



Két-magnon kötött állapotok vizsgálata lapcentrált köbös rácson

Rudner László

Témavezető: Penc Karlo

Tudományos tanácsadó

Wigner Fizikai Kutatóközpont

Elméleti Szilárdtestfizika Osztály

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2023. november

Kivonat

Ismeretes, hogy egy anyag alacsony hőmérsékleti tulajdonságait, mint például a fajhőt vagy a szuszceptibilitást, a gerjesztései határozzák meg, továbbá az alapállapot természetére is utalnak. Ilyen gerjesztések mágneses rendszerekben a magnon gerjesztések. Az egy-magnon gerjesztésekkel ellentétben a két-magnon kötött állapotok pontos viselkedése kevésbé ismert, például hogy kondenzálódnak-e vagy milyen kölcsönhatás van a kötött állapotok között. A két-magnon kötött állapotok kondenzálódásával úgynevezett nematikus fázis jöhet létre, amelyben nem sérül az időtükrözés. Ezt a kérdést járta körül első- és másodszerű csatolású négyzet rácson egy nemrég megjelent cikk. [S. Jiang et al., *Phys. Rev. Lett.* **130**, 116701 (2023)]

A két dimenziós eredményen felbuzdulva érdekessé vált három dimenzióra kiterjeszteni, és egy konkrét rács, a lapcentrált köbös rács (FCC) esetében vizsgálni, hogy a két-magnon gerjesztéseknek milyen esetekben van kötött állapota az első- és másod- és harmadszomszéd kölcsönhatást tartalmazó Heisenberg modellben. Ehhez meghatározom az egy-magnon gerjesztési spektrumot, majd a két-magnon állapotokat a két lefordított spinű állapotok bázisában keresve felírom a Schrödinger-egyenletet, és az így kapott önkonzisztens egyenlet megoldásával keresem a két-magnon gerjesztéseket.

Tartalomjegyzék

Kivonat	i
1. Bevezetés	1
1.1. A lapcentrált köbös rács és a Hamilton operátorunk	1
1.2. Tisza-Luttinger módszer [1]	3
1.3. Az FCC rács alapállapotú fázisdiagramja	4
1.4. Egy-magnon diszperziós reláció	9
2. Számítások a két-magnon esetre	13
2.1. A két-magnon Schrödinger-egyenlet felírása	13
2.2. A két-magnon potenciáltként	18
2.3. A két-magnon Schrödinger-egyenlet megoldásának menete	20
3. Összefoglalás, kitekintés, távlatok	26

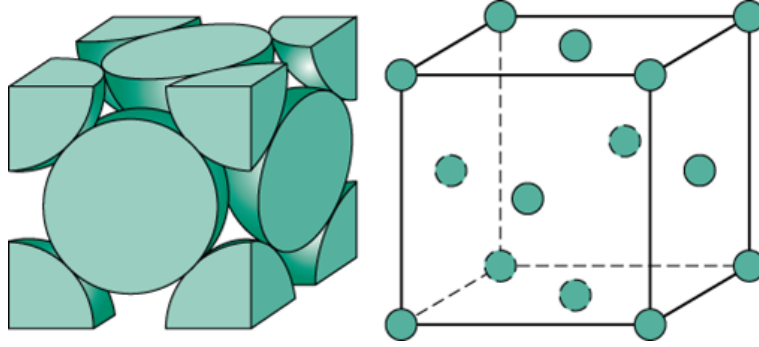
1. fejezet

Bevezetés

Ahhoz, hogy tüzetesebben vizsgálhassuk a két-magnon kötött állapotokat lapcentrált köbös (face-centered cubic, FCC) rácson, először meg kell ismernünk néhány fogalmat, valamint a rendszerünket, amire az egész számítás vonatkozik, illetve meg kell ismerkednünk a modellel, amivel számolunk. Ezek ennek a fejezetnek a részeként, a következőekben kerülnek felsorolásra.

1.1. A lapcentrált köbös rács és a Hamilton operátorunk

A lapcentrált köbös rács egy szoros kitöltésű Bravais-rács, melynek elemi celláját úgy szokás leírni, hogy veszünk egy kockát, melynek minden csúcsán van egy-egy rácspontunk, illetve a kocka minden lapjának a középpontján is van egy-egy rácspont, ez az a kanonikus leírás, melyből a rács neve is adódik. Az így kapott elemi cella csúcsaira azonban csak egynyolcad-egynyolcad rácspont esik, míg a lapokra csupán egykettő-egykettő, így az adott elemi cella összesen négy rácspontból áll. A lapcentrált köbös rács elemi cellájának kanonikus ábrázolását láthatjuk a [1.1.](#) ábrán is, ahol a fentiek jól láthatóak.

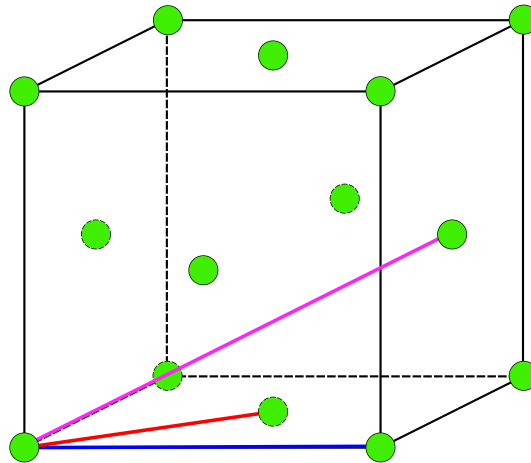


1.1. ábra. Az FCC rács elemi cellájának kanonikus ábrázolásai [2]

Az elemi cella élhosszúságát egységnyinek véve a lapcentrált köbös rácsot az alábbi elemi rácsvektorok feszítik ki:

$$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right); \mathbf{a}_2 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right); \mathbf{a}_3 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad (1.1)$$

Ezen vektorok segítségével könnyen felírhatóak az első-, másod- és harmadszomszédok, amelyekre a későbbiekben szükségünk lesz. A lapcentrált köbös rácsban egy rácspontnak 12 első szomszédja van, 6 másodszomszédja és 24 harmadszomszédja. Az, hogy mi is egy rácspont első-, másod- vagy harmadszomszédja, a 1.2. ábrán látható.



1.2. ábra. A lapcentrált köbös rács egy pontjának egy-egy első- (piros vonal), másod- (kék vonal) és harmadszomszédja (lila vonal)

A továbbiakban az n -ed rendű szomszédvektorokat $\delta_i^{(n)}$ -vel jelölöm, ahol i az egyes ugyanannyiad rendű szomszédvektorokat indexeli.

A számolásokhoz a Heisenberg modellt használtam, melyben a Hamilton operátor általános alakja a következő:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{n \in I} \sum_i \sum_{\mathbf{r}} J_n \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\delta_i^{(n)}} \quad (1.2)$$

Ahol az $\frac{1}{2}$ azért szükséges, mert az így leszámolt rácspont párok mindegyike kétszer kerül figyelembevételre a szummák alatt, az I pedig azon természetes számok halmaza, ahanyad rendű szomszédkölsönhatásokat figyelembe veszünk, $J_{\delta^{(n)}}$ az n -ed rendű szomszéd-kölsönhatáshoz tartozó csatolási konstans, $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}}$ pedig az $\mathbf{r}$ vektorral jellemzett rácsponthoz tartozó spin vektoroperátor.

Jelen dolgozatban azt az esetet vizsgáljuk, mely az első-, másod- és harmadszomszéd kölsönhatást tartalmazza izotrop csatolási konstanssal, melyeket rendre J_1 -gyel, J_2 -vel és J_3 -mal jelölünk, így a Hamilton operátorunk:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} J_1 \sum_{\mathbf{r}; \delta_i^{(1)}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\delta_i^{(1)}} + \frac{1}{2} J_2 \sum_{\mathbf{r}; \delta_i^{(2)}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\delta_i^{(2)}} + \frac{1}{2} J_3 \sum_{\mathbf{r}; \delta_i^{(3)}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\delta_i^{(3)}} \quad (1.3)$$

1.2. Tisza-Luttinger módszer [1]

A továbbiakban a Tisza-Luttinger módszer ezen dolgozat szempontjából releváns, specifikus esetét fogjuk tárgyalni, amikor is a rendszerünk egy Bravais-rács és a kölsönhatás izotrop. Ezen feltételek az 1.1. alfejezetben ismertetekkel egybevág, szóval tökéletesen megfelel számunkra ez a tárgyalásmód. A módszer azon alapszik, hogy transláció invariáns rendszerekben a Fourier-transzformáció sokszor segítségünkre van a vizsgálódások során.

Bizonyítás és levezetés nélkül csak ismertetem a használt állítást. Tekintsük az alábbi Fourier transzformációját a csatolási konstansunknak:

$$\mathcal{J}_{\mathbf{q}} = \sum_{\delta} J_{\delta} e^{-i\mathbf{q} \cdot \delta} \quad (1.4)$$

Az állítás a következő: ha vesszük az (1.4) egyenletben definiált Fourier-transzformált csatolási konstans folytonos kiterjesztését, melyet $\mathcal{J}(\mathbf{q})$ -val jelölök, akkor e függvény $\mathbf{Q}$ globális minimumhelye(i) alkotta sokaság egyértelműen meghatározza az alapállapot kva-

litatív mivoltát, pontosabban a $\mathbf{Q}$ vektor szerint rendeződik a spinrendszer.

Számunkra szintén releváns állítás, hogy Bravais-rácsok esetén ferromágneses fázisról akkor és csak akkor beszélünk, ha $\mathbf{Q} = 0$.

A globális minimumkeresés a szokott módon történik, tehát vesszük a $\mathcal{J}(\mathbf{q})$ gradiensét, megkeressük, hogy ez mikor a nullvektor, ezzel megkapjuk, hogy hol vannak stacionárius pontok. Majd a $\mathcal{J}(\mathbf{q})$ második deriváltjaiból képezett Hesse-mátrix mely stacionárius pontokban pozitív definit, ezzel megkapjuk, hogy hol vannak a lokális minimumok, végül ezen lokális minimumokban összehasonlítjuk, hogy a függvényértékek hol mekkorák, és így találhatjuk meg a globális minimumot.

1.3. Az FCC rács alapállapotú fázisdiagramja

Ebben az alfejezetben egy másik cikk eredményeit [3] reprodukálom. Az alapállapotú fázisdiagram meghatározásához az 1.2. alfejezetben bemutatott módszert használtam. A mi esetünkben a lapcentrált köbös rácsnak megfelelőek a szomszédvektorok, melyekkel harmadrendig megyünk el, ahogyan azt korábban is említettem. Ezek láthatóak az (1.3) egyenletben és az 1.2. ábrán. Ennek megfelelően az alábbi Fourier-transzformált csatolási konstansot kapjuk az (1.4) képletből:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_{\mathbf{q}} = & 2J_1 \left(\cos \frac{q_x + q_y}{2} + \cos \frac{q_x + q_z}{2} + \cos \frac{q_y + q_z}{2} + \cos \frac{q_x - q_y}{2} + \right. \\
& \left. + \cos \frac{q_x - q_z}{2} + \cos \frac{q_y - q_z}{2} \right) + 2J_2 (\cos q_x + \cos q_y + \cos q_z) + \\
& + 2J_3 \left(\cos \frac{2q_x + q_y + q_z}{2} + \cos \frac{q_x + 2q_y + q_z}{2} + \cos \frac{q_x + q_y + 2q_z}{2} + \right. \\
& + \cos \frac{2q_x - q_y + q_z}{2} + \cos \frac{q_x - 2q_y + q_z}{2} + \cos \frac{q_x - q_y + 2q_z}{2} + \\
& + \cos \frac{2q_x + q_y - q_z}{2} + \cos \frac{q_x + 2q_y - q_z}{2} + \cos \frac{q_x + q_y - 2q_z}{2} + \\
& \left. + \cos \frac{2q_x - q_y - q_z}{2} + \cos \frac{q_x - 2q_y - q_z}{2} + \cos \frac{q_x - q_y - 2q_z}{2} \right)
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Nos, az bizonyos, hogy az (1.5) egyenlet elég hosszú, de látszanak belőle a lapcentrált köbös rács szomszédsági viszonyai. Egyszerű algebrai és trigonometriai átrendezésekkel azonban leegyszerűsíthető az alábbi alakra:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_{\mathbf{q}} = & 4J_1 \left(\cos \frac{q_x}{2} \cos \frac{q_y}{2} + \cos \frac{q_x}{2} \cos \frac{q_z}{2} + \cos \frac{q_y}{2} \cos \frac{q_z}{2} \right) + \\
& + 2J_2 \left(\cos q_x + \cos q_y + \cos q_z \right) + 8J_3 \left(\cos q_x \cos \frac{q_y}{2} \cos \frac{q_z}{2} + \right. \\
& \left. + \cos \frac{q_x}{2} \cos q_y \cos \frac{q_z}{2} + \cos \frac{q_x}{2} \cos \frac{q_y}{2} \cos q_z \right)
\end{aligned} \tag{1.6}$$

Ennek a kifejezésnek a globális minimumát kell megkeresnünk. Először meg kell keresnünk a stacionárius pontokat, melyek a $\nabla_{\mathbf{q}}\mathcal{J}(\mathbf{q}) = 0$ egyenlet megoldásai, ahol $\mathcal{J}(\mathbf{q})$ a $\mathcal{J}_{\mathbf{q}}$ folytonos kiterjesztése. Szimmetria megfontolásokból ezeket a Brillouin-zóna szimmetrikus pontjaiba vagy szimmetrikus egyenesekre várjuk, a Brillouin-zóna pedig egy lapcentrált köbös rács esetében egy tércentrált köbös rács Wigner-Seitz cellája, melynek az 1.1. táblázatban láthatóak azon szimmetrikus pontjai, melyek stacionárius pontok lesznek, és az 1.2. táblázatban láthatjuk azon szimmetrikus egyeneseit, melyeken van stacionárius pont:

Jele	(q_x, q_y, q_z)	Degeneráció
Γ	$(0,0,0)$	1
X	$(2\pi, 0, 0)$	3
L	(π, π, π)	4
W	$(\pi, 2\pi, 0)$	6

1.1. táblázat. A lapcentrált köbös rács Brillouin-zónájának stacionárius pontot adó magas szimmetriájú pontjai

Jele	(q_x, q_y, q_z)	Degeneráció
Δ	$(q, 0, 0)$	3
Σ	$(q, q, 0)$	6
Λ	(q, q, q)	4

1.2. táblázat. A lapcentrált köbös rács Brillouin-zónájának stacionárius pontot tartalmazó magas szimmetriájú egyenesei

Ahol az 1.2. táblázatban a szimmetrikus egyenesek mentén csupán pár, maximum kettő stacionárius pont lehet, melyek egy-egy paraméterrel jellemezhetőek is, ahogyan az látszik a 1.2. táblázatból, amely paraméterek értéke a J_1, J_2, J_3 csatolási állandók nagyságától függ. Jelölje ezen paramétereket rendre q_{Δ} a Δ szimmetrikus egyenes, q_{Σ} a Σ szimmetrikus egyenes és q_{Λ} a Λ szimmetrikus egyenes esetén. Ekkor ezeket a paramétereket az alábbi egyenletek definiálják:

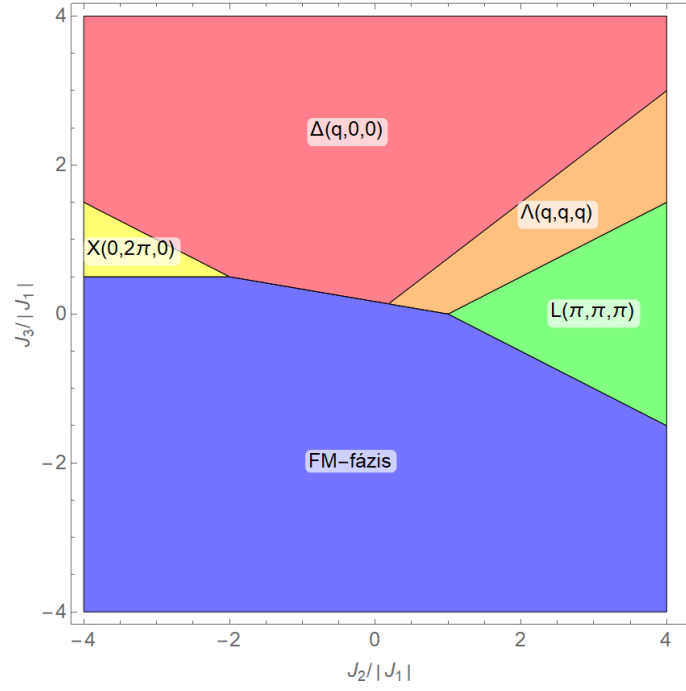
$$\cos q_\Delta = -\frac{J_1 + 2J_3}{J_2 + 4J_3} \quad (1.7)$$

$$\cos q_\Sigma = \frac{-J_1 - J_2 - J_3 \pm \sqrt{(J_1 + J_2 + J_3)^2 + 24J_3^2}}{12J_3} \quad (1.8)$$

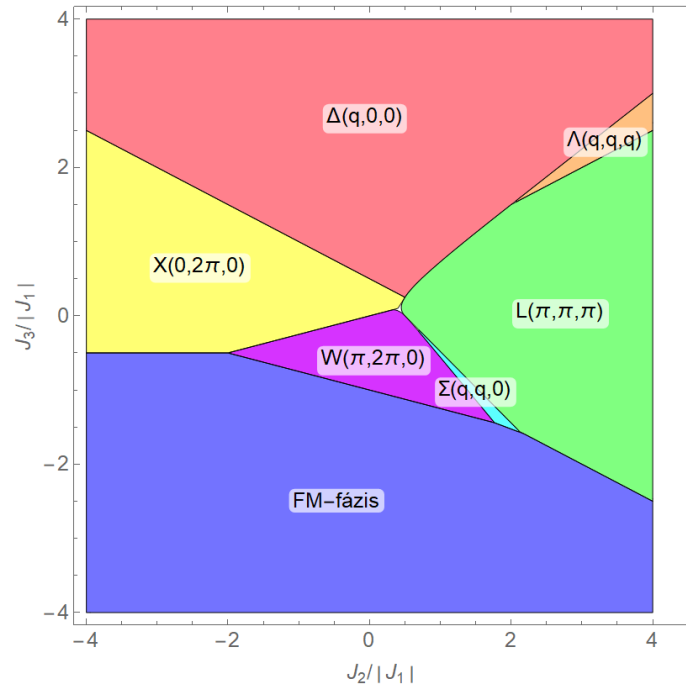
$$\cos q_\Lambda = \pm \sqrt{\frac{J_3 - J_1 - J_2}{6J_3}} \quad (1.9)$$

Miután a lehetséges stacionárius pontokat meghatároztam, kiszámítottam a Hesse-mátrixot, és megvizsgáltam, hogy milyen J_1 , J_2 , J_3 paraméter tartományokon lesz pozitív definit, azaz mikor lokális minimum az adott stacionárius pont. Miután ez meglett, a tartományoknak megfelelően az adott tartományon lokális minimumot adó összes pontban megvizsgáltam, hogy melyikre a legkisebb értékű a $\mathcal{J}(\mathbf{q})$, így megtaláltam a globális minimumot. Ezen globális minimumnak a helye határozza meg, hogy milyen fázisban vagyunk. A dolgozat szempontjából számunkra legfontosabb tartomány a ferromágneses tartomány, melyben akkor és csakis akkor van a rendszer, ha a $\mathcal{J}(\mathbf{q})$ globális minimumhelye a nullvektor, azaz ha a globális minimum a Γ pontban van. Ezt a fázist a továbbiakban ferromágneses fázisnak fogom ezért nevezni, és FM-mel jelölöm, a többi fázist pedig a globális minimumhelyhez tartozó szimmetrikus pont vagy egyenes jelével fogom jelölni.

Az egyszerűbb ábrázolhatóság kedvéért a fázisdiagramot úgy fogom kezelni, hogy mindent $|J_1|$ egységekben fogok mérni, és megkülönböztetem azt a két esetet, amikor a $J_1 = +1$ és $J_1 = -1$. Az így kapott fázisdiagramot a $J_1 = -1$ esetre az 1.3. ábrán, a $J_1 = +1$ esetre pedig az 1.4. ábrán ábrázoltam.



1.3. ábra. A lapcentrált köbös rács fázisdiagramja a $J_1 = -1$ esetre



1.4. ábra. A lapcentrált köbös rács fázisdiagramja a $J_1 = +1$ esetre

Mivel a dolgozat szempontjából nincs most jelentősége, ezért nem említem, hogy az egyes fázisok pontosan milyen alapállapottal jellemezhetőek, illetve hogy az egyes fázisok között hanyadrendű a fázisátalakulás, vagy hogy milyen speciális pontjai vannak. Azon-

ban érdekesek lehetnek a fázishatároknak az egyenletei, főleg a ferromágneses fázisé, ezért ezeket az 1.3. táblázatban gyűjtöttem össze.

Határ	Határ egyenlete $J_1 = -1$ esetén	Határ egyenlete $J_1 = +1$ esetén
Γ - X	$J_3 = \frac{1}{2}$	$J_3 = -\frac{1}{2}$
Γ - L	$J_3 = -\frac{1}{2}J_2 + \frac{1}{2}$	$J_3 = -\frac{1}{2}J_2 - \frac{1}{2}$
Γ - W	-	$J_3 = -\frac{1}{4}J_2 - 1$
Γ - Δ	$J_3 = -\frac{1}{6}J_2 + \frac{1}{6}$	-
Γ - Σ	-	$J_3 = -\frac{3}{23}J_2 - \frac{4}{23}\sqrt{6 + 5J_2 + 2J_2^2} - \frac{19}{46}$
Γ - Λ	$J_3 = -\frac{1}{6}J_2 + \frac{1}{6}$	-
X - L	-	$J_3 = \frac{3}{2}J_2 - \frac{1}{2}$
X - W	-	$J_3 = \frac{1}{4}J_2$
X - Δ	$J_3 = -\frac{1}{2}J_2 - \frac{1}{2}$	$J_3 = -\frac{1}{2}J_2 + \frac{1}{2}$
X - Σ	-	$J_3 = \frac{5}{7}J_2 - \frac{4}{7}\sqrt{2 - 3J_2 + 2J_2^2} - \frac{11}{14}$
L - Δ	-	$1 - J_2 - 2J_2^2 - 6J_3 + 12J_3^2 = 0$
L - Σ	-	(1.10) egyenlet alább
L - Λ	$J_3 = \frac{1}{2}J_2 - \frac{1}{2}$	$J_3 = \frac{1}{2}J_2 + \frac{1}{2}$
W - Σ	-	(1.11) egyenlet alább
Δ - Λ	$J_3 = \frac{3}{4}J_2$	$J_3 = \frac{3}{4}J_2$

1.3. táblázat. Az egyes fázishatárok egyenletei

Az 1.3. táblázatban a L - Σ határ és a W - Σ határ esetében azok egyenleteinek hosszúsága miatt nem a táblázatban tüntettem fel őket, hanem külön kifejtem az (1.10) és (1.11) egyenletekként alább:

$$1 + 3J_2 - 2J_2^2 - 12J_2^3 - 8J_2^4 - 64J_3 + 376J_3^2 - 768J_3^3 + 528J_3^4 +$$

$$+ 58J_2J_3 + 104J_2^2J_3 - 28J_2J_3^2 - 24J_2^3J_3 - 264J_2J_3^3 - 728J_2^2J_3^2 = 0 \quad (1.10)$$

$$J_2 + 2J_2^2 - 4J_2^3 - 8J_2^4 - 4J_3 + 200J_3^2 - 688J_3^3 + 608J_3^4 -$$

$$- 58J_2J_3 + 136J_2^2J_3 - 308J_2J_3^2 - 40J_2^3J_3 + 776J_2J_3^3 + 56J_2^2J_3^2 = 0 \quad (1.11)$$

Így végső soron mindent egybevéve ez a lapcentrált köbös rács fázisdiagramja az első-, másod- és harmadszomszéd csatolást tartalmazó Heisenberg modellben. Az irodalomban tárgyaltakkal ez teljesen egybevág. [3]

Az egyes fázishatárokról meg lehetne még állapítani esetleg a fázisátmenet típusát, azonban ez számunkra nem olyan érdekes most. Viszont megjegyzem, hogy vannak olyan fázisok, melyek magas szimmetriájú egyenesekhez tartoznak, és ha ezeknek a szomszédja egy olyan magas szimmetriájú ponthoz tartozó fázis, mely pontot az egyenes tartalmaz-

za, akkor az átmenet közöttük folytonos, és így másodrendű a fázisátalakulás. Ugyanez megtörténhet egymást metsző magas szimmetriájú egyenesekhez tartozó fázisokkal is, de ezek nem képezik a vizsgálódásaim tárgyát.

Végül megjegyezném az 1.4. ábrán található $J_1 = +1$ esethez tartozó fázisdiagrammal kapcsolatban, hogy itt a határok már nem egyenesek, ahogyan az látható is, illetve az 1.3. táblázatból is kiolvasható. Ebből kifolyólag sokkal kevésbé egyértelmű alakzatokat is felvehetnek a fázisok, azonban a kép közepe tájékán, a W , X és L magas szimmetriájú pontokhoz tartozó fázisok között nem egy hiba a folt, az ténylegesen hozzá tartozik a világoskékkel jelölt Σ ponthoz tartozó fázishoz.

1.4. Egy-magnon diszperziós reláció

A továbbiakban a vizsgálódásaimat a ferromágneses fázison belül fogom folytatni. Jól ismert tény, hogy a ferromágneses anyagok alapállapota az az állapot, amikor minden rácsponton ugyanazon irányba álló spinállapot van, ezt a továbbiakban $|FM\rangle$ -mel fogom jelölni, ezen alapállapot normált. Az alapállapot energiát az alábbi módon kaphatjuk meg:

$$E_0 = \langle FM | \hat{H} | FM \rangle = \frac{1}{2} S^2 N \sum_{\delta} J_{\delta} = \frac{1}{2} S^2 N \mathcal{J}_0 \quad (1.12)$$

Ahol a Hamilton operátort a (1.2) egyenlettel adjuk meg, tehát az általános alakban, S a rácspontokon található spinkvantumszám, N a rácspontok száma, a számoláshoz periodikus határfeltételt használok és $\mathcal{J}_q$ definícióját az (1.4) egyenlet adja meg.

A továbbiakban $|FM\rangle$ -et rögzítjük abban az állapotban, amikor minden rácsponton a maximális az S_z kvantumszám. A későbbi számításokhoz szükséges lesz a gerjesztett állapotok energiájára. A ferromágneses anyagokban első közelítésben az a legkisebb gerjesztés, amikor az alapállapotban az egyik rácsponton, legyen ez esetünkben a j . rácspont, eggyel csökkentjük az S_z -t. Ekkor az egy spin-fordítás a következőképpen írható le:

$$|j\rangle = \hat{S}_j^- |FM\rangle \quad (1.13)$$

Azonban $|j\rangle$ nem sajátállapota a Hamilton operátornak az $S_j^+ S_{j+\delta}^-$ tagok miatt, ezen segíthetünk a Fourier transzformálás segítségével:

$$|\psi_{\mathbf{q}}^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} \hat{S}_j^- |FM\rangle \quad (1.14)$$

A továbbiakban $|\psi_{\mathbf{q}}^{(1)}\rangle$ -ra úgy fogunk hivatkozni mint a $\mathbf{q}$ hullámszám vektorhoz tartozó magnon gerjesztés, ahogyan az bevett szokás a fizikában. Ezen állapot normanégyzete nem más, mint $\langle\psi_{\mathbf{q}}^{(1)}|\psi_{\mathbf{q}}^{(1)}\rangle = 2S$, ahogyan az könnyen kiszámítható.

A magnongerjesztés diszperziós relációja az alapállapothoz képest a következőképpen számítható:

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = E_{\mathbf{q}} - E_0 = \frac{\langle\psi_{\mathbf{q}}^{(1)}|\hat{H}|\psi_{\mathbf{q}}^{(1)}\rangle}{\langle\psi_{\mathbf{q}}^{(1)}|\psi_{\mathbf{q}}^{(1)}\rangle} - E_0 \quad (1.15)$$

Hogyha behelyettesítjük az (1.15) egyenletbe az (1.2) és (1.14) egyenleteket, illetve felhasználjuk a $|\psi_{\mathbf{q}}^{(1)}\rangle$ normanégyzetéről tett korábbi állításunkat, akkor a következőt kapjuk:

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = \frac{1}{4SN} \langle FM| \sum_{i,j,\mathbf{r},\delta} J_{\delta} e^{i(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\mathbf{q}} \hat{S}_i^+ \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\delta} \hat{S}_j^- |FM\rangle - E_0 \quad (1.16)$$

Az (1.16) egyenletben a bra és ket állapotokat bevéve a szumma belsejébe és a spin vektoroperátorok szorzatát felbontva komponensekre a következőt kaphatjuk:

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = \sum_{i,j,\mathbf{r},\delta} \frac{J_{\delta} e^{i(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\mathbf{q}}}{4SN} \langle FM| \hat{S}_i^+ \left(\hat{S}_{\mathbf{r}}^z \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^z + \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^+ \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^- + \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^+ \right) \hat{S}_j^- |FM\rangle - E_0 \quad (1.17)$$

Az (1.17) egyenletben az egyes tagok a következőképpen alakulnak:

$$\hat{S}_i^+ \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^z \hat{S}_j^- = \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^z - \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- \left(\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^z + \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \right) \quad (1.18)$$

$$\langle FM| \hat{S}_i^+ \hat{S}_{\mathbf{r}}^+ \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^- \hat{S}_j^- |FM\rangle = 4S^2 \left(\delta_{i,j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}} + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} \right) = 4S^2 \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} \quad (1.19)$$

$$\langle FM| \hat{S}_i^+ \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^+ \hat{S}_j^- |FM\rangle = 4S^2 \left(\delta_{i,j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}} + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \right) = 4S^2 \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \quad (1.20)$$

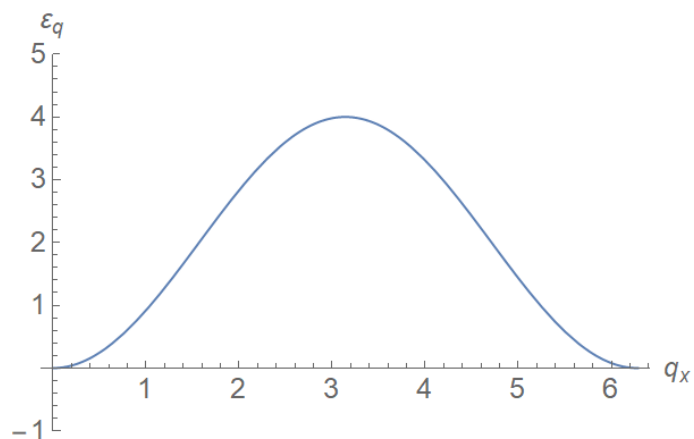
Az (1.17) egyenletben ilyen sorrendben írva az operátorokat az $\hat{S}^z$ operátorok hatnak az $|FM\rangle$ állapoton, és annak S szerezését adják vissza, míg az $\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^-$ tagok $2S\delta_{i,j}$ -t adnak vissza az $|FM\rangle$ állapotban vett várható értékben. Az (1.17) egyenletbe behelyettesítve az (1.18), (1.19) és (1.20) egyenleteket, figyelembe véve a most említetteket és kiértékelve a szummát az alábbi eredményt kapjuk:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{4SN} \left(\frac{1}{2} 4S^2 N \mathcal{J}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} 4S^2 N \mathcal{J}_{-\mathbf{q}} + 4S^2 N \mathcal{J}_0 + 2S^3 N^2 \mathcal{J}_0 \right) - E_0 = \\ &= S(\text{Re}(\mathcal{J}_{\mathbf{q}}) - \mathcal{J}_0) = S \text{Re}(\mathcal{J}_{\mathbf{q}} - \mathcal{J}_0)\end{aligned}\tag{1.21}$$

Ahol az (1.21) egyenlet utolsó előtti lépésében felhasználtuk a Fourier-transzformált azon tulajdonságát, hogy $-\mathbf{q}$ -ban a $\mathbf{q}$ -beli érték komplex konjugáltját veszi fel, az utolsó lépésben pedig, hogy $\mathcal{J}_0$ valós, mivel minden csatolási konstans valós. A későbbiekben a valós jelölést elhagyhatjuk, mert a lapcentrált köbös rácson az (1.4) egyenlettel definiált Fourier-transzformált valós lesz, hiszen minden szomszédvektornak a mínusz egyszerese is ugyanannyiad rendű szomszédvektor:

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = S(\mathcal{J}_{\mathbf{q}} - \mathcal{J}_0)\tag{1.22}$$

Ezzel tehát megkaptuk általános, ferromágneses tartományban levő anyag egy-magnon diszperziós relációját. Ez megegyezik az irodalomban [4][5] is használt, de sokszor levezetés nélkül szereplő kifejezéssel, azzal a különbséggel, hogy a valós rész vételét nem szokták szerepeltetni.



1.5. ábra. Az egymagnon diszperziós reláció a $\mathbf{q}$ tér $\Delta(q,0,0)$ szeletén $J_1 = -1$, $J_2 = -3$, $J_3 = 0,5$ értékek mellett

Az egymagnon diszperziós reláció a Brillouin-zóna $\Delta(q,0,0)$ egyenese mentén a 1.5. ábrán látható. A képen az látható, hogy mivel az FM- X fázishatárról választottam a csatolási konstans értékeket, ennek következményeképp, nem csak a $\Gamma(0,0,0)$ pontban, hanem az $X(2\pi,0,0)$ pontban is globális minimuma van a diszperziós relációnak.

2. fejezet

Számítások a két-magnon esetre

2.1. A két-magnon Schrödinger-egyenlet felírása

Az 1.4. alfejezetben tárgyalt egy-magnon állapotok ortogonális rendszert alkotnak, és bázist képeznek az állapottér egy-részecske szektorában. Azt gondolhatnánk, hogy a két-részecske állapotok szektorához lehet alkotni közvetlen módon egy bázist az egy-magnon bázisállapotok segítségével, ez azonban a spin operátorok nem-kommutativitása miatt nem így van. [6] Emiatt szükségünk van egy közvetlenül két-részecske állapotokból álló bázisra. [7] A következőekben először ennek megkonstruálásán fogunk dolgozni.

Keressük a két-részecske állapotokat az (1.13) egyenlet analógjaként a következő alakban:

$$|ij\rangle = \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- |FM\rangle \quad (2.1)$$

A (2.1) egyenlet azonban a továbbiakban sem sajátállapota a Hamilton operátornak, és nem is adja vissza a transláció invarianciát, amit persze várnánk tőle. Így újra a Fourier transzformációhoz nyúlunk, mely ezúttal egy $\mathbf{k}$ és egy $\mathbf{k}'$ momentumú kvázirészecskét fog reprezentálni, és a következőképpen írható:

$$|\psi_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{(2)}\rangle = \frac{1}{2N} \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}_j} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- |FM\rangle \quad (2.2)$$

Ahol az $\frac{1}{2}$ faktorra azért van szükség, mert kettőször számoltuk le a lehetséges $|ij\rangle$ állapotokat.

Azonban a (2.2) egyenletnek sokkal szerencsésebb felírása, ha úgynevezett tömegközépponti rendszerből vizsgálódunk, ekkor ugyanis a translációs invariancia megjelenik abban, hogy hattatva a transláció operátort az állapoton az csak egy $e^{-i\mathbf{K}}$ szorzófaktort hoz be, ahol $\mathbf{K}$ maga az összipulzus. Felírva tehát a $\mathbf{k}$ és $\mathbf{k}'$ impulzusokat a $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ összipulzus felétől való $\mathbf{q}$ eltérés segítségével azt kapjuk, hogy $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{q}$ és $\mathbf{k}' = \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{q}$. Ezzel:

$$|\psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q})\rangle = \frac{1}{2N} \sum_{i,j} e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- |FM\rangle \quad (2.3)$$

A (2.3) egyenletben megadott állapotra ha felírjuk az (1.2) egyenletben definiált általános alakú Hamilton operátor segítségével a Schrödinger egyenletet, akkor a következőt kapjuk:

$$E |\psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q})\rangle = \frac{1}{4N} \sum_{i,j,\delta,\mathbf{r}} J_{\delta} e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\delta_i} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- |FM\rangle \quad (2.4)$$

Mivel az (1.2) egyenletben megadott általános alakú Hamilton operátort használjuk, ezért az eredményünk is igaz lesz minden Bravais-rácsra. Persze miután megkaptuk az általános két-magnon Schrödinger egyenletünket, azután a lapcentrált köbös rácsra fogjuk alkalmazni ebben a dolgozatban.

A (2.4) egyenlet továbbírásához megint csak felbontjuk a spin vektoroperátorok skáláris szorzatát a komponensek szerint, és használva a kommutációs relációkat, az alábbi kifejezést kapjuk a (2.4) egyenlet operátoraira:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\delta_i} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- &= \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^z - \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^z - \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- \hat{S}_{\mathbf{r}}^z - \\ &- \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^z - \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- \hat{S}_{\mathbf{r}}^z + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- + \\ &+ \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^+ \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^- \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- + \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^+ \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- \end{aligned} \quad (2.5)$$

A (2.5) összefüggést felhasználva a (2.4) egyenletben, és kihasználva, hogy az $\hat{S}^z$ operátornak S sajátértékkel az $|FM\rangle$ állapot sajátvektora, a következő egyenletet kapjuk:

$$\begin{aligned}
E \left| \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q}) \right\rangle &= \frac{1}{4N} \sum_{i,j,\delta,\mathbf{r}} J_{\delta} e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} \left[S^2 \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- - S \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- - \right. \\
&\quad - S \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- - S \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- - S \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- + \\
&\quad \left. + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- + \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^+ \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^- \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- + \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^+ \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- \right] |FM\rangle
\end{aligned} \tag{2.6}$$

A (2.6) egyenletben az S^2 -es tagra elvégezve a szummát az eredeti $\left| \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q}) \right\rangle$ állapot E_0 szorosát kapjuk vissza, továbbá a $\frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^+ \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^- \hat{S}_j^- \hat{S}_i^-$ és a $\frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_{\mathbf{r}+\delta}^+ \hat{S}_j^- \hat{S}_i^-$ tagok csak akkor nem viszik 0-ba a $|FM\rangle$ állapotot, ha $\mathbf{r}+\delta = \mathbf{r}_i$ vagy $\mathbf{r}+\delta = \mathbf{r}_j$, amikor is a két megfelelő operátor együttesen csupán az $|FM\rangle$ állapotot $2S$ -sel szorozzák. Ekkor:

$$\begin{aligned}
(E - E_0) \left| \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q}) \right\rangle &= \frac{1}{4N} \sum_{i,j,\delta,\mathbf{r}} J_{\delta} e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} \times \\
&\quad \times \left[\left(\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \right) \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- - S \left(\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} + \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} + \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \right) \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- + \right. \\
&\quad \left. + 2S \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_i^- \delta_{\mathbf{r}-\delta,\mathbf{r}_j} + 2S \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_j^- \delta_{\mathbf{r}-\delta,\mathbf{r}_i} + 2S \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_i^- \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} + 2S \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_j^- \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} \right] |FM\rangle
\end{aligned} \tag{2.7}$$

A (2.7) egyenletbeli összeg utolsó négy tagja a következőképpen viselkedik, a négy közül az első példáján bemutatva:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{4N} \sum_{i,j,\delta,\mathbf{r}} J_{\delta} e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} 2S \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_i^- \delta_{\mathbf{r}-\delta,\mathbf{r}_j} |FM\rangle = \\
&= \frac{1}{4N} \sum_{i,\delta,\mathbf{r}} J_{\delta} e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}-\delta+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\delta-\mathbf{r}_i)} 2S \frac{1}{2} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_i^- |FM\rangle = \\
&= \frac{1}{4N} S \sum_{\delta} J_{\delta} e^{-i\delta(-\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q})} \sum_{i,\mathbf{r}} e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)} \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_i^- |FM\rangle = \\
&= \frac{1}{2} S \mathcal{J}_{-\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}} \left| \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q}) \right\rangle
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Felhasználva a (2.8) egyenletet, illetve szintén felhasználva a Fourier-transzformált azon tulajdonságát, hogy az argumentuma előjelváltására a komplex konjugáltjára változik az értéke, valamint összeadva a másik három tag járulékait is és az (1.21) összefüggést használva a következő egyenletre jutunk:

$$\begin{aligned}
& (E - E_0 - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}} - 2S\mathcal{J}_0) |\psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q})\rangle = \\
& = \frac{1}{4N} \sum_{i,j,\delta,\mathbf{r}} J_\delta e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} \left[\left(\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \right) \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- - \right. \\
& \quad \left. - S \left(\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} + \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} + \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \right) \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- \right] |FM\rangle
\end{aligned} \tag{2.9}$$

A (2.9) egyenlet S -sel arányos tagjában a $\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i}$ -t és $\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j}$ -t tartalmazó tagok felett elvégezve a $\mathbf{r}$ szummát mindkét esetben $-\frac{1}{2}S\mathcal{J}_0$ -t kapunk, azaz a kettő együtt egy $-S\mathcal{J}_0$ járulékot ad az összeghez, ezt mindkét oldalból kivonhatjuk. Az érvelés hasonló a $\delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i}$ -t és $\delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j}$ -t tartalmazó tagok esetén is, mert nem lényeges, hogy el van-e tolva az $\mathbf{r}$ egy adott δ -val vagy pedig sem, hiszen a Kronecker-delta így is úgy is csak egy értékre ad 1-et, minden más pedig független $\mathbf{r}$ -től. Így az egyenletünk a következőképpen módosul:

$$\begin{aligned}
& (E - E_0 - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}}) |\psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q})\rangle = \\
& = \frac{1}{4N} \sum_{i,j,\delta,\mathbf{r}} J_\delta e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} \left(\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \right) \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- |FM\rangle
\end{aligned} \tag{2.10}$$

A (2.10) egyenletben vigyázni kell a szummák elvégzésekor, hogy amikor az $\hat{S}_i^-$ vagy $\hat{S}_j^-$ alsó indexében megjelenik a δ , akkor a Kronecker-delta által meghagyott szummában ki kell használni a δ -val való eltolási invarianciát. Ezt a következőképpen lehet összefoglalni:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i,j,\mathbf{r}} e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} \left(\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_j} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_i} + \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_i} \delta_{\mathbf{r}+\delta,\mathbf{r}_j} \right) \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- = \\
& = \sum_{i,j} \left(e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)+i\mathbf{q}\delta} \delta_{\mathbf{r}_j+\delta,\mathbf{r}_i} + e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)+i\mathbf{q}\delta} \delta_{\mathbf{r}_j-\delta,\mathbf{r}_i} - \right. \\
& \quad \left. - e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i-\delta)-i\mathbf{q}\delta} \delta_{\mathbf{r}_j,\mathbf{r}_i} - e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i-\delta)+i\mathbf{q}\delta} \delta_{\mathbf{r}_j,\mathbf{r}_i} \right) \hat{S}_j^- \hat{S}_i^-
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Ahol (2.11) egyenlet jobb oldalán átneveztem a megmaradó $\mathbf{r}$ indexet úgy, hogy látványos maradjon a továbbiakban is az ij -s jelölés. Ezen felül mivel az (2.10) egyenlet jobb oldalán látszik, hogy valamilyen konvolúció eredménye, a Kronecker-deltákat a következőképpen érdemes felírni:

$$\delta_{\mathbf{r}_j,\mathbf{r}_i} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} \tag{2.12}$$

Felhasználva a (2.11) és (2.12) egyenleteket a (2.10) egyenlet átrendezéséhez, illetve E_2 -nek nevezve az E_0 -tól mért két-magnon energiát, az alábbi eredményt kapjuk:

$$\begin{aligned}
(E_2 - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}}) |\psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q})\rangle &= \frac{1}{4N^2} \sum_{\delta, i, j, \mathbf{p}} J_{\delta} \times \\
&\times \left(e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i+\delta)+i\mathbf{q}\delta} + e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i-\delta)+i\mathbf{q}\delta} - \right. \\
&- e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i-\delta)-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)-i\mathbf{q}\delta} - e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i-\delta)-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)+i\mathbf{q}\delta} \Big) \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- |FM\rangle = \\
&= \frac{1}{4N^2} \sum_{\delta, i, j, \mathbf{p}} J_{\delta} \left(e^{i\delta(\mathbf{q}-\mathbf{p})} + e^{i\delta(\mathbf{q}+\mathbf{p})} - e^{i\delta(\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q})} - e^{i\delta(\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q})} \right) \times \\
&\times e^{-i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}_j+\mathbf{r}_i)-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)} \hat{S}_j^- \hat{S}_i^- |FM\rangle
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Vezessük be továbbá a következő mennyiséget, melyet később magyarázok:

$$V_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathcal{J}_{\mathbf{q}-\mathbf{p}} + \mathcal{J}_{\mathbf{q}+\mathbf{p}} - \mathcal{J}_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}} - \mathcal{J}_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}} \tag{2.14}$$

A (2.14) egyenleten látszik, hogy mivel az (1.6) egyenletben megadott $\mathcal{J}_{\mathbf{q}}$ egy valós függvény, ezért a Fourier transzformáció tulajdonságait is kihasználva igazak a következők: $V_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = V_{\mathbf{K}}(-\mathbf{q}, \mathbf{p}) = V_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}, -\mathbf{p}) = V_{-\mathbf{K}}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$.

Az (1.4), (2.3) és (2.14) egyenletekben megadott mennyiségek felhasználásával átírhajuk a (2.13) egyenletet a következőképpen, elhagyva a ket jelölést:

$$(E_2 - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}}) \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}} V_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{p}) \tag{2.15}$$

Ez a kifejezés egybevág az irodalomban [5] ismert, gyakran levezetés nélkül közölt eredménnyel. Az (2.15) egyenletből látszik a legjobban, hogy a $V_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ fizikai jelentése nem más, mint valamilyen potenciálszerű mennyiség. Ezen potenciáltként (2.14) egyenletben megadott alakjában az első két szereplő tag a részecskék egymáson való szóródásának kezdeti és végállapotai közötti impulzus átviteltől függ, míg az utolsó két tag csak a részecskék impulzusától. Ez utóbbi tag a spin lefordítások taszításából származik.

A (2.15) egyenlet egy kompakt, jól érthető és elegáns felírása a kétrészecske Schrödinger-egyenletnek. A továbbiakban ezen egyenlet megoldásán fogunk dolgozni a lapcentrált köbös rácson az első-, másod- és harmadszomszéd-kölcsönhatást tartalmazó Heisenberg

modellben.

2.2. A két-magnon potenciáhtag

A (2.14) egyenletben megadott potenciáhtag fontos szerepet tölt be a kétrészecske Schrödinger-egyenletben, viszont ha a $\mathcal{J}_{\mathbf{q}}$ -t a mi esetünkre definiáló (1.6) egyenletre nézünk, rögtön láthatjuk, hogy egyben nagyon problémás is a potenciáhtag. Annak érdekében, hogy könnyebben kezelhetővé váljon, érdemes parciális hullámokra bontani, melyeket $\gamma_{\mathbf{q}}^{\mu}$ -vel fogok jelölni, ahol μ indexeli a parciális hullám típusát.

Ha megnézzük a (2.14) egyenletet, akkor látjuk, hogy az lenne a legszerencsésebb számunkra, ha $\gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}^{\mu} + \gamma_{\mathbf{q}+\mathbf{p}}^{\mu}$ tagok felírhatóak lennének $\gamma_{\mathbf{q}}^{\mu'} \gamma_{\mathbf{p}}^{\mu'}$ tagok szorzataival. Trigonometriai megfontolásokat követve az alábbi parciális hullámokat vezettem be:

$$\begin{aligned}\gamma_{\mathbf{q}}^{s_{\alpha\beta}} &= \cos \frac{q_{\alpha}}{2} \cos \frac{q_{\beta}}{2} \\ \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{\alpha\beta}} &= \sin \frac{q_{\alpha}}{2} \sin \frac{q_{\beta}}{2} \\ \gamma_{\mathbf{q}}^{a_{\alpha}} &= \cos q_{\alpha} \\ \gamma_{\mathbf{q}}^{b_{\alpha,\beta\delta}} &= \cos q_{\alpha} \cos \frac{q_{\beta}}{2} \cos \frac{q_{\delta}}{2} \\ \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{\alpha,\beta,\delta}} &= \sin q_{\alpha} \sin \frac{q_{\beta}}{2} \cos \frac{q_{\delta}}{2}\end{aligned}\tag{2.16}$$

Ahol α , β és δ helyére x , y vagy z írható, azzal a konvencióval, hogy a vessző nélkül írtak mindig ABC sorrendben követik egymást, a vesszővel elválasztottak sorrendje viszont számít. Ezen parciális hullámok lineárisan független rendszert alkotnak. A parciális hullámok típus indexei közül az $s_{\alpha\beta}$ és a $d_{\alpha\beta}$ kanonikus jelölés, melyet a szupravezetéssel foglalkozók használnak gyakran, az a_{α} , a $b_{\alpha,\beta\delta}$ és a $c_{\alpha,\beta,\delta}$ pedig csak az én munkajelölésem, egyelőre nem keresek nekik a $d_{\alpha\beta}$ -hoz hasonlatos jelölést, mert nincs jelentősége számunkra.

A (2.16) egyenletekre trigonometrikus összefüggésekből következően igazak az alábbiak:

$$\begin{aligned}\gamma_{\mathbf{q}+\mathbf{p}}^{s_{\alpha\beta}} + \gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}^{s_{\alpha\beta}} &= 2\gamma_{\mathbf{q}}^{s_{\alpha\beta}} \gamma_{\mathbf{p}}^{s_{\alpha\beta}} + 2\gamma_{\mathbf{q}}^{d_{\alpha\beta}} \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{\alpha\beta}} \\ \gamma_{\mathbf{q}+\mathbf{p}}^{a_{\alpha}} + \gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}^{a_{\alpha}} &= 2\gamma_{\mathbf{q}}^{a_{\alpha}} \gamma_{\mathbf{p}}^{a_{\alpha}} \\ \gamma_{\mathbf{q}+\mathbf{p}}^{b_{\alpha,\beta\delta}} + \gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}^{b_{\alpha,\beta\delta}} &= 2\gamma_{\mathbf{q}}^{b_{\alpha,\beta\delta}} + \gamma_{\mathbf{p}}^{b_{\alpha,\beta\delta}} + 2\gamma_{\mathbf{q}}^{a_{\alpha}} \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{\beta\delta}} \gamma_{\mathbf{p}}^{a_{\alpha}} \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{\beta\delta}}\end{aligned}\tag{2.17}$$

Továbbá a (2.16) egyenletek által definiált parciális hullámok alkalmasak arra is, hogy átírjuk vele az (1.6) Fourier-transzformált csatolási állandót is, amely így az alábbi alakot veszi fel:

$$\mathcal{J}_{\mathbf{q}} = 4J_1 \left(\gamma_{\mathbf{q}}^{s_{xy}} + \gamma_{\mathbf{q}}^{s_{xz}} + \gamma_{\mathbf{q}}^{s_{yz}} \right) + 2J_2 \left(\gamma_{\mathbf{q}}^{d_x} + \gamma_{\mathbf{q}}^{d_y} + \gamma_{\mathbf{q}}^{d_z} \right) + 8J_3 \left(\gamma_{\mathbf{q}}^{b_{x,yz}} + \gamma_{\mathbf{q}}^{b_{y,xz}} + \gamma_{\mathbf{q}}^{b_{z,xy}} \right) \quad (2.18)$$

A parciális hullámokkal így egy kompaktabb alakban felírható a potenciáhtag, ha a (2.14) egyenletbe beírjuk a megfelelő momentum indexekkel a (2.18) egyenletet, és felhasználjuk a (2.17) azonosságokat, az így kapott potenciál a következőképpen írható:

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = & 8J_1 \left[\gamma_{\mathbf{q}}^{s_{xy}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{s_{xy}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{s_{xy}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{s_{xz}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{s_{xz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{s_{xz}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{s_{yz}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{s_{yz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{s_{yz}} \right) + \right. \\ & \left. + \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{xy}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{d_{xy}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{xy}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{xz}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{d_{xz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{xz}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{yz}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{d_{yz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{yz}} \right) \right] + \\ & + 4J_2 \left[\gamma_{\mathbf{q}}^{a_x} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{a_x} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_x} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{a_y} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{a_y} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_y} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{a_z} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{a_z} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_z} \right) \right] + \\ & + 16J_3 \left[\gamma_{\mathbf{q}}^{b_{x,yz}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{b_{x,yz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{b_{x,yz}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{b_{y,xz}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{b_{y,xz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{b_{y,xz}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{b_{z,xy}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{b_{z,xy}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{b_{z,xy}} \right) + \right. \\ & + \gamma_{\mathbf{q}}^{a_x} \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{yz}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{a_x} \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{yz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_x} \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{yz}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{a_y} \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{xz}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{a_y} \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{xz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_y} \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{xz}} \right) + \\ & \left. + \gamma_{\mathbf{q}}^{a_z} \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{xy}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{a_z} \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{xy}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_z} \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{xy}} \right) + \right. \\ & + \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{x,y,z}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{c_{x,y,z}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{x,y,z}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{x,z,y}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{c_{x,z,y}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{x,z,y}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{y,x,z}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{c_{y,x,z}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{y,x,z}} \right) + \\ & \left. + \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{y,z,x}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{c_{y,z,x}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{y,z,x}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{z,x,y}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{c_{z,x,y}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{z,x,y}} \right) + \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{z,y,x}} \left(\gamma_{\mathbf{p}}^{c_{z,y,x}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{z,y,x}} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.19)$$

Első ránézésre a (2.19) egyenlet nagyon hosszú, de még így is kompaktabb, mint az eredeti lenne, hiszen a parciális hullám jelölés koszinuszok és szinuszok szorzatát jelöli, ráadásul az azonosságoknak és összevonásoknak köszönhetően még tovább rövidült. Azonban ennél is lehet kompaktabbul megfogalmazni, ha észrevesszük a (2.19) egyenletbeli strukturáltságot.

Vezessük be a következő jelöléseket: ha $\mu = \{s_{xy}, s_{xz}, s_{yz}, d_{xy}, d_{xz}, d_{zy}, a_x, a_y, a_z, b_{x,yz}, b_{y,xz}, b_{z,xy}, a_x d_{yz}, a_y d_{xz}, a_z d_{xy}, c_{x,y,z}, c_{x,z,y}, c_{y,x,z}, c_{y,z,x}, c_{z,x,y}, c_{z,y,x}\}$, akkor legyen rendre $V_{\mu} = \{8J_1, 8J_1,$

$8J_1, 8J_1, 8J_1, 8J_1, 4J_2, 4J_2, 4J_2, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3, 16J_3\}$, továbbá $R_\mu(\mathbf{q}) = \{\gamma_{\mathbf{q}}^{s_{xy}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{s_{xz}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{s_{yz}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{xy}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{xz}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{yz}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{a_x}, \gamma_{\mathbf{q}}^{a_y}, \gamma_{\mathbf{q}}^{a_z}, \gamma_{\mathbf{q}}^{b_{x,yz}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{b_{y,xz}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{b_{z,xy}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{a_x} \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{yz}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{a_y} \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{xz}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{a_z} \gamma_{\mathbf{q}}^{d_{xy}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{x,y,z}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{x,z,y}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{y,x,z}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{y,z,x}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{z,x,y}}, \gamma_{\mathbf{q}}^{c_{z,y,x}}\}$ és $\tilde{R}_\mu(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{K}}{2}) = R_\mu(\mathbf{p}) - R_\mu(\frac{\mathbf{K}}{2}) = \{\gamma_{\mathbf{p}}^{s_{xy}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{s_{xy}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{s_{xz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{s_{xz}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{s_{yz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{s_{yz}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{xy}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{xy}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{xz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{xz}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{yz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{yz}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{a_x} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_x}, \gamma_{\mathbf{p}}^{a_y} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_y}, \gamma_{\mathbf{p}}^{a_z} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_z}, \gamma_{\mathbf{p}}^{b_{x,yz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{b_{x,yz}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{b_{y,xz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{b_{y,xz}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{b_{z,xy}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{b_{z,xy}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{a_x} \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{yz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_x} \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{yz}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{a_y} \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{xz}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_y} \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{xz}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{a_z} \gamma_{\mathbf{p}}^{d_{xy}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_z} \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{xy}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{c_{x,y,z}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{x,y,z}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{c_{x,z,y}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{x,z,y}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{c_{y,x,z}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{y,x,z}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{c_{y,z,x}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{y,z,x}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{c_{z,x,y}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{z,x,y}}, \gamma_{\mathbf{p}}^{c_{z,y,x}} - \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{z,y,x}}\}$. Ezen jelöléssel felírva a potenciált a következő alakot kapjuk:

$$V_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{\mu} V_{\mu} R_{\mu}(\mathbf{q}) \tilde{R}_{\mu}(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{K}}{2}) \quad (2.20)$$

2.3. A két-magnon Schrödinger-egyenlet megoldásának menete

A 2.1. alfejezetben levezettem a (2.15) egyenletben leírt két-magnon Schrödinger-egyenletet, ezen egyenlet megoldásával fogok ebben az alfejezetben foglalkozni. Az egyenlet a (2.20) összefüggés felhasználásával a következőképpen néz ki:

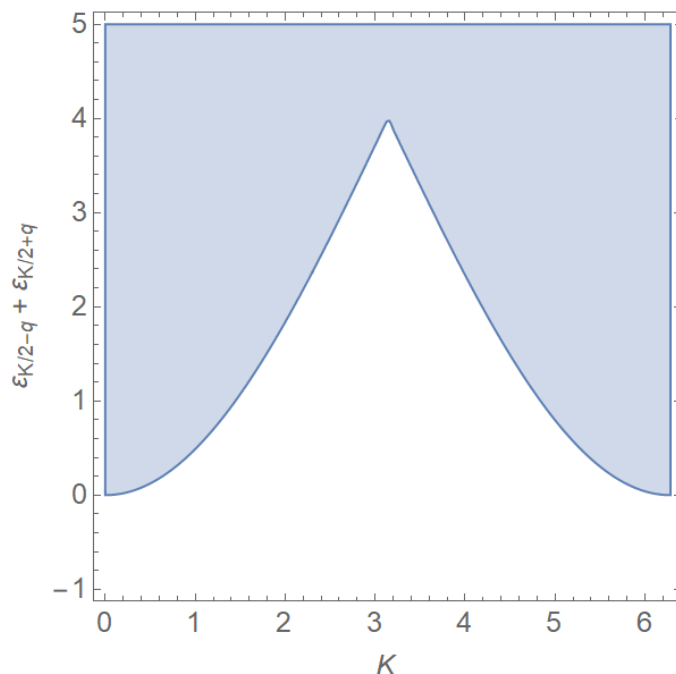
$$(E_2 - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}}) \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}, \mu} V_{\mu} R_{\mu}(\mathbf{q}) \tilde{R}_{\mu}(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{K}}{2}) \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{p}) \quad (2.21)$$

Keressük a két-magnon energiát úgy, hogy hol helyezkedik el az egy-magnon kontinuum aljához képest. Ehhez legyen $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ az a pont, ahol adott $\mathbf{K}$ összipulzus esetén a két független magnon összenergiájának a minimuma van, amely energia alá kettő magnon együttesen úgy jut, ha van valamilyen pozitív kötési energiájuk, mely egy részecskére jutó részét jelöljük Δ -val. Ekkor:

$$E_2 = \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{Q}} + \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{Q}} - 2\Delta \quad (2.22)$$

Hogy a fentebb elhangzottakat jobban megértsük, vegyük szemügyre a 2.1. ábrát, melyen a kétmagnon kontinuumot ábrázoltam a $\mathbf{K}$ összipulzus tér speciális szeletén, a Brillouin-zóna $(\Gamma-X)(q,0,0)$ magas szimmetriájú egyenes mentén (azért váltottam ennek az egyenesnek a jelölését, hogy ne legyen összezavaró a kötési energia miatt), amely a Γ és az X magas szimmetriájú pontok között húzódik, és egy adott J_1, J_2, J_3 értékhármásra.

Ezen kontinuumnak a globális minimuma a Γ és X pontokban van, később visszatérek rá, hogy miért. Egy adott $\mathbf{K}$ értékre az ábrán láthatjuk, hogy milyen értékű az $\varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{Q}} + \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{Q}}$, és ehhez képest vagyunk kíváncsiak, hogy a kötött állapot energiája mennyivel fekszik mélyebben.



2.1. ábra. A kétmagnon kontinuum a $\mathbf{K}$ összipulzus tér $\mathbf{K}(K,0,0)$ szeletén $J_1 = -1$, $J_2 = -3$, $J_3 = 0,5$ értékek mellett

Vezessük be továbbá a következő jelölést:

$$\Delta E_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}) = E_2 - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}} = -2\Delta - \left(\varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{Q}} \right) - \left(\varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{Q}} \right) \quad (2.23)$$

A (2.21) Schrödinger-egyenletben az energiát átírva (2.23) alakba és átrendezve azt az alábbi önkonzisztens egyenletet kapjuk:

$$\psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}, \mu} \frac{V_{\mu} R_{\mu}(\mathbf{q}) \tilde{R}_{\mu}(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{K}}{2})}{\Delta E_{\mathbf{K}}(\mathbf{q})} \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{p}) \quad (2.24)$$

A (2.24) önkonzisztens egyenlettel a következőképpen bánjunk el: vezessük be a következő $S_{\mu}(\frac{\mathbf{K}}{2})$ mennyiséget a $\mathbf{p}$ feletti szummára, ekkor:

$$\psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \frac{V_{\mu} R_{\mu}(\mathbf{q}) S_{\mu}(\frac{\mathbf{K}}{2})}{\Delta E_{\mathbf{K}}(\mathbf{q})} \quad (2.25)$$

Ahol:

$$S_{\mu}(\frac{\mathbf{K}}{2}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \tilde{R}_{\mu}(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{K}}{2}) \psi_{\mathbf{K}}^{(2)}(\mathbf{p}) \quad (2.26)$$

Helyettesítsünk vissza (2.26) egyenletbe (2.25) egyenlettel, és így megkapjuk a következő egyenletet:

$$S_{\mu}(\frac{\mathbf{K}}{2}) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}, \mu'} \frac{V_{\mu'} R_{\mu'}(\mathbf{p}) \tilde{R}_{\mu}(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{K}}{2})}{\Delta E_{\mathbf{K}}(\mathbf{p})} S_{\mu'}(\frac{\mathbf{K}}{2}) \quad (2.27)$$

Ezen a ponton érdemes nyilatkozni a $\mathbf{K}$ értékeiről. Azt várjuk, hogy kötött két-magnon párok először ott alakul ki, ahol a $\mathbf{K}$ összipulzusuk a rács Brillouin-zónájának magas szimmetriájú pontja. A fázishatárokon vizsgálódva azt tapasztaljuk, hogy egy-egy pontban az eredetivel azonos értékű minimum mutatkozik valamely magas szimmetriájú pontban, azaz egy másik globális minimum. Ha pont ezen ponton mutatkozik kötött állapot, azaz az alapállapot energiánál kisebb energiájú állapot, az instabilizálja az adott fázist. Ezt könnyen megérthetjük, ha visszatekintünk a 2.1. ábrára, ugyanis látható, hogy a két-magnon kontinuum két globális minimumhelyénél az összenergia éppen nulla. A 2.1. ábra éppen azon csatolási konstans értékek mellett készült, amely a ferromágneses J_1 mellett az FM- X határon van, lásd: 1.3. ábra. Így ha az X pontban például kötött két-magnon pár keletkezhet, az instabilizálná a ferromágneses állapotot.

Fázisonként eltér, hogy hol van az egy-magnon energia $\mathbf{Q}$ minimumhelye, ezért fázisonként eltér az is, hogy ezen magas szimmetriájú pontok közül melyekben van ténylegesen kötött állapot és melyekben nem.

Az alábbiakban a $\mathbf{K} = 0$ szektort vizsgálom meg csupán a korábban említett $J_1 = -1$, $J_2 = -3$, $J_3 = 0,5$ csatolási konstansok esetén, de a számítás menete nem sokban tér el a többi szektorban sem. Most a ferromágneses fázison belül vizsgálódunk, ekkor $\mathbf{Q} = 0$, a minimális energia pedig $\varepsilon_{\mathbf{Q}} = 0$. Továbbá bevezetem a $C_{\mu} = S_{\mu}(0)$ jelölést. A $\mathbf{K} = 0$ szektorban továbbá igaz, hogy $\gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{d_{\alpha\beta}} = 0 = \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{c_{\alpha,\beta,\delta}}$ és $\gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{s_{\alpha\beta}} = \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{a_{\alpha}} = \gamma_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^{b_{\alpha,\beta\delta}} = 1$, ennek megfelelően kap értéket $\tilde{R}_{\mu'}(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{K}}{2})$ is. Ekkor:

$$C_\mu = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}, \mu'} \frac{V_{\mu'} R_{\mu'}(\mathbf{p}) \tilde{R}_\mu(\mathbf{p}, 0)}{\Delta E_0(\mathbf{p})} C_{\mu'} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\tilde{R}_\mu(\mathbf{p}, 0)}{\Delta E_0(\mathbf{p})} \sum_{\mu'} V_{\mu'} R_{\mu'}(\mathbf{p}) C_{\mu'} \quad (2.28)$$

A (2.28) egyenletből látható, hogy így 21 darab csatolt egyenletünk van. De mivel az egyenletben a $\mathbf{p}$ feletti szumma során a $\mathbf{p}$ a Brillouin-zónabeli impulzusvektorokon megy végig, ezért lesznek olyan csatornák, melyekre az egyenletek részben vagy teljesen szétcsatolódnak a többitől. Mivel $\Delta E_0(\mathbf{p})$ páros függvény, ezért ha $R_{\mu'}(\mathbf{p})$ és $\tilde{R}_\mu(\mathbf{p}, 0)$ paritása eltér, akkor a $\mathbf{p}$ feletti, Brillouin-zónán vett szummázás során a szorzatuk eltűnik. Ezen mechanizmus mentén az alábbi csoportok csatolódnak szét: $\{d_{xy}, c_{x,y,z}, c_{y,x,z}\}, \{d_{xz}, c_{x,z,y}, c_{z,x,y}\}, \{d_{zy} c_{y,z,x}, c_{z,y,x}\}$ és $\{s_{xy}, s_{xz}, s_{zy}, a_x, a_y, a_z, b_{x,yz}, b_{y,xz}, b_{z,xy}, a_x d_{yz}, a_y d_{xz}, a_z d_{xy}\}$.

A négy imént felsorolt halmaz közül az utolsó, a leghosszabb, már nem csatolódik szét jobban, ennél fogva a megoldása bonyolult, hiszen lényegében egy 15×15 -ös mátrixot kell megvizsgálni, hogy a sajátértéke milyen Δ értékek esetében lesz 1. Azonban mindezen felül egyáltalán nem garantált, hogy lesz ilyen pozitív Δ , és a kötött állapotok keresése során a pozitív kötési energiákban vagyunk érdekeltek, egyéb esetben nem vagyunk az kétrészecske kontinuum alatt. Konkrét számolás helyett ezért ebben az esetben gondoljuk át a következőket: az egyenletek közötti csatolási mátrixról elmondható, hogy akkor lesz a sajátértéke az egy, ha a mátrixból kivonva az identitást egy szinguláris, azaz egy null determinánsú mátrixot kapunk. Ez a determináns egyenlet általános J_1, J_2, J_3 esetén akkor teljesül, ha a diagonális elemek mind eggyel egyenlőek a csatolási mátrixban. Ez azonban elég ritka esetben teljesíthető egyáltalán, de főleg ritkán pozitív Δ értékekkel, hiszen abban az esetben a nevező a szumma belsejében tisztán negatív.

Ezért foglalkozunk a három darab, egyesével három elemből álló halmazzal! Ezekre a megoldás roppant hasonló, ezért csak az egyikkel foglalkozok most, ez pedig a $\{d_{xy}, c_{x,y,z}, c_{y,x,z}\}$. Mivel ezen elemekre igaz, hogy $R_\mu(\mathbf{p}) = \tilde{R}_\mu(\mathbf{p}, 0)$, de V_μ nem ugyanaz a d_{xy} -re, mint $c_{x,y,z}$ -re vagy $c_{y,x,z}$ -re, ezért az egyenletek csatolását leíró mátrix nem lesz szimmetrikus, de konstans szorzó van a felsőháromszög és az alsó háromszög transzponáltja között. Felírva pedig a következőt kapjuk:

$$\begin{pmatrix} i_{11} & i_{12} & i_{13} \\ i_{21} & i_{22} & i_{23} \\ i_{31} & i_{32} & i_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{d_{xy}} \\ C_{c_{x,y,z}} \\ C_{c_{y,x,z}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{d_{xy}} \\ C_{c_{x,y,z}} \\ C_{c_{y,x,z}} \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

Ahol a mátrixelemeket a következő egyenletek adják meg:

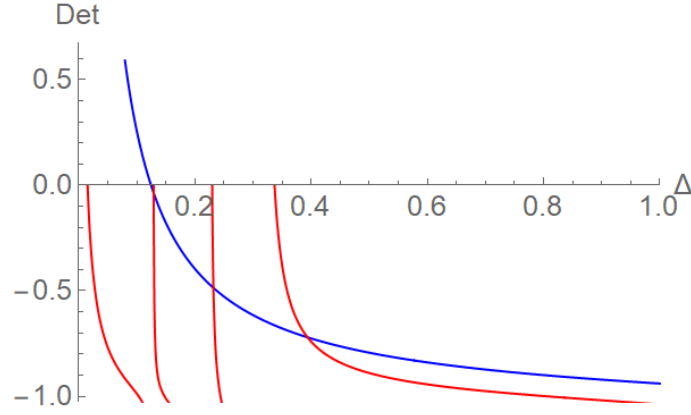
$$i_{ab} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{V_{\mu'} R_{\mu'}(\mathbf{p}) \tilde{R}_{\mu}(\mathbf{p}, 0)}{\Delta E_0(\mathbf{p})} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{V_{\mu'} R_{\mu'}(\mathbf{p}) \tilde{R}_{\mu}(\mathbf{p}, 0)}{-2\Delta - 2\varepsilon_{\mathbf{p}}} \quad (2.30)$$

Ahol $\mu; \mu' = \{d_{xy}, c_{x,y,z}, c_{y,x,z}\}$ esetén rendre $a; b = \{1, 2, 3\}$, és $i_{ab} \neq i_{ba}$, de $i_{ab} = \frac{V_{\mu}}{V_{\mu'}} i_{ba}$. Az egyenlet pedig, amit a mátrixnak ki kell elégítenie, hogy a sajátértéke legyen az 1 a következő:

$$\begin{aligned} & (i_{11} - 1)(i_{22} - 1)(i_{33} - 1) + i_{12}i_{23}i_{31} + i_{13}i_{21}i_{32} - \\ & - i_{13}(i_{22} - 1)i_{31} - i_{12}i_{21}(i_{33} - 1) - (i_{11} - 1)i_{23}i_{32} = 0 \end{aligned} \quad (2.31)$$

Ezen a ponton minden eszközünk, ismeretünk és egyenletünk megvan ahhoz, hogy ha veszünk egy konkrét J_1, J_2, J_3 értékhármast, akkor arra elvégezhezzük a megfelelő numerikus számítást, még ha az ezekkel a megfontolásokkal lassú is lenne. A $\mathbf{K} = 0$ szektorra $J_1 = -1, J_2 = -3, J_3 = 0,5$ csatolási konstansok esetén elvégeztem a fentebb levezetett egyenletek segítségével a megfelelő numerikus számításokat, és azt kaptam, hogy nem alakul ki itt két-magnon kötött állapot. Azonban a fentebbiekhez nagyon hasonlóan levezettem a megfelelő összefüggéseket a $\mathbf{K} = (2\pi, 0, 0)$, azaz az X pontra, és ugyanezen csatolási konstansokra, azaz az FM- X fázishatár ugyanezen pontján azt kaptam, hogy kialakul kötött állapot, még hozzá $\Delta = 0,12(9)$ kötési energiával, ahol az energiát J_1 egységekben mérjük.

A 2.2. ábrán az látható, ahogyan a (2.31) egyenlettel analóg, de $\mathbf{K} = (2\pi, 0, 0)$ pontra vonatkozó determinánst kiszámoltam egy $16 \times 16 \times 16$ rácsra (piros vonal) és egy $8 \times 8 \times 8$ rácsra (kék vonal), és megkerestem, hogy hol éri el a nullát. Több megoldás valószínűleg a véges méret miatt van, és végtelen rendszerre ezek eltűnnének, kivétel az a zérushely, amely több méretben is zérushely, amely a kötött állapothoz tartozó kötési energiának felel meg.



2.2. ábra. a (2.31) egyenlettel analóg determináns kiszámolva egy $16 \times 16 \times 16$ rácstra (piros vonal) és egy $8 \times 8 \times 8$ rácstra (kék vonal) $\mathbf{K} = (2\pi, 0, 0)$ szektorban $J_1 = -1$, $J_2 = -3$, $J_3 = 0,5$ értékek esetén. Látható, hogy egy közel közös pozitív értékben metszik a nullát, ez a kötött két-magnon pár egy részecskére jutó kötési energiája.

Csupán megemlítem továbbá, hogy egy lehetséges analitikus továbbvitele a problémának a (2.30) egyenlet közelítése az egy-magnon minimum körül, ekkor ugyanis $\Delta E_0(\mathbf{p}) \approx -2\Delta - \frac{\mathbf{p}^2}{m_{eff}}$, ahol m_{eff} az effektív tömeg, amelynek vehetem az egyszerű reciprokát, mert esetünkben az (1.21) egyenlet második deriváltja a $\mathbf{Q} = 0$ -ban az identitás konstans szorzosa, tehát egy skalár, nevezetesen $m_{eff} = -2J_1 - 2J_2 - 12J_3$, amely a ferromágneses tartományban egy pozitív szám, lásd: 1.3. táblázat, illetve 1.3. és 1.4. ábra.

Ha közelítjük ilyes módon a (2.30) egyenletünket, akkor a számláló pedig arányos lesz $p_x^2 p_y^2$ -tel. A szummáról áttérve integrálásra, és a Brillouin-zónát egy Λ sugarú gömbbel közelítve az integrál eredménye egy jól definiált függvénye Δ -nak, melyet már, a konstansokra is ügyelve, behelyettesíthetünk a (2.31) egyenletbe, mely így már algebrai, de közelítő egyenlet lesz Δ -ra. Ez egyelőre csak megemlítésre kerül itt, további vizsgálatokat igényelne.

3. fejezet

Összefoglalás, kitekintés, távlatok

Összefoglalásképpen először általános megállapításokat tettem egy általános alakú Hamilton-operátorról, majd konkrétan rátértem a lapcentrált köbös rács tárgyalására. Először a Tisza-Luttinger módszer segítségével megalkottam az első-, másod- és harmadszomszéd csatolást tartalmazó Heisenberg modell fázisdiagramját, majd a ferromágneses tartományon belül vizsgálódva általános alakú Hamilton operátorra levezettem az egy-magnon diszperziós relációt és a két-magnon Schrödinger-egyenletet. Majd a Schrödinger-egyenletben megjelenő potenciálgot számoltam ki a konkrét lapcentrált köbös rácsra, és ezt felbontottam parciális hullámokra a későbbi számítások érdekében. Végül ennek segítségével megadtam a módszert arra, hogy hogyan lehet kiszámolni a két-magnon kötött állapotok kötés energiáját.

A dolgozat kiterjeszthetőségéről szólva pedig számos érdekességet lehetne vizsgálni még, ami jelen dolgozatba nem fért bele. Például megvizsgálni a parciális hullámokat, hogy melyik milyen irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódik a pontcsoportunknak. A $\mathbf{K} = 0$ szektoron kívül minden más magas szimmetriájú pontra is ki lehetne terjeszteni a számolásokat, esetleg ott például máshogy csatolódnak-e szét az egyes csatornák, vagy kialakulhat-e egyáltalán ott bárminemű kötött állapot. Egy érdekesség lehetne tüzetesebben szemügyre venni a szét-nem-csatolódot csatornákat is, ennek esetleg valamilyen szimmetriákban kódolt okát is meg lehetne keresni, persze ha létezik ilyen. Végezetül, hogy csak még egy lehetőséget megemlítek, az egyes fázishatárokon meg lehetne nézni a magnon stabilitást, és hogy milyen jellegű rendeződés megy végbe a határokon, vagy akár a számításokat kiterjeszteni más fázisokra is.

Ábrák jegyzéke

1.1. Az FCC rács elemi cellájának kanonikus ábrázolásai [2]	2
1.2. A lapcentrált köbös rács egy pontjának egy-egy első- (piros vonal), második- (kék vonal) és harmadszomszédja (lila vonal)	2
1.3. A lapcentrált köbös rács fázisdiagramja a $J_1 = -1$ esetre	7
1.4. A lapcentrált köbös rács fázisdiagramja a $J_1 = +1$ esetre	7
1.5. Az egymagnon diszperziós reláció a $\mathbf{q}$ tér $\Delta(q,0,0)$ szeletén $J_1 = -1$, $J_2 = -3$, $J_3 = 0,5$ értékek mellett	12
2.1. A kétmagnon kontinuum a $\mathbf{K}$ összipulzus tér $\mathbf{K}(K,0,0)$ szeletén $J_1 = -1$, $J_2 = -3$, $J_3 = 0,5$ értékek mellett	21
2.2. a (2.31) egyenlettel analóg determináns kiszámolva egy $16 \times 16 \times 16$ rácsra (piros vonal) és egy $8 \times 8 \times 8$ rácsra (kék vonal) $\mathbf{K} = (2\pi,0,0)$ szektorban $J_1 = -1$, $J_2 = -3$, $J_3 = 0,5$ értékek esetén. Látható, hogy egy közel közös pozitív értékben metszik a nullát, ez a kötött két-magnon pár egy részecskére jutó kötési energiája.	25

Irodalomjegyzék

- [1] J. Luttinger and L. Tisza, „Theory of dipole interaction in crystals,” *Physical Review*, vol. 70, no. 11-12, p. 954 – 964, 1946. [Online]. Available: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-36149006618&doi=10.1103%2fPhysRev.70.954&partnerID=40&md5=31c3b396e04f6af393954fa8a771f819>
- [2] „Fcc elemi cella,” <https://www.toppr.com>.
- [3] P. Balla, „Extended ground state manifolds of classical heisenberg magnets and magnetoelectric selection rules in åkermanites,” Ph.D. dissertation, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Természettudományi Kar, Fizikai Tudományok Doktori Iskola, 2022.
- [4] S. Jiang, J. Romhányi, S. R. White, M. E. Zhitomirsky, and A. L. Chernyshev, „Where is the quantum spin nematic?” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 130, p. 116701, Mar 2023. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.130.116701>
- [5] M. E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu, „Magnon pairing in quantum spin nematic,” *Europhysics Letters*, vol. 92, no. 3, p. 37001, nov 2010. [Online]. Available: <https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/92/37001>
- [6] R. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures*, 1st ed. Boca Raton: CRC Press., 1998. [Online]. Available: <https://dx.doi.org/10.1201/9780429493034>
- [7] M. Wortis, „Bound states of two spin waves in the heisenberg ferromagnet,” *Phys. Rev.*, vol. 132, pp. 85–97, Oct 1963. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.132.85>