U N I V E R Z I T E T   U   N O V O M   S A D U

P R I R O D N O M A T E M A T I Č K I   F A K U L T E T

Mr. Stanoje Stojanović

FONONSKA I MAGNONSKA STANJA U STRUKTURAMA SA NARUŠENOM TRANSLACIONOM SIMETRIJOM I TERMODINAMIČKA ANALIZA OVAKVIH STRUKTURA

-d o k t o r s k a   d i s e r t a c i j a-

N O V I   S A D

1 9 7 4.

Ovim putem želim da izrazim zahvalnost Dr. Bratislavu S. Tošiću, vanrednom profesoru Prirodnomatematičkog fakulteta u Novom Sadu i mentoru ovog rada, koji mi je pomogao pri izboru teme, kao i korisnim sugestijama i diskusijama u toku rada.

Posebno se zahvaljujem Mr. Mariu J. Škrinjaru, asistentu Prirodnomatematičkog fakulteta u Novom Sadu, na korisnim diskusijama u toku rada na ovoj tezi.

Tehničku pomoć u izradi ove teze pružili su M. Stanojević i S. Božić, na čemu im ovom prilikom zahvaljujem.

Autor

S A D R Ž A J

UVOD

Poslednjih godina naglo se povećao interes za izučavanje kristalnih struktura sa narušenom translacionom simetrijom. Ovaj interes izazvan je u prvom redu opštom tendencijom da se naučna istraživanja što više približe praksi i tehnološkim potrebama. Izučavanje idealnih struktura, što se prakse tiče, predstavlja idealizaciju problema jer, kao što je poznato, čistih kristala nema, niti se oni kao takvi mogu proizvesti na današnjem nivou tehnologije. Izučavanje idealnih struktura korisno je isključivo zbog toga što se za osnovne fizičke fenomene mogu izračunati njihove globalne karakteristike i dobiti ono što se obično naziva kvalitativna teorija. Što se ovoga tiče, ne treba praviti grešku i misliti da neidealne strukture, koje se u praksi uvek posmatraju, nemaju i neke svoje, specifične karakteristike koje ih bitno razlikuju od idealnih. Drugim rečima, to znači da se zaključci dobijeni na osnovu izučavanja idealne strukture ne mogu uvek, čak ni u globalu, prenositi na neidealne.

Cilj ove teze je da se ispitaju upravo one karakteristike neidealnih struktura koje su bitno različite od odgovarajućih karakteristika idealnih struktura i da se, na osnovu ovih analiza, daju izvesne ideje o tome kako bi se u praksi ove specifičnosti iskoristile. Materijal teze obuhvata dosta širok spektar fizičkih problema. Ono što je opšte, bez obzira na tip problema, to je prilaz tipu elementarnih ekscitacija u sistemima sa narušenom translacionom simetrijom. Konkretno, ovde se izučavaju efekti u sistemu harmonijskih pobudjenja, bez obzira da li su to magnoni, fononi ili elektronski talasi. Potrebno je, pre svega, da se objasni šta se pod terminom "harmonijska pobudjenja" podrazumeva, ako je reč o strukturama sa narušenom translacionom simetrijom. Struktura sa narušenom simetrijom, u odnosu na idealnu, ima kao prvu specifičnost izvesne granične uslove i to je, sa tačke gledišta teorijskih istraživanja, stavlja u poseban položaj. Pre svega, u ovakvim strukturama, zbog narušenja homogenosti prostora, ne važi zakon o održanju impulsa. Ovo, sa svoje strane, stavlja veoma značajna ograničenja na tip i karakter elementarnih ekscitacija u ovakvoj strukturi. Ispostavlja se da elementarne ekscitacije u strukturi sa narušenom translacionom simetrijom mogu da egzistiraju kao slobodne, bez osetnog prigušenja, samo za odredjene vrednosti talasnog vektora. U idealnim strukturama, kao što je poznato, ovakve restrikcije na harmonijske ekscitacije ne postoje. Cilj teze je da se za polubeskonačne kristale i tanke filmove pronadje koje su to restrikcije na vrednosti talasnih vektora i da se formuliše teorija na bazi ovih ekscitacija koje imaju praktično beskonačno vreme života. Dalji je zadatak, da se u sistemu ovih pobudjenja ispitaju takvi efekti koji su od praktičnog interesa, s obzirom na opšti trend fizike u današnje vreme.

Poznato je da je u poslednjoj deceniji naglo porastao interes za problem visokotemperaturske superprovodljivosti. Ovaj interes diktiran je pre svega praktičnom potrebom i može se reći da danas predstavlja osnovnu preokupaciju i teorijske i eksperimentalne fizike. Potpuno je razumljivo što se, za problem koji je u žiži istraživanja, vrlo brzo ocenilo kakve su mogućnosti za njegovu praktičnu realizaciju, pa se tako došlo do zaključka koji se gotovo i ne može osporiti, a taj je da u idealnim strukturama ne postoje izgledi da se konstruiše visokotemperaturski superprovodnik [16]. Isto se tako, kao rezultat ovih forsiranih istraživanja došlo do zaključka da su izgledi za realizaciju visokotemperaturske superprovodljivosti daleko veći u strukturama koje sadrže primese, ili su ograničene u prostoru [16], odnosno u strukturama gde se translaciona invarijantnost ne održava. U ovoj tezi posvećeno je dosta prostora analizi mogućnosti da se u tankim metalnim filmovima, u sistemu harmonijskih fonona i harmonijskih elektronskih talasa, realizuje superprovodno stanje na temperaturama višim od dosad poznatih. To verovatno predstavlja najbližu praksi i najaktuelniju stranu istraživanja koja su ovde izvršena. Ostala istraživanja nemaju takav praktični značaj, kao gore pomenuta, ali u metodološkom smislu svakako ne bi bila neinteresantna. Ovo se naročito odnosi na spinska pobudjenja u magnetnim rešetkama sa narušenom translacionom simetrijom. Na osnovu teorije harmonijskih spinskih talasa, koja je u tezi formulisana, omogućuje se ocena posledica narušenja simetrije u smislu bitnih karakteristika za magnetne materijale. Preciznije rečeno, interesantno je da se napravi razlika izmedju idealne i neidealne strukture na niskim i visokim temperaturama, pri čemu su svakako najinteresantniji fenomeni u okolini kritične temperature. Ovakva istraživanja mogu svakako da unesu više svetla u dosada ne sasvim razjašnjen problem mehanizma faznih prelaza. Postoji primetno neslaganje izmedju teorije i eksperimenta po ovom pitanju i ono je, pored ostalog, svakako uslovljeno time da dobro razradjene teorije postoje samo za idealne strukture, a da se merenja iz praktičnih razloga uvek vrše na strukturama koje nisu idealne. I ovaj deo istraživanja može, zbog toga, da ima praktični interes i cilj je da se da doprinos razjašnjenju ovog problema u onoj meri u kojoj je to mogućno, jer je matematički formalizam takve prirode da za neidealne strukture, ako se izvesne aproksimacije ne uvedu, ne omogućuje da račun bude konačan.

G L A V A   I

POLUBESKONAČNE STRUKTURE

Poznato je da postojanje granične površine kristala dovodi do pojave stanja lokalizovanih u blizini te površine. Mogu se kao primer navesti zapreminska i površinska eksitonska stanja [1], koja je istraživao Pekar, zatim površinska i zapreminska fononska stanja, poznatija kao Relejevi talasi. Namera je u ovom radu da se ispitaju mogućnosti egzistencije lokalizovanih magnonskih i fononskih stanja u polubeskonačnom feromagnetnom kristalu. Egzistenciju zapreminskih i površinskih magnonskih stanja studiralo je više autora [2,3,4], ali u Hajtler-London--Hajzenbergovoj (HLH) aproksimaciji, tj. pod pretpostavkom da u kristalu postoji samo jedna ekscitacija. U ovom je radu formulisana teorija površinskih i zapreminskih magnonskih stanja u polubeskonačnom kristalu u Blohovoj aproksimaciji, tj. u aproksimaciji kada je broj ekscitacija na čvor rešetke manji od 2S. Na kraju ove glave izvršena je analiza spin-fonon interakcije u polubeskonačnom kristalu i proračun nekih veličina koje od nje bitno zavise, na primer, srednji slobodni put zapreminskog, odnosno površinskog magnona i koeficijent površinske anihilacije zapreminskog magnona.

1.1 *Magnoni u polubeskonačnom feromagnetiku*

Polazna tačka u prilazu problemu lokalizovanih magnonskih stanja u polubeskonačnom feromagnetiku je pretpostavka da se magnetni moment atoma na površini kristala razlikuje po veličini od magnetnog momenta atoma u zapremini kristala [5]. Postoje eksperimentalni podaci da je magnetni moment atoma u kristalu različit od magnetnog momenta tog istog atoma na površini kristala (v. tabelu I.1). Ovim su istraživanja, kao što će kas-

TABELA I.1*

	3d - metali					4f - metali	
Element	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Gd	Er
$\mu_s[\mu_B]$	5	5	4	3	2	7	9
$\mu_v[\mu_B]$	0.2-0.4	1.5	2.218	1.715	0.604	7.12	8 - 9

nije biti pokazano, ograničena isključivo na feromagnetike koji se nalaze u spoljašnjem magnetnom polju.

Analiza počinje od idealne strukture. Spinski hamiltonijan Hajzenbergovog izotropnog feromagnetnog kristala koji ima prostu kubnu strukturu i jedan atom po elementarnoj ćeliji, dat je izrazom [5]

$$H = -\mu \mathcal{H} \sum_{\vec{n}n_z} S^z_{\vec{n}n_z} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} \vec{S}_{\vec{n}n_z} \vec{S}_{\vec{m}m_z} \tag{I.1.1}$$

gde je μ magnetni moment atoma, $\mathcal{H}$ spoljašnje magnetno polje, $S^z_{\vec{n}n_z}$ projekcija ukupnog spina čvora $(\vec{n}n_z)$ na pravac z-ose, koja ujedno predstavlja i osu kvantizacije, $\vec{S}_{\vec{n}n_z}$ i $\vec{S}_{\vec{m}m_z}$ su operatori ukupnog spina na čvorovima $(\vec{n}n_z)$ i $(\vec{m}m_z)$, a veličina $I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$ predstavlja integral izmene izmedju čvorova $(\vec{n}n_z)$ i $(\vec{m}m_z)$, dok je $\vec{n} \equiv (n_x,n_y)$. Za izučavanje pojava u feromagnetiku osnovno je da se tačno izračuna z-projekcija spina u funkciji temperature ili nekih drugih uzroka koji dovode do promene njene vrednosti. Podesno je, zbog toga, da se uvedu sle-

* Uzeto iz: С. В. Тябликов, "Методы квантовой теории магнетизма", Наука, Москва, 1965.

deći operatori

$$S^{+}_{\vec{n}n_z} = S^{x}_{\vec{n}n_z} + iS^{y}_{\vec{n}n_z} \quad \text{i} \quad S^{-}_{\vec{n}n_z} = S^{x}_{\vec{n}n_z} - iS^{y}_{\vec{n}n_z},$$

gde su S^x i S^y x, odnosno, y-komponenta spina. Ovi operatori imaju osobinu da veličinu z-projekcije spina povećavaju (S^+) ili smanjuju (S^-) za jedinicu. Na osnovu opštih komutacionih relacija za komponente momenta, može se pokazati da za ove operatore važe sledeće komutacione relacije

$$\left[S^{+}_{\vec{n}n_z}, S^{-}_{\vec{m}m_z}\right] = 2\, S^{z}_{\vec{n}n_z}\, \delta_{\vec{n},\vec{m}}\, \delta_{n_z,m_z}$$

Kako se fizički procesi u feromagnetiku sastoje od smanjivanja i povećavanja z-projekcije spinova, potpuno je jasno da je potrebno da se spinski hamiltonijan (I.1.1) izrazi preko operatora S^+ i S^-. Korišćenjem transformacije

$$\left.\begin{aligned} S_{\vec{n}n_z} S_{\vec{m}m_z} &= \frac{1}{2}\left(S^{-}_{\vec{n}n_z} S^{+}_{\vec{m}m_z} + S^{-}_{\vec{m}m_z} S^{+}_{\vec{n}n_z}\right) + S^2 - S\left(S - S^{z}_{\vec{n}n_z}\right) - \\ &\quad - S\left(S - S^{z}_{\vec{m}m_z}\right) + \left(S - S^{z}_{\vec{n}n_z}\right)\left(S - S^{z}_{\vec{m}m_z}\right) \\ S^{z}_{\vec{n}n_z} &= S - \left(S - S^{z}_{\vec{n}n_z}\right) \end{aligned}\right\} \tag{I.1.2}$$

dobija se izraz

$$\begin{aligned} H = {} & -\mu\mathcal{H}SNN_z - \frac{1}{2} J_0 S^2 NN_z + \mu\mathcal{H} \sum_{\vec{n}n_z} \left(S - S^{z}_{\vec{n}n_z}\right) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},\, n_z-m_z}\, S^{-}_{\vec{n}n_z} S^{+}_{\vec{m}m_z} + \\ & + \frac{S}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},\, n_z-m_z} \left[\left(S - S_{\vec{n}n_z}\right) + \left(S - S_{\vec{m}m_z}\right)\right] - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},\, n_z-m_z} \left(S - S_{\vec{n}n_z}\right)\left(S - S_{\vec{m}m_z}\right) \end{aligned} \tag{I.1.3}$$

gde je

$$N = N_x N_y \quad \text{i} \quad J_o = \sum_{\vec{n} n_z} I_{0-\vec{n},0-m_z}.$$

Ako je kristal polubeskonačan i to tako da je duž z-ose translaciona simetrija narušena, a u ravni XOY ovo narušavanje ne postoji, spinski hamiltonijan (I.1.1) napisan u aproksimaciji najbližih suseda (ovakva je aproksimacija, kada se radi o feromagneticima, opravdana, jer integral izmene eksponencijalno opada sa rastojanjem) za ovakav sistem spinova ima oblik

$$\begin{aligned} H = {} & \left[(\mu-\mu')H + 5SI\right] \sum_{\vec{n}} \left(S - S^z_{\vec{n}0}\right) - \frac{1}{2} I \sum_{\vec{\nu},\vec{n}} S^-_{\vec{n}0} S^+_{\vec{\nu}+\vec{n}0} - \\ & - \frac{1}{2} I \sum_{\vec{n}} S^-_{\vec{n}0} S^+_{\vec{n}1} + (\mu H + 6SI) \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z} \left(S - S^z_{\vec{n}n_z}\right) - \\ & - \frac{1}{2} I \sum_{\vec{\nu},\vec{n}n_z=1}^{N_z} S^-_{\vec{n}n_z} S^+_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} - \frac{1}{2} I \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z} S^-_{\vec{n}n_z} \left(S^+_{\vec{n}n_z+1} + S^+_{\vec{n}n_z-1}\right) - \\ & - \frac{1}{2} I \sum_{\vec{\nu},\vec{n}} \left(S - S^z_{\vec{n}0}\right)\left(S - S^z_{\vec{\nu}+\vec{n}0}\right) - \frac{1}{2} I \sum_{\vec{n}} \left(S - S^z_{\vec{n}0}\right)\left(S - S^z_{\vec{n}1}\right) - \\ & - \frac{1}{2} I \sum_{\vec{\nu},\vec{n}n_z=1}^{N_z} \left(S - S^z_{\vec{n}n_z}\right)\left(S - S^z_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}\right) - \\ & - \frac{1}{2} I \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z} \left(S - S^z_{\vec{n}n_z}\right)\left[\left(S - S^z_{\vec{n}n_z+1}\right) + \left(S - S^z_{\vec{n}n_z-1}\right)\right] \end{aligned} \tag{I.1.4}$$

gde je μ' popravka za magnetni moment atoma kada se on nalazi na površini, zbog drukčije veze u kristalu u odnosu na ostale (zapreminske) atome, $\vec{\nu}$ je vektor koji uzima vrednosti za najbliže susede, I je integral izmene za najbliže susede. Broj atoma u pravcu u kojem je translaciona simetrija narušena (z-osa) po pretpostavci je mnogo veći od jedinice. Uzeto je, zbog toga da se atom na mestu $n_z = N_z$ nalazi u beskonačnosti i njegove se promene ne uzimaju u obzir.

Kako se analiza magnonskih stanja u polubeskonačnom feromagnetiku vrši u harmonijskoj aproksimaciji, uvodi se Blohova aproksimacija za spinske operatore, tj.

$$S-S^{z}_{\vec{n}n_z}=B^{+}_{\vec{n}n_z}B_{\vec{n}n_z};\quad S^{-}_{\vec{n}n_z}=\sqrt{2S}\,B^{+}_{\vec{n}n_z};\quad S^{+}_{\vec{n}n_z}=\sqrt{2S}\,B_{\vec{n}n_z} \tag{I.1.5}$$

gde su B i B^{+} Boze-operatori. Ova aproksimacija ima fizičkog opravdananja samo kada je broj bozona na jednom čvoru manji od $2S$.

Na osnovu (I.1.4), hamiltonijan (I.1.3) u Blohovoj aproksimaciji ima oblik

$$\begin{aligned}H=&\left[(\mu-\mu')\mathcal{H}+5SI\right]\sum_{\vec{n}}B^{+}_{\vec{n}0}B_{\vec{n}0}-SI\sum_{\vec{\nu},\vec{n}}B^{+}_{\vec{n}}B_{\vec{\nu}+\vec{n}0}-\\&-SI\sum_{\vec{n}}B^{+}_{\vec{n}0}B_{\vec{n}1}+(\mu\mathcal{H}+6SI)\sum_{\vec{n}n_z=1}B^{+}_{\vec{n}n_z}B_{\vec{n}n_z}-\\&-SI\sum_{\vec{\nu},\vec{n}n_z=1}B^{+}_{\vec{n}n_z}B_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}-SI\sum_{\vec{n}n_z}B^{+}_{\vec{n}n_z}\left(B_{\vec{n}n_z+1}+B_{\vec{n}n_z-1}\right)\end{aligned} \tag{I.1.6}$$

Hajzenbergove jednačine kretanja operatora $B_{\vec{n}n_z}$ glase

$$i\dot{B}_{\vec{m}m_z}=\left[B_{\vec{m}m_z},H\right] \tag{I.1.7}$$

i s obzirom na (I.1.6), jednačine (I.1.7) napisane eksplicitno imaju oblik

za $m_z>0$

$$i\dot{B}_{\vec{m}m_z}=(\mu\mathcal{H}+6SI)B_{\vec{m}m_z}-SI\sum_{\vec{\nu}}B_{\vec{\nu},\vec{m}m_z}-SI\left(B_{\vec{m}m_z+1}+B_{\vec{m}m_z-1}\right) \tag{I.1.8}$$

$m_z=0$

$$i\dot{B}_{\vec{m}0}=\left[(\mu-\mu')\mathcal{H}+6SI\right]B_{\vec{m}}-SI\sum_{\vec{\nu}}B_{\vec{\nu}+\vec{m}0}-SI\,B_{\vec{m}1} \tag{I.1.9}$$

Hamiltonijan (I.1.6) dijagonalizuje kanonična transformacija [5]

$$B_{\vec{m}m_z} = \sum_{\vec{k}k_z} U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}m_z} e^{-i\omega(\vec{k}k_z)t} B_{\vec{k}k_z} \tag{I.1.10}$$

gde je $k \equiv (k_x k_y)$. Posle ovoga sistemi jednačina (I.1.8) i (I.1.9), koji odredjuju funkcije $U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}m_z}$, dobijaju oblik

za $m_z > 0$

$$[\mu H-\omega(\vec{k}k_z)]U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}m_z} + 6SIU^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}m_z} - SI\sum_{\vec{\nu}} U^{\vec{k}k_z}_{\vec{\nu}+\vec{m}m_z} - SI\left(U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}m_z+1} + U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}m_z-1}\right) = 0 \tag{I.1.11}$$

za $m_z = 0$

$$[\mu H-\omega(\vec{k}k_z)]U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}0} + 6SIU^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}0} - SI\sum_{\vec{\nu}} U^{\vec{k}k_z}_{\vec{\nu}+\vec{m}0} - SI\, U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}1} + U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}-1} = (SI+\mu' H)\, U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}0} - SIU^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}-1} \tag{I.1.12}$$

Rešenje sistema diferencnih jednačina (I.1.11) traži se u obliku

$$U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}m_z} = \left[A\sin k_z m_z a + C\sin k_z(m_z+1)a\right] e^{i\vec{k}\vec{m}a} \tag{I.1.13}$$

gde je a konstanta rešetke. Odnos konstanata A i C odredjuje se iz uslova da izraz (I.1.13) istovremeno zadovoljava i sistem (I.1.12), ako važi zakon disperzije oblika

$$\omega(\vec{k}k_z) = \mu H + 2SI(3-\cos k_x a - \cos k_y a - \cos k_z a) \tag{I.1.14}$$

Na taj se način dobija da je

$$C = -A\,\frac{SI}{SI+\mu' H} \tag{I.1.15}$$

Druga konstanta u izrazu (I.1.13) odredjuje se iz uslova da hamiltonijan sistema (I.1.6) bude dijagonalan po Boze operatorima. Konačno se dobija

$$B_{\vec{m}m_z} = \sum_{\vec{k}k_z}\sqrt{\frac{2}{NN_z\left|1-\frac{SI}{SI+\mu' H}e^{ik_z a}\right|}}\left[\sin k_z m_z a - \frac{SI}{SI+\mu' H}\sin k_z(m_z+1)a\right]e^{i\vec{k}\vec{m}a}\, B_{\vec{k}k_z} \tag{I.1.16}$$

i

$$H = \sum_{\vec{k}k_z} \omega(\vec{k}k_z) B^{+}_{\vec{k}k_z} B_{\vec{k}k_z} \tag{I.1.17}$$

Kako je duž z-ose translaciona simetrija narušena, z-komponenta talasnog vektora k_z može biti i imaginarna [6]. Rešenje sistema (I.1.11) može se zato tražiti i u obliku

$$U^{\vec{k}k_z}_{\vec{m}m_z} = D e^{i\vec{k}\vec{m}a}\, e^{-\eta m_z a} \; ; \; \eta > 0 \tag{I.1.18}$$

Lako je pokazati da izraz (I.1.18) zadovoljava sisteme diferencnih jednačina (I.1.11) i (I.1.12) ukoliko važi zakon disperzije oblika

$$\omega(ki\eta) = \mu H + 2SI(3 - \cos k_x a - \cos k_y a - ch\eta a) \tag{I.1.19}$$

pri čemu je vrednost veličine η odredjena relacijom

$$e^{\eta a} = 1 + \frac{\mu' H}{SI} \tag{I.1.20}$$

i kao što se vidi uslov $\eta > 0$, automatski je ispunjen. Konstanta D u izrazu (I.1.18) odredjuje se iz uslova da hamiltonijan (I.1.6) bude dijagonalan. Odakle se dobija da je

$$B_{\vec{m}m_z} = \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{1-e^{-2\eta a}}{N}}\, e^{-\eta m_z a}\, e^{i\vec{k}\vec{m}a}\, B_{\vec{k}i\eta} \tag{I.1.21}$$

i

$$H = \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}i\eta) B^{+}_{\vec{k}i\eta} B_{\vec{k}i\eta} \tag{I.1.22}$$

---

* Transformacija (I.1.16) strogo uzevši nije kanonična. Ona bi bila kanonična pod uslovom da je

$$A^2 = \frac{2}{N(N_z+1)\left|1 - \frac{SI}{SI+\mu' H} e^{ik_z a}\right| + N\left(\frac{2SI}{SI+\mu' H} - \frac{S^2 I^2}{(SI+\mu' H)^2} \cos k_z a - 1\right)},$$

ali ne bi dijagonalizovala hamiltonijan. Kako je, po pretpostavci $N_z \gg 1$, drugi se član u imeniocu može zanemariti, pa se tako i dobija izraz (I.1.16) koji dijagonalizuje hamiltonijan.

Elementarne ekscitacije, čiji se operatori transformišu po zakonu (I.1.16) nazivaju se zapreminskim magnonima, dok elementarne ekscitacije čiji se operatori transformišu po zakonu (I.1.21) nazivaju se površinskim magnonima. Razlog za ovakvu klasifikaciju je očigledan. Naime, ako se formira izraz $\langle B^{+}_{\vec{n}n_z} B_{\vec{n}n_z} \rangle$, koji predstavlja koncentraciju magnona na mestu $(\vec{n}n_z)$, tada se za slučaj zapreminskih magnona dobija

$$\langle B^{+}_{\vec{n}n_z} B_{\vec{n}n_z} \rangle = \sum_{\vec{k}k_z} \bar{N}_{\vec{k}k_z} \left| U^{\vec{k}k_z}_{\vec{n}n_z} \right|^2$$

gde je $\bar{N}_{\vec{k}k_z}$ srednji broj magnona u stanju $(\vec{k}k_z)$. Kako je u ovom slučaju $U^{\vec{k}k_z}_{\vec{n}n_z}$ periodična funkcija od $(\vec{n}n_z)$, može se staviti da je

$$\left| U^{\vec{k}k_z}_{\vec{n}n_z} \right|^2 \sim \frac{1}{N}$$

odakle se vidi da su elementarne ekscitacije ovog tipa ravnomerno rasporedjene po čitavom kristalu, pa otuda naziv zapreminski magnoni. U slučaju površinskih magnona može se napisati

$$\langle B^{+}_{\vec{m}m_z} B_{\vec{m}m_z} \rangle = \sum_{\vec{k}} \bar{N}_{\vec{k}i\eta}\, e^{-2\eta m_z a} \quad ; \; \eta > 0$$

odakle se vidi da je koncentracija magnona ovakvog tipa za $m_z = 0$ najveća i da sa porastom dubine u kristalu opada ekspo-

---

** Transformacija (I.1.21) strogo uzevši nije kanonična i ne dijagonalizuje hamiltonijan sistema (I.1.6). Ova bi transformacija bila kanonična i dijagonalizovala bi hamiltonijan sistema pod uslovom da je

$$D^2 = \frac{1 - e^{-2\eta a}}{N\left(1 - e^{-2\eta(N_z+1)a}\right)}$$

Kako je po pretpostavci $N_z \gg 1$, drugi se član u imeniocu može zanemariti u odnosu na jedinicu, pa se tako približno dobija izraz (I.1.21).

nencijalno. S obzirom na ove osobine, elementarne ekscitacije koje ovom tipu rešenja odgovaraju, nazivaju se površinskim magnonima.

1.2 *Fononi u polubeskonačnoj strukturi*

Osnovna pretpostavka u ovom paragrafu je ta da je interakcija izmedju atoma na površini kristala promenjena u odnosu na interakciju izmedju atoma u kristalu.

Posmatra se polubeskonačan kristal proste kubne strukture sa jednim atomom po elementarnoj ćeliji. Kao i u paragrafu 1.1, ovde se takodje pretpostavlja da je z-osa pravac u kojem je translaciona simetrija narušena, dok u ravni XOY ovakvog narušavanja nema. Klasični hamiltonijan ovakvog sistema (samo fononski deo) ima oblik

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z, i} \left\{ M\left(\dot{\xi}^{i}_{\vec{n}n_z}\right)^2 + \sum_{\vec{m}m_z, i'}{}' \lambda^{ii'}_{\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z} \left(\xi^{i}_{\vec{n}n_z} - \xi^{i}_{\vec{m}m_z}\right)\left(\xi^{i'}_{\vec{n}n_z} - \xi^{i'}_{\vec{m}m_z}\right)\right\} \tag{I.2.1}$$

gde su veličine $\lambda^{ii'}_{\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z}$ date kao drugi izvodi potencijalne energije, tj.

$$\lambda^{ii'}_{\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V(\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z)}{\partial(\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z)_i \, \partial(\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z)_{i'}},$$

pri čemu je $V(\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z)$ energija interakcije izmedju atoma $(\vec{n}n_z)$ i $(\vec{m}m_z)$; $\xi^{i}_{\vec{n}n_z}$ i-ta komponenta vektora pomeraja $(\vec{n}n_z)$--tog atoma; M masa atoma; $i \equiv (x,y,z)$.

Komponente sile koja deluje na atom $(\vec{n}n_z)$, date su izrazom

$$F^{i}_{\vec{n}n_z} = - \frac{\partial V(\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z)}{\partial \xi^{i}_{\vec{n}n_z}} = - \sum_{\vec{m}m_z, i'} \lambda^{ii'}_{\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z} \left(\xi^{i'}_{\vec{n}n} - \xi^{i'}_{\vec{m}m}\right) \tag{I.2.2}$$

i u aproksimaciji najbližih suseda imaju oblik

$$F^{i}_{\vec{n}n_z} = -6\lambda^{ii}\xi^{i}_{\vec{n}n_z} - 6\sum_{i'\neq i}\lambda^{ii'}\xi^{i'}_{\vec{n}n_z} + \sum_{\vec{\nu}}\lambda^{ii}\xi^{i}_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} +$$

$$+\lambda^{ii}\left(\xi^{i}_{\vec{n}n_z+1} + \xi^{i}_{\vec{n}n_z-1}\right) + \sum_{i'\neq i}\lambda^{ii'}\left(\xi^{i'}_{\vec{n}n_z+1} + \xi^{i'}_{\vec{n}n_z-1}\right)$$

Na ovom je mestu podesno da se uvedu sledeće oznake:

$$6\lambda^{xx} = 6\lambda^{yy} = 6\lambda^{zz} = \lambda_o;$$

$$\lambda^{xx} = \lambda^{yy} = \lambda^{zz} = \lambda, \left(\lambda = \frac{1}{6}\lambda_o\right);$$

$$6\lambda^{xy} = 6\lambda^{xz} = 6\lambda^{yz} = \lambda^T_o;$$

$$\lambda^{xy} = \lambda^{xz} = \lambda^{yz} = \lambda^T_1, \left(\lambda^T_1 = \frac{1}{6}\lambda^T\right).$$

Odavde se vidi da je λ za red veličine manje od λ_o. Torzioni koeficijenti λ^T_o su za red veličine manji od koeficijenata istezanja λ_o, dok su koeficijenti λ^T_1 za dva reda veličine manji od koeficijenta λ_o, pa se isti mogu zanemariti. Uz ove aproksimacije izraz za komponente sile je oblika

$$F^{i}_{\vec{n}n_z} = -\lambda_o\xi^{i}_{\vec{n}n_z} - \lambda^T_o\sum_{i'\neq i}\xi^{i'}_{\vec{n}n_z} + \lambda\sum_{\vec{\nu}}\xi^{i}_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} + \lambda\left(\xi^{i}_{\vec{n}n_z+1} + \xi^{i}_{\vec{n}n_z-1}\right) \qquad (I.2.3)$$

U ovoj poslednjoj jednačini λ^T_o i λ istog su reda veličine, dok je λ_o za red veličine veća.

Prilikom pisanja jednačina kretanja atoma razlikuju se dva slučaja

a) Slučaj kada se atom za koji se jednačine kretanja pišu nalazi u unutrašnjosti kristala $(n_z > 0)$,

b) Slučaj kada se atom nalazi na površini kristala $(n_z = 0)$.

U prvom slučaju $(n_z > 0)$ komponentni sistem jednačina kretanja u aproksimaciji najbližih suseda glasi

$$M\ddot{\xi}^{x}_{\vec{n}n_z} + \lambda_o\xi^{x}_{\vec{n}n_z} - \lambda\sum_{\vec{\nu}}\xi^{x}_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} - \lambda\left(\xi^{x}_{\vec{n}n_z+1}+\xi^{x}_{\vec{n}n_z-1}\right) + \lambda^{T}_{o}\left(\xi^{y}_{\vec{n}n_z}+\xi^{z}_{\vec{n}n_z}\right) = 0$$

$$M\ddot{\xi}^{y}_{\vec{n}n_z} + \lambda_o\xi^{y}_{\vec{n}n_z} - \lambda\sum_{\vec{\nu}}\xi^{y}_{\vec{\nu}\,\vec{n}n_z} - \lambda\left(\xi^{y}_{\vec{n}n_z+1}+\xi^{y}_{\vec{n}n_z-1}\right) + \lambda^{T}_{o}\left(\xi^{x}_{\vec{n}n_z}+\xi^{z}_{\vec{n}n_z}\right) = 0$$

$$M\ddot{\xi}^{z}_{\vec{n}n_z} + \lambda_o\xi^{z}_{\vec{n}n_z} - \lambda\sum_{\vec{\nu}}\xi^{z}_{\vec{\nu}\,\vec{n}n_z} - \lambda\left(\xi^{z}_{\vec{n}n_z+1}+\xi^{z}_{\vec{n}n_z-1}\right) + \lambda^{T}_{o}\left(\xi^{x}_{\vec{n}n_z}+\xi^{y}_{\vec{n}n_z}\right) = 0 \qquad (I.2.4)$$

U drugom slučaju ($n_z = 0$) komponentni sistem jednačina kretanja u aproksimaciji najbližih suseda glasi

$$M\ddot{\xi}^{x}_{\vec{n}0} + (\lambda_o+\lambda'_o)\xi^{x}_{\vec{n}0} - \lambda\sum_{\vec{\nu}}\xi^{x}_{\vec{\nu}+\vec{n}0} - \lambda\xi^{x}_{\vec{n}1} + \lambda^{T}_{o}\left(\xi^{y}_{\vec{n}0}+\xi^{z}_{\vec{n}0}\right) = 0$$

$$M\ddot{\xi}^{y}_{\vec{n}0} + (\lambda_o+\lambda'_o)\xi^{y}_{\vec{n}0} - \lambda\sum_{\vec{\nu}}\xi^{y}_{\vec{\nu}+\vec{n}0} - \lambda\xi^{y}_{\vec{n}1} + \lambda^{T}_{o}\left(\xi^{x}_{\vec{n}0}+\xi^{z}_{\vec{n}0}\right) = 0$$

$$M\ddot{\xi}^{z}_{\vec{n}0} + (\lambda_o+\lambda'_o)\xi^{z}_{\vec{n}0} - \lambda\sum_{\vec{\nu}}\xi^{z}_{\vec{\nu}+\vec{n}0} - \lambda\xi^{z}_{\vec{n}1} + \lambda^{T}_{o}\left(\xi^{x}_{\vec{n}0}+\xi^{y}_{\vec{n}0}\right) = 0 \qquad (I.2.5)$$

U ovom drugom slučaju uzeta je u obzir pretpostavka, iskazana na početku ovog paragrafa, da su atomi na površini kristala drugačije vezani od atoma u njegovoj unutrašnjosti. Naime, koeficijent istezanja λ_o razlikuje se za λ'_o od koeficijenta istezanja koji se odnosi na atome u unutrašnjosti kristala. Promene koeficijenata λ i λ^{T}_{o} zanemarene su u slučaju površinskih atoma kao male veličine drugog reda u odnosu na λ_o, odnosno, kao male veličine prvog reda u odnosu na λ'_o. Kako je broj atoma $N_z \gg 1$, smatraće se da se atom na mestu $n_z = N_z$ nalazi u beskonačnosti, pa se promene njegove vezanosti u kristalu zanemaruju.

S obzirom da u ravni XOY postoji idealna translaciona simetrija, rešenje sistema (I.2.4) traži se u obliku

$$\xi^{i}_{\vec{n}n} = A_i\left[\sin n_z q_z a + C \sin (n_z+1)q_z a\right] e^{i\vec{q}\vec{n}a}\, e^{-i\omega t} \tag{I.2.6}$$

gde je $\vec{q} \equiv (q_x, q_y)$ i a - konstanta rešetke. Konstanta C se odredjuje iz uslova da rešenje (I.2.6) istovremeno zadovoljava i sistem jednačina (I.2.5). Na taj se način dobija sistem linearnih jednačina po nepoznatim amplitudama A_x, A_y i A_z, tj. sistem (I.2.4) prelazi u sistem linearnih jednačina po A_x, A_y i A_z

$$\left.\begin{aligned}
&[-M\omega^2+\lambda_o-2\lambda(\cos q_x a+\cos q_y a+\cos q_z a)]\,A_x + \lambda_o^T A_y + \lambda_o^T A_z = 0\\
&\lambda_o^T A_x + [-M\omega^2+\lambda_o-2\lambda(\cos q_z a+\cos q_z a+\cos q_z a)]\,A_y + \lambda_o^T A_z = 0\\
&\lambda_o^T A_x + \lambda_o^T A_y + [-M\omega^2+\lambda_o-2\lambda(\cos q_x a+\cos q_y a+\cos q_z a)]\,A_z = 0
\end{aligned}\right\} \tag{I.2.7}$$

a sistem (I.2.5) u sistem

$$\left.\begin{aligned}
&[-M\omega^2+\lambda_o+\lambda'_o-\lambda(2\cos q_x a+2\cos q_y a+2\cos q_z a+\tfrac{1}{C})]\,A_x + \lambda_o^T A_y + \lambda_o^T A_z = 0\\
&\lambda_o^T A_x + [-M\omega^2+\lambda_o+\lambda'_o-\lambda(2\cos q_x a+2\cos q_y a+2\cos q_z a+\tfrac{1}{C})]\,A_y + \lambda_o^T A_z = 0\\
&\lambda_o^T A_x + \lambda_o^T A_y + [-M\omega^2+\lambda_o+\lambda'_o-\lambda(2\cos q_x a+2\cos q_y a+2\cos q_z a+\tfrac{1}{C})]\,A_z = 0
\end{aligned}\right\} \tag{I.2.8}$$

Netrivijalna rešenja po A_x, A_y i A_z sistema (I.2.7) i (I.2.8) postojaće ako su odgovarajuće determinante jednake nuli, tj.

$$\begin{vmatrix}
-M\omega^2+\lambda_o-2\lambda(\cos q_x a+\cos q_y a+\cos q_z a) & \lambda_o^T & \lambda_o^T\\
\lambda_o^T & -M\omega^2+\lambda_o-2\lambda(\cos q_x a+\cos q_y a+\cos q_z a) & \lambda_o^T\\
\lambda_o^T & \lambda_o^T & -M\omega^2+\lambda_o-2\lambda(\cos q_x a+\cos q_y a+\cos q_z a)
\end{vmatrix} = 0 \tag{I.2.9}$$

$$\begin{vmatrix}
-M\omega^2+\lambda_o+\lambda'_o-\lambda(2\cos q_x a+2\cos q_y a+2\cos q_z a+\tfrac{1}{C}) & \lambda_o^T & \lambda_o^T\\
\lambda_o^T & -M\omega^2+\lambda_o+\lambda'_o-\lambda(2\cos q_x a+2\cos q_y a+2\cos q_z a+\tfrac{1}{C}) & \lambda_o^T\\
\lambda_o^T & \lambda_o^T & -M\omega^2+\lambda_o+\lambda'_o-\lambda(2\cos q_x a+2\cos q_y a+2\cos q_z a+\tfrac{1}{C})
\end{vmatrix} = 0 \tag{I.2.10}$$

Kao što je već pomenuto, konstanta C se odredjuje iz uslova da rešenje (I.2.6) istovremeno zadovoljava i sisteme jednačina

(I.2.4) i (I.2.5) uz uslov jednakosti disperzionih zakona, što se u suštini svodi na jednakost determinanata (I.2.9) i (I.2.10). Daljim računanjem se dobija da je

$$C = \frac{\lambda}{\lambda_o'} \tag{I.2.11}$$

Kako su pomenute determinante trećeg reda, jasno je da postoje tri zakona disperzije. Ako se sa ℓ (ℓ=1,2,3) označi indeks disperzione grane, tada pomeraj atoma (za koji se pretpostavlja da je izotropan) koji odgovara ℓ-toj grani, ima oblik

$$\vec{\xi}_{\vec{n}n_z,\ell}(\vec{q}q_z) = \vec{e}_\ell(\vec{q}q_z)A(\vec{q}q_z)e^{i\vec{q}\vec{n}a}\left[\sin n_z q_z a + \frac{\lambda}{\lambda_o'}\sin(n_z+1)q_z a\right]\cdot$$
$$\cdot\, e^{-i\omega_\ell(\vec{q}q_z)t}$$

Proizvoljni realni pomeraj atoma je

$$\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q}q_z,\ell}\vec{e}_\ell(\vec{q}q_z)f(n_z,q_z)\Big[A(\vec{q}q_z)e^{i\vec{q}\vec{n}a}\,e^{-i\omega_\ell(\vec{q}q_z)t} +$$
$$+\ \overset{*}{A}(\vec{q}q_z)\,e^{-i\vec{q}\vec{n}a}\,e^{i\omega_\ell(\vec{q}q_z)t}\Big] \tag{I.2.12}$$

gde je $\vec{e}_\ell(\vec{q}q_z)$ jedinični vektor polarizacije disperzione grane i $f(n_z,q_z) = \sin n_z q_z a + \frac{\lambda}{\lambda_o'}\sin(n_z+1)q_z a$. Uvodjenjem kompleksne veličine

$$b_{\vec{q}q_z,\ell} = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}A(\vec{q}q_z)\sqrt{NN_zM\omega_\ell(\vec{q}q_z)}\left|1+\frac{\lambda}{\lambda_o'}e^{iq_za}\right|e^{-i\omega_\ell(\vec{q}q_z)t}$$

$$\overset{*}{b}_{\vec{q}q_z,\ell} = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\overset{*}{A}(\vec{q}q_z)\sqrt{NN_zM\omega_\ell(\vec{q}q_z)}\left|1+\frac{\lambda}{\lambda_o'}e^{iq_za}\right|e^{i\omega_\ell(\vec{q}q_z)t}$$

za proizvoljni realni pomeraj atoma (I.2.12), koji istovremeno i dijagonalizuje hamiltonijan (I.2.1) napisan u aproksimaciji najbližih suseda, dobija oblik

$$\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q}q_z,\ell} \sqrt{\frac{\hbar}{NN_zM\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_o}\,e^{iq_za}\right|\omega_\ell(\vec{q}q_z)}}\;\vec{e}_\ell(\vec{q}q_z)f(n_z,q_z)\,\cdot$$

$$\cdot\left[b_{\vec{q}q_z,\ell}\,e^{i\vec{q}\vec{n}a} + b^*_{\vec{q}q_z,\ell}\,e^{-i\vec{q}\vec{n}a}\right] \qquad (I.2.13)$$

a hamiltonijan (I.2.1) postaje

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}q_z,\ell}\hbar\omega_\ell(\vec{q}q_z)\left[b_{\vec{q}q_z,\ell}b^*_{\vec{q}q_z,\ell} + b^*_{\vec{q}q_z,\ell}b_{\vec{q}q_z,\ell}\right] \qquad (I.2.14)$$

S obzirom da je duž z-ose translaciona simetrija narušena, treća komponenta talasnog vektora q_z može biti i imaginarna, tj. $q_z = i\rho$ [6]. U ovom slučaju rešenje sistema jednačina (I.2.4) traži se u obliku

$$\xi^i_{\vec{n}n_z} = A_i\,e^{i\vec{q}\vec{n}a}\,e^{-\rho n_za}\,e^{-i\omega t}\;;\quad \rho>0 \qquad (I.2.15)$$

Veličina ρ se odredjuje iz uslova da rešenje (I.2.15) istovremeno zadovoljava sisteme jednačina (I.2.4) i (I.2.5), što se, kao i u prethodnom tipu rešenja, svodi na jednakost determinanata

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2+\lambda_o-2\lambda(\cos q_xa+\cos q_ya+\cos q_za) & \lambda_o^T & \lambda_o^T \\ \lambda_o^T & -M\omega^2+\lambda_o-2\lambda(\cos q_xa+\cos q_ya+\cos q_za) & \lambda_o^T \\ \lambda_o^T & \lambda_o^T & -M\omega^2+\lambda_o-2\lambda(\cos q_xa+\cos q_ya+\cos q_za) \end{vmatrix} = 0 \qquad (I.2.16)$$

i

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2+\lambda_o+\lambda'_o-\lambda(2\cos q_xa+2\cos q_ya+2\cos q_za+e^{-\rho a}) & \lambda_o^T & \lambda_o^T \\ \lambda_o^T & -M\omega^2+\lambda_o+\lambda'_o-\lambda(2\cos q_xa+2\cos q_ya+2\cos q_za+e^{-\rho a}) & \lambda_o^T \\ \lambda_o^T & \lambda_o^T & -M\omega^2+\lambda_o+\lambda'_o-\lambda(2\cos q_xa+2\cos q_ya+2\cos q_za+e^{-\rho a}) \end{vmatrix} = 0 \qquad (I.2.17)$$

Iz jednakosti ovih determinanata sledi da je

$$e^{-\rho a} = -\frac{\lambda}{\lambda'_o}\;{}^{*)} \qquad (I.2.18)$$

Kako je po pretpostavci $\rho>0$, uslov za egzistenciju ovog rešenja je $\left|\frac{\lambda}{\lambda_o'}\right| < 1$.

Proizvoljni realni pomeraj atoma ovog tipa može se napisati u obliku

$$\xi_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q},\ell} \vec{e}_\ell(\vec{q}i\rho)e^{-\rho n_z a}\left[A(\vec{q}i\rho)e^{i\vec{q}\vec{n}a}\ e^{-i\omega_\ell(\vec{q}i\rho)t} + \right.$$

$$\left. + \overset{*}{A}(\vec{q}i\rho)e^{-i\vec{q}\vec{n}a}e^{i\omega_\ell(\vec{q}i\rho)t}\right] \qquad \text{(I.2.19)}$$

Uvodjenjem kompleksnih veličina $b_{\vec{q}i\rho,\ell}$ i $\overset{*}{b}_{\vec{q}i\rho,\ell}$ pomoću relacija

$$b_{\vec{q}i\rho,\ell} = \frac{1}{\sqrt{\hbar\left(1-e^{-2\rho a}\right)}}\ A(\vec{q}i\rho)\sqrt{2NM\omega_\ell(\vec{q}i\rho)}\ e^{-i\omega_\ell(\vec{q}i\rho)t}$$

$$\overset{*}{b}_{\vec{q}i\rho,\ell} = \frac{1}{\sqrt{\hbar\left(1-e^{-2\rho a}\right)}}\ \overset{*}{A}(\vec{q}i\rho)\sqrt{2NM\omega_\ell(\vec{q}i\rho)}\ e^{-i\omega_\ell(\vec{q}i\rho)t}$$

pomeraji atoma (I.2.19) i hamiltonijan sistema (I.2.1), napisan u aproksimaciji najbližih suseda, imaju oblik

$$\xi_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q},\ell}\sqrt{\frac{\hbar\left(1-e^{-2\rho a}\right)}{NM\omega_\ell(\vec{q}i\rho)}}\ \vec{e}_\ell(\vec{q}i\rho)\,e^{-\rho n_z a}\left(b_{\vec{q}i\rho,\ell}\,e^{i\vec{q}\vec{n}a} + \right.$$

$$\left. + \overset{*}{b}_{\vec{q}i\rho,\ell}\,e^{-i\vec{q}\vec{n}a}\right) \qquad \text{(I.2.20)}$$

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\vec{q},\ell}\hbar\omega_\ell(\vec{q}i\rho)\left(b_{\vec{q}i\rho,\ell}\overset{*}{b}_{\vec{q}i\rho,\ell} + \overset{*}{b}_{\vec{q}i\rho,\ell}b_{\vec{q}i\rho,\ell}\right) \qquad \text{(I.2.21)}$$

Prelaz na kvantnu mehaniku ostvaruje se formalno

---

*) Treba napomenuti da je izraz (I.2.18) specijalan slučaj opštije relacije

$$e^{\rho a} = (-1)^m\ \frac{\lambda_o'}{\lambda}\,,$$

gde je m proizvoljan ceo broj, prema tome znak ne igra bitnu ulogu i može se pisati $e^{\rho a} = |\lambda_o'/\lambda|$. Ovo sledi iz strožijeg rešavanja problema metodima rešavanja diferencnih jednačina [6].

zamenom veličina b i b^* Boze operatorima anihilacije b i kreacije b^+. Na taj se način za prvi tip rešenja dobija

$$\xi_{\vec{n}n} = \sum_{\vec{q}q_z,\ell} \sqrt{\frac{\hbar}{NN_zM\left|1+\frac{\lambda}{\lambda_0'}e^{iq_za}\right|\omega_\ell(\vec{q}q_z)}}\ \vec{e}_\ell(\vec{q}q_z)f(n_z,q_z)\cdot$$

$$\cdot\left[b_{\vec{q}q_z,\ell}e^{i\vec{q}\vec{n}a}+b^+_{\vec{q}q_z,\ell}e^{-i\vec{q}\vec{n}a}\right] \quad (I.2.22)$$

i

$$H = \sum_{\vec{q}q_z,\ell}\hbar\omega_\ell(\vec{q}q_z)\left[\frac{1}{2}+b^+_{\vec{q}q_z,\ell}b_{\vec{q}q_z,\ell}\right] \quad (I.2.23)$$

Analogno, za drugi tip rešenja, se dobija

$$\xi_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q},\ell}\sqrt{\frac{\hbar(1-e^{-2\rho a})}{NM\omega_\ell(\vec{q}i\rho)}}\ \vec{e}_\ell(\vec{q}i\rho)e^{-\rho n_z a}\ .$$

$$\cdot\left[b_{\vec{q}i\rho,\ell}\ e^{i\vec{q}\vec{n}a}+b^+_{\vec{q}i\rho,\ell}e^{-i\vec{q}\vec{n}a}\right] \quad (I.2.24)$$

i

$$H = \sum_{\vec{q},\ell}\hbar\omega_\ell(\vec{q}i\rho)\left[\frac{1}{2}+b^+_{\vec{q}i\rho,\ell}\ b_{\vec{q}i\rho,\ell}\right] \quad (I.2.25)$$

Analiziranjem izraza (I.2.22) i (I.2.24) vidi se da je amplituda pomeraja tipa (I.2.22) periodična funkcija po celom kristalu i takav se tip fonona (kvanti atomskih pomaka) kojima odgovara ovakva funkcija pomeraja naziva zapreminskim fononima. Amplitude pomeraja (I.2.24) eksponencijalno opadaju sa porastom dubine (n_z) i imaju maksimum na površini kristala (za n_z = 0). Fononi ovog tipa, zbog navedene osobine, nazivaju se površinskim fononima.

1.3 *Magnon-fonon interakcija u polubeskonačnom feromagnetiku. Koeficijent površinske anihilacije zapreminskih magnona. Srednji slobodni put zapreminskih i površinskih magnona*

Spinski hamiltonijan (I.1.1) napisan je za slučaj kada svi atomi rešetke miruju. Medjutim, na temperaturama različitim od nule čvorovi rešetke (atomi) vrše toplotne vibracije, što dovodi do interakcije spina sa vibracijama rešetke. Ova vibracija čvorova rešetke ima za posledicu promenu sila izmene. U ovoj novoj dinamičkoj slici, hamiltonijan spinske interakcije za idealan kristal i za opšti spin (izraz za energiju osnovnog stanja je izostavljen) ima oblik

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} \tilde{I}_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} \left[S^-_{\vec{n}n_z} S^+_{\vec{m}m_z} + S^z_{\vec{n}n_z} S^z_{\vec{m}m_z} \right] \tag{I.3.1}$$

gde je $\tilde{I}_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$ integral izmene izmedju čvorova $(\vec{n}n_z)$ i $(\vec{m}m_z)$ kada čvorovi rešetke vrše toplotne vibracije.

Neka, usled toplotnih vibracija, čvor na mestu $(\vec{n}n_z)$ dobije pomak $\vec{\xi}_{\vec{n}n_z}$, a čvor na mestu $(\vec{m}m_z)$ analogno $\vec{\xi}_{\vec{m}m_z}$, tj.

$$(\vec{n}n_z) \longrightarrow (\vec{n}n_z) + \vec{\xi}_{\vec{n}n_z}; \qquad (\vec{m}m_z) \longrightarrow (\vec{m}m_z) + \vec{\xi}_{\vec{m}m_z} .$$

Pod uslovom da su amplitude oscilovanja čvorova rešetke male u odnosu na konstantu rešetke, integral izmene se može razviti u red po stepenima atomskih pomaka, pri čemu se kvadrati i viši stepeni pomaka zanemaruju. Na taj se način dobija

$$\tilde{I}_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} \simeq I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} + \left(\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} - \vec{\xi}_{\vec{m}m_z}\right) \nabla I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} \tag{I.3.2}$$

gde je $I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$ integral izmene medju čvorovima $(\vec{n}n_z)$ i

$(\vec{m}m_z)$ kada se oni nalaze u svojim ravnotežnim položajima, a ∇ je Hamiltonov operator koji označava diferenciranje po komponentama vektora $(\vec{n}n_z) - (\vec{m}m_z)$. Hamiltonijan (I.3.1) sada ima oblik

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} \left[S^-_{\vec{n}n_z} S^+_{\vec{m}m_z} + S^z_{\vec{n}n_z} S^z_{\vec{m}m_z} \right] -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} \left[\nabla_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} \right] \left[\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} - \vec{\xi}_{\vec{m}m_z} \right] \cdot$$

$$\cdot \left[S^-_{\vec{n}n_z} S^+_{\vec{m}m_z} + S^z_{\vec{n}n_z} S^z_{\vec{m}m_z} \right] \qquad (I.3.3)$$

Drugi deo izraza (I.3.3) predstavlja spin-fonon interakciju, tj.

$$H_{S,F} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} \left[\nabla_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} \right] \cdot$$

$$\cdot \left[\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} - \vec{\xi}_{\vec{m}m_z} \right] \left[S^-_{\vec{n}n_z} S^+_{\vec{m}m_z} + S^z_{\vec{n}n_z} S^z_{\vec{m}m_z} \right] \qquad (I.3.4)$$

S obzirom da je u ovom prilazu problemu lokalizovanih stanja, koja su uzrokovana postojanjem granične površine kristala, zanemarivana promena integrala izmene, a uzimana u obzir samo promena magnetnog momenta atoma na graničnoj površini kristala, izraz (I.3.4) istovremeno predstavlja i hamiltonijan spin-fonon interakcije za polubeskonačni kristal.

U Blohovoj aproksimaciji za spinske operatore (I.1.4), izraz (I.3.4) dobija oblik

$$H_{S,F} = -\frac{S}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} \left[\nabla_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} \right] \left[\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} - \vec{\xi}_{\vec{m}m_z} \right] \cdot$$

$$\cdot \left[2B^+_{\vec{n}n_z} B_{\vec{m}m_z} - B^+_{\vec{m}m_z} B_{\vec{m}m_z} - B^+_{\vec{n}n_z} B_{\vec{n}n_z} + S \right] \qquad (I.3.5)$$

pri čemu je zanemaren član koji sadrži četiri operatora B^+BB^+B

kao dinamička interakcija višeg reda (uzimanjem ovog člana u obzir prevazilazi se tačnost Blohove aproksimacije [7]).

Kao prvi primer efekata koji bitno zavise od spin-fonon interakcije ispituje se proces prelaska zapreminskog magnona u površinski. Iz (I.3.5) izdvajaju se, zbog toga, samo članovi sa indeksima $(\vec{n},0) \equiv \vec{0}$ i $(\vec{m},1) \equiv \vec{1}$, pri čemu se dijagonalni delovi $B^{+}_{\vec{1}}B_{\vec{1}}$ i $B^{+}_{\vec{0}}B_{\vec{0}}$ zanemaruju, jer isti očigledno nisu odgovorni za "vertikalni" prelaz zapreminskog magnona u površinski. Prema tome, efektivni hamiltonijan koji dovodi do površinske anihilacije zapreminskog magnona i njegovog pretvaranja u površinski ima oblik

$$H_{S,F} = -S \sum_{\vec{1},\vec{0}} \left(\nabla_{\vec{0}-\vec{1}} I_{\vec{0}-\vec{1}}\right)\left(\vec{\xi}_{\vec{0}} - \vec{\xi}_{\vec{1}}\right) B^{+}_{\vec{0}} B_{\vec{1}} \qquad (I.3.6)$$

Anihilacija zapreminskog i radjanje površinskog magnona, tj. njegov izlazak na površinu kristala se može realizovati na dva različita načina:

a) Sve se ovo može dogoditi u procesu u kojem se uništava jedan zapreminski magnon, a radja jedan površinski magnon i jedan površinski fonon, ili

b) Uništava se zapreminski magnon, a radja površinski magnon i zapreminski fonon.

Drugim rečima, ovo znači da se proces prelaska zapreminskog magnona u površinski odvija ili uz emisiju zapreminskog ili uz emisiju površinskog fonona.

U nameri da se verovatnoća za ova dva tipa prelaza izračuna, izvršiće se Furije transformacija hamiltonijana (I.3.6) na sledeći način:

$$\nabla_{\vec{0}-\vec{1}} I_{\vec{0}-\vec{1}} = \frac{2}{NN_z} \sum_{\vec{p}p_z} J_{\vec{p}p_z} \left(i\vec{p}\cos p_z a - p_z \vec{e}_z \sin p_z a\right) e^{i\vec{p}(\vec{n}-\vec{m})a}$$

$$B^{+}_{\vec{0}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_1} e^{-i\vec{k}_1\vec{n}a} B^{+}_{\vec{k}_1 i\eta}$$

$$B_{\vec{1}} = \sum_{\vec{k}} \left[\frac{2}{NN_z\left|1-\frac{SI}{\mu' H+SI}e^{ik_z a}\right|}\right]^{1/2} \left(1-\frac{2SI}{\mu' H+SI}\cos k_z a\right) \cdot$$

$$\cdot \sin k_z a \; e^{i\vec{k}\vec{m}a} B_{\vec{k}k_z}$$

i, ako u procesu učestvuju zapreminski fononi, tada je

$$\vec{\xi}_{\vec{0}} = \sum_{\vec{q}q_z} \left[\frac{\hbar}{NN_z\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}e^{iq_z a}\right| M\omega(\vec{q}q_z)}\right]^{1/2} \frac{\vec{q}+q_z\vec{e}_z}{(q^2+q_z^2)^{1/2}} \left(b^{+}_{\vec{q}q_z} + b_{-\vec{q}q_z}\right) \cdot$$

$$\cdot \frac{\lambda}{\lambda'_0} \sin q_z a \quad e^{-i\vec{q}\vec{n}a}$$

$$\vec{\xi}_{\vec{1}} = \sum_{\vec{q}q_z} \left[\frac{\hbar}{NN_z\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}e^{iq_z a}\right| M\omega(\vec{q}q_z)}\right]^{1/2} \frac{\vec{q}+q_z\vec{e}_z}{(q^2+q_z^2)^{1/2}} \left(b^{+}_{\vec{q}q_z} + b_{-\vec{q}q_z}\right) \cdot$$

$$\cdot \left(1+2\frac{\lambda}{\lambda'_0}\cos q_z a\right) \sin q_z a \quad e^{-i\vec{q}\vec{m}a}$$

Medjutim, ukoliko u procesu učestvuju površinski fononi, tada je

$$\vec{\xi}_{\vec{0}} = \sum_{\vec{q}} \left[\frac{\hbar}{NM\omega(\vec{q}i\rho)}\right]^{1/2} \frac{\vec{q}+i\rho\vec{e}_z}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} \left(b^{+}_{\vec{q}i\rho} + b_{-\vec{q}i\rho}\right) e^{-i\vec{q}\vec{n}a}$$

$$\vec{\xi}_{\vec{1}} = \sum_{\vec{q}} \left[\frac{\hbar}{NM\omega(\vec{q}i\rho)}\right]^{1/2} \frac{\vec{q}+i\rho\vec{e}_z}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} \left(b^{+}_{\vec{q}i\rho} + b_{-\vec{q}i\rho}\right) e^{-i\vec{q}\vec{m}a}$$

Ovde je uzeto u obzir da postoji interakcija samo sa longitudinalnom granom fonona i zbog toga je stavljeno da je $\vec{e}_\ell(\vec{q}q_z) = \frac{\vec{q}+q_z\vec{e}_z}{(q^2+\rho^2)^{1/2}}$ [7] i istovremeno su zanemareni članovi

$e^{-2\eta a}$ i $e^{-2\rho a}$ u odnosu na jedinicu u izrazima (I.1.21) i (I.1.22).

Posle Furije transformacije, hamiltonijan spin-fonon interakcije sa zapreminskim fononima postaje

$$H^{Z}_{S,F} = -\frac{2S}{N^{1/2}N_z^2}\sum_{\substack{\vec{q}q_z\\ \vec{k}k_z,p_z}}\left[\frac{2\hbar}{M\omega(\vec{q}q_z)\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}e^{iq_z a}\right|\left|1-\frac{SI}{\mu' H+SI}e^{ik_z a}\right|}\right]^{1/2}\cdot$$

$$\cdot\left(1-\frac{2SI}{\mu' H+SI}\cos k_z a\right)\sin q_z a\,\sin k_z a\left[\frac{\lambda}{\lambda'_0}J_{\vec{k}p_z}\frac{i\vec{k}\vec{q}\cos p_z a-p_z q_z\sin p_z a}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}-\right.$$

$$\left.-J_{\vec{k}-\vec{q}\,p_z}\left(1+2\frac{\lambda}{\lambda'_0}\cos q_z a\right)\frac{i(\vec{k}-\vec{q})\vec{q}\cos p_z a-p_z q_z\sin p_z a}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}\right]\cdot$$

$$\left(b^{+}_{\vec{q}q_z}+b_{-\vec{q}q_z}\right)B^{+}_{\vec{k}-\vec{q}\,i\eta}\,B_{\vec{k}k_z} \qquad \text{(I.3.7)}$$

Hamiltonijan interakcije sa površinskim fononima dat je sa

$$H^{\Pi}_{S,F} = \frac{2S}{N^{1/2}N_z^{3/2}}\sum_{\substack{\vec{q}q_z\\ \vec{k}k_z,p_z}}\left(\frac{2\hbar}{M\omega(\vec{q}i\rho)\left|1-\frac{SI}{\mu' H+SI}e^{ik_z a}\right|}\right)^{1/2}\sin k_z a\,\cdot$$

$$\cdot\left(1-\frac{2SI}{\mu' H+SI}\cos k_z a\right)\left[J_{\vec{k}p_z}\frac{\vec{q}\vec{k}\cos p_z a+\rho p_z\sin p_z a}{(q^2+\rho^2)^{1/2}}-\right.$$

$$\left.-J_{\vec{k}-\vec{q}\,p_z}\frac{(\vec{k}-\vec{q})\vec{q}\cos p_z a+\rho p_z\sin p_z a}{(q^2+\rho^2)^{1/2}}e^{-\rho a}\right]\left(b^{+}_{\vec{q}i\rho}+b_{-\vec{q}i\rho}\right)B^{+}_{\vec{k}-\vec{q}\,i\eta}\,B_{\vec{k}k_z} \qquad \text{(I.3.8)}$$

Za proces u kojem se anihilira jedan zapreminski magnon, a na račun toga radja jedan površinski magnon i jedan zapreminski fonon, inicijalno i finalno stanje su oblika:

$$\left.\begin{aligned}|i\rangle &\equiv |1^{ZM}_{\vec{k}k_z}\rangle\,|0^{\Pi M}\rangle\,|0^{Z\Phi}\rangle\\ |f\rangle &\equiv |0^{ZM}\rangle\,|1^{\Pi M}_{\vec{k}-\vec{q}\,i\eta}\rangle\,|1^{Z\Phi}_{\vec{q}q_z}\rangle\end{aligned}\right\} \qquad \text{(I.3.9)}$$

a za proces u kojem se anihilira jedan zapreminski magnon i na račun toga radja jedan površinski magnon i jedan površinski fonon inicijalno i finalno stanje su dati sa:

$$\left.\begin{aligned} |i> &\equiv |1^{ZM}_{\vec{k}k_z}>\,|0^{\Pi M}>\,|0^{\Pi\Phi}> \\ |f> &\equiv |0^{ZM}>\,|1^{\Pi M}_{\vec{k}-\vec{q}\,i\eta}>\,|1^{\Pi\Phi}_{\vec{q}\,i\rho}> \end{aligned}\right\} \qquad (I.3.10)$$

Indeksima Z i Π označene su veličine koje se odnose na zapreminska, odnosno površinska stanja magnona (M), odnosno fonona (Φ).

U hamiltonijanima (I.3.7) i (I.3.8) član koji sadrži operatore B^+Bb (anihilacija fonona) dejstvujući na inicijalna stanja (I.3.9) i (I.3.10) daje nulu, tako da su matrični elementi prelaza pomenutih procesa, u aproksimaciji najbližih suseda, oblika

$$<H^{Z}_{S,F}>_{if} = \frac{4IS}{N^{1/2}N_z}\sqrt{\frac{2\hbar}{\left|1+\frac{\lambda}{\lambda_o'}e^{iq_za}\right|\left|1-\frac{SI}{\mu' H+SI}e^{ik_za}\right|M\omega(\vec{q}q_z)}}\,sink_za\,sinq_za\,\cdot$$
$$\cdot\left(1-\frac{2SI}{\mu' H+SI}cosk_za\right)\frac{1}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}\left\{\frac{i}{4}\frac{\lambda}{\lambda_o'}\vec{k}\vec{q}-\frac{1}{2a}\frac{\lambda}{\lambda_o'}\left(cosk_xa+cosk_ya\right)q_z+\right.$$
$$+\frac{1}{8a}\frac{\lambda}{\lambda_o'}q_z-\frac{i}{4}\left[\vec{q}(\vec{k}-\vec{q})(1+2\frac{\lambda}{\lambda_o'}cosq_za)\right]-\frac{1}{8a}q_z(1+2\frac{\lambda}{\lambda_o'}cosq_za)+$$
$$\left.+\frac{1}{2a}q_z(1+2\frac{\lambda}{\lambda_o'}cosq_za)\left[cos(k_x-q_x)a+cos(k_y-q_y)a\right]\right\} \qquad (I.3.11)$$

$$<H^{\Pi}_{S,F}>_{if} = i\,\frac{4SI}{N^{1/2}N_z^{1/2}}\sqrt{\frac{2\hbar}{\left|1-\frac{SI}{\mu' H+SI}e^{ik_za}\right|M\omega(\vec{q}\,i\rho)}}\,sink_za\,\cdot$$
$$\cdot\left(1-\frac{2SI}{\mu' H+SI}cosk_za\right)\frac{1}{(q^2+\rho^2)^{1/2}}\left\{\frac{1}{4}\vec{q}\vec{k}+\frac{1}{2a}\rho(cosk_xa+cosk_ya)-\frac{1}{8a}\rho-\right.$$
$$\left.-\frac{1}{2a}\left[cos(k_x-q_x)a+cos(k_y-q_y)a\right]\rho\,e^{-\rho a}-\frac{1}{4}\vec{q}(\vec{k}-\vec{q})e^{-\rho a}+\frac{1}{8a}\rho\,e^{-\rho a}\right\} \quad (I.3.12)$$

Verovatnoće prelaza u jedinici vremena za prethodno opisane procese date su izrazima

$$W^{Z}(\vec{q}q_z\vec{k}k_z\eta) = \frac{2\pi}{\hbar}\left|<H^{Z}_{SF}>_{if}\right|^{2}\delta\left[E^{ZM}_{\vec{k}k_z} - E^{\Pi M}_{\vec{k}-\vec{q}\,i\eta} - E^{Z\Phi}_{\vec{q}q_z}\right] \qquad (I.3.13)$$

$$W^{\Pi}(\vec{q}\,\vec{k}k_z\eta\rho) = \frac{2\pi}{\hbar}\left|<H^{\Pi}_{SF}>_{if}\right|^{2}\delta\left[E^{ZM}_{\vec{k}k_z} - E^{\Pi M}_{\vec{k}-\vec{q}\,i\eta} - E^{\Pi\Phi}_{\vec{q}\,i\rho}\right] \qquad (I.3.14)$$

gde su energije magnona, odnosno fonona date izrazima

$$E^{ZM}_{\vec{k}k_z} = S(J_o - J_{\vec{k}k_z}) \ , \qquad E^{\Pi M}_{\vec{k}-\vec{q}\,i\eta} = S(J_o - J_{\vec{k}-\vec{q}\,i\eta}) \ ;$$

$$E^{Z\Phi}_{\vec{q}q_z} = \omega(\vec{q}q_z)\hbar \ , \qquad E^{\Pi\Phi}_{\vec{q}\,i\rho} = \omega(\vec{q}\,i\rho)\hbar \ .$$

Verovatnoće prelaza usrednjene po svim fononskim stanjima sistema, u aproksimaciji najbližih suseda imaju oblik (δ - funkcije u izrazima (I.3.13) i (I.3.14) uzete su u aproksimaciji malih talasnih vektora)

$$W^{Z}(\vec{k}k_z\eta) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{NN_z a^3}{(2\pi)^3}\int_0^{q_{max}}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi/2}\left|<H^{Z}_{S,F}>_{if}\right|^{2}\frac{1}{SIa^2 sin^2\theta_q}\ \cdot$$

$$\cdot\ \frac{q^2\, sin\theta_q dq\, d\phi_q\, d\theta_q}{\left\{\dfrac{\left[2SIa^2k\ cos(\phi_k-\phi_q)sin\theta_k sin\theta_q - \hbar v_\phi\right]^2}{S^2I^2a^4 sin^4\theta_q} + 4\,\dfrac{\eta^3+k^2\ cos^2\theta_k}{sin^2\theta_q}\right\}^{1/2}} \qquad (I.3.15)$$

$$W^{\Pi}(\vec{k}k_z\eta\rho) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{NN_z a^3}{(2\pi)^3}\int_0^{q_{max}}\int_0^{\pi} q\sqrt{q^2+\rho^2}\ dq\, d\phi_q\ \left|<H^{\Pi}_{S,F}>_{if}\right|^{2}\frac{1}{SIa^2}\ \cdot$$

$$\cdot\ \frac{1}{\left\{\dfrac{\left[2SIa^2k\ sin\theta_k\ cos(\phi_k-\phi_q) - \hbar v_\phi\right]^2}{S^2I^2a^4} + 4\,\dfrac{\eta^2+k^2\ cos^2\theta_k}{a^2}\right\}^{1/2}} \qquad (I.3.16)$$

gde su $\{q,\theta_q,\phi_q\}$, $\{k,\theta_k,\phi_k\}$ i $\{q,\phi_q\}$ u prvom, odnosno drugom integralu sferne, odnosno polarne koordinate talasnog vektora zapreminskog fonona i magnona, odnosno površinskog fonona i v_ϕ brzina zvuka. U drugom je integralu, umesto normalnog "elementa zapremine", iskorišćena funkcija distribucije, za slučaj trodimenzionog talasnog vektora kada mu je jedna (z-komponenta) komponenta konstantna, tj. za taj slučaj u dugotalasnoj Debajevoj aproksimaciji umesto $q^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, dq$ treba uzeti funkciju distribucije $q\sqrt{q^2+\rho^2} \, dq \, d\phi$, gde je $\rho = const$.

Totalne verovatnoće prelaza, tj. verovatnoće usrednjene po svim stanjima zapreminskog magnona, date su izrazima:

$$W^Z(\eta) = \frac{S^2 I^2 N a^6}{\pi^5 M} \int_0^{k_{max}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2(ka\cos\theta_k)\left[1 - \frac{2SI}{\mu' H + SI}\cos(ka\cos\theta_k)\right]^2}{\left|1 - \frac{SI}{\mu' H + SI} e^{ika\cos\theta_k}\right|} \cdot$$

$$\cdot\, k^2 \sin\theta_k dk \, d\theta_k d\phi_k \left\{ \int_0^{Q_{max}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} F^Z(q,\theta_q,\phi_q,k,\theta_k,\phi_k,\eta) q^2 dq \, d\theta_q \, d\phi_q \right\} \tag{I.3.17}$$

$$W^{\sqcap}(\eta,\rho) = \frac{S^2 I^2 N N_z a^6}{\pi^5 M} \int_0^{k_{max}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2(ka\cos\theta_k)\left[1 - \frac{SI}{\mu' H + SI}\cos(ka\cos\theta_k)\right]^2}{\left|1 - \frac{SI}{\mu' H + SI} e^{ika\cos\theta_k}\right|} \cdot$$

$$\cdot\, k^2 \sin\theta_k dk \, d\theta_k d\phi_k \left\{ \int_0^{Q_{max}} \int_0^{2\pi} F^{\sqcap}(q,\phi_q,k,\theta_k,\phi_k,\eta,\rho) q\sqrt{q^2+\rho^2} \, dq \, d\phi_q \right\} \tag{I.3.18}$$

gde je

$$F^Z(q,\theta_q,\phi_q,k,\theta_k,\phi_k,\eta) = \frac{\sin^2(qa\cos\theta_q)}{\left|1 + \frac{\lambda}{\lambda'_o} e^{iqa\cos\theta_q}\right| \omega(q\theta_q\phi_q)} \cdot$$

$$\cdot\, \frac{1}{q^2 \{[2SIa^2 k \cos(\phi_k - \phi_q)\sin\theta_k \sin\theta_q - \hbar v_\phi]^2 + 4S^2 I^2 a^2(\eta^2 + k^2\cos^2\theta_k)\}^{1/2}} \cdot$$

$$\cdot \left| \frac{q}{2a} \frac{\lambda}{\lambda'_o} \left[\frac{1}{4} - \cos(ka\sin\theta_k\cos\phi_k) - \cos(ka\sin\theta_k\sin\phi_k)\right] \cos\theta_q + \frac{q}{2a}\cos\theta_q \cdot \right.$$

$$\cdot \left[1+2\frac{\lambda}{\lambda_0'}cos(qacos\theta_a)\right]\left[cos(kasin\theta_k cos\phi_k - qasin\theta_q cos\phi_q) + \right.$$

$$+ cos(kasin\theta_k sin\phi_k - qasin\theta_q sin\phi_q) - \left.\frac{1}{4}\right] + \frac{i}{4}\left[\frac{\lambda}{\lambda_0'}(kqsin\theta_k sin\theta_q cos\phi_k cos\phi_q + \right.$$

$$+ kqsin\theta_k sin\theta_q sin\phi_k sin\phi_q) - q(ksin\theta_k cos\phi_k - qsin\theta_q cos\phi_q)sin\theta_q cos\phi_q -$$

$$\left. - q(ksin\theta_k sin\phi_k - qsin\theta_q sin\phi_q)sin\theta_q sin\phi_q\right]\left[1+2\frac{\lambda}{\lambda_0'}cos(qacos\theta_q)\right]\Bigg|^2$$

$$F^{\Pi}(q,\phi_q,k,\theta_k,\phi_k,\eta,\rho) = \frac{1}{(q^2+\rho^2)\omega(q,\phi_q,\ i\rho)} \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\{[2SIa^2kcos\theta_k cos(\phi_k-\phi_q)-\hbar\nu_\phi]^2 + 4S^2I^2a^2(\eta^2+k^2cos^2\theta_k)\}^{1/2}} \cdot$$

$$\cdot\left\{\frac{\rho}{2a}\left[cos(kasin\theta_k cos\phi_k) + cos(kasin\theta_k sin\phi_k) - \frac{1}{4}\right] + \frac{1}{4}\, qk\left[cos\phi_q sin\theta_k cos\phi_k + \right.\right.$$

$$\left. + sin_q\phi sin_k\theta sin_k\phi\right] - \frac{\rho e^{-\rho a}}{2a}\left[cos(kasin\theta_k cos\phi_k - qacos\phi_q) + \right.$$

$$\left. + cos(kasin\theta_k sin\phi_k - qasin\phi_q)\right] + \frac{\rho e^{-\rho a}}{8a} - \frac{1}{4}q\left[(ksin\theta_k cos\phi_k - qcos\phi_q)cos\phi_q + \right.$$

$$\left.\left. + (ksin\theta_k sin\phi_k - qsin\phi_q)sin\phi_q\right] e^{-\rho a}\right\}^2 .$$

Odnos verovatnoća ovih dvaju procesa, budući da su integrali istog reda veličine, je

$$\frac{W^{\Pi}(\eta,\rho)}{W^{Z}(\eta)} \simeq N_z \qquad (I.3.19)$$

što znači da je proces prebacivanja magnetne energije na površinu kristala daleko verovatniji ako u njemu učestvuju površinski fononi.

Diskutujući rezultate za koeficijent površinske anihilacije zapreminskog magnona može se zaključiti da, kako u procesu emisije površinskog fonona (koji je verovatniji), tako i u procesu emisije zapreminskog fonona, magnetna energija prelazi iz zapremine na površinu kristala, pri čemu se kristal zagreva. S obzirom na izračunate verovatnoće ovih procesa, verovatnije je da magnetna energija struji iz zapremine prema površini uz zagrevanje površine kristala.

Kao drugi primer neposredne posledice spin-fonon interakcije biće izračunat srednji slobodni put magnona u interakciji sa fononima.

Kako u polubeskonačnom feromagnetiku, kao što je pokazano, postoje zapreminski i površinski magnoni, prvo će biti razmatrana interakcija zapreminskih magnona sa "gasom" zapreminskih i površinskih fonona.

Hamiltonijan magnon-fonon interakcije u polubeskonačnom feromagnetiku za opšti spin u Blohovoj aproksimaciji dat je izrazom (I.3.5)

$$H_{S,F} = -\frac{S}{2}\sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z}\left[\nabla_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}\right]\left(\vec{\xi}_{\vec{n}n_z}-\vec{\xi}_{\vec{m}m_z}\right)\cdot$$

$$\cdot\left[2B^{+}_{\vec{n}n_z}B_{\vec{m}m_z} - B^{+}_{\vec{n}n_z}B_{\vec{n}n_z} - B^{+}_{\vec{m}m_z}B_{\vec{m}m_z} + S\right] \qquad \text{I.3.20)}$$

Nakon Furije-transformacije veličina

$$\nabla_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} = \frac{1}{NN_z}\sum_{\vec{p}p_z} J_{\vec{p}p_z}\left[i\vec{p}\cos p_z(n_z-m_z)a - \right.$$

$$\left. - p_z\vec{e}_z \sin p_z(n_z-m_z)a\right]e^{i\vec{p}(\vec{n}-\vec{m})a}$$

$$B_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{k}k_z}\sqrt{\frac{2}{NN_z\left|1-\frac{SI}{\mu' H+SI}e^{ik_z a}\right|}}\; f(n_z,k_z)\; e^{i\vec{k}\vec{n}a} B_{\vec{k}k_z}$$

$$\vec{\xi}^{Z}_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q}q_z} \sqrt{\frac{\hbar}{NN_zM\left|1+\frac{\lambda}{\lambda_o'}e^{iq_za}\right|\omega(\vec{q}q_z)}}\,\frac{\vec{q}+q_z\vec{e}_z}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}\,\phi(n_z,q_z)\cdot$$

$$\cdot\left(a_{\vec{q}q_z} + a_{-\vec{q}q_z}\right)e^{i\vec{q}\vec{n}a}$$

gde je

$$f(n_z,k_z) = \sin n_zk_za - \frac{SI}{\mu'H+SI}\sin(n_z+1)k_za\;;$$

$$\phi(n_z,q_z) = \sin n_zq_za + \frac{\lambda}{\lambda_o'}\sin(n_z+1)q_za\;,$$

pri čemu je izraz (I.3.23) napisan samo za longitudinalnu granu fonona, zbog toga što je interakcija magnona sa transverzalnim fononima zanemarljiva [7], izraz za interakciju zapreminskih magnona sa zapreminskim fononima ima oblik

$$H^{ZM-Z\Phi} = \frac{S}{8\sqrt{NN_z}}\sum_{\vec{q}q_z,\vec{k}k_z}\sqrt{\frac{\hbar}{M\omega(\vec{q}q_z)}}\,\frac{1}{|1+\Lambda\alpha(q_z)||1-\beta(k_z)|}\,\frac{\vec{q}+q_z\vec{e}_z}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}\cdot$$

$$\cdot\left\{\frac{1}{|1-\alpha(q_z)\beta(k_z)|}\left[(\gamma-\gamma^*)(\vec{k}+k_z\vec{e}_z)\left(J_{\vec{k}k_z}-J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z+q_z}\right)-(\gamma-\gamma^*)\cdot\right.\right.$$

$$\cdot(\vec{q}+q_z\vec{e}_z)\,J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z+q_z} - 2\gamma k_z\vec{e}_z\left(J_{\vec{k}k_z}-J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z+q_z}\right) + 2\gamma q_z\vec{e}_zJ_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z+q_z} +$$

$$\left.+\frac{1}{2}(\gamma-\gamma^*)(\vec{q}-q_z\vec{e}_z)J_{-\vec{q}q_z} - \frac{1}{2}(\gamma+\gamma^*)q_z\vec{e}_zJ_{oq_z}\right]\left(a_{\vec{q}q_z}+a^+_{\vec{q}q_z}\right)B_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z+q_z} +$$

$$+\frac{1}{|1-\alpha^*(q_z)\beta(k_z)|}\left[2\delta^*q_z\vec{e}_zJ_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z-q_z} + 2\delta k_z\vec{e}_z\left(J_{\vec{k}k_z}-J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z-q_z}\right)+\right.$$

$$+(\delta-\delta^*)(\vec{q}+q_z\vec{e}_z)J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z-q_z} - (\delta-\delta^*)(\vec{k}+k_z\vec{e}_z)\left(J_{\vec{k}k_z}-J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z-q_z}\right)-$$

$$\left.-\frac{1}{2}(\delta-\delta^*)(\vec{q}+q_z\vec{e}_z)J_{-\vec{q}q_z} - \frac{1}{2}(\delta+\delta\;)q_z\vec{e}_zJ_{oq_z}\right]\left(a_{\vec{q}q_z}+a^+_{-\vec{q}q_z}\right)B_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z-q_z}B_{\vec{k}k_z} +$$

$$+\frac{1}{|1-\alpha(q_z)\beta^*(k_z)|}\left[(\delta-\delta^*)(\vec{k}+k_z\vec{e}_z)\left(J_{\vec{k}k_z}-J_{\vec{k}+\vec{q}\;q_z-k_z}\right)-(\delta-\delta^*)(\vec{q}+q_z\vec{e}_z)\cdot\right.$$

$$\cdot\, J_{\vec{k}+\vec{q}\; q_z-k_z} - 2\delta k_z\vec{e}_z\left(J_{\vec{k}k_z} - J_{\vec{k}+\vec{q}\; q_z-k_z}\right) - 2\delta^* q_z\vec{e}_z J_{\vec{k}+\vec{q}\; q_z-k_z} +$$

$$+ \frac{1}{2}(\delta-\delta^*)(\vec{q}+q_z\vec{e}_z)J_{-\vec{q}q_z} + \frac{1}{2}(\delta+\delta^*)q_z\vec{e}_z J_{oq_z}\Big]\left(a_{\vec{q}q_z} + a_{-\vec{q}q_z}\right)B^+_{\vec{k}+\vec{q}\; q_z-k_z} B_{\vec{k}k_z}\Big\} \tag{I.3.21}$$

gde je $\Lambda = \frac{\lambda}{\lambda'_o}$; $\alpha(q_z) = e^{iq_z a}$; $\beta(k_z) = \frac{SI}{\mu' H + SI}\, e^{ik_z a}$;

$$\gamma = |1+\Lambda\alpha^*(q_z)|\,|1-\alpha(q_z)\beta(k_z)|\,|1-\beta^*(k_z)|\,;$$

$$\delta = |1+\Lambda\alpha(q_z)|\,|1-\alpha^*(q_z)\beta(k_z)|\,|1-\beta^*(k_z)|\,.$$

U slučaju interakcije zapreminskih magnona sa površinskim fononima uzeto je da je $n_z = m_z = 0$; jer je koncentracija površinskih fonona na površini kristala najveća, a eksponencijalno opada sa porastom dubine. Naime, posle Furije-transformacije veličina

$$\nabla_{\vec{n}-\vec{m},\, 0}\, I_{\vec{n}-\vec{m},\, 0} = \frac{i}{NN_z}\sum_{\vec{p}p_z} J_{\vec{p}p_z}\, \vec{p}\, e^{i\vec{p}(\vec{n}-\vec{m})a}$$

$$B^Z_{\vec{n}\,0} = -\sum_{\vec{k}k_z}\sqrt{\frac{2}{NN_z\left|1-\frac{SI}{\mu' \; +SI}e^{ik_z a}\right|}}\;\frac{SI}{\mu' H+SI}\, sin k_z a\, e^{i\vec{k}\vec{n}a}\, B_{\vec{k}k_z}$$

$$\vec{\xi}_{\vec{n}\,0} = \sum_{\vec{q}}\sqrt{\frac{\hbar}{NM\omega(\vec{q}\,i\rho)}}\;\frac{\vec{q}+i\rho\,\vec{e}_z}{(q^2+\rho^2)^{1/2}}\left(a_{\vec{q}\,i\rho} + a^+_{-\vec{q}\,i\rho}\right)e^{i\vec{q}\vec{n}a}$$

pri čemu je izraz za fononski pomak napisan samo za longitudinalnu granu fonona, izraz za interakciju zapreminskih magnona sa površinskim fononima dobija oblik

$$H^{ZM-\Pi\Phi} = \frac{Si}{N^{1/2}N_z^2}\sum_{\substack{\vec{k}\; k_z,k'_z\\ \vec{q},p_z}}\sqrt{\frac{4\hbar}{M\left|1-\frac{SI}{\mu' H+SI}\, e^{ik'_z a}\right|\left|1-\frac{SI}{\mu' H+SI}\, e^{ik_z a}\right|\omega(\vec{q}\,i\rho)}}\;\cdot$$

$$\cdot\,\frac{S^2I^2}{(\mu' H+SI)^2}\, sin k'_z a\, sin k_z a\left\{\frac{\vec{q}(\vec{k}+\vec{q})}{(q^2+\rho^2)^{1/2}}\, J_{\vec{k}+\vec{q}\; p_z} - \frac{\vec{q}\vec{k}}{(q^2+\rho^2)^{1/2}}\, J_{\vec{k}\; p_z} -\right.$$

$$- \frac{q^2}{2(q^2+\rho^2)^{1/2}} J_{-\vec{q}\, p_z} - \frac{q^2}{2(q^2+\rho^2)^{1/2}} J_{\vec{q}\, p_z} \Big\} \left(a_{\vec{q}\, i\rho} + a^+_{-\vec{q}\, i\rho}\right) B^+_{\vec{k}+\vec{q}\, k'_z} B_{\vec{k}\, k_z}$$

(I.3.22)

Sada je ukupni hamiltonijan interakcije zapreminskih magnona sa "gasom" zapreminskih i površinskih fonona dat sa

$$H^Z = H^{ZM-Z\Phi} + H^{ZM-\Pi\Phi} \qquad (I.3.23)$$

Analizirajući, medjutim, izraze za $H^{ZM-Z\Phi}$ i $H^{ZM-\Pi\Phi}$, lako se zaključuje da je $H^{ZM-\Pi\Phi}$ bar za tri reda veličine manji od interakcije $H^{ZM-Z\Phi}$, tako da se ukupna interakcija zapreminskih magnona sa "gasom" zapreminskih i površinskih fonona aproksimativno može svesti na interakciju zapreminskih magnona sa zapreminskim fononima

$$H^Z = H^{ZM-Z\Phi} \qquad (I.3.24)$$

U interakciji magnon-fonon očigledno su mogući, kako procesi apsorpcije, tako i procesi emisije fonona. Zato se, prvo, posebno ispituju verovatnoće procesa apsorpcije, odnosno emisije fonona.

U slučaju procesa apsorpcije fonona uzima se da je inicijalno, odnosno finalno stanje oblika

$$|i> \equiv |0^{ZM}>|1^{ZM}_{\vec{k}k_z}>|n^{Z\Phi}_{\vec{q}q_z}>$$

$$|f> \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \Big\{ |1^{ZM}_{\vec{k}+\vec{q}\; k_z+q_z}>|0^{ZM}>|n^{Z\Phi}_{\vec{q}q_z}-1> +$$

$$+ |1^{ZM}_{\vec{k}+\vec{q}\; k_z-q_z}>|0^{ZM}>|n^{Z\Phi}_{\vec{q}q_z}-1> +$$

$$+ |1^{ZM}_{\vec{k}+\vec{q}\; q_z-k_z}>|0^{ZM}>|n^{Z\Phi}_{\vec{q}q_z}-1>\Big\} \qquad (I.3.25)$$

Matrični element prelaza u procesu apsorpcije fonona u aproksimaciji malih talasnih vektora i najbližih suseda (zadržavajući se samo na članovima sa najnižim stepenom talasnih vektora) ima oblik

$$\langle H^Z\rangle_{if}^{(A)} = \frac{\sqrt{3}\,SI}{4\sqrt{NN_z}}\sqrt{\frac{\hbar}{MV_\phi(q^2+q_z^2)^{1/2}}}\;\frac{1}{(1+\Lambda)(1-\Theta)}\;\frac{\vec{q}+q_z\vec{e}_z}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}\,\cdot$$

$$\cdot\left[(1+\Lambda)(1-\Theta)q_z\vec{e}_z + i(\Theta+\Lambda)(\vec{q}+q_z\vec{e}_z)q_z a\right]\sqrt{n_{\vec{q}q_z}} \tag{I.3.26}$$

gde je V_ϕ brzina zvuka i $\Theta = \frac{SI}{\mu' H+SI}$.

U slučaju procesa emisije fonona uzima sa da je inicijalno, odnosno finalno stanje oblika

$$|i\rangle \equiv |0^{ZM}\rangle|1^{ZM}_{\vec{k}k_z}\rangle|n^{Z\Phi}_{-\vec{q}q_z}\rangle$$

$$|f\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{3}}\left\{|1^{ZM}_{\vec{k}+\vec{q}\;q_z-k_z}\rangle|0^{ZM}\rangle|n^{Z\Phi}_{\vec{q}q_z}+1\rangle + \right.$$

$$+\;|1^{ZM}_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z-q_z}\rangle|0^{ZM}\rangle|n^{Z\Phi}_{-\vec{q}q_z}+1\rangle +$$

$$\left.+\;|1^{ZM}_{\vec{k}+\vec{q}\;q_z-k_z}\rangle|0^{ZM}\rangle|n^{Z\Phi}_{-\vec{q}q_z}+1\rangle\right\} \tag{I.3.27}$$

tako da je matrični element prelaza, u aproksimaciji malih talasnih vektora i najbližih suseda (zadržavajući se samo na članovima sa najnižim stepenom talasnih vektora) dat izrazom

$$\langle H^Z\rangle_{if}^{(E)} = \frac{\sqrt{3}\,SI}{4\sqrt{NN_z}}\sqrt{\frac{\hbar}{MV_\phi(q^2+q^2)^{1/2}}}\;\frac{1}{(1+\Lambda)(1-\Theta)}\;\frac{\vec{q}+q_z\vec{e}_z}{(q^2+q^2)^{1/2}}\,\cdot$$

$$\cdot\left[(1+\Lambda)(1-\Theta)q_z\vec{e}_z + i(\Theta+\Lambda)(\vec{q}+q_z\vec{e}_z)q_z a\right]\sqrt{n_{-\vec{q}q_z}+1} \tag{I.3.28}$$

Verovatnoće prelaza za jednu sekundu iz inicijalnog u finalno stanje za apsorpciju, odnosno emisiju jednog fonona date su izrazima

$$\left.\begin{aligned} W_Z^{(A)} &= \frac{2\pi}{\hbar}\,|\langle H^Z\rangle_{if}^{(A)}|^2\,\delta(\varepsilon_f-\varepsilon_i) \\ W_Z^{(E)} &= \frac{2\pi}{\hbar}\,|\langle H^Z\rangle_{if}^{(E)}|^2\,\delta(\varepsilon_f-\varepsilon_i) \end{aligned}\right\} \tag{I.3.29}$$

Za slučaj apsorpcije fonona $\left(W_Z^{(A)}\right)$ energije inicijalnog i finalnog stanja su

$$\varepsilon_i = 3n_{\vec{q}q_z}\,\omega(\vec{q}q_z)\hbar + 3S\left(J_o - J_{\vec{k}k_z}\right)$$

$$\varepsilon_f = 3(n_{\vec{q}q_z}-1)\omega(\vec{q}q_z)\hbar + S\left(J_o - J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z+q_z}\right) + $$
$$+ S\left(J_o - J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z-q_z}\right) + S\left(J_o - J_{\vec{k}+\vec{q}\;q_z-k_z}\right)$$

U aproksimaciji malih talasnih vektora i najbližih suseda razlika energija $\varepsilon_f - \varepsilon_i$ iznosi

$$\varepsilon_f - \varepsilon_i = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left[3q^2 + 6kq\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_k-\phi_q) - 2kq\cos\theta_k\cos\theta_q\right] - 3V_\phi q\hbar \tag{I.3.30}$$

Za slučaj emisije zapreminskog fonona $\left(W_Z^{(E)}\right)$ odgovarajuće energije inicijalnog, odnosno finalnog stanja su:

$$\varepsilon_i = 3n_{\vec{q}q_z}\,\omega(\vec{q}q_z)\hbar + 3S\left(J_o - J_{\vec{k}k_z}\right)$$

$$\varepsilon_f = 3(n_{\vec{q}q_z}+1)\omega(\vec{q}q_z)\hbar + S\left(J_o - J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z+q_z}\right) + $$
$$+ S\left(J_o - J_{\vec{k}+\vec{q}\;k_z-q_z}\right) + S\left(J_o - J_{\vec{k}+\vec{q}\;q_z-k_z}\right)$$

Razlika energija $\varepsilon_f - \varepsilon_i$ u istoj aproksimaciji kao u slučaju apsorpcije, ima oblik

$$\varepsilon_f - \varepsilon_i = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left[3q^2 + 6kq\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_k-\phi_q) - 2kq\cos\theta_k\cos\theta_q\right] + 3V_\phi q\hbar \tag{I.3.31}$$

gde su (k,θ_k,ϕ_k); (q,θ_q,ϕ_q) sferne koordinate talasnih vektora $(\vec{k}k_z)$ odnosno $(\vec{q}q_z)$ i m^* efektivna masa zapreminskog magnona:

$$m^* = \frac{\hbar}{2SIa^2} \tag{I.3.32}$$

Vreme relaksacije definiše se kao [8]

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\vec{q}q_z} V_1 \cdot V_2 \tag{I.3.33}$$

gde je

$$V_1 = \frac{\textit{broj meta}}{\textit{broj projektila}} = \frac{\textit{funkcija distribucije fonona}}{\textit{funkcija distribucije magnona}} = \frac{g_1(\vec{q}q_z)}{g_2(\vec{k}k_z)} ;$$

i $V_2 = W_Z^{(A)} + W_Z^{(E)}$; koje su date izrazima (I.3.29). Koristeći se Debajevom dugotalasnom aproksimacijom za funkcije distribucije se dobija $g_1(\vec{q}q_z) = 4\pi(q^2+q_z^2)$ i $g_2(\vec{k}k_z) = 4\pi(k^2+k_z^2)$. Koristeći (I.3.29), (I.3.30) i (I.3.31) za (I.3.33) se dobija

$$\frac{1}{\tau_Z} = \frac{1}{\tau_Z^A} + \frac{1}{\tau_Z^E} \tag{I.3.34}$$

gde je

$$\frac{1}{\tau_Z^A} = \sum_{\vec{q}q_z} \frac{q^2+q_z^2}{k^2+k_z^2} W_Z^{(A)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}q_z} \frac{q^2}{k^2} |\langle H^Z \rangle_{if}^{(A)}|^2 \cdot$$

$$\cdot \left\{ \frac{\delta(q)}{\left| 3\frac{\hbar^2}{m^*} k\sin\theta_k \sin\theta_q \cos(\phi_q-\phi_k) - k\cos\theta_k\cos\theta_q \frac{\hbar^2}{m^*} - 3V_\phi\hbar \right|} + \right.$$

$$\left. + \frac{\delta\left[q - \frac{2}{3}k\cos\theta_k\cos\theta_q + 2k\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_q-\phi_k) - \frac{2m^*}{\hbar}V_\phi\right]}{\left|\frac{\hbar^2}{m^*}k\cos\theta_k\cos\theta_q - 3\frac{\hbar^2}{m^*}k\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_q-\phi_k) + 3V_\phi\hbar\right|} \right\} \tag{I.3.35}$$

$$\frac{1}{\tau_Z^E} = \sum_{\vec{q}q_z} \frac{q^2+q_z^2}{k^2+k_z^2} W_Z^{(E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}q_z} \frac{q^2}{k^2} |\langle H^Z \rangle_{if}^{(E)}|^2 \cdot$$

$$\left\{ \frac{\delta(q)}{\left| 3\frac{\hbar^2}{m^*} k\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_k-\phi_q) - \frac{\hbar^2}{m^*} k\cos\theta_k\cos\theta_q + 3V_\phi\hbar \right|} + \right.$$

$$+\frac{\delta\left[q-\frac{2}{3}k\cos\theta_k\cos\theta_q+2k\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_q-\phi_k)+\frac{2m^*}{\hbar}V_\phi\right]}{\left|\frac{\hbar^2}{m^*}k\cos\theta_k\cos\theta_q-3\frac{\hbar^2}{m^*}k\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_q-\phi_k)-3\hbar V_\phi\right|}\Bigg\} \tag{I.3.36}$$

pri čemu je iskorišćena relacija

$$\delta\ \phi(x)=\sum_i\frac{\delta(x-x_i)}{\left|\frac{d\phi(x)}{dx}\right|_{x=x_i}}\ ;$$

gde su x_i koreni jednačine $\phi(x)=0$.

Srednji slobodni put zapreminskog magnona izmedju dva sudara sa fononima rešetke definiše se izrazom [8]

$$\overline{\frac{1}{\lambda_Z}}=\frac{1}{NN_Z}\sum_{\vec{k}k_z}\frac{1}{V_M^Z\tau_Z} \tag{I.3.37}$$

gde je V_M^Z brzina zapreminskog magnona

$$V_M^Z=\frac{\hbar(k^2+k_z^2)^{1/2}}{m^*} \tag{I.3.38}$$

Uzimajući u obzir (I.3.34) i (I.3.38) i prelazeći sa sume na integral, može se napisati izraz za srednji slobodni put zapreminskog magnona na sledeći način

$$\overline{\frac{1}{\lambda_Z}}=\frac{S^2I^2a^6m^{*6}}{432\pi^5MV_\phi\hbar^7}\left\{\int_0^\infty dk\int_0^{\pi/2}d\theta_q\int_0^{2\pi}d\phi_k\left[\int_{arctg(\frac{1}{3}ctg\theta_q)}^{\pi/2}d\theta_k\ \cdot\right.\right.$$

$$\cdot\left\{\int_{\phi_k-2\pi+arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)}^{\phi_k-arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)}F^{(A)}(k,\theta_k,\phi_k,\theta_q,\phi_q)d\phi_q+\int_{\phi_k+arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)}^{\phi_k+2\pi-arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)}F^{(A)}(k,\theta_k,\phi_k,\theta_q,\phi_q)d\phi_q\right\}+$$

$$+\left.\int_0^{arctg\frac{1}{3}ctg\theta_q}d\theta_k\int_{\phi_k-2\pi}^{\phi_k+2\pi}F^{(A)}(k,\theta_k,\phi_k,\theta_q,\phi_q)\ d\phi_q\right]+\int_0^{\pi/2}d\theta_q\int_0^{2\pi}d\phi_k\ \cdot$$

$$\cdot \int\limits_{arctg(\frac{1}{3}ctg\theta_q)}^{\pi/2} d\theta_k \cdot \left[\int\limits_{\phi_k}^{\phi_k+arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)} d\phi_q + \int\limits_{2\pi-arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)}^{2\pi} d\phi_q + \right.$$

$$\left. + \int\limits_{-2\pi}^{arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)} d\phi_q + \int\limits_{-arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)}^{0} d\phi_q \right] \cdot$$

$$\left. \int\limits_{0}^{\frac{m^*V_\phi}{\hbar}\left[\frac{1}{3}cos\theta_k cos\theta_q - sin\theta_k sin\theta_q cos(\phi_k-\phi_q)\right]^{-1}} F^{(A)}\left(k,\theta_k,\phi_k,\theta_q,\phi_q\right) dk \right\} + \frac{S^2 I^2 a^3 m^{*6}}{54 N N_z \pi^2 M V_\phi \hbar^7} \int\limits_0^{\pi/2} d\theta_q \cdot$$

$$\cdot \int\limits_0^{\pi/2} d\phi_k \left\{ \int\limits_{arctg(\frac{1}{3}ctg\theta_q)}^{\pi/2} d\theta_k \left[\int\limits_{\phi_k-2\pi+arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)}^{\phi_k-arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)} d\phi_q + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \int\limits_{\phi_k+arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)}^{\phi_k+2\pi-arccos(\frac{1}{3}ctg\theta_k ctg\theta_q)} d\phi_q \right] + \int\limits_0^{arctg(\frac{1}{3}ctg\theta_q)} d\theta_k \int\limits_{\phi_k-2\pi}^{\phi_k+2\pi} d\phi_q \right\} \cdot$$

$$\cdot \int\limits_{\frac{3m^*V_\phi}{\hbar}\left[cos\theta_k cos\theta_q - sin\theta_k sin\theta_q cos(\phi_k-\phi_q)\right]^{-1}}^{\infty} F^{(E)}\left(k,\theta_k,\phi_k,\theta_q,\phi_q\right) dk \qquad (I.3.39)$$

gde je

$$F^{(A)}\left(k,\theta_k,\phi_k,\theta_q,\phi_q\right) = \frac{1}{k}\left[\frac{\hbar}{m^*} k\ cos\theta_k cos\theta_q - 3\frac{\hbar}{m^*} k\ sin\theta_k sin\theta_q cos(\phi_q-\phi_k) + \right.$$

$$\left. + 3V_\phi\right]^4 \left[cos^2\theta_q + \frac{\left(\frac{SI}{\mu' H+SI} + \frac{\lambda}{\lambda'_0}\right)^2}{\left(1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}\right)\left(\frac{\mu' H}{\mu' H+SI}\right)^2}\right] \cdot$$

$$\cdot \frac{sin\theta_k sin\theta_q}{exp\left\{\frac{2V_\phi m^*}{3k_{\text{Б}}T}\left[\frac{\hbar}{m^*} k\ cos\theta_k cos\theta_q - 3\frac{\hbar}{m^*} sin\theta_k sin\theta_q cos(\phi_q-\phi_k) + 3V_\phi\right]\right\} - 1}$$

i

$$F^{(E)}(k,\theta_k,\phi_k,\theta_q,\phi_q) = \frac{1}{k}\left[\frac{\hbar}{m^*}k\cos\theta_k\cos\theta_q - 3\frac{\hbar}{m^*}k\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_q-\phi_k) - \right.$$

$$\left. - 3V_\phi\right]^4 \left[\cos^2\theta_q + \frac{\left(\frac{SI}{\mu' H + SI} + \frac{\lambda}{\lambda'_0}\right)^2}{\left(1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}\right)\left(\frac{\mu' H}{\mu' H + SI}\right)^2}\right] \cdot$$

$$\cdot \left\{\frac{\sin\theta_k\sin\theta_q}{\exp\left\{\frac{2V_\phi m^*}{3k_Б T}\left[\frac{\hbar}{m^*}k\cos\theta_k\cos\theta_q - 3\frac{\hbar}{m^*}\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_q-\phi_k) - 3V_\phi\right]\right\} - 1} + 1\right\}$$

gde je $k_Б$ Bolcmanova konstanta i T apsolutna temperatura. Granice integracije u izrazu (I.3.39) odredjene su uslovom

$$\frac{2}{3}k\cos\theta_k\cos\theta_q - 2k\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_q-\phi_k) + \frac{2m^*V_\phi}{\hbar} \geqslant 0$$

za proces apsorpcije i

$$\frac{2}{3}k\cos\theta_k\cos\theta_q - 2k\sin\theta_k\sin\theta_q\cos(\phi_q-\phi_k) - \frac{2m^*V_\phi}{\hbar} \geqslant 0$$

za proces emisije zapreminskog fonona.

Drugi deo analize se odnosi na izučavanje srednjeg slobodnog puta površinskog magnona izmedju dva sudara sa fononima rešetke.

Kako su površinski magnoni praktično koncentrisani na površini polubeskonačnog kristala, može se razmatrati samo magnon-fonon interakcija na površini kristala, jer je ovaj deo interakcije dominantan. Naime, za ovaj slučaj se uzima da je hamiltonijan magnon-fonon interakcije približno dat izrazom

$$H_{S,F} = -\frac{S}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}\left(\nabla_{\vec{n}-\vec{m}0} I_{\vec{n}-\vec{m}0}\right)\left(\vec{\xi}_{\vec{n}0} - \vec{\xi}_{\vec{m}0}\right)\left(2B^+_{\vec{n}0}B_{\vec{m}0} - \right.$$

$$\left. - B^+_{\vec{n}0}B_{\vec{n}0} - B^+_{\vec{m}0}B_{\vec{m}0} + S\right) \tag{I.3.40}$$

Nakon Furije-transformacije veličina

$$\nabla_{\vec{n}-\vec{m}0} I_{\vec{n}-\vec{m}0} = \frac{i}{NN_z} \sum_{\vec{p}p_z} J_{\vec{p}p_z} \vec{p}\, e^{i\vec{p}(\vec{n}-\vec{m})a}$$

$$B_{\vec{n}0} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}a} B_{\vec{k}i\eta}$$

$$\vec{\xi}_{\vec{n}0} = \sum_{\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{N\omega(\vec{q}i\rho)}} \frac{\vec{q}+i\rho\vec{e}_z}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} e^{i\vec{q}\vec{n}a}\left(b_{\vec{q}i\rho} + b^+_{-\vec{q}i\rho}\right)$$

hamiltonijan interakcije površinskih magnona sa površinskim fononima dat je sa

$$H^{\Pi M-\Pi\Phi} = \frac{Si}{N^{1/2}N_z} \sum_{\vec{k},\vec{q},p_z} \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega(\vec{q}i\rho)}} \left(\frac{\vec{q}(\vec{k}+\vec{q})}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} J_{\vec{k}+\vec{q}\,p_z} - \right.$$

$$\left. - \frac{\vec{q}\cdot\vec{k}}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} J_{\vec{k}\,p_z} - \frac{|\vec{q}|^2}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} J_{\vec{q}\,p_z}\right)\left(b_{\vec{q}i\rho} + b^+_{-\vec{q}i\rho}\right) B^+_{\vec{k}+\vec{q}\,i\eta} B_{\vec{k}i\eta} .$$

Hamiltonijan interakcije površinskih magnona sa zapreminskim fononima u impulsnom prostoru, posle Furije-transformacije veličina

$$\nabla_{\vec{n}-\vec{m}0} I_{\vec{n}-\vec{m}0} = \frac{i}{NN_z} \sum_{\vec{p}p_z} J_{\vec{p}p_z} \vec{p}\, e^{i\vec{p}(\vec{n}-\vec{m})a},$$

$$B_{\vec{n}0} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}a} B_{\vec{k}i\eta}$$

$$\vec{\xi}_{\vec{n}0} = \sum_{\vec{q}q_z} \sqrt{\frac{\hbar}{NN_zM\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}e^{iq_za}\right|\omega(\vec{q}q_z)}} \frac{\vec{q}+q_z\vec{e}_z}{(q^2+q^2)} \frac{\lambda}{\lambda'_0} \sin q_za\, e^{i\vec{k}\vec{n}a}\left(b_{\vec{q}q_z} + b^+_{-\vec{q}q_z}\right)$$

ima oblik

$$H^{\Pi M-Z\Phi} = \frac{Si}{N^{1/2}N_z} \sum_{\vec{q}q_z,\vec{k},p_z} \sqrt{\frac{\hbar}{M\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}e^{iq_za}\right|\omega(\vec{q}q_z)}} \frac{\lambda}{\lambda'_0} \sin q_za \cdot$$

$$\cdot\left[\frac{\vec{q}(\vec{k}+\vec{q})}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}\, J_{\vec{k}+\vec{q}}\, p_z - \frac{\vec{k}\cdot\vec{q}}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}\, J_{\vec{k}}\, p_z - \frac{|\vec{q}|^2}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}\, J_{\vec{q}}\, p_z\right]\cdot$$

$$\cdot\left(b_{\vec{q}q_z} + b^{+}_{-\vec{q}q_z}\right) B^{+}_{\vec{k}+\vec{q}\,i\eta}\, B_{\vec{k}\,i\eta} \qquad (I.3.42)$$

Ukupni hamiltonijan interakcije površinskih magnona sa "gasom" površinskih i zapreminskih fonona ima sada oblik

$$H^{\Pi} = H^{\Pi M-\Pi\Phi} + H^{\Pi M-Z\Phi} \qquad (I.3.43)$$

Analizom izraza (I.3.41) i (I.3.42), medjutim, vidi se da je $H^{\Pi M-\Pi\Phi}$ veće od $H^{\Pi M-Z\Phi}$ najmanje za faktor 10^4, pa se $H^{\Pi M-Z\Phi}$ može zanemariti. Na taj se način ukupni hamiltonijan interakcije površinskih magnona sa "gasom" površinskih i zapreminskih fonona, može aproksimirati interakcijom površinskih magnona sa površinskim fononima, tj.

$$H^{\Pi} = H^{\Pi M-\Pi\Phi} \qquad (I.3.44)$$

Slično kao i u slučaju interakcije zapreminskih magnona sa zapreminskim fononima i ovde se razmatraju dva moguća procesa, gde se u jednom od njih apsorbuje, a u drugom emituje jedan fonon. Za proces u kojem se apsorbuje jedan površinski fonon, inicijalno, odnosno finalno stanje su oblika

$$\left.\begin{aligned} |i> &\equiv |0^{\Pi M}>|1^{\Pi M}_{\vec{k}\,i\eta}>|n_{\vec{q}\,i\rho}> \\ |f> &\equiv |1^{\Pi M}_{\vec{k}+\vec{q}\,i\eta}>|0^{\Pi M}>|n_{\vec{q}\,i\rho}-1> \end{aligned}\right\} \qquad (I.3.45)$$

Matrični element prelaza u ovom procesu, u aproksimaciji najbližih suseda i malih talasnih vektora, ima oblik

$$<H^{\Pi}>^{(A)}_{if} = -\frac{2SIa^2 i}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{\hbar}{MV_{\phi}(q^2+\rho^2)^{1/2}}}\left\{\frac{|\vec{q}|^2}{(q^2+\rho^2)^{1/2}}\left[\frac{1}{2}|\vec{q}|^2 + \vec{k}\vec{q}\right] + \right.$$

$$+ \frac{\vec{k}\cdot\vec{q}}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} \left[\frac{1}{2}|\vec{q}|^2 + \vec{k}\cdot\vec{q}\right]\Bigg\} \sqrt{n_{\vec{q}\,i\rho}} \tag{I.3.46}$$

Za proces u kojem se emituje jedan površinski fonon, inicijalno, odnosno finalno stanje su:

$$\left.\begin{aligned} |i\rangle &\equiv |0^{\Pi M}\rangle |1^{\Pi M}_{\vec{k}\,i\eta}\rangle |n^{\Pi\Phi}_{-\vec{q}\,i\rho}\rangle \\ |f\rangle &\equiv |1^{\Pi M}_{\vec{k}+\vec{q}\,i\eta}\rangle |0^{\Pi M}\rangle |n^{\Pi\Phi}_{-\vec{q}\,i\rho}+1\rangle \end{aligned}\right\} \tag{I.3.47}$$

Matrični element prelaza u ovom procesu, u aproksimaciji najbližih suseda i malih talasnih vektora dat je izrazom

$$\langle H^{\Pi}\rangle^{(E)}_{if} = \frac{2SIa^2 i}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar}{MV\phi(q^2+\rho^2)^{1/2}}} \left\{ \frac{|\vec{q}|^2}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} \left[\frac{1}{2}|\vec{k}|^2 + \vec{k}\vec{q}\right] + \right.$$

$$\left. + \frac{\vec{q}\cdot\vec{k}}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} \left[-|\vec{q}|^2 + \vec{k}\vec{q}\right]\right\} \sqrt{n_{-\vec{q}\,i\rho}} \tag{I.3.48}$$

Verovatnoće prelaza iz inicijalnog u finalno stanje za apsorpciju, odnosno emisiju jednog površinskog fonona date su sa

$$\left.\begin{aligned} W^{(A)}_{\Pi} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle H^{\Pi}\rangle^{(A)}_{if}|^2 \, \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i) \\ W^{(E)}_{\Pi} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle H^{\Pi}\rangle^{(E)}_{if}|^2 \, \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i) \end{aligned}\right\} \tag{I.3.49}$$

Za slučaj apsorpcije fonona $\left(W^{(A)}_{\Pi}\right)$ energije inicijalnog i finalnog stanja su oblika

$$\varepsilon_i = n_{\vec{q}\,i\rho}\, \omega(\vec{q}\,i\rho)\,\hbar + S\left[J_o - J_{\vec{k}\,i\eta}\right]$$

$$\varepsilon_f = (n_{\vec{q}\,i\rho} - 1)\,\omega(\vec{q}\,i\rho)\,\hbar + S\left[J_o - J_{\vec{k}+\vec{q}\,i\eta}\right]$$

U aproksimaciji malih talasnih vektora i najbližih suseda razlika energija $\varepsilon_f - \varepsilon_i$ ima oblik

$$\varepsilon_f - \varepsilon_i = \frac{\hbar^2}{2m^*}(q^2 + 2kq\ cos\phi) - V_\phi \hbar\sqrt{q^2+\rho^2} \qquad (I.3.50)$$

Za slučaj emisije površinskog fonona $(W_\Pi^{(E)})$ energije inicijalnog, odnosno finalnog stanja su respektivno

$$\varepsilon_i = n_{-\vec{q}\,i\rho}\,\omega(-\vec{q}\,i\rho)\,\hbar + S\left[J_o - J_{\vec{k}\,i\eta}\right]$$

$$\varepsilon_f = (n_{-\vec{q}\,i\rho}+1)\,\omega(-\vec{q}\,i\rho)\,\hbar + S\left[J_o - J_{\vec{k}+\vec{q}\,i\eta}\right]$$

Razlika energija, u istoj aproksimaciji kao i u slučaju apsorpcije, ima oblik

$$\varepsilon_f - \varepsilon_i = \frac{\hbar^2}{2m^*}(q^2 + 2kq\ cos\phi) + V_\phi \hbar\sqrt{q^2+\rho^2} \qquad (I.3.51)$$

gde su (k,ϕ_k) i (q,ϕ_q) polarne koordinate vektora $\vec{k}$, odnosno $\vec{q}$; $\phi = \phi_k - \phi_q$; V_ϕ brzina zvuka i m^* efektivna masa površinskog magnona koja data izrazom (I.3.32).

Vreme relaksacije za površinske magnone je

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\vec{q}} V_1 \cdot V_2 \quad , \qquad (I.3.52)$$

gde je $V_1 = W_\Pi^{(A)} + W_\Pi^{(E)}$; dok je veličina V_2, koja predstavlja odnos funkcija distribucije za slučaj kada trodimenzioni talasni vektor ima jednu konstantnu komponentu, u Debajevoj dugotalasnoj aproksimaciji data u obliku

$$V_2 = \frac{q\sqrt{q^2+\rho^2}}{k\sqrt{k^2+\eta^2}} \qquad (I.3.53)$$

Koristeći izraze (I.3.49) (I.3.50) (I.3.51) i (I.3.53), za vreme relaksacije površinskih magnona dobija se

$$\frac{1}{\tau_\Pi} = \frac{1}{\tau_\Pi^A} + \frac{1}{\tau_\Pi^E} \qquad (I.3.54)$$

gde je

$$\frac{1}{\tau_{\Pi}^{A}} = \sum_{\vec{q}} \frac{q\sqrt{q^2+\rho^2}}{k\sqrt{k^2+\eta^2}} W_{\Pi}^{(A)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}} \frac{q\sqrt{q^2+\rho^2}}{k\sqrt{k^2+\eta^2}} \left|<H^{\Pi}>_{if}^{(A)}\right|^2 \cdot$$

$$\cdot \frac{\delta\left\{\phi_q - \phi_k - \arccos \dfrac{2m^* V_\phi \sqrt{q^2+\rho^2} - \hbar q^2}{2\hbar kq}\right\}}{\left|\dfrac{\hbar}{m^*} kq \sqrt{1 - \left[\dfrac{2m^* V_\phi \sqrt{q^2+\rho^2} - \hbar q^2}{2\hbar kq}\right]^2}\right|} \tag{I.3.55}$$

i

$$\frac{1}{\tau_{\Pi}^{E}} = \sum_{\vec{q}} \frac{q\sqrt{q^2+\rho^2}}{k\sqrt{k^2+\eta^2}} W_{\Pi}^{(E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}} \frac{q\sqrt{q^2+\rho^2}}{k\sqrt{k^2+\eta^2}} \left|<H^{\Pi}>_{if}^{(E)}\right|^2 \cdot$$

$$\cdot \frac{\delta\left\{\phi_q - \phi_k - \arccos \left[- \dfrac{2m^* V_\phi \sqrt{q^2+\rho^2} + \hbar q^2}{2\hbar kq}\right]\right\}}{\left|\dfrac{\hbar}{m^*} kq \sqrt{1 - \left[\dfrac{2m^* V_\phi \sqrt{q^2+\rho^2} + \hbar q^2}{2\hbar kq}\right]^2}\right|} \tag{I.3.56}$$

Srednji slobodni put površinskog magnona izmedju dva sudara sa površinskim fononima, dat je izrazom

$$\overline{\frac{1}{\lambda_{\Pi}}} = \frac{1}{NN_z} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{V_M^{\Pi} \tau_{\Pi}} \tag{I.3.57}$$

gde je V_M^{Π} brzina površinskog magnona, data sa (I.3.38). Uzimajući u obzir (I.3.54), izraz za srednji slobodni put površinskog magnona izmedju dva sudara sa površinskim fononima, posle prelaska sa sume na intergral, postaje

$$\overline{\frac{1}{\lambda_{\Pi}}} = \frac{N_z a^{10} S^2 I^2 m^{*2}}{4\pi^4 M V_\phi \hbar^2} \left\{ \int_0^{\sqrt{2}\frac{m^* V_\phi}{\hbar}\left[1+\sqrt{1+2\left(\frac{\rho\hbar}{m^* V_\phi}\right)^2}\right]^{1/2}} dq \int_{\infty}^{\frac{m^* V_\phi}{\hbar}\sqrt{1+\frac{\rho^2}{q^2}-\frac{q^2}{2}}} F^{(A)}(q,k,\eta,\rho)\, dk + \right.$$

$$+ \int\limits_{\sqrt{2}\frac{m^*V_\phi}{\hbar}\left[1+\sqrt{1+2\left(\frac{\rho\hbar}{m^*V_\phi}\right)^2}\right]^{1/2}}^{\infty} dq \int\limits_{\frac{q}{2}-\frac{m^*V_\phi}{\hbar}\sqrt{1+\frac{\rho^2}{q^2}}}^{\infty} F^{(A)}(q,k,\eta,\rho)dk \; +$$

$$\left. + \int\limits_{y_{min}}^{\infty} dk \int\limits_{q_1(k)}^{q_2(k)} F^{(E)}(q,k,\eta,\rho)\, dq \right\} \qquad (I.3.58)$$

gde je

$$F^{(A)}(q,k,\eta,\rho) = \frac{kq^5}{\sqrt{k^2+\eta^2}\sqrt{q^2+\rho^2}} \left\{\frac{1}{4}k^2 + \frac{3}{2}kq\left[\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}-\hbar q^2}{2\hbar kq}\right] + \right.$$
$$+ \left(\frac{9}{4}q^2+k^2\right)\left[\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}-\hbar q^2}{2\hbar kq}\right]^2 + 3kq\left[\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}-\hbar q^2}{2\hbar kq}\right]^3 +$$
$$\left. + k^4\left[\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}-\hbar q^2}{2\hbar kq}\right]^4\right\}\left(e^{\frac{V_\phi\hbar\sqrt{q^2+\rho^2}}{\Theta}}-1\right)^{-1}\left[1-\left(\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}-\hbar q^2}{2\hbar kq}\right)^2\right]^{-1/2},$$

$$F^{(E)}(q,k,\eta,\rho) = \frac{kq^5}{\sqrt{k^2+\eta^2}\sqrt{q^2+\rho^2}} \left\{\frac{1}{4}k^2 - \frac{3}{2}kq\left[\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}+\hbar q^2}{2\hbar kq}\right] + \right.$$
$$+ \left(\frac{9}{4}q^2+k^2\right)\left[\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}+\hbar q^2}{2\hbar kq}\right]^2 - 3kq\left[\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}+\hbar q^2}{2\hbar kq}\right]^3 +$$
$$\left. + k^4\left[\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}+\hbar q^2}{2\hbar kq}\right]\right\}\left[\left(e^{\frac{V_\phi\hbar\sqrt{q^2+\rho^2}}{\Theta}}-1\right)^{-1}+1\right]\left[1-\left(\frac{2m^*V_\phi\sqrt{q^2+\rho^2}+\hbar q^2}{2\hbar kq}\right)^2\right]^{-1/2};$$

$$y_{min} = min\left\{\frac{m^*V_\phi}{\hbar}\sqrt{1+\frac{\rho^2}{q^2}}+\frac{1}{2}q\right\}$$

a $q_1(k)$ i $q_2(k)$ su koreni (koji imaju fizičkog smisla) jednačine

$$\frac{m^*V_\phi}{\hbar}\sqrt{1+\frac{\rho^2}{q^2}}+\frac{1}{2}q-k=0\,.$$

Granice integracije u integralu (I.3.58) odredjene su iz uslova

$$-1 \leqslant \frac{2m^* V_\phi \sqrt{q^2+\rho^2} - \hbar q^2}{2\hbar k q} \leqslant 1$$

za proces u kojem se apšorbuje i

$$-1 \leqslant -\frac{2m^* V_\phi \sqrt{q^2+\rho^2} + \hbar q^2}{2\hbar k q} \leqslant 1$$

za proces u kojem se emituje površinski fonon.

Analizirajući izraze za srednje slobodne puteve zapreminskog i površinskog magnona, dolazi se do zaključka da je srednji slobodni put površinskog magnona znatno veći od srednjeg slobodnog puta zapreminskog magnona. Može se, na osnovu ovog rezultata, pretpostaviti da se proces migracije magnona odvija tako što zapreminski spinski talas (naročito ako je izvor blizu površine) izlazi na površinu i posle se vraća u zapreminu. Kreće se, dakle, po površini. Putanje magnona, ili spinskih talasa, imaju, zbog toga, tendenciju približavanja površini feromagnetnog kristala. Ovo znači da u polubeskonačnim strukturama, usled prisustva granične površine koja stvara posebne granične uslove, spinski talasi nemaju karakter sfernih talasa (kao što je to slučaj u idealnoj strukturi), već su deformisani u smeru normalno na graničnu površinu. Ovo pokazuje da se dalji domeni migracije ne mogu tretirati istim metodima kao u idealnoj strukturi.

G L A V A II

TANKI MAGNETNI FILMOVI

2.1 *Harmonijska magnonska stanja u filmovima*

Posmatra se Hajzenbergov feromagnetik proste kubne strukture, koji ima idealnu translacionu simetriju u XOY ravni, a u pravcu z-ose ima konačnu debljinu. Debljina kristala je tolika da se jedinica ne sme zanemariti u odnosu na broj atoma N_z. U odnosu na polubeskonačni kristal, koji je razmatran u prvoj glavi, ovde postoje dve granične površine na kojima atomi (čvorovi) imaju promenjene magnetne momente u odnosu na zapreminske atome [5]. Promena integrala izmene za površinske atome u odnosu na integral izmene zapreminskih atoma se zanemaruje.

Polazeći od spinskog hamiltonijana idealnog Hajzenbergovog feromagnetika [5]

$$H = -\mu\mathcal{H} \sum_{\vec{n}n_z} S^{z}_{\vec{n}n_z} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} I_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} \, S_{\vec{n}n_z} S_{\vec{m}m_z} \tag{II.1.1}$$

lako se dobija da je spinski hamiltonijan u aproksimaciji najbližih suseda za tanak film oblika

$$\begin{aligned} H = &-(\mu-\mu')\mathcal{H} \sum_{\vec{n}} \left(S^{z}_{\vec{n}0} + S^{z}_{\vec{n}N_z}\right) - \mu\mathcal{H} \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} S^{z}_{\vec{n}n_z} - \\ &- \frac{1}{2} I \sum_{\vec{\nu},\vec{n}} \left(\vec{S}_{\vec{n}0}\vec{S}_{\vec{\nu}+\vec{n}0} + \vec{S}_{\vec{n}\,N_z}\vec{S}_{\vec{\nu}+\vec{n}\,N_z}\right) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}} \left(\vec{S}_{\vec{n}0}\vec{S}_{\vec{n}1} + \vec{S}_{\vec{n}N_z}\vec{S}_{\vec{n}\,N_z-1}\right) \\ &- \frac{1}{2} I \sum_{\vec{\nu},\vec{n}\,n_z=1}^{N_z-1} \vec{S}_{\vec{n}n_z}\vec{S}_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} - \frac{1}{2} I \sum_{\vec{n}\,n_z=1}^{N_z-1} \vec{S}_{\vec{n}n_z}\left(\vec{S}_{\vec{n}n_z+1} + \vec{S}_{\vec{n}n_z+1}\right) \end{aligned} \tag{II.1.2}$$

gde je μ magnetni moment atoma; H spoljašnje magnetno polje; $\vec{S}_{\vec{n}n_z}$ operator ukupnog spina na čvoru $(\vec{n}n_z)$; $S^z_{\vec{n}n_z}$ projekcija ukupnog spina na z-osu; I integral izmene u aproksimaciji najbližih suseda; μ' popravka za magnetni moment atoma (čvora) na površini filma; $\vec{\nu}$ vektor koji uzima vrednosti za najbliže susede i $\vec{n} \equiv (n_x,n_y)$.

Posle transformacija:

$$\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\left(S - S^z_{\vec{n}n_z+1}\right) = -\sum_{\vec{n}}\left(S - S^z_{\vec{n}1}\right) + \sum_{\vec{n}}\left(S - S^z_{\vec{n}N_z}\right) + \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\left(S - S^z_{\vec{n}n_z}\right)$$

$$\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\left(S - S^z_{\vec{n}n_z-1}\right) = \sum_{\vec{n}}\left(S - S^z_{\vec{n}0}\right) - \sum_{\vec{n}}\left(S - S^z_{\vec{n}N_z-1}\right) + \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\left(S - S^z_{\vec{n}n}\right)$$

$$\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} S^-_{\vec{n}n_z+1}S^+_{\vec{n}n_z} = -\sum_{\vec{n}} S^-_{\vec{n}1}S^+_{\vec{n}0} + \sum_{\vec{n}} S^-_{\vec{n}N_z}S^+_{\vec{n}N_z-1} + \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} S^-_{\vec{n}n_z}S^+_{\vec{n}n_z-1}$$

$$\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} S^-_{\vec{n}n_z-1}S^+_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{n}} S^-_{\vec{n}0}S^+_{\vec{n}1} - \sum_{\vec{n}} S^-_{\vec{n}N_z-1}S^+_{\vec{n}N_z} + \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} S^-_{\vec{n}n_z}S^+_{\vec{n}n_z+1}$$

i aproksimacija

$$\sum_{\vec{n}}\left(S - S^z_{\vec{\nu}+\vec{n}0}\right) \simeq \sum_{\vec{n}}\left(S - S^z_{\vec{n}0}\right); \quad \sum_{\vec{n}} S^-_{\vec{\nu}+\vec{n}0}S^+_{\vec{n}0} \simeq \sum_{\vec{n}} S^-_{\vec{n}0}S^+_{\vec{\nu}+\vec{n}0}$$

$$\sum_{\vec{n}}\left(S - S^z_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}\right) \simeq \sum_{\vec{n}}\left(S - S^z_{\vec{n}N_z}\right); \quad \sum_{\vec{n}} S^-_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}S^+_{\vec{n}N_z} \simeq \sum_{\vec{n}} S^-_{\vec{n}N_z}S^+_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}$$

$$\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\left(S - S^z_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}\right) \simeq \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\left(S - S^z_{\vec{n}n_z}\right); \quad \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} S^-_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}S^+_{\vec{n}n_z} \simeq \sum_{\vec{n}n_z=1} S^-_{\vec{n}n_z}S^+_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}$$

izraz (II.1.2) postaje

$$H = H_o + H_2 + H_4 \tag{II.1.3}$$

gde je

$$H_o = -2(\mu-\mu')HSN - \mu SHN(N_z-1) - S^2IN(3N_z+2) \tag{II.1.4}$$

$$H_2 = \left[(\mu-\mu')H+5SI\right]\sum_{\vec{n}}\left[(S-S_{\vec{n}0})+(S-S_{\vec{n}N_z})\right]+$$

$$+(\mu H+6SI)\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\left(S-S^z_{\vec{n}n_z}\right)-\frac{1}{2}I\sum_{\vec{\nu},\vec{n}}\left[S^-_{\vec{n}0}S^+_{\vec{\nu}+\vec{n}0}+S^-_{\vec{n}N_z}S^+_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}\right]-$$

$$-\frac{1}{2}I\sum_{\vec{\nu},\vec{n}}\left[S^-_{\vec{n}0}S^+_{\vec{n}1}+S^-_{\vec{n}N_z}S^+_{\vec{n}N_z-1}\right]-\frac{1}{2}I\sum_{\vec{\nu},\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}S^-_{\vec{n}n_z}S^+_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}-$$

$$-\frac{1}{2}I\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}S^-_{\vec{n}n_z}\left(S^+_{\vec{n}n_z+1}+S^+_{\vec{n}n_z-1}\right) \qquad \text{(II.1.5)}$$

$$H_4 = -\frac{1}{2}I\sum_{\vec{\nu},\vec{n}}\left[\left(S-S^z_{\vec{n}0}\right)\left(S-S^z_{\vec{\nu}+\vec{n}0}\right)+\left(S-S^z_{\vec{n}N_z}\right)\left(S-S^z_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}\right)\right]-$$

$$-\frac{1}{2}I\sum_{\vec{n}}\left[\left(S-S^z_{\vec{n}0}\right)\left(S-S^z_{\vec{n}1}\right)+\left(S-S^z_{\vec{n}N_z}\right)\left(S-S^z_{\vec{n}N_z-1}\right)\right]-$$

$$-\frac{1}{2}I\sum_{\vec{\nu},\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\left(S-S^z_{\vec{n}n_z}\right)\left(S-S^z_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}\right)-$$

$$-\frac{1}{2}I\sum_{\vec{n}n_z=1}\left(S-S^z_{\vec{n}n_z}\right)\left[\left(S-S^z_{\vec{n}n_z+1}\right)+\left(S-S^z_{\vec{n}n_z-1}\right)\right] \qquad \text{(II.1.6)}$$

$N = N_xN_y$; a S intenzitet spina.

Namera je da se ispitaju harmonijska magnonska stanja u filmu i zbog toga se uzima da je efektivni hamiltonijan sistema (II.1.3) u Blohovoj aproksimaciji

$$S-S^z_{\vec{n}n_z} = B^+_{\vec{n}n_z}B_{\vec{n}n_z}\,;\quad S^-_{\vec{n}n_z} = \sqrt{2S}\,B^+_{\vec{n}n_z}\,;\quad S^+_{\vec{n}n_z} = \sqrt{2S}\,B_{\vec{n}n_z} \qquad \text{(II.1.7)}$$

oblika

$$H_2 = \left[(\mu-\mu')H+5SI\right]\sum_{\vec{n}}\left(B^+_{\vec{n}0}B_{\vec{n}0}+B^+_{\vec{n}N_z}B_{\vec{n}N_z}\right)-$$

$$- SI \sum_{\vec{\nu},\vec{n}} \left(B^{+}_{\vec{n}0} B_{\vec{\nu}+\vec{n}0} + B^{+}_{\vec{n}N_z} B_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z} \right) - SI \sum_{\vec{n}} \left(B^{+}_{\vec{n}0} B_{\vec{n}1} + B^{+}_{\vec{n}N_z} B_{\vec{n}N_z-1} \right) +$$

$$+ (\mu H + 6SI) \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} B^{+}_{\vec{n}n_z} B_{\vec{n}n_z} - SI \sum_{\vec{\nu},\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} B^{+}_{\vec{n}n_z} B_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} -$$

$$- SI \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} B^{+}_{\vec{n}n_z} \left(B_{\vec{n}n_z+1} + B_{\vec{n}n_z-1} \right) \qquad \text{(II.1.8)}$$

gde su $B_{\vec{n}n_z}$ Boze operatori.

Hamiltonijan (II.1.8) dijagonalizuje se kanoničnom transformacijom

$$B_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{k}k_z} U^{\vec{k}k_z}_{\vec{n}n_z} e^{-i \frac{E(\vec{k}k_z)}{\hbar} t} B_{\vec{k}k_z} \qquad \text{(II.1.9)}$$

gde je $\vec{k} \equiv (k_x, k_y)$. Funkcije $U^{\vec{k}k_z}_{\vec{n}n_z}$ odredjuju se iz uslova da sistem Hajzenbergovih jednačina kretanja bude zadovoljen, tj.

$$i\dot{B}_{\vec{n}n_z} = \left[B_{\vec{n}n_z}, H_2 \right] \qquad \text{(II.1.10)}$$

Eksplicitno napisane jednačine kretanja (II.1.10) u slučaju tankog feromagnetnog filma imaju oblik

za $n_z \in [1, N_z-1]$

$$i\dot{B}_{\vec{n}n_z} = [\mu H + 6SI] B_{\vec{n}n_z} - SI \sum_{\vec{\nu}} B_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} - SI \left(B_{\vec{n}n_z+1} + B_{\vec{n}n_z-1} \right)$$

za $n_z = 0$

$$i\dot{B}_{\vec{n}0} = [\mu H + 6SI] B_{\vec{n}0} - SI \sum_{\vec{\nu}} B_{\vec{\nu}+\vec{n}0} - SI \left(B_{\vec{n}1} + B_{\vec{n}\,-1} \right) -$$

$$- SI \left(B_{\vec{n}0} - B_{\vec{n}\,-1} \right) - \mu' H B_{\vec{n}0}$$

za $n_z = N_z$

$$i\dot{B}_{\vec{n}N_z} = [\mu H + 6SI] B_{\vec{n}N_z} - SI \sum_{\vec{\nu}} B_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z} - SI \left(B_{\vec{n}N_z-1} + B_{\vec{n}N_z+1} \right) -$$

$$- SI\left(B_{\vec{n}N_z} - B_{\vec{n}N_z+1}\right) - \mu' H B_{\vec{n}N_z} \qquad (II.1.11)$$

Posle prelaska u impulsni prostor transformacijom (II.1.9), sistem jednačina (II.1.11) prelazi u sistem diferencnih jednačina po nepoznatim funkcijama $U_{\vec{n}n_z}^{\vec{k}k_z}$, tj.

za $n_z \in [1, N_z-1]$

$$[E(\vec{k}k_z) - \mu H - 6SI]\,U_{\vec{n}n_z}^{\vec{k}k_z} + SI\sum_{\vec{\nu}} U_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}^{\vec{k}k_z} + SI\left(U_{\vec{n}n_z+1}^{\vec{k}k_z} + U_{\vec{n}n_z-1}^{\vec{k}k_z}\right) = 0;$$

za $n_z = 0$

$$[E(\vec{k}k_z) - \mu H - 6SI]\,U_{\vec{n}0}^{\vec{k}k_z} + SI\sum_{\vec{\nu}} U_{\vec{\nu}+\vec{n}0}^{\vec{k}k_z} + SI\left(U_{\vec{n}\,1}^{\vec{k}k_z} + U_{\vec{n}\,-1}^{\vec{k}k_z}\right) =$$

$$= -(\mu' H + SI)\,U_{\vec{n}0}^{\vec{k}k_z} + SI\,U_{\vec{n}\,-1}^{\vec{k}k_z}$$

i za $n_z = N_z$

$$[E(\vec{k}k_z) - \mu H - 6SI]\,U_{\vec{n}N_z}^{\vec{k}k_z} + SI\sum_{\vec{\nu}} U_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}^{\vec{k}k_z} + SI\left(U_{\vec{n}N_z+1}^{\vec{k}k_z} + U_{\vec{n}N_z-1}^{\vec{k}k_z}\right) =$$

$$= -(\mu' H + SI)\,U_{\vec{n}N_z}^{\vec{k}k_z} + SI\,U_{\vec{n}N_z}^{\vec{k}k_z} \qquad (II.1.12)$$

Ovaj sistem diferencnih jednačina dopušta dva tipa rešenja za funkcije $U_{\vec{n}n_z}^{\vec{k}k_z}$. Rešenje prvog tipa ima oblik

$$U_{\vec{n}n_z}^{\vec{k}k_o} = A_{\vec{k}k_o}\, e^{-i\vec{k}\vec{n}a} \cos n_z k_o a \qquad (II.1.13)$$

pod uslovom da važi zakon disperzije oblika

$$E(\vec{k}k_o) = \mu H + 2SI(3 - \cos k_x a - \cos k_y a - \cos k_o a) \qquad (II.1.14)$$

pri čemu se vrednost k_o odredjuje iz jednačine

$$\cos k_o a = 1 + \frac{\mu' H}{SI} \qquad (II.1.15)$$

S obzirom da je k_o realno, iz izraza (II.1.15) zaključuje se

---

*) Kako se rezultat (II.1.15) dobija uz zahtev $\sin k_o a \neq 0$, ovaj prilaz ne važi za dva i tri sloja, jer protivureči graničnom uslovu $\sin N_z k_o a = 0$. U slučaju tri sloja nema protivurečnosti samo ako je $\frac{\mu' H}{SI} = -1$. Ovaj prilaz, prema tome, važi bez ikakvih dopunskih uslova samo za četiri i više slojeva.

da μ' mora biti negativno, tj. rešenje tipa (II.1.13) moguće je u sistemima u kojima je $\mu' < 0$. Konačno, kanonična transformacija, koja ovom tipu rešenja odgovara i koja dijagonalizuje hamiltonijan (II.1.8), ima oblik

$$B_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{2}{N(N_z+2)}}\, e^{-i\vec{k}\vec{n}a} \cos n_z k_o a \, B_{\vec{k}k_z} \qquad \text{(II.1.16)}$$

pri čemu je

$$H = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}k_o) B^{+}_{\vec{k}k_o} B_{\vec{k}k_o} \qquad \text{(II.1.17)}$$

Drugi tip rešenja sistema diferencnih jednačina (II.1.12) ima oblik

$$U^{\vec{k}\,i\eta}_{\vec{n}n} = C_{\vec{k}\,i\eta}\left[e^{-\eta n_z a} + e^{-\eta(N_z-n_z)a}\right] e^{-i\vec{k}\vec{n}a}; \quad \eta > 0 \qquad \text{(II.1.18)}$$

pod uslovom da važi zakon disperzije oblika

$$E(\vec{k}\,i\eta) = \mu H + 2SI(3 - \cos k_x a - \cos_y k\, a - ch\,\eta\, a) \qquad \text{(II.1.19)}$$

pri čemu se vrednost za η odredjuje iz uslova

$$1 + \frac{\mu' H}{SI} = \frac{e^{\eta a} + e^{-\eta(N_z+1)a}}{1 + e^{-\eta N_z a}} \simeq e^{|\eta| a} \qquad \text{(II.1.20)}$$

S obzirom na uslov (II.1.20), rešenje ovog tipa je moguće samo ako je $\mu' > 0$.

Za razliku od polubeskonačnog kristala u filmu veličina η može biti i pozitivna i negativna, pri čemu su u oba slučaja ($\eta > 0$ i $\eta < 0$) ekscitacije lokalizovane oko graničnih površina i fizički potpuno ekvivalentne. Znak večine η uvek se može menjati promenom vrednosti konstante normiranja $C_{\vec{k}\,i\eta}$. Ceo je dalji račun izveden za izabranu vrednost $C_{\vec{k}\,i\eta}$ takvu da bude $\eta > 0$. Za slučaj $\eta < 0$ konstanta normiranja treba da se pomnoži faktorom $e^{-N_z|\eta|a}$. Razlog zbog kojeg je izabrano $\eta > 0$

je taj što se ovo rešenje u slučaju $N_z \to \infty$ svodi na odogovarajuće rešenje za polubeskonačni kristal, kao granični slučaj.

Konačno, kanonična transformacija koja odgovara ovom tipu rešenja i koja dijagonalizuje hamiltonijan (II.1.8) ima oblik

$$\mathcal{B}_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{e^{2\eta a} - 1}{2N}} \left[e^{-\eta n_z a} + e^{-\eta(N_z - n_z)a} \right] e^{-i\vec{k}\vec{n}a} \mathcal{B}_{\vec{k}i\eta} \qquad \text{(II.1.21)}$$

pri čemu je

$$H = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}\,i\eta)\, \mathcal{B}^{+}_{\vec{k}i\eta}\, \mathcal{B}_{\vec{k}i\eta} \qquad \text{(II.1.22)}$$

Elementarne ekscitacije koje se opisuju funkcijama (II.1.16) nazivaju se zapreminskim magnonskim stanjima, zbog toga što je koncentracija ovakvih stanja periodična funkcija po čitavom kristalu (filmu). Elementarne ekscitacije koje se opisuju funkcijama (II.1.21) nazivaju se površinskim magnonskim stanjima, zbog toga što je koncentracija ovakvih stanja maksimalna na površini filma ($n_z = 0$ i $n_z = N_z$), i sa porastom dubine ona opada eksponencijalno.

Karakteristično je da se ova dva tipa stanja uzajamno isključuju, za razliku od sličnih stanja u polubeskonačnom feromagnetiku. U filmu, naime, mogu da postoje ili samo zapreminska magnonska stanja ($\mu' < 0$) ili samo površinska magnonska stanja ($\mu' > 0$).

2.2 *Anharmonijski efekti u filmovima*

Anharmonijska analiza u tankim filmovima biće izvršena metodom Grinovih funkcija. Sistem spinskih Grinovih funkcija za tanak feromagnetni film može se napisati na sledeći način

za $n_z \in [1, N_z - 1]$

$$E \ll S^+_{\vec{n}n_z} | S^-_{\vec{g}n_z} \gg = \frac{i}{2\pi} \langle [S^+_{\vec{n}n_z}, S^-_{\vec{g}n_z}] \rangle + \ll [S^+_{\vec{n}n_z}, H] | S^-_{\vec{g}n_z} \gg$$

za $n_z = 0$

$$E \ll S^+_{\vec{n}0} | S^-_{\vec{g}0} \gg = \frac{i}{2\pi} \langle [S^+_{\vec{n}0}, S^-_{\vec{g}0}] \rangle + \ll [S^+_{\vec{n}0}, H] | S^-_{\vec{g}0} \gg \qquad \text{(II.2.1)}$$

za $n_z = N_z$

$$E \ll S^+_{\vec{n}N_z} | S^-_{\vec{g}N_z} \gg = \frac{i}{2\pi} \langle [S^+_{\vec{n}N_z}, S^-_{\vec{g}N_z}] \rangle + \ll [S^+_{\vec{n}N_z}, H] | S^-_{\vec{g}N_z} \gg$$

Dalja analiza ovog sistema spinskih Grinovih funkcija biće izvršena u kvazi-Paulionskoj slici, zbog bolje kontrole fizičkih procesa koji se ovde javljaju [7]. Spinski operatori izraženi preko kvazi-Pauli operatora imaju oblik [3]:

$$\left.\begin{aligned} S^+_{\vec{n}n_z} &= \sum_{f=1}^{2S} [f(2S+1-f)]^{1/2} P^+_{f-1\,\vec{n}n_z} P_{f\,\vec{n}n_z} \\ S_{\vec{n}n_z} &= S - \sum_{f=1}^{2S} f P^+_{f\,\vec{n}n_z} P_{f\,\vec{n}n_z} ; \; P_{0\,\vec{n}n_z} = P^+_{0\,\vec{n}n_z} = 1 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(II.2.2)}$$

pri čemu kvazi-Pauli operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije [8]:

$$\left.\begin{aligned} \left[P_{f\,\vec{n}n_z}, P^+_{\nu\,\vec{g}g_z}\right] &= \delta_{\vec{n},\vec{g}}\delta_{n_z,g_z}\Big[\delta_{f,\nu}\Big(1 - \sum_{\rho=1}^{2S} P^+_{\rho\,\vec{n}n_z} P_{\rho\,\vec{n}n_z}\Big) - \\ &\quad - P^+_{\nu\,\vec{n}n_z} P_{f\,\vec{n}n_z}\Big] \\ \left[P_{f\,\vec{n}n_z}, P_{\nu\,\vec{g}g_z}\right] &= \left[P^+_{f\,\vec{n}n_z}, P^+_{\nu\,\vec{n}n_z}\right] = 0 \\ P_{f\,\vec{n}n_z} P_{\nu\,\vec{n}n_z} &= P^+_{f\,\vec{n}n_z} P^+_{\nu\,\vec{n}n_z} = 0 \\ P_{f\,\vec{n}n_z} P^+_{\nu\,\vec{n}n_z} &= 0 \quad \text{za} \quad f \neq \nu \end{aligned}\right\} \qquad \text{(II.2.3)}$$

Analiza problema će biti izvršena prvo na niskim temperaturama. Kako su kvanti toplotne energije $k_Б T$ na niskim temperaturama mali, dominantan proces pobudjivanja je $S \longrightarrow S-1$, dok se deekscitacija sistema, s obzirom na mogućnosti virtuelnih procesa, vrši preko svih nivoa, tj. $S-1 \rightarrow S$, $S-2 \rightarrow S$, ... , $0 \rightarrow S$, ... , $-S \rightarrow S$. Uzimajući u obzir ovu aproksimaciju, sistem Grinovih funkcija (II.2.1) postaje

$$\left.\begin{aligned}
&\text{za } n_z \in [1, N_z - 1] \\
&E \langle\langle P_{1\vec{n}n_z} | P^+_{1\vec{g}n_z} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{g}} \left\langle \left[P_{1\vec{n}n_z}, P^+_{1\vec{n}n_z} \right] \right\rangle + \langle\langle \Omega_{\vec{n}n_z} | P^+_{1\vec{g}n_z} \rangle\rangle \\
&\text{za } n_z = 0 \\
&E \langle\langle P_{1\vec{n}0} | P^+_{1\vec{g}0} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{g}} \left\langle \left[P_{1\vec{n}0}, P^+_{1\vec{n}0} \right] \right\rangle + \langle\langle \Omega_{\vec{n}0} | P^+_{1\vec{g}0} \rangle\rangle \\
&\text{za } n_z = N_z \\
&E \langle\langle P_{1\vec{n}N_z} | P_{1\vec{g}N_z} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{g}} \left\langle \left[P_{1\vec{n}N_z}, P^+_{1\vec{n}N_z} \right] \right\rangle + \langle\langle \Omega_{\vec{n}N_z} | P^+_{1\vec{g}N_z} \rangle\rangle
\end{aligned}\right\} \tag{II.2.4}$$

gde je

$$\begin{aligned}
\Omega_{\vec{n}n_z} \equiv \left[S^+_{\vec{n}n_z}, H \right] = \sqrt{2S} \Bigg\{ & \left(\mu H + 6SI \right) P_{1\vec{n}n_z} - SI \sum_{\vec{\nu}} P_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}n_z} - \\
& - SI \left(P_{1\vec{n}n_z+1} + P_{1\vec{n}n_z-1} \right) + I \left(P^+_{1\vec{n}n_z} P_{1\vec{n}n_z} P_{1\vec{n}n_z-1} + \right. \\
& \left. + P^+_{1\vec{n}n_z} P_{1\vec{n}n_z} P_{1\vec{n}n_z+1} \right) + I \sum_{\vec{\nu}} \left(P^+_{1\vec{n}n_z} P_{1\vec{n}n_z} P_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}n_z} - \right. \\
& \left. - P^+_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}n_z} P_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}n_z} P_{1\vec{n}n_z} \right) - I \left(P^+_{1\vec{n}n_z+1} P_{1\vec{n}n_z+1} P_{1\vec{n}n_z} + \right. \\
& \left. + P^+_{1\vec{n}n_z+1} P_{1\vec{n}n_z+1} P_{1\vec{n}n_z} \right) \Bigg\}
\end{aligned} \tag{II.2.5}$$

$$\begin{aligned}
\Omega_{\vec{n}0} \equiv \left[S^+_{\vec{n}0}, H \right] = \sqrt{2S} \Bigg\{ & \left[(\mu - \mu') H + 5SI \right] P_{1\vec{n}0} - \\
& - SI \sum_{\vec{\nu}} P_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}0} - SI\, P_{1\vec{n}1} + I \sum_{\vec{\nu}} \left(P^+_{1\vec{n}0} P_{1\vec{n}0} P_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}0} - \right.
\end{aligned}$$

$$- P^+_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}0} P_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}0} P_{1\,\vec{n}0}\Big] + I\Big(P^+_{1\,\vec{n}0} P_{1\,\vec{n}0} P_{1\,\vec{n}1} - P^+_{1\,\vec{n}1} P_{1\,\vec{n}1} P_{1\,\vec{n}0}\Big)\Big\} \tag{II.2.6}$$

i

$$\Omega_{\vec{n}N_z} \equiv \Big[S^+_{\vec{n}N_z}, H\Big] = \sqrt{2S}\,\Big\{\Big[(\mu-\mu')H+5SI\Big]P_{1\,\vec{n}N_z} - SI\sum_{\vec{\nu}} P_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}N_z} -$$

$$- SI\,P_{1\,\vec{n}N_z-1} + I\sum_{\vec{\nu}}\Big(P^+_{1\,\vec{n}N_z} P_{1\,\vec{n}N_z} P_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}N_z} - P^+_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}N_z} P_{1\,\vec{\nu}+\vec{n}N_z} P_{1\,\vec{n}N_z}\Big) +$$

$$+ I\Big(P^+_{1\,\vec{n}N_z} P_{1\,\vec{n}N_z} P_{1\,\vec{n}N_z-1} - P^+_{1\,\vec{n}N_z-1} P_{1\,\vec{n}N_z-1} P_{1\,\vec{n}N_z}\Big)\Big\} \tag{II.2.7}$$

Ostale Grinove funkcije, koje odgovaraju procesima ekscitiranja $S \rightarrow S-2$, $S \rightarrow S-3$, itd., tj. Grinove funkcije

$$\langle\langle P^+_{f-1\,\vec{n}n_z} P_{f\,\vec{n}n_z} \,|\, P^+_{1\,\vec{g}n_z}\rangle\rangle \quad \text{za} \quad f > 1$$

jednake su nuli u nultoj aproksimaciji, jer su im korelatori jednaki nuli.

Posle Furije-transformacije veličina

$$\left.\begin{aligned} P_{1\,\vec{n}n_z} &= \sqrt{\frac{2}{N(N_z+2)}}\sum_{\vec{k}} P_{1\,\vec{k}k_o}\, e^{i\vec{k}\vec{n}a} \cos n_z k_o a \\ \Omega_{\vec{n}n_z} &= \sqrt{\frac{2}{N(N_z+2)}}\sum_{\vec{k}} \Omega_{\vec{k}k_o}\, e^{i\vec{k}\vec{n}a} \cos n_z k_o a \end{aligned}\right\} \tag{II.2.8}$$

sistem jednačina (II.2.4) postaje

za $n_z \in [1, N_z-1]$

$$E\langle\langle P_{1\,\vec{k}k_o} \,|\, P^+_{1\,\vec{k}k_o}\rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\Big\langle\Big[P_{1\,\vec{q}k_o}, P^+_{1\,\vec{q}k_o}\Big]\Big\rangle + \langle\langle\Omega^{(1)}_{\vec{k}k_o} \,|\, P^+_{1\,\vec{k}k_o}\rangle\rangle \tag{II.2.9}$$

za $n_z = 0$ i N_z

$$E\langle\langle P_{1\,\vec{k}k_o} \,|\, P^+_{1\,\vec{k}k_o}\rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\Big\langle\Big[P_{1\,\vec{q}k_o}, P^+_{1\,\vec{q}k_o}\Big]\Big\rangle + \langle\langle\Omega^{(2)}_{\vec{k}k_o} \,|\, P^+_{1\,\vec{k}k_o}\rangle\rangle \tag{II.2.10}$$

gde je

$$\Omega^{(1)}_{\vec{k}k_o} = E^{(0)}(\vec{k}k_o)P_{1\,\vec{k}k_o} + A^{(1)}(k_o,N_z,N)\sum_{\vec{q}\vec{q}_1} P^+_{1\,\vec{q}k_o}P_{1\,\vec{q}_1k_o}P_{1\,\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}_1\,k_o} +$$

$$+ B^{(1)}(N_z,N)\sum_{\vec{q}\vec{q}_1}\left(J_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}_1} - J_{\vec{q}_1-\vec{q}}\right)P^+_{1\,\vec{q}k_o}P_{1\,\vec{q}_1k_o}P_{1\,\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}_1\,k_o} \qquad (II.2.11)$$

i

$$\Omega^{(2)}_{\vec{k}k_o} = E^{(0)}(\vec{k}k_o)P_{1\,\vec{k}k_o} + A^{(2)}(k_o,N_z,N)\sum_{\vec{q}\vec{q}_1} P^+_{1\,\vec{q}k_o}P_{1\,\vec{q}_1k_o}P_{1\,\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}_1\,k_o} +$$

$$+ B^{(2)}(N_z,N)\sum_{\vec{q}\vec{q}_1}\left(J_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}_1} - J_{\vec{q}_1-\vec{q}}\right)P^+_{1\,\vec{q}k_o}P_{1\,\vec{q}_1k_o}P_{1\,\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}_1\,k_o} \qquad (II.2.12)$$

$$E^{(0)}(\vec{k}k_o) = \mu H + 6SI - 2SI\cos k_oa - SJ_{\vec{k}} \qquad (II.2.13)$$

$$A^{(1)}(k_o,N_z,N) = \frac{2I}{N(N_z+2)^2}\left\{(N_z+1)\left[\frac{3}{2}\cos k_oa - \frac{1}{2}(2+\cos 2k_oa)\right] + \frac{5}{2}\cos k_oa - \right.$$

$$\left. - \frac{3}{2}\cos 2k_oa - 1\right\} \qquad (II.2.14)$$

$$B^{(1)}(N_z,N) = \frac{1}{2N(N_z+2)^2}\left[3(N_z+1) + 5\right] \qquad (II.2.15)$$

$$A^{(2)}(k_o,N_z,N) = \frac{2I\cos k_oa}{N(N_z+2)}(1 - \cos k_oa) \qquad (II.2.16)$$

$$B^{(2)}(N_z,N) = \frac{2}{N(N_z+2)} \qquad (II.2.17)$$

pri čemu je, ako se napiše u aproksimaciji najbližih suseda,

$$J_{\vec{k}} = 4I(\cos k_xa + \cos k_ya)\,.$$

Dalja se analiza vrši pomoću egzaktne bozonske reprezentacije kvazi-Pauli operatora [8]

$$\left.\begin{aligned} P_{f\,\vec{n}n_z} &= \left[1 - \sum_{f'\neq 0,f}^{2S} \hat{Z}_{f'\,\vec{n}n_z}\right]\hat{Y}^{1/2}_{f\,\vec{n}n_z}\,B_{f\,\vec{n}n_z} \\ P_{f\,\vec{n}n_z}P_{f\,\vec{n}n_z} &= \left[1 - \sum_{f'\neq 0,f}^{2S}\hat{Z}_{f'\vec{n}n_z}\right]\hat{Z}_{f\,\vec{n}n_z}\end{aligned}\right\} \qquad (II.2.18)$$

gde je

$$\hat{Z}_{f\vec{n}n_z} = \sum_{\rho=0}^{\infty} \frac{(-2)^\rho}{(1+\rho)!} B^{+\,\rho+1}_{f\vec{n}n_z} B^{\rho+1}_{f\vec{n}n_z}$$

$$\hat{Y}_{f\vec{n}n_z} = \sum_{\rho=0}^{\infty} \frac{(-2)^\rho}{(1+\rho)!} B^{+\,\rho}_{f\vec{n}n_z} B^{\rho}_{f\vec{n}n_z}$$

pri čemu se koristi aproksimacija

$$P_{1\vec{n}n_z} \simeq B_{1\vec{n}n_z} - B^+_{1\vec{n}n_z} B_{1\vec{n}n_z} B_{1\vec{n}n_z} \qquad \text{(II.2.19)}$$

Posle Furije-transformacije veličina

$$B_{1\vec{n}n_z} = \sqrt{\frac{2}{N(N_z+2)}} \sum_{\vec{k}} B_{1\vec{k}k_o} e^{i\vec{k}\vec{n}a} \cos n_z k_o a$$

i sumiranja po n_z relacija (II.2.19) postaje

$$P_{1\vec{k}k_o} = B_{1\vec{k}k_o} - \frac{\alpha(N_z)}{N} \sum_{\vec{q}\vec{q}_1} B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}_1k_o} B_{1\,\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}_1\,k_o} \qquad \text{(II.2.20)}$$

gde je

$$\alpha(N_z) = \frac{1}{2(N_z+2)^2}\left[3(N_z+1)+5\right] .$$

Koristeći izraz (II.2.20), Vikovu teoremu za Boze operatore i aproksimaciju

$$\left[1 - \frac{4\alpha(N_z)}{N} \sum_{\vec{q}} \langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o\right]^{-1} \simeq 1 + \frac{4\alpha(N_z)}{N} \sum_{\vec{q}} \langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o$$

sistem Grinovih funkcija (II.2.9) i (II.2.10) postaje

za $n_z \in |1, N_z-1|$

$$\Big\{E(\vec{k}k_o) - E^{(0)}(\vec{k}k_o) - 2\left[1-\alpha(N_z)\right]A^{(1)}(k_o,N_z,N)\sum_{\vec{q}}\langle B_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o -$$

$$- B^{(1)}(N_z,N)\sum_{\vec{q}}\left(J_{\vec{k}} + J_{\vec{q}} - J_o - J_{\vec{k}-\vec{q}}\right)\langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o\Big\} \langle\langle B_{1\vec{k}k_o} | B^+_{1\vec{k}k_o}\rangle\rangle$$

$$= \frac{i}{2\pi}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\langle\left[P_{1\vec{q}k_o}, P^+_{1\vec{q}k_o}\right]\rangle\left[1 + \frac{4\alpha(N_z)}{N}\sum_{\vec{q}}\langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o\right] \qquad \text{(II.2.21)}$$

za $n_z = 0$ i N_z

$$\Big\{E(\vec{k}k_o) - E^{(0)}(\vec{k}k_o) - 2\left[1-\alpha(N_z)\right]A^{(2)}(k_o,N_z,N)\sum_{\vec{q}}\langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o - B^{(2)}(N,N_z)\sum_{\vec{q}}\Big(J_{\vec{k}} + J_{\vec{q}} - J_o - J_{\vec{q}-\vec{k}}\Big)\langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o\Big\}\langle\langle B_{1\vec{k}k_o}|B^+_{1\vec{k}k_o}\rangle\rangle =$$

$$= \frac{i}{2\pi}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\left\langle\left[P_{1\vec{q}k_o}, P^+_{1\vec{q}k_o}\right]\right\rangle\left[1 + \frac{4\alpha(N_z)}{N}\sum_{\vec{q}}\langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o\right] \qquad \text{(II.2.22)}$$

gde je $J_o = 4I$ i $\langle\cdots\rangle_o$ srednja statistička vrednost po nultom hamiltonijanu (II.1.8).

Zakoni disperzije (pol Grinove funkcije) za magnone neposredno slede iz jednačina (II.2.21) i (II.2.22), tj.

za $n_z \in [1, N_z-1]$

$$E_1(\vec{k}k_o) = E^{(0)}(\vec{k}k_o) + 2\left[1-\alpha(N_z)\right]A^{(1)}(k_o,N_z,N)\sum_{\vec{q}}\langle B^+_{1qk_o} B_{1qk_o}\rangle_o +$$

$$+ B^{(1)}(N_z,N)\sum_{\vec{q}}\Big(J_{\vec{k}} + J_{\vec{q}} - J_o - J_{\vec{q}-\vec{k}}\Big)\langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o \qquad \text{(II.2.23)}$$

za $n_z = 0$ i N_z

$$E_1(\vec{k}k_o) = E^{(0)}(\vec{k}k_o) + 2\left[1-\alpha(N_z)\right]A^{(2)}(k_o,N_z,N)\sum_{\vec{q}}\langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o +$$

$$+ B^{(2)}(N_z,N)\sum_{\vec{q}}\Big(J_{\vec{k}} + J_{\vec{q}} - J_o - J_{\vec{q}-\vec{k}}\Big)\langle B^+_{1\vec{q}k_o} B_{1\vec{q}k_o}\rangle_o \qquad \text{(II.2.24)}$$

odakle se vidi da atomi (spinovi) koji se nalaze na površini i atomi (spinovi) koji se nalaze u unutrašnjosti kristala nemaju isti zakon disperzije.

Da bi se našao zakon disperzije za magnone na visokim temperaturama polazi se od sistema spinskih Grinovih funkcija (II.2.1), ali sa razlikom što su ovde, za razliku od slučaja niskih temperatura, očigledno, podjednako verovatni svi procesi pobudjivanja, tj. $S \to S-1$, $S \to S-2$, itd. [7]. Deekscitacija se vrši, kao i u slučaju niskih temperatura, preko svih nivoa. S obzirom na ovakvu fizičku situaciju, na desnoj strani Grinove funkcije treba stavljati operatore

$$P^+_{1\,\vec{n}n_z},\ P^+_{2\,\vec{n}n_z}\, P_{1\,\vec{n}n_z},\ \dots\ ,\ P^+_{2S\,\vec{n}n_z}\, P_{2S-1\,\vec{n}n_z}$$

sa leve strane, medjutim, treba da stoji operator

$$S^+_{\vec{n}n_z} = \sum_{f=1}^{2S} a_f P^+_{f-1\,\vec{n}n_z}\, P_{f\,\vec{n}n_z}\ ;\quad a_f = \left[f(2S+1-f)\right]^{1/2}$$

Uzevši sve ovo u obzir, sistem kvazi-Paulionskih Grinovih funkcija ima oblik

za $f=1$ i $n_z \in [1, N_z-1]$

$$E \langle\langle S^+_{\vec{n}n_z} | P^+_{1\,\vec{g}n_z} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\, \delta_{\vec{n},\vec{g}} \left\langle \left[S^+_{\vec{n}n_z}, P^+_{1\,\vec{n}n_z} \right] \right\rangle + \langle\langle \Omega_{\vec{n}n_z} | P^+_{1\,\vec{g}n_z} \rangle\rangle$$

za $n_z = 0$

$$E \langle\langle S^+_{\vec{n}0} | P^+_{1\,\vec{g}0} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\, \delta_{\vec{n},\vec{g}} \left\langle \left[S^+_{\vec{n}0},\ P^+_{1\,\vec{n}0} \right] \right\rangle + \langle\langle \Omega_{\vec{n}0} | P^+_{1\,\vec{g}0} \rangle\rangle$$

za $n_z = N_z$

$$E \langle\langle S^+_{\vec{n}N_z} | P^+_{1\,\vec{g}N_z} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\, \delta_{\vec{n},\vec{g}} \left\langle \left[S^+_{\vec{n}N_z}, P^+_{1\,\vec{n}N_z} \right] \right\rangle + \langle\langle \Omega_{\vec{n}N_z} | P^+_{1\,\vec{g}N_z} \rangle\rangle \tag{II.2.25}$$

za $f=2,3,\dots,2S$ i $n_z \in [1,\ {}_z-1]$

$$E \langle\langle S^+_{\vec{n}n_z} | P^+_{f\,\vec{g}n_z}\, P_{f-1\,\vec{g}n_z} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\, \delta_{\vec{n},\vec{g}} \left\langle \left[S^+_{\vec{n}n_z}, P^+_{f\,\vec{n}n_z}\, P_{f-1\,\vec{n}n_z} \right] \right\rangle +$$

$$+ \langle\langle \Omega_{\vec{n}n_z} | P^+_{f\,\vec{g}n_z}\, P_{f-1\,\vec{g}n_z} \rangle\rangle\ ,$$

za $n_z = 0$

$$E \ll S^{+}_{\vec{n}0} | P^{+}_{f\,\vec{g}0}\, P_{f-1\,\vec{g}0} \gg = \frac{i}{2\pi}\, \delta_{\vec{n},\vec{g}} < \left[S^{+}_{\vec{n}0}, P^{+}_{f\,\vec{n}0}\, P_{f-1\,\vec{n}0} \right] > +$$

$$+ \ll \Omega_{\vec{n}0} | P^{+}_{f\,\vec{g}0}\, P_{f-1\,\vec{g}0} \gg$$

za $n_z = N_z$

$$E \ll S^{+}_{\vec{n}N_z} | P^{+}_{f\,\vec{g}N_z}\, P_{f-1\,\vec{g}N_z} \gg = \frac{i}{2\pi}\, \delta_{\vec{n},\vec{g}} < \left[S^{+}_{\vec{n}N_z}, P^{+}_{f\,\vec{n}N_z}\, P_{f-1\,\vec{n}N_z} \right] > +$$

$$+ \ll \Omega_{\vec{n}N_z} | P^{+}_{f\,\vec{g}N_z}\, P_{f-1\,\vec{g}N_z} \gg \qquad (II.2.26)$$

gde su veličine $\Omega_{\vec{n}n_z}$, $\Omega_{\vec{n}0}$ i $\Omega_{\vec{n}N_z}$ date izrazima (II.2.5), (II.2.6) i (II.2.7) respektivno.

Rešavanjem sistema kvazi-Paulionskih Grinovih funkcija (II.2.25) i (II.2.26) metodom haotičnih faza (RPA), koji se sastoji u aproksimativnom izražavanju viših Grinovih funkcija preko nižih dekuplovanjem tipa

$$\ll P^{+}PP | P^{+} \gg \;\simeq\; < P^{+}P > \ll P | P^{+} \gg \qquad (II.2.27)$$

posle prelaska u impulsni prostor dobija se

za $f=1$ i $n_z \in [1, N_z-1]$

$$\left\{ E - \left[\mu H + S(6I - J_{\vec{k}}) - 2SI\cos k_o a + D^{(1)}(\vec{k},k_o,N_z,N) \sum_{\rho=1}^{2S} \rho \sum_{\vec{q}} < \hat{N}_{\rho\vec{q}k_o} > \right] \right\} G^{(1)}_{\vec{k}k_o} =$$

$$= \frac{i}{2\pi}\, \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} < \left[P_{1\,\vec{q}k_o}, P^{+}_{1\,\vec{q}k_o} \right] > \qquad (II.2.28)$$

za $n_z = 0$ i N_z

$$\left\{ E - \left[\mu H + S(6I - J_{\vec{k}}) - 2SI\cos k_o a + D^{(2)}(\vec{k},k_o,N_z,N) \sum_{\rho=1}^{2S} \rho \sum_{\vec{q}} < \hat{N}_{\rho\vec{q}k_o} > \right] \right\} G^{(1)}_{\vec{k}k_o} =$$

$$= \frac{i}{2\pi}\, \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} < \left[P_{1\,\vec{q}k_o}, P^{+}_{1\,\vec{q}k_o} \right] > \qquad (II.2.29)$$

za $f=2,3,\dots,2S$ i $n_z \in [1,N_z-1]$

$$\left\{E - \left[\mu H + S(6I-J_{\vec{k}}) - 2SI\cos k_o a + D^{(1)}(\vec{k},k_o,N_z,N)\sum_{\rho=1}^{2S}\rho\sum_{\vec{q}}\langle\hat{N}_{\rho\vec{q}k_o}\rangle\right]\right\}G^{(f)}_{\vec{k}k_o} =$$

$$= \frac{i}{2\pi}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\langle\hat{N}_{f-1\,\vec{q}k_o} - \hat{N}_{f\,\vec{q}k_o}\rangle \qquad (II.2.30)$$

za $n_z = 0$ i N_z

$$\left\{E - \left[\mu H + S(6I-J_{\vec{k}}) - 2SI\cos k_o a + D^{(2)}(\vec{k},k_o,N_z,N)\sum_{\rho=1}^{2S}\rho\sum_{\vec{q}}\langle\hat{N}_{\rho\vec{q}k_o}\rangle\right]\right\}G^{(f)}_{\vec{k}k_o} =$$

$$= \frac{i}{2\pi}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\langle\hat{N}_{f-1\,\vec{q}k_o} - \hat{N}_{f\,\vec{q}k_o}\rangle \qquad (II.2.31)$$

gde je

$$G^{(1)}_{\vec{n}-\vec{g},n_z-n_z} \equiv \sum_{\rho=1}^{2S}\frac{a_\rho}{a_1}\langle\langle P^+_{\rho-1\,\vec{n}n_z}P_{\rho\,\vec{n}n_z}|P^+_{1\,\vec{g}n_z}\rangle\rangle =$$

$$= \frac{2}{N_z+2}\cos^2 n_z k_o a\,\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{q})a}\,G^{(1)}_{\vec{k}k_o},$$

$$G^{(f)}_{\vec{n}-\vec{g},n_z-n_z} \equiv \sum_{\rho=1}^{2S}\frac{a_\rho}{a_f}\langle\langle P^+_{\rho-1\,\vec{n}n_z}P_{\rho\,\vec{n}n_z}|P^+_{f\,\vec{g}n_z}P_{f-1\,\vec{g}n_z}\rangle\rangle =$$

$$= \frac{2}{N_z+2}\cos^2 n_z k_o a\,\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{q})a}\,G^{(f)}_{\vec{k}k_o},$$

$$\hat{N}_{f\,\vec{q}k_o} = P^+_{f\,\vec{q}k_o}P_{f\,\vec{q}k_o},$$

$$D^{(1)}(\vec{k},k_o,N_z,N) = A^{(1)}(k_o,N_z,N) + B^{(1)}(N_z,N)\left[J_{\vec{k}} - 4I\right]$$

$$D^{(2)}(\vec{k},k_o,N_z,N) = A^{(2)}(k_o,N_z,N) + B^{(2)}(N_z,N)\left[J_{\vec{k}} - 4I\right]$$

pri čemu su veličine $A^{(1)}(k_o,N_z,N)$; $B^{(1)}(N_z,N)$; $A^{(2)}(k_o,N_z,N)$ i $B^{(2)}(N_z,N)$ date izrazima (II.2.14) - (II.2.17) respektivno.

Ovi sistemi Grinovih funkcija kao rešenje daju sledeće zakone disperzije na visokim temperaturama:

za $f=1,2,\ldots,2S$ i $n_z \in [1,N_z-1]$

$$E_1(\vec{k}k_o)=E^{(0)}(\vec{k}k_o)+\Big[A^{(1)}(k_o,N_z,N)+$$

$$+B^{(1)}(k_o,N_z,N)(J_{\vec{k}}-4I)\Big]\sum_{\rho=1}^{2S}\rho\sum_{\vec{q}}\langle\hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}\rangle \tag{II.2.32}$$

za $f=1,2,\ldots,2S$; za $n_z=0$ i N_z

$$E_2(\vec{k}k_o)=E^{(0)}(\vec{k}k_o)+\Big[A^{(2)}(k_o,N_z,N)+$$

$$+B^{(2)}(k_o,N_z,N)(J_{\vec{k}}-4I)\Big]\sum_{\rho=1}^{2S}\rho\sum_{\vec{q}}\langle\hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}\rangle \tag{II.2.33}$$

gde je $E^{(0)}(\vec{k}k_o)$ zakon disperzije za magnone u harmonijskoj aproksimaciji dat izrazom (II.2.13).

Karakteristično je da, kako na visokim temperaturama, tako i na niskim, postoje dva različita zakona disperzije; jedan za atome (spinove) na površini filma, a drugi za ostale atome (spinove) u unutrašnjosti filma. Razlike se uočavaju samo u anharmonijskom delu zakona disperzije.

2.3 *Magnetizacija na niskim i visokim temperaturama*

Relativna magnetizacija obračunata na jedan čvor rešetke definisana je izrazom [5]

$$\sigma=\frac{\langle S^z_{\vec{n}n_z}\rangle}{S}=1-\frac{(N_z+1)}{S}\left\langle\sum_{\rho=1}^{2S}\rho\,P^+_{\rho\,\vec{n}n_z}P_{\rho\,\vec{n}n_z}\right\rangle \tag{II.3.1}$$

Razlog za ovakav način definisanja magnetizacije je zahtev da se izrazi za magnetizaciju na niskim i visokim temperaturama poklapaju u odsustvu anharmonijskih efekata. Izraz (II.3.1) za magnetizaciju na niskim temperaturama, s obzirom na aproksimaciju da je jedini relevantni proces pobudjivanja $S \to S-1$, svodi se na

$$\sigma = 1 - \frac{(N_z+1)}{S} \langle P^+_{1\vec{n}n_z} P_{1\vec{n}n_z} \rangle \qquad (II.3.2)$$

Posle prelaska u impulsni prostor izraz (II.3.2) ima oblik

$$\sigma = 1 - \frac{N_z+1}{S} \frac{2\cos^2 n_z k_o a}{N(N_z+2)} \sum_{\vec{k}} \langle P^+_{1\vec{k}k_o} P_{1\vec{k}k_o} \rangle \qquad (II.3.3)$$

S obzirom na opšti uslov u filmu da broj atoma N_z nije mnogo veći od jedinice, a i da bi se izbegla zavisnost od n_z, umesto relativne magnetizacije (II.3.3) podesnije je da se uvede ukupni relativni magnetni moment filma pomoću relacije

$$M = \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z} \sigma \qquad (II.3.4)$$

Kako zakon disperzije (II.2.23) važi za atome (spinove) koji se nalaze u unutrašnjosti filma, tj. za (N_z-1)-sloj, a zakon disperzije (II.2.24) važi za atome (spinove) koji se nalaze na površini filma, ukupni magnetni moment filma može se napisati u obliku

$$M = \sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} \left[1 - \frac{N_z+1}{S} \frac{2\cos^2 n_z k_o a}{N(N_z+2)} \sum_{\vec{k}} \langle P^+_{1\vec{k}k_o} P_{1\vec{k}k_o} \rangle^{(1)}\right] +$$

$$+ \sum_{\vec{n}n_z=0,N_z} \left[1 - \frac{N_z+1}{S} \frac{2\cos^2 n_z k_o a}{N(N_z+2)} \sum_{\vec{k}} \langle P^+_{1\vec{k}k_o} P_{1\vec{k}k_o} \rangle^{(2)}\right] \qquad (II.3.5)$$

gde su $\langle P^+_{1\vec{k}k_o} P_{1\vec{k}k_o} \rangle^{(1)}$ i $\langle P^+_{1\vec{k}k_o} P_{1\vec{k}k_o} \rangle^{(2)}$ srednji okupacioni kvazi-Paulionski brojevi izračunati preko spektralnih intenzivnosti Grinovih funkcija (II.2.21) i (II.2.22), respektivno. Na taj se način, sa tačnošću do kvadrata koncentracije, dobija da su ovi okupacioni brojevi dati izrazima

$$\langle P^{+}_{1\vec{k}k_o} P_{1\vec{k}k_o}\rangle^{(1)} = \left[e^{\frac{E_1(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} +$$

$$+ \frac{4\alpha(N_z)}{N}(N_z+1)\left[e^{\frac{E_1(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} \sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{E^{(0)}(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} -$$

$$- \frac{2\alpha^2(N_z) - 4\alpha(N_z)}{N}(N_z+1)\left[e^{\frac{E_1(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} \sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{E_1(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} -$$

$$- \frac{4\alpha(N_z)}{N}(N_z+1)\left[e^{\frac{E^{(0)}(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} \sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{E^{(0)}(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} +$$

$$+ \frac{2\alpha^2(N_z)}{N^2}(N_z+1)\left\{\sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{E^{(0)}(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1}\right\}^2 \tag{II.3.6}$$

$$\langle P^{+}_{1\vec{k}k_o} P_{1\vec{k}k_o}\rangle^{(2)} = \left[e^{\frac{E_2(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} +$$

$$+ \frac{4\alpha(N_z)}{N}(N_z+1)\left[e^{\frac{E_2(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} \sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{E^{(0)}(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} -$$

$$- \frac{2\alpha^2(N_z) - 4\alpha(N_z)}{N}(N_z+1)\left[e^{\frac{E_2(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} \sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{E_2(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} -$$

$$- \frac{4\alpha(N_z)}{N}(N_z+1)\left[e^{\frac{E^{(0)}(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} \sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{E^{(0)}(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} +$$

$$+ \frac{2\alpha^2(N_z)}{N^2}(N_z+1)\left\{\sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{E^{(0)}(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1}\right\}^2 \qquad \text{(II.3.7)}$$

gde je $\theta = k_Б T$, $k_Б$ je Bolcmanova konstanta, T je apsolutna temperatura. Vrednosti za $E_1(\vec{k}k_o)$ i $E_2(\vec{k}k_o)$ date su izrazima (II.2.23) i (II.2.24), respektivno.

Zamenom vrednosti (II.3.6) i (II.3.7) u izraz (II.3.5) i razvojem zakona disperzije $E_1(\vec{k}k_o)$ i $E_2(\vec{k}k_o)$ u red sa tačnošću do k^2, dobija se, sa tačnošću do $\tau^{3/2}$, izraz za ukupni magnetni moment filma {s obzirom na ovu aproksimaciju dovoljno je da se uzmu samo prvi članovi u izrazima (II.3.6) i (II.3.7)}

$$M = N(N_z+1)\left\{1 - \frac{1}{S} Z_{3/2}\left(\frac{\mu H}{2\pi I\tau}\right) W(k_o,\tau,N_z)\,\tau^{3/2} + \frac{1}{2\pi S}\left[\frac{N_z-2}{N_z+2} F^{(1)}(k_o,N_z,N) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{4}{N_z+2} F^{(2)}(k_o,N_z,N)\right] Z^2_{3/2}\left(\frac{\mu H}{2\pi I\tau}\right) W^2(k_o,\tau,N_z)\,\tau^2\right\} \qquad \text{(II.3.8)}$$

gde je

$$W(k_o,\tau,N_z) = \frac{N_z+1}{4\pi^2}\left(\frac{2\pi}{S}\right)^{3/2}\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} - e^{-\frac{k_o^2a^2S}{2\pi\tau}}\sum_{\rho=1}^{\infty}\frac{2^{\rho}(k_o a)^{2\rho+1}\left(\frac{S}{2\pi}\right)^{\frac{2\rho+1}{2}}}{(2\rho+1)!!}\,\tau^{-\frac{2\rho+1}{2}}\right]$$

$$F^{(1)}(k_o,N_z,N) = \frac{2}{I}\left[1 - \alpha(N_z)\right] N A^{(1)}(k_o,N_z,N)$$

$$F^{(2)}(k_o,N_z,N) = \frac{2}{I}\left[1 - \alpha(N_z)\right] N A^{(2)}(k_o,N_z,N)$$

$$Z_p\left(\frac{\mu H}{2\pi I\tau}\right) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-n\frac{\mu H}{\theta}}}{n^p}\,; \qquad \tau = \frac{\theta}{2\pi I}$$

Analizom izraza za ukupni magnetni moment filma na niskim temperaturama, može se zaključiti da se u odnosu na idealni feromagnetik razlikuje po tome što

1) U filmu anharmonijski efekti daju korekciju koja je proporcionalna sa τ^2, dok je ova korekcija u idealnoj strukturi negativna i proporcionalna sa τ^4. Znak anharonijske korekcije u filmu može biti, u zavisnosti od k_o i N_z, kako pozitivan, tako i negativan. Naime, za $k_o \in \left[0, \frac{\pi}{3a}\right]$, tj. kada je

$$\arccos\left(1+\frac{\mu' H}{SI}\right) \in \left[0, \frac{\pi}{3}\right]$$

korekcioni član je uvek pozitivan nezavisno od N_z, dok je za $k_o \in \left[\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{a}\right]$, tj. kada je

$$\arccos\left(1+\frac{\mu' H}{SI}\right) \in \left[\frac{\pi}{2}, \pi\right]$$

korekcioni član je uvek negativan za sve vrednosti N_z. Medjutim, kada je

$$\arccos\left(1+\frac{\mu' H}{SI}\right) \in \left[\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}\right]$$

za veoma male debljine korekcioni član je pozitivan, dok je za ostale debljine filma negativan. Prema tome, u zavisnosti od vrednosti za μ' magnetizacija u filmu, usled anharmonijskih efekata, može sporije ili brže, u odnosu na idealni feromagnetik, da opada sa porastom temperature.

2) Blohov član koji je proporcionalan $\tau^{3/2}$ u filmu se množi faktorom $W(k_o,\tau,N_z)$ koji, u zavisnosti od N_z, može biti i veći i manji od jedinice. Naime, za $N_z > 2\sqrt{2}\,S - 1$, ovaj faktor je veći od jedinice, pa magnetizacija brže opada sa porastom temperature u odnosu na idealni feromagnetik, dok za vrlo tanke filmove i velike vrednosti spina S, tj. za $3 < N_z < 2\sqrt{2}\,S - 1$, korigovan Blohov član je manji od jedinice, pa magnetizacija sa

porastom temperature opada sporije.

Budući da je korigovani Blohov član (član koji je proporcionalan sa $\tau^{3/2}$) u izrazu za magnetizaciju u filmu dominantan, jasno je da je njegovim ponašanjem odredjen hod magnetizacije u zavisnosti od temperature. Naime, za veoma tanke filmove, može se reći da magnetizacija sporije opada sa porastom temperature, dok za ostale debljine filma magnetizacija opada brže sa porastom temperature u poredjenju sa idealnim feromagnetikom.

Relativna magnetizacija na visokim temperaturama takodje se računa po formuli (II.3.1), s tom razlikom što su u ovom slučaju svi procesi ekscitacije jednako verovatni. S obzirom na činjenicu da površinski atomi (spinovi) i zapreminski atomi (spinovi) nemaju isti zakon disperzije, izraz za ukupni magnetni moment filma može se napisati u obliku

$$M = N(N_z+1) - \frac{1}{S}\frac{N_z-2}{N_z+2}\sum_{\rho=1}^{2S}\rho\sum_{\vec{q}}\langle\hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}\rangle^{(1)} - \frac{1}{S}\frac{4}{N_z+2}\sum_{\rho=1}\rho\sum_{\vec{q}}\langle\hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}\rangle^{(2)} \tag{II.3.9}$$

gde su $\langle\hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}\rangle^{(1)}$ i $\langle\hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}\rangle^{(2)}$ srednji okupacioni brojevi kvazi-pauliona izračunati za zakone disperzija (II.2.32) i (II.2.33), respektivno. Ovi srednji okupacioni brojevi kvazi--pauliona odredju se preko spektralnih intezivnosti Grinovih funkcija, tj. iz sistema jednačina

$$\left.\begin{aligned}
\langle\hat{N}_{1\,\vec{k}k_o}\rangle^{(1)} &= \left[e^{\frac{E_1(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1}\left\{\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\langle 1 - \hat{N}_{1\,\vec{q}k_o} - \sum_{\rho=1}^{2S}\hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}\rangle^{(1)}\right\}\\
\langle\hat{N}_{\rho\,\vec{k}k_o}\rangle^{(1)} &= \left[e^{\frac{E_1(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1}\left\{\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\langle\hat{N}_{\rho-1\,\vec{q}k_o} - \hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}\rangle^{(1)}\right\}
\end{aligned}\right\} \tag{II.3.10}$$

$\rho = 2,3,\ldots,2S$

$$\left.\begin{aligned}
<\hat{N}_{1\,\vec{k}k_o}>^{(2)} &= \left[e^{\frac{E_2(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} \left\{\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}<1 - \hat{N}_{1\,\vec{q}k_o} - \sum_{\rho=1}^{2S}\hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}>^{(2)}\right\} \\
<N_{\rho\,\vec{k}k_o}>^{(2)} &= \left[e^{\frac{E_2(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} \left\{\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}<\hat{N}_{\rho-1\,\vec{q}k_o} - \hat{N}_{\rho\,\vec{q}k_o}>^{(2)}\right\} \\
\rho &= 2,3,\dots,2S
\end{aligned}\right\} \quad (II.3.11)$$

Ovaj sistem jednačina veoma je komplikovan za rešavanje, pa se u daljem tekstu uvodi ograničenje na spin $S = 1/2$, kada zakon disperzije postaje

za $n_z \in [1,N_z-1]$

$$\varepsilon_1(\vec{k}k_o) = \varepsilon^{(0)}(\vec{k}k_o) + \left[A(k_o)+B(k_o)(J_{\vec{k}} - J_o)\right]\sum_{\vec{q}}<P^+_{\vec{q}k_o}P_{\vec{q}k_o}>$$

za $n_z = 0$ i N_z (II.3.12)

$$\varepsilon_2(\vec{k}k_o) = \varepsilon^{(0)}(\vec{k}k_o) + \frac{2}{N(N_z+2)}\left[I\cos k_oa(1-\cos k_oa) + \right.$$

$$\left. + (J_{\vec{k}} - J_o)\right]\sum_{\vec{q}}<P^+_{\vec{q}k_o}P_{\vec{q}k_o}> \qquad (II.3.13)$$

Magnetizacija na visokim temperaturama za spin $S = 1/2$ traži se po formuli

$$\sigma = \frac{<S^z_{\vec{n}n_z}>}{S} = 2<\frac{1}{2} - P^+_{\vec{n}n_z}P_{\vec{n}n_z}> = <P_{\vec{n}n_z}P^+_{\vec{n}n_z} - P^+_{\vec{n}n_z}P_{\vec{n}n_z}>$$

Kako atomi (spinovi) na površini i atomi (spinovi) u unutrašnjosti filma nemaju isti zakon disperzije, ukupna se magnetizacija u filmu može napisati u obliku

$$M = \frac{2}{N(N_z+2)}\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\cos^2 n_zk_oa\sum_{\vec{k}}<P_{\vec{k}k_o}P^+_{\vec{k}k_o} - P^+_{\vec{k}k_o}P_{\vec{k}k_o}>^{(1)} +$$

$$+ \frac{2}{N(N_z+2)} \sum_{\vec{n}n_z=0 \; i \; N_z} \cos^2 n_z k_o a \sum_{\vec{q}} \langle P_{\vec{k}k_o} P^+_{\vec{k}k_o} - P^+_{\vec{k}k_o} P_{\vec{k}k_o} \rangle^{(2)} \qquad (II.3.14)$$

Komutatori u izrazu (II.3.14) dati su na sledeći način

$$\sum_{\vec{k}} \langle P_{\vec{k}k_o} P^+_{\vec{k}k_o} - P^+_{\vec{k}k_o} P_{\vec{k}k_o} \rangle^{(1)} = N \sum_{\vec{k}} \langle P^+_{\vec{k}k_o} P_{\vec{k}k_o} \rangle^{(1)} \left\{ \sum_{\vec{k}} \left[e^{\frac{\varepsilon_1(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \right\}^{-1} \qquad (II.3.15)$$

$$\sum_{\vec{k}} \langle P_{\vec{k}k_o} P^+_{\vec{k}k_o} - P^+_{\vec{k}k_o} P_{\vec{k}k_o} \rangle^{(2)} = N \sum_{\vec{k}} \langle P^+_{\vec{k}k_o} P_{\vec{k}k_o} \rangle^{(2)} \left\{ \sum_{\vec{k}} \left[e^{\frac{\varepsilon_2(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \right\}^{-1} \qquad (II.3.16)$$

gde se indeks (1) odnosi na zakon disperzije (II.3.12), a indeks (2) na zakon disperzije (II.3.13).

Srednji okupacioni brojevi Pauliona nalaze se pomoću izraza

$$\langle P_{\vec{n}n_z} P^+_{\vec{n}n_z} \rangle + \langle P^+_{\vec{n}n_z} P_{\vec{n}n_z} \rangle = 1$$

odakle se dobija

$$\sum_{\vec{k}} \langle P^+_{\vec{k}k_o} P_{\vec{k}k_o} \rangle^{(1)} = \frac{N(N_z-1)(N_z+2)}{N_z-2} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[e^{\frac{\varepsilon_1(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \left\{ 1 + \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \left[e^{\frac{\varepsilon_1(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \right\}^{-1} \qquad (II.3.17)$$

$$\sum_{\vec{k}} \langle P^+_{\vec{k}k_o} P_{\vec{k}k_o} \rangle^{(2)} = \frac{1}{2} N(N_z+2) \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[e^{\frac{\varepsilon_2(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \left\{ 1 + \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \left[e^{\frac{\varepsilon_2(\vec{k}k_o)}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \right\}^{-1} \qquad (II.3.18)$$

Uzimajući u obzir izraze (II.3.15) - (II.3.18) izraz (II.3.14) za ukupnu magnetizaciju dobija oblik

$$M = M_1+M_2 = N(N_z-1)\left[\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} cth\,\frac{\varepsilon_1(\vec{k}k_o)}{2\theta}\right]^{-1} + 2N\left[\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} cth\,\frac{\varepsilon_2(\vec{k}k_o)}{2\theta}\right]^{-1} \tag{II.3.19}$$

S obzirom da se film nalazi u spoljašnjem magnetnom polju, temperatura prelaza traži se pomoću magnetne susceptibilnosti iz paramagnetne faze po metodu koji je detaljno izložen u [5].

Hiperbolične funkcije (kotangensi) iz (II.3.19) mogu se napisati u obliku

$$cth\,\frac{\varepsilon_1(\vec{k}k_o)}{2\theta} = \frac{1}{t_o}\left\{1+(1-t_o^2)\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\left(\frac{t_1}{t_o}\right)^n\right\} \tag{II.3.20}$$

$$cth\,\frac{\varepsilon_2(\vec{k}k_o)}{2\theta} = \frac{1}{t_o}\left\{1+(1-t_o^2)\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\left(\frac{t_2}{t_o}\right)^n\right\} . \tag{II.3.21}$$

gde je

$$t_o = th\,\frac{\varepsilon_o(\vec{k}k_o)}{2\theta}, \quad t_1 = th\,\frac{\varepsilon_1'(\vec{k}k_o)}{2\theta}, \quad t_2 = th\,\frac{\varepsilon_2'(\vec{k}k_o)}{2\theta},$$

pri čemu je $t_1 \ll t_o$ i $t_2 \ll t_o$. Pomoću izraza (II.3.17) i (II.3.18) mogu se veličine ε_1' i ε_2' napisati u obliku

$$\varepsilon_1' = \left[A(k_o)+B(k_o)\left(J_{\vec{k}}-J_o\right)\right]\frac{N(N_z-1)(N_z+2)}{N_z-2}\,\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\left[e^{\frac{\varepsilon_1(\vec{k}k_o)}{\theta}}-1\right]^{-1}\sigma_1$$

$$\varepsilon_2' = \left[I\cos k_oa(1-\cos k_oa)+J_{\vec{k}}-J_o\right]\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\left[e^{\frac{\varepsilon_2(kk_o)}{\theta}}-1\right]^{-1}\sigma_2$$

gde su σ_1 i σ_2 relativne magnetizacije obračunate na jedan čvor rešetke za zapreminske odnosno površinske atome.

Koristeći aproksimacije

$$t_1 \simeq \frac{\varepsilon_1'}{2\theta}, \quad t_2 \simeq \frac{\varepsilon_2'}{2\theta}, \quad \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\left(\frac{t_1}{t_o}\right)^n \simeq -\frac{t_1}{t_o} \text{ i } \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\left(\frac{t_2}{t_o}\right)^n \simeq -\frac{t_2}{t_o},$$

za odredjivanje magnetizacije dobijaju se sledeće implicitne jednačnine po σ_1 i σ_2

$$\sigma_1 = A + \frac{A^2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1-t_o^2}{t_o^2} \frac{C_1(\vec{k}k_o)}{\theta} \sigma_1 \qquad \text{(II.3.22)}$$

$$\sigma_2 = A + \frac{A^2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1-t_o^2}{t_o^2} \frac{C_2(\vec{k}k_o)}{\theta} \sigma_2 \qquad \text{(II.3.23)}$$

gde je

$$C_1(\vec{k}k_o) = \frac{\varepsilon_1'(\vec{k}k_o)}{2\sigma_1}, \quad C_2(\vec{k}k_o) = \frac{\varepsilon_2'(\vec{k}k_o)}{2\sigma_2} \quad \text{i} \quad \frac{1}{A} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{t_o}$$

U prvoj iteraciji dobija se da je relativna magnetizacija filma data izrazom

$$\sigma = \frac{1}{2}(\sigma_1+\sigma_2) = A + \frac{A^3}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{1-t_o^2}{t_o^2} \frac{1}{\theta}\left[C_1(\vec{k}k_o) + C_2(\vec{k}k_o)\right] \qquad \text{(II.3.24)}$$

Kako se magnetna susceptibilnost odredjuje iz paramagnetne faze, može se uzeti da je

$$\varepsilon_o(\vec{k}k_o) \simeq \mu H \qquad \text{i} \qquad \theta \gg \mu H$$

$$\sigma = t_o + t_o(1-t_o^2)\frac{1}{\theta}\tau \qquad \text{(II.3.25)}$$

gde je

$$\tau = \frac{N(N_z+2)(N_z-1)}{8(N_z-2)}\left[A(k_o) - 6IB(k_o)\right]\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{\varepsilon_1(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} -$$

$$- \frac{I}{8}\, 6 - \cos k_o a\,(1-\cos k_o a)\,\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\left[e^{\frac{\varepsilon_2(\vec{q}k_o)}{\theta}} - 1\right]^{-1} \qquad \text{(II.3.26)}$$

Magnetna susceptibilnost definiše se izrazom

$$\chi = \lim_{H\to 0} \mu \frac{\partial\sigma}{\partial H} \qquad \text{(II.3.27)}$$

što daje

$$\chi = \frac{\mu^2}{2}\frac{1}{\theta-\tau} \qquad \text{(II.3.28)}$$

tj. relaciju poznatu kao Kiri-Vajsov zakon.

Analizom izraza (II.3.26) može se zaključiti da temperatura prelaza u strukturama sa narušenom translacionom simetrijom primetno zavisi od strukturnih karakteristika kristala, nego što je to slučaj u idealnom feromagnetiku. S obzirom na činjenicu da se u ovom pitanju teorija i eksperiment znatno razilaze, jasno je da ona teorija, koja je osetljivija na strukturne karakteristike kristala, vernije reprodukuje temperaturu faznog prelaza.

G L A V A III

FONONI U TANKIM FILMOVIMA I ELEKTRON-FONON INTERAKCIJA

U ovoj se glavi razmatra elektron-fonon interakcija u tankim filmovima. Kako spektri elementarnih ekscitacija u tankim filmovima imaju, kao što je u glavi II pokazano, čitav niz specifičnih osobina u odnosu na idealnu strukturu, pre analize efekata elektron-fonon interakcije definiše se teorija harmonijskih fononskih stanja u filmu, a takodje i teorija harmonijskih elektronskih stanja. Dalja analiza filma vrši se u prostoru pomenutih harmonijskih stanja. Osnovni cilj ove glave jeste da se oceni uticaj spontane emisije harmonijskih fonona na fenomen superprovodnosti.

3.1 *Harmonijska fononska stanja i srednja fononska energija u tankim filmovima*

Posmatra se trodimenzioni kristal koji ima idealnu translacionu sismetriju u XOY ravni, a u pravcu z-ose ima konačnu debljinu, takvu da se jedinica ne sme zanemariti u odnosu na broj atoma N_z. Neka je, pored toga, kristal proste kubne strukture sa jednim atomom po elementarnoj ćeliji.

Hamiltonijan idealnog trodimenzionog kristala, slično kao u glavi I, dat je izrazom

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z, i} \left\{ M\left(\dot{\xi}^{i}_{\vec{n}n_z}\right)^2 + \sum_{\vec{m}m_z, i'} \lambda^{ii'}_{\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z} \left(\xi^{i}_{\vec{n}n_z} - \xi^{i}_{\vec{m}m_z}\right)\left(\xi^{i'}_{\vec{n}n_z} - \xi^{i'}_{\vec{m}m_z}\right)\right\} \tag{III.1.1}$$

gde je $\vec{n} \equiv (n_x n_y)$, M masa atoma, $\xi^{i}_{\vec{n}n_z}$ i-ta komponenta vektora pomeraja $(\vec{n}n_z)$-tog atoma u odnosu na njegov ravnotežni položaj,

$i \equiv (xyz)$, $\lambda^{ii'}_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$ koeficijenti interakcije koji zavise samo od rastojanja izmedju čvorova. Sve interakcije koje figurišu ovde napisane su u aproksimaciji najbližih suseda, pri čemu se za film razlikuju dva slučaja:

a) Slučaj kada se atom za koji se piše jednačina kretanja nalazi u unutrašnjosti kristala, tj. za $n_z \in [1,N_z-1]$

b) Slučaj kada se isti atom nalazi na površini kristala, tj. kada je $n_z = 0$ i $n_z = N_z$.

Na taj se način dobijaju sistemi diferencijalno - diferencnih jednačina kretanja, kako sledi

za $n_z \in [1,N_z-1]$

$$M\ddot{\xi}^x_{\vec{n}n_z} + \lambda_o\xi^x_{\vec{n}n_z} - \lambda\left[\sum_{\vec{\nu}} \xi^x_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} + \xi^x_{\vec{n}n_z+1} + \xi^x_{\vec{n}n_z-1}\right] + \lambda^T_o\left[\xi^y_{\vec{n}n_z} + \xi^z_{\vec{n}n_z}\right] = 0$$

$$M\ddot{\xi}^y_{\vec{n}n_z} + \lambda_o\xi^y_{\vec{n}n_z} - \lambda\left[\sum_{\vec{\nu}} \xi^y_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} + \xi^y_{\vec{n}n_z+1} + \xi^y_{\vec{n}n_z-1}\right] + \lambda^T_o\left[\xi^z_{\vec{n}n_z} + \xi^x_{\vec{n}n_z}\right] = 0$$

$$M\ddot{\xi}^z_{\vec{n}n_z} + \lambda_o\xi^z_{\vec{n}n_z} - \lambda\left[\sum_{\vec{\nu}} \xi^z_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} + \xi^z_{\vec{n}n_z+1} + \xi^z_{\vec{n}n_z-1}\right] + \lambda^T_o\left[\xi^x_{\vec{n}n_z} + \xi^y_{\vec{n}n_z}\right] = 0$$

(III.1.2)

za $n_z = 0$

$$M\ddot{\xi}^x_{\vec{n}0} + (\lambda_o+\lambda'_o)\xi^x_{\vec{n}0} - \lambda\left[\sum_{\vec{\nu}} \xi^x_{\vec{\nu}+\vec{n}0} + \xi^x_{\vec{n}1}\right] + \lambda^T_o\left[\xi^y_{\vec{n}0} + \xi^z_{\vec{n}0}\right] = 0$$

$$M\ddot{\xi}^y_{\vec{n}0} + (\lambda_o+\lambda'_o)\xi^y_{\vec{n}0} - \lambda\left[\sum_{\vec{\nu}} \xi^y_{\vec{\nu}+\vec{n}0} + \xi^y_{\vec{n}1}\right] + \lambda^T_o\left[\xi^z_{\vec{n}0} + \xi^x_{\vec{n}0}\right] = 0$$

$$M\ddot{\xi}^z_{\vec{n}0} + (\lambda_o+\lambda'_o)\xi^z_{\vec{n}0} - \lambda\left[\sum_{\vec{\nu}} \xi^z_{\vec{\nu}+\vec{n}0} + \xi^z_{\vec{n}1}\right] + \lambda^T_o\left[\xi^x_{\vec{n}0} + \xi^y_{\vec{n}0}\right] = 0$$

(III.1.3)

za $n_z = N_z$

$$M\ddot{\xi}^x_{\vec{n}N_z} + (\lambda_o+\lambda'_o)\xi^x_{\vec{n}N_z} - \lambda\left[\sum_{\vec{\nu}} \xi^x_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z} + \xi^x_{\vec{n}N_z-1}\right] + \lambda^T_o\left[\xi^y_{\vec{n}N_z} + \xi^z_{\vec{n}N_z}\right] = 0$$

$$M\ddot{\xi}^y_{\vec{n}N_z} + (\lambda_o+\lambda'_o)\xi^y_{\vec{n}N_z} - \lambda\left[\sum_{\vec{\nu}} \xi^y_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z} + \xi^y_{\vec{n}N_z-1}\right] + \lambda^T_o\left[\xi^z_{\vec{n}N_z} + \xi^x_{\vec{n}N_z}\right] = 0$$

$$M\ddot{\xi}^z_{\vec{n}N_z} + (\lambda_o+\lambda'_o)\xi^z_{\vec{n}N_z} - \lambda\left[\sum_{\vec{\nu}} \xi^z_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z} + \xi^z_{\vec{n}N_z-1}\right] + \lambda^T_o\left[\xi^x_{\vec{n}N_z} + \xi^y_{\vec{n}N_z}\right] = 0$$

(III.1.4)

gde je $\vec{\nu}$ vektor koji uzima vrednosti za najbliže susede u XOY ravni. Pri sastavljanju ovih sistema jednačina iskorišćene su iste aproksimacije za sile interakcije izmedju čvorova rešetke kao u slučaju polubeskonačnog kristala, koji je razmatran u glavi I.

Slično, kao u slučaju polubeskonačnog kristala, sistemi jednačina (III.1.2) - (III.1.4) imaju dva tipa rešenja, tj.

$$\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q},\ell} \sqrt{\frac{\hbar}{N(N_z+q)M\omega_\ell(\vec{q}q_o)}}\, \vec{e}_\ell(\vec{q}q_o)e^{i\vec{n}\vec{q}a} \cos n_z q_o a \left[b_{\vec{q}q_o,\ell} + b^+_{-\vec{q}q_o,\ell}\right] \qquad \text{(III.1.5)}$$

$$\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q},\ell} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_\ell(\vec{q}\,i\rho)}}\, \vec{e}_\ell(\vec{q}\,i\rho)\, e^{i\vec{n}\vec{q}a} \left[e^{-\rho n_z a} + e^{-\rho(N_z-n_z)a}\right] \cdot$$
$$\cdot \left[b_{\vec{q}\,i\rho,\ell} + b^+_{-\vec{q}\,i\rho,\ell}\right]; \quad \rho > 0 \qquad \text{(III.1.6)}$$

pri čemu ove funkcije dijagonalizuju hamiltonijan sistema (III.1.1), tj.

$$H = {\sum_{\vec{q},\ell}}' \hbar\omega_\ell(\vec{q}q_o)\left[\frac{1}{2} + b^+_{\vec{q}q_o,\ell}\, b_{\vec{q}q_o,\ell}\right] \qquad \text{(III.1.7)}$$

i

$$H = \sum_{\vec{q},\ell} \hbar\omega_\ell(\vec{q}\,i\rho)\left[\frac{1}{2} + b^+_{\vec{q}\,i\rho,\ell}\, b_{\vec{q}\,i\rho,\ell}\right] \qquad \text{(III.1.8)}$$

respektivno. Konstante q_o i ρ u rešenjima (III.1.5) i (III.1.6) odredjuju se iz jednačina

$$\cos q_o a = \frac{\lambda_o'}{\lambda} \quad \text{i} \quad \frac{\lambda_o'}{\lambda} = \frac{e^{\rho a} + e^{-\rho(N_z+1)a}}{1 + e^{-\rho N_z a}} \simeq e^{|\rho|a} \qquad \text{(III.1.9)}$$

Fononska stanja koja se opisuju funkcijama (III.1.5) nazivaju se zapreminska fononska stanja, jer su periodična funkcija čvora rešetke. Fononska stanja opisana funkcijama (III.1.6) nazivaju se površinska fononska stanja, jer su aperiodična funkcija debljine filma i opadaju sa porastom dubine u filmu. Karakteristično je da u ovakvim strukturama, s obzirom na (III.1.9), mogu postojati ili samo zapreminska fononska stanja ($\lambda'_o < \lambda$), ili samo površinska fononska stanja ($\lambda'_o > \lambda$). Granični slučaj se $\lambda'_o = \lambda$ svodi na slučaj $q_o = \rho = 0$, što odgovara slučaju idealnog dvodimenzionog kristala *).

Kako elementarna ćelija sadrži samo jedan atom, sledi da postoje samo tri fononske grane i to sve akustičke [9]. Unutrašnja energija filma, u dugotalasnoj aproksimaciji, može se izraziti u obliku

$$\mathcal{U} = 3\,\frac{N(N_z+1)\,a^3}{(2\pi)^3}\,4\pi\int\limits_0^{q_{max}} \hbar\bar{c}\,\sqrt{q^2+q_o^2}\;q\sqrt{q^2+q_o^2}\left[e^{\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+q_o^2}}-1\right]^{-1} dq \qquad \text{(III.1.10)}$$

gde je $\bar{c}$ srednja vrednost brzine zvuka, data izrazom

$$\frac{1}{\bar{c}} = \frac{2}{c_{tr}} + \frac{1}{c_{\ell}} \qquad \text{(III.1.11)}$$

pri čemu je c_{tr} brzina transverzalnih i c_{ℓ} brzina longitudinalnih talasa [10]. Ovde je korišćena funkcija distribucije za

*) Iz graničnih uslova $\sin N_z q_o a = 0$ sledi da je

$$q_o = \frac{\nu_o\pi}{N_z a}\,; \quad \nu_o \text{ - prirodan broj}$$

dok se s druge strane iz (III.1.9) dobija da je

$$q_o = \frac{1}{a}\,\arccos\frac{\lambda'_o}{\lambda}$$

tako da je veza izmedju ν_o i N_z data relacijom

$$N_z = \frac{\nu_o\pi}{\arccos\dfrac{\lambda'_o}{\lambda}}\,.$$

Vidi se odavde da se slučaj $\lambda'_o = \lambda$ ($\rho_o = 0$) svodi na slučaj idealnog dvodimenzionog kristala ($N_z = 0$).

trodimenzioni kristal pri čemu je jedna komponenta impulsa fiksirana, tj. $g(\vec{q}q_o) = 4\pi\sqrt{q^2+q_o^2}$. Posle rešavanja odgovarajućih integrala, izraz za unutrašnju energiju filma na niskim temperaturama, a koja potiče od zapreminskih fononskih stanja, posle aproksimacije

$$e^{\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+q_o^2}} - 1 \approx e^{\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+q_o^2}}$$

ima oblik

$$U = \frac{24\sqrt{2}N(N_z+1)\pi^4\hbar^3\,\bar{c}^3}{\left[\theta_D^2 - \frac{4\pi^2\hbar^2\bar{c}^2}{a^2}\left(\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^2\right]^{3/2}}\,\theta\left\{e^{\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{1}{a}\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}}\left[\frac{1}{a^3}\left(\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^3 + \frac{3\theta}{\hbar\bar{c}}\frac{1}{a^2}\left(\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^2 + \frac{6\theta^2}{\hbar^2\bar{c}^2}\frac{1}{a}\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda} + \frac{6\theta^3}{\hbar^3\bar{c}^3}\right] - e^{-\frac{\theta_D}{2\pi\theta}}\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar\bar{c}}\right)^3 + \frac{3\theta_D^2}{4\pi^2\hbar^3\bar{c}^3}\theta + \frac{3\theta_D}{\pi\hbar^3\bar{c}^3}\theta^2 + \frac{6\theta^3}{\hbar^3\bar{c}^3}\right]\right\}. \qquad \text{(III.1.12)}$$

gde je θ_D Debajeva energija, $\theta = k_Б T$, $k_Б$ Bolcmanova konstanta.

Izraz za unutrašnju energiju filma (III.1.10) na visokim temperaturama, a koja potiče od zapreminskih fononskih stanja, posle aproksimacije

$$e^{\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+q_o^2}} - 1 \approx \frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+q_o^2}$$

postaje

$$U = \frac{8\sqrt{2}N(N_z+1)\pi^4\hbar^3\bar{c}^3}{\left[\theta_D^2 - \frac{4\pi^2\hbar^2\bar{c}^2}{a^2}\left(\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^2\right]^{3/2}}\,\theta\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar\bar{c}}\right)^3 - \frac{1}{a^3}\left(\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^3\right] \qquad \text{(III.1.13)}$$

Odgovarajuće specifične toplote na niskim i visokim temperaturama date su respektivno izrazima

$$c = \frac{24\sqrt{2}N(N_z+1)\pi^4\hbar^3\bar{c}^3k_Б}{\left[\theta_D^2 - \frac{4\pi^2\hbar^2\bar{c}^2}{a^2}\left(arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^2\right]^{3/2}}\left\{e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{1}{a}arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}}\left[\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{1}{a^4}\left(arccos\frac{\lambda_o}{\lambda}\right)^4 + \right.\right.$$

$$\left. + \frac{4}{a^3}\left(arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^3 + \frac{12\theta}{\hbar\bar{c}}\frac{1}{a^2}\left(arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^2 + \frac{24\theta^2}{\hbar^2\bar{c}^2}\frac{1}{a}arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda} + \frac{24\theta^3}{\hbar^3\bar{c}^3}\right] -$$

$$\left. - e^{-\frac{\theta_D}{2\pi\theta}}\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar\bar{c}}\right)^4\frac{\hbar\bar{c}}{\theta} + 4\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar\bar{c}}\right)^3 + \frac{3\theta_D^2}{\pi^2\hbar^2\bar{c}^3}\theta + \frac{12\theta_D}{\pi\hbar^3\bar{c}^3}\theta^2 + \frac{24\theta^3}{\hbar^3\bar{c}^3}\right]\right\} \tag{III.1.14}$$

i

$$c = \frac{8\sqrt{2}N(N_z+1)\pi^4\hbar^3\bar{c}^3k_Б}{\left[\theta_D^2 - \frac{4\pi^2\hbar^2\bar{c}^2}{a^2}\left(arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^2\right]^{3/2}}\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar c}\right)^3 - \frac{1}{a^3}\left(arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^3\right] \tag{III.1.15}$$

Kako verovatnoća nalaženja površinskih fonona eksponencijalno opada sa porastom dubine u filmu, jer su praktično svi fononi ovog tipa koncentrisani na površini filma, unutrašnja je energija za ovaj slučaj (čvorovi rešetke koji se u unutrašnjosti filma nalaze praktično su "zamrznuti", jer samo čvorovi koji se nalaze na površini filma izvode toplotne vibracije) data izrazom

$$U = 3\,\frac{2Na^3}{(2\pi)^3}\,4\pi\int_0^{q_{max}}\hbar c\sqrt{q^2+\rho^2}\;q\sqrt{q^2+\rho^2}\left[e^{\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+\rho^2}} - 1\right]dq \tag{III.1.16}$$

Prema tome, u slučaju niskih, odnosno visokih temperatura, respektivno dobija se

$$U = \frac{48\sqrt{2}\,N\pi^4\hbar^4\bar{c}^3}{\left[\theta_D^2 - 4\pi^2\hbar^2\bar{c}^2\rho^2\right]^{3/2}}\,\theta\left\{e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho}\left[\rho^3 + \frac{3\theta}{\hbar\bar{c}}\rho^2 + \frac{6\theta^2}{\hbar^2\bar{c}^2} + \frac{6\theta^3}{\hbar^3\bar{c}^3}\right] - \right.$$

$$\left. - e^{-\frac{\theta_D}{2\pi\theta}}\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar\bar{c}}\right)^3 + \frac{3\theta_D^2}{4\pi^2\hbar^3\bar{c}^3}\theta + \frac{3\theta_D}{2\pi\hbar^3\bar{c}^3}\theta^2 + \frac{6\theta^3}{\hbar^3\bar{c}^3}\right]\right\} \tag{III.1.17}$$

$$U = \frac{16\sqrt{2}N\pi^4\hbar^3\bar{c}^3}{[\theta_D^2 - 4\pi^2\hbar^2\bar{c}^2\rho^2]^{3/2}}\ \theta\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar\bar{c}}\right)^3 - \rho^3\right] \qquad \text{(III.1.18)}$$

Odgovarajuće specifične toplote na niskim i visokim temperaturama, respektivno, su

$$c = \frac{48\sqrt{2}\,N\pi^4\hbar^3c^3k_Б}{[\theta^2 - 4\pi^2\hbar^2\bar{c}^2\rho^2]^{3/2}}\left\{e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho}\left[\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho^4 + 4\rho^3 + \frac{12\theta}{\hbar\bar{c}}\rho^2 + \frac{24\theta^2}{\hbar^2\bar{c}^2}\rho + \frac{24\theta^3}{\hbar^3\bar{c}^3}\right] - \right.$$

$$\left. - e^{-\frac{\theta_D}{2\pi\theta}}\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar\bar{c}}\right)^4\frac{\hbar\bar{c}}{\theta} + 4\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar\bar{c}}\right)^3 + \frac{3\theta_D^2}{\pi^2\hbar^3\bar{c}^3}\theta + \frac{12\theta_D}{\pi\hbar^3\bar{c}^3}\theta^2 + \frac{24\theta^3}{\hbar^3\bar{c}^3}\right]\right\} \qquad \text{(III.1.19)}$$

i

$$c = \frac{16\sqrt{2}\,N\,\pi^4\hbar^3\bar{c}^3k_Б}{[\theta_D^2 - 4\pi^2\hbar^2\bar{c}^2\rho^2]^{3/2}}\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\hbar\bar{c}}\right)^3 - \rho^3\right] \qquad \text{(III.1.20)}$$

Izrazi za unutrašnju energiju i specifičnu toplotu filma, kada u njemu postoje samo površinska stanja, ne zavise od debljine filma, kao što je to slučaj kod zapreminskih fonona.

Sledi da se izračuna srednja fononska energija, koja sa svoje strane takodje, na izvestan način karakteriše fononski sistem u filmu. U slučaju zapreminskih fononskih stanja može se napisati da je srednja fononska energija na niskim temperaturama

$$\bar{\varepsilon}_Z = \frac{\frac{N(N_Z+1)a^3}{(2\pi)^3}4\pi\int_0^{q_{max}}\hbar c\sqrt{q^2+q_0^2}\;q\sqrt{q^2+q_0^2}\;e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+q_0^2}}\,dq}{\frac{N(N_Z+1)a^3}{(2\pi)^3}4\pi\int_0^{q_{max}}q\sqrt{q^2+q_0^2}\;e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+q_0^2}}\,dq} \qquad \text{(III.1.21)}$$

Posle izračunavanja odgovarajućih integrala ovaj izraz konačno dobija oblik

$$\bar{\varepsilon}_Z = \theta\left\{e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{1}{a}\arccos\frac{\lambda_0'}{\lambda}}\left[\left(\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{1}{a}\arccos\frac{\lambda_0'}{\lambda}\right)^3 + 3\left(\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{1}{a}\arccos\frac{\lambda_0'}{\lambda}\right)^2 + \right.\right.$$

$$+ 6\frac{\hbar c}{\theta}\frac{1}{a}\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda} + 6\Bigg] - e^{-\frac{\theta_D}{2\pi\theta}}\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\theta}\right)^3 + 3\left(\frac{\theta_D}{2\pi\theta}\right)^2 + 6\frac{\theta_D}{2\pi\theta} + 6\right]\Bigg\} \cdot$$

$$\cdot \Bigg\{ e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{1}{a}\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}}\left[\left(\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{1}{a}\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda}\right)^2 + 2\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{1}{a}\arccos\frac{\lambda_o'}{\lambda} + 2\right] -$$

$$- e^{-\frac{\theta_D}{2\pi\theta}}\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\theta}\right)^2 + 2\left(\frac{\theta_D}{2\pi\theta}\right) + 2\right]\Bigg\}^{-1} \tag{III.1.22}$$

U slučaju površinskih fononskih stanja koristi se aproksimacija kao kod izračunavanja unutrašnje energije, tj. da su sve fononske ekscitacije ove vrste koncentrisane na površini filma. U ovom slučaju se, zbog toga, srednja fononska energija na niskim temperaturama traži u obliku

$$\bar{\varepsilon}_{\Pi} = \frac{\frac{2N\,a^3}{(2\pi)^3}4\pi\int_0^{q_{max}} \hbar c\sqrt{q^2+\rho^2}\; q\sqrt{q^2+\rho^2}\; e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+\rho^2}}\,dq}{\frac{2N\,a^3}{(2\pi)^3}4\pi\int_0^{q_{max}} q\sqrt{q^2+\rho^2}\; e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{q^2+\rho^2}}\,dq} \tag{III.1.23}$$

koja se nakon izračunavanja odgovarajućih izraza, konačno dobija u obliku

$$\bar{\varepsilon}_{\Pi} = \theta\Bigg\{ e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho}\left[\left(\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho\right)^3 + 3\left(\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho\right)^2 + 6\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho + 6\right] - e^{-\frac{\theta_D}{2\pi\theta}}\Bigg[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\theta}\right)^3 +$$

$$+ 3\left(\frac{\theta_D}{2\pi\theta}\right)^2 + 6\frac{\theta_D}{2\pi\theta} + 6\Bigg]\Bigg\}\Bigg\{ e^{-\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho}\left[\left(\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho\right)^2 + 2\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\rho + 2\right] -$$

$$- e^{-\frac{\theta_D}{2\pi\theta}}\left[\left(\frac{\theta_D}{2\pi\theta}\right)^2 + 2\left(\frac{\theta_D}{2\pi\theta}\right) + 2\right]\Bigg\}^{-1} \tag{III.1.24}$$

Analizirajući izraze za specifičnu toplotu filma, može se zaključiti da ona sa sniženjem temperature brže opada nego u idealnoj strukturi. Dok specifična toplota teži nuli kao θ^3 za idealnu strukturu, u filmu postoji zavisnost oblika (dominantni član u formuli kada $\theta \to 0$)

$$c \sim \frac{1}{\theta} e^{-\frac{const}{\theta}}$$

Ovo važi kako za zapreminska tako i za površinska fononska stanja. Iz ovog se može zaključiti da je zagrevanje filma relativno teže nego zagrevanje idealne trodimenzione strukture. Sa tačke gledišta uticaja temperature na superprovodne osobine filma ovo može da bude povoljna okolnost, jer bi do razaranja Kuperovskog para dolazilo na višim temperaturama nego u idealnoj strukturi. Slični se zaključci mogu izvesti analizirajući izraz za srednju fononsku energiju filma na niskim temperaturama.

3.2 *Elektronska stanja u tankim filmovima*

Hamiltonijan sistema valentnih elektrona u metalu (idealan kristal) ima oblik [9]

$$H = \sum_{\vec{k}k_z} \varepsilon(\vec{k}k_z) a^+_{\vec{k}k_z} a_{\vec{k}k_z} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z, \vec{m}m_z}{}' V_{\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z} a^+_{\vec{n}n_z} a_{\vec{m}m_z} \tag{III.2.1}$$

gde je $\varepsilon(\vec{k}k_z)$ energija slobodnih elektrona, $a_{\vec{k}k_z}$, odnosno $a_{\vec{n}n_z}$ Fermi operatori, $\vec{k}$ dvodimenzioni talasni vektor elektrona i $V_{\vec{n}-\vec{m}, n_z-m_z}$ potencijal rešetke (potencijal koji sačinjavaju sva jezgra i svi elektroni izuzev posmatranog) koji je privlačan.

Furije-transformacijom operatora

$$a_{\vec{k}k_z} = \frac{1}{\sqrt{NN_z}} \sum_{\vec{n}n_z} a_{\vec{n}n_z} e^{-i\vec{k}\vec{n}a - ik_z n_z a}$$

hamiltonijan (III.2.1) prevodi se u konfiguracioni prostor na oblik

$$H = \Delta \sum_{\vec{n}n_z} a^+_{\vec{n}n_z} a_{\vec{n}n_z} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z}{}' W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} a^+_{\vec{n}n_z} a_{\vec{m}m_z} \qquad \text{(III.2.2)}$$

gde je

$$\Delta = \frac{1}{NN_z} \sum_{\vec{k}k_z} \varepsilon(\vec{k}k_z)$$

$$W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} = V_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} + \frac{2}{NN_z} \sum_{\vec{k}k_z} \varepsilon(\vec{k}k_z)\, e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m}) + ik_z(n_z-m_z)a}$$

pri čemu je $W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$ parna funkcija. Za tanak metalni film, tj. za kristal koji ima idealnu translacionu simetriju u XOY ravni, a u pravcu z-ose konačnu debljinu, takvu da se jedinica ne sme zanemariti u odnosu na N_z, očigledno je da se elektron na površini kreće u plićoj jami potencijala rešetke u odnosu na elektron u zapremini. Znači može se napisati da se elektron na površini filma kreće u polju potencijala

$$-|V_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}| + V'_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}\,; \text{ pri čemu je } V'_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} > 0\,.$$

S druge strane, čestica koja se kreće u plićoj i široj jami (kakav je površinski elektron) ima manju kinetičku energiju, što je očigledno na osnovu Hajzenbergovih relacija neodredjenosti

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant h;$$

odakle sledi da ukoliko je Δx veće (šira jama), Δp je manje (manja kinetička energija). Ovaj se zaključak može izvesti i strožije rešavanjem problema sferne jame. Prema tome, kinetička energija površinskog elektrona može se napisati u obliku

$\varepsilon(\vec{k}k_z) - \delta\varepsilon(\vec{k}k_z)$ gde je $\delta\varepsilon(\vec{k}k_z) > 0$.

Iz ovih elementarnih razmatranja sledi da su promene veličina Δ i $V_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$ istog reda veličine [10] i suprotnog znaka, tako da veličina $W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$, za relativno male talasne vektore, ostaje praktično nepromenjena za površinske elektrone. Prema tome, u ovoj aproksimaciji, za površinske elektrone u hamiltonijanu (III.2.2) menja se samo veličina Δ; tako da za ove elektrone ona prelazi u $\Delta+\Delta'$, pri čemu je $\Delta' > 0$.

S obzirom na prethodnu analizu, hamiltonijan dat sa (III.2.2) za tanak metalni film u aproksimaciji najbližih suseda može se napisati u obliku

$$H = (\Delta+\Delta')\sum_{\vec{n}}\left(a^+_{\vec{n}0}a_{\vec{n}0} + a^+_{\vec{n}N_z}a_{\vec{n}N_z}\right) + \Delta\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} a^+_{\vec{n}n_z}a_{\vec{n}n_z} +$$
$$+ \frac{1}{2}W\sum_{\vec{\nu},\vec{n}}\left(a^+_{\vec{n}0}a_{\vec{\nu}+\vec{n}0} + a^+_{\vec{n}N_z}a_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}\right) + \frac{1}{2}W\sum_{\vec{n}}\left(a^+_{\vec{n}0}a_{\vec{n}1} + a^+_{\vec{n}N_z}a_{\vec{n}N_z-1}\right) +$$
$$+ \frac{1}{2}W\sum_{\vec{\nu},\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} a^+_{\vec{n}n_z}a_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} + \frac{1}{2}W\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1} a^+_{\vec{n}n_z}\left(a_{\vec{n}n_z-1} + a_{\vec{n}n_z+1}\right) \tag{III.2.3}$$

gde je W veličina $W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$ u aproksimaciji najbližih suseda. Ovaj se hamiltonijan dijagonalizuje kanoničnom transformacijom

$$a_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{k}k_z} U^{\vec{k}k_z}_{\vec{n}n_z}\, e^{-i\frac{E(\vec{k}k_z)}{\hbar}t}\, a_{\vec{k}k_z} \tag{III.2.4}$$

pri čemu se funkcije $U^{\vec{k}k_z}_{\vec{n}n_z}$ odredjuju tako da Hajzenbergove jednačine kretanja za operatore $a_{\vec{n}n_z}$ budu zadovoljene, tj. da bude zadovoljen sledeći sistem diferencijalno-diferencnih jednačina i to za

$n_z \in [1, N_z - 1]$

$$i\hbar \dot{a}_{\vec{n}n_z} = \Delta a_{\vec{n}n_z} + \frac{1}{2} W \sum_{\vec{\nu}} a_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z} + \frac{1}{2} W \left(a_{\vec{n}n_z-1} + a_{\vec{n}n_z-1} \right)$$

za $n_z = 0$

$$i\hbar \dot{a}_{\vec{n}0} = \Delta a_{\vec{n}0} + \frac{1}{2} W \sum_{\vec{\nu}} a_{\vec{\nu}+\vec{n}0} + \frac{1}{2} W \left(a_{\vec{n}1} + a_{\vec{n}-1} \right) - \frac{1}{2} W a_{\vec{n}-1} + \Delta' a_{\vec{n}0}$$

za $n_z = N_z$

$$i\hbar \dot{a}_{\vec{n}N_z} = \Delta a_{\vec{n}N_z} + \frac{1}{2} W \sum_{\vec{\nu}} a_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z} + \frac{1}{2} W \left(a_{\vec{n}N_z-1} + a_{\vec{n}N_z+1} \right) -$$

$$- \frac{1}{2} W a_{\vec{n}N_z+1} + \Delta' a_{\vec{n}N_z} \qquad \text{(III.2.5)}$$

Korišćenjem transformacije (III.2.4), sistem (III.2.5) prelazi u sistem diferencnih jednačina po nepoznatim funkcijama $U_{\vec{n}n_z}^{\vec{k}k_z}$ i to

za $n_z \in [1, N_z - 1]$

$$\left[E(\vec{k}k_z) - \Delta \right] U_{\vec{n}n_z}^{\vec{k}k_z} - \frac{1}{2} W \sum_{\vec{\nu}} U_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}^{\vec{k}k_z} - \frac{1}{2} W \left(U_{\vec{n}n_z-1}^{\vec{k}k_z} + U_{\vec{n}n_z+1}^{\vec{k}k_z} \right) = 0$$

za $n_z = 0$

$$\left[E(\vec{k}k_z) - \Delta \right] U_{\vec{n}0}^{\vec{k}k_z} - \frac{1}{2} W \sum_{\vec{\nu}} U_{\vec{\nu}+\vec{n}0}^{\vec{k}k_z} - \frac{1}{2} W \left(U_{\vec{n}1}^{\vec{k}k_z} + U_{\vec{n}-1}^{\vec{k}k_z} \right) =$$

$$= \Delta\, U_{\vec{n}}^{\vec{k}k_z} - \frac{1}{2} W U_{\vec{n}-1}^{\vec{k}k_z}$$

za $n_z = N_z$

$$\left[E(\vec{k}k_z) - \Delta \right] U_{\vec{n}N_z}^{\vec{k}k_z} - \frac{1}{2} W \sum_{\vec{\nu}} U_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}^{\vec{k}k_z} - \frac{1}{2} W \left(U_{\vec{n}N_z-1}^{\vec{k}k_z} + U_{\vec{n}N_z+1}^{\vec{k}k_z} \right) =$$

$$= \Delta' U_{\vec{n}N_z}^{\vec{k}k_z} - \frac{1}{2} W U_{\vec{n}N_z+1}^{\vec{k}k_z} \qquad \text{(III.2.6)}$$

Ovaj sistem diferencnih jednačina dopušta dva tipa rešenja. Naime, prvi tip rešenja ima oblik

$$U_{\vec{n}n_z}^{\vec{k}k_o} = A_{\vec{k}k_o} e^{i\vec{k}\vec{n}a} \cos k_o n_z a \qquad \text{(III.2.7)}$$

ukoliko važi zakon disperzije oblika

$$E(\vec{k}k_o) = \Delta + W(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \qquad \text{(III.2.8)}$$

Drugi tip rešenja ima oblik

$$U_{\vec{n}n_z}^{\vec{k}i\eta} = C_{\vec{k}i\eta} e^{i\vec{k}\vec{n}a}\left[e^{-\eta n_z a} + e^{-\eta(N_z-n_z)a}\right]; \quad \eta > 0 \qquad \text{(III.2.9)}$$

pri čemu važi zakon disperzije oblika

$$E(\vec{k}i\eta) = \Delta + W(\cos k_x a + \cos k_y a + ch\,\eta a) \qquad \text{(III.2.10)}$$

Konstante η i k_o odredjuju se iz jednačina

$$\frac{2\Delta'}{W} = \frac{e^{\eta a} + e^{-\eta(N_z+1)a}}{1 + e^{-\eta N_z a}} \simeq e^{\eta a} \qquad \text{(III.2.11)}$$

$$\cos k_o a = \frac{2\Delta'}{W} \qquad \text{(III.2.12)}$$

Konačno, elektronska stanja u tankom filmu koja odgovaraju rešenjima (III.2.7) i (III.2.9), su

$$a_{\vec{n}n_z} = \sqrt{\frac{2}{N(N_z+2)}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}a} \cos k_o n_z a \; a_{\vec{k}k_o} \qquad \text{(III.2.13)}$$

$$a_{\vec{n}n_z} = \sqrt{\frac{1 - e^{-2\eta}}{N_x N_y}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}a}\left[e^{-\eta n_z a} + e^{-\eta(N_z-n_z)a}\right] a_{\vec{k}i\eta} \qquad \text{(III.2.14)}$$

pri čemu ove transformacije dijagonalizuju hamiltonijan (III.2.3), tj.

$$H = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}k_o)\, a^{+}_{\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} \qquad \text{(III.2.15)}$$

i

$$H = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}i\eta)\, a^{+}_{\vec{k}i\eta} a_{\vec{k}i\eta} \qquad \text{(III.2.16)}$$

Elektronska stanja opisana funkcijama (III.2.13) u daljem se tekstu nazivaju zapreminska stanja, budući da je njihova koncentracija periodična funkcija čvora rešetke, a elektronska stanja opisana funkcijama (III.2.14) nazivaju se površinskim stanjima, jer je njihova koncentracija maksimalna na površini filma i eksponencijalno opada sa porastom dubine.

Analizom uslova (III.2.11) i (III.2.12) dolazi se do zaključka da u filmu, pod navedenim uslovima, postoje ili samo zapreminski ili samo površinski elektronski talasi, tj. ukoliko je $|2\Delta'| < |W|$ egzistiraju samo zapreminski, a ukoliko je $|2\Delta'| > |W|$, samo površinski elektronski talasi.

3.3 *Elektron-fonon interakcija i superkonduktivnost u tankim filmovima*

Hamiltonijan sistema elektrona u idealnom kristalu dat je izrazom (vidi drugi paragraf ove glave)

$$H = \Delta \sum_{\vec{n}n_z} a^+_{\vec{n}n_z} a_{\vec{n}n_z} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z}{}' W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} a^+_{\vec{n}n_z} a_{\vec{m}m_z} \qquad \text{(III.3.1)}$$

Na temperaturama različitim od nule čvorovi rešetke izvode toplotne vibracije, što dovodi do promene veličine $W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$. Pri izvodjenju hamiltonijana elektron-fonon interakcije posmatra se zato samo efektivni deo izraza (III.3.1), tj.

$$H_{ef} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z}{}' W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} a^+_{\vec{n}n_z} a_{\vec{m}m_z} \qquad \text{(III.3.2)}$$

Kako čvorovi rešetke izvode toplotne vibracije, može se uzeti da se u proizvoljnom trenutku vremena čvor $(\vec{n}n_z)$ nalazi na mestu $(\vec{n}n_z) + \xi_{\vec{n}n_z}$ a čvor $(\vec{m}m_z)$ na mestu $(\vec{m}m_z) + \xi_{\vec{m}m_z}$; gde su $\xi_{\vec{n}n_z}$ i $\xi_{\vec{m}m_z}$ odgovarajući fononski pomaci u odnosu na ravnotežne položaje čvorova $(\vec{n}n_z)$ odnosno $(\vec{m}m_z)$.

Prelaskom u impulsni prostor Furije-transformacijom veličina

$$W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z} = \frac{1}{NN_z} \sum_{\vec{k}k_z} W_{\vec{k}k_z} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})a + ik_z(n_z-m_z)a} \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \frac{1}{NN_z} \sum_{\vec{k}k_z} W_{\vec{k}k_z}\left[1+i(\vec{k}+k_z\vec{e}_z)\left(\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} - \vec{\xi}_{\vec{m}m_z}\right)\right] e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})a + ik_z(n_z-m_z)a} ;$$

$$a_{\vec{n}n_z} = \frac{1}{\sqrt{NN_z}} \sum_{\vec{k}k_z} e^{i\vec{k}\vec{n}a + ik_z n_z a} a_{\vec{k}k_z}$$

i

$$\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q}q_z,\ell} \sqrt{\frac{\hbar}{2NN_z M\omega_\ell(\vec{q}q_z)}}\, \vec{e}_\ell(\vec{q}q_z) e^{i\vec{n}\vec{q}a + in_z q_z a}\left(b_{\vec{q}q_z,\ell} + b^+_{-\vec{q}-q_z,\ell}\right)$$

efektivni hamiltonijan sistema elektron-fonon interakcije dobija oblik

$$H_{e,\Phi} = \frac{i}{2} \sum_{\vec{k}k_z,\vec{q}q_z,\ell} W_{\vec{k}k_z} \sqrt{\frac{\hbar}{2NN_z M\omega_\ell(\vec{q}q_z)}}\, \vec{e}_\ell(\vec{q}q_z)(\vec{k}+k_z\vec{e}_z)\cdot$$

$$\cdot\left(a^+_{\vec{k}+\vec{q},k_z+q_z} a_{\vec{k}k_z} - a^+_{\vec{k}k_z} a_{\vec{k}-\vec{q},k_z-q_z}\right)\left(b_{\vec{q}q_z,\ell} b^+_{-\vec{q}-q_z,\ell}\right) \qquad \text{(III.3.3)}$$

pri čemu se multifononski procesi ne uzimaju u obzir.

Ovaj se hamitonijan pomoću inverzne Furije-transformacije veličina

$$W_{\vec{k}k_z} = \sum_{\vec{n}n_z} W_{\vec{n}n_z} e^{i\vec{k}\vec{n}a + ik_z n_z a} ; \quad a_{\vec{k}k_z} = \frac{1}{\sqrt{NN_z}} \sum_{\vec{n}n_z} e^{-i\vec{k}\vec{n}a - ik_z n_z a} a_{\vec{n}n_z} ;$$

$$(\vec{k}+k_z\vec{e}_z) a_{\vec{k}k_z} = -\frac{i}{\sqrt{NN_z}} \sum_{\vec{n}n_z} e^{-i\vec{k}\vec{n}a - ik_z n_z a} \left(\nabla_{\vec{n}n_z} a_{\vec{n}n_z}\right)$$

i

$$\sum_\ell \sqrt{\frac{\hbar}{2NN_z M\omega_\ell(\vec{q}q_z)}}\, \vec{e}_\ell(\vec{q}q_z)\left(b_{\vec{q}q_z,\ell} + b^+_{-\vec{q}-q_z,\ell}\right) =$$

$$= \frac{1}{NN_z} \sum_{\vec{n}n_z} e^{-i\vec{n}\vec{q}a - in_z q_z a} \vec{\xi}_{\vec{n}n_z} ,$$

može prevesti u konfiguracioni prostor u obliku

$$H_{e,\Phi}=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}n_z,\vec{m}m_z} W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}\left[\vec{\xi}_{\vec{n}n_z}a^+_{\vec{n}n_z}\left(\nabla_{\vec{m}m_z}a_{\vec{m}m_z}\right)+\vec{\xi}_{\vec{m}m_z}\left(\nabla_{\vec{n}n_z}a^+_{\vec{n}n_z}\right)a_{\vec{m}m_z}\right] \tag{III.3.4}$$

gde je $\vec{e}_z$ ort z-ose i $\nabla_{\vec{n}n_z}$ Hamiltonov operator.

Za tanak metalni film koji je razmatran u drugom paragrafu ove glave, uzimajući da se veličina $W_{\vec{n}-\vec{m},n_z-m_z}$ ne menja za elektrone na površini, hamiltonijan elektron-fonon interakcije u aproksimaciji najbližih suseda ima oblik

$$\begin{aligned}
H_{e,\Phi}=&\frac{1}{2}W\sum_{\vec{\nu},\vec{n}}\left[\vec{\xi}_{\vec{n}0}a^+_{\vec{n}0}\left(\nabla_{\vec{\nu}+\vec{n}0}a_{\vec{\nu}+\vec{n}0}\right)+\vec{\xi}_{\vec{\nu}+\vec{n}0}\left(\nabla_{\vec{n}0}a^+_{\vec{n}0}\right)a_{\vec{\nu}+\vec{n}0}\right]+\\
&+\frac{1}{2}W\sum_{\vec{n}}\left[\vec{\xi}_{\vec{n}0}a^+_{\vec{n}0}\left(\nabla_{\vec{n}1}a_{\vec{n}1}\right)+\vec{\xi}_{\vec{n}1}\left(\nabla_{\vec{n}0}a^+_{\vec{n}0}\right)a_{\vec{n}1}\right]+\\
&+\frac{1}{2}W\sum_{\vec{\nu},\vec{n}}\left[\vec{\xi}_{\vec{n}N_z}a^+_{\vec{n}N_z}\left(\nabla_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}a_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}\right)+\vec{\xi}_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}\left(\nabla_{\vec{n}N_z}a^+_{\vec{n}N_z}\right)a_{\vec{\nu}+\vec{n}N_z}\right]+\\
&+\frac{1}{2}W\sum_{\vec{n}}\left[\vec{\xi}_{\vec{n}N_z}a^+_{\vec{n}N_z}\left(\nabla_{\vec{n}N_z-1}a_{\vec{n}N_z-1}\right)+\vec{\xi}_{\vec{n}N_z-1}\left(\nabla_{\vec{n}N_z}a^+_{\vec{n}N_z}\right)a_{\vec{n}N_z-1}\right]+\\
&+\frac{1}{2}W\sum_{\vec{\nu},\vec{n}n_z=1}\left[\vec{\xi}_{\vec{n}n_z}a^+_{\vec{n}n_z}\left(\nabla_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}a_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}\right)+\vec{\xi}_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}\left(\nabla_{\vec{n}n_z}a^+_{\vec{n}n_z}\right)a_{\vec{\nu}+\vec{n}n_z}\right]+\\
&+\frac{1}{2}W\sum_{\vec{n}n_z=1}^{N_z-1}\left[\vec{\xi}_{\vec{n}n_z}a^+_{\vec{n}n_z}\left(\nabla_{\vec{n}n_z+1}a_{\vec{n}n_z+1}\right)+\vec{\xi}_{\vec{n}n_z+1}\left(\nabla_{\vec{n}n_z}a^+_{\vec{n}n_z}\right)a_{\vec{n}n_z+1}+\right.\\
&\left.+\vec{\xi}_{\vec{n}n_z}a^+_{\vec{n}n_z}\left(\nabla_{\vec{n}n_z-1}a_{\vec{n}n_z-1}\right)+\vec{\xi}_{\vec{n}n_z-1}\left(\nabla_{\vec{n}n_z}a^+_{\vec{n}n_z}\right)a_{\vec{n}n_z-1}\right]
\end{aligned} \tag{III.3.5}$$

Budući da u filmu mogu postojati ili samo zapreminska ili samo površinska fononska odnosno elektronska stanja, moguće su različite kombinacije elektron-fonon interakcije. Ovde se analiziraju dva tipa interakcije, tj. interakcija zapreminskih elektronskih talasa sa zapreminskim fononima i interakcija površinskih elektronskih talasa sa površinskim fononima.

Posle Furije-transformacije veličina

$$\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{N(N_z+2)M\omega(\vec{q}q_o)}} \frac{\vec{q}+q_o\vec{e}_z}{(q^2+q_o^2)^{3/2}} \cos n_z q_o a\, e^{i\vec{n}\vec{q}a} \left(b_{\vec{q}q_o} + b^+_{-\vec{q}q_o}\right);$$

$$a_{\vec{n}n_z} = \sqrt{\frac{2}{N(N_z+2)}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}a} \cos n_z k_o a\, a_{\vec{k}k_o}$$

i

$$\nabla_{\vec{n}n_z} a_{\vec{n}n_z} = \sqrt{\frac{2}{N(N_z+2)}} \sum_{\vec{k}} (i\vec{k}\cos n_z k_o a - k_o\vec{e}_z \sin n_z k_o a) e^{i\vec{k}\vec{n}a}\, a_{\vec{k}k_z}$$

hamiltonijan interakcije zapreminskih elektronskih talasa sa zapreminskim fononima u impulsnom prostoru ima oblik

$$H^Z_{e,\Phi} = \frac{1}{N^{1/2}(N_z+2)^{3/2}} \sum_{\vec{k},\vec{q}} \Phi^Z(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)\left(b_{\vec{q}q_o} + b^+_{-\vec{q}q_o}\right) a^+_{\vec{k}+\vec{q}k_o} a_{\vec{k}k_o} \tag{III.3.6}$$

gde je

$$\Phi^Z(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o) = W\sqrt{\frac{\hbar}{M\omega(\vec{q}q_o)}} \frac{\vec{q}+q_o\vec{e}_z}{(q^2+q_o^2)^{1/2}} \left\{ i\left[1+(-1)^{\nu_o}\right]\left[\vec{k}A(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o) + \vec{q}B(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o)\right] - k_o\vec{e}_z\left[1-(-1)^{\nu_o}\right]C(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o)\right\} \tag{III.3.7}$$

$$A(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o) = \frac{7}{4}\left[\cos k_x a + \cos k_y a - \cos(k_x+q_x)a - \cos(k_y+q_y)a\right] + \frac{3}{4}\cos k_o a + \cos q_o a\left(\frac{1}{4}\cos k_o a - 1\right);$$

$$B(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o) = \frac{1}{4}\cos q_o a \cos k_o a - \frac{7}{4}\left[\cos(k_x+q_x)a + \cos(k_y+q_y)a\right] - \cos q_o a;$$

$$C(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o) = \sin k_o a + \frac{1}{4}\left[\frac{\sin(2k_o+q_o)a}{1-\cos(2k_o+q_o)a} + \frac{\sin(2k_o-q_o)a}{1-\cos(2k_o-q_o)a}\right]\left[\cos k_x a + \cos k_y a + \cos(k_x+q_x)a + \cos(k_y+q_y)a + \cos k_o a(1+\cos q_o a) - \sin q_o a \sin k_o a\right] + \frac{\sin^2 q_o a \sin k_o a}{2(1-\cos k_o a)}$$

i

$$\nu_o = \frac{N_z}{\pi}\, arccos\frac{\lambda'_o}{\lambda} \quad \text{(prirodan broj)}$$

Na sličan način, posle Furije-transformacije veličina

$$\vec{\xi}_{\vec{n}n_z} = \sum_{\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega(\vec{q}\,i\rho)}}\; \frac{\vec{q}+i\rho\vec{e}_z}{(q^2+\rho^2)^{1/2}} \left[e^{-\rho n_z a} + e^{-\rho(N_z-n_z)a}\right] \cdot$$

$$\cdot\; e^{i\vec{q}\vec{n}a}\left(b_{\vec{q}\,i\rho} + b^+_{-\vec{q}\,i\rho}\right);$$

$$a_{\vec{n}n_z} = \sqrt{\frac{1-e^{-2\eta a}}{N}}\; \sum_{\vec{k}} \left[e^{-\eta n_z a} + e^{-\eta(N_z-n_z)a}\right] e^{i\vec{k}\vec{n}a}\, a_{\vec{k}\,i\eta}$$

i

$$\nabla_{\vec{n}n_z} a_{\vec{n}n_z} = \sqrt{\frac{1-e^{-2\eta a}}{N}}\; \sum_{\vec{k}} \left\{ i\vec{k}\left[e^{-\eta n_z a} + e^{-\eta(N_z-n_z)a}\right] - \right.$$

$$\left. -\eta\vec{e}_z\left[e^{-\eta n_z a} + e^{-\eta(N_z-n_z)a}\right]\right\} e^{i\vec{k}\vec{n}a}\, a_{\vec{k}\,i\eta} \qquad \text{(III.3.8)}$$

hamiltonijan interakcije površinskih elektronskih talasa sa površinskim fononima u ipmulsnom prostoru ima oblik

$$H^{\Pi}_{e,\Phi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k},\vec{q}} \Phi^{\Pi}(\vec{k},\vec{q},i\eta,i\rho)\left(b_{\vec{q}\,i\rho} + b^+_{-\vec{q}\,i\rho}\right) a^+_{\vec{k}+\vec{q}\,i\eta}\, a_{\vec{k}\,i\eta} \qquad \text{(III.3.9)}$$

gde je

$$\Phi^{\Pi}(\vec{k},\vec{q},i\eta,i\rho) = W\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\vec{q}\,i\rho)}}\; \frac{\vec{q}+i\rho\vec{e}_z}{(q^2+\rho^2)^{1/2}}\; \frac{1+e^{-(2\eta+\rho)a}}{1+e^{-(2\eta+\rho)a}} \left\{ i\vec{k}\left[cos\, k_x a + \right.\right.$$

$$\left. + cos\, k_y a - cos(k_x+q_x)a - cos(k_y+q_y)a - 1 + e^{-\eta a}\right] + i\vec{q}\left[e^{-\eta a} + e^{-(\eta+\rho)a} + \right.$$

$$\left.\left. + e^{-(3\eta+2\rho)a} - cos(k_x+q_x)a - cos(k_y+q_y)a\right]\right\} \qquad \text{(III.3.10)}$$

pri čemu su u ovom izrazu zanemareni članovi koji su proporcionalni $e^{-(N_z-3)\eta a}$, odnosno $e^{-(N_z-3)\rho a}$ i manji.

Izrazi za fononske pomeraje u slučajevima zapreminskih i površinskih fonona napisani su samo za longitudinalnu granu, s obzirom da je interakcija transverzalnih fonona sa elektronima zanemarljiva u odnosu na interakciju longitudinalnih fonona sa elektronima [9].

Uzimajući u obzir ove specifičnosti elektronskog, odnosno fononskog sistema i njihove interakcije u tankom filmu, od interesa je da se razmotri koje su mogućnosti za realizaciju superkonduktivnog stanja, u sklopu učinjenih aproksimacija, u ovim strukturama.

Hamiltonijan sistema zapreminskih elektronskih talasa i zapreminskih fonona u tankom filmu ima oblik

$$H = H_e + H_\Phi + H_{e,\Phi} \tag{III.3.11}$$

gde je

$$H_e = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}k_o)\, a^+_{\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o}$$

$$H_\Phi = \sum_{\vec{q},\ell} \hbar\omega_\ell(\vec{q}q_o)\left[\frac{1}{2} + b^+_{\vec{q}q_o,\ell} b_{\vec{q}q_o,\ell}\right]$$

$$H_{e,\Phi} = \frac{1}{\sqrt{N(N_z+2)^3}} \sum_{\vec{k},\vec{q}} \Phi^{ZZ}(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o)\left(b_{\vec{q}q_o} + b^+_{-\vec{q}q_o}\right) a^+_{\vec{q}+\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o}$$

Za ocenu uloge elektron-fonon interakcije u fenomenu superkonduktivnog stanja biće izvršena poznata Frelihova transformacija [11] operatora energije (III.1.11) u cilju eliminisanja što većeg dela operatora interakcije. Ovo se može uraditi primenom jedne unitarne transformacije, kada se dobija

$$H_{eq} = e^{-S} H e^{S} \simeq H - [S,H] + \frac{1}{2}\left[S,[S,H]\right] \tag{III.3.12}$$

pri čemu se funkcija S bira u obliku

$$S = \sum_{\vec{k},\vec{q}} \left[X(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)\, a^{+}_{\vec{q}+\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} b_{\vec{q}q_o} - \textit{kompl. konjug.} \right] \tag{III.3.13}$$

gde je $X(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)$ nepoznata funkcija i po pretpostavci mala, tako da je razvoj (III.3.12) moguć. Komutatori iz (III.3.12) su

$$[S,H] \approx \sum_{\vec{k},\vec{q}} X(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)\Big[E(\vec{k}k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}k_o) + \hbar\omega(\vec{q}q_o)\Big] a^{+}_{\vec{q}+\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} b^{+}_{\vec{q}q_o} + \textit{kompl. konjug.} \tag{III.3.14}$$

i

$$\Big[S,[S,H]\Big] \approx \sum_{\vec{k},\vec{k}_1,\vec{q}} X^{*}(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o) X(\vec{k}_1,\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)\Big[E(\vec{k}_1 k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}_1 k_o) + \hbar\omega(\vec{q}q_o)\Big] a^{+}_{\vec{q}+\vec{k}_1 k_o} a_{\vec{k}_1 k_o} a^{+}_{\vec{k}k_o} a_{\vec{q}+\vec{k}k_o} + \textit{kompl. konjug.} \tag{III.3.15}$$

U ovim su komutatorima zanemareni članovi proporcionalni proizvodima operatora bb, $b^{+}b^{+}$ i $b^{+}b$, tj. izvršeno je ograničenje samo na procese spontane emisije fonona.

Ekvivalentni hamiltonijan (III.3.12) posle usrednjavanja po fononskom vakuumu ima oblik

$$\begin{aligned} \langle 0_\Phi | H_{eq} | 0_\Phi \rangle = H' = & \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}k_o) a^{+}_{\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} + \sum_{\vec{k},\vec{q}} \Big\{ \Phi^{Z}(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o) - \\ & - X^{*}(\vec{q}+\vec{k},-\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)\Big[E(\vec{q}+\vec{k}k_o) - E(\vec{k}k_o) + \hbar\omega(-\vec{q}q_o)\Big]\Big\} a^{+}_{\vec{q}+\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} + \\ & + \sum_{\vec{k},\vec{q},\vec{k}_1} X(\vec{k}_1,\vec{q},k_o,q_o,\nu_o) X^{*}(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)\Big[E(\vec{k}_1 k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}_1 k_o) + \\ & + \hbar\omega(\vec{q}q_o)\Big] a^{+}_{\vec{q}+\vec{k}_1 k_o} a_{\vec{k}_1 k_o} a^{+}_{\vec{k}k_o} a_{\vec{q}+\vec{k}k_o} + \sum_{\vec{k},\vec{q},\vec{k}_1} X(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o) \cdot \\ & \cdot X^{*}(\vec{k}_1,\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)\Big[E(\vec{k}_1 k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}_1 k_o) + \hbar\omega(\vec{q}q_o)\Big] \cdot \\ & \cdot a^{+}_{\vec{k}_1 k_o} a_{\vec{q}+\vec{k}_1 k_o} a^{+}_{\vec{q}+\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} \end{aligned} \tag{III.3.16}$$

Funkcija $X(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)$ odredjuje se iz uslova da u hamitonijanu (III.1.16) član koji potiče od elektron fonon-interakcije bude nula. Na taj se način dobija

$$X(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o) = -\frac{\Phi^Z(\vec{q}+\vec{k},-\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)}{E(\vec{k}k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}k_o) - \hbar\omega(\vec{q}q_o)} \qquad \text{(III.3.17)}$$

Prema tome, efektivni elektron-elektron hamiltonijan ima oblik

$$H' = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}k_o) a^{+}_{\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} - \sum_{\vec{k},\vec{q}} \left\{ \frac{|\Phi^Z(\vec{q}+\vec{k},-\vec{q},k_o,q_o,\ _o)|^2}{E(\vec{k}k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}k_o) - \hbar\omega(-\vec{q}q_o)} \cdot \right.$$

$$\cdot \frac{E(\vec{k}k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}k_o) + \hbar\omega(\vec{q}q_o)}{E(\vec{k}k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}k_o) - \hbar\omega(\vec{q}q_o)} + \frac{|\Phi^Z(\vec{q}+\vec{k},-\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)|^2}{E(\vec{k}k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}k_o) - \hbar\omega(-\vec{q}q_o)} \cdot$$

$$\left. \cdot \frac{E(\vec{k}k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}k_o) + \hbar\omega(\vec{q}q_o)}{E(\vec{k}k_o) - E(\vec{q}+\vec{k}k_o) - \hbar\omega(-\vec{q}q_o)} \right\} a^{+}_{\vec{k}k_o} a^{+}_{\vec{q}+\vec{k}k_o} a_{\vec{q}+\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} \qquad \text{(III.3.18)}$$

Izdvajanjem dela efektivnog hamiltonijana za koji je $\vec{k}+\vec{q} = -\vec{k}$, konačno se, kao rezultat, dobija izraz

$$\delta H' = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}k_o) a^{+}_{\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} - 2\sum_{\vec{k},\vec{q}} \frac{|\Phi^Z(-\vec{k},-\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)|^2}{\hbar\omega(2\vec{k}q_o)} a^{+}_{\vec{k}k_o} a^{+}_{-\vec{k}k_o} a_{-\vec{k}k_o} a_{\vec{k}k_o} \qquad \text{(III.3.19)}$$

Na potpuno isti način se, kao rezultat Frelihove transformacije, dobija hamiltonijan za slučaj interakcije površinskih elektronskih talasa sa površinskim fononima

$$\delta H'' = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}i\eta) a^{+}_{\vec{k}i\eta} a_{\vec{k}i\eta} - 2\sum_{\vec{k},\vec{q}} \frac{|\Phi^{\Pi}(-\vec{k},-\vec{q},i\eta,i\rho)|^2}{\hbar\omega(2ki\rho)} a^{+}_{\vec{k}i\eta} a^{+}_{-\vec{k}i\eta} a_{-\vec{k}i\eta} a_{\vec{k}i\eta} \qquad \text{(III.3.20)}$$

Analizom izraza (III.3.19) i (III.3.20) dolazi se do zaključka da se kao rezultat Frelihove transformacije predjašnji sistem elektrona i fonona prevodi u sistem elektrona sa nekom efektivnom privlačnom interakcijom medju elektronima, koja se realizuje preko procesa virtuelne razmene fonona.

Upravo na ovom svojstvu hamiltonijana (privlačna interakcija izmedju elektrona) zasnovan je model Bardina-Kupera-Šrifera, koji se smatra vodećim modelom u oblasti problema superkonduktivnosti metala. U ovom se modelu uzima da izmedju elektrona sa suprotnim impulsima u oblasti oko granice Fermi sfere postoji privlačna sila koja ih vezuje u tzv. Kuperove parove (po Kuperu [12] koji je prvi dao proračun za energiju veze para). Dakle, kao što je poznato, elektroni sa paralelnim spinovima se odbijaju, dok se elektroni sa antiparalelnim spinovima privlače [13]. U modelu Bardina-Kupera-Šrifera uzeta je u obzir i spin-spinska interakcija elektrona sa antiparalelnim spinovima.

Na osnovu ovih pretpostavki, može se napisati modelni hamiltonijan za slučaj sistema zapreminskih elektronskih talasa i zapreminskih fonona

$$H_{BCS} = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}k_o)\left[a^+_{\vec{k}k_o}(1/2)a_{\vec{k}k_o}(1/2) + a^+_{-\vec{k}k_o}(-1/2)a_{-\vec{k}k_o}(-1/2)\right] -$$

$$- \frac{1}{N(N_z+1)} \sum_{\vec{k},\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)\, a^+_{\vec{k}k_o}(1/2)a^+_{-\vec{k}k_o}(-1/2)a_{-\vec{q}k_o}(-1/2)a_{\vec{q}k_o}(1/2) \tag{III.3.21}$$

gde je $W(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)$ po modelnoj pretpostavci, parna, pozitivna i sporo promenljiva funkcija u intervalu impulsa

$$P_F - P_G \leqslant \hbar\sqrt{k^2+k_o^2} \leqslant P_F + P_G; \quad P_F - P_G \leqslant \hbar\sqrt{q^2+q_o^2} \leqslant P_F + P_G \tag{III.3.22}$$

gde je P_G polovina debljine sloja oko Fermi sfere i P_F granični impuls Fermi sfere; uz uslov da je $P_G \ll P_F$. Van ovog intervala impulsa funkcija $W(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)$ je ravna nuli.

Za analizu energijskog spektra hamiltonijana (III.3.21) biće primenjen metod Bogoljubova [15]. Izvršena je kanonična transformacija Fermi-operatora

$$\left.\begin{aligned} a_{\vec{k}k_o}(1/2) &= u_{\vec{k}k_o} A_{\vec{k}k_o}(0) + v_{\vec{k}k_o} A^{+}_{\vec{k}k_o}(1) \\ a_{-\vec{k}k_o}(1/2) &= u_{\vec{k}k_o} A_{\vec{k}k_o}(1) - v_{\vec{k}k_o} A^{+}_{\vec{k}k_o}(0) \end{aligned}\right\} \qquad \text{(III.3.23)}$$

gde su $u_{\vec{k}k_o}$ i $v_{\vec{k}k_o}$ realne i parne funkcije, koje zadovoljavaju uslov

$$u^2_{\vec{k}k_o} + v^2_{\vec{k}k_o} = 1$$

Zamenom (III.3.23) u (III.3.21) po operatorima A dobija se ekvivalentni hamiltonijan. Ako se iz ovog hamiltonijana odbace članovi višeg (četvrtog) reda, a funkcije $u_{\vec{k}k_o}$ i $v_{\vec{k}k_o}$ odrede tako da nedijalgonalni kvadratni delovi budu nula, hamiltonijan se svodi na

$$H_2^Z = \sum_{\vec{k}} \sqrt{E^2(\vec{k}k_o) + \Delta^2_{\vec{k}k_o}} \left[A^{+}_{\vec{k}k_o}(0) A_{\vec{k}k_o}(0) + A^{+}_{\vec{k}k_o}(1) A_{\vec{k}k_o}(1) \right] \qquad \text{(III.3.24)}$$

gde je

$$\Delta_{\vec{k}k_o} = \frac{1}{2N(N_z+1)} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o) \sqrt{\frac{\Delta^2_{\vec{q}k_o}}{E^2(\vec{q}k_o) + \Delta^2_{\vec{q}k_o}}} \qquad \text{(III.3.25)}$$

Analogna procedura za površinska stanja daje

$$H_2^{\sqcap} = \sum_{\vec{k}} \sqrt{E^2(\vec{k}\,i\eta) + \Delta^2_{\vec{k}\,i\eta}} \left[A^{+}_{\vec{k}\,i\eta}(0) A_{\vec{k}\,i\eta}(0) + A^{+}_{\vec{k}\,i\eta}(1) A_{\vec{k}\,i\eta}(1) \right] \qquad \text{(III.3.26)}$$

i

$$\Delta_{\vec{k}\,i\eta} = \frac{1}{2N(N_z+1)} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q},i\eta,i\rho) \sqrt{\frac{\Delta^2_{\vec{q}\,i\eta}}{E^2(\vec{q}\,i\eta) + \Delta^2_{\vec{q}\,i\eta}}} \qquad \text{(III.3.27)}$$

Budući da je jedan od bitnih parametara u teoriji superkonduktivnog stanja veličina gepa* u energijskom spektru

---

*) Umesto ovog izraza u domaćoj literaturi upotrebljava se još i izraz energijski procep i energijski zazor.

hamiltonijana (III.3.24), odnosno (III.3.26) dalja je analiza posvećena izračunavanju veličine ovog gepa.

Za slučaj zapreminskih elektronskih talasa odgovarajuće energije elektrona mogu se napisati u reprezentaciji hemijskog potencijala, tj.

$$E(\vec{k}k_o) = \frac{\hbar^2(k^2 + k_o^2)}{2m^*} - \mu \tag{III.3.28}$$

gde je m^* efektivna masa elektrona, μ hemijski potencijal koji se približno može napisati u obliku

$$\mu = \frac{\hbar^2(k_F^2 + k_o^2)}{2m^*}$$

Ako se stavi da je $k + k_F \simeq 2k_F$ i uvede brzina elektrona na granici Fermi sfere, pomoću relacije

$$\frac{\sqrt{k_F^2 + k_o^2}}{m^*} = V_F \tag{III.3.29}$$

može se, konačno, napisati da je energija elektrona u filmu data izrazom

$$E(\vec{k}k_o) = \hbar V_F\left[(k^2 + k_o^2)^{1/2} - (k_F^2 + k_o^2)^{1/2}\right] \tag{III.3.30}$$

Ako se, nadalje, pretpostavi da je funkcija $W(\vec{k},\vec{q},k_o,q_o,\nu_o)$, ne sporo promenljiva, već jednaka konstanti W u intervalu relacije (III.3.22), izraz (III.3.25), prelaskom sa sume na integral, postaje

$$1 = \frac{Wa^3}{(2\pi)^3}\int_{k_F-k_G}^{k_F+k_G} \frac{k(k^2+k_o^2)^{1/2}\,dk}{\{\hbar^2V_F^2[(k^2+k_o^2)^{1/2} - (k_F^2+k_o^2)^{1/2}]^2 + \Delta^2\}^{1/2}} \tag{III.3.31}$$

gde je k_G polovina debljine sloja oko graničnog dvodimenzionog talasnog vektora Fermi sfere k_F.

Uvodjenjem smene $k^2+k_o^2=x^2$, integral (III.3.31) postaje

$$1=\frac{Wa^3}{(2\pi)^2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{x^2dx}{\sqrt{(x-K_F)^2+\Delta^2}}$$

a smenom $x-K_F=y$ i aproksimacijom $x\simeq K_F$ u brojiocu, prethodni se izraz svodi na

$$1=\frac{Wa^3}{(2\pi)^2}K_F^2\int_{y_2}^{y_1}\frac{dy}{\sqrt{y^2+\Delta^2}} \qquad \text{(III.3.32)}$$

pri čemu su granice integracije

$$\left.\begin{aligned} y_1 &= \left[(k_F-k_G)^2+k_o^2\right]^{1/2}-(k_F^2+k_o^2)\\ y_2 &= \left[(k_F+k_G)^2+k_o^2\right]^{1/2}-(k_F^2+k_o^2)\end{aligned}\right\} \qquad \text{(III.3.33)}$$

Integral (III.3.32) rešava se u dva granična slučaja, kada je $k_o \ll k_F-k_G$ i kada je $k_o \gg k_F-k_G$.

U prvom slučaju ($k_o\ll k_F-k_G$) granice integracije (III.3.33) postaju

$$y_1\simeq -k_G+\frac{1}{2}\frac{k_o^2}{k_F^2}k_G\,; \qquad y_2\simeq k_G-\frac{1}{2}\frac{k_o^2}{k_F^2}k_G$$

pri čemu je vrednost integrala

$$1=\frac{Wa^3}{(2\pi)^2}\frac{K_F}{\hbar V_F}\ell n\frac{y_2+\left(y_2^2+\dfrac{\Delta^2}{\hbar^2V_F^2}\right)^{1/2}}{y_1+\left(y_1^2+\dfrac{\Delta^2}{\hbar^2V_F^2}\right)^{1/2}} \qquad \text{(III.3.34)}$$

koji, posle aproksimacije $y_{1,2}\ll\Delta/\hbar V_F$, postaje

$$1\simeq\frac{Wa^3}{(2\pi)^2}\frac{K_F^2}{\hbar V_F}\ell n\frac{y_2+|y_2|+\dfrac{1}{2}\dfrac{\Delta^2}{\hbar^2V_F^2|y_2|}}{y_1+|y_1|+\dfrac{1}{2}\dfrac{\Delta^2}{\hbar^2V_F^2|y_1|}}\,.$$

Nakon zamene vrednosti za y_1 i y_2 i aproksimacije

$$\frac{1}{\Delta^2}\left[4\hbar^2 V_F^2 k_G\left(1-\frac{k_o^2}{k_F^2}\right)^2\right] \gg 1 ,$$

izraz za superkonduktivni gep u energijskom spektru operatora (III.3.24) ima oblik

$$\Delta = 2\hbar V_F k_G\left(1-\frac{1}{2}\frac{k_o^2}{k_F^2}\right) e^{-\frac{2\pi^2\hbar V_F}{Wa^3K_F^2}} \tag{III.3.35}$$

U drugom slučaju ($k_o \gg k_F - k_G$) granice integracije (III.3.33) postaju

$$y_1 \simeq -\frac{1}{2}k_G; \quad y_2 \simeq \frac{1}{2}\frac{k_o^2}{k_F^2} ,$$

pri čemu je vrednost integrala (III.3.32) data izrazom

$$1 = \frac{Wa^3}{(2\pi)^2}\frac{K_F^2}{\hbar V_F}\ln\frac{\frac{1}{2}\frac{k_G^2}{k_o}+\frac{\Delta}{\hbar V_F}+\frac{\hbar V_F}{8\Delta}\frac{k_G^4}{k_o^2}}{-\frac{1}{2}\frac{k_G^2}{k_o}+\frac{\Delta}{\hbar V_F}+\frac{\hbar V_F}{8\Delta}\frac{k_G^4}{k_o^2}}$$

koji se, posle aproksimacije $\frac{1}{2}\frac{k_G^2}{k_o} \ll \frac{\Delta}{\hbar V_F}$, konačno svodi na izraz

$$\Delta = \frac{1}{2}\hbar V_F\frac{k_G^2}{k_o}\, cth\,\frac{4\pi^2\hbar V_F}{Wa^3K_F^2} \tag{III.3.36}$$

gde je $K_F = (k_F^2 + k_o^2)^{1/2}$.

Analogna procedura u slučaju površinskih elektronskih talasa daje, za $\eta \ll k_F^{\sqcap} - k_G^{\sqcap}$

$$\Delta^{\sqcap} = 2\hbar V_F k_G\left(1-\frac{1}{2}\frac{\eta^2}{k_F^2}\right) e^{-\frac{2\pi^2\hbar V_F}{W^{\sqcap}a^3K_F^{\sqcap 2}}} \tag{III.3.37}$$

i za $\eta \gg k_F - k_G$

$$\Delta^{\sqcap} = \frac{1}{2}\hbar V_F\frac{k_G^2}{\eta}\, cth\,\frac{4\pi^2\hbar V_F}{W^{\sqcap}a^3K_F^{\sqcap 2}} \tag{III.3.38}$$

gde je $K_F^{\Pi} = (k_F^2 + \eta^2)^{1/2}$.

Analizom formula (III.3.35), (III.3.36), (III.3.37), i (III.3.38) dolazi se do zaključka da granični slučaj dat sa $k_o \ll k_F - k_G$, u smislu povećanja superkonduktivnog gepa, ne daje ništa bitno novo u odnosu na idealnu strukturu. Drugi granični slučaj ($k_o \gg k_F - k_G$) daleko je interesantniji, s obzirom da se ovde može manipulisati kristalnim strukturama i veličinom efektivne interakcije W, tako da se gep primetno uveća. Na osnovu (III.3.36) očigledno je da u kristalima sa velikim Fermi sferama, velikom konstantom rešetke i jakom elektron-fonon vezom, gep se može primetno uvećati, a na taj način i kritična superkonduktivna temperatura.

Prema tome, kao krajnji zaključak, nameće se da su izgledi za povećanje kritične superkonduktivne temperature znatno bolji u filmovima nego u idealnim strukturama i zadatak je eksperimentalne fizike i kristalografije da pronadje ili formira ovakve strukture. Teorijski uslovi za optimalnu strukturu u ovom smislu već su prodiskutovani.

ZAKLJUČAK

Materijal disertacije podeljen je u tri glave. Osnovni rezultati koji su dobijeni mogu se ukratko rezimirati na sledeći način.

Prva glava posvećena je problemu polubeskonačnih struktura i u njoj su formulisane teorije spinskih talasa i fonona. Nadjene su talasne funkcije površinskih i zapreminskih magnona, a takodje, površinskih i zapreminskih fonona. Ove funkcije opisuju tzv. harmonijska stanja, tj. takva stanja, koja dopuštaju dijagonalizaciju hamiltonijana polubeskonačne strukture. Prilikom formulisanja harmonijskih stanja korišćena je ideja koju je svojevremeno dao S. I. Pekar u teoriji eksitona [1]. Pekareva ideja usavršena je utoliko što je cela teorija data u reprezentaciji druge kvantizacije, a ovo, kao što je poznato, u mnogome olakšava teorijsku analizu fenomena u kristalu. Prilikom izgradnje teorije zapreminskih i površinskih magnona korišćena je eksperimentalna činjenica da se magnetni momenti vezanih i slobodnih atoma znatno razlikuju [5], pa je deformacija magnetnog momenta površinskih atoma, u odnosu na zapreminske, uzeta kao osnova za formulisanje graničnih uslova. Kako magnetni moment atoma ulazi u Hajzenbergov hamiltonijan samo kada je prisutno spoljašnje magnetno polje, teorija se odnosi na polubeskonačne feromagnetike koji se nalaze u spoljašnjem magnetnom polju. Granični uslovi dovode do pojave dopunskih stanja (u odnosu na idealnu strukturu) i to su površinski spinski talasi čiji intenzitet eksponencijalno opada sa porastom dubine. Što se tiče zapreminskih magnona, njihovi nosioci nisu ravni talasi, već talasni paketi opisani trigonometrijskim funkcijama. Na potpuno analogni način, koristeći činjenicu da su površinski atomi drugačije vezani nego zapreminski, data je teorija površinskih i zapreminskih mehaničkih talasa-fonona. Takodje su dati hamiltonijani interakcije magnona i fonona u ovakvim strukturama i pomoću njih su izračunati veličina koeficijenta površinske anihilacije zapreminskih magnona i srednji slobodni putevi magnona u zapremini i na površini. Ovi su rezultati omogućili da se donesu izvesni zaključci o karakteru migracije magnetne energije u polubeskonačnom feromagnetiku. U kratkim crtama, može se reći da magnetna energija ima tendenciju kretanja ka površini, jer se po površini ona brže i sa manje gubitaka prenosi.

Druga je glava posvećena magnonima u tankim magnetnim filmovima. Prisustvo dve granične površine povećava broj graničnih uslova u odnosu na polubeskonačnu strukturu. Neposredna posledica ovoga je da harmonijski spinski talasi egzistiraju samo za jednu fiksiranu vrednost z-komponente kvazi-impulsa spina (račun je izveden pod pretpostavkom da je translaciona simetrija duž z-ose narušena). Ovaj zaključak važi i za zapreminska i za površinska stanja. U sistemu formulisanih harmonijskih stanja ispitano je ponašanje magnetizacije tankog filma na niskim temperaturama i u okolini temperature prelaza. Ispostavilo se da na niskim temperaturama magnetizacija filma brže opada sa porastom temperature, nego u idealnoj strukturi, izuzev u ekstremno tankim filmovima (četiri do pet slojeva) u kojima narušenje simetrije izaziva suprotan efekat. U okolini temperature prelaza ispostavilo se da važi Kiri-Vajsov zakon, ali je temperatura prelaza daleko osetljivija na strukturne karakteristike kristala nego u idealnom feromagnetiku.

U trećoj su glavi ispitane termodinamičke karakteristike tankih filmova u sistemu površinskih i zapreminskih harmonijskih fonona koji u ovakvim strukturama mogu da egzistiraju. Osnovni je zaključak analiza u ovoj glavi da specifična toplota tankih filmova znatno brže (eksponencijalno) teži nuli kada temperatura teži nuli, nego u idealnom kristalu. Ovo, drugim rečima, znači da se zagrevanje filma izvodi teže nego zagrevanje idealnog kristala. Pored ovih ispitivanja, analizirana su i stanja provodnih elektrona u filmu. Ispostavilo se da je egzistencija kako površinskih, tako i zapreminskih harmonijskih elektronskih talasa, u filmu moguća. Ovi su elektronski talasi, po matematičkoj strukturi sopstvenih talasnih funkcija, analogni spinskim i mehaničkim talasima u filmu. Definisan je takodje i hamiltonijan interakcije elektronskih talasa sa mehaničkim talasima. Pomoću unitarne transformacije hamiltonijana sistema elektroni (plus) - fononsko polje ispitano je do kojih efekata elektron-fonon interakcija u tankim filmovima, u smislu pojave superkonduktivnosti, dovodi. Ispostavilo se da u tankim filmovima postoje veći izgledi za regulisanje veličine superkonduktivnog gepa, nego u idealnom kristalu. Pod ovim se regulisanjem podrazumeva veća mogućnost manevrisanja tipom kristalne strukture i veličinom konstante elektron-fonon interakcije. Ovaj zaključak predstavlja najvredniji rezultat u tezi, s obzirom da je najbliži eksperimentalnoj realizaciji.

Celokupna istraživanja u ovoj tezi se odnose, kao što je više puta naglašeno, na sisteme sa narušenom strukturom. Ovakva pobudjenja imaju, bar teorijski, beskonačno malo prigušenje. Istraživanja obuhvataju dovoljno širok spektar procesa i efekata u sistemu harmonijskih pobudjenja. Potrebno je da se istakne, da, sem pomenutih harmonijskih pobudjenja, postoje i drugi tipovi pobudjenja, ali su njihove talasne funkcije takve prirode da se hamiltonijan sistema ne može dijagonalizovati [17]. Karakteristike ovih pobudjenja i efekata do kojih ona dovode mogu se ispitivati metodom Grinovih funkcija. U tezi ovakva ispitivanja nisu vršena iz dva razloga. Prvo, ova je oblast istraživanja veoma popularna u svetskoj literaturi, a mnogi su interesantni fenomeni već detaljno izučeni [18,19,20,21,22,23]. Drugi je razlog u tome, što izvodjenje ovakvih analiza bez intenzivnog korišćenja računara (kompjutera) ne daje bilo kakav vidljiv i ozbiljniji rezultat.

L I T E R A T U R A

[1] С. И. Пекар, ЖЭТФ, 33, 1022 (1057).

[2] D. L. Mills and W. M. Saslow, *Phys. Rev.*, 171, 488 (1968).

[3] D. L. Mills and A. A. Maradudin, *J. Phys. Chem. Sol.*, 28, 1855 (1967).

[4] T. Fujiwara, K. Ohtaka and S. Yanagawa, *Phys. Lett. (Netherlands)*, 26 A, 574 (1968).

[5] С. В. Тябликов, Методы квантовой теории магнетизма, Изд. "Наука", Москва, 1965.

[6] В. И. Суганов, ФТТ, 5, 2207 (1963).

[7] R. Djordjević, S. D. Stojanović and R. B. Žakula, *J. of Low Temp. Phys.*, 6, № 3/4, 287 (1972).

[8] D. I. Lalović, B. S. Tošić and R. B. Žakula, *Phys. Rev.*, 178, 1472 (1969).

[9] А. С. Давидов, Квантовая механика, Изд. "Наука", Москва, 1973.

[10] Ландау - Лифшиц, Статистическая физика, Москва, 1964.

[11] H. Fröhlich, *Proc. Roy. Soc.*, A 215, 291-298 (1952).

[12] Cooper L. N., *Phys. Rev.*, 104, 1198 (1956).

[13] Э. В. Шпольский, Атомная физика, Том второй, Москва, 1950.

[14] J. Bardeen, L. Cooper, J. Schrieffer, *Phys. Rev.*, 108, 1175 (1957).

[15] Н. Н. Боголюбов, ЖЭТФ, 34, 58 (1958); *Nuovo Cimento*, 7, 794 (1958).

[16] B. T. Matthias, Progress in Low Temperature, Vol. II, *Interscience Publishers*, New York, 1957.

[17] R. S. Gordenko, I. D. Mikhailov, *Sov. Phys. - Solid State*, Vol. 15, 4, 1181 (1973).

[18] J. C. Lery, J. L. Motchane, E. Gallias, *J. Phys. C(GB)*, Vol.7, 4, 761 (1974).

[19] D. Grecu, M. Craitoru, A. Corciovei, *Rev. Roum. Phys.*, Vol. 18, 7, 805 (1973).

[20] E. I. Butikov, A. S. Kondrat'ev, A. E. Kuchina, Fiz. Met. Metaloved, Vol. 36, 3, 485 (1973).

[21] C. - G. Grangvist, T. Cleason, *Phys. Lett.*, Vol. 45A, 6, 431 (1973).

[22] L. Wojtczak, B. Mrygon, *Phys. Stat. Sol.*, Vol. 60, 2, 73 (1973).

[23] F. K. Schulte, *European Physical Society Study Conference on Metal Surfaces*, Hindas, Sweden, 13 - 17 Aug. 1973.