

D-336

Природно-математички факултет  
Радна заједница заједничких послова'

НОВИ САД

|                          |       |         |          |
|--------------------------|-------|---------|----------|
| Примљена: 22. nov. 1995. |       |         |          |
| Орг. јед.                | Број  | Пријест | Вредност |
| 0603                     | 9/220 |         |          |

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ  
ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ

МЕТОД ГРИНОВИХ ФУНКЦИЈА  
У ТЕОРИЈИ ПОЛУБЕСКОНАЧНИХ МАГНЕТИКА  
СА ДВЕ ПОДРЕШЕТКЕ

дипломски рад

Milica Pavkov

mentor: Dr Mario Škrinjar

НОВИ САД, НОВЕМБАР 1995.

## **Sadržaj**

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Uvod</b>  | <b>1</b>  |
| <b>1 Površinske ekscitacije</b>  | <b>2</b>  |
| 1.1 Eksperimentalne metode . . . . .   | 4         |
| <b>2 Magnetizacija i elementarne ekscitacije u polubeskonačnom Hajzenbergovom feromagnetu</b>  | <b>9</b>  |
| <b>3 Površinske ekscitacije u polubeskonačnom ferimagnetiku i antiferomagnetiku sa bikvadratnom interakcijom – slučaj proste kubne strukture</b> | <b>18</b> |
| <b>4 Analiza dobijenih rezultata</b>   | <b>34</b> |
| <b>Literatura</b>  | <b>36</b> |

## Uvod

U poslednjih tridesetak godina proučavanje osobina površina čvrstih tela i tečnosti doživelo je veliki razvoj. Jedan deo aktivnosti bio je usmeren na proučavanje akustičkih, magnetnih i optičkih fenomena koji se dešavaju na površinama pošto imaju veliki broj zajedničkih osobina, na primer, često su okarakterisane amplitudom koja eksponencijalno opada sa udaljenošću od površine. Teorijsko opisivanje površinskih pojava može biti dato u dva nivoa. Prvi je fenomenološki (makroskopski) koji polazi od određenih eksperimentalnih činjenica i ugrađuje ih u izraze za termodi- namičke veličine odakle se onda može predviđati dalje ponašanje [1]. Drugi pristup je mikroskopski i on se zasniva na mikroskopskim modelima inter- akcije među česticama. U tom pristupu razlikujemo dve metode. Prvo, metodom jednačina kretanja mogu se odrediti disperzione relacije za ele- mentarne ekscitacije kao i njihove amplitude ( na primer promena amplitude sa udaljenošću od površine ). Drugo, rešenje može biti nađeno metodom Grinovih funkcija. Ovaj metod je teži, ali daje kompletniju informaciju, jer pored energija elementarnih ekscitacija njime možemo odrediti parametre uređenosti sistema ( na primer magnetizaciju, polarizaciju,...), kompleksne susceptibilnosti sistema (u okviru teorije linearog odziva), kao i korelacione funkcije koje su povezane sa parametrima rasejanja različitih čestica na datim sistemima.

Cilj ovog diplomskog rada je da metodom Grinovih funkcija ispitamo spektar površinskih ekscitacija Hajzenbergovih feromagnetika sa bikvadratnom interakcijom i jednojonskom anizotropijom sa spinom  $S \geq 1$  [2] – [4]. Konkretno, posmatramo polubeskonačan kristal sa dve podrešetke sa prostom kubnom strukturu (ferimagnetici i antiferomagneticci) sa bikvadratnom interakcijom i jednojonskom anizotropijom.

Kako posmatramo površinske ekscitacije, u prvom poglavlju dat je kratak teorijski prikaz ovih pojava kao i eksperimentalne metode koje se koriste za proučavanje osobina ekscitacija u blizini površina. U drugom poglavlju na najjednostavnijem primeru Hajzenbergovog feromagneta prikazan je uticaj površine na magnetizaciju sistema i na elementarne ekscitacije. Kompletan račun za površinske ekscitacije u magneticima sa mnogo složenijom strukturom i Hamiltonijanom koji sadrži i nehajzenbergovske članove spinskih interakcija dat je u trećem poglavlju. U poslednjem poglavlju analizirani su i komentarisani dobijeni rezultati i njihova primena na neke konkretnе slučajeve.



## 1 Površinske ekscitacije

Površine i međupovršine (dodirne površine između dva medijuma sa datim fizičkim osobinama, od kojih nijedan nije vakuum) menjaju osobine čvrstih tela i tečnosti pri čemu se javljaju različiti efekti. Prvo, može doći do modifikacije u odnosu na ravnotežnu konfiguraciju u medijumu blizu površine: ovo je poznato kao površinska rekonstrukcija. Na primer, atomi blizu površine mogu imati drugačije kristalografsko uređenje u poređenju sa onim u zapremini, ili mogu biti neuređeni. Drugi primer je feromagnetik, u kojem se međusobna interakcija magnetnih momenata na površini razlikuje od one u zapremini, što dovodi do različite vrednosti magnetizacije.

Drugo, ekscitacije unutar sistema (kao što su fononi u dinamici kristalne rešetke ili magnoni u feromagnetu) se menjaju usled efekta površine. U beskonačnom medijumu elementarne ekscitacije u sistemu predstavljaju ravne talase koji se prostiru u tri dimenzije. Kada je prisutan efekat površine eksitacije u sistemu moraju zadovoljavati odgovarajuće granične uslove. Zbog toga će se menjati gustina stanja eksitacija u sistemu, kao i njihova frekvenca. Jedan od najinteresatnijih efekata površine jeste pojava lokalizovanih površinskih eksitacija. Za razliku od eksitacija u zapremini, površinske eksitacije imaju oblik ravnih talasa kada se posmatraju u ravnima paralelним sa površinom dok im amplituda opada sa udaljenosću od površine.

Ovo ćemo ilustrovati pomoću sledećeg jednostavnog primera. Uzmimo da površina leži u ravni  $z = 0$  Dekartovog koordinatnog sistema. Neka debljina kristala i njegove dimenzije u  $x$  i  $y$  pravcu budu toliko velike (praktično beskonačne) da se može smatrati da kristal ispunjava polovicu prostora  $z \leq 0$ . Zanemaruјemo površinsku rekonstrukciju i površinu kristala smatramo "idealnom".

Ako je orientacija površine u odnosu na ose kristala takva da su dva od osnovnih vektora translacije (recimo  $\mathbf{a}_1$  i  $\mathbf{a}_2$ ) paralelna sa površinom, dok  $\mathbf{a}_3$  nije, tada skup translacija  $\mathbf{R}_{\parallel}$  definisan vektorima

$$\mathbf{R}_{\parallel} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (1)$$

gde su  $n_1$  i  $n_2$  celi brojevi, predstavlja simetrijske operacije kristala. Operacije translacije koje uključuju i  $\mathbf{a}_3$ , nisu operacije simetrije: ne ostavljaju kristal naizgled nepromenjenim, jer povezuju tačke koje imaju drugačiji položaj u odnosu na površinsku ravan. Krajnje tačke skupa vektora  $\mathbf{R}_{\parallel}$  formiraju dvodimenzionalnu prostornu rešetku.

Za odgovarajuću dvodimenzionalnu recipročnu rešetku postoje dva osnovna vektora  $\mathbf{b}_1$  i  $\mathbf{b}_2$ . Oni su definisani kao vektori u  $xy$  ravni koji zadovoljavaju:

$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2). \quad (2)$$

Dakle, bilo koji vektor  $\mathbf{Q}_{||}$  ove recipročne rešetke se može izraziti kao:

$$\mathbf{Q}_{||} = \nu_1 \mathbf{b}_1 + \nu_2 \mathbf{b}_2 \quad (3)$$

gde su  $\nu_1$  i  $\nu_2$  celi brojevi.

Za fizičku veličinu  $f(\mathbf{r})$  zbog translacione simetrije samo u  $xy$  ravni važi sledeća relacija:

$$f(\mathbf{r}_{||} + \mathbf{R}_{||}, z) = f(\mathbf{r}_{||}, z) \quad (4)$$

gde je  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{||}, z)$  položaj vektora u tri dimenzije, a  $\mathbf{r}_{||} = (x, y)$ . Pomoću osobina vektora dvodimenzionalne recipročne rešetke i periodičnosti rešetke u  $xy$  ravni možemo definisati dvodimenzionalni Furije razvoj kao:

$$f(\mathbf{r}_{||}, z) = \sum_{\mathbf{Q}_{||}} F(\mathbf{Q}_{||}, z) \exp(i\mathbf{Q}_{||}\mathbf{r}_{||}) \quad (5)$$

Blohova teorema u dvodimenzionalnom slučaju postaje:

$$\psi(\mathbf{r}_{||}, z) = \exp(i\mathbf{k}_{||}\mathbf{r}_{||}) U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{||}, z) \quad (6)$$

gde je  $\mathbf{k}_{||} = (k_x, k_y)$  dvodimenzionalni vektor, a  $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{||}, z)$  periodična funkcija koja zadovoljava  $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{||} + \mathbf{R}_{||}, z) = U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{||}, z)$ . Nije moguće koristiti simetrijske argumente da bi dobili stroga tvrdjenja o zavisnosti funkcije  $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{||}, z)$  od koordinate  $z$  normalne na površinu. Često se ova zavisnost u svakom specifičnom problemu nalazi pomoću diferencijalne jednačine za  $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{||}, z)$ ; ovo bi bila Šredingerova jednačina u slučaju elektronskih stanja ili odgovarajuća jednačina kretanja u slučajevima drugih eksitacija. Prilikom rešavanja diferencijalne jednačine moraju se uzeti u obzir odgovarajući granični uslovi; u ovom primeru, to su uslovi na površini  $z = 0$  i  $z \rightarrow -\infty$ . Pretpostavimo da diferencijalnu jednačinu za polubeskonačni medijum zadovoljavaju rešenja oblika  $\exp(ik_z^{(j)} z)$  gde  $k_z^{(j)}$  može biti kompleksni broj i uzima niz vrednosti (obeleženih sa  $j$ ) određenih iz diferencijalne jednačine. Rešenje za  $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{||}, z)$  može se formirati kao linearana kombinacija ovakvih članova:

$$U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{||}, z) = \sum_j B_{\mathbf{k}}^{(j)}(\mathbf{r}_{||}) \exp(ik_z^{(j)} z) \quad (7)$$

gde je  $B_{\mathbf{k}}^{(j)}(\mathbf{r}_{||})$  amplitudni faktor. Zbog desne strane jednačine koja mora ostati konačna i na velikim udaljenostima od površine ( $z \rightarrow -\infty$ ) ,  $k_z^{(j)}$  može biti realan ili kompleksan broj sa  $Im(k_z^{(j)}) < 0$ .

Prva mogućnost odgovara ekscitacijama u zapremini , pošto  $\exp(ik_z^{(j)}z)$  ima konstantan moduo za sve vrednosti  $z$ . Veličina  $k_z^{(j)}$  je treća komponenta trodimenzionalnog vektora  $\mathbf{k} = (k_{||}, k_z^{(j)})$  koja opisuje prostiranje ekscitacija u obliku ravnih talasa.

Druga od mogućnosti,  $Im(k_z^{(j)}) < 0$ , odgovara površinskim ekscitacijama lokalizovanim blizu površine  $z = 0$  , pošto  $\exp(ik_z^{(j)}z) \rightarrow 0$  kada ( $z \rightarrow -\infty$ ) unutar kristala. Ako je  $k_z^{(j)}$  čisto imaginaran broj možemo ga označiti kao  $k_z^{(j)} = -i\kappa$  (gde je  $\kappa$  realno i pozitivno ), pa površinske ekscitacije eksponencijalno opadaju proporcionalno sa  $\exp(\kappa z)$  kada ( $z \rightarrow -\infty$ ). Stoga, u takvim slučajevima, površinska ekscitacija može biti okarakterisana dvodimenzionalnim talasnim vektorom  $\mathbf{k}_{||}$  koji opisuje prostiranje paralelno sa površinom i opadajućom amplitudom u pravcu normalnom na površinu, dok su energije tih ekscitacija funkcije od  $\mathbf{k}_{||}$  i  $\kappa$ .

## 1.1 Eksperimentalne metode

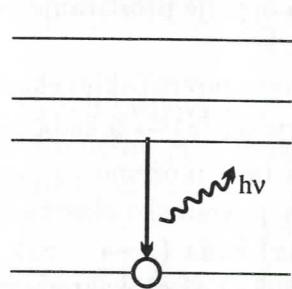
U ovom poglavlju navodimo neke od eksperimentalnih metoda koje se koriste za proučavanje osobina ekscitacija u blizini površina i međupovršina.

Neke od tehnika za proučavanje površinske kristalografske strukture i kompozicije su difracija nisko-energetskih elektrona i Augerova elektronska spektroskopija. Prva metoda omogućuje precizno određivanje kristalografske površine, dok je druga osetljiva na hemijsku kompoziciju.

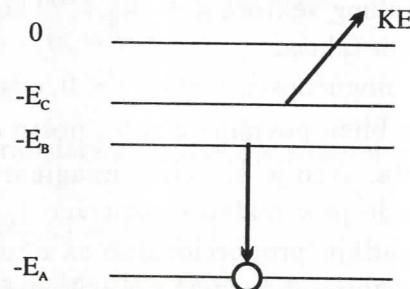
U prvoj metodi snop monoenergetskih elektrona se usmerava na površinu uzorka u uslovima veoma visokog vakuma i formira se difrakciona slika. Energije ovih elektrona su obično  $20 - 500\text{eV}$ , jer je njihova de Brogljeva talasna dužina uporediva sa dimenzijsima rešetke. Velik presek za rasejanje elektrona na atomima u ovoj oblasti energija čini tehniku difracije niskoenertetskih elektrona izuzetno osetljivom na uređenje površinskih atoma .

Osnovni princip druge metode je drugačiji i može se shvatiti pomoću slike broj 2.1.1.a),b) . Kada se atom ionizuje inicijalnim elektronima dovoljne energije tako da ostaje upražnjeno mesto na nivou A, jon može da izgubi deo svoje potencijalne energije popunjavanjem ovog mesta elektronom sa višeg nivoa B što je praćeno emisijom energije. Ova energija se može pojaviti u vidu fotona, kao što je prikazano na slici 2.1.1.a) ili kao kinetička energija

predata drugom vezanom elektronu C, kao na slici 2.1.1.b). Poslednji proces je poznat kao Augerov efekat i energetski je ostvariv pod uslovom da je  $E_A \geq E_B + E_C$ . Kinetička energija emitovanog elektrona je karakteristika atoma iz kog potiče. Augerovi elektroni imaju kratku srednju slobodnu putanju, pa njihova detekcija van uzorka omogućuje površinski osetljivu proveru hemijskog sastava.



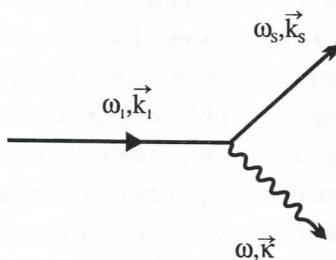
sl. 2.1.1.a.



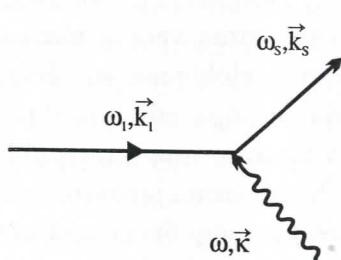
sl. 2.1.1.b.

Dve do sada opisane metode odnosile su se na statičke osobine površine. Neke od metoda za proučavanje dinamičkih osobina su neelastično rasejanje svetlosti, koje je primenljivo u istraživanju dugotalasnih površinskih ekscitacija, i različiti tipovi rasejanja čestica.

U neelastično rasejanje svetlosti spadaju Ramanovo i Briluenovo rasejanje, koje je počelo da se koristi za ispitivanje površinskih ekscitacija razvojem lasera i prateće tehnologije. Osnovna razlika u tehnikama rasejanja ove dve metode leži u analizama frekvencije rasejane svetlosti. U Ramanovom rasejanju ovo je postignuto difrakcionim rešetkom, obično u jedinicama talasnih brojeva svetlosti u opsegu  $5 - 4000 \text{ cm}^{-1}$ . U Briluenovom rasejanju koristi se Fabri-Peroov interferometar.



sl. 2.1.2.a.

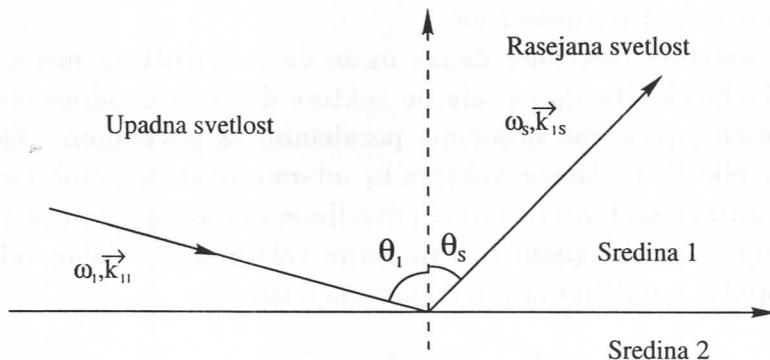


sl. 2.1.2.b.

Prvo posmatramo kinematiku rasejanja svetlosti u zapremini (praktično beskonačnoj) transparentnog medijuma. Najjednostavniji procesi su formi-

ranje ili apsorpcija jedne ekscitacije frekvencije  $\omega$  i talasnog vektora  $\mathbf{k}$  usled rasejanja svetlosti frekvencije  $\omega_1$  i talasnog vektora  $\mathbf{k}_1$ . Frekvencija i talasni vektor rasejane svetlosti su  $\omega_s$  i  $\mathbf{k}_s$  respektivno. Ovo je prikazano na slici 2.1.2.a),b) i poznato je kao Stoksovi (sl.2.1.2.a)) i anti-Stoksovi (sl.2.1.2.b)) procesi. Zakoni održanja energije i impulsa nameću ograničenje na talasni vektor  $\mathbf{k}$ , tako da rasejanjem svetlosti možemo detektovati samo eksitacije u blizini centra Briluenove zone.

Ako sad posmatramo rasejanje svetlosti na površini polubeskonačnog medijuma, geometrija rasejanja imaće izgled kao na slici 2.1.3.. Medijum 1 ima relativnu dielektričnu konstantu  $\varepsilon_1$ , a medijum 2 relativnu dielektričnu konstantu koja može zavisiti od frekvencije  $\varepsilon_2(\omega)$ . Upadni svetlosni snop u sredini 1 (talasnog vektora  $\mathbf{k}_{11}$ ) delimično prolazi kroz površinu u sredinu 2 gde talasni vektor postaje  $\mathbf{k}_{21}$ .



sl. 2.1.3.

Za komponente talasnog vektora koje su normalne na površinu imamo:

$$k_{11}^z = \frac{\omega_1}{c} \varepsilon_1^{1/2} \cos \theta_1$$

$$k_{21}^z = \frac{\omega_1}{c} [\varepsilon_2(\omega_1) - \varepsilon_1 \sin^2 \theta_1]^{1/2}$$

dok osobina translatorne invarijantnosti paralelno sa površinom daje

$$k_{11,\parallel} = k_{21,\parallel} = \frac{\omega_1}{c} \varepsilon_1^{1/2} \sin \theta_1 \equiv k_{1,\parallel}$$

Izrazi za talasne vektore  $\mathbf{k}_{1s}$  i  $\mathbf{k}_{2s}$  rasejanog snopa su slični, ali umesto  $\omega_1$  i  $\theta_1$  zamenjujemo  $\omega_s$  i  $\theta_s$ .

Zakon održanja energije ostaje isti kao i u zapremini :

$$\hbar\omega_1 = \hbar\omega_s \pm \hbar\omega$$

dok se zakon održanja impulsa menja:

$$\hbar \mathbf{k}_{1,\parallel} = \hbar \mathbf{k}_{s,\parallel} \pm \hbar \mathbf{k}_{\parallel}$$

i određuje  $\mathbf{k}_{\parallel}$ . Komponenta talasnog vektora  $k_z$  nije fiksna zato što polubeskonačan sistem nije translatorno invarijantan u  $z$  pravcu. Zbog toga dolazi do proširenja vrednosti komponente talasnog vektora  $k_z$ , što vodi do širenja pika posmatranog u spektru rasejane svetlosti, ako frekvencija ekscitacije eksplicitno zavisi od  $k_z$ .

Iako neelastično rasejanje svetlosti pruža veliku osjetljivost i rezoluciju za proučavanje površinskih eksitacija, ograničeno je za eksitacije veoma blizu centra Briluenove zone. Pod odgovarajućim uslovima neelastično rasejanje čestica može obuhvatiti veće promene impulsa, pa stoga pomoći ovog tipa rasejanja možemo proveravati površinske eksitacije za talasne vektore koji se pružaju duž cele Briluenove zone.

Tehnika rasejanja elektrona danas može da se koristi za merenje disperzionih relacija eksitacija za talasne vektore duž cele dvodimenzionalne Briluenove zone pridružene slojevima paralelnim sa površinom. Elektron kinetičke energije  $E_1$  i talasnog vektora  $\mathbf{k}_1$  udara o površinu, emituje ili apsorbuje površinski fonon frekvencije  $\omega$  i dvodimenzionalnog talasnog vektora  $\mathbf{k}_{\parallel}$ , i pojavljuje se sa energijom  $E_s$  i talasnim vektorom  $\mathbf{k}_s$ . Zakon održanja energije i impulsa paralelno sa površinom daje uslove:

$$E_1 - E_s \pm \hbar\omega = 0$$

$$\hbar k_1 (\sin \theta_1 - \sin \theta_s) = \hbar k_{\parallel}$$

U drugoj jednačini aproksimirali smo da je  $\hbar\omega \ll E_1$ , iz čega sledi da je  $|\mathbf{k}_s| \simeq |\mathbf{k}_1| \equiv k_1$ . Menjanjem uglova  $\theta_1$  i  $\theta_s$ ,  $\mathbf{k}_{\parallel}$  može biti detaljno istraženo duž cele Briluenove zone; a samim tim može se odrediti i disperziona relacija  $\omega$  u zavisnosti od  $\mathbf{k}_{\parallel}$ .

Rasejanje teških čestica je mnogo prihvativije u slučaju proučavanja eksitacija sa velikim vrednostima talasnih vektora. Rasejanje neutrona je efikasno u istraživanju zapreminskeih eksitacija, ali zbog velike dubine prodiranja ova tehnika je manje osjetljiva za površinske efekte. Dva su načina za poboljšanje: prvi je povećanje ispitivane površine, a drugi odabir povoljne geometrije rasejanja.

Tehnika koja se pokazala još korisnijom je rasejanje neutralnih atoma, kao što su atomi helijuma. Na odgovarajuće niskim energijama atomi helijuma su rasejani samo od prvog sloja na površini i njihova de Brogljeva

talasna dužina je uporediva sa dimenzijama rešetke pa može biti istražena cela Briluenova zona. Aparatura se sastoji od izvora snopa, mete i masenog spektrometra postavljenim pod pravim uglom u odnosu na upadno zračenje. Snop je u impulsima pre nego što udari u metu i proizvede rasejani signal. Primenom zakona održanja energije i impulsa (u ravni), lako se dobija veza između  $\omega$  i  $k_{\parallel}$ , pri čemu se ne može staviti  $|k_s| \simeq |k_1|$  jer  $\hbar\omega$  ne mora biti malo u poređenju sa  $E_1$ . Dobijeni spektar omogućuje detaljno istraživanje duž parabolične putanje u  $(\omega, k_{\parallel})$  prostoru, iz koje se može izvesti disperziona relacija za površinske ekscitacije.

## 2 Magnetizacija i elementarne ekscitacije u polubeskonačnom Hajzenbergovom feromagnetu

U ovoj glavi ćemo razmatrati magnetizaciju i elementarne ekscitacije u polubeskonačnom Hajzenbergovom feromagnetu ( $z \leq 0$ ). Kao i u prethodnoj glavi smatraćemo da je sistem beskonačan u  $x$  i  $y$  pravcu, tako da postoji samo jedna površina za proučavanje ( $z = 0$ ). Hamiltonijan ima formu :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - g\mu_B B_0 \sum_i S_i^z \quad (8)$$

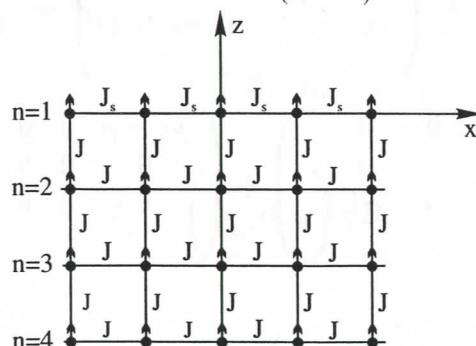
s tim što vrednost izmene  $J_{ij}$  u blizini površine može da se razlikuje od one u zapremini. Razlika se može pojaviti usled toga što je integral izmene srazmeran prekrivanju talasnih funkcija, a elektronske talasne funkcije i/ili parametri rešetke mogu biti perturbirani u blizini površine.

Posmatrajmo kao poseban primer površinu (001) proste kubne rešetke. Interakciju izmene posmatraćemo u aproksimaciji najbližih suseda, i to da u površinskom sloju ima vrednost  $J_s$ , a u ostalim slučajevima  $J$ . Smatraćemo da je pravac srednjeg polja duž  $z$  ose, a da ravnotežnu konfiguraciju određujemo pomoću teorije srednjeg polja. Jednačine koje važe za magnone u zapremini (radićemo u jedinicama  $\hbar = 1$ )

$$H_{MF} = -g\mu_B \sum_{\mathbf{i}} [B_0 + B_E(\mathbf{i})] S_i^z, \quad (9)$$

$$g\mu_B B_E(\mathbf{i}) = \sum_j \langle S_j^z \rangle J_{ij} \quad (10)$$

važe i dalje, ali  $B_E(\mathbf{i})$  će sada zavisi od čvora  $i$ . Uvodimo indeks  $n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) za označavanje slojeva paralelnih sa površinom;  $n$  je povezano sa koordinatom  $z$  na sledeći način:  $z = -(n - 1)a$ .



sl. 3.1.

Iz uslova simetrije jasno je da  $B_E(\mathbf{i})$  i  $\langle S_i^z \rangle$  zavise od položaja samo preko indeksa  $n$ . Za  $n = 1$  svaki spin ima četiri suseda na površini i jedan u sloju 2.

$$g\mu_B B_E(1) = 4J_S \langle S_1^z \rangle + J \langle S_2^z \rangle \quad (11)$$

Slično za  $n \geq 2$ , postoji šest suseda

$$g\mu_B B_E(n) = J(\langle S_{n-1}^z \rangle + 4\langle S_n^z \rangle + \langle S_{n+1}^z \rangle) \quad (12)$$

U slučaju  $S = 1/2$  jednačine srednjeg polja su:

$$\langle S_n^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh \{g\mu_B[B_0 + B_E(n)]/2k_B T\} \quad (n \geq 1)$$

Ovaj sistem jednačina može se rešavati numeričkim metodama. Nama će biti dovoljna linearizacija jednačina da bismo procenili tačku faznog prelaza; u okolini tačke faznog prelaza razvijamo u red funkciju  $\tanh x$  kao  $\tanh x = x$ , tako da dobijamo sledeći sistem linearnih jednačina za magnetizacije  $\sigma_n$  ( $\sigma_n = \langle S_n^z \rangle$ ;  $\sigma_1 = \sigma_S$ ):

$$n = 1 \quad \sigma_S \left( \frac{4\theta}{J} - 4 \frac{J_S}{J} \right) - \sigma_2 = \eta B_0 \quad (13)$$

$$n \geq 2 \quad -\sigma_{n-1} + \left( \frac{4\theta}{J} - 4 \right) \sigma_n - \sigma_{n+1} = \eta B_0 \quad (14)$$

pri čemu je:

$$\theta = k_B T \quad \eta = \frac{g\mu_B}{J}$$

Ovaj sistem jednačina u matričnom obliku glasi:

$$\hat{\Delta} \vec{\sigma} = \mathbf{B}_0 \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \hat{\Delta} &= \begin{pmatrix} \rho_S & -1 & 0 & 0 & \cdot \\ -1 & \rho & -1 & 0 & \cdot \\ 0 & -1 & \rho & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \rho & -1 & 0 & 0 & \cdot \\ -1 & \rho & -1 & 0 & \cdot \\ 0 & -1 & \rho & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \rho_S - \rho & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \end{aligned}$$

$$= \hat{D} + \Delta \hat{D} = \hat{D}(\hat{I} + \hat{D}^{-1} \Delta \hat{D}) \quad (16)$$

Pri čemu smo uveli označke :

$$\rho = \frac{4\theta}{J} - 4 \quad \rho_S = \frac{4\theta}{J} - 4 \frac{J_S}{J} \quad (17)$$

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_S \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \mathbf{B}_0 = \eta \begin{pmatrix} B_0 \\ B_0 \\ B_0 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Može se pokazati da se matrični elementi beskonačne matrice  $\hat{D}^{-1}$  mogu zapisati kao [5]:

$$(\hat{D}^{-1})_{mn} = B_{mn} = \frac{X^{m+n} - X^{|m-n|}}{X - \frac{1}{X}} = \frac{X}{X^2 - 1} (X^{m+n} - X^{|n-m|}) \quad (18)$$

gde je :

$$X + \frac{1}{X} = \rho \quad |X| \leq 1 \quad (19)$$

Iz (15) i (16):

$$\vec{\sigma} = \hat{\alpha} \hat{D}^{-1} \mathbf{B}_0 \quad \hat{\alpha} = (\hat{I} + \hat{D}^{-1} \Delta \hat{D})^{-1} \quad (20)$$

Konačno, posle niza proračuna magnetizaciju možemo zapisati kao zbir dva člana : jedan u kome se ogleda efekat površine i drugi na koji ovaj efekat ne utiče.

$$\vec{\sigma} = \hat{G}_S \mathbf{B}_0 + \hat{D}^{-1} \mathbf{B}_0 \quad (21)$$

Pošto  $\vec{\sigma}$  mora biti konačan broj, ako funkcije odziva  $\hat{G}_S$  i  $\hat{D}^{-1}$  imaju pol (tj. postaju beskonačne), jasno,  $B_0$  mora biti jednak nuli, pa postoji spontana magnetizacija. Te tačke nam definišu tačku faznog prelaza  $\theta_C(\theta_C^S)$ .

1.) Ako ne postoji efekat površine ( $\rho_S = \rho$ ) i  $\hat{G}_S = 0$ . Za polubeskonačni kristal jednačina (21) se svodi na:

$$\vec{\sigma} = \hat{D}^{-1} \mathbf{B}_0 \quad (22)$$

odnosno

$$\sigma_n = \left( \sum_m B_{nm} \right) \eta B_m$$

Na osnovu jednačine (18) lako je videti da singularitet imamo za  $X = 1$ , jer je tada  $\lim_{n \rightarrow \infty} B_{nm} = \infty$ , dok za  $|X| < 1$  dobijamo uvek konačnu sumu. Za  $X = -1$  dobija se alternativni red za  $B_{mn}$   $(-1)^{m+n}$  koji može ostati neodređen (ali nije beskonačan). Prema tome ostaje samo jedno rešenje  $X = 1$  ( $\rho = 2$ ) koje nam daje temperaturu u zapremini:

$$\theta_C = \frac{J(0)}{4} \quad J(0) = 6J$$

2.) Kada je prisutan efekat površine tj.  $\hat{G}_S \neq 0$  ( $\rho_S \neq \rho$ ) tada imamo još jedan pol (pored pola  $\rho = 2$ ). Iz (17), (18) i (20), lako je dobiti:

$$X_S = \frac{1}{\rho - \rho_S} = \frac{1}{4(\frac{J_S}{J} - 1)}$$

Iz poslednje relacije sledi:

1. Za  $\frac{J_S}{J} - 1 = \frac{1}{4}$  tj.  $J_S = \frac{5}{4}J$   $X_S = 1$  i iz relacija (17) i (19) dobijamo:

$$\theta_C^S = \theta_C$$

2. Za  $\frac{J_S}{J} - 1 > \frac{1}{4}$  tj.  $J_S > \frac{5}{4}J$ , lako je izračunati da je:

$$\theta_C^S = \frac{(1 + 16\alpha + 16\alpha^2)}{16\alpha} \quad \text{gde je} \quad \alpha = \frac{J_S}{J} - 1 > \frac{1}{4}$$

odnosno

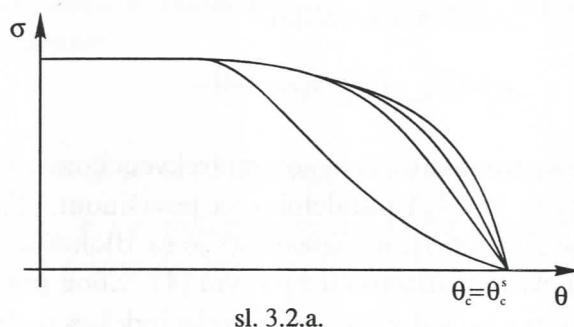
$$\theta_C^S > \theta_C$$

i konačno,

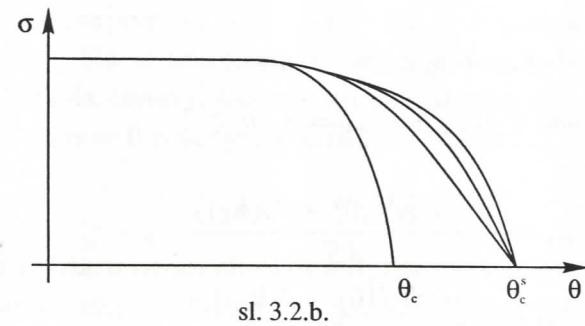
3. Za  $\frac{J_S}{J} - 1 < \frac{1}{4}$ , sledi  $X_S > 1$ , što znači da ne postoji drugi pol i jedino rešenje je:

$$\theta_C^S = \theta_C$$

Zaključujemo da tačka faznog prelaza u slučaju postojanja površinskih efekata  $\theta_C^S$  može biti ili veća ili jednaka zapreminskoj temperaturi  $\theta_C$ , u зависnosti od odnosa  $J_S$  i  $J$ . Prvi i treći slučaj je prikazan na slici 3.2.a), za  $J_S \leq \frac{5}{4}J$ , dok je drugi slučaj prikazan na slici 3.2.b), za  $J_S > \frac{5}{4}J$ .



sl. 3.2.a.



sl. 3.2.b.

Ovi grafici se mogu dobiti samo numeričkim rešavanjem sistema jednačina za  $\sigma_n(\theta)$  [6], dok smo mi samo ilustrovali ta rešenja ne navodeći konkretne brojne vrednosti za  $J$  i  $J_S$ . Bitno je istaći da se već za relativno mali broj slojeva ( $n \leq 10$ ) dobijaju grafici za  $\sigma_n(T)$  koji se praktično poklapaju sa rešenjem za magnetizaciju zapremine.

Pored magnetizacije, prisustvo površine utiče i na karakteristike elementarnih eksitacija (spinskih talasa, odnosno magnona) u feromagnetu. Pokazaćemo da se osim zapreminskega magnona u sistemu pojavljuju lokalizovane površinske eksitacije - površinski magnoni. Ograničićemo se na nisko-temperaturnu oblast  $T \ll T_C$  da bi izbegli komplikacije koje nastaju usled površinske rekonstrukcije (menja se  $\langle S_n^z \rangle$  u blizini površine). U slučaju spina  $S$ , to nam omogućava da svako  $\langle S_n^z \rangle$  zamenimo sa  $S$ . Linearizovana jednačina kretanja za operator  $S_j^+$  u tom slučaju glasi :

$$i \frac{d}{dt} S_j^+ = g\mu_B B_0 S_j^+ + S \sum_i J_{ij} (S_j^- - S_i^+) \quad (23)$$

Iz ove jednakosti izvodimo disperzije relacije za zapremske i površinske

magnone. Rešenja za  $S_j^+$  tražićemo u obliku:

$$S_j^+ = s_n(\mathbf{k}_{||}) e^{i\mathbf{k}_{||}\vec{\rho}_j} e^{-i\omega t} \quad (24)$$

gde razmatramo Furije komponentu sa ugaonom frekvencijom  $\omega$  i dvodimenzionalnim vektorom  $\mathbf{k}_{||} = (k_x, k_y)$  paralelnim sa površinom. Faktor  $e^{i\mathbf{k}_{||}\vec{\rho}_j}$  u jednačini (24), gde je  $\vec{\rho} = (x, y)$ , u saglasnosti je sa Blohovom teoremom (6) i translacionom simetrijom sistema u  $xy$  ravni (4). Zbog površine nema takvog faktora u  $z$  pravcu i  $s_n(\mathbf{k}_{||})$  zavisi od  $z$  preko indeksa  $n$ . Iz jednačina (23) i (24) dobijamo beskonačni red kuplovanih jednačina za  $s_n(\mathbf{k}_{||})$  (za  $B_0 = 0$  i  $z \geq 0$ ):

$$\begin{aligned} \rho_s s_1 + s_2 &= 0 & n = 1 \\ \rho s_n + s_{n-1} + s_{n+1} &= 0 & n \geq 2 \end{aligned} \quad (25)$$

gde je:

$$\rho_s = \frac{\omega - S(J_S(0) - J_S(\mathbf{k}_{||}))}{J_S} \quad (26)$$

$$\rho = \frac{\omega - S(J(0) - J(\mathbf{k}_{||}))}{J_S} \quad (27)$$

$$J_S(0) = 4J_S + J \quad J(0) = 6J$$

$$J_S(\mathbf{k}_{||}) = 2J_S\omega(\mathbf{k}_{||}) \quad J(\mathbf{k}_{||}) = 2J\omega(\mathbf{k}_{||}) \quad (28)$$

$$\omega(\mathbf{k}_{||}) = \cos(k_x a) + \cos(k_y a)$$

Gornji sistem jednačina može biti rešen na različite načine. Jednostavan prilaz je tražiti rešenje za  $s_n(\mathbf{k}_{||})$  u obliku:

$$s_n(\mathbf{k}_{||}) = C(\mathbf{k}_{||}) e^{i\kappa n a} \quad (29)$$

1.) Ako je  $\kappa = k_z$  realno, tada je rešenje za  $s_n(\mathbf{k}_{||})$  oblika (superpozicija progresivnog i reflektovanog talasa):

$$s_n(\mathbf{k}_{||}) = C(\mathbf{k}_{||}, k_z) \cos(n k_z a + \theta)$$

Ovo odgovara slučaju kada amplituda ne opada tj. slučaju zapreminske ekscitacije. Iz druge jednačine sistema (25) dobijamo:

$$\rho = -2 \cos k_z a \quad i \quad -\pi \leq k_z a \leq \pi$$

Kada ovo zamenimo u jednačinu (27), dobijamo disperzionu relaciju za zavremenske magnone :

$$\omega(\mathbf{k}) = S(J(0) - J(\mathbf{k})) \quad (30)$$

pri čemu je:

$$J(\mathbf{k}) = 2J(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (31)$$

Amplituda  $C(\mathbf{k}_{||}, k_z)$  određuje se iz graničnog uslova (jednačine za  $n = 1$ .)

2.) Ako je  $\kappa$  kompleksni broj tj.  $\kappa = \alpha + i\eta$  tada je :

$$\rho = -2 \cos(\kappa a) = -2[\cos \alpha a \cosh \eta a - i \sin \alpha a \sinh \eta a]$$

Pošto je  $\rho$  realno,  $\sin \alpha a$  mora biti nula, odnosno  $\alpha a = n\pi$ . Dovoljno je da razmatramo slučajeve  $\alpha a = 0$  i  $\alpha a = \pi$  (ostale vrednosti za  $\alpha$  daju iste rezultate). Da bi amplitude ostale konačne kada  $n \rightarrow \infty$  mora da važi uslov  $\eta > 0$ . Sada ćemo detaljnije analizirati oba slučaja.

a) Kada je  $\alpha = 0$  rešenje za  $s_n(\mathbf{k}_{||})$  je oblika :

$$s_n(\mathbf{k}_{||}) = C(\mathbf{k}_{||}) e^{-\eta n a}$$

odakle vidimo da u ovom slučaju amplituda eksponencijalno opada sa rastojanjem od površine, a faza ne zavisi od  $n$  tj. svi spinovi precesiraju u fazi. Pošto je  $\rho = -2 \cosh \eta a$  disperziona relacija glasi:

$$\omega_S^a(\mathbf{k}_{||}) = S[J(0) - 2J\omega(\mathbf{k}_{||}) - 2J \cosh \eta a] \quad (32)$$

Ove površinske eksitacije nazivamo akustičnim površinskim magnonima.

b) Ukoliko je  $\alpha a = \pi$  za  $s_n(\mathbf{k}_{||})$  dobijamo :

$$s_n(\mathbf{k}_{||}) = C(\mathbf{k}_{||}) e^{-\eta n a + i n \pi} = (-1)^n C(\mathbf{k}_{||}) e^{-\eta n a} \quad (33)$$

I ovde amplituda eksponencijalno opada dok je precesija spinova od sloja do sloja defazovana za  $\pi$ . Za disperziju ovih eksitacija (tzv. optički magnoni) dobijamo:

$$\rho = 2 \cosh \eta a \quad i$$

$$\omega_S^{op}(\mathbf{k}_{||}) = S[J(0) - 2J\omega(\mathbf{k}_{||}) + 2J \cosh \eta a]$$

Moguće vrednosti za  $\kappa$  odnosno  $\Delta = e^{i\kappa a}$  dobijamo zamenom vrednosti za frekvenciju i amplitudu  $s_1$  i  $s_2$  u prvu jednačinu sistema (25). Za  $n = 1$  (u slučaju površinskih eksitacija  $|\Delta| < 1$ ) dobija se :

$$\Delta = \frac{1}{\alpha_{00}}$$

$$\alpha_{00} = \frac{J(0) - J_S(0) - J(\mathbf{k}_{\parallel}) + J_S(\mathbf{k}_{\parallel})}{J}$$

Uslov  $|\Delta| < 1$  će biti zadovoljen na dva načina:

1.)  $0 < \Delta < 1$  ( $e^{i\kappa a} = e^{-\eta a}$ ) Za  $e^{\eta a} = \frac{1}{\Delta}$  dobijamo:

$$e^{\eta a} = 1 + \frac{2(J - J_S)}{J}(2 - \omega(\mathbf{k}_{\parallel})) \geq 1$$

Ako je  $J_S < J$  za bilo koje  $\mathbf{k}_{\parallel} \neq 0$  ovaj uslov će biti zadovoljen. U ovom slučaju imamo akustičke površinske magnone. Spinska pobuđenja u susednim slojevima su u fazi, a njihova frekvencija je manja od odgovarajuće frekvencije zapreminskih magnona  $\omega_S(\mathbf{k}_{\parallel}) < \omega_B(\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$ , za bilo koje  $k_z \neq 0$  (slika 3.3.a)). Naziv "akustični" potiče od analogije sa akustičnim fononima jer  $\omega_S(\mathbf{k}_{\parallel}) \rightarrow 0$  kada  $|\mathbf{k}_{\parallel}| \rightarrow 0$ .

2.) U drugom slučaju (slika 3.3.b)) je  $-1 < \Delta < 0$ , pri čemu nastaju optički površinski magnoni. Za njih je karakteristično da postoji fazna razlika od  $180^\circ$  između spinskih talasa susednih slojeva, a frekvencija zadovoljava  $\omega_S(\mathbf{k}_{\parallel}) > \omega_B(\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$ . Neophodan uslov za postojanje površinskih magnona je da je  $|\mathbf{k}_{\parallel}|$  veće od neke kritične vrednosti. To sledi iz relacije :

$$e^{\eta a} = \frac{2(J_S - J)}{J}(2 - \omega(\mathbf{k}_{\parallel})) - 1 \geq 1$$

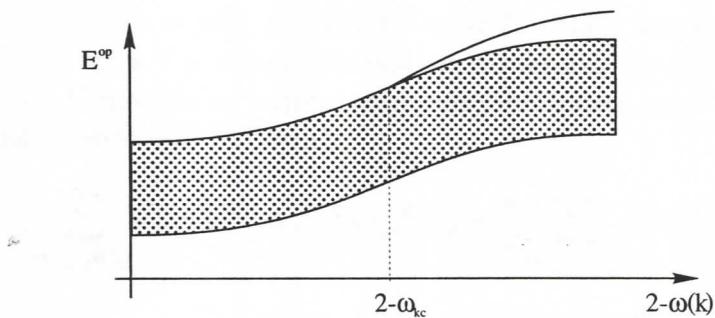
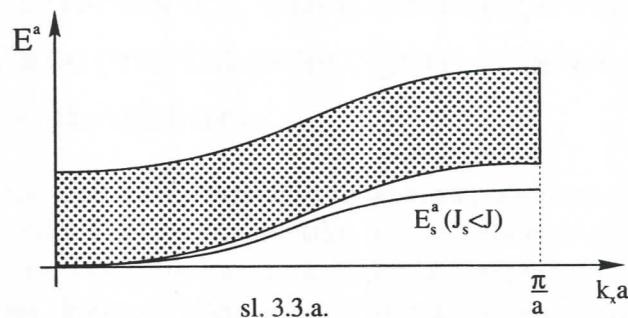
Ako je  $J_S > J$  i uzmemu u obzir prethodni uslov dobijamo graničnu vrednost  $\mathbf{k}_C$ .

$$\omega(\mathbf{k}_C) = 2 - \frac{J}{J_S - J} \quad (34)$$

S obzirom da je  $\omega(\mathbf{k}_{\parallel}) \geq -2$  možemo dobiti graničnu vrednost  $J_S (> J)$  pri kojoj se mogu pojaviti optički površinski magnoni. Iz relacije  $2 - \frac{J}{J_S - J} > -2$  sledi:

$$J_S > \frac{5}{4}J.$$

Ovaj uslov je identičan sa uslovom  $\theta_C^S > \theta_C$ , što ima dubokog fizičkog smisla.



sl. 3.3.b.

Na kraju ovog poglavlja spomenućemo i dodatni efekt kao posledicu površinske anizotropije, koja se javlja zato što površinske kristalne ravni imaju nižu simetriju od onih u unutrašnjosti kristala ili zbog primesa na površini. Ovo se predstavlja preko dodatnog člana u Hamiltonijanu:

$$-g\mu_B \sum_i B_A(i) S_i^z$$

U najjednostavnijem slučaju efektivno polje anizotropije može imati konstantnu vrednost  $B_{AS}$  za spinove na površini i biti jednako nuli u drugim slučajevima. Uvezši ovo u obzir definicija za  $\Delta$  postaje:

$$\Delta \equiv e^{-ik_a} = \left\{ 1 - \frac{g\mu_B B_{AS}}{SJ} + 4 \left( 1 - \frac{J_S}{J} \right) [1 - \omega(\mathbf{q}_{||})] \right\}^{-1}$$

Ako je  $B_{AS} < 0$  postojeći uslov  $|\Delta| < 1$  za površinske magnone biće zadovoljen za određene vrednosti  $\mathbf{k}_{||}$  (čak i za  $J_S = J$ ), za razliku od prethodne situacije kada je  $B_{AS}$  bilo jednako nuli.

### 3 Površinske eksitacije u polubeskonačnom ferimagnetiku i antiferomagnetiku sa bikvadratnom interakcijom – slučaj proste kubne strukture

U ovoj glavi ćemo ispitivati površinska magnetna pobuđenja u polubeskonačnom ferimagnetiku i antiferomagnetiku proste kubne strukture sa dve podrešetke, opisanim Hamiltonijanom koji pored Hajzenbergove sadrži i bikvadratnu izmenu. Kako je bikvadratna izmena najčešće praćena jednojonskom anizotropijom i ovaj član je uzet u obzir. Razmatramo polubeskonačni kristal ( $z = 0$  do  $z = \infty$ ), sa površinom (001). Zbog translacione invarijantnosti u ravni  $x$  i  $y$  stanje sistema se karakteriše dvodimenzionalnim vektorom  $\mathbf{k}_{\parallel}$ . U modelu sa kojim radimo najbliži sused spina podrešetke  $a$  (up) pripada podrešetki  $b$  (down).

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m}'_{\alpha'}, \mathbf{n}'_{\beta'}} J(\mathbf{m}'_{\alpha'} - \mathbf{n}'_{\beta'}) \mathbf{S}_{\mathbf{m}'_{\alpha'}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}'_{\beta'}} + \frac{a}{2} \sum_{\mathbf{m}'_{\alpha'}, \mathbf{n}'_{\beta'}} J(\mathbf{m}'_{\alpha'} - \mathbf{n}'_{\beta'}) \cdot (\mathbf{S}_{\mathbf{m}'_{\alpha'}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}'_{\beta'}})^2 - \sum_{\mathbf{m}'_{\alpha'}} D_{\mathbf{m}'_{\alpha'}} (S_{\mathbf{m}'_{\alpha'}}^z)^2 - \omega_A \sum_{\mathbf{m}'_{\alpha'}} S_{\mathbf{m}'_{\alpha'}}^z, \quad (35)$$

pri čemu je:

$$J(\mathbf{m}'_{\alpha'} - \mathbf{n}'_{\beta'}) = \begin{cases} +J^{ab}(\mathbf{m}'_a - \mathbf{n}'_b) & \text{(različite podrešetke)} \\ -J^{aa}(\mathbf{m}'_\alpha - \mathbf{n}'_\alpha) & \text{(iste podrešetke)} \end{cases} \quad (36)$$

$$\text{i } \alpha, \beta = \begin{cases} a & \text{(up)} \\ b & \text{(down)} \end{cases}$$

Poslednji član u izrazu predstavlja uticaj polja anizotropije.

Definišimo operatore  $S_{\mathbf{m}_\alpha}^+$  i  $S_{\mathbf{m}_\alpha}^-$  na sledeći način:

$$S_{\mathbf{m}_\alpha}^{\pm} = S_{\mathbf{m}_\alpha}^x \pm i S_{\mathbf{m}_\alpha}^y, \quad (37)$$

kao i operator kvadropolnog momenta:

$$Q_{\mathbf{m}_\alpha} = 3(S_{\mathbf{m}_\alpha}^z)^2 - S(S+1). \quad (38)$$

za koje važe sledeće komutacione relacije:

$$[S_{\mathbf{m}_\alpha}^+, S_{\mathbf{n}_\beta}^-] = 2S_{\mathbf{m}_\alpha}^z \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta},$$

$$[S_{\mathbf{m}_\alpha}^+, S_{\mathbf{n}_\beta}^z] = -S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta}. \quad (39)$$

Jednačinu kretanja za operator  $S_{\mathbf{m}_\alpha}^+$

$$i\hbar \frac{dS_{\mathbf{m}_\alpha}^+}{dt} = [S_{\mathbf{m}_\alpha}^+, H]. \quad (40)$$

koristeći relacije (35) - (40) možemo napisati u obliku:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_{\mathbf{m}_\alpha}^+}{dt} &= \sum_{\mathbf{n}'\beta'} J_{\mathbf{m}_\alpha - \mathbf{n}'\beta'} \left(1 - \frac{a}{2}\right) \left(S_{\mathbf{n}'\beta'}^z S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ - S_{\mathbf{m}_\alpha}^z S_{\mathbf{n}'\beta'}^+\right) + \\ &+ \frac{a}{2} \sum_{\mathbf{n}'\beta'} J_{\mathbf{m}_\alpha - \mathbf{n}'\beta'} [Q_{\mathbf{n}'\beta'} (S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ S_{\mathbf{m}_\alpha}^z + S_{\mathbf{m}_\alpha}^z S_{\mathbf{m}_\alpha}^+) - \\ &- Q_{\mathbf{m}_\alpha} (S_{\mathbf{n}'\beta'}^+ S_{\mathbf{n}'\beta'}^z + S_{\mathbf{n}'\beta'}^z S_{\mathbf{n}'\beta'}^+) + (S_{\mathbf{m}_\alpha}^+)^2 (S_{\mathbf{n}'\beta'}^- S_{\mathbf{n}'\beta'}^z + S_{\mathbf{n}'\beta'}^z S_{\mathbf{n}'\beta'}^-) - \\ &- (S_{\mathbf{n}'\beta'}^+)^2 (S_{\mathbf{m}_\alpha}^z S_{\mathbf{m}_\alpha}^- + S_{\mathbf{m}_\alpha}^- S_{\mathbf{m}_\alpha}^z)] + D_{\mathbf{m}_\alpha} (S_{\mathbf{m}_\alpha}^z S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ + S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ S_{\mathbf{m}_\alpha}^z) + \omega_A S_{\mathbf{m}_\alpha}^+. \end{aligned} \quad (41)$$

Linearizaciju gornje jednačine izvršićemo korišćenjem aproksimacije haotičnih faza (ili Tjablikovska aproksimacija) za proizvode operatora na različitim čvorovima :

$$(S_{\mathbf{n}'\beta'}^z S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ - S_{\mathbf{m}_\alpha}^z S_{\mathbf{n}'\beta'}^+) \rightarrow \langle S_{\mathbf{n}'\beta'}^z \rangle S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ - \langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^z \rangle S_{\mathbf{n}'\beta'}^+, \quad (42)$$

itd. pri čemu je

$$\langle S_{n_\alpha}^z \rangle \neq 0 \text{ i } \langle Q_{n_\alpha} \rangle \neq 0 \text{ a } \langle S^+ \rangle = (\langle S^+ \rangle)^2 = 0$$

Pri dekuplovanju proizvoda operatora na istom čvoru potrebna je opreznost, s obzirom da operatori ne komutiraju. Koristeći HP reprezentaciju za spinske operatore može se pokazati da je na  $T \approx 0$ , pravilno sledeće dekuplovanje [7] :

$$\begin{aligned} (S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ S_{\mathbf{m}_\alpha}^z + S_{\mathbf{m}_\alpha}^z S_{\mathbf{m}_\alpha}^+)^a &= (2\langle S_a^z \rangle - 1) S_{\mathbf{m}_a}, \quad \alpha = a \\ (S_{\mathbf{m}_a}^+ S_{\mathbf{m}_\alpha}^z + S_{\mathbf{m}_\alpha}^z S_{\mathbf{m}_a}^+)^b &= (-2\langle S_b^z \rangle + 1) S_{\mathbf{m}_b}, \quad \alpha = b \end{aligned} \quad (43)$$

Pošto ćemo problem rešavati metodom Grinovih funkcija, uvodimo Grinovu funkciju oblika  $\langle\langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle$ . Koristeći jednačinu kretanja za operator

$S_{\mathbf{m}_\alpha}^+$  (relacija (41)) i gornje dekuplovanje, jednačina kretanja za Grinovu funkciju  $\langle\langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle$  u energetskoj reprezentaciji postaje:

$$\begin{aligned}
 E\langle\langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle &= \frac{i}{\pi} \langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^z \rangle \delta_{\mathbf{mn}} \delta_{\alpha\beta} + \\
 &+ \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_{\mathbf{j}_\gamma} J(\mathbf{m}_\alpha - \mathbf{j}_\gamma) \left[ \langle S_{\mathbf{j}_\gamma}^z \rangle \langle\langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle - \langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^z \rangle \langle\langle S_{\mathbf{j}_\gamma}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle \right] + \\
 &+ \frac{a}{2} \sum_{\mathbf{j}_\gamma} J(\mathbf{m}_\alpha - \mathbf{j}_\gamma) [\langle Q_{\mathbf{j}_\gamma} \rangle z_\alpha (2\langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^z \rangle - 1) \langle\langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle - \\
 &- \langle Q_{\mathbf{m}_\alpha} \rangle z_\gamma (2\langle S_{\mathbf{j}_\gamma}^z \rangle - 1) \langle\langle S_{\mathbf{j}_\gamma}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle] + \\
 &+ D_{\mathbf{m}_\alpha} z_\alpha (2|S_\alpha| - 1) \langle\langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle z_\alpha \omega_A \langle\langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle. \quad (44)
 \end{aligned}$$

gde je  $z_\alpha = \begin{cases} 1 & \text{za } \alpha = a \\ -1 & \text{za } \alpha = b \end{cases}$ .

S obzirom da ćemo analizirati spektar elementarnih eksitacija na  $T \approx 0$  i u aproksimaciji najbližih suseda, u gornjoj jednačini uzimamo da je:

$$\langle S_{\mathbf{n}_\alpha}^z \rangle = \begin{cases} S_a & \text{za } \alpha = a \\ -S_b & \text{za } \alpha = b \end{cases}$$

$$\langle Q_{\mathbf{n}_\alpha} \rangle = |S_\alpha|(2|S_\alpha| - 1), \quad \alpha = a, b \quad (45)$$

i  $J_{\mathbf{m}_\alpha \mathbf{n}_\beta}$  jednako  $J_S$  između susednih spinova na površini a unutar kristala ima vrednost  $J$ .

### 1.) Elementarne eksitacije u beskonačnom kristalu. ( $T = 0$ )

Zbog translatorne invarijantnosti uvodimo Furije transform Grinove funkcije:

$$\langle\langle S_{\mathbf{m}_\alpha}^+ | S_{\mathbf{n}_\beta}^- \rangle\rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, E) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{n}-\mathbf{m})d} \quad (46)$$

Pošto najbliži susedi pripadaju različitim podrešetkama, važi sledeća relacija:

$$J_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}) = -2J(\cos k_x a_0 + \cos k_y a_0 + \cos k_z a_0)(1 - \delta_{\alpha\gamma}); a_0 = \frac{d}{2} \quad (47)$$

Jednačine za Grinove funkcije  $G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, E)$ , ( $\alpha, \beta = a, b$ ) na osnovu (44) - (47) možemo napisati u obliku :

$$\begin{aligned}(E - \omega_a)G_{aa}(\mathbf{k}, E) - \alpha_{ab}J(\mathbf{k})G_{ba}(\mathbf{k}, E) &= \frac{i}{\pi}S_a \\(E - \omega_a)G_{ab}(\mathbf{k}, E) - \alpha_{ab}J(\mathbf{k})G_{bb}(\mathbf{k}, E) &= 0 \\ \alpha_{ba}J(\mathbf{k})G_{aa}(\mathbf{k}, E) + (E + \omega_b)G_{ba}(\mathbf{k}, E) &= 0 \\ \alpha_{ba}J(\mathbf{k})G_{ab}(\mathbf{k}, E) + (E + \omega_b)G_{bb}(\mathbf{k}, E) &= -\frac{i}{\pi}S_b\end{aligned}\quad (48)$$

Gornji sistem zapisan u matričnom obliku je:

$$\hat{\Delta}_B \hat{G} = \frac{i}{\pi} \begin{pmatrix} S_a & 0 \\ 0 & -S_b \end{pmatrix} \quad (49)$$

odakle matricu  $G$  dobijamo inverzijom :

$$\hat{G} = \frac{i}{\pi} \hat{\Delta}_B^{-1} \begin{pmatrix} S_a & 0 \\ 0 & -S_b \end{pmatrix} \quad (50)$$

gde smo koristili sledeće oznake:

$$\begin{aligned}\omega_a &= \alpha_{ba}J(0) + (2S_a - 1)D_a + \omega_A \\ \omega_b &= \alpha_{ab}J(0) + (2S_b - 1)D_b + \omega_A \\ \alpha_{ab} &= (1 - \frac{a}{2})S_a - \frac{a}{2}S_a(2S_a - 1)(2S_b - 1) \\ \alpha_{ba} &= (1 - \frac{a}{2})S_b - \frac{a}{2}S_b(2S_b - 1)(2S_a - 1) \\ \hat{\Delta}_B &= \begin{pmatrix} E - \omega_a & -\alpha_{ab}J(\mathbf{k}) \\ \alpha_{ba}J(\mathbf{k}) & E + \omega_b \end{pmatrix} \\ \hat{G} &= \begin{pmatrix} G_{aa}(\mathbf{k}, E) & G_{ab}(\mathbf{k}, E) \\ G_{ba}(\mathbf{k}, E) & G_{bb}(\mathbf{k}, E) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Pomoću jednačine (50) možemo odrediti sve Grinove funkcije  $G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, E)$ . Energije elementarnih eksitacija dobijamo iz relacija:

$$\det \Delta_B = 0$$

što daje :

$$E_{1/2} = \frac{\omega_a - \omega_b}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_a + \omega_b)^2 - 4\alpha_{ab}\alpha_{ba}J^2(\mathbf{k})} \quad (51)$$

## 2.) Površinske eksitacije u polubeskonačnom ferimagnetiku (antiferomagnetu)

Sada uvodimo dvodimenzionalni Furije transform :

$$G(\mathbf{m}_\alpha, \mathbf{n}_\beta) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} G_{mn}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) e^{i\mathbf{k}_\parallel(\vec{\rho}_m - \vec{\rho}_n)d} \quad (52)$$

$$\vec{\rho}_m = (m_x, m_y) \quad \vec{\rho}_n = (n_x, n_y)$$

Iz jednačine (44) posle dvodimenzionalne Furije transformacije i uvođenja oznaka:

$$\begin{aligned} J_S(\mathbf{k}_\parallel) &= J_S \omega(\mathbf{k}_\parallel) & J_S(0) &= 4J_S + J \\ J(\mathbf{k}_\parallel) &= J \omega(\mathbf{k}_\parallel) & J(0) &= 6J \end{aligned}$$

$$\omega(\mathbf{k}_\parallel) = 2(\cos k_x a_0 + \cos k_y a_0), \quad a_0 = \frac{d}{2}$$

$\omega_a^S = \alpha_{ba} J_S(0) + D_a^S(2S_a - 1) + \omega_A$        $\omega_b^S = \alpha_{ab} J_S(0) + D_b^S(2S_b - 1) + \omega_A$   
sistem jednačina za Grinove funkcije postaje:

$$\begin{aligned} m = 1 \quad \alpha = a : \quad & (E - \omega_a^S) G_{1n}^{a\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) - \alpha_{ab} J_S(\mathbf{k}_\parallel) G_{1n}^{b\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) - \\ & \alpha_{ab} J G_{2n}^{b\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) = \frac{i}{\pi} S_a \delta_{a\beta} \delta_{1n} \\ \alpha = b : \quad & \alpha_{ba} J_S(\mathbf{k}_\parallel) G_{1n}^{a\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) + (E + \omega_b^S) G_{1n}^{b\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) + \\ & \alpha_{ba} J G_{2n}^{a\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) = -\frac{i}{\pi} S_b \delta_{b\beta} \delta_{1n} \\ m \geq 2 \quad \alpha = a : \quad & (E - \omega_a) G_{mn}^{a\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) - \alpha_{ab} J(\mathbf{k}_\parallel) G_{mn}^{b\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) - \\ & \alpha_{ab} J(G_{m-1,n}^{b\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) + G_{m+1,n}^{b\beta}(\mathbf{k}_\parallel)) = \frac{i}{\pi} S_a \delta_{a\beta} \delta_{mn} \\ \alpha = b : \quad & \alpha_{ba} J(\mathbf{k}_\parallel) G_{mn}^{a\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) + (E + \omega_b) G_{mn}^{b\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) + \\ & \alpha_{ba} J(G_{m-1,n}^{a\beta}(\mathbf{k}_\parallel, E) + G_{m+1,n}^{a\beta}(\mathbf{k}_\parallel)) = -\frac{i}{\pi} S_b \delta_{b\beta} \delta_{mn} \end{aligned}$$

Gornji sistem jednačina možemo predstaviti u matričnom obliku:

$$\hat{\Delta} \hat{G} = \frac{i}{\pi} \hat{J} \quad (53)$$

pri čemu je:

$$\hat{G} \equiv \begin{pmatrix} \hat{G}_{11} & \hat{G}_{12} & \dots & \hat{G}_{1n} & \dots & \dots \\ \hat{G}_{21} & \hat{G}_{22} & \dots & \hat{G}_{2n} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \ddots \\ \hat{G}_{m1} & \hat{G}_{m2} & \dots & \hat{G}_{mn} & & \end{pmatrix}$$

$$\hat{G}_{mn} = \begin{pmatrix} \hat{G}_{mn}^{aa}(\mathbf{k}_{||}, E) & \hat{G}_{mn}^{ab}(\mathbf{k}_{||}, E) \\ \hat{G}_{mn}^{ba}(\mathbf{k}_{||}, E) & \hat{G}_{mn}^{bb}(\mathbf{k}_{||}, E) \end{pmatrix}$$

Matricu  $\hat{\Delta}$  koja ima oblik :

$$\hat{\Delta} = \begin{pmatrix} \hat{D}_0^S & \hat{D}_1 & 0 & 0 & \dots \\ \hat{D}_1 & \hat{D}_0 & \hat{D}_1 & 0 & \dots \\ 0 & \hat{D}_1 & \hat{D}_0 & \hat{D}_1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (54)$$

možemo zapisati kao zbir dve matrice:

$$\hat{\Delta} = \hat{D} + \Delta \hat{D} \quad (55)$$

Radi jednostavnijeg zapisa uvodimo bezdimenzionalne veličine (zadržavamo iste oznake):

$$\hat{G} = \sqrt{\alpha_{ab}\alpha_{ba}} J \hat{G}$$

$$\hat{\Delta} = \frac{\hat{\Delta}}{\sqrt{\alpha_{ab}\alpha_{ba}} J}$$

$$E = \frac{E}{\sqrt{\alpha_{ab}\alpha_{ba}} J}$$

$$\omega_a^S = \frac{\omega_a^S}{\sqrt{\alpha_{ab}\alpha_{ba}} J} \quad \omega_b^S = \frac{\omega_b^S}{\sqrt{\alpha_{ab}\alpha_{ba}} J}$$

$$\omega_a = \frac{\omega_a}{\sqrt{\alpha_{ab}\alpha_{ba}} J} \quad \omega_b = \frac{\omega_b}{\sqrt{\alpha_{ab}\alpha_{ba}} J}.$$

U skladu sa gore navedenim, matrice će imati oblik:

$$\begin{aligned} \hat{D} &= \begin{pmatrix} \hat{D}_0 & \hat{D}_1 & 0 & 0 & \dots \\ \hat{D}_1 & \hat{D}_0 & \hat{D}_1 & 0 & \dots \\ 0 & \hat{D}_1 & \hat{D}_0 & \hat{D}_1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} & \Delta \hat{D} &= \begin{pmatrix} \Delta \hat{D}_0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\ \hat{D}_0^S &= \begin{pmatrix} E - \omega_a^S & -\delta \varepsilon \omega(\mathbf{k}_{||}) \\ \frac{1}{\delta} \varepsilon \omega(\mathbf{k}_{||}) & E + \omega_b^S \end{pmatrix} & \hat{D}_0 &= \begin{pmatrix} E - \omega_a & -\delta \omega(\mathbf{k}_{||}) \\ \frac{1}{\delta} \omega(\mathbf{k}_{||}) & E + \omega_b \end{pmatrix} \\ \hat{D}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & -\delta \\ \frac{1}{\delta} & 0 \end{pmatrix} & \Delta \hat{D}_0 &= \begin{pmatrix} \Delta \omega_0^a & \Delta \omega_k^a \\ \Delta \omega_k^b & -\Delta \omega_0^b \end{pmatrix} \quad (56) \end{aligned}$$

Gde smo koristili oznake (u bezdimenzionim veličinama):

$$\Delta\omega_0^a = \omega_a - \omega_a^S$$

$$\Delta\omega_0^b = \omega_b - \omega_b^S$$

$$\Delta\omega_k^a = \delta\Delta\omega_k$$

$$\Delta\omega_k^b = -\frac{1}{\delta}\Delta\omega_k$$

pri čemu je:

$$\varepsilon = \frac{J_S}{J} \quad \delta = \sqrt{\frac{\alpha_{ab}}{\alpha_{ba}}} \\ \Delta\omega_k = \omega_k(1 - \varepsilon)$$

Uvedimo još matricu  $\hat{J}$ :

$$\hat{J} = \begin{pmatrix} S_a & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & -S_b & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & S_a & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & -S_b & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = \hat{I} \begin{pmatrix} S_a & 0 \\ 0 & -S_b \end{pmatrix}$$

Iz (53) i (55), rešenje za  $\hat{G}$  glasi :

$$\hat{G} = \frac{i}{\pi}(\hat{I} + \hat{D}^{-1}\Delta\hat{D})^{-1}\hat{D}^{-1}\hat{J} \quad (57)$$

Matricu  $\hat{D}$  možemo napisati na sledeći način:

$$\hat{D} = \hat{D}_1 \begin{pmatrix} \hat{\rho} & \hat{1} & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \hat{1} & \hat{\rho} & \hat{1} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \hat{1} & \hat{\rho} & \hat{1} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix},$$

a njenu inverznu kao:

$$\hat{D}^{-1} = \hat{B}\hat{D}_1^{-1}.$$

Matrične elemente matrice  $\hat{B}$  možemo zapisati na sledeći način [8]:

$$\hat{B}_{nm} = \frac{\hat{X}^{n+m} - \hat{X}^{|n-m|}}{\frac{1}{\hat{X}} - \hat{X}}$$

Matrica  $\hat{\rho}$  ima oblik:

$$\hat{\rho} = \hat{D}_1^{-1} \hat{D}_0 = \begin{pmatrix} \omega(\mathbf{k}_{\parallel}) & \delta(E + \omega_b) \\ -\frac{1}{\delta}(E - \omega_a) & \omega(\mathbf{k}_{\parallel}) \end{pmatrix}$$

Sledeći postupak dat je u [8]. Da bi odredili matricu  $\hat{D}^{-1}$  (odnosno  $\hat{B}$ ) prvo ćemo dijagonalizovati matricu  $\hat{\rho}$ :

$$\hat{\rho}_d = \hat{U}^{-1} \hat{\rho} \hat{U} = \begin{pmatrix} -2 \cos \theta_1 & 0 \\ 0 & -2 \cos \theta_2 \end{pmatrix}$$

odakle rešavanjem svojstvenog problema matrice  $\hat{\rho}$  dobijamo jednačine:

$$\begin{aligned} \omega_k + 2 \cos \theta_1 &= -\sqrt{(\omega_a - E)(E + \omega_b)} \\ \omega_k + 2 \cos \theta_2 &= \sqrt{(\omega_a - E)(E + \omega_b)} \\ (\omega_k + 2 \cos \theta_1) U_{11} + \delta(E + \omega_b) U_{21} &= 0 \\ (\omega_k + 2 \cos \theta_2) U_{12} + \delta(E + \omega_b) U_{22} &= 0 \end{aligned} \quad (58)$$

pa je jedan od mogućih izbora matrice  $\hat{U}$  sledeći:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \sqrt{E + \omega_b} & \sqrt{E + \omega_b} \\ \frac{1}{\delta} \sqrt{\omega_a - E} & -\frac{1}{\delta} \sqrt{\omega_a - E} \end{pmatrix}$$

Sada možemo jednostavno odrediti dijagonalni oblik bilo koje matrice kao funkcije matrice  $\hat{\theta}$ . Tako dobijamo:

$$\begin{aligned} (\hat{D}^{-1})_{nm} &= \hat{d}_{nm} = \\ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} (b_{nm}(\theta_1) - b_{nm}(\theta_2)) & -\frac{\delta}{2} (b_{nm}(\theta_1) + b_{nm}(\theta_2)) \\ \frac{1}{2\delta} (b_{nm}(\theta_1) + b_{nm}(\theta_2)) & -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} (b_{nm}(\theta_1) - b_{nm}(\theta_2)) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (59)$$

gde je:

$$b_{nm}(\theta_i) = \frac{e^{i\theta_i(n+m)} - e^{i\theta_i|n-m|}}{2i \sin \theta_i} \quad i = 1, 2 \quad (60)$$

Da bi odredili Grinovu funkciju određujemo inverznu matricu  $(\hat{I} + \hat{D}^{-1}\Delta\hat{D})^{-1} = \hat{\alpha}$ . Lako je pokazati da ona ima oblik:

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{11} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \hat{\alpha}_{21} & \hat{I} & 0 & 0 & \dots \\ \hat{\alpha}_{31} & 0 & \hat{I} & 0 & \dots \\ \hat{\alpha}_{41} & 0 & 0 & \hat{I} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

gde je:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{11} &= \frac{1}{\det|\hat{I} + \hat{D}_{11}^{-1}\Delta\hat{D}_0|} \hat{a}_{11} \\ \hat{\alpha}_{n1} &= -\hat{D}_{n1}^{-1}\Delta\hat{D}_0\hat{\alpha}_{11}. \\ a_{11} &= \begin{pmatrix} \tilde{a}_{11} & \tilde{a}_{12} \\ \tilde{a}_{21} & \tilde{a}_{22} \end{pmatrix} \quad (61) \\ \tilde{a}_{11} &= 1 + \frac{\Delta\omega_k^a}{2\delta}(e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}) - \frac{\Delta\omega_0^b}{2}\sqrt{\frac{\omega_a - E}{\omega_b + E}}(e^{i\theta_1} - e^{i\theta_2}) \\ \tilde{a}_{12} &= -\frac{\Delta\omega_k^a}{2}\sqrt{\frac{\omega_b + E}{\omega_a - E}}(e^{i\theta_1} - e^{i\theta_2}) + \frac{\delta\Delta\omega_0^b}{2}(e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}) \\ \tilde{a}_{21} &= -\frac{\Delta\omega_0^a}{2\delta}(e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}) + \frac{\Delta\omega_k^b}{2}\sqrt{\frac{\omega_a - E}{\omega_b + E}}(e^{i\theta_1} - e^{i\theta_2}) \\ \tilde{a}_{22} &= 1 + \frac{\Delta\omega_0^a}{2}\sqrt{\frac{\omega_b + E}{\omega_a - E}}(e^{i\theta_1} - e^{i\theta_2}) - \frac{\delta\omega_k^b}{2}(e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}) \end{aligned}$$

Grinovu funkciju sada možemo predstaviti kao zbir dve matrice:

$$\begin{aligned} \hat{G} &= \frac{i}{\pi} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{11}\hat{d}_{11} - \hat{d}_{11} & \hat{\alpha}_{12}\hat{d}_{12} - \hat{d}_{12} & \dots & \hat{\alpha}_{1n}\hat{d}_{1n} - \hat{d}_{1n} & \dots \\ \hat{\alpha}_{21}\hat{d}_{11} & \hat{\alpha}_{22}\hat{d}_{12} & \dots & \hat{\alpha}_{2n}\hat{d}_{1n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \hat{\alpha}_{m1}\hat{d}_{11} & \hat{\alpha}_{m2}\hat{d}_{12} & \dots & \hat{\alpha}_{mn}\hat{d}_{1n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_a & 0 \\ 0 & -S_b \end{pmatrix} \\ &\quad + \frac{i}{\pi}\hat{D}^{-1} \begin{pmatrix} S_a & 0 \\ 0 & -S_b \end{pmatrix} = \\ &\quad = \hat{G}_S + \hat{G}_B \quad (62) \end{aligned}$$

Kao što ćemo videti Grinova funkcija  $\hat{G}_B$  karakteriše polubeskonačni kristal bez efekata površine ("idealni" polubeskonačni kristal), dok nam Grinova funkcija  $\hat{G}_S$  daje doprinos površinskih efekata.

**2.1.)** Ako nemamo efekte površine, tj.  $\Delta\hat{D}_0 = 0$ , za Grinove funkcije dobijamo:

$$\hat{G}_{mn}(\mathbf{k}_{||}, E) = (\hat{G}_B)_{mn} = \frac{i}{\pi} \hat{d}_{mn} \begin{pmatrix} S_a & 0 \\ 0 & -S_b \end{pmatrix} \quad (63)$$

pa je:

$$\begin{aligned} \hat{G}_{mn}^{aa}(\mathbf{k}_{||}, E) &= \frac{iS_a}{2\pi} \sqrt{\frac{\omega_b + E}{\omega_a - E}} (b_{mn}(\theta_1) - b_{mn}(\theta_2)) \\ \hat{G}_{mn}^{ba}(\mathbf{k}_{||}, E) &= \frac{iS_a}{2\pi\delta} (b_{mn}(\theta_1) + b_{mn}(\theta_2)) \\ \hat{G}_{mn}^{ab}(\mathbf{k}_{||}, E) &= \frac{iS_b\delta}{2\pi} (b_{mn}(\theta_1) + b_{mn}(\theta_2)) \\ \hat{G}_{mn}^{bb}(\mathbf{k}_{||}, E) &= \frac{iS_b}{2\pi} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{\omega_b + E}} (b_{mn}(\theta_1) - b_{mn}(\theta_2)) \end{aligned} \quad (64)$$

Definisaćemo funkciju generatrisu  $b(\theta_i, s, t) \quad i = 1, 2$ :

$$b(\theta_i, s, t) = \sum_{m,n=1}^{\infty} b_{mn}(\theta_i) s^m t^n \quad \text{gde} \quad |t| \leq |s| < 1 \quad (65)$$

koja će nam omogućiti da nadjemo Furije transforme "z" → "k<sub>z</sub>" za Grinove funkcije. Ako stavimo  $X = e^{i\theta_i}$ , tada je na osnovu (60) i (65):

$$b(X, s, t) = \frac{X}{X^2 - 1} \sum_{m,n=1}^{\infty} (X^{m+n} - X^{|m-n|}) s^m t^n$$

Izračunavanjem gornjih suma konačno dobijamo:

$$b(X, s, t) = \frac{Xts}{(1 - Xs)(1 - Xt)(1 - st)} \quad (66)$$

Koristeći (64) i (65) možemo dobiti funkcije generatrise za Grinove funkcije  $G_{mn}^{\alpha\beta}$ :

$$G^{\alpha,\beta}(\mathbf{k}_{||}, s, t, E) = \sum_{m,n=1}^{\infty} G_{mn}^{\alpha,\beta}(\mathbf{k}_{||}, E) s^m t^n$$

odnosno:

$$\begin{aligned}\hat{G}^{aa}(\mathbf{k}_{||}, s, t, E) &= \frac{iS_a}{2\pi} \sqrt{\frac{\omega_b + E}{\omega_a - E}} (b(\theta_1, s, t) - b(\theta_2, s, t)) \\ \hat{G}^{ba}(\mathbf{k}_{||}, s, t, E) &= \frac{iS_a}{2\pi\delta} (b(\theta_1, s, t) + b(\theta_2, s, t)) \\ \hat{G}^{ab}(\mathbf{k}_{||}, s, t, E) &= \frac{iS_b\delta}{2\pi} (b(\theta_1, s, t) + b(\theta_2, s, t)) \\ \hat{G}^{bb}(\mathbf{k}_{||}, s, t, E) &= \frac{iS_b}{2\pi} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{\omega_b + E}} (b(\theta_1, s, t) - b(\theta_2, s, t))\end{aligned}\quad (67)$$

Ovako definisane funkcije generatrise omogućavaju nam da odredimo Furije transform za Grinove funkcije tako što ćemo staviti  $s = e^{iq_z a}$  i  $t = e^{-iq'_z a}$  uz periodične granične uslove (za  $N_z \gg 1$ ):

$$s^{N_z} = t^{N_z} = 1$$

koji daju:

$$q_z = \frac{2\pi}{N_z a} \nu \quad \nu = 0, 1, 2, \dots N_z - 1$$

pa je Furije transform po definiciji za polubeskonačni kristal:

$$G^{\alpha,\beta}(k_x, k_y, q_z, q'_z, E) = \sum_{m,n=1}^{\infty} G_{mn}^{\alpha,\beta}(k_x, k_y, E) e^{iq_z m a - iq'_z n a} \quad (68)$$

Funkcija generatrisa  $b(X, s, t)$  dobija oblik:

$$b(X, q_z, q'_z) = \frac{X N_z \delta_{q_z q'_z}}{(1 - X e^{iq_z a})(1 - X e^{-iq'_z a})} \quad (69)$$

Pošto su Grinove funkcije  $G^{\alpha,\beta}(k_x, k_y, q_z, q'_z, E)$  date pomoću funkcije generatrise  $b(X, q_z, q'_z)$ , na osnovu relacije (69) vidimo da u slučaju periodičnih graničnih uslova i bez površinskih efekata Furije transform (68) ima identičan oblik kao i kod translatorynog invarijantnog magnetika. Polovi Grinove funkcije su određeni polovima funkcije  $b(X, q_z)$  što nam daje:

$$X + \frac{1}{X} = 2 \cos q_z a$$

Odavde vidimo da imamo samo jednu realnu vrednost za  $\theta_i$ :

$$\theta_1 = \theta_2 = \theta = q_z a,$$

a za energiju zapreminskih ekscitacija, koristeći relaciju (58) pri čemu je ( $q_z \equiv k_z, \theta_i = k_z a,$ ) dobijamo isti rezultat kao što je jednačina (51). Grinove funkcije (64) sada ćemo izraziti preko energije  $E$  i talasnog vektora  $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{||}, k_z)$ . U tom cilju moramo funkcije generatrise  $b(X_i, k_z)$  date relacijom (65) izraziti preko energije  $E$  i  $\mathbf{k}$ :

$$b(X_i = e^{i\theta_i}, k_z, k'_z) = \frac{N_z \delta_{k_z k'_z}}{2 \cos \theta_i - 2 \cos k_z a}$$

Koristeći relacije (58) dobijamo:

$$\begin{aligned} b(X_1, k_z, k'_z) &= -\frac{N_z \delta_{k_z k'_z}}{\sqrt{(E + \omega_b)(\omega_a - E)} + \gamma(\mathbf{k})} \\ b(X_2, k_z, k'_z) &= \frac{N_z \delta_{k_z k'_z}}{\sqrt{(E + \omega_b)(\omega_a - E)} - \gamma(\mathbf{k})} \end{aligned} \quad (70)$$

gde je  $\gamma(\mathbf{k}) = 2 \sum_{i=1}^3 \cos k_i a$ . Iz (70) sledi:

$$\begin{aligned} b(X_1, k_z, k'_z) + b(X_2, k_z, k'_z) &= \frac{2\gamma(\mathbf{k}) N_z \delta_{k_z k'_z}}{(E + \omega_b)(\omega_a - E) - \gamma^2(\mathbf{k})} \\ b(X_1, k_z, k'_z) - b(X_2, k_z, k'_z) &= -\frac{2\sqrt{(\omega_a - E)(\omega_b + E)} N_z \delta_{k_z k'_z}}{(E + \omega_b)(\omega_a - E) - \gamma^2(\mathbf{k})} \end{aligned} \quad (71)$$

Ako imenilac funkcija (71) izjednačimo sa nulom, dobijamo polove Grinovih funkcija  $G^{\alpha\beta}(\mathbf{k}_{||}, k_z, k'_z, E)$ , što daje energiju elementarnih zapreminskih ekscitacija ferimagneta. Pomoću jednačina (67) i (71) možemo konačno napisati:

$$\begin{aligned} G^{aa}(\mathbf{k}_{||}, k_z, k'_z, E) &= -\frac{iS_a}{\pi} \frac{E + \omega_b}{(E + \omega_b)(\omega_a - E) - \gamma^2(\mathbf{k})} N_z \delta_{k_z k'_z} \\ G^{ba}(\mathbf{k}_{||}, k_z, k'_z, E) &= \frac{iS_a}{\pi \delta} \frac{\gamma(\mathbf{k})}{(E + \omega_b)(\omega_a - E) - \gamma^2(\mathbf{k})} N_z \delta_{k_z k'_z} \\ G^{ab}(\mathbf{k}_{||}, k_z, k'_z, E) &= \frac{iS_b \delta}{\pi} \frac{\gamma(\mathbf{k})}{(E + \omega_b)(\omega_a - E) - \gamma^2(\mathbf{k})} N_z \delta_{k_z k'_z} \\ G^{bb}(\mathbf{k}_{||}, k_z, k'_z, E) &= -\frac{iS_b}{\pi} \frac{E - \omega_a}{(E + \omega_b)(\omega_a - E) - \gamma^2(\mathbf{k})} N_z \delta_{k_z k'_z} \end{aligned} \quad (72)$$

Ovaj rezultat je u saglasnosti sa rezultatom Furije transforma Grinovih funkcija u beskonačnom kristalu (koje dobijamo iz jednačine (50)).

**2.2.)** Drugi slučaj je kada imamo efekte površine tj.  $\Delta\hat{D}_0 \neq 0$  pa su matrični elementi matrice  $\hat{G}_S$ :

$$\begin{aligned} m = 1 \quad (\hat{G}_S)_{mn} &= \hat{\alpha}_{1n}\hat{d}_{1n} - \hat{d}_{1n} = -(\hat{d}_{1n}\Delta\hat{D}_0\hat{\alpha}_{11})\hat{d}_{1n} - \hat{d}_{1n} \\ m \geq 2 \quad (\hat{G}_S)_{mn} &= \hat{\alpha}_{m1}\hat{d}_{1n} = -(\hat{d}_{m1}\Delta\hat{D}_0\hat{\alpha}_{11})\hat{d}_{1n} \end{aligned} \quad (73)$$

Ako uvedemo označke:

$$b_1^+ = e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2} \quad b_1^- = e^{i\theta_1} - e^{i\theta_2} \quad (74)$$

$$d_m^{11} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_m^- \left\{ \Delta\omega_0^a \left[ 1 + \frac{\Delta\omega_k}{2} b_1^+ - \frac{\Delta\omega_0^b}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} b_1^- \right] - \right.$$

$$\left. \Delta\omega_k \left[ \frac{\Delta\omega_0^a}{2} b_1^+ + \frac{\Delta\omega_k}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} b_1^- \right] \right\} +$$

$$\frac{1}{2} b_m^+ \left\{ \Delta\omega_k \left[ 1 + \frac{\Delta\omega_k}{2} b_1^+ - \frac{\Delta\omega_0^b}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} b_1^- \right] + \right.$$

$$\left. \Delta\omega_0^b \left[ \frac{\Delta\omega_0^a}{2} b_1^+ + \frac{\Delta\omega_k}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} b_1^- \right] \right\}$$

$$d_m^{12} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_m^- \left\{ \Delta\omega_0^a \delta \left[ -\frac{\Delta\omega_k}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_1^- + \frac{\Delta\omega_0^b}{2} b_1^+ \right] + \right.$$

$$\left. \delta\Delta\omega_k \left[ 1 + \frac{\Delta\omega_0^a}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_1^- + \frac{\Delta\omega_k}{2} b_1^+ \right] \right\} +$$

$$\frac{b_m^+}{2} \left\{ \Delta\omega_k \left[ -\frac{\Delta\omega_k \delta}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_1^- + \frac{\delta\Delta\omega_0^b}{2} b_1^+ \right] - \right.$$

$$\left. \delta\Delta\omega_0^b \left[ 1 + \frac{\Delta\omega_0^a}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_1^- + \frac{\Delta\omega_k}{2} b_1^+ \right] \right\}$$

$$d_m^{21} = \frac{1}{2\delta} b_m^+ \left\{ \Delta\omega_0^a \left[ 1 + \frac{\Delta\omega_k}{2} b_1^+ - \frac{\Delta\omega_0^b}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} b_1^- \right] - \right.$$

$$\left. \Delta\omega_k \left[ \frac{\Delta\omega_0^a}{2} b_1^+ + \frac{\Delta\omega_k}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} b_1^- \right] \right\} -$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} b_m^- \left\{ \Delta \omega_k \left[ 1 + \frac{\Delta \omega_k}{2} b_1^+ - \frac{\Delta \omega_0^b}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} b_1^- \right] + \right. \\
 & \quad \left. \Delta \omega_0^b \left[ \frac{\Delta \omega_0^a}{2} b_1^+ + \frac{\Delta \omega_k^b}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} b_1^- \right] \right\} \\
 d_m^{22} = & \frac{1}{2\delta} b_m^+ \left\{ \Delta \omega_0^a \delta \left[ -\frac{\Delta \omega_k}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_1^- + \frac{\Delta \omega_0^b}{2} b_1^+ \right] + \right. \\
 & \quad \left. \delta \Delta \omega_k \left[ 1 + \frac{\Delta \omega_0^a}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_1^- + \frac{\Delta \omega_k}{2} b_1^+ \right] \right\} + \\
 & \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_m^- \left\{ \Delta \omega_k \left[ -\frac{\Delta \omega_k \delta}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_1^- + \frac{\delta \Delta \omega_0^b}{2} b_1^+ \right] - \right. \\
 & \quad \left. \delta \Delta \omega_0^b \left[ 1 + \frac{\Delta \omega_0^a}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} b_1^- + \frac{\Delta \omega_k}{2} b_1^+ \right] \right\}
 \end{aligned}$$

i koristeći relacije (63) i (73) iz jednačina:

$$\begin{aligned}
 m = 1 \quad \hat{G}_{mn,s}(\mathbf{k}_{||}, E) &= \frac{i}{\pi} (\hat{\alpha}_{1n} \hat{d}_{1n} - \hat{d}_{1n}) \begin{pmatrix} S_a & 0 \\ 0 & -S_b \end{pmatrix} \\
 m \geq 2 \quad \hat{G}_{mn,s}(\mathbf{k}_{||}, E) &= \frac{i}{\pi} \hat{\alpha}_{m1} \hat{d}_{1n} \begin{pmatrix} S_a & 0 \\ 0 & -S_b \end{pmatrix} \tag{75}
 \end{aligned}$$

dobijamo Grinove funkcije koje daju doprinos površinskih efekata:

$$\begin{aligned}
 G_{mn,s}^{aa}(\mathbf{k}_{||}, E) &= -\frac{iS_a}{\pi} \frac{1}{\det|\hat{I} + \hat{d}_{11} \Delta \hat{D}_0|} \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} d_m^{11} b_n^- + \frac{1}{2\delta} d_m^{12} b_n^+ \right] \\
 G_{mn,s}^{ba}(\mathbf{k}_{||}, E) &= -\frac{iS_a}{\pi} \frac{1}{\det|\hat{I} + \hat{d}_{11} \Delta \hat{D}_0|} \left[ -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{E + \omega_b}{\omega_a - E}} d_m^{21} b_n^- + \frac{1}{2\delta} d_m^{22} b_n^+ \right] \\
 G_{mn,s}^{ab}(\mathbf{k}_{||}, E) &= \frac{iS_b}{\pi} \frac{1}{\det|\hat{I} + \hat{d}_{11} \Delta \hat{D}_0|} \left[ -\frac{\delta}{2} d_m^{11} b_m^+ + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} d_m^{12} b_n^- \right] \\
 G_{mn,s}^{bb}(\mathbf{k}_{||}, E) &= \frac{iS_b}{\pi} \frac{1}{\det|\hat{I} + \hat{d}_{11} \Delta \hat{D}_0|} \left[ -\frac{\delta}{2} d_m^{21} b_m^+ + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega_a - E}{E + \omega_b}} d_m^{22} b_n^- \right] \tag{76}
 \end{aligned}$$

Ovaj rezultat je u skladu sa Vojnovićevim transformiranim Grinovim funkcijama beskonačnom kristalu (koje dobijamo iz jednačine (50)).

Iz poslednjih relacija vidimo da gornje Grinove funkcije poseduju dopunske polove date relacijom:

$$\det|\hat{I} + \hat{d}_{11}\Delta\hat{D}_0| = 0 \quad (77)$$

Jednačina (77) daje energije površinskih eksitacija. Ako odredimo Furije transforme Grinovih funkcija (76) dobicemo i polove koji određuju energiju zapreminskih eksitacija, kao i za funkcije (72). Eksplisitne izraze ovih Furije transforma nećemo navoditi, ali ćemo napomenuti da je razlika u tome što će se javiti dva pola i to u tački  $q_z$  i  $q'_z$ , što sledi iz činjenice da se, primenjujući prethodni postupak (u slučaju odsustva efekta površine), u funkciji generatrisi ne javlja Kronekerov simbol  $\delta_{q_z q'_z}$ . Koristeći relacije (56), (60), (74), (77) sledi:

$$1 + \Delta\omega_k(e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}) + \frac{1}{2} \left( \Delta\omega_0^a \sqrt{\frac{E + \omega_0^b}{\omega_0^a - E}} - \Delta\omega_0^b \sqrt{\frac{\omega_0^a - E}{E + \omega_0^b}} \right) (e^{i\theta_1} - e^{i\theta_2}) + \\ + (\Delta\omega^a \Delta\omega_0^b + (\Delta\omega_k)^2) e^{i(\theta_1 + \theta_2)} = 0 \quad (78)$$

Jednačinu (78) transformisacemo u jednačinu za određivanje promenljive  $x = -i \cot \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$ , koja određuje energije površinskih eksitacija. Relacije (58) daju za energiju površinskih eksitacija:

a) ferimagnet

$$(E - \frac{\omega_a - \omega_b}{2})^2 = (\frac{\omega_a + \omega_b}{2})^2 - \frac{\omega_k^2}{x^2} - \frac{4}{1 - x^2}$$

b) antiferomagnet ( $\omega_a = \omega_b = \omega_0$ )

$$E = \pm \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\omega_k^2}{x^2} - \frac{4}{1 - x^2}}$$

Posle niza trigonometrijskih transformacija jednačina (78) se svodi na:  
a) za ferimagnet:

$$\begin{aligned} & \Delta\omega_k \omega_k - x[1 - \frac{1}{2}\Delta\omega_0^a \omega_0^b + \frac{1}{2}\Delta\omega_0^b \omega_0^a - \\ & - \Delta\omega_0^a \Delta\omega_0^b - (\Delta\omega_k)^2] - x^2[-1 + \omega_k \Delta\omega_k - (\Delta\omega_k)^2 - \Delta\omega_0^a \Delta\omega_0^b] - \\ & - x^3 \frac{1}{2}(\Delta\omega_0^a \omega_0^b - \Delta\omega_0^b \omega_0^a) - \frac{1}{2}E(\Delta\omega_0^a + \Delta\omega_0^b)x(x^2 - 1) = 0 \end{aligned}$$

b) za antiferomagnet

$$\omega_0^a = \omega_0^b = \omega_0 \quad \Delta\omega_0^a = -\Delta\omega_0^b = \Delta\omega_0$$

$$\omega_k \Delta\omega_k - x[1 - \Delta\omega_0 \omega_0 + (\Delta\omega_0)^2 - (\Delta\omega_k)^2] -$$

$$x^2[\omega_k \Delta\omega_k - (\Delta\omega_k)^2 + (\Delta\omega_0)^2 - 1] - x^3 \Delta\omega_0 \omega_0 = 0$$

Dobili smo rezultat istraživanja: zakon disperzije površinskih magnona za slučaj ferimagnetika i antiferomagnetika. Rezultat smo ostavili u implicitnoj formi (izraz za energiju zavisi od parametra  $x$  koji se dobija kao rešenje algebarske jednačine čiji koeficijenti zavise samo od parametra sistema), zbog jednostavnije numeričke obrade. Za ferimagnetike je ova jednačina šestog reda, a za antiferomagnetike trećeg. Jednačine u eksplisitnom obliku smo takođe izračunali ali ih ovde nećemo navoditi jer ih u primerima koji slede nećemo koristiti.

## 4 Analiza dobijenih rezultata

U ovoj glavi ćemo razmatrati spektar elementarnih površinskih eksitacija menjajući parametre sistema. Uobičajeni način prikazivanja rezultata je da se na istom grafiku crta energija zapreminskih ("bulk") i površinskih ("surface") pobuđenja. Energija se obično crta u funkciji dvodimenzionalnog talasnog vektora  $k_{\parallel}$  ili što je jednostavnije  $\omega_k$  ili  $4 - \omega_k$ . Ovo je bezdimenzionalna veličina koja sa menja u intervalu od 0 do 4.

Da bi se prikazala energija zapreminskih pobuđenja potrebno je na određen način prikazati zavisnost od  $k_z$ . Pošto ova stanja u polubeskonačnom kristalu čine zonu, tj. kontinuum, na grafiku se crta donja granica ("dno" ili "bottom") i gornja granica ("vrh" ili "top") energije, koje odgovaraju minimalnoj i maksimalnoj vrednosti člana  $\cos k_z a_0$ , a deo između njih je ispunjen svim ostalim vrednostima energije.

Pre nego što pređemo na konkretne primere ispitaćemo koja rešenja veličine  $x$  zadovoljavaju fizičke uslove, izražene u činjenici da amplitude talasa površinskih eksitacija moraju opadati sa udaljenošću od površine. Neka kompleksne veličine  $\theta_1$  i  $\theta_2$  u opštem slučaju imaju oblik:

$$\theta_1 = \alpha_1 + i\eta_1 \quad \theta_2 = \alpha_2 + i\eta_2$$

što posle zamene u  $x$  daje:

$$x = -i \frac{\sin \alpha \cos \alpha}{\sin \alpha^2 \coth \eta^2 + \cos \alpha^2 \sinh \eta^2} - \frac{\sinh \eta \cosh \eta}{\sin \alpha^2 \coth \eta^2 + \cos \alpha^2 \sinh \eta^2}$$

gde je:

$$\alpha = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} \quad \eta = \frac{\eta_1 + \eta_2}{2}$$

Pošto je energija površinskih pobuđenja realna,  $x$  mora biti ili čisto realan ili čisto imaginaran broj. Zbog ranije navedenog fizičkog uslova, zaključujemo da fizičkog smisla imaju samo površinski talasi za koje važi  $\eta_1 > 0$  i  $\eta_2 > 0$ , pa iz prethodne jednačine sledi:

$$\sin 2\alpha = 0 \quad \Rightarrow \quad 2\alpha = n\pi$$

pa je:

$$\begin{aligned} 1. \quad n = 0 \quad \alpha &= \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} = 0 \\ 2. \quad n = 1 \quad \alpha &= \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} = \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

U prvom slučaju dobijamo:

$$x_1 = -\coth \eta < -1 \quad (79)$$

i to predstavlja optičke magnone ( $E_S > E_B$ ), a u drugom:

$$x_2 = -\tanh \eta \text{ pa je } -1 < x_2 < 0 \quad (80)$$

što nam daje akustičke magnone ( $E_S \leq E_B$ ). Iz (79) i (80) zaključujemo da samo negativna rešenja za  $x$  daju fizički prihvatljive vrednosti za energiju površinskih pobuđenja.

Posle niza proračuna, za slučaj  $\alpha = 0$  (optičke grane) i  $\alpha_1, \alpha_2 \neq 0, \pm\pi, \dots$ , sva rešenja su fizički prihvatljiva, jer je  $\eta_1 = \eta_2 = \kappa > 0$  i  $x < -1$ . Faza  $\alpha_1 = -\alpha_2$  je data relacijom:

$$\cos \alpha_1 = -\frac{\omega_k}{2 \coth \kappa}.$$

Za drugi slučaj  $\alpha = \pi$  (akustičke grane) rešenja koja zadovoljavaju fizičke uslove su za  $\alpha_1 = \pi, \alpha_2 = 0$  ili  $\alpha_1 = 0, \alpha_2 = \pi$ .

Pokušaćemo da uporedimo naše rezultate sa radom Wolfram i De Wames [8]. Prvo ćemo razmatrati najjednostavniji slučaj kada je  $\Delta\omega_0 = 0$ , tj. kada parametri na površini i u zapremini zadovoljavaju relacije  $D = D_S = 0$  i  $4J_S = 5J$ , pa se kubna jednačina po  $x$  svodi na kvadratnu jednačinu. Uzimajući u obzir samo uslov da  $x$  mora biti negativno, rezultati koje dobijamo su prikazani na slici (4.1.a). Primetimo da se za  $\varepsilon = 1.25$  javljaju površinska stanja. Uslov ( $\eta_1 > 0$  i  $\eta_2 > 0$ ), odbacuje fizički neprihvatljiva rešenja, pa se akustičke grane ne pojavljuju (sl. 4.1.b). Za antiferomagnet za iste parametre sistema takođe nema površinskih stanja (sl. 4.2). Ovi rezultati su u saglasnosti sa rezultatima u [8].

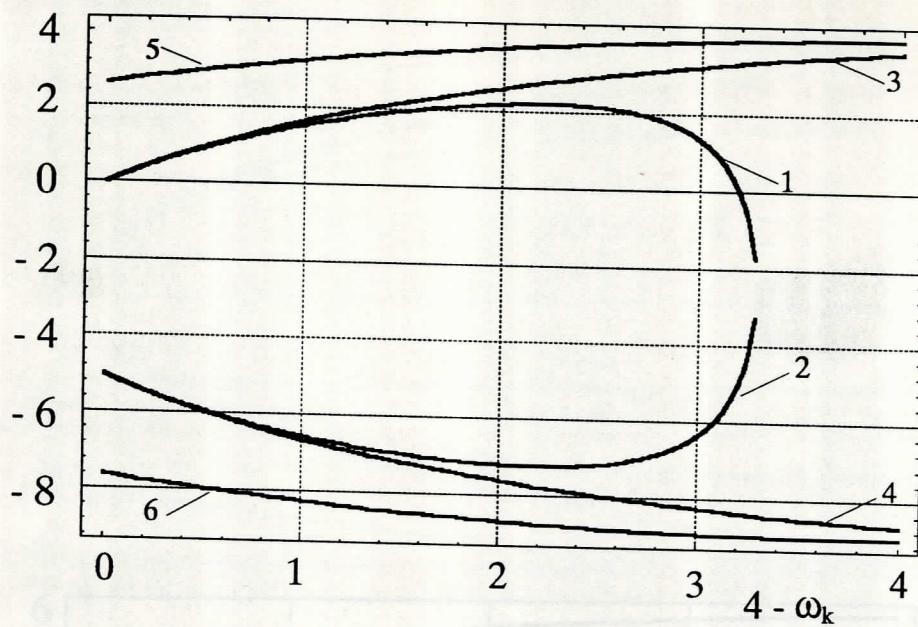
Dalje ćemo računati spektre za  $D = D_S = 0$  i  $a = 0$ , dakle za čist antiferomagnetik, menjajući vrednost  $\varepsilon$ . Vidimo da se za  $-0.112 < \varepsilon < 1.107$  javljaju akustičke grane duž cele Briluenove zone (primer na slici 4.3). Na granici  $\varepsilon = 1.107$ , pa sve do  $\varepsilon = 1.207$  akustička grana je odsečena za male vrednosti  $k_{\parallel}$  (slike 4.4 i 4.5). Za  $\varepsilon > 1.25$  postoji kompletan optička grana. To je prikazano na slikama (4.6), (4.7) i (4.8). Do presecanja optičke grane sa vrhom balka ne dolazi, jer kao što se može pokazati energija optičkih magnona je uvek veća od energije balka. Jedino se poslednji rezultat razlikuje od onih u [8].

Na kraju ćemo razmatrati antiferomagnet ali za  $D \neq 0$  i  $D_S \neq 0$ , za dve vrednosti  $\varepsilon$  i za različite vrednosti parametra  $a$ . U prvom slučaju  $\varepsilon = 1.107$

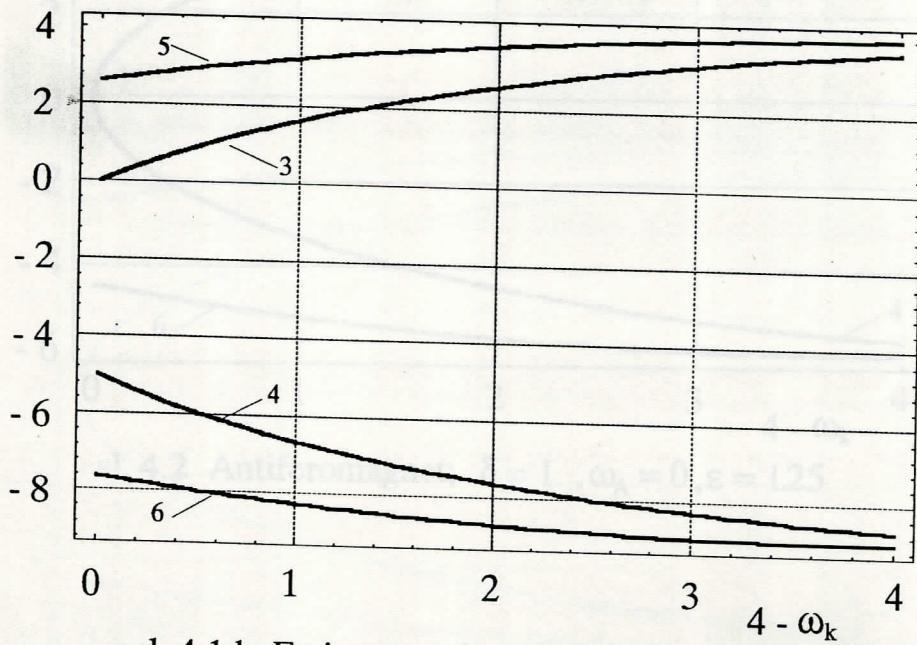
i  $a = 0$  ne postoje površinske grane. Numeričkim putem smo pronašli graničnu vrednost  $a$  za koju se površinski spinski talasi pojavljuju (slika 4.9.a). Imamo samo jednu granu i ona se nalazi iznad oblasti zapreminskih ekscitacija. Povećavanjem parametra  $a$  takođe se javlja jedna optička grana, ali dolazi do pomeranja ukupne energije sistema (slike 4.9.b i 4.9.c). Za slučaj  $\varepsilon = 1.207$  primeri su dati na slikama (4.10.a – 4.10.c). Vidimo da postoji značajna razlika u energetskim stanjima u odnosu na prethodnu situaciju kada je bio zanemaren uticaj jednojonske anizotropije.

Iz navedenih primera možemo zaključiti da kada nema uticaja jednojonske anizotropije tj.  $D = D_S = 0$ , parametar  $a$  ne utiče na oblast definisanosti energije površinskih ekscitacija ( jednačina za  $x$  ne sadrži  $a$  ), pa nema uticaja bikvadratne interakcije. U tom slučaju svi rezultati, osim gore napomenutog, su u saglasnosti sa radom Wolframa i De Wamesa. Ako je  $D \neq D_S \neq 0$  parametar  $a$  utiče ne samo na ukupnu energiju sistema nego i na oblast definisanosti energije u Briluenovoj zoni.

Cilj ovog rada bio je ispitivanje spektra površinskih ekscitacija u polubeskonačnom ferimagnetiku i antiferomagnetiku proste kubne strukture metodom Grinovih funkcija. Istim metodom mogu se odrediti i mnogi drugi parametri sistema (magnetizacija, polarizacija,...), ali to prevazilazi okvire ovog rada.



sl. 4.1.a Ferimagnet;  $\delta = 1.5, \omega_A = 0, \varepsilon = 1.25$



sl. 4.1.b Ferimagnet;  $\delta = 1.5, \omega_A = 0, \varepsilon = 1.25$

1 —  $E_s^+$

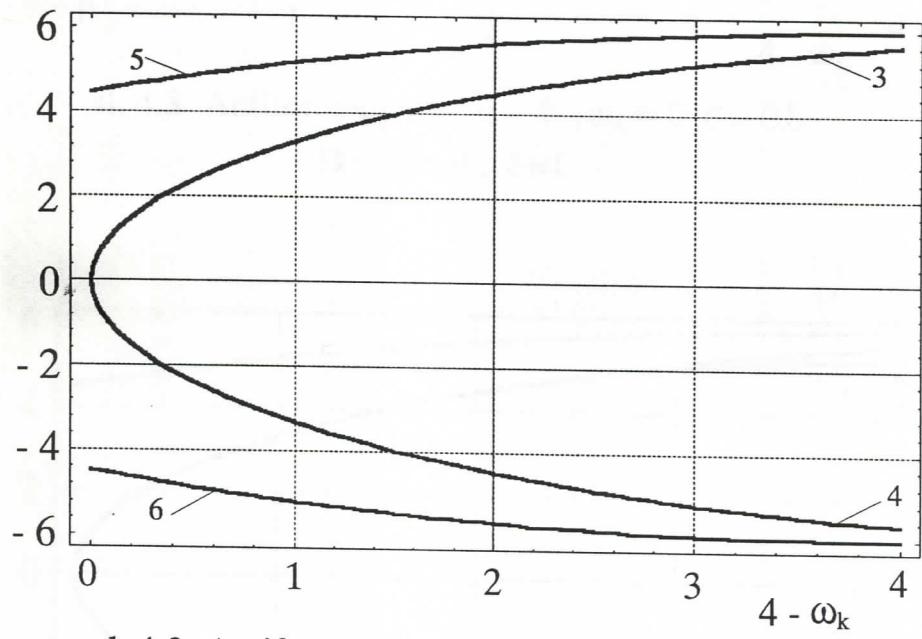
2 —  $E_s^-$

3 —  $E_B^{BOTT+}$

4 —  $E_B^{BOTT-}$

5 —  $E_B^{TOP+}$

6 —  $E_B^{TOP-}$



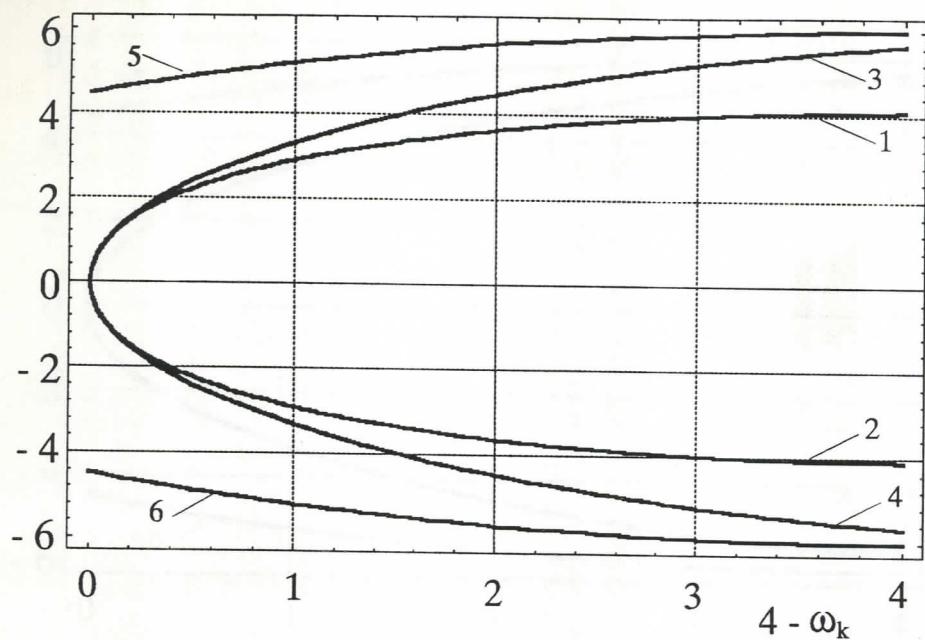
sl. 4.2 Antiferomagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\varepsilon = 1.25$

3 —  $E_B^{\text{BOTT}+}$

4 —  $E_B^{\text{BOTT}-}$

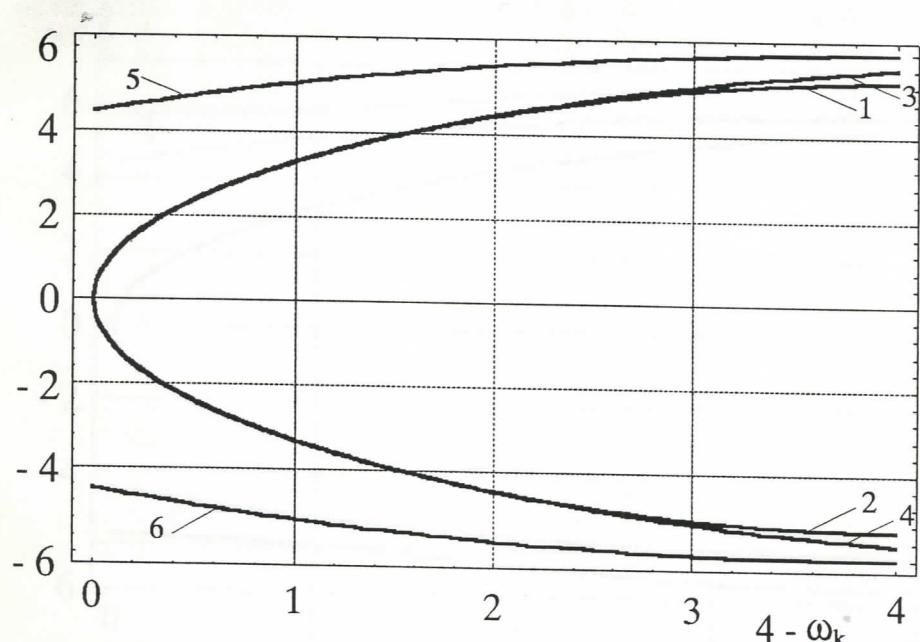
5 —  $E_B^{\text{TOP}+}$

6 —  $E_B^{\text{TOP}-}$



sl. 4.3 Antiferomagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\epsilon = 0.8$

$D = D_S = 0$ ,  $S=1$



sl. 4.4 Antiferomagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\epsilon = 1.107$

$D = D_S = 0$ ,  $S=1$

1 —  $E_S^+$

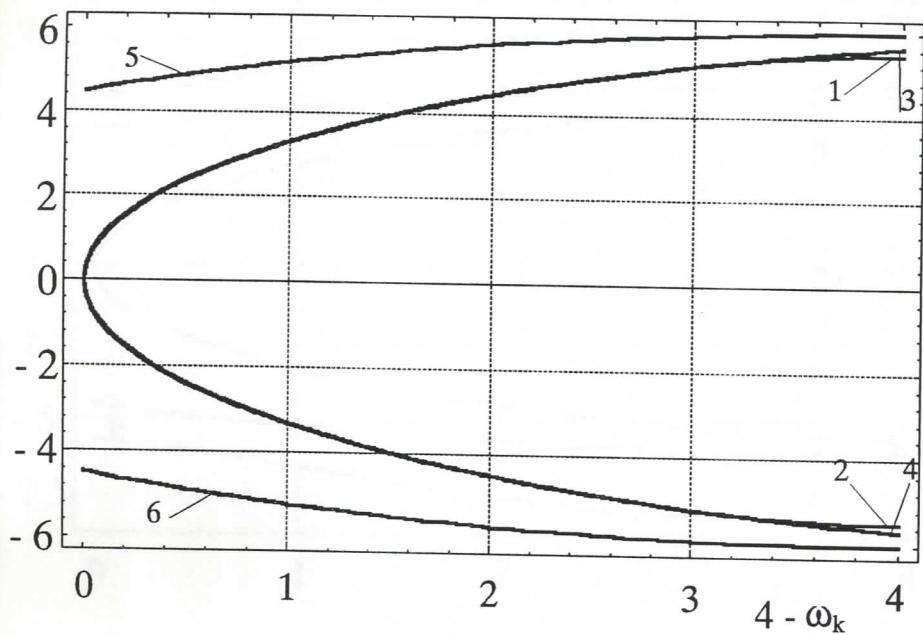
2 —  $E_S^-$

3 —  $E_B^{BOTT+}$

4 —  $E_B^{BOTT-}$

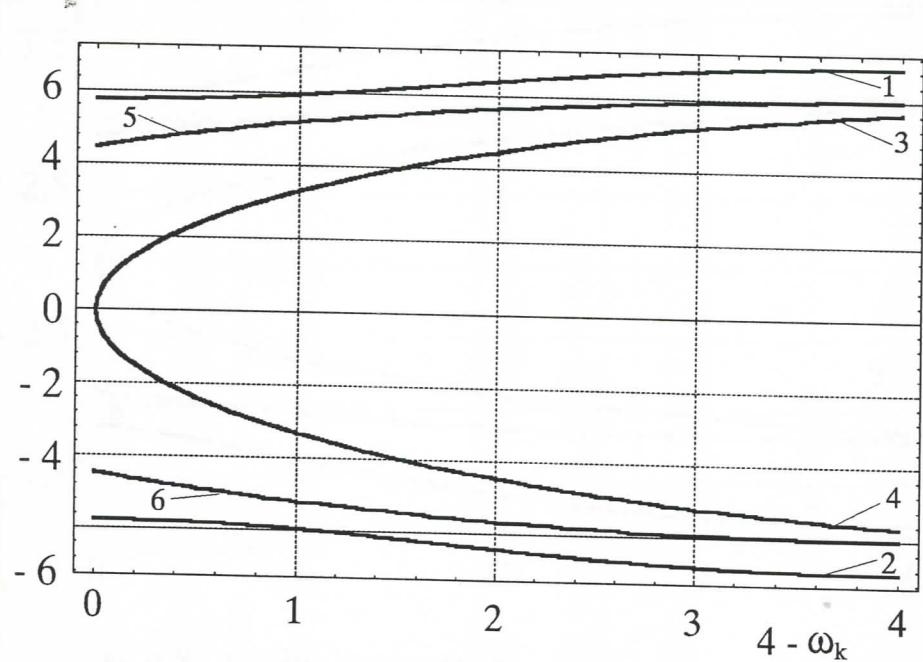
5 —  $E_B^{TOP+}$

6 —  $E_B^{TOP-}$



sl. 4.5 Antiferromagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\varepsilon = 1.15$

$D = D_S = 0$ ,  $S=1$



sl. 4.6 Antiferromagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\varepsilon = 1.5$

$D = D_S = 0$ ,  $S=1$

1 —  $E_s^+$

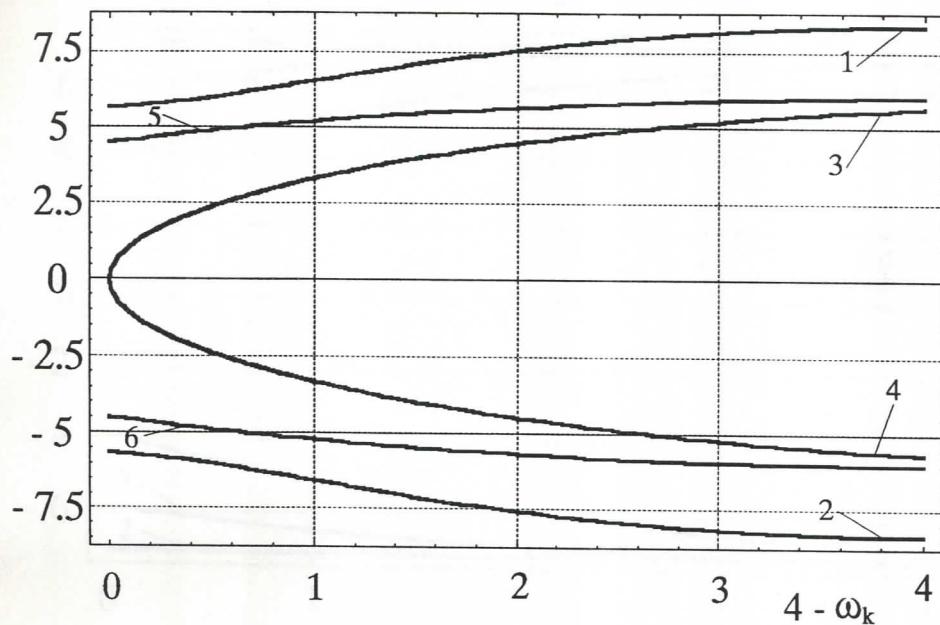
2 —  $E_s^-$

3 —  $E_B^{BOTT+}$

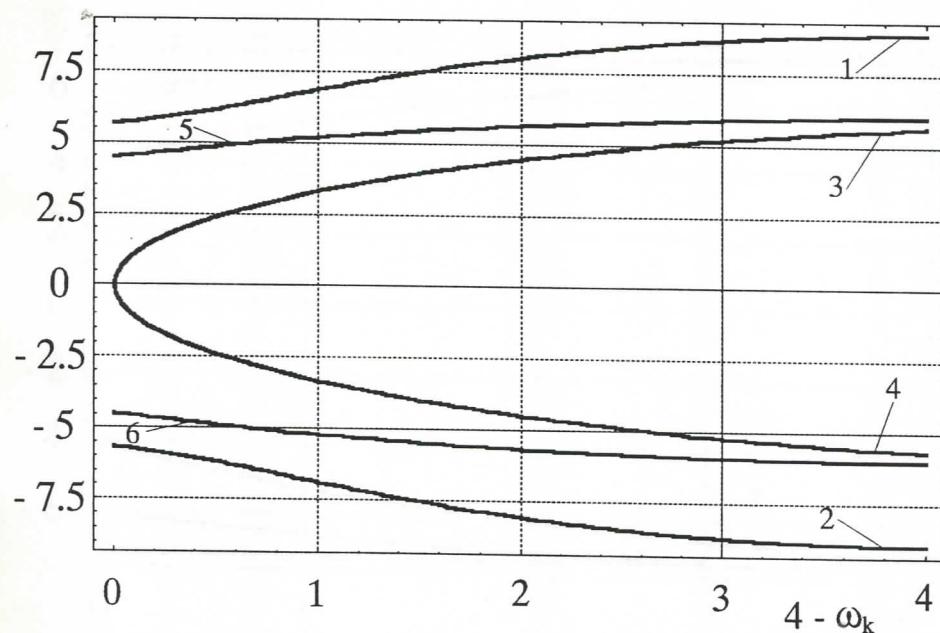
4 —  $E_B^{BOTT-}$

5 —  $E_B^{TOP+}$

6 —  $E_B^{TOP-}$



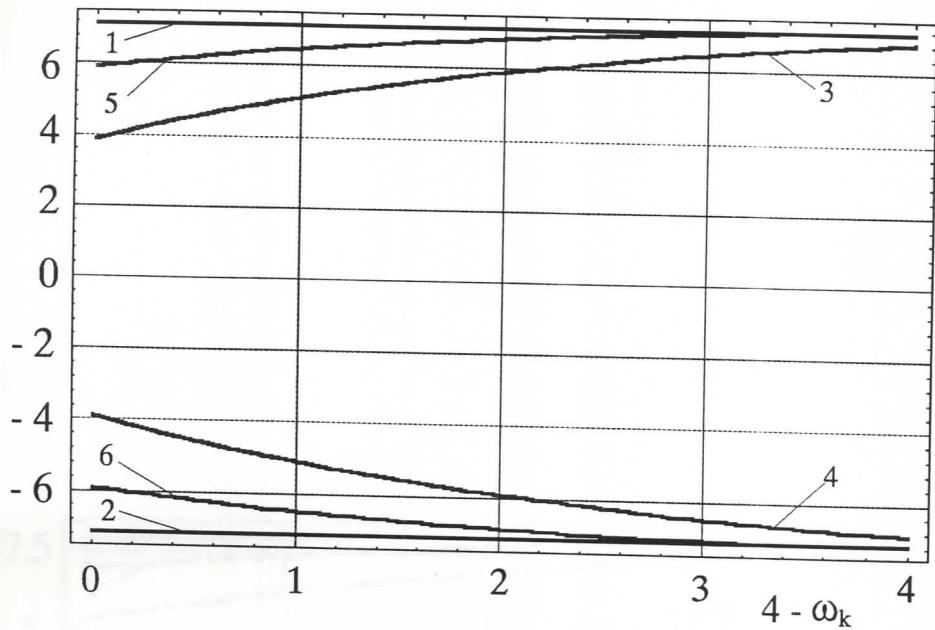
sl. 4.7 Antiferromagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\varepsilon = 1.854$   
 $D = D_S = 0$ ,  $S=1$



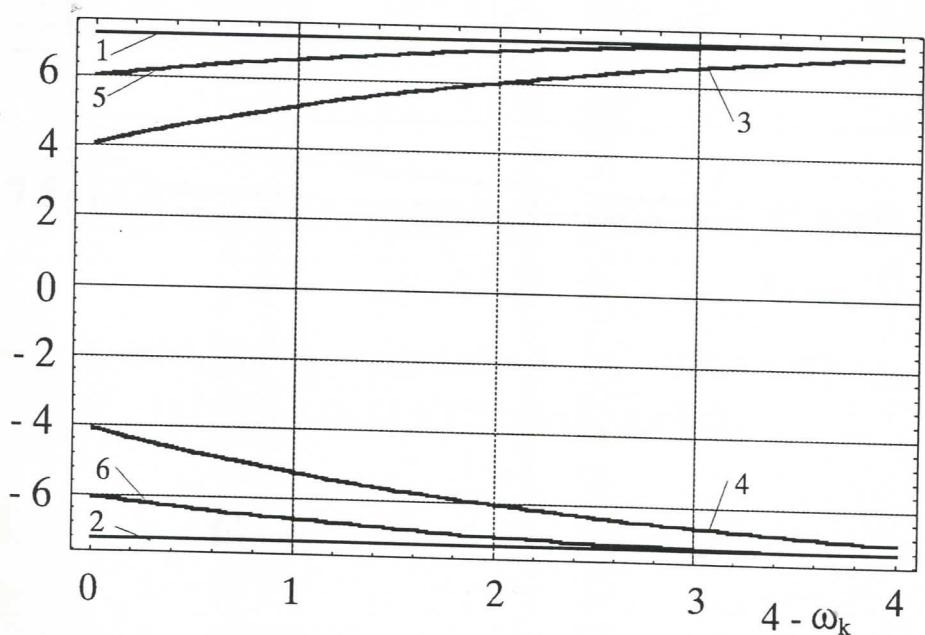
sl. 4.8 Antiferromagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\varepsilon = 2$   
 $D = D_S = 0$ ,  $S=1$

1 —  $E_s^+$   
 2 —  $E_s^-$   
 3 —  $E_B^{\text{BOTT}+}$

4 —  $E_B^{\text{BOTT}-}$   
 5 —  $E_B^{\text{TOP}+}$   
 6 —  $E_B^{\text{TOP}-}$



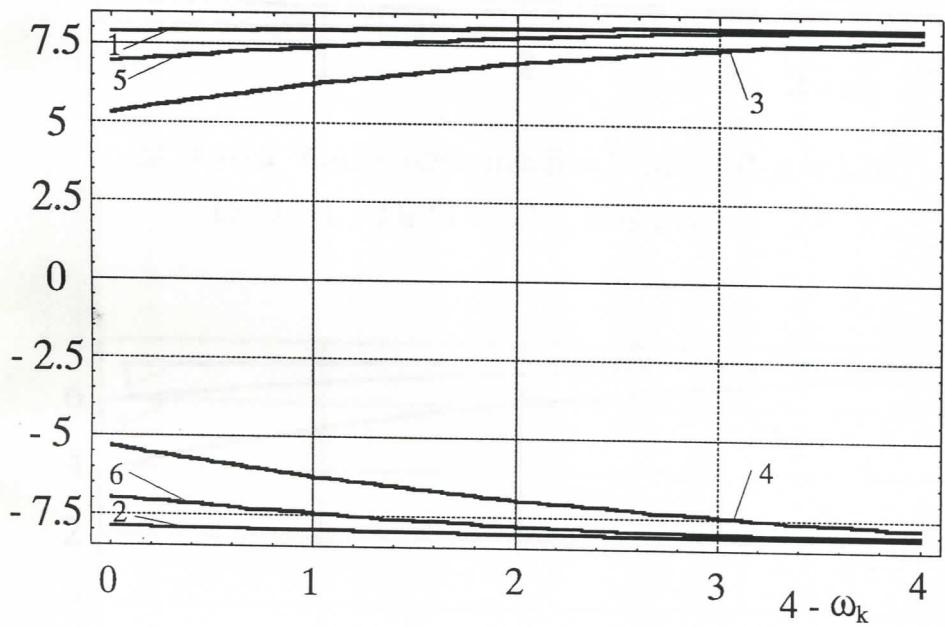
sl. 4.9.a Antiferromagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\varepsilon = 1.107$   
 $D / J = 1$ ,  $D_S / J = 1.5$ ,  $S=1$ ,  $a = 0.12588$



sl. 4.9.b Antiferromagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\varepsilon = 1.107$   
 $D / J = 1$ ,  $D_S / J = 1.5$ ,  $S=1$ ,  $a = 0.2$

1 —  $E_S^+$   
 2 —  $E_S^-$   
 3 —  $E_B^{BOTT+}$

4 —  $E_B^{BOTT-}$   
 5 —  $E_B^{TOP+}$   
 6 —  $E_B^{TOP-}$



sl. 4.9.c Antiferromagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\varepsilon = 1.107$

$D/J = 1$ ,  $D_S/J = 1.5$ ,  $S=1$ ,  $a=0.5$

1 —  $E_S^+$

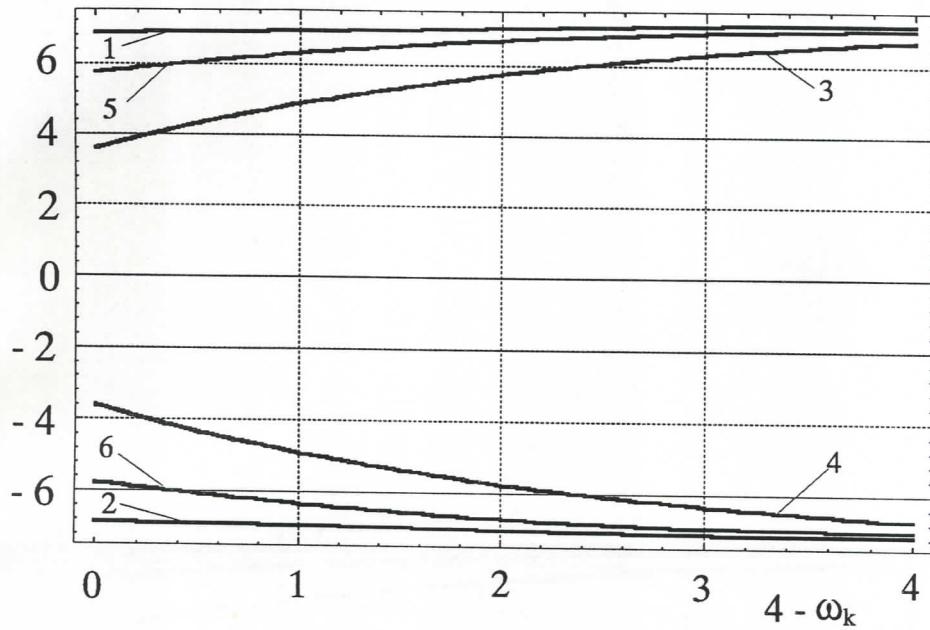
2 —  $E_S^-$

3 —  $E_B^{BOTT+}$

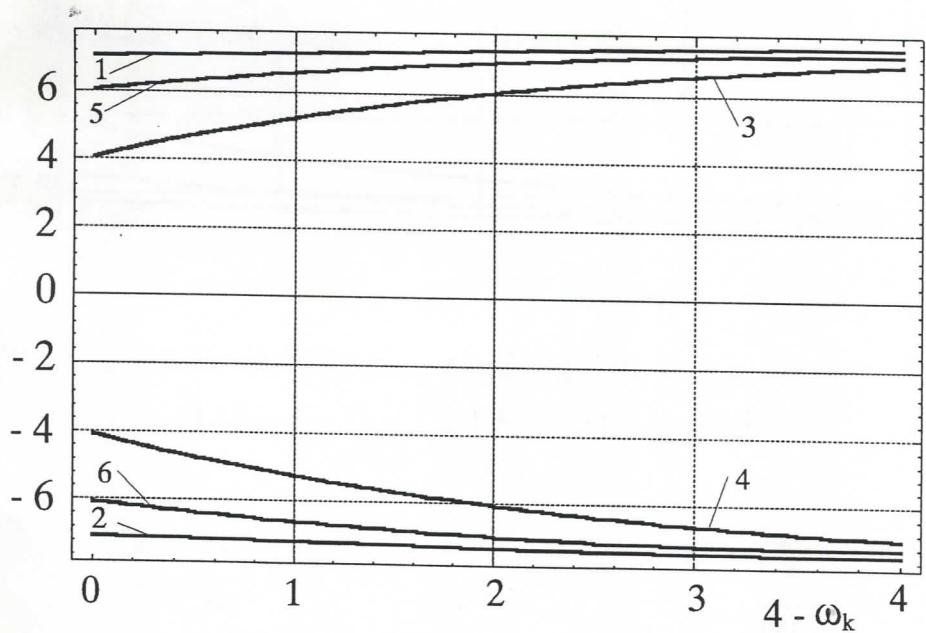
4 —  $E_B^{BOTT-}$

5 —  $E_B^{TOP+}$

6 —  $E_B^{TOP-}$



sl. 4.10.a Antiferromagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\epsilon = 1.207$   
 $D/J = 1$ ,  $D_S/J = 1.5$ ,  $S=1$ ,  $a=0$



sl. 4.10.b Antiferromagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\epsilon = 1.207$   
 $D/J = 1$ ,  $D_S/J = 1.5$ ,  $S=1$ ,  $a=0.2$

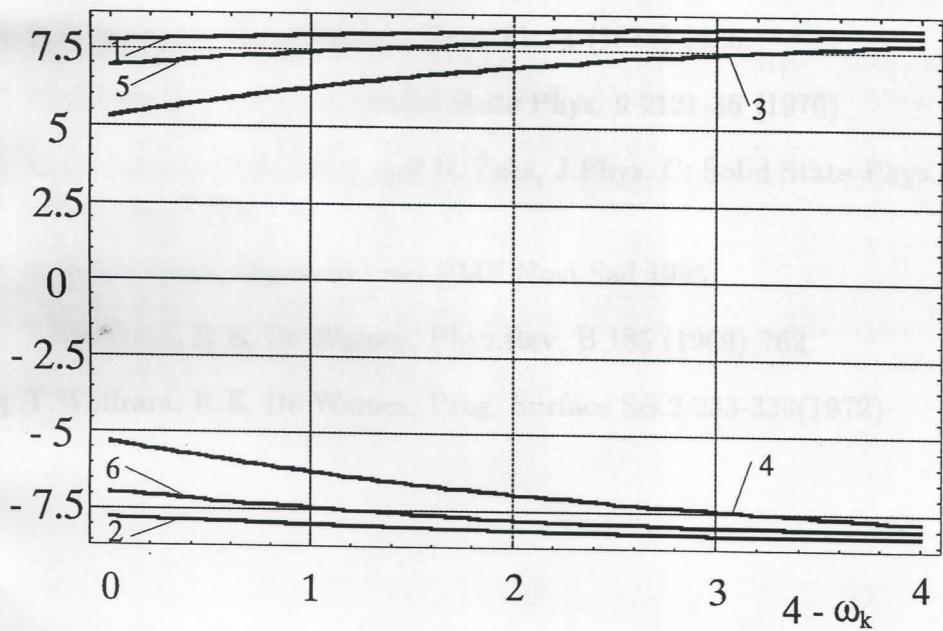
1 —  $E_s^+$   
 2 —  $E_s^-$   
 3 —  $E_B^{BOT+}$

4 —  $E_B^{BOT-}$   
 5 —  $E_B^{TOP+}$   
 6 —  $E_B^{TOP-}$

## LITERATURA

### Literature

- D) M.G. Cottam, D.R. Tiley, Introduction to Surface and Superlattice Excitations (Cambridge University Press, 1993.)  
 D) H.J. Choi, Phys. Rev. Lett. Vol. 92 (1995) 4201  
 D) J. Kudrnovský, vlastnosti abstraktního vzájemodějství atomů



sl. 4.10.c Antiferomagnet;  $\delta = 1$ ,  $\omega_A = 0$ ,  $\varepsilon = 1.207$

$D/J = 1$ ,  $D_S/J = 1.5$ ,  $S=1$ ,  $a=0.5$

1 —  $E_S^+$   
 2 —  $E_S^-$   
 3 —  $E_B^{BOTT+}$

4 —  $E_B^{BOTT-}$   
 5 —  $E_B^{TOP+}$   
 6 —  $E_B^{TOP-}$

## Literatura

- [1] M.G. Cottam, D.R. Tiley, Introduction to Surface and Superlattice Excitations (Cambridge University Press, 1989 )
- [2] H.H. Chen, P.M. Levy, Phys. Rev. B 7 (1973) 4267
- [3] E. Nagaev, Magnetiki so slozhnymi obmennymi vzaimodeistviyami (Nauka Moskva, 1988)
- [4] B,M.Matveev, Žurn. Eksp. i Teor. Fiz. 4 (1973) 1626.
- [5] M.G.Cottam, J.Phys. C: Solid State Phys. 9 2121-36 (1976)
- [6] M.G.Cottam, D.R.Tilley and B. Žekš, J.Phys. C: Solid State Phys. 17 1793-1824 (1984)
- [7] Andelka Ćelić, Diplomski rad,PMF Novi Sad 1995.
- [8] T.Wolfram, R.E. De Wames, Phys.Rev. B 185 (1969) 762.
- [9] T.Wolfram, R.E. De Wames, Prog. Surface Sci.2 233-330(1972)