

## 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. したがって 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  $\text{FeCl}_2$ ,  $\text{CoCl}_2$ ,  $\text{NiCl}_2$  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 +, - の層状性的な面が交互に積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,  $\text{FeCl}_2$  は c 軸方向,  $\text{CoCl}_2$ ,  $\text{NiCl}_2$  では

c面内にある。したがって  $\text{FeCl}_2$  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  $\text{CoCl}_2$  や  $\text{NiCl}_2$  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  $\text{CoCl}_2$  に入れられた Fe のスピンは c 面内を向き,  $\text{NiCl}_2$  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 の中を原質は 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

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

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

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

l番目のスピンの1を減った状態を  $|l\rangle$  と示す

$$(3) \quad |l\rangle \equiv S_l^{-1} |ferro\rangle$$

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

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

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

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

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

の element はすべて 20 である.

さて 1 magnon subspace 内の eigen ket を  $|\psi_l\rangle$  とする.

$$(9) \quad E_l |\psi_l\rangle = H |\psi_l\rangle = (H_0 + V) |\psi_l\rangle$$

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

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

$G$  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  $| \psi_1 \rangle$  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

$E_f < E_l$  の場合は  $| \text{ferro} \rangle$  が安定で, impurity spin は  $z$  軸を向く。  $E_f > E_l$  の場合は  $| \text{magnon state} \rangle$  が安定で, impurity spin は  $x-y$  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 の代わりに 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 に与ると, この条件は  $\beta$  に依存し,  $\beta$  が小さく与るほど  $| \psi_1 \rangle$  の領域が縮小。  $\alpha = 1$  のとき, 各線の左上側が  $| \psi_1 \rangle$  が安定の領域である。  $\alpha = 2$  の場合は  $\beta = 0.1$  としたとき  $E_l$  の値の  $\alpha$  依存性を示している。  $E_l$  が横軸を切る点以上の  $\alpha$  の値に対して  $| \psi_1 \rangle$  が安定である。

### § 4. 格子グリーン関数

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

2. 両子

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

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

結果は

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

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

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

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

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

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

これを  $\varepsilon$  を  $3$ ,  $4$  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.

$$(17) S(\varepsilon; m, n) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^2 \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{\cos^m \vartheta \cos^n \vartheta'}{\varepsilon + \cos \vartheta + \cos \vartheta'} d\vartheta d\vartheta'$$

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

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

と仮定し、 $[S(\varepsilon; m, n)]$  に関する  $S(m, n)$  と仮定]

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

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

(20) は次の楕円積分を  $I_0, I_1, I_2$  と表す

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

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

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

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

次に

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

が 1 種

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

が 2 種

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

が 3 種

結果は

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

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

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

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

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

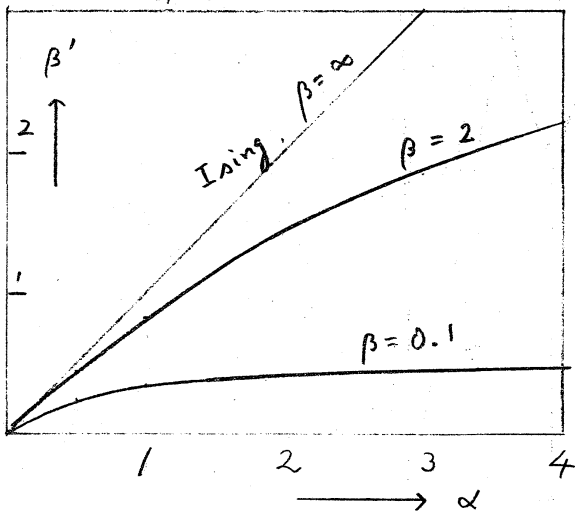
$$S(1,1) = \frac{1}{2} \varepsilon - \frac{1}{2} \varepsilon^2 S(0,0) - 2\varepsilon S(1,0) - S(2,0)$$

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

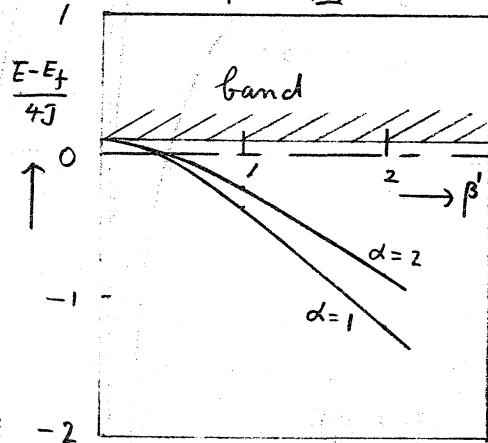
$$S(3,1) = \frac{1}{2} \varepsilon^2 S(1,1) - S(2,2)$$

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

\*1 図



\*2 図



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

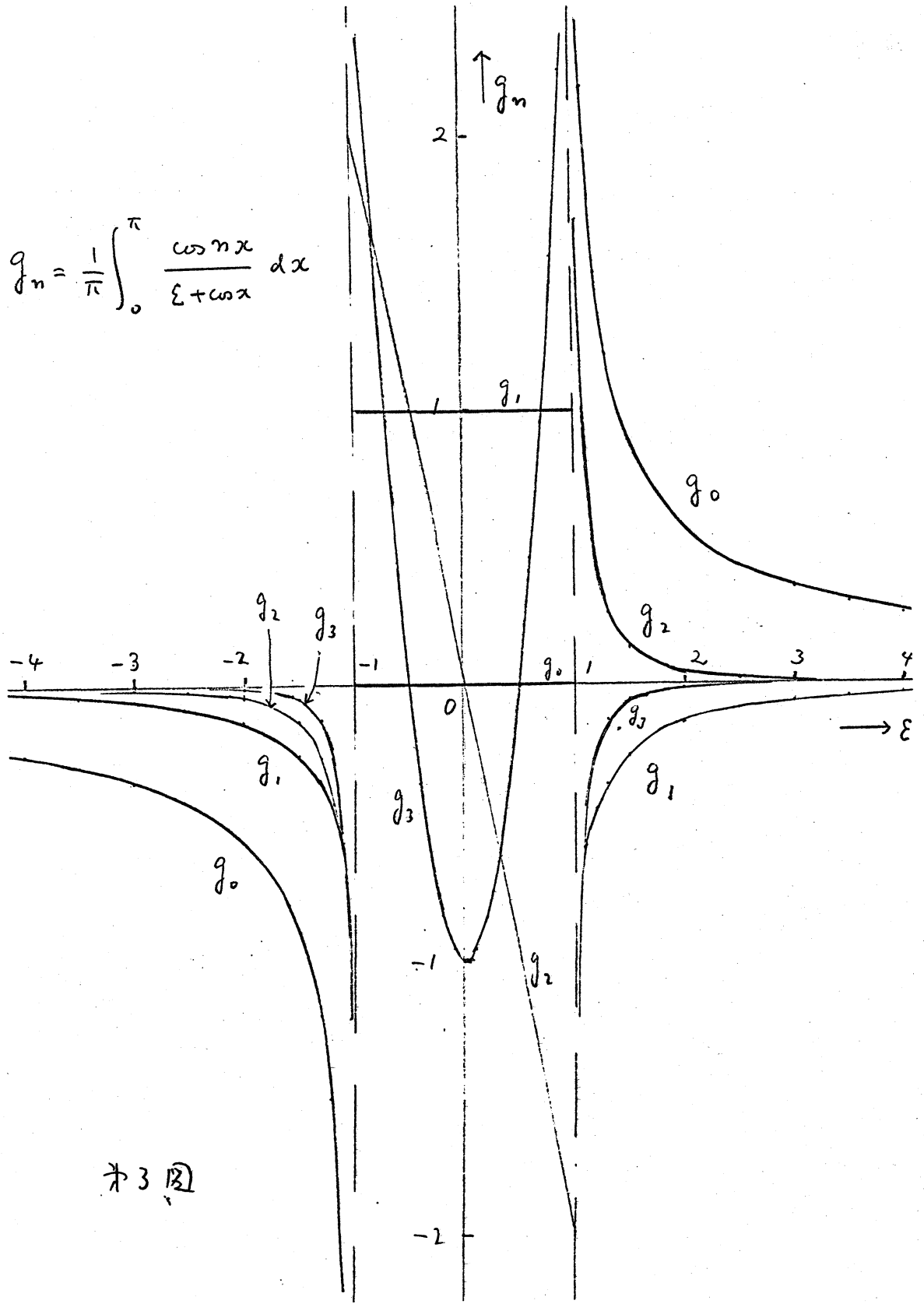


图 3



$$f_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\cos n x}{(\varepsilon + \omega x)^2} dx$$

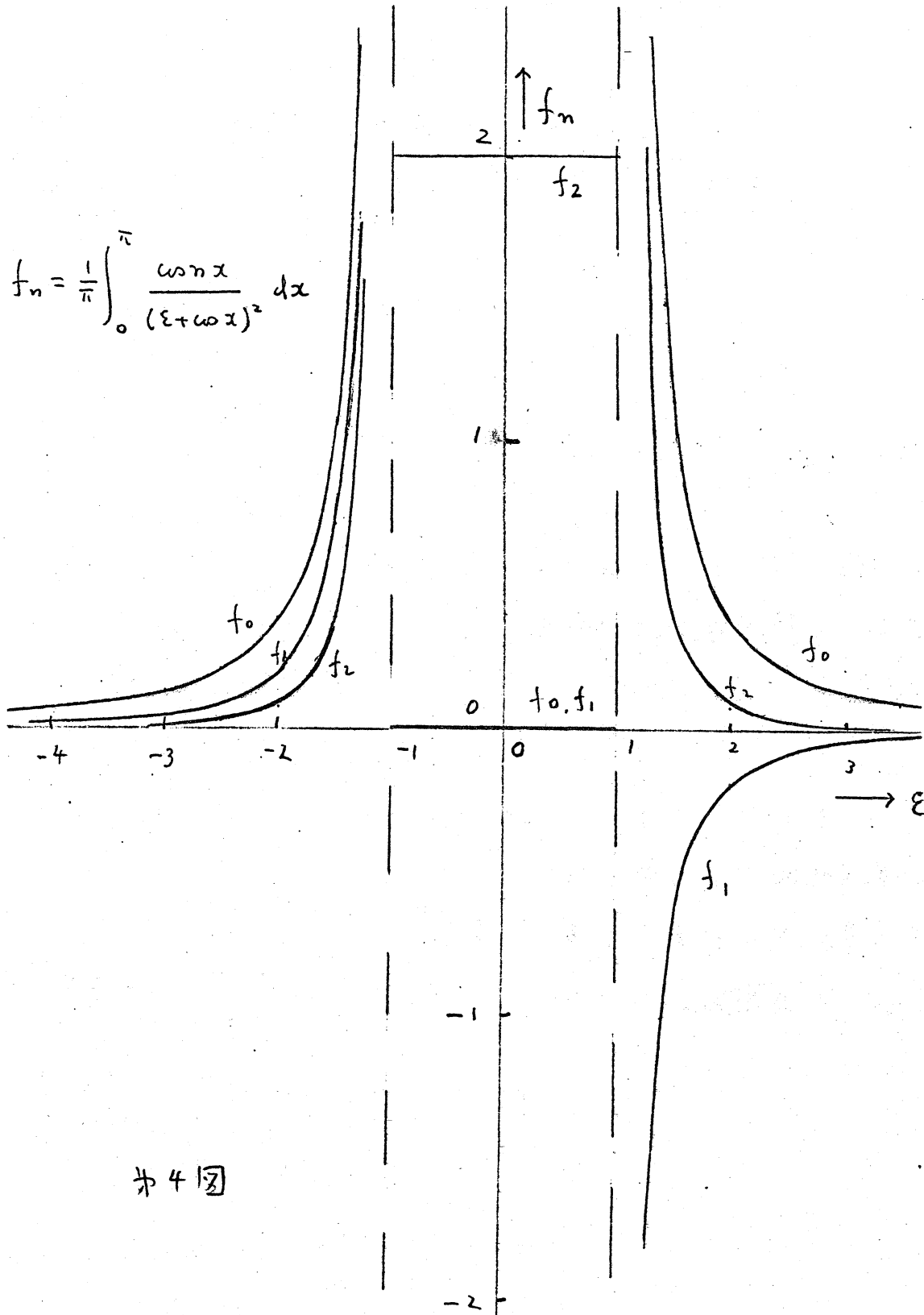


图4