〈平均場近似による動帯磁率〉

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\vec{S}_i(t)\cdot\vec{S}_j(t) + g\mu_B\sum_i \vec{S}_i(t)\cdot\vec{H}_i(t)$$

ここで、

$$\begin{cases} \vec{S}_i = \sum_q \vec{S}(q)e^{iq\cdot r_i}, & \vec{S}(q) = \frac{1}{N}\sum_i \vec{S}_i e^{-iq\cdot r_i} \\ \vec{H}_i = \sum_q \vec{H}(q)e^{iq\cdot r_i}, & \vec{H}(q) = \frac{1}{N}\sum_i \vec{H}_i e^{-iq\cdot r_i} \\ J_{ij} = \sum_q J(q)e^{iq\cdot(r_j - r_i)}, & J(q) = \frac{1}{N}\sum_i J_{ij}e^{-iq\cdot(r_j-r_i)} \end{cases}$$

← Bravais 格子の場合

($j=0$ としてよい)

と定義すると、

$$\mathcal{H} = -\frac{N^2}{2}\sum_q J(q)\vec{S}(q,t)\cdot\vec{S}(-q,t) + g\mu_B N\sum_q \vec{S}(q,t)\cdot\vec{H}(-q,t)$$

と表される。ここで、

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

とすると、

$$\vec{S}(q)\cdot\vec{S}(-q) = \langle\vec{S}(q)\rangle\langle\vec{S}(-q)\rangle + \langle\vec{S}(q)\rangle(\vec{S}(-q) - \langle\vec{S}(-q)\rangle) + (\vec{S}(q) - \langle\vec{S}(q)\rangle)\cdot\langle\vec{S}(-q)\rangle + \underbrace{(\vec{S}(q) - \langle\vec{S}(q)\rangle)\cdot(\vec{S}(-q) - \langle\vec{S}(-q)\rangle)}_{\text{ゆらぎの2乗は無視 (注1) (平均場近似)}}$$

$$= \langle\vec{S}(q)\rangle\cdot\vec{S}(-q) + \langle\vec{S}(-q)\rangle\cdot\vec{S}(q) - \langle\vec{S}(q)\rangle\cdot\langle\vec{S}(-q)\rangle$$

従って、

$$\mathcal{H} = -\frac{N^2}{2}\sum_q J(q)\left[\langle\vec{S}(q,t)\rangle\cdot\vec{S}(-q,t) + \langle\vec{S}(-q,t)\rangle\cdot\vec{S}(q,t) - \langle\vec{S}(q,t)\rangle\cdot\langle\vec{S}(-q,t)\rangle\right] + Ng\mu_B\sum_q \vec{S}(q,t)\cdot\vec{H}(-q,t)$$

① $\vec{H} \parallel z$ で

$$H_z(r_i) = H_0\cos(q\cdot r_i - \omega t) = \frac{H_0}{2}\left\{e^{i(q\cdot r_i - \omega t)} + e^{-i(q\cdot r_i - \omega t)}\right\}$$

のとき、

$$H_z(q,t) = \frac{H_0}{2}e^{-i\omega t}$$
$$H_z(-q,t) = \frac{H_0}{2}e^{i\omega t}$$

である。

$H_z(q,t)$ は $\langle S_z(q,t)\rangle$ を誘起する → $\langle S_z(q,t)\rangle = \frac{A}{2}e^{-i\omega t}$ （A：複素数）

$H_z(-q,t)$ は $\langle S_z(-q,t)\rangle$ を誘起する → $\langle S_z(-q,t)\rangle = \frac{A^*}{2}e^{i\omega t}$ とおくと、

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = &-\frac{N^2}{4}J(q)\left\{Ae^{-i\omega t}S_z(-q,t) + A^*e^{i\omega t}S_z(q,t)\right\} \\ &-\frac{N^2}{4}J(-q)\left\{A^*e^{i\omega t}S_z(q,t) + Ae^{-i\omega t}S_z(-q,t)\right\} \\ &+\frac{N}{2}g\mu_B H_0\left\{S_z(q,t)e^{i\omega t} + S_z(-q,t)e^{-i\omega t}\right\} + \frac{N^2}{8}|A|^2\{J(q)+J(-q)\}\end{aligned}$$

$\downarrow J(q) = J(-q)$

$$\begin{aligned}= &\,Ng\mu_B\underbrace{\frac{1}{2}\left\{H_0 - \frac{N}{g\mu_B}J(q)A^*\right\}e^{i\omega t}}_{=H_z^{\mathrm{eff}}(-q,t)}S_z(q,t) \\ &+ Ng\mu_B\underbrace{\frac{1}{2}\left\{H_0 - \frac{N}{g\mu_B}J(q)A\right\}e^{-i\omega t}}_{=H_z^{\mathrm{eff}}(q,t)}S_z(-q,t) + \frac{N^2}{4}|A|^2 J(q)\end{aligned}$$

とみなせる

(注1) これを RPA (Random Phase Approximation) という

単一イオンでの動的複素帯磁率を $\chi_0(\omega)=\chi_0'(\omega)+i\chi_0''(\omega)$ とすると、

$$\langle \mu_z(\vec{q},t)\rangle = -g\mu_B\langle S_z(\vec{q},t)\rangle = \chi_0(\omega)\, H_z^{eff}(\vec{q},t)$$

より、

$$-g\mu_B\cdot\frac{A}{2}e^{-i\omega t} = \chi_0(\omega)\cdot\frac{1}{2}\left\{H_0-\frac{N}{g\mu_B}J(\vec{q})A\right\}e^{-i\omega t}$$

$$-g\mu_B\left[1-\frac{N}{g^2\mu_B^2}J(\vec{q})\chi_0(\omega)\right]\underbrace{\frac{A}{2}e^{-i\omega t}}_{=\langle S_z(\vec{q},t)\rangle} = \chi_0(\omega)\cdot\underbrace{\frac{H_0}{2}e^{-i\omega t}}_{=H_z(\vec{q},t)}$$

$$\therefore\ \langle\mu_z(\vec{q},t)\rangle = -g\mu_B\langle S_z(\vec{q},t)\rangle = \underbrace{\frac{\chi_0(\omega)}{1-\frac{N}{g^2\mu_B^2}J(\vec{q})\,\chi_0(\omega)}}_{\Rightarrow\ =\chi(\vec{q},\omega)} H_z(\vec{q},t)$$

同様に、　　振動の時間依存性が $e^{i\omega t}$

$$\langle\mu_z(-\vec{q},t)\rangle = -g\mu_B\langle S_z(-\vec{q},t)\rangle = \chi_0(-\omega)\, H_z^{eff}(-\vec{q},t)$$

より、

$$-g\mu_B\cdot\frac{A^*}{2}e^{i\omega t} = \chi_0(-\omega)\cdot\frac{1}{2}\left\{H_0-\frac{N}{g\mu_B}J(\vec{q})A^*\right\}e^{i\omega t}$$

$$-g\mu_B\left[1-\frac{N}{g^2\mu_B^2}J(\vec{q})\chi_0(-\omega)\right]\cdot\underbrace{\frac{A^*}{2}e^{i\omega t}}_{=\langle S_z(-\vec{q},t)\rangle} = \chi_0(-\omega)\cdot\underbrace{\frac{H_0}{2}e^{i\omega t}}_{=H_z(-\vec{q},t)}$$

$$\therefore\ \langle\mu_z(-\vec{q},t)\rangle = -g\mu_B\langle S_z(-\vec{q},t)\rangle = \underbrace{\frac{\chi_0(-\omega)}{1-\frac{N}{g^2\mu_B^2}J(\vec{q})\,\chi_0(-\omega)}}_{\Rightarrow\ \chi(-\vec{q},-\omega)=\chi^*(-\vec{q},\omega)=\chi^*(\vec{q},\omega)} H_z(-\vec{q},t)$$

$\Downarrow$

$$\langle\mu_{iz}(t)\rangle = \frac{H_0}{2}\left\{\chi(\vec{q},\omega)e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)}+\chi^*(\vec{q},\omega)e^{-i(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)}\right\}$$

$$= H_0\{\underbrace{\chi'(\vec{q},\omega)\cos(\vec{q}\cdot\vec{r}_i-\omega t)}_{\text{同位相}}-\underbrace{\chi''(\vec{q},\omega)\sin(\vec{q}\cdot\vec{r}_i-\omega t)}_{\frac{\pi}{2}\text{遅れ}}\}$$

② $H_x = H_0\cos(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)$
　 $H_y = H_0\sin(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)$

のとき

$H_+ = H_x + iH_y = H_0\, e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ $\Rightarrow$ $H_+(\vec{q},t) = H_0\, e^{-i\omega t}$

$H_- = H_x - iH_y = H_0\, e^{-i(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)}$. 　　$H_-(-\vec{q},t) = H_0\, e^{i\omega t}$

平均場近似ハミルトニアンを

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = -\frac{N^2}{4}\sum_{q}J(\vec{q})\Big[&\{\langle S_+(\vec{q},t)\rangle S_-(-\vec{q},t)+\langle S_-(\vec{q},t)\rangle S_+(-\vec{q},t)+2\langle S_z(\vec{q},t)\rangle S_z(-\vec{q},t)\}\\ &+\{\langle S_+(-\vec{q},t)\rangle S_-(\vec{q},t)+\langle S_-(-\vec{q},t)\rangle S_+(\vec{q},t)+2\langle S_z(-\vec{q},t)\rangle S_z(\vec{q},t)\}\\ &-\{\langle S_+(\vec{q},t)\rangle\langle S_-(-\vec{q},t)\rangle+\langle S_-(\vec{q},t)\rangle\langle S_+(-\vec{q},t)\rangle+2\langle S_z(\vec{q},t)\rangle\langle S_z(-\vec{q},t)\rangle\}\Big]\\ &+\frac{1}{2}Ng\mu_B\sum_{q}\{S_+(\vec{q},t)H_-(-\vec{q},t)+S_-(\vec{q},t)H_+(-\vec{q},t)+2S_z(\vec{q},t)H_z(-\vec{q},t)\}\end{aligned}$$

と書き直す(注1)

$H_+(\vec{q},t)$ は $\langle S_+(\vec{q},t)\rangle$ を誘起する $\rightarrow \langle S_+(\vec{q},t)\rangle = A\,e^{-i\omega t}$

$H_-(-\vec{q},t)$ は $\langle S_-(-\vec{q},t)\rangle$ を誘起する $\rightarrow \langle S_-(-\vec{q},t)\rangle = A^*e^{i\omega t}$ とおくと、

(注1) $\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j = \frac{1}{2}(S_{i+}S_{j-}+S_{i-}S_{j+})+S_{iz}S_{jz}$.

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} = & -\frac{N^2}{4} J(\vec{q}) \left\{ A e^{-i\omega t} S_-(-\vec{q},t) + A^* e^{i\omega t} S_+(\vec{q},t) \right\} \\
& -\frac{N^2}{4} J(-\vec{q}) \left\{ A^* e^{i\omega t} S_+(\vec{q},t) + A e^{-i\omega t} S_-(-\vec{q},t) \right\} \\
& +\frac{N}{2} g\mu_B H_0 \left\{ S_+(\vec{q},t) e^{i\omega t} + S_-(-\vec{q},t) e^{-i\omega t} \right\} + \frac{N^2}{4} |A|^2 \{ J(\vec{q}) + J(-\vec{q}) \} \qquad J(\vec{q}) = J(-\vec{q}) \\
= & \ \frac{N}{2} g\mu_B \underbrace{\left\{ H_0 - \frac{N}{g\mu_B} J(\vec{q}) A^* \right\} e^{i\omega t}}_{=H_+^{\mathrm{eff}}(\vec{q},t)} S_+(\vec{q},t) \\
& + \frac{N}{2} g\mu_B \underbrace{\left\{ H_0 - \frac{N}{g\mu_B} J(\vec{q}) A \right\} e^{-i\omega t}}_{=H_-^{\mathrm{eff}}(-\vec{q},t)} S_-(-\vec{q},t) + \frac{N^2}{2} |A|^2 J(\vec{q})
\end{aligned}
$$

とみなせる

$$\langle \mu_+(\vec{q},t) \rangle = -g\mu_B \langle S_+(\vec{q},t) \rangle = \chi_0(\omega)\, H_+^{\mathrm{eff}}(\vec{q},t)$$

より、

$$-g\mu_B A e^{-i\omega t} = \chi_0(\omega) \left\{ H_0 - \frac{N}{g\mu_B} J(\vec{q}) A \right\} e^{-i\omega t}$$

$$-g\mu_B \left[1 - \frac{N}{g^2\mu_B^2} J(\vec{q}) \chi_0(\omega) \right] \cdot \underbrace{A e^{-i\omega t}}_{\langle S_+(\vec{q},t) \rangle} = \chi_0(\omega) \underbrace{H_0 e^{-i\omega t}}_{H_+(\vec{q},t)}$$

$$\therefore \langle \mu_+(\vec{q},t) \rangle = -g\mu_B \langle S_+(\vec{q},t) \rangle = \underbrace{\frac{\chi_0(\omega)}{1 - \dfrac{N}{g^2\mu_B^2} J(\vec{q}) \chi_0(\omega)}}_{\Rightarrow\ \chi(\vec{q},\omega)} H_+(\vec{q},t)$$

同様に、　振動の時間依存性が $e^{i\omega t}$

$$\langle \mu_-(-\vec{q},t) \rangle = -g\mu_B \langle S_-(-\vec{q},t) \rangle = \chi_0(-\omega)\, H_-^{\mathrm{eff}}(-\vec{q},t)$$

より

$$-g\mu_B A^* e^{i\omega t} = \chi_0(-\omega) \left\{ H_0 - \frac{N}{g\mu_B} J(\vec{q}) A^* \right\} e^{i\omega t}$$

$$-g\mu_B \left[1 - \frac{N}{g^2\mu_B^2} J(\vec{q}) \chi_0(-\omega) \right] \underbrace{A^* e^{i\omega t}}_{\langle S_-(-\vec{q},t) \rangle} = \chi_0(-\omega) \underbrace{H_0 e^{i\omega t}}_{H_-(-\vec{q},t)}$$

$$\therefore \langle \mu_-(-\vec{q},t) \rangle = -g\mu_B \langle S_-(-\vec{q},t) \rangle = \underbrace{\frac{\chi_0(-\omega)}{1 - \dfrac{N}{g^2\mu_B^2} J(\vec{q}) \chi_0(-\omega)}}_{\Rightarrow\ \chi(-\vec{q},-\omega) = \chi^*(-\vec{q},\omega) = \chi^*(\vec{q},\omega)} H_-(-\vec{q},t)$$

$\Downarrow$

$$\langle \mu_{i+}(t) \rangle = \langle \mu_+(\vec{q},t) \rangle e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} = \chi(\vec{q},\omega) H_0 e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r}_i - \omega t)}$$

$$\langle \mu_{i-}(t) \rangle = \langle \mu_-(-\vec{q},t) \rangle e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} = \chi^*(\vec{q},\omega) H_0 e^{-i(\vec{q}\cdot\vec{r}_i - \omega t)}$$

$$
\begin{aligned}
\therefore \langle \mu_{ix}(t) \rangle &= \frac{1}{2} \left\{ \langle \mu_{i+}(t) \rangle + \langle \mu_{i-}(t) \rangle \right\} \\
&= H_0 \left\{ \overbrace{\chi'(\vec{q},\omega) \cos(\vec{q}\cdot\vec{r}_i - \omega t)}^{\text{同位相}} - \overbrace{\chi''(\vec{q},\omega) \sin(\vec{q}\cdot\vec{r}_i - \omega t)}^{\frac{\pi}{2}\text{遅れ}} \right\} \\
\langle \mu_{iy}(t) \rangle &= \frac{1}{2i} \left\{ \langle \mu_{i+}(t) \rangle - \langle \mu_{i-}(t) \rangle \right\} \\
&= H_0 \left\{ \underbrace{\chi'(\vec{q},\omega) \sin(\vec{q}\cdot\vec{r}_i - \omega t)}_{\text{同位相}} + \underbrace{\chi''(\vec{q},\omega) \cos(\vec{q}\cdot\vec{r}_i - \omega t)}_{\frac{\pi}{2}\text{遅れ}} \right\}
\end{aligned}
$$

<non-Bravais lattice>

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{\substack{\ell\ell' \\ dd'}} J_{\ell d\ell' d'}\, \vec{S}_{\ell d}\cdot\vec{S}_{\ell' d'} + g\mu_B \sum_{\ell, d} \vec{S}_{\ell d}\cdot\vec{H}_{\ell d}$$

ℓ：単位格子の番号　d：単位格子内の原子の番号．

$$\begin{cases} \vec{S}_{\ell d} = \sum_{\vec{q}} \vec{S}(\vec{q})\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_{\ell d}}, & \vec{S}(\vec{q}) = \frac{1}{N}\sum_{\ell, d} \vec{S}_{\ell d}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_{\ell d}} \\ \vec{H}_{\ell d} = \sum_{\vec{q}} \vec{H}(\vec{q})\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_{\ell d}}, & \vec{H}(\vec{q}) = \frac{1}{N}\sum_{\ell, d} \vec{H}_{\ell d}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_{\ell d}} \\ J_{\ell d\ell' d'} = \sum_{\vec{q}} J(\vec{q})\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_{\ell' d'}-\vec{r}_{\ell d})}, & J(\vec{q}) = \frac{1}{N}\sum_{\ell d d'} J_{\ell d\ell' d'}\, e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_{\ell' d'}-\vec{r}_{\ell d})} \end{cases}$$

N：単位胞の数

($\ell'=0$とする)

と定義すると、

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -\frac{N^2}{2}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q})\vec{S}(\vec{q})\cdot\vec{S}(-\vec{q}) + g\mu_B N\sum_{\vec{q}}\vec{S}(\vec{q})\cdot\vec{H}(-\vec{q}) \\ &= -\frac{N^2}{4}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q})\{S_+(\vec{q})S_-(-\vec{q}) + S_-(\vec{q})S_+(-\vec{q}) + 2S_z(\vec{q})S_z(-\vec{q})\} \\ &\quad + \frac{1}{2}g\mu_B N\sum_{\vec{q}}\{S_+(\vec{q})H_-(-\vec{q}) + S_-(\vec{q})H_+(-\vec{q}) + 2S_z(\vec{q})H_z(-\vec{q})\}\end{aligned}$$

平均場近似を適用すると，

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -\frac{N^2}{2}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q})\left[\langle\vec{S}(\vec{q})\rangle\cdot\vec{S}(-\vec{q}) + \langle\vec{S}(-\vec{q})\rangle\cdot\vec{S}(\vec{q}) - \langle\vec{S}(\vec{q})\rangle\cdot\langle\vec{S}(-\vec{q})\rangle\right] \\ &\quad + Ng\mu_B\sum_{\vec{q}}\vec{S}(\vec{q})\cdot\vec{H}(\vec{q}) \\ &= -\frac{N^2}{4}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q})\Big[\{\langle S_+(\vec{q})\rangle\cdot S_-(-\vec{q}) + \langle S_-(\vec{q})\rangle S_+(-\vec{q}) + 2\langle S_z(\vec{q})\rangle S_z(-\vec{q})\} \\ &\qquad + \{\langle S_+(-\vec{q})\rangle\cdot S_-(\vec{q}) + \langle S_-(-\vec{q})\rangle S_+(\vec{q}) + 2\langle S_z(-\vec{q})\rangle S_z(\vec{q})\} \\ &\qquad - \{\langle S_+(\vec{q})\rangle\langle S_-(-\vec{q})\rangle + \langle S_-(\vec{q})\rangle\langle S_+(-\vec{q})\rangle + 2\langle S_z(\vec{q})\rangle\langle S_z(-\vec{q})\rangle\}\Big] \\ &\quad + \frac{N}{2}g\mu_B\sum_{\vec{q}}\{S_+(\vec{q})H_-(-\vec{q}) + S_-(\vec{q})H_+(-\vec{q}) + 2S_z(\vec{q})H_z(-\vec{q})\}\end{aligned}$$

- 動帯磁率

Bravais 格子で $J(\vec{q}) = J(\vec{q})$ としたが、ここでは $J(-\vec{q}) = J^*(\vec{q})$

従って，$J(\vec{q})$ を $\frac{1}{2}\{J(\vec{q}) + J^*(\vec{q})\} = \mathrm{Re}\,J(\vec{q})$ でおきかえればよい．

①② いずれの場合も，

$$\langle\mu_\alpha(\vec{q}, t)\rangle = -g\mu_B\langle S_\alpha(\vec{q}, t)\rangle = \chi_0(\omega)\, H_\alpha^{eff}(\vec{q}, t)$$

ただし (注1) $\chi_0(\omega) = \sum_d \chi_0^{(d)}(\omega)$

より

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\omega)}{1 - \frac{N}{g^2\mu_B^2}\cdot\frac{1}{2}\{J(\vec{q}) + J^*(\vec{q})\}\chi_0(\omega)}$$

$$\langle\mu_\alpha(-\vec{q}, t)\rangle = -g\mu_B\langle S_\alpha(-\vec{q}, t)\rangle = \chi_0(-\omega)\, H_\alpha^{eff}(-\vec{q}, t)$$

より

$$\begin{aligned}\chi(-\vec{q}, -\omega) &= \frac{\chi_0(\omega)}{1 - \frac{N}{g^2\mu_B^2}\cdot\frac{1}{2}\{J(\vec{q}) + J^*(\vec{q})\}\chi_0(\omega)} \\ &= \chi^*(-\vec{q}, \omega) = \chi^*(\vec{q}, \omega)\end{aligned}$$

(注1) $\vec{H}(\vec{q})$ の磁場下で．

$$\vec{S}(\vec{k}) = \frac{1}{N}\sum_{\ell d}\underset{\substack{\| \\ \chi_0^{(d)}H_{\ell d} = \chi_0^{(d)}\vec{H}(\vec{q})e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_{\ell d}}}}{\vec{S}_{\ell d}}\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_{\ell d}} = \frac{H(\vec{q})}{N}\underbrace{\sum_{\ell} e^{i(\vec{q}-\vec{k})\cdot\vec{\ell}}}_{N\delta_{\vec{q}\vec{k}}}\sum_d \chi_0^{(d)} e^{i(\vec{q}-\vec{k})\cdot\vec{d}} = \underbrace{\sum_d \chi_0^{(d)}}_{\chi_0(\vec{q})}\, H(\vec{q})$$

$\chi_0(\vec{q})$．相互作用がないときの$\chi(\vec{q})$．