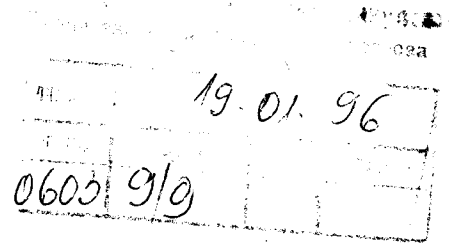


D-337

UNIVERZITET U NOVOM SADU

Prirodno-matematički fakultet

Institut za fiziku



DIPLOMSKI RAD

Zapreminski i površinski magnoni u polubeskonačnom
Hajzenbergovom feromagnetiku sa bikvadratnom
interakcijom

Nadđerđ Laslo
Mentor: Dr Škrinjar Mario

Novi Sad, januar 1996.



Sadržaj

Uvod	1
1. Osnovno stanje sistema	2
2. Magnetizacija u aproksimaciji molekularnog polja	5
3. Elementarne ekscitacije u sistemu na $T = 0K$ za $S = 1$. Metod jednačina kretanja	10
4. Analiza dobijenih rezultata	23
Literatura	36



Uvod

Magnetizam i to u prvom redu feromagnetizam izaziva pažnju ljudi već vekovima. U novije doba se pojavila potreba za potpunije razumevanje mehanizma ove fizičke pojave. U tom cilju su razvijani polufenomenološki modeli koji su bili u stanju da kvalitativno objasne neke efekte magnetizma.

Savremena teorija magnetizma razmatra fero i antiferomagnetike (specijalni slučaj feromagnetika) kao sisteme uređenih spinova. Spinovi obrazuju magnetnu kristalnu rešetku i povezani su međusobno kvantno-mehaničkim silama izmene, kojima odgovaraju izmenski potencijali I_{ij} . Detaljniji pregled osnovnih postavki ove teorije može se naći u odličnoj monografiji Matisa [1], a skraćena verzija u [2].

Problem ekscitacija u ovakvim sistemima se pojavio relativno davno, ali su novija istraživanja pokazala da standardni Hajzenbergov model nije dovoljan za tačno opisivanje sistema uređenih spinova za $S \geq 1$. Radi potpunijeg opisa ovih sistema uvodi se član bikvadratne izmene. S obzirom da već postoje radovi koji se bave problematikom porekla i uloge nehajzenbergovskih interakcija, ovde se nećemo zadržavati na tome. Za pregled ovih problema preporučujemo monografiju Nagaeva [3] kao i radove [2] i [4].

Šen i Li su u radu [5] rešavali problem magnetnih ekscitacija u Hajzenbergovom feromagnetiku sa bikvadratnom interakcijom, metodom Grinovih funkcija (GF). Taj rad ima nekoliko nedostataka (neadekvatno dekuplovanje GF na istom čvoru, kao i nedostatak analize odnosa površinskih i zapreminskih ekscitacija), koji su delom prevaziđeni u radu [6], gde je metodom jednočestičnih funkcija dobijen tačan spektar elementarnih ekscitacija na $T=0K$ za feromagnetno uređenje polubeskonačnog kristala. Osnovni cilj ovog diplomskog rada jeste da se za isti sistem odredi kompletan spektar površinskih ekscitacija, kako za feromagnetno uređenje tako i za antiferomagnetno sa zapreminski centriranom kubnom rešetkom, i da se analizira njihov odnos sa spektrom zapreminskih ekscitacija.

U prvom poglavlju ovog rada je opisano osnovno stanje feromagnetika opisanog Hamiltonijanom koji sadrži Hajzenbergovu i bikvadratnu interakciju. Problem određivanja srednjih magnetnih dipolnih i kvadrupolnih momenata kao i faznih prelaza u aproksimaciji srednjeg polja prikazan je u drugom poglavlju. Treće poglavlje je rezervisano za rešavanje glavne problematike ovog rada, a to je problem određivanja elementarnih ekscitacija u polubeskonačnom antiferomagnetiku sa zapreminski centriranom kubnom strukturom. Pored toga je rešavan isti problem za feromagnetike sa prostom kubnom strukturom.

Na kraju su dati grafički prikazi energija elementarnih ekscitacija u sistemu, dobijenih numeričkim putem, za određene vrednosti parametara sistema, kao i analiza rezultata.



1.

Osnovno stanje sistema

Ovde ćemo analizirati osnovno stanje polubeskonačnog Hajzenbergovog feromagnetika sa bikvadratnom interakcijom u aproksimaciji srednjeg polja. Hamiltonijan sistema ima oblik [2]:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}} - \frac{a}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} (\bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}})^2 \quad (1.1)$$

Pri transformaciji Hamiltonijana u oblik pogodniji za analizu iskoristićemo poznate relacije za kvadrupolne momente:

$$\begin{aligned} Q_0 &= 3\langle S_z^2 \rangle - S(S+1) \\ Q_2 &= S_x^2 - S_y^2 \\ Q_{\alpha\beta} &= S_\alpha S_\beta + S_\beta S_\alpha \quad (\alpha, \beta) \rightarrow (x, y, z) \end{aligned} \quad (1.2)$$

tako da gornji izraz dobija oblik:

$$H = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{a}{2} \right) \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}} - \frac{a}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \left(\frac{1}{6} Q_{\bar{i}}^0 Q_{\bar{j}}^0 + \frac{1}{2} Q_{\bar{i}}^2 Q_{\bar{j}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} Q_{\bar{i}}^{\alpha\beta} Q_{\bar{j}}^{\alpha\beta} \right) \quad (1.3)$$

Velika uređenost ovakvih sistema posledica je jakog unutrašnjeg magnetnog polja koje potiče od svih molekula sistema - molekularno (ili srednje) polje. U aproksimaciji srednjeg polja (MFA), spin-spin interakcija zamenjuje se interakcijom jednog spina sa srednjim poljem koje potiče od svih ostalih spinova. Može se pokazati da je smisao MFA u zanemarivanju interakcije između fluktuacija što smo ovde i iskoristili:

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \langle \bar{S} \rangle + (\bar{S} - \langle \bar{S} \rangle) = \langle \bar{S} \rangle + \delta \bar{S} \\ \bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}} &= \langle \bar{S}_{\bar{i}} \rangle \langle \bar{S}_{\bar{j}} \rangle + \langle \bar{S}_{\bar{i}} \rangle \delta \bar{S}_{\bar{j}} + \langle \bar{S}_{\bar{j}} \rangle \delta \bar{S}_{\bar{i}} + \delta \bar{S}_{\bar{i}} \delta \bar{S}_{\bar{j}} \\ \delta \bar{S}_{\bar{i}} \delta \bar{S}_{\bar{j}} &\approx 0 \\ \bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}} &\approx -\langle \bar{S}_{\bar{i}} \rangle \langle \bar{S}_{\bar{j}} \rangle + \langle \bar{S}_{\bar{i}} \rangle \bar{S}_{\bar{j}} + \langle \bar{S}_{\bar{j}} \rangle \bar{S}_{\bar{i}} \end{aligned} \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned}
H_{MF} = & -\frac{I}{2} \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \left[\langle \bar{S}_{\bar{i}} \rangle \bar{S}_{\bar{j}} + \langle \bar{S}_{\bar{j}} \rangle \bar{S}_{\bar{i}} - \langle \bar{S}_{\bar{i}} \rangle \langle \bar{S}_{\bar{j}} \rangle \right] - \\
& - \frac{a}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \left[\frac{1}{6} \langle Q_{\bar{i}}^0 \rangle Q_{\bar{j}}^0 + \frac{1}{6} \langle Q_{\bar{j}}^0 \rangle Q_{\bar{i}}^0 - \frac{1}{6} \langle Q_{\bar{i}}^0 \rangle \langle Q_{\bar{j}}^0 \rangle \right] + \\
& + \frac{1}{2} \langle Q_{\bar{i}}^2 \rangle Q_{\bar{j}}^2 + \frac{1}{2} \langle Q_{\bar{j}}^2 \rangle Q_{\bar{i}}^2 - \frac{1}{2} \langle Q_{\bar{i}}^2 \rangle \langle Q_{\bar{j}}^2 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta}^3 \left(\langle Q_{\bar{i}}^{\alpha\beta} \rangle Q_{\bar{j}}^{\alpha\beta} + \right. \\
& \left. + \langle Q_{\bar{j}}^{\alpha\beta} \rangle Q_{\bar{i}}^{\alpha\beta} - \langle Q_{\bar{i}}^{\alpha\beta} \rangle \langle Q_{\bar{j}}^{\alpha\beta} \rangle \right) \Big] + const.
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Ograničimo se na slučaj tzv. izingovske simetrije:

$$\begin{aligned}
\langle S_{\bar{i}}^x \rangle = \langle S_{\bar{i}}^y \rangle = \langle Q_{\bar{i}}^2 \rangle = \langle Q_{\bar{i}}^{\alpha\beta} \rangle = 0 \\
\langle S_{\bar{i}}^z \rangle = \sigma_{\bar{i}} \quad \langle Q_{\bar{i}}^0 \rangle = q_{\bar{i}}
\end{aligned} \tag{1.6}$$

$$H_{MF} = H_0 - \frac{1}{2} \langle H_0 \rangle + const. \tag{1.7}$$

$$H_0 = - \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \sigma_{\bar{i}} S_{\bar{j}}^z - \frac{a}{6} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} q_{\bar{i}} Q_{\bar{j}}^0 \tag{1.8}$$

Talasne funkcije elektrona brzo opadaju udaljavanjem od čvorova kristalne rešetke pa je njihovo prekrivanje veoma malo, tako da se u većini slučajeva uzima da je integral izmene različit od nule samo za najbliže susede.

Da bismo primenili „aproksimaciju najbližih suseda“, izrazićemo Hamiltonijan po slojevima $n_z = (0, 1, \dots, N_z)$.

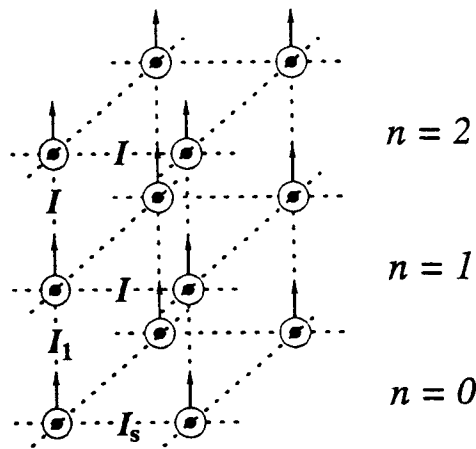
$$H_0 = -N_{xy} \sum_{n=0}^{N_z} \left[S_n^z \overline{\mathcal{H}}_n + Q_n^0 \overline{\mathcal{K}}_n \right] \tag{1.9}$$

N_{xy} – broj čvorova u xy -ravni

N_z – broj slojeva u z -pravcu

Za prostu kubnu strukturu, srednje polje koje deluje na S^z i Q^0 (slika 1) je:

$$\begin{aligned}
n=0 \quad \overline{\mathcal{H}}_0 &= \left(1 - \frac{a}{2}\right) (4I_s \sigma_s + I_1 \sigma_1) \\
n=1 \quad \overline{\mathcal{H}}_1 &= \left(1 - \frac{a}{2}\right) (I_1 \sigma_s + 4I \sigma_1 + I \sigma_2) \\
n \geq 2 \quad \overline{\mathcal{H}}_n &= \left(1 - \frac{a}{2}\right) I (\sigma_{n-1} + 4\sigma_n + \sigma_{n+1}) \\
\overline{\mathcal{K}}_0 &= \frac{a}{6} (4I_s q_s + I_1 q_1) \\
\overline{\mathcal{K}}_1 &= \frac{a}{6} (I_1 q_s + 4I q_1 + I q_2) \\
\overline{\mathcal{K}}_n &= \frac{a}{6} I (q_{n-1} + 4q_n + q_{n+1})
\end{aligned} \tag{1.10}$$



Slika 1

$$E_0 = \langle H_{MF} \rangle_0 = \frac{1}{2} \langle H_0 \rangle_0 + const. \quad (1.11)$$

Stavimo da je na $T = 0K$: $\sigma_n = \sigma_0$; $q_n = Q_0$.
Proizvoljnim izborom nivoa osnovnog stanja dobijamo:

$$\varepsilon_0 = \frac{E_0}{N_{xy}} = -\frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{a}{2} \right) \sigma_0^2 + \frac{a}{6} Q_0^2 \right] \mathcal{F}(N_z) \quad (1.12)$$

gde je: $\mathcal{F}(N_z) = 4I_1 + 2I_2 + 5I_3 + 6I(N_z - 1)$

Za sisteme sa spinom $S = 1$ sledeći analizu iz rada [4] imamo:

1° za $\sigma_0 = Q_0 = 1$ - feromagnetno uređenje spinova sa energijom:

$$\varepsilon_0 \equiv \varepsilon_0^1 = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{a}{3} \right) \mathcal{F}(N_z)$$

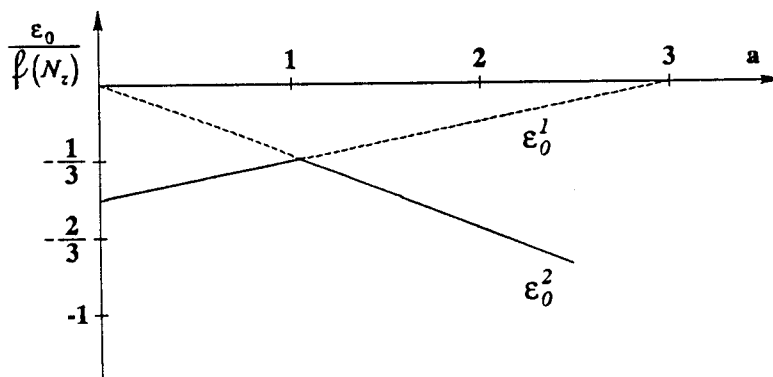
i 2° za $\sigma_0 = 0$ $Q_0 = -2$ - kvadrupolno uređenje spinova sa energijom:

$$\varepsilon_0 \equiv \varepsilon_0^2 = -\frac{1}{3} a \mathcal{F}(N_z)$$

Zaključujemo da će energija osnovnog stanja biti:

$$\varepsilon_0 \equiv \begin{cases} \varepsilon_0^1, & 0 \leq a < 1 \\ \varepsilon_0^2, & a > 1 \end{cases}$$

Prema tome, u zavisnosti od veličine parametra bikvadratne interakcije, osnovno stanje feromagnetika odgovara feromagnetnom za $0 \leq a < 1$ ili kvadrupolnom uređenju spinova za $a > 1$ (slika 2).



Slika 2

Ovaj rezultat analogan je rezultatu rada [4] za beskonačni feromagnetik. Za $a = 1$ imamo degenerisano stanje, jer istoj energiji odgovaraju i feromagnetno i kvadrupolno uređenje.

U daljem radu, magnetizaciju i elementarne ekscitacije analiziraćemo samo za feromagnetno uređenje (tj. $0 \leq a < 1$).

2.

Magnetizacija u aproksimaciji molekularnog polja

U Hamiltonijan (1.1) ćemo ubaciti član koji opisuje interakciju feromagnetika sa spoljašnjim magnetnim poljem usmerenim duž z-ose.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}} - \frac{a}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} (\bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}})^2 - \mu \mathcal{H} \sum_{\bar{i}} S_{\bar{i}}^z \quad (2.1)$$

U MFA Hamiltonijan postaje:

$$H_{MF} = H_0 - \mu \mathcal{H} N_{xy} \sum_{n=0}^{N_z} S_n^z - \frac{1}{2} \langle H_0 \rangle + const. \quad (2.2)$$

Statistička suma sistema je:

$$Z = (Z_0 Z_1 \cdots Z_n \cdots Z_{N_z})^{N_{xy}} \quad (2.3)$$

$$Z_n = \sum_{\ell=-1}^1 \langle \ell | e^{-\beta \frac{H_n^{MF}}{N_{xy}}} | \ell \rangle \quad (2.4)$$

Srednji magnetni moment sloja izračunavamo po definiciji:

$$\sigma_n = \langle S_n^z \rangle = \frac{1}{Z_n} \sum_{\ell=-1}^1 \langle \ell | e^{-\beta \frac{H_n^{MF}}{N_{xy}}} S_n^z | \ell \rangle \quad (2.5)$$

$$\sigma_n = \frac{2 \operatorname{sh} \beta (\overline{\mathcal{H}}_n + \mu \mathcal{H})}{e^{-3\beta \overline{\mathcal{H}}_n} + 2 \operatorname{ch} \beta (\overline{\mathcal{H}}_n + \mu \mathcal{H})} \quad (2.6)$$

Slično računamo i srednji kvadrupolni moment sloja:

$$q_n = \frac{6 \operatorname{ch} \beta (\overline{\mathcal{H}}_n + \mu \mathcal{H})}{e^{-3\beta \overline{\mathcal{H}}_n} + 2 \operatorname{ch} \beta (\overline{\mathcal{H}}_n + \mu \mathcal{H})} - 2 \quad (2.7)$$

Vidimo da σ_n , q_n kao i tačke faznog prelaza možemo odrediti samo numerički, rešavanjem gornjeg sistema nelinearnih jednačina.

Imajući u vidu rezultat iz prethodnog poglavlja, fazni prelazi na $T \neq 0K$ se moraju posebno analizirati za $a > 1$ i $a < 1$. Mi ćemo analizirati samo slučaj $0 < a < 1$.

Slučaj slabe bikvadratne interakcije: $0 < a < 1$

Može se uočiti iz (2.6) i (2.7) da za beskonačni obrazac (bulk) gde važi $\sigma_n \approx \sigma$ i $q_n \approx q$, σ i q imaju zajedničku tačku faznog prelaza.

$$\theta_c = \theta_q = \frac{2-a}{3} I(0) \quad (2.8)$$

Ovde ćemo prikazati jedno približno analitičko rešenje za tačke faznog prelaza u slučaju polubeskonačnog kristala.

Pretpostavimo da se θ_c^a malo razlikuju tako da možemo sve jednačine (2.6) razviti do prvog stepena po σ_n .

$$\begin{aligned} n=0 \quad 3\sigma_s &\approx \frac{2-a}{\theta} \left[4I_s\sigma_s + I_1\sigma_1 + \frac{2\mu\mathcal{H}}{2-a} \right] \\ n=1 \quad 3\sigma_1 &\approx \frac{2-a}{\theta} \left[I_1\sigma_s + 4I\sigma_1 + I\sigma_2 + \frac{2\mu\mathcal{H}}{2-a} \right] \\ n \geq 2 \quad 3\sigma_n &\approx \frac{2-a}{\theta} \left[I\sigma_{n-1} + 4I\sigma_n + I\sigma_{n+1} + \frac{2\mu\mathcal{H}}{2-a} \right] \end{aligned} \quad (2.9)$$

Ako uvedemo vektor magnetizacije i vektor magnetnog polja:

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_s \\ \sigma_1 \\ \sigma_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \vec{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \mathcal{H} \\ \mathcal{H} \\ \mathcal{H} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Sistem jednačina (2.9) možemo napisati u obliku:

$$D\vec{\sigma} = \epsilon\vec{\mathcal{H}} \quad D = A + \alpha \quad (2.10)$$

gde je:

$$A = \begin{pmatrix} \rho & -1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & \rho & -1 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & \rho & -1 & \dots \\ 0 & 0 & -1 & \rho & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha & \alpha_1 & 0 & 0 & \dots \\ \alpha_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

$$\rho = \frac{3\theta}{(2-a)I} - 4 \quad (2.13)$$

$$\alpha = 4 - 4\frac{I_s}{I} \quad \alpha_1 = 1 - \frac{I_1}{I} \quad \varepsilon = \frac{2\mu}{(2-a)I} \quad (2.14)$$

Spontana magnetizacija postoji pri $\mathcal{H} \rightarrow 0$ ako je determinanta matrice D jednaka nuli. Zbog nemogućnosti nalaženja determinante beskonačne matrice, odredićemo singularitete matrice G.

$$\bar{\sigma} = G \varepsilon \bar{\mathcal{H}} \quad (2.15)$$

$$G = (\bar{I} + A^{-1}\alpha)^{-1} A^{-1} \quad (2.16)$$

gde je \bar{I} jedinična matrica.

Matematičkom indukcijom smo izračunali elemente matrice A^{-1} :

$$(A^{-1})_{mn} = \sum_{k=0}^{\frac{1}{2}(m+n-|m-n|)-1} x^{m+n-1-2k}; \quad |x| \leq 1 \quad (2.17)$$

$$\rho = x + \frac{1}{x} \quad (2.18)$$

Može se videti da za bulk ($m, n \rightarrow \infty$), matrica A^{-1} ima singularitet za $x = 1$. Kombinacijom (2.13) i (2.18) dobijamo bulk temperaturu faznog prelaza - Kirijevu temperaturu:

$$\theta_c = \frac{2-a}{3} I(0) \quad (2.19)$$

Da bi ispitali uticaj površina na tačku faznog prelaza, moramo odrediti matricu $(\bar{I} + A^{-1}\alpha)^{-1}$. Matricu $\bar{I} + A^{-1}\alpha$ možemo napisati u obliku:

$$\bar{I} + A^{-1}\alpha = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & \dots \\ M_{21} & M_{22} & 0 & 0 & \dots \\ \hline N_{31} & N_{32} & 1 & 0 & \dots \\ N_{41} & N_{42} & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

gde je matrica M data kao:

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \alpha X + \alpha_1 X^2 & \alpha_1 X \\ \alpha X^2 + \alpha_1 X(X^2 + 1) & 1 + \alpha_1 X \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

Može se pokazati da važi sledeća relacija:

$$(\bar{I} + A^{-1}\alpha)^{-1} = \frac{1}{\det M} \left(\begin{array}{c|ccc} \text{adj } M & 0 & 0 & \dots \\ \hline -N \text{ adj } M & \bar{I} \det M & & \end{array} \right) \quad (2.22)$$

Singulariteti matrice (2.22) određuju temperaturu površinskih faznih prelaza.

$$\det M = 1 + \alpha X + (2\alpha_1 - \alpha_1^2)X^2 = 0 \quad (2.23)$$

Razmotrimo sledeći slučaj: $I_1 = I$, $I_s \neq I$
(2.23) postaje:

$$1 + \alpha X = 0 \quad \text{što daje} \quad X_s = -\frac{1}{\alpha} \quad (2.24)$$

Kombinujući (2.24), (2.18) i (2.13) dobijamo temperaturu površinskog faznog prelaza:

$$\theta_c^s = \frac{16\varepsilon(\varepsilon - 1) + 1}{24(\varepsilon - 1)} \cdot \frac{2 - a}{3} I(0) \quad (2.25)$$

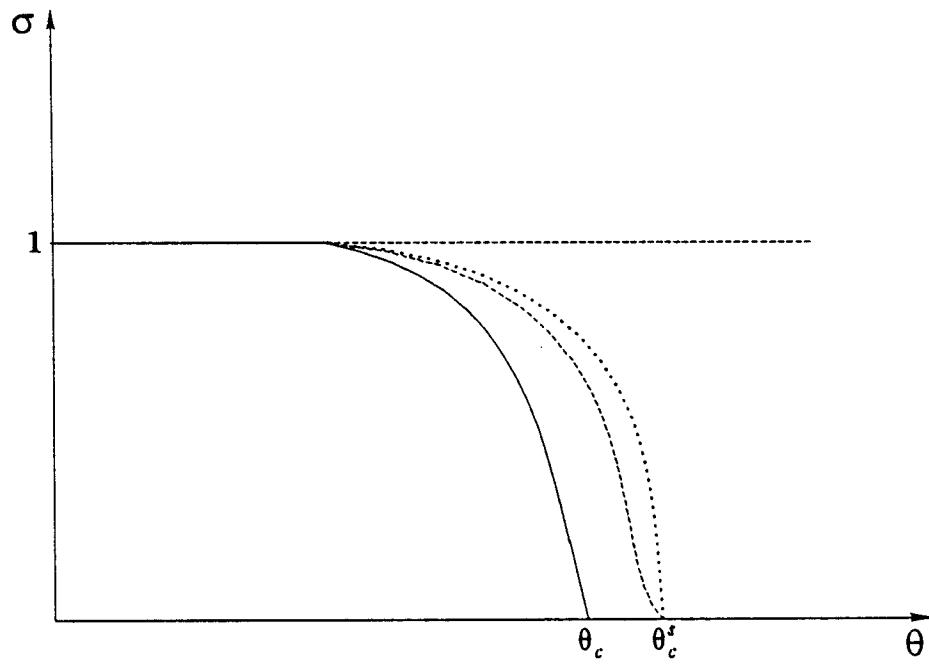
gde je: $\varepsilon = \frac{I_s}{I}$

Analiziranjem (2.25) i upoređujući sa (2.19) nalazimo:

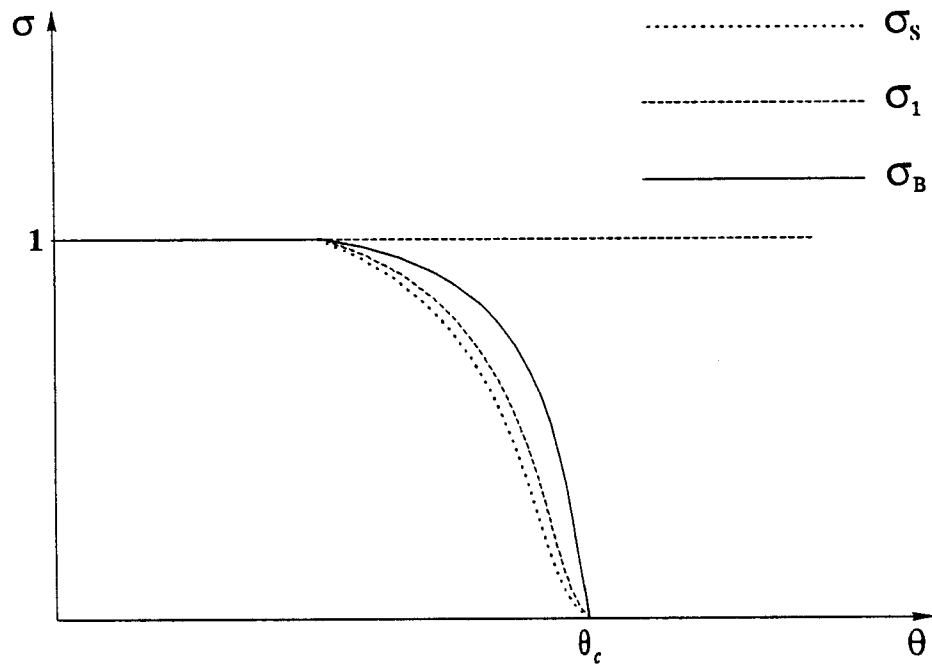
- a) za $I_s > \frac{5}{4}I$, $\theta_c^s > \theta_c$
 - b) za $I_s \leq \frac{5}{4}I$, $\theta_c^s = \theta_c$
- (2.26)

Dakle, pri $I_s > \frac{5}{4}I$ postojaće dve tačke faznog prelaza. Ovo omogućava da na temperaturama višim od θ_c postoji feromagnetno uređenje na površini a paramagnetno unutar kristala. Za $I_s \leq \frac{5}{4}I$ postoji samo jedna tačka faznog prelaza za ceo kristal jer je tada $|X_s| \geq 1$ te postoji samo singularitet matrice A^{-1} .

Gornje rezultate prikazaćemo grafički za proizvoljno izabrane parametre, tj. daćemo samo kvalitativne zavisnosti magnetizacija od temperature. Grafik na slici 3 se odnosi na slučaj $I_s > \frac{5}{4}I$, a na slici 4 za $I_s \leq \frac{5}{4}I$.



Slika 3



Slika 4

3.

Elementarne ekscitacije u sistemu na $T=0$ K za $S=1$. Metod jednačina kretanja

a) Slučaj feromagnetnog osnovnog stanja

Zadatak ovog dela rada je ispitivanje magnetnih pobuđenja u feromagnetiku proste kubne strukture, opisanim Hamiltonijanom koji pored Hajzenbergove izmene sadrži članove bikvadratne izmene i jednojonske anizotropije.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}} - \frac{a}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} (\bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}})^2 - \sum_{\bar{i}} D_{\bar{i}} (\bar{S}_{\bar{i}})^2 \quad (3.1)$$

Transformacijom Hamiltonijana u oblik pogodniji za račun, koristeći poznate komutatore dobijamo:

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \left[S_{\bar{i}}^+ S_{\bar{j}}^- + \left(1 - \frac{a}{2}\right) S_{\bar{i}}^z S_{\bar{j}}^z \right] - \\ & - \frac{a}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \left[\frac{3}{2} (S_{\bar{i}}^z)^2 (S_{\bar{j}}^z)^2 + \frac{1}{2} (S_{\bar{i}}^-)^2 (S_{\bar{j}}^+)^2 + S_{\bar{i}}^+ S_{\bar{i}}^- S_{\bar{j}}^- S_{\bar{j}}^z + S_{\bar{i}}^z S_{\bar{i}}^+ S_{\bar{j}}^z S_{\bar{j}}^- \right] - \\ & - \sum_{\bar{i}} \left[D_{\bar{i}} - \frac{a}{2} S(S+1) \sum_{\bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \right] (S_{\bar{i}}^z)^2 \end{aligned} \quad (3.2)$$

Za izračunavanje magnetnih ekscitacija koristimo metod jednačina kretanja. Jednačina kretanja za operator S_m^+ je:

$$i\hbar \frac{dS_m^+}{dt} = [S_m^+, H] \quad (3.3)$$

Izračunavanjem gornjeg komutatora dobija se sistem jednačina:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dS_m^+}{dt} = & \sum_j I_{j\bar{m}} \left(1 - \frac{a}{2}\right) (S_j^z S_m^+ - S_m^z S_j^+) + \\
& + \frac{a}{2} \sum_j I_{j\bar{m}} \left[Q_j^0 (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+) - Q_m^0 (S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+) + \right. \\
& + (S_m^+)^2 (S_j^- S_j^z + S_j^z S_j^-) - (S_j^+)^2 (S_m^- S_m^z + S_m^z S_m^-) \left. \right] + \\
& + D_m (S_m^z S_m^+ + S_m^+ S_m^z)
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Primenićemo aproksimaciju haotičnih faza (RPA) koja se ovde sastoji u dekuplovanju proizvoda spinskih operatora, gde se svako S^z zamenjuje srednjom vrednošću.

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dS_m^+}{dt} = & \sum_j I_{j\bar{m}} \left(1 - \frac{a}{2}\right) (\langle S_j^z \rangle S_m^+ - \langle S_m^z \rangle S_j^+) + \frac{a}{2} \sum_j I_{j\bar{m}} \left[\langle Q_j^0 \rangle (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+) - \right. \\
& - \langle Q_m^0 \rangle (S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+) \left. \right] + D_m (S_m^z S_m^+ + S_m^+ S_m^z) \\
\langle S_m^+ \rangle = \langle S_m^- \rangle = & 0 \quad \langle S_m^z S_m^+ + S_m^+ S_m^z \rangle = 0 \\
\langle Q_m^0 \rangle = & 3S^2 - S(S+1) = S(2S-1)
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Dekuplovanje na istom čvoru se vrši Blohovom aproksimacijom - prelazak sa spinskih na Boze operatore, pri čemu komutacione relacije ostaju iste.

Na niskim temperaturama je: $\langle S^z \rangle \approx S$, tako da važi aproksimacija:

$$\begin{aligned}
S_m^- & \approx \sqrt{2S} a_m^+ & S_m^+ & \approx \sqrt{2S} a_m^- \\
S_m^z & \approx S - a_m^+ a_m^-
\end{aligned}$$

Za proizvod operatora na istom čvoru sada dobijamo:

$$\begin{aligned}
S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+ & \approx \sqrt{2S} (a_m^- (S - a_m^+ a_m^-) + (S - a_m^+ a_m^-) a_m^-) \approx \\
& \approx \sqrt{2S} (2S - 1) a_m^- = (2S - 1) S_m^+
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Primenom (3.6) na sistem jednačina (3.5) dobijamo:

$$i\hbar \frac{dS_m^+}{dt} = S\alpha(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_m^+ - S\alpha(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_j^+ + (2S - 1) D_m S_m^+ \tag{3.7}$$

gde smo označili: $\alpha(a) = 1 + 2Sa(S - 1)$ (3.8)

Prelaskom na energetska reprezentaciju Furije transformacijom:

$$S_m^+(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} S_m^+(\omega) e^{-i\alpha\omega t} d\omega \quad E = \hbar\omega \tag{3.9}$$

sistem (3.7) dobija oblik:

$$\left[E - S\alpha(a) \sum_j I_{j\bar{m}} - (2S-1)D_{\bar{m}} \right] S_{\bar{m}}^+(\omega) + S\alpha(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_j^+(\omega) = 0 \quad (3.10)$$

Furije transformacija u dvodimenzionalnom \bar{k}_{II} prostoru ima oblik:

$$S_{\bar{m}}^+(\omega) = \frac{1}{N_1 N_2} \sum_{\bar{k}_{II}} e^{i\bar{k}_{II}\bar{\rho}} U_n(\bar{k}_{II}, \omega) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.11)$$

$$\bar{k}_{II} = (k_x, k_y, 0) \quad \bar{m} = (\bar{\rho}, na_0)$$

Kada je primenimo na (3.10) dobijamo sledeći sistem jednačina za $U_n(\bar{k}_{II}, \omega)$:

$$\begin{aligned} n = 0 \quad \rho_s U_0(\bar{k}_{II}, \omega) + U_1(\bar{k}_{II}, \omega) &= 0 \\ n \geq 1 \quad \rho U_n(\bar{k}_{II}, \omega) + U_{n+1}(\bar{k}_{II}, \omega) + U_{n-1}(\bar{k}_{II}, \omega) &= 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

gde je:

$$\begin{aligned} \rho_s &= \frac{E - (2S-1)D_s - S\alpha(a)[I_s(0) - I_s(\bar{k}_{II})]}{IS\alpha(a)} \\ \rho &= \frac{E - (2S-1)D - S\alpha(a)[I(0) - I(\bar{k}_{II})]}{IS\alpha(a)} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Za prostu kubnu strukturu važi:

$$\begin{aligned} I_s(0) &= 4I_s + I & I_s(\bar{k}_{II}) &= 2I_s v_{\bar{k}} \\ I(0) &= 6I & I(\bar{k}_{II}) &= 2I v_{\bar{k}} \\ v_{\bar{k}} &= \cos k_x a_0 + \cos k_y a_0 \end{aligned} \quad (3.14)$$

Rešenje za $U_n(\bar{k}_{II}, \omega)$ možemo tražiti u obliku:

$$U_n(\bar{k}_{II}, \omega) = U(\bar{k}_{II}, \omega) e^{i\lambda a_0 n} \quad (3.15)$$

Razlikujemo sledeće slučajeve:

$$1^\circ \quad \lambda = k_z \in R$$

$$U_n(\bar{k}_{II}, \omega) = U(\bar{k}_{II}, \omega) e^{ik_z a_0 n} \quad (3.16)$$

Vidimo da amplituda spinskog talasa ostaje konstantna (ne zavisi od n), tj. rešenje $\lambda = k_z$ nam daje zapreminske spinske talase.

Iz druge jednačine sistema (3.12) primenom (3.16) dobijamo:

$$\rho = \rho_b = -2 \cos k_z a_0 \quad -\pi \leq k_z a_0 \leq \pi$$

Kombinacijom (3.13) dobijamo izraz za energiju zapreminskih talasa.

$$E = E^B = (2S - 1)D + S\alpha(a) [I(0) - I(\bar{k})] \quad (3.17)$$

gde je:

$$I(\bar{k}) = 2I(\cos k_x a_0 + \cos k_y a_0 + \cos k_z a_0) \quad (3.18)$$

$$2^\circ \quad \lambda = \alpha + i\eta \in C$$

U ovom slučaju ρ postaje:

$$\rho = \rho_s = -2 \cos(\alpha a_0 + i\eta a_0) = -2[\cos \alpha a_0 \operatorname{ch} \eta a_0 - i \sin \alpha a_0 \operatorname{sh} \eta a_0] \quad (3.19)$$

Pošto je ρ realno, mora biti $\sin \alpha a_0 = 0$, tj.

$$\alpha a_0 = n\pi \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.20)$$

Dovoljno je uzeti $n = 0, 1$ jer ostale vrednosti samo reprodukuju rezultate dobijene upotrebom ovih vrednosti za n .

η mora biti veće od nule, u suprotnom amplituda talasa eksponencijalno raste (može postati beskonačna) kada n raste, što je fizički besmisleno.

Razmotrimo posebno slučajeve $\alpha = 0$ i $\alpha = \frac{\pi}{a_0}$

$$a) \quad \alpha = 0$$

$$U_n(\bar{k}_{II}, \omega) = U(\bar{k}_{II}, \omega) e^{-\eta a_0 n} \quad (3.21)$$

Vidimo da amplituda talasa opada eksponencijalno sa dubinom kristala, zbog toga ih nazivamo površinskim talasima. Faza ne zavisi od n što znači da svi spinovi precesiraju u fazi. To su površinski akustični talasi.

Iz (3.12) sledi:

$$\rho_s^{ak} = -2 \operatorname{ch} \eta a_0$$

Energija površinskih akustičnih talasa je:

$$E_s^{ak}(\bar{k}_{II}, \eta) = (2S - 1)D + S\alpha(a) [I(0) - I(\bar{k}_{II}) - 2I \operatorname{ch} \eta a_0] \quad (3.22)$$

Vidimo da je: $E_s^{ak} \leq E_B$

$$b) \quad \alpha a_0 = \pi$$

$$U_n(\bar{k}_{II}, \omega) = U(\bar{k}_{II}, \omega) (-1)^n e^{-\eta a_0 n} \quad (3.23)$$

Ovde se takođe radi o površinskim talasima s tim što je u ovom slučaju precesija spinova defazovana od sloja do sloja za 180° - pripadaju tzv. optičkoj grani površinskih talasa.

Iz (3.12) sledi: $\rho_s^{opt} = 2ch\eta a_0$

Energija površinskih optičkih talasa je:

$$E_s^{opt}(\bar{k}_H, \eta) = (2S - 1)D + S\alpha(a) \left[I(0) - I(\bar{k}_H) - 2I ch\eta a_0 \right] \quad (3.24)$$

i uvek važi relacija $E_s^{opt} \geq E_B$.

Da bi lakše analizirali oblast definisanosti površinskih ekscitacija (odnosno parametra $\eta > 0$), uvedimo veličinu $x = e^{i\lambda a_0}$.

$$\begin{aligned} 1^\circ \text{ za akustične grane: } & x = e^{-\eta a_0}; \quad 0 < x < 1 \\ 2^\circ \text{ za optičke grane: } & x = -e^{-\eta a_0}; \quad -1 < x < 0 \end{aligned} \quad (3.25)$$

Upotrebom gornje smene i sistema (3.12) dobijamo:

$$\rho = -\left(x + \frac{1}{x}\right) \quad (3.26)$$

Koristeći izraze (3.13) sledi:

$$\rho_s = \rho + \frac{(2S - 1)(D - D_s) + S\alpha(a) \left[I(0) - I_s(0) - I(\bar{k}_H) + I_s(\bar{k}_H) \right]}{IS\alpha(a)} \quad (3.27)$$

Gornja jednačina zajedno sa graničnim uslovom (3.12) (za $n = 0$) u slučaju površinskih ekscitacija ($|x| < 1$) postaje:

$$x\alpha_{00} - 1 = 0 \quad x = \frac{1}{\alpha_{00}} \quad (3.28)$$

gde je:

$$\alpha_{00} = \frac{(2S - 1)(D - D_s) + S\alpha(a) \left[I(0) - I_s(0) - I(\bar{k}_H) + I_s(\bar{k}_H) \right]}{IS\alpha(a)}$$

Uslovi (3.25) koristeći (3.28) postaju:

1° za akustične magnone:

$$(2S - 1)(D - D_s) + 2S\alpha(a)(I - I_s)(2 - v_{\bar{k}}) > 0 \quad (3.29)$$

2° za optičke magnone:

$$(2S - 1)(D - D_s) + 2S\alpha(a)(I - I_s)(2 - v_{\bar{k}}) < -2IS\alpha(a) \quad (3.30)$$

Menjanjem parametara sistema analiziraćemo kada su navedeni uslovi ispunjeni.

1. $D = D_S$

- a) $I = I_S$ Postoje samo zapreminski magnoni.
 b) $I > I_S$ Pošto važi: $-2 \leq v_{\vec{k}} \leq 2$ postoje samo površinski akustični magnoni.
 c) $I < I_S$ Pojavljuju se samo površinski optički magnoni, ali samo ako je ispunjeno:

$$v_{\vec{k}} < 2 - \frac{I}{I_S - I}$$

Ovo će biti zadovoljeno ako je $I_S > \frac{5}{4}I$ što je u saglasnosti sa rezultatom (2.26) dobijenim pri analizi površinskih faznih prelaza.

2. $D > D_S$

- a) $I \geq I_S$ Postoje samo površinski akustični magnoni.
 b) $I < I_S$ Površinski magnoni postoje samo kada su ispunjeni uslovi:

za akustične:
$$v_{\vec{k}}^{ak} > 2 - \frac{(2S-1)(D-D_S)}{2S\alpha(a)(I_S-I)}$$

odnosno za optičke magnone:
$$v_{\vec{k}}^{opt} < 2 - \frac{(2S-1)(D-D_S)}{2S\alpha(a)(I_S-I)} - \frac{I}{I_S-I}$$

3. $D < D_S$

- a) $I = I_S$ Postoje samo površinski optički magnoni ako je ispunjeno:

$$D_S - D > \frac{2S\alpha(a)}{2S-1}I$$

- b) $I > I_S$ Postoje površinski magnoni ako su ispunjeni uslovi:

za akustične:
$$v_{\vec{k}}^{ak} < 2 - \frac{(2S-1)(D_S-D)}{2S\alpha(a)(I-I_S)}$$

odnosno za optičke magnone:
$$v_{\vec{k}}^{opt} > 2 - \frac{(2S-1)(D_S-D)}{2S\alpha(a)(I-I_S)} + \frac{I}{I-I_S}$$



c) $I < I_S$ Postoje samo površinski optički magnoni ako važi:

$$v_{\bar{k}} < 2 - \frac{I}{I_S - I} + \frac{(2S - 1)(D_S - D)}{2S\alpha(a)(I_S - I)}$$

Pošto je interval za $v_{\bar{k}}$: $-2 \leq v_{\bar{k}} \leq 2$ vidimo da će optički magnoni postojati u celoj oblasti ako važi:

$$D_S - D \leq \frac{2S\alpha(a)}{2S - 1} I$$

Uporedimo energije elementarnih ekscitacija (3.17), (3.22) i (3.24). Energiju zapreminskih talasa možemo napisati kao:

$$E^B = (2S - 1)D + 2IS\alpha(a)[3 - \cos k_z a_0 - v_{\bar{k}}], \text{ odakle:}$$

1° za $k_z a_0 = 0$ dobijamo energiju dna (bottom) zapreminskog kontinuuma:

$$E^B = \varepsilon_{\text{bott}} = (2S - 1)D + 2IS\alpha(a)[2 - v_{\bar{k}}]$$

2° za $k_z a_0 = \pi$ dobijamo energiju vrha (top) zapreminskog kontinuuma:

$$E^B = \varepsilon_{\text{top}} = (2S - 1)D + 2IS\alpha(a)[4 - v_{\bar{k}}]$$

Sada energije površinskih talasa možemo predstaviti kao:

$$E_S^{\text{ak}} = \varepsilon_{\text{bott}} - 2IS\alpha(a)[ch \eta a_0 - 1]$$

$$E_S^{\text{opt}} = \varepsilon_{\text{top}} + 2IS\alpha(a)[ch \eta a_0 - 1]$$

Iz ovoga možemo zaključiti da se energija površinskih akustičnih magnona nalazi uvek ispod dna, a optičkih magnona iznad vrha kontinuuma energije zapreminskih magnona u oblastima gde je $\eta > 0$. U četvrtom poglavlju nacrtaćemo i analizirati kvalitativne grafike na osnovu gornjih rezultata, za različite parametre sistema.

b) Slučaj antiferomagnetnog osnovnog stanja

U ovom delu rada ćemo ispitati magnetna pobuđenja u antiferomagnetiku zapreminski centrirane kubne strukture. Hamiltonijan za opis ovog sistema sadrži članove Hajzenbergove i bikvadratne izmene i član jednojonske anizotropije koji smo uveli i kod analize feromagnetika jer je on gotovo uvek prisutan kada i bikvadratni član.

Karakteristika antiferomagnetika je negativna vrednost integrala izmene ($I_{\bar{i}\bar{j}} < 0$) po čemu se ovaj Hamiltonijan i razlikuje od (3.1). Radi potpunije analize uzeli smo u obzir i interakciju spinova sa spoljašnjim magnetnim poljem usmerenim duž z-ose.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} \bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}} + \frac{a}{2} \sum_{\bar{i}, \bar{j}} I_{\bar{i}\bar{j}} (\bar{S}_{\bar{i}} \bar{S}_{\bar{j}})^2 - \sum_{\bar{i}} D_{\bar{i}} (\bar{S}_{\bar{i}})^2 - \mu \mathcal{H} \sum_{\bar{i}} S_{\bar{i}}^z - \omega_A^\pm \sum_{\bar{i}} S_{\bar{i}}^z \quad (3.31)$$

Poslednji član opisuje uticaj površinske anizotropije koji je značajan za antiferomagnetike.

Jednačina kretanja za operator S_m^+ je:

$$i\hbar \frac{dS_m^+}{dt} = [S_m^+, H] \quad (3.32)$$

Izračunavanjem se dobija:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_m^+}{dt} = & -\sum_j I_{j\bar{m}} \left(1 - \frac{a}{2}\right) (S_j^z S_m^+ - S_m^z S_j^+) - \frac{a}{2} \sum_j I_{j\bar{m}} \left[Q_j^0 (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+) - \right. \\ & \left. - Q_m^0 (S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+) + (S_m^+)^2 (S_j^- S_j^z + S_j^z S_j^-) + (S_j^+)^2 (S_m^- S_m^z + S_m^z S_m^-) \right] + \\ & + (\mu\mathcal{H} + \omega_A^+) S_m^+ + D_m (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Negativna vrednost integrala izmene primorava spinove na međusobnu antiparalelnu orijentaciju. Zbog toga kristalnu rešetku antiferomagnetika delimo na dve podrešetke (a,b) pri čemu na $T = 0K$ važi:

$$\langle S_i^{za} \rangle = -\langle S_i^{zb} \rangle = S \quad (3.34)$$

Procedura primene aproksimacija je slična kao kod feromagnetika s tim što je ovde potrebno dekuplovati proizvode spinskih operatora posebno za obe podrešetke:

$$\begin{aligned} (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+)^{(a)} & \approx (2S - 1) S_m^{+a} \\ (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+)^{(b)} & \approx (-2S + 1) S_m^{+b} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Sistem jednačina (3.35) postaje:

$$i\hbar \frac{dS_m^{+a}}{dt} = \alpha_s(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_m^{+a} + [D_m(2S - 1) + \omega_a] S_m^{+a} + \alpha_s(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_j^{+b} \quad (3.36)$$

$$i\hbar \frac{dS_m^{+b}}{dt} = -\alpha_s(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_m^{+b} + [-D_m(2S - 1) + \omega_b] S_m^{+b} - \alpha_s(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_j^{+a} \quad (3.37)$$

gde smo označili:

$$\alpha_s(a) = S[1 - a - 2Sa(S - 1)] \quad \omega_{a/b} = \mu\mathcal{H} \pm \omega_A \quad (3.38)$$

Pomoću Furije transformacije:

$$S_m^+(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} S_m^+(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad E = \hbar\omega \quad (3.39)$$

jednačine (3.36) i (3.37) dobijaju oblik:

$$ES_{\bar{m}}^{+a}(\omega) = \alpha_S(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_{\bar{m}}^{+a}(\omega) + [D_{\bar{m}}(2S-1) + \omega_a] S_{\bar{m}}^{+a}(\omega) + \alpha_S(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_j^{+b}(\omega) \quad (3.40)$$

$$ES_{\bar{m}}^{+b}(\omega) = -\alpha_S(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_{\bar{m}}^{+b}(\omega) + [-D_{\bar{m}}(2S-1) + \omega_b] S_{\bar{m}}^{+b}(\omega) - \alpha_S(a) \sum_j I_{j\bar{m}} S_j^{+a}(\omega) \quad (3.41)$$

Furije transformacija u dvodimenzionom \bar{k}_H prostoru ima oblik:

$$S_{\bar{m}}^{+a,b} = \frac{1}{N_1 N_2} \sum_{\bar{k}_H} e^{i\bar{k}_H \bar{\rho}} U_n^{a,b}(\bar{k}_H, \omega) \quad (3.42)$$

$$\bar{k}_H = (k_x, k_y, 0) \quad \bar{m} = (\bar{\rho}, na_0)$$

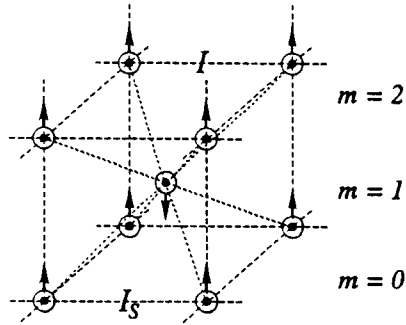
Kada je primenimo na (3.40) i (3.41) dobijamo sledeći sistem jednačina za $U_n^{a,b}(\bar{k}_H, \omega)$:

$$\begin{aligned} n=0 \quad EU_0^a(\bar{k}_H, \omega) &= [(2S-1)D_S + \mu\mathcal{H} + \omega_A + I_S(0)\alpha_S(a)]U_0^a(\bar{k}_H, \omega) + \\ &+ I_S v_{\bar{k}} \alpha_S(a) U_1^b(\bar{k}_H, \omega) \\ n=1 \quad EU_1^b(\bar{k}_H, \omega) &= [-(2S-1)D_b + \mu\mathcal{H} - \omega_A - I_1(0)\alpha_S(a)]U_1^b(\bar{k}_H, \omega) - \\ &- \alpha_S(a) v_{\bar{k}} [I_S U_0^a(\bar{k}_H, \omega) + I U_2^a(\bar{k}_H, \omega)] \end{aligned} \quad (3.43)$$

$n \geq 2$ ($n = 2m; m \geq 1$)

$$\begin{aligned} EU_{2m}^a(\bar{k}_H, \omega) &= [(2S-1)D_a + \mu\mathcal{H} + \omega_A + \alpha_S(a)I(0)]U_{2m}^a(\bar{k}_H, \omega) + \\ &+ I\alpha_S(a)v_{\bar{k}} [U_{2m-1}^b(\bar{k}_H, \omega) + U_{2m+1}^b(\bar{k}_H, \omega)] \\ EU_{2m+1}^b(\bar{k}_H, \omega) &= [-(2S-1)D_b + \mu\mathcal{H} - \omega_A - \alpha_S(a)I(0)]U_{2m+1}^b(\bar{k}_H, \omega) - \\ &- I\alpha_S(a)v_{\bar{k}} [U_{2m}^a(\bar{k}_H, \omega) + U_{2m+2}^a(\bar{k}_H, \omega)] \end{aligned} \quad (3.44)$$

Zapreminski centrirana kubna struktura:



Slika 5

$$\begin{aligned} I_S(0) &= 4I_S \\ I_1(0) &= 4(I_S + I) \\ I(0) &= 8I \\ v_{\bar{k}} &= 4 \cos \frac{k_x a_0}{2} \cos \frac{k_y a_0}{2} \end{aligned} \quad (3.45)$$

U zavisnosti od veličine parametara sistema, sistemi jednačina (3.43) i (3.44) mogu imati rešenja u obliku zapreminskih odnosno površinskih magnona.

Rešenje tražimo u obliku:

$$\begin{aligned} U_n^a(\bar{k}_H, \omega) &= U_{2m}^a(\bar{k}_H, \omega) = U^a(\bar{k}_H, \omega) e^{i\lambda a_0 m} \\ U_{n\pm 1}^b(\bar{k}_H, \omega) &= U_{2m\pm 1}^b(\bar{k}_H, \omega) = U^b(\bar{k}_H, \omega) e^{i\lambda a_0 \left(m \pm \frac{1}{2}\right)} \\ m &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.46)$$

Kao i u analizi ekscitacija u feromagnetiku i ovde razlikujemo tri situacije:

- 1° $\lambda = k_z \in R$ – zapreminske ekscitacije
- 2° $\lambda = i\eta$, $\eta > 0$ – akustične površinske ekscitacije
- 3° $\lambda = \frac{\pi}{a_0} + i\eta$, $\eta > 0$ – optičke površinske ekscitacije

Na osnovu (3.46) možemo napisati:

$$\begin{aligned} U_{2m-1}^b(\bar{k}_H, \omega) + U_{2m+1}^b(\bar{k}_H, \omega) &= U^b(\bar{k}_H, \omega) e^{i\lambda a_0 m} 2 \cos \frac{\lambda a_0}{2} \\ U_{2m}^a(\bar{k}_H, \omega) + U_{2m+2}^a(\bar{k}_H, \omega) &= U^a(\bar{k}_H, \omega) e^{i\lambda a_0 \left(m + \frac{1}{2}\right)} 2 \cos \frac{\lambda a_0}{2} \end{aligned} \quad (3.47)$$

Zamenom (3.47) u sistem (3.44) dobijamo sistem homogenih jednačina za $U^a(\bar{k}_H, \omega)$ i $U^b(\bar{k}_H, \omega)$:

$$\begin{aligned} [E - (2S - 1)D_a - \omega_a - \alpha_s(a)I(0)]U^a(\bar{k}_H, \omega) - 2I\alpha_s(a)v_{\bar{k}} \cos \frac{\lambda a_0}{2} U^b(\bar{k}_H, \omega) &= 0 \\ 2I\alpha_s(a)v_{\bar{k}} \cos \frac{\lambda a_0}{2} U^a(\bar{k}_H, \omega) + [E + (2S - 1)D_b - \omega_b + \alpha_s(a)I(0)]U^b(\bar{k}_H, \omega) &= 0 \end{aligned} \quad (3.48)$$

Sistem (3.48) ima rešenje za $U^a(\bar{k}_H, \omega)$ i $U^b(\bar{k}_H, \omega)$ samo kada je determinanta sistema jednaka nuli:

$$\begin{aligned} [E - (2S - 1)D_a - \omega_a - \alpha_s(a)I(0)][E + (2S - 1)D_b - \omega_b + \alpha_s(a)I(0)] + \\ + 4I^2\alpha_s^2(a)v_{\bar{k}}^2 \cos^2 \frac{\lambda a_0}{2} = 0 \end{aligned} \quad (3.49)$$

odnosno:

$$(E - \Omega_a)(E - \Omega_b) + 4I^2\alpha_s^2(a)v_{\bar{k}}^2 \cos^2 \frac{\lambda a_0}{2} = 0 \quad (3.50)$$

gde je:

$$\begin{aligned}\Omega_a &= (2S-1)D_a + \omega_a + \alpha_s(a)I(0) \\ \Omega_b &= -(2S-1)D_b + \omega_b - \alpha_s(a)I(0)\end{aligned}\quad (3.51)$$

$$\begin{aligned}E_{1,2} &= \frac{(2S-1)(D_a - D_b)}{2} + \mu\mathcal{H} \pm \\ &\pm \sqrt{\left[\omega_A + \frac{(2S-1)(D_a + D_b)}{2} + I(0)\alpha_s(a) \right]^2 - 4I^2\alpha_s^2(a)v_{\vec{k}}^2 \cos^2 \frac{\lambda a_0}{2}}\end{aligned}\quad (3.52)$$

1° Zapreminske ekscitacije

$$\lambda = k_z \Rightarrow 2Iv_{\vec{k}} \cos \frac{\lambda a_0}{2} = I(0)\gamma(\vec{k})$$

gde je:

$$\gamma(\vec{k}) = \cos \frac{k_x a_0}{2} \cos \frac{k_y a_0}{2} \cos \frac{k_z a_0}{2}\quad (3.53)$$

Sada je energija zapreminskih magnona data:

$$\begin{aligned}E_{1,2}^B &= \frac{(2S-1)(D_a - D_b)}{2} + \mu\mathcal{H} \pm \\ &\pm \sqrt{\left[\omega_A + \frac{(2S-1)(D_a + D_b)}{2} + I(0)\alpha_s(a) \right]^2 - \alpha_s^2(a)I^2(0)\gamma^2(\vec{k})}\end{aligned}\quad (3.54)$$

Treba napomenuti da zapreminske ekscitacije postoje samo ako je diskriminanta od (3.54) veća ili jednaka nuli.

2° Površinske ekscitacije

a) akustične magnonske grane: $\lambda = i\eta$

Energija površinskih - akustičnih magnona na osnovu (3.52) je:

$$\begin{aligned}E_{1,2}^{ak} &= \frac{(2S-1)(D_a - D_b)}{2} + \mu\mathcal{H} \pm \\ &\pm \sqrt{\left[\omega_A + \frac{(2S-1)(D_a + D_b)}{2} + I(0)\alpha_s(a) \right]^2 - 4I^2\alpha_s^2(a)v_{\vec{k}}^2 ch^2 \frac{\eta a_0}{2}}\end{aligned}\quad (3.55)$$

b) optičke magnonske grane: $\lambda = \frac{\pi}{a_0} + i\eta$

$$\cos \frac{a_0}{2} \left(\frac{\pi}{a_0} + i\eta \right) = i \operatorname{sh} \frac{a_0 \eta}{2}$$

Kombinacijom gornje relacije sa (3.52) dobijamo energiju površinskih optičkih magnona.

$$E_{1,2}^{opt} = \frac{(2S-1)(D_a - D_b)}{2} + \mu\mathcal{H} \pm \sqrt{\left[\omega_A + \frac{(2S-1)(D_a + D_b)}{2} + I(0)\alpha_s(a) \right]^2 + 4I^2\alpha_s^2(a)v_{\vec{k}}^2 sh^2 \frac{\eta a_0}{2}} \quad (3.56)$$

Možemo uporediti energije površinskih i zapreminskih magnona.

$$\varepsilon_{1,2bot}^B = E_{1,2}^B(k_z = 0) = \frac{(2S-1)(D_a - D_b)}{2} + \mu\mathcal{H} \pm \sqrt{\left[\omega_A + \frac{(2S-1)(D_a + D_b)}{2} + I(0)\alpha_s(a) \right]^2 - 4I^2\alpha_s^2(a)v_{\vec{k}}^2} \quad (3.57)$$

$$\varepsilon_{1,2top}^B = E_{1,2}^B\left(k_z = \pm \frac{\pi}{a_0}\right) = \frac{(2S-1)(D_a - D_b)}{2} + \mu\mathcal{H} \pm \left| \omega_A + \frac{(2S-1)(D_a + D_b)}{2} + I(0)\alpha_s(a) \right| \quad (3.58)$$

Vidimo da je:

$$\left| E_{1,2}^{ak} \right| \leq \left| \varepsilon_{1,2bot}^B \right| \quad \left| E_{1,2}^{opt} \right| \geq \left| \varepsilon_{1,2top}^B \right|$$

Da bi napravili grafički prikaz površinskih ekscitacija u zavisnosti od parametara sistema nedostaje nam informacija o veličini koeficijenta prigušenja površinskih stanja η

Zbog toga moramo simultano rešavati sisteme jednačina (3.43) i (3.44):

$$\begin{aligned} \left[(E - \Omega_a^S)(E - \Omega_b^1) + \alpha_s^2(a)v_{\vec{k}}^2 I_S^2 \right] U_0^a &= -\alpha_s^2(a)v_{\vec{k}}^2 I I_S U_2^a \\ \left[(E - \Omega_a)(E - \Omega_b) + 2\alpha_s^2(a)I^2 v_{\vec{k}}^2 \right] U_{2m}^a &= -\alpha_s^2 I^2 v_{\vec{k}}^2 (U_{2m+2}^a + U_{2m-2}^a) \end{aligned} \quad (3.59)$$

gde je:

$$\begin{aligned} \Omega_a^S &= (2S-1)D_S + \omega_a + \alpha_s(a)I_S(0) \\ \Omega_b^1 &= -(2S-1)D_b + \omega_b - \alpha_s(a)I_1(0) \end{aligned} \quad (3.60)$$

Ω_a i Ω_b su dati sa (3.51)

Koristimo rešenje (3.46) i dobijamo:

$$\begin{aligned} (E - \Omega_a^S)(E - \Omega_b^1) + \alpha_s^2(a)I^2 v_{\vec{k}}^2 \varepsilon \left(\varepsilon + \frac{1}{x} \right) &= 0 \\ (E - \Omega_a)(E - \Omega_b) + \alpha_s^2(a)I^2 v_{\vec{k}}^2 \left(2 + x + \frac{1}{x} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (3.61)$$

gde je: $\varepsilon = \frac{I_s}{I}$ $x = e^{-i\lambda a_0}$

1° za akustične magnone: $x = e^{\eta a_0} > 1$

2° za optičke magnone: $x = -e^{\eta a_0} < -1$

Iz sistema (3.61) možemo odrediti energije elementarnih ekscitacija samo numeričkim putem.

Međutim, sistem se može analitički rešiti u nekim specijalnim slučajevima, recimo $I_s = I$ ili $I_s = 2I$ i sl.

naprimer: $I_s = I$ što daje $\Omega_b = \Omega_b^I$.

Rešavanjem sistema (3.61) nalazimo eksplicitan izraz za energiju elementarnih ekscitacija antiferomagnetika sa zapreminski centriranom kubnom strukturom:

$$E_{1,2} = \frac{\Omega_a^S + \Omega_b}{2} - \frac{\alpha_S^2(a)I^2v_{\vec{k}}^2}{2(\Omega_a^S - \Omega_a)} \pm \frac{1}{2} \left[\left(\Omega_b - \Omega_a^S \right)^2 - \frac{2\alpha_S^2(a)(\Omega_a^S + \Omega_b - 2\Omega_a)I^2v_{\vec{k}}^2}{\Omega_a^S - \Omega_a} + \frac{\alpha_S^4(a)I^4v_{\vec{k}}^4}{(\Omega_a^S - \Omega_a)^2} \right]^{\frac{1}{2}}$$

4.

Analiza dobijenih rezultata

Rezultate kvalitativnih analiza i numeričkih izračunavanja najpogodnije je prikazati grafički tako što ćemo zakone disperzije zapreminskih i površinskih ekscitacija, za date vrednosti parametara sistema, prikazati na istoj slici.

Prva četiri grafika predstavljaju kvalitativne prikaze zavisnosti energija pobuđenja od veličine $(2 - v_k)$ u dvodimenzionalnoj Brillouenovoj zoni za feromagnetik sa prostom kubnom strukturom. Možemo uočiti da se u zavisnosti od odnosa parametara sistema mogu pojaviti sledeći slučajevi:

- za $I > I_S$ i $D \geq D_S$ ili $I = I_S$ i $D > D_S$ javljaju se samo akustični magnoni (slika 6)
- za $I < I_S$ i $D \leq D_S$ ili $I = I_S$ i $D < D_S$ javljaju se samo optički magnoni (slika 7)
- za $I > I_S$ i $D < D_S$ ili $I < I_S$ i $D > D_S$ javljaju se akustični i optički magnoni ali u različitim oblastima Brillouenove zone (slike 8 i 9).

Ostali grafici, koji se odnose na antiferomagnetik sa zapreminski centriranom kubnom strukturom dobijeni su numeričkim putem za slučaj tzv. slobodne površine $I = I_S$, $\varepsilon = 1$. U cilju povećanja univerzalnosti prikaza, crtali smo bezdimenzione veličine E/I u funkciji $(1 - \bar{v})$, gde je $\bar{v} = \frac{1}{4} v_k$. Stanja zapreminskih pobuđenja čine kontinuum, zbog toga se na grafiku crtaju dno - *bottom* i vrh - *top* kontinuuma energije, koje odgovaraju ekstremnim vrednostima člana $\cos \frac{k_z a_0}{2}$.

Pošto smo se ograničili samo na analizu slučaja tzv. slobodne površine, na graficima će se pored energija dva bulk kontinuuma koje su simetrične, pojaviti i dve akustične površinske grane koje su nesimetrične u odnosu na nulu. Eksperimentalno će se uvek registrovati grana sa nižom energijom (po apsolutnoj vrednosti), ali mi ćemo na graficima prikazati obe grane.

U radu [5] su takođe analizirane elementarne ekscitacije za feromagnet i ferimagnet (antiferomagnet) sa istim hamiltonijanom, ali se rezultati delimično razlikuju od naših s obzirom da su autori napravili neke greške u dekuplovanju GF. Pored toga na graficima nisu prikazali odnos zapreminskih i površinskih ekscitacija, tako da je teško zaključiti u kojim oblastima dvodimenzione Brillouenove zone postoji preklapanje tih grana.

Pošto je zadatak ovog rada bio da se ispita uticaj bikvadratne interakcije na energetski spektar sistema, analiziraćemo neke karakteristične slučajeve. Za $S = 1,5$ u

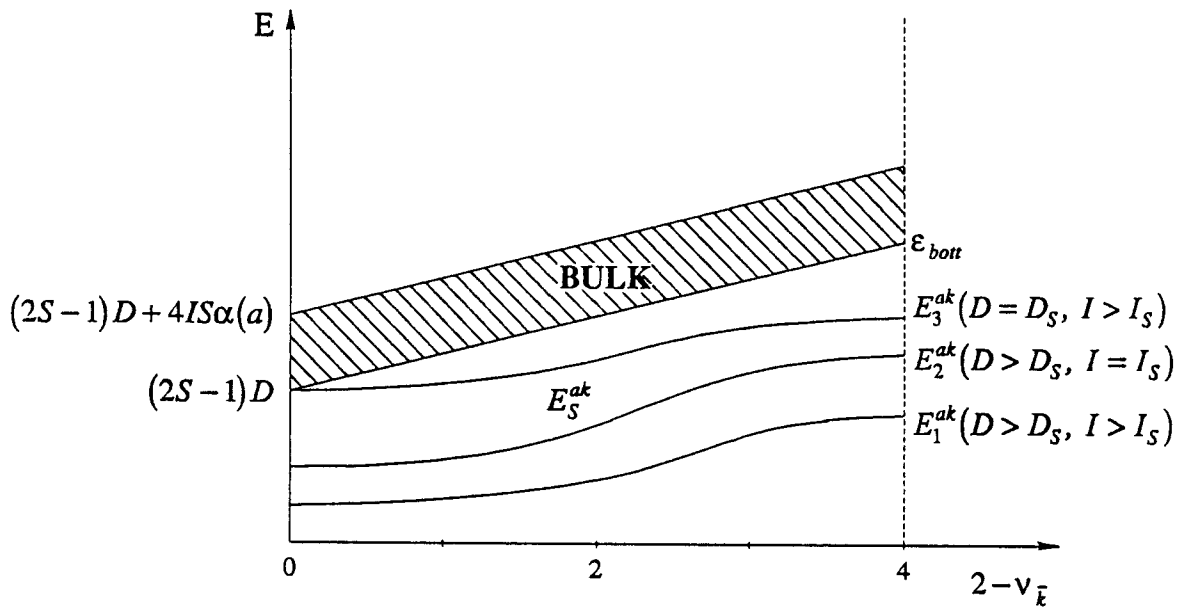
slučaju: $D_S/I = 0$, $D/I = 0$, $a = 0$ (slika 10a) gornja akustična grana počinje od nule, postoji u celoj dvodimenzionoj Brillouenovoj zoni i ima, po apsolutnoj vrednosti, nižu energiju od donje akustične grane. Ovaj rezultat je u saglasnosti sa rezultatom rada [7], što možemo smatrati kao test ispravnosti našeg prilaza. Povećanjem parametra bikvadratne interakcije „ a “ do kritične vrednosti a_c , koja se definiše relacijom $\alpha_S(a_c) = 0$, (u našem slučaju za spin $S = 1,5$ dobija se $a_c = 0,4$) energija akustičnih magnona se smanjuje, pri čemu se donja akustična grana sve više približava bulk kontinuumu. Povećanjem parametra „ a “ iznad njene kritične vrednosti a_c energija akustičnih magnona se povećava, pri čemu donja akustična grana, postaje grana sa nižom energijom dok se gornja akustična grana približava bulk kontinuumu. U slučajevima kada je $D/I \neq 0$ i $D_S/I \neq 0$ (slike 11, 12 i 13) vidi se da postoji slična zavisnost energije akustičnih površinskih magnona od parametra „ a “. Posebno je međutim interesantna pojava konzistentnih progresivnih talasa pri kritičnoj vrednosti parametra bikvadratne interakcije $a = a_c$. U ovom slučaju važi relacija $\alpha_S(a) = 0$ i član koji daje zavisnost energije pobuđenja od talasnog vektora - otpada (slike 12c i 13c). Ovo naravno važi samo u aproksimaciji najbližih suseda. Kada bismo u analizi hamiltonijana uzeli u obzir i sledeće susede, tada ne bi dobili konzistentne progresivne talase za $a = a_c$ jer bi energija, makar slabije, zavisila od talasnog vektora.

Ovakvu zavisnost energije akustičnih magnona od parametra bikvadratne interakcije možemo protumačiti kao zavisnost smera precesije vektora spina od parametra „ a “, pri čemu na kritičnoj vrednosti ovog parametra dolazi do promene smera precesije vektora spina.

Treba uočiti da u slučajevima kada je $D/I \neq 0$ i $D_S/I \neq 0$, pri vrednostima parametra bikvadratne interakcije većim od kritične a_c , akustični magnoni ne postoje pri malim vrednostima talasnog vektora (tj. u dugotalasnoj oblasti) (slike 11c,d; 12d,e; i 13d,e).

Analiza odnosa zapreminskih i površinskih ekscitacija antiferomagnetika sa zapreminski centriranom kubnom strukturom može se proširiti i na slučaj $I \neq I_S$, ali zbog obimne numerike ovde nije urađena. Možemo samo napomenuti da bi se za $I_S > I$ pojavile i optičke grane površinskih magnona ($E_S > E_{bulk}$), kao i u slučaju $a = 0$ iz rada [7] ili u slučaju: $D_S/I = 2$, $D/I = 1$ i $a = 0,4$ iz ovoga rada (slika 13c), ali bi analiza zavisnosti energije od parametara a , D i D_S sigurno dala mnogo interesantnije rezultate.

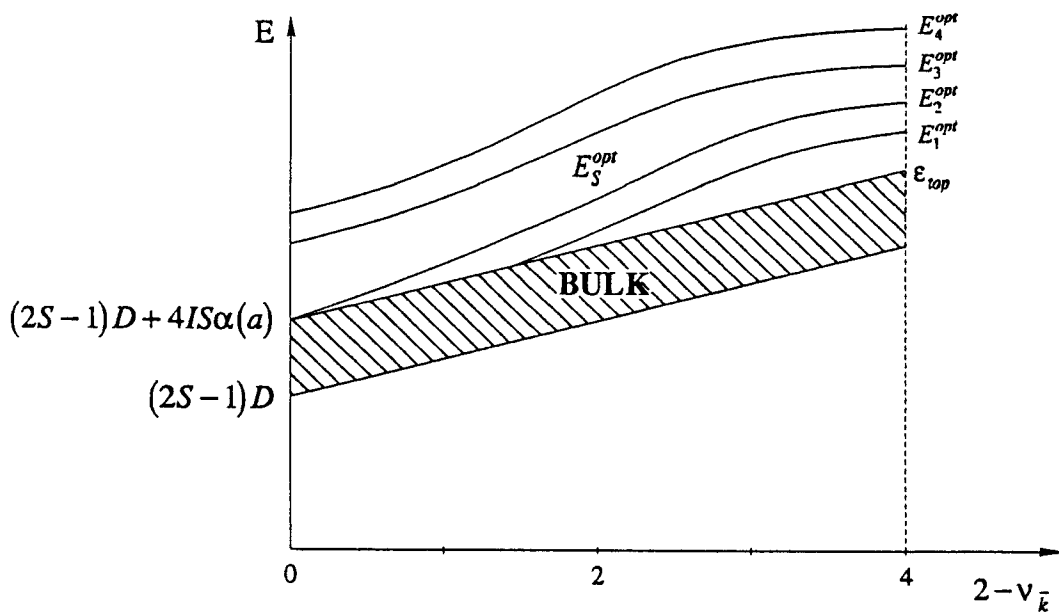
Samo akustični magnoni



Slika 6

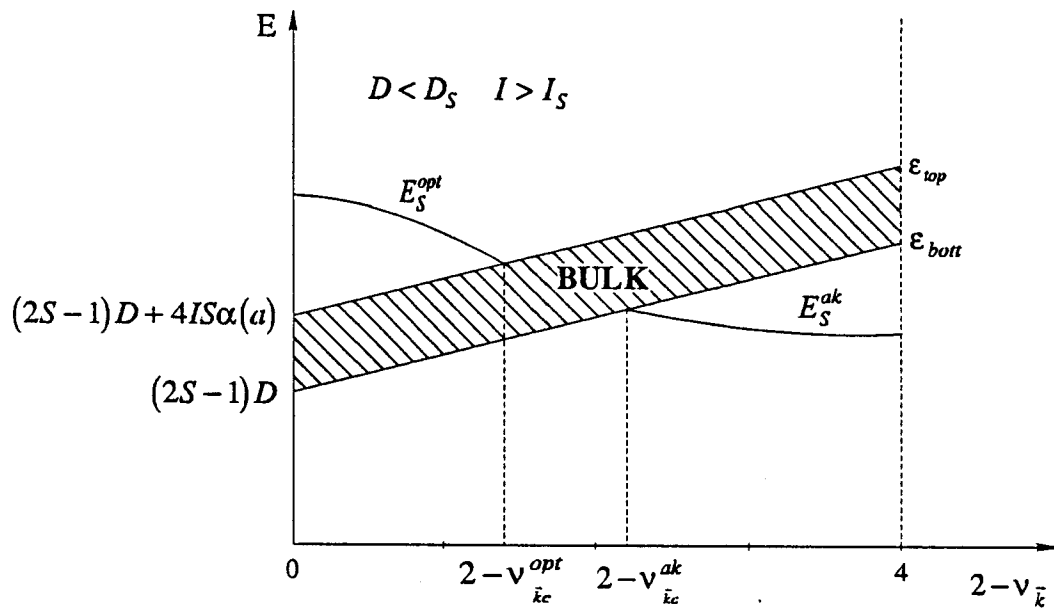
Samo optički magnoni

$$\begin{aligned}
 E_4^{opt}(D < D_S, I < I_S) & E_2^{opt}\left(D_S - D = \frac{2S\alpha(a)}{2S-1} I\right) \\
 E_3^{opt}(D < D_S, I = I_S) & E_1^{opt}\left(D_S - D < \frac{2S\alpha(a)}{2S-1} I\right)
 \end{aligned}$$



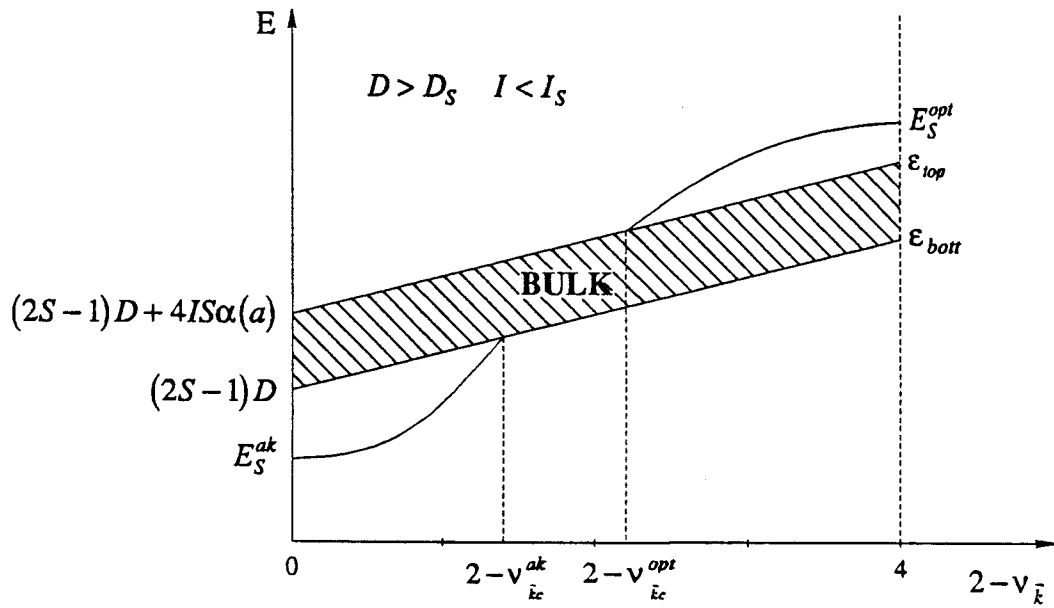
Slika 7

Akustični i optički magnoni

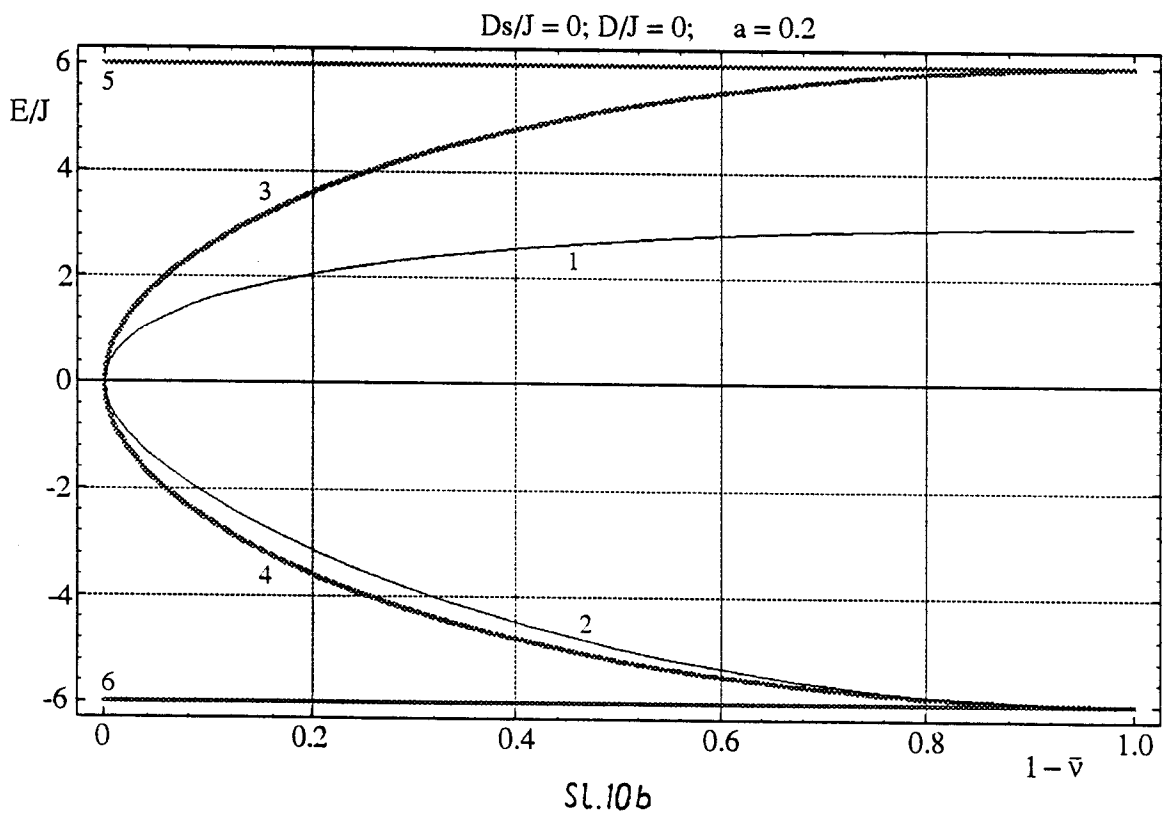
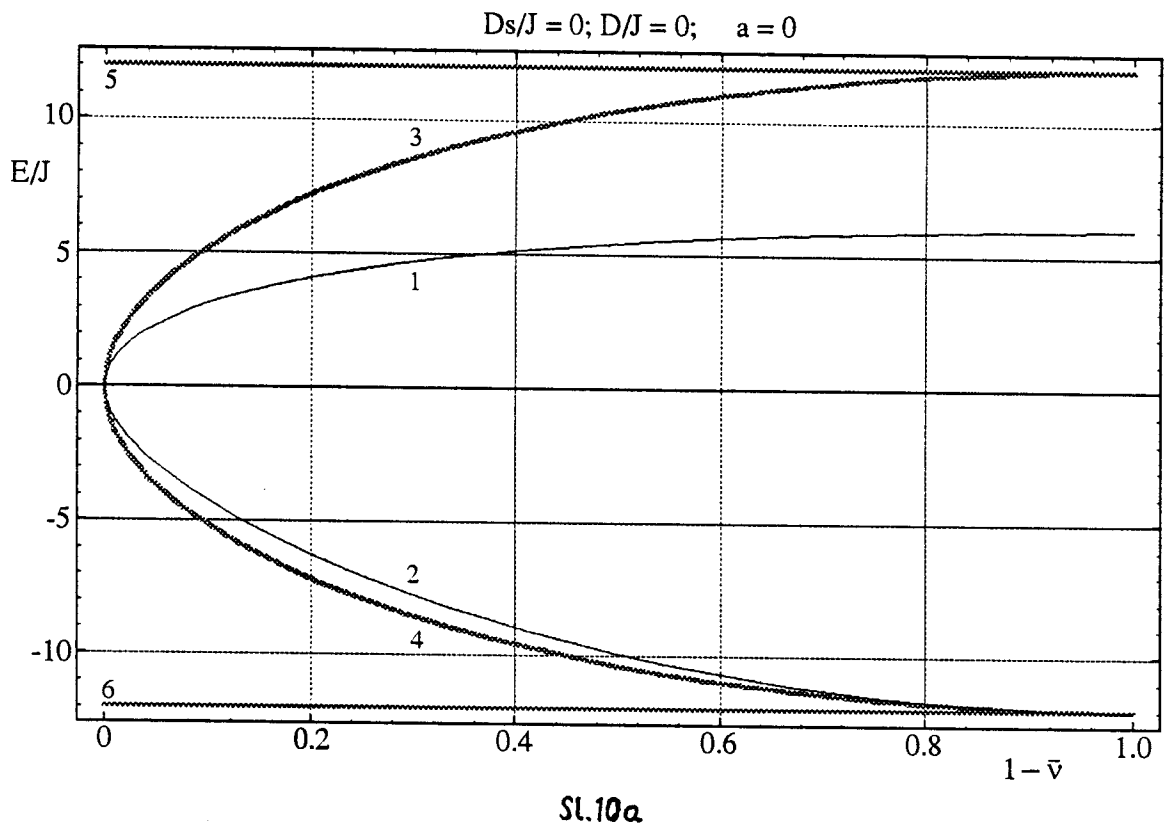


Slika 8

Akustični i optički magnoni

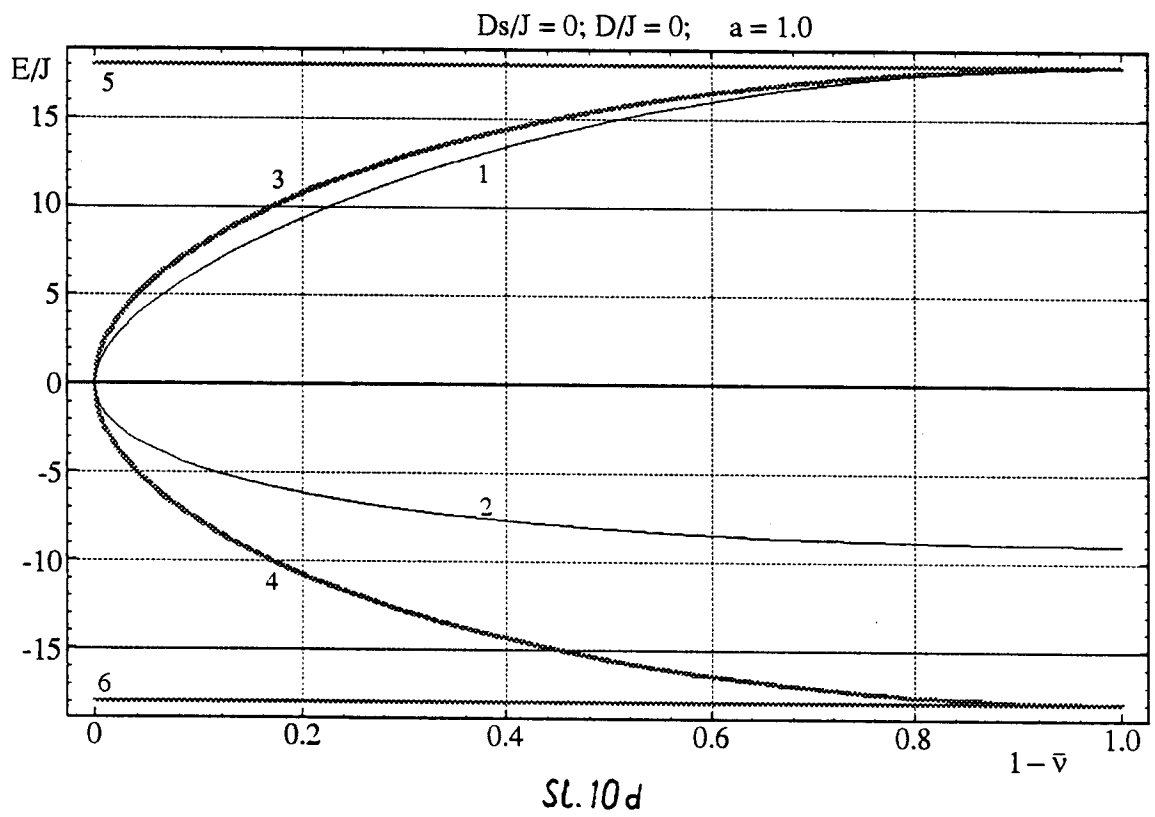
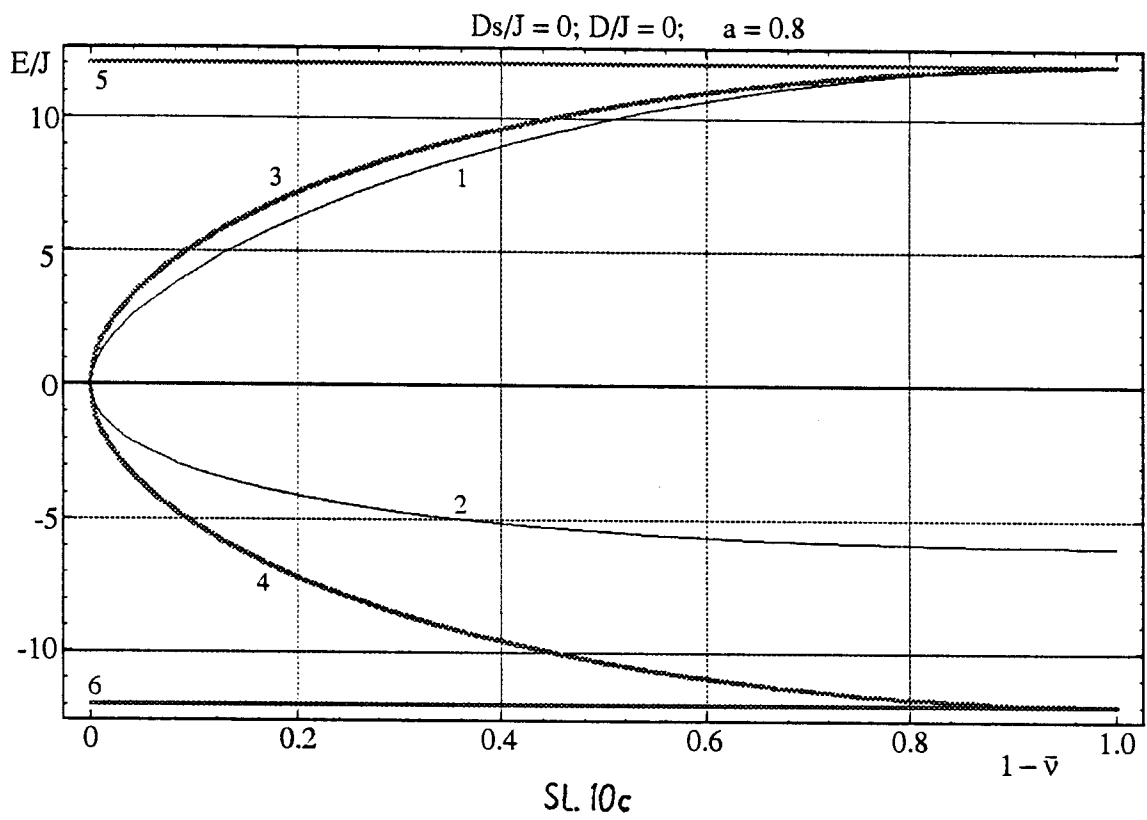


Slika 9



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

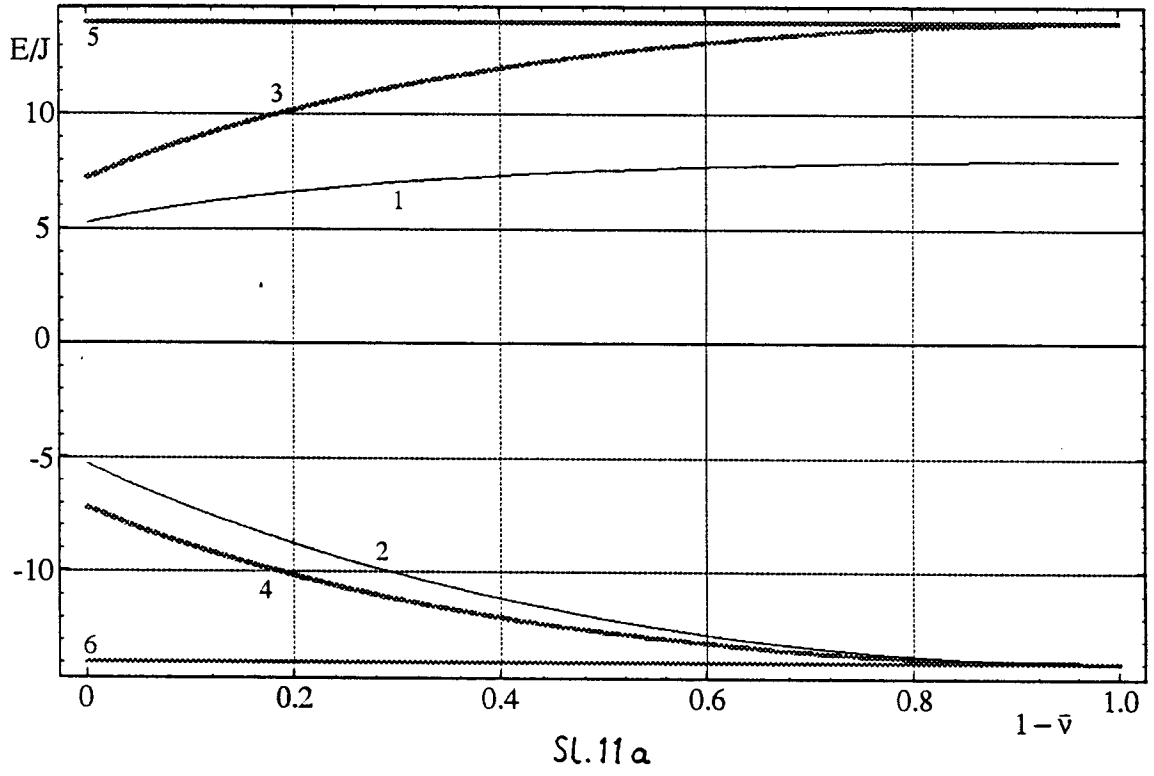
4 — $E_B^{\text{BOTT}-}$
 5 — $E_B^{\text{TOP}+}$
 6 — $E_B^{\text{TOP}-}$



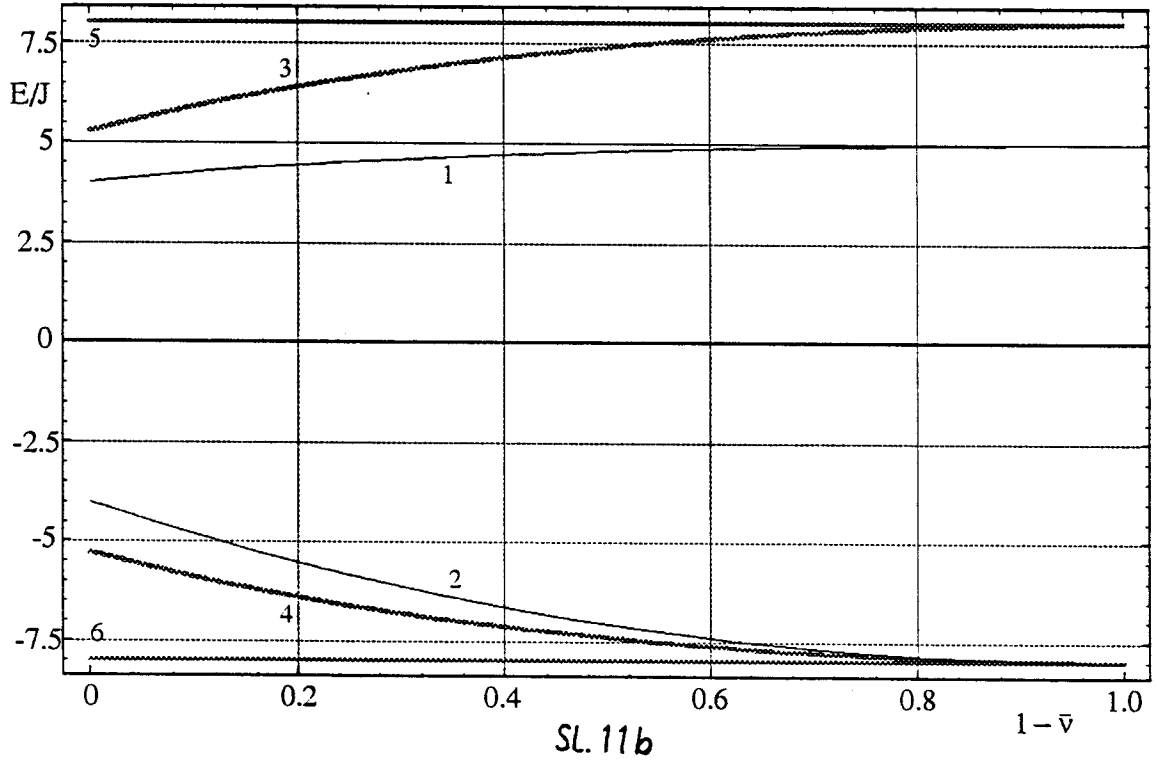
1 — E_S^+
 2 — E_S^-
 3 — E_B^{BOTT+}

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

$D_s/J = 1; D/J = 1; a = 0$

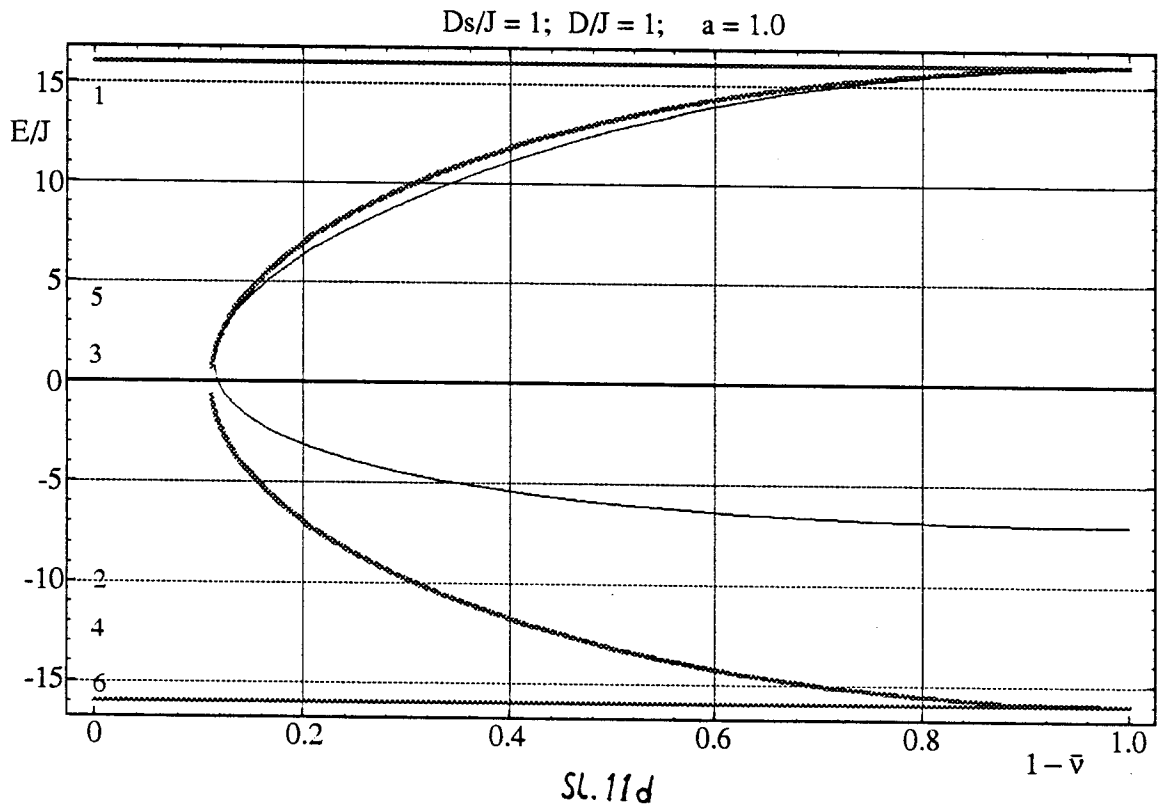
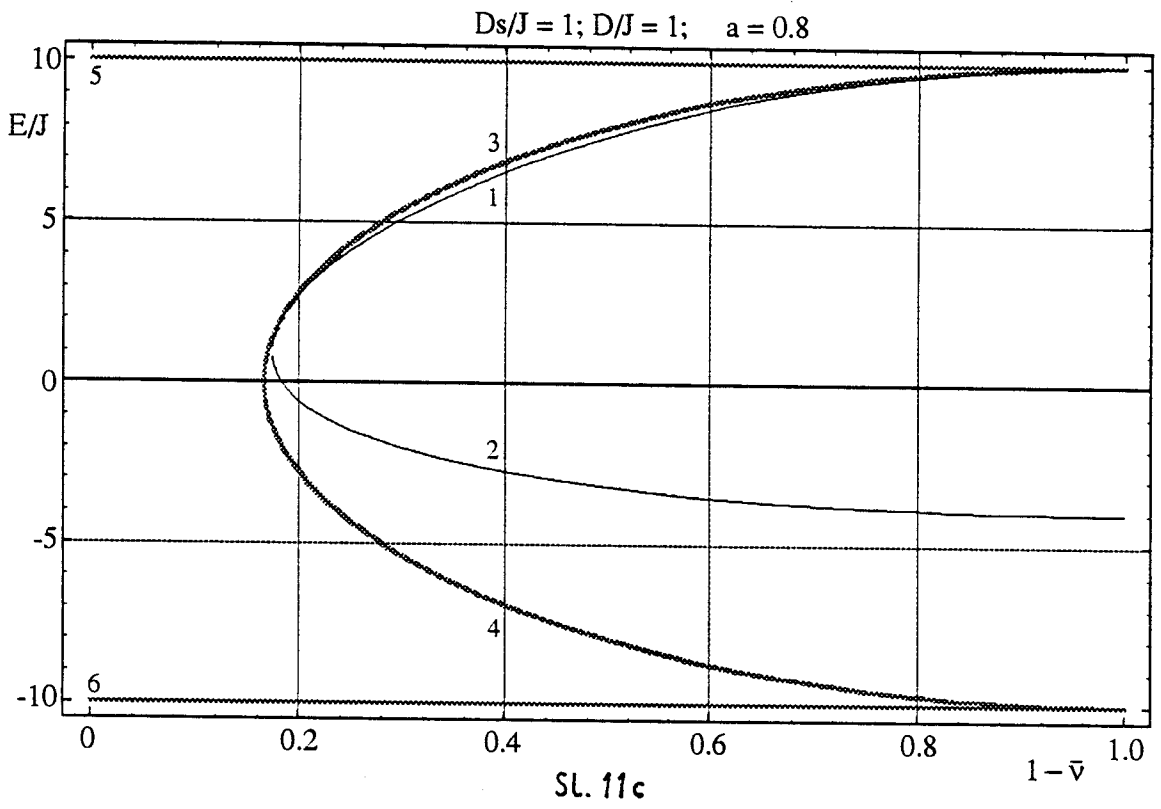


$D_s/J = 1; D/J = 1; a = 0.2$



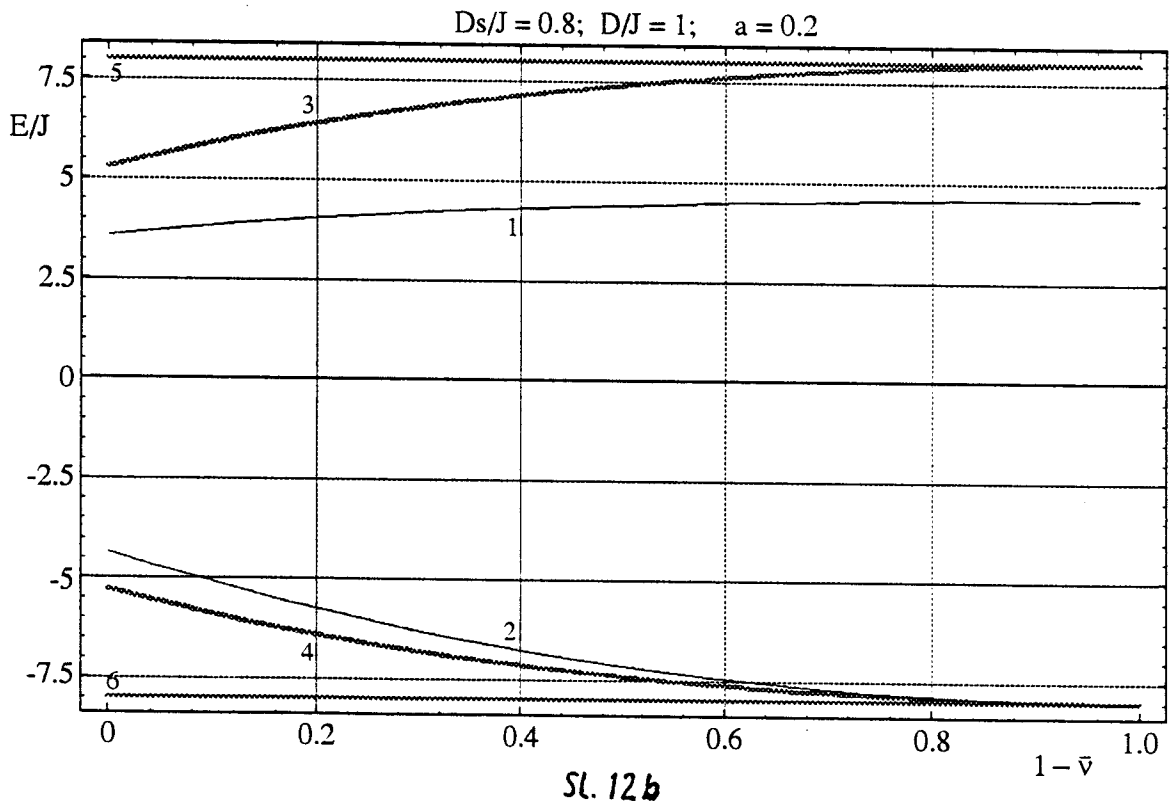
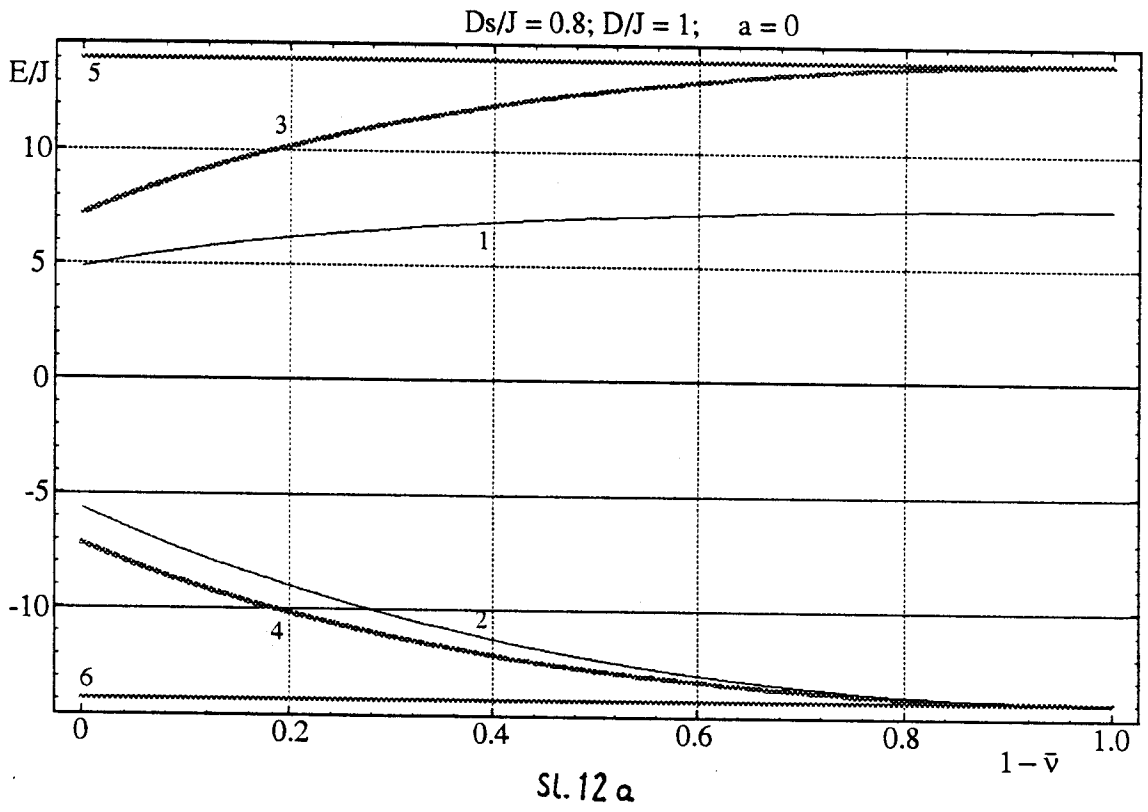
1 — E_S^+
 2 — E_S^-
 3 — $E_B^{\text{BOTT}+}$

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



1 — E_S^+
 2 — E_S^-
 3 — $E_B^{\text{BOT}+}$

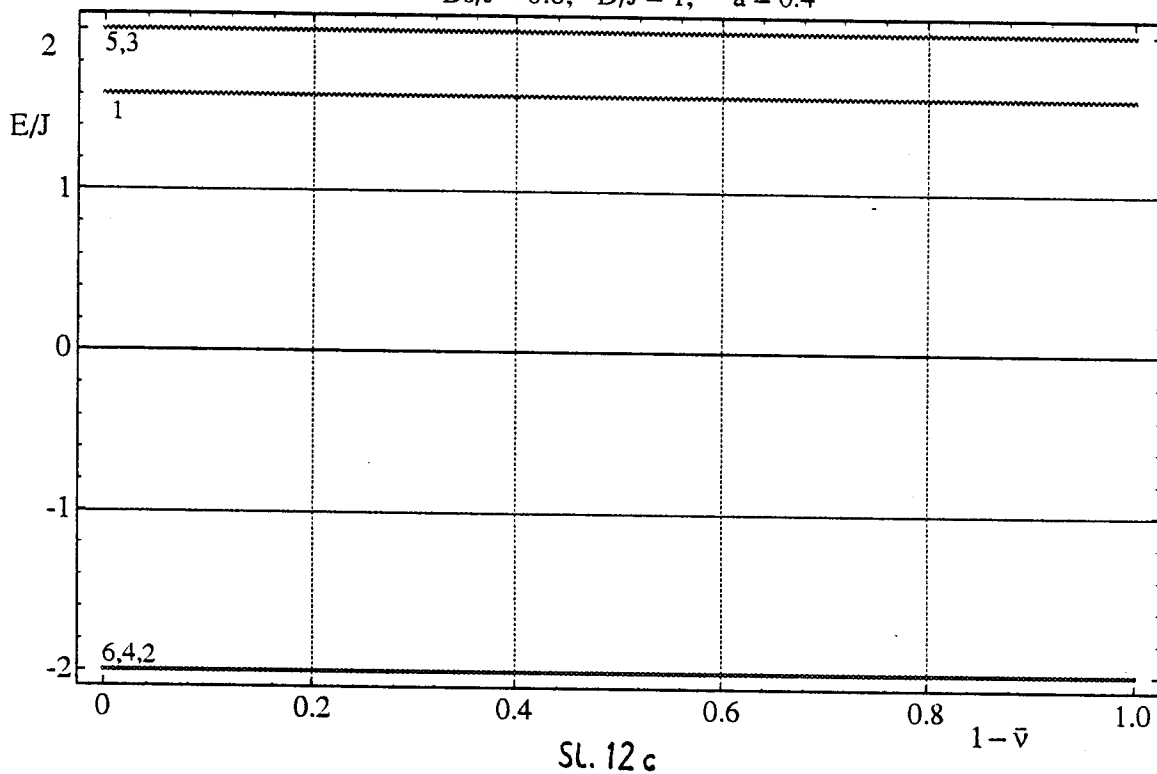
4 — $E_B^{\text{BOT}-}$
 5 — $E_B^{\text{TOP}+}$
 6 — $E_B^{\text{TOP}-}$



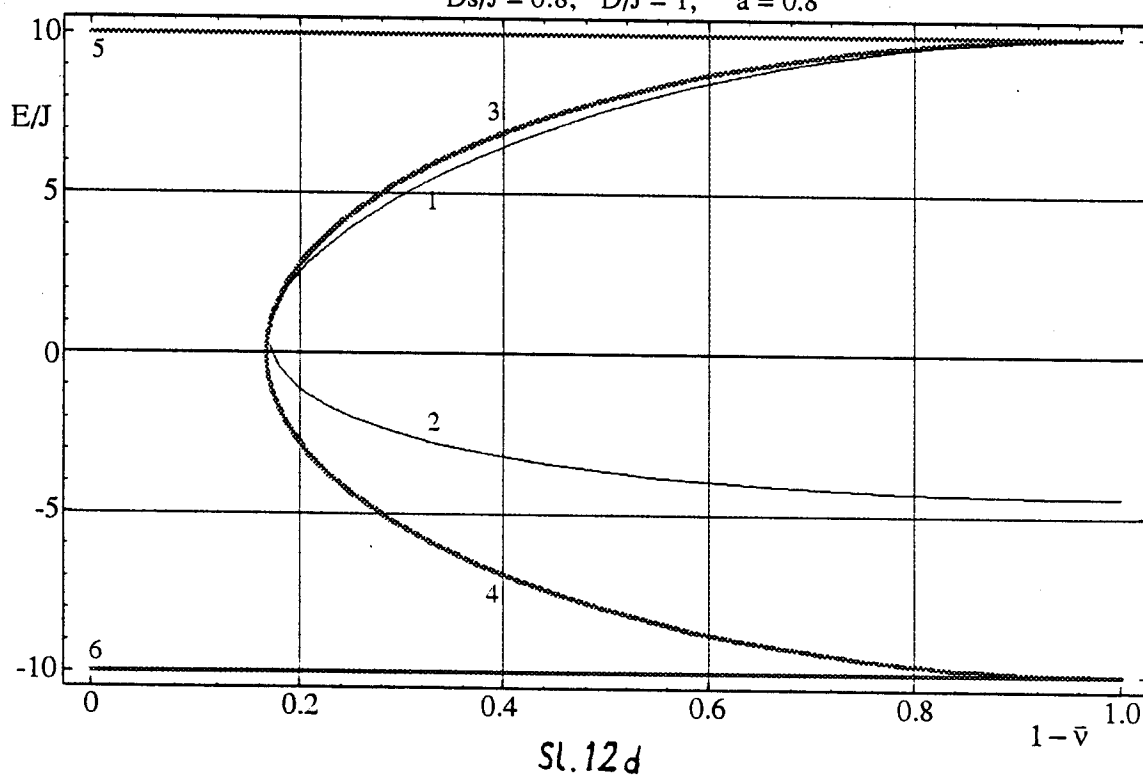
1 — E_S^+
 2 — E_S^-
 3 — $E_B^{\text{BOT}+}$

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

$D_s/J = 0.8; D/J = 1; a = 0.4$

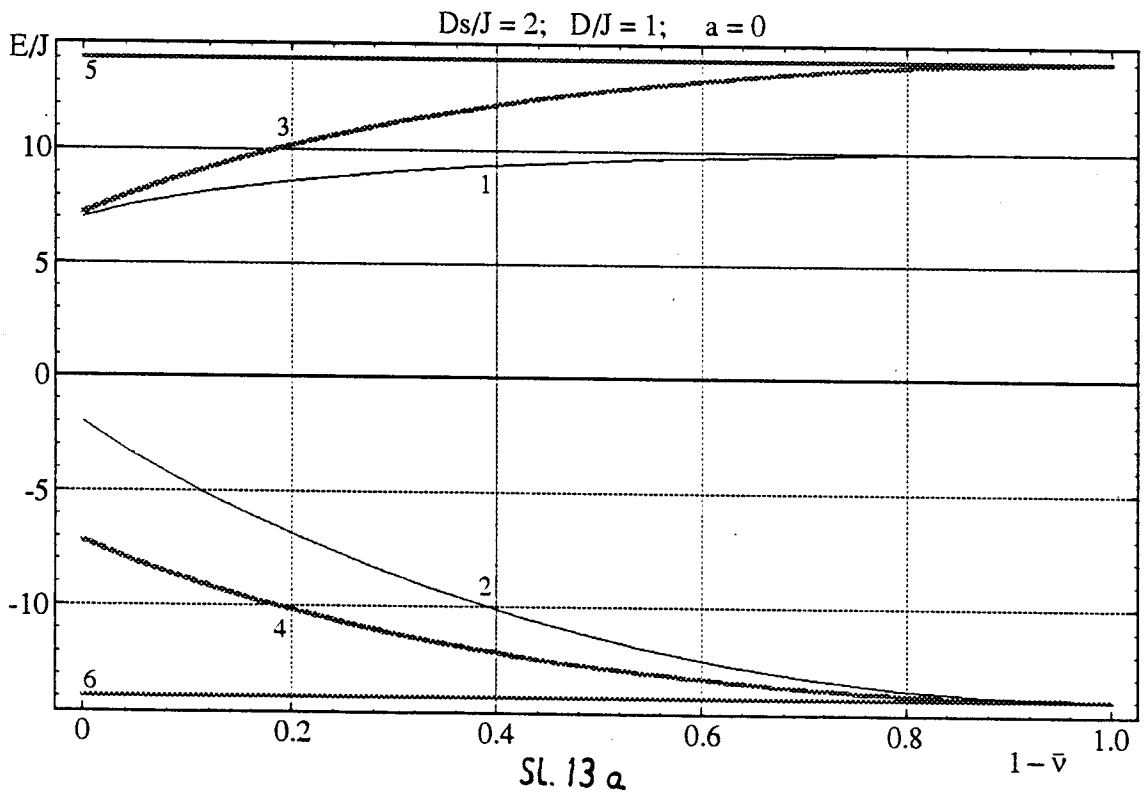
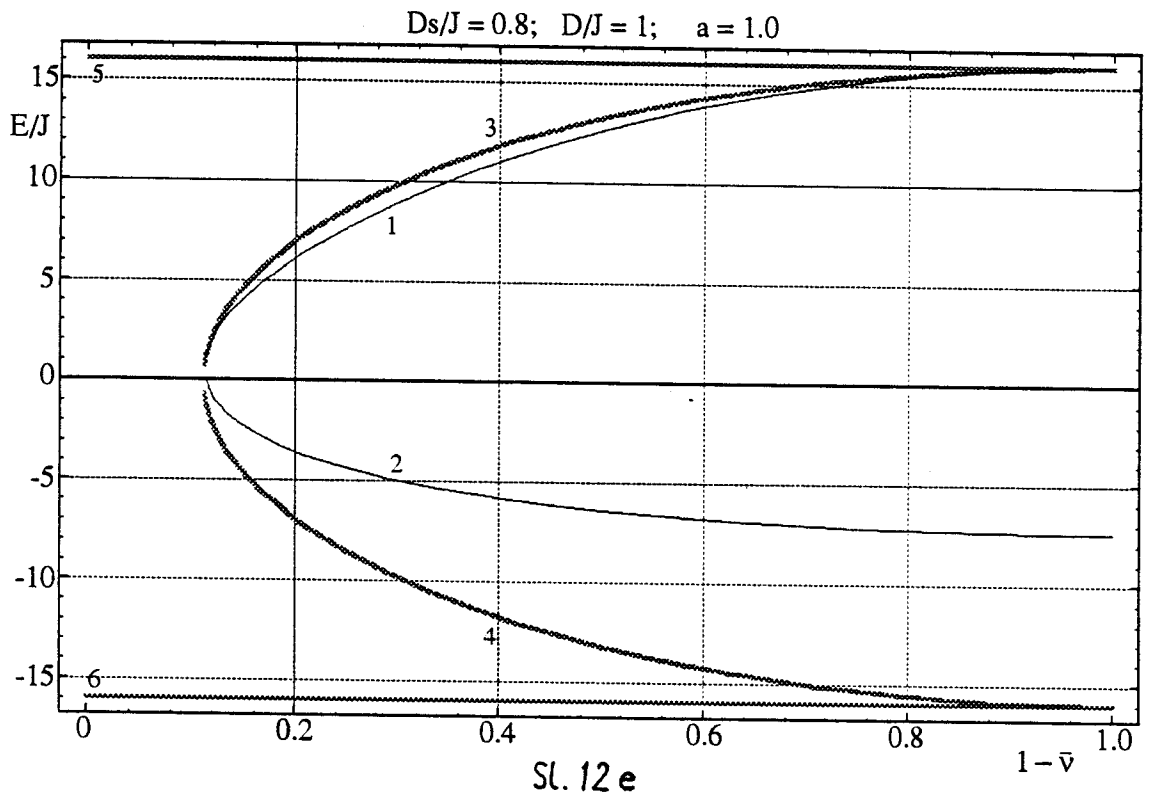


$D_s/J = 0.8; D/J = 1; a = 0.8$



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

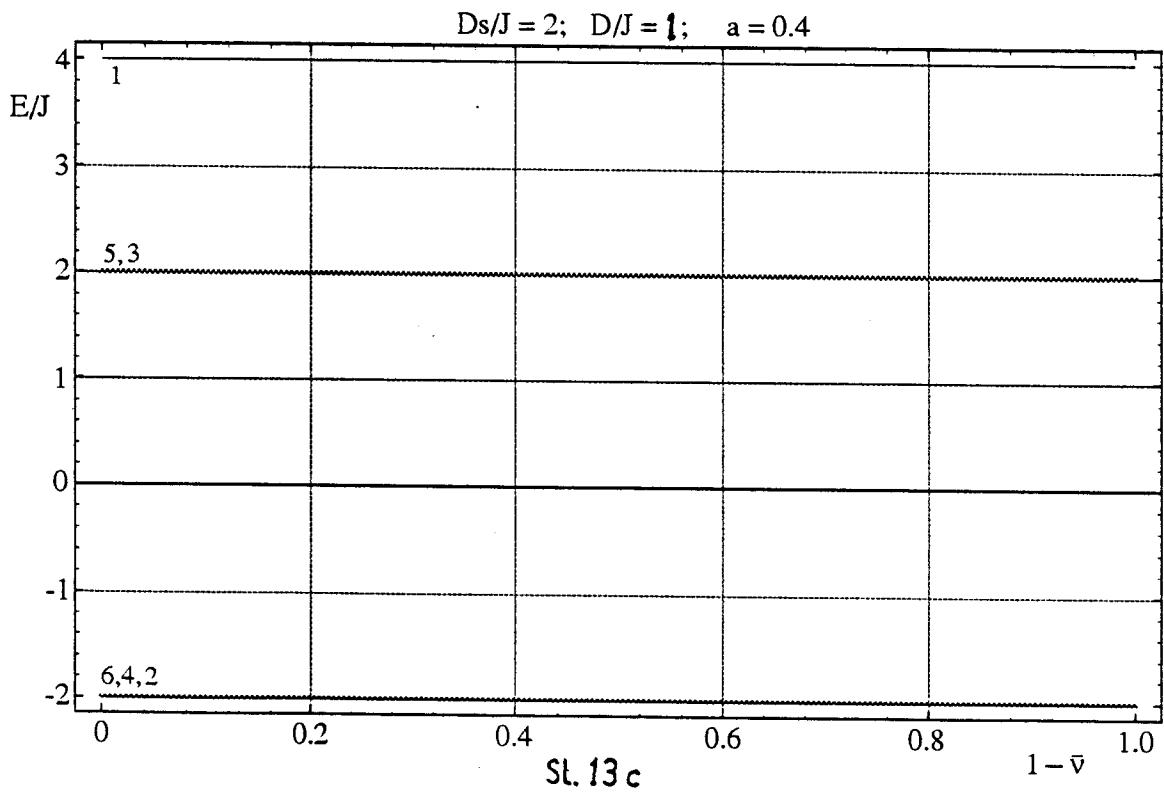
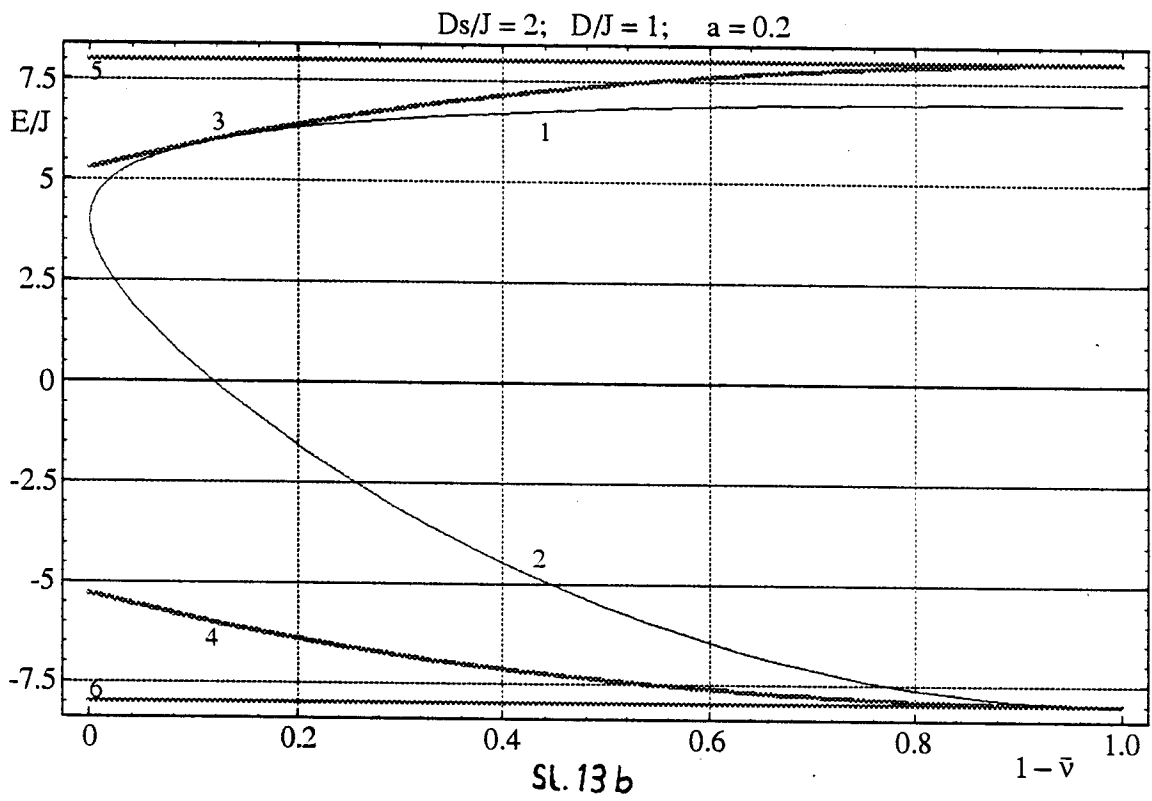
4 — $E_B^{\text{BOTT}-}$
 5 — $E_B^{\text{TOP}+}$
 6 — $E_B^{\text{TOP}-}$



1 — E_S^+
 2 — E_S^-
 3 — E_B^{BOT+}

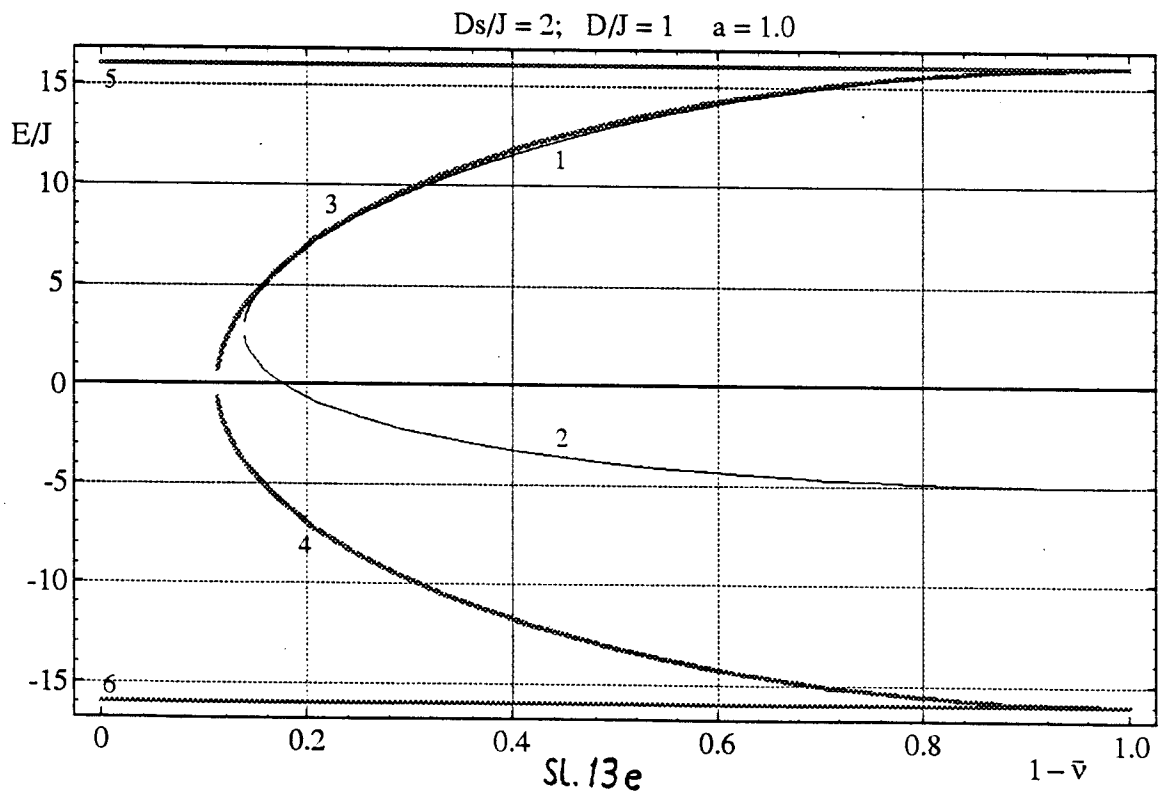
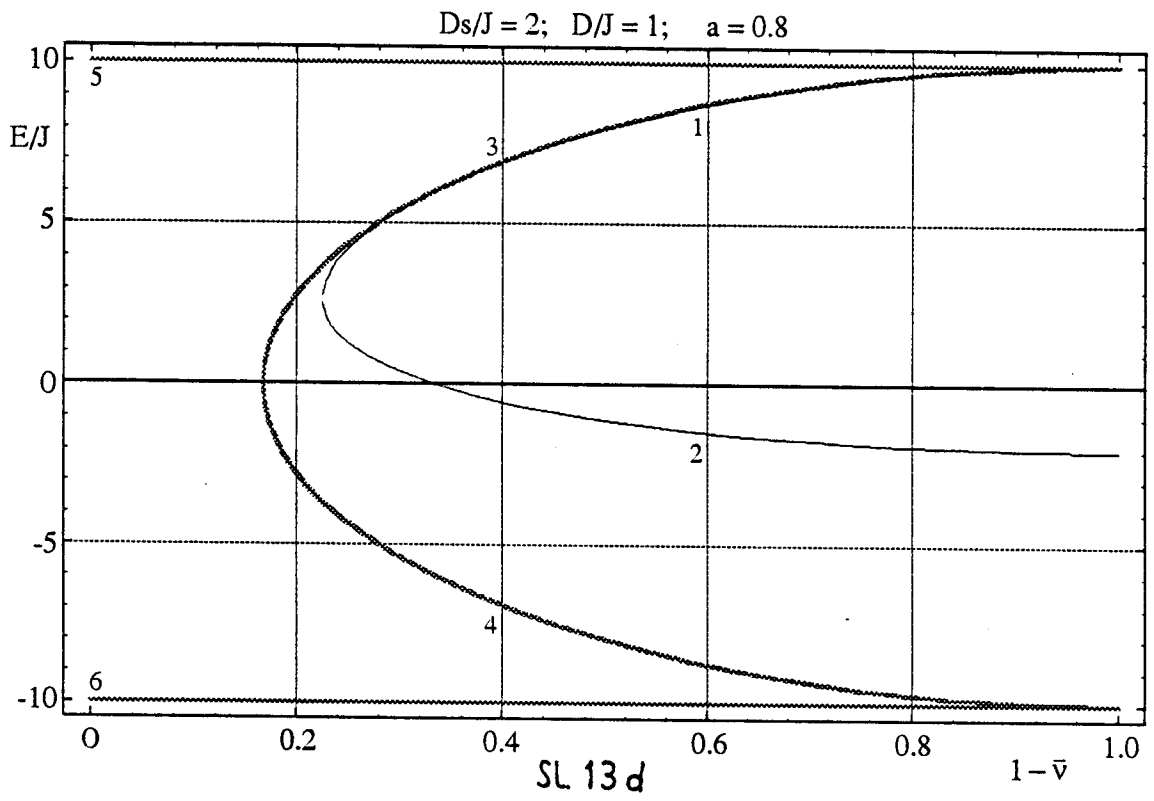
4 — E_B^{BOT-}
 5 — E_B^{TOP+}
 6 — E_B^{TOP-}





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

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



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

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

Literatura

- [1] D. C. Mattis, Department of Phys. , The University of Utah, Salt Lake City, UT 84112, USA
- [2] A. Ćelić, Diplomski rad (P. M. F. Novi Sad 1995.)
- [3] E. L. Nagaev, Magnetiki so slozhnymi obmennymi vzaimodeistviyami (nauka Moskva, 1988.)
- [4] H. H. Chen, P. M. Levy, Phys. Rev. B7 (1973.) 4267.
- [5] W. Z. Shen, Z. Y. Li, Phys. Lett. A168 (1992.) 151.
- [6] D. Kapor, M. Škrinjar, S. Stojanović, Phys. Lett. A192 (1994.) 413
- [7] T. Wolfram, R. E. De Wames, Phys. Rev. B185 (1969.) 762

