



UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU



Milica Pavkov

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	12 ЈУН 2002
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	БРОЈ
0603	335/1

# Elementarne ekscitacije i termodinamičke osobine magnetnih superrešetki i magnetika sa više podrešetki

-doktorska disertacija-

Novi Sad, 2002.

Ovim putem želim da se zahvalim svima koji su doprineli izradi ove teze. Zahvaljujem Prof. Dr Darku Kaporu, mentoru, za pruženu podršku i izuzetno korisne sugestije prilikom analize problema čije je rešavanje dovelo do ove teze, kao i savetima koji su pomogli da se isprave pojedini propusti i nepreciznosti u tekstu. Posebnu zahvalnost dugujem Prof. Dr Mariju Škrinjaru za svesrdnu podršku, nesebičnu pomoć i pažnju i stalno usmeravanje i praćenje naučne i obrazovne aktivnosti tokom izrade ove disertacije. Zahvaljujem Prof. Dr Stanoju Stojanoviću, koji mi je kao rukovodilac Laboratorije za teorijsku fiziku kondenzovanog stanja materije, omogućio da se bavim problematikom iz koje je proizašao ovaj rad. Posebno se zahvaljujem mr Nenadu Đapiću za pomoć prilikom pripreme i obrade teksta.

Novi sad, 12.06.2002.

# Sadržaj

<b>Uvod</b>	<b>1</b>
<b>1 Spektar površinskih spinskih talasa za Hajzenbergov ferimagnetik sa dve podrešetke</b>	<b>5</b>
1.1 Analiza rezultata . . . . .	12
<b>2 Uticaj translatorne simetrije na elementarne ekscitacije u feromagneti- nim superrešetkama</b>	<b>19</b>
2.1 Elementarne ekscitacije u superrešetki sa defektnom čelijom . . . . .	23
2.2 Elementarne ekscitacije u polu-beskonačnoj superrešetki . . . . .	27
2.3 Elementarne ekscitacije u višeslojnim strukturama (filmovima) . . . . .	30
2.4 Analiza rezultata . . . . .	31
<b>3 Složene magnetne strukture sa prostornom anizotropijom</b>	<b>39</b>
3.1 Sistemi sa više podrešetki sa prostornom anizotropijom . . . . .	40
3.1.1 Neke osobine prostorno anizotropnih magnetika sa četiri podrešetke . . . . .	44
3.2 Elementarne ekscitacije i magnetizacija magnetnih superrešetki sa FM i AF sparivanjem . . . . .	50
3.3 Temperature kompenzacije za sisteme sa tri i četiri podrešetke i superrešetke . . . . .	56
3.3.1 Aproksimacija srednjeg polja za sisteme sa više podrešetki . . . . .	56
3.3.2 Aproksimacija srednjeg polja za superrešetke . . . . .	60
<b>4 Magnetne osobine visokotemperaturskih superprovodnih bakarnih ok- sida</b>	<b>68</b>
4.1 Spinski formalizam . . . . .	71
4.2 Bozonski prilaz . . . . .	75
4.3 Analiza rezultata . . . . .	76

<b>5 Zaključak</b>	<b>85</b>
<b>A Prvi prilog</b>	<b>89</b>
<b>B Drugi prilog</b>	<b>90</b>
<b>Literatura</b>	<b>91</b>

## Uvod

Veći deo savremene fizike kondenzovanog stanja materije, i to kako osnovnih tako i primenjenih istraživanja, zasniva se na razvoju novih materijala neobičnih konfiguracija kao što su višeslojne strukture i superrešetke. Posebno su zanimljivi magnetni materijali s obzirom na njihovu moguću tehnološku primenu. Magnetne superrešetke i višeslojne strukture uglavnom obuhvataju skoro sve kombinacije prelaznih metala i u manjem stepenu elemenata retkih zemalja ( $Fe/Cr, Fe/Cu, Fe/Gd, Co/Cr, Co/Cu, Y/Tb, NiFe/Cu$ ). Neki savremeni fenomeni, kao što su gigantska magnetootpornost (GMR) [1] ili normalna magnetna anizotropija [2], upravo su otkriveni u superrešetkama pošto sadrže veći broj slojeva i većina međupovrši je zaštićena od površinske kontaminacije. Magnetne superrešetke privlače pažnju zbog efekata dimenzionalnosti, magnetne anizotropije na međupovršima, magnetnog sparivanja preko nemagnetskog sloja, efekata spinske strukture i dr.

Otkriće i sinteza novih magnetnih materijala kao i razmatranje poznatih materijala neobičnih geometrija [1, 3, 4, 5], dovelo je do značajnog napretka fundamentalnih istraživanja u magnetizmu. Pored višeslojnih struktura i superrešetki, u ovu klasu materijala spadaju i magnetici sa više podrešetki. Teorija dinamičkih osobina sistema sa više podrešetki nije detaljno proučena jer je mnogo komplikovanija u poređenju sa teorijom dinamičkih osobina feromagnetika i antiferomagnetika. Za to postoje dva razloga: struktura koju sačinjava više podrešetki i činjenica da ukupan Hamiltonian ne komutira sa magnetizacijom podrešetke. S druge strane, složenost sistema uticala je na neke autore da primene veoma komplikovane tehnike [9, 10], koje ponekad vode i do pogrešnih rezultata. Činjenica da samo tačni rezultati omogućavaju poređenje sa eksperimentom nas je nagnala da, primenjujući neke sofisticirane tehnike, detaljno proučimo spektar elementarnih ekscitacija spinskih talasa ovakvih sistema.

Pomenuti autor [9, 10] ispituje takođe i spektar elementarnih ekscitacija superrešetki. Za ispitivanje istih osobina pomenutih sistema, u literaturi nailazimo na još nekoliko metoda, od koji su najznačajniji metod transfer matrice [11], ili metod Grinovih funkcija (GF) [12]. Ipak, neuređenost je ključni sadržaj svih ovih materijala. Iako se ulažu značajni naporci za postizanjem sve veće perfekcije, slobodno se može tvrditi da u skorijoj budućnosti to neće biti postignuto. Neuređenost dovodi do različitih osobina, te se ne treba zadržati na idealnom slučaju translatoryno invarijantnih ravni duž jednog pravca. Potrebno je proučiti situaciju kada se pojavljuje diskontinuitet. Ovo se može manifestovati na dva načina: ili kao površ polubeskonačne superrešetke, ili kao međupovrš, tj. kontakt dve polubeskonačne superrešetke koji je realizovan preko određene ravni i eventualno njenih suseda. Prvi

je ovaj problem obrađivao Barnas (Barnás) u fundamentalnom radu [11], međutim koliko je nama poznato, u literaturi nedostaju teorijski radovi koji se bave ovom tematikom. Razvijanje teorije i eksperimenta koji ispituju efekat neuređenosti je od izuzetnog značaja.

U složenim sistemima kao što su magnetni sistemi sa više podrešetki i magnetne superrešetke, različite vrste anizotropije igraju veoma značajnu ulogu. Zanimljiv je uticaj dve vrste anizotropije na ponašanje ovakvih sistema. Jedna je anizotropija u spiskom prostoru, "spinska" ili "magnetna anizotropija", koja je posledica različite interakcije različitih spiskih komponenti. Druga je "prostorna anizotropija" i nastaje usled različitih vrednosti interakcija spinova unutar i između slojeva. Poznato je da prisustvo spinske anizotropije može dovesti do osnovnog stanja sistema sa nekolinearnom spiskom konfiguracijom, međutim uloga prostorne anizotropije nije sasvim ispitana, a njeno prisustvo omogućava proučavanje veoma zanimljivih fenomena kao što su dimenzionalni krossover (crossover) ili perkolacija. Pokazaćemo ključnu razliku između ove dve vrste anizotropije za sisteme kod kojih je izražena prostorna anizotropija, a odsustvu spinske, a zatim proučiti i sisteme sa obe vrste anizotropije.

Nedavno je sintetisan materijal neuređene strukture sa dve temperature kompenzacije [6], pa je za nas bilo zanimljivo ispitati ovu mogućnost i u uređenim materijalima. Okoši (Ohkoshi) i dr. su prvi razvili aproksimaciju srednjeg polja (Mean-Field approximation (MFA)) za neuređeni materijal  $(Ni_a^{II}Mn_b^{II}Fe_c^{II})_{1.5}[Cr^{III}(CN)_6] \cdot zH_2O$  i predvideli postojanje dve tačke kompenzacije za sistem  $a = 0.20, b = 0.61, c = 0.19$ . Nastavili su sa sintezom i eksperimentalno uspeli da dobiju ovakvo ponašanje za materijal sa  $a = 0.22, b = 0.60, c = 0.18$ . Predložena struktura je bio sistem sa četiri podrešetke, gde je ion hroma ( $Cr$ ) na proizvoljan način okružen sa niklom ( $Ni$ ) i gvožđem ( $Fe$ ) i sa njima sparen feromagnetskom interakcijom, dok sa manganom ( $Mn$ ) interaguje antiferomagnetsko. U naučnoj literaturi postoje i drugi primeri proučavanja kompleksnih sistema. Tako radovi Herbsta (Herbst) [7] i de Morala (del Moral) [8] daju pregled osobina jedinjenja čija je opšta formula  $R_2Fe_{14}B$ , gde je  $R$  atom retke zemlje. Primećeno je da laki članovi niza retkih zemalja interaguju feromagnetsko sa gvožđem, dok se teški atomi retkih zemalja sa gvožđem sparaju antiferomagnetsko (ili ferimagnetsko). Za sada nisu registrovane kompenzacione tačke u bilo kom čistom materijalu, iako je takvo ponašanje bilo poznato za druga jedinjenja retkih zemalja, tako da se čini interesantnim potražiti kompenzacione temperature u sistemima sa nekoliko podrešetki.

Jednostavan magnetni sistem koji se sastoji od dva magnetno uređena sloja magnetno sparena, takozvani bisloj, je česta tema istraživanja u poslednjoj dekadi. Za to postoji nekoliko razloga. Dvodimenzionalni magnetik je sam po sebi interesan-

tan, pošto različite anizotropije snažno utiču na njegove osobine [13, 14]. Sparivanje između slojeva uvodi element trodimenzionalnosti. Ovo dozvoljava proučavanje efekta dimenzionog krosovera. Eksperimentalni aspekti problema su takođe interesantni. Skora proučavanja gigantske magnetootpornosti, koja omogućava konstrukciju malih memorijskih senzora, ukazuju da se ona javlja najčešće u ovakvim slojvitim sistemima, iako odgovarajuća veza između strukture i GMR još nije utvrđena. Ipak, pravi razlog za veliko interesovanje za ove sisteme su visokotemperaturski superprovodni kuprati. Dobro je poznato da se u njima javljaju antiferomagnetno uređene ravni  $Cu^{2+}$ -jona i da magnetni sistem može biti razmatran kao niz magnetnih slojeva ( $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ) ili bislojeva ( $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  ( $1 : 2 : 3$ )). Uloga magnetnog sistema u superprovodnoj fazi je još uvek predmet diskusije. Naveli smo nekoliko razloga za proučavanje ovih sistema. Mi ćemo se skoncentrisati na antiferomagnetno uređene ravni, a predmet našeg proučavanja biće osobine koje mogu da se provere eksperimentalno. Pre svega, zainteresovani smo za energiju elementarnih ekscitacija- spinske talase, koji su dostupni iz rasejanja neutrona, zatim magnetizaciju podrešetke, unutrašnju energiju i specifičnu toplotu.

U ovom radu proučavane su magnetne superrešetke i magnetni sistemi sa više podrešetki opisani Hajzenbergovim (Heisenberg) Hamiltonijanom. Prvi deo rada obraduje spektar površinskih eksitacija ferimagnetička sa dve podrešetke metodom jednačina kretanja. U drugoj glavi proučavali smo elementarne eksitacije feromagnetičnih superrešetki, bez i u prisustvu diskontinuiteta, metodom transfer matrice. U trećoj glavi obrađen je uticaj prostorne anizotropije na dinamičke i termodynamičke osobine magnetnih sistema sa tri ili četiri podrešetke, kao i magnetne superrešetke primenjujući metode aproksimacije srednjeg polja, dijagonalizaciju bozonskog Hamiltonijana i metod Grinovih funkcija. Četvrta glava se bavi osobinama sistema koji se sastoje od antiferomagnetičnih bislojeva, koji se javljaju u visokotemperaturskim kupratima ( $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  ( $1 : 2 : 3$ )), i to u spinskoj (Random Phase Approximation (RPA)) i bozonskoj slici na niskim temperaturama. Na kraju je data analiza dobijenih rezultata.

Numerički proračuni su vršeni korišćenjem matematičkog paketa Mathematica 3.0. Primjenjene metode za numeričko rešavanje jednačina su metoda sečice i Njutnov metod, a za numeričko rešavanje integrala su Henkins-Traub algoritam, Monte Carlo i Quasi Monte Carlo metod.



## 1 Spektar površinskih spinskih talasa za Hajzenbergov ferimagnetik sa dve podrešetke

U ovoj glavi ćemo proučavati spektar površinskih spinskih talasa ferimagnetika. Motiv za ovakva izučavanja je činjenica da granične površi imaju značajan uticaj na dinamičke osobine Hajzenbergovih ferimagnetika, a u dosadašnjoj naučnoj literaturi tome nije posvećena dovoljna pažnja. Dalji podstrek proučavanju daju i savremene eksperimentalne tehnike pomoću kojih uticaj površi može da se proveri i praktično, te teorijski rezultati uporede sa eksperimentom. Energije površinskih pobuđenja ćemo izračunati koristeći originalan i jednostavan metod baziran na jednačinama kretanja, koji uopštava rezultate dobijene za antiferomagnetike [15, 16]. Glavni razlog za korišćenje pojednostavljene procedure jednačina kretanja je metodološki i predstavlja uopštavanje rezultata rada Ženga i Lina (Zheng, Lin) [17, 18]. Pomenuti autori su proučavali zapreminske (balkovske) i površinske spiske talase u ferimagnetiku sa dve podrešetke metodom retardovanih Grinovih funkcija, uzimajući u obzir samo geometrijske efekte površine. Rezultat našeg pristupa su analitička rešenja (dobijena u zatvorenoj formi) za energije i atenuacione koeficijente lokalizovanih modova u zavisnosti od parametara sistema.

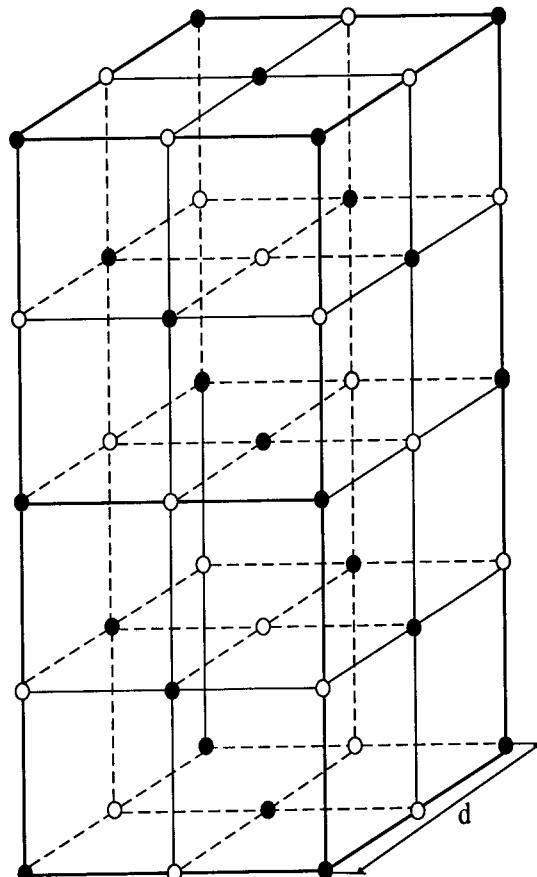
Proučavaćemo (001) površ ferimagnetika proste kubne strukture sa dve površinski centrirane magnetne podrešetke. Najbliži susedi spina **a** u podrešetki su spinovi **b** i obrnuto, i nalaze se na rastojanju  $a = \frac{d}{2}$  ( $d$  – konstanta magnetne rešetke, Slika 1). Za ferimagnetike važi:  $|\langle S^z \rangle_a| \neq |\langle S^z \rangle_b|$ , gde su  $\langle S^z \rangle_a$  i  $\langle S^z \rangle_b$  srednje vrednosti spina u podrešetki **a** i spina u podrešetki **b**, respektivno. U slučaju ferimagnetika energija spinskih talasa zavisi od odnosa  $\alpha = \frac{\langle S^z \rangle_b}{\langle S^z \rangle_a}$ , čak i kada je izražena preko bezdimenzione veličine  $\frac{E}{zJ\langle S^z \rangle}$  ( $z = 6$  broj najbližih suseda).

Naš model je opisan Hajzenbergovim Hamiltonijanom u aproksimaciji najbližih suseda:

$$H = \sum_{n_a n_b} J_{n_a n_b} \vec{S}_{n_a} \cdot \vec{S}_{n_b} - \omega_A \sum_{n_a} S_{n_a}^z - \omega_B \sum_{n_b} S_{n_b}^z \quad (1)$$

$J_{n_a n_b} > 0$  je integral izmene najbližih suseda i ima samo dve vrednosti:  $J_S$  među spinovima u površinskom sloju i  $J$  za sve ostale spinove.  $\vec{S}_{n_a} (\vec{S}_{n_b})$  predstavlja lokalni spinski operator u podrešetki **a**(**b**). Položaj jona je određen sa  $n_{a/b} = (\vec{p}, n)$ . Ovde je  $\vec{p}$  dvodimenzionalni vektor koji opisuje položaj unutar ravni, dok  $n$  prebrojava ravni duž pravca normalnog na površinu magnetika. Poslednja dva člana

$\omega_{A/B} = \omega_{a/b} \pm g\mu_B \mathcal{H}$  su polje anizotropije i spoljašnje polje i zadržavamo ih zbog opštosti. Ovde smo uveli spinsku anizotropiju  $\omega_{a/b}$ , koja se još naziva "jednojon-ska anizotropija". U zavisnosti od znaka i veličine ovaj član može da prouzrokuje uređivanje spinova u  $z$ - pravcu ("osa lake magnetizacije") ili u ravni normalnoj na taj pravac ("ravan lake magnetizacije").



Slika 1: Šema ferimagnetika proste kubne strukture

Hamiltonijan sistema možemo napisati preko operatora  $S_{n_a/n_b}^{\pm} = S_{n_a/n_b}^x \pm iS_{n_a/n_b}^y$  kao:

$$H = \sum_{n_a n_b} J_{n_a n_b} \left[ \frac{1}{2} (S_{n_a}^+ S_{n_b}^+ + S_{n_a}^- S_{n_b}^-) - S_{n_a}^z S_{n_b}^z \right] - \omega_A \sum_{n_a} S_{n_a}^z - \omega_B \sum_{n_b} S_{n_b}^z \quad (2)$$

gde smo koristili standardnu konvenciju menjanja pravca ose kvantizacije u jednoj (npr.  $b$ ) podrešetki [19]:  $S_{n_b}^z \rightarrow -S_{n_b}^z$  ,  $S_{n_b}^{\pm} \rightarrow S_{n_b}^{\mp}$ . Startujemo od jednačina

kretanja za spinske operatore:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_{n_a}^+}{dt} &= \sum_{n_b} J_{n_a n_b} (S_{n_a}^z S_{n_b}^- + S_{n_a}^+ S_{n_b}^z) + \omega_A S_{n_a}^+ \\ i\hbar \frac{dS_{n_b}^-}{dt} &= \sum_{n_a} J_{n_a n_b} (-S_{n_b}^z S_{n_a}^+ - S_{n_b}^- S_{n_a}^z) - \omega_B S_{n_b}^- \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_{n_b}^+}{dt} &= \sum_{n_a} J_{n_a n_b} (S_{n_b}^z S_{n_a}^- + S_{n_b}^+ S_{n_a}^z) + \omega_B S_{n_b}^+ \\ i\hbar \frac{dS_{n_a}^-}{dt} &= \sum_{n_b} J_{n_a n_b} (-S_{n_a}^z S_{n_b}^+ - S_{n_a}^- S_{n_b}^z) - \omega_A S_{n_a}^- \end{aligned} \quad (4)$$

Jednačine (3,4) linearizujemo koristeći standardnu aproksimaciju haotičnih faza [15, 16, 20]:

$$(S_{n_a}^z S_{n_b}^- + S_{n_a}^+ S_{n_b}^z) \rightarrow \langle S_{n_a}^z \rangle S_{n_b}^- + \langle S_{n_b}^z \rangle S_{n_a}^+ = \langle S^z \rangle_a S_{n_b}^- + \langle S^z \rangle_b S_{n_a}^+$$

Uvodeći vremensko-energijski i 2D Furije (Fourier) transform u  $x - y$  ravni ( $\alpha = a, b$ ):

$$\begin{aligned} S_{n_\alpha}^+ &= \frac{1}{N_1 N_2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_{\vec{k}_\parallel} u_n^\alpha(\vec{k}_\parallel, \omega) e^{i\vec{p}\vec{k}_\parallel - i\omega t} \\ S_{n_\alpha}^- &= \frac{1}{N_1 N_2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_{\vec{k}_\parallel} u_n^{\alpha*}(\vec{k}_\parallel, \omega) e^{i\vec{p}\vec{k}_\parallel - i\omega t} \end{aligned}$$

prelazimo sa spinskih operatora na amplitude.  $N_1 N_2$  je ukupan broj čvorova u ravni. Za slojeve numerisane sa "n" duž z-ose, jednačine za spinske amplitude  $u_n^a(\vec{k}_\parallel, \omega), u_n^{a*}(\vec{k}_\parallel, \omega), u_n^b(\vec{k}_\parallel, \omega), u_n^{b*}(\vec{k}_\parallel, \omega)$  su ( $\hbar = 1$ ):

za  $n \geq 1$

$$\begin{aligned} (\omega - \Omega_a) u_n^a(\vec{k}_\parallel, \omega) - z_2 \gamma(\vec{k}_\parallel) u_n^{b*}(\vec{k}_\parallel, \omega) - (u_{n+1}^{b*}(\vec{k}_\parallel, \omega) + u_{n-1}^{b*}(\vec{k}_\parallel, \omega)) &= 0 \\ (\omega + \Omega_b) u_n^{b*}(\vec{k}_\parallel, \omega) + z_2 \alpha \gamma(\vec{k}_\parallel) u_n^a(\vec{k}_\parallel, \omega) + \alpha(u_{n+1}^a(\vec{k}_\parallel, \omega) + u_{n-1}^a(\vec{k}_\parallel, \omega)) &= 0 \\ (\omega + \Omega_a) u_n^{a*}(\vec{k}_\parallel, \omega) + z_2 \gamma(\vec{k}_\parallel) u_n^b(\vec{k}_\parallel, \omega) + (u_{n+1}^b(\vec{k}_\parallel, \omega) + u_{n-1}^b(\vec{k}_\parallel, \omega)) &= 0 \\ (\omega - \Omega_b) u_n^b(\vec{k}_\parallel, \omega) - z_2 \alpha \gamma(\vec{k}_\parallel) u_n^{a*}(\vec{k}_\parallel, \omega) - \alpha(u_{n+1}^{a*}(\vec{k}_\parallel, \omega) + u_{n-1}^{a*}(\vec{k}_\parallel, \omega)) &= 0 \end{aligned} \quad (5)$$

i za  $n = 0$  (površinski sloj)

$$\begin{aligned} (\omega - \Omega_a^S) u_0^a(\vec{k}_{||}, \omega) - z_2 \eta \gamma(\vec{k}_{||}) u_0^{b*}(\vec{k}_{||}, \omega) - u_1^{b*}(\vec{k}_{||}, \omega) &= 0 \\ (\omega + \Omega_b^S) u_0^{b*}(\vec{k}_{||}, \omega) + z_2 \eta \alpha \gamma(\vec{k}_{||}) u_0^a(\vec{k}_{||}, \omega) + \alpha u_1^a(\vec{k}_{||}, \omega) &= 0 \\ (\omega + \Omega_a^S) u_0^{a*}(\vec{k}_{||}, \omega) + z_2 \eta \gamma(\vec{k}_{||}) u_0^b(\vec{k}_{||}, \omega) + u_1^b(\vec{k}_{||}, \omega) &= 0 \\ (\omega - \Omega_b^S) u_0^b(\vec{k}_{||}, \omega) - z_2 \eta \alpha \gamma(\vec{k}_{||}) u_0^{a*}(\vec{k}_{||}, \omega) - \alpha u_1^{a*}(\vec{k}_{||}, \omega) &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

gde je uvedena kompaktnija notacija:

$$\begin{aligned} \sigma_a &= \langle S^z \rangle_a, \quad \sigma_b = \langle S^z \rangle_b, \quad \alpha = \frac{\langle S^z \rangle_b}{\langle S^z \rangle_a} \\ \omega &= \frac{E}{J\sigma_a}, \quad \eta = \frac{J_S}{J}, \quad \gamma(\vec{k}_{||}) = \frac{1}{2}(\cos k_x a + \cos k_y a) \\ \Omega_a &= \tilde{\omega}_A + z\alpha, \quad \Omega_b = \tilde{\omega}_B + z \\ \Omega_a^S &= \tilde{\omega}_A^S + (4\eta + 1)\alpha, \quad \Omega_b^S = \tilde{\omega}_B^S + (4\eta + 1) \\ \tilde{\omega}_{A/B} &= \frac{\omega_{A/B}}{J\sigma_a}, \quad \tilde{\omega}_{A/B}^S = \frac{\omega_{A/B}^S}{J\sigma_a} \end{aligned}$$

$z_2$  je broj najbližih suseda u ravni. Uobičajena procedura bi bila formulisati matičnu jednačinu sistema i dalje raditi sa beskonačnim matricama, kao na primer [21] za slučaj antiferomagnetika. Potrebno je istaći da su Ženg i Lin [18] pošli od aproksimacije da je srednja vrednost spina u podrešetki u bilo kojoj ravni rešetke nezavisna od udaljenosti od površine, što zapravo nije slučaj [22, 23]. Mi ćemo smatrati da je odnos srednjih vrednosti spina u dve podrešetke ( $\alpha$ ) isti na površini i u svim ostalim ravnima, što je realnija aproksimacija. Čak i u osnovnom stanju, kvantne fluktuacije diktiraju da je  $\alpha \neq \frac{S_b}{S_a}$ , a menja se i sa temperaturom. To bi trebalo da se uzme u obzir koristeći odgovarajuću samousaglašenu proceduru (npr. metod Grinovih funkcija, MFA, itd.), ali mi ćemo u našem računu smatrati  $\alpha$  za parametar (koji zavisi samo od temperature). Amplitude tražimo u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} u_n^{a/b}(\vec{k}_{||}, \omega) &= u_{a/b} e^{in\theta}, \quad u_n^{a/b*}(\vec{k}_{||}, \omega) = u_{a/b}^* e^{-in\theta} \\ u_{a/b} &= u_{a/b}(\vec{k}_{||}, \omega), \quad u_{a/b}^* = u_{a/b}^*(\vec{k}_{||}, \omega) \end{aligned} \quad (7)$$

Zamenjujući (7) u jednačine (5) dobija se sistem jednačina čiju determinantu izjednačavamo sa nulom:

$$\Delta(\omega) = \begin{vmatrix} \omega - \Omega_a & -(z_2\gamma(\vec{k}_{||}) + 2\cos\theta) & 0 & 0 \\ \alpha(z_2\gamma(\vec{k}_{||}) + 2\cos\theta) & \omega + \Omega_b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega + \Omega_a & (z_2\gamma(\vec{k}_{||}) + 2\cos\theta) \\ 0 & 0 & -\alpha(z_2\gamma(\vec{k}_{||}) + 2\cos\theta) & \omega - \Omega_b \end{vmatrix} = 0 \quad (8)$$

Kao što se može videti iz (8), determinanta  $\Delta(\omega)$  se može predstaviti kao proizvod dve nezavisne determinante:

$$\Delta(\omega) = \Delta_1(\omega)\Delta_2(\omega) = 0$$

gde je

$$\begin{aligned} \Delta_1(\omega, \theta) &= (\omega - \Omega_a)(\omega + \Omega_b) + \alpha(\omega_k + 2\cos\theta)^2 \\ \Delta_2(\omega, \theta) &= (\omega + \Omega_a)(\omega - \Omega_b) + \alpha(\omega_k + 2\cos\theta)^2 = \Delta_1(-\omega, \theta) \\ \omega_k &= z_2\gamma(\vec{k}_{||}). \end{aligned}$$

Iz  $\Delta_1(\omega, \theta) = 0$  dobijamo dva moguća rešenja za  $\theta$ :

$$-2\cos\theta_{1/2} = \omega_k \pm \frac{1}{\alpha^{\frac{1}{2}}} \sqrt{(\Omega_b + \omega)(\Omega_a - \omega)}, \quad (9)$$

a iz  $\Delta_2(\omega, \theta) = 0$  druga dva:

$$-2\cos\theta_{3/4} = \omega_k \pm \frac{1}{\alpha^{\frac{1}{2}}} \sqrt{(\Omega_b - \omega)(\Omega_a + \omega)}. \quad (10)$$

Za obe jednačine (9) i (10), postoji jedno realno rešenje za  $\theta = k_z a$  koje daje dve grane zapreminskih ekscitacija (za  $\alpha < 1$ , bez narušavanja opštosti):

$$\omega_{1/2} = \pm \frac{\Omega_a - \Omega_b}{2} + \sqrt{\left(\frac{\Omega_b + \Omega_a}{2}\right)^2 - \alpha(\omega_k + 2\cos k_z a)^2}. \quad (11)$$

Može se primetiti da prisustvo spinske anizotropije utiče na pojavu gepa u spektru spinskih talasa. U odsustvu anizotropije, za  $z = 6$  imamo:

$$\omega_{1/2} = \pm 3(\alpha - 1) + 3\sqrt{(1 + \alpha)^2 - \frac{1}{9}\alpha(\omega_k + 2\cos k_z a)^2}.$$

Ovde znak "+" odgovara Goldstonovom (Goldstone) modu ( $\omega_1 \rightarrow 0, \vec{k} \rightarrow 0$ ). Važno je zapaziti da je  $\Delta_1(\omega, k_z a) = (\omega - \omega_1)(\omega + \omega_2)$  dok je  $\Delta_2(\omega, k_z a) = (\omega + \omega_1)(\omega -$

$\omega_2$ ). Ovaj rezultat se slaže sa radom Veija (Wei) i dr. [25], dok Ženg i Lin imaju samo rešenja za  $\Delta_1 = 0$  i dobijaju dve grane  $\omega = \omega_1 > 0$  i  $\omega = -\omega_2 < 0$ , koje obe interpretiraju kao energije pobuđenja, što naravno nema smisla za  $-\omega_2$ .

Za amplitude zapreminske ekscitacije, rešenje se mora tražiti kao superpozicija progresivnog i reflektovanog (od površine) spinskog talasa, na primer:

$$u_n^{a/b}(\vec{k}_\parallel, \omega) = A_P^{a/b} e^{ik_z n a} + A_R^{a/b} e^{-ik_z n a}$$

Amplitude  $A_P^{a/b}$  i  $A_R^{a/b}$  se određuju iz graničnih uslova (sistem (6)) i uslova normalizacije [16], ali mi to nećemo uraditi jer nas prvenstveno interesuju površinske ekscitacije.

Jednačine (9) i (10) imaju takođe dva različita kompleksna rešenja za realne vrednosti energije  $\omega$ . Primenjujući isti postupak kao i u radovima [15, 16] za kompleksno  $\theta$  dobijamo energiju površinskih magnona. Ove energije leže ispod (akustički površinski magnoni) ili iznad (optički površinski magnoni) zapreminske pobuđenja (ovo su detaljno objasnili Wolfram i De Vam (Wolfram and De Wames) [21]). Iz (9) se može zaključiti da spektar površinskih magnona ( $\omega_S$ ) zavisi kako od  $\theta_1$  tako i od  $\theta_2$  i ima oblik:

$$(\omega_S - \frac{\Omega_a - \Omega_b}{2})^2 = (\frac{\Omega_a + \Omega_b}{2})^2 - \alpha f(x), \quad (12)$$

gde je

$$f(x) = \frac{\omega_k^2}{x^2} + \frac{4}{1-x^2} ; \quad x = -i \cot \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}.$$

Druga rešenja dobijamo iz (10):

$$(\omega_S - \frac{\Omega_b - \Omega_a}{2})^2 = (\frac{\Omega_a + \Omega_b}{2})^2 - \alpha f(y), \quad (13)$$

gde je

$$f(y) = \frac{\omega_k^2}{y^2} + \frac{4}{1-y^2} ; \quad y = -i \cot \frac{\theta_3 + \theta_4}{2}.$$

Osnovni problem je sada odrediti  $x(y)$ , i ovde ćemo ukratko izložiti postupak koji uopštava na slučaj ferimagnetika rešenje za antiferimagnete, detaljno prikazan u [15]. Amplitude lokalizovanih stanja su u najopštijem slučaju date u sledećem obliku:

$$u_n^a(\vec{k}_\parallel, \omega) = A_1 e^{in\theta_1} + A_2 e^{in\theta_2} , \quad u_n^{b*}(\vec{k}_\parallel, \omega) = B_1 e^{in\theta_1} + B_2 e^{in\theta_2} \quad (14)$$

Uvodeći ove izraze u prve dve jednačine (5) dobijamo dva identična sistema ( $i = 1, 2$ ):

$$(\omega - \Omega_a)A_i - (\omega_k + 2\cos\theta_i)B_i = 0 , \quad \alpha(\omega_k + 2\cos\theta_i)A_i + (\omega + \Omega_b)B_i = 0 \quad (15)$$

S druge strane, kombinujući (14) sa prve dve granične jednačine (6) dobijamo sledeći sistem:

$$\begin{aligned} (\omega - \Omega_a^S)(A_1 + A_2) - \eta\omega_k(B_1 + B_2) - (B_1 e^{i\theta_1} + B_2 e^{i\theta_2}) &= 0 \\ \alpha\eta\omega_k(A_1 + A_2) + \alpha(A_1 e^{i\theta_1} + A_2 e^{i\theta_2}) + (\omega + \Omega_b^S)(B_1 + B_2) &= 0 \end{aligned} \quad (16)$$

Oduzimanjem oba sistema (16) od odgovarajuće kombinacije (15) dobija se:

$$\begin{aligned} \Delta\omega_a(A_1 + A_2) - \Delta\omega_k(B_1 + B_2) + (B_1 e^{-i\theta_1} + B_2 e^{-i\theta_2}) &= 0 \\ \alpha\Delta\omega_k(A_1 + A_2) - \alpha(A_1 e^{-i\theta_1} + A_2 e^{-i\theta_2}) + \Delta\omega_b(B_1 + B_2) &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

gde je:

$$\Omega_a^S - \Omega_a = \Delta\omega_a , \quad \Delta\omega_b = \Omega_b^S - \Omega_b , \quad \Delta\omega_k = (\eta - 1)\omega_k.$$

Kombinujući (15) i (17) možemo na primer eliminisati  $B_1$  i  $B_2$  i dobiti homogen sistem za  $A_1$  i  $A_2$ . Izjednačavajući determinantu sistema sa nulom dobijamo sledeću jednačinu po  $x$ :

$$\begin{aligned} 2x(x+1)[\Delta\omega_a\Delta\omega_b - \alpha(\Delta\omega_k)^2] - (x^2 - 1)x(\Omega_b\Delta\omega_a + \Omega_a\Delta\omega_b) - \\ - 2\alpha\Delta\omega_k(x^2 - 1)\omega_k - 2\alpha x(x-1) + (x^2 - 1)x\omega(\Delta\omega_b - \Delta\omega_a) &= 0 \end{aligned} \quad (18)$$

U slučaju antiferomagnetika ( $\Delta\omega_a = \Delta\omega_b$ ), ovo prelazi u kubnu jednačinu po  $x$  [16, 21].

Sledeći isti postupak za  $\theta_{3,4}$  stižemo do jednačine za  $y$  koja je dobijena iz (18) zamenom  $\omega \rightarrow -\omega$ .

Da bi dobili eksplicitnu jednačinu za  $x$ , mora se eliminisati  $\omega$  iz (18). Pošto  $\omega = \omega_S(\omega_k, x)$  sadrži kvadratni koren, jednačina (18) se mora kvadrirati i u tom slučaju jednačine za  $x$  i  $y$  su identične i imaju oblik:

$$a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5 + a_6x^6 = 0 \quad (19)$$

Koeficijenti jednačine (19) su dati u Prvom prilogu.

Tako smo koristeći pojednostavljen postupak u ovom odeljku našli opšta analitička rešenja za spektar površinskih magnona ferimagnetika sa dve podrešetke

u zatvorenoj formi. Da bismo dobili bolji uvid u naše rezultate koristićemo numeričku proceduru. Za numeričko izračunavanje energije površinskih eksitacija u svakoj tački dvodimenzione (2D) Briluenove (Brillouin) zone (BZ) dovoljna je jednačina (19). Uzećemo u obzir samo fizički prihvatljiva rešenja za  $x(y)$ . Ako uzmemo da je  $\theta_i = \beta_i + ia\xi_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ), površinska pobuđenja mogu postojati samo ako je  $\xi_i > 0$  (amplituda mora biti konačna kada  $z \rightarrow \infty$ ). Polazeći od ove pretpostavke, uslov za realnu energiju  $\omega_S$  (vidi [15, 16]) daje prihvatljive vrednosti za  $x(y)$ :  $x(y) < -1$  (za optičke magnone) i  $-1 < x(y) < 0$  (za akustičke), dok za faze imamo  $\beta_1 + \beta_2 = \pi$  (za akustičke površinske magnone) i  $\beta_1 + \beta_2 = 0$  (za optičke magnone).

## 1.1 Analiza rezultata

Polazeći od izraza (19) analiziraćemo opšte osobine spektra površinskih eksitacija za različite vrednosti parametra  $\eta$ , u odsustvu anizotropije i spoljašnjeg polja ( $\omega_{A/B} = 0$ ). Isto tako, ispitaćemo odnos između spektara površinskih i zapreminskih eksitacija.

Prvo ćemo utvrditi granice balk kontinuma za obe grane. Dno kontinuma odgovara najnižoj vrednosti zapremske energije  $\omega_{1/2}$  koja se uvek javlja za  $k_z a = 0$ :

$$(\omega_{1/2}^{bott} \mp \frac{\Omega_a - \Omega_b}{2})^2 = (\frac{\Omega_a + \Omega_b}{2})^2 - \alpha(\omega_k + 2)^2$$

Vrh kontinuma odgovara najvišoj vrednosti energije za dato  $\omega_k$ , gde se javljaju dve oblasti:

$$(\omega_{1/2}^{top} \mp \frac{\Omega_a - \Omega_b}{2})^2 = \begin{cases} (\frac{\Omega_a + \Omega_b}{2})^2 - \alpha(\omega_k - 2)^2 & \text{za } \omega_k > 2 \\ (\frac{\Omega_a + \Omega_b}{2})^2 & \text{za } \omega_k \leq 2 \end{cases}$$

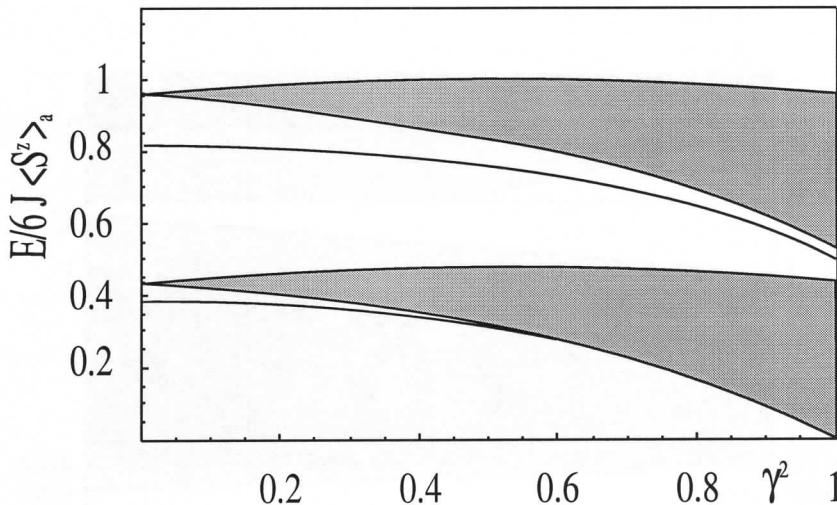
Najpre ćemo diskutovati slučaj takozvane slobodne površine ( $J_S = J, \eta = 1$ ), za iste vrednosti parametara kao u [18]. Jednačina (18) i odgovarajuća jednačina za  $y$  prelaze u sledeće jednačine po  $\omega$ :

$$\Delta_1^S(\omega) = \omega^3 + \omega^2 [8 \frac{\alpha}{\alpha - 1} - 5(\alpha - 1)] + 16\omega\alpha(\gamma^2(\vec{k}_{||}) - 1) + 192 \frac{\alpha^2}{1 - \alpha} (1 - \gamma^2(\vec{k}_{||})) = 0 \quad (20)$$

$$\Delta_2^S(\omega) = \omega^3 - \omega^2 [8 \frac{\alpha}{\alpha - 1} - 5(\alpha - 1)] + 16\omega\alpha(\gamma^2(\vec{k}_{||}) - 1) - 192 \frac{\alpha^2}{1 - \alpha} (1 - \gamma^2(\vec{k}_{||})) = 0 \quad (21)$$

Može se lako videti da je  $\Delta_2^S(\omega) = \Delta_1^S(-\omega)$ , što je u skladu sa našim prethodnim tvrđenjima.

Jednačina (20) daje površinsku granu (akustičku) pridruženu nižoj zapreminskoj traci, dok (21) daje površinske ekscitacije (optičke), koje odgovaraju višoj zapreminske traci. Autori rada [18] rešavaju samo jednačinu (20), ali negativna energija je crtana kao pozitivna (Slika 1 u [18]). Naši rezultati su prikazani na Slici 2.



Slika 2: Spektar površinskih ekscitacija ferimagnetika proste kubne strukture za  $\alpha = 0.476$  i  $\eta = 1$ . Odgovarajući balk (osenčena oblast) je takođe prikazan radi poređenja.

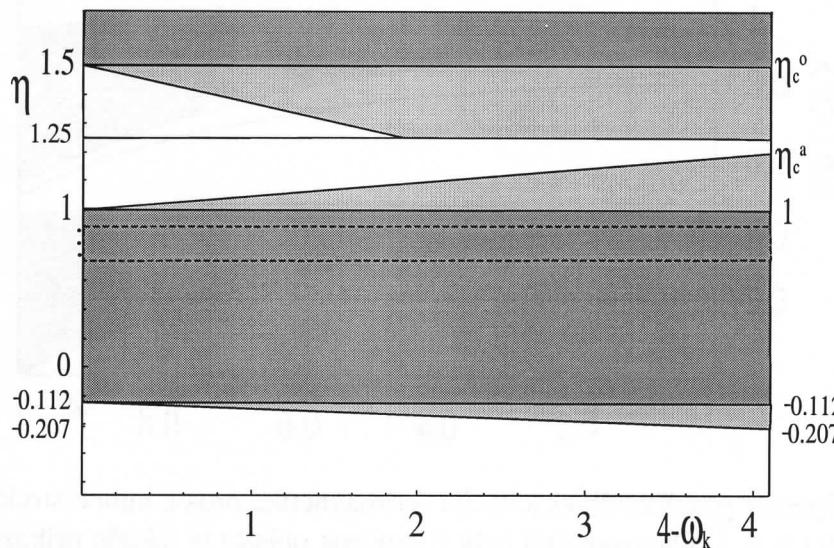
U nastavku ćemo proučiti uticaj parametra  $\eta = \frac{J_S}{J} \neq 1$  na površinske spinske talase. Prvo ćemo odrediti za koje vrednosti  $\eta$  mogu egzistirati površinske eksitacije, za  $\alpha \leq 1$  (bez narušavanja opštosti).

Koristeći postupak iz rada [16], mogu se odrediti granične vrednosti  $(x_b, y_b)$  za promenljive  $x, y$  koje su iste kao i u slučaju antiferomagnetičkih (Apendiks B rada [16], sa  $\omega_o = \frac{1}{\alpha}\Omega_a\Omega_b$ ). Uvodeći ove granične vrednosti  $(x_b, y_b)$  u jednačinu (18) dolazimo do jednačine koja određuje tražene vrednosti  $\eta$ . Analiziraćemo slučaj u odsustvu anizotropije i spoljašnjeg polja (tj.  $\omega_{A/B} = 0$ ) za površinske eksitacije pridružene nižoj zapreminske zoni ( $\omega_1$ ), koja u stvari određuje ponašanje sistema na niskim temperaturama.

U ovom slučaju, jednačina (18) dobija oblik:

$$(16 - \omega_k^2)\eta^2 - 2\eta[20 - \omega_k^2 + 12(x_b - 1) + \frac{x_b - 1}{2x_b}\omega_k^2 - \omega_S(x_b - 1)\frac{1 - \alpha}{\alpha}] - \\ - \omega_k^2 - 5 + 30x_b + \omega_k^2\frac{x_b - 1}{x_b + 1} - \frac{5}{2}\omega_S(x_b - 1)\frac{1 - \alpha}{\alpha} = 0 \quad (22)$$

Iz gornje jednačine sledi da granične vrednosti  $\eta$  u principu zavise od vrednosti  $\alpha = \frac{\sigma_b}{\sigma_a}$ . Na Slici 3 je prikazano kako se menja granična vrednost  $\eta$  duž 2D BZ, za određenu vrednost  $\alpha$ .



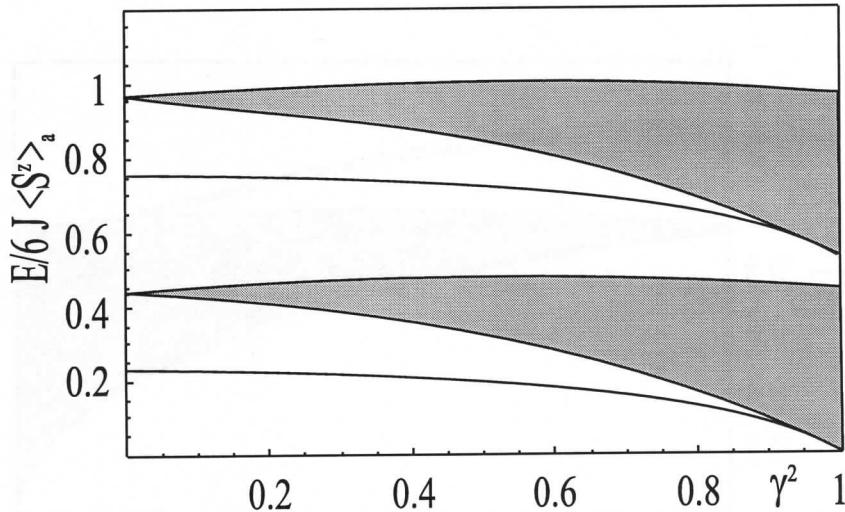
Slika 3: Granična vrednost  $\eta$  u zavisnosti od  $\omega_k$  za  $\alpha = 0.5$ .

Polazeći od velikih vrednosti  $\eta$ , prvo imamo oblast  $\eta > \eta_c^o$  gde površinske optičke ekscitacije postoje u celoj BZ (jače osenčena oblast).  $\eta_c^o$  je kritična vrednost  $\eta$ , koja zavisi od  $\alpha$ , za koju optičke ekscitacije ulaze u vrh balk kontinuuma u centru BZ.  $\eta_c^o$  se menja od  $1.25(\alpha \rightarrow 0)$  do  $1.853(\alpha = 1)$ . Za  $1.25 \leq \eta \leq \eta_c^o$ ,  $\omega_S^{op}$  se poklapa sa vrhom balk kontinuuma za neke vrednosti  $\omega_k > 2$  (slabije osenčena oblast). Treba primetiti da za ovu oblast  $\eta$  i  $\omega_k < 2$ , površinske ekscitacije se nikad ne poklapaju sa vrhom balk kontinuuma. U opsegu  $\eta_c^a \leq \eta \leq 1.25$ , površinska pobuđenja ne postoje pošto njihove energije leže unutar balk kontinuuma (neosenčena oblast). Ovde je  $\eta_c^a$  kritična vrednost za pojavu akustičkih spinskih talasa na granici BZ i takođe zavisi od  $\alpha$ :  $1.166(\alpha \rightarrow 0) \leq \eta_c^a \leq 1.207(\alpha = 1)$ . Za  $1 \leq \eta \leq \eta_c^a$ , grane se javljaju na granici BZ, ali ulaze u

dno balk kontinuuma za neke vrednosti  $\omega_k$  (slabije osenčena oblast). Za  $-0.112 < \eta < 1$ , akustički površinski magnoni postoje u celoj BZ (jako osenčena oblast delimično izostavljena sa slike). Unutar opsega  $-0.207 \leq \eta \leq -0.112$  (slabije osenčena oblast), energija akustičkih površinskih ekscitacija  $\omega_S^a$  teži nuli (tzv. soft mode). Ovo je važno zbog mogućnosti magnetne površinske rekonstrukcije [27], tj. pojave da spinska konfiguracija na površi može postati nestabilna u pogledu uređenja osnovnog stanja i preći u novo stanje. Konačno, za  $\eta < -0.207$ , akustičke površinske grane uopšte ne postoje.

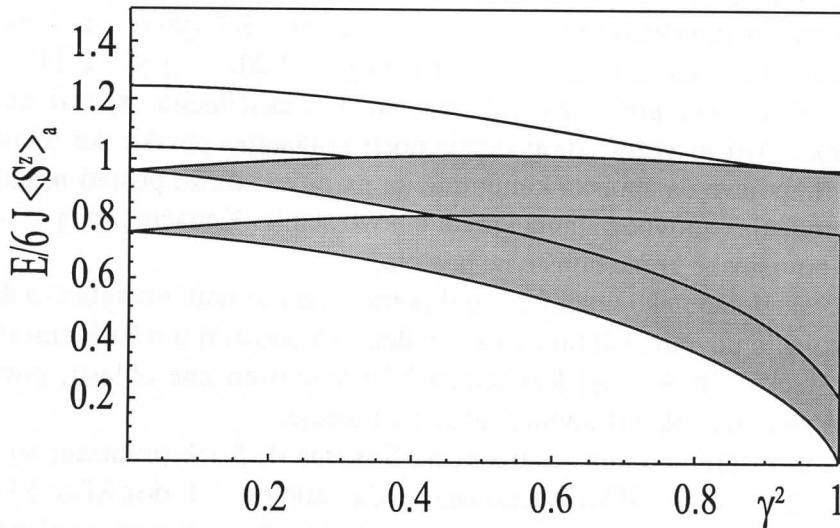
Slika 3 služi kao neka vrsta faznog dijagrama, pošto nam omogućava da odredimo postojanje površinskih moda za određene vrednosti  $\eta$  u određenim tačkama BZ. Ako "tačka"  $(\eta, 4 - \omega_k)$  leži unutar bilo koje osenčene oblasti, površinske eksitacije postoje, dok u drugom slučaju ne postoje.

U skladu sa prethodnom analizom na Slikama 4, 5 i 6 prikazani su spektri površinskih eksitacija. Slika 4 odgovara vrednostima  $\eta < 1$ , dok Slike 5 i 6 vrednostima  $\eta > 1.25$ . Na slikama se može pratiti ponašanje u zavisnosti od  $\alpha$ . Za  $\alpha \rightarrow 1$ , dva balk kontinuuma se poklapaju. Optička grana pridružena nižem balk kontinuumu "raste" i konačno se poklapa sa optičkom granom iznad višeg kontinuuma. Ovo je u saglasnosti sa radovima [16, 21].

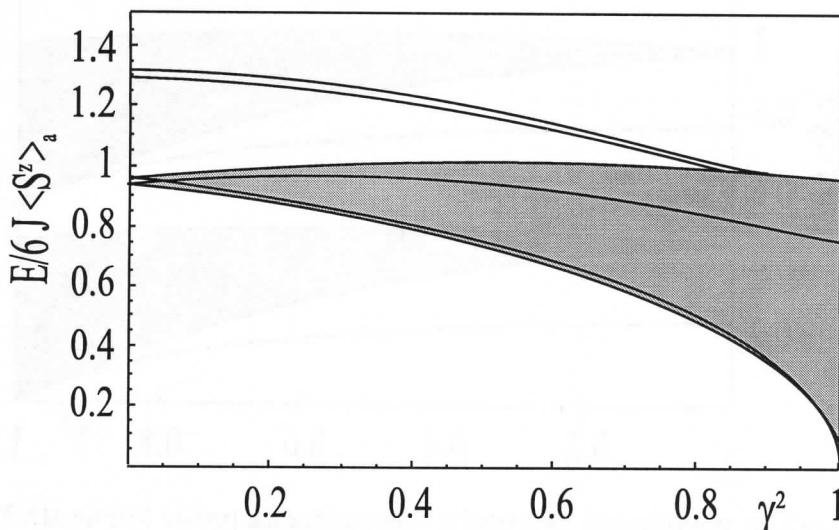


Slika 4: Spektar površinskih eksitacija ferimagnetika proste kubne strukture za  $\alpha = 0.476$  i  $\eta = 0.5$ . Odgovarajući balk (osenčena oblast) je takođe prikazan radi poređenja.

Treba istaći da kod ferimagnetika, za bilo koje  $\alpha \neq 1$  (Slika 2), akustički površinski spinski talasi postoje u celoj BZ za  $\eta < 1$ , kao i u slučaju feromagnetika



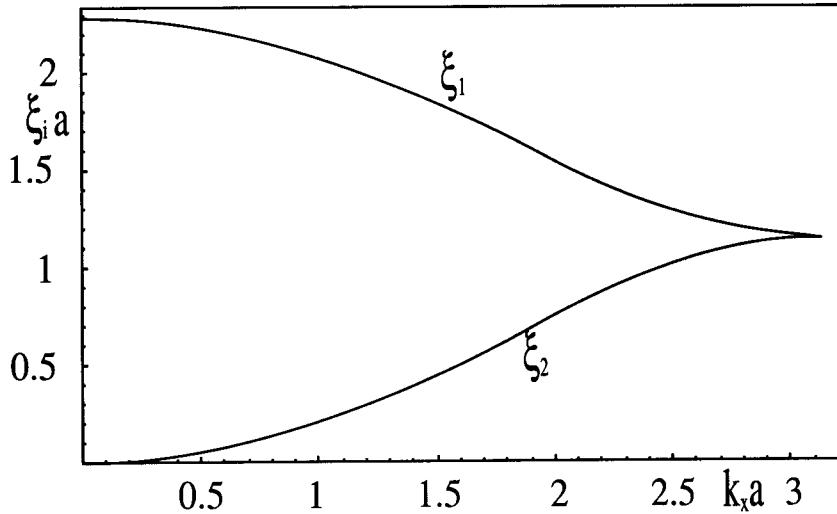
Slika 5: Optičke grane spektra površinskih eksitacija ferimagnetika proste kubne strukture за  $\alpha = 0.8$  и  $\eta = 1.7$ . Odgovarajući balk (osenčena област) је takođe prikazan radi poređenja.



Slika 6: Optičke grane spektra površinskih eksitacija ferimagnetika proste kubne strukture за  $\alpha = 0.98$  и  $\eta = 1.7$ . Odgovarajući balk (osenčена област) је takoђе приказан ради poređenja.

[23]. Ovo karakteristično ponašanje se takođe javlja za  $\alpha = 1$  (slučaj antiferomagnetika) gde ova oblast startuje od  $\eta < 1.107$  [16, 21], te ne postoji kontinualan prelaz iz jednog u drugi slučaj.

$$A_1^{ac} = -(\Delta\omega_a - \sqrt{\frac{\Omega_a - \omega_{ac}}{\Omega_a + \omega_{ac}}} e^{-i\theta_2}) \frac{1}{\sqrt{\frac{\Omega_a - \omega_{ac}}{\Omega_a + \omega_{ac}}}} (e^{-i\theta_1} + e^{-i\theta_2}).$$



Slika 7: Zavisnost atenuacionih parametara ( $a\xi_i$ ) od  $k_xa$  (za  $k_ya = 0$ ).

Dalje ćemo prikazati kako se izračunavaju amplitude. U opštem slučaju izrazi su dosta glomazni, tako da se ograničavamo na akustičku granu i slučaj antiferomagnetika  $\alpha = 1$  i slobodnu površinu ( $\eta = 1$ ). Koristićemo izraze za amplitude iz Apendiksa A,B rada [16]. Za akustičku granu, koristeći uslov normalizacije  $u_0^a = A_1 + A_2 = 1$ , dobijamo:

$$u_n^a = A_1^{ac} (-1)^n e^{-na\xi_1} + (1 - A_1^{ac}) e^{-na\xi_2}$$

$$u_n^{b*} = \sqrt{\frac{\Omega_a - \omega_{ac}}{\Omega_a + \omega_{ac}}} A_1^{ac} (-1)^n e^{-na\xi_1} + \sqrt{\frac{\Omega_a - \omega_{ac}}{\Omega_a + \omega_{ac}}} (A_1^{ac} - 1) e^{-na\xi_2} \quad (23)$$

gde je

Faze i atenuacioni koeficijenti u ovom slučaju su:

$$\beta_1 = \pi, \quad \beta_2 = 0, \quad \theta_1 = \pi + ia\xi_1, \quad \theta_2 = ia\xi_2$$

$$\cosh a\xi_1 = \frac{\sqrt{\Omega_a^2 - \omega_{ac}^2} + 4\gamma^2(\vec{k}_{||})}{2} \quad \cosh a\xi_2 = \frac{\sqrt{\Omega_a^2 - \omega_{ac}^2} - 4\gamma^2(\vec{k}_{||})}{2}$$

dok iz (20)  $\omega_{ac}^2 = 24(1 - \gamma^2(\vec{k}_{||}))$ . Izračunali smo  $\xi_i a$  duž  $(1, 0)$  pravca u 2D BZ i rezultat je pokazan na Slici 7. Možemo analizirati i dubinu prodiranja  $\lambda_i = \frac{1}{\xi_i}$  i videti da u (23) prvi član sa  $\xi_1$  ostaje praktično lokalizovan na površini ( $\lambda_1 \leq a$ ). Karakter drugog člana se menja duž Briluenove zone:  $\lambda_2$  divergira u centru BZ, tako da eksitacije postaju zapreminske (delokalizovane, sa energijom koja teži nuli), dok  $\lambda_2 \rightarrow a$  na ivici BZ, tj. odgovara eksitacijama lokalizovanim na površini.

Amplitude optičkih grana takođe zavise od oba atenuaciona parametra  $\xi_1, \xi_2$  i mogu biti izračunate na sličan način.

Dakle, kao rezultat primene jednostavne metode jednačina kretanja dobijena su analitička rešenja (u zatvorenoj formi) za energije i atenuacione koeficijente lokalizovanih eksitacija Hajzenbergovog ferimagneta u zavisnosti od parametara sistema. Ovi originalni rezultati objavljeni su u radu [26].

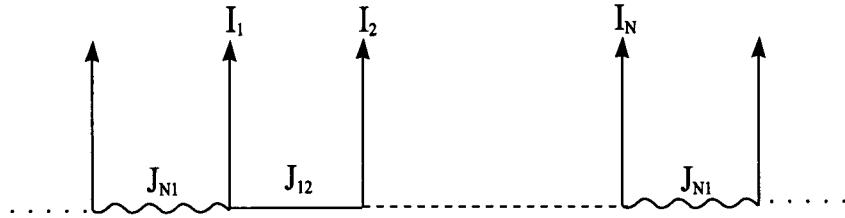
## 2 Uticaj translatorne simetrije na elementarne ekscitacije u feromagnetskim superrešetkama

U ovoj glavi ćemo proučavati elementarne eksitacije feromagnetskih superrešetki koristeći metod transfer matrice. Superrešetke ili višeslojne strukture (multilejeri) su konfiguracije u formi naizmeničnih slojeva npr. konstituenata "1", debljine  $d_1$  i konstituenta "2" debljine  $d_2$ , pri čemu se ove vrednosti mogu kretati u rasponu od 2-3 međatomska rastojanja, pa do 100nm. Menjući sastav i debljinu slojeva mogu se dobiti magnetne slojevite strukture različitih makroskopskih osobina. S obzirom na razvoj eksperimentalnih tehnika koje omogućavaju proizvodnju ovakvih struktura i neobične osobine koje imaju eventualnu primenu, superrešetke su poslednjih godina privukle veliku pažnju naučnika [1, 3, 4, 5]. Pored idealnog slučaja translatorno invarijantne superrešetke, interesantno je proučiti i situaciju kada je narušena translatorna invarijantnost. Problem narušavanja translatorne invarijantnosti u superrešetki prvi je obrađivao Barnas (Barnas) u radu [11]. Mi ćemo proširiti njegov pristup, pošto se mora biti veoma oprezan u definisanju granične ćelije (ili ćelije koja unosi nepravilnost) i translatorno invarijantnog dela. Pošto je ponekad lakše izvesti iste rezultate uvodeći specijalan Ansatz za spinske amplitude, u ovoj glavi ćemo prikazati i ovaj metod paralelno sa prikazom metoda transfer matrice. Obradićemo slučajeve polu-beskonačne superrešetke, dve superrešetke koje su u kontaktu i višeslojne strukture koje ćemo jednostavno zвати filmovima.

Sada ćemo definisati modelni Hamiltonijan sistema. Podrazumevaćemo sistem lokalizovanih spinova koji interaguju Hajzenbergovom interakcijom izmene u aproksimaciji najbližih suseda. Smatramo da je ukupna rešetka proste kubne strukture sa konstantom rešetke  $a$ . Superrešetka se sastoji od  $y-z$  ravni koje su feromagnetski uređene i interakcija između spinova unutar ravni će biti označena sa  $I > 0$  uz dodatne donje indekse koji označavaju položaj unutar ćelije.

Motiv, ili jedinična ćelija, tj. magnetna struktura koja se ponavlja duž  $x$ -pravca, sastoji se od  $N$  slojeva koji takođe interaguju feromagnetski. Interakcija između spinova koji pripadaju susednim slojevima će biti označena sa  $J > 0$  i odgovarajućim indeksima. Položaj jona je dat sa  $\vec{n} = \vec{\rho} + [mL + (n-1)a]\vec{e}_x$ . Ovde je  $\vec{\rho}$  dvodimenzionalni vektor koji opisuje položaj unutar ravni,  $L = Na$  je dimenzija ćelije duž  $x$ -ose, dok  $m$  prebrojava ćelije. Ceo broj  $n = 1, 2, \dots, N$  prebrojava ravni unutar ćelije. Šematski prikaz je dat na Slici 8.

Najopštiji oblik Hamiltonijana za beskonačnu, tj. idealno periodičnu strukturu (van magnetnog polja i bez spinske anizotropije) ima oblik:



Slika 8: Šematski prikaz beskonačne feromagnetne superrešetke sa  $N$  ravnim ućelijama.

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & -\frac{1}{2} \sum_m \sum_{n=1}^N I_n \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{\delta}_{||}} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \hat{S}_{m\vec{p}}^+(n) \hat{S}_{m\vec{p}+\vec{\delta}_{||}}^-(n) + h.c. \right] + \hat{S}_{m\vec{p}}^z(n) \hat{S}_{m\vec{p}+\vec{\delta}_{||}}^z(n) \right\} - \\
 & - \sum_m \left\{ \sum_{n=1}^{N-1} J_{n,n+1} \sum_{\vec{p}} \left[ \frac{1}{2} (\hat{S}_{m\vec{p}}^+(n) \hat{S}_{m\vec{p}}^-(n+1) + \hat{S}_{m\vec{p}}^-(n) \hat{S}_{m\vec{p}}^+(n+1)) + \hat{S}_{m\vec{p}}^z(n) \hat{S}_{m\vec{p}}^z(n+1) \right] + \right. \\
 & \quad \left. + \frac{1}{2} J_{N1} \left[ \frac{1}{2} (\hat{S}_{m\vec{p}}^+(N) \hat{S}_{m+1\vec{p}}^-(1) + \hat{S}_{m-1\vec{p}}^+(N) \hat{S}_{m\vec{p}}^-(1)) + h.c. \right] + \right. \\
 & \quad \left. + \hat{S}_{m\vec{p}}^z(N) \hat{S}_{m+1\vec{p}}^z(1) + \hat{S}_{m-1\vec{p}}^z(N) \hat{S}_{m\vec{p}}^z(1) \right] \right\} \quad (24)
 \end{aligned}$$

Ovde  $\vec{S}_{m\vec{p}}(n)$  označava spin jona u  $n$ -toj ravni unutar  $m$ -te ućelije, a položaj unutar ravni je određen sa  $\vec{p}$ . Prvi član opisuje interakciju unutar ravni i uključuje sumu po najbližim susedima čiji su položaji označeni sa  $\vec{\delta}_{||}$ . Drugi član opisuje interakciju između ravni, gde su razdvojene interakcije unutar date ućelije i one između ućelija. U Hamiltonijanu (24) nije prisutna spinska anizotropija, ali s obzirom da su interakcije izmene unutar i između različitih ravni različite, postoji prostorna anizotropija. U ovoj glavi rada (kao i u sledećoj) biće pokazano da ona ne utiče na postojanje Goldstonovog moda u spektru elementarnih eksitacija.

Opšti postupak je detaljno objašnjen u [11], tako da nećemo ponavljati sve korake. Prvo pišemo jednačine kretanja za spinske operatore (u RPA), uvodimo dvodimenzionalni Furije transform u ravni da bismo dobili sistem za amplitudu spinskih talasa  $u_m(n, \vec{k}_{||})$  ( $\vec{k}_{||} = (k_y, k_z)$  je dvodimenzionalni talasni vektor koji će nadalje biti izostavljen). Za translaciono invariantnu superrešetku sistem jednačina za amplitudu  $m$ -te ućelije ima oblik:

$$(E - \epsilon_n) u_m(n) + S_n J_{n,n+1} u_m(n+1) + S_n J_{n,n-1} u_m(n-1) = 0 ; n = 1, 2, \dots, N \quad (25)$$

gde je  $S_n$  veličina spina u  $n$ -toj ravnini,  $J_{N,N+1} \equiv J_{N,1}$ ,

$$\epsilon_n = 4I_n S_n [1 - \gamma(\vec{k}_\parallel)] + S_{n+1} J_{n,n+1} + S_{n-1} J_{n,n-1} \quad (26)$$

i

$$\gamma(\vec{k}_\parallel) = \frac{1}{2} [\cos k_y a + \cos k_z a]. \quad (27)$$

Sistem jednačina (25) može biti zapisan u matričnom obliku

$$\begin{pmatrix} u_m(n+1) \\ u_m(n) \end{pmatrix} = \hat{M}_n \begin{pmatrix} u_m(n) \\ u_m(n-1) \end{pmatrix} \quad (28)$$

gde je transfer matrica  $\hat{M}_n$  data kao:

$$\hat{M}_n = \begin{pmatrix} \epsilon_n - E & -J_{n,n-1} \\ S_n J_{n,n+1} & 1 \end{pmatrix} \quad (29)$$

Sada možemo povezati proizvoljne amplitude u susednim ćelijama

$$\begin{pmatrix} u_{m+1}(n+1) \\ u_{m+1}(n) \end{pmatrix} = \hat{M}^{(n)} \begin{pmatrix} u_m(n+1) \\ u_m(n) \end{pmatrix}, \quad N+1 \equiv 1 \quad (30)$$

gde je

$$\hat{M}^{(n)} = \hat{M}_n \hat{M}_{n-1} \cdots \hat{M}_1 \hat{M}_N \hat{M}_{N-1} \cdots \hat{M}_{n+1} \quad (31)$$

Jedna važna osobina ove matrice je da je unimodularna, tj. njena determinanta je jednaka 1.

Matrica ima ekvivalentan oblik sa onom koju koristi Barnas [11] za  $n = N$ . Ipak, za translatorno invarijantno rešetku, ovaj izbor ne utiče na fizički važne rezultate što ćemo i pokazati.

Pre svega, primenjujući Blohovu (Bloch) teoremu (translatorna invarijantnost duž  $x$ -ose), dobijamo

$$\begin{pmatrix} u_{m+1}(n+1) \\ u_{m+1}(n) \end{pmatrix} = e^{i\eta L} \begin{pmatrix} u_m(n+1) \\ u_m(n) \end{pmatrix} \quad (32)$$

što vodi do

$$\hat{M}^{(n)} \begin{pmatrix} u_m(n+1) \\ u_m(n) \end{pmatrix} = e^{i\eta L} \begin{pmatrix} u_m(n+1) \\ u_m(n) \end{pmatrix} \quad (33)$$

Ovo je svojstveni problem matrice  $\hat{M}^{(n)}$  sa svojstvenim vrednostima  $e^{i\eta L}$ . Slična jednačina može biti napisana i za matricu  $(\hat{M}^{(n)})^{-1}$ :

$$(\hat{M}^{(n)})^{-1} \begin{pmatrix} u_m(n+1) \\ u_m(n) \end{pmatrix} = e^{-i\eta L} \begin{pmatrix} u_m(n+1) \\ u_m(n) \end{pmatrix} \quad (34)$$

tako da njihova kombinacija daje

$$\hat{M}^{(n)} + (\hat{M}^{(n)})^{-1} - 2 \cos vL \hat{I} = 0 \quad (35)$$

Koristeći osobine matrice  $\hat{M}^{(n)}$ , može se pokazati da je

$$(\hat{M}^{(n)})^{-1} = \begin{pmatrix} \hat{M}_{22}^{(n)} & -\hat{M}_{12}^{(n)} \\ -\hat{M}_{21}^{(n)} & \hat{M}_{11}^{(n)} \end{pmatrix} \quad (36)$$

tako da jednačina (35) postaje

$$2 \cos vL = \hat{M}_{11}^{(n)} + \hat{M}_{22}^{(n)} = \text{Tr} \left\{ \hat{M}^{(n)}(E) \right\} \quad (37)$$

Pošto je trag proizvoda matrica invarijantan u odnosu na cikličnu permutaciju unutar proizvoda, ovaj rezultat je potpuno nezavisan od izbora  $n$  u (30) i (31).

Značaj ove jednačine je u tome što određuje energije sistema (sadržane u  $M_{11}$  i  $M_{22}$ ) preko svojstvenih vrednosti. Svojstvene vrednosti ( $\lambda = e^{ivL}$ ) ne mogu biti određene samo iz svojstvenih jednačina (jednačina (18) u [11]), nego i pomoću graničnih uslova u svakom posebnom slučaju (periodična beskonačna superrešetka, superrešetka koja poseduje definisano površ ili međupovrš, film,...). Detaljna analiza svojstvenog problema data u odeljku 3 u [11], važi za bilo koju  $2 \times 2$  unimodularnu matricu sa realnim elementima koji zavise od parametara, tako da nije posebna osobina transfer matrice.

Kao najjednostavniji primer navešćemo rešenje za idealan slučaj beskonačne superrešetke, periodične duž  $x$ -ose. Ova periodičnost može biti obezbeđena samo ako je  $v$  realno, tj.  $v = k_x$  i  $-\pi \leq k_x L \leq \pi$ , tako da će energije elementarnih ekscitacija zavisi od  $\cos(k_x L)$ .

Pored metode transfer matrice može se definisati i drugi pristup rešavanju sistema jednačina (25) koji u komplikovanim slučajevima vodi do istih rezultata, ponekad na mnogo efikasniji način. Osnovna ideja je da se rešenja za spinske amplitudu traže u obliku Ansatza:

$$u_m(n) = u(n) e^{ivmL} \quad (38)$$

Notacija je već definisana u ovom odeljku. Uvođenjem Ansatza (38) u sistem (25) dobija se homogen sistem jednačina sa  $N$  nepoznatih amplituda  $u(n)$  ( $n = 1, 2, \dots, N$ ). Uslov da je determinanta sistema jednaka nuli, vodi direktno do jednačine (37).

Ovaj rezultat može biti dobijen i na drugi način. Polazeći od (30) i (31) može se dobiti sledeća jednačina

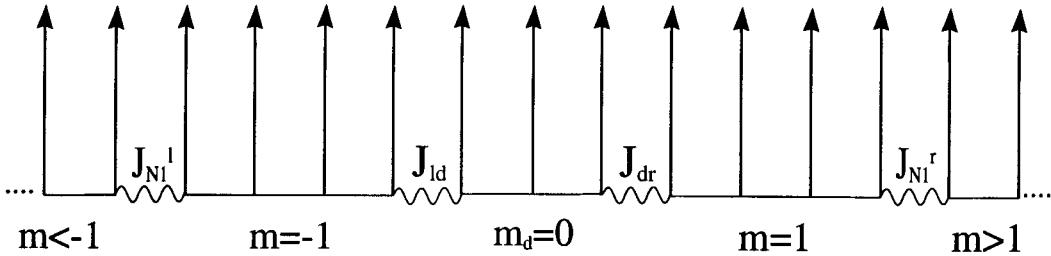
$$u_{m+1}(n) - [M_{11}^{(n)} + M_{22}^{(n)}]u_m(n) + u_{m-1}(n) = 0 \quad (39)$$

Zamenjujući Ansatz (38) u (39), odmah se dobija jednačina (37).

Koristeći ove opšte rezultate, u sledećim odeljcima analiziraćemo elementarne ekscitacije u superrešetkama sa različitim oblicima narušene translatorne invarijantnosti u pravcu  $x$ -ose.

## 2.1 Elementarne ekscitacije u superrešetki sa defektnom čelijom

U ovom odeljku ćemo razmatrati slučaj dve polu-beskonačne superrešetke koje su dovedene u kontakt preko defektne čelije, koju numerišemo sa  $m_d = 0$ . Zapravo podrazumevamo da koordinatni početak  $x$ -ose leži u  $n = 1$  ravni  $m_d = 0$  čelije koja ima  $N_d$  slojeva okarakterisanih sa amplitudama  $u^d(n)$ ,  $n = 1, 2 \dots N_d$ . "Leva" superrešetka ima motiv od  $N_l$  ravni gde su spinske amplitudе  $u_m^l(n)$ ,  $n = 1, 2 \dots N_l$ ;  $m < 0$ . "Desna" superrešetka je okarakterisana sa  $u_m^r(n)$ ,  $n = 1, 2 \dots N_r$ ;  $m > 0$ . Sve interakcije lako mogu biti identifikovane gornjim indeksima ( $l, d, r$ ) dok interakcije sa čelijom koja sadrži defekt označavamo sa  $J_{ld}$  (za levu čeliju) i  $J_{dr}$  (za desnu čeliju). Ova konfiguracija je prikazana na Slici 9 za  $N_l = 4$ ,  $N_d = 3$  i  $N_r = 4$ .



Slika 9: Šematski prikaz beskonačne superrešetke sa defektnom čelijom na mestu  $m_d = 0$ .

Ovde moramo napisati tri sistema jednačina za amplitude vezane za čeliju sa defektom ( $m = m_d = 0$ ) i susedne čelije u oba pravca ( $m = \pm 1$ ):

Za  $m = -1$ :

$$\begin{aligned} n = 1 : \quad & (E - \epsilon_1^l) u_{-1}^l(1) + J_{12}^l S_1^l u_{-1}^l(2) + J_{N_l 1}^l S_1^l u_{-2}^l(N_l) = 0 \\ 1 < n < N_l : \quad & (E - \epsilon_n^l) u_{-1}^l(n) + J_{n-1, n}^l S_n^l u_{-1}^l(n-1) + J_{n, n+1}^l S_n^l u_{-1}^l(n+1) = 0 \\ n = N_l : \quad & (E - \epsilon_{N_l}^l) u_{-1}^l(N_l) + J_{N_l-1, N_l}^l S_{N_l}^l u_{-1}^l(N_l-1) + J_{ld} S_{N_l}^l u_1^d = 0 \end{aligned} \quad (40)$$

gde je

$$\begin{aligned}\epsilon_1^l &= 4I_1^l S_1^l (1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + J_{12}^l S_2^l + J_{N_l 1}^l S_{N_l}^l \\ \epsilon_{N_l}^l &= 4I_{N_l}^l S_{N_l}^l (1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + J_{N_l-1, N_l}^l S_{N_l-1}^l + J_{ld}^l S_1^d \\ \epsilon_n^l &= 4I_n^l S_n^l (1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + J_{n-1, n}^l S_{n-1}^l + J_{n, n+1}^l S_{n+1}^l \quad \text{za } 1 < n < N_l\end{aligned}$$

Za  $m = 0$ :

$$\begin{aligned}n = 1: \quad & (E - \epsilon_1^d) u_1^d + J_{12}^d S_1^d u_2^d + J_{ld}^d S_1^d u_{-1}^l (N_l) = 0 \\ 1 < n < N_d: \quad & (E - \epsilon_n^d) u_n^d + J_{n-1, n}^d S_n^d u_{n-1}^d + J_{n, n+1}^d S_n^d u_{n+1}^d = 0 \\ n = N_d: \quad & (E - \epsilon_{N_d}^d) u_{N_d}^d + J_{N_d-1, N_d}^d S_{N_d}^d u_{N_d-1}^d + J_{dr}^d S_{N_d}^d u_1^r (1) = 0 \quad (41)\end{aligned}$$

gde je

$$\begin{aligned}\epsilon_1^d &= 4I_1^d S_1^d (1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + J_{12}^d S_2^d + J_{ld}^d S_{N_l}^l \\ \epsilon_{N_d}^d &= 4I_{N_d}^d S_{N_d}^d (1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + J_{N_d-1, N_d}^d S_{N_d-1}^d + J_{dr}^d S_1^r \\ \epsilon_n^d &= 4I_n^d S_n^d (1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + J_{n-1, n}^d S_{n-1}^d + J_{n, n+1}^d S_{n+1}^d \quad \text{za } 1 < n < N_d\end{aligned}$$

Za  $m = 1$ :

$$\begin{aligned}n = 1: \quad & (E - \epsilon_1^r) u_1^r (1) + J_{12}^r S_1^r u_1^r (2) + J_{dr}^r S_1^r u_{N_d}^d = 0 \\ 1 < n < N_r: \quad & (E - \epsilon_n^r) u_1^r (n) + J_{n-1, n}^r S_n^r u_1^r (n-1) + J_{n, n+1}^r S_n^r u_1^r (n+1) = 0 \\ n = N_r: \quad & (E - \epsilon_{N_r}^r) u_1^r (N_r) + J_{N_r-1, N_r}^r S_{N_r}^r u_1^r (N_r-1) + J_{Nr1}^r S_{N_r}^r u_2^r (1) = 0 \quad (42)\end{aligned}$$

gde je

$$\begin{aligned}\epsilon_1^r &= 4I_1^r S_1^r (1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + J_{12}^r S_2^r + J_{dr}^r S_{N_d}^d \\ \epsilon_{N_r}^r &= 4I_{N_r}^r S_{N_r}^r (1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + J_{N_r-1, N_r}^r S_{N_r-1}^r + J_{Nr1}^r S_1^r \\ \epsilon_n^r &= 4I_n^r S_n^r (1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + J_{n-1, n}^r S_{n-1}^r + J_{n, n+1}^r S_{n+1}^r \quad \text{for } 1 < n < N_r\end{aligned}$$

Jednačine za "levi i desni balk" ( $m < -1$ ,  $m > +1$ ) identične su jednačini (25), uz dodatne gornje indekse ( $l, r$ ).

Na osnovu gornjih jednačina kretanja, možemo napisati odgovarajuće transfer matrice:

$$\text{za } m < -1 : \begin{pmatrix} u_{m+1}^l(1) \\ u_m^l(N_l) \end{pmatrix} = \hat{M}^l \begin{pmatrix} u_m^l(1) \\ u_{m-1}^l(N_l) \end{pmatrix} \quad (43)$$

$$m = -1 : \begin{pmatrix} u^d(1) \\ u_{-1}^l(N_l) \end{pmatrix} = \hat{M}_t^l \begin{pmatrix} u_{-1}^l(1) \\ u_{-2}^l(N_l) \end{pmatrix} \quad (44)$$

$$m = 0 : \begin{pmatrix} u_1^r(1) \\ u^d(N_d) \end{pmatrix} = \hat{M}^d \begin{pmatrix} u^d(1) \\ u_{-1}^l(N_l) \end{pmatrix} \quad (45)$$

$$m = +1 : \begin{pmatrix} u_2^r(1) \\ u_1^r(N_r) \end{pmatrix} = \hat{M}_t^r \begin{pmatrix} u_1^r(1) \\ u^d(N_d) \end{pmatrix} \quad (46)$$

$$m > 1 : \begin{pmatrix} u_{m+1}^r(1) \\ u_m^r(N_r) \end{pmatrix} = \hat{M}^r \begin{pmatrix} u_m^r(1) \\ u_{m-1}^r(N_r) \end{pmatrix} \quad (47)$$

Značenje matrica je jasno zbog analogije sa prethodnim odeljkom, osim što je neophodno uvesti dve "prelazne" matrice:  $\hat{M}_t^l$  i  $\hat{M}_t^r$ .

Da bismo dobili uslov za energiju i amplitude lokalizovanih moda primenjujemo sledeći postupak. Formalno, pišemo jednačine za "prelazne" čelije ( $m = -1$ ;  $m = +1$ ) kao da su one deo balka superrešetke:

$$m = -1 : \begin{pmatrix} u_0^l(1) \\ u_{-1}^l(N_l) \end{pmatrix} = \hat{M}^l \begin{pmatrix} u_{-1}^l(1) \\ u_{-2}^l(N_l) \end{pmatrix} \quad (48)$$

Ova procedura uvodi novu pomoćnu amplitudu  $u_0^l(1) \neq u^d(1)$ .

S druge strane, za  $m = 1$ , imamo

$$\begin{pmatrix} u_2^r(1) \\ u_1^r(N_r) \end{pmatrix} = \hat{M}^r \begin{pmatrix} u_1^r(1) \\ u_0^r(N_r) \end{pmatrix} \quad (49)$$

sa pomoćnom amplitudom  $u_0^r(N_r) \neq u^d(N_d)$ .

Sada ćemo pristupiti "prišivanju" amplituda leve i desne superrešetke (kombinujući jednačine (44), (45), (46), (48) i (49)):

$$\begin{pmatrix} u_1^r(1) \\ u_0^r(N_r) \end{pmatrix} = \tilde{M} \begin{pmatrix} u_0^l(1) \\ u_{-1}^l(N_l) \end{pmatrix} \quad (50)$$

gde je

$$\tilde{M} = (\hat{M}^r)^{-1} \hat{M}_t^r \hat{M}^d \hat{M}_t^l (\hat{M}^l)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{\Delta\epsilon_1}{J_{N_r1}^r S_1^r} & \frac{J_{dr}}{J_{N_r1}^r} \end{pmatrix} \hat{M}^d \begin{pmatrix} \frac{J_{N_l1}^l}{J_{ld}} & -\frac{\Delta\epsilon_{N_l}}{J_{ld} S_{N_l}^l} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (51)$$

$$\text{i } \Delta\epsilon_1 = \epsilon_1^r - \epsilon_1^t, \Delta\epsilon_{N_l} = \epsilon_{N_l}^l - \epsilon_{N_l}^t.$$

Koristeći simetriju sistema, moramo definisati dva Ansatz za različite smerove  $x$ -ose

$$\text{za } m \geq 1 : u_m^r(n) = u^r(n)(\lambda_-^r)^{m-1}, |\lambda_-^r| < 1 \quad (52)$$

$$\text{za } m \leq -1 : u_m^l(n) = u^l(n)(\lambda_+^l)^{m+1} = u^l(n)(\lambda_-^l)^{|m|-1}, |\lambda_-^l| < 1 \quad (53)$$

Uvodeći (52) i (53) u (50) stižemo do sledećeg sistema jednačina:

$$\begin{aligned} u^r(1) + \lambda_+^l \tilde{M}_{11} u^l(1) - \tilde{M}_{22} u^l(N_l) &= 0 \\ \lambda_+^r u^r(N_r) - \lambda_+^l \tilde{M}_{21} u^l(1) - \tilde{M}_{22} u^l(N_l) &= 0 \end{aligned} \quad (54)$$

Ovaj sistem od dve jednačine povezuje četiri nepoznate amplitudе. Da bismo izrazili amplitude za čelije na krajevima ( $N_l, N_r$ ) preko amplituda čelija na početku (1) uvodimo odgovarajući Ansatz u jednačine za balk (43) i (47). Lako je dobiti

$$u^r(N_r) = \frac{M_{21}^r(E)\lambda_-^r}{\lambda_-^r - M_{22}^r(E)} u^r(1) \quad (55)$$

$$u^l(1) = \frac{(\lambda_+ - M_{22}^l(E))\lambda_-^l}{M_{21}^l(E)} u^l(N_l) \quad (56)$$

Kombinujući (54), (55) i (56) dobijamo homogen sistem za amplitude  $u^l(N_l)$  i  $u^r(1)$ . Izjednačavajući determinantu sistema sa nulom, dobijamo

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{21}(\lambda_-^r - M_{22}^r)(\lambda_+^l - M_{22}^l) + \\ + \tilde{M}_{22}M_{21}^l(\lambda_-^r - M_{22}^r) - \tilde{M}_{11}M_{21}^r(\lambda_+^l - M_{22}^l) - \tilde{M}_{12}M_{21}^rM_{21}^l &= 0 \end{aligned} \quad (57)$$

što zajedno sa relacijama

$$\lambda_-^r + \frac{1}{\lambda_-^r} = M_{11}^r + M_{22}^r \quad (58)$$

$$\lambda_+^l + \frac{1}{\lambda_+^l} = M_{11}^l + M_{22}^l \quad (59)$$

definiše energije lokalizovanih stanja, kao i atenuacione koeficijente za levu i desnu superrešetku:

$$\begin{aligned} \lambda_-^r &= e^{i\nu_r L_r}, \nu_r = \alpha_r + i\kappa_r, |\lambda_-^r| < 1 \\ \lambda_+^l &= e^{-i\nu_l L_l}, \nu_l = \alpha_l + i\kappa_l, |\lambda_+^l| > 1 \end{aligned} \quad (60)$$

sa  $\alpha_l, \alpha_r$  realnim i  $\kappa_l, \kappa_d$  realnim i pozitivnim da bi dobili lokalizovane ekscitacije.

U slučaju identičnih superrešetki levo i desno od defekta:  $N_l = N_r = N$ ;  $\hat{M}^l = \hat{M}^r = \hat{M}$ ;  $\lambda_{\pm}^l = \lambda_{\pm}^r = \lambda_{\pm}$  i  $\lambda_+ \lambda_- = 1$ , dobijamo:

$$(\lambda_- - M_{22})\tilde{M}_{22} - (\lambda_+ - M_{22})\tilde{M}_{11} - M_{21}\tilde{M}_{12} - M_{12}\tilde{M}_{21} = 0 \quad (61)$$

$$\lambda_+ + \lambda_- = M_{11} + M_{22} \quad (62)$$

Treba primetiti da se ovaj izraz razlikuje od odgovarajućeg koji je dobio Barnas (jedn.(42) u [11]), pošto u našem izrazu figuriše  $\tilde{M}$  umesto  $M^d$ . Razlog uvođenja  $\tilde{M}$  je činjenica da su svojstvene funkcije definisane sa (38),(39) u [11], odgovarajuće svojstvene funkcije samo za  $J_{ld} = J_{N1}$  i  $J_{dr} = J_{N1}$  što ne mora uvek biti slučaj. Tačne svojstvene funkcije su date sa

$$\begin{pmatrix} u_1^r(1) \\ u_0^r(N_r) \end{pmatrix} = Au_-^r; \quad u_-^r = \begin{pmatrix} \lambda_-^r - M_{22}^r \\ M_{21}^r \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |\lambda_-^r| < 1 \quad (63)$$

$$\begin{pmatrix} u_0^l(1) \\ u_{-1}^l(N_l) \end{pmatrix} = Bu_+^l; \quad u_+^l = \begin{pmatrix} \lambda_+^l - M_{22}^l \\ M_{21}^l \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |\lambda_+^l| > 1 \quad (64)$$

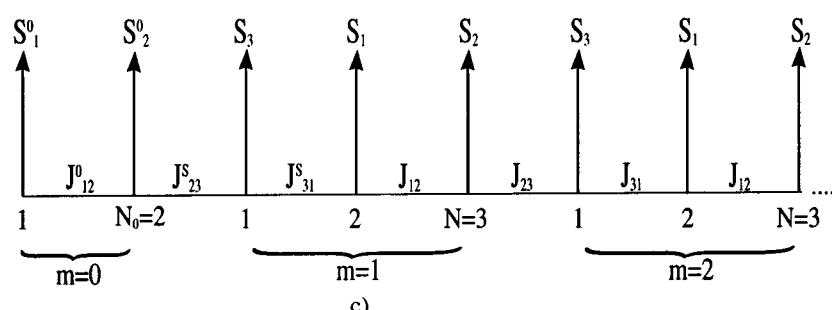
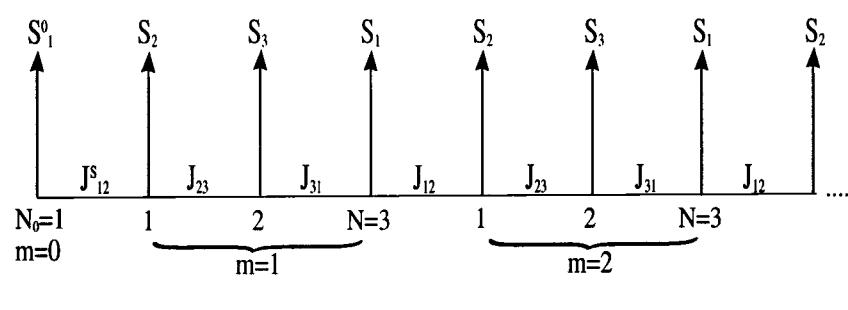
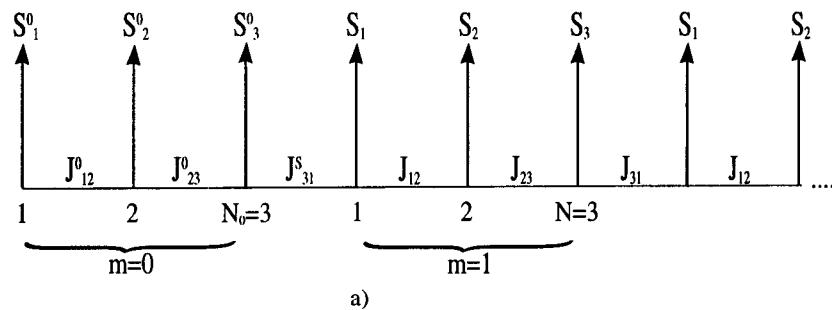
Posledice koje nastaju usled razlike između  $\tilde{M}$  i  $M_d$  će biti elaborirane u nekim primerima u sledećem odeljku.

Primetimo konačno da naš metod kombinovanja matrica sa Ansatzom uopšte ne zahteva poznavanje svojstvenih funkcija.

## 2.2 Elementarne ekscitacije u polu-beskonačnoj superrešetki

U ovom odeljku razmatramo superrešetku koja poseduje graničnu površ, dok se beskonačno prostire u suprotnom smeru. Prisustvo površi će biti opisano na način koji zapravo predstavlja uopštavanje onog koji analizira Barnas [11], gde se samo parametri površinskog sloja razlikuju od balkovskih. Dakle, pretpostavljamo da površinska ćelija ( $m = 0$  ćelija) ima  $N_0$  slojeva, gde  $N_0$  nije neophodno jednako sa  $N$ . U najopštijem slučaju, sve interakcije u površinskoj ćeliji se mogu razlikovati od zapreminskih, a takođe i interakcija između površinske i susedne ćelije ( $J_{N_0,1} \neq J_{N,1}$ ).

Da budemo precizniji: biramo  $N_0$  na takav način da se u delu sistema izvan  $N_0$ , može definisati "zapreminska" ćelija koja se periodično ponavlja. Ovde se mora biti pažljiv, pošto periodičnost može biti perturbovana na dva načina: ili



Slika 10: Šematski prikaz različitih izbora površinske i zapreminske čelije za raličite superrešetke. (Interpretacija je data u tekstu.)

prisustvom različitih interakcija ili različitim vrednostima spina. Odgovarajući izbor  $N_0$  ilustrovan je na Slici 10.

Najopštiji slučaj različitih spinova i interakcija je prikazan na Slici 10a za  $N_0 = 3$  i  $N = 3$ . "Balk" ćelija - ona koja se periodično ponavlja duž  $x$ -ose ima strukturu  $(S_1, S_2, S_3)$ . Ipak, kada su neke interakcije blizu površi iste kao i u balku (Slika 10b), imamo slučaj  $N_0 = 1, N = 3$ , ali je struktura zapreminske ćelije  $(S_2, S_3, S_1)$ . Još jedna mogućnost je prikazana na Slici 10c, gde je  $N_0 = 2$  i  $N = 3$ , ali sa zapreminskom ćelijom  $(S_3, S_1, S_2)$ .

Može se videti da su u ovim slučajevima svojstvene vrednosti transfer matrica koje odgovaraju balku iste pošto je njihov trag invarijantan u pogledu ciklične permutacije matrica  $\hat{M}_1 \hat{M}_2 \hat{M}_3$ . Samo su granični uslovi različiti u sva tri slučaja, kao što će biti pokazano.

Sistem jednačina kretanja za amplitude može prosto biti prihvaćen iz prethodnog odeljka, zanemarujući deo sistema za  $x < 0$ . Ćelija koja unosi defekt je sada površinska ćelija sa odgovarajućim promenama u notaciji  $u_n^d \rightarrow u_0(n)$ ,  $N_d \rightarrow N_0$ ,  $J_{n,n+1}^d \rightarrow J_{n,n+1}^s$  itd. Za  $m \geq 1$  gornji indeks ( $r$ ) je izostavljen. Jedina matrična jednačina koja je suštinski drugačija je ona za  $m = 0$ :

$$\begin{pmatrix} u_1(1) \\ u_0(N_0) \end{pmatrix} = \hat{M}^s \begin{pmatrix} u_0(1) \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{M}^s = \prod_{n=N_0}^1 \hat{M}_n^s \quad (65)$$

gde je transfer matrica  $\hat{M}_n^s$  data sa  $(J_{N_0, N_0+1} \equiv J_{N_0, 1})$ :

$$\hat{M}_n^s = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon_n^s - E}{S_n J_{n,n+1}^s} & -\frac{J_{n,n-1}^s}{J_{n,n+1}^s} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ za } n = 2, 3, \dots, N_0 \text{ i } \hat{M}_1^s = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon_1^s - E}{S_1 J_{12}^s} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (66)$$

Za  $m \geq 1$ , mogu se koristiti relacije (46,47) uz odgovarajuću notaciju.

Da bismo dobili uslov koji određuje površinske amplitude i energije, radićemo na sledeći način. Formalno proširujući zapreminsku jednačinu (47) za  $m = 1$  pišemo

$$\begin{pmatrix} u_2(1) \\ u_1(N) \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} u_1(1) \\ u_0(N) \end{pmatrix} \quad (67)$$

gde je  $u_0(N) \neq u_0(N_0)$ .

Kombinujući (67), (46) i (65) dobijamo

$$\begin{pmatrix} u_1(1) \\ u_0(N) \end{pmatrix} = \hat{M}_0 \begin{pmatrix} u_0(1) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (68)$$

koja povezuje zapreminske i površinske amplitude. Ovde je:

$$\hat{M}_0 = \hat{M}^{-1} \hat{M}_t \hat{M}_s = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{\Delta\epsilon_1}{S_1 J_{N1}} & \frac{J_{N01}}{J_{N1}} \end{pmatrix} \hat{M}_s, \quad \Delta\epsilon_1 = \epsilon_1 - \epsilon'_1 \quad (69)$$

Ako uvedemo opšti Ansatz:

$$u_m(n) = u(n) \lambda_-^{m-1}, \quad m \geq 1 \quad (70)$$

(pošto je  $J_{N01} \neq J_{N1}$ ) u (68), dobijamo dve jednačine za tri amplitude ( $u_0(1), u(1)$  i  $u(N)$ ).

Koristeći relaciju (55) eliminisemo  $u(N)$  što vodi do sistema od dve jednačine za dve nepoznate amplitude  $u(1)$  i  $u_0(1)$ . Determinanta ovog sistema daje

$$M_0^{21}(\lambda_- - M_{22}) - M_{21}M_0^{11} = 0 \quad (71)$$

što kombinovano sa

$$\lambda_- + \frac{1}{\lambda_-} = M_{11} + M_{22} \quad (72)$$

određuje energije površinskih eksitacija ( $E_s$ ) i atenuacione koeficijente  $\eta_s$ .

U posebnom slučaju, kada je samo interakcija unutar površinskog sloja  $I_1^s$  različita od zapreminske vrednosti, dobijamo Barnasovu jednačinu (35) iz [11]. Jednačine (71) i (72) ćemo koristiti u odeljku 2.4 da bi numerički analizirali spekter elementarnih eksitacija u polu-beskonačnoj superrešetki.

### 2.3 Elementarne eksitacije u višeslojnim strukturama (filmove-vima)

Konačno ćemo proučiti slučaj višeslojnih struktura. Predstavićemo pojednostavljen pristup, pomoću kojeg se ipak mogu obrađivati opšiji problemi nego oni predloženi u [11]. Posmatraćemo film koji se sastoji od  $m_0$  ćelija, od kojih svaka sadrži  $N_m$  ( $m = 1, 2, \dots, m_0$ ) slojeva. U najopštijem slučaju sve ćelije su različite.

Napišimo sada jednačine za amplitude:

$$1 < m < m_0; \quad \begin{pmatrix} u_{m+1}(1) \\ u_m(N_m) \end{pmatrix} = \hat{M}_m \begin{pmatrix} u_m(1) \\ u_{m-1}(N_{m-1}) \end{pmatrix} \quad (73)$$

$$m = 1; \quad \begin{pmatrix} u_2(1) \\ u_1(N_l) \end{pmatrix} = \hat{M}_1 \begin{pmatrix} u_1(1) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (74)$$

$$m = m_0 ; \quad \begin{pmatrix} 0 \\ u_{m_0}(N_{m_0}) \end{pmatrix} = \hat{M}_{m_0} \begin{pmatrix} u_{m_0}(1) \\ u_{m_0-1}(N_{m_0-1}) \end{pmatrix} \quad (75)$$

Kombinujući gornje tri jednačine

$$\begin{pmatrix} 0 \\ u_{m_0}(N_{m_0}) \end{pmatrix} = \tilde{M} \begin{pmatrix} u_1(1) \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad \tilde{M} = \prod_{m=m_0}^1 \hat{M}_m \quad (76)$$

dobijamo sistem za određivanje nepoznatih amplituda  $u_1(1)$  i  $u_{m_0}(N_{m_0})$

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{11} u_1(1) + 0 \cdot u_{m_0}(N_{m_0}) &= 0 \\ \tilde{M}_{21} u_1(1) + u_{m_0}(N_{m_0}) &= 0 \end{aligned} \quad (77)$$

Izjednačavanjem determinante sistema (77) sa nulom dobijamo jednačinu za energijske nivoe u filmu:

$$\tilde{M}_{11}(E) = 0 \quad (78)$$

Broj energijskih nivoa (u 2D BZ) u najopštijem slučaju je jednak ukupnom broju ( $N_f$ ) slojeva u filmu :  $N_f = \sum_{m=1}^{m_0} N_m$ , jer je  $\tilde{M}_{11}(E)$  polinom (po  $E$ ) reda  $N_f$ .

Ovaj pristup je mnogo opštiji od onog koji predlože Barnas, pošto dozvoljava potpunu slobodu u izboru graničnih uslova i sastava ćelija filma.

S druge strane, za numerička izračunavanja energijskih nivoa u filmu, naša jednačina (78) je mnogo lakša nego odgovarajuće jednačine (49) ili (50) u [11], koje su implicitne funkcije energije i svojstvenih vrednosti  $\lambda_+$  i  $\lambda_-$ .

## 2.4 Analiza rezultata

Cilj ovog dela rada je bio proširivanje metode transfer matrice za sisteme koje predlaže Barnas. Da bi uporedili rezultate oba metoda, analizirali smo spekture elementarnih ekscitacija za neke identične sisteme gde se javljaju razlike u rezultatima dva prilaza.

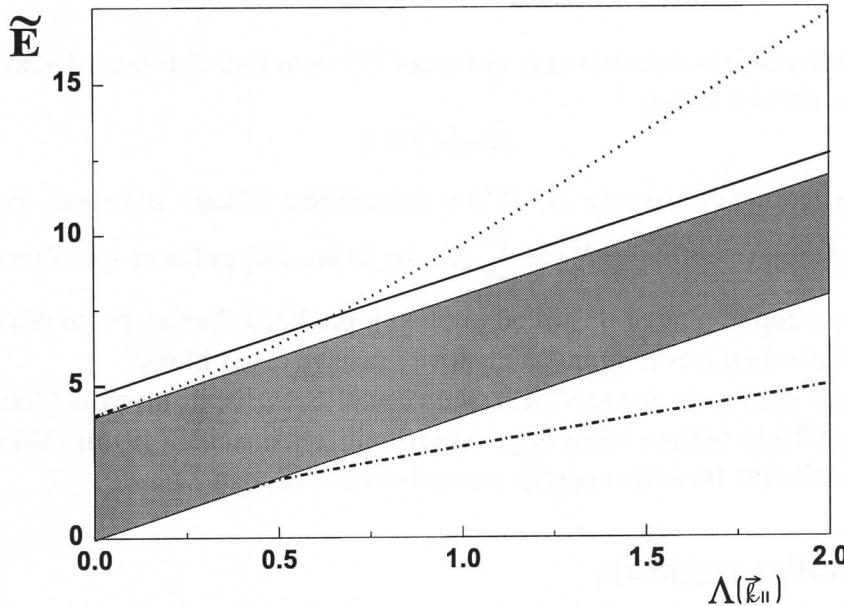
Posmatrajmo polu-beskonačnu superrešetku. Razmatrajmo prvo slučaj uniformnog feromagnetika ( $N = 1$ ,  $I_n = J_{n,n+1} = J$ ) sa  $N_0 = 1$ ,  $I_1^s \neq J$ ,  $J_{N_0 1} = J_\perp \neq J$ . Iako veoma jednostavna, čak i ova konfiguracija ne može biti rešena postupkom koji predlaže Barnas u [11], gde je osnovna prepostavka samo  $I_1^s \neq J$  dok je međućelijsko sparivanje uvek isto.

Jednačine (71,72) u ovom slučaju daju:

$$\widetilde{\Delta\epsilon}_1 \lambda_-^3 - (\widetilde{\Delta\epsilon}_s \widetilde{\Delta\epsilon}_1 - \epsilon_\perp^2 + 1) \lambda_-^2 + (\widetilde{\Delta\epsilon}_1 + \widetilde{\Delta\epsilon}_s) \lambda_- - 1 = 0$$

$$\tilde{E}_s = \frac{E_s}{JS} = 4(1 - \gamma(\vec{k}_{\parallel})) + 2 - (\lambda_- + \frac{1}{\lambda_-})$$

gde je  $\tilde{\Delta}\varepsilon_s = \frac{\varepsilon - \varepsilon_s}{JS} = 4(1 - \beta_s)(1 - \gamma(\vec{k}_{\parallel})) + 2 - \varepsilon_{\perp}$ ,  $\tilde{\Delta}\varepsilon_1 = \frac{\Delta\varepsilon_1}{JS} = 1 - \varepsilon_{\perp}$ ,  $\beta_s = \frac{I_1^s}{J}$ ,  $\varepsilon_{\perp} = \frac{J_{\perp}}{J}$ . Ova jednačina se slaže sa rezultatima Wolframa i de Vama [21], koji su dobijeni na mnogo složeniji način primenom GF-ja. Spektar lokalizovanih i zapreminskega moda je nacrtan na Slici 11, za neke vrednosti parametara. Može se videti da se za  $J_{\perp} > J$  pojavljuju optičke mode, dok se za  $J_{\perp} < J$  pojavljuju akustičke površinske mode.



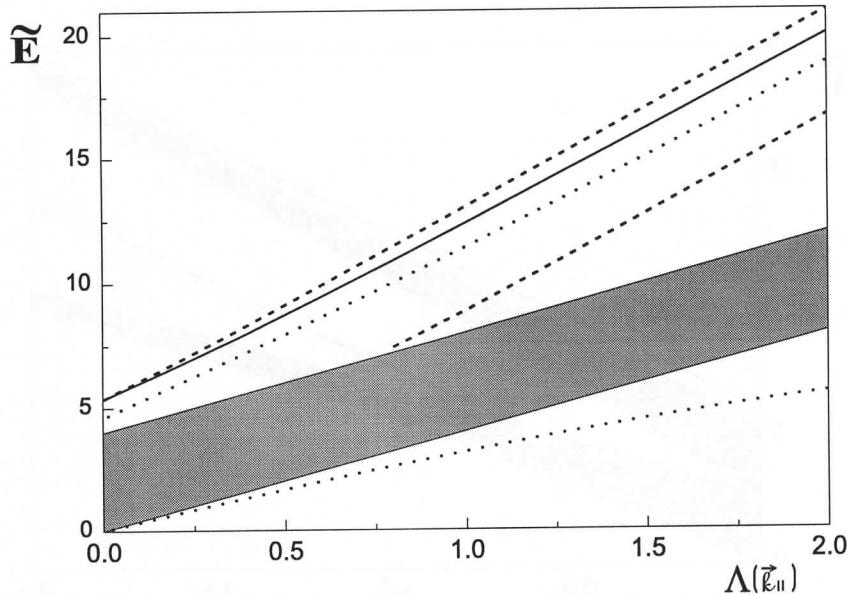
Slika 11: Spektar površinskih spinskih talasa u polu-beskonačnoj superrešetki sa jednom magnetnom ravni po jediničnoj celiji ( $N_0 = 1$ ,  $N = 1$ ): renormalizovana energija  $\tilde{E} = \frac{E}{JS}$  u zavisnosti od  $\Lambda(\vec{k}_{\parallel}) = 1 - \gamma(\vec{k}_{\parallel})$ . Osenčena je zapreminska zona. Odgovarajuće linije su: (a) (tačkasta linija)  $\beta_s = 2$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 1.4$ , (b) (crta-tačka linija)  $\beta_s = 0.5$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 0.25$ , (c) (puna linija)  $\beta_s = 1$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 2$ .

Sada ćemo analizirati površinske eksitacije uniformnog feromagnetika za iste zapreminske parametre, ali sa  $N_0 = 2$ . Interakcije su:  $J_{12}^s \neq J$ , obe interakcije u ravni  $I_1^s \neq I_2^s \neq J$  i  $J_{N_01} = J$  (Slika 12).

U zavisnosti od izbora parametara mogu nastati različite kombinacije grana

uključujući koegzistenciju akustičkih i optičkih grana za isti set parametara (tačkaste linije).

Čak i ova dva jednostavna primera ukazuju na potrebu proširivanja metode uvedene u radu [11].

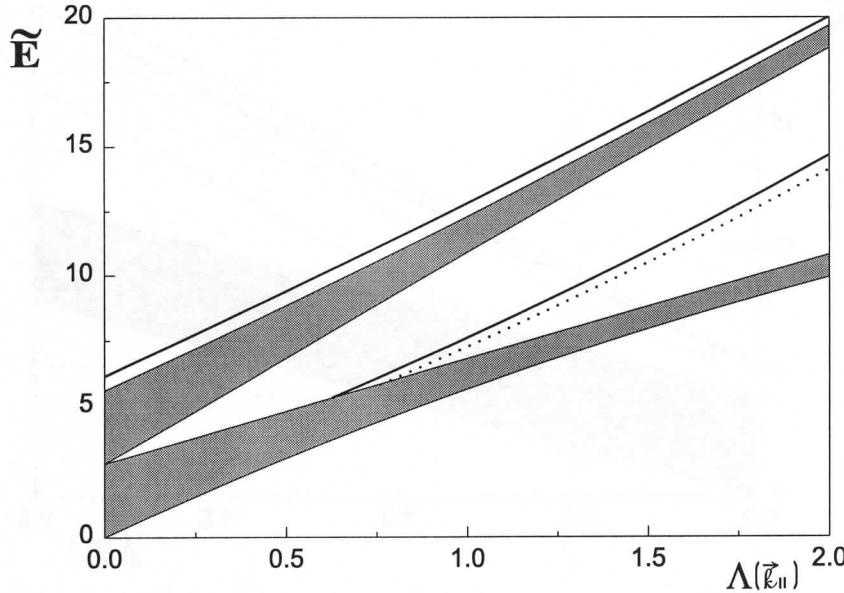


Slika 12: Spektar površinskih spinskih talasa u polu-beskonačnoj superrešetki sa dve magnetne ravni u površinskoj ćeliji ( $N_0 = 2, N = 1$ ). Osenčena je zapreminska zona. Parametri  $\beta_s = \frac{I_1^s}{J}, \beta_1 = \frac{I_2^s}{J}, \varepsilon_{\perp}^s = \frac{J_{12}^s}{J}$  odgovarajućih linija su: (a) (puna linija)  $\beta_s = 1, \beta_1 = 2, \varepsilon_{\perp}^s = 1.4$ , (b) (isprekidana linija)  $\beta_s = 2, \beta_1 = 2, \varepsilon_{\perp}^s = 1.4$ , (c) (tačkasta linija)  $\beta_s = 0.5, \beta_1 = 2, \varepsilon_{\perp}^s = 0.8$ .

Posmatrajmo sada kompleksniji slučaj sa  $N_0 = N = 2$ . Zapreminske ćelije dva sloja su okarakterisane sa  $(I_A, S_A; I_B, S_B)$  dok je interakcija između slojeva uvek  $J_{AB}$ . Površinska ćelija je okarakterisana sa  $I_A^s, I_B^s$  i  $J_{12}^s \equiv J_{\perp}$ , dok  $J_{N_0 1} \equiv J_{AB}$ . Slika 12 ukazuje da se za različite parametre, mogu pojavitи različite površinske grane, uključujući i rezultate Barnasa [11].

Nadalje ćemo posmatrati superrešetku sa jednim defektnim slojem. Uniformni feromagnetik sa  $N = 1, S_A, J_A$ , ima defektni sloj ( $N_0 = 1$ , spin  $S_B$  i interakcijom unutar ravni  $J_B$ ), a interakcija tog sloja i uniformnog dela superrešetke je  $J_{AB}$  (u oba smera). Ovaj primer ukazuje na suštinsku razliku između rezultata Barnasovog i našeg prilaza. Pošto je  $J_{AB} \neq J_A$ , moramo uvesti prelaznu matricu. Jednačina (61) u ovom slučaju daje:

$$(\widetilde{\Delta\epsilon}_A \lambda_- - 1)[\widetilde{\Delta\epsilon}_A \lambda_-^3 + \lambda_-^2(2\eta\alpha^2 - \widetilde{\Delta\epsilon}_A \widetilde{\Delta\epsilon}_B - 1) + \lambda_- (\widetilde{\Delta\epsilon}_A + \widetilde{\Delta\epsilon}_B) - 1] = 0$$



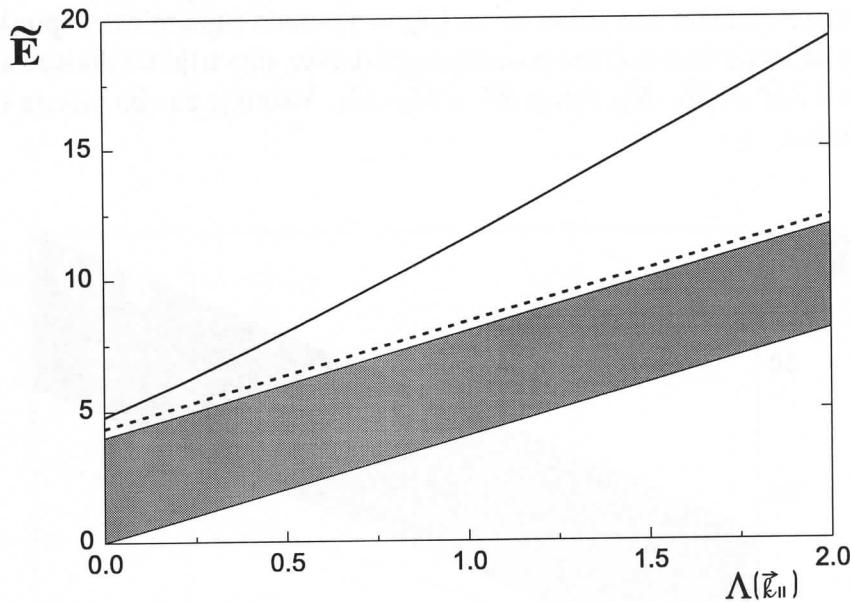
Slika 13: Disperzije krive površinskih spinskih talasa lokalizovanih na površi za  $N_0 = N = 2$ . Parametri za pune linije su:  $\eta = \frac{S_B}{S_A} = 1$ ,  $\delta = \frac{J_B}{J_A} = 2$ ,  $\alpha = \frac{J_{AB}}{J_A} = 1.4$ ,  $\beta_s = \frac{I_A^s}{J_A} = 1.5$ ,  $\epsilon_{\perp}^s = \frac{J_{\perp}}{J_A} = 2$ ,  $\delta_s = \frac{I_B^s}{J_A} = 2$ . Tačkasta linija odgovara Barnesovom slučaju ( $\beta_s = 1.5$ ,  $\epsilon_{\perp}^s = \alpha = 1.4$ ,  $\delta_s = \delta = 2$ ,  $\eta = 1$ )

sa  $\widetilde{\Delta\epsilon}_A = \frac{\Delta\epsilon_1}{J_A S_A} = 1 - \eta\alpha$ ,  $\widetilde{\Delta\epsilon}_B = \frac{\epsilon_A - \epsilon_B}{J_A S_A} = 4(1 - \eta\delta)\Lambda(\vec{k}_{\parallel}) + 2(1 - \alpha)$ ,  $\eta = \frac{S_B}{S_A}$ ,  $\alpha = \frac{J_{AB}}{J_A}$ ,  $\delta = \frac{J_B}{J_A}$ . Za istu konfiguraciju jedn. (42) u radu [11] vodi do jednačine drugog reda po  $\lambda_-$ :

$$(2\eta\alpha - 1)\lambda_-^2 + \lambda_- \widetilde{\Delta\epsilon}_B - 1 = 0,$$

što je sasvim drugačije od našeg rezultata kao posledica činjenice da je  $\tilde{M} \neq \hat{M}_d$ . Može se videti da se naša jednačina četvrtog reda može faktorizovati u linearu i kubnu. Uvodeći Ansatz za spinske amplitude, lako možemo zaključiti da rešenja

lineарне једначина одговарају локализованим спинским таласима са нултом амплитудом у дефекту  $u^B = 0$ ,  $u_1^A = -u_{-1}^A \neq 0$  и одговара само оптичкој грани (тачкаста линија на Слици 13). С друге стране решење кубне једначина води до  $u^B \neq 0$  и  $u_1^A = u_{-1}^A = -\frac{\alpha\lambda_- u^B}{\widetilde{\Delta\varepsilon}_A \lambda_- - 1}$ , што одговара акустичким или оптичким гранама, у зависности од избора параметара система (пуне линије на Слици 14).



Slika 14: Disperzije krive površinskiх spinskih talasa локализованих на дефектном слоју у бесконачном унiformном систему. Коришћени параметри су: a) (пуне линије)  $\eta = 1$ ,  $\delta = 2$ ,  $\alpha = 1.4$  и b) (испрекидана линија)  $\eta = 1$ ,  $\delta = 2$ ,  $\alpha = 2.8$ .

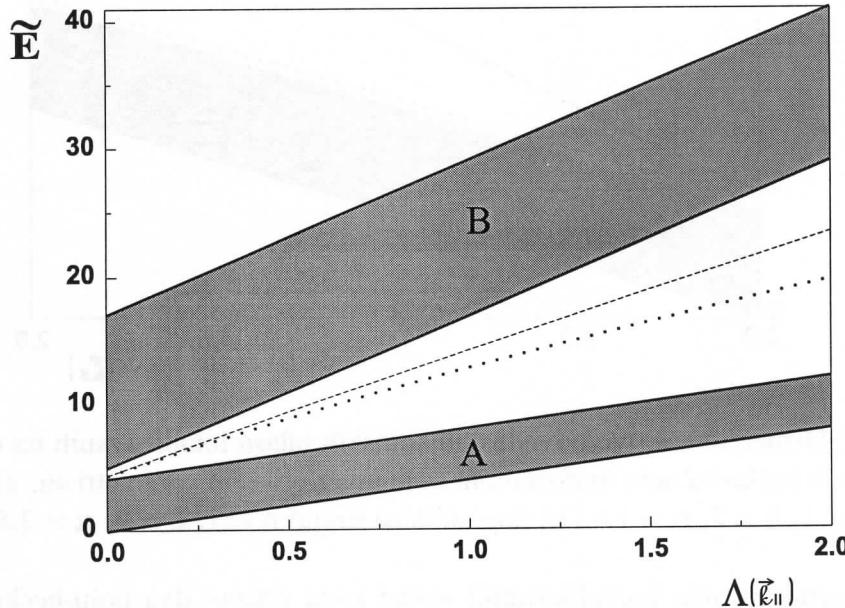
Посматрајмо сада компликованiji slučaj kada имамо два полубесконачна феромагнетика ( $J_A, S_A$ ) и ( $J_B, S_B$ ) чији контакт је остварен преко две међуповрши ( $J_A^s, S_A$ ) и ( $J_B^s, S_B$ ) чији спонови интерагују са  $J_{AB}$ . Да би избегли преклапање за преминских зона у центру BZ, додали smo једнојонску анизотропију  $B$ -феромагнетику ( $D_s$  у међуповршинској равни,  $D$  у балку). Увођење анизотропије у трансфер матрице је прости урађено dodавањем одговарајућег renormalizacionог кофицијента у  $\varepsilon_n$ . Овде се moraju користити општиji изрази (57-59). Резултати су приказани на Слици 15.

Vidimo da za dati set параметара енергије локализованих стања леже између две zone балка. Ово implicira да се може појавити магнетизација феромагнетика A на међуповрши чак и у температурском опсегу  $T \geq T_c^A$ , индукована јаљом феромагнетном интеракцијом феромагнетика B ( $T_c^B > T_c^A$ ), пошто је енергија локализованих

stanja viša nego energija zapreminske zone  $A$ , podsećajući na situaciju iz rada [23] gde je analiziran odnos površinske i zapreminske magnetizacije.

Posmatrajmo sada drugi način narušavanja translatorne simetrije. Razmatramo superrešetku sa  $N = N_d = 2$  gde je zapreminski motiv kombinacija  $AB$  ravni, dok je defekt tipa  $AA$ .  $A$  i  $B$  spinovi interaguju sa  $J_{AB}$ , dva  $A$  spina interaguju sa  $J_A$  i  $B$  spinovi sa  $J_B$ .

Ovaj sistem može biti opisan i na drugačiji način. Zapravo ako odaberemo desnu ravan  $A$  defekta kao jednu ravan ( $N_d = 1$ ), onda zapreminske spinske konfiguracije sa leve i desne strane poseduju ogledalsku simetriju u odnosu na defektну ravan  $A$  i  $\hat{M}^l = \hat{M}_A \cdot \hat{M}_B$  dok je  $\hat{M}^r = \hat{M}_B \cdot \hat{M}_A$ . Važno je da oba prilaza vode do istih rezultata.



Slika 15: Disperzije krive površinskih spinskih talasa lokalizovanih na međupovršinama koje se javljaju u kontaktu dva različita feromagnetičara. Parametri  $\beta_s^l = \frac{J_A^s}{J_A}$ ,  $\beta_s^r = \frac{J_B^s}{J_B}$ ,  $\delta = \frac{J_B}{J_A}$ ,  $d = \frac{D(2S_B - 1)}{J_A S_A}$ ,  $d_s = \frac{D_s(2S_B - 1)}{J_A S_A}$ : (a) (isprekidana linija)  $S_A = 1$ ,  $S_B = 3/2$ ,  $\beta_s^l = 1$ ,  $\beta_s^r = 1.5$ ,  $\delta = 2$ ,  $d = 5$ ,  $d_s = 4.5$ , (b) (tačkasta linija)  $S_A = 1$ ,  $S_B = 3/2$ ,  $\beta_s^l = 1.5$ ,  $\beta_s^r = 1$ ,  $\delta = 2$ ,  $d = 5$ ,  $d_s = 4.5$ .

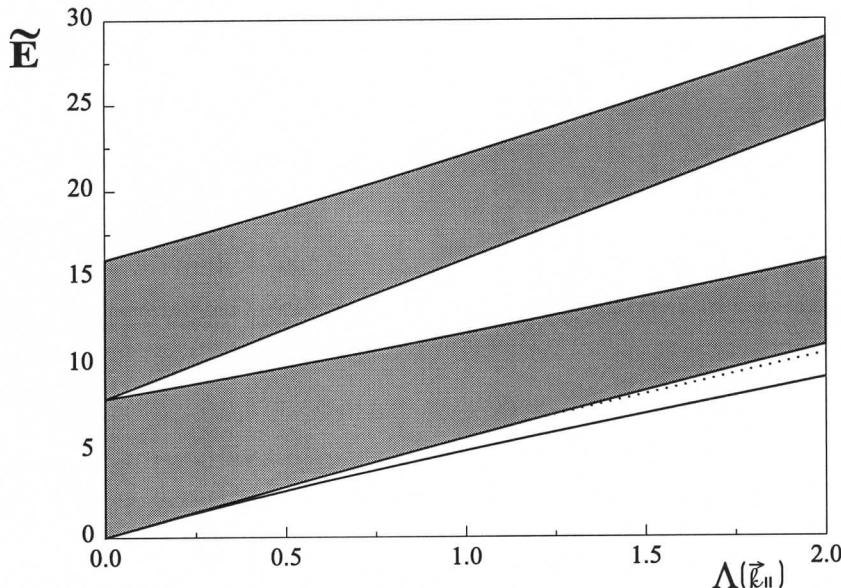
U ovom slučaju relacija (61) može biti faktorizovana

$$[\widetilde{\Delta\epsilon}_A(1 + \lambda_-) + (E - \widetilde{\epsilon}_A)]\{(E - \widetilde{\epsilon}_A^d)[\widetilde{\Delta\epsilon}_A(1 + \lambda_-) + E - \widetilde{\epsilon}_A] - 2(1 + \lambda_-)\} = 0$$

$$\text{sa } \tilde{\varepsilon}_A = 4\Lambda(\vec{k}_{||}) + 2\alpha\eta, \quad \tilde{\varepsilon}_A^d = 4\Lambda(\vec{k}_{||}) + 2, \quad \widetilde{\Delta\varepsilon}_A = \tilde{\varepsilon}_A - \tilde{\varepsilon}_A^1, \quad \tilde{\varepsilon}_A^1 = 4\Lambda(\vec{k}_{||}) + 1 + \eta\alpha, \\ \tilde{\varepsilon}_i \equiv \frac{\varepsilon_i}{J_{AS_A}}, \quad \alpha = \frac{J_{AB}}{J_A}, \quad \eta = \frac{S_B}{S_A}.$$

Koristeći Ansatz metod, može se lako videti da rešenje prvog činioca odgovara sledećem nizu amplituda:  $u_d^A = 0$ ,  $u_1^A = -u_{-1}^A$ ,  $u_1^B = -u_{-1}^B$  dok drugi vodi do:

$u_1^A = u_{-1}^A$ ,  $u_1^B = u_{-1}^B$  i  $u_d^A = -\frac{2}{E - \tilde{\varepsilon}_A^d} u_1^A$ . Ova dva rešenja su međusobno isključiva, što se može videti analizom gornjih jednačina. Ova situacija je ilustrovana na Slici 16 gde tačkasta linija odgovara prvom nizu amplituda, dok druga puna linija odgovara drugom nizu. Ovi rezultati se razlikuju od rezultata iz rada [11], iz razloga koje smo ranije pomenuli.



Slika 16: Disperzije krive moda spinskih talasa lokalizovanih na međupovrši za  $N_d = N = 2$ . Parametri  $\eta = 1$ ,  $\delta = 2$ ,  $\alpha = 4$ .

Osnovna ideja našeg prilaza je da se mogu dobiti opštiji (i fleksibilniji) rezultati ako se napravi pogodna identifikacija defekta i balka, na način koji dozvoljava maksimalno korišćenje translatorne simetrije. Za polu-beskonačnu superrešetku bila je potrebna generalizacija da bismo razmatrali konfiguracije koje nisu tretirane u Barnasovom prilazu. Efikasnost našeg metoda se manifestuje u proučavanju superrešetke sa defektom, kada su interakcije između ćelije sa defektom i leve i desne ćelije balka različite u odnosu na balkovske. Neophodnost uvođenja matrica prelaza čini formalnu razliku očiglednom. Ranije je detaljno objašnjeno da

u ovom slučaju, svojstvene funkcije zapreminskih matrica ne mogu biti definisane na način koji predlaže Barnas [11]. Važno je primetiti da za iste vrednosti parametara sistema, dobijamo ili različite numeričke vrednosti za energije ili čak neke grane kojih nema u njegovom prilazu. Podvucimo da smo mi primenili kombinaciju jednačine transfer matrice i odgovarajućeg Ansatza, a originalni rezultati su objavljeni u radu [24]. Ipak, važno je primetiti, da primena samo metode transfer matrice (sa pravim izborom svojstvenih funkcija) ili samo direktno uvođenje Ansatza u jednačine kretanja za amplitude, vodi do istih rezultata kao i kombinacija ove dve metode. Dakle, u ovoj glavi su prikazane dve nezavisne metode, ali u praksi korišćene kao kombinacija, pošto mnogo efikasnije vode do traženih rezultata.

### 3 Složene magnetne strukture sa prostornom anizotropijom

Napredak u teorijskim predviđanjima i sintezi materijala sa složenim strukturama naveo nas je da teorijski proširimo ova istraživanja. Primeri složenih magnetnih sistema su jaki magnetici (sistemi retka zemlja-gvožđe  $R_2Fe_{14}B$ , [7, 8]) ili magnetne superrešetke i slojevite strukture ( $Fe/Cr$  i  $Co/Cu$  slojevi, gde varijacija u širini sloja može proizvesti FM ili AF sparivanje između FM uređenih ravni [31], superrešetke koje se sastoje od  $Fe$  i  $Gd$  ravni [32],  $Gd/Dy$  superrešetke [33] itd.). Za teorijsku analizu ovakvih sistema potrebno je uopštavanje Hamiltonijana Hajzenbergovog modela uvođenjem ne samo spinske već i prostorne anizotropije.

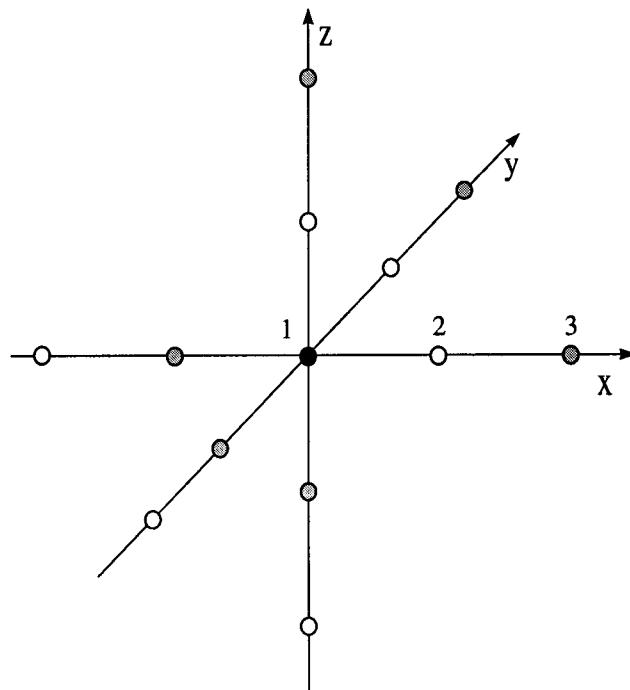
Poznato je iz literature da pod uticajem spinske anizotropije (eventualno i spoljašnjeg polja) može da dođe do spinske reorientacije [8], gde sistem u funkciji temperature menja osu kvantizacije (to se na primer javlja u sistemima kao što su  $R_2Fe_{14}B$ , [7]). Što se tiče uticaja prostorne anizotropije u literaturi postoji dosta "lutanja". Navećemo primer autora Ži-donga (Zhi-dong), koji u radovima [9, 10] (objavljenih u Physical Review B!), neadekvatno tretira ulogu prostorne anizotropije. To nas je navelo da detaljno analiziramo sisteme sa izraženom prostornom anizotropijom u odsustvu spinske anizotropije. Uticaj obe vrste anizotropije ćemo analizirati u sledećoj glavi. Pokazaćemo da se sistemi sa prostornom anizotropijom ponašaju slično izotropnom Hajzenbergovom modelu, odnosno da u odsustvu spoljašnjeg polja ili spinske anizotropije, osnovno stanje može biti samo feromagnetno ili Nelovo (Néel) osnovno stanje, sa kolinearnom spinskom konfiguracijom [34]. S druge strane, ovakvi sistemi omogućavaju razmatranje fenomena kao što su na primer dimenzionalni krossover i perkolacija.

Sledeća bitna karakteristika ovih sistema jeste pojava jedne ili dve temperature kompenzacije. Japanski tim [6] je u okviru Aproksimacije srednjeg polja prevideo postojanje dve temperature kompenzacije za neuređeni materijal, pa smo se odlučili da primenom istog teorijskog formalizma ispitamo takvu mogućnost u uređenim sistemima. Prilikom odabira teorijskog formalizma pokazuje se da iako veoma jednostavna, Aproksimacija srednjeg polja vodi do rezultata koji se slažu sa raspoloživim eksperimentalnim rezultatima, a pored toga složeniji teorijski formalizam ne bi u kvalitativnom smislu dao bolje rezultate. Jedan od argumenata je i uspeh rada [6], a takođe nas i rezultati nekih drugih radova posvećenih Hajzenbergovim superrešetkama [31, 32] ohrabruju u ovom izboru.

### 3.1 Sistemi sa više podrešetki sa prostornom anizotropijom

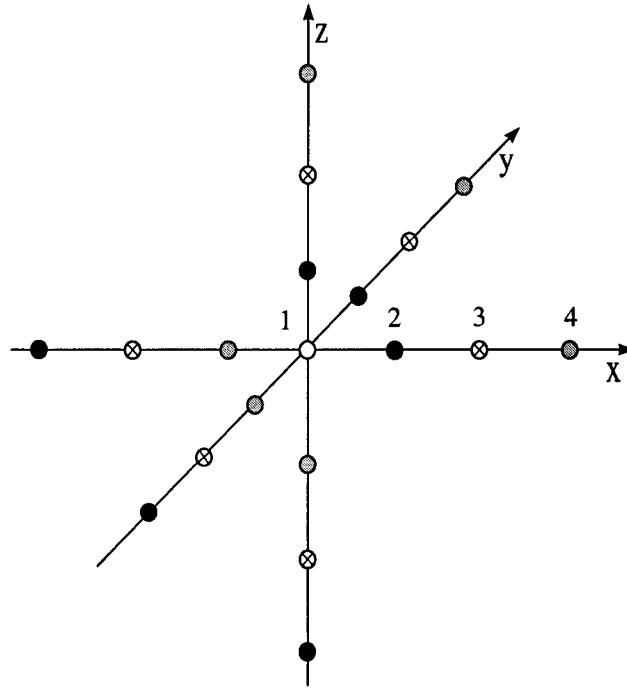
U ovom odeljku definisacemo relativno jednostavne modele magnetnih sistema sa tri i četiri podrešetke, sa izraženom prostornom anizotropijom ([9, 10]), u cilju analize uticaja te anizotropije na karakteristike fero- i antiferomagnetika.

U slučaju tri podrešetke jon date podrešetke (recimo 1) je okružen jednakim brojem (tri) čvorova koji pripadaju drugim dvema podrešetkama (2 i 3), a ni sa jednim jonom koji pripada istoj podrešetki (1). Nadalje, duž svakog pravca ( $x$  se poklapa sa kristalografskom  $a$ -osom,  $y$  sa  $b$  i  $z$  sa  $c$ ), susedi uvek pripadaju drugoj rešetki. Moguća konfiguracija koja obezbeđuje translatornu invarijantnost je prikazana na Slici 17.



Slika 17: Sistem sa tri podrešetke.

Ova konfiguracija se najlakše može opisati naizmeničnim smenjivanjem sve tri vrste jona duž sva tri pravca. Isti princip se može primeniti za konstrukciju sistema sa četiri podrešetke. Vidi se da konfiguracija koja se sastoji od sve četiri vrste jona i ponavlja se duž bilo kog pravca, kao što je prikazano na Slici 18, osigurava translatornu invarijantnost. U ovom slučaju jon 1 je ponovo okružen sa tri jona podrešetke 2 (u pozitivnom smeru osa) i tri jona 4 (u negativnom smeru osa).



Slika 18: Sistem sa četiri podrešetke.

3-jon je okružen sa tri 4 jona u pozitivnim smerovima i tri 2 jona u negativnim smerovima.

Hamiltonian za sistem sa tri podrešetke je oblika

$$H = - \sum_{\langle l; l' j \rangle} J_{l, i; l', j} \vec{S}_i(l) \vec{S}_j(l') = - \sum_{i, \delta} J_{12} \vec{S}_i(1) \vec{S}_{i+\delta}(2) - \sum_{j, \delta} J_{23} \vec{S}_j(2) \vec{S}_{j+\delta}(3) - \sum_{m, \delta} J_{31} \vec{S}_m(3) \vec{S}_{m+\delta}(1) \quad (79)$$

$l, l'$  označava tri podrešetke 1, 2, 3, a  $\delta$  rastojanje između dva susedna čvora. Znak interakcije izmene može biti pozitivan ili negativan, u zavisnosti da li je sparenje feromagnetno ili antiferomagnetno. Osnovna ideja je da se izvede rotacija spinskih operatora da bi se odredilo osnovno stanje konfiguracije sistema. Ako izvršimo rotaciju ose kvantizacije za Ojlerove (Euler) uglove ( $\theta_l, \psi_l$ ,  $l = 1, 2, 3$ ), komponente spinskih operatora će se transformisati na sledeći način:

$$S_l^x = S_l^{x'} \cos \theta_l \cos \psi_l + S_l^{z'} \sin \theta_l \cos \psi_l - S_l^{y'} \sin \psi_l$$

$$\begin{aligned} S_l^y &= S_l^{x'} \cos \theta_l \sin \psi_l + S_l^{z'} \sin \theta_l \sin \psi_l + S_l^{y'} \cos \psi_l \\ S_l^z &= S_l^{z'} \cos \theta_l - S_l^{x'} \sin \theta_l \end{aligned} \quad (80)$$

$x, y, z$  se odnosi na sistem vezan za kristalografske ose, a  $x', y', z'$  na zarotirani sistem. Uvodeći Boze-operatore  $\hat{a}_l$ ,  $l = 1, 2, 3$  (Blobova aproksimacija za spinske operatore), dobija se sledeći Hamiltonijan:

$$\begin{aligned} H = H_0 + \sum_l A_l \sum_i \hat{a}_i^+(l) \hat{a}_i(l) + \sum_l \frac{C_{l,l+1}}{z} \sum_{i\delta} [\hat{a}_i(l) \hat{a}_{i+\delta}(l+1) + \hat{a}_i^+(l) \hat{a}_{i+\delta}^+(l+1)] \\ + \sum_l \frac{D_{l,l+1}}{z} \sum_{i\delta} [\hat{a}_i(l) \hat{a}_{i+\delta}^+(l+1) + \hat{a}_i^+(l) \hat{a}_{i+\delta}(l+1)] \\ + \sum_l \frac{C'_{l,l+1}}{z} \sum_{i\delta} [\hat{a}_i(l) \hat{a}_{i+\delta}(l+1) - \hat{a}_i^+(l) \hat{a}_{i+\delta}^+(l+1)] \\ + \sum_l \frac{D'_{l,l+1}}{z} \sum_{i\delta} [\hat{a}_i(l) \hat{a}_{i+\delta}^+(l+1) - \hat{a}_i^+(l) \hat{a}_{i+\delta}(l+1)] \\ + \sum_l \frac{B_l}{\sqrt{N}} \sum_i [\hat{a}_i(l) + \hat{a}_i^+(l)] + \sum_l \frac{B'_l}{\sqrt{N}} \sum_i [\hat{a}_i(l) - \hat{a}_i^+(l)], \quad (l = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (81)$$

$H_0$  i odgovarajući koeficijenti jednačine (81) su dati u drugom Prilogu.

Prodiskutovaćemo kada izraz za energiju osnovnog stanja ima minimum, pošto je to ključno za određivanje Ojlerovih uglova:

$$h_0 = \frac{H_0}{2NZS^2} = - \sum_l J_{l,l+1} f_{l,l+1} \quad (82)$$

gde je  $N = N_{tot}/3$  je broj jona svake podrešetke,  $z$  je broj najbližih suseda ( $z = 6$  za prostu kubnu strukturu) i uveli smo funkcije

$$f_{l,l+1} = \cos \theta_l \cos \theta_{l+1} + \sin \theta_l \sin \theta_{l+1} \cos(\psi_l - \psi_{l+1}), \quad l = 1, 2, 3$$

Ovaj izraz očigledno odgovara skalarnom proizvodu dva jedinična vektora odgovarajućih pravaca, tako da važi  $-1 \leq f_{l,l+1} \leq 1$ .

Razmatraćemo prvo situaciju kada su sve interakcije  $J_{l,l+1} > 0$ . U ovom slučaju, minimum  $h_0$  odgovara maksimumu sve tri funkcije  $f_{l,l+1}$ , tj.  $f_{l,l+1} = 1$ ) a rešenja su sledeća:

a) trivijalno:  $\theta_l = \theta_{l+1} = \theta$ ;  $\psi_l = \psi_{l+1} = \psi$ , koje odgovara FM uređenju sa osom kvantizacije u proizvoljnom pravcu, i

b) netrivijalna:  $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = 0$  ili  $\pi$  i proizvoljno  $\psi_l - \psi_{l+1}$ . Ni jedno od ovih rešenja ne utiče na energiju FM osnovnog stanja. Koristeći izraze za koeficijente date u Drugom prilogu vidimo da važe relacije  $C_{l,l+1} = B_l = B_{l'} = 0$ , tako da dobijamo običan FM Hamiltonian u Blohovoj aproksimaciji:

$$H_2 = \sum_{l=1}^3 A_l \sum_i \hat{a}_i^+(l) \hat{a}_i(l) - S \sum_{l=1}^3 J_{l,l+1} \sum_{i,\delta} \left[ e^{i(\psi_l - \psi_{l+1})} \hat{a}_i(l) \hat{a}_{i+\delta}^+(l+1) + \hat{a}_i^+(l) \hat{a}_{i+\delta}(l+1) e^{-i(\psi_l - \psi_{l+1})} \right] \quad (83)$$

gde je  $A_l = \frac{1}{2} zS \sum_{j=1}^2 J_{l,l+j}$ . Lako se može pokazati da posle prelaska u impulsni prostor i dijagonalizacije jednostavnom unitarnom transformacijom [38], energije ekscitacija su nezavisne od uglova  $\psi_l$ .

Sledeći interesantan slučaj je kada su interakcije  $J_{l,l+1} < 0$ . Minimum  $h_0$  sada odgovara  $f_{l,l+1} = -1$  što vodi do  $\theta_l - \theta_{l+1} = \pi$  i  $\psi_l = \psi_{l+1}$ . Ipak, ova rešenja uopšte ne postoje. Formalni matematički dokaz sledi iz  $\sum_l (\theta_l - \theta_{l+1}) = 3\pi$ , što daje besmislen rezultat  $3\pi = 0$ . Pravo fizičko tumačenje je da motiv sa tri spina uređena antiferomagnetski, ne može zadovoljiti translatorynu invarijantnost sistema. Isto rezonovanje važi i za situaciju sa dva pozitivna i jednim negativnim sparivanjem.

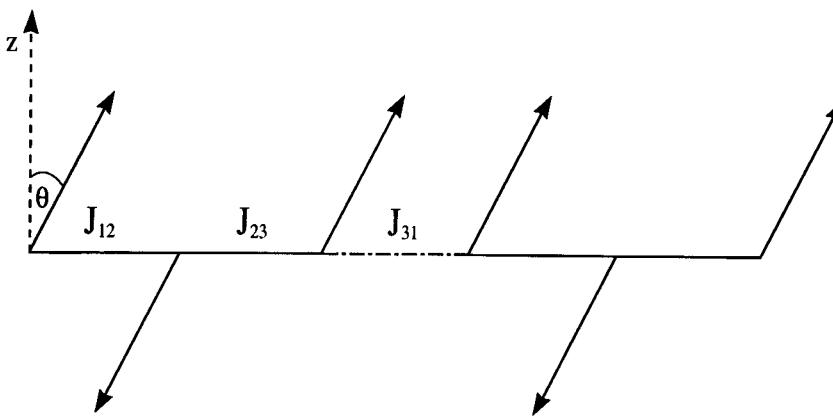
Konačno, razmatraćemo slučaj sa dva negativna i jednim pozitivnim sparivanjem (na primer  $J_{12}, J_{23} < 0, J_{31} > 0$ ). U ovom slučaju rešenja,  $f_{12} = f_{23} = -1, f_{31} = 1$  odgovaraju minimumu Nelovog osnovnog stanja  $H_0 = -\frac{1}{2} NzS^2(|J_{12}| + |J_{23}| + J_{31})$ . Moguće vrednosti uglova u ovom slučaju su:

a)  $\psi_1 = \psi_2 = \psi_3 = \psi$  i  $\theta_1 = \theta_3 = \theta, \theta_2 = \theta \pm \pi$  (ferimagnet sa proizvoljnom osom kvantizacije) (Slika 19)

b)  $\theta_1 = \theta_3 = 0, \theta_2 = \pi$  ili  $\theta_1 = \theta_3 = \pi, \theta_2 = 0$ , za proizvoljno  $\psi_l - \psi_{l+1}$ .

U ovom slučaju Hamiltonian dobija oblik

$$H_2 = \sum_l A_l \sum_i \hat{a}_i^+(l) \hat{a}_i(l) + S \sum_{i,\delta} \left\{ \left[ |J_{12}| e^{\pm i(\psi_1 - \psi_2)} \hat{a}_i(1) \hat{a}_{i+\delta}(2) + h.c. \right] + |J_{23}| \left[ e^{\mp i(\psi_2 - \psi_3)} \hat{a}_i(2) \hat{a}_{i+\delta}(3) + h.c. \right] - J_{31} \left[ e^{\pm i(\psi_3 - \psi_1)} \hat{a}_i(3) \hat{a}_{i+\delta}^+(1) + h.c. \right] \right\} \quad (84)$$



Slika 19: Šematski prikaz spinskog uređenja sa proizvoljnom osom kvantizacije.

$$\text{gde je } A_1 = \frac{zS}{2}(|J_{12}| + |J_{31}|), \quad A_2 = \frac{zS}{2}(|J_{12}| + |J_{23}|), \quad A_3 = \frac{zS}{2}(|J_{31}| + |J_{23}|).$$

Podvucimo još jednom, za oba rešenja uglovi ne utiču ni na energiju Nelovog osnovnog stanja, niti na energije elementarnih ekscitacija, što može biti pokazano na primer Bogoljubov-Tjablikov (Tyablikov) (BT) "u-v" transformacijom [29, 38] Hamiltonijana (84).

Zaključujemo da za Hamiltonijan sa prostornom anizotropijom (u odsustvu spinske), rotacija ne smanjuje energiju osnovnog stanja, tj. ne može se definisati osa kvantizacije. Moguće osnovno stanje je "klasično" feromagnetsko ili Neloovo osnovno stanje sa kolinearnom spinskom konfiguracijom. Kada nema spoljašnjeg polja ili spinske anizotropije, osa kvantizacije je proizvoljna i ne mogu se pojaviti nekolinearne konfiguracije kao ni spinska reorientacija. Ovi rezultati se bitno razlikuju od rezultata u radovima [9, 10].

### 3.1.1 Neke osobine prostorno anizotropnih magnetika sa četiri podrešetke

U ovom pododeljku ćemo analizirati sisteme sa četiri podrešetke i prostornom anizotropijom u slučaju feromagnetskog i antiferomagnetskog sparivanja. Polazni Hamiltonijan za sistem sa četiri podrešetke je:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}_\alpha, \vec{m}_\beta} J_{\vec{n}_\alpha, \vec{m}_\beta} \vec{S}_{\vec{n}_\alpha} \cdot \vec{S}_{\vec{m}_\beta} \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4 \quad (85)$$

Interakciju uzimamo u aproksimaciji najbližih suseda i smatramo da su spinovi u svim podrešetkama isti  $S_i = S$ . Energije elementarnih ekscitacija možemo naći koristeći formalizam Grinovih funkcija u spinskoj reprezentaciji ili na niskim temperaturama u reprezentaciji Boze-operatora. U slučaju feromagnetskog kupovanja,

Hamiltonian (85) u bozonskoj aproksimaciji u  $\vec{k}$  prostoru je oblika:

$$\tilde{H} = H - H_0 = \sum_{\vec{k}} \hat{H}_{\vec{k}} \quad (86)$$

gde je:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\vec{k}} = & \sum_{\alpha=1}^4 \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{+}(\vec{k}) a_{\alpha}(\vec{k}) - \\ & - S[J_{12}(\gamma(\vec{k}) a_1^{+}(\vec{k}) a_2(\vec{k}) + h.c.) + J_{14}(\gamma(\vec{k}) a_4^{+}(\vec{k}) a_1(\vec{k}) + h.c.) + \\ & + J_{23}(\gamma(\vec{k}) a_2^{+}(\vec{k}) a_3(\vec{k}) + h.c.) + J_{34}(\gamma(\vec{k}) a_3^{+}(\vec{k}) a_4(\vec{k}) + h.c.)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_0 = zNS^2(J_{12} + J_{23} + J_{34} + J_{41}) \quad & \varepsilon_1 = \frac{z}{2}S(J_{21} + J_{14}) \quad \varepsilon_2 = \frac{z}{2}S(J_{23} + J_{21}); \\ \varepsilon_3 = \frac{z}{2}S(J_{34} + J_{23}) \quad & \varepsilon_4 = \frac{z}{2}S(J_{41} + J_{34}) \\ \gamma(\vec{k}) = e^{ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{ik_z a} \quad & (\lambda \text{ povezuje najbliže susede}) \end{aligned} \quad (87)$$

Koristeći jednačine kretanja za operatore  $a_{\alpha}(\vec{k})$ ,  $\alpha = 1, 2, 3, 4$ , lako možemo naći bozonske Grinove funkcije  $\langle\langle \hat{a}_{\alpha}(\vec{k}) \hat{a}_{\alpha}^{+}(\vec{k}) \rangle\rangle$ . Energije elementarnih eksitacija dobijamo ako determinantu dobijenog sistema od četiri jednačine za Grinove funkcije, izjednačimo sa nulom:

$$\begin{aligned} \Delta(E) = & (E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_2)(E - \varepsilon_3)(E - \varepsilon_4) - (E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_2)S^2J_{34}^2|\gamma(\vec{k})|^2 - \\ & - (E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_4)S^2J_{23}^2|\gamma(\vec{k})|^2 - (E - \varepsilon_3)(E - \varepsilon_4)S^2J_{12}^2|\gamma(\vec{k})|^2 - \\ & - (E - \varepsilon_2)(E - \varepsilon_3)S^2J_{14}^2|\gamma(\vec{k})|^2 + S^4J_{12}^2J_{34}^2|\gamma(\vec{k})|^4 + \\ & + S^4J_{14}^2J_{23}^2|\gamma(\vec{k})|^4 - S^4J_{12}J_{23}J_{34}J_{41}(\gamma(\vec{k})^4 + \gamma^*(\vec{k})^4) = 0 \end{aligned} \quad (88)$$

Da bi pronašli neka analitička rešenja moramo uvesti izvesna pojednostavljenja, npr.  $J_{12} = J_{34} = J > 0$ ;  $J_{23} = J_{41} = J' > 0$ . Tada se jednačina (88) svodi na:

$$\begin{aligned} \Delta(E) = & (E - \varepsilon)^4 - 2(E - \varepsilon)^2S^2(J^2 + J'^2)|\gamma(\vec{k})|^2 + \\ & + S^4(J^4 + J'^4)|\gamma(\vec{k})|^4 - S^4J^2J'^2(\gamma(\vec{k})^4 + \gamma^*(\vec{k})^4) = 0 \\ \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = \varepsilon = & \frac{zS}{2}(J + J') + g\mu_B\mathcal{H} \end{aligned} \quad (89)$$

gde smo dodali spoljašnje polje u pravcu  $z$ -ose.

Rešenja ove jednačine su:

$$E_{1/2} = \varepsilon - S\sqrt{(J+J')^2|\gamma(\vec{k})|^2 \mp JJ'(\gamma(\vec{k}) \pm \gamma^*(\vec{k}))^2} \quad (90)$$

$$E_{3/4} = \varepsilon + S\sqrt{(J+J')^2|\gamma(\vec{k})|^2 \mp JJ'(\gamma(\vec{k}) \pm \gamma^*(\vec{k}))^2} \quad (91)$$

Vidimo da se u sistemu javljaju četiri grane energija spinskih talasa (što se moglo i očekivati), od kojih jedna (akustička) poseduje Goldstonov mod [19]  $\lim_{k \rightarrow 0} E_1(k) \sim k^2 \rightarrow 0$ . Ta grana je odgovorna za osobine sistema na niskim temperaturama. Sve ostale grane imaju  $g\mu_B$   $E_i \sim \Delta_i$   $i = 2, 3, 4$  i njihov osnovni doprinos termodinamičkim osobinama sistema je eksponencijalno mali  $\sim \exp(-\frac{\Delta_i}{\theta})$  ( $\theta = k_B T$ ). Ovo se najjednostavnije može proveriti računanjem magnetizacije (po čvoru) na niskim temperaturama, što vodi do dobro poznatog Blohovog (Bloch) rezultata [19]:  $\langle S^z \rangle \sim \theta^{3/2} + O(e^{-\frac{\Delta_i}{\theta}})$ .

Sada ćemo razmatrati sistem sa antiferomagnetskim i feromagnetskim sparivanjem. U ovom slučaju uzimamo  $J_{12} = J_{34} = J > 0$ ;  $J_{23} = J_{41} = -J' < 0$  ( $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ ). Primjenjujući isti postupak kao i u slučaju feromagnetika, vodeći računa o znaku interakcije, dobijamo sistem od  $2 \times 4$  jednačine za GF. Determinanta  $\Delta(E)$  sistema GF-ja se faktorizuje:

$$\Delta(E) = \Delta_1(E) \cdot \Delta_2(E) \quad (92)$$

gde je  $\Delta_1(E) = \Delta_2(-E)$  i

$$\begin{aligned} \Delta_1(E) = & (E - \varepsilon_1)^2(E + \varepsilon_2)^2 - 2S^2J'^2|\gamma(\vec{k})|^2(E - \varepsilon_1)(E + \varepsilon_2) - \\ & - S^2J^2|\gamma(\vec{k})|^2[(E - \varepsilon_1)^2 + (E + \varepsilon_2)^2] + S^4(J^4 + J'^4)|\gamma(\vec{k})|^4 - S^4J^2J'^2(\gamma(\vec{k})^4 + \gamma^*(\vec{k})^4) \end{aligned} \quad (93)$$

$$\varepsilon_1 = \frac{zS}{2}(J + |J'|) + g\mu_B\mathcal{H} = \varepsilon + g\mu_B\mathcal{H}$$

$$\varepsilon_1 = \frac{zS}{2}(J + |J'|) - g\mu_B\mathcal{H} = \varepsilon - g\mu_B\mathcal{H}$$

Rešavajući jednačinu  $\Delta_1(E) = 0$  (ili  $\Delta_2(E) = 0$ ) u prisustvu spoljašnjeg magnetskog polja ( $\mathcal{H}$ ) dobijamo četiri grane spinskih ekscitacija:

$$E_1 = g\mu_B\mathcal{H} + \sqrt{X_1} > 0 \quad (94)$$

$$E_2 = g\mu_B\mathcal{H} + \sqrt{X_2} > 0 \quad (95)$$

$$E_3 = \sqrt{X_1} - g\mu_B\mathcal{H} > 0 \quad (96)$$

$$E_4 = \sqrt{X_2} - g\mu_B \mathcal{H} > 0 \quad (97)$$

gde je

$$X_{1/2} = \epsilon^2 + S^2 \gamma(\vec{k})^2 (J^2 - J'^2) \mp \sqrt{4\epsilon^2 S^2 |\gamma(\vec{k})|^2 J^2 + S^4 J^2 J'^2 (\gamma(\vec{k})^2 - \gamma^*(\vec{k})^2)^2}$$

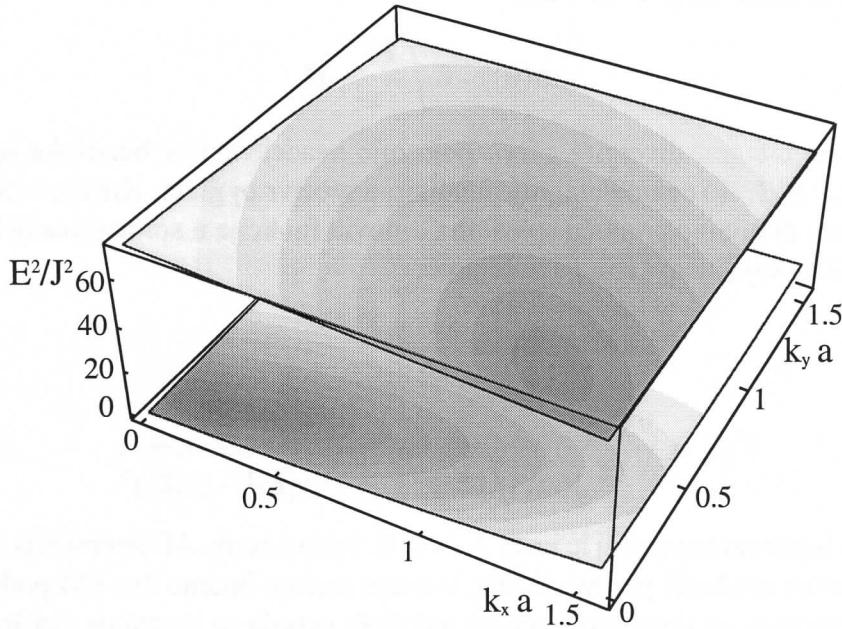
Za determinante  $\Delta_1$  i  $\Delta_2$  važe faktorizacije:

$$\Delta_1(E) = (E - E_1)(E - E_2)(E + E_3)(E + E_4) = \Delta_2(-E) \quad (98)$$

Za  $\mathcal{H} = 0$  imamo dve dvostruko degenerisane grane  $E_1 = E_3$  i  $E_2 = E_4$ ,

$$E_{1/2} = \sqrt{X_{1/2}} \text{ dok za determinante važi } \Delta_1 = \Delta_2 = (E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2). \quad (99)$$

Jedna grana (akustička) poseduje Goldstonov mod, dok druga ima gep i ne doprinosi nisko-temperaturnim osobinama sistema. Na Slici 20 prikazane su elementarne ekscitacije antiferomagnetika sa četiri podrešetke za određene vrednosti parametara u pravcu  $k_z = 0$ .



Slika 20: Dve degenerisane grane spinskih talasa antiferomagnetika sa četiri podrešetke za  $J = J'$  duž pravca  $k_z = 0$ .

Koristeći gornje rezultate možemo izračunati magnetizaciju svake podrešetke na niskim temperaturama:

$$\sigma = \langle \hat{S}_\alpha^z \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle a_\alpha^+(\vec{k}) a_\alpha(\vec{k}) \rangle = S - \Delta\sigma_o - \Delta\sigma(\theta) \quad (100)$$

gde su  $\Delta\sigma_o$  kvantne fluktuacije magnetizacije podrešetke u osnovnom stanju, a  $\Delta\sigma(\theta)$  zavisnost magnetizacije od temperature.

U specijalnom slučaju  $J = J'$ , za energije elementarnih eksitacija u dugotolastnoj aproksimaciji dobijamo:

$$E_{1/2} = \sqrt{X_{1/2}} ; \quad X_{1/2} = 36S^2J^2 \mp 12S^2J^2\sqrt{9 - 3k^2a^2}, \quad (101)$$

Vidimo da energija  $E_1 \approx \sqrt{6SJka}$  predstavlja Goldstonov mod i definiše ponašanje na niskim temperaturama. Za magnetizaciju na niskim temperaturama u 3D slučaju dobijamo:

$$\Delta\sigma(\theta) = \frac{v_o}{2\pi^2} \int_0^{k_0} \frac{3k}{\sqrt{6}a} \frac{dk}{e^{\frac{\sqrt{6}JSka}{\theta}} - 1} \quad (102)$$

što daje  $\sigma(\theta) \sim \theta^2$ , kao i u trodimenzionom antiferomagnetu sa dve podrešetke. Za  $d = 1, 2$ , možemo približno dobiti

$$\Delta\sigma(\theta) \sim \theta \int \frac{k^{d-1}}{k^2} dk$$

i vidimo da integral divergira. Ovo pokazuje neadekvatnost bozonske aproksimacije za  $d \leq 2$ , što ćemo detaljnije analizirati u četvrtoj glavi. Kritičnu (Nelovu) temperaturu dobijamo pomoću spinskih Grinovih funkcija u aproksimaciji haotičnih faza. Za ovaj slučaj ( $J = J'$ ) dobijamo:

$$\theta_N = \frac{S(S+1)J}{C_1 + C_2} \quad (103)$$

$$C_{1/2} = \frac{9}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{36 \mp \sqrt{144|\gamma(\vec{k})|^2 + (\gamma(\vec{k})^2 - \gamma^*(\vec{k}))^2}}$$

Drugi interesantan slučaj je kada  $J' \rightarrow 0$ , tj. kada nestaje AF interakcija između feromagnetno uređenih parova. Dakle, u ovom slučaju imamo dve FM podrešetke koje međusobno ne interaguju, a broj najbližih suseda se smanjuje (tri jona iste podrešetke). Za energije elementarnih eksitacija dobijamo:

$$E_{1/2} = \epsilon \mp SJ|\gamma(\vec{k})|, \quad (104)$$

dok za magnetizaciju na konačnim temperaturama dobijamo:

$$\Delta\sigma(\theta) = \frac{v_o}{4\pi^2} \int_0^{k_0} \frac{k^2 dk}{e^{\frac{JSk^2a^2}{3\theta}} - 1} \quad (105)$$

pa sledi da se magnetizacija ponaša na isti način kao i u slučaju feromagnetika, tj. po Blohovom zakonu  $\sigma(\theta) \sim \theta^{3/2}$ . Temperatura prelaza je i u ovom slučaju data relacijom (103), pri čemu je:

$$C_{1/2} = \frac{3}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{3 \mp |\gamma(\vec{k})|}. \quad (106)$$

Konačno, razmotrimo slučaj kada  $J \rightarrow 0$ , tj. kada nestaje FM interakcija i ostaje AF kuplovanje između bližih suseda različitih podrešetki. I u ovom slučaju broj suseda se smanjuje i iznosi tri. Izraz za energiju postaje:

$$E_{1/2} = \pm \sqrt{(3J'S)^2 - J'^2 S^2 |\gamma(\vec{k})|^2}, \quad (107)$$

te vidimo da u ovom slučaju dobijamo jednu dvostruko degenerisanu granu, kao kod antiferomagneta. To je i logično s obzirom da ostaju dve identične antiferomagnete podrešetke. Za  $\vec{k} \rightarrow 0$  dobija se linearni zakon disperzije  $E_{1/2} \approx \pm \sqrt{2} J' S k a$ . Magnetizacija na niskim temperaturama za ovaj slučaj je data izrazom:

$$\Delta\sigma(\theta) = \frac{v_o}{2\pi^2} \frac{\epsilon}{J'S} \int_0^{k_0} \frac{k}{a} \frac{dk}{e^{\frac{\sqrt{2}J'Ska}{\theta}} - 1} \quad (108)$$

S obzirom na linearni zakon disperzije dobija se  $\Delta\sigma(\theta) \sim \theta^2$ . Kao što smo već napomenuli to je tipično antiferomagnetsko ponašanje na  $T \geq 0$ . Nelova temperatura se u ovom slučaju može predstaviti kao:

$$\theta_N = \frac{S(S+1)J'}{C} \quad (109)$$

$$C = \frac{9}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{9 - |\gamma(\vec{k})|^2} \quad (110)$$

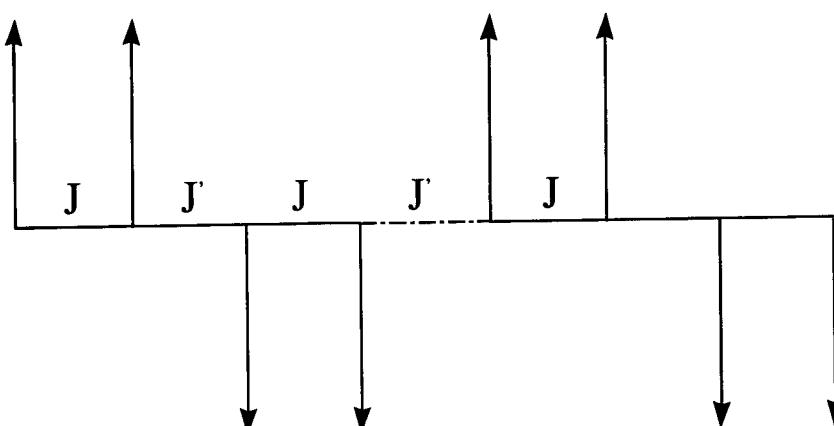
Numerički rezultati za temperature prelaza u zavisnosti od parametara  $J$  i  $J'$  ukazuju na to da je u slučaju  $J = J'$ ,  $\theta_N$  za dva reda veličine veće od Nelove temperature za slučajeve kada jedna od interakcija nestaje ( $J \rightarrow 0$  ili  $J' \rightarrow 0$ ). Tako

numerički proračuni za  $J = J'$  za  $\frac{\theta_N}{S(S+1)J}$  daju vrednost 2.275, dok je za slučaj  $J' \rightarrow 0$ ,  $\frac{\theta_N}{S(S+1)J} = 0.057$ , a za  $J \rightarrow 0$ ,  $\frac{\theta_N}{S(S+1)J'} = 0.048$ . Iako sistem ostaje trodimenzionalni, smanjenje broja suseda (usled nestajanja jedne interakcije  $J(J')$ ) očigledno vodi do smanjenja kritične temperature  $T_C(T_N)$ . Interesantno bi bilo na proizvoljan način ubacivati nemagnetne jone u ovakve magnetne strukture i ispitati za koju kritičnu koncentraciju nemagnetnih jona kritična temperatura  $T_C$  odn.  $T_N$  postaje nula. Dakle, magnetne strukture analizirane u ovom odeljku mogu biti osnov za ispitivanje efekta perkolacije.

Rezultati prikazani u ovom pododeljku izvedeni su za sistem sa četiri podrešetke, za slučaj kada su svi spinovi isti. Oni mogu biti generalizovani za bilo koju vrednost spinova. Ipak, analiza jednačina za različite spinove i različita sparivanja, ukazuje da će se u najopštijem slučaju pojaviti onoliko grana energija elementarnih eksitacija koliko je podrešetki i uvek postoji akustička granica sa Goldstonovim modom.

### 3.2 Elementarne eksitacije i magnetizacija magnetnih superrešetki sa FM i AF sparivanjem

Na početku ove glave pomenuli smo da je prostorna anizotropija pogodna za analizu dimenzionog krosovera (3D-2D) u ponašanju magnetizacije sistema. Taj prelaz se može analizirati kod magnetnih superrešetki, kada je interakcija između ravni mnogo manja od interakcije spinova unutar svake ravni. Ilustrovaćemo ovakvo ponašanje za slučaj superrešetke sa motivom od četiri ravni.



Slika 21: Šematski prikaz superrešetke sa motivom od četiri ravni

Smatraćemo da je kristalna rešetka sistema prosta kubna sa konstantom  $a$ . Motiv superrešetke sastoji se od 4 feromagnetsko uređene  $xy$ -ravni (interakcija izmene unutar ravni je  $I$ ) koji se redaju duž  $z$ -ose. Sparivanje između susednih ravni je feromagnetsko ( $J$ ) ili antiferomagnetsko ( $J'$ ) (Slika 21).

Opšti oblik Hamiltonijana u ovom slučaju je dat sledećim izrazom:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{(ij)_{xy}} I_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{2} \sum_{(ij)_z} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - g\mu_B \vec{\mathcal{H}} \sum_i \vec{S}_i \quad (111)$$

Prvi član se odnosi na interakciju najbližih suseda unutar ravni ( $xy$ ), dok se drugi odnosi na interakciju između ravni (u pravcu  $z$ -ose). Za proučavanje osobina na niskim temperaturama, kao što su energije elementarnih ekscitacija, spinske fluktuacije u osnovnom stanju kao i nisko-temperatursko ponašanje, kao što smo ranije spomenuli, može se koristiti bozonska reprezentacija spinskih operatora [19]. U Blohovoj aproksimaciji Hamiltonijan (111) dobija oblik:

$$H_4 = H_4^0 + \sum_{\vec{k}} H_4(\vec{k}) \quad (112)$$

gde je

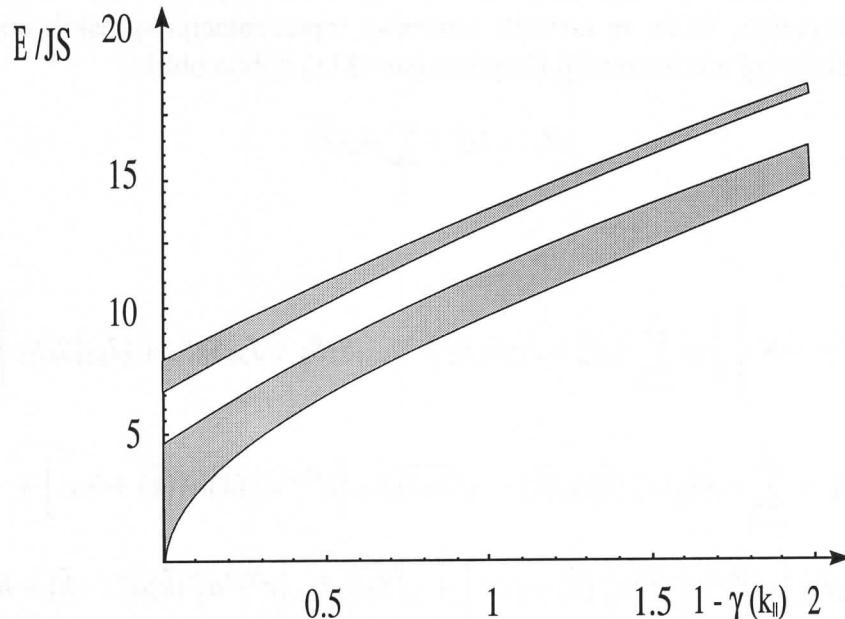
$$\begin{aligned} H_4^0 &= -N \left\{ \frac{1}{2} z_2 \sum_{n=1}^4 I_n S_n^2 + J_{12} S_1 S_2 + |J_{23}| S_2 S_3 + J_{34} S_3 S_4 + |J_{41}| S_4 S_1 \right\} \\ \hat{H}_k &= \sum_{n=1}^4 \varepsilon_n(\vec{k}_{||}) a_n^+(\vec{k}) a_n(\vec{k}) - \sqrt{S_1 S_2} J_{12} \left[ e^{ik_z a} a_1^+(\vec{k}) a_2(\vec{k}) + h.c. \right] + \\ &+ \sqrt{S_1 S_4} J_{41} \left[ e^{-ik_z a} a_1^+(\vec{k}) a_4^+(\vec{k}) + h.c. \right] + \sqrt{S_2 S_3} J_{23} \left[ e^{ik_z a} a_2^+(\vec{k}) a_3^+(-\vec{k}) + h.c. \right] - \\ &- \sqrt{S_3 S_4} J_{43} \left[ e^{-ik_z a} a_4^+(\vec{k}) a_3(\vec{k}) + h.c. \right] \end{aligned} \quad (113)$$

gde je  $\varepsilon_n$  dato izrazom (26),  $\gamma(\vec{k}_{||}) = \frac{1}{2} [\cos k_x a + \cos k_y a]$ , a  $z_2 (= 4)$  je broj suseda unutar ravni. U daljem računu koristićemo bozonske Grinove funkcije. Važno je primetiti da se sistem od osam jednačina za osam operatora ( $\hat{a}_n, \hat{a}_n^+, n = 1, \dots, 4$ ) koji definišu Grinove funkcije raspada na dva sistema od četiri jednačine: jedan niz za ( $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3^+, \hat{a}_4^+$ ) i drugi za ( $\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+, \hat{a}_3, \hat{a}_4$ ), kao posledica strukture Hamiltonijana, što je opšta osobina antiferomagnetske interakcije. Kao i ranije determinante ta dva sistema zadovoljavaju relaciju  $\Delta_1^4(E) = \Delta_2^4(-E)$ , tako da ćemo energije ekscitacija odrediti iz uslova  $\Delta_1^4(E) = 0$ .

U posebnom slučaju kada su svi spinovi isti i jednaki  $S$  i sve interakcije unutar ravni jednake  $I$ , dok je  $J_{12} = J_{34} = J$  i  $J_{23} = J_{41} = J'$ , dobijamo bikvadratnu jednačinu preko varijable  $X = E - g\mu_B \mathcal{H}$ :

$$\begin{aligned}\Delta_1(E) = & X^4 - 2X^2[\varepsilon^2 - S^2(J'^2 - J^2)] + \varepsilon^4 - 2\varepsilon^2S^2(J'^2 + J^2) + \\ & + S^4(J'^4 + J^4) - 2J'^2J^2S^4 \cos 4k_z a\end{aligned}\quad (114)$$

gde je  $\varepsilon = z_2 IS(1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + S(J + J')$  i  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon + g\mu_B \mathcal{H}$  i  $\varepsilon_3 = \varepsilon_4 = \varepsilon - g\mu_B \mathcal{H}$ . Poslednji član okarakterisan periodom  $4a$  je posledica Blohove teoreme (slično kao u drugoj glavi rada). U prisustvu spoljašnjeg polja, dobijamo četiri različite grane:



Slika 22: Energija elementarnih eksitacija  $E/IS$  superrešetke sa motivom koji se sastoji od četiri ravni u zavisnosti od  $(1 - \gamma(\vec{k}_{||}))$  za  $4k_z a = 0$  (donja kriva) i  $4k_z a = \pi$  (gornja kriva) za a)  $\lambda = 1$ ,  $\lambda' = 10$ .

$$E_{1/3} = IS \sqrt{\varepsilon^2 + \lambda^2 - \lambda'^2 - 2\lambda(\varepsilon^2 - A^2)^{1/2}} \pm g\mu_B \mathcal{H} \quad (115)$$

$$E_{2/4} = IS \sqrt{\varepsilon^2 + \lambda^2 - \lambda'^2 + 2\lambda(\varepsilon^2 - A^2)^{1/2}} \pm g\mu_B \mathcal{H}$$

$$(A = \lambda' \sin 2k_z a, \quad \varepsilon = 4[1 - \gamma(\vec{k}_{||})] + \lambda + \lambda, \quad \lambda = \frac{J}{I}, \quad \lambda' = \frac{J'}{I})$$

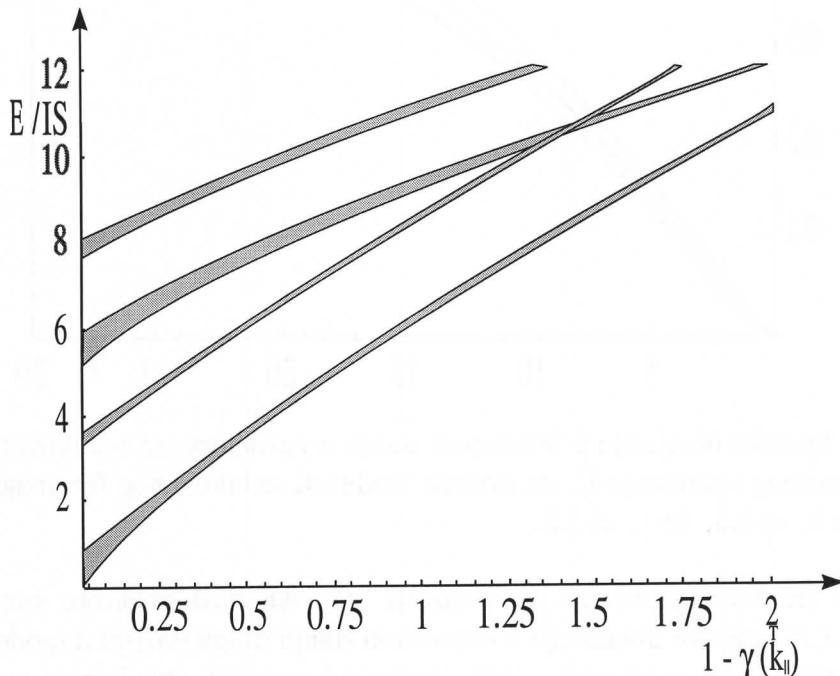
### 3.2 Elementarne ekscitacije i magnetizacija magnetnih superrešetki sa FM i AF sparivanjem 53

Determinante se faktorizuju  $\Delta_1^{(4)} = (E - E_1)(E - E_2)(E + E_3)(E + E_4)$  i  $\Delta_2(E) = \Delta_1(-E)$ . Ukoliko nije prisutno spoljašnje polje postoje dve dvostruko degenerisane grane (akustička i optička) (slika 22) i  $E_1(0) = 0$  je Goldstonov mod, a u prisustvu polja javljaju se četiri grane. Povećanje AF interakcije  $\lambda'$  uzrokuje širenje zona. Četiri grane se javljaju i kada spoljašnje polje nije prisutno, ali su spinovi različiti u različitim ravnima u motivu superrešetke. Primer je dat na Slici 23.

Kao sledeće navećemo rezultate za spinske devijacije u osnovnom stanju ( $\langle \delta S_l^z \rangle$ ) i nisko-temperatursko ponašanje magnetizacije ( $\sigma_l(\theta)$ ), polazeći od relacije:

$$|\langle S_l^z \rangle| = S - \langle \delta S_l^z \rangle_0 - \sigma_l(\theta)$$

$l = 1, 2, 3, 4$  je indeks koji označava ravan unutar motiva. Imajući u vidu simetriju Hamiltonijana ove veličine su jednake za svaku ravan unutar motiva tako da ćemo izostaviti indeks  $l$ .



Slika 23: Energija elementarnih ekscitacija  $E/IS_1$  superrešetke sa motivom od četiri sloja u zavisnosti od  $(1 - \gamma(\vec{k}_{||}))$  za  $4k_xa = 0$  (niža kriva) i  $4k_xa = \pi$  (gornja kriva) za  $S_1 = S_2$ ,  $S_3 = S_4 = 0.5S_1$ ,  $J_{12} = J_{34} = J$ ,  $|J_{23}| = |J_{41}| = 10J$ .

Posle niza matematičkih operacija dolazimo do sledećeg izraza za spinsku de-

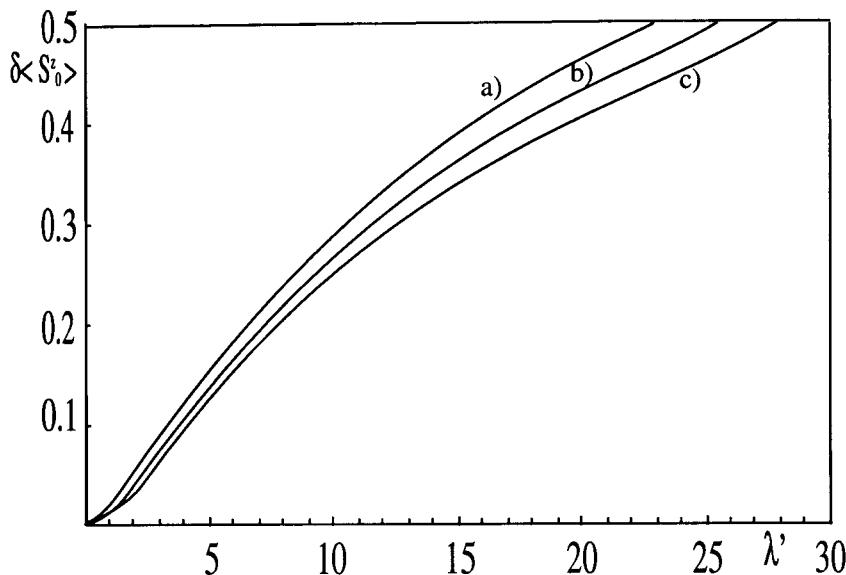
vijaciju:

$$\langle \delta S_1^z \rangle_0 = K(\lambda, \lambda') - 1/2 \quad (116)$$

gde je

$$K(\lambda, \lambda') = \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int \int \int \left[ \frac{\tilde{\epsilon}}{4\tilde{E}_1(\vec{k})} \left( 1 - \frac{\lambda}{\sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - A^2}} \right) + \frac{\tilde{\epsilon}}{4\tilde{E}_2(\vec{k})} \left( 1 + \frac{\lambda}{\sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - A^2}} \right) \right] d^3\vec{k} \quad (117)$$

i  $A = \lambda' \sin 2k_z a$ ,  $\frac{\epsilon}{IS} = \tilde{\epsilon} = 4(1 - \gamma(\vec{k}_{||})) + \lambda + \lambda'$ . Ovaj integral je računat numerički za nekoliko vrednosti  $\lambda'$  za fiksno  $\lambda$  (Slika 24).



Slika 24: Spinske devijacije u osnovnom stanju u zavisnosti od redukovanih antiferomagnetskih sparivanja  $\lambda'$ , za sledeće vrednosti redukovanih feromagnetskih sparivanja  $\lambda$ : a) 0.5, b) 1, c) 1.5.

Gornji rezultati impliciraju da u slučaju jake AF međuravanske interakcije ( $J' \gg J, I$ ), spinske fluktuacije u osnovnom stanju mogu uništiti dugodometno FM uređenje unutar ravni za  $S = 1/2$ . Jedno od mogućih objašnjenja moglo bi biti stvaranje singletnih stanja dva spina susednih ravni sa jakom AF interakcijom, dok je njihova međusobna interakcija zanemarljiva. Ceo sistem kao da prelazi u stanje spinskog stakla (spin glass).

Nisko-temperatursku magnetizaciju unutar ravni moramo proučavati u dve odvojene temperaturske oblasti. Za najniži temperaturski opseg ( $\theta = k_B T < \min(J, J', I)$ ), imamo:

$$\sigma_l(\theta) = \sqrt{\frac{\lambda + \lambda'}{\lambda}} \frac{2\zeta(2)}{\pi^2 S \lambda'} \left(\frac{\theta}{IS}\right)^2, \quad (118)$$

što je tipično ponašanje za 3D antiferomagnetik.

U slučaju kada je  $J, J' \ll I$ , u temperaturskoj oblasti  $J, J' \leq \theta \ll I$  magnetizacija se ponaša na sledeći način:

$$\sigma_l(\theta) = \frac{\lambda'}{8\pi} \left(\frac{\theta}{IS}\right) \ln \left[ \left(\frac{\theta}{IS}\right) \frac{2}{\lambda'} \sqrt{\frac{\lambda + \lambda'}{\lambda}} \right] \approx T \ln T \quad (119)$$

što ukazuje na prelaz (krossover) iz trodimenzionog u dvodimenziono ponašanje (detaljnija analiza je data u četvrtoj glavi).

Konačno, razmotrićemo temperatursku oblast u blizini faznog prelaza, koristeći Tjablikovske Grinove funkcije za spinske operatore, u okviru aproksimacije haotičnih faza [29]. Analiziraćemo zavisnost temperature prelaza  $\theta_N$  od interakcije između ravni.  $\theta_N$  u dатој aproksimaciji dato je izrazom:

$$\theta_N = \frac{1}{3} S(S+1) \frac{I}{C}, \quad (120)$$

gde je

$$C = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon(\epsilon^2 - \lambda^2 - \lambda'^2)}{(\epsilon^2 - \lambda^2 - \lambda'^2)^2 - 4\lambda^2\lambda'(1 - \sin^2 2k_z a)} \quad (121)$$

Lako se može videti da  $C$  divergira za  $\lambda = \lambda' = 0$  i  $T_N = 0$  (2D slučaj), što je u saglasnosti sa Mermin-Vagnerovom (Mermin-Wagner) teoremom [19]. Kada  $\lambda$  ili  $\lambda'$  (ili oba) teže nuli, koristeći osobine eliptičkih integrala, dobijamo aproksimativne analitičke izraze ( $\theta_N^a$ ) za temperaturu prelaza:

$$\theta_N^a \approx \frac{1}{3} S(S+1) I \frac{8\pi}{\ln \frac{64}{\delta}}, \text{ sa } \delta = \lambda(\text{ ili } \lambda') \ll 1 \quad (122)$$

$$\text{i } \theta_N^a \approx \frac{1}{3} S(S+1) I \frac{4\pi}{\ln \frac{16}{\lambda + \lambda'}}, \text{ sa } \lambda \approx \lambda' \ll 1 \quad (123)$$

Ponovo uočavamo da  $\theta_N \rightarrow 0$  u 2D slučaju ( $\lambda, \lambda' \rightarrow 0$ ).

Ako uporedimo ove aproksimativne rezultate sa numerički izračunatim vrednostima za  $\theta_N$  koristeći relacije (120) i (121), vidimo da su greške u intervalu 10 – 15% za  $\lambda(\lambda') < 10^{-4}$ .

Dakle, zaključujemo da prostorna anizotropija kod superrešetki omogućava proučavanja dimenzionog krosovera iz trodimenzionog u dvodimenzioni sistem. Takođe smo pokazali da je i ovom slučaju Tjablikovska aproksimacija sasvim ko-rektna i u saglasnosti sa Mermin-Vagnerovom teoremom.

### 3.3 Temperature kompenzacije za sisteme sa tri i četiri podreške i superrešetke

Cilj ovog dela rada je da u okviru MF teorije ispitamo mogućnost pojavljivanja dve temperature kompenzacije u uređenim magnetnim sistemima sa više podrešetki i u superrešetkama. Ovo je pre svega interesantno zbog moguće sinteze ovakvih materijala, jer je upravo na bazi teorijskih proračuna, sintetisan materijal neuređene strukture sa dve temperature kompenzacije.

#### 3.3.1 Aproksimacija srednjeg polja za sisteme sa više podrešetki

Sistem ćemo opisati Hajzenbergovim Hamiltonianom, smatrujući da su svi spinovi različiti:  $S_a \neq S_b \neq S_c \neq S_d$  i svi integrali izmene različiti:  $J_{ab} \neq J_{bc} \neq J_{cd} \neq J_{da}$  i svi mogu biti ili FM ( $> 0$ ) ili AF ( $< 0$ ).

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}_a, \vec{n}_a + \vec{\lambda}_a^b} J_{ab} \vec{S}_{\vec{n}_a} \cdot \vec{S}_{\vec{n}_a + \vec{\lambda}_a^b} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}_a, \vec{n}_a + \vec{\lambda}_a^d} J_{ad} \vec{S}_{\vec{n}_a} \cdot \vec{S}_{\vec{n}_a + \vec{\lambda}_a^d} \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}_b, \vec{n}_b + \vec{\lambda}_b^a} J_{ab} \vec{S}_{\vec{n}_b} \cdot \vec{S}_{\vec{n}_b + \vec{\lambda}_b^a} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}_d, \vec{n}_d + \vec{\lambda}_d^a} J_{ad} \vec{S}_{\vec{n}_d} \cdot \vec{S}_{\vec{n}_d + \vec{\lambda}_d^a} + (bc + cb) + (cd + dc) \end{aligned} \quad (124)$$

Ovde  $\vec{n}_a$  označava određeni čvor u  $a$  podrešetki, a  $\vec{n}_a + \vec{\lambda}_a^b$  označava tri najbliža suseda u  $b$  podrešetki i tako dalje. Značenje poslednja dva člana je očigledno.

Da bismo primenili standardnu MF proceduru [39], smatramo da je dodato spoljašnje polje  $\mathcal{H}$  u  $z$ -pravcu:

$$H_{ZEM} = -g\mu_B \mathcal{H} \sum_{\vec{n}\alpha} S_{\vec{n}\alpha}^z \quad (125)$$

Ovo uvodi Izingovu (Ising) simetriju u problem, tako da u MF-aproksimaciji dobijamo ( $\hat{S}_n^z = \langle S_n^z \rangle + \delta \hat{S}_n^z$  i zanemaruјemo članove  $\sim \delta S^z \delta S^z$ ):

$$\vec{S}_{\vec{n}\alpha} \cdot \vec{S}_{\vec{n}\beta} \approx \langle S_{\vec{n}\alpha}^z \rangle S_{\vec{n}\beta}^z + S_{\vec{n}\alpha}^z \langle S_{\vec{n}\beta}^z \rangle - \langle S_{\vec{n}\alpha}^z \rangle \langle S_{\vec{n}\beta}^z \rangle \quad (126)$$

Uzimajući u obzir translatornu invarijantnost  $\langle S_{\vec{n}\alpha}^z \rangle = \langle S_\alpha^z \rangle = \sigma_\alpha$  ( $\alpha = a, b, c, d$ ), možemo napisati Hamiltonian u MF aproksimaciji (MFA) :

$$H_{MFA} = H_0 - 1/2 \langle H_0 \rangle_{\mathcal{H}=0} \quad (127)$$

$$H_0 = \sum_{\alpha=a,b,c,d} \sum_{\vec{n}\alpha} \tilde{\mathcal{H}}_\alpha S_{\vec{n}\alpha}^z \quad (128)$$

### 3.3 Temperature kompenzacije za sisteme sa tri i četiri podrešetke i superrešetke 57

Efektivna polja su data kao:

$$\tilde{\mathcal{H}}_a = \frac{z}{2} (J_{ab}\sigma_b + J_{ad}\sigma_d) + g\mu_B\mathcal{H} \quad (129)$$

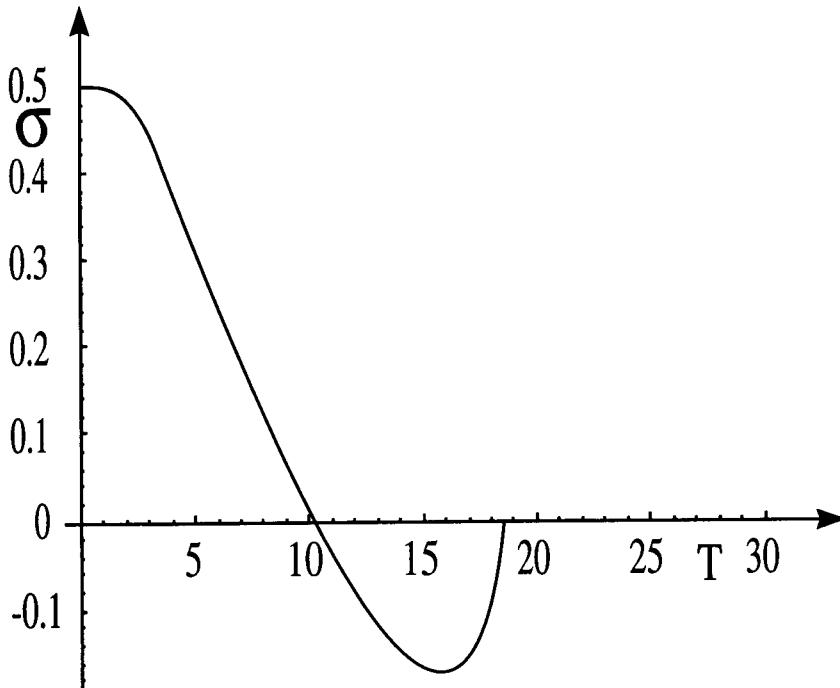
$$\tilde{\mathcal{H}}_b = \frac{z}{2} (J_{ab}\sigma_a + J_{bc}\sigma_c) + g\mu_B\mathcal{H} \quad (130)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_c = \frac{z}{2} (J_{bc}\sigma_c + J_{cd}\sigma_d) + g\mu_B\mathcal{H} \quad (131)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_d = \frac{z}{2} (J_{ad}\sigma_a + J_{cd}\sigma_c) + g\mu_B\mathcal{H} \quad (132)$$

Ovde  $z = 6$  označava broj najbližih suseda. Ako uvedemo broj magnetnih jona po podrešetki  $N = N_{tot}/4$ , možemo pisati:

$$H_0 = -N \sum_{\alpha=a,b,c,d} \tilde{\mathcal{H}}_\alpha S_\alpha^z \quad (133)$$



Slika 25: Magnetizacija sistema sa četiri podrešetke za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = 1.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_2 = -3 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_3 = -2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_4 = 1 \text{ cm}^{-1}$ ,  $S_1 = 1$ ,  $S_2 = 1/2$ ,  $S_3 = 5/2$ ,  $S_4 = 3/2$ .

Koristeći standardnu proceduru, slobodnu energiju dobijamo kao

$$\mathcal{F} = \frac{F}{N} = -\theta \sum_{\alpha=1}^4 \ln Z_{\alpha} \quad (134)$$

$$Z_{\alpha} = \sum_{v=-S_{\alpha}}^{S_{\alpha}} \exp[-\beta \mathcal{H}_{\alpha} v] = \frac{\sinh((S_{\alpha} + 1/2)x_{\alpha})}{\sinh(x_{\alpha}/2)} \quad (135)$$

gde je  $x_{\alpha} = \beta \mathcal{H}_{\alpha}$  i

$$\sigma_{\alpha} = S_{\alpha} B_{S_{\alpha}}(S_{\alpha} x_{\alpha}) \quad \alpha = a, b, c, d \quad (136)$$

a  $B_{S_{\alpha}}$  je standardna Briluenova funkcija [31]. Da bi unificirali notaciju, koristićemo nadalje sledeću konvenciju  $J_{ab} = J_1$ ,  $J_{bc} = J_2$ ,  $J_{cd} = J_3$ ,  $J_{da} = J_4$  a za spinove  $S_a = S_1$ ,  $S_b = S_2$ ,  $S_c = S_3$ ,  $S_d = S_4$ .

Sistem od četiri jednačine (136) mora biti rešen na self-konzistentan način. Ovo ćemo diskutovati numerički za neke posebne izvore interakcije, iako se procena temperature prelaza  $\theta_c$  može dobiti prostom linearizacijom. Rešićemo jednačinu za magnetizaciju podrešetke, a crtati ukupnu magnetizaciju (u daljem tekstu jednostavno "magnetizacija"), koja se dobija kao algebarska suma magnetizacija svih podrešetki.

Radeći na identičan način, dobijamo sistem MF jednačina za sistem sa tri podrešetke, čiju eksplisitnu formu nećemo navoditi.

Numerički ćemo analizirati neke primere koji mogu dovesti do pojave dveju temperatura kompenzacije. Prvo ćemo posmatrati konfiguraciju  $(\uparrow \uparrow \downarrow \uparrow)$  opisanu interakcijama izmene:  $J_1 = 1.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_2 = -3 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_3 = -2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_4 = 1 \text{ cm}^{-1}$  i sledećim vrednostima spinova  $S_1 = 1$ ,  $S_2 = 1/2$ ,  $S_3 = 5/2$ ,  $S_4 = 3/2$ . Ponašanje magnetizacije je dato na Slici 25.

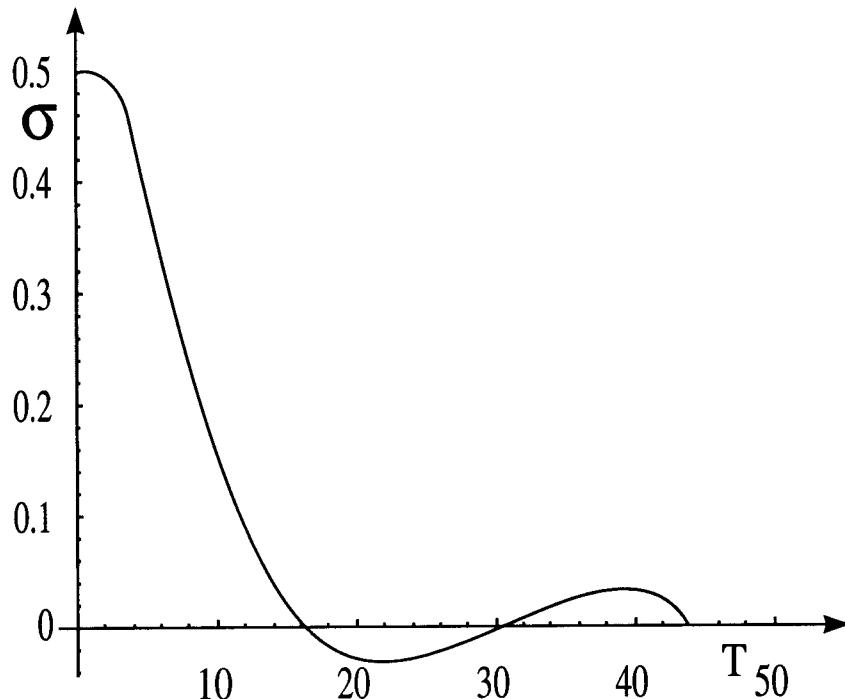
Vidimo da se javlja jedna kompenzaciona tačka. Drugi izbor parametara za ovu konfiguraciju daje ili nijednu ili jednu kompenzacionu tačku, ali nikada dve. Naravno, trebali bi biti oprezni izvodeći ovaj zaključak pošto on sledi iz čisto numeričke analize, dok nismo u mogućnosti da to pokažemo i analitički.

Ipak, "cik - cak" struktura  $(\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow)$  opisana antiferomagnetskim sparivanjem  $J_1 = -1 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_2 = -10 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_3 = -7 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_4 = -2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $S_1 = S_2 = S_4 = 1$ ,  $S_3 = 3/2$  daje dve kompenzacione temperature, iako je negativna magnetizacija prilično slaba, kao što se vidi na Slici 26.

Konačno, nismo uspeli da dobijemo ni jedan skup parametara koji vodi do dve kompenzacione tačke u strukturi sa tri podrešetke. Komentarisaćemo sada ove rezultate. Vrednosti integrala izmene su izabrani u opsegu predloženim u [6]. Ipak, ovi autori su pokazali da su rezultati veoma osetljivi čak i na male promene stehiometrije. Činjenica da smo uspeli da nađemo set parametara koji predviđa

### 3.3 Temperature kompenzacije za sisteme sa tri i četiri podrešetke i superrešetke 59

pojavu dve temperature kompenzacije čak i u uređenim strukturama može da se formuliše kao naš osnovni rezultat: neuređenost (ne-stehiometrija) nije preduslov za fenomen.



Slika 26: Magnetizacija sistema sa četiri podrešetke za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = -1 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_2 = -10 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_3 = -7 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_4 = -2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $S_1 = S_2 = S_4 = 1$ ,  $S_3 = 3/2$ .

U našem slučaju, kao što pokazuje numerička analiza, sistem je osetljiv na male promene odnosa parametara  $J_i$ . Ipak, kada se jednom ustanovi odnos parametara koji dozvoljava dve temperature kompenzacije, mogu se menjati njihove numeričke vrednosti i ponovo dobiti dve tačke kompenzacije. Kompenzacione temperature dobijene na ovaj način leže u širokom opsegu vrednosti, što nudi dobru perspektivu za moguću "konstrukciju" ovih materijala.

Prikazaćemo ovde jedan primer (Slika 27) gde su vrednosti parametara sa Slike 26 pomnoženi 10 puta. Kompenzacione tačke i kritična temperatura rastu, iako ne za isti faktor 10 pošto jednačine nisu linearne.

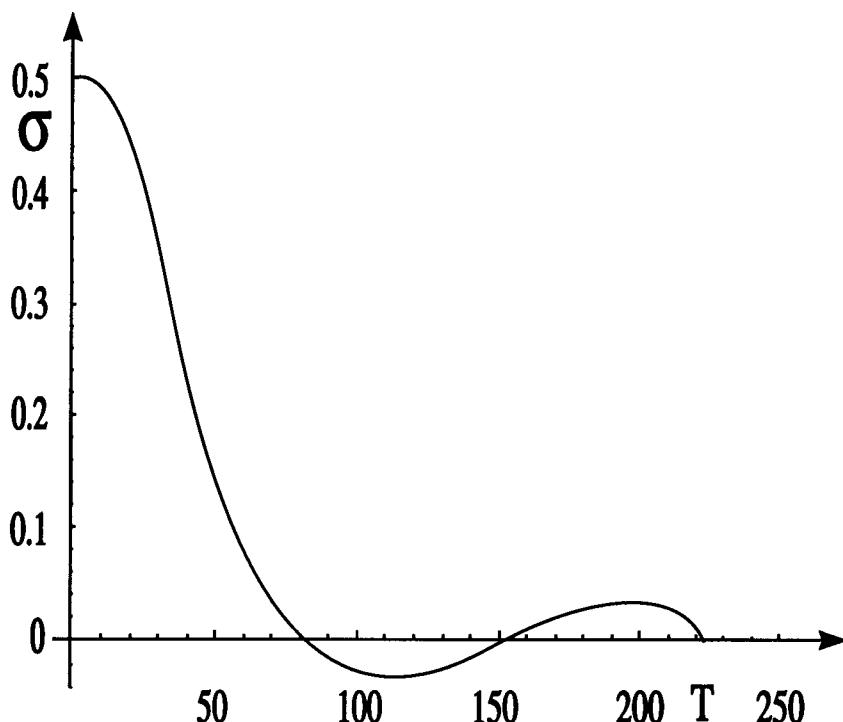
Pokazaćemo u sledećem pododeljku da je za slučaj superrešetki, s obzirom na veći broj parametara, uglavnom moguće dobiti dve temperature kompenzacije.

### 3.3.2 Aproksimacija srednjeg polja za superrešetke

Osnovna rešetka je ista kao i u odeljku 3.2. Hamiltonijan sistema može biti napisan u opštem obliku:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}_\alpha, \vec{n}_\alpha + \vec{\delta}_l} I_\alpha \vec{S}_{\vec{n}_\alpha} \cdot \vec{S}_{\vec{n}_\alpha + \vec{\delta}_l} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}_\alpha, \vec{n}_\alpha + \vec{\delta}_\beta^x} J_{\alpha \beta} \vec{S}_{\vec{n}_\alpha} \cdot \vec{S}_{\vec{n}_\alpha + \vec{\delta}_\beta^x} \quad \alpha, \beta = a, b, c(d) \quad (137)$$

Prvi član opisuje interakciju spinova u svakom sloju tako da  $\alpha$  broji slojeve,  $\vec{n}$  je 2D vektor unutar sloja, a  $\vec{\delta}_l$  povezuje spinove sa najbližim susedima unutar ravni. Spinovi unutar ravni interaguju feromagnetsno, tako da je svako  $I_\alpha > 0$ .



Slika 27: Magnetizacija sistema sa četiri podrešetke za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = -10 \text{ cm}^{-1}, J_2 = -100 \text{ cm}^{-1}, J_3 = -70 \text{ cm}^{-1}, J_4 = -20 \text{ cm}^{-1}, S_1 = S_2 = S_4 = 1, S_3 = 3/2$ .

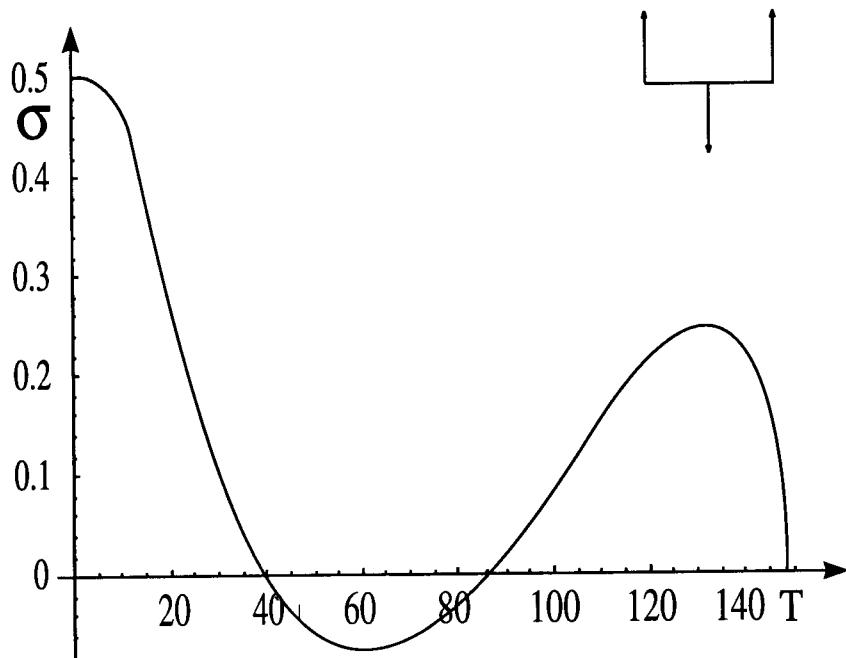
Drugi član opisuje sparivanje između ravni  $\alpha$  i  $\beta$ , tako da  $\vec{n}_\alpha + \vec{\delta}_\beta^x$  povezuje spin u položaju  $\vec{n}_\alpha$  sa spinom u susednoj ravni  $\beta$ , koja se nalazi direktno "iznad" nje

### 3.3 Temperature kompenzacije za sisteme sa tri i četiri podrešetke i superrešetke 61

duž  $x$ -ose. Suma po  $\vec{n}_\alpha + \vec{\delta}_\beta^x$  uvek uključuje oba suseda a faktor  $1/2$  vodi računa o odgovarajućem broju interakcija.

Smatraćemo da su vrednosti spinova unutar ravnih jednake, ali ne moraju biti iste u različitim ravnima ( $S_a \neq S_b \neq S_c \neq S_d$ ). Da bi očuvali translatornu invarijantnost u svim pravcima, podrazumevamo periodične granične uslove. Oznake su sledeće:  $J_{ab} = J_1$ ,  $J_{bc} = J_2$  i za superrešetku sa motivom od tri ravnih  $J_{ca} = J_3$ , dok je za superrešetku sa motivom od četiri ravnih  $J_{cd} = J_3$ ,  $J_{da} = J_4$ . Slično i za interakcije unutar ravnih,  $I_a = I_1$  itd.  $J$  može da bude ili pozitivno ili negativno, po što je danas moguće proizvesti superrešetke gde interakcije između slojeva zavise od širine sloja i nemagnetičnih jona umetnutih u prostor između slojeva.

Uzimajući u obzir translatornu invarijantnost spinova unutar sloja i ćelija duž  $x$ -ose, možemo koristiti  $\langle S_{\vec{n}_\alpha}^z \rangle = \langle S_\alpha^z \rangle = \sigma_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, 3, 4$ ). Osnovni niz jednačina je opet tipa (136), a efektivna polja su data sa:

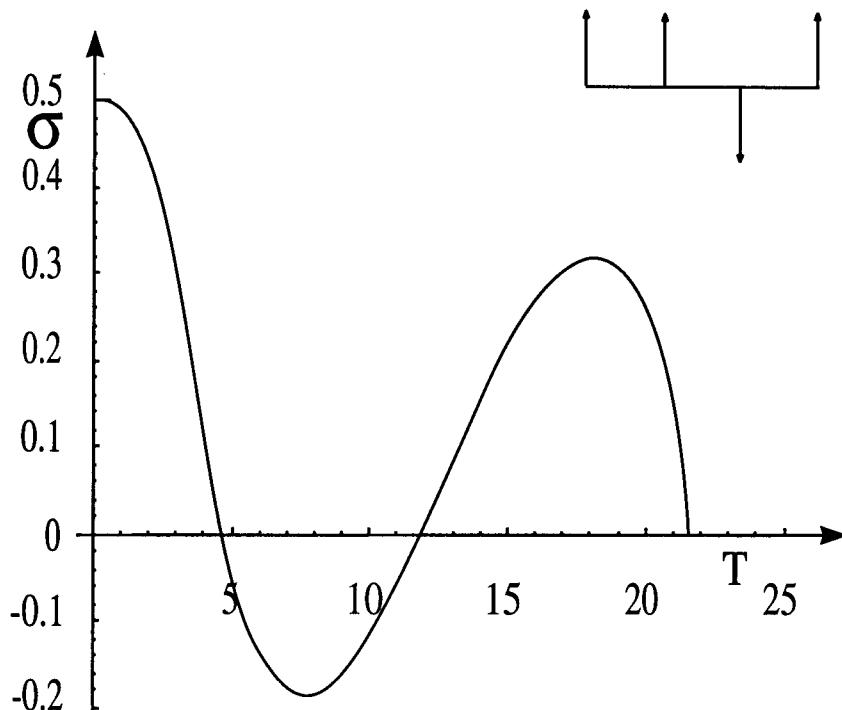


Slika 28: Magnetizacija superrešetke sa ćelijom koja se sastoji od tri sloja za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = -1 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_2 = -2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_3 = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_1 = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_2 = 1.2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_3 = 2.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $S_1 = 1$ ,  $S_2 = 5/2$ ,  $S_3 = 2$ . (konfiguracija je prikazana na insetu.)

a) za slučaj superrešetke sa motivom od četiri sloja:

$$\tilde{\mathcal{H}}_1 = z_2 I_1 \sigma_1 + \frac{z_1}{2} (J_1 \sigma_2 + J_4 \sigma_4) + g\mu_B \mathcal{H} \quad (138)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_2 = z_2 I_2 \sigma_2 + \frac{z_1}{2} (J_1 \sigma_1 + J_2 \sigma_3) + g\mu_B \mathcal{H} \quad (139)$$



Slika 29: Magnetizacija superrešetke sa čelijom koja se sastoji od četiri sloja za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_2 = -3 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_3 = -2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_4 = 0.4 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_1 = 1 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_2 = 3 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_3 = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_4 = 3 \text{ cm}^{-1}$ ,  $S_1 = 1$ ,  $S_2 = 1/2$ ,  $S_3 = 5/2$ ,  $S_4 = 3/2$ . (konfiguracija je prikazana na insetu.)

$$\tilde{\mathcal{H}}_3 = z_2 I_3 \sigma_3 + \frac{z_1}{2} (J_2 \sigma_2 + J_3 \sigma_4) + g\mu_B \mathcal{H} \quad (140)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_4 = z_2 I_4 \sigma_4 + \frac{z_1}{2} (J_3 \sigma_3 + J_4 \sigma_1) + g\mu_B \mathcal{H} \quad (141)$$

b) za slučaj superrešetke sa motivom od tri sloja:

$$\tilde{\mathcal{H}}_1 = z_2 I_1 \sigma_1 + \frac{z_1}{2} (J_1 \sigma_2 + J_3 \sigma_3) + g\mu_B \mathcal{H} \quad (142)$$

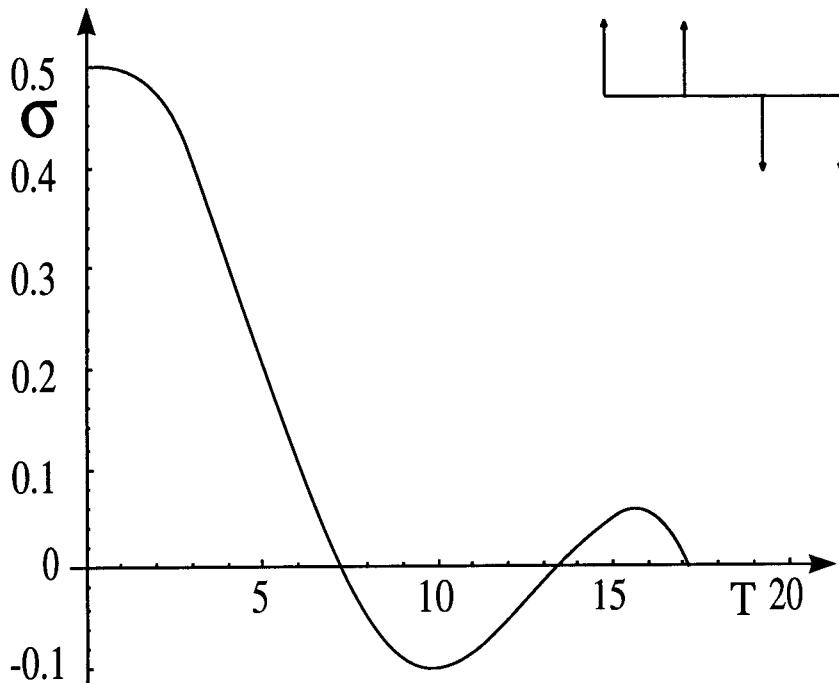
### 3.3 Temperature kompenzacije za sisteme sa tri i četiri podrešetke i superrešetke 63

$$\tilde{\mathcal{H}}_2 = z_2 I_2 \sigma_2 + \frac{z_1}{2} (J_1 \sigma_1 + J_2 \sigma_3) + g\mu_B \mathcal{H} \quad (143)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_3 = z_2 I_3 \sigma_3 + \frac{z_1}{2} (J_2 \sigma_2 + J_3 \sigma_1) + g\mu_B \mathcal{H} \quad (144)$$

U gornjim izrazima  $z_1 = 2$  označava broj najbližih suseda u pravcu normalno na ravni dok je  $z_2 = 4$  broj suseda unutar ravni.

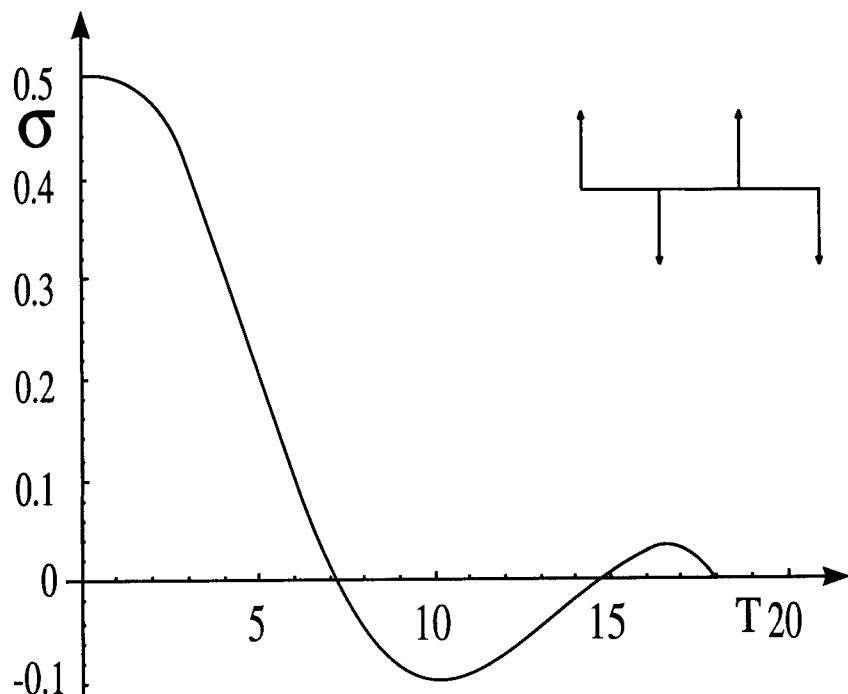
S praktične tačke gledišta, superrešetke su pogodnije pošto je eksperimentalno moguće menjati interakciju između ravni na efikasniji način, dodavanjem nemagnetnih materijala između ravni, slično sendvič strukturama. Na taj način je mnogo lakše naći niz parametara za koji se pojavljuju dve temperature kompenzacije. Praktično za svaku konfiguraciju superrešetke, moguće je dobiti ovaj fenomen (Slike 28-31).



Slika 30: Magnetizacija superrešetke sa čelijom koja se sastoji od četiri sloja za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = 1 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_2 = -10 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_3 = 4 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_4 = -2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_1 = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_2 = 3 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_3 = 1 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_4 = 2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $S_1 = 3/2$ ,  $S_2 = S_3 = S_4 = 1$ . (konfiguracija je prikazana na insetu.)

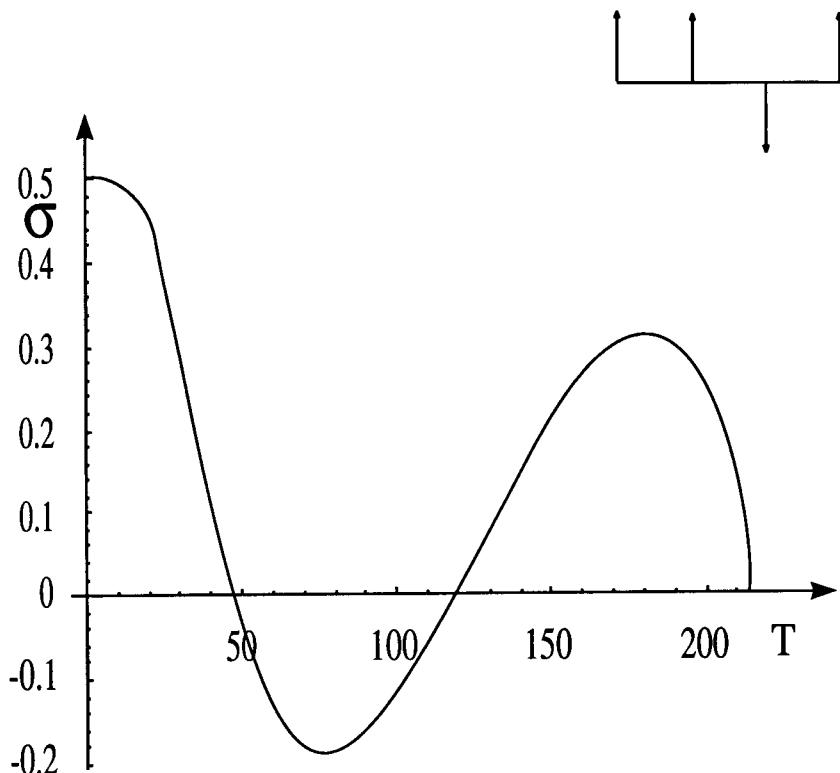
Očigledno, ovo je posledica činjenice da kod superrešetki postoji veći broj parametara koji mogu biti fitovani. Povećanje vrednosti odnosa interakcionih

parametara koji daju dve temperature kompenzacije, vodi do sličnog ponašanja kao i kod sistema sa četiri podrešetke. Primeri su dati na Slici 32 (parametri sa Slike 28 pomnoženi su faktorom 10).

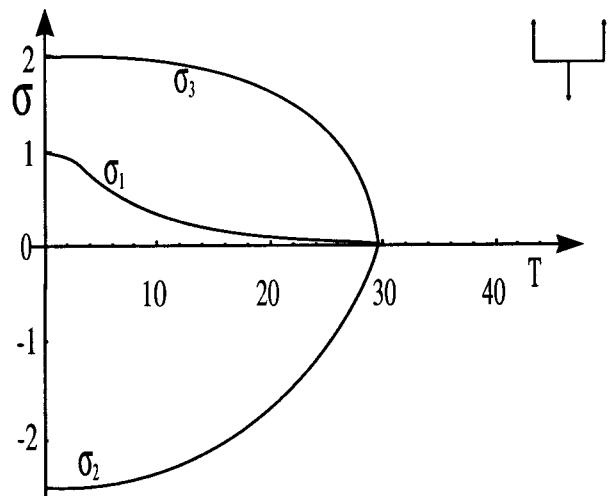
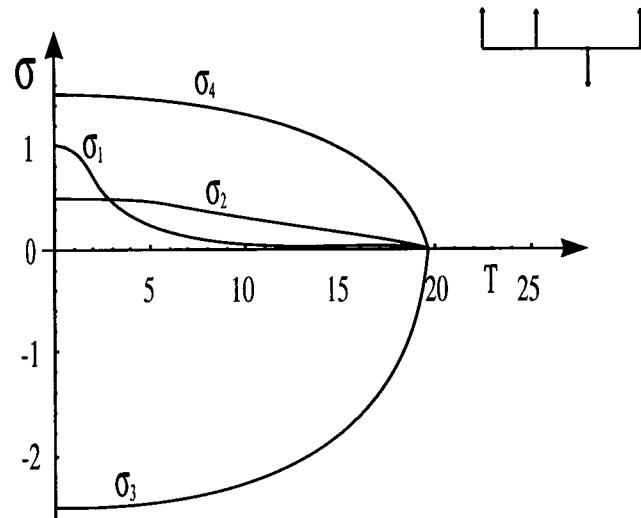


Slika 31: Magnetizacija superrešetke sa čelijom koja se sastoji od četiri sloja za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = -1 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_2 = -10 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_3 = -4 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_4 = -2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_1 = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_2 = 1.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_3 = 3 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_4 = 2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $S_1 = 3/2$ ,  $S_2 = S_3 = S_4 = 1$ . (konfiguracija je prikazana na insetu.)

### 3.3 Temperature kompenzacije za sisteme sa tri i četiri podrešetke i superrešetke 65



Slika 32: Magnetizacija superrešetke sa čelijom koja se sastoji od četiri sloja za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = 5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_2 = -30 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_3 = -20 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_4 = 4 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_1 = 10 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_2 = 30 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_3 = 5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $I_4 = 30 \text{ cm}^{-1}$ ,  $S_1 = 1$ ,  $S_2 = 1/2$ ,  $S_3 = 5/2$ ,  $S_4 = 3/2$ . (konfiguracija je prikazana na insetu.)



Slika 33: Magnetizacije pojedinačnih slojeva superrešetke sa čelijom koja se sastoji a) četiri sloja za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = 0.5 \text{ cm}^{-1}, J_2 = -3 \text{ cm}^{-1}, J_3 = -2 \text{ cm}^{-1}, J_4 = 0.4 \text{ cm}^{-1}, I_1 = 1 \text{ cm}^{-1}, I_2 = 3 \text{ cm}^{-1}, I_3 = 0.5 \text{ cm}^{-1}, I_4 = 0.4 \text{ cm}^{-1}, S_1 = 1, S_2 = 1/2, S_3 = 5/2, S_4 = 3/2$  i b) tri sloja za sledeće vrednosti parametara:  $J_1 = -1 \text{ cm}^{-1}, J_2 = -2 \text{ cm}^{-1}, J_3 = 0.5 \text{ cm}^{-1}, I_1 = 0.5 \text{ cm}^{-1}, I_2 = 1.2 \text{ cm}^{-1}, I_3 = 2.5 \text{ cm}^{-1}, S_1 = 1, S_2 = 5/2, S_3 = 2$  (konfiguracija je prikazana na insetu.)

### *3.3 Temperature kompenzacije za sisteme sa tri i četiri podrešetke i superrešetke*<sup>67</sup>

Zanimljivo je pratiti ponašanje magnetizacije svakog pojedinačnog sloja i viđeti kako nastaje kompenzacija za određene vrednosti parametara za superrešetke sa tri i četiri sloja (Slika 33) (Slični proračuni za podrešetke takođe pokazuju zašto je teško dostići kompenzaciju u tom slučaju).

U okviru MFA smo pokazali da je odgovarajućim izborom komponenti (tj. parametara sistema) moguće postići da i uređeni magnetni sistemi sa nekoliko podrešetki poseduju dve temperature kompenzacije, dok je u slučaju superrešetki mnogo više mogućih kombinacija. Što se tiče praktične realizacije ovih sistema, verujemo da postoje eksperimentalne mogućnosti za njihovo sintetisanje, na šta navodi i uspeh japanskog tima [6], posebno što smo pokazali da se ovakva mogućnost javlja u širokom spektru interakcija izmene među paramagnetenim jonima.



## 4 Magnetne osobine visokotemperaturskih superprovodnih bakarnih oksida

U poslednjoj glavi rada biće analizirane magnetne osobine sistema koji po svojoj magnetnoj strukturi odgovaraju visokotemperaturskim superprovodnim kupratima. Od otkrića visokotemperaturske superprovodnosti 1986. god, kada su K.A. Miler (Müller) i J.G. Bednorc (Bednorz) otkrili [40] u keramičkom oksidu bakra, lantana i barijuma superprovodnost na  $T_c \simeq 30K$ , materijali ovog tipa su užiži naučnog interesovanja. Strukturna karakteristika svih superprovodnih bakarnih oksida je prisustvo jedne ili više elektronski aktivnih  $CuO_2$  bliskih paralelnih ravni, koje su dalje razdvojene tzv. "rezervoarima naelektrisanja". Pored toga, zajednička karakteristika visokotemperaturskih (*HTC*) superprovodnika je da se metalno stanje dobija od "roditeljskih" izolatorskih antiferomagnetičnih jedinjenja. To se postiže npr. dopiranjem O-atomima u jedinjenju  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  (1 : 2 : 3). Atomske konfiguracije elemenata koji čine ovo jedinjenje su:  $Cu[Ar]3d^{10}4s^1$ ,  $Y[K](5s)^2(4d)$ ,  $Ba[Xe](6s)^2$ ,  $O[He]2s^22p^4$ . U kristalu kiseonik je u  $O^{2-}$  stanju sa popunjrenom  $2p$ -ljuskom. Y gubi 3 elektrona i postaje  $Y^{3+}$  koji je u stabilnoj konfiguraciji popunjene spoljašnje ljuske. Da bi se u ovom slučaju očuvala električna neutralnost, s obzirom da je atom bakra na mestima Cu1 u  $Cu^+$  stanju, atom bakra na mestima Cu2 treba da bude u  $Cu^{2+}$  stanju, koje se dobija posle otpuštanja 4s i jednog 3d elektrona. Tako se dobija šupljina u njegovoj  $d$ -ljuski i na taj način  $Cu^{2+}$  ion ima sopstveni spin  $S = \frac{1}{2}$  u kristalu. Kada dopiramo jedinjenje O-atomima, uslov opšte neutralnosti naelektrisanja uzrokuje odvođenje elektrona iz  $CuO_2$  ravni, čime se efektivno stvaraju pokretnе šupljine u ravni.

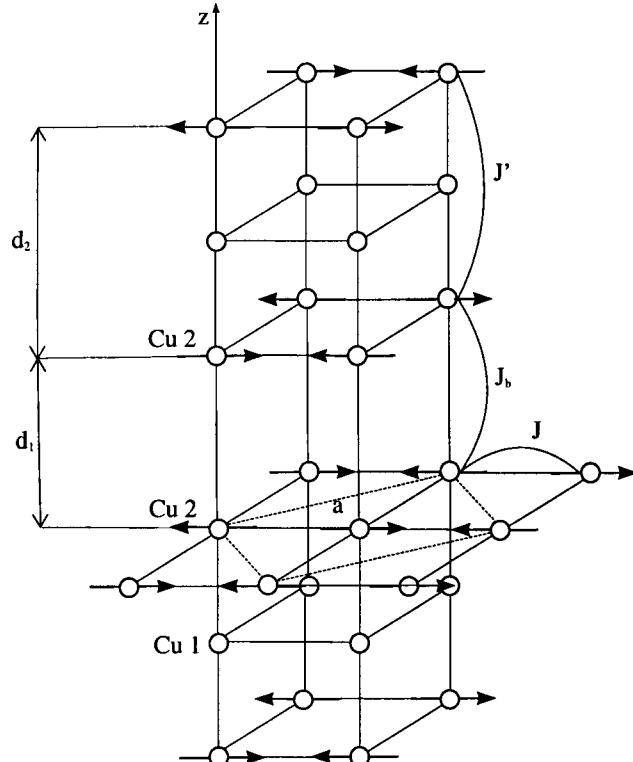
S obzirom da se u ovim materijalima pojavljuju antiferomagnetsko uređene ravni  $Cu^{2+}$ -jona, ovi magnetni sistemi se mogu posmatrati kao niz od jednog magnetro uređenog sloja ( $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ) ili dva sloja (bisloj) ( $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ ). Bliska veza između magnetizma i superprovodnosti u ovim bakarnim oksidima je veoma interesantna, s obzirom da ne postoji u "običnim" superprovodnicima. O ovoj vezi svedoče i eksperimenti: npr. neutronsko rasejanje pokazuje nedvosmisleno prisustvo kratkodometnih antiferomagnetičnih korelacija (ekscitacija) u *HTC* superprovodnicima. Iako mnogi naučnici smatraju da magnetizam igra veoma važnu ulogu u *HTC* superprovodnosti [41], uloga ovih ekscitacija na mehanizam sparivanja u superprovodnicima je još uvek nerazjašnjena. Ulogu magnetnih podsistema u superprovodnoj fazi u ovom radu nećemo razmatrati.

Cilj naše analize će biti osobine AF uređenih bislojeva, koje mogu biti proverene eksperimentalno. Pre svega smo zainteresovani za energiju elementarnih ekscitacija-spinske talase, koji se mogu dobiti neutronskim rasejanjem. Poznavanje energije

spinskih talasa omogućava izračunavanje magnetizacije podrešetke i proučavanje njenog nisko-temperaturskog ponašanja, kao i ponašanja u blizini faznog prelaza. Takođe možemo izračunati doprinos unutrašnjoj energiji sistema i proceniti temperatursko ponašanje magnetnog doprinosa specifičnoj topotri  $C_v$ .

Može se raditi direktno sa spinskim operatorima i primeniti aproksimacija srednjeg polja ili metod Grinovih funkcija, koje dekuplujemo na odgovarajući način. Alternativni postupak je korišćenje neke aproksimativne bozonske reprezentacije za spinske operatore, gde je onda osnova za dalje proučavanje bozonski Hamiltonijan.

U našem radu razmatraćemo samo vrednost spina  $S = 1/2$  (što odgovara magnetnom momentu  $Cu^{2+}$ -jona). Energiju sistema i magnetizaciju podrešetke ćemo računati koristeći formalizam Grinovih funkcija za spinske i bozonske operatore. Diskutovaćemo različite temperaturske oblasti kao i temperaturu faznog prelaza.



Slika 34: Antiferomagnetna struktura  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  [50, 51]. Dve  $Cu_2$  ravni su  $m_1$  i  $m_2$  ravni jedinične celije, sa interakcijom unutar ravni  $J$  i parametrom kvadratne rešetke  $a$ . Interakcija unutar celije je  $J_b$  a interakcija između celija  $J'$ .  $c_o = d_1 + d_2$  je period superrešetke duž  $z$ -pravca.

Da bismo mogli primeniti naše rezultate na bakar oksidne visokotemperaturske superprovodnike (HTC), kao na primer (1 : 2 : 3) strukture, posmatraćemo superrešetku koja se sastoji od bislojeva. Elementi bisloja su antiferomagnetsno uređene ravni sparene antiferomagnetsno. Osnovna rešetka je podeljena na četiri magnetne podrešetke  $a_1, b_1, a_2$  i  $b_2$  (po dve podrešetke u svakoj magnetnoj ravni jedinične celije). Ovaj model može biti primenjen na sistem spinova takozvanih  $Cu_2$  jona u (1 : 2 : 3) strukturi, kao što je prikazano na Slici 34 [50, 51].

Položaj svakog spina je definisan na sledeći način:  $\vec{S}_{m_i, \vec{p}}(\alpha)$ ;  $i = 1, 2$ ;  $\alpha = a, b$ , gde su  $m_1$  i  $m_2$  oznaće ravni unutar bisloja (odnosno jedinične celije za superrešetku), a  $\vec{p}$  je dvodimenzionalni vektor koji definiše položaj unutar ravni. Dovoljno je da podrešetke u odgovarajućoj ravni obeležimo sa  $a$  i  $b$ , s obzirom da donji indeks  $i$  označava ravan unutar magnetne elementarne celije.

Hajzenbergove interakcije su u aproksimaciji najbližih suseda. Izmenska interakcija unutar ravni je  $J$ , interakcija između dve ravni, odgovorna za postojanje bislojeva označena je izmenskim integralom  $J_b$ , a interakcija između bislojeva izmenskim integralom  $J'$ . Takođe, uvodimo i spinsku anizotropiju unutar ravni, označenu sa  $gJ$  za interakciju spinskih komponenti izvan ravni  $S^zS^z$  (out-of-plane). Magnetno polje je duž  $z$ -ose.

Hamiltonian sistema može biti zapisan na sledeći način:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{m_i, \vec{p}_a, \vec{p}_b} J \left[ \frac{1}{2} (\hat{S}_{m_i, \vec{p}_a}^+(a) \hat{S}_{m_i, \vec{p}_b}^+(b) + h.c.) - g \hat{S}_{m_i, \vec{p}_a}^z(a) \hat{S}_{m_i, \vec{p}_b}^z(b) \right] - \mu \vec{\mathcal{H}} \sum_{m, \vec{p}, \alpha=a,b} \vec{S}_{m, \vec{p}}(\alpha) + \\ & + J_b \sum_{m_1, \vec{p}} \left[ \frac{1}{2} (\hat{S}_{m_1, \vec{p}}^+(a) \hat{S}_{m_2, \vec{p}}^+(b) + h.c.) - \hat{S}_{m_1, \vec{p}}^z(a) \hat{S}_{m_2, \vec{p}}^z(b) + \frac{1}{2} (\hat{S}_{m_1, \vec{p}}^+(b) \hat{S}_{m_2, \vec{p}}^+(a) + h.c.) - \right. \\ & \left. - \hat{S}_{m_1, \vec{p}}^z(b) \hat{S}_{m_2, \vec{p}}^z(a) \right] + J' \sum_{m_2, \vec{p}} \left[ \frac{1}{2} (\hat{S}_{m_2, \vec{p}}^+(a) \hat{S}_{m_1+1, \vec{p}}^+(b) + \hat{S}_{m_2, \vec{p}}^+(b) \hat{S}_{m_1+1, \vec{p}}^+(a) + h.c.) - \right. \\ & \left. - \hat{S}_{m_2, \vec{p}}^z(a) \hat{S}_{m_1+1, \vec{p}}^z(b) - \hat{S}_{m_2, \vec{p}}^z(b) \hat{S}_{m_1+1, \vec{p}}^z(a) \right] \end{aligned} \quad (145)$$

Kao što je napomenuto u uvodu, ovde modelni Hamiltonian sadrži obe vrste anizotropije, spinsku i prostornu, te ćemo ispitati kako one utiču na ponašanje sistema. Možemo nastaviti na najopštiji način, ipak, kao što smo već napomenuli, ograničićemo se na slučaj  $S_a = S_b = 1/2$ , pošto to dozvoljava jednostavno izračunavanje energije sistema. Zbog ovoga je bolje izraziti Hamiltonian preko operatora  $S^\pm$ , tako da on dobija formu:

$$H/J = H_o + H_2 + H_4 \quad (146)$$

$$H_o = -\frac{N_o}{8}\epsilon - \frac{1}{2}N_o\mu\mathcal{H}; \quad \epsilon = 4g + \lambda_b + \lambda'; \quad \lambda_b = \frac{J_b}{J}; \quad \lambda' = \frac{J'}{J} \quad (147)$$

$N_o$  je broj paramagnetičnih jona

$$\begin{aligned} H_2 = & \sum_{m_i, \vec{p}} [\epsilon_a \hat{S}_{m_i \vec{p}}^-(a) \hat{S}_{m_i \vec{p}}^+(a) + \epsilon_b \hat{S}_{m_i \vec{p}}^-(b) \hat{S}_{m_i \vec{p}}^+(b)] + \frac{1}{2} \sum_{m_i, \vec{p}_a, \vec{p}_b} (\hat{S}_{m_i \vec{p}_a}^+(a) \hat{S}_{m_i \vec{p}_b}^+(b) + h.c.) + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{m_1, \vec{p}} [\hat{S}_{m_1 \vec{p}}^+(a) (\lambda_b \hat{S}_{m_2 \vec{p}}^+(b) + \lambda' \hat{S}_{m_2-1 \vec{p}}^+(b)) + \hat{S}_{m_1 \vec{p}}^+(b) (\lambda_b \hat{S}_{m_2 \vec{p}}^+(a) + \lambda' \hat{S}_{m_2-1 \vec{p}}^+(a)) + h.c.] + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{m_2, \vec{p}} [\hat{S}_{m_2 \vec{p}}^+(a) (\lambda_b \hat{S}_{m_1 \vec{p}}^+(b) + \lambda' \hat{S}_{m_1+1 \vec{p}}^+(b)) + \hat{S}_{m_2 \vec{p}}^+(b) (\lambda_b \hat{S}_{m_1 \vec{p}}^+(a) + \lambda' \hat{S}_{m_1+1 \vec{p}}^+(a)) + h.c.] \end{aligned} \quad (148)$$

$$\begin{aligned} H_4 = & -g \sum_{m_i, \vec{p}_a, \vec{p}_b} \hat{S}_{m_i \vec{p}_a}^-(a) \hat{S}_{m_i \vec{p}_a}^+(a) \hat{S}_{m_i \vec{p}_b}^-(b) \hat{S}_{m_i \vec{p}_b}^+(b) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{m_1, \vec{p}, \alpha \neq \beta = (a, b)} \hat{S}_{m_1 \vec{p}}^-(\alpha) \hat{S}_{m_1 \vec{p}}^+(\alpha) (\lambda_b \hat{S}_{m_2 \vec{p}}^-(\beta) \hat{S}_{m_2 \vec{p}}^+(\beta) + \lambda' \hat{S}_{m_2-1 \vec{p}}^-(\beta) \hat{S}_{m_2-1 \vec{p}}^+(\beta)) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{m_2, \vec{p}, \alpha \neq \beta = (a, b)} \hat{S}_{m_2 \vec{p}}^-(\alpha) \hat{S}_{m_2 \vec{p}}^+(\alpha) (\lambda_b \hat{S}_{m_1 \vec{p}}^-(\beta) \hat{S}_{m_1 \vec{p}}^+(\beta) + \lambda' \hat{S}_{m_1+1 \vec{p}}^-(\beta) \hat{S}_{m_1+1 \vec{p}}^+(\beta)) \end{aligned} \quad (149)$$

gde je  $\epsilon_{a/b} = \frac{1}{2}\epsilon \pm \frac{\mu\mathcal{H}}{J}$ .

## 4.1 Spinski formalizam

Napisaćemo prvo jednačine kretanja za operatore  $\hat{S}^\pm$ . One će služiti u dve svrhe: da izračunamo spinske GF i da izračunamo srednju energiju sistema. Oblik Hamiltonijana sugerije sistem od četiri kuplovane jednačine kretanja za operatore  $\hat{S}_{m_1 \vec{p}_a}^+(a)$ ,  $\hat{S}_{m_1 \vec{p}_b}^-(b)$ ,  $\hat{S}_{m_2 \vec{p}_a}^+(a)$  i  $\hat{S}_{m_2 \vec{p}_b}^-(b)$  i pridružen sistem za adjungovane operatore. Navešćemo samo jednu jednačinu, a ostale se dobijaju analogno. Na primer:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^+(a)}{dt} = & \varepsilon_a \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^+(a) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}_b} \hat{S}_{m_1\vec{p}_b}^-(b) + \frac{1}{2} \lambda_b \hat{S}_{m_2\vec{p}_a}^-(b) + \frac{\lambda'}{2} \hat{S}_{m_2-1\vec{p}_a}^-(b) - \\
& - g \sum_{\vec{p}_b} \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^+(a) \hat{S}_{m_1\vec{p}_b}^-(b) \hat{S}_{m_1\vec{p}_b}^+(b) - \lambda_b \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^+(a) \hat{S}_{m_2\vec{p}_a}^-(b) \hat{S}_{m_2\vec{p}_a}^+(b) - \\
& - \lambda' \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^+(a) \hat{S}_{m_2-1\vec{p}_a}^-(b) \hat{S}_{m_2-1\vec{p}_a}^+(b) - \sum_{\vec{p}_b} \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^-(a) \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^+(a) \hat{S}_{m_1\vec{p}_b}^-(b) - \\
& - \lambda_b \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^-(a) \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^+(a) \hat{S}_{m_2\vec{p}_a}^+(b) - \lambda' \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^-(a) \hat{S}_{m_1\vec{p}_a}^+(a) \hat{S}_{m_2-1\vec{p}_a}^-(b)
\end{aligned} \tag{150}$$

Ako generalizujemo postupak koji je Tjablikov [29] primenio na Hajzenbergov feromagnet, stižemo do važnog rezultata:

$$\frac{H}{J} = H_o + \frac{1}{2} H_2 + \frac{1}{4} \sum_{m_i} \sum_{\vec{p}} \sum_{\alpha=a,b} [\hat{S}_{m_i\vec{p}\alpha}^-(\alpha) \frac{d\hat{S}_{m_i\vec{p}\alpha}^+(\alpha)}{dt} - \frac{d\hat{S}_{m_i\vec{p}\alpha}^-(\alpha)}{dt} \hat{S}_{m_i\vec{p}\alpha}^+(\alpha)]. \tag{151}$$

Gornja relacija je egzaktna i omogućava nam da odredimo energiju sistema ( $\langle H \rangle$ ) poznajući odgovarajuće korelacione funkcije.

U tu svrhu izračunaćemo Tjablikovske Grinove funkcije u aproksimaciji haotičnih faza (RPA). Osnovna ideja ove aproksimacije je zanemarivanje korelacije longitudinalnih spinskih komponenti  $\hat{S}^z$  sa transverzalnim  $\hat{S}^\pm$  na različitim čvorovima rešetke, tako da je

$$\langle \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_j^\pm | \hat{B} \rangle \rangle \approx \langle \hat{S}_i^z \rangle \langle \langle \hat{S}_j^\pm | \hat{B} \rangle \rangle = \sigma \langle \langle \hat{S}_j^\pm | \hat{B} \rangle \rangle$$

$$\langle S_i^z \rangle = \sigma \text{ (zbog translatorne invarijantnosti)}$$

Sistem od osam jednačina, u ovoj aproksimaciji se raspada na dva nezavisna sistema od četiri jednačine za GF u  $(\vec{k}, E)$  reprezentaciji. Opšta notacija koju ćemo koristiti je  $G_{\alpha_i \beta_j}^{\mu\nu}(\vec{k}, E) \equiv \ll \hat{S}_{m_i\vec{p}}^\mu(\alpha) | \hat{S}_{m_j\vec{p}}^\nu(\beta) \gg_{\vec{k}, E}$  ( $\mu, \nu = +, -$ ;  $\alpha, \beta = a, b$ ;  $i, j = 1, 2$ ).

Navešćemo ovde samo jedan niz od četiri jednačine:

$$(E - \tilde{\epsilon}_a) G_{a_1 \beta_j}^{+\nu}(\vec{k}, E) - \sigma \gamma(\vec{k}) G_{b_1 \beta_j}^{-\nu}(\vec{k}, E) + 0 + \sigma \gamma_z G_{b_2 \beta_j}^{-\nu}(\vec{k}, E) = \frac{i}{2\pi} C_{a_1 \beta_j}^{+\nu}$$

$$\sigma \gamma(\vec{k}) G_{a_1 \beta_j}^{+\nu}(\vec{k}, E) + (E + \tilde{\epsilon}_b) G_{b_1 \beta_j}^{-\nu}(\vec{k}, E) + \sigma \gamma_z G_{a_2 \beta_j}^{+\nu}(\vec{k}, E) + 0 = \frac{i}{2\pi} C_{b_1 \beta_j}^{-\nu}$$

$$0 + \sigma \gamma_z^* G_{b_1 \beta_j}^{-\nu}(\vec{k}, E) + (E - \tilde{\epsilon}_a) G_{a_2 \beta_j}^{+\nu}(\vec{k}, E) - \sigma \gamma(\vec{k}) G_{b_2 \beta_j}^{-\nu}(\vec{k}, E) = \frac{i}{2\pi} C_{a_2 \beta_j}^{+\nu}$$

$$\sigma \gamma_z^* G_{a_1 \beta_j}^{+\nu}(\vec{k}, E) + 0 + \sigma \gamma(\vec{k}) G_{a_2 \beta_j}^{+\nu}(\vec{k}, E) + (E + \tilde{\epsilon}_b) G_{b_2 \beta_j}^{-\nu}(\vec{k}, E) = \frac{i}{2\pi} C_{b_2 \beta_j}^{-\nu} \quad (152)$$

gde je:

$$C_{\alpha_i \beta_j}^{\mu\nu} = \langle [\hat{S}_{m_i, \vec{p}_\alpha}^\mu(\alpha), \hat{S}_{m_j, \vec{p}_\beta}^\nu(\beta)] \rangle ; \quad \gamma(\vec{k}) = 2(\cos k_x a + \cos k_y a) ; \quad \sigma \equiv \langle \hat{S}^z \rangle$$

$$\gamma_z = \lambda_b e^{ik_z d_1} + \lambda' e^{-ik_z d_2} ; \quad \tilde{\epsilon}_{a/b} = \tilde{\epsilon} \pm \frac{\mu \mathcal{H}}{J} ; \quad \tilde{\epsilon} = \sigma \epsilon$$

Postoji i drugi sistem od četiri jednačine, koji sledi iz jednačina kretanja za adjungovane operatore.

Determinanta gornjeg sistema (152) je:

$$\Delta_1(E) = [(E - \frac{\mu \mathcal{H}}{J})^2 - \tilde{\epsilon}^2]^2 + 2\sigma^2 [(E - \frac{\mu \mathcal{H}}{J})^2 - \tilde{\epsilon}^2] (\gamma^2(\vec{k}) + |\gamma_z|^2) + \sigma^4 (\gamma^2(\vec{k}) - |\gamma_z|^2)^2 \quad (153)$$

dok determinanta  $\Delta_2(E)$  adjungovanog sistema zadovoljava relaciju:

$$\Delta_2(E) = \Delta_1(-E). \quad (154)$$

Nule gornjih determinanti daju nam energije spinskih talasa. U odsustvu spojivašnjeg magnetnog polja pojavljuju se samo dve, dvostruko degenerisane grane

$$E_{1/2} = \sigma \sqrt{\epsilon^2 - (\gamma(\vec{k}) \pm |\gamma_z|)^2} \quad (155)$$

#### 4.1 Spinski formalizam

Dug, ali jednostavan račun, baziran na simetriji sistema, pokazuje da je za naše svrhe dovoljno znati Furije-transforme (tzv. spektralne gustine  $I_{\alpha_i \beta_j}^{\mu\nu}(\vec{k}, E)$ ) samo za tri različite korelacione funkcije:

$$\begin{aligned} I_{\alpha_i \alpha_i}^{++}(\vec{k}, E) &= \frac{\sigma}{2} \left\{ \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}}{E_1(\vec{k})}\right) \delta[E - E_1(\vec{k})] + \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}}{E_1(\vec{k})}\right) \delta[E + E_1(\vec{k})] + \right. \\ &\quad \left. + \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}}{E_2(\vec{k})}\right) \delta[E - E_2(\vec{k})] + \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}}{E_2(\vec{k})}\right) \delta[E + E_2(\vec{k})] \right\} n(E) \quad \alpha = a, b ; i = 1, 2 \end{aligned} \quad (156)$$

$$\begin{aligned} I_{\alpha_i \beta_i}^{++}(\vec{k}, E) &= I_{\alpha_i \beta_i}^{--}(\vec{k}, E) = -\frac{\sigma^2}{2} \left\{ \frac{\gamma(\vec{k}) + |\gamma_z|}{E_1(\vec{k})} (\delta[E - E_1(\vec{k})] - \delta[E + E_1(\vec{k})]) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\gamma(\vec{k}) - |\gamma_z|}{E_2(\vec{k})} (\delta[E - E_2(\vec{k})] - \delta[E + E_2(\vec{k})]) \right\} n(E) \quad \alpha \neq \beta = a, b ; i = 1, 2 \end{aligned} \quad (157)$$

$$\begin{aligned} I_{\alpha_i \beta_j}^{++}(\vec{k}, E) &= (I_{\alpha_i \beta_i}^{--}(\vec{k}, E))^* = -\frac{\sigma^2 \gamma_z}{2|\gamma_z|} \left\{ \frac{\gamma(\vec{k}) + |\gamma_z|}{E_1(\vec{k})} (\delta[E - E_1(\vec{k})] - \delta[E + E_1(\vec{k})]) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\gamma(\vec{k}) - |\gamma_z|}{E_2(\vec{k})} (\delta[E - E_2(\vec{k})] - \delta[E + E_2(\vec{k})]) \right\} n(E) \quad \alpha \neq \beta = a, b ; i \neq j = 1, 2 \end{aligned} \quad (158)$$

gde je :  $n(E) = \frac{1}{e^{\frac{E}{\theta}} - 1}$  ;  $\theta = \frac{k_B T}{J}$ . Koristeći gornje korelacione funkcije, u mogućnosti smo da izračunamo energiju sistema (usrednjavanjem jednačine (151)) i relativnu magnetizaciju ( $\sigma_r = \frac{\langle S_n^z \rangle}{S}$ , koja je po intezitetu ista za svaku podrešetku).

$$\frac{\langle H \rangle}{J} = H_o + \sum_{\vec{k}} \Delta E_o(\vec{k}, \theta) + \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}, \theta) \quad (159)$$

$$\Delta E_o(\vec{k}, \theta) = -\sigma(\theta) [\epsilon - E_1^B(\vec{k}) - E_2^B(\vec{k}) + 2\tilde{\epsilon} - E_1(\vec{k}) - E_2(\vec{k})] \quad (160)$$

$$E(\vec{k}, \theta) = 2\sigma(\theta) \{ [E_1^B(\vec{k}) + E_1(\vec{k})] n(E_1(\vec{k})) + [E_2^B(\vec{k}) + E_2(\vec{k})] n(E_2(\vec{k})) \} \quad (161)$$

$$\sigma_r(\theta) = \frac{1}{S} \sigma(\theta) = \sigma_r(0) \frac{1}{1 + \sigma_r(0) F(\theta)} \quad (162)$$

$$\sigma_r(0) = \left[ \frac{\epsilon}{2N} \sum_{\vec{k}} \left( \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 - (\gamma(\vec{k}) + |\gamma_z|)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 - (\gamma(\vec{k}) - |\gamma_z|)^2}} \right) \right]^{-1} \quad (163)$$

$$F(\theta) = \frac{\tilde{\epsilon}}{N} \sum_{\vec{k}} \left[ \frac{1}{E_1(\vec{k})} n(E_1(\vec{k})) + \frac{1}{E_2(\vec{k})} n(E_2(\vec{k})) \right] \quad (164)$$

gde su  $E_{1/2}^B(\vec{k}) = \frac{1}{2} \sqrt{\epsilon^2 - (\gamma(\vec{k}) \pm |\gamma_z|)^2}$  energije u Blohovoj aproksimaciji,  $N$  je broj magnetnih elementarnih ćelija,  $\sigma_r(0)$  je relativna magnetizacija u osnovnom stanju ( $T = 0$ ),  $\Delta E_o(\vec{k}, \theta)$  je popravka na energiju osnovnog stanja, a  $E(\vec{k}, \theta)$  je energija sistema u prisustvu elementarnih eksitacija. Vidimo da izraz za energiju zavisi od magnetizacije, koja opet zavisi od temperature, te je gornji sistem jednačina samousaglašen. U tome i leži specifičnost spinskog prilaza. Ovi izrazi će biti osnova za dalja izračunavanja.

## 4.2 Bozonski prilaz

Za analizu osnovnog stanja i niskotemperaturnih osobina magnetnih sistema adekvatan prilaz je uvođenje Boze operatora. Uvođenjem Boze operatora u Blohovoj aproksimaciji, možemo napisati sledeći bozonski Hamiltonijan:

$$\frac{H^B}{J} = H_o + \sum_{\vec{k}} H_{\vec{k}} \quad (165)$$

$$H_{\vec{k}} = \sum_{i=1}^2 [\epsilon_a \hat{a}_i^+(\vec{k}) \hat{a}_i(\vec{k}) + \epsilon_b \hat{b}_i^+(\vec{k}) \hat{b}_i(\vec{k}) + \frac{\gamma(\vec{k})}{2} (\hat{a}_i^+(\vec{k}) \hat{b}_i^+(-\vec{k}) + h.c.)] + \\ + \frac{1}{2} [\gamma_z^* (\hat{a}_1(\vec{k}) \hat{b}_2^+(-\vec{k}) + \hat{b}_1^+(\vec{k}) \hat{a}_2(-\vec{k})) + h.c.] \quad (166)$$

Ovde  $a$  označava spinove usmerene na gore (up), dok  $b$  označava spinove usmerene na dole (down), a oznake 1 i 2 označavaju odgovarajuće ravni u bisloju. Ovo je bilinearni Hamiltonijan, koji može biti dijagonalizovan na dva načina: koristeći "u-v" transformaciju Bogoljubova-Tjablikova ili koristeći bozonske Grijnove funkcije. Obe metode očigledno vode do istih rezultata, koji su analogni rezultatima dobijenim korišćenjem spinskih GF. Zapravo, energije eksitacija  $E_{1/2}^B$  i energija sistema  $\langle H \rangle^B$  u bozonskoj aproksimaciji mogu se dobiti iz (155) i (159) direktnom zamenom  $\sigma \rightarrow S = \frac{1}{2}$ :

$$E_{1/2}^B = \frac{1}{2} \sqrt{\epsilon^2 - (\gamma(\vec{k}) \pm |\gamma_z|)^2} \quad (167)$$

$$\frac{\langle H \rangle^B}{J} = H_o + \sum_{\vec{k}} \Delta E_o^B(\vec{k}) + \sum_{\vec{k}} E^B(\vec{k}, \theta) \quad (168)$$

$$\Delta E_o^B(\vec{k}) = -(\varepsilon - E_1^B(\vec{k}) - E_2^B(\vec{k})) \quad (169)$$

$$E^B(\vec{k}, \theta) = 2E_1^B(\vec{k})n(E_1^B(\vec{k})) + 2E_2^B(\vec{k})n(E_2^B(\vec{k})) \quad (170)$$

Magnetizacija svake podrešetke u ovoj aproksimaciji data je relacijom:

$$\sigma^B = S - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle = \sigma_o^B - \Delta\sigma^B(\theta) \quad (171)$$

gde je

$$\sigma_o^B = 1 - \frac{\varepsilon}{4N} \sum_{\vec{k}} \left( \frac{1}{E_1^B(\vec{k})} + \frac{1}{E_2^B(\vec{k})} \right) \quad (172)$$

$$\Delta\sigma^B(\theta) = \frac{\varepsilon}{2N} \sum_{\vec{k}} \left( \frac{n(E_1^B(\vec{k}))}{E_1^B(\vec{k})} + \frac{n(E_2^B(\vec{k}))}{E_2^B(\vec{k})} \right) \quad (173)$$

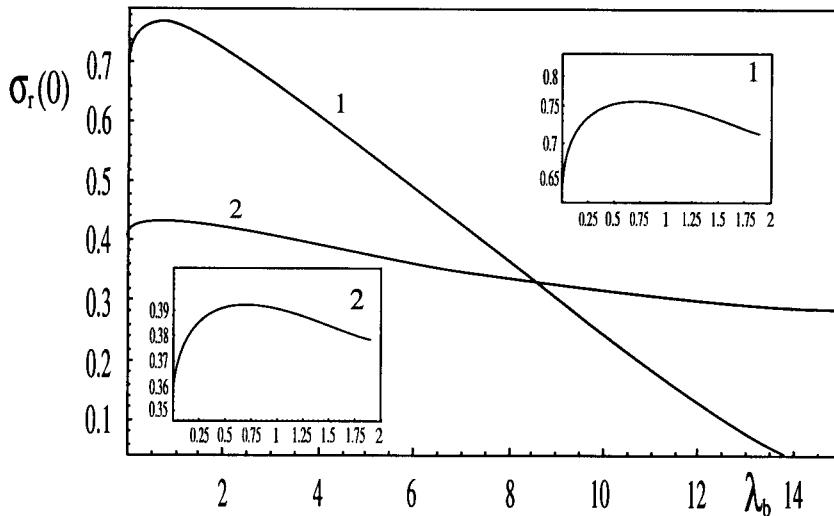
$\Delta E_o^B(\vec{k})$  je popravka na energiju osnovnog stanja u Blohovoj aproksimaciji,  $E^B(\vec{k}, \theta)$  je energija sistema,  $\sigma_B$  je relativna magnetizacija dobijena u bozonskom prilazu,  $\sigma_o^B$  je magnetizacija u osnovnom stanju, a  $\Delta\sigma^B(\theta)$  predstavlja promenu magnetizacije sa temperaturom. Vidimo da u bozonskom prilazu dobijamo izraze koji nisu samousaglašeni, što će, kako ćemo videti kasnije, voditi do rezultata koji nisu primenljivi čak ni u najnižem temperaturskom opsegu, kada se analizira prelaz 3D-2D.

### 4.3 Analiza rezultata

U ovom odeljku detaljnije ćemo analizirati rezultate dobijene korišćenjem dva različita pristupa, spinskog (RPA) i bozonskog. Najpre ćemo uporediti rezultate za osnovno stanje ( $T = 0K$ ). Poredimo  $\sigma_r(0)$  koje je dato jednačinom (163) za spinski formalizam i (172) u bozonskom formalizmu. Rezultati su sumirani na Slici 35 gde je prikazana zavisnost relativne magnetizacije podrešetke u zavisnosti od interakcije između dva sloja u jediničnoj ćeliji.

Pre svega, moramo podvući da se numeričke vrednosti magnetizacije za jedan bisloj (dvodimenzioni slučaj 2D) i superrešetku (trodimenzioni slučaj 3D) razlikuju samo u trećoj značajnoj cifri tako da se ne mogu razlikovati na crtežu. Iz tog razloga, slika prikazuje samo dve krive- jednu za spinski RPA pristup, a drugu za bozonski.

Analizirajmo ponašanje relativne magnetizacije za male vrednosti  $\lambda_b$ , koje je slično za oba slučaja i prikazano je kao uvećani deo na Slici 36. Porast  $\lambda_b$  vodi do pojačanja antiferomagnetskog uređenja ( $\sigma(0)$  raste), dok ne dostigne maksimalnu vrednost za  $\lambda_b \approx 1$ . Daljim povećanjem  $\lambda_b$ , magnetizacija počinje da opada i tu se rezultati bitno razlikuju. Može se videti da u okviru bozonskog prilaza,



Slika 35: Relativna magnetizacija podrešetki u osnovnom stanju: 1 – bozonski prilaz, 2 – spinski RPA prilaz.

dugodometno uređenje (long range order (LRO)) na  $T = 0$  uvek nestaje za jako sparivanje unutar ćelije (ovo se u izvesnom stepenu slaže sa rezultatima Hida [36] gde LRO nestaje za  $\lambda_b \approx 7$ ). S druge strane, u okviru spinskog prilaza, LRO nikada ne nestaje, nego asymptotski teži nuli za veoma velike vrednosti  $\lambda_b$ . Ovo implicira da prema bozonskom prilazu, kvantne fluktuacije za  $\lambda_b \geq 10$  mogu uništiti LRO u ravni, dok se prema spinskom to praktično nikada ne dešava. Formalni razlog za ovo neslaganje leži u činjenici da bozonski izrazi daju grublju aproksimaciju u odnosu na RPA. Matsuda i Hida (Matsuda,Hida) [35] su razmatrali osnovno stanje i elementarne ekscitacije AF bislojeva, koristeći za spinske operatore Blohovu aproksimaciju. Sve interakcije u spinskem prostoru su izotropne, a postoje tri različita sparivanja: jedna za svaku ravan i jedna između ravnih. Oni su pokušali da nestanak LRO objasnjuju formiranjem singletnih stanja koja se sastoje od spinova koji pripadaju susednim ravnim, povezujući ovo sa ulogom spinskih fluktuacija u formiranju parova u visokotemperaturskim superprovodnicima [53, 54]. Nadalje je, Hida [36] proučavao nisko-temperaturske osobine ovih sistema primenjujući Dajson-Malejevu (Dyson - Maleev (DM)) bozonsku reprezentaciju. Dekuplovanjem nelinearnih bozonskih članova na MF način, on uglavnom potvrđuje rezultate Matsude i Hida [35].

Naši rezultati, koji ne ukazuju na nestanak LRO, ipak ne isključuju ovaj mehanizam sparivanja u superprovodnoj fazi, pošto oni važe samo za AF fazu visoko-temperaturskih kuprata ( $x < 0.41$  za  $(1 : 2 : 3)$ ). Poznato je (videti npr.[52]) da se u superprovodnoj fazi, zbog veće koncentracije šupljina, u Hamiltonijanu siste-

$\eta$								
$10^{-4}$				0				
$\lambda_b$	$\lambda'$	$J[\text{meV}]$	$T_N[\text{K}]$	$\lambda_b$	$\lambda'$	$J[\text{meV}]$	$T_N[\text{K}]$	
$10^{-2}$	$10^{-6}$	80	313.004	$10^{-2}$	$10^{-7}$	80	210.964	3D
$10^{-2}$	$10^{-5}$	80	313.383	$10^{-2}$	$10^{-5}$	80	253.143	
$5 \times 10^{-2}$	$10^{-5}$	80	343.595	$5 \times 10^{-2}$	$10^{-5}$	80	272.705	
$10^{-2}$	$10^{-6}$	100	391.255	$10^{-2}$	$10^{-7}$	100	263.70	
$10^{-2}$	$10^{-5}$	100	391.728	$10^{-2}$	$10^{-5}$	100	316.428	
$5 \times 10^{-2}$	$10^{-5}$	100	429.494	$5 \times 10^{-2}$	$10^{-5}$	100	340.88	
$10^{-2}$	$10^{-6}$	120	469.506	$10^{-2}$	$10^{-7}$	120	316.446	
$10^{-2}$	$10^{-5}$	120	470.074	$10^{-2}$	$10^{-5}$	120	379.714	
$5 \times 10^{-2}$	$10^{-5}$	120	515.392	$5 \times 10^{-2}$	$10^{-5}$	120	409.057	
$10^{-2}$	0	80	312.961					2D
$5 \times 10^{-2}$	0	80	343.096					
$10^{-2}$	0	100	391.20					
$5 \times 10^{-2}$	0	100	428.87					
$10^{-2}$	0	120	469.442					
$5 \times 10^{-2}$	0	120	514.644					

Tabela 1: Zavisnost temperature prelaza od parametara sistema.

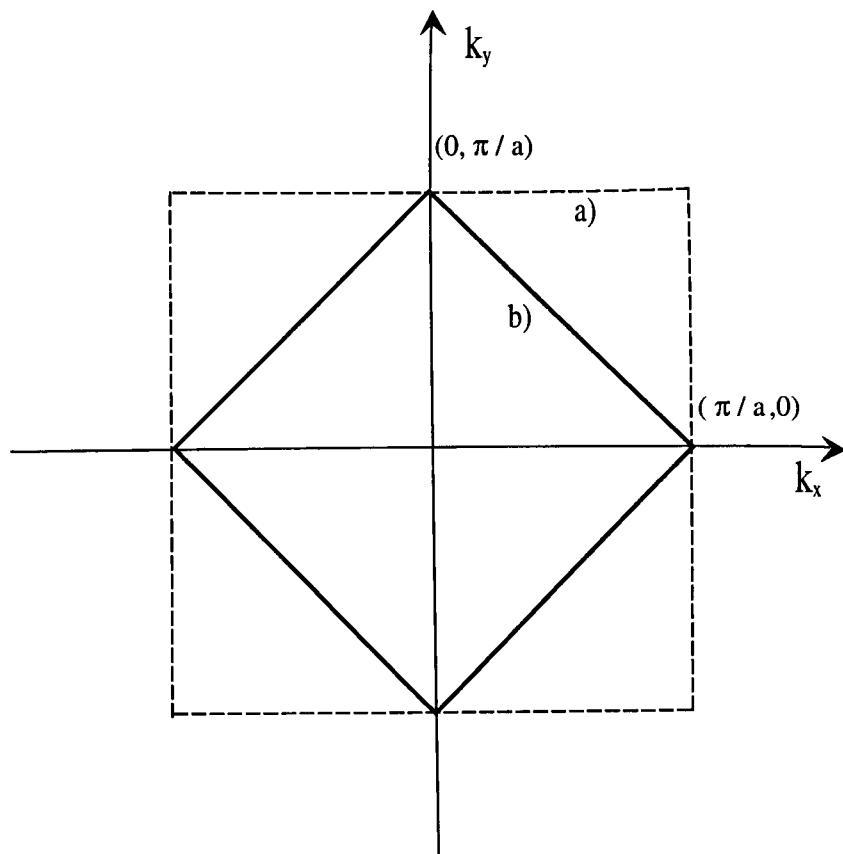
ma mora uzeti u obzir i interakcija šupljina i spinova (t-J model), što usložnjava teorijsku analizu osobina HTC-superprovodnika pa i samog mehanizma stvaranja kuperovih parova, ali to nije tema ove disertacije. Napomenimo na kraju ove analize magnetizacije na  $T = 0$ , da analogno ponašanje u 2D i 3D slučaju ukazuje da su kvantne fluktuacije unutar ravni dominantne.

U drugom graničnom slučaju u okolini faznog prelaza, diskutovaćemo samo rezultate RPA prilaza. Kao što su pokazali Irkin *i dr.* [44], bozonska aproksimacija nije odgovarajuća u ovom temperaturskom intervalu. Izraz za  $\theta_N$  se u okviru RPA aproksimacije može dobiti iz (162) u limesu  $\sigma \rightarrow 0$ .

$$\theta_N = \frac{J}{C_1 + C_2} \quad ; \quad C_{1/2} = \frac{2\epsilon}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\epsilon^2 - (\gamma(\vec{k}) \pm |\gamma_z|)^2} \quad (174)$$

Prvo ćemo numerički analizirati ovaj izraz za niz parametara relevantnih za visoko-temperaturske kuprate ((1 : 2 : 3)), koji se navode u literaturi [50, 51, 55, 56, 57]. Ova analiza ukazuje na odlučujući uticaj parametra anizotropije unutar ravni  $g = 1 + \eta$  na veličinu  $\theta_N$ . Sve dok je  $\eta \neq 0$ , za oba slučaja, dvodimenzionalni ( $\lambda' = 0$ )

i trodimenzioni, vrednosti Nelove temperature  $\theta_N$  (za date vrednosti  $J$  i  $\lambda_b$ ) su praktično iste, kao što se vidi u levom delu Tabele 1. Konkretno za sistem  $(1 : 2 : 3)$ , čiji su parametri (za  $x = 0$ )  $J \approx 100\text{meV}$ ,  $\lambda_b = 5 \times 10^{-2}$  i  $\lambda' = 10^{-5}$  dobija se  $\theta_N \approx 429K$  (u 3D) odnosno  $\theta_N \approx 428$  (u 2D), što predstavlja dobro slaganje sa eksperimentalnom vrednošću  $\theta_N \approx 415K$  [50, 55]. U trodimenzionom slučaju, može se posmatrati i izotropni sistem ( $g = 1$ ), zadržavajući iste vrednosti parametara  $\lambda, \lambda'$ . Vrednosti  $\theta_N$  su tada mnogo niže kao što se vidi u desnom delu Tabele 1., gde je konkretno za sistem  $(1 : 2 : 3)$   $\theta_N \approx 340K$ . Ovo implicira da nasuprot



Slika 36: Oblik dvodimenzione I Briluenove zone za a) feromagnet i b) antiferomagnet.

opštim tvrđenjima, trodimenzionalnost nije ključna za antiferomagnetsko uređenje u sistemu, nego spinska anizotropija unutar ravni ( $\eta \neq 0$ ). Mnogi autori smatraju da dvodimenzione spinske fluktuacije igraju osnovnu ulogu i u superprovodnoj fazi [52, 53, 54]. Ovo tvrđenje podržava i činjenica da je AF fazni prelaz u sistemu  $(1 : 2 : 3)$  za  $x = 0$  na temperaturi  $415 \pm 5K$ , drugog reda, sa kritičnim eksponentom

za magnetizaciju  $\beta = 0.25 \pm 0.03$ , što je karakteristika 2D AF sistema [50].

Na prvi pogled može izgledati čudno da male konačne vrednosti spinske anizotropije unutar ravni ( $\eta \neq 0$ ) tako bitno utiču na  $T_N$ . Ovo možemo objasniti počevši od 2D slučaja. Ako se pogleda izraz (174) vidimo da integral  $C_{1/2}$  bitno zavisi od anizotropije unutar ravni. Kada je  $g = 1$ , član  $\epsilon$  tačno poništava doprinos  $\gamma(\vec{k})$  za  $\vec{k} \rightarrow 0$ , što dovodi do divergencije  $C_1$  i  $T_N \rightarrow 0$ . Dakle,  $g \neq 1 (\eta \neq 0)$  očuvava konvergenciju integrala (slična situacija se pojavljuje i u dokazu Mermin-Vagnerove teoreme [19, 42]). Isto rezonovanje se može primeniti na 3D slučaj. Ovde je konvergencija obezbeđena i za  $g = 1$ , ipak uticaj  $\eta$  na vrednost integrala i u ovom slučaju je dominantan.

Na kraju želimo da ukažemo na jedan problem koji se često pojavljuje u literaturi, a u vezi je sa jednim važnim tehničkim detaljem prilikom integracije po I BZ. U dvodimenzionom slučaju, integracija po prvoj Briluenovoj zoni (I BZ) je često uzeta u granicama  $(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a})$  za  $k_x$  i  $k_y$ , i za feromagnet i za antiferomagnet sa prostom kubnom strukturom. Tačne granice integracije su diktirane oblikom I BZ koja je data na Slici 36 za feromagnetički i antiferomagnetički. Vidi se da ne samo da je AF I BZ upola manja, nego i da se moraju uzeti u obzir promenljive granice. Na primer u I kvadrantu (za AF) granice su  $0 \leq k_x \leq \frac{\pi}{a}$  i  $0 \leq k_y \leq \frac{\pi}{a} - k_x$ . Tipičan primer ovakve greške je rad Singa (Singh) *et al.* [58]. Na prvi pogled autori dobijaju izuzetno dobro slaganje između teorijskih i eksperimentalnih rezultata, posebno za slučaj temperature prelaza  $T_N$  (za sistem  $(1 : 2 : 3)$ ) i bez prisustva spinske anizotropije.

Mi smo pokazali da se takvo slaganje ne može postići u odsustvu spinske anizotropije (za  $g = 1$ , videti Tabelu 1). Slaganje u pomenutom radu [58], je posledica činjenice da je u integralu  $I(r)$  (koji definiše  $T_N$  slično kao i integrali  $C_{1/2}$ ) uzeta manja zapremina jedinične celije,  $V = a^2 c$  umesto ispravne vrednosti  $V = 4a^2 c$ . Ovo je kombinovano sa netačnim granicama integracije, tako da je prava vrednost integrala dva puta veća, a temperatura prelaza koja sledi iz njihovih procena u stvari dva puta manja.

U oblasti niskih temperatura možemo uporediti izraze za energiju i magnetizaciju, dobijene u dva različita prilaza. Takođe se može napraviti poređenje sa rezultatima koji se javljaju u literaturi. Opšti izrazi su sumirani u (159), (162) za spinove i (168), (171) za bozone.

Već smo pokazali ključnu ulogu magnetne anizotropije. Ipak, pre nego što damo neke detalje, komentarisaćemo različite manifestacije anizotropije. Naš pristup uključuje dva tipa anizotropije: jedna je anizotropija u spiskom prostoru (prosto: spinska anizotropija) i ovde se javlja kao anizotropija unutar ravni  $xxz$  tipa. S druge strane, pojavljuje se takođe i takozvana "prostorna anizotropija"

[59] pošto se integrali izmene unutar i između slojeva razlikuju. Razlika između dva tipa anizotropije je ključna: prostorna anizotropija ne utiče na postojanje akustičkih grana (Goldstonov mod:  $\lim_{k \rightarrow 0} E(k) = 0$ ), i energijski gep ove grane se pojavljuje samo kao posledica spinske anizotropije. U prethodnoj glavi rada smo pokazali da i kod složenih magnetnih sistema sa više podrešetki i magnetnih superrešetki, prostorna anizotropija ne utiče na postojanje akustičkih grana. I kod ovih sistema samo spinska anizotropija utiče na pojavu energetskog gепа, a prostorna anizotropija dovodi do fenomena kao što su dimenzionalni krossover. Ipak, neki autori, kao na primer Pratap *i dr.* [48], uvodeći prostornu anizotropiju dobijaju gep za akustičku granu u jednom bisloju, što je definitivno netačan rezultat.

Prvo ćemo analizirati sistem koji se sastoji od jednog bisloja ( $\lambda' = 0, k_z = 0$ ) tj. 2D slučaj. Zakon disperzije spinskih talasa u bozonskom slučaju postaje:

$$E_{1/2}^B(\vec{k}) = \frac{1}{2} \sqrt{(4g + \lambda_b)^2 - (\gamma(\vec{k}) \pm \lambda_b)^2} \quad (175)$$

Zbog spinske anizotropije obe grane poseduju gep u dugotalasnom limesu:

$$E_{1/2}^B(0) \equiv \Delta_{1/2}^2 = 4(g \mp 1)[2(g \pm 1) + \lambda_b] \quad (176)$$

U najnižem temperaturskom opsegu, tj.  $0 < \theta < \Delta_1$ , promena magnetizacije sa temperaturom je data relacijom:

$$\Delta\sigma^B(\theta) = -\frac{4g + \lambda_b}{\pi(4 + \lambda_b)} \theta \ln(1 - e^{-\frac{\Delta_1}{\theta}}) + O(e^{-\frac{\Delta_2}{\theta}}) \quad (177)$$

Na ovom mestu moramo istaći da se u literaturi često daju pogrešni izrazi za  $\Delta\sigma(\theta)$  u 2D. Tako, na primer, nedavno su Pratap *i dr.* [48] u najnižem temperaturskom opsegu dobili (zbog pogrešne integracije po  $k_z$ ) kvadratnu temperatursku zavisnost, karakterističnu za trodimenzionalni AF (kao što će biti kasnije pokazano). U temperaturskom opsegu  $\Delta_1 < \theta < \Delta_2$  magnetizacija ima oblik:

$$\Delta\sigma^B(\theta) = \frac{4g + \lambda_b}{\pi(4 + \lambda_b)} \theta \ln \frac{\theta}{\Delta_1} + O(e^{-\frac{\Delta_2}{\theta}}), \quad (178)$$

dok za  $\Delta_2 < \theta < \theta_N$  dobijamo:

$$\Delta\sigma^B(\theta) = \frac{4g + \lambda_b}{\pi(4 + \lambda_b)} \theta \ln \frac{\theta}{\Delta_1} + \frac{4g + \lambda_b}{\pi(4 - \lambda_b)} \theta \ln \frac{\theta}{\Delta_2}. \quad (179)$$

Ovakvo ponašanje magnetizacije ( $\sim \theta \ln \theta$ ), na niskim temperaturama, u literaturi se tretira kao karakteristično ponašanje za anizotropni 2D magnetik (fero i antiferio). Potrebno je ipak istaći da se magnetizacija 2D magnetika na najnižim

temperaturama menja prema relaciji (177) i samo za temperature  $\theta > \Delta_1$ , gde važi aproksimacija  $e^{-\frac{\Delta_1}{\theta}} \approx 1 - \frac{\Delta_1}{\theta}$  dobijamo zakonitost datu relacijama (178) i (179). Sada ćemo analizirati energiju izotropnog bisloja ( $g = 1$ ). U ovom slučaju jedna energijska grana ( $E_1^B$ ) nema gep (Goldstonov mod), i ona u osnovi karakteriše termodinamičke osobine sistema na niskim temperaturama. Relativno jednostavan račun daje:

$$\langle H \rangle = N \frac{16J\zeta(3)}{\pi(4 + \lambda_b)} \theta^3 + N \frac{32J\lambda_b}{\pi(4 - \lambda_b)} \theta \exp\left(-\frac{2\sqrt{\lambda_b}}{\theta}\right) \quad (180)$$

gde je  $\zeta(3)$  Rimanova (Rieman) funkcija. Konačno ispišimo izraz za  $C_v = \frac{d\langle H \rangle}{dT}$

$$C_v = N \frac{48k_B\zeta(3)}{\pi(4 + \lambda_b)} \theta^2 + NO(e^{-\frac{2\sqrt{\lambda_b}}{\theta}}) \quad (181)$$

Drugi član eksponencijalno opada na niskim temperaturama, tako da može biti zanemaren (ovi rezultati se bitno razlikuju od odgovarajućih (30), (31) u [48]).

Nastavljamo dalje sa 3D slučajem, tj. superrešetkom koja se prostire beskonačno duž  $z$ -pravca. Energije ekscitacija su date sa:

$$E_{1/2}^B(\vec{k}) = \frac{1}{2} \sqrt{(4g + \lambda_b + \lambda')^2 - [\gamma(\vec{k}) \pm ((\lambda_b + \lambda')^2 - 2\lambda_b\lambda'(1 - \cos k_z c_o))^{1/2}]^2} \quad (182)$$

gde je  $c_o = d_1 + d_2$  konstanta rešetke u  $z$ -pravcu. Važno je primetiti da za superrešetu formiranu od bislojeva, članovi sa interakcijom unutar sloja ( $\lambda_b$ ) i između slojeva ( $\lambda'$ ) ulaze u sve izraze na apsolutno simetričan način. Dalja analiza odnosiće se samo na izotropan slučaj ( $g = 1$ ), gde je  $E_1^B$  Goldstonov mod, dok  $E_2^B$  poseduje gep. U najnižem temperaturskom opsegu,  $0 \leq \theta \leq \min[\lambda_b, \lambda']$ , izraz (173) daje:

$$\Delta\sigma^B(\theta) = \frac{1}{6} \sqrt{\frac{\lambda_b + \lambda'}{\varepsilon\lambda_b\lambda'}} \theta^2 + O(e^{-\frac{\Delta_2}{\theta}}) ; \quad \Delta_2 = 2\sqrt{\lambda_b + \lambda'} \quad (183)$$

Zavisnost magnetizacije od kvadrata temperature ( $\sim \theta^2$ ) je tipično ponašanje za 3D AF. Međutim u temperaturskom opsegu koji je definisan interakcijama između slojeva  $\min[\lambda_b, \lambda'] \leq \theta \ll \theta_N$  (tj. prostornom anizotropijom) za  $\Delta\sigma$  se dobija:

$$\Delta\sigma^B(\theta) \approx \frac{1}{2\pi} \theta \ln \left[ \theta \left( \frac{4(\lambda_b + \lambda')}{\varepsilon\lambda_b\lambda'} \right)^{1/2} \right] \quad (184)$$

Vidimo da smo dobili  $\Delta\sigma \sim \theta \ln \theta$ , što je tipično za 2D magnetike (178) tako da možemo govoriti o 3D → 2D krosoveru kao posledici prostorne anizotropije. Iako sparivanja  $\lambda$  i  $\lambda'$  u prethodni izraz ulaze potpuno simetrično, ako se njihov red veličine bitno razlikuje, očigledno se javlja asimetrija. Na primer, u (1 : 2 : 3) strukturama gde je  $\lambda_b >> \lambda' (\lambda' \approx 10^{-2} \lambda_b)$ , imamo:

$$\Delta\sigma^B(\theta) \approx \frac{1}{2\pi} \theta \ln [2\theta \frac{1}{(\varepsilon\lambda')^{1/2}}] \quad (185)$$

tako da slabije sparivanje između slojeva  $\lambda'$  određuje 2D ponašanje.

Na kraju navedimo rezultate RPA pristupa. U prisustvu anizotropije unutar ravni ( $g \neq 1$ ), obe grane energijskih ekscitacija poseduju gep:

$$E_{1/2}(0) = \Delta_{1/2}^2 = 8(g \mp 1)[2(g \pm 1) + \lambda_b + \lambda'] \quad (186)$$

tako da je osnovna temperaturska zavisnost magnetizacije na niskim temperaturama eksponencijalna  $\approx \exp(-\Delta_{1/2}/\theta)$ . Ovaj slučaj neće biti detaljno analiziran. U izotropnom režimu ( $g = 1$ ), u najnižem temperaturskom opsegu, izraz za  $\Delta\sigma(T)$  je:

$$\Delta\sigma(\theta) = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{\lambda_b + \lambda'}{\varepsilon\lambda_b\lambda'}} \theta^2 + O(e^{-\frac{\sigma_r(0)\Delta_2}{\theta}}) \quad (187)$$

što se razlikuje od (183) samo za faktor 2. Ova razlika sledi iz različitih postupaka izračunavanja magnetizacije. U spiskom pristupu je (za razliku od bozonskog), magnetizacija određena na samousaglašen način. Važno je napomenuti da se iz izraza (162) vidi da je za  $g = 1$  na  $T \geq 0$  u 2D, RP aproksimacija u saglasnosti sa Mermin-Vagnerovom teoremom, jer izraz za  $F(\theta)$  u (164) divergira što daje  $\sigma = 0$ , za  $T \neq 0$ . S druge strane, bozonski rezultati (171-173) imaju isti taj integral koji se dodaje, pa  $\sigma$  formalno divergira. To je dobra provera validnosti oba pristupa, te zaključujemo da bozonska aproksimacija, čak i na veoma niskim temperaturama ne daje adekvatne rezultate u 2D.

U opsegu  $\min[\lambda_b, \lambda'] \leq \theta \ll \theta_N$ , i ovde se javlja krosover, tako da dobijamo:

$$\Delta\sigma_r(\theta) = \frac{\sigma_r(0)}{\pi} \theta \ln [\theta \sigma_r(0) \left( \frac{4(\lambda_b + \lambda')}{\varepsilon\lambda_b\lambda'} \right)^{1/2}] \quad (188)$$

Ovo se razlikuje od bozonskog izraza (184), ne samo za numerički faktor 2, nego i prisustvom  $\sigma_r(0)$ , koje je opet posledica samousaglašene aproksimacije.

Izrazi za energiju sistema će biti ključno različiti, zbog prisustva magnetizacije koja zavisi od temperature u izrazima za energiju (160) i (161). Čak i popravka na energiju osnovnog stanja  $\Delta E_o$  ne nestaje za  $T \neq 0$ , nego se menja na

sličan način kao magnetizacija. Zapravo, ta korekcija diktira nisko-temperatursko ponašanje energije i kvadratna je funkcija temperature, tako da je  $C_v \approx \theta$ . Ovo ponašanje je potpuno drugačije u odnosu na ponašanje energije bozonskog sistema ( $\langle H \rangle \sim \theta^4, C_v \sim \theta^3$ ) i to je posledica činjenice da tačniji pristup spinskoj statistici (u smislu Tjablikovskog dekuplovanja) reflektuje fermijonsku prirodu spinskih ( $S = \frac{1}{2}$ ) operatora koji deluju na istom čvoru.

Cilj ove glave je bio prikaz sličnosti i razlika rezultata dobijenih iz razmatranja magnetnih AF bisloja u bozonskoj i RPA-spinskoj aproksimaciji i istovremeno da ukaže na raličite loše interpretacije koje se javljaju u nekim posebnim primenama. Jedan od naših osnovnih rezultata pri primeni na spinski sistem koji se javlja u  $(1 : 2 : 3)$  strukturama, je da u antiferomagnetnoj fazi ( $x < 0.4$ ), anizotropija u ravni i dvodimenzionalne spiske fluktacije igraju važnu ulogu u definisanju magnetnih karakteristika sistema [60]. U spinskem prilazu, rezultati su u skladu sa Mermin-Vagnerovom teoremom, dok u bozonskom slučaju u 2D takvo slaganje ne postoji. Na kraju je potrebno istaći da se naši rezultati ne mogu lako ekstrapolirati na superprovodnu fazu, jer je tu potrebno uzeti u obzir i interakciju sa šupljinama, ali u svakom slučaju ukazuju na značaj 2D spisksih fluktacija.



## 5 Zaključak

U ovom poglavlju ćemo analizirati rezultate izložene u prethodne četiri glave rada.

Cilj ovog rada je bio proučavanje dinamičkih i termodinamičkih osobina magnetnih sistema sa složenim magnetnim strukturama, koji su interesantni kako sa čisto teorijskog aspekta, tako i zbog velike primene pomenutih magnetnih sistema u veoma širokom dijapazonu tehnologije: od mikroelektronike do jakih magnetika.

U prvoj glavi rada detaljno je proučen spektar površinskih spinskih talasa ferimagnetika. U dosadašnjoj literaturi značajna pažnja je posvećena analizi površinskih spinskih talasa feromagnetika i antiferomagnetika [15, 16, 19, 20, 21], dok je teorija spinskih talasa ferimagnetika slabo proučavana. Razlog za ovo je prilično komplikovana struktura rešetke ferimagnetika, koja je sačinjena od više podrešetki, kao i neekvivalentnost podrešetki u magnetnom smislu. S druge strane u pogledu praktične primene mnogi magnetni materijali su ferimagneticni.  $MnZn$ ,  $NiZn$ ,  $BaFe_{12}O_9$ ,  $CuFe_2O_4$  su samo neki od materijala ferimagnetne strukture, koji zahvaljujući dobrim magnetnim osobinama, imaju višestruku primenu, pre svega kao nosači informacija [61, 62]. Koristeći pojednostavljen metod jednačina kretanja, našli smo analitičko rešenje u zatvorenoj formi za energije i atenuacione koeficijente lokalizovanih moda u zavisnosti od parametara sistema u Hajzenbergovom ferimagnetiku sa dve podrešetke. Za razliku od antiferomagnetika, gde je pokazano da je energija dve grane zapreminske spinskih talasa degenerisana [15, 16, 21], kod ferimagnetika to nije slučaj. Pošto dve podrešetke u ferimagnetiku nisu ekvivalentne, dobili smo dve zapremske energijske zone i takođe jednu granu površinskih ekscitacija pridružene svakoj zapremskoj zoni. Ove grane površinskih ekscitacija mogu biti ili optičke ili akustičke, u zavisnosti od odnosa površinskog i zapremskog integrala izmene  $\eta = \frac{J_S}{J}$ . Zaključak je da akustički površinski spinski talasi postoje u celoj BZ za  $\eta < 1$ , što je slično feromagnetiku. Naši rezultati uključuju i specijalan slučaj čisto geometrijskog efekta površine (takozvana slobodna površina  $\eta = 1$ ), što je omogućilo poređenje sa drugom literaturom.

Proučavanje kolektivnih ekscitacija u magnetnim superrešetkama, u kojima se javlja diskontinuitet, tj. narušena je translatorna invarijantnost duž nekog pravca, otvorilo je mogućnost proizvodnje novih materijala kod kojih je moguće kontrolisati magnetne i elektromagnetne osobine. Iz tog razloga odlučili smo se da

u sledećoj glavi rada teorijski analiziramo elementarne ekscitacije u feromagneti-  
nim superrešetkama koristeći metod transfer matrice. Naša ideja je bila uopštiti  
metod primenjen u Barnasovom radu [11], da bi omogućili razmatranje slučajeva  
kada se granice ne sastoje od jedne ravni, nego cele celije. Analizirali smo polu-  
beskonačnu superrešetku, dve superrešetke koje su u kontaktu i višeslojne struk-  
ture (filmovi). Pokazano je da izbor transfer matrice jako zavisi od translatorne  
simetrije preostalog dela sistema. Izveli smo energije lokalizovanih ekscitacija  
i uporedili ih sa zapreminskim, kao i sa rezultatima standardnog prilaza transfer  
matrice [11]. Za iste vrednosti parametara sistema dobili smo različite numeričke  
vrednosti energije u poređenju sa rezultatima Barnasa, pa čak i neke grane kojih  
nema u njegovom prilazu. Takođe smo uveli poseban Ansatz za spinske amplitude,  
koji u kombinaciji sa metodom transfer matrice vode do velikih pojednostavljenja  
prilikom računanja. Kao što je podvučeno, ove dve metode su potpuno nezavisne,  
te svaka primenjena na odgovarajući problem vodi do istih rezultata, no, njihova  
kombinacija se pokazuje kao mnogo efikasnija.

U trećoj glavi rada detaljno smo proučili elementarne ekscitacije i niskotem-  
peratursko ponašanje sistema sa više podrešetki i magnetnih superrešetki, sa izra-  
ženom prostornom anizotropijom, a u odsustvu spinske anizotropije. S obzirom  
da se u literaturi veoma često uloga prostorne anizotropije tumači pogrešno, anal-  
izirali smo njen uticaj na ponašanje sistema. Pokazali smo da ukoliko nije prisutno  
spoljašnje polje ili spinska anizotropija, sistemi sa prostornom anizotropijom se  
ponašaju kao izotropni Hajzenbergovi magnetici, odnosno, da se ne mogu pojaviti  
nekolinearne spinske konfiguracije, niti spinska reorientacija. Ipak, ovakvi sis-  
temi su interesantni za proučavanje efekta kao što je dimenzioni prelazak iz 3D u  
2D.

Osnovne osobine nisko-temperaturskog ponašanja (devijacije u osnovnom sta-  
nju, zavisnost magnetizacije od temperature, unutrašnja energija i specifična toplo-  
ta), mogu se dobiti koristeći dve metode: metod Grinovih funkcija u Holštajn-Pri-  
makovoj (Holstein-Primakoff) aproksimaciji [28] ili dijagonalizacijom bozonskog  
Hamiltonijana koristeći Bogoliubov-Tjablikovu " $u - v$ " transformaciju [29, 30].  
Posle proučavanja sistema sa više podrešetki, pokazuje se da se za feromagnete  
uvek javlja onoliko grana koliko je podrešetki, od kojih je jedna Goldstonov mod  
odgovoran za ponašanje na niskim temperaturama. Osnovno niskotemperatursko  
ponašanje antiferomagnetika sa četiri podrešetke je isto kao i ponašanje antifero-  
magnetika sa dve podrešetke, tj. a) dugodometno uređenje na  $T = 0K$  postoji za  
 $d = 2$  i  $d = 3$ ; b) magnetizacija podrešetke postoji na konačnim temperaturama  
samo za  $d = 3$  i ponaša se kao  $T^2$ . Kada je prisutno spoljašnje polje pojavljuju se  
četiri različite energije, dok se u odsustvu polja javlja degeneracija, tj. dve duplo

degenerisane grane. Takođe smo za ovaj slučaj analizirali temperature prelaza u zavisnosti od FM i AF parametara interakcije. Numerički rezultati ukazuju da je u slučaju kada su ove interakcije iste, temperatura prelaza za dva reda veličine veća nego u slučaju kada jedna od interakcija nestaje. Ovi rezultati bi mogli biti osnova za ispitivanje efekta perkolacije. Za superrešetke sa motivom od četiri ravni, pokazali smo da se uvek javlja Goldstonov mod kao posledica spinske izotropije interakcija. S druge strane, jako međuravansko AF sparivanje dovodi do velikih kvantnih spinskih fluktuacija, koje mogu da unište dugodometno feromagnetno uređenje unutar ravni.

U poslednjem delu treće glave smo u okviru MF teorije, za sisteme sa tri i četiri podrešetke, kao i superrešetke ispitali mogućnost pojavljivanja dve temperature kompenzacije. Pokazano je da se za strukturu sa četiri podrešetke sa antiferomagnetskim interakcijama, za odgovarajući izbor interakcija izmene javljaju dve temperature kompenzacije, dok u strukturi sa tri podrešetke nijedan set parametara ne vodi do dve tačke kompenzacije. S druge strane, ista teorija primenjena na superrešetku sa celijom od tri ili četiri sloja, ukazuje da se dve kompenzacione tačke javljaju za širi izbor parametara. Konačno treba nešto reći i o opravdanosti korišćenja MF teorije. Ne postoji problem u slučaju sistema sa više podrešetki (rad [6] jasno ukazuje na to), pošto su to tipični trodimenzionalni primeri gde MFA daje verodostojne rezultate (osim u blizini  $T_c$ , što nije od interesa ovde). Problem se može pojaviti pri proučavanju superrešetki, pošto smo smatrali da radimo sa feromagnetno uređenim (dvodimenzionim) slojevima koji su onda spareni feromagnetno ili antiferomagnetno. Dobro je poznato da nema čisto dvodimenzionog feromagnetizma [42], ali upravo sparivanje između slojeva (ma koliko malo bilo) omogućuje u našem modelu dugodometno uređenje u svakoj ravni, na  $T \neq 0$ .

Potrebno je ipak istaći, da u limesu jakog antiferomagnetskog sparivanja između slojeva ( $|J_\alpha| \gg I_\alpha$ ), dugodometno feromagnetno uređenje može biti uništeno mogućnošću formiranja singleta u susednim položajima dva sloja. Mi ovde nismo razmatrali tako ekstremne slučajeve, tako da sa teorijske tačke gledišta, smatramo da naši rezultati indiciraju mogućnost konstrukcije takvih materijala.

U poslednjoj glavi rada teorijski su proučavani AF sistemi koji se sastoje od antiferomagnetno kuplovanih bislojeva (kao oni koji se sreću u visokotemperaturskim kupratima (1:2:3)) i to koristeći dva pristupa: bozonski i spinski (na niskim temperaturama). Cilj je bio izučavanje osobina AF uređenih bislojeva koji mogu da se uporede sa eksperimentom. Detaljno su analizirane sličnosti i razlike ekscitacione energije, unutrašnje energije i magnetizacije nastale usled primene različitih prilaza, kao i poređenje naših rezultata sa postojećom literaturom. Rezultati spinske aproksimacije za temperaturu prelaza antiferomagnetika su analizirani

u zavisnosti od spinske (u ravni) i prostorne anizotropije. Zaključak je da spinska anizotropija igra jako značajn u definisanju magnetnih osobina tih sistema. Takođe je podvućeno da se naši rezultati ne mogu lako ekstrapolirati na superprovodnu fazu. Pokazano je da je Tjablikovska aproksimacija za Hajzenbergov model, iako veoma jednostavna, u skalu sa Mermin-Vagnerovom teoremom u celom temperaturskom intervalu  $0 \leq T \leq T_N$ .

## A Prvi prilog

Koeficijenti jednačine (19), u prvoj glavi rada, su dati kao :

$$a_0 = \alpha d_4^2 \omega_k^2 + d_3^2;$$

$$a_1 = 2d_3(d_1 + d_2 + 2\alpha) - (\Omega_a - \Omega_b)d_3d_4;$$

$$a_2 = d_4^2(-\Omega_a\Omega_b - 2\alpha\omega_k^2 + 4\alpha) + (d_2 + d_1)^2 - (\Omega_a - \Omega_b)d_4(d_2 + d_1 + 2\alpha) + 2d_3(d_1 - d_3) + 4\alpha(\alpha + d_1 + d_2 - d_3);$$

$$a_3 = 2d_1^2 - 8\alpha^2 + 2d_1d_2 - 2d_1d_3 - d_4(\Omega_a - \Omega_b)(2\alpha + 2d_3 - d_1) - 4\alpha(2\alpha + d_2 + d_3) + 2d_1(d_2 - d_3) + 2d_1^2 - 4d_2d_3;$$

$$a_4 = d_4^2(\alpha\omega_k^2 - 4\alpha + 2\Omega_a\Omega_b) + d_4(\Omega_a - \Omega_b)(2d_2 + d_1 + 2\alpha) + (d_1 - d_3)^2 + 4\alpha(\alpha - d_1 - d_2 + d_3) + 2d_2(d_1 - d_2);$$

$$a_5 = d_4(\Omega_a - \Omega_b)(d_1 - d_3 - 2\alpha) + 2d_2(d_3 - d_1 + 2\alpha);$$

$$a_6 = d_2^2 - (\Omega_a - \Omega_b)d_2d_4 - d_4^2\Omega_a\Omega_b;$$

$$d_1 = 2(\Delta\omega_a\Delta\omega_b - \alpha(\Delta\omega_k)^2);$$

$$d_2 = \Omega_a\Delta\omega_b + \Omega_b\Delta\omega_a;$$

$$d_3 = 2\alpha\omega_k\Delta\omega_k = 2(\eta - 1)\alpha\omega_k^2;$$

$$d_4 = \Delta\omega_b - \Delta\omega_a.$$

## B Drugi prilog

Koeficijenti jednačine (81), u trećoj glavi rada, su dati kao :

$$H_0 = -NzS^2 \sum_l J_{l,l+1} [\cos \theta_l \cos \theta_{l+1} + \sin \theta_l \sin \theta_{l+1} \cos (\psi_l - \psi_{l+1})];$$

$$A_l = zS \sum_{j=1}^2 J_{l,l+j} [\cos \theta_l \cos \theta_{l+1} + \sin \theta_l \sin \theta_{l+j} \cos (\psi_l - \psi_{l+j})];$$

$$C_{l,l+1} = -\frac{zS}{2} J_{l,l+1} [\sin \theta_l \sin \theta_{l+1} + (\cos \theta_l \cos \theta_{l+1} - 1) \cos (\psi_l - \psi_{l+1})];$$

$$D_{l,l+1} = -\frac{zS}{2} J_{l,l+1} [\sin \theta_l \sin \theta_{l+1} + (\cos \theta_l \cos \theta_{l+1} + 1) \cos (\psi_l - \psi_{l+1})];$$

$$C'_{l,l+1} = i \frac{zS}{2} J_{l,l+1} (\cos \theta_l - \cos \theta_{l+1}) \sin (\psi_l - \psi_{l+1});$$

$$D'_{l,l+1} = -i \frac{zS}{2} J_{l,l+1} (\cos \theta_l + \cos \theta_{l+1}) \sin (\psi_l - \psi_{l+1});$$

$$B_l = S \frac{\sqrt{2NS}}{2} \sum_{j=1}^2 J_{l,l+j} [\sin \theta_l \cos \theta_{l+j} - \cos \theta_l \sin \theta_{l+j} \cos (\psi_l - \psi_{l+j})];$$

$$B'_l = S \frac{\sqrt{2NS}}{2} \sum_{j=1}^2 J_{l,l+j} \sin \theta_{l+j} \sin (\psi_l - \psi_{l+j})$$

## Literatura

- [1] J.W.Allen: Solid State Commun. **102**, 127 (1997).
- [2] P.F. Garcia. A.D.Meinhardt and A. Sunna: Applied Physics Letters **47** 178, (1985).
- [3] I.K.Schuller, S.Kim and C.Leighton: Jour.Magn.Magn.Mater. **200**, 571 (1999).
- [4] T.Shinjo, T.Takada (Eds.): Metallic Superlattices, Elsevier, Amsterdam, (1988).
- [5] P.Dhez, C.Weisbuch (Eds.): Physics, Fabrication and Applications of Multi-layered Structure, Plenum Press, New York, (1987).
- [6] S.Ohkoshi, Y.Abe, A.Fujishima and K.Hashimoto: Physical Review Letters **82**, 1285 (1999).
- [7] F.Herbst: Reviews of Modern Physics **63**, 819 (1991).
- [8] A.del Moral: Journal of Physics: Condensed Matter **4**, 4687, 4703 (1992).
- [9] Zh.Zhi-dong: Physical Review **B 53**, 2569 (1996).
- [10] Zh.Zhi-dong: Physical Review **B 55**, 12 408 (1997).
- [11] J.Barnas: Phys.Rev. B **45**, 10427 (1992).
- [12] T.H.Diep: Phys.Rev. B **40**, 4818 (1989).
- [13] E.Manousakis: Rev.Mod.Phys. **63**, 1 (1995).
- [14] J.Barnes: Int. J. of Mod. Phys. C **2**, 659 (1991).
- [15] A. Ćelić, D. Kapor, M. Škrinjar:Phys. Lett. A **219**, 121 (1996).
- [16] M. Pavkov, M. Škrinjar, S. Stojanović, D. Kapor: Phys. Lett. A **236**, 148 (1997).
- [17] D.L. Lin and H. Zheng : Phys.Rev. B **37**, 5394 (1987).
- [18] H. Zheng and D.L. Lin: Phys.Rev. B **37**, 9615 (1988).
- [19] D.C.Mattis: Theory of Magnetism I (Springer, Berlin,1988).

- [20] D. Kapor, M. Škrinjar, S. Stojanović: Phys. Lett.**192**, 413 (1994).
- [21] T. Wolfram, R.E. De Wames: Phys Rev. **185**, 762 (1969).
- [22] M.G. Cottam: J. Phys. C **17**, 1793 (1984).
- [23] M. Pavkov, M. Škrinjar, D. Kapor and S. Stojanović: Physica A **280** 465 (2000).
- [24] M. Pavkov, M. Škrinjar, D. Kapor, M. Pantić and S. Stojanović: International Journal of Modern Physics B **15** No.17 2369 (2001).
- [25] Guo-Zhu Wei, An Du and Rong-ke Qiu, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5039 (1996).
- [26] M. Pavkov, M. Škrinjar, D. Kapor, M. Pantić and S. Stojanović: Phys. Lett. A **281**, 347 (2001).
- [27] M.Pavkov, S.Stojanović, D.Kapor, M.Škrinjar and D. Nikolić: Phys.Rev. B **60**, 6574 (1999).
- [28] T.Holstein and H.Primakoff: Phys.Rev. **58**, 1048 (1940).
- [29] S.V.Tyablikov: The Methods in the Quantum Theory of Magnetism, Plenum Press, New York (1967).
- [30] N.N. Bogoliubov and S.V. Tyablikov: JETP **9**, 256 (1949).
- [31] R.E.Camley and D.R.Tiley: Phys.Rev. B **37**, 3413 (1988).
- [32] R.E.Camley: Phys.Rev. B **39**, 12 316 (1989).
- [33] R.E.Camley, J. Kwo, M. Hong and C.L. Chien: Phys.Rev.Letters **64**, 2703 (1990).
- [34] M. Pavkov, M. Škrinjar, D. Kapor, M. Pantić and S. Stojanović: Phys.Rev. B **65**, 132411 (2002).
- [35] T.Matsuda and K.Hida: J.Phys.Soc.Japan **59**, 2223 (1990).
- [36] K.Hida, J.Phys.Soc.Japan **59**, 2230 (1990).
- [37] M.P.Gelfand, Zh.Weihong, C.J.Hammer and J.Oitmaa: Phys.Rev. B **57**, 392 (1998).

- [38] M.Pavkov, M.Škrinjar, D.Kapor and S.Stojanović: Phys.Rev. B **62**, 6385 (2000).
- [39] H.E.Stanley: Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford (1971).
- [40] J.G. Bednorz and K.A. Müller: Z. Physik B **64**, 189 (1986).
- [41] Pengcheng Dai, H.A. Mook, G. Aeppli, S.M. Hayden and F. Dogan: Nature **406**, 965 (2000).
- [42] N.Mermin, H.Wagner: Physical Review Letters **17**, 1133 (1966).
- [43] M.G.Cottam and D.R.Tilley: Introduction to Surface and Superlattice Excitations, Cambrige Univ.Press, Cambrige (1989).
- [44] V.Yu.Irkhin, A.A.Katanin and M.I.Katsnelson: Phys.Rev. B **60**, 1082-1099 (1999).
- [45] V.G.Baryakhtar, V.N.Krivoruchko and D.A.Yablonsky: Zh.Eksp.Teor.Fiz **85**, 601 (1983) [Sov.Phys. JETP **58**, 351 (1983)].
- [46] V.G.Baryakhtar, V.N.Krivoruchko and D.A.Yablonsky: *Green's Functions in the Theory of Magnetism* [in Russian] (Naukova dumka, Kiev, 1984).
- [47] D.P.Arovas and A.Auerbach: Phys.Rev. B **38**, 316 (1988).
- [48] A.Pratap, Govind and R.S.Tripathi: Phys.Rev. B **60**, 6775 (1999).
- [49] K.-K.Ng, F.C.Zhang and M.Ma: Phys.Rev. B **53**, 12 196 (1996).
- [50] J. Rossat-Mignod, J.X. Boucherle, P. Burlet, J.Y. Henry, J.M. Jurgens, G. Lapertot, L.P. Regnault, J. Schweizer, F. Tasset, C. Vettier, in *Proceedings of the Int. Seminar on HTSC*, Dubna 1989, eds. V.L. Aksenov, N.N. Bogolubov, N.M. Plakida, Vol.21, P.74, World Scientific, Series Progress in HTSC.
- [51] J. Rossat-Mignod, L.P. Regnault, P. Bourges, P. Burlet,C. Vettier, J.Y. Henry, in *Frontiers in Solid State Sciences: Magnetism and Superconductivity*, World Scientific, Singapore 1994.
- [52] N.M. Plakida: "High-Temperature Supercondutors", Springer-Verlag,Berlin (1991).
- [53] Yu. A. Izymov: UFN **169** No.3 225-254 (1999).

- [54] D.J. Scalapino: Phys.Reports **250**, 329-365 (1995).
- [55] S. Shamoto, M. Sato, J.M. Tranquada, B.J. Sternlieb and G. Shirane: Phys.Rev. **B 48**, 13817 (1993).
- [56] D. Reznik, P. Bourges,H.F. Fong, L.P. Regnault, J. Bossy, C. Vettier, D.L. Millius, I.A. Aksay and B. Keimer: Phys.Rev. **B 53**, R14741 (1996).
- [57] P.Bourges, H.F. Fong, L.P. Regnault, J. Bossy, C.Vettier,D.L. Millius, I.A. Aksay and B. Keimer: Phys.Rev. **B 56** 11439 (1997).
- [58] R.P. Singh, Z.C. Tao and M. Singh: Phys.Rev. **B 46**, 1244 (1992).
- [59] L. Siurakshina, D. Ihle and R. Hayn: Phys.Rev. **B 61**, 14601 (2000).
- [60] M. Pavkov, M. Škrinjar, D. Kapor, M. Pantić and S. Stojanović: Phys.Rev. B **65**, 104512 (2002).
- [61] D.R.Callaby: NML Technical Report RE-0015 June (1994).
- [62] PHILIPS Data Sheets-FERRITE CERAMICS, Dec 23 (1999).

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET  
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj:

RBR

Identifikacioni broj:

IBR

Tip dokumentacije: *Monografska dokumentacija*

TD

Tip zapisa: *Tekstualni štampani materijal*

TZ

Vrsta rada: *Doktorska disertacija*

VR

Autor: *mr Milica Pavkov*

AU

Mentor: *dr Darko Kapor*

MN

Naslov rada: *Elementarne ekscitacije i termodinamičke osobine magnetnih superrešetki i magnetika sa više podrešetki*

NR

Jezik publikacije: *srpski (latinica)*

JP

Jezik izvoda: *srpski*

JI

Zemlja publikovanja: *SR Jugoslavija*

ZP

Uže geografsko područje: *Vojvodina*

UGP

Godina: *2002*

GO

Izdavač: *Autorski reprint*

IZ

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

MA

Fizički opis rada: 4/96/62/1/36/0/2

FO

Naučna oblast: *Fizika*

NO

Naučna disciplina: *Teorijska fizika čvrstog stanja*

ND

Predmetna odrednica / Ključne reči: *Fizika, superrešetka, Hajzenbergov spinski Hamiltonijan*

PO

UDK:

Čuva se: U biblioteci Instituta za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta, Univerziteta u Novom Sadu

ČU

Važna napomena

VN

Izvod:

Ovaj rad se bavi sistemima sa složenim magnetnim strukturama kao što su magnetne superrešetke i magnetici sa više podrešetki. U prvoj glavi je određen spektar površinskih ekscitacija ferimagnetika metodom jednačina kretanja. U drugoj glavi proučene su dinamičke osobine feromagnetičnih superrešetki, metodom transfer matrice. U trećoj glavi obrađen je uticaj prostorne anizotropije na osobine magnetnih sistema sa više podrešetki i magnetne superrešetke, primenjujući dijagonalizaciju bozonskog Hamiltonijana i metod Grinovih funkcija. Četvrta glava sadrži analizu osobina sistema koji se sastoji od antiferomagnetičnih bislojeva, i to u spinскоj (RPA) i bozonskoj slici na niskim temperaturama.

IZ

Datum prihvatanja teme od strane veća: *21.06.2001.*

DP

Datum odbrane:

DO

Članovi komisije:

Predsednik:

*Dr Mario Škrinjar, redovni profesor, PMF, Novi Sad*

Članovi:

*Dr Sava Milošević, redovni profesor, Fizički Fakultet, Beograd*

*Dr Darko Kapor, redovni profesor, PMF, Novi Sad KO*

UNIVERSITY OF NOVI SAD  
FACULTY OF NATURAL SCIENCES  
KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document Type: *Monographic documentation*

DT

Type of record: *Textual printed matter*

TR

Contents code: *Ph.D. thesis*

CC

Author: *Milica Pavkov, M.Sc.*

AU

Mentor: *Darko Kapor, Ph.D.*

MN

Title: *Elementary excitations and thermodynamical properties of magnetic superlattices and magnetics with several sublattices*

TI

Language of text: *Serbian (latin)*

LT

Language of abstract: *Serbian*

LA

Country of publication: *FR Jugoslavija*

LP

Locality of publication: *Vojvodina*

LP

Publication year: *2002*

PY

Publisher: *Author's reprint*

PU

Publ. place: *Faculty of Natural Sciences, Trg Dositelja Obradovića 4,  
21000 Novi Sad*

PP

- Physical description: 4/96/62/1/36/0/2

PD

- Scientific field: *Physics*

SF

- Scientific discipline: *Theoretical condensed matter physics*

SD

- Subject/Ket words: *physics, superlattice, Heisenberg spin Hamiltonian*

PO

UC:

- Holding Data: The library of the Institute of physics, Faculty of Natural Sciences, University of Novi Sad

HD

- Note

VN

- Abstract:

The thesis deals with complex magnetic systems, such as magnetic superlattices and magnetics with several sublattices. Surface spin waves for ferrimagnets using equation of motion, are determined in first Chapter. In Chapter 2, dynamical properties of ferromagnetic superlattices using method of transfer matrix, are considered. Chapter 3 is devoted to the investigation of the influence of spatial anisotropy to the properties of magnetic systems with several sublattices and magnetic superlattices, using diagonalization of boson Hamiltonian or Green function method. Chapter 4 contains analysis of the properties of the magnetic bilayers, using spin (RPA) and boson picture at low temperatures.

AB

- Accepted by the Scientific Board on: *June 21, 2001.*

ASb

- Defended:

DE

- Thesis defend board:

President:

*Dr Mario Škrinjar, full professor, Faculty of Natural Sciences, University of Novi Sad*

Članovi:

*Dr Sava Milošević, full professor, Faculty of Physics, University of Belgrade*

*Dr Darko Kapor, full professor, Faculty of Natural Sciences, University of Novi Sad DB*