УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
Институт за физику

НИКОЛА ТАНКОСИЋ

ХАМИЛТОНИЈАН МОДЕЛА АНТИФЕРОМАГНЕТА СА ОДРЖАНИМ ПАРАМЕТРОМ УРЕЂЕЊА (OPP AMF) У РЕПРЕЗЕНТАЦИЈИ БОЗОНСКИХ КОХЕРЕНТНИХ СТАЊА

ДИПЛОМСКИ РАД

Ментор: Др. Дарко Капор

Нови Сад, фебруар 1995.

САДРЖАЈ

Желим да се захвалим најпре родитељима за стрпљење и подршку, затим ментору проф. др. Дарку Капору на помоћи у изради дипломског рада и колеги проф. Илији Арсенићу на корисним саветима и сугестијама.

УВОД

Циљ овог рада је анализа могућности постојања солитона у једном посебном моделу антиферомагнетика. Тачније, покушали смо да презентујемо општи приступ заснован на техникама развијеним на Институту за физику ПМФ-а у Новом Саду, и да укажемо на низ неконзистентности у постојећој анализи.

Структура дипломског рада је следећа:

У првој глави приказан је Хајзенбергов модел феромагнетика и антиферомагнетика.

У другој глави је дата елементарна теорија линеарних побуђења - спинских таласа.

У трећој глави је приказано класично налажење солитонских решења.

У четвртој глави описан је модел ОРР AFM са освртом на резултате добијене у експериментима са расејањем неутрона.

Следеће две главе садрже оригиналне резултате. У петој је спроведен рачун у циљу добијања једначина кретања, а у шестој је указано на грешке које постоје у постојећој литератури.

1. ФЕРОМАГНЕТНИ И АНТИФЕРОМАГНЕТНИ ИЗОЛАТОР: СТРУКТУРА И ФАЗНИ ПРЕЛАЗИ - АПРОКСИМАЦИЈА МОЛЕКУЛСКОГ ПОЉА

Савремена теорија магнетизма описује феромагнетни (ФМ) изолатор помоћу Хајзенберговог модела као систем уређених перманентних магнетних момената. Најпознатији пример су спинови непопуњених $3d$ љуски прелазних метала (Fe, Ni, Co) "уграђених" у решетку немагнетних атома или молекула.

Посматрајмо парамагнетик са концентрацијом N јона са спином S. Уколико постоји унутрашња интеракција која тежи да усмери магнетне моменте да буду паралелни један другом, имаћемо феромагнетик. Дакле, спинови образују магнетну кристалну решетку и повезани су међусобно квантномеханички силама измене [1]. Спинска интеракција се може описати помоћу уопштеног Хајзенберговог модела:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}}\left[J_x(\vec{n}-\vec{m})S^x_{\vec{n}}S^x_{\vec{m}} + J_y(\vec{n}-\vec{m})S^y_{\vec{n}}S^y_{\vec{m}} + J_z(\vec{n}-\vec{m})S^z_{\vec{n}}S^z_{\vec{m}}\right]$$

где су $\vec{n},\vec{m}$ вектори положаја чворова кристалне решетке; $S^x_{\vec{n}}, S^y_{\vec{n}}, S^z_{\vec{n}}$ компоненте вектора спина $\vec{S}_{\vec{n}}$ у чвору $\vec{n}$; $J(\vec{n}-\vec{m})$ изменски потенцијал (функција интеракције измене). Анализа особина феромагнетика врши се најчешће у оквирима Хајзенберговог изотропног модела, који следи из општег модела, ако се узме да је:

$$J_x(\vec{n}-\vec{m}) = J_y(\vec{n}-\vec{m}) = J_z(\vec{n}-\vec{m}) = J(|\vec{n}-\vec{m}|)$$

тако да одговарајући хамилтонијан има облик:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} J(|\vec{n}-\vec{m}|)\vec{S}_{\vec{n}}\vec{S}_{\vec{m}}$$

Ако је систем спинова у спољашњем магнетном пољу $\vec{H}_o$, онда се овом облику додаје Земанов члан:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} J(|\vec{n}-\vec{m}|)\,\vec{S}_{\vec{n}}\vec{S}_{\vec{m}} - g_L\mu_B\sum_{\vec{n}}\vec{S}_{\vec{n}}\vec{H}_o$$

где је g_L - Ландеов фактор, а μ_B - Боров магнетон.

Основна претпоставка квантне теорије феромагнетизма састоји се у томе да су на апсолутној нули сви спинови паралелно оријентисани и да су z - пројекције спинова свих атома једнаке максималној вредности спина S. Тада магнетизација кристала има максималну вредност:

$$M(0) = \mu NS$$

Пораст температуре доводи до отклањања z - пројекције спинова од њихове максималне вредности S, а ово изазива смањивање магнетизације, тако да она на некој температури T_c, која се назива Киријева температура, постаје равна нули и феромагнетик прелази у парамагнетну фазу. Ако енергију услед интеракције измене третирамо као енергију појединачног спина у неком ефективном (молекуларном) пољу $\vec{H}_E$ и ако претпоставимо да је пропорционална магнетизацији $\vec{M} = \vec{M}(\vec{H},T)$ тада је:

$$\vec{H}_E = \lambda \vec{M} \tag{1.1}$$

где је λ константа независна од температуре. Ако је χ сусцептибилност, примењено поље H проузрокује коначну магнетизацију, услед које се појављује поље H_E и добија се:

$$M = \chi_o (H + H_E) \tag{1.2}$$

где је за парамагнетик по Киријевом закону:

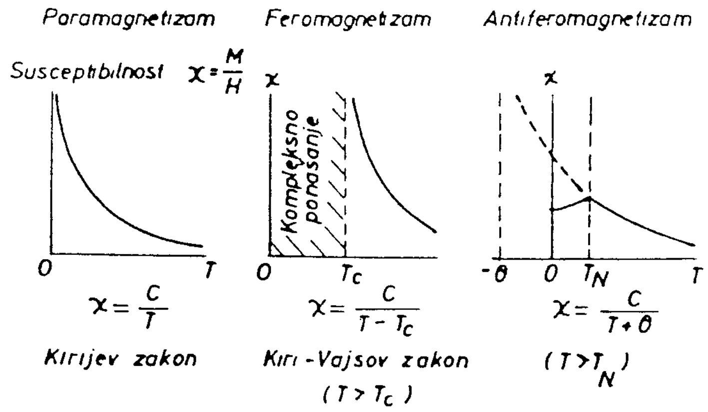
$$\chi_o = \frac{C}{T}$$

C је Киријева константа.
Из (1.1) и (1.2) следи:

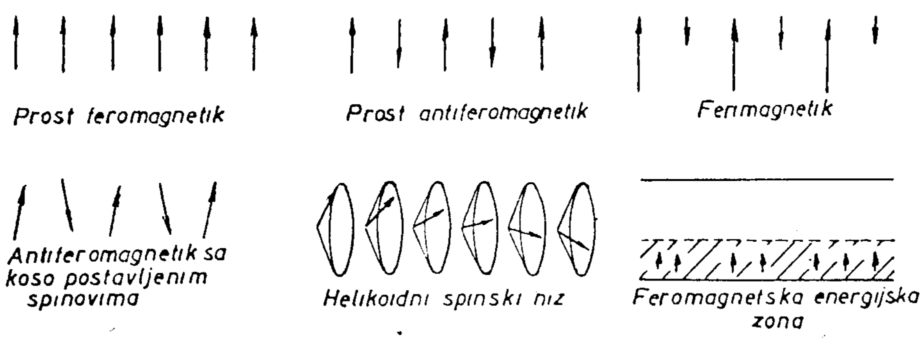
$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{C}{T - \lambda C} \tag{1.3}$$

Сусцептибилност има сингуларитет за $T = \lambda C$. На тој и нижој температури постоји спонтана магнетизација (феромагнетна фаза). Из (1.3) следи Кири-Вајсов закон:

$$\chi = \frac{C}{T - T_C}$$



Слика 1. *Сусцептибилности у функцији температуре*



Слика 2. *Могући уређени распореди спинова*

У многим феромагнетним кристалима магнетизација засићења на $T = 0K$ не одговара паралелна усмереност магнетних момената саставних парамагнетних јона (Fe_3O_4, $FeO \cdot Fe_2O_3$). Такве кристале називамо феримагнетима. Утврђено је да су узајамна дејства у феритима антиферомагнетне (АФМ) природе [2]. Антиферомагнетно стање карактерише се антипаралелним спиновима. Зато долази до снижавања резултујућег магнетног момента и опште намагнетисаности материјала у односу на феромагнетик. Структурно, антиферомагнетни материјал описује се као модел са две кристалне решетке које прожимају једна другу, па су најближи јони око сваког јона прве решетке, јони оне друге решетке. Ако претпоставимо да се решетка ферита састоји од подрешетки *A* и *B*, тада код спинелне кристалне структуре (карактеристичне за кубични ферит) интеракција размене (*AA, AB, BB*) фаворизује антипаралелно усмеравање спинова повезаних интеракцијом. Међутим, *AB* интеракција је најјача и да би *A* спинови били антипаралелни *B* спиновима, сви *A* спинови су паралелни међусобно као и сви B спинови. Молекулска поља која делују на спинске решетке A и B могу се написати као:

$$\vec{H}_A = -\lambda\vec{M}_A - \mu\vec{M}_B; \qquad \vec{H}_B = -\mu\vec{M}_A - \nu\vec{M}_B$$

где су λ, μ, ν позитивне величине.
Знак "-" тада одговара антипаралелној интеракцији. Енергија интеракције је:

$$U = -\frac{1}{2}\left(\vec{H}_A\vec{M}_A + \vec{H}_B\vec{M}_B\right) = \frac{1}{2}\lambda M_A^2 + \mu\vec{M}_A\vec{M}_B + \frac{1}{2}\nu M_B^2$$

Она је мања када су M_A и M_B антипаралелни, него када су паралелни. Када је:

$$\mu M_A M_B > \frac{1}{2}\left(\lambda M_A^2 + \nu M_B^2\right)$$

у основном стању M_A ће бити супротно усмерено од M_B. Ако за A и B дефинишемо различите киријеве константе C_A и C_B:

$$M_A T = C_A\left(H - \mu M_B\right) \qquad M_B T = C_B\left(H - \mu M_A\right)$$

За сусцептибилност при $T > T_C$, где је $T_C = \mu\left(C_A C_B\right)^{1/2}$ имамо:

$$\chi = \frac{M_A + M_B}{H} = \frac{(C_A + C_B)T - 2\mu C_A C_B}{T^2 - T_C^2}$$

У антиферомагнетику спинови су уређени са антипаралелним распоредом који има резултујући момент једнак нули на температури испод температуре уређивања. χ антиферомагнетика није бесконачна на $T = T_N$ већ има слабо изражен прелом (сл. 1). Антиферомагнетик је специјалан случај феримагнетика код кога обе подрешетке A и B имају једнаке магнетизације засићења. Пошто су Киријеве константе $C_A = C_B$ добија се:

$$T_N = \mu C$$

где је T_N - Нелова температура.

У парамагнетној области антиферомагнетика за $T > T_N$ сусцептибилност је:

$$\chi = \frac{2CT - 2\mu C^2}{T^2 - (\mu C)^2} = \frac{2C}{T + \mu C} = \frac{2C}{T + T_N}$$

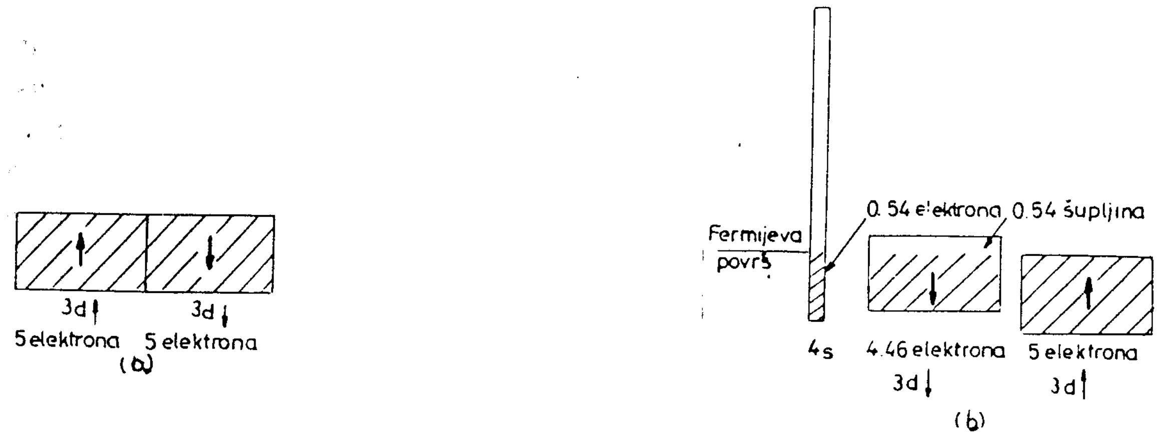
Хајзенбергов модел антиферомагнетика са две подрешетке у општем случају је:

$$\hat{H} = -g_L \mu_B \sum_{\vec{n}_1} \left\{ \vec{S}_{\vec{n}_1} \left[\vec{H}_o - \frac{2}{g_L \mu_B} \sum_{\vec{m}_1} J(|\vec{n}_1 - \vec{m}_1|) \vec{S}_{\vec{m}_1} - \frac{2}{g_L \mu_B} \sum_{\vec{m}_2} J(|\vec{n}_1 - \vec{m}_2|) \vec{S}_{\vec{m}_2} \right] \right\} -$$

$$- g_L \mu_B \sum_{\vec{n}_2} \left\{ \vec{S}_{\vec{n}_2} \left[\vec{H}_o - \frac{2}{g_L \mu_B} \sum_{\vec{m}_2} J(|\vec{n}_2 - \vec{m}_1|) \vec{S}_{\vec{m}_1} - \frac{2}{g_L \mu_B} \sum_{\vec{m}_2} J(|\vec{n}_2 - \vec{m}_2|) \vec{S}_{\vec{m}_2} \right] \right\}$$

$\vec{n}_1$ и $\vec{m}_1$, односно $\vec{n}_2$ и $\vec{m}_2$ су вектори положаја чворова прве и друге подрешетке респективно.

Код метала имамо додатне ефекте. Услед делокализације електрона јавља се зонски магнетизам. Ефективан број магнетона (n_B) дефинисан је са $M(0) = n_B N \mu_B$, где је N број структурних јединица елемената или једињења, по јединици запремине. Измерене вредности n_B често нису цели бројеви. Први узрок је у спин - орбиталној интеракцији услед које долази до сабирања или одузимања једног дела орбиталног магнетног момента. Други узрок код феромагнетних метала је у локално индукованој магнетизацији проводних електрона у околини парамагнетног јона. На трећи узрок указује распоред спинова у феромагнету на сл. 2: ако постоји један атом са пројекцијом спина $-S$, на свака два атома са пројекцијом $+S$, средњи спин је $1/3\ S$. Ова појава се може објаснити зонским моделом.



Слика 3.

На сл $3a$ попуњена $3d$ зона Cu приказана је као две подзоне са супротним оријентацијама спина електрона. Свака садржи пет електрона. Када су обе подзоне попуњене, резултујући спин (и резултујућа магнетизација) d зоне је једнак нули. На сл. $3b$ је приказан однос зона у Ni на $T = 0K$. Енергије $3d$ подзона се разликују услед постојања интеракције размене. Резултујући магнетни момент од $0.54\ \mu_B$ по атому потиче од вишка попуњености $3d\uparrow$ зоне у односу на $3d\downarrow$ зону.

Један од важних појмова у терији фазних прелаза је физичка величина која је различита од нуле у једној фази, а тежи нули на температури прелаза и идентички је једнака нули у другој фази. Она се назива ***параметар уређености.*** За феромагнет то је очигледно магнетизација

$$M = \frac{1}{N}\sum_n S_n^z$$

Док се код АфМ користи *staggered* (*цик - цак*) ***магнетизација*** или ***антиферомагнетни вектор*** по руској терминологији. То је у ствари разлика магнетизације две подрешетке.

$$M_я = \frac{1}{N}\sum_{i\in A} S_i^z - \frac{1}{N}\sum_{j\in B} S_j^z .$$

2. ЛИНЕАРНА ПОБУЂЕЊА - СПИНСКИ ТАЛАСИ У ФМ И АФМ

Хамилтонијан система спинова у Хајзенберговом ФМ изотропном моделу дат је са:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}\left[I^x_{\vec{n}\vec{m}} S^x_{\vec{n}} S^x_{\vec{m}} + I^y_{\vec{n}\vec{m}} S^y_{\vec{n}} S^y_{\vec{m}} + I^z_{\vec{n}\vec{m}} S^z_{\vec{n}} S^z_{\vec{m}}\right] \tag{2.1}$$

Пораст температуре изазива смањење магнетизације, и на температури T_c јавља се прелаз из феромагнетне у парамагнетну фазу. Већ смо нагласили да основно стање сматрамо оно са свим спиновима у позитивном смеру z - осе ("up"). При порасту температуре топлотни квант смањи пројекцију спина на једном чвору за јединицу(тј. $\hbar$), а ово се због сила измене преноси на остале чворове магнетне решетке. Ствара се у систему талас "заљуљаних" спинова који се назива спински талас (магнон) [1,2,3,4,5]. Њихов број расте са порастом температуре и доводи до преласка у парамагнетну фазу. Ово наводи на закључак да се елементарне екситације система уређених спинова састоје од промена вредности z-компоненти спина.

Пошто оператор $S^+ = S^x + iS^y$ повећава z пројекцију, а $S^- = S^x - iS^y$ је смањује за јединицу, може се узети да S^- креира побуђења система док их S^+ анхилира. Зато је потребно да се хамилтонијан (2.1) изрази преко оператора S^-, S^+ и $S - S^z$ који представља меру одступања величине S^z од њене максималне вредности. Инверзна трансформација ових оператора је:

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

Због потпуности изведимо и комутационе релације за спинске операторе.

$$\left[S^x, S^y\right] = iS^z; \qquad \left[S^z, S^x\right] = iS^y; \qquad \left[S^y, S^z\right] = iS^x; \qquad (\hbar = 1)$$

$$\left[S^+, S^-\right] = 2S^z; \qquad \left[S^+, S^z\right] = -S^+; \qquad \left[S^-, S^z\right] = S^- \tag{2.2}$$

$$\left\{S^+, S^-\right\} = 2S(S+1) - 2\left(S^z\right)^2$$

Заменом у хамилтонијан имамо:

$$H = -\frac{1}{4}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}\left(S_{\vec{n}}^{-}S_{\vec{m}}^{+} + S_{\vec{m}}^{-}S_{\vec{n}}^{+}\right) - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^{z} S_{\vec{m}}^{z}$$

Пошто спински оператори на различитим чворовима решетке комутирају, у другом члану се врши смена $\vec{n} \leftrightarrow \vec{m}$ и искористи $I_{\vec{n}\vec{m}} = I_{\vec{m}\vec{n}}$. Коначан израз за хамилтонијан постаје:

$$H = -\frac{N}{2}S^{2}J_{o} + SJ_{o}\sum_{\vec{n}}\left(S - S_{\vec{n}}^{z}\right) - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^{-}S_{\vec{m}}^{+} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}\left(S - S_{\vec{n}}^{z}\right)\left(S - S_{\vec{m}}^{z}\right) \qquad (2.3)$$

$$J_{o} = \sum_{\vec{n}-\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} = \sum_{\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}$$

Комутационе релације за спинске операторе (2.2) нису ни бозонског ни фермионског типа. Зато се мора користити нека од бозонских или фермионских репрезентација. Идеја је да се дефинишу такве формуле бозе - оператора које дају исте комутационе релације као $S^{\pm}$ и S^{z}, али по могућности и исте статистичке средње вредности, што је већ теже постићи.

На ниским температурама $\langle S^{z}\rangle \approx S$.

$$\left[S_{n}^{+}, S_{m}^{-}\right] \cong 2S\delta_{n,m}$$

Тако је први корак смена:

$$S_{\vec{n}}^{+} = \sqrt{2S}B_{\vec{n}}; \qquad S_{\vec{n}}^{-} = \sqrt{2S}B_{\vec{n}}^{+}; \qquad S_{\vec{n}}^{z} = S - B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}};$$

Ово је тзв. Блохова апроксимација [1-6].

Основни проблем је што се са њеном применом могу појавити стања са $S^{z} < -S$ (или већом од S, зависно од дефиниције основног стања). Зато је потребно одвојити стања за која је $B^{+}B \leq 2S$ од тзв. нефизичких стања ($B^{+}B > 2S$).

Први корак су учинили Холштајн и Примаков.

$$S_{\vec{n}}^{+} = \sqrt{2S}\sqrt{1 - \frac{B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}}{2S}}B_{\vec{n}} \qquad S_{\vec{n}}^{-} = \sqrt{2S}B_{\vec{n}}^{+}\sqrt{1 - \frac{B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}}{2S}} \qquad S_{\vec{n}}^{z} = S - B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}$$

Квадратни корен је само симбол за биномни развој за $\langle B^{+}B\rangle << 2S$, а ово је иначе специјалан случај корекције Голдхиршове репрезентације [6]. На ниским температурама је могуће користити развој корена

$$S_{\vec{n}}^{+} \approx \sqrt{2S}\left(1-\frac{B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}}{4S}\right)B_{\vec{n}} \qquad S_{\vec{n}}^{-} = \sqrt{2S}B_{\vec{n}}^{+}\left(1-\frac{B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}}{4S}\right) \qquad S_{\vec{n}}^{z} = S - B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}$$

док се често на ниским температурама користи репрезентација Дајсон Малејева:

$$S_{\vec{n}}^{+} \approx \sqrt{2S}\left(1-\frac{B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}}{2S}\right)B_{\vec{n}} \qquad S_{\vec{n}}^{-} = \sqrt{2S}B_{\vec{n}}^{+}\left(1-\frac{B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}}{2S}\right) \qquad S_{\vec{n}}^{z} = S - B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}$$

Овде ћемо користити линеарну Блохову апроксимацију $[1,2,3,4,5,6]$:

$$S_{\vec{n}}^{+} = \sqrt{2S}B_{\vec{n}}; \qquad S_{\vec{n}}^{-} = \sqrt{2S}B_{\vec{n}}^{+}; \qquad S - S_{\vec{n}}^{z} = B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}};$$

Такође, одбацује се и последњи члан у (2.3) јер би био типа $B^{+}BB^{+}B$ и одговарао процесима расејања спинских таласа. Сада хамилтонијан има има:

$$H = SJ_0\sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}} - S\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}$$

После Фуријеове трансформације:

$$B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\vec{n}}; \qquad B_{\vec{n}}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^{+}e^{-i\vec{k}\vec{n}}; \qquad I_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} J_{\vec{k}}e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}$$

добија се дијагонални облик

$$H = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}B_{\vec{k}}^{+}B_{\vec{k}}; \qquad \varepsilon_{\vec{k}} = S\left(J_0 - J_{\vec{k}}\right)$$

Енергије $\varepsilon_{\vec{k}}$ су енергије спинских таласа (магнона). За просту кубну решетку параметра a, у апроксимацији најближих суседа:

$$I_{\vec{n}\vec{m}} = \begin{cases} I & \text{ако су } \vec{n} \text{ и } \vec{m} \text{ суседни ч ворови} \\ 0 & \text{у осталим случ ајевима} \end{cases}$$

добиће се:

$$J_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}-\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}}e^{-i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}$$

$$J_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}-\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} e^{-i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} = 2I\left(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a\right) \approx$$

$$\approx 2I\left(3 - \frac{1}{2}(k_x a)^2 - \frac{1}{2}(k_y a)^2 - \frac{1}{2}(k_z a)^2\right) == 6I - I\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)a^2 = J_0 - Ik^2a^2$$

Коначно добијамо израз за закон дисперзије магнона у дуготаласној апроксимацји:

$$\varepsilon_{\vec{k}} \cong SIk^2a^2$$

Код феромагнета енергија елементарних побуђења пропорционална је k^2. Код антиферомагнета имамо две подрешетке A и B при чему је сваки чвор (up) решетке A окружен суседима (down) решетке B и обрнуто.

$$A:\uparrow\uparrow \quad S_{\vec{n}}^z = S - A_{\vec{n}}^+ A_{\vec{n}};\ S_{\vec{n}}^- = \sqrt{2S}A_{\vec{n}}^+; S_{\vec{m}}^+ = \sqrt{2S}A_{\vec{n}}$$

$$B:\downarrow\downarrow \quad S_{\vec{m}}^z = -S + B_{\vec{m}}^+ B_{\vec{m}};\ S_{\vec{m}}^- = \sqrt{2S}B_{\vec{m}}; S_{\vec{n}}^+ = \sqrt{2S}B_{\vec{m}}^+$$

Уочити да је избор апроксимације диктиран избором основног стања подрешетки. Одговарајући хамилтонијан у Блоховој апроксимацији је:

$$H_{AFM} = \sum_{\substack{\vec{n}\in A\\ \vec{m}\in B}} I_{\vec{n}\vec{m}}\left[S_{\vec{n}}^z S_{\vec{m}}^z + \frac{1}{2}\left(S_{\vec{n}}^+ S_{\vec{m}}^- + S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+\right)\right]$$

$$H_{AFM} = \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}\left[\left(S - A_{\vec{n}}^+ A_{\vec{n}}\right)\left(-S + B_{\vec{m}}^+ B_{\vec{m}}\right) + \frac{1}{2}2S\left(A_{\vec{n}} B_{\vec{m}} + A_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}}^+\right)\right] =$$

$$= SJ_0 \sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}}^+ A_{\vec{n}} + SJ_0 \sum_{\vec{m}} B_{\vec{m}}^+ B_{\vec{m}} + S\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}\left(A_{\vec{n}} B_{\vec{m}} + A_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}}^+\right)$$

После Фуријеове трансформације хамилтонијан има облик:

$$H = SJ_0 \sum_{\vec{k}}\left(A_{\vec{k}}^+ A_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}\right) + S\sum_{\vec{k}} I\left(\vec{k}\right)\left(A_{\vec{k}} B_{-\vec{k}} + B_{-\vec{k}}^+ A_{\vec{k}}^+\right):$$

Овде смо користили да је фурије трансформ $I(\vec{k}) = \sum_{\delta} I e^{i\vec{q}\vec{\delta}/2}$, где је $\delta/2$ растојање најближих суседа и да је за кристал који има центар инверзије $I(\vec{k}) = I(-\vec{k})$.
Увођењем Фуријеове трансформације посматрамо уместо две једну реципрочну решетку и само једну врсту оператора $A, B \to A$. Сада је Хамилтонијан:

$$H = 2SJ_0 \sum_{\vec{k}} A^+_{\vec{k}} A_{\vec{k}} + S \sum_{\vec{k}} I(\vec{k})\left(A_{\vec{k}} A_{-\vec{k}} + A^+_{-\vec{k}} A^+_{\vec{k}}\right)$$

Ако уведемо ознаке: $X = 2SJ_0$; $\quad Y(\vec{k}) = 2SI(\vec{k})$

$$H = \sum_{\vec{k}} X A^+_{\vec{k}} A_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} Y(\vec{k})\left(A_{\vec{k}} A_{-\vec{k}} + A^+_{-\vec{k}} A^+_{\vec{k}}\right) \tag{2.4}$$

Елиминација другог члана у изразу (2.4) може се извршити познатом канонском трансформацијом Богољубова[1-5]:

$$A_{\vec{k}} = U_{\vec{k}} C_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} C^+_{-\vec{k}} \quad ; \quad A^+_{\vec{k}} = U_{\vec{k}} C^+_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} C_{-\vec{k}}$$
$$U^2_{\vec{k}} - V^2_{\vec{k}} = 1 \tag{2.5}$$

где су $C^+_{\vec{k}}$ и $C_{\vec{k}}$ нови Бозе-оператори, а $U_{\vec{k}}$ и $V_{\vec{k}}$ реалне и парне функције.
И избором функција на следећи начин

$$U^2_{\vec{k}} = \frac{1}{2}\left[\frac{X(\vec{k})}{\sqrt{X^2(\vec{k}) - Y^2(\vec{k})}} + 1\right] \qquad V^2_{\vec{k}} = \frac{1}{2}\left[\frac{X(\vec{k})}{\sqrt{X^2(\vec{k}) - Y^2(\vec{k})}} - 1\right]$$
$$U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} = -\frac{1}{2}\frac{Y(\vec{k})}{\sqrt{X^2(\vec{k}) - Y^2(\vec{k})}} \tag{2.6}$$

елиминишемо чланове типа C^+C^+ и CC, тако да хамилтонијан постаје

$$H = \varepsilon_0 + \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} C^+_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \tag{2.7}$$

где је:

$$\varepsilon_p = \sqrt{X^2(\vec{k}) - Y^2(\vec{k})} = 2S\sqrt{J_o^2 - I^2(\vec{k})} = 2SJ_o\sqrt{1 - I^2(\vec{k})/J_o} \tag{2.8}$$

Ако је $\boldsymbol{ka} << 1$, за просту кубну структуру имамо:

$$\frac{I(\boldsymbol{k})}{\boldsymbol{J_o}} = \frac{1}{6}2\left(\cos \boldsymbol{k_x a} + \cos \boldsymbol{k_y a} + \cos \boldsymbol{k_z a}\right) \approx 1 - \frac{1}{6}\boldsymbol{k}^2\boldsymbol{a}^2$$

Заменом у закон дисперзије (2.8) добија се:

$$\omega_k \approx 2JS6\frac{ka}{\sqrt{3}}.$$

Може се закључити да енергија елементарних екситација у АФМ линеарно зависи од $\boldsymbol{k}$.

3. НЕЛИНЕАРНА ПОБУЂЕЊА - СОЛИТОНИ У ХАЈЗЕНБЕРГОВОМ ФМ

Солитонима називамо таласне облике који се добијају као решење нелинеарних таласних једначина [7]. Особине су им: имају звонасту форму која се у времену не мења; брзина им може зависити од амплитуде, и често порастом брзине расте и амплитуда; могу се сударити и проћи један кроз други без промене облика или брзине, али уз малу промену фазе. За разлику од обичних дисперзивних таласа оваква решења су трајно просторно локализована, не расејавају се и имају практично бесконачан живот, што подсећа на честице.

Експериментално су регистровани још 70 -их година у материјалима који се могу описати Хајзенберговим хамилтонијаном и зато ћемо показати како се теоријски може предвидети њихова егзистенција [8,9,10].

Овде ћемо приказати класично решење којеспинове у Хајзенберговом хамилтонијану третира као класичне векторе дужине S, а касније ћемо објаснити како се узима у обзир квантна природа. Даље, дискретна структура се може занемарити у односу на димензије солитона, па се напушта дискретна слика и прелази у континуалну. Почетни хамилтонијан XXZ - анизотропног, једнодимензионог феромагнетика има форму:

$$H = -\mu B \sum_j S_j^z - \frac{1}{4} J \sum_{j,\rho} \left(S_j^+ S_{j+\rho}^- + S_{j+\rho}^+ S_j^- \right) - \frac{1}{2} \Delta J \sum_{j,\rho} S_j^z S_{j+\rho}^z$$

Реч је о феромагнетном ланцу, тако да сума $\sum_{\vec{m},\vec{n}}$ прелази у суму $\sum_{j,\rho}$, где су ρ суседи чвора j. У обзир је узето спољашње магнетно поље B и интеракција међу компонентама. Ако са a означимо параметар решетке, а са Δ коефицијент анизотропије ($\tilde{J} = \Delta J$), прелаз на континуални облик биће:

$$\frac{1}{a} \sum_n a \Delta n \to \frac{1}{a} \int dx$$

$$H = \frac{1}{a} \int \mathcal{H} \, dx$$

Физички смисао овог прелаза је у томе да се у ланцу посматрају екситације са таласним дужинама много већим од константе решетке. Чинилац $1/a$ је мера густине решетке.

$$H = -\frac{\mu B}{a}\int S^z dx - \frac{Ja^2}{2a}\int \vec{S}\cdot\frac{\partial^2\vec{S}}{\partial x^2}dx - \frac{J}{2a}(\Delta-1)\int\left[\left(2S^z\right)^2 + a^2 S^z\frac{\partial^2 S^z}{\partial x^2}\right]dx$$

Искоришћен је развој :

$$f(j\pm\alpha)\approx f \pm a\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

Преласком на сферне координате:

$$S^z = S\cos\theta = S\,u \qquad \theta = \arccos u$$

$$S^x = S\sin\theta\cos\varphi \qquad u_\xi = -\theta_\xi \sin\theta$$

$$S^y = S\sin\theta\sin\varphi \qquad \theta_\xi^2 = \frac{u_\xi^2}{1-u^2}$$

густину хамилтонијана можемо написати у облику:

$$\mathcal{H} = -\mu BSu + \frac{1}{2}JS^2\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\frac{1}{1-u^2} + \left(1-u^2\right)\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2\right] - JS^2(\Delta-1)u^2 + \frac{1}{2}JS^2(\Delta-1)\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2$$

Сада се формирају Хамилтонове једначине за пар коњугованих променљивих S^z и φ, које дају резултат:

$$\dot{u} = \frac{1}{S}\frac{\partial}{\partial x}JS^2\left(1-u^2\right)\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)$$

$$\dot{\varphi} = -\mu B - 2JS(\Delta-1)u - JS\left[\frac{u}{\left(1-u^2\right)^2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + u\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) + \frac{1}{1-u^2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right] - JS(\Delta-1)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Увођењем смене:

$$\xi = x - vt \qquad \frac{\partial}{\partial t} = -v\frac{\partial}{\partial \xi} \qquad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi}$$

$$\varphi = \varphi(\xi, t) \qquad \frac{v}{JS} = V$$

и граничних услова у $\xi = \pm\infty$: $\theta_\xi = 0, \sin\theta = 0, \cos\theta = 1$, који су у складу са избором основног стања, у којем је $S^z = S$, ми се опредељујемо за солитонско решење, јер гранични услови захтевају да поремећај буде локализован само у мањем делу простора.

Применом граничних услова добија се:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial\xi} = V\frac{1-\cos\theta}{\sin^2\theta} = \frac{V}{1+\cos\theta}$$

Сменом $\varphi = \Omega t + \tilde{\varphi}(\xi)$ налазимо:

$$\Gamma \sin\theta + 2(\Delta - 1)\sin\theta\cos\theta - \frac{V^2\sin\theta}{1+\cos\theta} + \frac{V^2\sin\theta\cos\theta}{(1+\cos\theta)^2} - \theta_{\xi\xi} - (\Delta-1)\sin\theta\frac{\partial}{\partial\xi}(\sin\theta\theta_{\xi\xi}) = 0 \tag{3.1}$$

где је: $\Gamma = \dfrac{\mu B + \Omega}{JS}$.

Ово је солитонска једначина за *XXZ* - ланац. Множењем једначине (3.1) са θ_ξ, интеграцијом по ξ и преласком на нову променљиву β, $\theta = 2\beta$ уз услов $S = 0 \;\Rightarrow\; \beta_S = 0$, добија се израз:

$$\cos^2\beta_o + \frac{2\gamma}{\Gamma}\cos^4\beta_o = \frac{V^2}{4\Gamma} \tag{3.2}$$

Обзиром на везу између ξ и x, очигледно је да се амплитуда β_o креће дуж x-осе брзином V. Угао β дефинише пројекцију спина на z-осу. β_o је екстремна вредност ($\beta_\xi = 0$), тако да одређује центар побуђења који се непромењено креће дуж x-осе, и то побуђење је *солитон*.

Услов (3.2) даје ограничење за брзину солитона. Пошто је $\cos^2\beta_o \geq 0$ имамо:

$$V^2 \leq 4\Gamma + 8\gamma \tag{3.3}$$

У апроксимацији занемаривања анизотропије биће:

$$cos^2\beta\left(\frac{\partial\beta}{\partial\xi}\right)^2 = \Gamma sin^2\beta\left(cos^2\beta + \frac{2(\Delta-1)}{\Gamma}cos^4\beta - \frac{V^2}{4\Gamma}\right) \tag{3.4}$$

Члан уз $\Delta - 1$ не може се занемарити јер I може бити мало (за реална магнетна поља $\mu B << JS$), тако да однос γ/Γ може бити много већи од један. Стављајући да је $\Delta > 0$ једначина (3.4) има решење:

$$sin^2\beta = \frac{\varphi_o^2}{1 + \frac{2A\varphi_o^2}{\sqrt{a}} sh^2\sqrt{aG}\,\xi} \tag{3.5}$$

где је:

$$a = 1 + \frac{2\gamma}{\Gamma} - \frac{V^2}{4\Gamma}; \qquad A^2 = \frac{1+\frac{4\gamma}{\Gamma}}{4a} - \frac{2\gamma}{\Gamma}; \qquad G = \sqrt{2\gamma}V_o$$

Израз (3.5) представља солитонско решење једначине (3.4) за мале вредности $\Delta - 1 << 1$. На основу понашања функције sh^2 види се да поремећај φ^2 има значајну вредност саму у некој малој околини тачке $\xi = 0$. φ узима максималну вредност φ_o у та ч ки $\xi = 0$, а читав таласни пакет заузима простор реда десетак константи решетке. Овакав таласни пакет креће се дуж x-осе брзином дефинисаном изразом (3.3) и остаје непромењен, што је карактеристика солитона.

Између енергије, импулса и магнетизације постоји веза облика:

$$E = \mu B M_z + 4JS^2\sqrt{2\gamma}\,\frac{ch\frac{M_z}{m_o} - cos\frac{P}{2S}}{sh\frac{M_z}{m_o}}$$

Ова веза показује да солитон, поред транслаторног степена слободе (даје зависност енергије од импулса) поседује и један унутрашњи, ротациони степен слободе, који даје зависност енергије од магнетизације.

Овде је приказано класично решавање, а за налажење квантних поправки треба користити неки други метод, нпр. бозонску репрезентацију [6].

Важно је нагласити да ако се бозонске репрезентације користе у непотпуном облику, као резултујуће нелинеарне једначине добија се нелинеарна Шредингерова једначина. С друге стране, развијајући метод којим се узимају доприноси свих бозонских чланова, на пример у класичној апроксимацији, група аутора са ИФ ПМФ је успела да добије ове резултате као што су ови горе наведени [11] и тако показали потпуну еквивалентност ових репрезентација са класичним репрезентацијама добијеним методом спинских кохерентних стања [12].

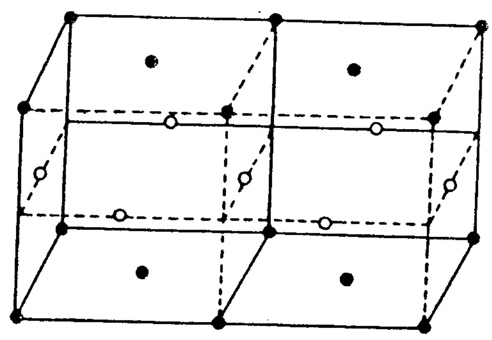
Овај прилаз назваћемо "интегралним" прилазом, јер у сваком реду по $1/S$ узима допринос свих бозонских чланова.

Када су у питању солитони у АФМ, који су експериментално били регистровани, обично се узима у обзир и нека додатна анизотропија која доводи до појаве тзв. sine-Gordonove једначине [7]. Њоме се овде нећемо бавити.

4. МОДЕЛ АНТИФЕРОМАГНЕТА СА ОЧУВАНИМ ПАРАМЕТРОМ УРЕЂЕЊА (OPP AFM)

Познато је да је статика и динамика антиферомагнета (АФМ) потпуно различита од феромагнета (ФМ). АФМ стање окарактерисано је параметром уређености који се не одржава, а спектар спинских таласа је линеаран по таласном вектору $|\vec{k}|$. У случају ФМ параметар уређености је очувана величина а спектар спинских таласа је квадратан по $|\vec{k}|$. Бозе и Чатерји [13] су 1984. предложили за АФМ хамилтонијан линеаран ланац код којег су Нелова стања егзактна основна стања. Овај AFM хамилтонијан може се пресликати на ФМ Хајзенбергов хамилтонијан помоћу унитарне трансформације. Као последица тога спектар побуђења је квадратни по $|\vec{k}|$ и *staggered* (*цик-цак*) *магнетизација* која је параметар уређености је очувана величина [14]. Хамилтонијан се може формулисати и за више димензија ако се решетка састоји од две подрешетке. Хамилтонијан који је специјалан случај $(J^{xx} = -J^{yy})$ потпуно анизотропног Хајзенберговог хамилтонијана $(J^{xx} \neq J^{yy} \neq J^{zz})$ може се описати као моделни АФМ са очуваним параметром уређености (OPP AFM = order parameter preserving antiferromagnet).

Недавне студије [15] наводе АФМ једињење *CeAs* као први пример OPP AFM, где параметар уређења није потпуно одржан, већ скоро. *CeAs* припада фамилији церијумових и уранијумових монопниктида *CeX* и *UX* где је *X=N, P, As, Sb*, или *B*, који кристалишу у површински центрираној *NaCl* структури и имају АФМ основна стања. *CeAs*, на пример, има АФМ структуру типа-I (AF-I) (слика 4.1) са $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ (up, down) поређаним ФМ равнима са $k_z = \dfrac{2\pi}{a}$ (001).

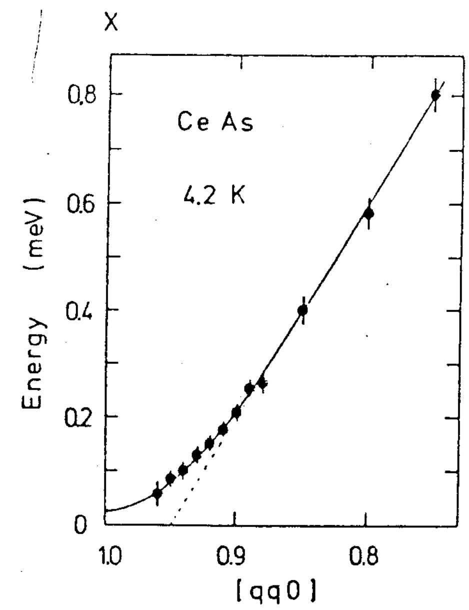


Слика 4.1 *Тип*-I *антиферомагнетног уређења за кубну површински центрирану решетку. Празни кругови означавају спин up (down), а пуни кругови спин down (up)*

Истраживања неутронским расејањем су открила интересантне особине у спектру спинских таласа *CeAs*. Спински таласи имају две гране са предоминантном x и y поларизацијом и са квадратном дисперзијом суседних тачака (X_x): $k_x = \frac{2\pi}{a}(100)$; (X_y): $k_y = \frac{2\pi}{a}(010)$. Магнетне особине *CeX* и *UX* последица су $4f$ и $5f$ електронских Ce^{3+} и U^{3+} респективно. Док су за *CeX* електрони локализовани, у *UX* систему је повећана делокализација $5f$ електрона према лакшим пниктидима.

Дифузно критично неутронско расејање (DCNS) и посебно нееластично неутронско расејање (INS) могу дати врло детаљну слику магнетне анизотропије на макроскопском нивоу. DCNS експерименти показују анизотропију кратко-дометно уређених спинских флуктуација, а INS експерименти дају директну информацију о дуго-дометној динамици спинских корелација.

CeAs уређење на T_N~$8K$ је AF-I структуре. У парамагнетном стању на T=$9K$, INS експерименти су вршени између различитих симетријских праваца [15]. *CeAs* показује фундаментално ново понашање магнетних побуђења. У тачкама *X* дисперзија је квадратна са скоро нултим енергетским гепом ~ 0.03 *meV* (слика 4.2). Ово је потпуно супротно са опште примећеном линеарном дисперзијом код АФМ магнона.



Слика (4.2) *Квадратна дисперзија за спински талас у тачки X за CeAs на $T = 4.2\ K$*

Хамилтонијан са Неловим стањима, као основним стањима, може се написати у једној димензији као [14]:

$$H_A(J,\Delta) = \sum_{i=1}^{N}\left[JS_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2}\Delta\left(S_i^+ S_{i+1}^+ + S_i^- S_{i+1}^-\right)\right] \tag{4.1}$$

где је: $J > 0$, $\Delta > 0$, $0 \le \dfrac{\Delta}{J} \le 1$; N је парно; J, Δ – константе измене.

Напишемо Нелова стања као:

$$\Phi_1 = \alpha_1\,\beta_2\,\alpha_3\,\beta_4 \ldots \alpha_{N-1}\,\beta_N \qquad\qquad \Phi_2 = \beta_1\,\alpha_2\beta_3\,\alpha_4 \ldots \beta_{N-1}\,\alpha_N$$

где су α и β спинске функције up и down респективно. Ова стања су најнижа стања Изинговог дела хамилтонијана (4.1) са енергијом $E_o = -\dfrac{JN}{4}$ а преостали део (4.1) је сума два оператора који "подижу" или "спуштају" за најближе суседе и не дају допринос енергији основног стања.

Посматрајмо феромагнетни линеарни ланац са лонгитудиналном анизотропијом:

$$H_F(-J,-\Delta) = \sum_{i=1}^{N}\left[-JS_i^z S_{i+1}^z - \frac{1}{2}\Delta\left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+\right)\right]$$

Основно стање Φ_F је потпуно уређено стање са енергијом основног стања $-\frac{JN}{4}$. Једноставном канонском трансформацијом може се показати да он има исти енергетски спектар као хамилтонијан:

$$H_F(-J,\Delta)=\sum_{i=1}^{N}\left[-JS_i^zS_{i+1}^z+\frac{1}{2}\Delta\left(S_i^+S_{i+1}^-+S_i^-S_{i+1}^+\right)\right] \tag{4.2}$$

Посматрајмо оператор $A=\prod\sigma^x$, где су σ^x Паулијеве матрице, а производ се узима по наизменичним чворовима (по сваком другом). Канонска трансформација A повезује (4.2) са (4.1) релацијом:

$$AH_F(-J,\Delta)A^{-1}=H_A(J,\Delta)$$

Ово значи да је енергија основног стања (4.1) такође $-\frac{JN}{4}$. Ако са T означимо оператор транслације који помера са једног чвора на следећи, феромагнетно стање Φ_F припада таласном вектору $k=0$, јер је $T\Phi_F=\Phi_F$. Зависно од тога да ли ротирамо спинове на парним или непарним чворовима имао два оператора: A_o и A_e респективно. Ниједан не комутира са T, али је $A_e\Phi_F=\Phi_1$ и $A_o\Phi_F=\Phi_2$. T^2 комутира са A_o и A_e. Спектар и својствене функције (4.2) означене таласним вектором транслационе групе, када на њих делује A, могу се погодно измешати и добити спектар својствених функција (4.1). Пошто T^2 има својствену вредност +1 за Φ_F, стања Φ_1 и Φ_2 имају исту својствену вредност. Два нормирана основна стања која припадају својственим вредностима ±1 за T могу се конструисати на следећи начин:

$$\Phi^+=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_1+\Phi_2),\qquad T\Phi^+=\Phi^+$$

$$\Phi^-=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_1-\Phi_2),\qquad T\Phi^-=-\Phi^-$$

На исти начин могу се конструисати побуђена стања (4.1). Применићемо Блохову апроксимацију и рачунајући на исти начин као у другој глави добија се $\varepsilon(k)\sim Jk^2$. Друга побуђена стања се могу израчунати Bethe Ansatz-om. На коначним температурама једнодимензиони систем не показује дугодометно уређење. Преостаје конструкција АФМ хамилтонијана са Неловим стањима као основним, у три димензије. Посматрамо две прожимајуће решетке (решетку са две подрешетке) и хамилтонијан са интеракцијом најближих суседа ($J > 0$):

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle}\left[-JS_i^z S_j^z + \frac{1}{2}\Delta\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\right)\right] \tag{4.3}$$

где i пребројава једну подрешетку, а j другу, тако да су i и j најближи суседи. Енергија основног стања је $E_o = -\frac{1}{8}Nz$, где је z број првих суседа. На (4.3) делујемо унитарном трансформацијом $C = \prod \sigma^x$, где приозвод иде само по једној подрешетки и добијамо АФМ хамилтонијан.

$$H_A = \frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle}\left[JS_i^z S_j^z + \frac{1}{2}\Delta\left(S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-\right)\right]$$

Можемо имати два C оператора за ротацију две подрешетке. Они стварају два Нелова стања Φ_1 и Φ_2. У Φ_1 спинови up су на подрешетки A, а down на подрешетки B, а обрнуто у Φ_2. Сада се могу узети три примитивне транслације од којих свака преводи Φ_1 у Φ_2 и обрнуто. Функције основног стања

$$\Phi^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_1 + \Phi_2); \qquad \Phi^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_1 - \Phi_2) \tag{4.4}$$

су својствене функције оператора транслације. Спектар побуђења за $J = \Delta$ је $\varepsilon \sim k^2$, $k \to 0$. Основно стања (4.4) има конвенционално дуго-дометно уређење.

Staggered (цик-цак) магнетизација

Остаје да објаснимо порекло назива овог модела. Полазимо од општег случаја:

$$\tilde{M} = \frac{1}{N}\left(\sum_{i\in A} S_i^z + \alpha\sum_{j\in B} S_j^z\right)$$

где је за $\alpha = 1$ - обична магнетизација, а за $\alpha = -1$ - staggerered магнетизација.

Упоређујемо два хамилтонијана

$$H_{AFM}=\frac{1}{2}\sum_{ij}\left[J_{ij}S_i^zS_j^z+\frac{1}{2}\Delta\left(S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+\right)\right]$$

$$i\in A,\ \ j\in B$$

$$H_{OPP}=\frac{1}{2}\sum_{ij}\left[J_{ij}S_i^zS_j^z-\frac{1}{2}\Delta\left(S_i^+S_j^++S_i^-S_j^-\right)\right]$$

Рачунамо комутатор ових хамилтонијана са $\tilde{M}$.

$$\left[H_{AFM},\tilde{M}\right]=\frac{1}{2}\Delta\frac{1}{N}\sum_{ij}\left[S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+,\ \sum_{m\in A}S_m^z+\alpha\sum_{n\in B}S_n^z\right]=$$

$$=\frac{1}{2}\Delta\frac{1}{N}\sum_{ij}\left\{\sum_{m\in A}\left[S_i^+,S_m^z\right]S_j^-+\alpha\sum_{n\in B}S_i^+\left[S_j^-,S_n^z\right]+\sum_{m\in A}\left[S_i^-,S_m^z\right]S_j^++\alpha\sum_{n\in B}S_i^-\left[S_j^+,S_n^z\right]\right\}=$$

$$=\frac{1}{2}\Delta\frac{1}{N}\left\{-\sum_{ij}S_i^+S_j^-++\alpha\sum_{ij}S_i^+S_j^-+\sum_{ij}S_i^-S_j^+-\alpha\sum_{ij}S_i^-S_j^+\right\}$$

За $\alpha=-1$ комутатор је различит од нуле. За $\alpha=1$ комутатор је нула, али тада је укупна магнетизација нула!

$$\left[H_{OPP},\tilde{M}\right]=-\frac{1}{2}\Delta\frac{1}{N}\sum_{ij}\left[S_i^+S_j^++S_i^-S_j^-,\ \sum_{m\in A}S_m^z+\alpha\sum_{n\in B}S_n^z\right]=$$

$$=-\frac{1}{2}\Delta\frac{1}{N}\sum_{ij}\left\{\sum_{m\in A}\left[S_i^+,S_m^z\right]S_j^++\alpha\sum_{n\in B}S_i^+\left[S_j^+,S_n^z\right]+\sum_{m\in A}\left[S_i^-,S_m^z\right]S_j^-+\alpha\sum_{n\in B}S_i^-\left[S_j^-,S_n^z\right]\right\}=$$

$$=-\frac{1}{2}\Delta\frac{1}{N}\left\{\sum_{ij}(-1-\alpha)S_i^+S_j^++\sum_{ij}(1+\alpha)S_i^-S_j^-\right\}$$

Када је $\alpha=-1$, овај комутатор је нула. Значи staggered магнетизација се у овом моделу очувава. Зато је OPP AFM модел који очувава параметар уређености.

5. ХАМИЛТОНИЈАН ОРР AFM У ХОЛШТАЈН-ПРИМАКОВОЈ РЕПРЕЗЕНТАЦИЈИ (ИНТЕГРАЛНИ ПРИСТУП)

Када су објашњене посебне особине ОРР AFM, истраживачи су се заинтересовали и за нелинеарна побуђења у материјалима. Наиме, већина нелинеарних побуђења у AFM се третирају у оквиру Sine - Gordon модела који се добија узимањем у обзир високе анизотропије [7]. Обзиром да овај модел показује особине сличне феромагнетику, постојала је претпоставка да се и овде као основна једначина појављује нелинеарна Шредингерова једначина, као и код феромагнетика. Двојица истраживача, Lin & Zhon [16], су користила бозонску репрезентацију Холштајна и Примакова (ХП) и бозонских кохерентних стања. Наш циљ је да проверимо ову претпоставку, али тако што ћемо прво увести егзактне једначине кретања, а тек у следећој глави анализирати [16]. Користићемо приступ развијен у оквирима лабораторије за теоријску физику института за физику ПМФ у Новом Саду, који смо, како је већ речено, назвали интегрални приступ.

Хамилтонијан ОРР AFM модела има облик:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle}\left[J_{ij}S_i^z S_j^z - \frac{1}{2}\Delta\left(S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-\right)\right] - b\sum_i S_i^z \qquad i \in A, \quad j \in B \tag{5.1}$$

где су J_{ij} и Δ_{ij} интеграли размене, а b је јачина спољног магнетног поља.

Одмах недоумицу изазива последњи члан у изразу, јер по њему поље делује само на једну подрешетку. Зато ћемо последњи члан у изразу (5.1) изоставити у даљем рачуну. Морамо овде објаснити процедуру коју користи већина аутора. Прво се изврши прелазак на бозоне, а затим се израз усредњи по Глауберовим кохерентним стањима која су својствена стања оператора анихилације.

$$B|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

Добијени израз се третира као Хамилтонове функције променљивих β и $i\hbar\beta^*$ и формирају се једначине кретања. Аутори често заборављају да је услов преласка на кохерентна стања да израз буде написан у облику нормалног производа по бозе-операторима. При довођењу на облик нормалних производа јављају се додатни чланови који се обично занемарују. Други битан момент је класичан лимес: $S \to \infty$, $\hbar \to 0$, $S\hbar \to S_d$ који није увек лако реализовати. У интегралном приступу се развија корен у ХП репрезентацији [17,18] до реда $1/S$, доводи на нормалне продукте што даје (5.2).

$$S^{+} = \sqrt{2S}\sum_{k=0}^{\infty}\binom{1/2}{k}\left(-\frac{1}{2}\right)^{k}\left[\frac{B^{+k}B^{k}}{S^{k}} + \frac{1}{S}\frac{k(k-1)}{2}\frac{B^{+k-1}B^{k-1}}{S^{k-1}}\right]B \qquad (5.2.\,a)$$

$$S^{+} = \sqrt{2S}\,B^{+}\sum_{k=0}^{\infty}\binom{1/2}{k}\left(-\frac{1}{2}\right)^{k}\left[\frac{B^{+k}B^{k}}{S^{k}} + \frac{1}{S}\frac{k(k-1)}{2}\frac{B^{+k-1}B^{k-1}}{S^{k-1}}\right] \qquad (5.2.б)$$

$$S^{z} = S - B^{+}B \qquad (5.2.в)$$

Прво се изврши прелаз са спинских на бозонске операторе у ХП репрезентацији, а затим усредњавање чланова по кохерентним стањима. Прво се усредњује S^{z}, да би са J дало класичан лимес.

$$JS^{2} \to J_d \qquad\qquad S_i^{z} = S - B_i^{+}B_i$$

$$\langle\alpha|S_i^{z}|\alpha\rangle = \langle\alpha|S - B_i^{+}B_i|\alpha\rangle = S - |\alpha_i|^{2}$$

У класичној слици је $S^{z} = S\cos\theta$. Ако се то упореди са усредњеним S^{z}, добија се $|\alpha|^{2} = S(1-\cos\theta)$. У класичном лимесу кохерентна амплитуда $|\alpha|$ дивергира. Зато се прелази на нову величину која није дивергентна.

$$\tilde{\alpha} = \frac{\alpha}{\sqrt{S}}$$

Након ове смене имамо:

$$\langle\alpha|S_i^{z}|\alpha\rangle = S\left(1-|\tilde{\alpha}_i|^{2}\right)$$

Применом (5.2. *a*) и (5.2. *б*) добија се:

$$\langle\alpha|S_i^{-}|\alpha\rangle = \sqrt{2S}\,\tilde{\alpha}_i^{*}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}_i|^{2}}{2}}\left[1-\frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\alpha}_i|^{2}}{\left(1-|\tilde{\alpha}_i|^{2}/2\right)^{3/2}}\right]$$

Сада уочавамо да имамо две подрешетке A и B за које уводимо две врсте бозона и којима придружујемо кохерентна стања $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$.

$$\langle\alpha|S_i^+|\alpha\rangle = \langle\alpha|S_i^-|\alpha\rangle^* \qquad\qquad \langle\beta|S_j^+|\beta\rangle = \langle\beta|S_j^-|\beta\rangle^*$$

$$\langle\alpha,\beta|H|\alpha,\beta\rangle = H = -\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}S^2 + \sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}S^2|\tilde{\alpha}_i|^2 + \sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}S^2|\tilde{\beta}_j|^2 - \sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}S^2|\tilde{\alpha}_i|^2|\tilde{\beta}_j|^2 -$$

$$-\Delta S^2\sum_{\langle ij\rangle}\left(\tilde{\alpha}_i^*\tilde{\beta}_j + \tilde{\alpha}_i\tilde{\beta}_j\right)\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}_i|^2}{2}}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}_j|^2}{2}}\left[1-\frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\alpha}_i|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}_i|^2/2\right)^2}-\frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\beta}_j|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}_j|^2/2\right)^2}\right]$$

Користећи апроксимацију најближих суседа и одбацујући дивергентни члан $\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}$, хамилтинијан постаје:

$$H = 2JS^2\sum_i|\tilde{\alpha}_i|^2 + 2JS^2\sum_i|\tilde{\beta}_j|^2 - JS^2\sum_{\langle ij\rangle}|\tilde{\alpha}_i|^2|\tilde{\beta}_j|^2 -$$

$$-\Delta S^2\sum_{\langle ij\rangle}\left(\tilde{\alpha}_i^*\tilde{\beta}_j + \tilde{\alpha}_i\tilde{\beta}_j\right)\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}_i|^2}{2}}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}_j|^2}{2}}\left[1-\frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\alpha}_i|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}_i|^2/2\right)^2}-\frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\beta}_j|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}_j|^2/2\right)^2}\right]$$

Ако извршимо центрирање у i - том чвору, тада се у j чворовима налазе два суседа $\pm a$, $\rho = \pm 1$.

$$H_i = 2JS^2\sum_i|\tilde{\alpha}_i|^2 + 2JS^2\sum_i|\tilde{\beta}_j|^2 - JS^2\sum_i\sum_{\rho=\pm a}|\tilde{\alpha}_i|^2|\tilde{\beta}_{i+\rho}|^2 -$$

$$-\Delta S^2\sum_i\sum_{\rho=\pm a}\left(\tilde{\alpha}_i^*\tilde{\beta}_{i+\rho} + \tilde{\alpha}_i\tilde{\beta}_{i+\rho}^*\right)\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}_i|^2}{2}}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}_{i+\rho}|^2}{2}}\left[1-\frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\alpha}_i|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}_i|^2/2\right)^2}-\frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\beta}_{i+\rho}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}_{i+\rho}|^2/2\right)^2}\right]$$

Ако се изврши прелаз на континуум $\sum_i \sum_j \to \int dx$; $\alpha_i \to \alpha(x)$; $\beta_{i+\rho} \to \beta(x \pm a)$ и искористи Тејлоров развој до члана a^2:

$$f(x \pm a) = f(x) \pm a \frac{d}{dx}\big(f(x)\big)_x + \frac{a^2}{2}\frac{d^2}{dx^2}\big(f(x)\big)_x$$

добиће се израз у којем се чланови пропорционални a потиру, а испред осталих се појављује фактор 2. Након што се групишу чланови са изводима и без извода добија се:

$$H_t = 2JS^2 \frac{1}{a}\int dx |\tilde{\alpha}|^2 + 2JS^2 \frac{1}{a}\int dx |\tilde{\beta}|^2 - 2JS^2 \frac{1}{a}\int dx |\tilde{\alpha}|^2 |\tilde{\beta}|^2 -$$

$$-2\Delta S^2 \frac{1}{a}\int dx \left(\tilde{\alpha}^*\tilde{\beta} + \tilde{\alpha}\tilde{\beta}\right)\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\left[1 - \frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}\right] +$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx \left(\tilde{\alpha}^*\tilde{\beta} + \tilde{\alpha}\tilde{\beta}\right)\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2} +$$

$$+\frac{a^2}{2}\left\{-2JS^2 \frac{1}{a}\int dx |\tilde{\alpha}|^2 |\tilde{\beta}|^2_{xx} - 2\Delta S^2 \frac{1}{a}\int dx \tilde{\alpha}^* \sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\beta}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\right) +\right.$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx \tilde{\alpha}^* \sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\beta}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}\right) -$$

$$-2\Delta S^2 \frac{1}{a}\int dx \tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\beta}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\right) +$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx\tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\beta}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}\right)+$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx\tilde{\alpha}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\beta}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\right)+$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx\tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\beta}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\right)\Bigg\} \tag{5.3}$$

Израз (5.3) је погодан за диференцирање. Ако извршимо центрирање у j - том чвору, тада се у i чворовима налазе два суседа $\pm a$, $\rho = \pm 1$.

$$H_j = 2JS^2\frac{1}{a}\int dx|\tilde{\alpha}|^2 + 2JS^2\frac{1}{a}\int dx|\tilde{\beta}|^2 - 2JS^2\frac{1}{a}\int dx|\tilde{\alpha}|^2|\tilde{\beta}|^2 -$$

$$-2\Delta S^2\frac{1}{a}\int dx\left(\tilde{\alpha}^*\tilde{\beta}+\tilde{\alpha}\tilde{\beta}^*\right)\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\left[1-\frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}-\frac{1}{32S}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2}\right]-$$

$$-\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx\left(\tilde{\alpha}^*\tilde{\beta}+\tilde{\alpha}\tilde{\beta}^*\right)\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2}+$$

$$+\frac{a^2}{2}\left\{-2JS^2\frac{1}{a}\int dx|\tilde{\alpha}|^2_{xx}|\tilde{\beta}|^2 - 2\Delta S^2\frac{1}{a}\int dx\tilde{\beta}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\alpha}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\right)+\right.$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx\tilde{\beta}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\alpha}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2}\right)-$$

$$-2\Delta S^2\frac{1}{a}\int dx\tilde{\beta}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\right)+$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx\tilde{\beta}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2}\right)+$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx\tilde{\beta}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\alpha}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\right)+$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\frac{1}{a}\int dx\tilde{\beta}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)}\frac{d^2}{dx^2}\left(\tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\right) \qquad (5.4)$$

Поређењем (5.3) и (5.4) може се закључити:

1. Део који не зависи од извода је исти.
2. H_j се може извести из H_i сменом $\tilde{\alpha} \leftrightarrow \tilde{\beta}$.
3. Ако се изводи у датим изразима интеграле парцијално два пута, уз услове: $\tilde{\alpha}(\pm\infty)=\tilde{\alpha}_x(\pm\infty)=\tilde{\alpha}_{xx}(\pm\infty)=0$, добиће се да је $H_i=H_j$, те се може користити било који облик. За добијање једначине кретања за $\tilde{\alpha}$ користиће се H_i, а за једначину за $\tilde{\beta}$ користиће се H_j. Уместо да пишемо изводе, рачун вршимо развијањем у ред по a. Искористе се изрази [19,20]:

$$\frac{|\tilde{\beta}(x+a)|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}(x+a)|^2/2\right)^2}=\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}+a|\tilde{\beta}|_x^2\frac{1+\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^3}+$$

$$+\frac{a^2}{2}\left|\tilde{\beta}\right|^2_{xx}\frac{1+\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{2}}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^3}+a^2\left(\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\right)^2\frac{1+\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{4}}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^4}$$

$$\tilde{\beta}(x+a)\sqrt{1-\frac{\left|\tilde{\beta}(x+a)\right|^2}{2}}=\sqrt{1-\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{2}}\left[\tilde{\beta}+a\tilde{\beta}_x-\frac{a}{4}\frac{\tilde{\beta}\left|\tilde{\beta}\right|^2_x}{1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2}+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}_{xx}-\right.$$

$$\left.-\frac{a^2}{8}\frac{\tilde{\beta}\left|\tilde{\beta}\right|^2_{xx}}{1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2}-\frac{a^2}{32}\frac{\tilde{\beta}\left(\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\right)^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^2}-\frac{a^2}{4}\frac{\tilde{\beta}_x\left|\tilde{\beta}\right|^2_x}{1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2}\right]$$

$$\tilde{\beta}(x+a)\sqrt{1-\frac{\left|\tilde{\beta}(x+a)\right|^2}{2}}\frac{\left|\tilde{\beta}(x+a)\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}(x+a)\right|^2/2\right)^2}=$$

$$=\sqrt{1-\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{2}}\left[\frac{\tilde{\beta}\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^2}+a\tilde{\beta}\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\frac{1+\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{4}}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^3}+a\frac{\tilde{\beta}_x\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^2}+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}\left|\tilde{\beta}\right|^2_{xx}\frac{1+\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{4}}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^3}+\right.$$

$$\left.+a^2\tilde{\beta}\left(\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\right)^2\frac{\frac{3}{4}+\frac{3}{32}\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^4}+a^2\tilde{\beta}_x\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\frac{1+\frac{1}{4}\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^3}+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}_{xx}\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^2}\right]$$

и добија:

$$\mathcal{H} = 2JS^2|\tilde{\alpha}|^2 + 2JS^2|\tilde{\beta}|^2 - 2JS^2|\tilde{\alpha}|^2\left[|\tilde{\beta}|^2 + \frac{a^2}{2}|\tilde{\beta}|^2_{xx}\right] - 2\Delta S^2\tilde{\alpha}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\left\{\ \tilde{\beta} + \right.$$

$$\left. + \frac{a^2}{2}\tilde{\beta}_{xx} - \frac{a^2}{8}\frac{\tilde{\beta}|\tilde{\beta}|^2_{xx}}{1-|\tilde{\beta}|^2/2} - \frac{a^2}{32}\frac{\tilde{\beta}\left(|\tilde{\beta}|^2_x\right)^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2} - \frac{a^2}{4}\frac{\tilde{\beta}_x|\tilde{\beta}|^2_x}{1-|\tilde{\beta}|^2/2} - \frac{1}{32S}\left[\frac{\tilde{\beta}|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2} + \right.\right.$$

$$+ \frac{a^2}{2}\tilde{\beta}|\tilde{\beta}|^2_{xx}\frac{1+\frac{|\tilde{\beta}|^2}{4}}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^3} + a^2\tilde{\beta}\left(|\tilde{\beta}|^2_x\right)^2\frac{\frac{3}{4}+\frac{3}{32}|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^4} + a^2\tilde{\beta}_x|\tilde{\beta}|^2_x\frac{1+\frac{|\tilde{\beta}|^2}{4}}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^3} +$$

$$\left.\left. + \frac{a^2}{2}\tilde{\beta}_{xx}\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}\right]\right\} - 2\Delta S^2\tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\left\{\tilde{\beta}^* + \frac{a^2}{2}\tilde{\beta}^*_{xx} - \frac{a^2}{8}\frac{\tilde{\beta}^*|\tilde{\beta}|^2_{xx}}{1-|\tilde{\beta}|^2/2} - \right.$$

$$\left. - \frac{a^2}{32}\frac{\tilde{\beta}^*\left(|\tilde{\beta}|^2_x\right)^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2} - \frac{a^2}{4}\frac{\tilde{\beta}^*_x|\tilde{\beta}|^2_x}{1-|\tilde{\beta}|^2/2} - \frac{1}{32S}\left[\frac{\tilde{\beta}^*|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2} + \frac{a^2}{2}\tilde{\beta}^*|\tilde{\beta}|^2_{xx}\frac{1+\frac{|\tilde{\beta}|^2}{4}}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^3} + \right.\right.$$

$$\left.\left. + a^2\tilde{\beta}^*\left(|\tilde{\beta}|^2_x\right)^2\frac{\frac{3}{4}+\frac{3}{32}|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^4} + a^2\tilde{\beta}^*_x|\tilde{\beta}|^2_x\frac{1+\frac{|\tilde{\beta}|^2}{4}}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^3} + \frac{a^2}{2}\tilde{\beta}^*_{xx}\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}\right]\right\} +$$

$$+\frac{2\Delta S^2}{32S}\tilde{\alpha}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}_i|^2/2\right)^2}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\left\{\tilde{\beta}+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}_{xx}-\frac{a^2}{8}\frac{\tilde{\beta}|\tilde{\beta}|^2_{xx}}{1-|\tilde{\beta}|^2/2}-\frac{a^2}{32}\frac{\tilde{\beta}\left(|\tilde{\beta}|^2_x\right)^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}-\right.$$

$$\left.-\frac{a^2}{4}\frac{\tilde{\beta}_x|\tilde{\beta}|^2_x}{1-|\tilde{\beta}|^2/2}\right\}+\frac{2\Delta S^2}{32S}\tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\left\{\tilde{\beta}^*+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}^*_{xx}-\right.$$

$$\left.-\frac{a^2}{8}\frac{\tilde{\beta}^*|\tilde{\beta}|^2_{xx}}{1-|\tilde{\beta}|^2/2}-\frac{a^2}{32}\frac{\tilde{\beta}^*\left(|\tilde{\beta}|^2_x\right)^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}-\frac{a^2}{4}\frac{\tilde{\beta}^*_x|\tilde{\beta}|^2_x}{1-|\tilde{\beta}|^2/2}\right\} \tag{5.5}$$

Израз (5.5) има погодан облик за диференцирање. Сада се искористе изводи:

$$\frac{\partial}{\partial\tilde{\alpha}^*}\tilde{\alpha}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}=\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{1-\frac{3}{4}|\tilde{\alpha}|^2}{1-|\tilde{\alpha}|^2/2}$$

$$\frac{\partial}{\partial\tilde{\alpha}^*}\tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}=-\frac{\tilde{\alpha}^2}{2}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{1}{1-|\tilde{\alpha}|^2/2}$$

$$\frac{\partial}{\partial\tilde{\alpha}^*}\tilde{\alpha}^*\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2}=2\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}|\tilde{\alpha}|^2\frac{1-\frac{1}{8}|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^3}$$

$$\frac{\partial}{\partial\tilde{\alpha}^*}\tilde{\alpha}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^2}=\tilde{\alpha}^2\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{1+\frac{1}{4}|\tilde{\alpha}|^2}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^3}$$

Преостаје да се формира једначина кретања:

$$iS_c\frac{d\tilde{\alpha}}{dt}=\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\tilde{\alpha}^*}\tag{5.6}$$

$$iS_c\frac{\partial\tilde{\alpha}}{\partial t}=2JS^2\tilde{\alpha}-2JS^2\tilde{\alpha}\left(\left|\tilde{\beta}\right|^2+\frac{a^2}{2}\left|\tilde{\beta}\right|^2_{xx}\right)-2\Delta S^2\sqrt{1-\frac{\left|\tilde{\alpha}\right|^2}{2}}\,\frac{1-\frac{3}{4}\left|\tilde{\alpha}\right|^2}{1-\left|\tilde{\alpha}\right|^2/2}\sqrt{1-\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{2}}\Bigg\{\tilde{\beta}+$$

$$+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}_{xx}-\frac{a^2}{8}\frac{\tilde{\beta}\left|\tilde{\beta}\right|^2_{xx}}{1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2}-\frac{a^2}{32}\frac{\tilde{\beta}\left(\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\right)^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^2}-\frac{a^2}{4}\frac{\tilde{\beta}_x\left|\tilde{\beta}\right|^2_x}{1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2}-\frac{1}{32S}\Bigg[\frac{\tilde{\beta}\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^2}+$$

$$+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}\left|\tilde{\beta}\right|^2_{xx}\frac{1+\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{4}}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^3}+a^2\tilde{\beta}\left(\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\right)^2\frac{\frac{3}{4}+\frac{3}{32}\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^4}+a^2\tilde{\beta}_x\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\frac{1+\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{4}}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^3}+$$

$$+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}_{xx}\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^2}\Bigg]\Bigg\}+2\Delta S^2\frac{\tilde{\alpha}}{4}\sqrt{1-\frac{\left|\tilde{\alpha}\right|^2}{2}}\,\frac{1}{1-\left|\tilde{\alpha}\right|^2/2}\sqrt{1-\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{2}}\Bigg\{\tilde{\beta}^*+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}^*_{xx}-$$

$$-\frac{a^2}{8}\frac{\tilde{\beta}^*\left|\tilde{\beta}\right|^2_{xx}}{1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2}-\frac{a^2}{32}\frac{\tilde{\beta}^*\left(\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\right)^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^2}-\frac{a^2}{4}\frac{\tilde{\beta}^*_x\left|\tilde{\beta}\right|^2_x}{1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2}-\frac{1}{32S}\Bigg[\frac{\tilde{\beta}^*\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^2}+$$

$$+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}^*\left|\tilde{\beta}\right|^2_{xx}\frac{1+\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{4}}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^3}+a^2\tilde{\beta}^*\left(\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\right)^2\frac{\frac{3}{4}+\frac{3}{32}\left|\tilde{\beta}\right|^2}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^4}+a^2\tilde{\beta}^*_x\left|\tilde{\beta}\right|^2_x\frac{1+\frac{\left|\tilde{\beta}\right|^2}{4}}{\left(1-\left|\tilde{\beta}\right|^2/2\right)^3}+$$

$$+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}_{xx}\frac{|\tilde{\beta}|^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}\Bigg]\Bigg\}+\frac{2\Delta S^2}{32S}2\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}|\tilde{\alpha}|^2\frac{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{8}}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^3}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\Bigg\{\tilde{\beta}+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}_{xx}-$$

$$-\frac{a^2}{8}\frac{\tilde{\beta}|\tilde{\beta}|^2_{xx}}{1-|\tilde{\beta}|^2/2}-\frac{a^2}{32}\frac{\tilde{\beta}\left(|\tilde{\beta}|^2_x\right)^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}-\frac{a^2}{4}\frac{\tilde{\beta}_x|\tilde{\beta}|^2_x}{1-|\tilde{\beta}|^2/2}\Bigg\}+\frac{2\Delta S^2}{32S}\tilde{\alpha}^2\sqrt{1-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}}\frac{1+\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{4}}{\left(1-|\tilde{\alpha}|^2/2\right)^3}\sqrt{1-\frac{|\tilde{\beta}|^2}{2}}\Bigg\{\tilde{\beta}^*+$$

$$+\frac{a^2}{2}\tilde{\beta}^*_{xx}-\frac{a^2}{8}\frac{\tilde{\beta}^*|\tilde{\beta}|^2_{xx}}{1-|\tilde{\beta}|^2/2}-\frac{a^2}{32}\frac{\tilde{\beta}^*\left(|\tilde{\beta}|^2_x\right)^2}{\left(1-|\tilde{\beta}|^2/2\right)^2}-\frac{a^2}{4}\frac{\tilde{\beta}^*_x|\tilde{\beta}|^2_x}{1-|\tilde{\beta}|^2/2}\Bigg\} \tag{5.7}$$

Једначина $iS_c\frac{d\tilde{\beta}}{dt}=\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\tilde{\beta}^*}$ добија се сменом: $\tilde{\alpha}\leftrightarrow\tilde{\beta}$ у једначини (5.7). Ово је систем једначина који би се евентуално могао решавати нумерички. Наш циљ је пре свега био да укажемо колико је овај систем далеко од система који је раније третиран, што ћемо учинити у следећем поглављу.

6. АНАЛИЗА РАДА: WU-MING LIU AND BEN-LIAN ZHOU: SOLITONS IN AN OPP AFM JPCM 5 L 149-156 (1993.)

Liu и Zhou полазе од хамилтонијана у моделу OPP-AFM, чији је облик у спољном магнетном пољу дат са:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle}\left[J_{ij} S_i^z S_j^z - \frac{1}{2}\Delta_{ij}\left(S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-\right)\right] - b\sum_i S_i^z$$

Иако смо већ нагласили да је члан са магнетним пољем споран, ипак ћемо га овде задржати и то у облику у којем га користе L.Z. да би анализа била потпунија.

Рачун врше у Дајсон-Малејев-ој репрезентацији која даје следећу везу између оператора у хилбертовом спинском и бозонском простору:

$$S_i^+ = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{a_i^+ a_i}{2S}\right)a_i \qquad S_i^- = \sqrt{2S}\, a_i^+ \qquad S_i^z = S - a_i^+ a_i \ , \quad i \in A$$

$$S_j^+ = \sqrt{2S}\, b_j^+\left(1 - \frac{b_j^+ b_j}{2S}\right) \qquad S_j^- = \sqrt{2S}\, b_j \qquad S_j^z = -S + b_j^+ b_j \ , \ j \in B$$

На тај начин формира се бозонски хамилтонијан:

$$H = -S^2\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} - b\sum_i S + \sum_{\langle ij \rangle} S\, J_{ij} a_i^+ a_i + b\sum_i a_i^+ a_i + S\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} b_j^+ b_j - S\sum_{\langle ij \rangle}\Delta_{ij}\left(a_i b_j^+ + a_i^+ b_j\right) -$$

$$\frac{1}{2}\sum_{\langle ij \rangle}\Delta_{ij}\left(a_i^+ a_i a_i b_j^+ + a_i b_j^+ b_j^+ b_j\right) - \frac{1}{4S}\sum_{\langle ij \rangle}\Delta_{ij} a_i^+$$

$$\frac{1}{2}\sum_{\langle ij \rangle}\Delta_{ij}\left(a_i^+ a_i a_i b_j^+ + a_i b_j^+ b_j^+ b_j\right) - \frac{1}{4S}\sum_{\langle ij \rangle}\Delta_{ij} a_i^+ a_i a_i b_j^+ b_j^+ b_j$$

Уочимо да је хамилтонијан неермитски. Одбаце се прва два члана као дивергентна и поређењем са формулом (3) у њиховом раду уочава се члан $\sum_{\langle ij\rangle}\left(b + S\,J_{ij}\right)$ којим је b доведено и под j суму.Затим су извршили прелаз на кохерентна стања:

$$a_i|\alpha_i\rangle = \alpha_i|\alpha_i\rangle, \qquad b_j|\beta_j\rangle = \beta_j|\beta_j\rangle$$

и разматрали систем који садржи само интеракције најближих суседа:

$$\Delta_{ij} = \Delta \qquad J_{ij} = J$$

Може се извршити димензиона провера:

$$S^z = S - a_i^+ a_i \quad \Rightarrow \quad \left\langle \alpha \middle| S - a_i^+ a_i \middle| \alpha \right\rangle = S - |\alpha_i|^2$$

$$\alpha = \sqrt{S}\,\tilde{\alpha} \quad \Rightarrow \quad \left\langle S^z \right\rangle = S - S|\tilde{\alpha}|^2 = S\left(1 - |\tilde{\alpha}|^2\right)$$

$$H = 2S^2\sum_i|\tilde{\alpha}_i|^2 + bS\sum_i|\tilde{\alpha}_i|^2 + 2S^2J\sum_j\left|\tilde{\beta}_j\right|^2 - S^2\Delta\sum_{\langle ij\rangle}\left(\tilde{\alpha}_i\tilde{\beta}_j^* + \tilde{\alpha}_i^*\tilde{\beta}_j\right) - \sum_{\langle ij\rangle}J\,S^2|\tilde{\alpha}_i|^2\left|\tilde{\beta}_j\right|^2 +$$

$$+\frac{1}{2}\Delta S^2\sum_{\langle ij\rangle}\left(|\tilde{\alpha}_i|^2\tilde{\alpha}_i\tilde{\beta}_j + \tilde{\alpha}_i\tilde{\beta}_j^*\left|\tilde{\beta}_j\right|^2\right) - \frac{1}{4S}\Delta S^3\sum_{\langle ij\rangle}|\tilde{\alpha}_i|^2\tilde{\alpha}_i\tilde{\beta}_j\left|\tilde{\beta}_j\right|^2$$

$JS^2, \Delta S^2$ су у класичном лимесу J_{cl} и Δ_{cl}. Посматра се последњи члан $\frac{1}{4S}\Delta S^3 = \frac{1}{4}\Delta S^2 = \frac{1}{4}\Delta_{cl}$. Значи овај члан није реда $1/S$, односно није никаква поправка.

Апроксимација најближих суседа може се посматрати на два начина:

1. центрирањем у i-том чвору добија се:

$$H = (2SJ + b)\sum_i|\alpha_i|^2 + 2SJ\sum_j|\beta_j|^2 - S\Delta\sum_{ij}\left[\alpha_i\left(\beta_{j-1}^* + \beta_j^*\right) + \alpha_i^*\left(\beta_{j-1} + \beta_j\right)\right] -$$

$$-J\sum_{ij}|\alpha_i|^2\left(|\beta_{j-1}|^2+|\beta_j|^2\right)+\frac{1}{2}\Delta\sum_{ij}\left[\alpha_i|\alpha_i|^2\left(\beta^*_{j-1}+\beta^*_j\right)+\alpha_i\left(\beta^*_{j-1}|\beta_{j-1}|^2+\beta^*_j|\beta_j|^2\right)\right]-$$

$$-\frac{\Delta}{4S}\sum_{ij}\alpha_i|\alpha_i|^2\left(\beta^*_{j-1}|\beta_{j-1}|^2+\beta^*_j|\beta_j|^2\right)$$

2. центрирањем у j - ом чвору добија се:

$$H=(2SJ+b)\sum_i|\alpha_i|^2+2SJ\sum_j|\beta_j|^2-S\Delta\sum_j\left[\beta^*_j(\alpha_{i+1}+\alpha_i)+\beta_j(\alpha^*_i+\alpha^*_{i+1})\right]-$$

$$-J\sum_j|\beta_j|^2\left(|\alpha_i|^2+|\alpha_{i+1}|^2\right)+\frac{1}{2}\Delta\sum_j\left[\beta_j|\beta_j|^2(\alpha_i+\alpha_{i+1})+\beta^*_j\left(\alpha_i|\alpha_i|^2+\alpha_{i+1}|\alpha_{i+1}|^2\right)\right]-$$

$$-\frac{\Delta}{4S}\sum_j\beta_j|\beta_j|^2\left(\alpha_i|\alpha_i|^2+\alpha_{i+1}|\alpha_{i+1}|^2\right)$$

Одговарајуће једначине кретања су:

$$i\hbar\frac{d\alpha_i}{dt}=\frac{\partial H}{\partial\alpha^*_i}\qquad\qquad i\hbar\frac{d\beta_j}{dt}=\frac{\partial H}{\partial\beta^*_j}$$

затим врше прелазак на континуум:

$$\alpha_i(t)\to\psi_1(x,t);\qquad\qquad \alpha_{i+1}(t)\to\psi_1(x)+\eta\psi_{1x}+\frac{\eta^2}{2}\psi_{1xx}+0(\eta^3)$$

$$\beta_j(t)\to\psi_2(x,t);\qquad\qquad \beta_{j-1}(t)\to\psi_2(x)-\eta\psi_{2x}+\frac{\eta^2}{2}\psi_{2xx}+0(\eta^3)$$

где је $\eta=\dfrac{d_o}{\lambda_o}$ бездимензиони параметар, а d_o константа решетке.

Може се уочити, када $i\to x$, онда $j\to x+d$. Њихове једначине су:

$$i\hbar\,\psi_{1t} = (SJ + b)\psi_1 - S\Delta\left(2\psi_2 - \eta\psi_{2x} + \frac{1}{2}\eta^2\psi_{2xx}\right) - 2J\psi_1|\psi_2|^2 +$$

$$+\Delta\psi_1^2\psi_2^* - \frac{1}{2S}\Delta\psi_1^2|\psi_2|^2\psi_2^* \tag{8.a}$$

$$i\hbar\,\psi_{2t} = SJ\psi_2 - S\Delta\left(2\psi_1 + \eta\psi_{1x} + \frac{1}{2}\eta^2\psi_{1xx}\right) - 2J\psi_2|\psi_1|^2 + 2\Delta\psi_1|\psi_2|^2 -$$

$$-\frac{1}{S}\Delta\psi_1|\psi_1|^2|\psi_2|^2 + \Delta\left|\psi_1|\psi_1|^2\right| \tag{8.б}$$

Наш рачун даје:

$$i\hbar\,\psi_{1t} = (2SJ + b)\psi_1 - S\Delta(2\psi_2 + \eta^2\psi_{2xx}) - 2J\psi_1|\psi_2|^2 - \underline{\eta^2 J\psi_1|\psi_2|^2_{xx}}$$

$$+\Delta\psi_1^2\psi_2^* - \frac{1}{2S}\Delta\psi_1^2|\psi_2|^2\psi_2^* + \underline{\frac{1}{2}\eta^2\Delta\psi_1^2\psi_{2xx} - \frac{\Delta}{4S}\eta^2\psi_1^2|\psi_2|^2\psi_{2xx}}$$

$$\underline{-\frac{\Delta}{4S}2\eta^2\psi_1^2\psi_{2x}^*|\psi_2|^2_x - \frac{\Delta}{4S}\eta^2\psi_1^2|\psi_2|^2_{xx}\psi_2^*}$$

Подвучени чланови недостају у једначини (8.*a*), јер β_j узимају на истом месту, а не у $x + d$. Такође, недостаје им развој β_{j-1}. На исти начин, при центрирању у j, добија се:

$$i\hbar\,\psi_{2t} = 2SJ\psi_2 - \underline{S\Delta(2\psi_1 + \eta^2\psi_{1xx})} - 2J\psi_2\left(2|\psi_1|^2 + \eta^2|\psi_1|^2_{xx}\right) +$$

$$+\Delta|\psi_2|^2(2\psi_1 + \eta^2\psi_{1xx}) + \frac{\Delta}{2}\left(2|\psi_1|^2 + \eta^2\psi_{1xx}|\psi_1|^2 + \underline{2\eta^2\psi_{1x}|\psi_1|^2|\psi_1|^2_x + \eta^2|\psi_1|^2_{xx}\psi}\right) -$$

$$\underline{-\frac{\Delta}{2S}|\psi_2|^2\left(2\psi_1|\psi_1|^2 + \eta^2\psi_{1xx}|\psi_1|^2 + 2\eta^2\psi_{1x}^*|\psi_1|^2_x + \eta^2|\psi_1|^2_{xx}\psi\right)}$$

Преостаје провера нелинеарне Шредингерове једначине. Претпоставимо да важе једначине (8.*а*) и (8.*б*) у раду [16]. Аутори користе метод вишеструких скала (multiple scale). Основе примене овог метода за добијање нелинеарне Шредингерове једначине су дате у додатку. У развоју се заустављамо на члану пропорционалном μ^3:

$$\psi_n = \mu\psi_n^{(1)} + \mu^2\psi_n^{(2)} + \mu^3\psi_n^{(3)} + \ldots$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t_o} + \mu\frac{\partial}{\partial t_1} + \mu^2\frac{\partial}{\partial t_2} + \mu^3\frac{\partial}{\partial t_3} + \ldots$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x_o} + \mu\frac{\partial}{\partial x_1} + \mu^2\frac{\partial}{\partial x_2} + \mu^3\frac{\partial}{\partial x_3} + \ldots$$

Развијајући функцију, затим изводе и изједначавајући коефицијенте испред μ **истог степена, добијају се једначине чији је општи облик:**

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o} - \omega_1\right)\psi_1^{(j)} + L_1\psi_2^{(j)} = \beta_1^{(j)};$$

$$L_1 = S\Delta\left(2 - \eta\frac{\partial}{\partial x_o} + \frac{1}{2}\eta^2\frac{\partial^2}{\partial x_o^2}\right); \qquad \omega_1 = SJ + h; \qquad j = 1,2,3$$

$$\beta_1^{(1)} = 0 \qquad \beta_1^{(2)} = -i\hbar\frac{\partial\psi_1^{(1)}}{\partial t_1} + S\Delta\left(\eta\frac{\partial\psi_2^{(2)}}{\partial x_1} - \eta^2\frac{\partial^2\psi_2^{(1)}}{\partial x_o\partial x_1}\right)$$

$$\beta_1^{(3)} = -i\hbar\left(\frac{\partial\psi_1^{(2)}}{\partial t_1} + \frac{\partial\psi_2^{(1)}}{\partial t_2}\right) + S\Delta\eta\left(\frac{\partial\psi_2^{(2)}}{\partial x_1} + \frac{\partial\psi_2^{(1)}}{\partial x_2}\right) -$$

$$-\frac{1}{2}S\Delta\eta^2\left(2\frac{\partial^2\psi_2^{(2)}}{\partial x_o\partial x_1} + 2\frac{\partial^2\psi_2^{(1)}}{\partial x_o\partial x_2} + \frac{\partial^2\psi_2^{(1)}}{\partial x_1^2}\right) - 2J\psi_1^{(1)}\left|\psi_2^{(1)}\right|^2 + \underline{\Delta\psi_1^{(1)2}\psi_2^{(1)*}}$$

Подвучени члан недостаје. Исто се понови за једначину (8.*б*).

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o}-\omega_2\right)\psi_2^{(j)}+L_2\psi_1^{(j)}=\beta_2^{(j)}$$

$$L_2=S\Delta\left(2+\eta\frac{\partial}{\partial x_o}+\frac{1}{2}\eta^2\frac{\partial^2}{\partial x_o^2}\right);\qquad \omega_2=SJ;\qquad j=1,2,3$$

$$\beta_2^{(1)}=0\qquad \beta_2^{(2)}=-i\hbar\frac{\partial\psi_2^{(1)}}{\partial t_1}-S\Delta\left(\eta\frac{\partial\psi_1^{(2)}}{\partial x_1}+\eta^2\frac{\partial^2\psi_1^{(1)}}{\partial x_o\partial x_1}\right)$$

$$\beta_2^{(3)}=-i\hbar\left(\frac{\partial\psi_2^{(2)}}{\partial t_1}+\frac{\partial\psi_2^{(1)}}{\partial t_2}\right)-S\Delta\eta\left(\frac{\partial\psi_1^{(2)}}{\partial x_1}+\frac{\partial\psi_1^{(1)}}{\partial x_2}\right)-$$

$$-\frac{1}{2}S\Delta\eta^2\left(2\frac{\partial^2\psi_1^{(2)}}{\partial x_o\partial x_1}+2\frac{\partial^2\psi_1^{(1)}}{\partial x_o\partial x_2}+\frac{\partial^2\psi_1^{(1)}}{\partial x_1^2}\right)-2J\psi_2^{(1)}\left|\psi_1^{(1)}\right|^2+\Delta\psi_1^{(1)}\left|\psi_1^{(1)}\right|^2+2\Delta\psi_1^{(1)}\left|\psi_2^{(1)}\right|^2$$

То су једначине (11) у раду [16]. Сада се прави једначина за једну амплитуду, а другу изражавамо преко ње. На тај начин добије се општи систем једначина:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o}-\omega_2\right)\beta_1^{(j)}-L_1\beta_2^{(j)}=\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o}-\omega_1\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o}-\omega_2\right)\psi_1^{(j)}-S^2\Delta^2\left(4+\eta^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi_1^{(j)}$$

$$(6.1.a)$$

$$\beta_2^{(j)}-L_2\psi_1^{(j)}=\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o}-\omega_2\right)\psi_2^{(j)}\qquad(6.1.б)$$

Једначина за функцију $\psi_1^{(1)}$ формира се стављајући у једначину (6.1.a) да је $j=1$, а њено решење тражи се у облику:

$$\psi_1^{(1)}=A_1^{(1)}e^{i(kx_o-\omega t_o)}$$

Добија се закон дисперзије у облику квадратне једначине:

$$(\hbar\omega)^2-(\omega_1+\omega_2)\hbar\omega+\omega_1\omega_2-S^2\Delta^2(4-k^2\eta^2)=0 \tag{4.2}$$

Тражени први и други извод $\left(\omega'=\dfrac{d\omega}{dk}\right)$ добија се:

$$\omega'=\frac{2kS^2\Delta^2\eta^2}{\hbar(\omega_1+\omega_2)-2\hbar^2\omega};\qquad \omega''=\frac{2S^2\Delta^2\eta^2}{\hbar(\omega_1+\omega_2)-2\hbar^2\omega}$$

Затим се формира једначина за $\psi_2^{(1)}$ и добија веза:

$$A_2^{(1)}=\frac{S\Delta}{\hbar\omega-\omega_2}\left(\frac{1}{2}k^2\eta^2-ik\eta-2\right)A_1^{(1)}$$

Понављајући исти поступак за $j=2$, десна страна једначине (6.1.a) постаје:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o}-\omega_2\right)\beta_1^{(j)}-L_1\beta_2^{(j)}=\left[-i\hbar\frac{\partial A_1^{(1)}}{\partial t_1}(2\hbar\omega-\omega_1-\omega_2)+2S^2\Delta^2ik\eta^2\frac{\partial A_1^{(1)}}{\partial x_1}\right]e^{i(kx_o-\omega t_o)}$$

Ако се решење леве стране једначине (6.1.a) потражи у облику $\psi_1^{(2)}=A_1^{(2)}e^{i(kx_o-\omega t_o)}$ добија се да је она идентички једнака нули. Значи, корен једначине је истог типа као и функција са десне стране, те се десна страна мора анулирати (резонантно понашање). На тај начин добија се парцијална једначина:

$$\frac{\partial A_1^{(1)}}{\partial t_1}+\omega'(k)\frac{\partial A_1^{(1)}}{\partial x_1}=0$$

У додатку је показан пример када се нелинеарна Шредингерова једначина појављује као услов за решење диференцијалне једначине. Формирајући једначину за $\psi_2^{(2)}$ добија се следећа веза:

$$A_2^{(2)}=S\Delta\frac{\left(\frac{1}{2}\eta^2k^2-ik\eta-2\right)}{\hbar\omega-\omega_2}A_1^{(2)}+D\frac{\partial A_1^{(1)}}{\partial x_1}$$

$$D = \frac{S\Delta}{\hbar\omega - \omega_2}\left(-\eta + ik\eta^2 \frac{\hbar\omega - \omega_2}{\omega_1 + \omega_2 - 2\hbar\omega}\right)$$

Стављајући да је $j = 3$ у једначине (6.1.*а*) и (6.1.*б*) добија се:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o} - \omega_1\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o} - \omega_2\right)\psi_1^{(3)} - L_1L_2\psi_1^{(3)} = -i\hbar\left(2\hbar\omega - \omega_1 - \omega_2\right)$$

$$\lambda = -4J\left(\hbar\omega - \omega_1\right) + 2\Delta S\Delta\left(\frac{1}{2}k^2\eta^2 + ik\eta - 2\right)\frac{2\hbar\omega - \omega_1 - \omega_2}{\hbar\omega - \omega_2}$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o} - \omega_2\right)\psi_2^{(3)} + L_2\psi_1^{(3)} = \beta_2^{(3)}$$

Њихова једначина је:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_0} - \omega_1\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_0} - \omega_2\right)\Psi_1^{(3)} - L_1L_2\Psi_1^{(3)} =$$

$$= -\left(2\omega - \omega_1 - \omega_2\right)\left[i\frac{\partial A^{(1)}}{\partial t_2} + \frac{1}{2}\omega''(k)\frac{\partial^2 A^{(1)}}{\partial\xi^2} + \lambda\left|A^{(1)}\right|^2 A^{(1)}\right]e^{i(kx_0 - \omega t_0)} \tag{12. а}$$

$$\lambda = \frac{\Delta}{\omega - \omega_1 - \omega_2}\left[4\left(\omega - \omega_1\right) + \frac{2\omega - \omega_1 - \omega_2}{\omega - \omega_2} + 4\left(\omega - \omega_1\right)\frac{A_1^{(2)}\left(\omega - \omega_2\right)^2 + A_2^{(2)}\left(\omega - \omega_1\right)^2}{\Delta\left(\omega - \omega_2\right)^2}\right]$$

(12. б)

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_o} - \omega_2\right)\psi_2^{(3)} + L_2\psi_1^{(3)} = \beta_2^{(3)} \tag{12. ц}$$

Видимо да је услов анулирања десне стране (12. *а*) управо једна нелинеарна Шредингерова једначина за амплитуду $A^{(1)}$. Остаје питање како у раду [16] у (12.*б*) λ зависи од $A_1^{(2)}$ и $A_2^{(2)}$. Ако се узме само $x_1 = x = \varepsilon x$, а занемари

$x_2 = \varepsilon^2 x$, отпада парцијални извод по t_2, али остаје члан: $\dfrac{\partial A_2^{(1)}}{\partial t_1}$.

Анализом рада [16] можемо уочити следеће

1. Коришћење неермитске репрезентације Дајсон-Малејева доводи до неермитског хамилтонијана. Тада $\left\langle \alpha \middle| \hat{H} \middle| \alpha \right\rangle$ није реална величина, па немају смисла "класичне" једначине кретања за α, α^* и β, β^*.
2. Развој по $1/S$ није коректан
3. Прелазак на континуум је некоректан.
4. Полазне једначине су бесмислене јер су из [13] узели да је хамилтонијан $\sum\limits_{\langle ij \rangle}$, а онда додали поље $\sum\limits_{i} h S_i^z$, али у [13] то i се третира по целом ланцу, а не само по i - тој подрешетки.
5. Када би се све то занемарило, још увек се не добија нелинеарна Шредингерова једначина у облику који они дају.

Стога предлажемо да се даља анализа врши на основу система једначина (5.7).

Додатак

Метод вишеструких скала

Овде ћемо приказати поједностављену верзију методу вишеструких скала следећи познату монографију [7].
Нека је полазна једначина облика:

$$u_{tt} - c^2 u_{xx} + \omega_p^2 u = \frac{\omega_p^2}{6} u^3$$

Када би била хомогена, ова једначина би била линеарна. Решење се тражи као $u = e^{ikx - i\omega t}$ и добија се линеарна зависност дисперзије:

$$\omega^2 = c^2 k^2 + \omega_p^2$$

Ако се уведе мали параметар ε, такав да је $u = \varepsilon\left(u_o + \varepsilon u_1 + \varepsilon^2 u_2 + \ldots\right)$, имамо:

$$u_{ott} - c^2 u_{oxx} + \omega_p^2 u_o + \varepsilon u_{1tt} - \varepsilon c^2 u_{1xx} + \omega_p^2 \varepsilon u_1 + \varepsilon^2 u_{2tt} - \varepsilon^2 c^2 u_{2xx} + \varepsilon^2 \omega_p^2 u_2 = \varepsilon^2 \frac{\omega_p^2}{6} u_o^3 \tag{6.3}$$

$$u_o = a e^{i(kx - \omega t)} + a^+ e^{-i(kx - \omega t)}$$

Сада се уводи: $T_1 = \varepsilon t$, $T_2 = \varepsilon^2 t$, $X = \varepsilon x$.

$$a_t = \frac{\partial a}{\partial T_1}\frac{dT_1}{dt} + \frac{\partial a}{\partial T_2}\frac{dT_2}{dt} = \varepsilon a_{T_1} + \varepsilon a_{T_2} + \ldots \; ; \quad a_{tt} = \varepsilon^2 a_{T_1 T_1}; \quad a_x = \varepsilon a_X; \quad a_{xx} = \varepsilon^2 a_{XX}$$

Заменом у једначину (6.3) добијају се следеће једнакости:

$$\varepsilon^o: \quad \left(-\omega^2 + c^2 k^2 \omega_p^2\right) a e^{i(kx - \omega t)} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \omega^2 = \omega_p^2 + c^2 k^2$$

$$\varepsilon^1: \quad u_{1tt} - c^2 u_{1xx} + \omega_p^2 u_1 = 2i\left(\omega a_{T_1} + c^2 k a_X\right) e^{i(kx - \omega t)} + c.c.$$

Корен леве стране једначине је $e^{\pm i(kx - \omega t)}$, па би смо имали резонантно понашање. Зато се мора десна страна једначине анулирати.

$$a_{T_1} + \frac{c^2 k}{\omega} a_X = 0$$

Пошто је $\omega' = c^2 \frac{k}{\omega}$, уводимо групну брзину $\omega' = v_g$

$$a_{T_1} + v_g a_X = 0$$

$$\varepsilon^2: \quad u_{2tt} - c^2 u_{2xx} + \omega_p^2 u_2 = \frac{\omega_p^2}{6}\left[a^3 e^{3i(kx-\omega t)} + a^{*3} e^{-3i(kx-\omega t)}\right] + \frac{\omega_p^2}{6} 3a^2 a^* e^{i(kx-\omega t)} +$$

$$+2i\omega a_{T_2} e^{i(kx-\omega t)} - a_{T_1 T_1} e^{i(kx-\omega t)} + c^2 a_{XX} e^{i(kx-\omega t)} + c.c.$$

Да би се елиминисала резонанција биће:

$$\frac{\omega_p^2}{2} a^2 a^* + 2i\omega a_{T_2} - a_{T_1 T_1} + c^2 a_{XX} = 0$$

Прелазећи на променљиву: $\xi = X - v_g T_1 = \varepsilon(x - v_g t)$; $a = a(\xi)$; $a_{XX} = a_{\xi\xi}$ добија се нелинеарна Шредингерова једначина.

$$i a_{T_2} + \frac{1}{4}\frac{\omega_p^2}{\omega}|a|^2 a + \frac{\omega''}{2} a_{\xi\xi} = 0$$

где је $\omega'' = \frac{c^2 - \omega'^2}{\omega}$.

ЗАКЉУЧАК

У уводу смо нагласили да је циљ рада анализа постојања солитона у једном посебном антиферомагнетном моделу. То је остварено у следећем смислу. Показано је да постојећа литература садржи некоректне резултате, тако да се на основу тога о солитонима не може судити. Уведен је коректан систем једначина из којег би нумеричком анализом требало третирати солитоне.

У договору са ментором, стали смо на овом месту процењујући да би даља анализа сигурно премашивала оквире "стандардног" дипломског рада.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Др. Б. Тошић: Статистичка физика - ПМФ Институт за физику, Нови Сад 1978.
[2] Чарлс Кител: Увод у физику чврстог стања - Савремена админ., Београд, 1970.
[3] D. C. Mattis: The Theory of Magnetism - Springer-Verlag Berlin, Heilderberg, New Jork 1988.
[4] C. Kittel: Quantum Theory of Solids - Jonh Wiley & Sons, New Jork - London 1963. (руски превод: "Наука" Москва 1967.)
[5] М. Шкрињар и Д. Капор: Збирка задатака са одабраним поглављима статистичке физике ПМФ, Институт за физику, Нови Сад (1982.)
[6] Б. Тошић, С. Стојановић, М. Шкрињар, Д. Капор, Љ. Машковић, Ј. Шетрајчић: Бозонске репрезентације спинских оператора у теоријској физици чврстог стања, SFIN 1992. (27-49)
[7] A. C. Newel: Solitons in Mathematics and Physics, Soc. Ind. Appl. Math., Tucson 1985. (руски превод "Мир" - Москва 1989.)
[8] Tjon Y. and Wright J., : Solitons in the Continuous Heisenberg Chain, Phys. Rev.; B 15(1977.): 3470 - 3476
[9] J. Мишић: Солитони у класичном феромагнетном ланцу са анизотропијом типа XXZ - дипломски рад, ПМФ, Нови Сад 1985.
[10] D. V. Kapor, S. D. Stojanović and M. J. Škrinjar: Semi-classical quantisation of an anisotropic excange spin-field model, J. Phys. C.: Sol. St. Phsics 19 (1986) 2963
[11] M. J. Škrinjar, D. V. Kapor and S. D. Stojanović: J. Phys. Cond. Matt.; 1 (1984.) 725
[12] D. V. Kapor, M. J. Škrinjar and S. D. Stojanović: Application of Spin Coherent States to 1-d Heisenberg Model, Physics Scripta 39 (1989) 516
[13] I. Bose and Chatterjee - Antiferomagnetic Model with Neel States as Ground States, Phys. Rev., B. Vol. 29, No 5 1984. 2741 - 2744
[14] I. Bose: Spin-Wave Spektra in an Order - Parametar - Preserving Antiferromagnet: J. Phys. C., Solid State Phys. 21 (1988.) L 841 - 845
[15] B. Hälg and Furrer: Anisotropic Exchange and Spin Dinamics in the Type - I - (IA) Antiferomagnetics *CeAs, SeSb* and *USb:* A neutron study 6258 - 6278 (1986.)
[16] Wu - Ming Liu and Ben - Lian Zhou: Solitons in an OPP AFM, J. Phys.; Condens. Matter. 5 (1993.) L 149 - 156
[17] D. Kapor, M. Škrinjar and S. Stojanović (1989.): Rev., Res., Fac. Sci.; Univerzitet Novi Sad: 47 - 56
[18] D. Kapor, M. Škrinjar and S. Stojanović (1990.) in M. Barthes, J. Leon Eds Non Linear Coherent Structures; Springer-Verlag Berlin 147 - 146
[19] И. Арсенић: Хамилтонијан Хајзенберговог модела феромагнета са биквадратном интеракцијом у репрезентацији Глауберових кохерентних стања; дипломски рад, ПМФ Нови Сад 1993.
[20] D. Kapor, M Škrinjar, S. Stojanović, I. Arsenić - Solitons in the Heisenberg Model with biqadratic exchange; Proceedings for Natural Sciences, Matica Srpska, Novi Sad, No. 85, 1993. 217 - 221