数理解析研究所講究録
130巻 1971年 211-219

強磁性体中の不純物スピン

東京工大 物理 小口武彦

§1. 問題の背景

強磁性体の host atom の1つを impurity magnetic atom で置換した場合に，impurity atom 付近に局在する magnon の研究はかなり多くなされている．今迄なされた場合は，異方性エネルギーが考慮されていない．所が host atom と，impurity atom の異方性の容易軸が異なっているとき，面白い現象が期待される．

このような例は実在の磁性体にいくつか存在する．例えば反強磁性体 $FeCl_2$, $CoCl_2$, $NiCl_2$ は，magnetic atom のスピンは，c 面内では互に平行，c 軸に沿っては互に反平行に並ぶので，結果はc軸に沿って＋，－の強磁性的な面が交互につみ重なったスピン配列になる．しかも面内の交換積分は，面間のものより絶対値が大きいので，metamagnetism を示す．スピンの容易軸は，$FeCl_2$ は c 軸方向，$CoCl_2$, $NiCl_2$ では

c面内にある．したがって$FeCl_2$にCo又はNiをimpurity atomとして置換すると，CoやNiのスピンは何れを向くであろうか．逆に$CoCl_2$や$NiCl_2$にFeをimpurity atomとして置換すると，Feのスピンは何れを向くであろうか．後者についての実験が$\bar{O}$no et al.によるMössbauerの実験で行われた．その結果は$CoCl_2$に入れられたFeのスピンはc面内を向き，$NiCl_2$に入れられたFeのスピンはc軸を向くことが確かめられた．

§2. モデル

前節で述べた特徴を具体的に取り入れ，しかも計算を簡単にするためのモデルとして，1次元格子を扱う．N個のhost atomの中で原点はimpurity atomで置換されたとする．スピンの大きさは，すべて1とする．異方性の容易軸は，host atomはz軸，impurity atomはxy面内とする．そのハミルトニアンは

$$(1)\quad \mathcal{H} = -2J\sum_{\ell\neq -1,0}(\vec{S}_\ell\cdot\vec{S}_{\ell+1}) - 2J'\sum_{\rho=\pm1}(\vec{S}_0\cdot\vec{S}_\rho) - D\sum_{\ell\neq 0}(S_\ell^z)^2 + D'(S_0^z)^2 \qquad (J,J',D,D'>0)$$

すべてのスピンが上を向いている強磁性状態$|\mathrm{ferro}\rangle$では

$$(2)\quad \mathcal{H}|\mathrm{ferro}\rangle = E_f|\mathrm{ferro}\rangle\,,\quad E_f = -2J(N-2) - D(N-1) - 4J' + D'$$

l番目のスピンが1だけ減った状態を$|l\rangle$で示す

(3) $|l\rangle \equiv S_l^- |\mathrm{ferro}\rangle$

(4) $H|l\rangle = (E_f+4J+D)|l\rangle - 2J|l+1\rangle - 2J|l-1\rangle \qquad l \neq 0, \pm 1$

$H|\pm 1\rangle = (E_f+2J+2J'+D)|\pm 1\rangle - 2J|\pm 2\rangle - 2J'|0\rangle$

$H|0\rangle = (E_f+4J'-D')|0\rangle - 2J'|1\rangle - 2J'|-1\rangle$

fictitious Hamiltonian H_0 を次の式で定義する.

(5) $H_0|l\rangle = (E_f+4J+D)|l\rangle - 2J|l+1\rangle - 2J|l-1\rangle$

(6) $|l\rangle$のフーリエ変換 $|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_l e^{ikl}|l\rangle$

はH_0の固有ketである.

(7) $H_0|k\rangle = [E_f + 2J(1-\cos k)]|k\rangle$

HとH_0の差を摂動Vとする. これは

(8) $$V \equiv H - H_0 = \begin{array}{c|ccc|} \langle 0| & -4(J-J')-D-D' & 2(J-J') & 2(J-J') \\ \langle 1| & 2(J-J') & -2(J-J') & 0 \\ \langle -1| & 2(J-J') & 0 & -2(J-J') \end{array}$$

他のelementはすべて0である.

さて1 magnon subspace内のeigen ketを$|\psi_1\rangle$とすると

(9) $E_1|\psi_1\rangle = H|\psi_1\rangle = (H_0+V)|\psi_1\rangle$

(10) $|\psi_1\rangle = \frac{1}{E_1-H_0}V|\psi_1\rangle$ or $(1-GV)|\psi_1\rangle = 0$

(11) $G \equiv \frac{1}{E_1-H_0}$

Gはlattice Green 関数で, そのlm成分は

$$(12)\qquad \langle l|G|m\rangle = \frac{1}{N}\sum_k \frac{e^{-ik(l-m)}}{E_1 - E_f - 2J(1-\cos k)}$$

(10)を解くと E_1 がもとめられる．さらに $|\psi_1\rangle$ をうるためには $F \equiv G^2$ の lattice Green function が必要になる．

§3. 結果の一部

$E_f < E_1$ であれば $|\mathrm{ferro}\rangle$ が安定で impurity spin も z 軸を向く．$E_f > E_1$ なら 1 magnon state が安定で，impurity spin は xy 面内に倒れる．簡単のため

$$(13)\qquad J'/J \equiv \alpha\ ,\quad D/4J \equiv \beta\ ,\quad D'/4J \equiv \beta'$$

とおく．Heisenberg interaction の代りに Ising interaction を考えると，$E_f \gtrless E_1$ の条件は

$$(14)\qquad D' \gtrless 4J' \quad \text{or} \quad \beta' \gtrless \alpha$$

Heisenberg interaction になると，この条件は β に依存し，β が小さくなるほど $|\psi_1\rangle$ の領域が増す．第1図で，各線の左上側が $|\psi_1\rangle$ が安定の領域である．第2図は $\beta = 0.1$ としたとき E_1 の値の α 依存性を示している．E_1 が横軸を切る点以上の α の値に対して $|\psi_1\rangle$ が安定である．

§4. 格子グリーン関数

E_1, $|\psi_1\rangle$ を計算するために，次の格子グリーン関数が必要

である．

$$(15) \qquad g_n = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \frac{\cos nk}{\varepsilon + \cos k}\, dk$$

$$(16) \qquad f_n = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \frac{\cos nk}{(\varepsilon + \cos k)^2}\, dk$$

結果は

$$g_0 = \begin{cases} \pm \dfrac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 - 1}} & \varepsilon \geq 1 \\ & \varepsilon \leq 1 \\ 0 & -1 < \varepsilon < 1 \end{cases}$$

$$g_1 = 1 - \varepsilon g_0 , \quad g_2 = -2\varepsilon + (2\varepsilon^2 - 1) g_0$$

$$g_n = -\tfrac{3}{2}\varepsilon g_{n-1} + (\varepsilon^2 - 1) g_{n-2} + \tfrac{1}{2}\varepsilon g_{n-3} \qquad n \geq 3$$

$$f_0 = \begin{cases} \dfrac{\pm \varepsilon}{(\varepsilon^2 - 1)^{3/2}} & \varepsilon \geq 1 \\ & \varepsilon \leq 1 \\ 0 & -1 < \varepsilon < 1 \end{cases}$$

$$f_1 = \begin{cases} \mp \dfrac{1}{(\varepsilon^2 - 1)^{3/2}} & \varepsilon \geq 1 \\ & \varepsilon \leq 1 \\ 0 & -1 < \varepsilon < 1 \end{cases}$$

$$f_2 = 2 - 4\varepsilon f_1 - (2\varepsilon^2 + 1) f_0$$

これらを第3，4図に示す．

2 magnon state を計算するには，次のグリーン関数が必要である．これは 1 magnon の 2 次元格子の場合のグリーン関数でもある．

(17) $$S(\varepsilon; m, n) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^2 \iint_0^{\pi} \frac{\cos^m q \cos^n q'}{\varepsilon + \cos q + \cos q'} \, dq \, dq'$$

(18) $$S(-\varepsilon; m, n) = (-1)^{m+n+1} S(\varepsilon; m, n)$$

(19) $$\tan\frac{q'}{2} = x, \quad \tan\frac{q}{2} = \sqrt{\frac{\varepsilon+2}{\varepsilon}} \frac{z}{\sqrt{1-z^2}}$$

とおくと，[$S(\varepsilon; m, n)$ を単に $S(m, n)$ とかく]

(20) $$S(m, 0) = \frac{2}{\pi} \int_0^1 \left[\frac{\varepsilon - 2(\varepsilon+1) z^2}{\varepsilon + 2z^2} \right]^m \frac{dz}{\sqrt{f(z)}}$$

(21) $$f(z) = (1-z^2)(\varepsilon^2 - 4z^2)$$

(20) は次の楕円積分で表わされる

$$I_0 = \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{f(z)}} = \frac{1}{\varepsilon} K\left(\frac{2}{\varepsilon}\right)$$

$$I_1 = \int_0^1 \frac{z\,dz}{\sqrt{f(z)}} = \frac{1}{4} \log \frac{\varepsilon+2}{\varepsilon-2}$$

$$I_2 = \int_0^1 \frac{z^2 dz}{\sqrt{f(z)}} = \frac{\varepsilon}{4} \left\{ K\left(\frac{2}{\varepsilon}\right) - E\left(\frac{2}{\varepsilon}\right) \right\}$$

$$J\left(\frac{2}{\varepsilon}, i\sqrt{\frac{\varepsilon}{2}}\right) = \int_0^1 \frac{1}{z^2 + \frac{\varepsilon}{2}} \frac{dz}{\sqrt{f(z)}}$$

ただし

$$K(k) = \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{(1-z^2)(1-k^2 z^2)}}$$ 第1種

$$E(k) = \int_0^1 \sqrt{\frac{1-k^2 z^2}{1-z^2}} \, dz$$ 第2種

$$J(k, \lambda) = \int_0^1 \frac{\quad}{(z^2 - \lambda^2)\sqrt{(1-z^2)(1-k^2 z^2)}}$$ 第3種

結果は

$$S(0,0) = \frac{1}{\varepsilon}\frac{2}{\pi} K\left(\frac{2}{\varepsilon}\right)$$

$$S(1,0) = \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{2} S(0,0)$$

$$S(2,0) = -\frac{\varepsilon}{2} + \frac{2}{\pi}\left[\frac{1}{\varepsilon} K\left(\frac{2}{\varepsilon}\right) + \frac{\varepsilon}{2} E\left(\frac{2}{\varepsilon}\right)\right]$$

$$S(3,0) = \frac{1}{2}(\varepsilon^2+1) - \frac{2}{\pi}\left[\frac{6-\varepsilon^2}{4} K\left(\frac{2}{\varepsilon}\right) + \frac{3}{4}\varepsilon^2 E\left(\frac{2}{\varepsilon}\right)\right]$$

$$S(4,0) = -\frac{1}{2}(\varepsilon^3+2\varepsilon) + \frac{2}{\pi}\left[\left(-\frac{5}{12}\varepsilon^3 + \frac{5}{3}\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon}\right) K\left(\frac{2}{\varepsilon}\right) + \left(\frac{11}{12}\varepsilon^3 + \frac{2}{3}\varepsilon\right) E\left(\frac{2}{\varepsilon}\right)\right]$$

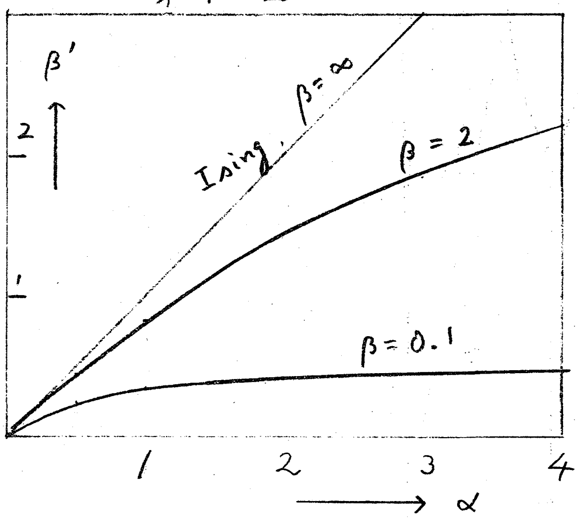
$$S(1,1) = \frac{1}{2}\varepsilon - \frac{1}{2}\varepsilon^2 S(0,0) - 2\varepsilon S(1,0) - S(2,0)$$

$$S(2,1) = -\frac{1}{2}\varepsilon S(1,1)$$

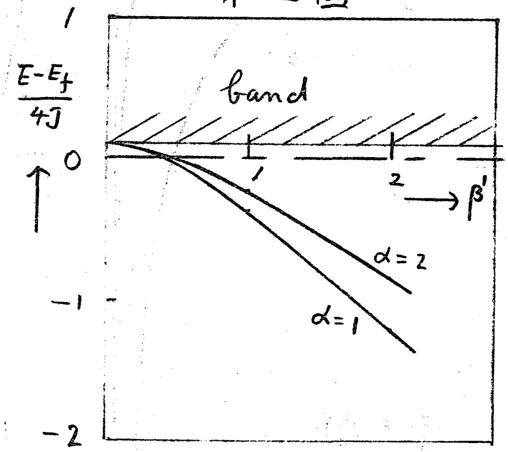
$$S(3,1) = \frac{1}{2}\varepsilon^2 S(1,1) - S(2,2)$$

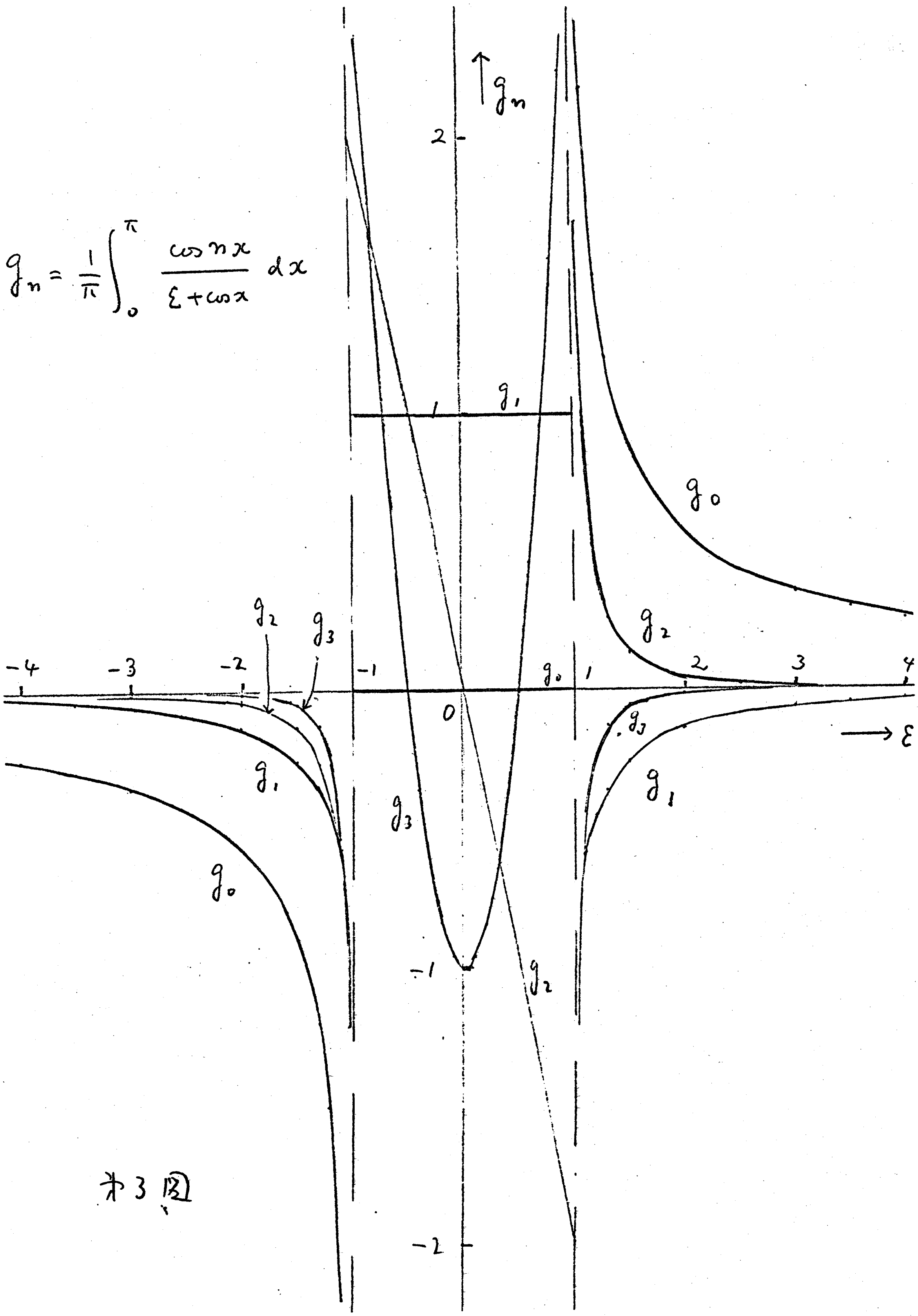
$$S(2,2) = \frac{1}{2}(\varepsilon+\varepsilon^3) - \frac{1}{2}\varepsilon^4 S(0,0) + 2\varepsilon^2 S(1,1) + S(4,0)$$

第1図

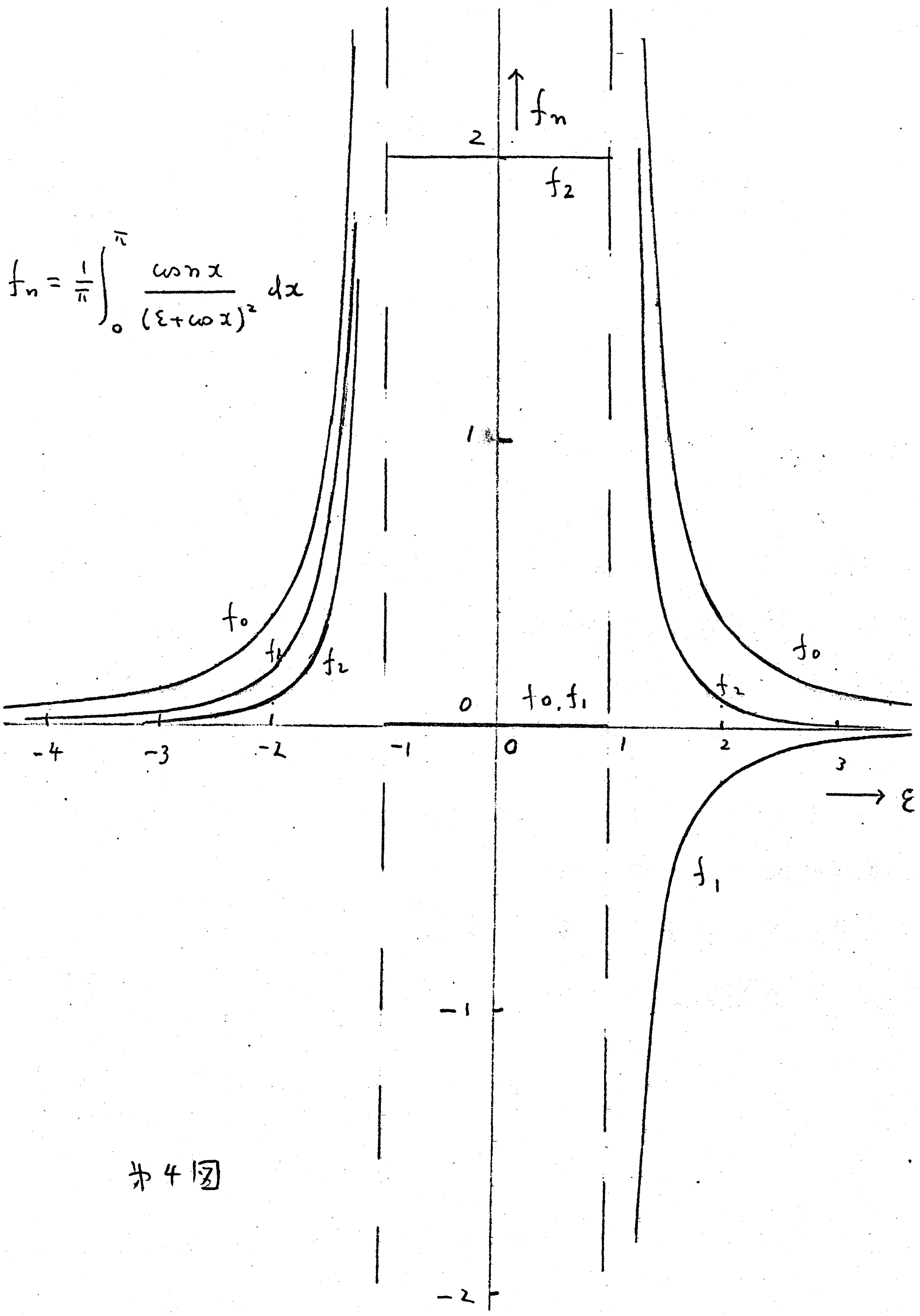


第2図




$g_n = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \frac{\cos nx}{\varepsilon + \cos x}\,dx$
g_n
ε
2
1
-1
-2
0
-4
-3
-2
-1
1
2
3
4
g_0
g_1
g_2
g_3

第3図


$f_n = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \frac{\cos nx}{(\varepsilon+\cos x)^2}\,dx$
f_n
2
f_2
1
f_0
f_1
f_2
0
f_0, f_1
f_0
f_2
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
ε
f_1
-1
-2

第4図