

UNIVERZITET U NOVOM SADU
Prirodno-matematički fakultet

ŽIVOJIN B. BREKIN



DIPLOMSKI RAD IZ KVANTNE MEHANIKE

T e m a: PERGELEKTRIK KAO SISTEM SA DVOČESTIČNIM PERMIONSKIM
INTERAKCIJAMA

U Novom Sadu, Decembra 1973. godine.

M E N T O R:

Dr. BRATISLAV TOŠIĆ,
vanredni profesor

Zahvaljujem se Dr. Bratislavu
Tošiću na izboru teme i stalnoj
pomoći pri izradi diplomskega rada.
Takođe se zahvaljujem i Slobodanu
Stanenkoviću iz Instituta "Boris
Kidrič" u Vinči na korisnim savetima
pri pisanju diplomskega rada.



U V O D

Za poslednjih petnaest godina mnogo je poraslo interesovanje za ferroelektrične kristale. Ovi kristali odlikuju se jako izraženim vektorom električne polarizacije, i kao takvi nalazili su i nalaze višestruku primenu u praksi.

Klasična i poluklasična teorija ferroelektričnih fenomena bila je data relativno davno, i najverovatnije u vezi s tim što se ferroelektrici mogu korisno upotrebiti pri izradi elemenata ultrazvučnih emitera.

Poslednjih godina pokušava se da se sa tačke gledišta mikroteorije objasni proces, koji se odvija u ferroelektrici. Najpopularnije teorije mikrofenomena u ferroelektricima baziraju na ideji O-H-O veze, suština ove ideje je da jezgro atoma H osciluje u dvostrukoj potencijalnoj jami, koju образuju dva atoma O. Tipičan predstavnik ovih ferroelektrika je KH_2PO_4 (kalijum dihidrofosfat).

Za ferroelektrike sa naznačenim vodeničnim vezama predloženo je više modela, od kojih su najpopularniji: model dipola sa promenljivim smerom i intenzitetom (Ginsburg) i model kvazi-spina, koji ferroelektrične fenomene svedi na "Order-disorder" prenos (Slajter, Blinc, De-Žen). Danas se smatra da je model kvazi-spina adekvatniji realnoj fizičkoj situaciji i zbog toga se on mnogo češće koristi. Treba napomenuti da u okviru modela kvazi-spina nisu rešeni svi problemi i to u prvom redu problem energije osnovnog stanja ferroelektrika i problem onih delova ferroelektričnog Hamiltonijana, koji odgovaraju anharmonijskim procesima.

Cilj ovog diplomskog rada je da se na osnovu usvojene šeme protona, koji osciluje u potencijalnoj jami sa dvostrukim dnom ispitaju i u izvesnoj meri osvetle problemi sa kojima se susreće kvazi-spinski model.



Očigledno je da se fenomeni u ferroelektriku mogu razmatrati na bazi procesa u fermionskom sistemu sa dvočestičnim interakcijama, jer proton koji osciluje je fermion, pa se stoga i ferroelektrik može analizirati analogno onim dielektricima u kojima se ekscitacije pojavljuju usled promene stanja u električnom podsistemu.

Ovde čemo preneti tehniku analize sistema fermiona sa dvočestičnim interakcijama i u okviru te tehničke pokušati da rešimo problem energije osnovnog stanja ferroelektrika, kao i problem mogućih anharmoničkih procesa u njemu.

I GLAVA

OPĆE O FEROELEKTRICIMA

1. Feroelektricitet kristala

Feroelektrici su kristalne materije kod kojih se ispod neke temperature ili u nekim intervalu temperaturu u odsustvu spoljnog polja pojavljuje spontana polarizacija. Uzrok takvog naziva je istorijski i uslovjen je formalnom sličnošću feroelektriciteta i feromagnetizma. Kao i feromagnetne materije, i feroelektrici imaju spontanu električnu polarizaciju i histerezisnu, zavisnost između polarizacije i električnog polja. Tipični primjeri feroelektričnih kristala su dihidrofosfat kalijum i njemu izomerfni fosfati titanbarijuma i njemu izomerfni dicksidi, zatim senjetova so (natrijum, kalijum, tartarat, tetrahidrat) i nekoliko njemu izomerfnih kristala. Svojstva ovih i drugih feroelektrika opširno ili revijalno su prikazani kod Kencinga, Forsberga i Negoua, kao i mnoštvu drugih radova.

Klasifikacija po karakteru faznog prelaza imane dve vrste feroelektrika; u prvoj grupi su (KH_2PO_4 , tri glicin sulfat) koji imaju prelaz tipa "uredjenje-neuredjenje". Kod druge grupe (barijum-titanat i njemu izomerfni kristali) fazni prelaz je tipa tzv. "prelaza pomeraja". Priroda faznog prelaza u gore pomenutom smislu u principu se može odrediti na osnovu tačnih strukturalnih ispitivanja. U nekim slučajevima za to su dovoljni rezultati električnih meranja i optičkih. Za sve feroelektrike karakteristično je da odredjene fazne veličine, kao što su dielektrična propustljivost ϵ , (dielektrična susceptibilnost χ) ili što je ekvivalentno veličina konstante Kiri C u zakonu Kiri Vajs (veličina toplotnog kapaciteta c, sama električna polarizacija, unutrašnja energija i

druge fizičke veličine ispoljavaju diskontinuitet u kritičnoj tački. Na osnovu toga se za svaki feroelektrik i određuje tip faznog prelaza. Obično feroelektrik "tipa poseraja" imaju fazni prelaz prvog reda, a feroelektrici tipa "uredjenje-ne-uredjenje" fazni prelaz drugog reda. Klasifikacija faznog prelaza se predružuje na osnovu ponašanja slobodne energije F , odnosno Gibsove funkcije raspodele G , koje su diskontinuirane u tački prelaza (kritična tačka). Prema Erenfestu za fazni prelaz prvog reda G je kontinualna u tački prelaza, a njeni izvedi su prekidne, te otuda postoji latentna toplota u tački prelaza. Za fazni prelaz drugog reda prvi izvod po G je kontinualan, ali drugi izvod po temperaturi je diskontinualan, (kao što je specifična toplota). Postoje mnogi prelazi koji nezadovoljavaju ovu klasifikaciju kao što je dobro poznat prelaz λ -tipa, gdje specifična toplota c teži ∞ u tački prelaza. Međutim, na sve prelaze, sem za prelaze ne samo funkcije G i entropija S i zapremina V su kontinualne u tački prelaza.

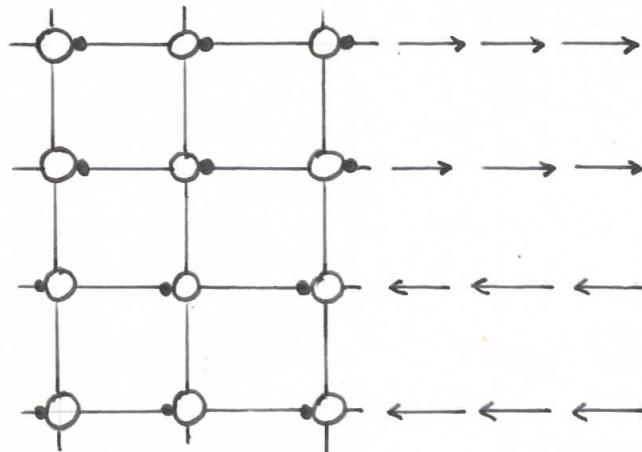
Ova termodinamička klasifikacija faznih prelaza može se povezati sa karakteristikama simetrije faza ispod i iznad kritične tačke. Prema Landau postoji dva tipa faznih promena u kristalu:

- Nagla promena kod faznog prelaza prvog reda praćena diskontinualnom promenom polarizacije i paracetara rešetke. U tački prelaza dve različite faze su u ravnoteži i njihove slobodne energije su jednake. Izmena simetrije tela pri tome ne podleže nikakvim ograničenjima, a simetrije obeju faza mogu biti sasvim različite.
- Fazni prelaz drugog reda ispoljava kontinualnu promenu stanja tela (polarizacija ide kontinualno ka nuli, kada temperatura teži kritičnoj tački).

Simetrija tela u tački prelaza se menja, svakako, skokovito i na svakoj temperaturi postoji samo jedna faza, tako da je

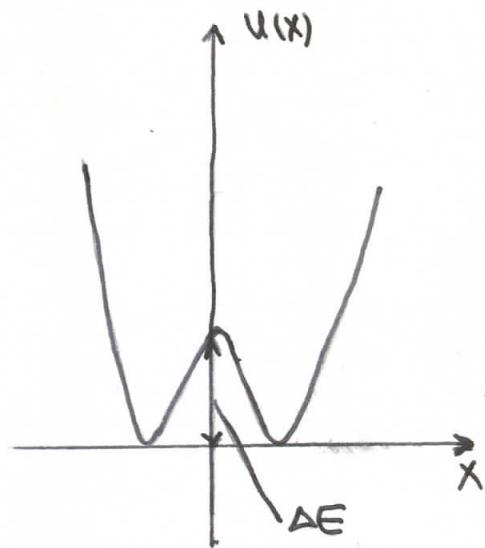
fazni prelaz umutar jedne faze, ali tako da su u tački prelaza stanje obeju faza ista. Simetrije kristala u kritičnoj tački moraju da uključuju sve elemente simetrije obeju faza. Za ovaj tip prelaza kod homogenih tela definišu se potrebni i dovoljni zahtevi simetrije, koji se detaljnije formulišu u teoriju grupa.

Fizička pozadina podele ferroelektrika na pomenuta dva tipa sastoji se u sledećem: kod ferroelektrika tipa "uredjenje - neuredjenje" laki (B) joni rešetke mogu prelaziti iz jednog položaja ravnoteže u drugi, koji se nalaze na malom međusobnom rastojanju izmedju dva teška jona (A) pod dejstvom toplotnog kretanja. (vidi sliku 1.).



○ A • B

SL. 1



SL. 2

Da bi prešao iz jedne potencijalne jame u drugu, ion treba da savlada potencijalnu barijeru ΔE (slika 2.).

Predpostavimo da su na datoј temperaturi svi joni (B) nalazē bliže jonima (A). Mi možemo razmatrati svaku grupu (A,B) kao električni dipol. U tom slučaju kaže se da je kristal

spontano polarizovan. Nalazi se u ferroelektričnoj fazi. Sa porastom temperature topotno kretanje jona u rešetci može toliko perasti da joni (B) našeg nednog kristala (slika 1.) budu u stanju da savladaju energijsku barijeru E bez ikakvog spoljnog polja, odnosno da prekazu iz jednog ravnotežnog položaja u drugi. Ovaj fenomen je u kvantnoj mehanici poznat kao tunel efekat. U kritičnoj tački i iznad nje, verovatnoća za nalaziće jona (B) u jednoj i drugoj potencijalnoj jami (levoj i desnoj) su jednake, tako da dolazi do totalne depolarizacije kristala i iznad T_c kristal se nalazi u paralelektričnom stanju. Treba imati u vidu da kod realnog kalijum dihidrofosfata ferroelektričnu ulogu jona (B) imaju protoni u vodoničnim vesama, ali je sama fizička slika mehanizma spontane orijentacije jonskih dipola modifikovana utoliko što doprinos polarizaciji dvaju teškim jona $K^+PO_4^-$ koji su u jakoj interakciji sa protonima. Upravo ova interakcija posredno omogućuje tzv. ekidni mehanizam protona u ferroelektriku (KH_2PO_4), koji je analogen ulozi jona (B) u opisanom hipoteitičnom modelu ferroelektrika tipa "uredjenje-neuredjenje".

Što se tiče ferroelektrika "tipa pomeraja" napomeničemo samo da se u njima u ferroelektričnoj fazi stvaraju inducirani (trenutni) dipoli na račun velikog anharmonijskog kretanja jona u rešetci. Ono se čituje u pomeraju centra harmonijskog kretanja jona, usled čega se stvaraju inducirani dipoli, koji se posredstvom dugotalašnih interakcija optičkih frekvencija uredjuju u određenom pravcu, dajući kao rezultat spontanu polarizaciju kristala. Teorija koju su razradili Kohran i Anders bazira na argumentu da su oscilacije jona rešetke prateće polarizacionim talasima, koji stvaraju lokalno polje interagujući tako sa jonima preko Kulonovih sila dugog doseg. Srednji položaj strukturne jedinice, koja fluktuiru u anharmonijskoj jami menja se u zavisnosti od amplitude, njenog kretanja, a samim tim i sa temperaturom. Polarizacionost

ove jedinice menja se sa temperaturom usled prisustva anharmoničnosti; ona se takođe menja kada spoljašnje polje deformiše potencijalnu jamu. U složenoj situaciji, kada postoje uzajamni efekti anharmonijske sile kratkog dosega su u suprostavljanju sa elektrostatičkim silama dugog dosega.

Spontana polarizacija P_s nastaje u tom slučaju ako preovladaju efekti dugog dosega, ali samu vrednost velikog P_s određuju anharmonijske komponente sile. Harmonijske oscilacije rešetke ne interreaguju nedjusobno, ali pristupnost anharmonizma doveđi do kolektivne frekvencije, (modova). Kao rezultat toga nastaje feroselektrični "mod" koji jako zavisi od temperature i koji upravo dovodi do pojave feroselektričnog prelaza. Ako za datu kolektivnu frekvenciju (optička grana) ove sile dugog dosega imaju istu veličinu, ali su suprotnog znaka interakcije kratkog dosega, kristal postaje nestabilan u odnosu na ovu kolektivnu frekvenciju (mod). Drugim rečima, ispod kritične tačke ova karakteristična frekvencija postaje imaginarna i ima oblik :

$$\omega_F^2(\theta) = \gamma(T - T_c) \quad (1.1)$$

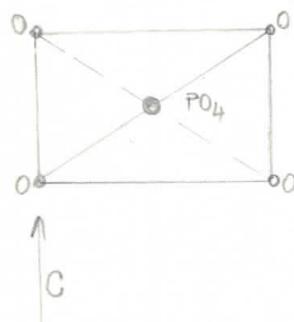
Ovako ponašanje feroselektričnog moda imamo u slučaju feroselektrika tipa "uredjenje-neuredjenje" ali se do istog dolazi na osnovu drugih modela, koji su adaptirani za ovaj tip feroselektrika.

2. Modeli feroselektrika

Isterijski prvu molekularnu teoriju faznog prelaza kalijum dihidrofesfata dao je Slepjer. Slepjer je predpostavio da svaki proton ima dva moguća položaja unutar OH veze i da se na četiri H veze pridružene svakoj PO_4 grupi mogu nalaziti samo dva protona u bližim položajima ovoj grupi. Ovo energetsko stanje karakteriše se parametrom E_0 . Zanemarujući više energetske konfiguracije Slepjer je uspeo da objasni opaženu promenu entropije na temperaturi prelaza predviđajući fazni prelaz prve vrste.

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

Premda Slepjeru ako se dva jona H nalaze blizu dva "gornja" jona (slika 3.) H, onda se grupi KH_2PO_4 asocira dipol u pravcu ose (-C). Ako se joni H (protoni) približe nižim O, onda je dipol ose (+C). Ove konfiguracije smatraju se energetski ekvivalentne i one se uzimaju kao konfiguracije muite energije. U slučaju kada se jedan jon O nalazi blizu "gornjeg", a drugi blizu "donjeg" jona O, odgovaraju dipolima orijentisanim upravno na C osu (C). Takvih konfiguracija ima četiri, koje su takođe energetski ekvivalentne i vezane su sa energijom ϵ_0 . Drugim rečima, energija kristala bez spoljnog polja se određuje brojem dipola orijentisanih upravno na osu (C), koji se može konstantom energije ϵ_0 . Ne upuštajući se detaljne u složene Slepjerove račune može se lako pokazati na drugi način veza između kritične temperature i Slepjerovog parametra ϵ_0 . Ako je:



$$P(\beta) = \sum_{j=1}^N \exp(-\beta j \epsilon_0) \quad (1.2)$$

$j = 1, \dots, N$ - Broj fosfatnih grupa

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (1.3)$$

Sl. 3

te verovatnoća da sve N fosforne grupe imaju energiju ϵ_0 , onda se temperatura prelaza može naći iz uslova da ova verovatnoća bude jednaka jedinici, tj. da na kritičnoj temperaturi svi dipoli budu upravni na osu C.

$$P(\beta) = 1 \quad (1.4)$$

Ako N teži beskonačnosti onda se dobija Slejterov rezultat:

$$K_B T_c = \frac{\varepsilon_0}{\ln 2} \quad (1.5)$$

Kasnije je Piren cee problem tretirao kvantno mehanički uvođeći kinetičku energiju protona. On je to pokušao sa potencijalom, koji ima jedan minimum. Neposredno posle ovoga Blinc je uveo model po kome proton tunelira kvantno mehanički u potencijalu sa dvaminimuma. Ovu ideju su kasnije poopštili japanski teoretičari Macubara i Tokunaga, i, nezavisno od njih, De-Žen.

Faktički iz radova ovih poslednjih teoretičara potekla je ideja kvazi-spina ne upuštajući se detaljno u izvodjenje kvazi-spinskog Hamiltonijana i na osnovu prvih principa ideja ovog modela se može lako demonstrirati na jednočestičnom potencijalu vodonika unutar vodonične veze.

Hamiltonian za jedan proton glasi:

$$H_p = E_{kp} + U_p(x) \quad (1.6)$$

i ako su $\psi_L(x)$ i $\psi_D(x)$ talasne funkcije protona u levoj, odnosno desnoj potencijalnoj jemi, onda se u reprezentaciji ova dva stanja protona jednočestični Hamiltonian može napisati u matičnom obliku

$$\begin{pmatrix} \langle L|H_p|L\rangle & \langle L|H_p|D\rangle \\ \langle D|H_p|L\rangle & \langle D|H_p|D\rangle \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

Po prirodi problema $\psi_L(x)$ i $\psi_D(x)$ su realne funkcije, pa je:

iz simetrije problema vali i:

$$\langle L | H_p | L \rangle = \langle D | H_p | D \rangle = E_0 \quad (1.8)$$

Matrica /1/ se onda može dekomponovati u obliku:

$$E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + Q \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = E_0 I_{(2 \times 2)} + 2 Q \hat{S}_x \quad (1.9)$$

Interakcija između protona opisuje se Ising-ovim modelom:

$$H_{p-p} = - \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (1.10)$$

Totalni Hamiltonian je onda:

$$H = -2Q \sum_i S_i^x - \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad 2Q = -2Q_0 \quad (1.11)$$

Kasnije su ovaj model poopštili Villain i Stamenković i nezviseo Kobayashi, uvedeći interakciju protona sa teškim jonom. Na ovaj način reproducovan je feroelektrični mod u obliku:

$$\omega_F^2 = \lambda q^2 + \gamma(T - T_c) \quad \beta = \begin{cases} \beta_1 & T > T_c \\ \beta_2 & T < T_c \end{cases} \quad (1.12)$$

Na kraju Stamenković i Novaković su razvili dinamičku teoriju feroelektrika sa vedeničnom vezom u kojoj su dobijene kompletne kolektivne frekvencije sistema zajedno sa njihovim vremenom poluživota.

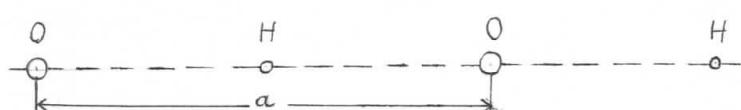
11.

Ovo je omogućilo formulaciju diferencijalnog efikasnog preseka za rasejanje sporih neutrona, koje treba da omogući uvid u slaganje teorije sa eksperimentom.

II GLAVA

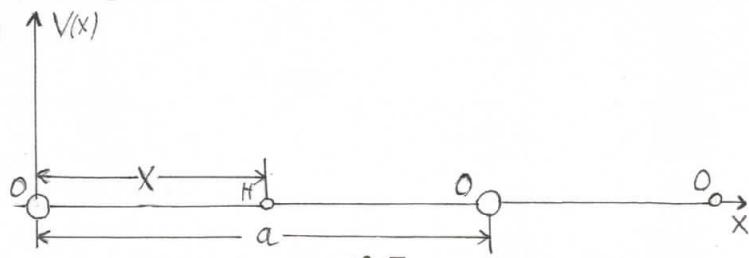
1. Objašnjenje potencijala

Kalijum dihidrefosfat (KH_2PO_4) je feroelektrik sa vodoničnom vezom. Smatra se da kretanje protona uslovljava feroelektrične osobine. Pored kalijum dihidrefosfata ovde spadaju i izomorfne soli (RbH_2PO_4 ; CsH_2PO_4 itd.). U kristalu vodonik i kiseonik su vezani kao što je naslici prikazano.



sl. 4

Ovaj niz (lanac) se naziva u stručnoj literaturi "bond", što na engleskom jeziku, između ostalog znači, i veza. Ako su joni na rastojanju većem od dimenzija jezgra, onda između njih deluje Kulonova sila, pošto imamo sistem nanelektrisanja. Posmatramo Kulonov potencijal u ovom sistemu:



sl. 5

Neka je rastojanje između jona O (kiseonika) "a" i neka ova tri nanelektrisanja leže na x osi. Neka je y osa potencijal V i neka se koordinatni početak nalazi u kiseoniku, a vodonik neka se nalazi na rastojanju x od koordinatnog početka, odnosno od jona kiseonika. Kulonov potencijal će imati vrijednost:

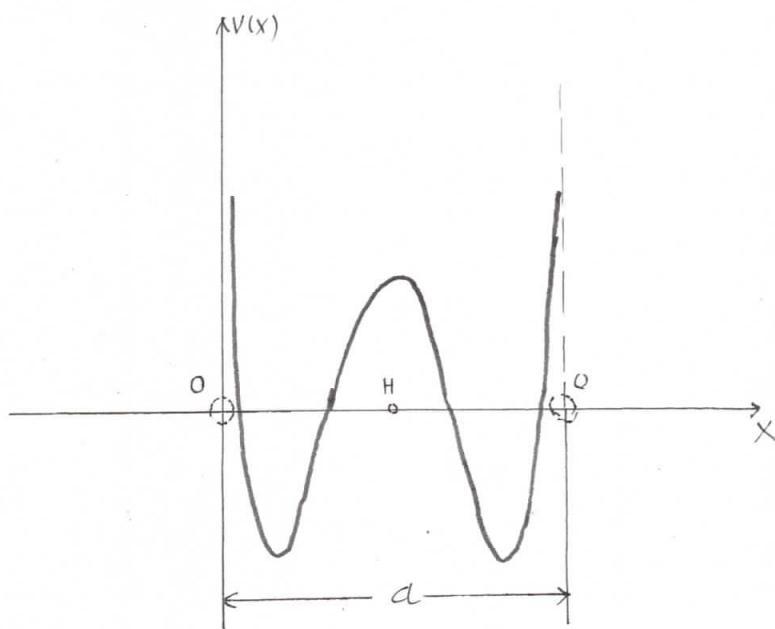
$$V = -\frac{V_0}{x} - \frac{V_0}{a-x} \quad (2.1)$$

Nadjimo maksimalnu vrednost potencijala:

$$\frac{dV}{dx} = -V_0 a \frac{a-2x}{x(a-x)} = 0 \quad X_{\max.} = \frac{a}{2} \quad (2.2)$$

$$V_{\max.} = -\frac{4V_0}{a} \quad (2.3)$$

Nacrtajmo potencijalnu krivu koja će se dobiti za ovaj sistem "bond":



sl. 6

U blizini jezgra deluje sila jezgra, te potencijal menja znak / deluju odbojne sile koja opadaju približno kao $r^{-12}/.$

Ovakav potencijal naziva se potencijalne dvestruke simetrične jame.

2. Prelaz od Fermi-operatora na Pauli-operator

Sistem "OHO" bondova ako eliminisemo gva ostala kretanja u njemu kao ne bitna za feroelektrične osobine, može se posmatrati kao sistem fermiona sa dvočestičnim interakcijama, pri čemu su ti fermioni protoni iz "OHO" bonda sa svaki od čvorova rešetke.

Na osnovu opštih pravila kvantne mehanike i prelaska na drugu kvantizaciju Hamiltonian ima slijedeći oblik:

$$H = H_2 + H_4 \quad (2.4)$$

$$H_2 = \sum_{n,f} E_{nf} a_{nf}^+ a_{nf} \quad (2.5)$$

$$H_4 = \frac{1}{2} \sum_{nm} V_{n-m}(f_1, f_2, f_3, f_4) a_{nf_1}^+ a_{mf_2}^+ a_{mf_3} a_{nf_4} \quad (2.6)$$

Sumiranje se vrši po čvorima rešetke, pri čemu je: n/m.
 f - stanje koje proton može sauzeti.
 \circ - osnovno stanje

a_{nf} Fermi-operatori, koji imaju osobine:

$$a_{\alpha\beta} a_{\alpha'\beta'}^+ + a_{\alpha'\beta'}^+ a_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} \quad (2.7)$$

$$a_{n\circ}^+ a_{n\circ} + a_{nf}^+ a_{nf} = 1 \quad (2.8)$$

$$a_{\alpha\beta} a_{\alpha'\beta'}^+ + a_{\alpha'\beta'}^+ a_{\alpha\beta} = 0 \quad (2.9)$$

V_{n-m} je interakcija između čvorova rešetke i ona je simetrična funkcija, tj.

$$V_{n-m} = V_{m-n}$$

Stanja koja protomi mogu sauzeti data su u šemci:

| f_1 | f_2 | f_3 | f_4 |
|-------|-------|-------|-------|
| 0 | 0 | 0 | 0 |
| f | 0 | 0 | 0 |
| 0 | f | 0 | f |
| 0 | 0 | f | 0 |
| 0 | 0 | 0 | f |
| f | f | 0 | 0 |
| f | 0 | f | 0 |
| f | 0 | 0 | f |
| 0 | f | f | 0 |
| 0 | f | 0 | f |
| f | f | f | 0 |
| f | f | 0 | f |
| f | 0 | f | f |
| 0 | f | f | f |
| f | f | f | f |

Koristeći osobine Fermi-operatora i znajući da f može uzimati vrijednost /0,f/, možemo Hamiltonijan napisati u obliku:

$$\begin{aligned}
 H_2 &= \sum_n E_{nf} a_{nf}^+ a_{nf} = \\
 &= \sum_n E_{no}(1 - a_{nf}^+ a_{nf}) + \sum_n E_{nf} a_{nf}^+ a_{nf} = \\
 &= \sum_n E_{no} + \sum_n (E_{nf} - E_{no}) a_{nf}^+ a_{nf} = \\
 &= N E_0 + \sum_n (E_{nf} - E_{no}) a_{nf}^+ a_{nf} \quad (2.10)
 \end{aligned}$$

Koristimo Paulijeve operatorne. Paulijevi operatori se mogu poštaviti kao produkt para Fermi operatora.

$$P_n^+ = a_{nf}^+ a_{no} \quad (2.11)$$

$$P_n = a_{no}^+ a_{nf} \quad (2.12)$$

$$P_n^+ P_n = a_{nf}^+ a_{nf} \quad (2.13)$$



i zadovoljavaju slijedeće komutacione relacije:

$$[P_n, P_m^+] = (1 - 2P_n^+ P_m) S_{nm} \quad (2.14)$$

$$[P_n, P_m] = [P_n^+, P_m^+] = 0 \quad 2.15$$

$$[P^+, P] = 0 \quad i \quad 1 \quad (2.16)$$

Uvodeći Paulijeve operatore Hamiltonijan možemo napisati u obliku:

$$\begin{aligned} H = N E_0 + \sum_n (\epsilon_{nf} - \epsilon_{no}) a_{nf}^+ a_{nf} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(00;00) a_{no}^+ a_{mo} a_{no} a_{mf} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(+0;00) a_{nf}^+ a_{no}^+ a_{mo} a_{no} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(0f;00) a_{no}^+ a_{mf}^+ a_{mo} a_{no} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(00;+0) a_{no}^+ a_{mo}^+ a_{mf} a_{no} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(00;0f) a_{no}^+ a_{mo}^+ a_{no} a_{mf} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(+f;00) a_{nf}^+ a_{mf}^+ a_{mo} a_{no} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(f0;+0) a_{nf}^+ a_{mo}^+ a_{no} a_{mf} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(f0;0f) a_{nf}^+ a_{no}^+ a_{mo} a_{nf} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(0f;f0) a_{no}^+ a_{mf}^+ a_{no} a_{mf} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(0f;0f) a_{no}^+ a_{mf}^+ a_{no} a_{mf} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(00;ff) a_{no}^+ a_{mo}^+ a_{mf} a_{nf} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(ff;0f) a_{no}^+ a_{mf}^+ a_{no} a_{nf} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(00;ff) a_{no}^+ a_{mo}^+ a_{mf} a_{nf} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(ff;ff) a_{nf}^+ a_{mf}^+ a_{no} a_{nf} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(ff;ff) a_{no}^+ a_{mf}^+ a_{no} a_{nf} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(+0;ff) a_{nf}^+ a_{mo}^+ a_{mf} a_{nf} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(0f;ff) a_{no}^+ a_{mf}^+ a_{no} a_{nf} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}(+f;ff) a_{nf}^+ a_{mf}^+ a_{no} a_{nf} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Koristeći osobine Fermi operatora

$$\alpha_p \alpha_{p'}^\dagger \alpha_{p'} = \alpha_{p'}^\dagger \alpha_{p'} \alpha_p = -\alpha_{p'}^\dagger \alpha_p \alpha_{p'}, \quad (2.18)$$

i uvođeći Paulijeve operatore po definiciji, dobijemo izraz za Hamiltonijan u obliku:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 \quad (2.19)$$

$$H_0 = \frac{1}{2} \mathcal{W}_0 N + N E_0 \quad (2.20)$$

$$H_1 = A_1 \sum_n (P_n^+ + P_n) \quad (2.21)$$

$$H_2 = B_1 \sum_n P_n^+ P_n + \sum_{n,m} B_{n,m}^{(2)} (P_n^+ P_m^+ + P_n P_m) + \\ + \sum_{n,m} B_{n,m}^{(3)} P_n^+ P_m \quad (2.22)$$

$$H_3 = \sum_{n,m} C_{n,m}^{(1)} (P_n^+ P_m^+ P_m + P_n^+ P_n P_m) \quad (2.23)$$

$$H_4 = \sum_{n,m} C_{n,m}^{(1)} P_n^+ P_m^+ P_m P_n \quad (2.24)$$

Konstante A, B, C i D su konstante date u funkciji W_{n-m} , tj. interakcije medju čvorovima rešetke. Ove konstante se dobijaju kada se saberi članovi uz linearne, kvadratni, kubni i četvrti deo Hamiltonijana (H) i imaju slijedeće vrednosti:

$$A_1 = \frac{1}{2} \sum_i [W_e(00;ff) + W_e(00;0f)] = \frac{1}{2} \sum_i [W_e(+0;00) + W_e(0+00)] = A_2 \quad (2.25)$$

$$B_1 = \frac{1}{2} \sum_i [-W_e(00;00) + W_e(f0;0f) + W_e(0f;f0)] + E_{uf} - E_{uo} \quad (2.26)$$

$$B_{num}^{(2)} = \frac{1}{2} W_{num}(00;ff) = \frac{1}{2} W_{num}(+0;00) = B_{num}^{(u)} \quad (2.27)$$

$$B_{num}^{(3)} = \frac{1}{2} [W_{num}(+0;+0) + W_{num}(0+;0f)] \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} C_{num}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left[-W_{num}(00;+0) - W_{num}(00;0f) + W_{num}(+0;+f) + W_{num}(0+;ff) \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left[-W_{num}(+0;00) - W_{num}(0+;00) + W_{num}(ff;0f) + W_{num}(ff;ff) \right] = B_{num}^{(u)} \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$D_{num} = \frac{1}{2} \left[W_{num}(00;00) - W_{num}(+0;0f) - W_{num}(0+;+0) + W_{num}(ff;ff) \right] \quad (2.30)$$

3. Unitarna transformacija Fermi-operatora

Hamiltonijan sadrži član H_1 , koji je linearan po Pauli-operatorima. Pojava ovog člana u Hamiltonijanu označava da osnovno stanje sistema nije dobro odabранo i da H_0 ne predstavlja energiju osnovnog stanja sistema, što znači da vakuum sistema, sadrži u sebi kvazičestice, pa prema tome nije pravi vakuum.

Unitarnom transformacijom Hamiltonijana ili drugim rečima, rotacijem Hilbertovog prostora, se postiže da vakuum u saređivanom prostoru bude i realno vakuum, tj. da u sebi ne sadrži kvazi čestice. Kao što je poznato, unitarna transformacija ne menja svojstvene vrednosti Hamiltonijana. Ovakvu rotaciju Hilbertovog prostora, koja nas dovodi do stvarnog vakuuma u literaturi obično nazivaju stabilizacija Hamiltonijana sistema.

Da bismo se oslobođili člana H_1 mi ćemo preći na nove Fermi-operatore (a_{no} i a_{nf}) unitarnom transformacijom.

$$\begin{pmatrix} a_{no} \\ a_{nf} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{no} \\ b_{nf} \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

gde: $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ zadovoljava datu relaciju. (3.2)

U podprostoru fermionskih operatara, koji obrazuju operatori a_{no} i a_{nf} mogu se uvesti novi Pauli operatori:

$$Q_u^+ = b_{nf}^+ b_{no} \quad (3.3)$$

$$Q_u = b_{no}^+ b_{nf} \quad (3.4)$$

$$Q_u^+ Q_u = b_{nf}^+ b_{nf} \quad (3.5)$$

$$Q_u^2 = Q_u^{+2} = 0 \quad (3.6)$$

Operatori a_n^+ i a_{nf}^+ se mogu pisati u obliku:

$$a_{no} = \alpha b_{no} + \beta b_{nf} \quad (3.7)$$

$$a_{nf} = -\beta b_{no} + \alpha b_{nf} \quad (3.8)$$

$$a_{no}^+ = \alpha b_{no}^+ + \beta b_{nf}^+ \quad (3.9)$$

$$a_{nf}^+ = -\beta b_{no}^+ + \alpha b_{nf}^+ \quad (3.10)$$

Ako stare Pauli operatore P izrazimo preko novih Pauli operatori Q, dobijemo slijedeće izraze:

$$P_n^+ = a_{nf}^+ a_{no} \quad (3.11)$$

$$P_n = a_{no}^+ a_{nf} \quad (3.12)$$

$$P_n^+ P_n = a_{nf}^+ a_{nf} \quad (3.13)$$

Ako zamenimo operatore a_{nf}^+ i a_{no}^+ operatorima b_{no}^+ i b_{nf}^+ i koristimo osobine novih Pauli operatera Q dobijemo:

$$\begin{aligned} P_n^+ &= a_{nf}^+ a_{no} = (-\beta b_{no}^+ + \alpha b_{nf}^+) (\alpha b_{no} + \beta b_{nf}) = \\ &= -\alpha \beta + 2\alpha \beta Q_n^+ Q_n + \alpha^2 Q_n^+ - \beta^2 Q_n \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} P_n &= a_{no}^+ a_{nf} = (\alpha b_{no}^+ + \beta b_{nf}^+) (-\beta b_{no} + \alpha b_{nf}) = \\ &= -\alpha \beta + 2\alpha \beta Q_n^+ Q_n + \beta^2 Q_n - \alpha^2 Q_n \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} P_n^+ P_n &= a_{nf}^+ a_{nf} = (-\beta b_{no}^+ + \alpha b_{nf}^+) (-\beta b_{no} + \alpha b_{nf}) = \\ &= \beta^2 + (\alpha^2 - \beta^2) Q_n^+ Q_n - \alpha \beta (Q_n^+ + Q_n) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Dobijeni izrazi za operatore P se zamene u Hamiltonijan i dobijena forma, sada po operatorima Q^+ i Q uredi tako da se izdvoji konstantni deo, zatim linearan po operatorima Q^+ i Q , kvadratni deo, deo trećeg reda i deo četvrtog reda. Pošto se to uredi, koeficijent unitarne matrice odredi se tako da članovi linearnih po Q i Q^+ budu jednaki nuli. Ovaj uslov eksplicitno glasi:

$$\begin{aligned} & (\lambda^2 - \beta^2) A_1 - \lambda \beta B_1 + \lambda \beta (\beta^2 - 2\lambda^2) B_2 + \lambda \beta (\beta^2 - \lambda^2) B_3 + \\ & + \beta^2 (3\lambda^2 - \beta^2) C_1 - 2\lambda \beta^3 D = 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

Dodatajmo svoj jednačini jednačinu /3.2/ koja glasi:

$$\lambda^2 + \beta^2 = 1 \quad (3.18)$$

Sad imamo dve jednačine po dvema nepoznatim λ i β i prekupljaju da je rešimo. Uvedimo smenu:

$$\lambda = \cos \varphi \quad \beta = -\sin \varphi \quad (3.19)$$

i zamenimo u jednačinu /3.17/, dobijeno jednačinu po φ . U tako dobijenoj jednačini trigonometrijskih funkcija izrazime preko dvostrukog ugla / $\sin 2\varphi$ i $\cos 2\varphi$ / i uvedimo smenu da je $\tan 2\varphi = x$, pa čemo dobiti jednačinu četvrtog stepena po x , koja glasi:

$$a_0 x^4 + a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4 = 0 \quad (3.20)$$

Konstantne a su funkcije od A, B, C i D.

$$a_0 = -\left[\frac{1}{2} (D + 3B_2 + B_3)^2 + C_1^2 \right] \quad (3.21)$$

$$a_1 = 3C_1^2 + \frac{1}{2} \left(B_1 + \frac{B_2}{2} + D \right) (D + 3B_2 + B_3) \quad (3.22)$$

$$a_2 = \frac{1}{2} (D + 3B_2 + B_3)^2 - \frac{1}{2} \left(B_1 + \frac{B_2}{2} + D \right) - \frac{9C_1^2}{4} - C_1(C_1 + 2A_1) \quad (3.23)$$

$$a_3 = -\frac{1}{2} \left(B_1 + \frac{B_2}{2} + D \right) (D + 3B_2 + B_3) + (C_1 + 2A_1) \frac{C_1}{2} \quad (3.24)$$

$$a_4 = \frac{1}{2} \left(B_1 + \frac{B_2}{2} + D \right)^2 \quad (3.25)$$

Smenom:

$$x = y - \frac{1}{4} \frac{a_1}{a_0} \quad (3.26)$$

gornja jednačina se svedi na:

$$y^4 + px^2 + qx + r = 0 \quad (3.27)$$

čija su rešenja istovremeno i korenji kvadratnih jednačina:

$$y^2 + \frac{1}{2} p + d_0 = \sqrt{2d_0} \left(y - \frac{q}{4d_0} \right) \quad (3.28)$$

gde je d_0 jedan koren jednačine:

$$8d_0^3 + 8pd_0^2 - (8r - 2p^2)d_0 - q^2 = 0 \quad (3.29)$$

Rješenje jednačine trećeg stepena date je u obliku Kardanovog
obrasca, koji za naš slučaj glasi:

$$\beta_0 = \sqrt[3]{-\frac{q_0}{2} + \sqrt{\frac{q_0^2}{4} + \frac{p_0^3}{27}}} + \sqrt[3]{-\frac{q_0}{2} - \sqrt{\frac{q_0^2}{4} + \frac{p_0^3}{27}}} \quad (3.30)$$

gde je β_0 data u obliku:

$$d_1 = \beta_0 - \frac{p}{3} = \beta_0 - \frac{1}{3} \left[\frac{b^2 - a^2 - d^2 - 2cd}{8} - \frac{3(c_1d + 2ab)^2}{512} \right] \quad (3.31)$$

a konstante p i q date su u funkciji konstanti a, b, c i d :

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{1}{3} \left[\frac{b^2 - a^2 - d^2 - 2cd}{(b^2 + c_1^2)^2} + \frac{3(c_1d + ab)^2}{128} \right] - \frac{3}{256} (2c_1d + 2ab)^4 + \\ &+ \frac{(c_1d + ab)^2(b^2 - a^2 - d^2 - 2cd)}{128} - \frac{(c_1d + ab)(-ab + cd)}{64} + \frac{a^2}{8} - \\ &- \frac{1}{4} \left[\frac{b^2 - a^2 - d^2 - 2cd}{8} - \frac{3(c_1d + ab)^2}{128} \right] \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} q_0 &= \frac{1}{8} \left[\frac{b^2 - a^2 - d^2 - 2cd}{(b^2 + c_1^2)^2} + \frac{3}{2} \left(\frac{c_1d + ab}{b^2 + c_1^2} \right)^2 \right] + \frac{1}{256} \left[\frac{(2c_1d + 2ab)^2(b^2 - a^2 - d^2 - 2cd)}{(b^2 + c_1^2)^3} \right. \\ &\left. + \frac{(c_1d + ab)(cd - ab)}{(b^2 + c_1^2)^2} + \frac{a^2}{b^2 + c_1^2} + \frac{24}{256} \left(\frac{2c_1d + 2ab}{b^2 + c_1^2} \right)^2 \right]. \\ &\left[\frac{b^2 - a^2 - d^2 - 2cd}{b^2 + c_1^2} + \frac{3}{2} \left(\frac{c_1d + ab}{b^2 + c_1^2} \right)^2 \right] + 2 \left[\frac{b^2 - a^2 - d^2 - 2cd}{b^2 + c_1^2} + \right. \\ &\left. + \frac{3}{8} \frac{3c_1d + 2ab}{(b^2 + c_1^2)^2} - \frac{2}{27} \left[\frac{b^2 - a^2 - d^2 - 2cd}{b^2 + c_1^2} + \frac{3}{2} \frac{(c_1d + ab)^2}{b^2 + c_1^2} \right]^3 \right] \end{aligned} \quad (3.33)$$

Kao što vidimo, rešenje nema praktične vrednosti, jer iz njega ne vidimo koja rešenja zadovoljavaju našu jednačinu. Trebalo bi pomoću determinante sistema ispitati koja rešenja postoje, pa ih onda naći. Problem je praktično neizvodljiv i zato smo koristili metod približne aproksimacije, tražeći rešenje do određene tačnosti.

4. Stabilizacija Hamiltonijana i uglovi rotacija

Prelaskom na nove Fermi operatore unitarnom transformacijom /3.1/ koeficijenti α i β zadovoljavaju relacije /3.2/, tj.

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1 \quad (3.34)$$

uvedenom smenom /3.19/

$$\alpha = \cos \varphi \quad \beta = -\sin \varphi \quad (3.35)$$

mi smo zasotirali Hilbertov prostor za ugao . Rotacije Hilbertovega prostora se vrše zbog kvantnih uslova, tj. da bi isčezali članovi linearni po Q da bi sistem bio stabilan. Hilbertov prostor je vektorski N -dimenzionalni prostor, međutim, mi ćemo posmatrati rotaciju dvodimenzionog prostora u podprostoru Fermionskih operatora:

$$\vec{e}_1 = a_0^\dagger |0\rangle \quad (3.36)$$

$$\vec{e}_2 = a_f^\dagger |0\rangle \quad (3.37)$$

koji se mogu prikazati u slijedećem obliku:

$$\begin{pmatrix} \vec{e}_1 \\ \vec{e}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\tau}_1 \\ \vec{\tau}_2 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

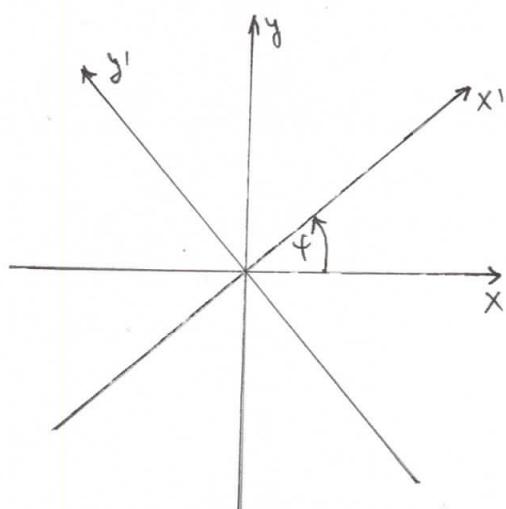
$$\vec{\tau}_1 = \ell_0^+ |0\rangle$$

(3.39)

$$\vec{\tau}_2 = \ell_f^+ |0\rangle$$

(3.40)

Po analogiji sa rotacijom koordinatnog sistema u ravni:



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

(3.41)

sp.7
vidi se da je:

$$\varphi = -\arcsin \beta$$

(3.42)

Posmatrajmo jednačinu (3.17) i uzimo da su konstante A i C reda veličine " ε ", a konstante B i D reda veličine "1". Veličina " ε " predstavlja malu veličinu u odnosu na "1". Neka su konstante α i β odredjene do tačnosti:

$$\alpha = 1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2$$

(3.43)

$$\beta = \varepsilon + \times \varepsilon^2$$

(3.44)

Ovako definisane veličine α i β zamenimo u jednačinu (3.17) i zanemarimo veličine sledećeg reda:

$$A\varepsilon = C\varepsilon = 0$$

(3.45)

$$B\varepsilon^2 = D\varepsilon^2 = 0$$

(3.46)

Na osnovu ovih aproksimacija dobijemo vrednost za „ ε ”, koja glasi:

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{A_1}{B_1 + 2B_2 + B_3} = \beta \quad (3.47)$$

Za ovu aproksimaciju ugao rotacije Hilbertovog prostora iznosi:

$$\varphi_k = -\arctan \frac{A_1}{B_1 + 2B_2 + B_3} \quad (3.48)$$

Pošto je:

$$A_1 \ll B_1 + 2B_2 + B_3 \quad (3.49)$$

sledi da je:

$$\varphi_k \approx 0 \quad (3.50)$$

Vidimo da je rotacija Hilbertovog prostora mala, što znači da je sistem skoro stabilan. Pošto imamo vrednost za y možemo napisati vrednost konstante λ :

$$\lambda = 1 - \frac{1}{2} \left[\frac{A_1}{B_1 + 2B_2 + B_3} \right]^2 \quad (3.51)$$

Uzmimo sada drugi slučaj. Neka su konstante B i D reda veličine ϵ , konstante A i C reda veličine "1". U ovom slučaju u jednačini (3.17) zanemarićemo sledeće izraze:

$$B\epsilon^2 = D\epsilon^2 = 0 \quad (3.52)$$

$$A\epsilon^3 = C\epsilon^3 = 0 \quad (3.53)$$

Posle ovih aproksimacija jednačina (3.17) poprimiće sledeći oblik:

$$\epsilon^2(3C_1 - 2A_1) + \epsilon(B_1 + 2B_2 + B_3) - A_1 = 0 \quad (3.54)$$

$$\epsilon_{1,2} = -\frac{B_1 + 2B_2 + B_3}{2(3C_1 - 2A_1)} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{B_1 + 2B_2 + B_3}{3C_1 - 2A_1}\right)^2 + \frac{4A_1}{3C_1 - 2A_1}} \quad (3.55)$$

Ako vrednost za " ϵ " zamenimo u jednačinu (4.11) ili (4.12) dobijemo vrednost za ugao φ_K . U ovom slučaju ugao rotacije nije očigledan kao u prethodnom slučaju, ali je očigledno $\epsilon_1 \approx 1$, što znači da je $\varphi_K \approx \frac{\pi}{2}$.

Vrednosti konstanti koje smo uzimali predstavljaju granične vrednosti, koje one mogu imati. Postoje i teorijska opravdaja za ove aproksimacije, koje ovde nisu iznete.

Prelaskom na ove operatore unitarnom transformacijom, oslobođili smo člana H_1 u našem Hamiltonijanu i naš Hamiltonijan sredjen može se pisati u obliku:

$$H = H_0 + H_2 + H_3 + H_4 \quad (3.56)$$

$$H_0 = \frac{1}{2}W_0N + NE_0 \quad (3.57)$$

$$H_2 = \Delta \sum_n Q_n^+ Q_n^- + \frac{1}{2} \sum_{n,m} f_{nm}^{(1)} (Q_n^+ Q_m^- + Q_n^- Q_m^+) + \\ + \sum_{n,m} f_{nm}^{(2)} Q_n^+ Q_m^- \quad (3.58)$$

$$H_3 = \sum_{n,m} f_{nm}^{(3)} (Q_n^+ Q_m^+ Q_m^- + Q_n^+ Q_m^- Q_m^+) \quad (3.59)$$

$$H_4 = \sum_{n,m} f_{nm}^{(4)} Q_n^+ Q_m^+ Q_m^- Q_n^- \quad (3.60)$$

$$\Delta = 2d\beta A_1 + (\beta^2 - \beta^2) B_1 - 8\beta^2 \beta^2 B_2 - 4\beta^2 \beta^2 B_3 + 2\sqrt{3}(3\beta^2 - \beta^2) C_1 + \\ + 2\beta^2(\beta^2 - \beta^2) D \quad (3.61)$$

$$f_{nm}^{(1)} = \left[(\beta^4 + \beta^4) B_{nm}^{(2)} - \beta^2 \beta^2 B_{nm}^{(3)} + d\beta(\beta^2 - \beta^2) C_{nm}^{(1)} + \beta^2 \beta^2 D_{nm} \right] 2 \quad (3.62)$$

$$f_{nm}^{(2)} = -\beta^2 \beta^2 B_{nm}^{(2)} + \beta^4 B_{nm}^{(3)} + 2d\beta(\beta^2 - \beta^2) C_{nm}^{(1)} + 2\beta^2 \beta^2 D_{nm} \quad (3.63)$$

$$f_{nm}^{(3)} = \left[\beta^2 (\beta^2 - 3\beta^2) + \beta^2 (\beta^2 - 3\beta^2) \right] C_{nm}^{(1)} + 2d\beta(\beta^2 - \beta^2) B_{nm}^{(2)} - \\ - d\beta(\beta^2 - \beta^2) D_{nm} \quad (3.64)$$

$$f_{nm}^{(4)} = 8\beta^2 \beta^2 B_{nm}^{(2)} + 4\beta^2 \beta^2 B_{nm}^{(3)} + 4d\beta(\beta^2 - \beta^2) C_{nm}^{(1)} + \\ + (\beta^2 - \beta^2) D_{nm} \quad (3.65)$$

III GLAVA

1. POREĐENJE DODIJENIH REZULTATA SA KVAZI-SPINSKIM MODELOM

Kao što je poznato najpopularniji model za pojave u ferroelektriku je tзв. kvazi-spinski model. Ferroelektrik se prematra kao sistem uredjenih kvazi-spina /recimo, leva pozicija protona u dvostrukoj jami/, a pobudjenje u njemu kao rezultat narušavanja svih orijentacija. S tim u vezi formulisan je Hamiltonijan ferroelektrika, koji ima sledeci oblik:

$$H = -2Q \sum_n S_n^x - \sum_{n,m} W_{nm}^{(2)} S_n^x S_m^x - 2 \sum_{n,m} W_{nm}^{(4)} S_n^z S_m^z \quad (4.1)$$

gde su: S - komponente vektora kvazi-spina, čiji je intenzitet $S = 1/2$. Ako odvode predjeme od kvazi-spinskih operatora na Paulijeve operatorе po formulema:

$$\frac{1}{2} - S_n^x = Q^+ Q \quad (4.2)$$

$$S_n = Q^+ \quad (4.3)$$

$$S_n^+ = Q \quad (4.4)$$

$$S_n^+ = S_n^z + i S_n^y \quad (4.5)$$

$$S_n^- = S_n^z - i S_n^y \quad (4.6)$$

$$[S_n^+, S_m^-] = 2S_n^x \delta_{nm} \quad (4.7)$$

dobijamo Hamiltonijan kvazi-spinskog modela ferroelektrika u Paulinskoj reprezentaciji.

$$\begin{aligned}
 H = E_0 + \Delta \sum_n Q_n^+ Q_n - \sum_{n,m} W_{nm}^{(1)} Q_n^+ Q_m + \\
 + \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{nm}^{(1)} (Q_n^+ Q_m^+ + Q_n Q_m) - \\
 - \sum_{n,m} W_{nm}^{(2)} Q_n^+ Q_m^+ Q_m Q_n
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

$$E_0 = -\Omega N - \frac{1}{4} N W_0^{(2)} \tag{4.9}$$

$$\Delta = 2 \Omega + 2 W_0^{(2)} \tag{4.10}$$

$$W_0^{(2)} = \sum_n W_{nn}^{(2)} \tag{4.11}$$

Ako formulu uporedimo sa rezultatima, koje smo dobili razmatrajući feroelektrik kao sistem fermiona sa dvočestičnim interakcijama, onda su matrični elementi kvazi-spinskog modela definisani na sledeći način: preko matričnih elemenata fermion-fermion-interakcije:

$$E_0 = \frac{1}{2} N W_0 + N E_0 \tag{4.12}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta = 2d\beta A_1 + (\delta^2 - \beta^2) B_1 - 8\delta^2 \beta^2 B_2 - 4\delta^2 \beta^2 B_3 + 2d\beta (3\beta^2 - \delta^2) C_1 + \\
 + 2\beta^2 (\delta^2 - \beta^2) D
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

$$W_{nm}^{(1)} = 2 \left[(\delta^4 + \beta^4) B_{nm}^{(1)} - \delta^2 \beta^2 B_{nm}^{(3)} + 2\beta (\beta^2 - \delta^2) (C_{nm}^{(1)} + \delta^2 \beta^2 D_{nm}) \right] \tag{4.14}$$

$$W_{nm}^{(2)} = 8\delta^2 \beta^2 B_{nm}^{(2)} + 4\delta^2 \beta^2 B_{nm}^{(3)} + 4d\beta (\delta^2 - \beta^2) (C_{nm}^{(1)} + (\delta^2 - \beta^2) D_{nm}) \tag{4.15}$$

Karakteristično je da kvazi-spinski model zanemaruje procese raspada i slepljivanja feroselektričnih ekscitacija, koji se u Hamiltonijanu bazira na fermion-fermion interakciji. Drugim rečima, u kvazi-spinskom modelu nema članovi koji sadrže proizvode tri Paulijeva operatora.

Gornje formule imaju za slučaj malog ugla rotacije oblik:

$$\begin{aligned} H = H_0 + \Delta \sum_n Q_n^+ Q_n^- + \frac{1}{2} \sum_{n,m} f_{nm}^{(1)} (Q_n^+ Q_m^- + Q_n^- Q_m^+) + \\ + \sum_{n,m} f_{nm}^{(2)} Q_n^- Q_m^- + \sum_{n,m} f_{nm}^{(3)} (Q_n^+ Q_m^+ Q_m^- + Q_n^+ Q_n^- Q_m^-) + \\ + \sum_{n,m} f_{nm}^{(4)} Q_n^+ Q_m^+ Q_m^- Q_n^- \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$H_0 = \frac{1}{2} W_0 N + N E_0 \quad (4.17)$$

$$\Delta = W_0 + \frac{1}{2} \sum_p [W_e(v_f; f_0) + W_e(f_0; v_f)] + E_{uf} - E_{vo} \quad (4.18)$$

$$f_{nm}^{(1)} = B_{nm}^{(1)} = W_{n-m}(00; ff) \quad (4.19)$$

$$f_{nm}^{(2)} = B_{nm}^{(2)} = \frac{1}{2} [W_{n-m}(f_0; f_0) + W_{n-m}(v_f; v_f)] \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} f_{nm}^{(3)} = C_{nm}^{(3)} = \frac{1}{2} \left[W_{n-m}(f_0; ff) + W_{n-m}(vf; ff) - W_{n-m}(00; f_0) - \right. \\ \left. - W_{n-m}(00; vf) \right] \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} f_{nm}^{(4)} = \frac{1}{2} \left[W_{n-m}(00; 00) + W_{n-m}(ff; ff) - W_{n-m}(f_0; vf) - \right. \\ \left. - W_{n-m}(vf; f_0) \right] \end{aligned} \quad (4.22)$$

Za slučaj ugla rotacije bliskog $\pi/2$ formule glase:

$$\begin{aligned} H = H_0 + \Delta \sum_n Q_n^+ Q_n^- + \frac{1}{2} \sum_{n,m} f_{nm}^{(1)} (Q_n^+ Q_m^- + Q_n^- Q_m^+) + \\ + \sum_{n,m} f_{nm}^{(2)} Q_n^+ Q_m^- + \sum_{n,m} f_{nm}^{(3)} (Q_n^+ Q_m^+ Q_m^- + Q_n^+ Q_n^- Q_m^+) + \\ + \sum_{n,m} f_{nm}^{(4)} Q_n^+ Q_m^+ Q_m^- Q_n^- \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\Delta = W_0 + \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^r [W_e(\alpha_f; f_0) + W_e(f_0; \alpha_f)] + E_{nf} - E_{no} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} f_{nm}^{(1)} = W_{nm}(00; ff) - \frac{1}{2} [W_{n-m}(f_0; ff) + W_{m-n}(0f; ff) - \\ - W_{n-m}(00; fo) - W_{m-n}(00; of)] \end{aligned} \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} f_{nm}^{(2)} = \frac{1}{2} [W_{n-m}(fo; f_0) + W_{n-m}(of; of) + W_{n-m}(fo; ff) + \\ + W_{n-m}(of; ff) - W_{n-m}(00; fo) - W_{n-m}(00; of)] \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} f_{nm}^{(3)} = -\frac{5}{2} [W_{n-m}(fo; ff) + W_{m-n}(of; ff) - W_{n-m}(00; fo) - \\ - W_{n-m}(00; of)] \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} f_{nm}^{(4)} = \frac{1}{2} [W_{n-m}(00; 00) + W_{n-m}(ff; ff) - W_{n-m}(fo; of) - \\ - W_{n-m}(of; fo) - W_{n-m}(00; fo) + W_{n-m}(of; ff) + \\ + W_{n-m}(fo; ff)] \end{aligned} \quad (4.28)$$

Z A K L J U Č A K

Razmatrajući feroelektrik sa vodoničnim vezama kao sistem fermiona sa dvočestičnim interakcijama, i stabilizujući dobijeni Hamiltonijan, došli smo do sledećih rezultata:

- a) Ako su matični elementi dvočestičnih formionskih interakcija, koji odgovaraju parnom broju ekscitacija izolovanog fermiona, mnogo veći od matičnih elemenata, koji odgovaraju neparnom broju pobudjenja, onda se model Blinca i De-Žena onako kako je formulisan može smatrati dobar, jer izvesne male pogreške u energiji osnovnog stanja ne menjaju bitno karakter rezultata.
- b) U drugom graničnom slučaju, tj. ako neprva pobudjenja imaju dominantnu ulogu, onda kvazi-spinski model treba da pretrpi izmene. Energija osnovnog stanja se primetno menja i osim toga uloga članova koji odgovaraju procesima fuzije dve feroelektrične ekscitacije, ili raspadu jedne od njih na dve, postaje veoma značajna.

Na kraju, treba naglasiti da postupak koji je ovde izložen, može biti generalisan bez principijelnih teškoća i na multinivovsku fermionsku šemu. Ovakvo uopštavanje bi možda dalo objašnjenje i za pojave u feroelektricima, kod kojih kvazi-spinski model nepotpuno odražava stvarno fizičku sliku.



REFERENCE

1. J.C. Slater J. Chem. Phys. 9 16 (1941)
2. N. Tekunaga, T. Matsubara Progr. Theoret. Phys. 36,857 (1966)
3. Y. Takagi J. Phys. Soc. Japan 3.271 (1948)
4. P.G. De Gennes Solid State Commun 1.132 (1963)
5. R. Blinc J. Phys. Chem. Solid 13,204 (1960)
6. J. Pirenne Phusica 15 1019 (1949)
7. K.K. Kobayashi J. Phys. Soc. Japan 24,497 (1967)
8. J. Vilain S. Stamenković Phus. Stat. Sol. 15,585 (1966)
9. S. Stamenković L. Novaković Phus. Stat. Sol. 41,135 (1970)
10. Charles Kittel: Uvod u fiziku lvrstog stanja.