

EXCITACIONES LOCALIZADAS EN SISTEMAS MAGNÉTICOS

M. Gorfinkiel y A. Misetich

Resumen

El objeto del trabajo es estudiar las excitaciones elementales en sistemas magnéticamente ordenados dopados con impurezas. Variando la interacción entre la impureza y sus vecinos varía la energía de esta excitación localizada. Estas excitaciones han sido observadas espectroscópicamente en algunos casos. Queremos entender el comportamiento de las intensidades con que se observan estas excitaciones, en función de la interacción de la impureza con sus vecinos, el spin de la impureza y la anisotropía local de la impureza, para energías de la excitación localizada por encima de la banda de ondas de spin no localizadas.

Partimos de un sistema de momentos magnéticos localizados en sitios fijos de la red, y que interactúan entre sí de a pares. Suponemos el sistema bien representado por el hamiltoniano de Heisenberg, es decir: $H_0 = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ donde $\vec{S}_i$ es el operador de spin en el sitio i , J_{ij} es la constante de intercambio que aquí consideramos isotrópica. Dado que la interacción decae muy rápidamente con la distancia, consideramos como única interacción importante la que une un sitio cualquiera, con sus z primeros vecinos. Agregamos además un término correspondiente a la anisotropía.

$$H_0 = \sum_i \vec{S}_i \cdot \sum_{j=1}^z \vec{S}_{i+j} + K \sum_i \vec{S}_i \cdot \hat{z} \langle S_i^z \rangle S_i^z$$

La solución de este hamiltoniano son las ondas de spin, con una ley de dispersión $w(k)$ que depende de la estructura cristalina del material considerado.

Cuando hablamos de un sistema impuro, lo que queremos decir es que estamos reemplazando un ion por otro sustitucionalmente, que puede tener un S total $S' \neq S$, un $J' \neq J$ e inclusive un $K' \neq K$. En estas condiciones el hamiltoniano se modifica de la siguiente forma:

$$H = H_0 - K' \langle S' \rangle^2 S'^z + 2 \epsilon J' \vec{S}_i \cdot \hat{z} S_i^z$$

En esta aproximación solo la interacción de la impureza con sus primeros vecinos se ve afectada. Se obtienen por lo tanto soluciones localizadas en la impureza y sus vecinos cercanos, cuyas energías pueden estar fuera o dentro de la banda del sistema puro, dependiendo de los valores de los parámetros involucrados.

La energía de estos niveles, en ciertos casos, ha sido estudiada por diversos métodos para materiales ferromagnéticos por Wolfram and Callaway (1), Izyumov and Medvedev (2) y para antiferromagnéticos por Shiles and Hone (3) Lovesey (4) Tonegawa (5).

Nos proponemos calcular a más de la ubicación de los niveles para ciertos casos de interés específico, el coeficiente de absorción para estos modos (transición dipolar magnética). Una posible aproximación sería, considerar la excitación completamente localizada en la impureza, y está sometida al campo efectivo creado por la interacción con sus z vecinos, y calcular la probabilidad de excitación como en el caso de una resonancia paramagnética. Si bien esta aproximación da resultados razonables lejos de la banda, es muy pobre cuando la energía del modo está vecino al borde de la banda o cae den-

tro de la misma.

Para mejorar la aproximación anterior debemos considerar desviaciones también en vecinos de la impureza.

Una posible técnica es la de las funciones de Green, que utilizaremos aquí y con las cuales, del cálculo obtendremos no solo la posición de los niveles resonantes, sino además la susceptibilidad magnética compleja con cuya parte imaginaria calcularemos la probabilidad de transición.

Usamos la doble función de Green definida de este modo:

$$G^-(t) = -i\theta(t) \langle [A(t), B(0)] \rangle \quad \text{en nuestro caso} \quad A(t) = S_1^+(t)$$

$$G^+(t) = \langle \langle A|B \rangle \rangle$$

$$B(t) = S_1^-(t)$$

que es esencialmente la diferencia entre las funciones de correlación de los operadores $S_1(t)$, $S_1(0)$ multiplicadas por la función de Heaviside.

En nuestro caso la función de Green puede ser interpretada como una función de transferencia, que mide la respuesta en i al tiempo t , a un campo rotante en el plano xy actuando sobre un spin en el sitio i a $t=0$. Esta G depende no solo del tiempo sino también de la temperatura, dado que $\langle \rangle$ implican promedios termodinámicos, de modo, que si bien nosotros trabajamos para $T=0$ en cuyo caso la función de Green es la común, esta nos permite la extensión al caso $T \neq 0$.

Obtendremos las funciones de Green a partir de las ecuaciones de movimiento de las mismas. Las ecuaciones de movimiento nos llevan a un sistema de ecuaciones acopladas que relacionan la función de Green de un cierto orden con funciones de Green de orden superior, es decir donde A o B pueden ser producto de dos operadores. La aparición de una cadena de ecuaciones acopladas se debe a que tenemos un sistema de momentos magnéticos interactuantes.

Usamos para desacoplar la R.P.A. donde todos los operadores S se reemplazan por sus promedios en las expresiones finales.

La impureza perturba la magnetización de los primeros vecinos via la interacción de intercambio, y esta modificación se propaga a vecinos más distantes, pero decayendo rápidamente con la distancia. Para cortar esta extensión infinita de la perturbación suponemos para el estado fundamental que la magnetización es la misma que la del sistema puro en todo sitio salvo la impureza misma.

El problema de hallar los modos se reduce a hallar los ceros del determinante de una matriz M tal que $MG = S'/S G_0$ donde G_0 es la función de Green para el sistema puro. Dado el rango finito que le hemos impuesto a la perturbación y la aproximación de primeros vecinos en la que estamos trabajando, el orden de la matriz M que tenemos que resolver para tener totalmente determinado el problema es $z+1$. Para simplificar el problema se hace una transformación de similitud; se reduce la matriz a una serie de submatrices caracterizadas por la simetría de sus soluciones como s , p , d etc. Interpretamos un modo s_0 como aquel en que el spin central y los de sus vecinos precesan en el mismo sentido, estando todos los vecinos en fase, teniendo la mayor parte de la desviación en la impureza. Un modo p por ej. son excitaciones en las cuales las fases de precesión en primeros vecinos tienen la simetría de un orbital p .

De todos los modos posibles el único que puede verse bien separado de la banda, para una adecuada combinación de parámetros, es el modo s_0 (dado que tiene la mayor parte de la desviación en la impureza) por lo tanto nos restringiremos al estudio de este modo.

Si sobre un sistema magnético actúa un campo de radiación tal que el hamiltoniano de interacción es H

$H = \mu_B \sum_i g_i \bar{S}_i$ donde μ_B es el magneton de Bohr y g_i es el factor giromagnético con $\frac{d}{dt} \sum_i \bar{S}_i = i\omega t$ (1), el incremento en el valor medio de la componente α de la magnetización será

$$\delta \langle M^\alpha(t) \rangle = \sum_i e^{-i\omega t} \chi_{\alpha\alpha}(w) h^\alpha$$

donde $\chi_{\alpha\alpha} = \langle S_i^\alpha | S_j^\alpha \rangle = \chi_{\alpha\alpha}$ es el llamado tensor de susceptibilidad compleja y $S_i^\alpha = \sum_j S_j^\alpha$. Se puede ver que la probabilidad de transición para luz linealmente polarizada en la dirección γ , de frecuencia w es

$$W = -2\pi h^\alpha I_{\alpha\gamma} \chi_{\gamma\gamma}$$

Para calcular el tensor de susceptibilidad compleja hay que sumar las partes imaginarias de todas las posibles funciones de Green de dos sitios $\langle S_i^\alpha | S_j^\alpha \rangle$ y $\langle S_i^\alpha | S_j^\alpha \rangle$ etc. Como ésta implicaría el conocimiento de un número enorme de funciones de Green para el sistema puro e impuro y como éstas se calculan numéricamente (7), lo que hacemos es sumar sobre todas las funciones de Green para el sistema puro en la ecuación de movimiento y sumar y restar las del sistema impuro y puro respectivamente de todas aquellas que consideramos modificadas por la presencia de la impureza. En primera aproximación sólo consideramos distintas las $z+1$ funciones de Green correspondientes a impureza con impureza e impureza con sus primeros vecinos. Dado que despreciamos la interacción magnon magnon, fuera de la banda la función de Green será real salvo en la singularidad misma, en donde la parte imaginaria es una función δ y el coeficiente de esta δ nos da la intensidad de este modo. Por lo tanto dentro de esta aproximación el espectro es una δ .

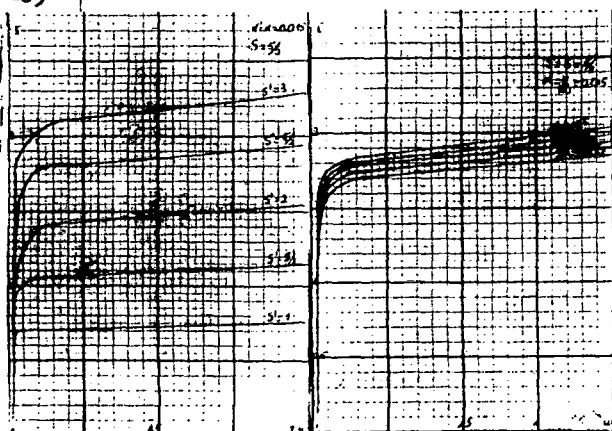
Para el caso de $K'=K$ y $S'=S$ se espera que la intensidad caiga a cero al acercarnos al borde de la banda, dado que esto corresponde a $J' \rightarrow J$, luego no existe modo localizado.

En la figura 3 tenemos la intensidad expandida en función de la energía próxima al borde de la banda para una anisotropía fija $K'=K$ y usando como parámetro el S' .

En la figura 4 tenemos un gráfico de intensidad en función de la energía próxima al borde de la banda usando como parámetro el K' y manteniendo fijo el $S'=S$. Si bien no podemos calcular la intensidad en el borde mismo, la tendencia de todas estas curvas para $S'=S$ y $K' \nearrow K$, es que la intensidad va a cero a medida que nos vamos acercando al borde de la banda.

En las figuras 1 y 2 se ve el comportamiento general de la intensidad en función de la energía, para distintos valores de S' y K' manteniendo fijo K' y S' respectivamente.

Si bien para $K'=K$ y $S'=S$ el borde de la banda corresponde a $J'=J$ este no es el caso si $K' \nearrow K$ y $S' \nearrow S$ como vemos en el gráfico 5 donde se grafica $\xi = J'/J - 1$ en función de K' para una w fija muy próxima a la banda.



Se grafica intensidad en función de energía las energías están medidas en unidades de $16JS$ de modo que en el caso graficado (MnF_2) el borde de la banda es $w=1.015$ dado que $\alpha = K/16J = 0.015$ $S=5/2$. En la fig. 1 se mantiene fijo K' y se varía S' . En la fig. 2 se varía K' manteniendo fijo S' . $\alpha' = K'/16J$.

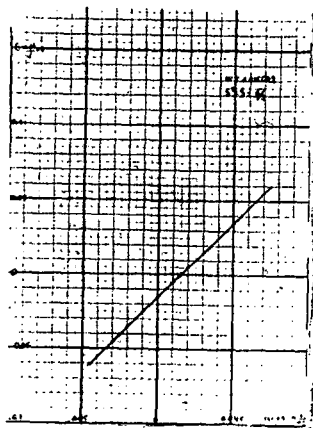


Fig.5

Se grafica $=J'/J-1$ en función de K' para $S'=S=5/2$ y una energía $w=1.015002$

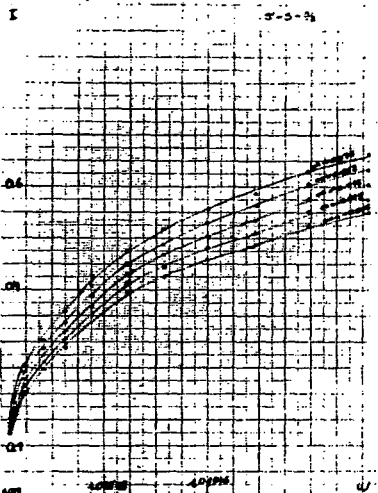


fig.4

Idem que el gráfico 2 para energías próximas al borde de la banda.

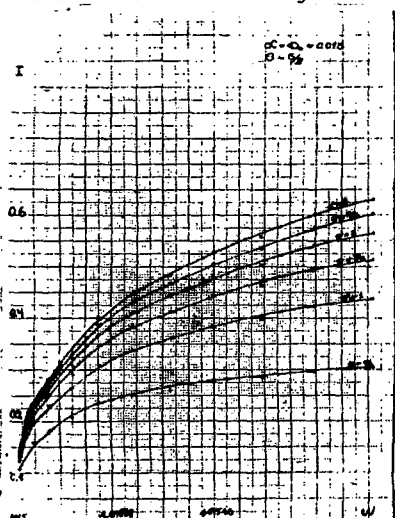


fig.3

Idem que el gráfico 1 para energías próximas al borde de la banda.

REFERENCIAS

- 1) T. Wolfram and Callaway, Phys. Rev. 130, 2207 (1963).
- 2) Izyumov and M. Medvedev, Soviet Phys. JETP 21, 381 (1965).
- 3) Shiles and Hone, Journal of Phys. Society of Japan 28, 51 (1970).
- 4) Lovesey, J. Phys. Cl. 102 (1968).
- 5) Tonegawa, Progr. Theor. Phys. 40, 1195 (1968), y 41.1 (1969).
- 6) D.N. Zubarev, Soviet Physics Uspekhi, 3 320 (1960).
- 7) L. Walker, B. Cetliu and D. Hone. J. Phys. Solids 30, 923 (1969)