

**UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU**

Природно-математички факултет

Радна заједница за свртичким послова

14.07.1995.

Приказено:	13	дес	1995
Орг. јед.	Број	Дан	Вредност
0603	9/234		

**GRINOVE FUNKCIJE ZA POLUBESKONAČNI
HAJZENBERGOV FEROMAGNET SA BIKVADRATNOM
INTERAKCIJOM**

-Diplomski rad-

**Olivera Ciraj
Mentor: Dr Mario Škrinjar**

NOVI SAD, DECEMBER 1995

SADRŽAJ

<i>UVOD</i>	1
<i>1. EFEKTI POVRŠINE</i>	2
<i> 1.1. EKSPERIMENTALNE METODE</i>	3
<i>2. FEROMAGNETIK SA BIKVADRATNOM INTERAKCIJOM I FAZNI PRELAZI</i>	5
<i> 2.1. BESKONAČNI KRISTAL</i>	5
<i> 2.2. POVRŠINSKI MAGNETIZAM I FAZNI PRELAZI</i>	11
<i>3. GRINOVE FUNKCIJE ZA POLUBESKONAČNI HAJZENBERGOV FEROMAGNET</i>	23
<i>4. ELEMENTARNE EKSCITACIJE ZA POLUBESKONAČNI HAJZENBERGOV FEROMAGNET</i>	33
<i> A. AKUSTIČNI MAGNONI</i>	36
<i> B. OPTIČKI MAGNONI</i>	39

zašto

UVOD

Razvoj tehnologije poslednjih decenija naročito računara i opreme, doneo je i sve veće interesovanje za magnetizam na površinama i tankim filmovima. Uporedo su se razvijali kako makroskopski, tako i mikroskopski pristupi proučavanju ovih pojava. Razvijeno je više teorijskih metoda, među kojima su i metod molekulskog polja i metod Grinovih funkcija, koji će biti primenjeni u ovom radu.

Cilj ovog diplomskog rada jeste da ispitamo magnetizaciju i kvadropolne momente u aproksimaciji molekulskog polja za polubeskonačni kristal za spin $S=1$ i metodom Grinovih funkcija odredimo spektar elementarnih ekscitacija polubeskonačnog Hajzenbergovog feromagnetika sa bikvadratnom interakcijom za spin S u zavisnosti od parametara koji opisuju interakciju izmene i jednojonsku anizotropiju.

U prvom poglavlju ovog rada dat je pregled eksperimentalnih metoda koje se koriste za proučavanje elementarnih ekscitacija i drugih osobina površina i kratak teorijski prikaz ovih pojava.

U drugom poglavlju je opisan Hamiltonian sa bikvadratnom interakcijom i jednojonskom anizotropijom i analizirani su parametri sistema - magnetizacija i kvadrupolni momenti i to za beskonačni i polubeskonačni kristal.

Kompletan račun za Grinovu funkciju dat je u trećem, dok su u četvrtom poglavlju analizirana elementarna pobuđenja za posmatrani feromagnetik.

1. EFEKTI POVRŠINE

Prisustvo površine utiče na osobine čvrstih tela i tečnosti. Atomi na površini se mogu razlikovati od atoma u zapremini kako po kristalografskom uređenju, tako i po interakciji magnetnih momenata, što utiče na vrednost magnetizacije sistema. Ekscitacije unutar feromagnetika se takođe menjaju usled efekta površine, te nisu više ravni talasi koji se prostiru u tri dimenzije (beskonačni kristal). Prisustvo površine se ogleda u opadanju amplitude elementarnih ekscitacija sa udaljavanjem od površine, dok u ravnima paralelnim površini zadržavaju oblik ravnih talasa. Ako je izabrana orijentacija kristala takva da je ravan paralelna površini XOY a kristal ispunjava deo prostora $z \leq 0$, skup translacija:

$$\vec{R}_{\parallel} = n_1 a \vec{i} + n_2 a \vec{j} \quad 1.1$$

predstavlja simetrijsku operaciju, dok u pravcu z ose kristal nije translatorno invarijantan. Za fizičku veličinu f važi sledeća relacija:

$$f(\vec{r}_{\parallel}, z) = f(\vec{r}_{\parallel}, -z) \quad 1.2$$

a Fourier razvoj u dve dimenzije ima oblik:

$$f(\vec{r}_{\parallel}, z) = \sum F(\vec{Q}_{\parallel}, z) e^{i \vec{Q}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \quad 1.3$$

gde je \vec{Q}_{\parallel} vektor recipročne rešetke. Blohova teorema je:

$$\Psi(\vec{r}_{\parallel}, z) = U_{\vec{k}}(\vec{r}_{\parallel}, z) e^{i \vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} ? \quad 1.4$$

Iz diferencijalne jednačine za $U_{\vec{k}}(\vec{r}_{\parallel}, z)$ dobijaju se rešenja oblika $\exp(i\lambda z)$.

Zbog specifičnih graničnih uslova na površini ($z \rightarrow 0$ i $z \rightarrow -\infty$) λ može biti realan (ekscitacije u zapremini) i kompleksan broj pri čemu je $\text{Im}(\lambda) < 0$ (površinske ekscitacije).

gde je λ i vrednost?

1.1. EKSPERIMENTALNE METODE

Za proučavanje osobina površinskih ekscitacija koriste se različite eksperimentalne tehnike, zato ćemo navesti neke od njih koje su značajne za proučavanje statičkih i dinamičkih osobina površine.

Difrakcija nisko-energetskih elektrona je jedna od tehnika koja se koristi za proučavanje površinske kristalografske strukture.

Snop monoenergetskih elektrona se usmerava na površinu uzorka u uslovima visokog vakuma pri čemu se formira difrakciona slika. Energije elektrona iz snopa su obično od 20 do 500 eV. U ovoj oblasti je presek za rasejanje elektrona na atomima velik, što ovu metodu čini izuzetno osetljivom.

Augerova elektronska spektroskopija je osetljiva na hemijsku kompoziciju površine. Suština ove metode je u sledećem: atom se jonizuje inicijalnim elektronima a usled udaljavanja elektrona od atoma upražnjeno mesto se popunjava elektronom sa nekog višeg energetskog nivoa, pri čemu atom gubi deo energije, koja se emituje u vidu fotona ili biva predata drugom vezanom elektronu. Kinetička energija emitovanog Augerovog elektrona je karakteristična za atom iz koga elektron potiče. Ovi elektroni imaju kratak srednji slobodan put, pa je stoga njihova detekcija van uzorka pogodna za provere hemijskog sastava površine.

Neelastično rasejanje svetlosti u koje se ubrajaju Ramanovo i Briluenovo rasejanje pogodno je za istraživanje dugotalasnih površinskih ekscitacija. Razvojem tehnologije, pre svega lasera, ove dve metode našle su svoju primenu. Kod Ramanovog rasejanja svetlost se analizira difrakcionom rešetkom dok se kod Briluenovog rasejanja koristi Fabri-Peroov interferometar. Kao posledica rasejanja svetlosti frekvencije ω_1 i talasnog vektora \mathbf{k}_1 u beskonačnoj zapremini transparentnog medijuma, javlja se apsorpcija ili formiranje jedne ekscitacije frekvencije ω i talasnog vektora \mathbf{k} i rasejana svetlost frekvencije ω_s i talasnog vektora \mathbf{k}_s . Ove pojave su poznate kao Stoksovi i anti-Stoksovi procesi. Zakon održanja energije i zakon održanja impulsa nameću ograničenja za \mathbf{k} , tako da se mogu detektovati samo eksitacije u blizini granice Briluenove zone.

Rasejanje svetlosti na površini polubeskonačnog kristala ima drugačiju geometriju. Posmatramo rasejanje svetlosti na granici dva medijuma različitih dielektričnih konstanti (koje zavise od ω). Pri tome zakon održanja energije ostaje isti kao i u zapremini, dok se zakon održanja impulsa menja i važi samo za \mathbf{k}_{\parallel} . Komponenta talasnog vektora \mathbf{k}_z nije fiksna jer polubeskonačni kristal nije translatorno invarijantan u pravcu z ose. Usled ovoga dolazi do proširenja vrednosti komponente

talasnog vektora \mathbf{k}_z , što dovodi do širenja pika u spektru rasejane svetlosti ako frekvencija ekscitacije eksplisitno zavisi od \mathbf{k}_z . Ova metoda je, iako veoma osetljiva, ograničena za eksitacije u blizini centra Briluenove zone.

Rasejanje čestica pod određenim uslovima, može obuhvatiti veće promene impulsa, pa se pomoću ove tehnike mogu proučavati površinske eksitacije za talasne vektore koji se pružaju duž čitave Briluenove zone. Tehnika rasejanja elektrona koristi se za proučavanje eksitacija za talasne vektore duž čitave dvodimenzionalne Briluenove zone pridružene slojevima paralelnim površini.

Rasejanje teških čestica je mnogo prihvativije za proučavanje eksitacija sa velikim vrednostima talasnog vektora. Rasejanje neutrona je efikasno za proučavanje zapreminskih eksitacija, ali ne i površinskih efekata zbog velike dubine prodiranja neutrona. Tehnika koja se pokazala još korisnijom pri proučavanju površinskih pobuđenja jeste rasejanje neutralnih elektrona. Atomi helijuma, na odgovarajuće niskim energijama bivaju rasejani samo do prvog sloja na površini. Kako je njihova de Brogljeva talasna dužina uporediva sa dimenzijama rešetke, ovom metodom može biti istražena čitava Briluenova zona.

2. FEROMAGNETIK SA BIKVADRATNOM INTERAKCIJOM I FAZNI PRELAZI

Pod feromagneticima se podrazumevaju materijali kod kojih se javlja magnetni moment i u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja. Ovaj spontani moment ukazuje da su magnetni momenti elektrona raspoređeni na pravilan način i u najvećem broju slučajeva potiču od spinova. Uređenost spinova se javlja kao posledica interakcije izmene između susednih elektrona. Ona je u osnovi elektrostatička, ali nastaje kao posledica identičnosti čestica. (1)

Interakcija između magnetnih jona koja se opisuje spiskim operatorima višeg stepena (kao na primer bikvadratne interakcije), poznata je već duže vreme (2,3,4). U početku se smatralo da je bikvadratna interakcija zanemarljivo mala u odnosu na bilinearnu, međutim kasnijim proučavanjima magnetnih sistema, naročito jedinjenja retkih zemalja, ustanovljeno je da je bikvadratna interakcija uporediva sa bilinearnom. Iz tog razloga ćemo proučavati magnetne osobine sistema sa bikvadratnom interakcijom.

2.1. BESKONAČNI KRISTAL

Hamiltonian sa bilinearnom i bikvadratnom interakcijom za $S=1$, proučava se u aproksimaciji molekulskog polja. Posmatramo feromagnet sa prostom kubnom strukturu.

Ako Hamiltonian ima Izingovu ili izotropnu interakciju izmene, pokazuje se da sistem ima samo jednu tačku faznog prelaza, iz paramagnete u feromagnetu ili ferokvadropolnu fazu. (2)

U slučaju Hamiltonijana sa aksijalnom simetrijom javljaju se dva odvojena fazna prelaza: iz paramagnete u ferokvadropolnu, a zatim u feromagnetu fazu.

Interakcija izmene se može opisati Hamiltonijanom:

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_i \vec{S}_i \vec{S}_j - \sum_{ij} \sum_{t=0,2,xy,xz,yz} K_i^{(t)} Q_{it} Q_{jt}$$

gde je:

$$Q_0 = 3S_z^2 - 2 \quad Q_2 = S_x^2 - S_y^2 \quad Q_{xy} = S_x S_y + S_y S_x$$

Fazni prelazi su uslovjeni uređenjem dipolnih momenata S_x, S_y, S_z a prisustvo kvadrupolnih momenata može dovesti i do dodatnih faznih prelaza. Sistem sa feromagnetskom interakcijom susednih jona opisan je pozitivnom vrednošću konstante izmene.

Ustanovljeno je da sistemi opisani Hamiltonijanom sa Izingovom, izotropnom i kubnom simetrijom imaju isto termodinamičko ponašanje. Imaju jedan fazni prelaz: ili se dipolni i kvadrupolni momenti uređuju istovremeno, ili se dipolni momenti uopšte ne uređuju. (2)

U aproksimaciji molekulskog polja Hamiltonian ima oblik:

$$\hat{H}_0 = -I \left[\sum_{t=x,y,z} \alpha_t \langle S_t \rangle S_t + \sum_{t=0,2,xy,yz,xz} \beta_t \langle Q_t \rangle Q_t \right] \quad 2.2$$

gde je:

$$I\alpha_t = \sum_j l_j^t \quad I\beta_t = \sum_j K_{ij}^t \quad \beta_0 = \frac{1}{3}$$

Srednje vrednosti $\langle S_t \rangle$ i $\langle Q_t \rangle$ određuju minimume Gibsove slobodne energije:

$$G = -kT \ln(T \exp(-H_0/kT)) - \frac{1}{2} \langle H_0 \rangle \quad 2.3$$

gde je statistička suma data izrazom:

$$Z_0 = \text{Tr } \exp(-H_0/kT) \quad 2.4$$

a $\frac{1}{2} \langle H_0 \rangle$ predstavlja unutrašnju energiju po čvoru koja zavisi od dipolnog i kvadropolnog momenta sistema.

Srednje vrednosti dipolnog i kvadropolnog momenta, koje zavise od temperature mogu se izračunati iz izraza:

$$\frac{\partial G}{\partial \langle S_t \rangle} = \frac{\partial G}{\partial \langle Q_t \rangle} = 0 \quad 2.5$$

odakle sledi:

$$\langle S_i \rangle = \frac{kT}{l\alpha_i} \frac{\partial \ln Z_0}{\partial \langle S_i \rangle} \quad 2.6$$

$$\langle Q_i \rangle = \frac{kT}{l\beta_i} \frac{\partial \ln Z_0}{\partial \langle Q_i \rangle}$$

Ovo su samousaglašene jednačine koje mogu imati više rešenja. Rešenje koje odgovara minimumu Gibbsove slobodne energije opisuje ravnotežno stanje sistema.

U daljem razmatranju koristićemo sledeće aproksimacije:

1. Talasnu funkciju sistema sa spinom $S=1$ možemo na temperaturi $T=0$ napisati u obliku:

$$\Psi = C_1 |1\rangle + C_2 |0\rangle + C_3 |-1\rangle$$

2. Koordinatni sistem biramo tako da je

$$\begin{aligned}\langle S_z \rangle &= \sigma \\ \langle S_y \rangle &= \langle S_x \rangle = 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle Q_{\alpha\beta} \rangle &= 0; \langle Q_0 \rangle = 1; \langle Q_2 \rangle = \sqrt{1 - \sigma^2} \\ \alpha &\neq \beta\end{aligned}$$

A. IZINGOV HAMILTONIJAN

Hamiltonian sa Izingovom simetrijom može se napisati u obliku:

$$H_0 = -l(\alpha\sigma S_z + \frac{1}{3} q_0 Q_0) \quad 2.7$$

Sada možemo izračunati statističku sumu i Gibbsovu slobodnu energiju:

$$Z_0 = \exp(q_0 K / 3) [\exp(-q_0 K) + 2 \operatorname{ch}(K \alpha \sigma)]$$

$$\frac{G}{l} = -\frac{1}{K} \ln Z_0 + \frac{1}{2} \alpha \sigma^2 + \frac{1}{6} q_0^2$$

gde smo sa K označili l/kT , $\sigma = \langle S_z \rangle$, $q_0 = \langle Q_0 \rangle$, $q_2 = \langle Q_2 \rangle$

iz uslova za minimum slobodne energije dobija se:

$$\sigma = \frac{2shK\alpha\sigma}{e^{-q_0K} + 2chK\alpha\sigma}$$

$$q_0 = 1 - \frac{3e^{-q_0K}}{e^{-q_0K} + 2chK\alpha\sigma} \quad 2.8$$

gde je

Sistem jednačina (2.8) ima tri rešenja. Upoređujući slobodnu energiju ovih rešenja, dolazimo do sledećih rezultata:

a) za $\alpha > 1$ rešenje $\sigma > q_0 > 0$ ima najnižu energiju. Na niskim temperaturama izrazi za σ i q_0 približno imaju sledeći oblik:

$$\sigma = 1 - \exp(-K(\alpha+1)) \quad 2.9$$

$$q_0 = 1 - 3\exp(-K(\alpha+1))$$

U blizini tačke faznog prelaza je $\sigma \ll 1$, pa stoga možemo koristiti razvoj

$$\frac{k}{l}(T_c - T) = B\sigma^2 + \dots, T \rightarrow T_c$$

Ovaj razvoj u kombinaciji sa sistemom (2.8) daje izraze za σ i q_0 u blizini tačke faznog prelaza.

$$\sigma = \sqrt{\frac{4k(\alpha - 1)(T_c - T)}{\alpha l(\alpha - 2)}} \quad 2.10$$

$$q_0 = \frac{3}{\alpha - 2} \frac{k}{l}(T_c - T); T \rightarrow T_c$$

Izrazi za σ i q_0 važe za slučaj $\alpha > 2$ kada je $\frac{kT_c}{l} = \frac{2}{3}\alpha$, gde T_c odgovara faznom prelazu druge vrste. Za $\alpha < 2$ razvoj 2.10 ne važi i fazni prelaz II vrste prelazi u fazni prelaz I vrste. Ovo je bitna razlika

između feromagneta sa i bez bikvadratne interakcije, jer se menja tip faznog prelaza.

b) Za $\alpha < 1$ najnižu energiju ima rešenje $\sigma=0$, $q_0 < 0$, pri čemu je $kT/I < 1/\ln 4$. Za $kT/I > 1/\ln 4$ rešenje $\sigma=q_0=0$ ima najnižu energiju. Definišimo pozitivnu funkciju $Q(kT/I)$ na sledeći način:

$$Q\left(\frac{kT}{I}\right) = \begin{cases} -\frac{1}{2}\bar{q}_0; & \frac{kT}{I} \leq \frac{1}{\ln 4} \\ 0; & \frac{kT}{I} > \frac{1}{\ln 4} \end{cases} \quad 2.11$$

gde je $\bar{q}_0 < 0$ rešenje za q_0 sistema (2.8) za slučaj $\alpha=0$. Uočavamo da je $Q=1$ za $T=0$, a $Q=1/2$ za $kT/I=1/\ln 4$. Na niskim temperaturama ($T \rightarrow 0$) je:

$$Q\left(\frac{kT}{I}\right) \approx 1 - 3e^{-2I/kT} \quad 2.12$$

U blizini tačke faznog prelaza gde je $kT_\alpha/I=1/\ln 4$, funkcija Q ima sledeću vrednost:

$$Q\left(\frac{kT}{I}\right) = \frac{1}{2} + \frac{(\ln 4)^2}{3 - 2\ln 4} \frac{k}{I} (T_\alpha - T) \quad 2.13$$

Ovde se javlja fazni prelaz iz paramagnetne u ferokvadropolnu na temperaturi $kT_\alpha/I=1/\ln 4$, pri čemu je $q_0=-2Q(kT/I)$.

c) Za $\alpha=1$, sistem ima dva rešenja:

$$\begin{aligned} \sigma &= q_0 = Q(kT/I) \text{ i} \\ \sigma &= 0, q_0 = -2Q(kT/I). \end{aligned}$$

Oba navedena rešenja daju iste vrednosti za Gibsovu slobodnu energiju i koegzistiraju na svim temperaturama koje su manje od T_α .

B. IZOTROPNI HAMILTONIJAN

Za spin S=1 Hamiltonijan sa izotropnom simetrijom, dat je izrazom:

$$\hat{H} = -\sum_{ij} \left[I_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + K_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 \right] \quad 2.14$$

a u aproksimaciji molekulskog polja:

$$H_0 = -I \left[\alpha \sigma S_z + q_2 Q_2 + \frac{1}{3} q_0 Q_0 \right]; \quad 2.15$$

$$I = \frac{1}{2} \sum_i K_{ii}, \quad (\alpha + 1) I = \sum_i I_{ii}$$

Ne gubeći na opštosti, predpostavili smo da se dipoli uređuju duž z ose, $q_{xy}=q_{yx}=q_{xz}=0$. Statistička suma i Gibsova slobodna energija za ovakav sistem imaju sledeći oblik:

$$Z_0 = e^{q_0 K / 3} \left[e^{-q_0 K} + 2 \operatorname{ch} K \sqrt{q_2^2 + \alpha^2 \sigma^2} \right] \quad 2.16$$

$$\frac{G}{I} = -\frac{1}{K} \ln Z_0 + \frac{\alpha}{2} \sigma^2 + \frac{1}{2} q_2^2 + \frac{1}{6} q_0^2$$

Iz uslova za minimum Gibsove slobodne energije dobija se:

$$(\alpha - 1) \sigma q_2 = 0 \quad 2.17$$

za $\alpha \neq 1$ postoje tri rešenja:

$$\sigma = q_2 = 0;$$

$$\sigma \neq 0, q_2 = 0;$$

$$q_2 \neq 0, \sigma = 0.$$

Slučaj kada je $q_2=0$ daje ista rešenja kao i Izingov Hamiltonijan, zbog čega će nadalje biti razmatran samo slučaj kada je $q_2 \neq 0$.

Za $q_2 \neq 0$ i $\sigma=0$ samousaglašene jednačine za q_2 i q_0 su:

$$\begin{aligned} q_2 &= \frac{2shKq_2}{e^{-q_0K} + 2chKq_2} \\ q_0 &= 1 - \frac{3e^{-q_0K}}{e^{-q_0K} + 2chKq_2} \end{aligned} \quad 2.18$$

Gornje jednačine su analogne jednačinama (2.8.), pa imajući u vidu razmatranja u odeljku A., za slučaj $\alpha=1$ postoje dva degenerisana rešenja.

$$q_2=q_0=Q(kT/I) \text{ i}$$

2.19

$$q_2=0, q_0=-2Q(kT/I).$$

Ako izraze za q_0 i q_2 transformišemo tako da $y \rightarrow z$, može se uočiti da su rešenja (2.19) ekvivalentna. U slučaju kada je $\alpha \neq 1$, uvek možemo izabrati koordinatni sistem tako da je $\sigma \neq 0$ i $q_0 \neq 0$.

Znači, u slučaju kada je $\alpha \neq 0$, Hamiltonijan sa izotropnom simetrijom se isto ponaša kao i Izingov Hamiltonijan: za $\alpha>1$ dipolni i kvadrupolni momenti se uređuju simultano, a za $\alpha<1$, uređuju se samo kvadrupolni momenti. Jedina razlika je u tome što se uređivanje kod Izingovog Hamiltonijana odvija duž z ose, a kod izotropnog u bilo kom pravcu. U slučaju $\alpha=1$ kod izotropnog modela q_2 i σ se ne mogu jednoznačno odrediti, ali veza $\sqrt{\sigma^2 + q_2^2} = q_0 = Q(kT/I)$ daje istu Gibsovnu energiju kao i rešenje $\sigma=q_2=0$ i $q_0=-2Q(kT/I)$.

2.2. POVRŠINSKI MAGNETIZAM I FAZNI PRELAZI (polubeskonačni kristal)

Posmatrajmo feromagnet koji ispunjava deo prostora $z \leq 0$ i pretpostavimo da je beskonačan duž x i y ose. Razmatramo površinu $z=0$. Forma Hamiltonijana je sledeća:

$$\vec{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_i \vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{a}{2} \sum_{ij} J_{ij} (\vec{S}_i \vec{S}_j)^2 - \sum_i D_i (S_i^z)^2 - \mu \beta \ell \sum_i S_i^z \quad 3.1$$

Veličina I u izrazu (3.1) je integral izmene i predstavlja meru preklapanja talasnih funkcija elektrona. Za $I>0$ u stanju sa spinom $S=1$, favorizovano je paralelno uređenje spinova (feromagnetizam), dok za $I<0$ dolazi do antiparalelnog uređenja (antiferomagnetizam).

Interakcija izmene među najbližim susedima ima vrednost I_s , između atoma na površini I_1 između čvorova nultog i prvog sloja a I u svim ostalim slučajevima. Kristal ima prostu kubnu strukturu, sa konstantom rešetke a_0 .

Pretposlednji član u izrazu (3.1) posledica je pomeranja energetskih nivoa pod dejstvom kristalnog polja i opisuje se višim stepenima spinskih operatora na istom čvoru (jednojonska anizotropija), dok poslednji član u istom izrazu donosi uticaj spoljašnjeg magnetnog polja.

U aproksimaciji molekulskog polja Hamiltonian (3.1) je:

$$\hat{H}_{MF} = -\frac{1}{2}\left(1 - \frac{a}{2}\right)\sum_{ij} I_{ij} [\sigma_i S_j^z + \sigma_j S_i^z - \sigma_i \sigma_j] - \frac{a}{12} \sum_{ij} I_{ij} [q_i Q_j + q_j Q_i - q_i q_j] \quad 3.2.$$

Prilikom izračunavanja izraza (3.2) prepostavili smo da je $D_i=0$, da je spoljašnje polje usmereno u pravcu z ose, shodno čemu:

$$\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = 0, \quad \langle Q_i^2 \rangle = \langle Q_i^{\alpha\beta} \rangle = 0, \quad \alpha, \beta = x, y, z$$

$$\langle Q_i^0 \rangle = q_i, \quad \langle S_i^z \rangle = \sigma_i$$

U slučaju polubeskonačnog feromagnetika u teoriji molekulskog polja:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MF} &= \hat{H}_0 - \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle \\ \hat{H}_{MF} &= -\left(1 - \frac{1}{2}\right) \sum_{n_x, n_y, n_z=0} S_{\bar{n}, 0}^z (4I_s \sigma_s + I_s \sigma_1) - \frac{a}{6} \sum_{n_x, n_y, n_z=0} Q_{\bar{n}, 0} (4I_s q_s + I_s q_1) - \\ &- \left(1 - \frac{1}{2}\right) \sum_{n_x, n_y, n_z=1} S_{\bar{n}, 1}^z (I_s \sigma_s + 4I_s \sigma_1 + I_s \sigma_2) - \frac{a}{6} \sum_{n_x, n_y, n_z=1} Q_{\bar{n}, 1} (I_s q_s + 4I_s q_1 + I_s q_2) - \\ &- \left(1 - \frac{1}{2}\right) \sum_{n_x, n_y, n_z \geq 2} S_{\bar{n}, n_z}^z (I_s \sigma_{n_z-1} + 4I_s \sigma_n + I_s \sigma_{n_z+1}) - \frac{a}{6} \sum_{n_x, n_y, n_z \geq 2} Q_{\bar{n}, n_z} (I_s q_{n_z-1} + 4I_s q_n + I_s q_{n_z+1}) - \frac{1}{2} \langle \hat{H} \rangle \end{aligned} \quad 3.3$$

gde q_s i σ_s odgovaraju sloju $n_z=0$, σ_1 i q_1 sloju $n_z=1$, a q i σ slojevima $n_z \geq 2$.

$$\hat{H}_0 = -N_{xy} \sum_{n_z=0}^{N_z} \left\{ S_{n_z}^z \bar{\mathcal{H}}_{n_z} + Q_{n_z} \bar{\mathcal{K}}_{n_z} \right\} \quad 3.4$$

gde N_{xy} označava broj čvorova u ravni X0Y. Srednje polje koje deluje na σ_i može se napisati u obliku:

$$\begin{aligned}\bar{\mathcal{H}}_0 &= \frac{2-a}{2} (4l_s \sigma_s + l_1 \sigma_1) \\ \bar{\mathcal{H}}_1 &= \frac{2-a}{2} (l_1 \sigma_s + 4l \sigma_1 + l \sigma_2) \\ \bar{\mathcal{H}}_{n \geq 2} &= \frac{2-a}{2} (l \sigma_{n-1} + 4l \sigma_n + l \sigma_{n+1})\end{aligned}$$

A srednje polje koje deluje na q_i :

$$\begin{aligned}\bar{\mathcal{K}}_0 &= \frac{a}{6} (4l_s q_s + l_1 q_1) \\ \bar{\mathcal{K}}_1 &= \frac{a}{6} (l_1 q_s + 4l q_1 + l q_2) \\ \bar{\mathcal{K}}_{n \geq 2} &= \frac{a}{6} (l q_{n-1} + 4l q_n + l q_{n+1})\end{aligned} \quad 3.5$$

U izrazima (3.5) izostavljen je indeks z uz n_z u cilju jednostavnijeg zapisa. Kao što je opisano u prethodnom poglavlju, izračunaćemo statističku sumu i Gibsovu slobodnu energiju:

$$\begin{aligned}Z_0 &= (Z_0 Z_1 \dots Z_{N_z})^{N_{xy}} \\ G &= -\theta \ln Z_0 - \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle\end{aligned} \quad 3.6$$

Odnosno:

$$Z_{n_z} = \sum_{l=-1}^1 \langle |e^{-\beta(s_n^z \bar{H}_n + Q_n \bar{X}_n)}|l\rangle$$

$$G = -N_{xy} \theta \sum_n \ln Z_n + \frac{N_{xy}}{2} \sum_n (\sigma_n \bar{H}_n + q_n \hat{X}_n) \quad 3.7$$

Na osnovu (3.7) dobija se slobodna energija "po čvoru u slojevima":

$$\frac{G}{N_{xy}} = -\theta \sum_{n=0}^{N_z} [\beta \bar{H}_n + \ln(e^{-\beta \bar{H}_n} + 2\cosh \beta \bar{H}_n)] + \frac{1}{2} \sum_n (\sigma_n \bar{H}_n + q_n \bar{X}_n) \quad 3.8$$

Energija osnovnog stanja data je izrazom:

$$E_0 = -\frac{N_{xy}}{2} \sum_n (\sigma_n \bar{H}_n + q_n \hat{X}_n) + \text{const} \quad 3.9$$

Na temperaturi $T=0$, možemo izvršiti sledeću procenu ($\sigma_n=\sigma$, $q_n=q$):

a) $\sigma = q = 1$

$$\frac{E_0}{N_z(l, l_1, l_s)} = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{a}{3} \right) = E_1 \quad 3.10$$

b) $\sigma = 0, q = -2$

$$\frac{E_0}{N_z(l, l_1, l_s)} = -\frac{a}{3} = E_2$$

Znači, za $a < 1$ osnovno stanje je feromagnetsko (slučaj a), dok je za $a > 1$ osnovno stanje kvadropolno uređeno (slučaj b). Za $a = 1$ postoji dva degenerisana stanja, slično kao kod beskonačnog kristala.

Na temperaturi različitoj od nule magnetizacija i kvadropolni moment se mogu odrediti iz uslova za minimum slobodne energije ili po definiciji:

$$\frac{\partial G}{\partial \sigma_n} = \frac{\partial G}{\partial q_n} = 0, \text{ ili}$$

$$\begin{aligned}\sigma_n &= \frac{1}{Z_n} \sum_{l=-1}^1 \langle l | e^{-\beta \hat{H}_n} S_n^z | l \rangle \\ q_n &= \frac{1}{Z_n} \sum_{l=-1}^1 \langle l | e^{-\beta \hat{H}_n} Q_n | l \rangle\end{aligned}\quad 3.11$$

Na osnovu (3.11) dobijaju se izrazi za magnetizaciju i kvadrupolni moment:

$$\begin{aligned}\sigma_n &= \frac{2 \operatorname{sh} \beta \bar{H}_n}{e^{-\beta \bar{H}_n} + 2 \operatorname{ch} \beta \bar{H}_n} \\ q_n &= \frac{6 \operatorname{ch} \beta \bar{H}_n}{e^{-\beta \bar{H}_n} + 2 \operatorname{ch} \beta \bar{H}_n} - 2\end{aligned}\quad 3.12$$

Jednačine (3.12) ukazuju na zavisnost magnetizacije i kvadropolnog momenta od temperature. Posebno treba naglasiti da σ_n i q_n u svakom sloju n , zavise od srednjeg polja u odgovarajućem sloju n .

Na temperaturi $T=0$, na osnovu (3.12) za oba slučaja (3.10), može se uspostaviti veza:

$$\begin{aligned}3\sigma_n &= (q_n + 2) \operatorname{th} \beta \bar{H}_n \\ q_n &= 3\sigma_n - 2 \quad (T \rightarrow 0)\end{aligned}\quad 3.13$$

Na temperaturama različitim od nule, moramo odvojeno razmatrati slučajeve $a < 1$ i $a > 1$, pa je u tom cilju potrebno detaljnije ispitati Gibsovu slobodnu energiju sistema, a dobijeni izraz posmatrati zajedno sa jednačinama (3.12).

Dalje ćemo razmatrati slučaj feromagnetskog uređenja kada je $0 < a < 1$. Napisaćemo jednačine (3.12) za slojeve $n=0$, $n=1$ i dalje.

$$\sigma_s = \frac{2\operatorname{sh} \frac{2-a}{2\theta} (4l_s \sigma_s + l_1 \sigma_1)}{e^{-\frac{a}{2\theta} (4l_s q_s + l_1 q_1)} + 2\operatorname{ch} \frac{2-a}{2\theta} (4l_s \sigma_s + l_1 \sigma_1)}$$

$$q_s = \frac{6\operatorname{ch} \frac{2-a}{2\theta} (4l_s \sigma_s + l_1 \sigma_1)}{e^{-\frac{a}{2\theta} (4l_s q_s + l_1 q_1)} + 2\operatorname{ch} \frac{2-a}{2\theta} (4l_s \sigma_s + l_1 \sigma_1)} - 2$$

$$\sigma_1 = \frac{2\operatorname{sh} \frac{2-a}{2\theta} (4l \sigma_1 + l_1 \sigma_s + l \sigma_2)}{e^{-\frac{a}{2\theta} (4l q_1 + l_1 q_s + l q_2)} + 2\operatorname{ch} \frac{2-a}{2\theta} (4l \sigma_1 + l \sigma_2 + l_1 \sigma_s)}$$

$$q_1 = \frac{6\operatorname{ch} \frac{2-a}{2\theta} (4l \sigma_1 + l_1 \sigma_s + l \sigma_2)}{e^{-\frac{a}{2\theta} (4l q_1 + l_1 q_s + l q_2)} + 2\operatorname{ch} \frac{2-a}{2\theta} (4l \sigma_1 + l \sigma_2 + l_1 \sigma_s)} - 2$$

$$\sigma_n = \frac{2\operatorname{sh} \frac{2-a}{2\theta} (4l \sigma_n + l \sigma_{n-1} + l \sigma_{n+1})}{e^{-\frac{a}{2\theta} (4l q_n + l q_{n-1} + l q_{n+1})} + 2\operatorname{ch} \frac{2-a}{2\theta} (4l \sigma_n + l \sigma_{n-1} + l \sigma_{n+1})}$$

3.14

$$q_n = \frac{6\operatorname{ch} \frac{2-a}{2\theta} (4l \sigma_n + l \sigma_{n-1} + l \sigma_{n+1})}{e^{-\frac{a}{2\theta} (4l q_n + l q_{n-1} + l q_{n+1})} + 2\operatorname{ch} \frac{2-a}{2\theta} (4l \sigma_n + l \sigma_{n-1} + l \sigma_{n+1})} - 2$$

Gornji sistem jednačina se može tačno rešiti samo numerički. Mi ćemo dati jedno analitičko rešenje koje se bazira na činjenici da magnetizacija i kvadrupolni moment teže nuli u blizini tačke faznog prelaza. Zato ćemo izvršiti linearizaciju gornjeg sistema jednačina.

Linearizovane jednačine glase:

$$3\sigma_s \approx \frac{2-a}{\theta} (4l_s\sigma_s + l_1\sigma_1) + \frac{\mu h_s}{\theta}$$

$$3\sigma_1 \approx \frac{2-a}{\theta} (4l\sigma_1 + l\sigma_2 + l_1\sigma_s) + \frac{\mu h_1}{\theta} \quad 3.15$$

$$3\sigma_n \approx \frac{2-a}{\theta} (4l\sigma_n + l\sigma_{n-1} + l\sigma_{n+1}) + \frac{\mu h_n}{\theta}$$

Spoljašnje polje h_n , koje deluje na spinove n-tog sloja uvodimo iz formalnih razloga ,u cilju definisanja funkcije linearog odziva sistema.

$$\begin{aligned} \left(3 - \frac{4(2-a)}{\theta} l_s \right) \sigma_s - \frac{2-a}{\theta} l_1 \sigma_1 &= \frac{\mu h_s}{\theta}; \quad n = 0 \\ -\frac{2-a}{\theta} l_1 \sigma_s + \left(3 - \frac{4(2-a)}{\theta} l \right) \sigma_1 - \frac{2-a}{\theta} l \sigma_2 &= \frac{\mu h_1}{\theta}; \quad n = 1 \\ -\frac{2-a}{\theta} l \sigma_{n-1} + \left(3 - \frac{4(2-a)}{\theta} l \right) \sigma_n - \frac{2-a}{\theta} l \sigma_{n+1} &= \frac{\mu h_n}{\theta}; \quad n \geq 2 \end{aligned}$$

3.16

Sistem jednačina 3.16 možemo napisati u matričnom obliku:

$$\begin{pmatrix} \rho_0 & \alpha_{01} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \alpha_{10} & \rho & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & \rho & -1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -1 & \rho & -1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \vec{\sigma} = \eta \vec{h} \quad \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_s \\ \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \vec{h} = \begin{pmatrix} h_s \\ h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

3.17

Pri čemu smo uveli oznake:

$$\rho = \frac{3\theta}{(2-a)l} - 4; \quad \rho_0 = \frac{3\theta}{(2-a)l} - 4 \frac{l_s}{l};$$

$$\eta = \frac{\mu}{(2-a)l\theta}; \quad \alpha_{01} = \alpha_{10} = -\frac{l_1}{l}$$

Jednačina (3.17) se može transformisati na sledeći način:

$$\begin{aligned}\hat{D}\vec{\sigma} &= \eta\vec{h} \\ \hat{D} &= \hat{A} + \hat{\Delta} \\ \vec{\sigma} &= (I + \hat{A}^{-1}\hat{\Delta})^{-1}\hat{A}^{-1}\eta\vec{h}\end{aligned}\tag{3.18}$$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \rho & -1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & \rho & -1 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & \rho & -1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Može se pokazati da se matrični elementi beskonačne matrice \hat{A}^{-1} mogu zapisati kao (5):

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

gde je: 3.19

$$\rho = X + \frac{1}{X}; \quad |X| \leq 1$$

Matrice $\hat{\Delta}$ i $\hat{\alpha} = (I + \hat{B}\hat{\Delta})$ su oblika:

$$\hat{\Delta} = \left(\begin{array}{cc|cc} \hat{\Delta}_1 & \hat{\Delta}_2 & 0 & \dots \\ \hat{\Delta}_3 & 0 & 0 & \dots \\ \hline 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{array} \right); \quad \hat{\alpha} = \left(\begin{array}{c|c} \hat{M} & 0 \\ \hline \hat{N} & I \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc|ccc} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & \dots \\ M_{21} & M_{22} & 0 & 0 & \dots \\ \hline N_{31} & N_{32} & 1 & 0 & \dots \\ N_{41} & N_{42} & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{array} \right)$$

3.20

Na osnovu (3.18) i (3.20) dobija se:

$$\vec{\sigma} = \left(\begin{array}{c|c} \frac{\text{adj}\hat{M}}{\det\hat{M}} & 0 \\ \hline -\frac{\text{Nadj}\hat{M}}{\det\hat{M}} & I \end{array} \right) \hat{B}\eta\vec{h} = \hat{G}\eta\vec{h} \quad 3.21$$

Temperature faznih prelaza određene su singularitetima matrice G , jer spontana magnetizacija postoji i kada je spoljašnje polje jednako nuli. Kao što se vidi iz (3.21) singulariteti matrice G određeni su singularitetima matrice B i rešenjima jednačine $\det M=0$. Razmotrićemo dva slučaja:

a) Kada je $I_1=I$, tada je $\Delta_2 = \Delta_3 = 0$ pa jednačina $\det M=0$ ima jedno rešenje:

$$\det M = 1 + x\Delta_1 = 0 \quad 3.22$$

Pol $x=-1/\Delta_1$ je posledica prisustva površinskih efekata.

b) Kada je $I_1 \neq I_s \neq I$, jednačina $\det M=0$ ima dva rešenja:

$$\det M = 1 + \Delta_1 x + (\Delta_2 + \Delta_3 - \Delta_2 \Delta_3)x^2 = 0 \quad 3.23$$

Ovaj slučaj dalje nećemo razmatrati.

Singulariteti matrice B određuju temperature faznih prelaza karakteristične za beskonačne kristale. Iz izraza (3.18) može se videti da je $x=1$ jedini pol ove matrice jer se za $x=-1$ dobija alternativni red za B_{mn} . Ovaj pol određuje temperaturu faznog prelaza u zapremini:

$$\rho = \frac{3\theta_c}{(2-a)|l|} - 4 = 2$$

Odakle sledi:

$$\theta_c = \frac{(2-a)|l|(0)}{3}; \quad l(0) = 6l \quad 3.24$$

Pol koji se javlja usled prisustva efekta površine obeležićemo sa

$$x_s = -\frac{1}{\Delta_1} = \frac{1}{4(\varepsilon-1)}; \quad \varepsilon = \frac{|l_s|}{|l|}$$

Što daje:

$$\rho_s = x_s + \frac{1}{x_s} = \frac{3\theta_c^s}{(2-a)|l|} - 4 \quad 3.25$$

$$\theta_c^s = \frac{(2-a)|l|}{3} \frac{16\varepsilon(1-\varepsilon)-1}{4(1-\varepsilon)}$$

Relacije (3.24) i (3.25) ukazuju na sledeće:

1) Kada je $\varepsilon = \frac{5}{4}$, temperature θ_c^s i θ_c su jednake.

2) Kada je $\varepsilon > \frac{5}{4}$, $\theta_c^s > \theta_c$.

3) Kada je $\varepsilon < \frac{5}{4}$, tada je $|x_s| > 1$ pa do faznog prelaza dolazi

samo na temperaturi $\theta_c^s = \theta_c$.

Znači, tačka faznog prelaza u sloju $n=0$ koja se javlja usled efekata površine može biti veća ili jednaka zapreminskoj temperaturi faznog prelaza u zavisnosti od odnosa interakcije izmene na površini i unutar zapremine kristala.

Pokazuje se da su fazni prelazi praćeni pojavom singulariteta izvoda magnetizacije. Kako je unutrašnja energija proporcionalna magnetizaciji, to su fazni prelazi istovremeno i singulariteti izvoda unutrašnje energije ili bilo koje veličine koja se izražava preko unutrašnje energije. Za Hajzenbergov feromagnet fazni prelaz iz feromagnete u paramagnetu fazu svrstava se u fazne prelaze druge vrste, jer se odigrava trenutno. Za razliku od faznog prelaza druge vrste, fazni prelaz prve vrste (topljenje, isparavanje) zahteva konačan interval vremena, dok unutrašnja energija sistema ostaje konstantna.

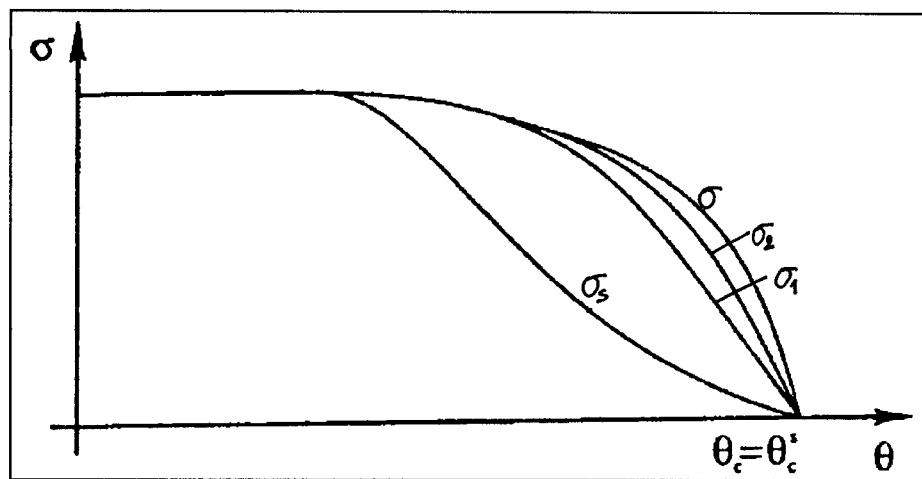
Linearizacija jednačina za magnetizaciju i kvadrupolni moment ima smisla samo kada je $\theta \approx \theta_c^* \approx \theta_c$. Lako možemo videti da za Hajzenbergov feromagnet sa bikvadratnom interakcijom fazni prelaz može biti kako prve tako i druge vrste, u zavisnosti od parametra a . U okolini tačke faznog prelaza izraze za magnetizaciju i kvadrupolni moment (3.14) možemo razviti u red. Pri tome se dobija:

$$\sigma^2 \left(\frac{3a - 2}{2(1-a)} \right) \approx \frac{8}{3} \left(1 - \frac{\theta_c}{\theta} \right) \quad 3.26$$

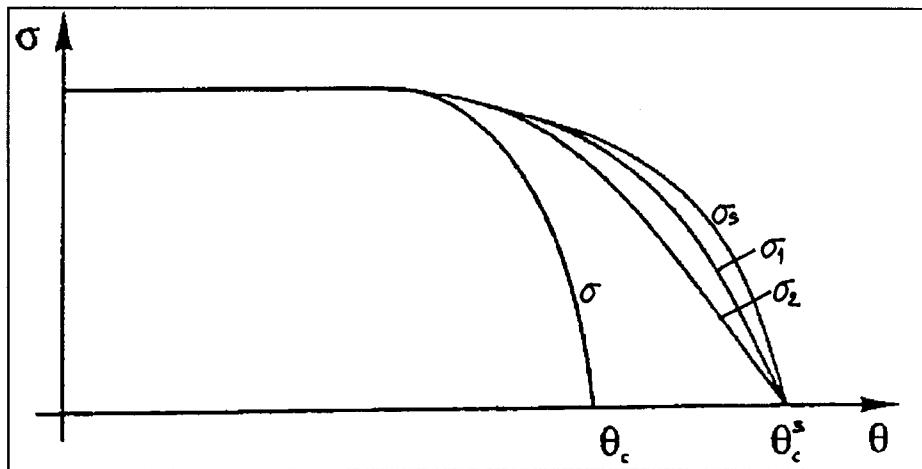
$$\sigma \approx C(a) \sqrt{\theta_c - \theta} \quad 3.27$$

Iz izraza (3.26) i (3.27) vidi se da se za $a \geq 2/3$ javlja fazni prelaz prve vrste, dok za $a < 2/3$ imamo fazni prelaz druge vrste isto kao i u slučaju beskonačnog kristala.

Numeričkim metodama mogu se dobiti grafici koji ukazuju na temperaturno ponašanje magnetizacije(7). Pokazuje se da već za mali broj slojeva ($n \geq 10$) magnetizacija ima identično ponašanje kao i magnetizacija u zapremini(sl.2.1 i sl.2.2).



2.1



2.2

?

o

3. GRINOVE FUNKCIJE ZA POLUBESKONAČNI HAJZENBERGOV FEROMAGNET

Izračunavanje Grinovih funkcija za polubeskonačni Hajzenbergov feromagnet sa bikvadratnom interakcijom i jednojonskom anizotropijom za spin S jeste centralni deo ovog diplomskog rada.

Metodom Grinovih funkcija se pored energije elementarnih ekscitacija, mogu odrediti i parametri uređenosti sistema (magnetizacija...), kompleksne susceptibilnosti sistema, kao i korelacione funkcije koje su povezane sa parametrima rasejanja različitih čestica na datom sistemu.

Polazimo od Hamiltonijana; (posmatramo slučaj kada je $a < 1$):

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} I_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{a}{2} \sum_{i,j} I_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 - \sum_i D_i (S_i^z)^2 - \mu \mathcal{H} \sum_i S_i^z \quad 4.1$$

Definišimo operatore:

$$\hat{S}_i^\pm = \hat{S}_i^x \pm i \hat{S}_i^y \quad 4.2$$

za koje važe komutacione relacije:

$$[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z \delta_{ij} \quad [S_i^z, S_j^\pm] = \pm S_i^\pm \delta_{ij} \quad 4.3$$

Operator kvadropoljnog momenta je:

$$\hat{Q}_i^\circ = 3(\hat{S}_i^z)^2 - S(S+1) \quad 4.4$$

Napisaćemo jednačinu kretanja za Grinovu funkciju $\langle\langle S_m^+ | S_n^- \rangle\rangle$ u energetskoj reprezentaciji:

$$E\langle\langle S_m^+ | S_n^- \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \langle [S_m^+, S_n^-] \rangle + \langle \langle [S_m^+, H] | S_n^- \rangle \rangle \quad 4.5$$

Koristeći (4.3) i (4.1) možemo izračunati komutator $[S_m^+, H]$

$$\begin{aligned}
 (E - \mu\mathcal{H}) \langle \langle S_m^+ | S_n^- \rangle \rangle &= \frac{i}{2\pi} f_m \delta_{mn} + D_m \langle \langle A_m^2 | S_n^- \rangle \rangle + \\
 &+ \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_j I_{mj} \langle \langle S_m^+ S_j^z - S_m^z S_j^+ | S_n^- \rangle \rangle + \\
 &+ \frac{a}{2} \sum_j I_{mj} \left(\langle \langle Q_j^0 A_m^2 | S_n^- \rangle \rangle - \langle \langle Q_m^0 A_j^2 | S_n^- \rangle \rangle + \right. \\
 &\quad \left. + \langle \langle (S_m^+)^2 A_j^1 | S_n^- \rangle \rangle - \langle \langle (S_j^+)^2 A_m^1 | S_n^- \rangle \rangle \right)
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

gde smo uveli oznake:

$$\begin{aligned}
 A_m^1 &= S_m^- S_m^z + S_m^z S_m^- \\
 A_m^2 &= S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+ \\
 f_m &= \langle [S_m^+, S_m^-] \rangle
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Na temperaturama bliskim apsolutnoj nuli, možemo izvršiti dekuplovanje na sledeći način:

$$\begin{aligned}
 \langle \langle A_m^2 | S_n^- \rangle \rangle &\approx (2 \langle S_m^z \rangle - 1) \langle \langle S_m^+ | S_n^- \rangle \rangle \\
 \langle \langle Q_m^0 A_j^2 | S_n^- \rangle \rangle &\approx \langle Q_m^0 \rangle (2 \langle S_j^z \rangle - 1) \langle \langle S_j^+ | S_n^- \rangle \rangle
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

na osnovu čega se jednačina (4.6) može napisati:

$$\begin{aligned}
 \omega g_{mn} &= \frac{i}{2\pi} f_m \delta_{mn} + D_m (2 \langle S_m^z \rangle - 1) g_{mn} - \\
 &- \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_j I_{mj} (\langle S_m^z \rangle g_{jn} - \langle S_j^z \rangle g_{mn}) \\
 &+ \frac{a}{2} \sum_j I_{mj} (q_j (2 \langle S_m^z \rangle - 1) g_{mn} - q_m (2 \langle S_j^z \rangle - 1) g_{jn})
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

gde je

$$g_{mn} = \langle\langle S_m^+ | S_n^- \rangle\rangle \quad 4.10$$

$$\omega = E - \mu\mathcal{H} \quad q_m = \langle Q_m^0 \rangle$$

Furije transform jednačine(4.9) se može izvršiti samo u ravni XOY kao što je rečeno u prvom poglavlju.

$$g_{mn}(E) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{\vec{q}_{||}} g_{mn}(\vec{q}_{||}, E) e^{i\vec{q}_{||}(\vec{p}_m - \vec{p}_n)} \quad 4.11$$

$$\vec{q}_{||} = (q_x, q_y); \quad \vec{p}_m = n_x a \vec{i} + n_y a \vec{j}; \quad m = m_z$$

Jednačina (4.9) nakon izvršenog furije transforma, napisana "po slojevima" duž z ose glasi: $\sigma_m = \frac{\langle S_m^z \rangle}{S}$.

$m = 1$:

$$\left[\begin{array}{l} \omega - \left(1 - \frac{a}{2}\right)(4I_s S \sigma_s + I S \sigma_2) + \left(1 - \frac{a}{2}\right) S \sigma_s I_s(\vec{q}_{||}) - \\ - (2S\sigma_s - 1) \left[D_s + \frac{a}{2} (4I_s S q_s + I S q_2) - \frac{a}{2} q_s I_s(\vec{q}_{||}) \right] \end{array} \right] g_{1n} + \\ + I \left[\left(1 - \frac{a}{2}\right) S \sigma_s + \frac{a}{2} (2S\sigma_2 - 1) q_s \right] g_{2n} = \frac{i}{2\pi} f_s \delta_{1n}$$

$m \geq 2$:

$$\left[\begin{array}{l} \omega - \left(1 - \frac{a}{2}\right) I S (4\sigma_m + \sigma_{m-1} + \sigma_{m+1}) + \left(1 - \frac{a}{2}\right) S \sigma_m I(\vec{q}_{||}) - \\ - (2S\sigma_m - 1) \left[D_m + \frac{a}{2} I (4q_m + q_{m-1} + q_{m+1}) - \frac{a}{2} q_m I(\vec{q}_{||}) \right] \end{array} \right] g_{mn} + \\ + I \left[\left(1 - \frac{a}{2}\right) S \sigma_m + \frac{a}{2} (2S\sigma_{m-1} - 1) q_m \right] g_{(m-1)n} + I \left[\left(1 - \frac{a}{2}\right) S \sigma_m + \frac{a}{2} (2S\sigma_{m+1} - 1) q_m \right] g_{(m+1)n} = \frac{i}{2\pi} f_m \delta_{mn}$$

4.12

ili u matričnom obliku:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & 0 & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & 0 & \cdots \\ 0 & A_{32} & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & A_{nn} & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} & \cdots & \cdots \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & g_{mn} & \cdots \end{pmatrix} = \frac{i}{2\pi} \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & f_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & f_m & \cdots \end{pmatrix}$$

Obzirom da ćemo u ovom radu analizirati energije površinskih magnona na temperaturi T=0, možemo uvesti sledeće aproksimacije:

$$\sigma_1 = \sigma_s \quad \sigma_2 = \sigma_3 = \cdots = \sigma$$

$$q_1 = q_s \quad q_2 = q_3 = \cdots = q$$

$$D_1 = D_s \quad D_2 = D_3 = \cdots = D$$

gde se σ_s , q_s i D_s odnose na površinu, a σ , q i D na unutrašnjost kristala.

Izrazi (4.12) predstavljaju beskonačni sistem jednačina koji možemo napisati u matričnom obliku:

$$\begin{pmatrix} D_{00} & D_{01} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ D_{10} & D_{11} & D_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & D_1 & D_0 & D_1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & D_1 & D_0 & D_1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{1n} \\ g_{2n} \\ g_{3n} \\ g_{4n} \\ \vdots \end{pmatrix} = \frac{i}{2\pi} \begin{pmatrix} f_s & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & f & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & f & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & f & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

4.13

pri čemu smo uveli sledeće oznake:

$$\begin{aligned}
 D_{00} &= \omega - \left(1 - \frac{a}{2}\right)S(4l_s\sigma_s + l\sigma) + S\left(1 - \frac{a}{2}\right)\sigma_l l_s(\bar{q}_{||}) - \\
 &\quad -(2S\sigma_s - 1)\left[D_s + \frac{a}{2}S(4l_s q_s + lq) - \frac{a}{2}q_s l_s(\bar{q}_{||})\right] \\
 D_{11} &= \omega - \left(1 - \frac{a}{2}\right)S(5l\sigma + l\sigma_s) + S\left(1 - \frac{a}{2}\right)\sigma_l l(\bar{q}_{||}) - \\
 &\quad -(2S\sigma - 1)\left[D + \frac{a}{2}(5ql + lq_s) - \frac{a}{2}ql(\bar{q}_{||})\right]
 \end{aligned} \tag{4.14a}$$

$$\begin{aligned}
 D_0 &= \omega - \left(1 - \frac{a}{2}\right)S6l\sigma + S\left(1 - \frac{a}{2}\right)\sigma_l l(\bar{q}_{||}) - \\
 &\quad -(2S\sigma - 1)\left[D + \frac{a}{2}6lq - \frac{a}{2}ql(\bar{q}_{||})\right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_{01} &= l\left(1 - \frac{a}{2}\right)S\sigma_s + \frac{a}{2}l(2S\sigma - 1)q_s \\
 D_{10} &= l\left(1 - \frac{a}{2}\right)S\sigma + \frac{a}{2}l(2S\sigma_s - 1)q
 \end{aligned} \tag{4.14b}$$

$$l(\bar{q}_{||}) = 2l(\cos q_x a_0 + \cos q_y a_0)$$

Jednačinu (4.13) možemo napisati u obliku:

$$\hat{D}\hat{G} = \frac{i}{2\pi}\hat{F}_0 \tag{4.15}$$

Ovo je nehomogena jednačina, što zahteva izračunavanje inverzne matrice D^{-1} . Matricu D možemo transformisati na sledeći način:

$$\hat{D} = D_1 (\hat{D}_0 + \hat{\Delta}) = D_1 \left[\begin{pmatrix} \rho & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \rho & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta_1 & \Delta_2 & 0 & 0 & \dots \\ \Delta_3 & \Delta_4 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \right]$$

4.16

$$\rho = \frac{D_0}{D_1}; \quad \Delta_1 = \frac{D_{00} - D_0}{D_1}; \quad \Delta_2 = \frac{D_{01} - D_1}{D_1};$$

$$\Delta_3 = \frac{D_{10} - D_1}{D_1}; \quad \Delta_4 = \frac{D_{11} - D_0}{D_1}$$

4.17

Iz jednačina (4.13) i (4.16) sledi:

$$\hat{G} = \frac{i}{2\pi} \hat{D}^{-1} \hat{F}_0 = \frac{i}{2\pi} (I + \hat{D}_0^{-1} \hat{\Delta})^{-1} \hat{D}_0^{-1} D_1^{-1} \hat{F}_0$$

$$\hat{G} = \frac{i}{2\pi} \hat{\alpha} \hat{B} D_1^{-1} \hat{F}_0$$

Može se pokazati da je(5):

$$\hat{\alpha} = \left(\begin{array}{c|c} \frac{\text{adj} \hat{M}}{\det \hat{M}} & 0 \\ \hline \frac{-\hat{N} \text{adj} \hat{M}}{\det \hat{M}} & 1 \end{array} \right)$$

4.19

Takođe:

$$\left(\hat{D}_0^{-1}\right)_{mn} = B_{mn} = \frac{x^{m+n} - x^{|m-n|}}{-x + \frac{1}{x}}$$

gde je:

4.20

$$\rho = -x - \frac{1}{x}; \quad |x| \leq 1$$

Obzirom da nas interesuju elementarne eksitacije u blizini $T=0$, kada je $\sigma_s \approx \sigma \approx S$ uvodimo i sledeću aproksimaciju:

$$\Delta_1 \neq 0 \quad \Delta_2 = \Delta_3 = \Delta_4 = 0 \quad 4.21$$

Matrični elementi M_{mn} sada imaju oblik:

$$\begin{aligned} M_{11} &= B_{11}\Delta_1 + 1 & M_{21} &= B_{21}\Delta_1; & N_{m1} &= B_{m1}\Delta_1 \\ M_{12} &= 0; & M_{22} &= 1 & N_{m2} &= 0 \end{aligned} \quad 4.22$$

$$\det M = M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = B_{11}\Delta_1 + 1 = 1 - x\Delta_1 \quad 4.23$$

Izraz (4.18) možemo napisati u obliku:

$$\begin{aligned} \hat{G} &= \frac{i}{2\pi D_1} (\hat{B}_s + \hat{B})(\hat{F} + \hat{F}_s) \quad \hat{F} = f\hat{I} \\ \hat{B}_s &= \begin{pmatrix} \alpha_{11}B_{11} - B_{11} & \cdots & \alpha_{11}B_{in} - B_{in} & \cdots \\ \alpha_{21}B_{11} & \cdots & \alpha_{21}B_{in} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \\ \alpha_{m1}B_{11} & \cdots & \alpha_{m1}B_{in} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \\ \hat{F}_s &= \begin{pmatrix} f_s - f & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \end{aligned} \quad 4.24$$

Matrični elementi:

$$\begin{aligned}\alpha_{11} &= \frac{(\text{adj}M)_{11}}{\det M} = \frac{1}{1 - x\Delta_1}, \\ \alpha_{m1} &= \frac{(-N\text{adj}M)_{m1}}{\det M} = \frac{x^m \Delta_1}{1 - x\Delta_1} \quad m \geq 2 \\ \Rightarrow \alpha_{m1} &= \frac{x^m \Delta_1}{1 - x\Delta_1} + \delta_{m1} \quad m \geq 1\end{aligned}\quad 4.25$$

Na osnovu (4.24) dobija se:

$$\begin{aligned}g_{mn} &= \frac{\text{if}}{2\pi D_1} B_{mn} + \frac{\text{if}}{2\pi D_1} \alpha_{m1} B_{1n} + \frac{i(f_s - f)}{2\pi D_1} (\alpha_{m1} B_{1n} + B_{m1}) \delta_{1n} \\ g_{mn} &= \frac{\text{if}}{2\pi D_1} B_{mn} - \frac{\text{if}}{2\pi D_1} \frac{x^{m+n} \Delta_1}{1 - x\Delta_1} - \frac{i(f_s - f)}{2\pi D_1} \left(\frac{x^{m+n} \Delta_1}{1 - x\Delta_1} + x^m \right) \delta_{1n}\end{aligned}\quad 4.26$$

Grinova funkcija (4.26) sadrži zavisnost od energije preko promenljive x , dok veličina Δ_1 opisuje površinske efekte za dati sistem.

Za dalji račun, pogodno je uvesti funkciju generatrisu:

$$G_{st}(\vec{q}, E) = \sum_{n,m=1}^{\infty} s^n t^m G_{mn}(\vec{q}, E)\quad 4.27$$

Na osnovu (4.26) i (4.27) dobija se:

$$g_{st}(\vec{q}, E) = -\frac{\text{if}}{2\pi D_1} \frac{xts}{(1 - xs)(1 - xt)(1 - st)} + \frac{\text{if}}{2\pi D_1} \frac{\Delta_1 x^2 st}{(1 - xs)(1 - xt)(1 - x\Delta_1)}\quad 4.28$$

pri čemu smo zanemarili treći član na desnoj strani izraza (4.26), u skladu sa našom aproksimacijom.

Na makroskopskim dimenzijama važe periodični granični uslovi duž z ose: $e^{\pm iq_Na} = 1$. Parametre s i t možemo napisati kao $s=\exp(iq'za)$ i $t=\exp(-iq'za)$.

Furije transform po z koordinati definišemo na sledeći način:

$$g_{mn}(\vec{q}, E) = \frac{1}{N_2^2} \sum_{q_z, q'_z} e^{-iq_z n a + iq'_z m a} g(q_z, q'_z, \vec{q}, E), \quad 4.29$$

jer ne postoji translatorna invarijantnost u tom pravcu. Na osnovu (4.27) i (4.29) može se uočiti da se funkcija $g(q_z, q'_z, \vec{q}, E)$ dobija zamenom izraza za s i t, pri čemu se može pokazati da je $st/(1-st)=N_2\delta q_z q'_z$, što daje:

$$\begin{aligned} g(q_z, q'_z, \vec{q}, E) &= -\frac{\text{if}}{2\pi D_1} \frac{x N_2 \delta_{q_z q'_z}}{(1 - x \exp(iq_z a))(1 - x \exp(-iq_z a))} + \\ &+ \frac{\text{if}}{2\pi D_1} \frac{x^2 \Delta_1}{(1 - x \Delta_1)(x - \exp(-iq_z a))(x - \exp(iq_z a))} \end{aligned} \quad 4.30$$

Na osnovu (4.20) i (4.30):

$$g(q_z, q'_z, \vec{q}, E) = \frac{f}{2\pi D_1} \frac{N_2 \delta_{q_z q'_z}}{(\rho + \cos q_z a)} + \frac{\text{if}}{2\pi D_1} \frac{\left(1 - \frac{\Delta_1}{x}\right)(x - e^{iq_z a})(x - e^{-iq_z a})}{(\rho - \rho_s)(\rho + \cos q_z a)(\rho + \cos q'_z a)} \quad 4.31$$

gde je $\rho_s = -\frac{1}{\Delta_1} - \Delta_1$. S obzirom na vezu između ρ i E (4.14a), za

Grinovu funkciju dobijamo:

$$g(q_z, q'_z, \vec{q}, E) = \frac{f}{2\pi} \frac{N_2 \delta_{q_z q'_z}}{E - E_b(\vec{Q})} + \frac{\text{if} D_1^2}{2\pi} \frac{\left(1 - \frac{\Delta_1}{x}\right)(x - e^{iq_z a})(x - e^{-iq'_z a})}{(E - E_s(\vec{q}))(E - E_b(\vec{Q}))(E - E_b(\vec{Q}'))} \quad 4.32$$

4.32

Polovi Grinovih funkcija određuju energije elementarnih ekscitacija. Prvi član izraza (4.32) predstavlja Grinovu funkciju za beskonačni feromagnetik, dok drugi član opisuje perturbacioni efekat površine. Pomoću Grinovih funkcija može se izračunati i statistička srednja vrednost $\langle S_n^- S_m^+ \rangle$ (korelaciona funkcija). Zahvaljujući ovome metod Grinovih funkcija predstavlja jedno od najefikasnijih oruđa u teorijskoj

fizici. Kombinovanjem komutacionih relacija za spinske operatore i odgovarajućih korelacionih funkcija, mogu se izračunati magnetizacija, kvadrupolni momenti, magnetne susceptibilnosti...

Obzirom da nas interesuje samo energija elementarnih ekscitacija, nećemo izračunavati korelacione funkcije. U narednom poglavljiju analiziraćemo spekture površinskih i zapreminskih magnona.

4. ELEMENTARNE EKSCITACIJE ZA POLUBESKONAČNI HAJZENBERGOV FEROMAGNET

U ovom poglavlju ćemo analizirati elementarne eksitacije kod feromagnetika na temperaturi $T \geq 0$ za spin S . Prisustvo površine utiče na osobine elementarnih eksitacija (magnona). U feromagnetiku se stoga pored zapreminskih magnona javljaju i površinski. Kako smo se ograničili na niske temperature, dozvoljeno nam je da srednju vrednost z komponente spina zamenimo sa S .

Na osnovu izraza (4.14a), dobija se:

$$\rho_s = \frac{D_{00}}{D_1} = \frac{E - (2S - 1)D_s - S\alpha(a)(I_s(0) - I_s(\vec{q}_{||}))}{IS\alpha(a)} \quad 5.1$$

$$\rho = \frac{D_0}{D_1} = \frac{E - (2S - 1)D - S\alpha(a)(I(0) - I(\vec{q}_{||}))}{IS\alpha(a)}$$

gde smo uveli oznake:

$$\begin{aligned} I_s(0) &= 4 I_s + I & I_s(\vec{q}_{||}) &= 2 I_s v_{\vec{q}} \\ I(0) &= 6 I & I(\vec{q}_{||}) &= 2 I v_{\vec{q}} \\ v_{\vec{q}} &= \cos q_x a_0 + \cos q_y a_0 \\ \alpha(a) &= 1 + 2Sa(S - 1) \end{aligned} \quad 5.2$$

Drugi član Grinove funkcije (4.32) ima tri pola: jedan određuje površinske magnone, a preostala dva zapreminske. Na osnovu (4.30) za zapreminske magnone imamo sledeće polove:

$$x_1 = \exp(-iqz a_0) \quad x_2 = \exp(iq'z a_0).$$

Kako energija elementarnih eksitacija ne zavisi od x već samo od ρ , a ρ je oblika $x+1/x$, uočavamo da ovim magnonima, zapravo odgovara ista energija.

$$\rho = -2\cos q z a_0 \quad -\pi < q z a_0 < \pi \quad 5.3$$

gde je qz realan broj.

Energija zapreminskih magnona na osnovu (5.1) je:

$$E = (2S - 1)D + S\alpha(a)(l(0) - l(\vec{q})) \quad 5.4$$

$$l(\vec{q}) = 2l(\cos q_x a_0 + \cos q_y a_0 + \cos q_z a_0)$$

Površinske ekscitacije određuje rešenje jednačine $\det M=0$, odnosno:

$$1 - \Delta_1 x = 0 \Rightarrow x = \frac{1}{\Delta_1} \quad 5.5$$

Imajući u vidu jednačine kretanja za spinski operator S_n^+ i definiciju spinskih talasa(8), iz rešenja (4.20) za Grinovu funkciju lako je zaključiti da se amplitude spinskih talasa ponašaju kao x^n . Iz uslova konvergentnosti inverzne matrice B (4.20) sledi $|x| \leq 1$, tako da možemo pisati $x=\exp(i\kappa a_0)$, odnosno $S_n^+ \propto e^{ikna_0}$, gde κ može biti realan ili kompleksan broj. Ako je κ realno i stavimo $\kappa=q_z$, dobijamo energiju zapreminskih magnona, izraz (5.4). Amplituda je: $S_n^+ \propto e^{iq_z n a_0}$, kao i u slučaju translatorynog invarijantnog kristala. Ako je κ kompleksan broj, tj. $\kappa=\alpha+i\eta$ tada je:

$$\rho = -2(\cos \alpha a_0 \operatorname{ch} \eta a_0 - i \sin \alpha a_0 \operatorname{sh} \eta a_0) \quad 5.6$$

Kako ρ mora biti realan broj, $\sin \alpha a_0$ mora biti 0, odnosno $\alpha a_0 = 0$ ili $\alpha a_0 = \pi$ (ostale vrednosti za α daju iste rezultate).

1.) U slučaju kada je $\alpha=0$

$$x = e^{-\eta a_0}$$

$$\rho = -2\operatorname{ch} \eta a_0 \quad 5.7$$

$$E_s^a(\vec{q}_{||}, \eta) = (2S - 1)D + S\alpha(a)[l(0) - 2l\nu_{\vec{q}_{||}} - 2l\operatorname{ch} \eta a_0]$$

Amplituda spinskih talasa je: $A_n \propto e^{-\eta a_0 n}$. U ovom slučaju amplituda eksponencijalno opada sa rastojanjem od površine, a obzirom na to da faza ne zavisi od n , svi spinovi precesiraju u fazi. Ovakve ekscitacije nazivaju se akustični površinski magnoni. Njihova energija je manja (ili jednaka) od energije zapreminskih magnona.

2.) Ukoliko je $\alpha a_0 = \pi$

$$\begin{aligned} x &= e^{-\eta a_0} \\ p &= 2ch\eta a_0 \quad 5.8 \\ E_s^o(\vec{q}_{||}, \eta) &= (2S - 1)D + S\alpha(a)[l(0) - 2lv_{\vec{q}_{||}} + 2lh\eta a_0] \end{aligned}$$

Amplituda je: $A_n \propto (-1)^n e^{-\eta a_0 n}$. I u ovom slučaju, amplituda eksponencijalno opada dok je precesija defazovana za π od sloja do sloja. Ovi magnoni poznati su kao optički. Njihova energija je veća od energije zapreminskih magnona.

Razmotrimo sada detaljnije rešenje jednačine $detM=0$; $x=1/\Delta_1$ gde je na osnovu (4.14a) i (4.17):

$$\Delta_1 = \frac{(2S - 1)(D - D_s) + S\alpha(a)[l(0) - l_s(0) - l(\vec{q}_{||}) + l_s(\vec{q}_{||})]}{IS\alpha(a)} \quad 5.9$$

Uslov $|x|<1$ će biti ispunjen na dva načina:

$$\begin{array}{lll} \text{Akustični magnoni:} & 0 < x < 1; & x = \exp(-\eta a_0) \\ \text{Optički magnoni:} & -1 < x < 0; & x = -\exp(-\eta a_0) \end{array}$$

Razmotrićemo detaljnije oba slučaja.

A. AKUSTIČNI MAGNONI

Na osnovu (5.9) može se dobiti nejednakost:

$$0 < \frac{S\alpha(a)}{(2S-1)(D - D_s) + S\alpha(a)[5l - 4l_s - 2(l - l_s)v_{\bar{q}}]} < 1$$

$$\text{odakle sledi: } (2S-1)(D - D_s) + S\alpha(a)(l - l_s)(2 - v_{\bar{q}}) > 0$$

$$\text{odnosno: } e^{\eta a_0} = 1 + \frac{2(l - l_s)}{l}(2 - v_{\bar{q}}) + \frac{(2S-1)(D - D_s)}{lS\alpha(a)} \geq 1$$

5.12

Gornje relacije poslužiće nam za analizu energije akustičnih magnona za različite vrednosti površinskih parametara u odnosu na zapreminske.

a.) Za $D=D_s$ nejednakost (5.12) se svodi na:

$$e^{\eta a_0} = 1 + \frac{2(l - l_s)}{l}(2 - v_{\bar{q}}) \geq 1 \quad 5.13$$

Kada je $|l|>l_s$ gornji uslov je zadovoljen za svako $\vec{q}_{||}$ jer je $-2 \leq v_{\bar{q}} \leq 2$, tj. akustični magnoni postoje u celoj dvodimenzionalnoj Briluenovoj zoni.

Za $|l|=l_s$ postoji samo zapreminski magnoni ($\eta=0$) dok u slučaju $|l|<l_s$ ne postoji akustični magnoni.

b) Kada je $D \neq D_s$ (5.12) možemo zapisati na sledeći način:

$$\begin{aligned} e^{\eta a_0} &= \frac{\varepsilon_b - \varepsilon_b^s + l S\alpha(a)}{l S\alpha(a)} \\ \varepsilon_b &= (2S - 1)D + 2l S\alpha(a)(2 - v_{\bar{q}}) \\ \varepsilon_b^s &= (2S - 1)D_s + 2l_s S\alpha(a)(2 - v_{\bar{q}}) \\ ch\eta a_0 &= \frac{[\varepsilon_b - \varepsilon_b^s + l S\alpha(a)]^2 + [l S\alpha(a)]^2}{2l S\alpha(a)[\varepsilon_b - \varepsilon_b^s + l S\alpha(a)]} \end{aligned} \quad 5.14$$

ε_b označava dno ("bottom") zapreminskog kontinuma.

Na osnovu (5.7) i (5.14):

$$E_s^a(\vec{q}, \eta) = \varepsilon_b - \frac{(\varepsilon_b - \varepsilon_b^s)^2}{\varepsilon_b - \varepsilon_b^s + l S\alpha(a)} \quad 5.15$$

U slučaju $D > D_s$, $l \geq l_s$ na osnovu izraza (5.14), dolazimo do sledećeg zaključka:

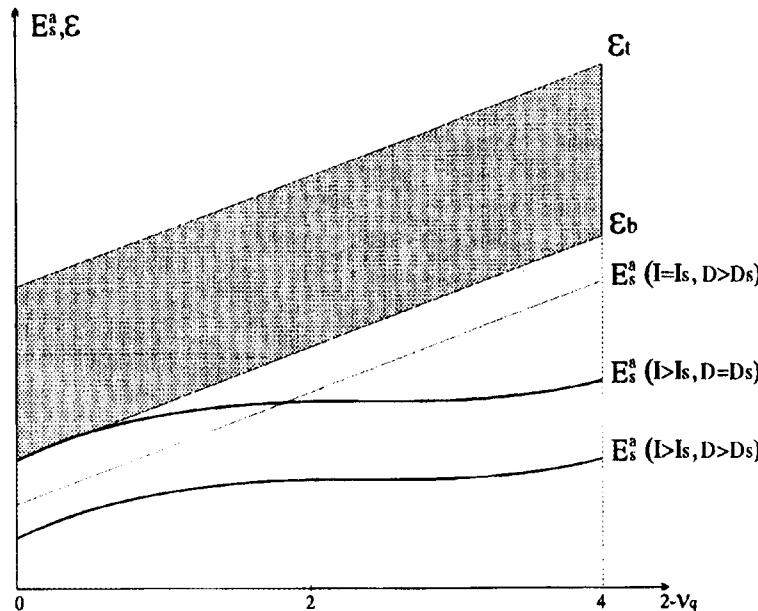
$$\varepsilon_b - \varepsilon_s^b > 0 \quad 5.16$$

Izraz (5.15) se može transformisati na sledeći način:

$$E_s^a(\vec{q}, \eta) = \varepsilon_b \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{l S\alpha(a)}{\varepsilon_b - \varepsilon_b^s}} \right) + \frac{\varepsilon_b^s}{1 + \frac{l S\alpha(a)}{\varepsilon_b - \varepsilon_b^s}} \quad 5.17$$

odakle se vidi da je za svako $v_{\bar{q}} < 0 < E_s^a < \varepsilon_b$ što znači da akustični magnoni u ovom slučaju postoje duž cele dvodimenzionalne Briluenove zone.

Svi ovi slučajevi dati su na slici 4.1, gde šrafirana oblast predstavlja zapreminske kontinuum.



Slika 4.1

c.) Posmatramo slučaj kada je $D < D_s$ i $I > I_s$. Uslov $e^{n_{a_0}} \geq 1$ na osnovu (5.14) zadovoljen je kada je $\varepsilon_b \geq \varepsilon_b^s$, odakle se dobija:

$$2S\alpha(a)(I - I_s)(2 - v_{\bar{q}}) \geq (2S - 1)(D - D_s) \quad 5.18$$

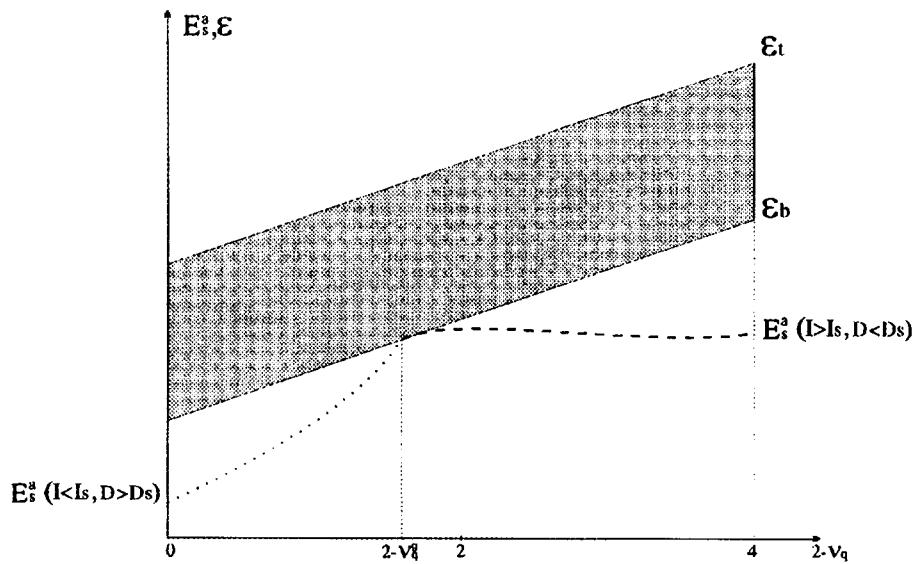
Nejednakost (5.18) nameće graničnu vrednost za $v_{\bar{q}}$

$$v_{\bar{q}}^g \leq 2 - \frac{(2S - 1)(D_s - D)}{2S\alpha(a)(I - I_s)} \quad 5.19$$

Prema tome, akustični magnoni postoje samo od granice $v_{\bar{q}} = v_{\bar{q}}^g$ pa do kraja dvodimenzionalne Briluenove zone.

Ako je $D > D_s$ a $I < I_s$, akustični magnoni postoje samo kada je $v_{\bar{q}} > v_{\bar{q}}^g$.

Ovi slučajevi su prikazani na slici 4.2.



Slika 4.2

d.) Za $D < D_s$ i $I > I_s$ u skladu sa uslovom $e^{\eta a_0} \geq 1$ a na osnovu izraza (5.14), može se zaključiti da ne postoji akustični površinski magnoni u ovom slučaju.

B. OPTIČKI MAGNONI

Optički površinski magnoni nastaju u slučaju $-1 < x < 0$. Za ovakve magnone karakteristično je postojanje fazne razlike od π između spiskih talasa susednih slojeva feromagnetskih materijala. U ovom slučaju je:

$$\begin{aligned}
 e^{\eta a_0} &= -\Delta_1 = \frac{-\varepsilon_b + \varepsilon_b^s - |S\alpha(a)|}{|S\alpha(a)|} \\
 \varepsilon_b &= (2S - 1)D + 2|S\alpha(a)|(2 - v_{\bar{q}}) \\
 \varepsilon_b^s &= (2S - 1)D_s + 2|S\alpha(a)|(2 - v_{\bar{q}}) \quad 5.20 \\
 \text{ch}\eta a_0 &= \frac{[-\varepsilon_b + \varepsilon_b^s - |S\alpha(a)|]^2 + [|S\alpha(a)|]^2}{2|S\alpha(a)|[-\varepsilon_b + \varepsilon_b^s - |S\alpha(a)|]}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_s^{\text{op}}(\vec{q}, \eta) &= \varepsilon_t + 2l S\alpha(a)(ch\eta a_0 - 1) \\ \varepsilon_t &= (2s - 1)D + 2l S\alpha(a)(4 - v_{\vec{q}}) \end{aligned} \quad 5.21$$

ε_t je gornja granica ("top") kontinuma zapreminskih magnona.

Analiziraćemo sledeće slučajevе za optičke magnone:

a.) $D_s < D$ i $|l_s| < l$. Na osnovу predhodnih relacija može se zapaziti da postojanje optičkih magnona u ovom slučaju nije moguće.

b.) $D_s = D$ i $|l_s| > l$. Izraz (5.20), nameće graničnu vrednost za $v_{\vec{q}}$

$$\begin{aligned} e^{\eta a_0} &= \frac{2(l_s - l)}{|l|}(2 - v_{\vec{q}}) - 1 \geq 1 \\ v_{\vec{q}}^g &\leq 2 - \frac{|l|}{|l_s - l|} \end{aligned} \quad 5.22$$

Obzirom da je $v_{\vec{q}} \geq -2$, koristeći (5.22) možemo dobiti graničnu vrednost za $|l_s|$ pri kojoj se javljaju optički površinski magnoni.

$$2 - \frac{|l|}{|l_s - l|} > -2 \Rightarrow |l_s| > \frac{5}{4}|l| \quad 5.23$$

Važno je uočiti da je ovaj uslov identičan sa uslovom koji važi za tačku površinskog faznog prelaza, $\theta_c^s \geq \theta_c$ (kao što je pokazano u drugom poglavljju).

c.) $D_s > D$ i $|l_s| \geq l$

$$\begin{aligned} \frac{2(l_s - l)}{|l|}(2 - v_{\vec{q}}) &\geq 2 - \frac{(2s - 1)(D_s - D)}{|l|S\alpha(a)} \\ v_{\vec{q}}^g &\leq 2 - \frac{|l|}{|l_s - l|} + \frac{(2s - 1)(D_s - D)}{2S\alpha(a)(|l_s - l|)} \end{aligned} \quad 5.24$$

Imajući u vidu da je $v_{\vec{q}} < 2$ iz (5.24) vidi se da u ovom slučaju optički površinski magnoni postoje u čitavoj Briluenovoj zoni, uz dodatni uslov:

$$(2S - 1)(D_s - D) \geq 2S |\alpha(a)| \quad 5.25$$

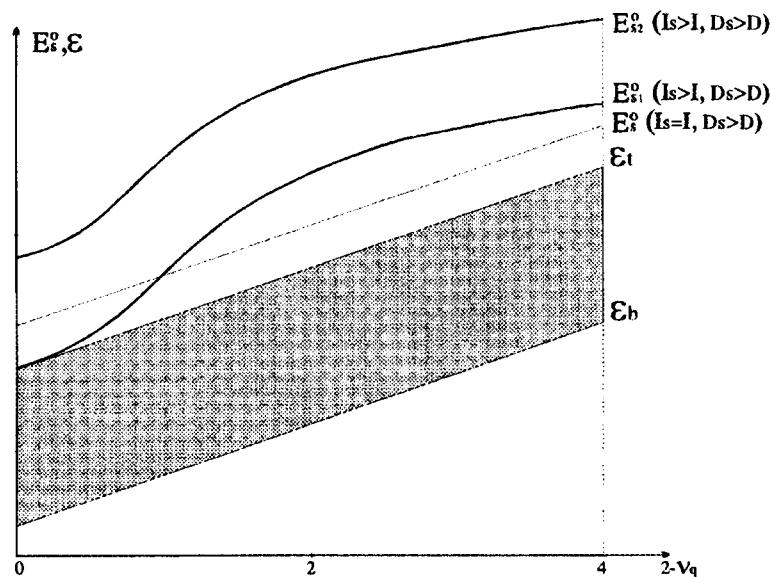
Iz granične vrednosti $v_{\vec{q}} = -2$ i iz izraza (5.24) proističe:

$$4l_s \geq 5l - \frac{(2S - 1)(D_s - D)}{2S|\alpha(a)|} \quad 5.26$$

Energija ovakvih magnona na osnovu (5.20) i (5.21) je:

$$\begin{aligned} E_s^o(\vec{q}, \eta) &= \epsilon_t + \frac{[(2S - 1)(D_s - D) - 2lS\alpha(a)]^2}{[(2S - 1)(D_s - D) - lS\alpha(a)]} \\ \epsilon_t &= (2S - 1)D + 2l S\alpha(a)(4 - v_{\vec{q}}) \end{aligned} \quad 5.27$$

Grafici energija optičkih ekscitacija za gornje slučajeve dati su na slici 4.3.



Slika 4.3

d.) $I_s < I$ i $D_s > D$. Izraz (5.20) uz ograničenje za x nameće sledeću nejednakost:

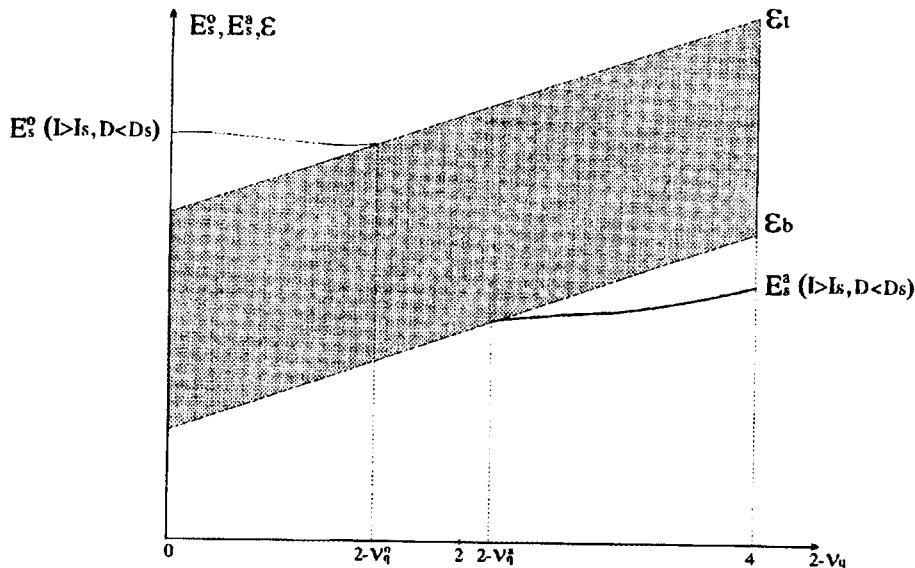
$$\frac{(2S - 1)(D_s - D)}{IS\alpha(a)} \geq 2 + \frac{2(I - I_s)}{I} (2 - v_{\bar{q}}) \quad 5.28$$

$$v_{\bar{q}}^g \geq 2 + \frac{I}{I - I_s} - \frac{(2S - 1)(D_s - D)}{2S\alpha(a)(I - I_s)}$$

Iz predhodnih izraza možemo zaključiti da $(2S-1)(Ds-D)$ mora biti veće od $Is\alpha(a)$, a u specijalnom slučaju kada je $(2S-1)(Ds-D) = Is\alpha(a)$, magnoni postoje samo u centru Briluenove zone. Iz predhodnog razmatranja i slučaja c.) za akustične magnone (5.19), može se uočiti veza:

$$v_{\bar{q}}^o = v_{\bar{q}}^a + \frac{I}{I - I_s} \quad 5.29$$

U dugotalasnoj oblasti postoje optički površinski magnoni a u kratkotalasnoj oblasti akustični površinski magnoni (slika 4.4).



Slika 4.4

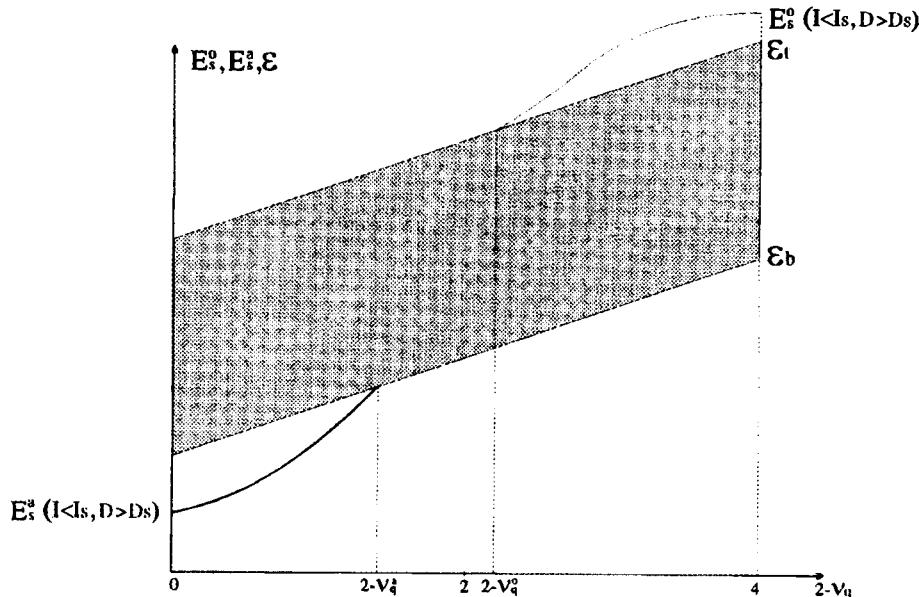
e.) $|l_s| > |l|$ i $D_s < D$. Optički magnoni postoje samo na krajevima Brillouinove zone. Analogno predhodnim razmatranjima za $v_{\vec{q}} = 2$, dobija se

$$4|l_s| \geq 5|l| + \frac{(2S - 1)(D - D_s)}{2S\alpha(a)} \quad 5.30$$

Uslov (5.30) sadrži u sebi i uslove (5.23) i (5.26) kada je $D = D_s$. Takođe, na osnovu izraza (5.28), može se uočiti i sledeća veza:

$$v_{\vec{q}}^a = 2 - \frac{(2S - 1)(D - D_s)}{2S\alpha(a)(|l_s| - |l|)} = v_{\vec{q}}^o + \frac{|l|}{|l_s| - |l|} \quad 5.31$$

U ovom slučaju u kratkotalasnoj oblasti javljaju se optički magnoni, dok su u dugotalasnoj oblast akustični magnoni (slika 4.5).



Slika 4.5

Koristeći prethodna razmatranja, možemo zaključiti da su za feromagnetik sa prostom kubnom struktukom na temperaturi $T=0$ karakteristični:

- a) Samo akustični magnoni kada je $|l| \geq |l_s|$; $D \geq D_s$
- b) Samo optički magnoni kada je $|l_s| \geq |l|$; $D_s > D$
- c) I akustični i optički magnoni kada je $|l_s| < |l|$; $D_s > D$ ili $|l_s| > |l|$; $D_s < D$
Ali ne za iste vrednosti $v_{\vec{q}}$.

ZAKLJUČAK

Imajući u vidu postavljeni cilj ovog rada, možemo zaključiti da je on skoro u potpunosti ispunjen.

U drugoj glavi dati su izrazi za magnetizaciju i kvadrupolni moment u aproksimaciji molekulskog polja za polubeskonačni feromagnetik sa bikvadratnom interakcijom. Izvršena je linearizacija datih jednačina i određene tačke faznog prelaza za površinsku i bałkovsku magnetizaciju. Sistem jednačina za magnetizaciju i kvadrupolni moment nije rešen numerički, iz tehničkih razloga.

U trećoj glavi izračunate su Grinove funkcije za polubeskonačni Hajzenbergov feromagnet, pomoću kojih je određen spektar elementarnih ekscitacija sistema za proizvoljni spin, u blizini apsolutne nule.

U četvrtom poglavlju detaljno je analiziran spektar površinskih ekscitacija u zavisnosti od odnosa integrala izmene i jednojonske anizotropije na površini i u bałku.

Dalje, treba izračunati korelace funkcije pomoću kojih se mogu odrediti i druge karakteristike sistema, ali to nije predmet ovog rada.

Kako je razliku u odnosu na fizikalni
zajedno sa površinsko efekte polubeskonačni
zadaci je ne obrazd bio laskavosti
prav.

LITERATURA:

- (1) D.C. Mattis, The Theory of Magnetism I, 1981, Springer-Verlag Berlin...
- (2) H.H. Chen, P.M. Levy, Phys. Rev. B7, 1973, 4267.
- (3) E. Nagaev, Magnetiki so slozhnymi obmennymi vzai modeistviyami (Nauka Moskva, 1988).
- (4) B.M. Matveev, Žuru, Eksp. i Teor. Fiz. 4 (1973) 1626.
- (5) M.G. Cottam, J. Phys. C: Solid State Phys, 9 (1976) 2121.
- (6) B.S.Tošić: Statistička fizika, PMF Novi Sad, 1978.
- (7) M.G. Cotam, D.R. Tilley and B. Žekš, J.Phys.C: Solid State Phys 17 (1984) 1793-1824.
- (8) Milica Pavkov, Diplomski rad, PMF Novi Sad, 1995.
- (9) E.B. Brown, Physics Letters A 181 (1993) 267,268
- (10) J.N.B. Moraes, W. Figueiredo, Phys. Rev. B44 (1991) 11784