

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. 今述べている場合は, 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. 例えは反強磁性体 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重なるようなスピン配列になる. 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 の 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 の 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 Ono 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 の中から原点は 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

$$(1) \quad H = -2J \sum_{l \neq -1, 0} (\vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1}) - 2J' \sum_{l=\pm 1} (\vec{S}_0 \cdot \vec{S}_l) \\ - D \sum_{l \neq 0} (S_l^x)^2 + D' (S_0^z)^2 \quad (J, J', D, D' > 0)$$

すべてのスピンの上を向いている強磁性状態 $|\text{ferro}\rangle$ には

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

l 番目のスピンの値が 1 だけ減った状態を $|l\rangle$ と示す

$$(3) \quad |l\rangle \equiv S_l^- |ferro\rangle$$

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

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

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

fictitious Hamiltonian H_0 を次の式で定義する.

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

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

は H_0 の固有ket である.

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

H と H_0 の差を擾動 V とする. これは

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

他の element はすべて 0 である.

さ 2 magnon subspace 内の eigen ket を $|\psi_i\rangle$ とする.

$$(9) \quad E_i |\psi_i\rangle = H |\psi_i\rangle = (H_0 + V) |\psi_i\rangle$$

$$(10) \quad |\psi_i\rangle = \frac{1}{E_i - H_0} V |\psi_i\rangle \quad \text{or} \quad (1 - GV) |\psi_i\rangle = 0$$

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

G は lattice Green 函数で, その lm 成分は

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

(10) を解くと E_l が求められる。さらに $|4_l\rangle$ 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

$E_f < E_l$ ならば $|ferro\rangle$ が安定で impurity spin は z 軸を向く。 $E_f > E_l$ ならば $|magnon\ state\rangle$ が安定で, impurity spin は xy 面内に倒れる。簡単のため

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

と置く。 Heisenberg interaction の代りに Ising interaction を与えると, $E_f \geq E_l$ の条件は

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

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 $|4_l\rangle$ の領域が縮む。お1図は, 各線の左上側が $|4_l\rangle$ が安定の領域である。お2図は $\beta = 0.1$ としたとき E_l の値の α 依存性を示している。 E_l が横軸を切る点以上の α の値に対して $|4_l\rangle$ が安定である。

§ 4. 格子グリーン関数

$E_l, |4_l\rangle$ を計算するために, 次の格子グリーン関数が必要

である。

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

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

結果は

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

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

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

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

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

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

これを表 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ある。

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

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

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

$$\text{と } \alpha < \varepsilon, [S(\varepsilon; m, n) \text{ に対する } S(m, n) \text{ とおく}]$$

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

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

(20) は次の楕円積分で表わすことができる

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

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

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

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

さらに

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

が1種

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

が2種

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

が3種

结果是

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

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

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

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

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

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

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

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

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

图 1

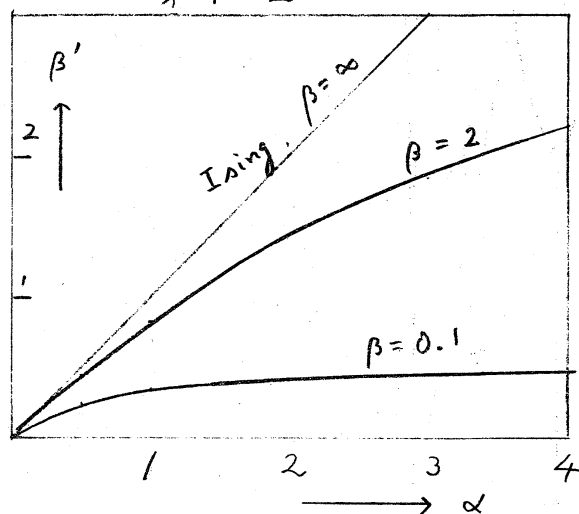
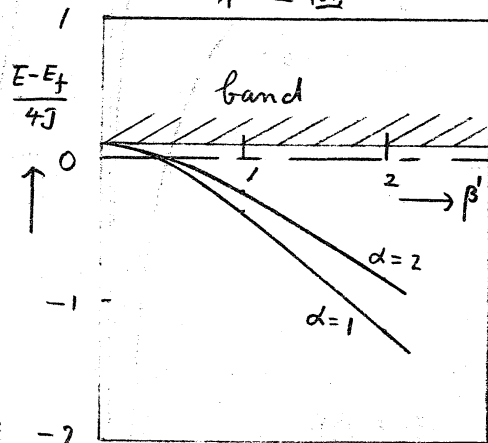


图 2



$$g_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\cos nx}{\xi + \cos x} dx$$

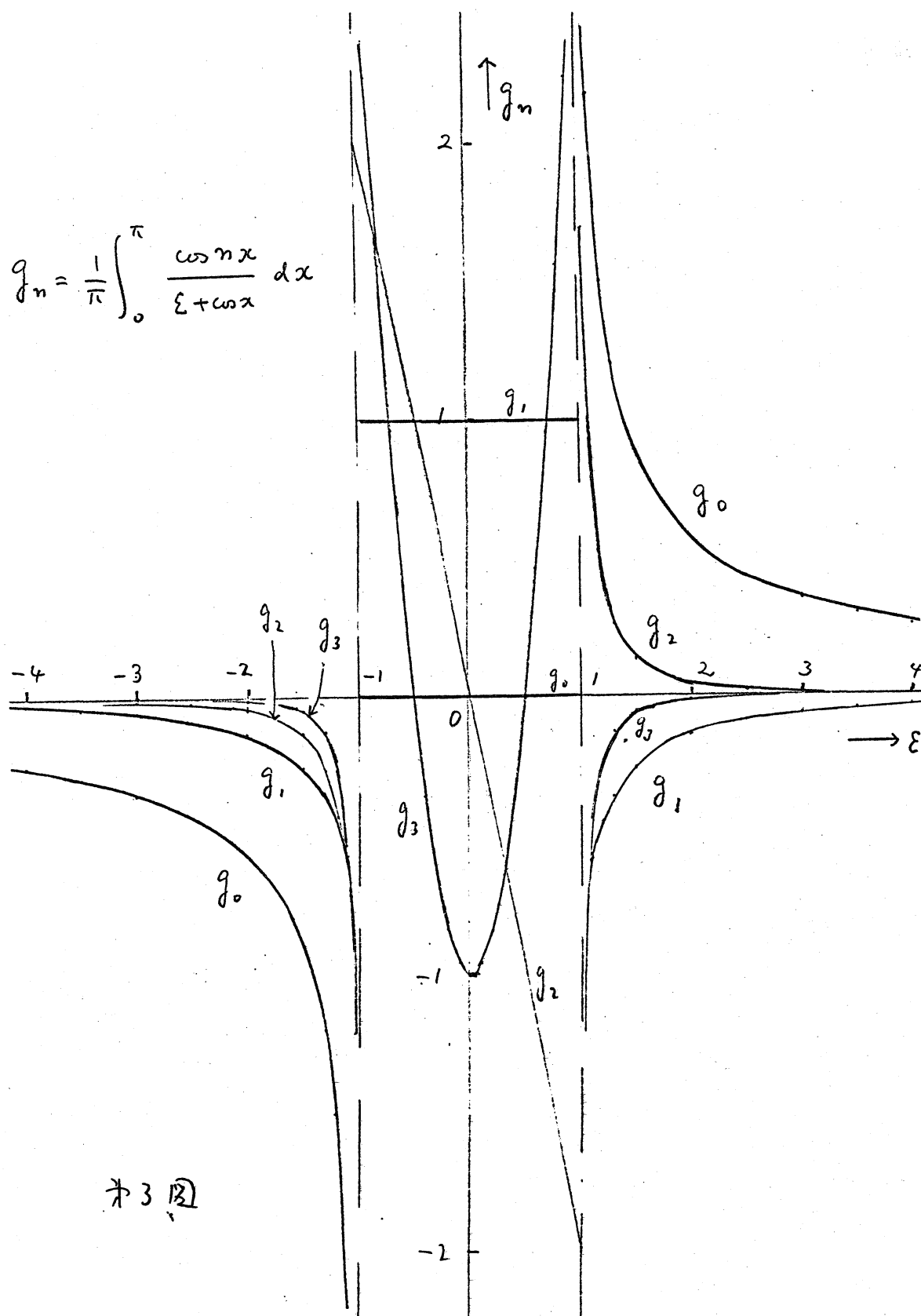


图 3

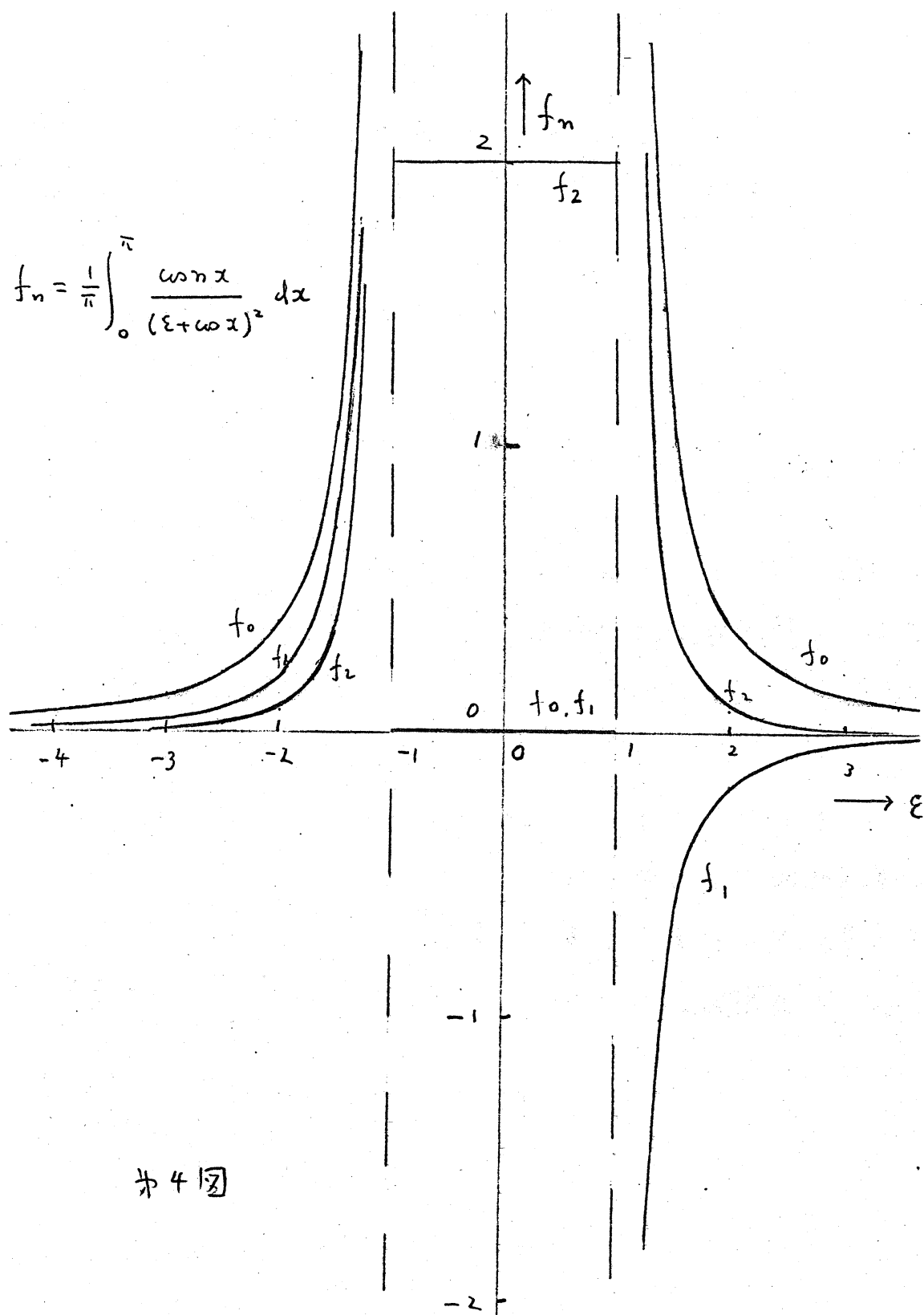


图 4 第 4 图