

Univerzitet u Novom Sadu
Prirodno-matematički fakultet
Institut za fiziku

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

| | |
|----------|--------------|
| ПРИМЉЕНО | - 6 NOV 2000 |
| РГАНИЗ | |
| 0603 | 9/302 |

**NISKOTEMPERATURNE OSOBINE
SUPER-REŠETKE SA DVOSTRUKIM
HAJZENBERGOVIM
ANTIFEROMAGNETNIM SLOJEM**

Diplomski rad iz fizike

Mentor:
prof.dr Darko Kapor

Student:
Tatjana Tošić

Novi Sad,
novembar 2000.

Sadržaj

| | | |
|------|---|----|
| | Uvod | |
| I | Osnovni pojmovi teorije jakog magnetizma čvrstih tela | 1 |
| 1 | Hajzenbergov model | 2 |
| 1.1 | Izmensko uzajamno dejstvo (interakcija) | 2 |
| 1.2 | Hajzenbergov spinski hamiltonijan | 4 |
| 1.3 | Uvođenje magnetne anizotropije | 6 |
| 1.4 | Feromagnetici | 7 |
| 1.5 | Antiferomagnetici | 7 |
| II | Reprezentacije spinskih operatora | 9 |
| 1 | Opšti pristup bozonskim reprezentacijama spinskih operatora | 11 |
| 2 | Agranovič-Tošićeva reprezentacija | 13 |
| III | Slojevite strukture i super – rešetke | 16 |
| IV | Hamiltonijan super–rešetke sa dvostrukim antiferomagnetnim slojem | 18 |
| V | Proračun metodom Grinovih funkcija | 25 |
| 1 | Pojam Grinove funkcije | 25 |
| 2 | Jednačine kretanja | 26 |
| VI | Kvadratna aproksimacija | 32 |
| VII | Analiza rezultata | 39 |
| VIII | Prilog | 44 |
| 1 | Goldstonova teorema | 44 |
| 2 | Teorema o reziduumu | 48 |

Uvod

U radu je primenjen bozonski tretman sistema super-rešetke sa dvostrukim Hajzenbergovim antiferomagnetnim slojem, sa ciljem izučavanja niskotemperaturnih osobina ove beskonačne super-strukture. Prelaskom u recipročni prostor, korišćen je metod Grinovih funkcija u energetske reprezentaciji i time omogućeno korišćenje teoreme o spektralnoj intenzivnosti u cilju nalaženja ravnotežnih srednjih vrednosti naseljenosti čvorova super-rešetke elementarnim ekscitacijama. Izvršeno je poređenje sa srodnim teorijskim radovima na ovom polju i pokazano da u beskonačnoj antiferomagnetnoj strukturi ne dolazi do formiranja singleta, za razliku od sistema koji se sastoji samo od jednog dvostrukog sloja („bilayer”), kao što je to pokazano u radu *Matsuda i Hide*[10].

Ovaj rad sastoji se iz osam glava. U prvoj glavi dat je pregled nekih osnovnih pojmova teorije jakog magnetizma čvrstih tela, uključujući i opis modelnog Hajzenbergovog spinskog hamiltonijana. U drugoj glavi izložene su odabrane bozonske reprezentacije spinskih operatora, dok je u trećoj glavi opisan sistem koji ćemo proučavati. Četvrta glava posvećena je bozonskom hamiltonijanu sistema, kao i njegovom Furije transformu. Proračun metodom Grinovih funkcija u aproksimaciji haotičnih faza prikazan je u petoj glavi. Šesta glava opisuje posmatranu problematiku super-strukture u kvadratnoj bozonskoj aproksimaciji. Rekapitulacija dobijenih rezultata iznesena je u sedmoj glavi. Poslednja, osma glava sadrži priloge u kojima su iznesene Goldstonova teorema, kao i teorema o reziduumu, čiji su stavovi u ovom radu bili korišćeni .

I Osnovni pojmovi teorije jakog magnetizma čvrstih tela

Magnetizam je opšta karakteristika čvrstih tela, međutim korisno je iz skupa svih čvrstih sredina izdvojiti one materijale koji pokazuju veoma izražene magnetne osobine. Na taj način dobijamo materijale iz grupe jakih magnetika, za koje je karakterističan visok stepen magnetne uređenosti, odnosno postojanje konačnog makroskopskog magnetnog momenta u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja, koji po redu veličine iznosi $N\mu_B$, gde je $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ Borov magneton, a N broj čvorova magnetne kristalne rešetke.

Sa svoje strane, u okviru skupa jakih magnetika razlikujemo tri podskupa, u zavisnosti od kvalitativno različitih tipova magnetne uređenosti i kvantitativno različitih vrednosti magnetizacije u njima, koja iz tih tipova proizilazi. U tom smislu razlikujemo feromagnetne, antiferomagnetne i ferimagnetne materijale.

Usmeravanje spinova, koje rezultuje različitom od nule vrednošću *magnetizacije* (magnetnog momenta po jedinici zapremine), postoji jedino ispod izvesne kritične vrednosti temperature, jer u suprotnom zbog intenzivnog termalnog kretanja čestica kristala magnetna uređenost biva razorena. Javljanje magnetnog momenta jedinice zapremine nastale bez učešća spoljašnjih uticaja ispod izvesne kritične temperature, nosi naziv *spontana magnetizacija*. Ona je funkcija temperature i simetrije kristala kao i vrste kristalnih motiva, s obzirom da magnetna uređenost nije primećena u tečnostima i gasovima. Pri tome najveća teorijski dopuštena vrednost magnetizacije jeste *magnetizacija saturacije*.

Po savremenoj teoriji, magnetizam čvrstih tela uslovljen je postojanjem nepotpuno popunjenih atomskih ljuski, pri čemu magnetne osobine materije zavise kako od raspodele gustine elektrona u njima, tako i od gustine elektrona provodnosti kristalne sredine. Ovaj uslov se pri tome ispostavlja kao potreban, međutim ne kao i dovoljan. Čak šta više, savremena teorija magnetizma ne dozvoljava formulisanje potrebnog i dovoljnog uslova za javljanje makroskopskog magnetnog momenta.

Ukupan magnetni momenat nastaje slaganjem sopstvenih i orbitalnih momenata atomskih elektrona. Međutim, orbitalni momenti daju mali doprinos ukupnom magnetnom momentu jako magnetnih materijala u poređenju sa sopstvenim.

Makroskopski magnetni momenat rezultat je paralelnog usmeravanja (pri određenim okolnostima) spinova pojedinih elektrona nepotpuno zaposednutih atomskih ljuski. Ovo usmeravanje očigledno mora biti posledica interakcije među elektronima. Ovo stanovište prvi put bilo je formulisano od strane Frenkela i Hajzenberga 1928. godine, a ono i danas predstavlja fundament savremene kvantne teorije magnetizma.

Kao posledica anizotropije kristalnih sredina, u svetlu teorije magnetizma, javlja se *magnetno-kristalna anizotropija* koja se sastoji u tome što pri određenoj orijentaciji kristala njegove magnetne karakteristike zavise od pravca u kojem se određuju.

Međusobna orijentacija spinova elektrona susednih atoma određena je njihovim uzajamnim dejstvom. Naime, Kulonovo odbijanje može dovesti do paralelnog postavljanja spinova elektrona, pri čemu pravci njihove orijentacije nisu fiksirani. Spin-spiniska i spin-orbitalna uzajamna dejstva u značajnoj meri smanjuju ovu degeneraciju po pravcima, tako da se kao rezultat u kristalnoj rešetki javlja svega nekoliko pravaca sa



osobinom da je termodinamički potencijal sistema minimalan pri orijentaciji spinova (ili skupa spinova) u jednom od tih pravaca. To su *pravci lake magnetizacije*.

U svakom monokristalnom uzorku, u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja, spinovi dakle mogu biti raspoređeni duž svake od osa lakog namagnetisanja. Međutim, energetski se najpogodnijim ispostavlja slučaj kada se monokristal deli na niz oblasti u kojima se spinovi orijentišu paralelno. Te oblasti zovu se *domeni* ili *oblasti samoproizvoljne magnetizacije*. Dimenzije domena, njihova forma i uzajamni raspored određeni su zahtevom za minimumom termodinamičkog potencijala.

1 Hajzenbergov model

U cilju opisa magnetnih osobina čvrstih tela, u našem slučaju jakih magnetika, neophodno je eksplicitno zadati određeni oblik operatora energije sistema. Pri tome se obično ne uzimaju u obzir svi mehanizmi koji u datom materijalu postoje, jer problem tada postaje veoma komplikovan za rešavanje, a u većini slučajeva postavlja se i pitanje njegove opravdanosti, s obzirom da se u mnogim slučajevima dobijaju nekorektni rezultati.

Dakle, usvojeno je da se pri modeliranju uzmu u obzir samo najzastupljeniji mehanizmi koji u najvećoj meri odražavaju osobine realnih magnetika.

Jedan od modela jeste i magnetni dielektrik, pod kojim se podrazumeva da se spinovi nepopunjenih ljuski nalaze lokalizovani u čvorovima kristalne rešetke. Koeficijent proporcionalnosti koji određuje intenzitet uzajamnog dejstva među spinovima jeste integral izmene I , koji po redu veličine odgovara energiji uzajamnog dejstva elektrona susednih čvorova.

1.1 Izmensko uzajamno dejstvo (interakcija)

Kao što je poznato, Šredingerova jednačina ne uzima u obzir postojanje spina kao prirodnog svojstva čestice. Delom je to zbog toga što uzajamno dejstvo čestica ne zavisi od njima pripadajućih spinova (npr. Kulonovo odbijanje između elektrona). U suštini ovo je tačno jedino u nerelativističkoj aproksimaciji, jer se pri razmatranju relativističkih efekata uzajamno dejstvo pokazuje kao spinski zavisno.

Nezavisnost uzajamnog dejstva od spina matematički je izražena činjenicom da se u hamiltonijanu sistema čestica koje deluju elektrostatičkim silama ne pojavljuju spinski operatori, pa prema tome bilo kakva promena spinskog dela talasne funkcije neće uticati na energiju sistema. Zbog toga Šredingerova jednačina određuje jedino prostorni deo talasne funkcije, pri čemu spinski deo ostaje proizvoljan.

Međutim, bez obzira na ukazanu nezavisnost elektrostatičkog uzajamnog dejstva čestica od spina, postoji generalna zavisnost energije sistema od potpunog spina sistema, koja je u krajnjoj instanci posledica principa nerazlikovanja identičnih čestica u kvantnoj fizici (*Davidov*[5], *Landau, Lifšic*[4]).

Upravo je to razlog koji opravdava mogućnost uvođenja izvesnog sveobuhvatnog uzajamnog dejstva između identičnih čestica, koje dovodi do ove zavisnosti. Ovako

uvodeno dejstvo zovemo izmenskimi i ono predstavlja čisto kvantni efekat, koji potpuno iščezava (kao i sam spin) u klasičnom limesu.

Odredimo sada izmensko cepanje nivoa energije sistema od dva elektrona, pri čemu ćemo njihovo uzajamno dejstvo tretirati kao perturbaciju.

Neka su $\varphi_1(\vec{r})$ i $\varphi_2(\vec{r})$ orbitalne talasne funkcije stanja dva elektrona. Stanjima sistema sa potpunim spinom $S = 1$ i $S = 0$ odgovaraju simetrizovana i antisimetrizovana talasna funkcija, odnosno:

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}}, (\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) \pm \varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_1))$$

Srednja vrednost operatora uzajamnog dejstva elektrona $U(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$, u tim stanjima jednaka je $A \pm I$, respektivno, pri čemu su:

$$A = \iint u |\varphi_1(\vec{r}_1)|^2 |\varphi_2(\vec{r}_2)|^2 dV_1 dV_2$$

$$I = \iint u \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_1^*(\vec{r}_2) \varphi_2(\vec{r}_2) \varphi_2^*(\vec{r}_1) dV_1 dV_2,$$

gde se integraljenje vrši po prostornim koordinatama oba elektrona. Integral I nazivamo izmenskimi integralom. Ako energiju računamo od aditivne konstante A , koja nema izmenski karakter, dobijamo $\Delta E_0 = +I$ i $\Delta E_1 = -I$, gde indeks ukazuje na vrednost potpunog spina.

Dobijene veličine možemo predstaviti kao svojstvene vrednosti spinskog operatora izmene, uvedenog od strane Diraka:

$$\hat{V}_{izm} = -\frac{1}{2} I (1 + 4\hat{s}_1\hat{s}_2),$$

gde su \hat{s}_1 i \hat{s}_2 spinski operatori posmatranih elektrona.

Naime iz opšte teorije angularnog momenta, koja između ostalog opisuje i spinski operator, poznato je da su svojstvene vrednosti kvadrata operatora potpunog spina $S(S + 1)$ (u jedinicama $\hbar = 1$), gde je S potpuni spin sistema, pa zbog toga za svojstvene vrednosti operatora $\hat{s}_1\hat{s}_2$ važi :

$$\hat{s}_1\hat{s}_2 = \frac{1}{2} (\hat{S}^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2),$$

odnosno:

$$\vec{s}_1\vec{s}_2 = \frac{1}{2} (S(S + 1) - s_1(s_1 + 1) - s_2(s_2 + 1))$$

ili

$$\hat{s}_1\hat{s}_2 = \begin{cases} -\frac{3}{4} & S = 0 \\ \frac{1}{4} & S = 1 \end{cases}$$

U slučaju da ovi elektroni pripadaju različitim atomima, izmenski integral eksponencijalno opada povećavanjem rastojanja r između atoma. Naime, iz strukture podintegralnog izraza je jasno da je on funkcija mere „prekrivanja” talasnih funkcija stanja $\varphi_1(\vec{r}_1)$ i $\varphi_2(\vec{r}_2)$.

1.2 Hajzenbergov spinski hamiltonijan

Pretpostavimo da se kristal sastoji od N atoma iste vrste raspoređenih u čvorovima proste kubne rešetke. Uzajamno dejstvo elektrona nepopunjenih ljuski i elektrona provodnosti smatraćemo malim, kako bismo ih mogli smatrati za dva nezavisna podsistema. Kako nas zanimaju magnetna svojstva sistema, ubuduće ćemo razmatrati jedino elektrone nepotpuno popunjenih unutrašnjih ljuski atoma (d - ili f -ljuske) (*Tjablikov[7]*).

Smatraćemo dalje da svaki od atoma sadrži jedan d -elektron, pri čemu ćemo zanemariti njegov orbitalni moment, a samim tim i sva spin-spinska i spin-orbitalna uzajamna dejstva. Dakle, d -elektron razmatraćemo kao s -elektron.

Uzećemo da je osnovni nivo energije koji opisuje sistem elektrona u nultoj aproksimaciji E_0 (neinteragujući sistem) okarakterisan jediničnom vrednošću broja zaposednuća elektronima svakog čvora rešetke:

$$N_{\vec{m}} = n_{\vec{m},-1/2} + n_{\vec{m},1/2} = 1,$$

kao i da je energija osnovnog nivoa E_0 odvojena izvesnim pozitivnim i različitim od nule energetskim intervalom od ostalih, pobuđenih nivoa ovog sistema.

Potrebno je pokazati da je osnovni nivo degenerisan, kao i ispitati njegovo cepanje pod dejstvom perturbacije (uzajamnog dejstva elektrona).

Ako je \hat{H}_0 hamiltonijan idealnog sistema, a ψ_0 talasna funkcija osnovnog stanja, imamo:

$$\hat{H}_0\psi_0 = E_0\psi_0$$

Osnovno stanje je spinski degenerisano, s obzirom da je ono određeno jedino zadavanjem jediničnih vrednosti brojeva zaposednuća čvorova elektronima, pri čemu je vrednost spina u određenom čvoru ostala neodređena.

Talasna funkcija ψ_0 određena je skupom brojeva $\{n_{\vec{m},\sigma}\}$ gde je $\sigma = \pm\frac{1}{2}$. Pošto će svaka linearna kombinacija skupa $\{\psi_0\}$ takođe biti svojstvena talasna funkcija osnovnog stanja, možemo ih sve smatrati elementima lineala \mathcal{L} .

Ako iskoristimo operatorsku formu metoda teorije perturbacija (*Tjablikov[7]*), možemo videti da se u svakom određenom redu ovog metoda cepanje nivoa E_0 određuje jednačinom:

$$(E - E_0)\psi_0 = \hat{H}\psi_0,$$

gde je $\psi_0 \in \mathcal{L}$, a \hat{H} neki hermitski operator koji svaku funkciju tog lineala prevodi u funkciju istog skupa, odnosno $\hat{H}\psi_0 \in \mathcal{L}$, $\forall \psi_0 \in \mathcal{L}$.

Vrednost E_0 možemo odrediti zadavanjem vrednosti z -komponente spina svakog pojedinačnog elektrona. Tada ψ_0 možemo smatrati funkcijom z komponenti spinskih operatora:

$$\psi_0 = \psi_0(\dots \hat{S}_{\vec{n}}^z, \dots)$$

Na osnovu prethodne relacije i modelni Hamiltonov operator \hat{H} moramo razmatrati kao funkciju spinskih operatora.

Predstavimo \hat{H} u vidu reda po stepenima komponenti spinskih operatora:

$$\begin{aligned} \hat{H} = G_0 + \sum_{\alpha, \vec{n}} G_{\alpha}(\vec{n}) \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha} + \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \vec{n}, \vec{m}} G_{\alpha_1 \alpha_2}(\vec{n}, \vec{m}) \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha_1} \hat{S}_{\vec{m}}^{\alpha_2} + \\ + \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \vec{n}, \vec{m}, \vec{l}} G_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3}(\vec{n}, \vec{m}, \vec{l}) \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha_1} \hat{S}_{\vec{m}}^{\alpha_2} \hat{S}_{\vec{l}}^{\alpha_3} + \dots \end{aligned} \quad (1)$$

pri čemu se sumiranje vrši po svim čvorovima rešetke, kao i po svim komponentama operatora spina ($\alpha = x, y, z$). Funkcije G su jedino funkcije koordinata čvorova kristalografske, ali u ovom slučaju i magnetne kristalne rešetke. Potrebno je primetiti da se pod svakom od suma nalaze spinski operatori različitih čvorova, jer bi u protivnom zbog komutacionih relacija za spinske operatore:

$$[\hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha}, \hat{S}_{\vec{m}}^{\beta}] = i \delta_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\gamma} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_{\vec{n}}^{\gamma} \quad (\hbar = 1)$$

oni mogli biti svedeni na članove nižeg reda (manjeg broja operatora u proizvodu). Zbog toga svi operatori koji se nalaze pod sumom međusobno komutiraju, s obzirom da su operatori različitih čvorova rešetke. Takođe, u cilju ermitskog karaktera operatora \hat{H} , sve funkcije G moraju biti realne.

Nadalje ćemo razmatrati jedino elektrostatička uzajamna dejstva među elektroni-
ma, odnosno magnetna (spin-spin i spin-orbitalna) će biti zanemarena.

Pošto elektrostatičke sile ne zavise od orijentacije spinova, operator \hat{H} dužan je da bude invarijantan u odnosu na promenu znaka projekcija spinova svih elektrona. Dakle, svi članovi u razvoju moraju biti skalarni funkcije spinskih operatora.

Izvršimo, dakle sledeću kanonsku transformaciju spinskih operatora (jer ona očigledno očuvava komutacione relacije za spinske operatore):

$$\hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha} \rightarrow -\hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha} \quad i \rightarrow -i$$

S obzirom da operator \hat{H} ostaje invarijantan pri ovoj transformaciji, on se mora sastojati od parnog broja operatora spinskih komponenti u proizvodima, pa ga možemo zapisati u vidu:

$$\hat{H} = G_0 + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} G(\vec{n}, \vec{m}) \hat{S}_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{m}} + O(\hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha_1} \hat{S}_{\vec{m}}^{\alpha_2} \hat{S}_{\vec{l}}^{\alpha_3} \hat{S}_{\vec{p}}^{\alpha_4}) \quad (2)$$

Ako uvedemo simetrizovane oznake:

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

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

dobijamo:

$$\hat{H} = G_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{m}} ,$$

gde je $I_{\vec{n}\vec{m}}$ integral izmene pridružen elektronima (spinovima) lokalizovanim u čvorovima \vec{n} i \vec{m} . Kako se elektrostatičko uzajamno dejstvo ne menja pri izmeni orijentacije koordinatnih osa u trodimenzionalnom Dekartovom prostoru, sledi:

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

Dalje, izmenski integral mora biti invarijantan u odnosu na translaciju za celobrojni umnožak perioda rešetke duž sve tri kristalografske ose (koja se za slučaj kubne rešetke poklapa sa Dekartovim sistemom koordinata), pa na osnovu svega zaključujemo da je on funkcija jedino relativnog rastojanja dva čvora:

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

Dopustimo sada da na sistem deluje i spoljašnje magnetno polje. Označimo sa μ magnetni moment atoma. Tada hamiltonijan izotropnog Hajzenbergovog modela dobija oblik:

$$\hat{H} = G_0 - g\mu_B \vec{H} \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{m}} \quad (3)$$

Na taj način smo korišćenjem jedino nekih opštih odredbi došli do operatora energije sistema koji dozvoljava korišćenje predstave o magnetnoj sredini kao o skupu lokalizovanih spinova, koji međusobno deluju silama izmene, a čija je energija uzajamnog dejstva $I_{\vec{n}\vec{m}}$. Pri tome eksplicitan izraz izmenskog integrala nije određen i on u račun ulazi kao fenomenološka veličina.

1.3 Uvođenje magnetne anizotropije

Razmotrimo uticaj magnetnog uzajamnog dejstva među elektronima. Pre svega, kao što je već rečeno, ono se sastoji od spin-spinских i spin-orbitalnih interakcija.

Naime, svaki spin lokalizovan u čvoru rešetke poseduje magnetni momenat $g\mu\hat{S}_{\vec{n}}$, pri čemu klasična dipol-dipol interakcija između ovih momenata daje sledeći doprinos energiji (*Cottam, Tilley*[8]):

$$\hat{H}_{s-s} = \frac{\mu_0}{4\pi} g^2 \mu_B^2 \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \left(\frac{\hat{S}_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{m}}}{r_{ij}^3} - \frac{3 \hat{S}_{\vec{n}} \vec{r}_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{m}} \vec{r}_{\vec{n}\vec{m}}}{r_{ij}^5} \right)$$

Tipično, dipol-dipolna interakcija slabija je za dva reda veličine od izmenske interakcije. Slično, i spin-orbitalna interakcija veoma brzo opada sa rastojanjem ($\sim 1/r^3$).

Da bismo na izvestan način i ove doprinose uključili u modelni hamiltonijan, zadržimo u izrazu (1) član sa četiri spinska operatora u proizvodu:

$$\hat{\hat{H}} = G_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}, \alpha_1, \alpha_2} I_{\vec{n}\vec{m}}^{\alpha_1 \alpha_2} \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha_1} \hat{S}_{\vec{m}}^{\alpha_2} - \frac{1}{4!} \sum I_{\vec{n}\vec{m}\vec{p}\vec{l}}^{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4} \hat{S}_{\vec{n}}^{\alpha_1} \hat{S}_{\vec{m}}^{\alpha_2} \hat{S}_{\vec{p}}^{\alpha_3} \hat{S}_{\vec{l}}^{\alpha_4}$$

Primetimo, da veličine $I_{\vec{n}\vec{m}}^{\alpha_1 \alpha_2}$ i $I_{\vec{n}\vec{m}\vec{p}\vec{l}}^{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}$ imaju tenzorsku prirodu, pri čemu ćemo $(\hat{I})_{\alpha_1 \alpha_2}$ zvati tenzorom izmenskog uzajamnog dejstva. U opštem slučaju sve tenzorske

koordinate mogu biti različite, mada se najčešće razmatranje jakih magnetika vrši u okviru izotropnog modela, za koji je karakteristično da su svi dijagonalni elementi tenzora izmenske interakcije međusobno jednaki, dok su svi nedijagonalni elementi identički jednaki nuli.

Uslovno rečeno, spinski hamiltonijan možemo podeliti na dva člana: izotropan (za slučaj $I^{xx} = I^{yy} = I^{zz} \wedge I^{ij} = 0, i \neq j$) i anizotropan. Ovaj poslednji član hamiltonijana zovemo članom magnetno-kristalografske anizotropije, pri čemu njegoa konkretna forma direktno zavisi od grupe simetrije magnetne rešetke.

Za jednoosan feromagnetik anizotropan član u okviru Hajzenbergovog modela u najnižoj aproksimaciji ima sledeći oblik :

$$\hat{H}_A = -\frac{1}{2} \sum D_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^z \quad (4)$$

pri čemu je $D_{\vec{n}\vec{m}}$ tenzor magnetno-kristalografske anizotropije.

1.4 Feromagnetici

Feromagnetici jesu tip jakih magnetnih materijala kod kojih je $I > 0$, pa su pri temperaturama nižim od Kirijeve svi spinovi u srednjem orijentisani paralelno jedan drugom, usled čega taj materijal stiče veliki makroskopski magnetni momenat. U spoljašnjem magnetnom polju \vec{H} magnetni momenti atoma trpe preorijentaciju u pravcu i smeru primenjenog magnetnog polja.

U odsustvu spoljašnjeg polja pravac rezultantnog magnetnog momenta \vec{M} nije određen, međutim zbog sveprisutne slabe anizotropije, vektor \vec{M} biće usmeren duž jedne od osa lake magnetizacije.

Povećavanjem temperature, spontana magnetizacija se razara i pri $T = T_C$, u odsustvu spoljašnjeg polja, ona potpuno iščezava, što predstavlja prelaz u paramagnetnu fazu (fazni prelaz II reda).

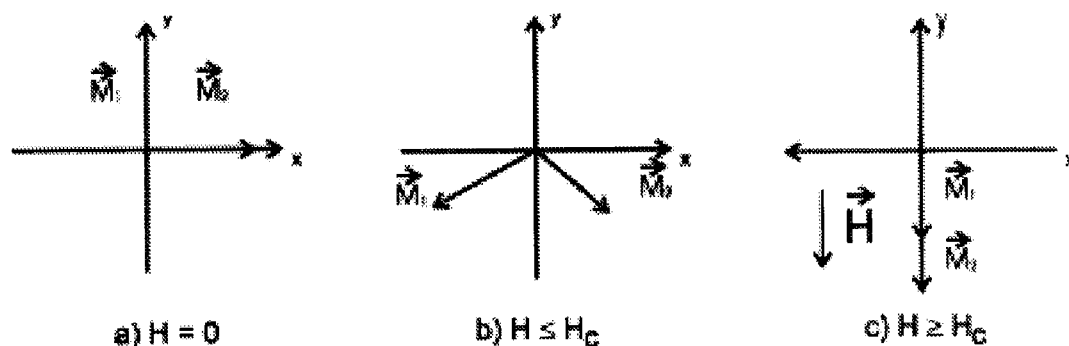
Iznad Kirijeve temperature, feromagnetik se ponaša kao klasični paramagnetik.

1.5 Antiferomagnetici

Antiferomagnetni raspored lokalizovanih spinova, prema hipotezi Nela, može biti predstavljen kao skup dve ili više feromagnetnih podrešetki, pri čemu se najbliži susedi nalaze u čvorovima koji pripadaju različitim podrešetkama. Znak interakcije izmene u antiferomagneticima je negativan ($I < 0$), što favorizuje antiparalelnu orijentaciju spinova susednih čvorova. Na taj način, u slučaju konstituenata jednakih magnetnih doprinosa, rezultujući momenat koji potiče od svih podrešetki jednak je nuli.

Šematski prikaz antiferomagnetnog rasporeda spinova dat je sledećom slikom:

Posmatračemo momente podrešetki \vec{M}_1 i \vec{M}_2 sa osobinom $|\vec{M}_1| = |\vec{M}_2|$. Pri $H = 0$ rezultantna magnetizacija jednaka je nuli. Za $H \leq H_C$, gde je H_C neko kritično polje, magnetni momenat ima rezultantu duž polja. U intervalu $0 \leq H \leq H_C$ rezultujuća



Slika 1. Šematski prikaz antiferomagnetnog rasporeda spinova

magnetizacija raste linearno sa poljem. Pri $H > H_C$ spinovi obe podrešetke orijentisani su duž pravca polja i nadalje se antiferomagnetik ponaša kao feromagnetik.

Magnetizacija svake podrešetke pojedinačno postepeno se razara povećavanjem temperature, a na $T = T_N$ (Nelova temperatura) (pri $H = 0$) dolazi do faznog prelaza II reda.

U oblasti prelaza specifična toplota dobija karakterističan „ λ -oblik”, koji ukazuje i na anomaliju drugih osobina pod tim uslovima.

Potrebno je primetiti da anizotropija u antiferomagnetnim materijalima u značajnoj meri utiče na rezultujuću vrednost magnetizacije u njima.

II Reprezentacije spinskih operatora

Magnoni (ili spinski talasi) jesu elementarne ekscitacije koje se javljaju u magnetno uređenim materijalima. Koncept spinskih talasa bio je predložen od strane Bloha (1930.) i on se temelji na pretpostavci da su na apsolutnoj nuli svi spinovi paralelno orijentisani, odnosno da su z projekcije spinova svih atoma jednake maksimalnoj vrednosti spina S . Povećavanjem temperature nastali toplotni kvanti smanjuju projekcije spinova prvobitno maksimalno uređenog spinskog sistema, pri čemu se ovaj poremećaj u obliku spinskog talasa prostire kroz magnetik. Pošto su spinski operatori opisani opštom kvantnom teorijom angularnog momenta (njihove svojstvene vrednosti su diskretizovane), sledi da i spinski talasi sa svoje strane moraju biti kvantovani. Pri tome je upravo magnon elementarni kvant kojim se enegija spinskih talasa prenosi kroz kristal, sa čvora na čvor, posredstvom interakcije izmene.

Prema Blohovom konceptu, prelaz magnetika u paramagnetnu fazu posledica je „zasićenja” magnetika elementarnim ekscitacijama—magnonima.

Definišimo najpre svojstveni problem operatora spina:

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 |SS^z\rangle &= S(S+1) |SS^z\rangle \\ \hat{S}^z |SS^z\rangle &= S^z |SS^z\rangle \\ S^z &\in (-S, -S+1, \dots, S)\end{aligned}$$

U skladu sa ovom predstavom, jasno je da se elementarne ekscitacije sistema uređenih spinova sastoje od promena vrednosti z -komponente spina (*Tošić[2]*). Kako operator $\hat{S}^+ = \hat{S}^x + i\hat{S}^y$ povećava z -projekciju operatora spina za jedinicu (delujući na vektor stanja $|S^z\rangle$ prevodi ga u $|S^z+1\rangle$), dok je operator $\hat{S}^- = \hat{S}^x - i\hat{S}^y$ smanjuje, sledi da operator \hat{S}^- kreira pobuđenja sistema dok ih \hat{S}^+ anihilira, s obzirom da se ona sastoje u otklanjanju pravca elektronskog spina od prvobitnog pravca njihove maksimalne uređenosti.

Kao sledeći korak nameće se potreba izražavanja Hajzenbergovog hamiltonijana preko operatora \hat{S}^- , \hat{S}^+ i $S - \hat{S}^z$, pri čemu ovaj poslednji predstavlja meru odstupanja svojstvene vrednosti operatora \hat{S}^z od njene maksimalne vrednosti S , a sve u cilju animiranja koncepta spinskih talasa.

S obzirom da se spinski operator $\vec{\hat{S}}$ može predstaviti u obliku:

$$\vec{\hat{S}} = \hat{S}^x \vec{i} + \hat{S}^y \vec{j} + \hat{S}^z \vec{k} = \frac{\hat{S}^+ + \hat{S}^-}{2} \vec{i} + \frac{\hat{S}^+ - \hat{S}^-}{2} \vec{j} + [S - (S - \hat{S}^z)] \vec{k} \quad (5)$$

i imajući u vidu da spinski operatori različitih čvorova rešetke (s obzirom da deluju na različite argumente) komutiraju, Hajzenbergov spinski hamiltonijan (1):

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{\hat{S}}_{\vec{n}} \vec{\hat{S}}_{\vec{m}} - g\mu_B \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^z,$$

postaje (*Škrinjar, Kapor[1]*):

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} S^2 I(0) N - g\mu_B \mathcal{H} N S + (SI(0) + \mu_B g \mathcal{H}) \sum_{\vec{n}} (S - \hat{S}_z) - \\ - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}}^- \hat{S}_{\vec{m}}^+ - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - \hat{S}_{\vec{n}}^z) (S - \hat{S}_{\vec{m}}^z) . \quad (6)$$

Dalja analiza feromagnetika zahteva utvrđivanje kinetičkih karakteristika operatora koji ulaze u sastav njegovog operatora energije.¹

Pri ispitivanju magnetika, pre svega smo zainteresovani za dve grupe pitanja teorije magnetizma: prvo, određivanje temperaturne zavisnosti niza statičkih karakteristika magnetnih materijala (npr. magnetizacije) i drugo, ispitivanje dinamičkih osobina, u našem slučaju naseljenosti čvorova rešetke elementarnim ekscitacijama.

U zavisnosti od karakteristika magnetnih sredina koje se žele ispitati u okviru Hajzenbergovog izotropnog modela koji ovde jedino razmatramo, koriste se različite metode reprezentacije spinskih operatora operatorskim strukturama sastavljenim od Pauli-, Boze- ili Fermi-operatora.

U slučaju kada se ispituju sistemi sa dva energetska nivoa-osnovnim i prvim pobuđenim, kao što je to na primer slučaj u molekulskim kristalima proste kubne strukture, kod kojih je energija prvog pobuđenog nivoa mnogo bliža energiji osnovnog stanja nego energiji ostalih pobuđenih stanja, koriste se Pauli operatori (*Tošić, Stojanović, ... [3]*). Dakle, zanemarujući pod datim uslovima mogućnost pobuđivanja na više energetske nivoe, sistem svodimo u okvire dvonivovskog modela, koji se veoma pogodno opisuju pomoću operatora spina svojstvene vrednosti 1/2.

Na taj način, za opisivanje optičkih pobuđenja molekulskih kristala, odnosno elektronskih prelaza u njima, uz uslov da u svakom molekulu tj. čvoru postoji samo jedan elektron koji se može pobuditi, koristimo:

$$\hat{a}_{n_0}^+ \hat{a}_{n_0} + \hat{a}_{n_1}^+ \hat{a}_{n_1} = 1 ,$$

možemo definisati operatore koji ih kreiraju ili anihiliraju na sledeći način:

$$\hat{P}_{n_1}^+ = \hat{a}_{n_1}^+ \hat{a}_{n_0} \quad \wedge \quad \hat{P}_{n_1} = \hat{a}_{n_0}^+ \hat{a}_{n_1} .$$

Pri tome se operatori $\hat{a}_{n_f}^+$, \hat{a}_{n_f} koji kreiraju, odnosno anihiliraju elektron na čvoru \vec{n} u kvantnom stanju f pokoravaju fermionskim komutacionim relacijama (*Tošić[2]*).

Konačni oblik komutacionih izraza Pauli-operatora, koji se na istom čvoru ponašaju kao fermioni, a na različitim čvorovima kao bozoni, glasi (*Tošić, Stojanović, ... [3]*):

$$[\hat{P}_{\vec{n}}, \hat{P}_{\vec{m}}] = (1 - 2\hat{P}_{\vec{n}}^+, \hat{P}_{\vec{n}}) \delta_{\vec{n}\vec{m}} ,$$

$$[\hat{P}_{\vec{n}}, \hat{P}_{\vec{m}}] = [\hat{P}_{\vec{n}}^+, \hat{P}_{\vec{m}}^+] = 0 \quad \wedge \quad \hat{P}_{\vec{n}}^2 = \hat{P}_{\vec{n}}^{+2} = 0 \quad \wedge \quad (\hat{P}_{\vec{n}}^+ \hat{P}_{\vec{n}}) = (\hat{a}_{\vec{n}}^+ \hat{a}_{\vec{n}}) \in \{0, 1\} ,$$

gde mala zagrada označava svojstvene vrednosti operatora.

¹To se odnosi se na analizu magnetika uopšte, jer za slučajeve antiferomagnetika ili feromagnetika, hamiltonijan trpi sa formalnog stanovišta manje izmene. Prelaz ka tim tipovima magnetika ne predstavlja principijelnu teškoću.

Dakle, za slučaj dvonivovskog sistema, za reprezentaciju spinskih operatora koriste se sledeće operatorske strukture Pauli-operatora :

$$\hat{S}_{\vec{n}}^+ \rightarrow \hat{P}_{\vec{n}}^-, \hat{S}_{\vec{n}}^- \rightarrow \hat{P}_{\vec{n}}^+, \hat{S}_{\vec{n}}^z \rightarrow \frac{1}{2} - \hat{P}_{\vec{n}}^+ \hat{P}_{\vec{n}}^- .$$

Međutim, ponekad je pogodnije raditi direktno sa spinskim hamiltonijanom, jer nam on omogućava da temperaturno zavisne efekte ispitamo na najdirektniji način.

Tako se na primer, postavljanjem jednačine kretanja za operator \hat{S}^+ , uz korišćenje RPA aproksimacije (*Random Phase Approximation*)—aproksimacije haotičnih faza, dobija linearizovana jednačina, jer se u proizvodu dve komponente spinskih operatora projekcija duž z -ose zamenjuje njenom termalnom srednjom vrednošću:

$$\hat{S}_{\vec{n}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^+ \rightarrow \langle S_{\vec{n}}^z \rangle \hat{S}_{\vec{m}}^+ .$$

Ovo „dekuplovanje” priozvoda spinskih operatora, u kojem je svaki operator $\hat{S}_{\vec{n}}^z$ zamenjen svojom srednjom vrednošću različitom od nule, predstavlja zadovoljavajuću aproksimaciju za sistem čije je stanje veoma blisko stanju maksimalne magnetne uređenosti.

Prelaskom u Furijeov prostor dobija se jednačina kretanja operatora $\hat{S}_{\vec{q}}^+$ koja ima oblik jednačine linearnog harmonijskog oscilatora, odakle se dobija frekvencija elementarnih ekscitacija (*Cottam, Tilley [8]*).

Veliki nedostatak ovakvog prilaza je što Furijeova transformacija ne održava komutacione relacije spinskih operatora, dok se sa druge strane, tek prelaskom u prostor recipročne rešetke može u najvećoj meri iskoristiti simetrija kristala. Zbog toga se, uglavnom kada se radi sa spinskim operatorima, ne prelazi u recipročan prostor, već se metodom spinskih Grinovih funkcija nalaze energije elementarnih ekscitacija sistema (*Tošić, Stojanović, ... [3]*).

U ovom radu, kao što će se videti, biće korišćena bozonska reprezentacija spinskih operatora, pa se kao jedna prednost ovakvog pristupa odmah uočava činjenica da Furijeova transformacija za razliku od spinskih, održava komutacione relacije bozonskih i fermionskih operatora.

Takođe, sistemi neinteragujućih bozona i fermiona detaljno su i potpuno proučeni, što omogućuje da se ti idealni sistemi koriste kao nulta aproksimacija prilikom primena perturbativnih metoda.

1 Opšti pristup bozonskim reprezentacijama spinskih operatora

Neka je dato N spinskih operatora $\hat{S}_{\vec{n}}$ pridruženih čvorovima rešetke \vec{n} . Označimo sa $|S, m \rangle_n$ vektore standardnog bazisa pojedinačnog čvora, koji su definisani sa:

$$\hat{S}_{\vec{n}}^2 |S, m \rangle_n = S(S+1) |S, m \rangle_n$$

$$\hat{S}_{\vec{n}}^z |S, m \rangle_n = m |S, m \rangle_n$$

Navedeni vektori stanja čine bazis $(2S + 1)$ - dimenzionog Hilbertovog prostora. Kako su Hilbertovi prostori pojedinačnih čvorova rešetke među sobom disjunktni, odgovarajući Hilbertov prostor stanja celog magnetika jeste direktan proizvod Hilbertovog prostora spinova pojedinačnih čvorova kristala (*Tošić, Stojanović ... [9]*), odnosno:

$$\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_{S_1} \otimes \mathcal{H}_{S_2} \otimes \mathcal{H}_{S_3} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{S_N} .$$

Sa svoje strane, skup bozonskih operatora $\{\hat{B}_{\vec{n}}\}$, čijim će operatorskim funkcijama spinovi biti reprezentovani, zadovoljava sledeće komutacione relacije:

$$[\hat{B}_{\vec{n}}, \hat{B}_{\vec{m}}^+] = \delta_{\vec{n}\vec{m}} \quad \wedge \quad [\hat{B}_{\vec{n}}, \hat{B}_{\vec{m}}] = [\hat{B}_{\vec{n}}^+, \hat{B}_{\vec{m}}^+] = 0$$

i deluje u bozonskom Hilbertovom prostoru:

$$\mathcal{H}_B = \mathcal{H}_{B_1} \otimes \mathcal{H}_{B_2} \otimes \mathcal{H}_{B_3} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{B_N} ,$$

čiji bazis u svakom potprostoru grade vektori stanja $|n \rangle_m$, koji su svojstveni vektori operatora $\hat{n}_{\vec{m}} = \hat{B}_{\vec{m}}^+ \hat{B}_{\vec{m}}$.

Ideali svake reprezentacije, pa prema tome i bozonske, mogu se sažeti u obliku dva zahteva. Prvi od njih je da se teži ka formulisanju operatorskih struktura boze-operatora koji će delujući u prostoru $\hat{\mathcal{H}}_B$ imati iste komutacione relacije kao i operatori $\hat{S}_{\vec{n}}^{\pm}$ i $\hat{S}_{\vec{n}}^z$ u spinskom prostoru \mathcal{H}_S , dok se drugi sastoji u zahtevu za istim statističkim srednjim vrednostima polaznih struktura i bozonskih, kojima će one biti zamenjene.

Na niskim temperaturama, kada je stanje sistema veoma blisko stanju maksimalne uređenosti, možemo pisati $\langle \hat{S}^z \rangle \approx S$, čime komutaciona relacija $[\hat{S}_{\vec{n}}^+, \hat{S}_{\vec{m}}^-] = 2 \hat{S}_z \delta_{\vec{n}\vec{m}}$ prelazi u $[\hat{S}_{\vec{n}}^+, \hat{S}_{\vec{m}}^-] = 2S \delta_{\vec{n}\vec{m}}$, što predstavlja osnovni argument koji ide u prilog stava da se na niskim temperaturama spinovi ponašaju kao bozoni.

U tom smislu kao prvi korak, nameće se sledeća smena:

$$\hat{S}_{\vec{n}}^- \rightarrow \sqrt{2S} \hat{B}_{\vec{n}}^+, \quad \hat{S}_{\vec{n}}^+ \rightarrow \sqrt{2S} \hat{B}_{\vec{n}} ,$$

što za spin 1/2 (tj. dvonivovski sistem) daje $\hat{P}_{\vec{n}} \rightarrow \hat{B}_{\vec{n}} \quad \wedge \quad \hat{P}_{\vec{n}}^+ \rightarrow \hat{B}_{\vec{n}}^+$, kao što je i bilo predviđeno.

U teoriji magnetizma ova aproksimacija odgovara konceptu neinteragujućih spinskih talasa (Blohova aproksimacija), s obzirom da se u transformisanom hamiltonijanu, nakon prelaska na normalni oblik proizvoda operatora u njemu, zanemaruju (u skladu sa samom reprezentacijom) proizvodi više od dva boze-operatora, što fizički odgovara zanemarivanju interakcije među magnonima (*Škrinjar, Kapor[1]*).

S obzirom na relaciju $\hat{S}_{\vec{n}}^z = S - \hat{B}_{\vec{n}}^+ \hat{B}_{\vec{n}}$, vidimo da Blohova aproksimacija postaje potpuno neprihvatljiva u slučaju kada svojstvene vrednosti operatora $\hat{B}_{\vec{n}}^+ \hat{B}_{\vec{n}}$ pređu $2S$, što je u skladu sa konstatacijom da se ona koristi samo za slučaj slabo pobuđenog sistema.

Takođe, Blohova aproksimacija je tim bolja što je spin veći, a samim tim i broj mogućih projekcija spina na pravac spoljašnjeg polja, odnosno što smo bliži klasičnom slučaju.

Blohov pristup zamene spinskih talasa kvazičesticama bozonskog tipa neizostavno se dakle, suočava sa problemom dimenzionalnosti bozonskog prostora, jer se u njega uvode

nefizička stanja sa z -projekcijom većom od S , koja očigledno u spinskom prostoru nisu postojala.

U tom smislu su dalji napori bili usmereni ka mogućnostima razdvajanja potprostora fizičkih i nefizičkih stanja. Holštajn i Primakov napravili su prvi korak u tom pravcu i predložili sledeću reprezentaciju, koja se u teoriji bozonskih reprezentacija danas smatra „klasičnom“:

$$\hat{S}_n^+ = \sqrt{2S - n_m} \hat{B}_m = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{B_n^+ B_n}{2S}} \hat{B}_n$$

$$\hat{S}_m^- = (\hat{S}_m^+)^+ , \quad \hat{S}_m^z = S - \hat{B}_n^+ \hat{B}_n .$$

Ovde kvadratni koren treba smatrati oznakom za binomni razvoj, pod pretpostavkom da je $\frac{\langle n \rangle}{2S} \ll 1$. Primetimo da ova reprezentacija ima smisla jedino za $S \gg \frac{1}{2}$.

Problem sa kojim se srećemo u radu sa njom je nepogodnost računanja sa kvadratnim korenom, međutim korektni rezultati se dobijaju jedino ako se on koristi. U praksi se često uzimaju samo prvi članovi reda, odnosno:

$$\hat{S}_n^+ \approx \sqrt{2S} \left(1 - \frac{\hat{B}_n^+ \hat{B}_n}{4S}\right) \hat{B}_n ,$$

što je prilično gruba aproksimacija, pogotovo za $S = \frac{1}{2}$.

Holštajn–Primakova reprezentacija ipak nije dobro opisivala niskotemperaturno ponašanje Hajzenbergovog feromagneta, jer je davala član reda T^3 , kao član magnonske interakcije, u suprotnosti sa Blohovom aproksimacijom koja daje član reda $T^{\frac{3}{2}}$, kao osnovni član u niskotemperaturnom razvoju magnetizacije.

Tako se kao rezultat dajeg razvoja teorije pojavila bozonska neermitska reprezentacija Dajson–Maljejeva, koja ima sledeći oblik:

$$\hat{S}_n^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{\hat{B}_n^+ \hat{B}_n}{2S}\right) \hat{B}_n$$

$$\hat{S}_n^- = \sqrt{2S} \hat{B}_n^+$$

$$\hat{S}_n^z = S - \hat{B}_n^+ \hat{B}_n$$

2 Agranovič–Tošićeva reprezentacija za slučaj $S = \frac{1}{2}$

Tokom proučavanja kolektivnih svojstava Frenkelovih eksitona, Agranovič i Tošić predložili su bozonsku reprezentaciju koja nije približna, već tačna u smislu ideala ka kojima teži svaka reprezentacija, bez obzira na matematičku prirodu njenih objekata.

Njihov zaključak bio je da bozonsku reprezentaciju Pauli–operatora treba tražiti u obliku:

$$\hat{P}_m = f_m^{1/2} \hat{B}_m ; \quad \hat{P}_m^+ = (\hat{P}_m)^+ ; \quad \hat{P}_m^+ \hat{P}_m = \hat{B}_m^+ f_m \hat{B}_m ,$$

gde je $f_{\bar{m}}$ hermitski operator koji je funkcija jedino $n_{\bar{m}} = \hat{B}_{\bar{m}}^+ \hat{B}_{\bar{m}}$. U cilju nalaženja njegovih karakteristika, razvićemo ga u red po normalnim produktima boze-operatora:

$$f_{\bar{m}} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \hat{B}_{\bar{m}}^{+\nu} \hat{B}_{\bar{m}}^{\nu} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} n_{\bar{m}}(n_{\bar{m}} - 1) \dots (n_{\bar{m}} - \nu + 1) .$$

Oдавde sledi da sa porastom ν ovaj operator na sve većem potprostoru stanja stiče svojstvenu vrednost nula. Bozonska priroda operatorske funkcije $f_{\bar{m}}$ obezbeđuje da svi komutatori Pauli-operatora u ovoj reprezentaciji, na različitim čvorovima, budu jednaki nuli. Na taj način nam preostaje da koeficijente operatorskog reda odredimo iz antikomutatorske relacije, koju zadovoljavaju Paulijevi operatori istog čvora:

$$\hat{P}_{\bar{m}}^+ \hat{P}_{\bar{m}} + \hat{P}_{\bar{m}} \hat{P}_{\bar{m}}^+ = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \hat{B}_{\bar{m}}^{+\nu} \hat{B}_{\bar{m}}^{\nu} + \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} n_{\bar{m}} \hat{B}_{\bar{m}}^{+\nu} \hat{B}_{\bar{m}} + \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \hat{B}_{\bar{m}}^{+\nu+1} \hat{B}_{\bar{m}}^{\nu+1} = 1 .$$

Pomoću rekurentnih relacija mogli bi se naći traženi koeficijenti, koji glase:

$$a_{\nu} = \frac{(-2)^{\nu}}{(\nu + 1)!} , \quad \nu = 0, 1, 2, \dots$$

Prema tome, AT -reprezentacija ima konačni oblik:

$$\hat{P}_{\bar{m}} = f_{\bar{m}}^{1/2} \hat{B}_{\bar{m}} ; \quad \hat{P}_{\bar{m}}^+ = (\hat{P}_{\bar{m}})^+ ; \quad f_{\bar{m}} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(\nu + 1)!} \hat{B}_{\bar{m}}^{\nu} \hat{B}_{\bar{m}}^{\nu}$$

Bitne osobine ove reprezentacije posledica su sledeće relacije:

$$f_{\bar{m}} | n_{\bar{m}} \rangle = \frac{1}{2} [1 - (-1)^{n_{\bar{m}}-1}] \frac{1}{n_{\bar{m}}+1} | n_{\bar{m}} \rangle ,$$

iz koje se vidi da operatorska funkcija $f_{\bar{m}}$ ima samo dve svojstvene vrednosti: 0 kada deluje na stanje sa neparnim brojem bozona i $\frac{1}{(n_{\bar{m}}+1)}$, kada deluje na stanje parnog $n_{\bar{m}}$. Sada je lako odrediti spektar operatora $\hat{N}_{\bar{m}} = \hat{P}_{\bar{m}}^+ \hat{P}_{\bar{m}}$. On ima samo dve svojstvene vrednosti: 0 za $n_{\bar{m}} = 2k$ i 1 za $n_{\bar{m}} = 2k + 1$, $k \in N$.

Oдавde sledi značajna karakteristika AT -reprezentacije, a to je da se nefizička stanja ne pojavljuju, već ceo bozonski prostor daje doprinos u smislu da se u njemu ne mogu naći vektori stanja koji bi bili svojstvene funkcije bozonskih operatorskih struktura sa nultim svojstvenim vrednostima i onim koje se ne mogu pojaviti u prvobitnom spinskom Hilbertovom prostoru.

Na kraju, potrebno je još proveriti da li je ispunjeno $\hat{P}_{\bar{m}}^2 = \hat{P}_{\bar{m}}^{+2} = 0$. Kako je $\hat{P}_{\bar{m}}^2 = f_{\bar{m}}^{1/2} \hat{B}_{\bar{m}} f_{\bar{m}}^{1/2} \hat{B}_{\bar{m}}$, zbog prisustva dva bozonska operatora anihilacije, bar jedna od operatorskih funkcija, delujući na svoj argument, daće nulu. Analogno rezonovanje primenjuje se i za slučaj $\hat{P}_{\bar{m}}^{+2}$.

Na ovaj način, pokazalo se da AT -reprezentacija zadovoljava sve neophodne relacije.

Iz AT -reprezentacije dobijamo Blohovu aproksimaciju za slučaj da u operatorskom redu za funkciju $f_{\bar{m}}$ zadržimo samo prvi član, odnosno uzmemo $f_{\bar{m}} = 1$, dok zadržavanjem samo dva prva člana u razvoju dobijamo Holštajn-Primakovu (HP) reprezentaciju, tj.:

$$\hat{P}_{\bar{m}}^+ \approx \hat{B}_{\bar{m}}^+ \sqrt{1 - \hat{B}_{\bar{m}}^+ \hat{B}_{\bar{m}}} .$$

Očigledno je da se problem postojanja nefizičkih stanja u prostoru operatora, objekata reprezentacije može izbeći jedno zadržavanjem beskonačnog bozonskog reda.

Recimo za kraj da je Agranovič-Tošičeva reprezentacija našla niz primena i u osnovi se pokazala veoma efikasnom. Ona je bila ne samo u stanju da reprodukuje sve dotadašnje rezultate, već i da dovede do niza novih i to iz oblasti teorije magnetizma, feroelektrika i optike molekulskih kristala.



III Slojevite strukture i super-rešetke

Posebno mesto u modernoj fizici kondenzovane materije zauzimaju fundamentalna i primenjena istraživanja u cilju stvaranja novih materijala u konfiguracijama ranije smatranim za neuobičajene. Među njima, magnetni materijali daju naročit doprinos u opštoj tendenciji ka minijaturizaciji tehnologija.

Interesovanje za veštački proizvedene slojevite sisteme enormno je poraslo nakon otkrića *GMR* 1988. godine (*Giant-magneto-resistance*) (Allen[14]).

Sedamdesetih godina unapređen je veliki broj metoda rasta kristala u cilju dobijanja uzoraka forme naizmenično položenih slojeva. Metalne slojevite konfiguracije nisu međutim dovele do značajnijeg uticaja na magnetna istraživanja sve do osamdesetih godina, kada su usledila značajna otkrića zavisnosti fizičkih osobina materijala od vrste geometrije u kojoj su proizvedeni. U tom smislu tehnike rasta bile su upotrebljavane za spravljanje uzoraka u formi naizmeničnih slojeva konstituenta 1, debljine d_1 i konstituenta 2 debljine d_2 , pri čemu se ove vrednosti mogu kretati u rasponu od 2 – 3 međuatomska rastojanja, pa do tipično 100nm. Njih nazivamo slojevitim strukturama ili super-rešetkama. Termin *super-rešetka* u početku je bio kovanica koja se odnosi na slojevite strukture u kojima postoji dugodometna strukturna koherentnost duž pravca rasta, odnosno pravca njihovog naizmeničnog ređanja. Međutim, kasnije su termini super-rešetke i multilejera sve češće upotrebljavani kao sinonimi.

Mnoge fizičke osobine su u značajnoj meri modifikovane usled postojanja dugog perioda $D = d_1 + d_2$, ovako veštački stvorene rešetke u pravcu normalnom na ravni naizmenično položenih slojeva. Generalna posledica jeste javljanje nove granice I Brilloune zone sa komponentom talasnog vektora $\frac{\pi}{D}$ normalnom na interfejse, koja je u mnogome manje od uobičajenih vrednosti $\frac{\pi}{a}$ prirodne rešetke. Disperzione krive, kao na primer za akustičnu fononsku granu, usled toga dobijaju familiju energetskih procepa (zabranjenih zona) na krajevima veštački stvorenih zona.

U metodi epitaksije molekulskim snopom (*MBE-Molecular-beam epitaxy*) (Cottam, Tilley[8]), snop atoma ili molekula prolazeći kroz ultra-visoki vakuum, sudara se sa monokristalnom podlogom, nakon čega se u kontrolisanim uslovima kristalni rast ostvaruje epitaksijalno. Ultra-visoki vakuum (*UHV*) koristi se u metodi *MBE* da bi se pod povišenom temperaturom atomski snop u vidu epitaksijalnog filma nataložio na podlogu. Mala brzina rasta, tipično monoatomski sloj u sekundi, kombinovan sa površinskom migracijom omogućuje formu rasta sloj po sloj. Rast filma odvija se daleko od uslova termodinamičke ravnoteže i u najvećoj meri je uslovljen pojavom površinske kinetike usled ugrađivanja atoma iz snopa u supstrat. *UHV MBE* kao eksperimentalni metod, ima tu jedinstvenu prednost što dozvoljava primenu osetljivih dijagnostičkih postupaka kao što su *RHEED* (*reflection high energy electron diffraction*) i *AES* (*Auger electron spectroscopy*) u cilju karakterizacije površina ovako nastalih lejera.

Metoda raspršivanja (*sputtering*) dozvoljava dublju implementaciju atoma u podlogu i omogućuje preciznu kontrolu energetske distribucije atoma koji dospevaju u supstrat. Međutim, sama prisutnost gasa koji se naprskava onemogućuje primenu tehnika strukturne karakterizacije površina nastalih slojeva i čini sistem osetljivijim na kontaminaciju.

Može se reći da su strukturne i fizičke karakteristike super-rešetki dobijenih primenom ove dve tehnike uporedive ako je u oba slučaja posvećena podjednaka pažnja procesu rasta kristala.

Metalne super-rešetke mogu se dobiti u velikom broju kombinacija različitih tipova metala, bez obzira na kristalografske strukture učestvujućih komponenti.

Metali multilejeri sastavljeni od naizmeničnih slojeva feromagnetnih prelaznih metala (*Fe, Co, Ni*) i plemenitih metala (*Cu, Ag, Pd, Pt, Au*) pokazuju *PMA* (*perpendicular magnetic anizotropy*)-transverzalnu magnetnu anizotropiju što se veoma široko primenjuje kao medijum za magneto-optičko snimanje signala (*Schuller, Kim, Leighton*[13]).

Metalne slojevite strukture, uključujući i one kod kojih jedan ili oba konstituenta mogu biti magnetna, dobijaju se metodom raspršivanja.

U novije vreme fundamentalna istraživanja u teoriji magnetizma bivala su preusmeravana na modeliranje kako potpuno novih, tako i starih materijala neobičnih geometrija, što je bilo uslovljeno napretkom u pripremi materijala kao i vakumskim tehnologijama.

Generalno gledano, fizički fenomeni koji se javljaju u super-rešetkama, mogu biti klasifikovani kao efekti pojedinačnog filma, interfejsa i blizine u smislu površinskih efekata.

Efekti pojedinačnog filma uslovljeni su restrikcijom geometrije materijala, efekti blizine ispoljavaju se u direktnom kontaktu dva različita materijala, dok se magnetno sparivanje odnosi na sistem od najviše tri lejera, što znači da super-rešetka nije neophodna. Međutim, pogodnost izučavanja fenomena unutar super-rešetke sastoji se u uklanjanju perturbacija sredine površinskim efektima, s obzirom da se unutar nje interfejsi nalaze zaštićeni.

Na primer, transverzalna magnetna anizotropija (*PMR-perpendicular magnetic anisotropy*), pojava dominantno prisutne površinske anizotropije, ili u *GMR*, posledice antiferomagnetnog sparivanja kroz nemagnetne slojeve, prvi put je bilo primećeno u super-rešetkama (*Allen*[14]).

Tabela koja sledi, u najkompaktnijem vidu daje pregled najvažnijih dostignuća u oblasti magnetnih slojevitih struktura (*Schuller, Kim, Leighton* [13]).

| Godina | Dostignuća na polju super-struktura |
|--------|--|
| 1935. | Proizvodnja magnetnih rešetki i multilejera |
| 1978. | Anomalna magnetizacija u sistemu Cu/Ni |
| 1982. | Odsustvo 2d magnetizma u sistemu Cu/Ni |
| 1983. | Magnonski procepi u magnetnim super-rešetkama |
| 1985. | PMA u sistemu Co/Pd |
| 1986. | Antiferomagnetno (AF) kuplovanje u sistemu Fe/Cr |
| 1988. | Giant Magneto-Resistance (GMR) |
| 1989. | AF kuplovanje u sistemu Co/Cu |
| 1992. | Energetski procepi u sistemu Ag/Au |
| 1994. | Transportni procesi u sistemu Co/Ni |

Tabela 1. Hronologija dostignuća na polju super-struktura

IV Hamiltonijan super-rešetke sa dvostrukim antiferomagnetnim slojem

Geometrijski najjednostavnija super-rešetka bila bi ona kod koje se kao motiv ponavlja sistem dve ravni. Ovaj sistem može se i relativno jednostavno praktično realizovati, pa i zbog toga zanimljiv za proučavanje.

U literaturi postoje mnogi teorijski radovi posvećeni ovoj problematici. Tako se u radu *Matsuda i Hide[10]* posmatra slojevita struktura sa samo dva sloja, tzv. „bilejer”, u okviru kvadratnog bozonskog hamiltonijana. Sa druge strane, H.T.Diep (*H.T.Diep[9]*) problem super-rešetke tretirao je metodom spinskih Grinovih funkcija.

Mi smo odlučili da sistem super-rešetke posmatramo u svetlu bozonskih aproksimacija, kao što će se u daljem videti.

Posmatrajmo sada super-rešetku, prikazanu na slici 2. Njena struktura sastoji od naizmenično postavljenih antiferomagnetnih slojeva sačinjenih od materijala a i b , čiji integrali izmene imaju vrednosti J_a i J_b , a svojstvene vrednosti operatora spina njihovih atoma S_a i S_b , respektivno. Sa iste slike se primećuje da je rastojanje između ravni označenih sa a i b rastojanje jednako i iznosi a , što nam daje opravdanje da nadalje smatramo da su vrednosti integrala izmene između svih raznorodnih slojeva jednake, odnosno da važi $J_{ab} = J_{ba}$. Sa obzirom na antiferomagnetnu prirodu uključenih interakcija sva izmenska uzajamna dejstva opisana su pozitivnim integralima izmene. U okviru našeg sistema uočavamo dve proste kubne magnetne podrešetke smaknute za veličinu d , jedna u odnosu na drugu, pri čemu ćemo sa 1 obeležavati čvorove „up” podrešetke, a sa 2 čvorove odgovarajuće „down” podrešetke. Pri tome, sa N_p označavaćemo broj čvorova u svakoj od ravni a i b , sa N_c broj ćelija super-rešetke i sa N_z broj ravni duž z -ose, pri čemu je očigledno $N_z = 2N_c$. Oznake Z_1 i Z_2 biće korišćene sa značenjem broja najbližih suseda u jednoj, odnosno dve dimenzije, odnosno $Z_1 = 2$ i $Z_2 = 4$.

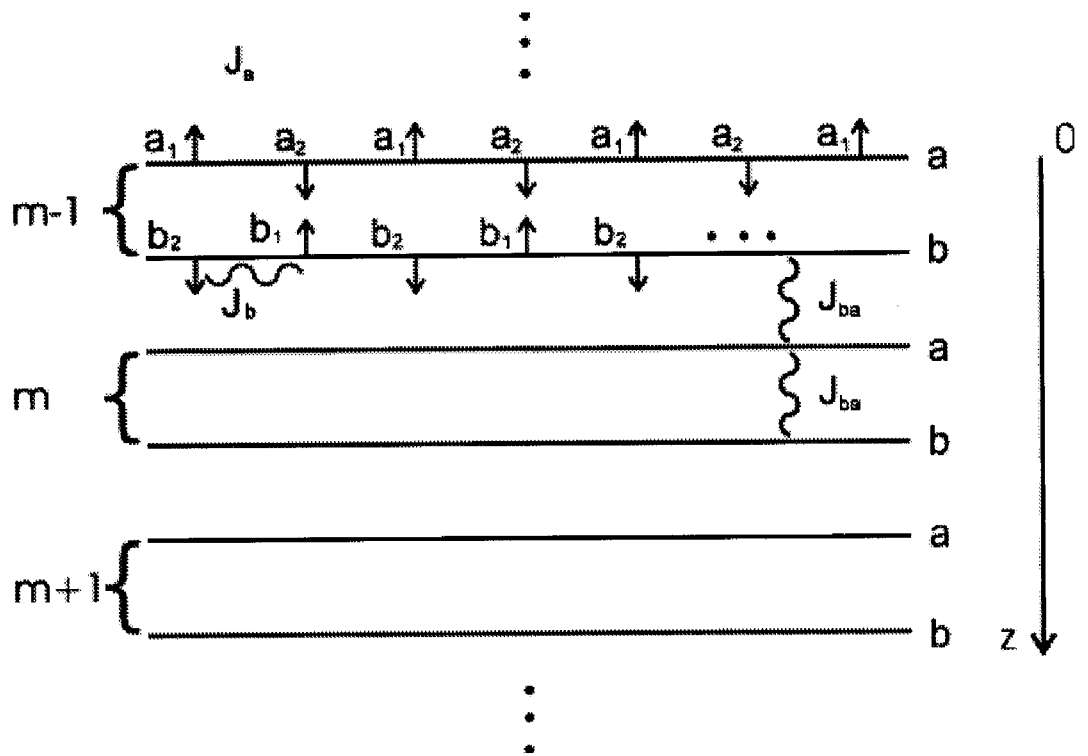
Proučavanje niskotemperaturnih osobina na ovaj način definisane super-strukture, započinjemo u okviru Hajzenbergovog hamiltonijana (1):

$$\hat{H} = \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}}^x \hat{S}_{\vec{m}}^x + D \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^z - g\mu_B \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}}^z$$

Prva suma u okviru modelnog Hajzenbergovog operatora energije obuhvata magnetne interakcije kako između, tako i unutar svake od podrešetki 1 i 2. Anizotropni član okarakterisan je konstantom D zbog kasnijeg numeričkog komoditeta. Ona je naravno funkcija argumenata mikroskopske prirode, ali s obzirom da ima malu vrednost smatramo je nezavisnom od koordinata čvorova kristalne rešetke. Na kraju, trećom sumom opisana je interakcija super-rešetke sa spoljašnjim magnetnim poljem.

Sada je neophodno izvršiti prelaz ka operatorima kreiranja i anihilacije pobuđenja u sistemu, odnosno kvanata spinskih talasa – magnona, na način opisan u poglavlju o reprezentacijama spinskih operatora (videti glavu I, poglavlje 2). Traženi prelaz ostvaruje se pomoću sledeće relacije:

$$\hat{S}_{\vec{n}}^x \hat{S}_{\vec{m}}^x + \hat{S}_{\vec{n}}^y \hat{S}_{\vec{m}}^y = \frac{1}{2} (\hat{S}_{\vec{n}}^+ \hat{S}_{\vec{m}}^- + \hat{S}_{\vec{n}}^- \hat{S}_{\vec{m}}^+) \quad (7)$$



Slika 2. Šematski prikaz super-rešetke

Koristeći se slikom 2., osvrnimo se još jednom na strukturu modelnog hamiltonijana. Super-rešetka se sa svoje strane sastoji od ćelija označenih indeksom m koji prolazi skupom prirodnih brojeva u okviru kojih su obuhvaćene obe vrste interfejsa. Na taj način, u okviru planarnog člana hamiltonijana razlikujemo dva raznorodna dela koja se odnose na interfejse a i b , u kojima figurišu veličine J_a i J_b . Unutarćelijskim i međućelijskim članom hamiltonijana obuhvaćene su interakcije izmene, opisane sa J_{ab} između elektrona smeštenih u čvorovima magnetnog dielektrika i to kako unutar svake od ćelija tako i onih međućelijskih. Dakle, možemo zapisati:

$$\hat{H} = \hat{H}_{plane} + \hat{H}_{cell} + \hat{H}_{intercell} + \hat{H}_{extfield}$$

Primetimo da operator \hat{S}_2^+ (operator „down” podrešetke) povećava projekciju spina na z -osu, odnosno kreira pobuđenje u sistemu. Zbog toga je u ovom trenutku izvršeno „obrtanje” z -ose u podrešetki 2, kako bi bozonske reprezentacije spinskih operatora definisanje u odnosu na nju imale isti algebarski oblik kao i reprezentacije spinova „up” podrešetke. Na taj način će se u hamiltonijanu umesto očekivanog izraza $(\hat{S}^+\hat{S}^- + \hat{S}^-\hat{S}^+)$, javiti izraz $(\hat{S}^+\hat{S}^+ + \hat{S}^-\hat{S}^-)$, pri čemu će se u daljem, bozonske reprezentacije spinova obe podrešetke uzeti u algebarski simetričnom obliku.

Označavajući sa A_1, A_2, B_1 i B_2 tekuće čvorove materijala a i b , a sa $\vec{n} = (m, \vec{\rho})$ njihove položaje, pri čemu analizu vršimo u aproksimaciji najbližih suseda, možemo pisati:

$$\hat{H}_{plane} = \sum_{m \in Z} \sum_{A=a,b} \sum_{\vec{\rho}} \sum_{\vec{\rho}+\vec{\delta}} \left[\frac{1}{2} J_A (\hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{+(A_1)} \hat{S}_{m,\vec{\rho}+\vec{\delta}}^{+(A_2)} + \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{-(A_1)} \hat{S}_{m,\vec{\rho}+\vec{\delta}}^{-(A_2)}) - (J_A + D) \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{z(A_1)} \hat{S}_{m,\vec{\rho}+\vec{\delta}}^{z(A_2)} \right] \quad (8)$$

$$\hat{H}_{cell} = \sum_m \sum_{i,j=1}^2 \sum_{\vec{\rho}} \left[\frac{1}{2} J_{ab} (\hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{+(a_i)} \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{+(b_j)} + \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{-(a_i)} \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{-(b_j)}) - (J_{ab} + D) \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{z(a_i)} \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{z(b_j)} \right] \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{intercell} = & \frac{1}{2} \sum_m \sum_{i,j=1}^2 \sum_{\vec{\rho}} \left[\frac{1}{2} J_{ab} (\hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{+(b_i)} \hat{S}_{m+1,\vec{\rho}}^{+(a_j)} + \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{-(b_i)} \hat{S}_{m+1,\vec{\rho}}^{-(a_j)} + \hat{S}_{m-1,\vec{\rho}}^{+(b_i)} \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{+(a_j)} + \right. \\ & \left. + \hat{S}_{m-1,\vec{\rho}}^{-(b_i)} \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{-(a_j)}) - (J_{ab} + D) (\hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{z(b_i)} \hat{S}_{m+1,\vec{\rho}}^{z(a_j)} + \hat{S}_{m-1,\vec{\rho}}^{z(b_i)} \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{z(a_j)}) \right] \quad (10) \end{aligned}$$

$$\hat{H}_{extfield} = g\mu_B \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}} = -h \sum_{\vec{n}} \hat{S}_{\vec{n}} \quad (11)$$

Bozonski tretman primenjujemo u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{+(a)} &= \sqrt{2S_a} \hat{a} - \beta_a \hat{a}^+ \hat{a} \\ \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{-(a)} &= \sqrt{2S_a} \hat{a}^+ - \alpha_a \hat{a}^+ \hat{a} \\ \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{z(a)} &= S_a - \hat{a}^+ \hat{a} + \gamma_a \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} \\ \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{+(b)} &= \sqrt{2S_b} \hat{b} - \beta_b \hat{b}^+ \hat{b} \\ \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{-(b)} &= \sqrt{2S_b} \hat{b}^+ - \alpha_b \hat{b}^+ \hat{b} \\ \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{z(b)} &= S_b - \hat{b}^+ \hat{b} + \gamma_b \hat{b}^+ \hat{b} \hat{b} \quad (12) \end{aligned}$$

U navedenim bozonskim reprezentacijama spinskih operatora, svi učestvujući operatori jesu operatori datog čvora $\vec{n} = (m, \vec{\rho})$. Pri tome $m \in Z$ prebrojava ćelije, dok dvodimenzioni vektor $\vec{\rho} = (x, y)$ locira položaj određenog čvora u okviru izabrane ravni, odnosno, u svim prethodnim relacijama podrazumevamo $\hat{a}(m, \vec{\rho})$, $\hat{a}^+(m, \vec{\rho})$ i $\hat{b}(m, \vec{\rho})$, $\hat{b}^+(m, \vec{\rho})$. Za parametre bozonske reprezentacije važi $\alpha_a, \beta_a, \gamma_a, \alpha_b, \beta_b, \gamma_b \in R^+$.

Nakon primenjene bozonske reprezentacije spinskih operatora, potrebno je preći u energetski, Furijeov prostor, s obzirom da se u njemu na najpotpuniji način može iskoristiti simetrija super-strukture. Taj prelaz vrši se postupno. U prvom koraku sprovodimo ravanski Furije-transform, dok se u drugom vrši transformacija duž veštački stvorenog dugog perioda super-rešetke $2a$, duž z -ose. Pri tome ćemo koristiti oznake:

$$\vec{k}_{||} = (k_x, k_y)$$

$$\gamma(\vec{k}_{\parallel}) = \frac{1}{2}(\cos(\vec{k}_{\parallel} a \vec{e}_x) + \cos(\vec{k}_{\parallel} a \vec{e}_y))$$

$$\hat{a}(m, \vec{\rho}) = \frac{1}{\sqrt{N_p}} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} a(m, \vec{k}_{\parallel}) e^{i\vec{k}_{\parallel} \vec{\rho}} \quad \wedge \quad \hat{a}(m, \vec{k}_{\parallel}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\vec{k}_z} a(k_z, \vec{k}_{\parallel}) e^{i k_z m a}$$

Konačni Furije-transformi svih članova totalnog hamiltonijana sistema glase:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{plane} = & J_a S_a Z_2 \sum_{\vec{k}} \gamma(\vec{k}_{\parallel}) [\hat{a}_1(\vec{k}) \hat{a}_2(-\vec{k}) + h.c.] + J_b S_b Z_2 \sum_{\vec{k}} \gamma(\vec{k}_{\parallel}) [\hat{b}_1(\vec{k}) \hat{b}_2(-\vec{k}) + h.c.] - \\ & - \frac{1}{2} J_a \sqrt{2 S_a} \beta_a \frac{Z_2}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \gamma(\vec{k}_{\parallel}) [\hat{a}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_2(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k}) + \\ & + \hat{a}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_1(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k})] - \\ & - \frac{1}{2} J_b \sqrt{2 S_b} \beta_b \frac{Z_2}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \gamma(\vec{k}_{\parallel}) [\hat{b}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_2(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k}) + \\ & + \hat{b}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_1(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k})] - \\ & - \frac{1}{2} J_a \sqrt{2 S_a} \alpha_a \frac{Z_2}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \gamma(\vec{k}_{\parallel}) [\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2^+(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) + \\ & + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1^+(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l})] - \\ & - \frac{1}{2} J_b \sqrt{2 S_b} \alpha_b \frac{Z_2}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \gamma(\vec{k}_{\parallel}) [\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2^+(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) + \\ & + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1^+(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l})] - \\ & - [(J_a + D) S_a^2 + (J_b + D) S_b^2] Z_2 N_p N_z + \\ & + (J_a + D) S_a Z_2 \sum_{\vec{k}} (\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2(\vec{k})) + \\ & + (J_b + D) S_b Z_2 \sum_{\vec{k}} (\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1(\vec{k}) + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2(\vec{k})) - \\ & - (J_a + D) S_a \gamma_a \frac{Z_2}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} [\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) + \\ & + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l})] - \\ & - (J_b + D) S_b \gamma_b \frac{Z_2}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} [\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) + \\ & + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l})] - \\ & - (J_a + D) \frac{Z_2}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \gamma(\vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}) \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{k} - \vec{q} + \vec{l}) - \end{aligned}$$

$$-(J_b + D) \frac{Z_2}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \gamma(\vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}) \hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{k} - \vec{q} + \vec{l}).$$

Furije transform ćelijskog dela hamiltonijana je:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{cell}} = & J_{ab} \sqrt{S_a S_b} \sum_{\vec{k}} \left\{ e^{-i k_z a} [\hat{a}_1(\vec{k}) \hat{b}_2(-\vec{k}) + \hat{a}_2(\vec{k}) \hat{b}_1(-\vec{k})] + h.c. \right\} - \\ & - \frac{\sqrt{2 S_a \beta_b} J_{ab}}{2 N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{b}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{k}) + \hat{b}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{k}) \right] e^{-i k_z a} - \\ & - \frac{\sqrt{2 S_b \beta_a} J_{ab}}{2 N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{a}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_1(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k}) + \hat{a}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_2(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k}) \right] e^{i k_z a} - \\ & - \frac{\sqrt{2 S_a \alpha_b} J_{ab}}{2 N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2^+(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1^+(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \right] e^{i k_z a} - \\ & - \frac{\sqrt{2 S_b \alpha_a} J_{ab}}{2 N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1^+(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) + \right. \\ & \quad \left. + \hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{l}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \right] e^{-i k_z a} - \\ & - 2 S_a S_b (J_{ab} + D) N_p N_c + \\ & + (J_{ab} + D) \sum_{\vec{k}} \left[S_a (\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1(\vec{k}) + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2(\vec{k})) + S_b (\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2(\vec{k})) \right] - \\ & - (J_{ab} + D) \frac{S_a \gamma_b}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) \right] - \\ & - (J_{ab} + D) \frac{S_b \gamma_a}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) \right] - \\ & - (J_{ab} + D) \frac{1}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{k} - \vec{q} + \vec{l}) + \right. \\ & \quad \left. + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{k} - \vec{q} + \vec{l}) \right] e^{i(k_z - q_z)a} \end{aligned}$$

Transformisani sabirak međućelijske interakcije unutar hamiltonijana izgleda sledeće:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{intercell}} = & J_{ab} \sqrt{S_a S_b} \sum_{\vec{k}} \left\{ e^{-i k_z a} [\hat{b}_1(\vec{k}) \hat{a}_2(-\vec{k}) + \hat{b}_2(\vec{k}) \hat{a}_1(-\vec{k})] + h.c. \right\} - \\ & - \frac{\sqrt{2 S_b \beta_a} J_{ab}}{2 N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{a}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{k}) + \hat{a}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{k}) \right] e^{-i k_z a} - \\ & - \frac{\sqrt{2 S_a \beta_b} J_{ab}}{2 N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{b}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_1(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k}) + \hat{b}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_2(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k}) \right] e^{i k_z a} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\sqrt{2S_b\alpha_a}J_{ab}}{2N_pN_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2^+(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k}+\vec{q}+\vec{l}) + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1^+(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k}+\vec{q}+\vec{l}) \right] e^{ik_z a} - \\
& -\frac{\sqrt{2S_a\alpha_b}J_{ab}}{2N_pN_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1^+(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k}+\vec{q}+\vec{l}) + \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2^+(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k}+\vec{q}+\vec{l}) \right] e^{-ik_z a} - \\
& \quad - 2S_a S_b (J_{ab} + D) N_p N_c + \\
& + (J_{ab} + D) S_b \sum_{\vec{k}} \left[\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2(\vec{k}) \right] + (J_{ab} + D) S_a \sum_{\vec{k}} \left[\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1(\vec{k}) + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2(\vec{k}) \right] - \\
& - (J_{ab} + D) \frac{S_a \gamma_b}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k}+\vec{q}-\vec{l}) + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k}+\vec{q}-\vec{l}) \right] - \\
& - (J_{ab} + D) \frac{S_b \gamma_a}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k}+\vec{q}-\vec{l}) + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k}+\vec{q}-\vec{l}) \right] - \\
& \quad - (J_{ab} + D) \frac{1}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{k}-\vec{q}+\vec{l}) + \right. \\
& \quad \left. + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{k}-\vec{q}+\vec{l}) \right] e^{i(k_z - q_z)a}. \\
\hat{H}_{extfield} = & -h \sum_{\vec{k}} \left[\hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2(\vec{k}) + \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2(\vec{k}) - \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) - \hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1(\vec{k}) \right] - \\
& - \frac{h}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \left[\gamma_a (\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k}+\vec{q}-\vec{l}) - \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k}+\vec{q}-\vec{l})) + \right. \\
& \quad \left. + \gamma_b (\hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k}+\vec{q}-\vec{l}) - \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k}+\vec{q}-\vec{l})) \right].
\end{aligned}$$

Totalni hamiltonijan super-rešetke u Furijeovom prostoru glasi:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{tot} = & -N_p N_c Z_2 \left[(J_a + D) S_a^2 + (J_b + D) S_b^2 \right] - 4N_p N_c S_a S_b (J_{ab} + D) + \\
& + \left[(J_a + D) S_a Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_b + h \right] \sum_{\vec{k}} \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) + \\
& + \left[(J_a + D) S_a Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_b - h \right] \sum_{\vec{k}} \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2(\vec{k}) + \\
& + \left[(J_b + D) S_b Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_a + h \right] \sum_{\vec{k}} \hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1(\vec{k}) + \\
& + \left[(J_b + D) S_b Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_a - h \right] \sum_{\vec{k}} \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2(\vec{k}) + \\
& + J_a S_a Z_2 \sum_{\vec{k}} \gamma(\vec{k}_{||}) \left[\hat{a}_1(\vec{k}) \hat{a}_2(-\vec{k}) + h.c. \right] + J_b S_b Z_2 \sum_{\vec{k}} \vec{k} \gamma(\vec{k}_{||}) \left[\hat{b}_1(\vec{k}) \hat{b}_2(-\vec{k}) + h.c. \right] + \\
& + 2J_{ab} \sqrt{S_a S_b} \sum_{\vec{k}} \cos k_z a \left[\hat{a}_1(\vec{k}) \hat{b}_2(-\vec{k}) + \hat{a}_2(\vec{k}) \hat{b}_1(-\vec{k}) + h.c. \right] -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{Z_2}{2N_p N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{l}} \gamma(\vec{k}_{\parallel}) \left(J_a \sqrt{2S_a} \beta_a \left[\hat{a}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_2(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k}) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \hat{a}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_1(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k}) \right] + \right. \\
& + J_a \sqrt{2S_a} \alpha_a \left[\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{l}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{l}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \right] + \\
& \quad + J_b \sqrt{2S_b} \beta_b \left[\hat{b}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_1(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k}) + \hat{b}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_2(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k}) \right] + \\
& \quad + J_b \sqrt{2S_b} \alpha_b \left[\hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{l}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) + \hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{l}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \right] - \\
& - \frac{1}{N_p N_c} \left[(J_a + D) S_a Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_b + h \right] \gamma_a \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) - \\
& - \frac{1}{N_p N_c} \left[(J_a + D) S_a Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_b - h \right] \gamma_a \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) - \\
& - \frac{1}{N_p N_c} \left[(J_b + D) S_b Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_a + h \right] \gamma_b \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) - \\
& - \frac{1}{N_p N_c} \left[(J_b + D) S_b Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_a - h \right] \gamma_b \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k} + \vec{q} - \vec{l}) - \\
& - \frac{Z_2}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \gamma(\vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}) \left((J_a + D) \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{k} - \vec{q} + \vec{l}) + \right. \\
& \quad \left. + (J_b + D) \hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{k} - \vec{q} + \vec{l}) \right) - \\
& - \frac{\sqrt{2S_b} \beta_a J_{ab}}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \cos k_z a \left[\hat{a}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_1(\vec{q}) \hat{a}_1(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k}) + \hat{a}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{a}_2(\vec{q}) \hat{a}_2(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k}) \right] - \\
& - \frac{\sqrt{2S_b} \alpha_a J_{ab}}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \cos k_z a \left[\hat{b}_2^+(\vec{k}) \hat{a}_1^+(\vec{q}) \hat{a}_1^+(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) + \hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_2^+(\vec{q}) \hat{a}_2^+(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \right] - \\
& - \frac{\sqrt{2S_a} \beta_b J_{ab}}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \cos k_z a \left[\hat{b}_1^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_1(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{k}) + \hat{b}_2^+(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \hat{b}_2(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{k}) \right] - \\
& - \frac{\sqrt{2S_a} \alpha_b J_{ab}}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \cos k_z a \left[\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{q}) \hat{b}_2^+(\vec{l}) \hat{b}_2(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{q}) \hat{b}_1^+(\vec{l}) \hat{b}_1(\vec{k} + \vec{q} + \vec{l}) \right] - \\
& - \frac{2(J_{ab} + D)}{N_p N_c} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{l}} \cos(k_z - q_z) a \left[\hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{b}_2^+(\vec{l}) \hat{a}_1(\vec{q}) \hat{b}_2(\vec{k} - \vec{q} + \vec{l}) + \hat{a}_2^+(\vec{k}) \hat{b}_1^+(\vec{l}) \hat{a}_2(\vec{q}) \hat{b}_1(\vec{k} - \vec{q} + \vec{l}) \right].
\end{aligned}$$

Ovako dobijeni totalni hamiltonijan super-rešetke biće predmet dalje analize.

V Proračun metodom Grinovih funkcija

1 Pojam Grinove funkcije

Dvovremenska, temperaturno zavisna, retardovana komutatorska funkcija Grina ili jednostavnije samo Grinova funkcija definiše se kao (Tošić[2]):

$$G(x, x'; t, t') = \ll \hat{A}(x, t | \hat{B}(x', t') \gg = \theta(t - t') \langle [\hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t')] \rangle_0,$$

gde je $\theta(t - t')$ Hevisajdova step-funkcija, a \hat{A} i \hat{B} operatori u reprezentaciji interakcije.

Ako originalni operatori kod kojih je Grinova funkcija konstruisana ne zavisi eksplicitno od vremena i ako je sistem prostorno homogen, Grinova funkcija zavisi jedino od razlika vremenskih, odnosno prostornih koordinata. Takođe, ako operatori \hat{A} i \hat{B} deluju u istom trenutku vremena, važi nam da je:

$$\langle [\hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t)] \rangle_0 = \langle \hat{A}(x) \hat{B}(x') \rangle_0,$$

gde su \hat{A} i \hat{B} originalni operatori dati u Šredingerovoj slici.

Metod Grinovih funkcija jeste približan metod za izračunavanje neravnotežnih srednjih vrednosti korišćenjem ravnotežnih raspodela. Potrebno je primeniti da Grinova funkcija zavisi od vremena čak i kada od vremena ne zavise originalni operatori od kojih je ona konstruisana. Dakle, metod Grinovih funkcija široko se koristi i u problemima ravnotežne kvantne statistike kada su ravnotežni hamiltonijani toliko komplikovani da im se svojstvene vrednosti moraju tražiti perturbativno, što je upravo slučaj u našem problemu super-rešetke.

Da bismo došli do osnovne primene Grinovih funkcija, potrebno je pozvati se na njihovu vezu sa korelacionim funkcijama, koje definišemo sa:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x'; t - t') = \langle [\hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t')] \rangle_0$$

$$\mathcal{J}_{BA}(x - x'; t - t') = \langle [\hat{B}(x, t) \hat{A}(x', t')] \rangle_0$$

Pokazuje se pri tome da je veza između korelacionih funkcija definisana preko njihovih vremenskih Furije-transforma na sledeći način:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x', \omega) = e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} \mathcal{J}_{BA}(x - x', \omega)$$

Sa druge strane, osnovna veza između Grinove funkcije i korelacionih funkcija glasi:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x', \omega) - \mathcal{J}_{BA}(x - x', \omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0} [G(x - x', \omega + i\delta) - G(x - x', \omega - i\delta)].$$

Da bismo iskoristili ovu vezu, potrebno je primeniti sledeći simbilički identitet:

$$\mathcal{P} \frac{1}{x - a \pm i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x - a} \mp i\pi\delta(x - a).$$

Prema tome, za slučaj vremenski nezavisnog hamiltonijana i operatora koji deluju u istom trenutku vremena ($t = t'$), dobijamo:

$$\langle \hat{A}(x)\hat{B}(x) \rangle_0 = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{G(x-x'; \omega + i\delta) - G(x-x'; \omega - i\delta)}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}}}$$

Drugi važan rezultat jeste da realni deo pola Grinove funkcije određuje energiju elementarnih ekscitacija sistema, dok je recipročna vrednost imaginarnog dela pola proporcionalna vremenu života kvazičestica.

Same Grinove funkcije dobijaju se iz odgovarajućih jednačina kretanja koje se za njih postavljaju, dok ćemo ovde jedino navesti jednačinu kretanja za Grinovu funkciju u energetske reprezentaciji, s obzirom da će ona u tom obliku dalje biti primenjavana na problem super-rešetke (*Škrinjar, Kapor[1]*):

$$\omega \ll \hat{A} | \hat{B} \gg_{\omega} = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{A}(x), \hat{B}] \rangle + \ll [\hat{A}, \hat{H}] | \hat{B} \gg_{\omega}$$

2 Jednačine kretanja

U cilju dobijanja srednjih vrednosti naseljenosti čvorova super-rešetke ekscitacija, neophodno je doći do jednačina kretanja odabranih Grinovih funkcija, koje će dati zatvoren sistem jednačina i time omogućiti njihovo nalaženje. Posmatrajmo Grinove funkcije oblika: $\ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{B} \gg$, $\ll \hat{a}_2(\vec{k}) | \hat{B} \gg$, $\ll \hat{b}_1(\vec{k}) | \hat{B} \gg$ i $\ll \hat{b}_2^+(\vec{k}) | \hat{B} \gg$.

Postavljajući za njih jednačine kretanja, nalaženjem komutatora $[\hat{a}_1(\vec{k}), \hat{H}(\vec{k})]$, $[\hat{a}_2^+(\vec{k}), \hat{H}(\vec{k})]$, $[\hat{b}_1(\vec{k}), \hat{H}(\vec{k})]$, $[\hat{b}_1(\vec{k}), \hat{H}(\vec{k})]$, $[\hat{b}_2^+(\vec{k}), \hat{H}(\vec{k})]$, mi dobijamo egzaktno jednačine kretanja u kojima se javljaju više Grinove funkcije sledećih tipova:

$$\begin{aligned} &\ll \hat{a} \hat{a} \hat{a} | \hat{B} \gg, \ll \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} | \hat{B} \gg, \ll \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} | \hat{B} \gg \\ &\ll \hat{b} \hat{b} \hat{b} | \hat{B} \gg, \ll \hat{b}^+ \hat{b} \hat{b} | \hat{B} \gg, \ll \hat{b}^+ \hat{b}^+ \hat{b} | \hat{B} \gg. \end{aligned}$$

Sada je potrebno, u cilju dalje mogućnosti rešavanja, odnosno svođenja viših Grinovih funkcija na niže, primeniti sledeće aproksimacije. Prvo, zanemarujemo sve Grinove funkcije u kojima se javljaju kombinacije tri kreaciona ili anihilaciona boze-operatora. Drugo, u preostalim višim Grinovim funkcijama potrebno je izvršiti aproksimaciju dekuplovanja koja se sastoji u sledećem izražavanju dobijenih viših Grinovih funkcija preko nižih:

$$\begin{aligned} &\ll \hat{a}^+(\vec{k}) \hat{a}^+(\vec{q}) \hat{a}(\vec{l}) | \hat{B} \gg \approx \langle \hat{a}^+(\vec{k}) \hat{a}(\vec{l}) \rangle \ll \hat{a}^+(\vec{q}) | \hat{B} \gg + \\ &+ \langle \hat{a}^+(\vec{q}) \hat{a}(\vec{l}) \rangle \ll \hat{a}^+(\vec{k}) | \hat{B} \gg, \text{ itd.} \end{aligned}$$

Uz ove relacije, koristimo i zakon održanja impulsa u obliku:

$$\langle \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{q}) \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{q}} \langle \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) \rangle$$

Konačno, dobijamo tražene jednačine kretanja za četiri odobrene Grinove funkcije u obliku koji sledi, pri čemu su u njima uvedene sledeće oznake:

$$\frac{4\gamma_a}{N_p N_c} \left[Z_2(J_a + D) S_a + Z_1(J_{ab} + D) S_b \pm h \right] = A^\pm$$

$$\frac{4\gamma_b}{N_p N_c} \left[Z_2(J_b + D) S_b + Z_1(J_{ab} + D) S_a \pm h \right] = B^\pm$$

$$\gamma(\vec{k}_{||}) = \frac{1}{2} (\cos(\vec{k}_{||} a \vec{e}_x) + \cos(\vec{k}_{||} a \vec{e}_y))$$

$$Z_2 J_b S_b \gamma(\vec{k}_{||}) = J_b(\vec{k}_{||})$$

$$Z_2 J_a S_a \gamma(\vec{k}_{||}) = J_a(\vec{k}_{||})$$

$$Z_1 J_{ab} \sqrt{S_a S_b} \cos k_z a = J_{ab}(k_z)$$

$$\sigma_{a_1}(\vec{k}) = \langle \hat{a}_1(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) \rangle$$

$$\sigma_{a_2}(\vec{k}) = \langle \hat{a}_2(\vec{k}) \hat{a}_2(\vec{k}) \rangle$$

$$\sigma_{b_1}(\vec{k}) = \langle \hat{b}_1(\vec{k}) \hat{b}_1(\vec{k}) \rangle$$

$$\sigma_{b_2}(\vec{k}) = \langle \hat{b}_2(\vec{k}) \hat{b}_2(\vec{k}) \rangle$$

$$\varepsilon_a^\pm = Z_2(J_a + D) S_a + 2(J_{ab} + D) \pm h$$

$$\varepsilon_b^\pm = Z_2(J_b + D) S_b + 2(J_{ab} + D) \pm h$$

$$\varepsilon_1 = Z_2(J_a + D) S_a + Z_1(J_{ab} + D) S_b$$

$$\varepsilon_2 = Z_2(J_b + D) S_b + Z_1(J_{ab} + D) S_a$$

$$\varepsilon_a^\pm = \varepsilon_1 \pm h$$

$$\varepsilon_b^\pm = \varepsilon_2 \pm h$$

Sistem jednačina za Grinove funkcije ovim oznakama dobija oblik:

I

$$\begin{aligned} \langle\langle \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{B} \rangle\rangle & \left\{ \omega - \varepsilon_a^+ + 4 \left[(J_a + D) S_a Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_b + h \right] \frac{\gamma_a}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_1}(\vec{q}) + \right. \\ & \left. + \frac{Z_2(J_a + D)}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_2}(\vec{q}) + \frac{2(J_{ab} + D)}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{b_2}(\vec{q}) \right\} + \\ & + \langle\langle \hat{a}_2^+(-\vec{k}) | \hat{B} \rangle\rangle Z_2 J_a \gamma(\vec{k}_{||}) \left\{ \frac{\sqrt{2S_a} \alpha_a}{N_p N_c} \left[\sum_{\vec{q}} (\sigma_{a_1}(\vec{q}) + \sigma_{a_2}(\vec{q})) \right] - S_a \right\} + \\ & + \langle\langle \hat{b}_2^+(-\vec{k}) | \hat{B} \rangle\rangle 2J_{ab} \cos k_z a \left\{ \frac{\sqrt{2S_a} \alpha_b}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} (\sigma_{b_2}(\vec{q}) + \frac{\sqrt{2S_b} \alpha_a}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_1}(\vec{q}) - \sqrt{S_a S_b}) \right\} = \\ & = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{a}_1(\vec{k}), \hat{B}] \rangle \end{aligned}$$

II

$$\begin{aligned}
\ll \hat{a}_2^+(-\vec{k}) | \hat{B} \gg & \left\{ -\omega - \varepsilon_a^- + \frac{4\gamma_a}{N_p N_c} \left[(J_a + D) S_a Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_b - h \right] \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_2}(\vec{q}) + \right. \\
& + \frac{Z_2(J_a + D)}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_1}(\vec{q}) + \frac{2(J_{ab} + D)}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{b_1}(\vec{q}) \left. \right\} + \\
& + \ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{B} \gg Z_2 J_a \gamma(k_{\parallel}) \left\{ \frac{\sqrt{2S_a} \beta_a}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} (\sigma_{a_1}(\vec{q}) + \sigma_{a_2}(\vec{q})) - S_a \right\} + \\
& + \ll \hat{b}_1(\vec{k}) | \hat{B} \gg 2J_{ab} \cos k_z a \left\{ \frac{\sqrt{2S_a} \beta_b}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{b_1}(\vec{q}) + \frac{\sqrt{2S_b} \beta_a}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_2}(\vec{q}) - \sqrt{S_a S_b} \right\} = \\
& = -\frac{i}{2\pi} \langle [\hat{a}_2^+(-\vec{k}), \hat{B}] \rangle
\end{aligned}$$

III

$$\begin{aligned}
\ll \hat{b}_1(\vec{k}) | \hat{B} \gg & \left\{ \omega - \varepsilon_b^+ + \frac{4\gamma_b}{N_p N_c} \left[(J_b + D) S_b Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_a + h \right] \sum_{\vec{q}} \sigma_{b_1}(\vec{q}) + \right. \\
& + \frac{Z_2(J_b + D)}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{b_2}(\vec{q}) + \frac{2(J_{ab} + D)}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_2}(\vec{q}) \left. \right\} + \\
& + \ll \hat{b}_2^+(-\vec{k}) | \hat{B} \gg Z_2 J_b \gamma(k_{\parallel}) \left\{ \frac{\sqrt{2S_b} \alpha_b}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} (\sigma_{b_1}(\vec{q}) + \sigma_{b_2}(\vec{q})) - S_b \right\} + \\
& + \ll \hat{a}_2^+(-\vec{k}) | \hat{B} \gg 2J_{ab} \cos k_z a \left\{ \frac{\sqrt{2S_b} \alpha_a}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_2}(\vec{q}) + \frac{\sqrt{2S_a} \alpha_b}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{b_1}(\vec{q}) - \sqrt{S_a S_b} \right\} = \\
& = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{b}_1(\vec{k}), \hat{B}] \rangle
\end{aligned}$$

IV

$$\begin{aligned}
\ll \hat{b}_2^+(-\vec{k}) | \hat{B} \gg & \left\{ -\omega - \varepsilon_b^- + \frac{4\gamma_b}{N_p N_c} \left[(J_b + D) S_b Z_2 + 2(J_{ab} + D) S_a - h \right] \sum_{\vec{q}} \sigma_{b_2}(\vec{q}) + \right. \\
& + \frac{Z_2(J_b + D)}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{b_1}(\vec{q}) + \frac{2(J_{ab} + D)}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_1}(\vec{q}) \left. \right\} + \\
& + \ll \hat{b}_1(\vec{k}) | \hat{B} \gg Z_2 J_b \gamma(k_{\parallel}) \left\{ \frac{\sqrt{2S_b} \beta_b}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} (\sigma_{b_1}(\vec{q}) + \sigma_{b_2}(\vec{q})) - S_b \right\} + \\
& + \ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{B} \gg 2J_{ab} \cos k_z a \left\{ \frac{\sqrt{2S_b} \beta_a}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{a_1}(\vec{q}) + \frac{\sqrt{2S_a} \beta_b}{N_p N_c} \sum_{\vec{q}} \sigma_{b_2}(\vec{q}) - \sqrt{S_a S_b} \right\} = \\
& = -\frac{i}{2\pi} \langle [\hat{b}_2^+(-\vec{k}), \hat{B}] \rangle
\end{aligned}$$

Da bismo dobili željene srednje vrednosti naseljenosti čvorova, odnosno $\sigma_{a_1}(\vec{k})$, $\sigma_{a_2}(\vec{k})$, $\sigma_{b_1}(\vec{k})$ i $\sigma_{b_2}(\vec{k})$, operator \hat{B} konkretizujemo kroz sledeća četiri operatora: $\hat{a}_1^+(\vec{k})$, $\hat{a}_2(\vec{k})$, $\hat{b}_1^+(\vec{k})$ i $\hat{b}_2(\vec{k})$. Naime, ako napišemo jednačinu za $\ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{a}_1(\vec{k}) \gg$ ona nam u račun uvlači i Grinove funkcije $\ll \hat{a}_2(\vec{k}) | \hat{a}_2(\vec{k}) \gg$ i $\ll \hat{b}_2(\vec{k}) | \hat{b}_2(\vec{k}) \gg$, a postavljajući jednačinu za $\ll \hat{a}_2(\vec{k}) | \hat{a}_2(\vec{k}) \gg$, pojavljuje nam se jednačina za $\ll \hat{b}_1(\vec{k}) | \hat{b}_1(\vec{k}) \gg$, tako da nakon primene aproksimacije haotičnih faza primećujemo da se za gore navedene konkretne vrednosti operatora \hat{B} , sistem zatvara.

U ovom trenutku je moguće, radi kompaktnijeg zapisa uvesti još i sledeće oznake:

$$x = \frac{Z_2(J_a + D)}{N_p N_c} \quad y = \frac{Z_2(J_b + D)}{N_p N_c} \quad z = \frac{Z_1(J_{ab} + D)}{N_p N_c}$$

$$\sigma_{a_i} = \sum_{\vec{k}} \sigma_{a_i}(\vec{k}) \quad \wedge \quad \sigma_{a_i} = \sum_{\vec{k}} \sigma_{a_i}(\vec{k}), \quad (\forall i) = 1, 2$$

Sada, u cilju nalaženja četiri Grinove funkcije, pre svega potrebno je naći izraz za determinantu dobijenog sistema jednačina:

$$D_s = \begin{vmatrix} \omega - M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14} \\ M_{21} & -\omega - M_{22} & M_{23} & M_{24} \\ M_{31} & M_{32} & \omega - M_{33} & M_{34} \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} & -\omega - M_{44} \end{vmatrix}$$

Matrični elementi gornje determinante glase:

$$M_{11} = \varepsilon_a^+ - A^+ \sigma_{a_1} - x \sigma_{a_2} - z \sigma_{b_2}$$

$$M_{22} = \varepsilon_a^- - A^- \sigma_{a_2} - x \sigma_{a_1} - z \sigma_{b_1}$$

$$M_{33} = \varepsilon_b^+ - B^+ \sigma_{b_1} - y \sigma_{b_2} - z \sigma_{a_2}$$

$$M_{44} = \varepsilon_b^- - B^- \sigma_{b_2} - y \sigma_{b_1} - z \sigma_{a_1}$$

$$M_{12} = J_a(k_{||}) \left\{ \frac{\sqrt{2S_a \alpha_a}}{N_p N_c} (\sigma_{a_1} + \sigma_{a_2}) - S_a \right\}$$

$$M_{21} = J_a(k_{||}) \left\{ \frac{\sqrt{2S_a \beta_a}}{N_p N_c} (\sigma_{a_1} + \sigma_{a_2}) - S_a \right\}$$

$$M_{13} = 0$$

$$M_{31} = 0$$

$$M_{14} = J_{ab}(k_z) \left\{ \frac{\sqrt{2S_a \alpha_b}}{N_p N_c} \sigma_{b_2} + \frac{\sqrt{2S_b \alpha_a}}{N_p N_c} \sigma_{a_1} - \sqrt{S_a S_b} \right\}$$

$$M_{41} = J_{ab}(k_z) \left\{ \frac{\sqrt{2S_b \beta_a}}{N_p N_c} \sigma_{a_1} + \frac{\sqrt{2S_a \beta_b}}{N_p N_c} \sigma_{b_2} - \sqrt{S_a S_b} \right\}$$

$$M_{23} = J_{ab}(k_z) \left\{ \frac{\sqrt{2S_a \beta_b}}{N_p N_c} \sigma_{b_1} + \frac{\sqrt{2S_b \beta_a}}{N_p N_c} \sigma_{a_2} - \sqrt{S_a S_b} \right\}$$

$$M_{32} = J_{ab}(k_z) \left\{ \frac{\sqrt{2S_b\alpha_a}}{N_p N_c} \sigma_{a_2} + \frac{\sqrt{2S_a\alpha_b}}{N_p N_c} \sigma_{b_1} - \sqrt{S_a S_b} \right\}$$

$$M_{24} = 0$$

$$M_{42} = 0$$

$$M_{34} = J_b(\vec{k}_{\parallel}) \left\{ \frac{\sqrt{2S_b\alpha_b}}{N_p N_c} (\sigma_{b_1} + \sigma_{b_2}) - S_b \right\}$$

$$M_{43} = J_b(\vec{k}_{\parallel}) \left\{ \frac{\sqrt{2S_b\beta_b}}{N_p N_c} (\sigma_{b_1} + \sigma_{b_2}) - S_b \right\}$$

Razvijanjem ove determinante dobijamo potpunu jednačinu četvrtog stepena po energiji sistema, koja glasi:

$$\begin{aligned} D_S = & \omega^4 + \omega^3 [M_{44} - M_{33} + M_{22} - M_{11}] + \\ & + \omega^2 [M_{12}M_{21} + M_{23}M_{32} + M_{34}M_{43} + M_{14}M_{41} - M_{11}M_{22} - M_{33}M_{44} + (M_{11} - M_{22})(M_{33} - M_{44})] + \\ & + \omega [M_{11}M_{22}(M_{33} - M_{44}) + M_{33}M_{44}(M_{11} - M_{22}) - M_{34}M_{43}(M_{11} - M_{22}) - M_{14}M_{41}(M_{33} - M_{22})] + \\ & M_{11}M_{22}M_{33}M_{44} - M_{11}M_{22}M_{34}M_{43} - M_{11}M_{44}M_{23}M_{32} - \\ & - M_{33}M_{44}M_{12}M_{21} + M_{12}M_{23}M_{34}M_{41} - M_{21}M_{32}M_{14}M_{43} - M_{14}M_{41}M_{22}M_{33}. \end{aligned}$$

Iz prethodne jednačine se vidi da izrazi koje stoje uz članove ω i ω^3 zavise samo od dijagonalnih elemenata determinante našeg sistema. U ovom trenutku prelazimo na slučaj kada oba materijala a i b koja sačinjavaju super-rešetku imaju jednake magnetne doprinose. Matematički je ovaj uslov iskazan jednakošću bozonskih reprezentacija spinova njihovih čorova, odnosno:

$$(S_a = S_b = S) \wedge (\alpha_a = \alpha_b = \alpha) \wedge (\beta_a = \beta_b = \beta) \wedge (\gamma_a = \gamma_b = \gamma)$$

Nakon ovih izmena, pokazuje se međutim da determinanta još uvek nije simetrična. Da bismo to postigli i samim tim bili sigurni da će sve energije sistema biti realne, neophodno je primeniti uslov $\alpha = \beta$. Dakle, tek primenom ermitskih reprezentacija (Holštajn - Primakov, Agranovič - Tošić, Goldhirš), determinanta sistema postaje simetrična, odnosno za nju važi $M_{ij} = M_{ji}$, $\forall i, j = 1, 2, 3, 4$.

Posmatrajmo sada članove uz ω i ω^3 u determinanti D_s . Da bi član uz ω bio jednak nuli, potrebno i dovoljno da bude $h = 0$, odnosno da se super-rešetka nalazi van spoljašnjeg magnetnog polja. Što se tiče člana uz ω^3 , ispostavlja se da ukoliko želimo da i on bude jednak nuli, a da samim tim jednačina $D_s = 0$ postane bikvadratna, mora biti ispunjen sledeći uslov:

$$\{(\varepsilon_b^+ - \varepsilon_b^-) + (\varepsilon_a^+ - \varepsilon_a^-)\} + \sigma_{a_1}(-A^+ + x + z) + \sigma_{a_2}(A^- - x - z) + \\ + \sigma_{b_1}(-B^+ + y + z) + \sigma_{b_2}(B^- - y - z) = 0$$

Za ispunjenje prethodne relacije, potrebno i dovoljno da važi $h = 0$ i $\sigma_{a_1} = \sigma_{a_2} = \sigma_a$ i $\sigma_{b_1} = \sigma_{b_2} = \sigma_b$. Međutim, ispostavlja se da slobodan član ovako dobijene bikvadratne jednačine ne može biti jednak nuli u odgovarajućem limesu kada $\vec{k} \rightarrow \vec{0}$, ni za jednu kombinaciju realnih i pozitivnih parametara primenjene bozonske reprezentacije. Naime on se može napisati u sledećem obliku:

$$\varepsilon_a^2 \varepsilon_b^2 - S^2 (J_a^2(\vec{k}_{||}) \varepsilon_b^2 + J_b^2(\vec{k}_{||}) \varepsilon_a^2) - 2S^2 J_{ab}(\vec{k}_{||}) \varepsilon_a \varepsilon_b + \sigma_a [\dots] + \sigma_b [\dots]$$

U gornjem izrazu član nezavisan od koncentracija teži nuli u odgovarajućem limesu, za razliku od izraza koji množe koncentracije. Odavde sledi da uz sve gore navedene uslove i u odsustvu anizotropije, ne postoji nulta energija sistema.

Ovaj rezultat je u kontradikciji sa Goldstonovom teoremom (videti Prilog), koja je posledica opštih simetrijskih zahteva u odnosu na Hajzenbergov spinski hamiltonijan. Kako je on u suštini posledica dekuplovanja, sledi da su korišćene bozonske reprezentacije spinskih operatora primenjene na slučaj super-rešetke sa dvostrukim antiferomagnetnim slojem, neadekvatne.

VI Kvadratna aproksimacija

Kako polazna bozonska reprezentacija spinskih operatora ne zadovoljava, sa obzirom da Goldstonov mod energije sistema ne postoji, u daljem radu korišćićemo jednostavniju kvadratnu bozonsku reprezentaciju, u sledećem obliku:

$$\begin{aligned}
 \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{+(a)} &= \sqrt{2S_a} \hat{a} \\
 \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{- (a)} &= \sqrt{2S_a} \hat{a}^+ \\
 \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^z (a) &= S_a - \hat{a}^+ \hat{a} \\
 \\
 \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{+(b)} &= \sqrt{2S_b} \hat{b} \\
 \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^{- (b)} &= \sqrt{2S_b} \hat{b}^+ \\
 \hat{S}_{m,\vec{\rho}}^z (b) &= S_b - \hat{b}^+ \hat{b}
 \end{aligned} \tag{13}$$

U ovom slučaju svi izrazi se pojednostavljuju, pa je zbog toga ovde moguće uvesti unekoliko različite oznake u odnosu na one koje smo imali ranije:

$$\begin{aligned}
 \frac{4\gamma_a}{N_p N_c} \left[Z_2(J_a + D) S_a + Z_1(J_{ab} + D) S_b \pm h \right] &= A^\pm \\
 \frac{4\gamma_b}{N_p N_c} \left[Z_2(J_b + D) S_b + Z_1(J_{ab} + D) S_a \pm h \right] &= B^\pm \\
 x = \frac{Z_2(J_a + D)}{N_p N_c} \quad y = \frac{Z_2(J_b + D)}{N_p N_c} \quad z = \frac{Z_1(J_{ab} + D)}{N_p N_c} \\
 \gamma(\vec{k}_{\parallel}) &= \left(\frac{1}{2} \cos(\vec{k}_{\parallel} a \vec{e}_x) + \cos(\vec{k}_{\parallel} a \vec{e}_y) \right) \\
 Z_2 J_b S_b \gamma(\vec{k}_{\parallel}) &= J_b(\vec{k}_{\parallel}) \\
 Z_2 J_a S_a \gamma(\vec{k}_{\parallel}) &= J_a(\vec{k}_{\parallel}) \\
 Z_1 J_{ab} \sqrt{S_a S_b} \cos k_z a &= J_{ab}(k_z) \\
 \varepsilon_a^\pm &= Z_2(J_a + D) S_a + 2(J_{ab} + D) \pm h \\
 \varepsilon_b^\pm &= Z_2(J_b + D) S_b + 2(J_{ab} + D) \pm h \\
 \varepsilon_1 &= Z_2(J_a + D) S_a + Z_1(J_{ab} + D) S_b \\
 \varepsilon_2 &= Z_2(J_b + D) S_b + Z_1(J_{ab} + D) S_a \\
 \varepsilon_a^\pm &= \varepsilon_1 \pm h \\
 \varepsilon_b^\pm &= \varepsilon_2 \pm h
 \end{aligned}$$

Za slučaj kvadratne boznske aproksimacije determinanta sistema dobija jednodimenzionalni oblik:

$$D_s = \begin{vmatrix} \omega - \varepsilon_a^+ & -J_a(\vec{k}_{\parallel}) & 0 & -J_{ab}(k_z) \\ -J_a(\vec{k}_{\parallel}) & -\omega - \varepsilon_a^- & -J_{ab}(k_z) & 0 \\ 0 & -J_{ab}(k_z) & \omega - \varepsilon_b^+ & -J_b(\vec{k}_{\parallel}) \\ -J_{ab}(k_z) & 0 & -J_b(\vec{k}_{\parallel}) & -\omega - \varepsilon_b^- \end{vmatrix}$$

Primetimo da ovakav izraz za determinantu sistema dozvoljava da se u daljem, kao promenljiva koristi $(\omega - h)$ i da za sva razmatranja problema super-strukture u ovom slučaju ne zahtevaju odsustvo spoljašnjeg magnetnog polja.

Za vrednost determinante sistema dobija se:

$$D_s = (\omega - h)^4 + (\omega - h)^2 \left[(J_a^2(\vec{k}_{\parallel})S_a^2 - \varepsilon_a^2) + (J_b^2(\vec{k}_{\parallel})S_b^2 - \varepsilon_b^2) + 2J_{ab}^2(k_z)S_aS_b \right] + \\ + \varepsilon_a\varepsilon_b (\varepsilon_a\varepsilon_b - 2J_{ab}^2(k_z)S_aS_b) - \varepsilon_a^2J_b^2(\vec{k}_{\parallel})S_b^2 - \varepsilon_b^2J_a^2(\vec{k}_{\parallel})S_a^2 + S_a^2S_b^2 (J_a(\vec{k}_{\parallel})J_b(\vec{k}_{\parallel}) - J_{ab}^2(k_z))^2$$

Kada se gornja determinanta sistema izjednači sa nulom, dobija se bikvadratna jednačina čija diskriminanta glasi:

$$D = \{(J_a^2(\vec{k}_{\parallel})S_a^2 - \varepsilon_1^2) - (J_b^2(\vec{k}_{\parallel})S_b^2 - \varepsilon_2^2)\}^2 + 4S_aS_bJ_{ab}^2(k_z) \{(J_a(\vec{k}_{\parallel})S_a + J_b(\vec{k}_{\parallel})S_b)^2 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2\}$$

Kao rešenje gornje bikvadratne jednačine dobija se:

$$(\omega - h)_{1/2}^2 = X_{1/2} = \frac{1}{2} [\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 - 2J_{ab}^2(k_z) - J_a^2(\vec{k}_{\parallel}) - J_b^2(\vec{k}_{\parallel})] \pm \\ \pm \frac{1}{2} \left\{ [(J_a^2(\vec{k}_{\parallel}) - \varepsilon_1^2) - (J_b^2(\vec{k}_{\parallel}) - \varepsilon_2^2)]^2 + 4J_{ab}^2(k_z) [(J_a(\vec{k}_{\parallel}) + J_b(\vec{k}_{\parallel}))^2 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2] \right\}^{1/2}$$

Sada je potrebno u gornju jednačinu zameniti $k = 0$, kako bismo se uverili da u slučaju kvadratne bozonske reprezentacije Goldstonov mod energije sistema postoji. Za slučaj $k = 0$, korišćene oznake imaju sledeće vrednosti:

$$J_a(0) = Z_2J_aS_a$$

$$J_b(0) = Z_2J_bS_b$$

$$J_{ab}(0) = Z_1J_{ab}\sqrt{S_aS_b}$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} X_{1/2}^2(k) = X_{1/2}^2(0) = \frac{1}{2} [\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 - 2Z_1^2J_{ab}^2S_aS_b - Z_2^2J_a^2S_a^2 - Z_2^2J_b^2S_b^2] \pm \\ \pm \frac{1}{2} \left\{ [(Z_2^2J_a^2S_a^2 - \varepsilon_1^2) - (Z_2^2J_b^2S_b^2 - \varepsilon_2^2)]^2 + 4Z_1^2J_{ab}^2S_aS_b [Z_2^2(J_aS_a - J_bS_b)^2 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2] \right\}^{1/2}$$

Za slučaj bez anizotropije imamo:

$$X_1^{D=0}(0) = Z_1^2J_{ab}^2(S_a - S_b)^2 + 2Z_1Z_2J_{ab}S_aS_b(J_a + J_b)$$

$$X_2^{D=0}(0) = 0$$

Ovim smo se neposredno uverili da je kvadratna bozonska reprezentacija u skladu sa opštim simetrijskim zahtevima u odnosu na Hajzenbergov spinski hamiltonijan.

$$(\omega - h)^2 = X_{1/2} \Rightarrow \omega_1 - h = \pm\sqrt{X_1} \quad \omega_2 - h = \pm\sqrt{X_2}$$

Za sledeće vrednosti, Grinove funkcije imaju singularitete:

$$E_1 = h + \sqrt{X_1}$$

$$E_2 = h - \sqrt{X_1}$$

$$E_3 = h + \sqrt{X_2}$$

$$E_4 = h - \sqrt{X_2}$$

Na ovaj način, iz uslova rešivosti homogenog sistema jednačina za Grinove funkcije, dobili smo energije sistema super-rešetke.

Sada je potrebno naći prvu, od četiri Grinove funkcije i u tom smislu determinantu sistema zapisati u vidu proizvoda četiri faktora:

$$\begin{aligned} D_S &= [(\omega - h)^2 - X_1][(\omega - h)^2 - X_2] = [(\omega - h) - \sqrt{X_1}][(\omega - h) + X_1] \cdot \\ &\quad \cdot [(\omega - h) - \sqrt{X_2}][(\omega - h) + \sqrt{X_2}] \\ X_{1/2} &= X_{1/2}(\vec{k}) \end{aligned}$$

Kao prvu konkretnu vrednost operatora \hat{B} uzimamo $\hat{a}_1^+(\vec{k})$, a sama Grinova funkcija glasi:

$$\begin{aligned} \ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{a}_1^+(\vec{k}) \gg &= \frac{D_{a_1}}{D_S} = \\ &= \frac{i}{2\pi} \frac{\{(\omega + \varepsilon_a^-)(\omega - \varepsilon_b^+)(\omega + \varepsilon_b^-) + (\omega + \varepsilon_a^-)J_b^2(\vec{k}_{||}) + J_{ab}^2(k_z)(\omega - \varepsilon_b^-)\}}{[\omega - (h + \sqrt{X_1})][\omega - (h - X_1)][\omega - (h + \sqrt{X_2})][\omega - (h - \sqrt{X_2})]} \end{aligned}$$

Za determinantu Grinove funkcije $\ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{a}_1^+(\vec{k}) \gg$, dobija se:

$$D_{\ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{a}_1^+(\vec{k}) \gg} = \begin{vmatrix} \frac{i}{2\pi} & -J_a(\vec{k}_{||}) & 0 & -J_{ab}(k_z) \\ 0 & -(\omega + \varepsilon_a^-) & -J_{ab}(k_z) & 0 \\ 0 & -J_{ab}(k_z) & \omega - \varepsilon_b^+ & -J_b(\vec{k}_{||}) \\ 0 & 0 & -J_b(\vec{k}_{||}) & -(\omega + \varepsilon_b^-) \end{vmatrix}$$

U razvijenom obliku ona glasi:

$$D_{\ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{a}_1^+(\vec{k}) \gg} = \frac{i}{2\pi} (\omega + \varepsilon_a^-)(\omega - \varepsilon_b^+)(\omega + \varepsilon_b^-) + \frac{i}{2\pi} (\omega + \varepsilon_a^-)J_b^2(\vec{k}_{||}) + \frac{i}{2\pi} J_{ab}^2(k_z)(\omega + \varepsilon_b^-)$$

Konačno prva Grinova funkcija u energetske reprezentaciji ima oblik:

$$\ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{a}_1^+(\vec{k}) \gg = \frac{i}{2\pi}.$$

$$\frac{\left\{ (\omega + \varepsilon_1 - h)(\omega - \varepsilon_2 - h)(\omega + \varepsilon_2 + h) + (\omega + \varepsilon_1 - h) J_b^2(\vec{k}_{||}) + (\omega + \varepsilon_2 - h) J_{ab}^2(k_z) \right\}}{[\omega - (h + \sqrt{X_1})][\omega - (h - \sqrt{X_1})][\omega - (h + \sqrt{X_2})][\omega - (h - \sqrt{X_2})]}$$

Da bismo sada mogli primeniti teoremu o spektralnoj intenzivnosti, tj. simbolički identitet $\mathcal{P} \frac{1}{x-a \pm i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x-a} \mp i\pi \delta(x-a)$, moramo Grinovu funkciju rastaviti na parcijalne sabirke, odnosno prikazati je u obliku:

$$\ll \hat{a}_1(\vec{k}) | \hat{a}_1^+(\vec{k}) \gg = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{A_1}{\omega - \omega_1} + \frac{B_1}{\omega - \omega_2} + \frac{C_1}{\omega - \omega_3} + \frac{D_1}{\omega - \omega_4} \right\},$$

gde su:

$$\omega_1 = h + \sqrt{X_1}$$

$$\omega_2 = h - \sqrt{X_1}$$

$$\omega_3 = h + \sqrt{X_2}$$

$$\omega_4 = h - \sqrt{X_2}$$

U cilju izračunavanja četiri koeficijenta A_1 B_1 C_1 i D_1 , potrebno je iskoristiti teoremu kompleksne analize (*Nikolić-Despotović, Budinčević[12]*), koja je data u Prilogu.

Primenjeno na naš slučaj, u kome se susrećemo sa izrazom oblika $\frac{P(x)}{D(x)}$, gde je

$$D(x) = \prod_i (x - x_i)$$

zaključujemo da se on može prikazati u obliku:

$$\frac{P(x)}{D(x)} = \sum_i \frac{a_i}{x - x_i}, \text{ gde je } a_i = \frac{P(x_i)}{\left[\frac{d}{dx} D(x) \right]_{x=x_i}}$$

Sada sledi ilustracija dobijanja prvog traženog koeficijenta A_1 , korišćenjem dobijenog pravila:

$$A_1 = \frac{(\omega_1 + \varepsilon_1 - h)(\omega_1 - \varepsilon_2 - h)(\omega_1 + \varepsilon_2 - h) + (\omega_1 + \varepsilon_1 - h) J_b^2(\vec{k}_{||})}{\frac{d}{d\omega} [(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)(\omega - \omega_3)(\omega - \omega_4)]_{\omega=\omega_1}} + \frac{J_{ab}^2(k_z)(\omega_1 + \varepsilon_2 - h)}{\frac{d}{d\omega} [(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)(\omega - \omega_3)(\omega - \omega_4)]_{\omega=\omega_1}}.$$

$$\frac{d}{d\omega} [(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)(\omega - \omega_3)(\omega - \omega_4)] =$$

$$= (\omega - \omega_2)(\omega - \omega_3)(\omega - \omega_4) + (\omega - \omega_1)(\omega - \omega_3)(\omega - \omega_4) + (\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)(2\omega - \omega_3 - \omega_4)$$

Na taj način, konačni izrazi za prvi set od četiri koeficijenta, glase:

$$A_1 = \frac{(\sqrt{X_1} + \varepsilon_1)(X_1 - \varepsilon_2^2) + (\sqrt{X_1} + \varepsilon_1)J_b^2(\vec{k}_{\parallel}) + (\sqrt{X_1} + \varepsilon_2)J_{ab}^2(k_z)}{2\sqrt{X_1}(X_1 - X_2)}$$

$$B_1 = \frac{(\sqrt{X_1} - \varepsilon_1)(X_1 - \varepsilon_2^2) + (\sqrt{X_1} - \varepsilon_1)J_b^2(\vec{k}_{\parallel}) + (\sqrt{X_1} - \varepsilon_2)J_{ab}^2(k_z)}{2\sqrt{X_1}(X_1 - X_2)}$$

$$C_1 = \frac{(\sqrt{X_2} + \varepsilon_1)(\varepsilon_2^2 - X_2) - (\sqrt{X_2} + \varepsilon_1)J_b^2(\vec{k}_{\parallel}) - (\sqrt{X_2} + \varepsilon_2)J_{ab}^2(k_z)}{2\sqrt{X_2}(X_1 - X_2)}$$

$$D_1 = \frac{(\sqrt{X_2} - \varepsilon_1)(\varepsilon_2^2 - X_2) - (\sqrt{X_2} - \varepsilon_1)J_b^2(\vec{k}_{\parallel}) - (\sqrt{X_2} - \varepsilon_2)J_{ab}^2(k_z)}{2\sqrt{X_2}(X_1 - X_2)}$$

Korišćenjem teoreme o spektralnoj intenzivnosti (videti str.25), sledi nam da je:

$$\mathcal{J}_{AB}(e^{\frac{\hbar\omega}{\vartheta}} - 1) = A_1\delta(\omega - \omega_1) + B_1\delta(\omega - \omega_2) + C_1\delta(\omega - \omega_3) + D_1\delta(\omega - \omega_4)$$

Tako za ravnotežnu srednju vrednost broja zaposednuća čvorova pobuđenima, u energetskoj reprezentaciji, dobijamo:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{BA} &= \mathcal{J}_{BA}(\vec{k}, \omega) = \langle \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) \rangle_{\omega} = \\ &= \frac{A_1\delta(\omega - \omega_1) + B_1\delta(\omega - \omega_2) + C_1\delta(\omega - \omega_3) + D_1\delta(\omega - \omega_4)}{e^{\frac{\hbar\omega}{\vartheta}} - 1} \end{aligned}$$

Inverznom Furijevom transformacijom dobijamo:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) \rangle_t &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \left[\frac{A_1\delta(\omega - \omega_1) + B_1\delta(\omega - \omega_2) + C_1\delta(\omega - \omega_3) + D_1\delta(\omega - \omega_4)}{e^{\frac{\hbar\omega}{\vartheta}} - 1} \right] = \\ &= A_1 \frac{e^{-i\omega_1 t}}{e^{\frac{\hbar\omega_1}{\vartheta}} - 1} + B_1 \frac{e^{-i\omega_2 t}}{e^{\frac{\hbar\omega_2}{\vartheta}} - 1} + C_1 \frac{e^{-i\omega_3 t}}{e^{\frac{\hbar\omega_3}{\vartheta}} - 1} + D_1 \frac{e^{-i\omega_4 t}}{e^{\frac{\hbar\omega_4}{\vartheta}} - 1} \\ \langle \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) \rangle &= \frac{A_1}{e^{\frac{\hbar\omega_1}{\vartheta}} - 1} + \frac{B_1}{e^{\frac{\hbar\omega_2}{\vartheta}} - 1} + \frac{C_1}{e^{\frac{\hbar\omega_3}{\vartheta}} - 1} + \frac{D_1}{e^{\frac{\hbar\omega_4}{\vartheta}} - 1} \end{aligned}$$

Konačno, nakon prelaska iz impulsnog prostora u trodimenzionalni Dekartov, za traženu ravnotežnu srednju vrednost, dobijamo:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_1^+(\vec{n}_1) \hat{a}_1(\vec{n}_2) \rangle &= \langle \hat{a}_1^+(m_1, \vec{\rho}_1) \hat{a}_1(m_2, \vec{\rho}_2) \rangle = \frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \langle \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{q}) \rangle e^{-i\vec{k}\vec{n}_1} e^{i\vec{q}\vec{n}_2} = \\ &= \frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \langle \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) \rangle e^{i\vec{k}(\vec{n}_1 - \vec{n}_2)}, \end{aligned}$$

gde smo usled veštački proizvedene periodičnosti super-strukture duž z -ose, korisili zakon održanja impulsa u obliku $\langle \hat{a}_1(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{q}) \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{q}} \langle \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{q}) \rangle$.

Sada, koristeći već poznatu vezu:

$$\langle \hat{a}_1^+(\vec{n}) \hat{a}_1(\vec{n}) \rangle = \frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \langle \hat{a}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_1(\vec{k}) \rangle$$

Dobijamo traženi izraz, koji glasi:

$$\langle \hat{a}_1^+(\vec{n}) \hat{a}_1(\vec{n}) \rangle = \frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{A_1}{e^{\frac{\hbar\omega_1}{\vartheta}} - 1} + \frac{B_1}{e^{\frac{\hbar\omega_2}{\vartheta}} - 1} + \frac{C_1}{e^{\frac{\hbar\omega_3}{\vartheta}} - 1} + \frac{D_1}{e^{\frac{\hbar\omega_4}{\vartheta}} - 1} \right]$$

Sličnom procedurom, dobijamo i preostale srednje vrednosti, pa ih zbog toga ovde samo navodimo u njihovom konačnom obliku:

$$\langle \hat{b}_1^+(\vec{n}) \hat{b}_1(\vec{n}) \rangle = \frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{A_3}{e^{\frac{\hbar\omega_1}{\vartheta}} - 1} + \frac{B_3}{e^{\frac{\hbar\omega_2}{\vartheta}} - 1} + \frac{C_3}{e^{\frac{\hbar\omega_3}{\vartheta}} - 1} + \frac{D_3}{e^{\frac{\hbar\omega_4}{\vartheta}} - 1} \right]$$

$$\langle \hat{a}_2^+(\vec{n}) \hat{a}_2(\vec{n}) \rangle = \frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{A_2}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_1}{\vartheta}}} + \frac{B_2}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_2}{\vartheta}}} + \frac{C_2}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_3}{\vartheta}}} + \frac{D_2}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_4}{\vartheta}}} \right]$$

$$\langle \hat{b}_2^+(\vec{n}) \hat{b}_2(\vec{n}) \rangle = \frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{A_4}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_1}{\vartheta}}} + \frac{B_4}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_2}{\vartheta}}} + \frac{C_4}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_3}{\vartheta}}} + \frac{D_4}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_4}{\vartheta}}} \right]$$

U gornjim izrazima tri seta od po četiri koeficijenta mogu biti dobijena iz eksplicitno navedene vrednosti uređene četvorke (A_i, B_i, C_i, D_i) , sledećom smenom:

$$A_i \rightarrow B_i \wedge C_i \rightarrow D_i \text{ za } \varepsilon \rightarrow -\varepsilon_1 \wedge \varepsilon_2 \rightarrow -\varepsilon_2 \text{ i}$$

$$A_i \rightarrow C_i \wedge B_i \rightarrow D_i \text{ za } X_1 \rightarrow X_2 \wedge X_2 \rightarrow X_1, \forall i \in (1, 2, 3, 4)$$

Svođenjem gore navedenih jednačina za srednje vrednosti na standardan oblik za bozonske operatore, uz zamenu $\hbar = 0$, s obzirom da nas u daljem zanimaju niskotemperaturne osobine super-rešetke, odnosno osnovno stanje sistema, dobijamo sledeće izraze:

$$\langle \hat{a}_1^+(\vec{n}) \hat{a}_1(\vec{n}) \rangle = -\frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[(B_1 + D_1) - \frac{A_1 - B_1}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_1}}{\vartheta}} - 1} - \frac{C_1 - D_1}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_2}}{\vartheta}} - 1} \right]$$

$$\langle \hat{a}_2^+(\vec{n}) \hat{a}_2(\vec{n}) \rangle = \frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[(A_2 + C_2) + \frac{A_2 - B_2}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_1}}{\vartheta}} - 1} + \frac{C_2 - D_2}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_2}}{\vartheta}} - 1} \right]$$

$$\langle \hat{b}_1^+(\vec{n}) \hat{b}_1(\vec{n}) \rangle = -\frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[(B_3 + D_3) - \frac{A_3 - B_3}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_1}}{\vartheta}} - 1} - \frac{C_3 - D_3}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_2}}{\vartheta}} - 1} \right]$$

$$\langle \hat{b}_2^+(\vec{n}) \hat{b}_2(\vec{n}) \rangle = \frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[(A_4 + C_4) + \frac{A_4 - B_4}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_1}}{\vartheta}} - 1} + \frac{C_4 - D_4}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_2}}{\vartheta}} - 1} \right]$$

Koristeći vrednosti uređenih četvorki ($A_i, B_i, C_i, D_i, \forall i \in (1, 2, 3, 4)$) dobijamo očekivani rezultat da je $\sigma_{a_1} = \sigma_{a_2} \wedge \sigma_{b_1} = \sigma_{b_2}$, odnosno da važi:

$$\begin{aligned} \sigma_a &= \langle \hat{a}_1^+(\vec{n}) \hat{a}_1(\vec{n}) \rangle = \langle \hat{a}_2^+(\vec{n}) \hat{a}_2(\vec{n}) \rangle = \\ &= -\frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_1 J_b^2 + \varepsilon_2 J_{ab}^2 - \varepsilon_1 (\sqrt{X_1 X_2} + \varepsilon_2^2)}{2\sqrt{X_1 X_2} (\sqrt{X_1} + \sqrt{X_2})} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\varepsilon_1 J_b^2 + \varepsilon_2 J_{ab}^2 + \varepsilon_1 (X_1 - \varepsilon_2^2)}{\sqrt{X_1} (X_1 - X_2)} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_1}}{\vartheta}} - 1} + \frac{\varepsilon_1 J_b^2 + \varepsilon_2 J_{ab}^2 + \varepsilon_1 (X_2 - \varepsilon_2^2)}{\sqrt{X_2} (X_1 - X_2)} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_2}}{\vartheta}} - 1} \right] \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \sigma_b &= \langle \hat{b}_1^+(\vec{n}) \hat{b}_1(\vec{n}) \rangle = \langle \hat{b}_2^+(\vec{n}) \hat{b}_2(\vec{n}) \rangle = \\ &= -\frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_2 J_a^2 + \varepsilon_1 J_{ab}^2 - \varepsilon_2 (\sqrt{X_1 X_2} + \varepsilon_1^2)}{2\sqrt{X_1 X_2} (\sqrt{X_1} + \sqrt{X_2})} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\varepsilon_2 J_a^2 + \varepsilon_1 J_{ab}^2 + \varepsilon_2 (X_1 - \varepsilon_1^2)}{\sqrt{X_1} (X_1 - X_2)} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_1}}{\vartheta}} - 1} + \frac{\varepsilon_2 J_a^2 + \varepsilon_1 J_{ab}^2 + \varepsilon_2 (X_2 - \varepsilon_1^2)}{\sqrt{X_2} (X_1 - X_2)} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\sqrt{X_2}}{\vartheta}} - 1} \right] \end{aligned} \quad (15)$$

VII Analiza rezultata

Ovo je poslednje poglavlje diplomskog rada koje će biti posvećeno rezimiranju njegovih rezultata, odnosno svojevrsnom poređenju s jedne strane onoga što nam je bila želja i namera da uradimo, dakle onoga što smo možda očekivali da dobijemo i onoga postignutog, sa druge.

Kao što će se videti, postoji izvestan raskorak između ove dve kategorije, međutim upravo je on taj koji nam je ukazao na prednosti i nedostatke primenjene reprezentacije, kao i fizičke razloge koji ograničavaju njenu primenu u onom obimu u kojem smo mi želeli da je koristimo.

Prvobitna ideja bila je realizacija bozonskog tretmana sistema super-rešetke sa dva antiferomagnetna sloja, ali u jednom širem obimu u odnosu na čuvenu Blohovu aproksimaciju i na taj način pružanje izvesnog originalnog doprinosa ovoj problematici. U tom cilju modelni Hajzenbergov spinski hamiltonijan bio je tretiran bozonski, a prelaskom u recipročni prostor uz postavljanje jednačina kretanja za izabrane Grinove funkcije u energetsnoj reprezentaciji bilo je omogućeno korišćenje teoreme o spektralnoj intenzivnosti i na taj način određivanje ravnotežnih srednjih vrednosti naseljenosti čvorova super-rešetke elementarnim ekscitacijama. Međutim, ovakav put nas je doveo u kontradikciju sa Goldstonovom teoremom, kao izrazom sasvim opštih simetrijskih zahteva u odnosu na usvojeni modelni hamiltonijan, s obzirom da prvobitna bozonska reprezentacija nije dovela do pojave očekivanog Goldstonovog moda. Tada je postalo jasno da prvobitna ideja neće moći biti u potpunosti sprovedena i da smo prinuđeni da se vratimo u okvire kvadratnog hamiltonijana i Blohove aproksimacije.

Na taj način, dobijene su srednje vrednosti brojeva zaposednuća čvorova pobuđenjima u funkciji temperature, kao i svojstvenih vrednosti hamiltonijana koje sa svoje strane ne zavise povratno od samih naseljenosti čvorova kvazičesticama. Naime, sledeći prvobitnu ideju mi smo u principu mogli bez osvrta na pitanje ispunjenosti Goldstonove teoreme naći odgovarajuće samousaglašene jednačine za srednje vrednosti, međutim to u okviru ovog rada ipak nije urađeno, već je izvršena potpuna preorijentacija na kvadratnu aproksimaciju i proučavanje niskotemperaturnih osobina u njenom svetlu.

Razmotrimo najpre relacije (14) i (15). Kako su one dobijene svodenjem na standardni bozonski oblik, energije u odgovarajućim eksponencijalnim članovima su pozitivne. Koristeći:

$$\frac{1}{e^{\frac{E}{\Theta}} - 1} = \begin{cases} 0, & E > 0 \wedge \Theta = 0 \\ -1, & E < 0 \wedge \Theta = 0 \end{cases},$$

zaključujemo da na apsolutnoj nuli postoje različite od nule srednje vrednosti naseljenosti čvorova kvazičesticama. One predstavljaju tzv. *kvantne fluktuacije*, a u materijalima super-rešetke a i b one iznose $\Delta\sigma_a$ i $\Delta\sigma_b$, respektivno.

$$\Delta\sigma_a = -\frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_1 J_b^2 + \varepsilon_2 J_{ab}^2 - \varepsilon_1 (\sqrt{X_1 X_2} + \varepsilon_2^2)}{2\sqrt{X_1 X_2} (\sqrt{X_1} + \sqrt{X_2})} \right]$$

$$\Delta\sigma_b = -\frac{1}{N_p N_z} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_2 J_a^2 + \varepsilon_2 J_{ab}^2 - \varepsilon_2 (\sqrt{X_1 X_2} + \varepsilon_1^2)}{2\sqrt{X_1 X_2} (\sqrt{X_1} + \sqrt{X_2})} \right]$$

Postojanje kvantnih fluktuacija u antiferomagnetnim slojevitim strukturama posledica je činjenice da osnovno stanje ovakvih sistema (Nelovo stanje) ne predstavlja svojstveno stanje njihovih modelnih spinskih hamiltonijana. U ovo se možemo neposredno uveriti posmatrajući izraz za spinski antiferomagnetni hamiltonijan našeg sistema (razmatramo slučaj $S = 1/2$) (8).

Izdvajajući karakterističan motiv ovog hamiltonijana možemo napisati sledeću operatorsku jednačinu:

$$\hat{S}_{a_1}^+ \hat{S}_{a_2}^- \left| \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle_2 = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2} \right\rangle_2$$

iz koje je očigledno da Nelovo stanje nije svojstveno antiferomagnetnom hamiltonijanu, za razliku od feromagnetnih materijala kod kojih je to očigledno slučaj.

Na osnovu osnovnih postavki kvantne teorije merenja, znamo da u ovom nesvojstvenom stanju sistem nema određenu energiju niti srednji broj popunjenosti, s obzirom da je disperzija rezultata merenja u tom slučaju različita od nule.

Na konačnim temperaturama osim kvantnih fluktuacija javljaju se i termičke, koje sa povećavanjem temperature postaju dominantne, što se vidi iz relacija (14) i (15).

Kako u literaturi postoje brojni teorijski radovi posvećeni problematici slojevitih struktura, a kako po našem saznanju postoje samo dva koja se bave našim konkretnim sistemom, kao sledeći korak ukazuje se potreba za poređenjem naših rezultata sa jedne i ovih teorijskih radova, s druge strane.

U tom cilju mi smo polazeći od dobijenih relacija za σ_a i σ_b , odnosno od (14) i (15), koristeći numeričke proračune došli do funkcionalnih zavisnosti kvantnih fluktuacija u slojevima a i b u funkciji interplanarne interakcije izmene J_{ab} izražene u jedinicama J_a , pri čemu su kao parametri korišćene različite vrednosti J_b (takođe izražene u jedinicama J_a).

Posmatrajući grafike 1 i 2 možemo formulirati sledeća tri stava:

1. Pri malim vrednostima J_{ab} sa porastom interplanarne interakcije izmene zapaža se smanjenje vrednosti kvantnih fluktuacija, odnosno približavanje svojstvenom stanju antiferomagnetnog hamiltonijana, što pozitivno utiče na stabilizaciju sistema.

2. Sa daljim povećavanjem J_{ab} kvantne fluktuacije dostižu svoj minimum nakon čega one počinju da rastu sa porastom J_{ab} , međutim one nikada ne dostižu vrednost $\frac{1}{2}$, što znači da u beskonačnim antiferomagnetnim slojevitim strukturama ne dolazi do stvaranja spinskih singleta, odnosno ne dolazi realizacije Nelovog stanja sa magnetizacijom jednakom nuli.

3. U materijalu tipa b , s obzirom da su kao parametri uzete vrednosti interakcije izmene unutar njega, za vrednost $J_b = 0$ dobijamo da u slučaju kada ne postoji magnetna interakcija između slojeva, odnosno kada je $J_{ab} = 0$ kvantne fluktuacije iščezavaju, kao posledica činjenice da su spinovi unutar ravni b međusobno nezavisni i kao takvi ne fluktuiraju.

U radu Matsude i Hide [10] dvostruki antiferomagnetni sloj („bilayer”) bozonski je tretiran u okviru kvadratnog hamiltonijana, pri čemu je u oblasti malih vrednosti

J_{ab} dobijena kvalitativno ista funkcionalna zavisnost kao i u našem slučaju, za razliku od oblasti velikih vrednosti J_{ab} kvantne fluktuacije u potpunosti razuređuju Nelovo stanje, jer sistem zbog formiranja singleta na susednim čvorovima dveju podrešetki prelazi u tzv. stanje spinskog stakla (*spin glass*).

S druge strane, H.T. Diep[9], posmatra problem super-rešetke, dakle za razliku od prethodnog rada beskonačne super-strukture, ali metodom spinskih Grinovih funkcija. Njegov najzanimljiviji rezultat ogleda se u činjenici da je na apsolutnoj nuli, ali i na konačnim, ali veoma niskim temperaturama magnetizacija unutar sloja sa jačom intraplanarnom interakcijom izmene (sloj b) magnetizacija manja nego u lejeru a , kojeg karakteriše slabije magnetno sprezanje. Na prvi pogled ovaj rezultat čini se paradoksalan, međutim objašnjenje leži u tome što unutar sloja sa jačom interakcijom izmene kvantne statističke fluktuacije imaju veću vrednost, što se lako vidi i iz našeg rezultata izraženih jednačinama (14) i (15).

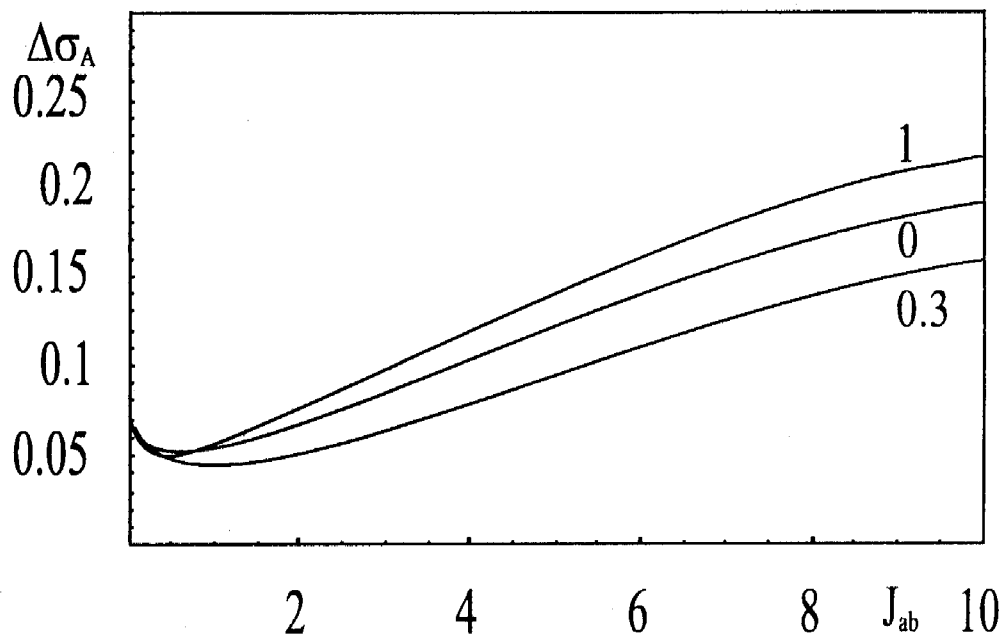
Međutim na višim temperaturama dolazi do „preticanja” magnetizacija slojeva a i b , pri čemu sloj sa jačom magnetnom interakcijom stiče veću magnetizaciju. To je lako razumljivo, s obzirom da sa porastom temperature termalne fluktuacije postanu dominantne.

Grafik 3 prikazuje dobijene funkcionalne zavisnosti magnetizacija u slojevima a i b od temperature, odnosno:

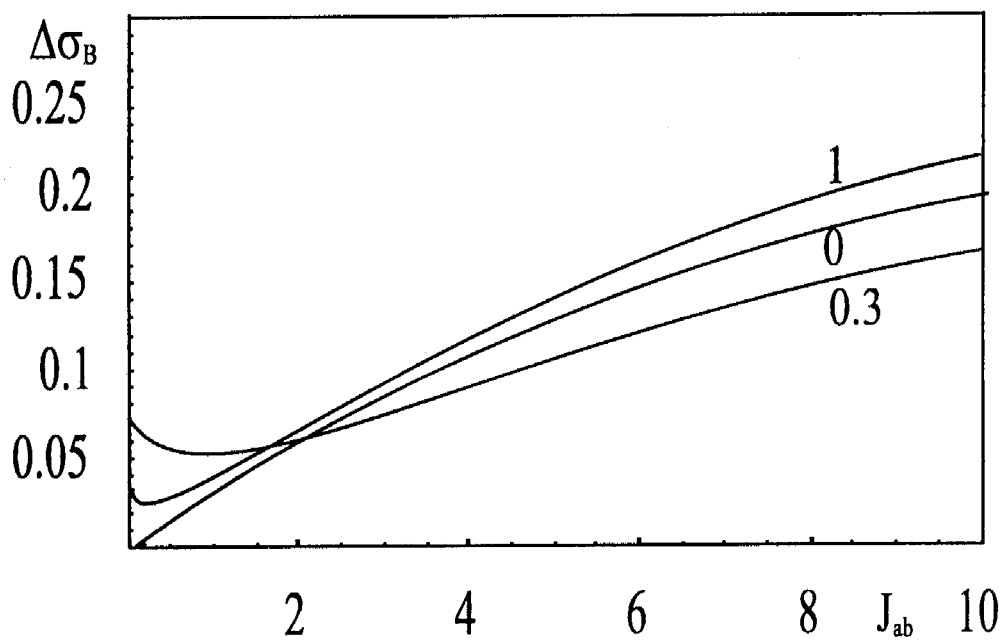
$$\mu_a = \frac{1}{2} - \sigma_a = f(\theta)$$

$$\mu_b = \frac{1}{2} - \sigma_b = f(\theta)$$

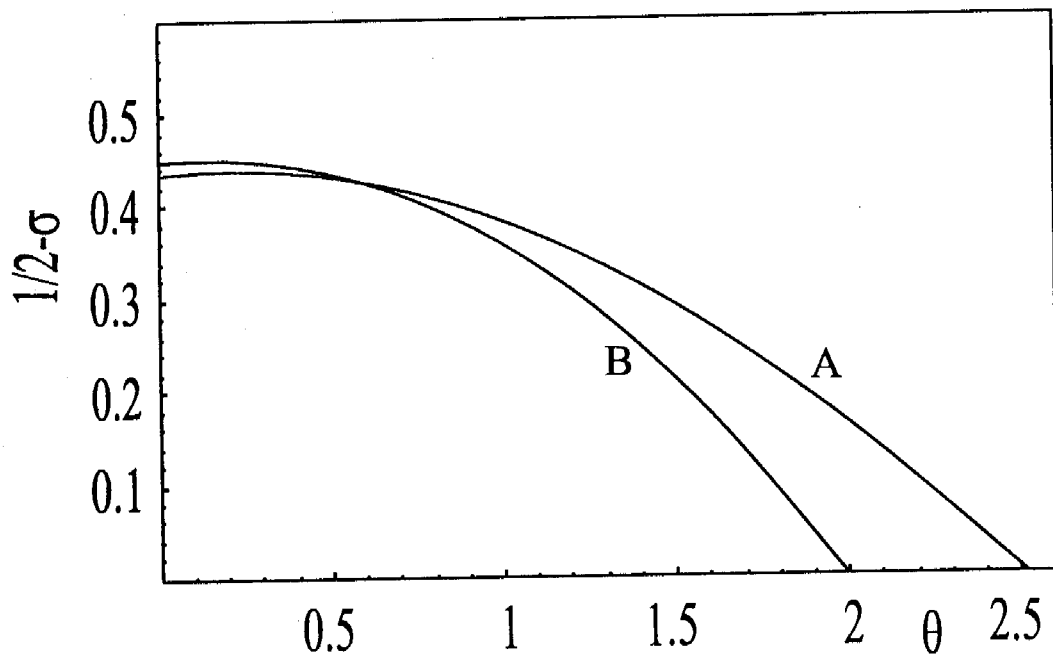
Naši rezultati kvalitativno se potpuno slažu sa gore navedenim rezultatima dobijenim spinskim tretmanom super-rešetke, međutim na temperaturama u blizini faznog prelaza, nagibi naših funkcionalnih zavisnosti izrazito su linearni i ne samo to: mi dobijamo dve različite Nelove temperature za dva sloja super-rešetke, što ukazuje na činjenicu da bozonska aproksimacija u oblasti viših temperatura više ne zadovoljava. Takođe, nepostojanje jedinstvene Nelove temperature može se objasniti odsustvom self-konzistentnih zavisnosti za srednje vrednosti naseljenosti čvorova, odnosno njihovom znatno smanjenom spregnutošću u okviru kvadratne bozonske aproksimacije. Za razliku od nas, Diep radeći spinski dobija odgovarajuće samousaglašene jednačine koje dovode do postojanja jedinstvene temperature magnetnog faznog prelaza.



Grafik 1. Zavisnost kvantnih fluktuacija u sloju a od J_{ab}



Grafik 2. Zavisnost kvantnih fluktuacija u sloju b od J_{ab}



Grafik 3. Zavisnost magnetizacija u slojevima *a* i *b* od temperature

VIII Prilog

1 Goldstonova teorema

U oblasti malih vrednosti talasnih vektora, na osnovu određivanja simetrijskih svojstava hamiltonijana sistema s jedne strane i nekog izdvojenog stanja sistema sa druge, možemo naći nekoliko opštih odnosa sa zanimljivim posledicama. Veliki doprinos u shvatanju tih odnosa dali su Bogoljubov u fizici kondenzovane materije i Goldstoun u teoriji polja (*Barijahtar, Krivoručko, Jablonski[6]*). S obzirom da singulariteti Grinove funkcije daju energije pobuđenja sistema, izučavanje asimptotskih osobina Grinovih funkcija predstavlja istovremeno i ispitivanje asimptotskih osobina spektara njegovih kvazičestica.

Veoma interesantna svojstva kvazičestica javljaju se u slučaju kada je simetrija hamiltonijana makroskopskog sistema viša od simetrije njegovog osnovnog stanja. Sa takvim sistemima susrećemo se kod superprovodnika, degenerisanog Boze-gasa i ono što je za nas u ovom trenutku najznačajnije – magnetika.

Razmotrimo za početak, u cilju ilustracije ovog fenomena proizvoljan sistem makroskopskih dimenzija. U nerelativističkoj aproksimaciji njegov operator energije predstavlja sumu kinetičke energije njegovih čestica i potencijalne energije njihovog uzajamnog dejstva. U odsustvu spoljašnjih polja hamiltonijan ovog sistema invarijantan je u odnosu na proizvoljnu translaciju sistema kao celine, kao i u odnosu na proizvoljne rotacije. Neophodnost izostavljanja relativističkog uzajamnog dejstva čestica sistema ogleda se u invarijantnosti hamiltonijana jedino u odnosu na pojedinačnu rotaciju koordinatnih i spinskih promenljivih. Ispostavlja se međutim, da postoje fizička stanja sistema čija je simetrija niža u odnosu na simetriju koju poseduje njegov operator energije. Tako, za razmatrani makroskopski sistem koji se sastoji od N čestica, operator brzine centra masa

$$\vec{v} = \frac{\sum_l \vec{p}_l}{\sum_l m_l},$$

gde je \vec{p}_l operator impulsa l -te čestice, a m_l -njena masa, komutira sa operatorom koordinate proizvoljne čestice kada broj čestica sistema teži beskonačnosti:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} = - \frac{i\hbar}{\sum_l m_l} \delta_{\alpha\beta} \rightarrow 0$$

Iz prethodnog možemo zaključiti da se operator brzine centra masa datog sistema javlja kao njegov kvantni broj. U slučaju kristalnog uzorka u stanju mirovanja kao posmatranog sistema, jezgra njegovih atoma lokalizovana su u blizini svojih ravnotežnih položaja, tako da je $\vec{v} = \vec{0}$. Dejstvo operatora translacije $\hat{T}_a = e^{i\vec{r}\vec{a}}$ na dato stanje ψ daje stanje u kojem su jezgra atoma lokalizovana u blizini novih ravnotežnih položaja određenih sa $r'_i = r_i + a$. Kako je ispunjeno $[\hat{H}, T_a] = 0$, sva stanja $\hat{T}_a\psi$ javljaju se kao svojstvena za hamiltonijan sistema i to sa istom vrednošću energije kao i polazno stanje ψ .

Kako su stanja $\hat{T}_a\psi$ fizički različita od stanja ψ , ona se javljaju kao energetski degenerisana.

U slučajevima postojanja sistema čiji operator energije ima određenu simetriju, dok je osnovno stanje sistema nema govorimo o spontanom narušavanju simetrije.

Pošto osnovno stanje sistema $|0\rangle$ nazivamo vakuumom, sistemi sa spontanim narušenjem simetrije nazivaju se i sistemima sa degenerisanim vakuumom, s obzirom da je njegova degeneracija direktna posledica ovog narušenja.

Hajzenbergovi magnetici takođe se javljaju kao primer sistema sa spontanim narušenjem simetrije. Kako se u modelnom spinskom hamiltonijanu Hajzenberga operatori spina javljaju u vidu odgovarajućih skalarnih proizvoda, sledi da je on invarijantan u odnosu na proizvoljne rotacije: $U = e^{i\vec{\varphi}\vec{S}}$. Sa obzirom na paralelnu usmerenost spinova magnetika u osnovnom stanju (duž ose z), sledi da je:

$$\hat{S}_I^z |0\rangle = S |0\rangle$$

pa je hamiltonijan invarijantan samo u odnosu na rotacije oko z -ose. Sa druge strane, dejstvom operatora \hat{S}^x ili \hat{S}^y na osnovno stanje dobijamo ponovo osnovno stanje, ali sa drugom vrednošću energije.

Oba razmotrena slučaja imaju zajedničku osobinu da se degeneracija javlja kao posledica komutiranja hamiltonijana sistema sa nekim operatorom \hat{g}_0 , kojeg možemo predstaviti u vidu sume po izvesnim jednočestičnim operatorima:

$$\hat{g}_0 = \sum_l \hat{g}_l,$$

pri čemu je stanje $\hat{g}_0 |0\rangle$ takođe svojstveno stanje operatora \hat{H} sa istom energijom kao i vakuumsko stanje, ali za njega važi $\hat{g}_0 |0\rangle \neq |0\rangle$, mada se od njega razlikuje beskonačno malo.

Utvrđeno je da je spontano narušavanje simetrije uvek praćeno pojavljivanjem bozona bez mase, tzv. Goldstonovih bozona, odnosno do pojave specifičnih pobuđenih stanja čija energija teži ka nuli istovremeno sa talasnim vektorom. Ovaj stav naziva se Goldstonovom teoremom.

Primitimo da je za postojanje ovakve specifične grane neophodno da uzajamno dejstvo između lokalnih pobuđenja generisanih operatorima \hat{g}_l iz osnovnog stanja, dovoljno brzo opada sa rastojanjem. Ono naime mora opadati takvom brzinom da Furije-transformacija matičnog elementa operatora energije uzetog između stanja $\psi_l = \hat{g}_l |0\rangle$ i $\psi_m = \hat{g}_m |0\rangle$ bude neprekidna funkcija talasnog vektora \vec{k} i pri njegovim malim vrednostima važi uslov:

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \sum_{l,m} e^{i\vec{k}(\vec{r}_l - \vec{r}_m)} \langle \psi_l \hat{H} \psi_m \rangle = \sum_{l,m} \langle 0 | g_l \hat{H} g_m | 0 \rangle$$

Razmotrena grana pobuđenja nazvana je goldstonovskom. Goldstonovskim česticama javljaju se kolektivne toplotne oscilacije rešetke (fononi), kolektivne oscilacije magnetnih momenata atoma (magnoni), itd.

Da bismo ilustrovali mehanizam javljanja bezmasenih Goldstonovih bozona u slučaju Hajzenbergovog feromagnetika, definišimo najpre talasnu funkciju osnovnog (vakuumskog) stanja $\Phi_0 \equiv |0\rangle$, uz pomoć sledećih relacija koje ga jednoznačno određuju:

$$\hat{S}_I^z |0\rangle = S |0\rangle \quad \wedge \quad \hat{S}_I^+ |0\rangle = |0\rangle \quad \wedge \quad \langle 0 | 0 \rangle = 1,$$

pri čemu je $\hat{S}_i^\pm = S_i^x \pm i\hat{S}_i^y$, dok su komutacione relacije koje povezuju ove spinske operatore date kao:

$$[\hat{S}_i^+, \hat{S}_m^-] = 2\hat{S}_i^z \delta_{i,m}$$

$$[\hat{S}_i^z, \hat{S}_m^\pm] = \pm \hat{S}_i^\pm \delta_{i,m} .$$

Kako se sva razmatranja jakih magnetnih materijala vrše u okviru poznatog modelnog hamiltonijana:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,m} J_{im} \hat{S}_i \hat{S}_m - g\mu_B \mathcal{H} \sum_i \hat{S}_i^z ,$$

lako se uočava da na ovaj način definisano vakuumsko stanje Φ_0 jeste svojstveni vektor Hajzenbergovog hamiltonijana. Na taj način, koristeći operatorsku jednačinu $\hat{H} | 0 \rangle = E_0 | 0 \rangle$, kao i gore navedene operatorske i komutacione relacije, za energiju osnovnog stanja dobijamo:

$$E_0 = -N \left[\frac{1}{2} S^2 \mathcal{J}_0 + g\mu_B \mathcal{H} \right] , \text{ gde je}$$

$$\mathcal{J}_0 = \sum_{\vec{n}, \vec{m}} J_{\vec{n}\vec{m}}$$

N je broj čorova u kristalu, dok stanje $| 0 \rangle$ opisuje paralelno usmerene spinove svih atoma kristala, koji dakle u tom stanju imaju maksimalnu projekciju na osu z : $\hat{S}^z | 0 \rangle = NS | 0 \rangle$, gde je $\vec{S} = \sum_i \hat{S}_i$ - operator potpunog spina sistema.

Razmotrimo sada talasnu funkciju $\Phi_1(\vec{k})$, definisanu narednom relacijom:

$$\Phi_1(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_i e^{i\vec{k}\vec{i}} \hat{S}_i^- | 0 \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2S}} \hat{S}_{\vec{k}}^- | 0 \rangle$$

Potrebno je primetiti da je ova talasna funkcija normirana, kao i ortogonalna na vakuumsko stanje Φ_0 , odnosno da važi:

$$\langle \Phi_1(\vec{k}) | \Phi_1(\vec{k}) \rangle = 1 \wedge \langle \Phi_1(\vec{k}) | 0 \rangle = 0 .$$

U prvom koraku neophodno je pokazati da se talasna funkcija $\Phi_1(\vec{k})$ javlja kao sopstvena funkcija hamiltonijana \hat{H} Hajzenbergovog feromagnetika. U tom cilju, primetimo da važe sledeće operatorske jednačine:

$$\hat{S}_i^z \hat{S}_m^- | 0 \rangle = (S - \delta_{i,m}) \hat{S}_m^- | 0 \rangle$$

$$\hat{S}_i^z \hat{S}_m^z \hat{S}_p^- | 0 \rangle = [S^2 - S\delta_{i,p} - S\delta_{m,p}] \hat{S}_p^- | 0 \rangle ,$$

$$\hat{S}_i^+ \hat{S}_m^- \hat{S}_p^- | 0 \rangle = 2S\delta_{i,p} \hat{S}_m^- | 0 \rangle .$$

Koristeći gornje formule, kao i izraz za energiju osnovnog stanja, nalazimo:

$$\hat{H} \Phi_1(\vec{k}) = [E_0 + \varepsilon(\vec{k})] \Phi_1(\vec{k}) ,$$

$$\varepsilon(\vec{k}) = S(\mathcal{J}_0 - \mathcal{J}_{\vec{k}}) + g\mu_B H \quad \wedge \quad \mathcal{J}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{l}, \vec{r}} \mathcal{J}_{\vec{l}\vec{r}} e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{r})}$$

Iz ovih formula vidimo da za $\mathcal{J}_{\vec{l}\vec{r}} > 0$, talasna funkcija $\Phi_1(\vec{k})$ opisuje pobuđeno stanje, koje se energetske razlikuje od osnovnog za veličinu $\varepsilon(\vec{k}) > 0$. Ova energija jeste energija spinskog talasa. Stanje $\Phi_1(\vec{k})$ opisuje rasprostiranje kvanta spinskog talasa kroz kristal. Da bi se uverili u to, dovoljno je razmotriti dejstvo operatora \hat{S}^z na talasnu funkciju $\Phi(\vec{k})$. U skladu sa gore navedenim operatorskim jednačinama za spinske operatore, dobijamo da važi:

$$\hat{S}^z \Phi_1(\vec{k}) = (NS - 1)\Phi_1(\vec{k}).$$

Na ovaj način smo pokazali da je $\Phi_1(\vec{k})$ talasna funkcija jednomagnonskog stanja u Hajzenbergovom feromagnetiku, koja odgovara (u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja), sledeća energija:

$$E_{\vec{k}} - E_0 = \varepsilon_{\vec{k}} = S(\mathcal{J}_0 - \mathcal{J}_{\vec{k}}) ; \quad \mathcal{J}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \mathcal{J}_{\vec{n}\vec{m}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}$$

Ako $\mathcal{J}_{\vec{n}\vec{m}}$ dovoljno brzo opada sa rastojanjem, i to tako da postoji vrednost \mathcal{J}_0 , odnosno da važi: $\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \mathcal{J}_{\vec{k}} = \mathcal{J}_0$, tada je $\varepsilon_0 = 0$, odnosno u spektru sistema javljaju se bezaktivaciona pobuđenja (bezmasneni Goldstonovi bazoni), u skladu sa Goldstonovom teoremom.

Postojanje specifične bezaktivacione grane u spektru pobuđenja u ovom slučaju povezano je sa činjenicom da se pri malim vrednostima talasnog vektora \vec{k} , stanje $\Phi_1(\vec{k})$ neznatno razlikuje od stanja $\Phi_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2S}} \hat{S}_0^- |0\rangle$, kojem očigledno odgovara energija E_0 :

$$H |0\rangle = E_0 |0\rangle, \quad \hat{H} \Phi_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2S}} \{[\hat{H}, \hat{S}_0^-] + \hat{S}_0^- \hat{H}\} |0\rangle = E_0 \Phi_1(0)$$

Ova situacija tipična je za sisteme sa degenerisanim vakuumom. U njima tada uvek postoje grane pobuđenja, svojstvene vektoru stanja $\Phi(\vec{k})$, koji u prelazu $\vec{k} \rightarrow 0$, dobija oblik: $\Phi(0) = \hat{g}_0 |0\rangle$, gde je \hat{g}_0 već pomenuta suma jednočestičnih operatora: $\hat{g}_0 = \sum_{\vec{r}} \hat{g}_{\vec{r}}$. Sa obzirom na:

$$H |0\rangle = E_0 |0\rangle, \quad \hat{H} \Phi(0) = \frac{1}{\sqrt{2S}} \{[\hat{H}, \hat{g}_0] + \hat{g}_0 \hat{H}\} |0\rangle = E_0 \Phi(0),$$

energija odgovarajućih pobuđenja iznosi:

$$\varepsilon_{\vec{k}} = E_{\vec{k}} - E_0, \quad \hat{H} \Phi(\vec{k}) = \varepsilon_{\vec{k}} \Phi(\vec{k})$$

i teži ka nuli, za $\vec{k} \rightarrow 0$. U slučaju Hajzenbergovog feromagnetika kao operator rađanja Goldstonovih bozona ovde se javlja $\hat{S}_{\vec{k}}^-$, koji u limesu $\vec{k} \rightarrow 0$ neprekidno prelazi u operator \hat{S}_0^- , što upravo predstavlja traženi operator u odnosu na koji se vakuum ispostavlja neinvarijantnim. Ovaj zaključak predstavlja drugi, poslednji korak u dokazu Goldstonove teoreme, u domenu Hajzenbergovog feromagnetika.

Primetimo da u ovom slučaju operator:

$$\hat{g}_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{l}} e^{i\vec{k}\vec{l}} \hat{g}_{\vec{l}}$$

nije neposredno operator kreacije Goldstonovih bozona, ali očigledno je sa njim tesno povezan.

Istaknimo na kraju, da u sistemima sa spontanom narušenjem simetrije, koji se sastoje od beskonačnog broja čestica, postoji beskonačno mnogo linearno nezavisnih vakuumskih stanja. Ovo je naročito uočljivo na primeru Hajzenbergovog feromagnetika. Razmotrimo dva vektora stanja, u kojima su spinovi svih atoma orijentisani paralelno duž ose jediničnog vektora \vec{n}_1 u prvom stanju, odnosno duž \vec{n}_2 u drugom. Označimo ta stanja sa Φ_1 i Φ_2 , respektivno. Kako je $\vec{n}_1 \vec{n}_2 = \cos \vartheta$, imamo:

$$\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} (\cos \frac{1}{2} \vartheta)^N = 0$$

Ova formula važi za slučaj $S = \frac{1}{2}$. Ona nam kazuje da su oba ova vakuumska stanja međusobno ortogonalna, pri $N \rightarrow \infty$, ukoliko je $\vartheta \neq 0$. Dakle, odavde nam sledi gornji stav, s obzirom da ugao ϑ može uzeti proizvoljne vrednosti u intervalu od 0 do π .

2 Teorema o reziduumu

Teorema 1 Neka je f regularna funkcija u prstenu $r < |z - \alpha| < R$, tada se ona može prikazati (tj. razviti u Loranov red) kao:

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha_n (z - \alpha)^n \quad ; \quad \alpha_n = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{f(u) du}{(u - \alpha)^{n+1}}$$

gde je L zatvorena putanja koja leži unutar prstena tako da kružnica $|z - \alpha| = r$ leži u unutrašnjosti putanje L .

$$\alpha_{-1} = \frac{1}{2\pi i} \int_L f(u) du = \text{Res}(f(z); \alpha).$$

Posledica 1 Ako je $f(z) = \frac{\phi(z)}{\psi(z)}$, $0 < |z - z_0| < r$ i $z_0 \in C$ je izolovani singularitet funkcije f , a ϕ i ψ su analitičke funkcije na čitavom krugu $K(z_0, r)$ i ako je za neko $m \geq 1$

$$\phi(z_0) \neq 0, \quad \psi(z_0) = \psi'(z_0) = \dots = \psi^{(m-1)}(z_0) = 0, \quad \psi^{(m)}(z_0) \neq 0,$$

tada je

$$\text{Res}(f; z_0) = \frac{1}{(m-1)!} \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}} ((z - z_0)^m f(z)).$$

Specijalno, ako f u z_0 ima pol prvog reda i $\phi(z_0) \neq 0$, tada je

$$\text{Res}(f; z_0) = \frac{\phi(z_0)}{\psi'(z_0)}.$$

Literatura

- [1] Dr Škrinjar M., Dr Kapor D.: *Zbirka zadataka po odabranim poglavljima statističke fizike*, Prirodno-matematički fakultet, OOUR Institut za fiziku, Novi Sad 1982.
- [2] S.B. Dr Tošić: *Statistička fizika*, Institut za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta, Novi Sad, 1978.
- [3] B. Tošić, S. Stojanović, M. Škrinjar, D. Kapor, Lj. Mašković, J. Šetrajić: *Bozonske reprezentacije spinskih operatora u teorijskoj fizici čvrstog stanja*, Sveske fizičkih nauka, SFIN, god. V, broj 2. (27 - 49), Institut za fiziku PMF, Novi Sad, 1992.
- [4] E.M. Lifšic L.D. Landau: *Kvantna mehanika - nerelativistička teorija*, Građevinska knjiga, Beograd, 1966.
- [5] A.S. Davidov: *Kvantna mehanika*, Nauka, Moskva, 1973.
- [6] V.G. Barijahtar, V.N. Krivoručko, D.A. Jablonski: *Funkcije Grina u teoriji magnetizma*, Nauka, Kijev, 1984.
- [7] Tjablikov S. V.: *Metode kvantne teorije magnetizma*, Nauka, Moskva, 1976.
- [8] Cottam M. G. and Tilley D. R.: *Introduction to surface and superlattice excitations*, Cambridge University Press, 1989.
- [9] H.T. Diep: *Physical Review B*, Vol. 40, Number 7, (4818 - 4823), 1989.
- [10] T. Matsuda and K. Hida: *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 59, Number 6. (2223 - 2229), 1990. Institut za matematiku PMF, Novi Sad, 1998.
- [11] L.B. Okunj: *Fizika elementarnih čestica*, Fond Ing. Petra i Sonje Subotić, Beograd, 1992.
- [12] D. Nikolić - Despotović, M. Budinčević: *Zbirka rešenih zadataka iz kompleksne analize*, Institut za matematiku, Novi Sad, 1998.
- [13] I. K. Schuller. S. Kim, C. Leighton: *Magnetic superlattices and multilayers*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, (571 - 582), 1990.
- [14] P. B. Allen: *Magnetism and Magnetoresistance in Magnetic Multilayers*, Solid State Communications, Vol. 102, No. 2-3 (127-134), 1997.

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj:

RBR

Identifikacioni broj:

IBR

Tip dokumentacije: *Monografska dokumentacija*

TD

Tip zapisa: *Tekstualni štampani materijal*

TZ

Vrsta rada: *Diplomski rad*

VR

Autor: *Tatjana Tošić, br. dos. 213/96*

AU

Mentor: *dr. Darko Kapor*

MN

Naslov rada: *Niskotemperaturne osobine super-rešetke sa dvostrukim Hajzenbergovim antiferomagnetnim slojem*

NR

Jezik publikacije: *srpski - latinica*

JP

Jezik izvoda: *srpski*

JI

Zemlja publikovanja: *Jugoslavija*

ZP

Uže geografsko područje: *Vojvodina*

UGP

Godina: *2000.*

GO

Izdavač: *Autorski reprint*

IZ

Mesto i adresa: *Prirodno - matematički fakultet, Trg Dositelja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*

MA

Fizički opis rada: *U radu je primenjen bozonski tretman sistema super-rešetke sa dvostrukim Hajzenbergovim antiiferomagnetnim slojem, sa ciljem izučavanja niskotemperaturnskih osobina ove beskonačne super-strukture. Prelaskom u recipročni prostor, korišćen je metod Grinovih funkcija u energetskoj reprezentaciji i time omogućeno korišćenje teoreme o spektralnoj intenzivnosti u cilju nalaženja ravnotežnih srednjih vrednosti naseljenosti čvorova super-rešetke elementarnim ekscitacijama. Izvršeno je poređenje sa srodnim teorijskim radovima na ovom polju i pokazano da u beskonačnoj antiiferomagnetnoj strukturi ne dolazi do formiranja singleta, za razliku od sistema bilijera, kao što je to pokazano u radu Matsuda i Hide[10].*

FO

Naučna oblast: *Fizika*

NO

Naučna disciplina: *Teorijska fizika čvrstog stanja*

ND

Predmetna odrednica / Ključne reči: *Fizika, super-rešetka, Hajzenbergov spinski hamiltonijan*

PO

UDK:

Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF, Novi Sad*

Izvod:

IZ

Datum prihvatanja teme od strane veća: *27.10.2000.*

DP

Datum odbrane: *06.11.2000.*

DO

Članovi komisije:

Predsednik:

Dr Darko Kapor, redovni profesor, PMF, Novi Sad

Članovi:

Dr Mario Škrinjar, redovni profesor, PMF, Novi Sad

Dr Miroslav Vesković, redovni profesor, PMF, Novi Sad

KO

