv. teorija zona magnetizma. Ona daje na primer, objašnjenje necelobrojnosti magnetnih momenata i anomalno velikih atomskih toplotnih kapaciteta metala sa nepopunjenim 3d elektronskim oblakom. Kako pak uveličava efekat kolektivizacije ne može da objasni znatan broj magnetnih svojstava.

Postoji još jedan hibridni model tzv. s - d - model razmene, kojim ćemo se baviti u ovom radu, gde se interakcija valentnih elektrona sa lokalizovanim spinovima /elektroni iz nepopunjenih ljusaka odgovorni za magnetizam/ uzima kao mala perturbacija. Ipak, sigurno je da magnetna svojstva najbolje opisuje model prema kome se jaki magnetni materijali uzimaju kao sistem spinova rasporedjenih u čvorovima rešetke.

§2. Hajzenbergov feromagnet

Hajzenberg i Frenkel su dali jedan model feromagnetizma koji je nazvan Hajzenbergov model. Oni su pokazali da osnovnu ulogu u feromagnetizmu igra interakcija razmene medju elektronima nepopunjenih oblaka. Interakciju izmedju elektrona nepopunjenih unutrašnjih oblaka sa elektronima valentnog oblaka /provodnim elektronima/ smatraćemo malom. Tada elektrone nepopunjenih oblaka i provodne elektrone možemo aproksimativno razmatrati kao dva nezavisna podsistema. Pošto nas interesuju magnetna svojstva, dalje ćemo razmatrati samo elektrone nepopunjenog unutrašnjeg oblaka. /d ili f - oblaka/. Predpostavimo da u svakom atomu imamo jedan d - elektron. Zanemarimo orbitalni moment d - elektrona, kao i magnetni moment elektrona sa orbitalnim i uzajamno dejstvo medju sobom. Znači razmatraćemo d - elektron kao s - elektron. Spoljašnje magnetno polje smatramo da je nula.

Posmatrajmo niz, i neka su atomi rasporedjeni na rastojanju a, a neka niz sadrži N atoma. Radi eliminisanja efekata krajeva uvodimo ciklične uslove sa velikim periodom N.a=L. Posmatrajmo jedan elektron, a ostatak tretirajmo kao pozitivan jon. Hamiltonov operator /hamiltonijan/ je:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 + \sum_{i,l}^{N} V_l(\vec{r}_i) + \frac{1}{2}\sum_{i,l}^{N}\frac{e^2}{|\vec{r}_i-\vec{r}_l|} \qquad 2.1$$

V_{lr} - je negativna potencijalna energija i - tog elektrona u polju l - toga atoma. Talasne funkcije izolovanih atoma zadovoljavaju jednačinu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla_i^2 + V_i(\vec{r}_i) - \mathcal{E}_0\right]\varphi_i(\vec{r}_i) = 0 \qquad 2.2$$

a kao posledicu slabog prepokrivanja talasnih funkcija različitih atoma imamo:

$$\int \varphi_i(\vec{r}_i)\, \varphi_l(\vec{r}_l)\, d^3\vec{r}_i \approx \delta_{i,l} \qquad 2.3$$

Dve moguće orijentacije spina duž i protiv z- ose označavaju se odgovarajućim spinskim funkcijama α i β. Potpunom namagnetisanju odgovara orijentacija svih spinova duž ili protiv z - ose. Antisimetrična funkcija tog stanja u nultoj aproksimaciji je data kao:

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu} (-1)^{\nu} P_{\nu} \left\{ \varphi_1(\vec{r}_1)\alpha(1) \ldots\ldots \varphi_N(\vec{r}_N)\alpha(N) \right\} \qquad 2.4$$

Sumiranje se vrši po svim permutacijama elektrona, ali koje su takve da se svaka poslednja dobija iz prethodne permutacijom jednog para elektrona. Sa druge strane prema teoriji perturbacije energija u prvoj aproksimaciji je:

$$E_0 = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle \qquad 2.5.$$

S obzirom na izraze 2.4 i 2.1 ona se može napisati:

$$E_0 = N\varepsilon_0 + Q - \frac{1}{2} \sum_{i,l}{}' I_{i,l} \qquad 2.6.$$

gde je:

$$Q = \sum_{i,l}{}' \int |\varphi_i(\vec{r}_i)|^2 \left\{ V_l(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \int \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_l|} |\varphi_l(\vec{r}_l)|^2 d^3\vec{r}_l \right\} d^3\vec{r}_i$$

i predstavlja srednju Kulonovu energiju interakcije elektrona medjusobno i sa jonima rešetke.

$$I_{i,l} = \int \varphi_l^*(\vec{r}_l)\, \varphi_i^*(\vec{r}_i) \left[V_l(\vec{r}_l) + V_i(\vec{r}_i) + \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_l|} \right] \varphi_l(\vec{r}_i)\, \varphi_i(\vec{r}_l)\, d^3\vec{r}_i\, d^3\vec{r}_l$$

je integral razmene medju atomima i i l. Okretanje samo jednog spina odgovaralo bi najniže pobudjenom stanju.

Ako bi to bilo u n - tom atomu talasna funkcija bi izgledala ovako:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu} (-1)^{\nu} P_{\nu} \{ f_1(\vec{r}_1)\alpha(1) \ldots f_n(\vec{r}_n)\beta(n) \ldots f_N(\vec{r}_N)\alpha(N) \} \qquad 2.7$$

Ovo je talasna funkcija pobudjenog stanja u nultoj aproksimaciji, zato talasne funkcije u sledećim aproksimacijama, a koje su rešenja jednačine:

$$(\hat{H} - E)\Psi = 0 \qquad 2.8$$

mogu se tražiti u obliku:

$$\Psi = \sum_{m} b_m |m\rangle \qquad 2.9$$

gde su b_m - konstantni koeficijenti. Zamenom 2.9 u 2.8, množeći sa leva sa $\langle n|$ i integrišući dobijamo sistem jednačina koje odredjuju koeficijente b_n i energiju sistema.

$$\sum_{m} \langle n|\hat{H}|m\rangle b_m + [\langle n|\hat{H}|n\rangle - E] b_n = 0 \qquad 2.10$$

a uzimajući u obzir $\hat{H}$ i $|n\rangle$ dobijamo:

$$\langle n|\hat{H}|n\rangle = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\ell}' I_{\ell,n} \equiv E_0'$$

s tim da je E_0 dato sa 2.6 a

$$\langle n|\hat{H}|m\rangle = -\frac{1}{2} I_{n,m}$$

Ako uzimamo integral razmene samo izmedju susednih atoma važi:

$$I_{n,n+1} = I_{n-1,n} = I$$

dobijamo sistem jednačina:

$$(E - E_0') b_n = \frac{1}{2} I (2b_n - b_{n+1} - b_{n-1})$$

čije se rešenje može napisati u obliku

$$b_n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikan} \qquad 2.11$$

gde je $k = \frac{2\pi\nu}{N\cdot a}$, ν - ceo broj. Svakoj vrednosti k odgovara energija sistema:

$$E(k) - E_0' = I(1 - \cos ka)$$

što znači da svakom pobudjenom stanju odgovara talasna funkcija

$$\Psi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m |m\rangle e^{ikma} \qquad 2.12$$

funkcija Ψ_k se zove spinski talas, a veličina

$$\varepsilon_M(k) = E_k - E_0' = I(1 - \cos ka) \qquad 2.13$$

energija spinskog talasa. Ova energija što je od posebnog značaja za niske temperature i male vrednosti k.a svodi se na

$$\varepsilon_M(k) = S I a^2 k^2 \qquad 2.14$$

Iz 2.13 da bi E_0 odgovaralo minimumu energije I mora biti pozitivno, a vrednost I jednaka je T_c u energetskim jedinicama. Ovde je S spin.

Dobijeni rezultati, kada se uopšte, daju za slučaj rešetke, za prostu kubnu strukturu:

$$\varepsilon_M(\vec{k}) = I \sum_{\lambda=1}^{3} (1 - \cos k_\lambda a) \qquad 2.15$$

a što za aproksimaciju malih talasnih vektora daje

$$\varepsilon_M(\vec{k}) = S I a^2 k^2 \qquad 2.16$$

Ako posmatramo takva stanja kod kojih imamo malo "okrenutih" spinova u odnosu na njihov ukupan broj, kod njih tako pobudjena stanja se mogu predstaviti kao superpozicija nezavisnih spinskih stanja sa jednim "okrenutim" spinom što je sa druge strane ekvivalentno zanemarivanju spinskih talasa, kao i spinskih kompleksa. Prema aproksimacijama koje smo uveli mala pobudjenja kristala razmatraju se kao ukupnost elementarnih pobudjenja od kojih se svako ponaša kao kvazičestica idealnog gasa čija je efektivna masa prema 2.16 data kao:

$$m^* = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{SIa^2} \tag{2.17}$$

Ove kvazičestice se nazivaju magnoni, a ako spinske talase smatramo nezavisnim, broj magnona u stanju odredjene vrednosti k dat je prema Boze - Ajnštajnovoj statistici relacijom:

$$\overline{n}_{\vec{k}} = \frac{1}{e^{\varepsilon_M(\vec{k})/KT} - 1} \tag{2.18}$$

$\varepsilon_M(\vec{k})$ je energija magnona, K je Bolcmanova konstanta, a T apsolutna temperatura. Važno je još da je u prostoru talasnih vektora k broj mogućih vrednosti k po jedinici obima $\left(\frac{1}{2\pi}\right)^3$.

Ovako uvedena teorija magnetizma omogućila je uvodjenje pojma spinskih talasa i magnona, kao kvantovane elementarne eksitacije spinskog sistema. Sada treba za ovaj model izvesti njegov hamiltonijan, onakav kakav se najčešće korsti za izračunavanja u magnetizmu - tzv. Hajzenbergov spinski hamiltonijan. Pored napred uzetih napomena treba reći da se uzima da je rešetka obrazovana iz iste vrste atoma. Neka je u nultoj aproksimaciji najniži energetski nivo okarakterisan jediničnim okupacionim brojem elektrona u čvorovima rešetke /f/.

$$N_f = n_{f,-1/2} + n_{f,1/2} = 1$$

gde je $n_{f,-1/2}$ broj elektrona sa spinom "levo" i $n_{f,1/2}$ broj elektrona sa spinom "desno". Neka je osnovni nivo odvojen od pobudjenih odredjenim energetskim procepom. Uzajamno dejstvo elektrona posmatra se kao perturbacija. Nivo je spinski degenerisan pošto je on odredjen samo jediničnom vrednošću okupacionog broja, a vrednost spina u čvoru je neodredjena. Ako sa $\hat{H}_0$ označimo hamiltonijan nulte aproksimacije, a sa C_0 odgovarajuću funkciju stanja imamo:

$$(\hat{H}_0 - \mathcal{E}_0) C_0 = 0 \qquad 2.19$$

Funkcija C_0 odredjena je okupacionim brojem $n_{f\sigma}$ $(\sigma = \pm 1/2)$ kao $C_0 = C_0(\ldots, n_{f\sigma}, \ldots)$. Ove sopstvene funkcije obrazuju linearno prostranstvo $\mathcal{L}$. Na osnovu teorije perturbacije cepanje nivoa u sledećim aproksimacijama dato je jednačinom:

$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0) C_0 = \hat{H} C_0 \qquad 2.20$$

$\hat{H}$ je /samoandjungovani/ ermitski operator koji funkcije iz prostranstva $\mathcal{L}$ transformišu u nove funkcije, koje takodje pripadaju istom prostranstvu $\mathcal{L}$. S obzirom na nefiksiranost spinova C_0 se može uzeti kao funkcija z - komponenti operatora spina:

$$C_0 = C_0(\ldots, \hat{S}_f^z, \ldots)$$

a $\hat{H}$ kao funkcija operatora spina. Predstavljajući $\hat{H}$ u obliku reda po stepenima spinskih operatora S_f^α $(\alpha = x, y, z)$ ima oblik:

$$\hat{H} = G_0 + \sum_{\alpha f}{}' G_\alpha(f) \hat{S}_f^\alpha + \sum_{\substack{\alpha_1 \alpha_2 \\ f_1 f_2}}{}' G_{\alpha_1 \alpha_2}(f_1, f_2) \hat{S}_{f_1}^{\alpha_1} \hat{S}_{f_2}^{\alpha_2} + \sum_{\substack{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \\ f_1 f_2 f_3}}{}' G_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3}(f_1, f_2, f_3) \hat{S}_{f_1}^{\alpha_1} \hat{S}_{f_2}^{\alpha_2} \hat{S}_{f_3}^{\alpha_3} \qquad 2.21$$

gde su koeficijenti G - obične funkcije broja /koordinata/ čvorova rešetki. Sumiranje se vrši tako da se ne uzimaju kombinacije sa jednakim indeksima, a pod ovim uslovom operatori S_f^α pod znakom sume komutiraju. Koeficijenti razvoja C_0 su realni pošto je $\hat{H}$ ermitsko. Ako se zanemare magnetne sile, a kako elektrostatičke ne zavise od orijentacije spinova hamiltonijan mora biti invarijantan u odnosu na transformaciju pokretanja spinova. Zato svi članovi razvoja 2.21 moraju biti skalarne funkcije spinskih operatora.

Izvršimo kanoničnu transformaciju spinskih operatora:

$$S_f^{\alpha} \rightarrow -S_f^{\alpha} \quad , \quad i \rightarrow -i$$

Operator $\hat{H}$ ostaje invarijantan jer ne zavisi od orijentacije spinova. Zato $\hat{H}$ mora biti skalar, sastavljen od parnog broja spinskih operatora. Ako se zanemare članovi četvrtog reda po spinskim operatorima dobijamo:

$$\hat{H} = G_0 + \sum G(f_1, f_2)(\hat{\vec{S}}_{f_1}, \hat{\vec{S}}_{f_2}) \qquad 2.22$$

ili uvodeći simetrične oznake za koeficijente:

$$\hat{H} = G_0 - \frac{1}{2}\sum I(f_1, f_2)(\hat{\vec{S}}_{f_1}, \hat{\vec{S}}_{f_2}) \qquad 2.23$$

gde je I - integral razmene:

$$G(f_1, f_2) = -\frac{1}{2}(f_1, f_2) \quad ; \quad I(f_1, f_2) = I(f_2, f_1)$$

Pošto se pri izmeni pravca osa u običnom prostoru ne menja elektrostatičko uzajamno dejstvo sledi:

$$I(f_1, f_2) = I(-f_1, -f_2)$$

Još pod uslovom da su svi čvorovi ekvivalentni, a kako mora postojati invarijantnost u odnosu na celobrojni umnožak konstante rešetke, integral razmene je ustvari samo funkcija relativnog rastojanja:

$$I(f_1, f_2) = I(|f_1 - f_2|) \qquad 2.24$$

Znači da se hamiltonijan Hajzenbergovog modela feromagnetizma izražava preko spinskih operatora elektrona nepopunjenih oblaka. On opisuje feromagnetik kao skup spinova raspoređjenih u čvorovima kristalne rešetke, koji uzajamno interaguju po parovima sa energijom jednakom I. Integrali razmene u izraz za $\hat{H}$ ulaze kao neke fenomenološke veličine. Eksplicitni izraz za I u ovom slučaju se ne dobija, no pri korišćenju aproksimacije Hajtler - Londona pri izgradnji teorije feromagnetizma dobija se očigledan izraz za integral razmene preko atomskih talasnih funkcija, i energije uzajamnog dejstva jednog elektrona na drugi.

Znači, spinski hamiltonijan dozvoljava dosta dobro opisivanje magnetnih karakteristika jakih magnetnih materijala, bez obzira što se može pokazati da su oni prva aproksimacija stvarnih hamiltonijana. Aproksimacija je dobra ako se smatra da je prepokrivanje talasnih funkcija atoma jako malo.

§3. S-d model razmene

Ovaj model je postavio S.V. Vonsovski, pa je po njemu i dobio ime. U ovom modelu se razmatraju dve grupe nivoa elektronskog sistema: d /ili f/ nivoi elektrona unutrašnjeg nepopunjenog oblika i s - nivoi valentnih elektrona. Uzajamno dejstvo medju elektronima koji se nalaze na d /ili f/ nivoima i na s - nivoima razmatramo kao malo pobudjenje. Po ovom modelu prisutnost nepopunjenih nivoa sa nekompenzovanom vrednošću rezultujućeg spinskog magnetnog momenta je uzrok pojave feromagnetizma. Sa ovim predpostavkama hamiltonijan ovog sistema može biti napisan:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sd} = \hat{H}_{dd} + \hat{H}_{ss} + \hat{H}_{sd} \tag{3.1}$$

gde je $\hat{H}_{dd}$ operator energije interakcije d - elektrona, $\hat{H}_{ss}$ operator energije interakcije s - elektrona i $\hat{H}_{sd}$ predstavlja energijuuzajamnog dejstva d i s - elektrona i dati su kao:

$$H_{dd} = -\frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2}{}' I(f_1, f_2)\,(S_{f_1}, S_{f_2}) \tag{3.2}$$

$$H_{ss} = \sum_{\nu,\sigma} E_{\nu\sigma}\, a^{+}_{\nu\sigma} a_{\nu\sigma} \tag{3.3}$$

$$H_{sd} = -\frac{1}{2N} \sum_{\nu_1 f} B(\nu_1-\nu_2)\, e^{-i(\nu_1-\nu_2, f)} \times \Big\{ S^z_f \big(a^{+}_{\nu_1,-1/2} a_{\nu_2,-1/2} - a^{+}_{\nu_1,1/2} a_{\nu_1,1/2}\big) + S^x_f \big(a^{+}_{\nu_1,-1/2} a_{\nu_2,1/2} + a^{+}_{\nu_1,1/2} a_{\nu_2,-1/2}\big) + i S^y_f \big(a^{+}_{\nu_1,1/2} a_{\nu_2,-1/2} - a^{+}_{\nu_1,-1/2} a_{\nu_2,1/2}\big) \Big\} \tag{3.4}$$

gde je S - operator spina elektrona, koji pripada čvoru f; $a^{+}_{\nu,\sigma}, a_{\nu,\sigma}$ $(\sigma = \pm 1/2)$ - fermi operatori kreacije i anhilacije s - elektrona u stanju sa talasnim vektorom ν i spinom σ; $E_{\nu\sigma}$ - energija elektrona u stanju (ν, σ); I - integral d - d razmene; B - integral s - d razmene; N - broj čvorova u rešetki.

Analiza za efektivnu nasu elektrona:

$$\hat{H}_{ss} = \sum_{\vec{n}} a^+_{\vec{n}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{n}}\right) a_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}}{}' P_{\vec{n}\vec{m}} a^+_{\vec{n}} a_{\vec{m}} \qquad 3.5$$

Furije transformacije su:

$$a_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}}, \qquad a^+_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}'} a^+_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{n}} \qquad 3.6$$

$$P_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}}$$

$$\hat{H}'_{ss} = \sum_{\vec{n}} a^+_{\vec{n}}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{n}}\right) a_{\vec{n}} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{n},\vec{k},\vec{k}'} a^+_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\vec{n}}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{n}}\right) e^{i\vec{k}\vec{n}} a_{\vec{k}} =$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{n}(\vec{k}-\vec{k}')} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} N \delta_{\vec{k},\vec{k}'} =$$

$$= \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}}$$

Sada je:

$$\hat{H}_{ss} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\vec{m}} P_{\vec{k}} a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \qquad 3.7$$

Odavde energija elektrona:

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{2} P_{\vec{k}} \qquad 3.8$$

gde je $P_{\vec{k}}$ tenzor efektivne mase. Ako je još:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial k_i^2} = P_0 \qquad (i = x, y, z) \qquad 3.9$$

Sledi

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{2} P_0 \frac{k^2 a^2 \hbar^2}{\hbar^2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{p^2}{\frac{2\hbar^2}{a^2 P_0}}$$

Ako obeležimo sa $m_{int} = \frac{\hbar^2}{a^2 P_0}$ masu elektronske interakcije dobijamo:

$$E_{\vec{k}} = \frac{m_{int} p^2 + m p^2}{2 m m_{int}} = \frac{p^2}{2\frac{m m_{int}}{m + m_{int}}}$$

i ako uvedemo oznaku za efektivnu masu:

$$m_{eff} = \frac{m m_{int}}{m + m_{int}} = \frac{m}{1 + \frac{m}{m_{int}}}$$

odakle posle razvoja u red i zanemarivanja viših članova dobijamo:

$$m_{eff} \cong m - \frac{m^2}{m_{int}} = m - \frac{m^2 \hbar^2}{a^2 P_0} \qquad 3.10$$

a to je tražena efektivna masa elektrona.

Sada objasnimo fizički smisao operatora $\hat{H}_{sd}$. Uvedimo oznake:

$$a_{g\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} a_{\nu\sigma} e^{i(\nu,g)} \quad , \quad I(f) = \frac{1}{N} \sum_{\nu} B(\nu) e^{i(f,\nu)} \qquad 3.11$$

Očigledno je da operatori $a^{+}_{\nu,\sigma}$, $a_{\nu\sigma}$ mogu biti interpletirani kao operatori kreacije /radjanja/ i anhilacije /uništavanja/ s - elektrona sa spinom σ u čvoru g. Sa ovim oznakama 3.4 prepisujemo u obliku:

$$\hat{H}_{sd} = -\frac{1}{2} \sum I(f-g) \{ S^{z}_{f} (a^{+}_{g,-1/2} a_{g,-1/2} - a^{+}_{g,1/2} a_{g,1/2}) + S^{x}_{f} (a^{+}_{g,-1/2} a_{g,1/2} + a^{+}_{g,1/2} a_{g,-1/2}) + i S^{y}_{f} (a^{+}_{g,1/2} a_{g,-1/2} - a^{+}_{g,-1/2} a_{g,1/2}) \} \qquad 3.12$$

Uvedimo po definiciji sledeće operatore:

$$\sigma^{x}_{g} = \frac{1}{2} (a^{+}_{g,-1/2} a_{g,+1/2} + a^{+}_{g,1/2} a_{g,-1/2})$$

$$\sigma^{y}_{g} = \frac{i}{2} (a^{+}_{g,1/2} a_{g,-1/2} - a^{+}_{g,1/2} a_{g,1/2}) \qquad 3.13$$

$$\sigma^{z}_{g} = \frac{1}{2} (a^{+}_{g,-1/2} a_{g,-1/2} - a^{+}_{g,1/2} a_{g,1/2})$$

Dopustimo da ti operatori definisani na prostornim funkcijama okupacionog broja,koji pokazuje koliko se čestica nalazi u odredjenom stanju /tačnije na odredjenom energetskom nivou/, zadovoljavaju uslove:

$$n_{f,-1/2} + n_{f,1/2} = 1 \quad , \quad n_{f\sigma} = a^{+}_{f\sigma} a_{f\sigma} \quad (\sigma = \pm 1/2) \qquad 3.14$$

Za s - elektrone uslovi 3.14 ne važe, ali ako tu okolnost zanemarimo onda operator s - d interakcije dobija oblik običnog integrala razmene.

$$\hat{H}_{sd} = - \sum I(f-g) (\sigma_f , \sigma_g) \qquad 3.15$$

Na ovaj način,koji je prihvaćen u teoriji s-d modela, izraz za interakciju s i d elektrona se zaista može interpletirati kao razmena.

II G L A V A

FRELIHOVA TRANSFORMACIJA U MODELU VONSOVSKOG

§4. Frelihova transformacija za elektron-fononsku interakciju

Mikroskopska teorija superprovodnosti bila je sačinjena u poslednje vreme radovima Kupera, Bardina, Šriffera i Bogoljubova. Mi ćemo ovde razmatrati osnovne ideje teorije, koja ilustruje važnost interakcije elektrona metala sa oscilacijama jona u rešetci - fononima, tj. interakciju fermijona sa sistemom bozona.
Kako je poznato otpor metala uslovljava se interakcijom elektrona sa fononima rešetke, koja dovodi do rasejanja elektrona. Frelih je još 1950. godine ukazao da i superprovodnost metala takodje potiče od interakcije elektrona sa fononima rešetke. Pokazano je da takva interakcija pri nekim uslovima dovodi u spektru do prisutnosti energetske pukotine /procepa/ nad osnovnim stanjem. U vezi sa tim pojavljuju se stabilna pobudjena stanja, odgovarajuća provodnost struje kroz metale, što i dovodi do superprovodnosti. U idealnoj rešetci /nepokretno pričvršćeni joni u čvorovima rešetke/ kretanje elektrona u zoni provodnosti definiše se Blohovom funkcijom.

$$\varphi_{\vec{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r})\,\chi_\sigma \qquad 4.1$$

Ovde se nećemo ograničiti na predeo prve Briluenove zone. Elektronska talasna funkcija svih metala, sadrži N provodnih elektrona u zapremini $L^3 = V$, i javlja se antisimetrični proizvod N funkcija 4.1. Osnovno stanje odgovara punim elektronima nižih Blohovskih stanja, tj. zauzeta stanja, i leže u oblasti k - prostranstva unutar površine fermija. Predpostavimo da te površine leže daleko od granice zone i da je izotropna, tj. da predstavlja sferu radijusa k_0. Pri pobudjenju elektroni iz stanja $k < k_0$ prelaze u stanje $k > k_0$. Ako je $E_{\vec{k}}$ - energija stanja elektrona sa kvaziimpulsom $\hbar k$, to predstavljen u drugoj kvantizaciji hamiltonijan sistema elektrona ima oblik:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k},\sigma} E_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} \qquad 4.2$$

gde su a^{+} i a fermi operatori kreacije i anhilacije kvazičestice. Ako je $\xi_{\vec{n}}$ pomeranje atoma /jona/ na mestu $\vec{n}$, onda se interakcija elektrona sa rešetkom $\sum_n W|\vec{r}-\vec{n}|$ promeni na veličinu $\sum_n \xi_{\vec{n}} \{\nabla_n W|\vec{r}-\vec{n}|\}$.

Odavde predstavljen u drugoj kvantizaciji operator elektron-fonon interakcije možemo napisati kao:

$$\hat{H}_{sf} = \int \hat{\Psi}^{+}|\vec{r}| \sum_n \hat{\xi}_n \{\nabla_n W|\vec{r}-\vec{n}|\} \hat{\Psi}|\vec{r}|\, dr = -\int \hat{\Psi}^{+}|\vec{r}| \sum_n W|\vec{r}-\vec{n}| (\nabla_n \hat{\xi}_n) \hat{\Psi}|\vec{r}|\, d^3r \qquad 4.3$$

gde je $\hat{\Psi}$ - operator izražen preko fermi-operatora, $a_{k\sigma}$ i blohove funkcije 4.1 :

$$\hat{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum_{\vec{k},\sigma} a_{\vec{k}\sigma} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}|\vec{r}| \chi_\sigma \qquad 4.4$$

Operator pomeranja jona $\hat{\xi}_{\vec{n}}$ odredjen je sa:

$$(\nabla_n \hat{\xi}_n) = \sum_{\vec{q}} i \sqrt{\frac{\hbar q}{2MNS}} \left(b_q e^{i\vec{q}\vec{n}} - b^{+}_q e^{-i\vec{q}\vec{n}} \right) \qquad 4.5$$

gde su b_q i b^{+}_q - boze operatori anhilacije i kreacije respektivno; s - brzina prostiranja zvučnih talasa u kristalu koja odgovara talasnom vektoru q.

Zamenom 4.4 i 4.5 u 4.3 i uzimajući u obzir da je suma $\sum_{\vec{r}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} = N\cdot\delta_{\vec{Q},0}$ dobijamo konačan izraz operatora elektron-fonon interakcije:

$$\hat{H}_{s,f} = \sum_{\vec{q},\sigma} H_{\vec{q}} \quad , \quad H_{\vec{q}} = i\,D(\vec{q})\, b_{\vec{q}}\, b^{+}_{\vec{q}} \qquad 4.6$$

gde je: $$D(\vec{q}) = \sqrt{\frac{\hbar q}{2ML^3 S}} \int u^{*}_{\vec{k}-\vec{q}}\, W\, u_{\vec{k}}\, d^3 r \qquad 4.7$$

Mala veličina odredjena elektron-fonon interakcijom. Integrali se po jednoj elementarnoj ćeliji. Operator elektron-fonon interakcije 4.6 ne zavisi od spinskog stanja elektrona, zato ćemo dalje izbaciti indeks σ u svim izrazima. Operator 4.6 uzet sa svim predpostavkama: da se jon u rešetci kreću kao jedna celina, da D /$\vec{q}$/ zavisi samo od $\vec{q}$, a ne i od $\vec{k}$ i da vibracije jona u rešetci deluju na longitudinalan i transverzalan talas za sve $\vec{q}$, i da je interakcija 4.5 ostvarljiva samo sa longitudinalnim fononima. Bez svih ovih uprošćenja izračunavanje bi bilo jako složeno. Medjutim, takva složenost opravdava se samo pri neophodnosti dobijanja kvantitativnih rezultata, što nama u ovom radu nije zadatak. Zbog interakcije elektrona sa fononima menja se energetsko stanje elektrona i fonona. Nas interesuje samo ponašanje elektrona, dok se promena spektra fonona pod uticajem elektrona neće uzimati u obzir zbog samog cilja ovog rada.

Dakle, sistem elektrona u interakciji sa fononima će biti opisan hamiltonijanom:

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 + \hat{H}_{s,f} \quad , \quad \hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}}\, a^{+}_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}}\, b^{+}_{\vec{q}} b_{\vec{q}} \qquad 4.8$$

gde je $\hat{H}_{sf}$ odredjeno formulom 4.6.

Izvodjenje za ocenu uloge elektron-fonon interakcije je predložio Frelih zamenom operatora 4.8 da bi se dobilo što više operatora interakcije.

Vršimo unitarnu transformaciju hamiltonijana $\hat{H}$:

$$\hat{H} = e^{-i\hat{S}}\hat{H}'e^{i\hat{S}} = [1 - i\hat{S} + \frac{(-i\hat{S})^2}{2} + \cdots]\hat{H}'[1 + i\hat{S} + \frac{(i\hat{S})^2}{2} + \cdots]$$
$$= (1 - i\hat{S} - \frac{\hat{S}^2}{2})\hat{H}'(1 + i\hat{S} - \frac{\hat{S}^2}{2})$$

gde je $\hat{S}$ operator veličine $\hat{H}_{sf}$. Mi idemo do veličine S^2 /H^2_{sf}/, a članove višeg reda veličine zanemarujemo.

$$\hat{H} = H' + iH'S^2 - iSH' + SH'S + \frac{i}{2}SH'S^2 - \frac{S^2}{2}H' - \frac{i}{2}S^2H'S^2 + \frac{1}{4}SH'S^2 =$$
$$= H' + i(H'S - SH') - \frac{1}{2}(H'S - SH)S + \frac{1}{2}S(H'S - SH') = H' + i[H',S] -$$
$$- \frac{1}{2}[H',S]S + \frac{1}{2}S[H',S] = \hat{H}' + i[\hat{H}',S] - \frac{1}{2}[[\hat{H}',S],S]$$

Izmenjen hamiltonijan bez članova viših redova koje smo zanemarili izgleda ovako:

$$\hat{H} = \hat{H}' + i[\hat{H}',S] - \frac{1}{2}[[\hat{H}',S],S] + \cdots\cdots \tag{4.9}$$

Operator izmene sadrži interakcije izabrane u obliku:

$$S = S^+ = \sum_q S_q \quad , \quad S_q = \tau_q b_{-q} + \tau_q^+ b_q^+ \tag{4.10}$$

gde je: $\tau_q = \sum \phi(\vec{k},\vec{q})\, a^+_{\vec{k}}\, a_{\vec{k}-\vec{q}}$ (4.11)

Funkcije $\phi(\vec{k},\vec{q})$ su proizvoljne funkcije od /$\vec{k},\vec{q}$/ koje ćemo kasnije odrediti i one su povezane interakcijom.

Zamenom 4.8 i 4.10 u 4.9 nalazimo uzimajući u obzir i 4.6:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_q \{i[H_0,S_q] + H_q\} + i\sum_q [(\frac{i}{2}[H_0,S_q] + H_q),S_q]$$
$$\hat{H}_1 = \sum_q \{i[H_0,S_q] + H_q\} \quad , \quad \hat{H}_2 = i\sum_q [(\frac{i}{2}[H_0,S_q] + H_q),S_q] \tag{4.12}$$

Ovaj operator se lako računa jer smo uzeli u obzir da fermi-operatori komutiraju sa boze-operatorima, i odmah smo uredili po stepenima od S.

Iz svojstva fermi-operatora sledi:

$$[a^+_k a_l , a^+_m a_n] = \delta_{lm} a^+_k a_n - \delta_{kn} a^+_m a_l \tag{4.13}$$

Koristeći 4.11 i 4.13 računamo komutatore iz $\hat{H}$.

$$[a^+_k a_k , \tau_q] = \phi(k,q)\, a^+_k a_{k-q} - \phi(k+q,q)\, a^+_{k+q} a_k$$

$$[a^+_{k-q} a_k , \tau_q] = \phi(k,q)\, [a^+_{k-q} a_{k-q} - a^+_k a_k]$$

$$[a^+_k a_{k-q} , \tau_q] = \phi(k-q,q)\, a^+_k a_{k-2q} - \phi(k+q,q)\, a^+_{k+q} a_{k-q}$$

$$[b^+_q b_q , b_q] = -b_q$$

Koristeći nadjene veze za drugi član 4.12, se posle jednostavnih ali dužih algebarskih svodjenja dobija:

$$\hat{H}_1 = i[H_0, S_2] + H_2 = i\left\{\sum_{k}(E_k - E_{k-q} - \hbar\omega_q)\,\phi(k,q) + D(q)\right\} b_k a_k^+ a_{k-q} \qquad 4.14$$

Sada izaberemo funkciju $\phi(\vec{k},\vec{q})$ tako da ceo izraz 4.14 tj. $\hat{H}_1$ bude jednak nuli. Odatle sledi:

$$\phi(\vec{k},\vec{q}) = -\frac{D(\vec{q})}{E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}} \qquad 4.15$$

Sada nalazimo:

$$\frac{i}{2}[H_0, S_2] + H_2 = \frac{i}{2}\sum_{k} D(\vec{q})\, b_k a_k^+ a_{k-q}$$

sledi

$$\hat{H}_2 \equiv i\sum_{q}\left[\left(\frac{i}{2}[H_0, S_2] + H_2\right), S_2\right] = -\frac{1}{2}\sum\left\{D(q)[b_q a_k^+ a_{k-q}, \gamma_q b_q^+] - D^*(q)[b_q a_{k-q} a_k, \gamma_q b_q]\right\} \qquad 4.16$$

Usrednjavanjem nastalog člana po vakuumskom stanju fonona nalazimo koristeći 4.15 i 4.11:

$$\langle 0|\hat{H}_2|0\rangle = -\sum_{\vec{k},\vec{q}} \frac{|D(\vec{q})|^2\, a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}-\vec{q}}^+ a_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}} \qquad 4.17$$

Izvodjenje ove Frelihove transformacije ima smisla samo pri uslovima da je funkcija 4.15 mala, u protivnom red 4.9 neće biti pogodan.

Znači, takvim načinom se naše aproksimacije mogu primeniti samo na deo $\hat{H}_{sf}$, koji ne sadrži $\vec{q}$, pri kojima je imenitelj 4.15 blizak nuli. Označimo sa $\hat{H}^q_{sf}$ deo $\hat{H}_{sf}$ koji zavisi od $\vec{q}$, pa hamiltonijan elektrona metala /sa tačnošću do kvadratnih članova operatora interakcije/ u vakuumskom stanju izgleda:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} - \sum_{\vec{k},\vec{q}}^{(q)} \frac{|D(q)|^2\, a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}-\vec{q}}^+ a_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}} \qquad 4.18$$

Drugi sabirak u 4.18 se može interpletirati kao energija interakcije izmedju elektrona, uslovljena virtuelnom razmenom samih fonona. Pri tome svaki sabirak u sumi odgovara interakciji izmedju elektrona sa kvazi-impulsima $\hbar\vec{k}$ i $\hbar\vec{k}' = \hbar/\vec{k} - \vec{q}/$.

Pri $\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q} = -\vec{k}$ sledi:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} b^{+}_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} V(\vec{q})\, a^{+}_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} a^{+}_{-\vec{k}} a_{\vec{k}} \qquad 4.19$$

gde je

$$V(\vec{q}) = \frac{|D(\vec{q})|^2}{\hbar \omega_{\vec{q}}} > 0 \quad ; \; \vec{q} = 2\vec{k} \neq 0$$

Efekat elektron - fonon interakcije je po Frelihu dat sa izrazom 4.17.

§5. Analogija elektron-fononske i s-d- interakcije

Ovde je dat hamiltonijan Vonsovskog preko Frelihove transformacije. Hamiltonijan Vonsovskog je dat sa 3.1.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sd}$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{ss} + \hat{H}_{dd} = \sum_{\vec{k},\sigma} E_\sigma(\vec{k})\, a^+_\sigma(\vec{k})\, a_\sigma(\vec{k}) - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} I(\vec{n},\vec{m})\,(S_{\vec{n}}, S_{\vec{m}}) \qquad 5.1$$

Interakcija valentnih elektrona i elektrona sa lokalizovanim spinom je data sa 3.12:

$$\hat{H}^{(sd)}_{int} = -\frac{1}{2}\sum I(\vec{n}-\vec{m})\Big\{ S^z_{\vec{n}}\big(a^+_{\vec{m},-1/2} a_{\vec{m},-1/2} - a^+_{\vec{m},1/2} a_{\vec{m},1/2}\big) + S^x_{\vec{n}}\big(a^+_{\vec{m},-1/2} a_{\vec{m},1/2} + a^+_{\vec{m},1/2} a_{\vec{m},-1/2}\big) + i S^y_{\vec{n}}\big(a^+_{\vec{m},-1/2} a_{\vec{m},-1/2} - a^+_{\vec{m},-1/2} a_{\vec{m},1/2}\big)\Big\} \qquad 5.2$$

gde su u 3.12 indeksi f i g zamenjeni sa $\vec{n}$ i $\vec{m}$ i gde je $S^\alpha_{\vec{n}}$ - operator spina elektrona koji pripada čvoru $\vec{n}$; $E_{\vec{k},\sigma}$ - energija elektrona u stanju $/\vec{k},\vec{\sigma}/$; I-integral razmene koji ulazi kao fenomenološki faktor u teoriji. Ovde takodje važi da je:

$$I(\vec{n},\vec{m}) = I(\vec{m},\vec{n}) = I(\vec{n}-\vec{m})$$

Sada je zgodno hamiltonijan s-d- interakcije izraziti preko S^-_n, S^+_n i S^z_n operatora gde je:

$$(S_{\vec{n}}, S_{\vec{m}}) = S^x_{\vec{n}} S^x_{\vec{m}} + S^y_{\vec{n}} S^y_{\vec{m}} + S^z_{\vec{n}} \cdot S^z_{\vec{m}}$$

$$S^\pm_{\vec{n}} = S^x_{\vec{n}} \pm i S^y_{\vec{n}} \qquad 5.3$$

Iz gornje relacije sledi:

$$S^x_{\vec{n}} = \frac{S^+_{\vec{n}} + S^-_{\vec{n}}}{2}\ ; \quad i S^y_{\vec{n}} = \frac{S^+_{\vec{n}} - S^-_{\vec{n}}}{2}\ ; \quad S^z_{\vec{n}} = S^z_{\vec{n}} \qquad 5.4$$

S obzirom na relacije 5.4 hamiltonijan s-d - interakcije postaje:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{1}{2}\sum I(\vec{n}-\vec{m})\Big\{ S^z_{\vec{n}}\big(a^+_{\vec{m},-1/2} a_{\vec{m},-1/2} - a^+_{\vec{m},1/2} a_{\vec{m},1/2}\big) + \frac{S^+_{\vec{n}} + S^-_{\vec{n}}}{2}\big(a^+_{\vec{m},-1/2} a_{\vec{m},1/2} + a^+_{\vec{m},1/2} a_{\vec{m},-1/2}\big) + \frac{S^+_{\vec{n}} - S^-_{\vec{n}}}{2}\big(a^+_{\vec{m},1/2} a_{\vec{m},-1/2} - a^+_{\vec{m},-1/2} a_{\vec{m},1/2}\big)\Big\}$$

Posle množenja i elementarnog svodjenja dobijamo:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} I|\vec{n}-\vec{m}|\{S^z_{\vec{n}}(a^+_{\vec{m},-1/2}a_{\vec{m},-1/2} - a^+_{\vec{m},1/2}a_{\vec{m},1/2})+ + S^+_{\vec{n}}a^+_{\vec{m},1/2}a_{\vec{m},-1/2} + S^-_{\vec{n}}a^+_{\vec{m},-1/2}a_{\vec{m},1/2}\} \qquad 5.5$$

Prema Blohovoj aproksimaciji za spinske operatore imamo:

$$S^-_{\vec{n}} \cong \sqrt{2S}\, b^+_{\vec{n}}$$
$$S^+_{\vec{n}} \cong \sqrt{2S}\, b_{\vec{n}} \qquad 5.6$$
$$S^z_{\vec{n}} \cong S - b^+_{\vec{n}}b_{\vec{n}}$$

Ove aproksimacije važe pod uslovom da broj bozona nije veći od 2S, jer za stanja kada je broj bozona veći od 2S kažemo da su nefizička, i ona mogu dati nekontrolisane greške. Ovde su $b_{\vec{n}}$ i $b^+_{\vec{n}}$ boze - operatori, gde je $b^+_{\vec{n}}$ kreacioni operator tj.:

$$b^+_{\vec{n}}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \qquad 5.7$$

, znači kada deluje na stanje sa n bozona on kreira jednu kvazi-česticu.

$b_{\vec{n}}$ je anhilacioni operator, tj.:

$$b_{\vec{n}}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad 5.8$$

, znači kada deluje na stanje od n bozona uništava /anhilira/ jednu kvazi-česticu.

Komutacione relacije za njih su:

$$[b_{\vec{n}}, b^+_{\vec{m}}] = \delta_{\vec{n},\vec{m}} \;;\; [b_{\vec{n}}, b_{\vec{m}}] = [b^+_{\vec{n}}, b^+_{\vec{m}}] = 0 \qquad 5.9$$

Koristeći Blohove aproksimacije za spinske operatore za opšti spin S, hamiltonijan interakcije 5.5 postaje:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} I(|\vec{n}-\vec{m}|)\{(S - b^+_{\vec{n}}b_{\vec{n}})(a^+_{\vec{m},-1/2}a_{\vec{m},-1/2} - a^+_{\vec{m},1/2}a_{\vec{m},1/2})+ + \sqrt{2S}\, b_{\vec{n}}a^+_{\vec{m},1/2}a_{\vec{m},-1/2} + \sqrt{2S}\, b^+_{\vec{n}}a^+_{\vec{m},-1/2}a_{\vec{m},1/2}\}$$

Ako je broj pobudjenih stanja mali zanemarujemo $b^+_{\vec{n}}b_{\vec{n}}$ u odnosu na S gde je $b^+_{\vec{n}}b_{\vec{n}} = N_{\vec{n}}$, a $\hat{N} = \sum_{\vec{n}} N_{\vec{n}}$ operator broja čestica.

Isto tako nas i korišćenje Blohove aproksimacije obavezuje da odbacimo sve članove četvrtog reda po operatorima, što se u krajnjem rezultatu svodi na rečeno u prethodnoj rečenici. Uzevši ovo u obzir dobijamo:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m})\{S(a^+_{\vec{n},-1/2}a_{\vec{m},-1/2} - a^+_{\vec{n},1/2}a_{\vec{m},1/2}) + \sqrt{2S}\, b_{\vec{n}}\, a^+_{\vec{m},1/2}a_{\vec{m},-1/2} + \sqrt{2S}\, b^+_{\vec{n}}\, a^+_{\vec{m},-1/2}a_{\vec{m},1/2}\} \qquad 5.10$$

Sada da bi dobijeni hamiltonijan transformisali prelazimo u prostor talasnih vektora $\vec{k}$ pomoću Furije transformacije:

$$a_{\vec{n}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_2\sigma}\, e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{n}} \quad ; \quad a^+_{\vec{n},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}_1} a^+_{\vec{k}_1,\sigma}\, e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{n}} \qquad 5.11$$

$$I(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}} I(\vec{n})\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}} \qquad 5.12$$

I - je realno jer uzima simetrične vrednosti tj. kristal ima centar inverzije.

Sada transformišemo član po član hamiltonijana 5.1o koji možemo napisati ovako: $\hat{H}_{int} = \hat{H}^{I}_{int} + \hat{H}^{II}_{int} + \hat{H}^{III}_{int} + \hat{H}^{IV}_{int}$

$$\hat{H}^{IV}_{int} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m})\sqrt{2S}\, b^+_{\vec{n}}\, a^+_{\vec{m},-1/2}a_{\vec{m},1/2} = -\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2S}}{N\cdot\sqrt{N}}\sum_{\vec{n},\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m})\sum_{\vec{q}} b^+_{\vec{q}}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{n}} \qquad 5.13$$

$$\times \sum_{\vec{k}_1} a^+_{\vec{k}_1,-1/2}\, e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{m}} \times \sum_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_2,1/2}\, e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{m}} = -\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2S}}{N\sqrt{N}}\sum_{\vec{n},\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m})\,\cdot$$

$$\cdot\, b^+_{\vec{q}}\, a_{\vec{k}_1,-1/2}\, a_{\vec{k}_2,1/2}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{n} - i\vec{k}_1\cdot\vec{m} - i\vec{k}_2\cdot\vec{m}} =$$

uvodimo smenu $\vec{n}-\vec{m}=\vec{S}$, sledi $\vec{n}=\vec{S}+\vec{m}$

$$= -\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2S}}{N\sqrt{N}}\sum_{\substack{S,m,q\\k_1,k_2}} I(\vec{S})\, b^+_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}_1,-1/2}\, a_{\vec{k}_2,1/2}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{S}} \times e^{-i\vec{q}\cdot\vec{m} - i\vec{k}_1\vec{m} + i\vec{k}_2\vec{m}} =$$

$$= \sqrt{2S}\sum_{q,k_1,k_2}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{S}} I(\vec{S})\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{S}}\, b^+_{\vec{q}}\, a_{\vec{k}_1,-1/2}a_{\vec{k}_2,1/2}\,\frac{1}{N}\sum_{m} e^{i(-\vec{q}-\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{m}}$$

Uvodimo sada smenu $\vec{k}_1=\vec{k}_2-\vec{q}$ i $\vec{k}_2=\vec{k}$, i ako još uzmeno u obzir periodičnost graničnih uslova u prostoru dobijamo:

$$= -\frac{1}{2}\sqrt{2S}\sum_{q,k_1,k}\frac{I(\vec{q})}{\sqrt{N}}\, b^+_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}\, a_{\vec{k},1/2}\cdot\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}}$$

što se zbog pojave $\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}}$ svodi na:

$$\hat{H}^{IV}_{int} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2S}{N}}\sum_{\vec{k},\vec{q}} I(\vec{q})\, b^+_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}\, a_{\vec{k},1/2} \qquad 5.14$$

Predzadnji član je samo adjungovan pa imamo neponavljajući račun:

$$\hat{H}^{III}_{int} = -\frac{1}{2}\sum_{n,m} I|\vec{n}-\vec{m}|\sqrt{2S}\, b_{\vec{n}}\, a^{+}_{\vec{m},1/2}\, a_{\vec{m},-1/2} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2S}{N}}\sum_{k,q} I^{+}(\vec{q})\, b_{\vec{q}}\, a^{+}_{\vec{k},1/2}\, a_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} \qquad 5.15$$

Kada se ova dva člana saberu dobijamo:

$$H'_{int} = \hat{H}^{III}_{int} + \hat{H}^{IV}_{int} = \sum_{\vec{q}} H_{\vec{q}} \qquad 5.16$$

gde je:

$$H_{\vec{q}} = -\frac{1}{2}\cdot\sqrt{\frac{2S}{N}}\, I(\vec{q})\left\{ b_{\vec{q}}\sum_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{k},1/2}\, a_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} + b^{+}_{\vec{q}}\sum_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}\, a_{\vec{k},1/2}\right\} \qquad 5.17$$

Znači ovaj član je dodatak energiji elektrona.

Za prvi član se dobija posle unitarne Furije transformacije:

$$\hat{H}^{I}_{int} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} S\cdot I|\vec{n}-\vec{m}|\, a^{+}_{\vec{m},-1/2}\, a_{\vec{m},-1/2} = \sum_{\vec{n},\vec{m}} I|\vec{n}-\vec{m}|\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1} a^{+}_{\vec{k}_1,-1/2}\, e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{m}} \times$$

$$\times \sum_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_2,-1/2}\, e^{i\vec{k}_2\vec{m}} = \sum_{\vec{n},\vec{m}} I|\vec{n}-\vec{m}|\frac{1}{N}\, a^{+}_{\vec{k}_1,-1/2}\, a_{\vec{k}_2,-1/2}\, e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{m}} =$$

Ako isto uvedemo smenu $\vec{n}-\vec{m}=\vec{S}$ tj. $\vec{m}=\vec{n}-\vec{S}$

$$= -\frac{S}{2}\sum_{\vec{n},\vec{S}} I(\vec{S})\, e^{i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{S}}\, a^{+}_{\vec{k}_1,-1/2}\, a_{\vec{k}_2,-1/2}\frac{1}{N}\sum e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{n}} =$$

stavljajući $\vec{k}_2 = \vec{k}$

$$= -\frac{S}{2}\sum_{k_1,k}\left\{\sum_{S} I(\vec{S})\, a^{+}_{\vec{k}_1,-1/2}\, a_{\vec{k},-1/2}\, \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}}\right.$$

pa dobijamo:

$$\hat{H}^{I}_{int} = -\frac{S}{2} J_0 \sum a^{+}_{\vec{k},-1/2}\, a_{\vec{k},-1/2} \qquad 5.18$$

gde je

$$J_0 = \sum_{\vec{S}} I(\vec{S})$$

Slično i za $\hat{H}^{II}_{int}$ kada se izvrši Furije transformacija dobija se:

$$\hat{H}^{II}_{int} = \frac{S}{2}\sum_{n,m} I|\vec{n}-\vec{m}|\, a^{+}_{\vec{m},1/2}\, a_{\vec{m},1/2} = \frac{S}{2}\sum_{n,m} I|\vec{n}-\vec{m}|\frac{1}{N}$$

$$\sum_{\vec{k}_1} a^{+}_{\vec{k}_1,1/2}\, e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{m}} \times \sum_{k_2} a_{\vec{k}_2,1/2}\, e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{m}} =$$

$$= \frac{S}{2}\sum I|\vec{n}-\vec{m}|\frac{1}{N}\, a^{+}_{\vec{k}_1,1/2}\, a_{\vec{k}_2,1/2}\, e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{m}}$$

Uvedimo isto smenu $\vec{n}-\vec{m}=\vec{S}$ tj. $\vec{m}=\vec{n}-\vec{S}$ i stavimo da je $\vec{k}_2=\vec{k}$ i uzimajući u obzir periodičnost graničnih uslova u prostoru talasnih vektora $\vec{k}$, dobijamo:

$$\hat{H}^{\vec{k}}_{int} = \frac{S}{2} J_0 \sum_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{k},1/2} a_{\vec{k},1/2} \qquad 5.19$$

gde je $\quad J_0 = \sum_{\vec{S}} I(\vec{S})$

Sabirajući prema 5.13 izraze date sa 5.16, 5.18 i 5.19 dobija se hamiltonijan s-d- interakcije:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{\vec{q}} H_{\vec{q}} - \frac{1}{2} J_0 S \sum_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{k},-1/2} a_{\vec{k},-1/2} + \frac{1}{2} J_0 S \sum_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{k},1/2} a_{\vec{k},1/2} \qquad 5.20$$

gde je $H_{\vec{q}}$ dato sa 5.17.

Izvršimo sada transformaciju $\hat{H}_0$ koje je prema 5.1 jednako:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{ss} + \hat{H}_{dd} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k},1/2} a^{+}_{\vec{k},1/2} a_{\vec{k},1/2} + \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k},-1/2} a^{+}_{\vec{k},-1/2} a_{\vec{k},-1/2} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n},\vec{m}} I(\vec{n},\vec{m}) (S_{\vec{n}}, S_{\vec{m}})$$

Ako predjemo na operatore $S^{-}_{\vec{n}}$, $S^{+}_{\vec{n}}$ i $S^{z}_{\vec{n}}$ pomoću 5.3 i 5.4 dobijamo za $\hat{H}_{dd}$:

$$\hat{H}_{dd} = E_0 + S J_0 \sum_{\vec{n},\vec{m}} (S - S^{z}_{\vec{n}}) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n},\vec{m}} I_{\vec{n},\vec{m}} S^{-}_{\vec{n}} S^{+}_{\vec{m}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n},\vec{m}} I_{\vec{n},\vec{m}} (S - S^{z}_{\vec{n}})(S - S^{z}_{\vec{m}}) \qquad 5.21$$

Ovaj izraz posle Blohovih aproksimacija i zanemarivanja članova po operatorima četvrtog reda dovodi do blohovskog /Bl/ hamiltonijana $\hat{H}_{dd}$:

$$\hat{H}^{(Bl)}_{dd} = E_0 + S J_0 \sum_{\vec{n}} b^{+}_{\vec{n}} b_{\vec{n}} - S \sum_{\vec{n},\vec{m}}{}' I(\vec{n}-\vec{m}) b^{+}_{\vec{n}} b_{\vec{n}} \qquad 5.22$$

gde prim /'/ na sumi označava da se ne sumira član za $\vec{n}=\vec{m}$.

Posle Furije transformacija:

$$I(\vec{n}-\vec{m}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} I(\vec{q})\, e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{m})} \; ; \quad b^{+}_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}_1} b^{+}_{\vec{q}_1} e^{-i\vec{q}_1 \vec{n}} \qquad 5.23$$

izmenjeni hamiltonijan $\hat{H}^{/Bl/}_{dd}$ je:

$$\hat{H}^{(0)}_{dd} = \hat{H}^{(Bl)}_{dd} - E_0 = \sum_{\vec{q}} S [J_0 - J(\vec{q})] b^{+}_{\vec{q}} b_{\vec{q}} \qquad 5.24$$

Odavde sledi i energija magnona /energija elementarne ekscitacije spinskog sistema/:

$$E_M(\vec{q}) = S [J_0 - J(\vec{q})] \qquad 5.25$$

Sada je $\hat{H}_0$ jednako:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}^{(0)}_{dd} + \hat{H}_{ss} = \sum_{\vec{q}} E_M(\vec{q})\, b^+_{\vec{q}} b_{\vec{q}} + \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k},1/2} a^+_{\vec{k},1/2} a_{\vec{k},1/2} + \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k},-1/2} a^+_{\vec{k},-1/2} a_{\vec{k},-1/2} \qquad 5.26$$

Ako sada ukupni hamiltonijan obeležimo sa:

$$\hat{H} = \hat{H}'_0 + \hat{H}'_{int} \qquad 5.27$$

gde je $\hat{H}'_{int}$ dato sa 5.16 i 5.17, a $\hat{H}'_0$ će biti:

$$\hat{H}'_0 = H^{I}_{int} + H^{II}_{int}$$

tj. ako se zamene izrazi 5.26, 5.18 i 5.19 i srede dobija se:

$$\hat{H}'_0 = \sum_{\vec{k}} \left(E_{\vec{k},-1/2} - \frac{1}{2} J_0 S\right) a^+_{\vec{k},-1/2} a_{\vec{k},-1/2} + \sum_{\vec{k}} \left(E_{\vec{k},1/2} + \frac{1}{2} J_0 S\right) a^+_{\vec{k},1/2} a_{\vec{k},1/2} + $$
$$+ \sum_{\vec{q}} E_M(\vec{q})\, b^+_{\vec{q}} b_{\vec{q}} \qquad 5.28$$

Po analogiji sa elektron-fononskom interakcijom izvršimo unitarnu transformaciju hamiltonijana:

$$\hat{H}' = e^{-i\hat{S}} \hat{H} e^{i\hat{S}} = \left[1 - i\hat{S} + \frac{(-i\hat{S})^2}{2} + \dots\right] \hat{H} \left[1 + i\hat{S} + \frac{(i\hat{S})^2}{2} + \dots\right] = \left(1 - i\hat{S} - \frac{\hat{S}^2}{2} \dots\right) \hat{H} \left(1 + i\hat{S} - \frac{\hat{S}^2}{2} + \dots\right)$$

gde je $\hat{S}$ operator veličine $\hat{H}_{int}$. Mi idemo do veličine S^2, tj. H^2_{int}, pa dobijamo:

$$\hat{H}' = H + iHS - \frac{1}{2}HS^2 - iSH + SHS + \cancel{\frac{i}{2}SHS^2} - \frac{S^2}{2}H - \cancel{\frac{i}{2}S^2HS^2} + \frac{1}{4}SHS^2 =$$
$$= H + i[H,S] - \frac{1}{2}[H,S]\cdot S + \frac{1}{2}S\cdot[H,S] = \hat{H} + i[\hat{H},\hat{S}] - \frac{1}{2}[[\hat{H},\hat{S}],\hat{S}]$$

Izmenjen hamiltonijan ima oblik:

$$\hat{H}' = \hat{H} + i[\hat{H},\hat{S}] - \frac{1}{2}[[\hat{H},\hat{S}],\hat{S}] = \hat{H}'_0 + \hat{H}'_{int} + i[\hat{H}'_{int},\hat{S}] -$$
$$- \frac{1}{2}[[H_0,S],S] - \frac{1}{2}\cancel{[[H'_{int},S],S]} \qquad 5.29$$

Precrtani članovi su zanemareni kao članovi višeg reda po $\hat{S}$. Operator izmene sadrži interakcije koje biramo u obliku:

$$S = S^+ = \sum_{\vec{q}} S_{\vec{q}} \quad , \quad S_{\vec{q}} = \gamma_{\vec{q}} b_{\vec{q}} + \gamma^+_{\vec{q}} b^+_{\vec{q}} \qquad 5.30$$

gde je:

$$\gamma_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} \phi(\vec{q},\vec{k})\, a^+_{\vec{k},1/2} a_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} \qquad 5.31$$

Funkcije $\phi(\vec{k},\vec{q})$ su povezane interakcijom.

Sada uvodimo sume i pošto su to boze - operatori, odmah svodimo prvu sumu i uredjujemo po stepenima od $\hat{S}$:

$$\hat{H}' = H_0' + \sum_{\vec{q}} H_{\vec{q}} + i\sum_{\vec{q}} [H_0', S_{\vec{q}}] + i\sum_{\vec{q}} [H_{\vec{q}}, S_{\vec{q}}] - \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}} [[H_0', S_{\vec{q}}], S_{\vec{q}}] =$$

$$= H_0' + \sum_{\vec{q}} H_{\vec{q}} + i[H_0', S_{\vec{q}}] + \sum_{\vec{q}} [(i H_{\vec{q}} - \frac{1}{2}[H_0', S_{\vec{q}}]), S_{\vec{q}}] \qquad 5.32$$

odnosno: $\hat{H}' = \hat{H}_0' + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$

gde su: $\hat{H}_1 = \sum_{\vec{q}} H_{\vec{q}} + i[H_0', S_{\vec{q}}]$

$$\hat{H}_2 = \sum_{\vec{q}} [(i H_{\vec{q}} - \frac{1}{2}[H_0', S_{\vec{q}}]), S_{\vec{q}}] \qquad 5.33$$

Opšti obrazac za komutator četiri operatora je:

$$[a_k^+ a_l, a_m^+ a_n] = a_k^+ a_n \delta_{m,l} - a_m^+ a_l \delta_{k,n}$$

Sada izračunajmo $[H_0', S_{\vec{q}}]$ uzimajući u obzir 5.28 i 5.30:

$$[H_0', S_{\vec{q}}] = [H_0', \gamma_q h_q + \gamma_q^+ h_q^+] = [\sum_k \{(E_{k,-1/2} - \frac{1}{2} J_0 S) a_{k,-1/2}^+ a_{k,-1/2} + (E_{k,1/2} + \frac{1}{2} J_0 S) a_{k,1/2}^+ a_{k,1/2}\} +$$

$$+ \sum_q E_n(q) [h_q^+ h_q, \gamma_q h_q + \gamma_q^+ h_q^+]$$

$$[H_0', S_{\vec{q}}] = \sum_{\vec{k}} (E_{\vec{k},-1/2} - \frac{1}{2} J_0 S) [a_{\vec{k},-1/2}^+ a_{\vec{k},-1/2}; \gamma_q h_q + \gamma_q^+ h_q^+] + \qquad 5.34$$

$$+ \sum_{\vec{k}} (E_{\vec{k},1/2} + \frac{1}{2} J_0 S) [a_{\vec{k},1/2}^+ a_{\vec{k},1/2}; \gamma_{\vec{q}} h_{\vec{q}} + \gamma_{\vec{q}}^+ h_{\vec{q}}^+] + \sum_{\vec{q}} E_n(\vec{q}) [h_{\vec{q}}^+ h_{\vec{q}}, \gamma_{\vec{q}} h_{\vec{q}} + \gamma_{\vec{q}}^+ h_{\vec{q}}^+]$$

Sada ćemo izračunati sledeće izraze koji se javljaju u 5.34 uzimajući u obzir i 5.31:

$$[a_{\vec{k},-1/2}^+ a_{\vec{k},-1/2}, \gamma_{\vec{q}}] = \sum_{k'} \phi(k', q) [a_{k,-1/2}^+ a_{k,-1/2}, a_{k',-1/2}^+ a_{k'-q,-1/2}] = -\sum \phi(k', q) \cdot$$

$$\cdot a_{\vec{k}',1/2}^+ a_{\vec{k},-1/2} \delta_{\vec{k},\vec{k}'-\vec{q}}$$

za $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ dobija se:

$$[a_{\vec{k},-1/2}^+ a_{\vec{k},-1/2}, \gamma_{\vec{q}}] = -\phi(\vec{k}+\vec{q}, \vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q},1/2}^+ a_{\vec{k},-1/2} \qquad 5.35$$

$$[a_{\vec{k},-1/2}^+ a_{\vec{k},1/2}, \gamma_{\vec{q}}^+] = \sum_{k'} \phi^*(k', q) [a_{k,-1/2}^+ a_{k,1/2}, a_{k'-q,-1/2} a_{k',1/2}] =$$

$$= \sum_{k'} \phi^*(k', q) [a_{\vec{k},-1/2}^+ a_{\vec{k}',1/2} \delta_{\vec{k},\vec{k}'-\vec{q}}$$

za $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ je:

$$[a_{\vec{k},-1/2}^+ a_{\vec{k},1/2}, \gamma_{\vec{q}}] = \phi^*(\vec{k}+\vec{q}, \vec{q}) a_{\vec{k},-1/2}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},1/2} \qquad 5.36$$

$$[a_{\vec{k},1/2}^+ a_{\vec{k},1/2}, \gamma_{\vec{q}}] = \sum_{k'} \phi(k', q) [a_{k,1/2}^+ a_{k,1/2}, a_{k',1/2}^+ a_{k'-q,-1/2}] =$$

$$= \sum_{k'} \phi(\vec{k}', \vec{q}) a_{\vec{k},1/2}^+ a_{\vec{k}'-\vec{q},-1/2} \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$$

tj. za $\vec{k}' = \vec{k}$ dobija se:

$$[a_{\vec{k},1/2}^+ a_{\vec{k},1/2}, \gamma_{\vec{q}}] = \phi(\vec{k}, \vec{q}) a_{\vec{k},1/2}^+ a_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} \qquad 5.37$$

$$[a_{\vec{k},1/2}^+ a_{\vec{k},1/2}, \gamma_{\vec{q}}^+] = \sum_{k'} \phi^*(k', q) [a_{k,1/2}^+ a_{k,1/2}, a_{k'-q,-1/2}^+ a_{k',1/2} =$$

$$= -\sum_{k'} \phi^*(\vec{k}', \vec{q}) a_{\vec{k},1/2}^+ a_{\vec{k}'-\vec{q},-1/2} \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$$

za $\vec{k}' = \vec{k}$ je:

$$[a_{\vec{k},1/2}^+ a_{\vec{k},1/2}, \gamma_{\vec{q}}^+] = -\phi^*(\vec{k}, \vec{q}) a_{\vec{k},1/2}^+ a_{\vec{k}-\vec{q},-\frac{1}{2}} \qquad 5.38$$

Posle kraćeg računa dobija se i za:

$$[b_q^+ b_q, b_q] = -b_q \quad ; \quad [b_q^+ b_q, b_q^+] = b_q^+ \qquad 5.39$$

Sada se za 5.34 dobija:

$$[H_0', S_q] = -\sum_k (E_{k,-1/2} - \tfrac{1}{2} J_0 S)\, \phi(k+q, q)\, a^+_{k+q,1/2} a_{k,-1/2} b_q + \sum_k (E_{k,-1/2} - \tfrac{1}{2} J_0 S)\, \phi^*(k+q, q)$$
$$a^+_{k,-1/2} a_{k+q,1/2} b_q^+ + \sum (E_{k,1/2} + \tfrac{1}{2} J_0 S)\, \phi(k,q)\, a^+_{k,1/2} a_{k-q,-1/2} b_q - \sum (E_{k,1/2} + \tfrac{1}{2} J_0 S)$$
$$\phi^*(k,q)\, a^+_{k,1/2} a_{k-q,-1/2} b_q^+ - \sum_q E_M(q)\, b_q\, \phi(k,q)\, a^+_{k,1/2} a_{k-q,-1/2} + \sum_q E_M(q)\, b_q^+\, \phi^*(k,q)$$
$$a^+_{k-q,-1/2} a_{k,1/2} = \sum_k \{E_{k,1/2} + \tfrac{1}{2} J_0 S - E_{k-q,-1/2} + \tfrac{1}{2} J_0 S - E_M(q)\}\, \phi(k,q)\, b_q$$
$$a^+_{k,1/2} a_{k-q,-1/2} - \sum \{E_{k,1/2} - E_{k-q,-1/2} + J_0 S - E_M(q)\}\, \phi^*(k,q)\, b_q^+ a^+_{k-q,-1/2} a_{k,1/2}$$

Sada dobijamo s obzirom na 5.17 i 5.33 za:

$$H_q + i[H_0', S_q] = \sum_{\vec{k}} \{i[E_{\vec{k},1/2} - E_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} + J_0 S - E_M(\vec{q})]\, \phi(\vec{k},\vec{q}) - \sqrt{\tfrac{S}{2N}}\, I(\vec{q})\}$$
$$b_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k},1/2} a_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} - \sum_{\vec{k}} \{i[E_{\vec{k},1/2} - E_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} + J_0 S - E_M(\vec{q})]\, \phi(\vec{k},\vec{q}) +$$
$$+ \sqrt{\tfrac{S}{2N}}\, I(\vec{q})\}\, b^+_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} a_{\vec{k},1/2} \qquad 5.40$$

Postavimo uslov sada da je $\hat{H}_1$ /5.33/ jednako nuli. Odatle sledi da je:

$$\phi(\vec{k},\vec{q}) = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{S}{2N}}\, \frac{I(\vec{q})}{[E_{\vec{k},1/2} - E_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} + J_0 S - E_M(\vec{q})]} \qquad 5.41$$

$$\phi^*(\vec{k},\vec{q}) = -\frac{1}{i}\sqrt{\frac{S}{2N}}\, \frac{I(\vec{q})}{[E_{\vec{k},1/2} - E_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} + J_0 S - E_M(\vec{q})]} \qquad 5.42$$

Sada tražimo $\hat{H}_2$ dato sa 5.33:

$$\hat{H}_2 = \sum_{q} [(i H_{\vec{q}} - \tfrac{1}{2}[H_0', S_{\vec{q}}]), S_{\vec{q}}]$$

Prvo nadjimo:

$$i H_{\vec{q}} - \tfrac{1}{2}[H_0', S_{\vec{q}}] = -i\sqrt{\tfrac{S}{2N}}\, I(q)\, b_q \sum a^+_{k,1/2} a_{k-q,-1/2} - i\sqrt{\tfrac{S}{2N}}\, I(\vec{q})\, b_q^+$$
$$\sum_k a^+_{k-q} a_{k,1/2} - \frac{1}{2i}\sqrt{\tfrac{S}{2N}}\, I(q)\, b_q \sum_k a^+_{k,1/2} a_{k-q,-1/2} -$$
$$- \frac{1}{2i}\sqrt{\tfrac{S}{2N}}\, I(q)\, b_q^+ \sum a^+_{k-q,-1/2} a_{k,1/2} = \sqrt{\tfrac{S}{2N}}\, I(q)$$
$$(-i - \tfrac{1}{2i}) \sum_k \{b_q\, a^+_{k,1/2} a_{k-q,-1/2} + b_q^+\, a^+_{k-q,-1/2} a_{k,1/2}\} =$$
$$= -i\sqrt{\tfrac{S}{2N}}\, I(\vec{q}) \sum_{\vec{k}} \{b_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k},1/2} a_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} + b^+_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}-\vec{q},-1/2} a_{\vec{k},1/2}\}$$

Sada je uzimajući u obzir 5.37 i 5.38 $\hat{H}_2$ jednako:

$$\hat{H}_2=\sum_{\vec{q}}\left[(iH_{\vec{q}}-\tfrac{1}{2}[H_0',S_{\vec{q}}],S_{\vec{q}}\right]=-i\sqrt{\frac{S}{8N}}\sum_{\vec{q}}I(\vec{q})\sum_{\vec{k},\vec{k}'}\left[b_{\vec{q}}\,a^+_{\vec{k},1/2}a_{\vec{k}-\vec{q},1/2}+\right.$$

$$\left.+\,b^+_{\vec{q}}\,a^+_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}a_{\vec{k},1/2}\,\phi(\vec{k}',\vec{q})\,a^+_{\vec{k}',1/2}a_{\vec{k}'-\vec{q},-1/2}\,b_{\vec{q}}+\phi^*(\vec{q},\vec{k}')\,a^+_{\vec{k}'-\vec{q},-1/2}a_{\vec{k}',1/2}\,b^+_{\vec{q}}\right] \quad 5.43$$

Ako usrednjimo $\hat{H}_2$ po vakuumskom stanju dobijamo:

$$\langle 0|\hat{H}_2|0\rangle=-i\sqrt{\frac{S}{8N}}\sum_{k,k',q}\langle 0|\,b_q\cdots,\cdots b_q|0\rangle+\phi^*(q,k')\left[b_q\,a^+_{k,1/2}a_{k-q,-1/2},\right.$$

$$\left.,a^+_{k'-q,-1/2}a_{k',1/2}\,b^+_q\right]+\phi(q,k')\left[b^+_q\,a^+_{k-q,-1/2}a_{k,1/2},\,b_q\,a^+_{k',1/2}a_{k'-q,-1/2}\right]+$$

$$+\langle 0|\,b^+b^+|0\rangle$$

Za $\vec{k}'=\vec{k}$ ostaje samo bb^+, a otpadaju svi članovi koji sadrže više nego četiri operatora, tj. imamo:

$$\langle 0|\hat{H}_2|0\rangle=\frac{S}{8N}\left\{\sum_{\vec{k},\vec{q}}\frac{|I(\vec{q})|^2\,a^+_{\vec{k},1/2}a_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}a^+_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}a_{\vec{k},1/2}}{[E_{\vec{k},1/2}-E_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}+J_0S-E_M(\vec{q})]}\right\}+$$

$$+\frac{S}{8N}\left\{\sum_{\vec{k},\vec{q}}\frac{|I(\vec{q})|^2\,a^+_{\vec{k},1/2}a_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}a^+_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}a_{\vec{k},1/2}}{[E_{\vec{k},1/2}-E_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}+J_0S-E_M(\vec{q})]}\right\} \quad 5.44$$

Za sam hamiltonijan se dobija usrednjavanjem energija u prvoj aproksimaciji:

$$\langle 0|\hat{H}|0\rangle=\sum_{\vec{k}}\left\{(E_{\vec{k},1/2}+\tfrac{1}{2}J_0S)\,a^+_{\vec{k},1/2}a_{\vec{k},1/2}+(E_{\vec{k},-1/2}-\tfrac{1}{2}J_0S)\,a^+_{\vec{k},-1/2}a_{\vec{k},-1/2}+\right.$$

$$+\sum_{\vec{k},\vec{q}}\frac{S}{4N}\frac{|I(\vec{q})|^2\,a^+_{\vec{k},1/2}a_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}a^+_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}a_{\vec{k},1/2}}{[E_{\vec{k},1/2}-E_{\vec{k}-\vec{q},-1/2}+J_0S-E_M(\vec{q})]} \quad 5.45$$

smena $\vec{k}-\vec{q}=-\vec{k}$ tj. $\vec{q}=2\vec{k}$ pa za usrednjen $\hat{H}_2$, što nas i interesuje, dobijamo:

$$\langle 0|\hat{H}_2|0\rangle=\frac{S}{4N}\sum_{\vec{k}}\frac{|I(2\vec{k})|^2\,a^+_{\vec{k},1/2}a_{-\vec{k},-1/2}a^+_{-\vec{k},-1/2}a_{\vec{k},1/2}}{[E_{\vec{k},1/2}-E_{-\vec{k},-1/2}+J_0S-E_M(2\vec{k})]} \quad 5.46$$

§6. Ocena veličine i znaka efektivnog potencijala i poredjenje elektron-fonon sa spin-elektron interakcijom

Izvršimo sada ocenu veličine i znaka efektivnog potencijala za s-d interakciju.

Ako usrednjeni hamiltonijan interakcije preuredimo tako da dobijemo dva kuperovska para, možemo pisati:

$$\langle 0|\hat{H}_2|0\rangle = -\frac{S}{4N}\sum_{\vec{k}} \frac{|J(2\vec{k})|^2 \, a^+_{\vec{k},1/2} a^+_{-\vec{k},-1/2} a_{-\vec{k},-1/2} a_{\vec{k},1/2}}{E_{\vec{k},1/2} - E_{-\vec{k},-1/2} + J_0 S - E_M(2\vec{k})} \qquad 6.1$$

Pošto za energije elektrona važi:

$$E_{\vec{k},1/2} = E_{\vec{k},-1/2}$$

možemo za efektivni potencijal s-d interakcije pisati:

$$F(\vec{k}) = -\frac{S}{4}\frac{|J(2\vec{k})|^2}{SJ_0 - E_M(2\vec{k})} \qquad 6.2$$

Ako izračunamo imenilac uzimajući u obzir 5.25 dobijamo:

$$E_M(2\vec{k}) = S[J_0 - J(2\vec{k})]$$

$$SJ_0 - E_M(2\vec{k}) = SJ_0 - SJ_0 + SJ(2\vec{k}) \qquad 6.3$$

Pa zamenom 6.3 u 6.2 za efektivni potencijal s-d interakcije dobijamo:

$$F(\vec{k}) = -\frac{1}{4}\frac{|J(2\vec{k})|^2}{J(2\vec{k})} = -\frac{1}{4}J(2\vec{k}) \qquad 6.4$$

Ocenimo sada znak efektivnog potencijala za razne vrednosti impulsa. Za prostu kubnu strukturu možemo pisati:

$$J(2\vec{k}) = 2I(\cos 2k_x a + \cos 2k_y a + \cos 2k_z a)$$

Za talasne vektore koji pripadaju sledećim oblastima prve Briluenove zone

$$k_x, k_y, k_z \in \left(0, \frac{\pi}{4a}\right) \quad \text{i} \quad k_x, k_y, k_z \in \left(\frac{3\pi}{4a}, \frac{\pi}{a}\right)$$

dobijamo: $J(2\vec{k})>0$

pa je efektivni potencijal privlačan tj.:

$$F(\vec{k})=-\frac{1}{4}J(2\vec{k})<0 \qquad 6.5$$

Ako $\vec{k}$ pripada oblasti

$$k_x, k_y, k_z \in \left(\frac{\pi}{4a}, \frac{3\pi}{4a}\right)$$

izlazi da je:

$$J(2\vec{k})<0$$

, a efektivan potencijal je odbojan:

$$F(\vec{k})=-\frac{1}{4}J(2\vec{k})>0 \qquad 6.6$$

Maksimalan odbojan efektivan potencijal dobijamo za k_x, $k_y, k_z=\frac{\pi}{2a}$ jer je onda J minimalno tj.:

$$J_{min}(2\vec{k})=-6I$$

a

$$F(\vec{k})=-\frac{1}{4}J(2\vec{k})=\frac{3}{2}I=1500\ K_b \qquad 6.7$$

gde smo uzeli da je integral izmene $I = 10^3\ K_b$ /K_b - Bolcmanova konstanta/.

Znači, odbojni potencijal ima maksimum oko sredine Briluenove zone, a to odgovara elektronskim energijama:

$$E(\tilde{k})=\frac{\hbar^2\tilde{k}^2}{2m} \quad \text{gde je} \quad \tilde{k}=\frac{\pi\sqrt{3}}{2a}.$$

Ako uzmemo da je konstanta rešetke $a = 3\cdot10^{-8}$cm dobijamo:

$$E(\tilde{k})=\frac{\hbar^2\tilde{k}^2}{2m}=\frac{1{,}1\cdot10^{-54}\cdot\pi^2\cdot3}{2\cdot10^{-27}\cdot4\cdot9\cdot10^{-16}}=4{,}5\cdot10^{-12}\,\text{erg}\approx 3\,\text{eV}$$

Baš elektroni sa ovim energijama oko Fermi-površine /3-5 eV/ su odgovorni za superprovodnost materijala.

Ovde smo za konstante uzeli:

$\hbar = 1{,}054 \cdot 10^{-27}$ erg·sec

$1eV = 1{,}6 \cdot 10^{-12}$ erg

$m_e = 10^{-27}$ gr.

$1K_b \sim 1°K$

Iz kritične tačke prelaza iz superprovodnog stanja u obično stanje znamo da je privlačni efektivni potencijal koji dolazi usled elektron-fonon interakcije reda 10 K_b.
Kako smo za oblast impulsa oko polovine Briluenove zone za spin-elektron interakcije dobili efektivan potencijal da je odbojan i reda veličine 10^3 K_b, očigledno je da s-d interakcija preovladjuje, tj. elektroni se medju sobom odbijaju.

Z A K L J U Č A K

Rezultati analize, koja je ovde izvršena, pokazali su da s-d interakcija u feromagneticima u oblasti impulsa koji su bliski granici Fermi-površine stvara efektivni potencijal izmedju slobodnih elektrona koji je odbojan i reda veličine $1,5\cdot 10^{3}$ K_b / o,15 eV/ pa prema tome, pošto je privlačenje koje dolazi usled elektron-fonon interakcije reda 10 K_b / 10^{-3} eV/, ovo predstavlja dokaz eksperimentalne činjenice da feromagnetici nisu superprovodnici. Odbojni potencijal ima maksimum oko sredine Briluenove zone, a to odgovara elektronskim energijama od oko 3 eV, tj. baš onim elektronima koji se nalaze oko Fermi-površine.

Treba na kraju napomenuti da u oblasti malih impulsa, a takodje i u oblasti impulsa bliskih kraju Briluenove zone efektivni potencijal koji dokazi od s-d interakcije je privlačan i ovaj rezultat nesumnjivo zaslužuje pažnju, jer za ove oblasti impulsa treba očekivati neke nove fenomene u slabo neidealnom gasu pošto za razliku od slučaja kada nema lokalizovanih spinova izmedju elektrona sa malim i veoma velikim impulsima deluju privlačne, a ne odbojne sile.

Литература:

1. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц: „Квантовая механика"
„Физматгиз", Москва 1963.

2. А.С. Давыдов: „Квантовая механика"
„Физматгиз" Москва 1963.

3. С.В. Тябликов: „Методы квантовой теории магнетизма"
„Наука" 1965. Москва

4. С.В. Вонсовский: „Современное учение о магнетизме"
Москва 1953.

5. Сборник статей: „Теория сверхпроводимости"
„Издательство иностраной литературы" Москва 1960.

6. Charles Kittel: „Uvod u fiziku čvrstog stanja"
„Savremena administracija" Beograd 1972

[7.] H. Fröhlich; Phys. Rev., 79, 854 (1950.)