

01.76.13

## MODOS LOCALIZADOS VIRTUALES EN SISTEMAS MAGNETICOS

M.Gorfinkiel y A.Misetich\*

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
NO 1	NO 1976
RESUMEN	

\* Comisión Nacional de Energía Atómica  
 Área de Investigaciones - Buenos Aires

Estudiamos las excitaciones localizadas en sistemas magnéticamente ordenados dopados con impurezas. Estas excitaciones han sido observadas espectroscópicamente en algunos casos. En trabajos anteriores (<sup>1,2</sup>) nos hemos ocupado de aquellas excitaciones, cuyas energías caen fuera de la banda de ondas de spin del sistema puro y estudiando el comportamiento de las intensidades con que se observan estas excitaciones hemos podido explicar la no observación en los espectros de infrarrojo lejano de modos localizados, para cierto tipo de impurezas.

En este trabajo nos ocupamos de las excitaciones, cuyas energías caen dentro de la banda. Usando el método de las funciones de Green, analizamos la variación de la energía del modo localizado con la variación de la interacción de la impureza con sus vecinos, y la dependencia con la anisotropía local de la impureza. Se estudian las intensidades de estos modos para diversos valores de los parámetros involucrados y la modificación de las mismas, con la inclusión de un número creciente de vecinos.

Para describir nuestro sistema de momentos magnéticos localizados en puntos fijos de la red e interactuantes entre sí de a pares, se utiliza como en (<sup>1</sup>) el Hamiltoniano de Heisenberg más un término correspondiente a la anisotropía.

$$H_0 = J \sum_{i \ell} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_\ell + K \sum_{\ell} \langle S_\ell^z \rangle S_\ell^z$$

J = constante de intercambio

S = operador de spin

K = constante de anisotropía

Con una impureza reemplazando un ion de la red, el Hamiltoniano se convierte en:

$$H = H_{0-} - K' \langle S'^z \rangle S'^z + 2\epsilon J \sum_{\ell} S' \cdot S_\ell \quad \epsilon = J'/J-1$$

J' y K' se refieren a la impureza.

Utilizamos las mismas aproximaciones que hemos utilizado en (<sup>1</sup>) para el estudio de los modos fuera de la banda.

a) Tomamos como única interacción importante, la que relaciona a un

sitio con sus  $z$  primeros vecinos.

- b) Dado que se utiliza el método de las funciones de Green y éstas se obtienen de sus ecuaciones de movimiento, para desacoplar el sistema de ecuaciones acopladas que relacionan las funciones de un cierto orden con las de un orden superior, se utiliza la aproximación de fases al azar (R.P.A.) que consiste en reemplazar todos los operadores  $S_Z$  por sus promedios en las expresiones finales.
- c) Se le impone a la perturbación un rango finito, suponiendo que la magnetización es en todo sitio, salvo la impureza misma, la misma que la del sistema puro.

En estas condiciones el problema de hallar los modos de energía localizados se reduce a hallar los ceros del determinante de una matriz  $M^{(3, 4)}$  de orden  $(z+1)$ , tal que  $MG = S'/S.G_0$  donde  $G$  y  $G_0$  (<sup>4</sup>) son las funciones de Green del sistema impuro y puro respectivamente.

Nuevamente como en (<sup>1</sup>) centramos nuestra atención en el modo de simetría  $s_0$  (spin central y los spines de sus vecinos precediendo en fase y en el mismo sentido, estando la mayor parte de la desviación en la impureza).

Las soluciones son reales cuando la energía del modo está fuera de la banda de ondas de spin no localizadas. Estos son estados estacionarios (tiempo de vida infinita) dado que hemos despreciado las posibilidades de relajación, por ejemplo, vía interacción magnon-magnon.

Por otro lado los modos cuyas energías caen dentro de la banda pueden aún dentro de la aproximación usada mezclarse con los estados del continuo. Por lo tanto los modos que calculamos utilizando la aproximación de considerar sólo los  $z$  primeros vecinos, serán modos virtuales que decaen al continuo, ensanchándose por esta razón. Cuando la energía del modo considerado cae dentro de la banda, las  $G_0$  que tienen denominadores del tipo  $\omega^2 - \omega_q^2$ ,  $\omega_q$  = energía de la banda del sistema puro, resultan singulares. Para definir estas integrales se sigue el proceso usual, la energía es considerada teniendo una pequeña parte positiva imaginaria, entonces las funciones de Green y por ende el determinante resultan complejos. El estado resonante se dirá que está localizado para una energía para la cual la parte real del determinante se anula.

Todos los cálculos que siguen fueron hechos para el caso del  $MnF_2$  (antiferromagnético) como material puro.

En la figura 1 se grafica la energía del modo resonante como función de  $J'$  para distintos valores de la anisotropía local de la impureza, para  $S' = 5/2$ .

Valores positivos y negativos de la anisotropía corresponden a una tendencia de la magnetización de la impureza a orientarse paralela o perpendicular al eje  $c$  del cristal respectivamente. La anisotropía del  $MnF_2$  es tal que  $\alpha = K/16 J$   $\alpha = 0.015$  o sea se orienta a lo largo del eje  $c$ . Del gráfico se ve la extrema dependencia de la energía del modo con los valores de la anisotropía, para valores usuales de ésta. Esta dependencia

es importante porque la energía de anisotropía varía mucho de impureza en impureza.

En la figura 2 se grafica lo mismo usando como parámetro el spin de la impureza para una anisotropía  $\alpha' = K'/16J = 0.015$ . Se puede ver que la dependencia es muy pequeña.

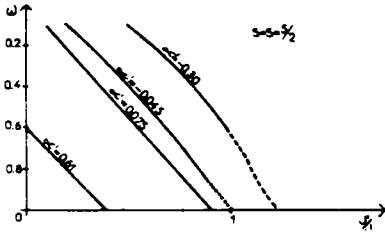


Fig.1

Se grafica la energía del modo resonante en función de  $J'/J$ , el parámetro es  $\alpha' = K'/16J$  manteniendo fijo  $S' = 5/2$  ( $MnF_2$ )

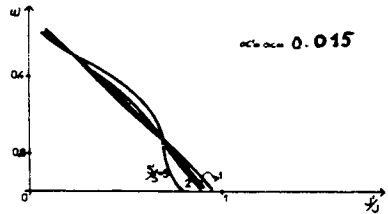


Fig.2

Se grafica la energía del modo resonante en función de  $J'/J$  usando como parámetro  $S'/S$  para una anisotropía fija  $\alpha' = K'/16J = 0.015$  (valor del  $MnF_2$ )

Dado que el método de las funciones de Green nos permite obtener vía la parte imaginaria de la susceptibilidad compleja (<sup>1</sup>), las intensidades de estos modos (transición dipolar magnética), mostraremos ahora algunas de las formas de las bandas obtenidas para distintos valores de anisotropía y constantes de intercambio. Usamos para ejemplificar valores de la anisotropía  $\alpha' = 0.61$  fig.3 y  $\alpha' = -0.30$  fig.4 que corresponden a anisotropías observadas para el Fe en  $MnF_2$  en la fase antiferromagnética y para la fase spin-flop ( $H > 93$  K Gauss) respectivamente. Podemos ver la gran diferencia de  $J'$  en los dos casos, para obtener modos resonantes a la misma energía y la diferencia de anchos de las curvas. En el gráfico 3 la localización se debe a los pequeños valores de  $J'$ , o a la energía particular en que se ubica el modo resonante; para  $J'$  no tan pequeños el modo cae cerca del pico de la densidad de estados del continuo.

Consideramos el efecto que sobre la forma de la banda tendrá la inclusión de un mayor número de vecinos. Como para obtener el tensor de susceptibilidad compleja sumamos sobre todas las funciones de Green del sistema puro y consideramos modificadas por la presencia de la impureza sólo las  $(z + 1)$  funciones correspondientes a impureza-impureza e impureza con sus  $z$  primeros vecinos, incluir más vecinos significa considerar modificadas las funciones de Green que involucran vecinos más allá de los primeros. Se ve del gráfico 5 y 6 que esto afecta muy poco cuando la línea es angosta y sustancialmente si esta es ancha, como era de esperar dado el distinto grado de localización.

## REFERENCIAS

1. Gorfinkiel y Misetich, Comunicaciones A.F.A. 1 (86) 1974
2. Gorfinkiel y Misetich, Comunicaciones A.F.A. 1 (90) 1974
3. Shiles y Hone, Phys. Soc. Japan 28 (51) 1970
4. Lovesey, Phys. Cl (102) 1968
5. Walker, Cetliny Hone Jour. Phys. Solids 30 (923) 1969

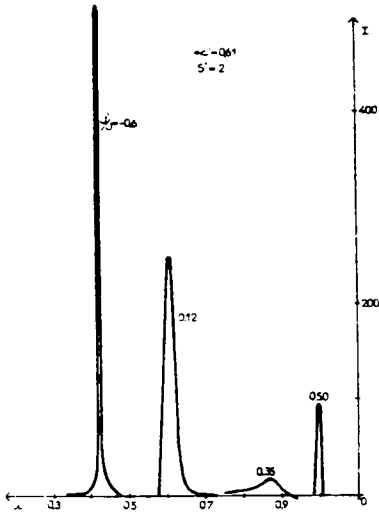


Fig.3

Se grafica lo mismo que en la fig. 4 para otros parámetros.

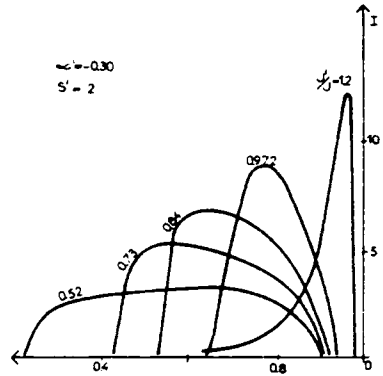


Fig.4

Se grafica intensidad en función de energía, las energías están medidas en unidades de  $16JS$  de modo que el borde superior de la banda es  $\omega = 1.015$  ( $MnF_2$ )

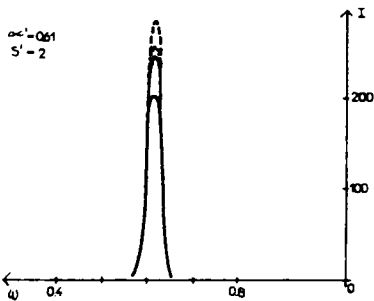


Fig.5

Se grafica la variación de la forma del pico con la inclusión de un mayor número de vecinos

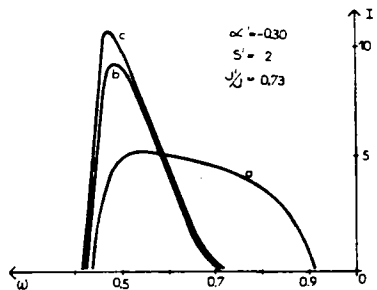


Fig.6

a) corresponde a considerar sólo distintas funciones de Green de impurezas con primeros vecinos.  
 b) agregamos primeros vecinos entre sí. c) Se agrega el grupo (100)