〈$\cos\omega t$ で振動する磁場に対する帯磁率〉

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + g\mu_B J_z H\cos\omega t$$
$$= \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2}g\mu_B J_z H\left(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\right) \qquad \vec{\mu} = -g\mu_B\vec{J} \qquad ①$$

$$\mathcal{H}_0\varphi_n = \varepsilon_n\varphi_n$$

時間に依存した摂動論を適用。

Schrödinger方程式
$$(\mathcal{H}_0+\lambda\mathcal{H}')\psi(t) = i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}$$

$$\psi_n(t) = \sum_m c_m(t)\varphi_m e^{-i\omega_m t}$$

$c_m(t) = c_m^{(0)}(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \cdots$ とおく。

Schrödinger方程式より、

1次
$$\frac{dc_m^{(1)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\sum_n c_n^{(0)}(t)\langle m|\mathcal{H}'|n\rangle e^{i\omega_{mn}t} \qquad (\omega_{mn}=\omega_m-\omega_n)$$

0次
$$\frac{dc_m^{(0)}(t)}{dt} = 0$$

$t\to-\infty$ で $c_0(t)=1$, $c_n(t)=0$ $(n\neq 0)$ とし、断熱的に摂動が加えられたものと考える
($\to \mathcal{H}'$ に $e^{\eta t}$ $(0<\eta\ll 1)$ をつける)

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}\langle m|\mathcal{H}'|0\rangle e^{i\omega_{m0}t'}dt'$$
$$= \frac{g\mu_B H}{2i\hbar}\langle m|J_z|0\rangle\int_{-\infty}^{t}\left\{e^{i(\omega+\omega_{m0}-i\eta)t'}+e^{-i(\omega-\omega_{m0}+i\eta)t'}\right\}dt'$$
$$= \frac{g\mu_B H}{2}\langle m|J_z|0\rangle\cdot\left\{\frac{-e^{i(\omega+\omega_{m0}-i\eta)t}}{\hbar(\omega+\omega_{m0}-i\eta)}+\frac{e^{-i(\omega-\omega_{m0}+i\eta)t}}{\hbar(\omega-\omega_{m0}+i\eta)}\right\}$$

従って、

$$\langle\mu_z\rangle = -g\mu_B\langle\psi|J_z|\psi\rangle$$
$$= -g\mu_B\sum_{m,n}c_m^*(t)c_n(t)\langle m|J_z|n\rangle e^{i\omega_{mn}t}$$

(1次項)

$$= -g\mu_B\sum_m\left\{c_m^*(t)\langle m|J_z|0\rangle e^{i\omega_{m0}t}+\sum_n c_n(t)\langle 0|J_z|n\rangle e^{i\omega_{0n}t}\right\}$$
$$= \frac{g^2\mu_B^2H}{2}\left[\sum_m|\langle m|J_z|0\rangle|^2\cdot\left\{\frac{e^{-i(\omega+\omega_{m0}+i\eta)t}}{\hbar(\omega+\omega_{m0}+i\eta)}-\frac{e^{i(\omega-\omega_{m0}-i\eta)t}}{\hbar(\omega-\omega_{m0}-i\eta)}\right\}e^{i\omega_{m0}t}\right.$$
$$\left.+\sum_n|\langle n|J_z|0\rangle|^2\cdot\left\{\frac{e^{i(\omega+\omega_{n0}-i\eta)t}}{\hbar(\omega+\omega_{n0}-i\eta)}-\frac{e^{-i(\omega-\omega_{n0}+i\eta)t}}{\hbar(\omega-\omega_{n0}+i\eta)}\right\}e^{i\omega_{0n}t}\right]$$
$$= \frac{g^2\mu_B^2H}{2\hbar}\cdot\sum_n|\langle n|J_z|0\rangle|^2\left[\left(\frac{1}{\omega+\omega_{n0}+i\eta}-\frac{1}{\omega-\omega_{n0}+i\eta}\right)e^{-i\omega t}e^{\eta t}\right.$$
$$\left.+\left(\frac{1}{\omega+\omega_{n0}-i\eta}-\frac{1}{\omega-\omega_{n0}-i\eta}\right)e^{i\omega t}e^{\eta t}\right]$$

$$[\quad] = \left\{\frac{\omega+\omega_{n0}-i\eta}{(\omega+\omega_{n0})^2+\eta^2}-\frac{\omega-\omega_{n0}-i\eta}{(\omega-\omega_{n0})^2+\eta^2}\right\}(\cos\omega t-i\sin\omega t)\,e^{\eta t}$$
$$+\left\{\frac{\omega+\omega_{n0}+i\eta}{(\omega+\omega_{n0})^2+\eta^2}-\frac{\omega-\omega_{n0}+i\eta}{(\omega-\omega_{n0})^2+\eta^2}\right\}(\cos\omega t+i\sin\omega t)\,e^{\eta t}$$
$$= 2\left\{\frac{\omega+\omega_{n0}}{(\omega+\omega_{n0})^2+\eta^2}-\frac{\omega-\omega_{n0}}{(\omega-\omega_{n0})^2+\eta^2}\right\}\cos\omega t\;e^{\eta t}$$
$$-2\left\{\frac{\eta}{(\omega+\omega_{n0})^2+\eta^2}-\frac{\eta}{(\omega-\omega_{n0})^2+\eta^2}\right\}\sin\omega t\;e^{\eta t}$$

$$\therefore\ \langle\mu_z\rangle = \frac{g^2\mu_B^2H}{\hbar}\sum_n|\langle n|J_z|0\rangle|^2\left[\left\{\frac{\omega+\omega_{n0}}{(\omega+\omega_{n0})^2+\eta^2}-\frac{\omega-\omega_{n0}}{(\omega-\omega_{n0})^2+\eta^2}\right\}\cos\omega t\right.$$
$$\left.-\left\{\frac{\eta}{(\omega+\omega_{n0})^2+\eta^2}-\frac{\eta}{(\omega-\omega_{n0})^2+\eta^2}\right\}\sin\omega t\right]e^{\eta t} \qquad ②$$

$$= \chi'(\omega)\,\underbrace{\cos\omega t}_{\text{同位相}} + \chi''(\omega)\,\underbrace{\sin\omega t}_{\frac{\pi}{2}\text{遅れ}}\ \text{の応答} \qquad ③$$

$t \to -\infty$ でのBoltzmann分布を考えると、

$$\langle \mu_z \rangle = \frac{g^2 \mu_B^2}{Z} \cdot H \cdot \sum_{n,m} e^{-\varepsilon_m/k_BT} |\langle n|J_z|m\rangle|^2$$

$$\times \frac{1}{\hbar}\left[\left\{ \frac{\omega+\omega_{nm}}{(\omega+\omega_{nm})^2+\eta^2} - \frac{\omega-\omega_{nm}}{(\omega-\omega_{nm})^2+\eta^2} \right\} \cos\omega t - \left\{ \frac{\eta}{(\omega+\omega_{nm})^2+\eta^2} - \frac{\eta}{(\omega-\omega_{nm})^2+\eta^2} \right\} \sin\omega t \right] e^{\eta t} \quad ④$$

$$\therefore \chi'(\omega) = \frac{g^2 \mu_B^2}{Z} \sum_{n,m} e^{-\varepsilon_m/k_BT} |\langle n|J_z|m\rangle|^2 \cdot \frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{\omega+\omega_{nm}}{(\omega+\omega_{nm})^2+\eta^2} - \frac{\omega-\omega_{nm}}{(\omega-\omega_{nm})^2+\eta^2} \right\} \quad ⑤$$

$$\chi''(\omega) = -\frac{g^2 \mu_B^2}{Z} \sum_{n,m} e^{-\varepsilon_m/k_BT} |\langle n|J_z|m\rangle|^2 \frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{\eta}{(\omega+\omega_{nm})^2+\eta^2} - \frac{\eta}{(\omega-\omega_{nm})^2+\eta^2} \right\} \quad ⑥$$

$\omega=0$, $\eta=0$ とすると、 $\chi''(\omega=0)=0$

$$\chi'(\omega=0) = \frac{g^2 \mu_B^2}{Z} \sum_{n,m} e^{-\varepsilon_m/k_BT} \cdot 2 \cdot \frac{|\langle n|J_z|m\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \quad \Rightarrow \text{Van-Vleck 帯磁率} \quad ⑦$$

$$= \frac{g^2 \mu_B^2}{Z} \sum_{n,m} \frac{|\langle n|J_z|m\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \left(e^{-\varepsilon_m/k_BT} - e^{-\varepsilon_n/k_BT} \right)$$

$$= \frac{g^2 \mu_B^2}{Z} \sum_{n,m} \frac{|\langle n|J_z|m\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \cdot e^{-\varepsilon_m/k_BT} \underbrace{\left\{ 1 - e^{(\varepsilon_m-\varepsilon_n)/k_BT} \right\}}_{|\varepsilon_m-\varepsilon_n| \ll k_BT \text{ のとき} \simeq -\frac{\varepsilon_m-\varepsilon_n}{k_BT}}$$

$$\fallingdotseq \frac{g^2 \mu_B^2}{Z} \sum_{n,m} e^{-\varepsilon_m/k_BT} \frac{|\langle n|J_z|m\rangle|^2}{k_BT} \quad \Rightarrow \text{Curie-帯磁率} \quad ⑧$$

☆縮退した準位内で非対角要素をもつときの計算に使える。
⑦で $|\varepsilon_m-\varepsilon_n| \ll k_BT$ のときは⑧を使うようにすると、⑦だけですべての状況に対応できる。
Curie項とVan-Vleck項に分けて考える必要がなくなる。