〈平均場近似による静帯磁率〉

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\,\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j + g\mu_B\sum_i \vec{S}_i\cdot\vec{H}_i$$

について、

$$\vec{S}_i = \langle\vec{S}_i\rangle + (\vec{S}_i - \langle\vec{S}_i\rangle)$$
$$\vec{S}_j = \langle\vec{S}_j\rangle + (\vec{S}_j - \langle\vec{S}_j\rangle)$$

とすると、

$$\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j = \langle\vec{S}_i\rangle\langle\vec{S}_j\rangle + \langle\vec{S}_i\rangle(\vec{S}_j - \langle\vec{S}_j\rangle) + \langle\vec{S}_j\rangle(\vec{S}_i - \langle\vec{S}_i\rangle) + \underbrace{(\vec{S}_i - \langle\vec{S}_i\rangle)(\vec{S}_j - \langle\vec{S}_j\rangle)}_{\text{ゆらぎの2乗は無視（平均場近似）}}$$
$$= \langle\vec{S}_i\rangle\cdot\vec{S}_j + \langle\vec{S}_j\rangle\cdot\vec{S}_i - \langle\vec{S}_i\rangle\cdot\langle\vec{S}_j\rangle$$

$$\therefore\ \mathcal{H} = \sum_i g\mu_B\left(\vec{H}_i - \sum_j \frac{J_{ij}}{g\mu_B}\langle\vec{S}_j\rangle\right)\cdot\vec{S}_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\langle\vec{S}_i\rangle\cdot\langle\vec{S}_j\rangle$$

ここで

$$\vec{S}_i = \sum_{\vec{q}} \vec{S}(\vec{q})\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}, \quad \vec{S}(\vec{q}) = \frac{1}{N}\sum_i \vec{S}_i\,e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}$$

←Bravais格子の場合

$$\vec{H}_i = \sum_{\vec{q}} \vec{H}(\vec{q})\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}, \quad \vec{H}(\vec{q}) = \frac{1}{N}\sum_i \vec{H}_i\,e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}$$

$$J_{ij} = \sum_{\vec{q}} J(\vec{q})\,e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}, \quad J(\vec{q}) = \frac{1}{N}\sum_i J_{ij}\,e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}$$

($j=0$としてよい)

と定義すると、

$$\mathcal{H} = Ng\mu_B\sum_{\vec{q}} \vec{S}(\vec{q})\cdot\vec{H}(-\vec{q}) - N^2\sum_{\vec{q}} J(\vec{q})\,\vec{S}(\vec{q})\cdot\langle\vec{S}(-\vec{q})\rangle + N^2\sum_{\vec{q}} J(\vec{q})\langle\vec{S}(\vec{q})\rangle\cdot\langle\vec{S}(-\vec{q})\rangle$$
$$= Ng\mu_B\sum_{\vec{q}} \vec{S}(\vec{q})\cdot\underbrace{\left[\vec{H}(-\vec{q}) - \frac{N}{g\mu_B}J(\vec{q})\langle\vec{S}(-\vec{q})\rangle\right]}_{=\vec{H}_{\mathrm{eff}}(-\vec{q})} + \frac{N^2}{2}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q})\langle\vec{S}(\vec{q})\rangle\cdot\langle\vec{S}(-\vec{q})\rangle$$

単一イオンでの帯磁率を χ_0 とすると、

$J(-\vec{q}) = J(\vec{q})$

$$\langle\vec{\mu}(\vec{q})\rangle = -g\mu_B\langle\vec{S}(\vec{q})\rangle = \chi_0\vec{H}_{\mathrm{eff}}(\vec{q}) = \chi_0\left[\vec{H}(\vec{q}) - \frac{N}{g\mu_B}J(\vec{q})\langle\vec{S}(\vec{q})\rangle\right]$$

$\langle S(\vec{q})\rangle$について解くと、

$$-g\mu_B\left[1 - \frac{N}{g^2\mu_B^2}J(\vec{q})\chi_0\right]\langle\vec{S}(\vec{q})\rangle = \chi_0\vec{H}(\vec{q})$$

$$\langle\vec{\mu}(\vec{q})\rangle = -g\mu_B\langle\vec{S}(\vec{q})\rangle = \frac{\chi_0}{1 - \frac{N}{g^2\mu_B^2}J(\vec{q})\chi_0}\vec{H}(\vec{q})$$

$$\therefore\ \chi(\vec{q}) = \frac{\chi_0}{1 - \frac{N}{g^2\mu_B^2}J(\vec{q})\chi_0}$$
$$= \frac{g^2\mu_B^2 S(S+1)/3k_B}{T - NJ(\vec{q})S(S+1)/3k_B}$$

$\chi_0 = \dfrac{g^2\mu_B^2 S(S+1)}{3k_B T}$ とすると、

$J(\vec{q})$が最大値をとる $\vec{q}$ を $\vec{Q}$ とすると、

$$T_{\vec{Q}} = \frac{NJ(\vec{Q})S(S+1)}{3k_B}$$ で $\chi(\vec{Q})$ が発散する。