

4 古典スピン系の秩序状態と分子場理論

1. 古典スピン系の秩序状態
2. ハイゼンベルグ・モデルの分子場理論
3. 異方的交換相互作用

4 - 1 古典スピン系の秩序状態

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

if $J_{ij} < 0$ for all $\langle i, j \rangle$,

$S_i^z = S$ (ferromagnetic ground state)

強磁性状態は正確な基底量子状態。

if $J_{nn} > 0$ ($J_{ij} = 0$ for other pairs),

$S_{2i}^z = S, S_{2i+1}^z = -S$ (antiferromagnetic state)

反強磁性状態は固有量子状態ではない。

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

スピンを古典的なベクトルと見なして、エネルギーを最小にするスピン配列を求める。

Fourier成分 (q - 空間) でスピン系のエネルギーを考える

格子Fourier展開 (単位胞あたり磁性イオン1個を仮定する。)

$$\vec{S}_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \vec{S}_n e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n}, \quad \vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3: \text{Bravais格子}$$

境界: $N_1 \times N_2 \times N_3$

逆格子

$$\begin{aligned} \vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3: \quad & \vec{b}_1 \perp \vec{a}_2, \vec{b}_1 \perp \vec{a}_3, (\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1) = 2\pi \\ & \vec{b}_2 \perp \vec{a}_1, \vec{b}_2 \perp \vec{a}_3, (\vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2) = 2\pi \\ & \vec{b}_3 \perp \vec{a}_1, \vec{b}_3 \perp \vec{a}_2, (\vec{b}_3 \cdot \vec{a}_3) = 2\pi \end{aligned}$$

逆格子ベクトル

$$\begin{aligned} \vec{K}_n &= n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2 + n_3 \vec{b}_3 \\ (\vec{K}_n \cdot \vec{R}_m) &= 2\pi l \quad e^{i\vec{K}_n \cdot \vec{R}_m} = 1 \end{aligned}$$

波数ベクトル

$$\vec{q} = q_1 \vec{b}_1 + q_2 \vec{b}_2 + q_3 \vec{b}_3, \quad \vec{q} \cdot \vec{R}_n = 2\pi(q_1 n_1 + q_2 n_2 + q_3 n_3)$$

$$q_i = \frac{n_i}{N_i} \left(n_i = -\frac{N_i}{2} \leq \frac{N_i}{2} \right) \quad 1^{\text{st}} \text{ Brillouin zone}$$

逆変換

$$\vec{S}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \vec{S}_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n}$$

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{1}{2} \sum_{i,l} J(\vec{R}_l) \vec{S}(\vec{R}_i) \cdot \vec{S}(\vec{R}_i + \vec{R}_l)$$

$$\vec{S}(\vec{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \vec{S}_{\mathbf{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i}, \quad \vec{S}(\vec{R}_i + \vec{R}_l) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \vec{S}_{\mathbf{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l}$$

$$H = \frac{1}{2N} \sum_{i,l,k,q} J(\vec{R}_l) \vec{S}_{\mathbf{q}} \cdot \vec{S}_{\mathbf{k}} e^{i(\vec{q}+\vec{k}) \cdot \vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \quad \text{直交関係} \quad \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\vec{q}+\vec{k}) \cdot \vec{R}_i} = \delta(\vec{q} + \vec{k})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{l,q} J(\vec{R}_l) \vec{S}_{\mathbf{q}} \cdot \vec{S}_{-\mathbf{q}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_l} \quad J(\vec{q}) = \sum_l J(\vec{R}_l) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_l}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_q J(\vec{q}) \vec{S}_{\mathbf{q}} \cdot \vec{S}_{-\mathbf{q}} \quad \text{束縛条件(各サイトのスピンの大きさが一定)}$$

$$\sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_i = \sum_{\mathbf{q}} \vec{S}_{\mathbf{q}} \cdot \vec{S}_{-\mathbf{q}} = NS^2$$

$J(q)$ を最小にする $q=Q$ に対して、 $\vec{S}_Q \neq 0$, $\vec{S}_{-Q} \neq 0$

その他の q では、 $\vec{S}_{\mathbf{q}} = 0$

$$S^2 = \vec{S}_i \cdot \vec{S}_i = \frac{1}{N} \left(2\vec{S}_Q \cdot \vec{S}_{-Q} + \vec{S}_Q \cdot \vec{S}_Q e^{2i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i} + \vec{S}_{-Q} \cdot \vec{S}_{-Q} e^{-2i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i} \right)$$

R_i によらず一定であるにはゼロ
であることが必要

$$\vec{S}_Q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \vec{S}_n e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}_n}$$

$$\vec{S}_Q = \vec{R}_Q + i\vec{I}_Q, \quad \vec{S}_{-Q} = \vec{R}_Q - i\vec{I}_Q \quad \vec{S}_Q \cdot \vec{S}_Q = R_Q^2 - I_Q^2 + 2i\vec{R}_Q \cdot \vec{I}_Q = 0$$

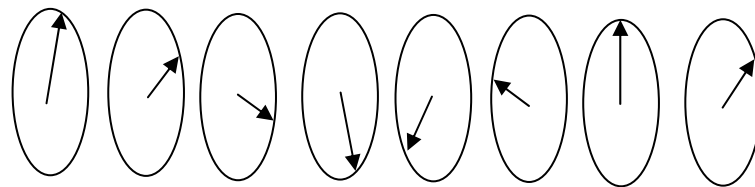
$$\vec{S}(\vec{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\vec{S}_Q e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i} + \vec{S}_{-Q} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i} \right)$$

$$R_Q^2 = I_Q^2, \quad \vec{R}_Q \cdot \vec{I}_Q = 0$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \left[2\vec{R}_Q \cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) - 2\vec{I}_Q \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \right]$$

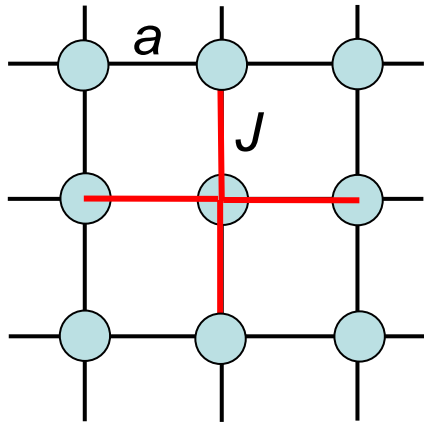
ヘリカル・スピン構造

$$= S \begin{pmatrix} \cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \\ -\sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \\ 0 \end{pmatrix}$$



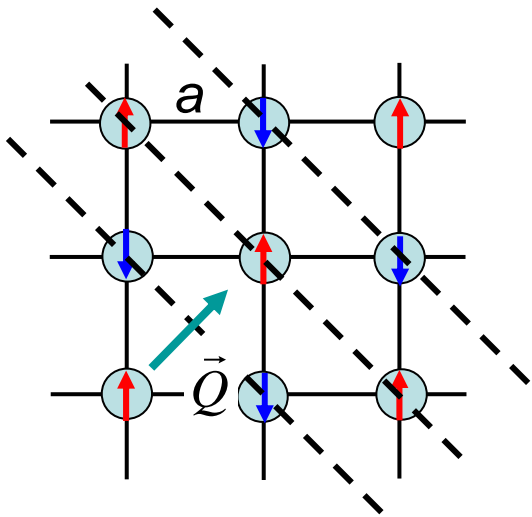
簡単な例

1. 2次元正方格子(最近接反強磁性相互作用)



$$\begin{aligned} J(\vec{q}) &= J \left(e^{2\pi i q_x} + e^{-2\pi i q_x} + e^{2\pi i q_y} + e^{-2\pi i q_y} \right) \\ &= 2J \left\{ \cos(2\pi q_x) + \cos(2\pi q_y) \right\} \end{aligned}$$

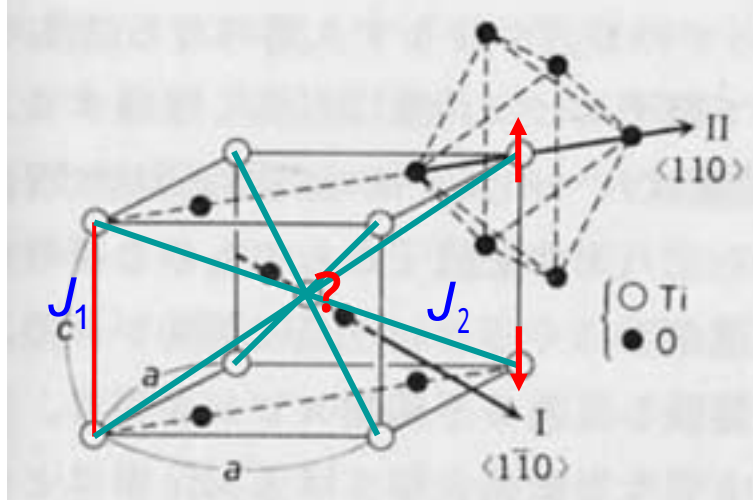
$\vec{Q} = (q_x, q_y) = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$ で最小値を取る。



2部分格子反強磁性構造

2. ルチル構造 (MnO₂)

スピン・フラストレーション



$$J(\vec{q}) = J_1 \left(e^{2\pi i q_z} + e^{-2\pi i q_z} \right) + J_2 \left(e^{\pi i q_x} + e^{-\pi i q_x} \right) \left(e^{\pi i q_y} + e^{-\pi i q_y} \right) \left(e^{\pi i q_z} + e^{-\pi i q_z} \right) \\ = 2J_1 \cos(2\pi q_z) + 8J_2 \cos(\pi q_x) \cos(\pi q_y) \cos(\pi q_z)$$

q_x, q_y, q_z で微分して $\sin(\pi q_x) \cos(\pi q_y) \cos(\pi q_z) = 0$

$$\cos(\pi q_x) \sin(\pi q_y) \cos(\pi q_z) = 0$$

$$J_1 \sin(2\pi q_z) + 2J_2 \cos(\pi q_x) \cos(\pi q_y) \sin(\pi q_z) = 0$$

Case 1: $Q_x = Q_z = \frac{1}{2}$, Q_y は任意

Case 2: $Q_x = Q_y = 0$, $Q_z = 1$

Case 3: $Q_x = Q_y = 0$, $\cos \pi Q_z = -\frac{J_2}{J_1} \left(\left| \frac{J_2}{J_1} \right| < 1 \right)$

Case 1: $Q_x = Q_z = \frac{1}{2}$, Q_y は任意 $J(Q) = -2J_1$

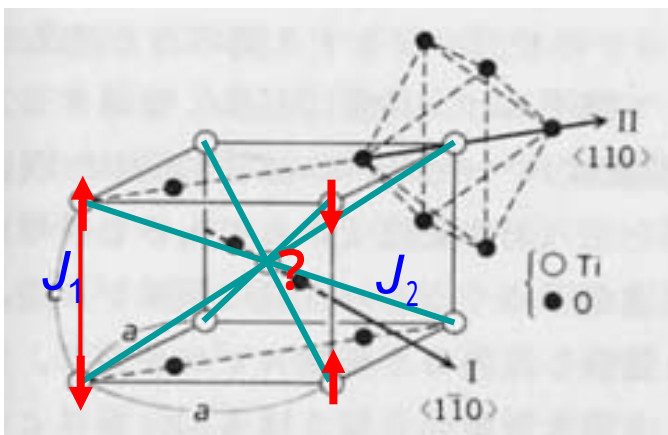
Case 2: $Q_x = Q_y = 0$, $Q_z = 1$ $J(Q) = 2J_1 - 8J_2$

Case 3: $Q_x = Q_y = 0$, $\cos \frac{Q_z}{2} = -\frac{J_2}{J_1}$ $\left(\left| \frac{J_2}{J_1} \right| < 1 \right)$ $J(Q) = -2J_1 - 4 \frac{J_2^2}{J_1}$

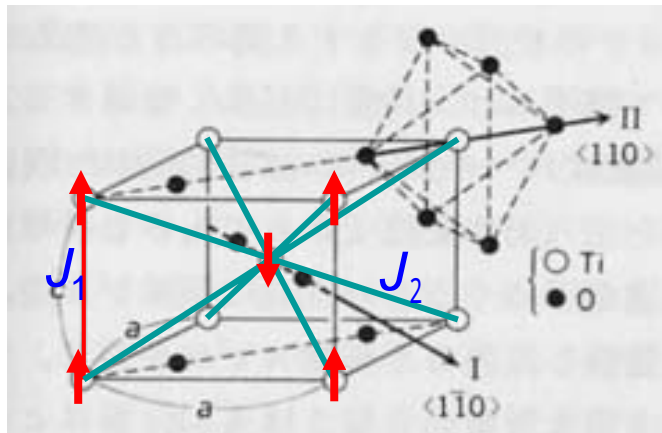
ヘリカル構造

$\left| \frac{J_2}{J_1} \right| < 1$ ならヘリカル構造が安定。 $\left| \frac{J_2}{J_1} \right| > 1$ なら Case 2 が安定。

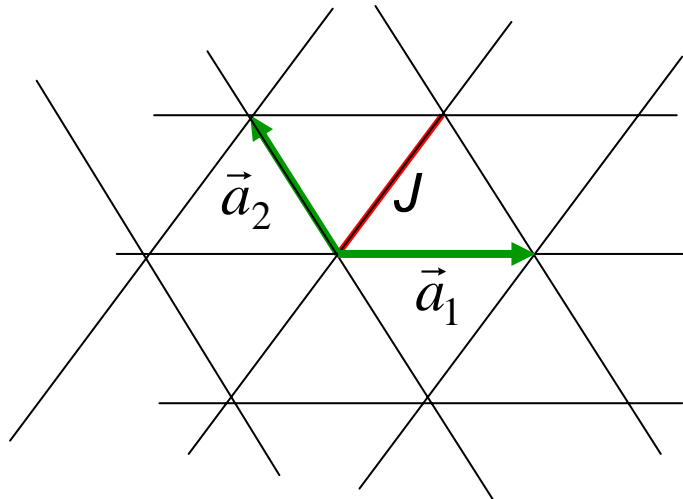
Case 1:



Case 2:

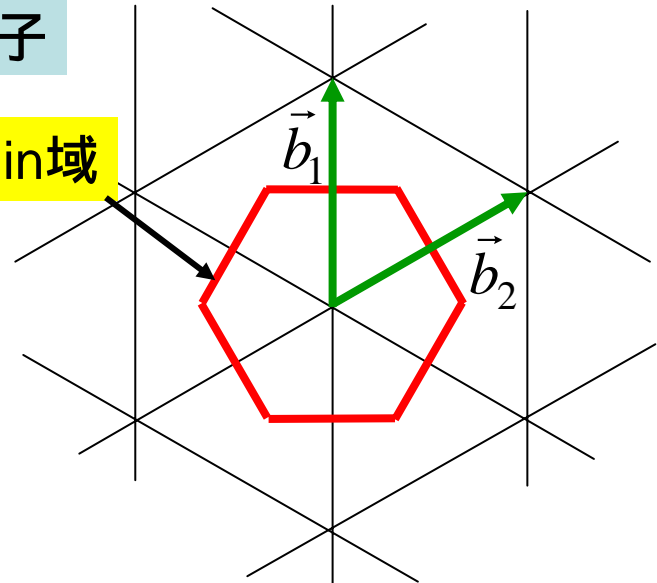


3.3角格子



逆格子

第1 Brillouin域



中心点(0,0)とJで結ばれている格子点:(1,0), (-1,1), (0,1), (0,-1), (1,1), (-1,-1)

$$J(\vec{q}) = J \left(e^{2\pi i q_1} + e^{-2\pi i q_1} + e^{2\pi i q_2} + e^{-2\pi i q_2} + e^{2\pi i (q_1 + q_2)} + e^{-2\pi i (q_1 + q_2)} \right)$$

$$= 2J \{ \cos(2\pi q_1) + \cos(2\pi q_2) + \cos 2\pi (q_1 + q_2) \}$$

最小値

$$\begin{cases} \frac{\partial J}{\partial q_1} = 0 & \sin(2\pi q_1) + \sin 2\pi (q_1 + q_2) = 0 \\ \frac{\partial J}{\partial q_2} = 0 & \sin(2\pi q_2) + \sin 2\pi (q_1 + q_2) = 0 \end{cases}$$

$$q_1 = q_2$$

強磁性

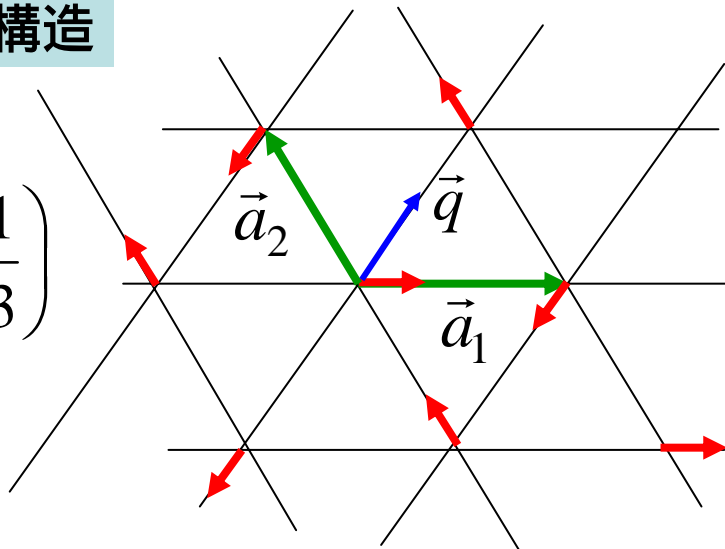
$$\text{case 1: } q_1 + q_2 = -q_1 \quad (q_1 = q_2 = 0)$$

120度構造

$$\text{case 2: } q_1 + q_2 = 1 - q_1 \quad (q_1 = q_2 = \frac{1}{3})$$

120度構造

$$\vec{q} = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3} \right)$$



正3角形

$$J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \cdot \vec{S}_1) = \frac{J}{2} \vec{S}_T^2 + \text{const.}$$

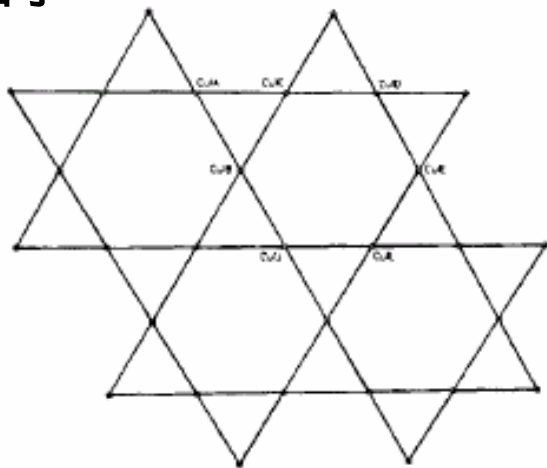
$$\vec{S}_T = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3$$

正4面体

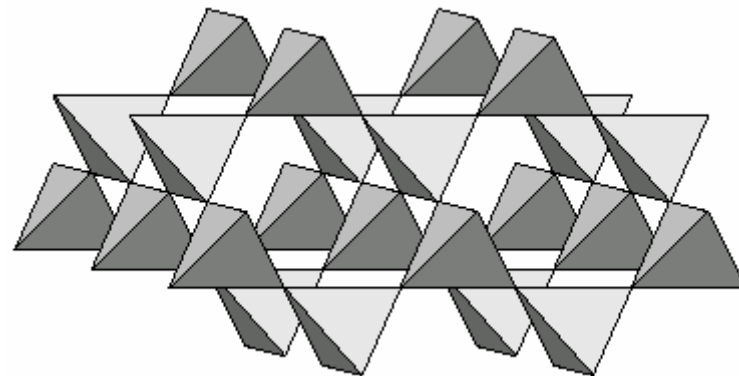
$$J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \cdot \vec{S}_4 + \vec{S}_4 \cdot \vec{S}_1) = \frac{J}{2} \vec{S}_T^2 + \text{const.}$$

フラストレーションの強い格子の例

カゴメ格子



パイロクロア格子



最低エネルギー状態にマクロな縮退が残る

4 - 2 ハイゼンベルグ・モデルの分子場理論

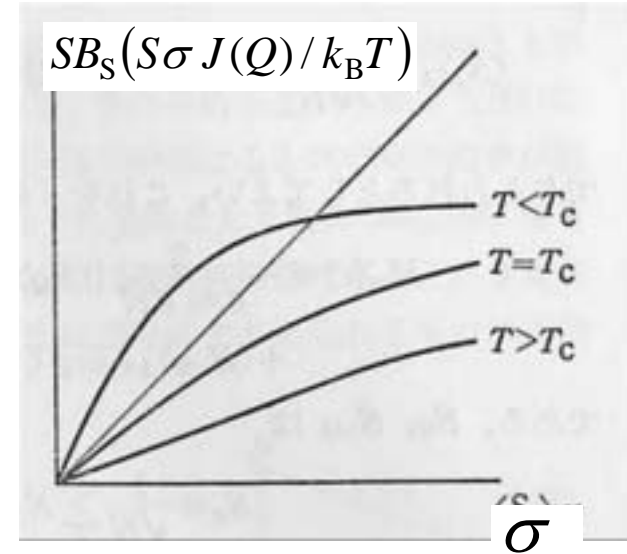
$$H = \sum_j J_{ij} \langle \vec{S}_j \rangle \cdot \vec{S}_i$$

$$\vec{S}_j = \sigma \begin{pmatrix} \cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_j) \\ -\sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_j) \\ 0 \end{pmatrix}$$

有効磁場 $g\mu_B \vec{H}_{\text{eff}}$

$$\vec{H}_{\text{eff}} = \frac{\sigma}{g\mu_B} \begin{pmatrix} -\sum_j J_{ij} \cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_j) \\ \sum_j J_{ij} \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_j) \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma J(\vec{Q})}{g\mu_B} \begin{pmatrix} -\cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \\ \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\sigma}{S} = B_S \left(\frac{Sg\mu_B H_{\text{eff}}}{kT} \right) = B_S \left(-\frac{S\sigma J(Q)}{kT} \right)$$



$$B_S(x) \approx \frac{S+1}{3S} x - \alpha x^3$$

$$SB_S \left(-\frac{S\sigma J(Q)}{k_B T} \right) \approx -\frac{S(S+1)J(Q)}{3k_B T} \sigma - \beta \sigma^3$$

磁気秩序
転移温度

$$T > T_c = -\frac{J(Q)S(S+1)}{3k_B} \text{で解を持つ。}$$

$$J(Q) < 0, \quad \beta > 0$$

$$B_S(x) = \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{x}{2S}\right)$$

$$T \rightarrow 0 \text{ で } B_S(x) \approx 1 - \frac{1}{S} \exp\left(-\frac{x}{S}\right)$$

$$\sigma \approx S - \exp\left(\frac{J(Q)S}{k_B T}\right)$$

実験とは合わない。
低エネルギーのスピนว励起を
考えていない。

$$T \approx T_c \text{ では } \sigma \approx \frac{T_c}{T} \sigma - \beta \sigma^3$$

$$\sigma \propto \sqrt{1 - \frac{T_c}{T}}$$

$T < T_c$: 常磁性磁化率

外部磁場 H_0 $\langle \vec{S}_i \rangle \parallel H_0$ 一様磁化

$$\text{分子場 } H_{\text{eff}} = H_0 - \frac{J(0)\sigma}{g\mu_B}$$

$$g\mu_B\sigma = \tilde{\chi}H_{\text{eff}}, \quad \tilde{\chi} = \frac{C}{T}, \quad C = \frac{(g\mu_B)^2 S(S+1)}{3k_B}, \quad \tilde{\chi}: \text{相互作用がないときの磁化率}$$

(一様)磁化率 $\chi \equiv \frac{g\mu_B\sigma}{H_0} = \tilde{\chi} \frac{H_{\text{eff}}}{H_0} = \tilde{\chi} \left(1 - \frac{J(0)}{g\mu_B} \frac{\sigma}{H_0} \right) = \tilde{\chi} \left(1 - \frac{J(0)\chi}{(g\mu_B)^2} \right)$

自己無撞着 (self-consistent) に χ を決める。... 分子場近似

$$\frac{1}{\tilde{\chi}} = \frac{1}{\chi} - \frac{J(0)}{(g\mu_B)^2}$$

$$\chi = \frac{C}{T - T_0}, \quad T_0 = -\frac{J(0)S(S+1)}{3k_B}$$

Curie Weiss則

一般化された磁化率

仮想的な外場 $\vec{H}_0(\vec{R}_i) = \vec{H}_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_i} + \vec{H}_{-q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_i}$ に対する応答

$$\vec{S}(\vec{R}_i) = \langle \vec{S}_q \rangle e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_i} + \langle \vec{S}_{-q} \rangle e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_i}$$

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}(\vec{R}_i) &= H_0(\vec{R}_i) - \frac{1}{g\mu_B} \sum_j J_{ij} \left(\langle \vec{S}_q \rangle e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_j} + \langle \vec{S}_{-q} \rangle e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_j} \right) \\ &= \vec{H}_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_i} + \vec{H}_{-q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_i} - \frac{J(q)}{g\mu_B} \left(\langle \vec{S}_q \rangle e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_i} + \langle \vec{S}_{-q} \rangle e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_i} \right) \end{aligned}$$

$$\langle \vec{S}_q \rangle \parallel \vec{H}_q$$

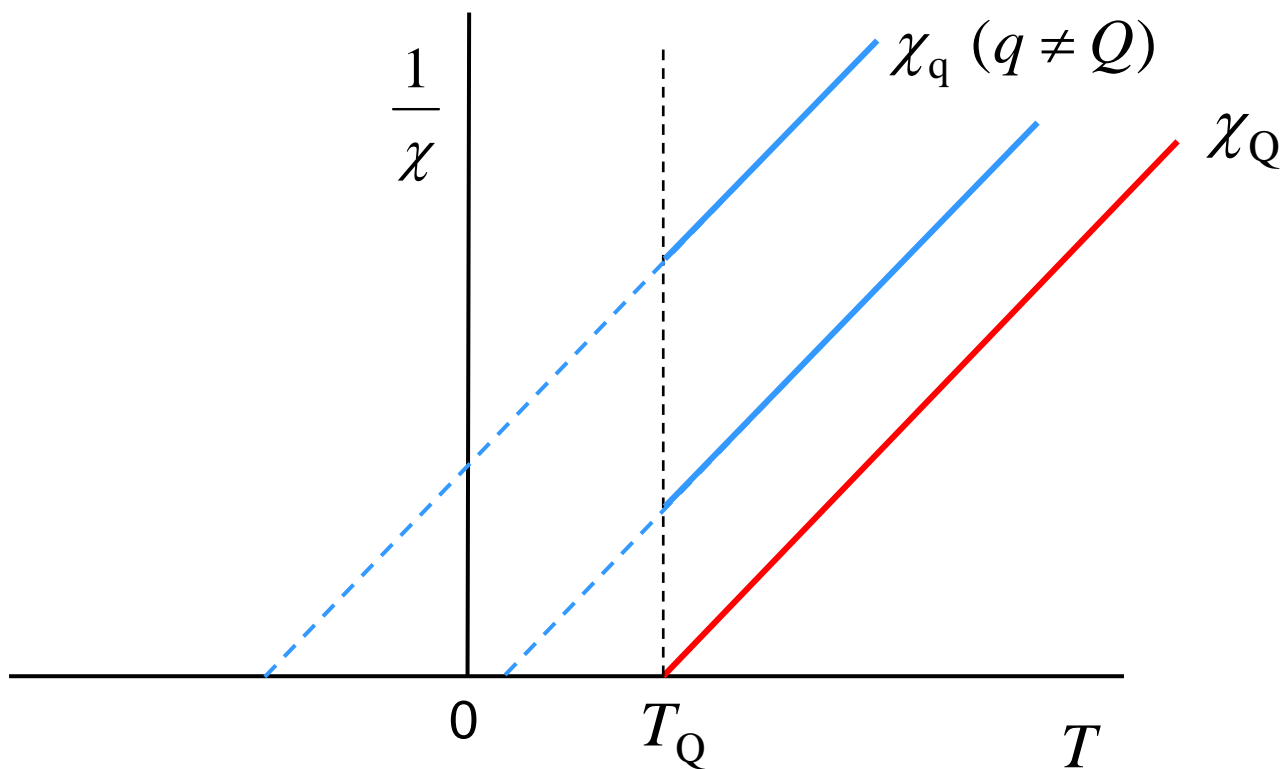
$$\chi_q = \frac{g\mu_B |\langle \vec{S}_q \rangle|}{|\vec{H}_q|} \quad \text{一般化された磁化率}$$

$$g\mu_B \vec{S}(\vec{R}_i) = \tilde{\chi} H_{\text{eff}}(\vec{R}_i) \quad \chi_q = \frac{g\mu_B |\langle \vec{S}_q \rangle|}{|\vec{H}_q|} = \tilde{\chi} \left(1 - \frac{J(q) |\langle \vec{S}_q \rangle|}{g\mu_B |\vec{H}_q|} \right) = \tilde{\chi} \left(1 - \frac{J(q)}{(g\mu_B)^2} \chi_q \right)$$

$$\frac{1}{\tilde{\chi}} = \frac{1}{\chi} - \frac{J(q)}{(g\mu_B)^2}$$

$$\chi = \frac{C}{T - T_q}, \quad T_q = -\frac{J(q)S(S+1)}{3k_B}$$

$$\chi_q = \frac{C}{T - T_q}, \quad T_q = -\frac{J(q)S(S+1)}{3k_B}$$



反強磁性体

2部分格子 (A, B sublattices) $\vec{M}_A = g\mu_B \langle \vec{S}_A \rangle$, $\vec{M}_B = g\mu_B \langle \vec{S}_B \rangle$

$T > T_N$ では $\vec{M}_B = \vec{M}_A$, $T < T_N$ では磁場がなければ $\vec{M}_B = -\vec{M}_A$

分子場:
$$\begin{cases} \vec{H}_A = -\Gamma \vec{M}_A - A \vec{M}_B \\ \vec{H}_B = -\Gamma \vec{M}_B - A \vec{M}_A \end{cases}$$

$T > T_N$: 外部磁場 H_0 , $M = \frac{C}{T}(H_0 + H_A) = \frac{C}{T}(H_0 - (\Gamma + A)M)$

$$\chi \equiv \frac{M}{H_0} = \frac{C}{T}(1 - (\Gamma + A)\chi) \quad \chi = \frac{C}{T + T_0}, \quad T_0 = C(\Gamma + A)$$

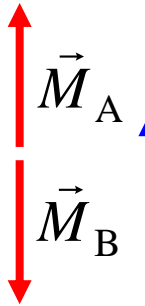
$T < T_N$: $M_A = g\mu_B S B_S \left(\frac{Sg\mu_B H_A}{k_B T} \right) = \frac{(g\mu_B)^2 S(S+1)}{3k_B T} H_A - \alpha H_A^3$, $H_A = (A - \Gamma)M_A$

$$T_N = C(A - \Gamma)$$

分子場係数はWeiss温度とNeel温度から評価できる。

$T < T_N$ での磁化率

磁場がないときは、スピン軸は異方性によって決まる磁化容易軸に平行。



1. 平行磁化率

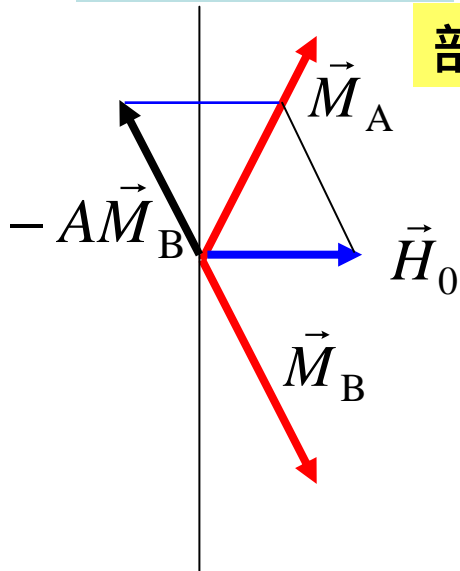
$$\chi_{\parallel} = \frac{M_A - M_B}{H_0}$$

$$T \rightarrow 0 \text{ で } \chi_{\parallel} \rightarrow 0$$

$$\vec{H}_0 M_A = g\mu_B S B_S \left(\frac{Sg\mu_B (-\Gamma M_A - AM_B + H_0)}{k_B T} \right) \quad M_B = g\mu_B S B_S \left(\frac{Sg\mu_B (-\Gamma M_B - AM_A + H_0)}{k_B T} \right)$$

2. 垂直磁化率

部分格子磁化は分子場と外部磁場を合成した有効磁場に平行。



$$\vec{H}_{\text{eff, A}} = -\Gamma \vec{M}_A - A \vec{M}_B + \vec{H}_0$$

$$2A |M| \sin \theta = H_0$$

$$\chi_{\perp} = \frac{|M| \sin \theta}{H_0} = \frac{1}{2A} = \chi(T_N)$$

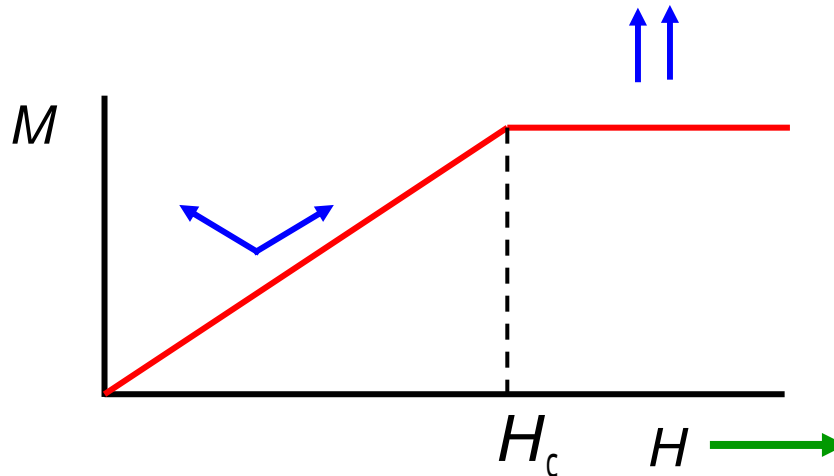
垂直磁化率は T_N 以下で温度に依存しない。

反強磁性体の磁化過程 (T=0)

1. 磁場が容易軸に垂直

$$H_c = 2AM = 2H_E$$

磁化が飽和する臨界磁場

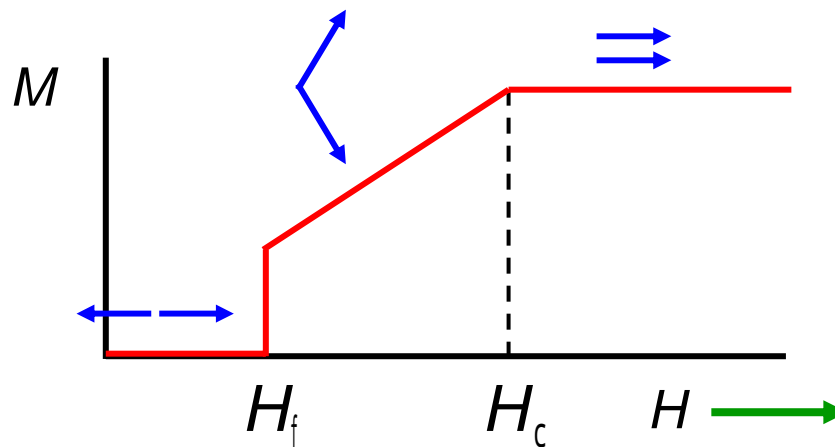


2. 磁場が容易軸に平行 スピンのフロップ

異方性エネルギーとゼーマン・エネルギーの競合

$$\text{異方性エネルギー: } -\frac{K}{2} \cos^2 \theta$$

$$\text{ゼーマン・エネルギー: } -\frac{\chi_{\perp} H^2}{2}$$



$$H_f = \sqrt{K/\chi_{\perp}} = \sqrt{2AK} = \sqrt{2H_E H_A}, \quad H_E = AM, \quad H_A = \frac{K}{M}$$

4 - 3 異方的交換相互作用

シングル・イオンの異方性(結晶場 + スピン・軌道相互作用)

$$H_{\text{anis}} = -\lambda^2 \left(\Lambda_{xx} S_x^2 + \Lambda_{yy} S_y^2 + \Lambda_{zz} S_z^2 \right) = D S_z^2 + E \left(S_x^2 - S_y^2 \right)$$

$$\Lambda_{\mu\nu} = \sum_n \frac{\langle 0 | L_\mu | n \rangle \langle n | L_\nu | 0 \rangle}{E_n - E_0}$$

$$D = -\lambda^2 \left\{ \Lambda_{zz} - \frac{1}{2} (\Lambda_{xx} + \Lambda_{yy}) \right\}$$
$$E = -\lambda^2 \frac{\Lambda_{xx} - \Lambda_{yy}}{2}$$

$(\Lambda_{zz} > \Lambda_{xx} > \Lambda_{yy})$

異方的相互作用

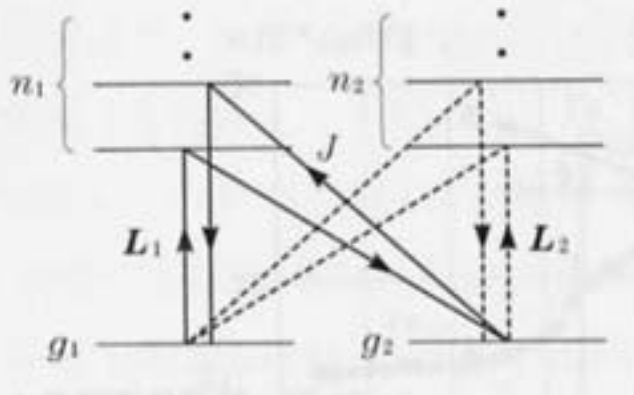
$$H_{\text{ex}} = \sum_{\mu, \nu} S_{1\mu} J_{\mu\nu} S_{2\nu}$$

例: 双極子相互作用

$$H_{\text{dip}} = \frac{(g\mu_B)^2}{r^3} \left(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - 3 \frac{(\vec{S}_1 \cdot \vec{r})(\vec{S}_2 \cdot \vec{r})}{r^2} \right)$$

交換相互作用の異方性

異方的交換相互作用



摂動項 $H' = \lambda \vec{L}_1 \cdot \vec{S}_1 + \lambda \vec{L}_2 \cdot \vec{S}_2 + J(n_1 g_2, n'_1 g_2) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$

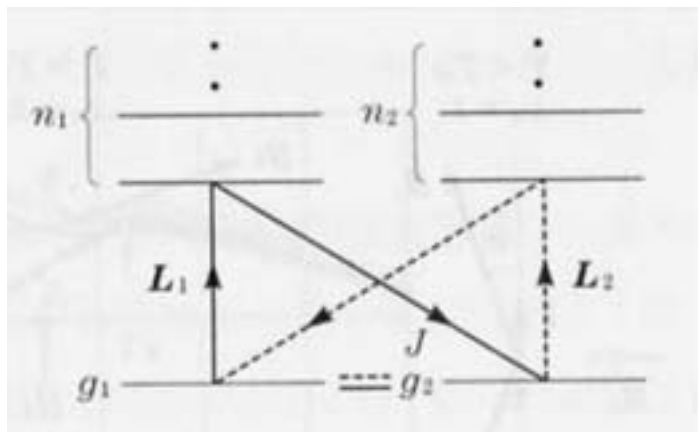
3次摂動

$$J(g_1 n_2, g_1 n'_2) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

$$J_{\text{anis}} \approx \left| \frac{\lambda}{\Delta E} \right|^2 J \cong (g - 2)^2 J$$

反対称性交換相互作用 (Dzyaloshinski-Moriya 相互作用) 2次摂動

$$H_{\text{DM}} = -\lambda \left[\sum_{n1} \frac{\langle g_1 | \vec{L}_1 \cdot \vec{S}_1 | n_1 \rangle J(n_1 g_2, g_1 g_2) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + J(g_1 g_2, n_1 g_2) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \langle n_1 | \vec{L}_1 \cdot \vec{S}_1 | g_1 \rangle}{E_{n1} - E_{g1}} + (1 \leftrightarrow 2) \right]$$



$$\langle g_1 | \vec{L}_1 | n_1 \rangle = \langle n_1 | \vec{L}_1 | g_1 \rangle^* = - \langle n_1 | \vec{L}_1 | g_1 \rangle \quad \text{純虚数}$$

$$[\vec{S}_1, \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2] = -i \vec{S}_1 \times \vec{S}_2 \quad [\vec{S}_2, \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2] = i \vec{S}_2 \times \vec{S}_1$$

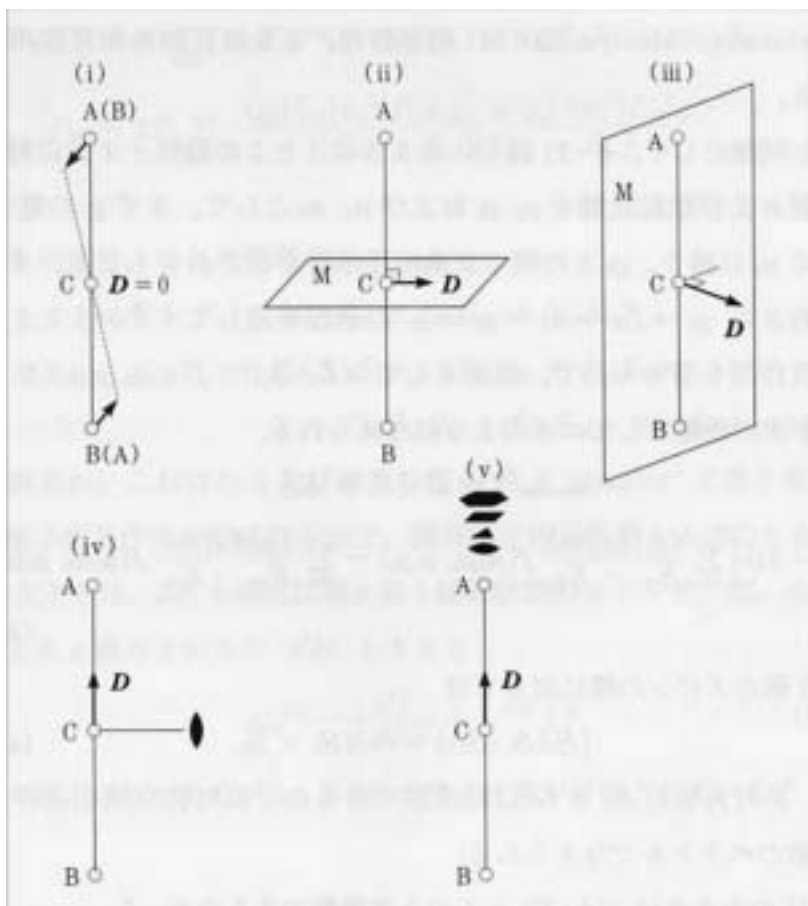
$$H_{\text{DM}} = -2\lambda \left[\sum_{n1} \frac{\langle g_1 | \vec{L}_1 | n_1 \rangle J(n_1 g_2, g_1 g_2) [\vec{S}_1, \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2]}{E_{n1} - E_{g1}} + \sum_{n2} \frac{\langle g_2 | \vec{L}_2 | n_2 \rangle J(g_1 n_2, g_1 g_2) [\vec{S}_2, \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2]}{E_{n2} - E_{g2}} \right]$$

$$H_{\text{DM}} = \vec{D} \cdot [\vec{S}_1 \times \vec{S}_2]$$

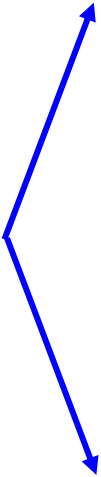
$$\vec{D} = -2i\lambda \left[\sum_{n1} \frac{\langle g_1 | \vec{L}_1 | n_1 \rangle J(n_1 g_2, g_1 g_2)}{E_{n1} - E_{g1}} - \sum_{n2} \frac{\langle g_2 | \vec{L}_2 | n_2 \rangle J(g_1 n_2, g_1 g_2)}{E_{n2} - E_{g2}} \right]$$

$$|D| \approx \left| \frac{\lambda}{\Delta E} \right| J \cong |g - 2| J$$

S 1 と S 2 の中点で結晶の反転対称性があれば $D = 0$



スピン・キャンティング、弱強磁性


$$H = J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{D}[\vec{S}_1 \times \vec{S}_2]$$

$$E = JS^2 \cos \theta + DS^2 \sin \theta$$

$$\tan(\pi - \theta) = \left| \frac{D}{J} \right| \quad \text{でエネルギー最小}$$

弱強磁性(寄生強磁性)