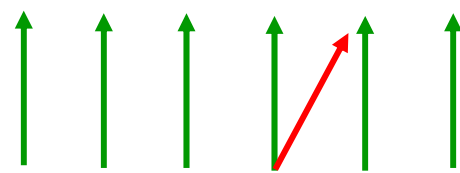


## 5 スピン系の素励起

1. 強磁性体におけるスピン波励起
2. 反強磁性体におけるスピン波励起

# 5 - 1 強磁性体におけるスピン波励起

## 1. 強磁性基底状態からの素励起

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


$$J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = J \left[ S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \right]$$

最近接相互作用

$$S_z = S$$

$$S_z = S - 1$$

スピンの傾きが伝播する。

$$|\varphi_{\vec{q}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} |\varphi_i\rangle \quad (\text{Bloch状態})$$

$$\langle S_z = S | S^+ | S_z = S - 1 \rangle = \langle S_z = S - 1 | S^- | S_z = S \rangle = \sqrt{2S}$$

$$H |\varphi_{\vec{q}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} \sum_j \left( J_{ij} S(S-1) |\varphi_i\rangle + \frac{J_{ij}}{2} 2S |\varphi_j\rangle \right)$$

$$= S(S-1) \sum_j J_{ij} |\varphi_{\vec{q}}\rangle + S \sum_{i,j} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} J_{ij} |\varphi_{\vec{q}}\rangle$$

$$= \left[ S^2 J(0) + S(-J(0) + J(\vec{q})) \right] |\varphi_{\vec{q}}\rangle$$

励起エネルギー

# 古典的描像

## 磁気モーメントの運動

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \vec{S}_i] = \frac{g\mu_B}{\hbar} [\vec{S}_i \times \vec{H}_{\text{eff}}], \quad \vec{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{g\mu_B} \sum_j J_{ij} \vec{S}_j + \vec{H}_0$$

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \sum_j J_{ij} [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] + \frac{g\mu_B}{\hbar} [\vec{S}_i \times \vec{H}_0]$$

$$\begin{cases} \hbar \frac{dS_{ix}}{dt} = -\sum_j J_{ij} (S_{iy} S_{jz} - S_{iz} S_{jy}) + g\mu_B S_{iy} H_0 \\ \hbar \frac{dS_{iy}}{dt} = -\sum_j J_{ij} (S_{iz} S_{jx} - S_{ix} S_{jz}) - g\mu_B S_{ix} H_0 \end{cases}$$

$\vec{S}$  は殆ど  $z$  に平行  
 $S_x, S_y$  : 1 次の微少量  
 $S - S_z$  : 2 次の微少量

$$\begin{cases} S_{ix} \pm iS_{iy} = S_i^\pm \\ S_{iz} = S, \quad S_{jz} = S \end{cases}$$

$$\hbar \frac{dS_i^\pm}{dt} = \pm iS \sum_j J_{ij} (S_j^\pm - S_i^\pm) \mp ig\mu_B H_0 S_i^\pm$$

$$\vec{S}_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} \vec{S}_i$$

## 固有振動モード

$$\frac{\hbar}{i} \frac{dS_q^-}{dt} = -S(J(0) - J(q))S_q^- + g\mu_B H$$

## 固有振動数

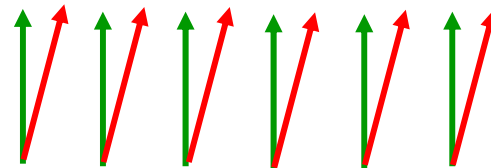
$$\hbar\omega = -S(J(0) - J(q)) + g\mu_B H$$

## スピン波励起エネルギー

$$\varepsilon_q = -S(J(0) - J(q)) + g\mu_B H = S \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} (\cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_{ij}) - 1) + g\mu_B H$$

磁場がないとき  $\varepsilon_q \propto q^2$ ,  $\varepsilon(q=0) = 0$

$q=0$  モード: 磁化が一様に傾いた状態  
エネルギー変化なし



強磁性長距離秩序: ハミルトニアンを持つスピンの回転対称性が破れた状態

長波長の極限でエネルギーがゼロとなる励起が存在する。  
Goldstone モード

## 磁化の温度変化

$$\langle S_z \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_q \langle n_q \rangle, \quad \langle n_q \rangle = f_B(\varepsilon_q) = \frac{1}{\exp(\varepsilon_q/k_B T) - 1}$$

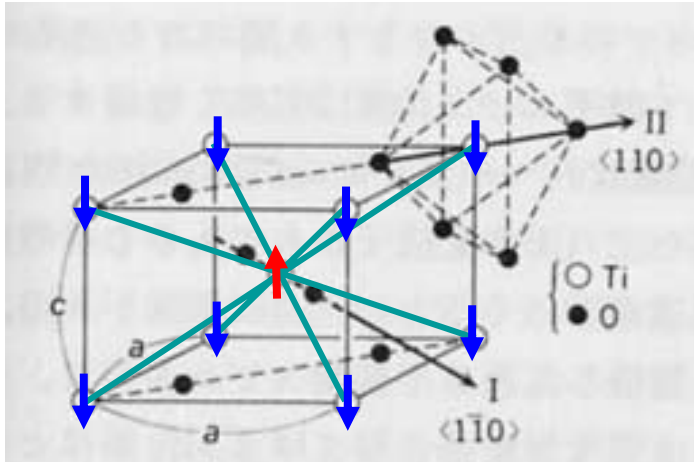
$$\sum_q \langle n_q \rangle \propto \int \frac{q^{d-1} dq}{\exp(\varepsilon_q/k_B T) - 1}, \quad \varepsilon_q = aq^2 \text{ for small } q$$

$$\sum_q \langle n_q \rangle \propto (k_B T)^{\frac{d}{2}} \int \frac{x^{\frac{d}{2}-1} dx}{e^x - 1}, \quad (x = aq^2/k_B T) \quad \text{3次元では} \quad M(T) - M(0) \propto T^{\frac{3}{2}}$$

## 比熱の温度変化

$$E = \sum_q \varepsilon_q \langle n_q \rangle \propto \int \frac{\varepsilon_q q^{d-1} dq}{\exp(\varepsilon_q/k_B T) - 1} \propto (k_B T)^{\frac{d}{2}+1} \int \frac{x^{\frac{d}{2}+1} dx}{e^x - 1}$$

$$C = \frac{dE}{dT} \propto (k_B T)^{\frac{d}{2}} \quad \text{3次元では} \quad C \propto T^{\frac{3}{2}}$$



2部分格子

最近接スピン間に反強磁性相互作用  $J$   
 $z$ : 最近接サイト数

+ 部分格子

 $S_{jz} = S - n_j \quad n_j = a_j^* a_j$ : ボーズ粒子

$$a_j |N_j\rangle = \sqrt{N_j} |N_j - 1\rangle, \quad a_j^* |N_j\rangle = \sqrt{N_j + 1} |N_j + 1\rangle, \quad [a_j, a_j^*] = 1$$

$$S_j^+ |N_j\rangle = (S_{jx} + iS_{jy}) |N_j\rangle$$

$$= \sqrt{(S - M)(S + M + 1)} |N_j - 1\rangle$$

$$= \sqrt{N_j(2S + 1 - N_j)} |N_j - 1\rangle$$

$$= \sqrt{2S - n_j} a_j |N_j\rangle$$

$$= \sqrt{2S} \left( 1 - \frac{a_j^* a_j}{2S} \right) a_j |N_j\rangle$$

$$S_j^- |N_j\rangle = (S_{jx} - iS_{jy}) |N_j\rangle$$

$$= \sqrt{(S + M)(S - M + 1)} |N_j + 1\rangle$$

$$= \sqrt{(2S - N_j)(N_j + 1)} |N_j + 1\rangle$$

$$= a_j^* \sqrt{2S - n_j} |N_j\rangle$$

$$= \sqrt{2S} a_j^* \left( 1 - \frac{a_j^* a_j}{2S} \right) |N_j\rangle$$

$\frac{a_j^* a_j}{2S} \ll 1$  で展開する。  $\longrightarrow$  スピン波近似

+ sublattice  $S_{jz} = S - a_j^* a_j, \quad S_{j+} = \sqrt{2S} a_j, \quad S_{j-} = \sqrt{2S} a_j^*$

- sublattice  $S_{lz} = -S + b_l^* b_l, \quad S_{l+} = \sqrt{2S} b_l^*, \quad S_{l-} = \sqrt{2S} b_l$

$$\begin{aligned} H &= J \sum_{\langle j,l \rangle} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_l - D \left( \sum_j S_{jz}^2 + \sum_l S_{lz}^2 \right) - g\mu_B H \left( \sum_j S_{jz} + \sum_l S_{lz} \right) \\ &= J \sum_{\langle j,l \rangle} \left\{ -S^2 + S(n_j + n_l) + S(a_j^* b_l^* + a_j b_l) \right\} \\ &\quad - D \left\{ \sum_j (S^2 - 2S a_j^* a_j) + \sum_l (S^2 - 2S b_l^* b_l) \right\} \\ &\quad + g\mu_B H \left( \sum_j a_j^* a_j - \sum_l b_l^* b_l \right) \end{aligned}$$

交換相互作用は異なる部分格子の間に働く。

Fourier変換

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_q a_q e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_j}, \quad b_l = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_q b_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_l}, \quad \gamma(q) = \frac{1}{z} \sum_{\rho_{jl}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\rho}_{jl}}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{H} = & -\frac{N_z JS^2}{2} + JzS \sum_q \left\{ (a_q^* a_q + b_q^* b_q) + \gamma(\vec{q}) (a_q^* b_q^* + a_q b_q) \right\} - NDS^2 \\
& + 2DS \sum_q (a_q^* a_q + b_q^* b_q) + g\mu_{\mathbf{B}} H \sum_q (a_q^* a_q - b_q^* b_q)
\end{aligned}$$

## Bogolyubov変換による対角化

$$\begin{cases} A_q = a_q \cosh \theta_q + b_q^* \sinh \theta_q \\ B_q^* = a_q \sinh \theta_q + b_q^* \cosh \theta_q \end{cases} \quad \begin{cases} A_q^* = a_q^* \cosh \theta_q + b_q \sinh \theta_q \\ B_q = a_q^* \sinh \theta_q + b_q \cosh \theta_q \end{cases}$$

逆変換  $\cosh^2 \theta_q - \sinh^2 \theta_q = 1, \quad \theta_q : \text{real}$

$$\begin{cases} a_q = A_q \cosh \theta_q - B_q^* \sinh \theta_q \\ b_q^* = -A_q \sinh \theta_q + B_q^* \cosh \theta_q \end{cases} \quad \begin{cases} a_q^* = A_q^* \cosh \theta_q - B_q \sinh \theta_q \\ b_q = -A_q^* \sinh \theta_q + B_q \cosh \theta_q \end{cases}$$

$A_q, B_q$  もボーズ交換関係を満たす。

$$[A_q, A_q^*] = [B_q, B_q^*] = 1, \quad \text{他は } 0 \text{ .}$$



$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} = & -\frac{NzJS^2}{2} + JzS \sum_q \left\{ (a_q^* a_q + b_q^* b_q) + \gamma(\vec{q}) (a_q^* b_q^* + a_q b_q) \right\} - NDS^2 \\
 & + 2DS \sum_q (a_q^* a_q + b_q^* b_q) + g\mu_B H \sum_q (a_q^* a_q - b_q^* b_q)
 \end{aligned}$$

$$a_q^* a_q = A_q^* A_q \cosh^2 \theta_q + B_q B_q^* \sinh^2 \theta_q - (A_q^* B_q^* + A_q B_q) \cosh \theta_q \sinh \theta_q$$

$$b_q^* b_q = A_q A_q^* \sinh^2 \theta_q + B_q^* B_q \cosh^2 \theta_q - (A_q^* B_q^* + A_q B_q) \cosh \theta_q \sinh \theta_q$$

$$a_q^* b_q^* = -(A_q^* A_q + B_q B_q^*) \cosh \theta_q \sinh \theta_q + A_q^* B_q^* \cosh^2 \theta_q + A_q B_q \sinh^2 \theta_q$$

$$a_q b_q = -(A_q A_q^* + B_q^* B_q) \cosh \theta_q \sinh \theta_q + A_q B_q \cosh^2 \theta_q + A_q^* B_q^* \sinh^2 \theta_q$$

対角化

$A_q B_q, A_q^* B_q^*$ の係数が0となるように $\theta_q$ を決める。

$$-(JzS + 2DS) 2 \cosh \theta_q \sinh \theta_q + JzS \gamma(\vec{q}) (\cosh^2 \theta_q + \sinh^2 \theta_q) = 0$$

$$\frac{\gamma(\vec{q})}{1 + \alpha} = \frac{2 \cosh \theta_q \sinh \theta_q}{\cosh^2 \theta_q + \sinh^2 \theta_q} = \tanh 2\theta_q, \quad \alpha = \frac{2D}{Jz} = \frac{H_A}{H_E}$$

$H_E = JzS$  : 交換磁場

$H_A = 2DS$  : 異方性磁場

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{NzJS^2}{2} - NDS^2 \\
 & + JzS \sum_q \left[ (1+\alpha) \left\{ (A_q^* A_q + B_q^* B_q) (\cosh^2 \theta_q + \sinh^2 \theta_q) + 2 \sinh^2 \theta_q \right\} - \gamma(\vec{q}) (A_q^* A_q + B_q^* B_q + 1) 2 \cosh \theta_q \sinh \theta_q \right] \\
 & + g\mu_B H \sum_q (A_q^* A_q - B_q^* B_q)
 \end{aligned}$$

$$(1+\alpha) (\cosh^2 \theta_q + \sinh^2 \theta_q) = (1+\alpha) \cosh 2\theta_q = \frac{(1+\alpha)}{\sqrt{1 - \tanh^2 2\theta_q}} = \frac{(1+\alpha)^2}{\sqrt{(1+\alpha)^2 - \{\gamma(\vec{q})\}^2}}$$

$$(1+\alpha) 2 \sinh^2 \theta_q = (1+\alpha) (\cosh^2 \theta_q + \sinh^2 \theta_q - 1) = \frac{(1+\alpha)^2}{\sqrt{(1+\alpha)^2 - \{\gamma(\vec{q})\}^2}} - (1+\alpha)$$

$$\gamma(\vec{q}) 2 \cosh \theta_q \sinh \theta_q = \gamma(\vec{q}) \cosh 2\theta_q \tanh 2\theta_q = \frac{\{\gamma(\vec{q})\}^2}{1+\alpha} \frac{1+\alpha}{\sqrt{(1+\alpha)^2 - \{\gamma(\vec{q})\}^2}} = \frac{\{\gamma(\vec{q})\}^2}{\sqrt{(1+\alpha)^2 - \{\gamma(\vec{q})\}^2}}$$

$$H = -\frac{NzJS^2}{2} - NDS^2 \quad \leftarrow \text{古典的な基底状態 } (S_{jz}=S, S_{lz}=-S) \text{ のエネルギー}$$

$$- JzS \sum_q \left\{ 1 + \alpha - \sqrt{(1+\alpha)^2 - \{\gamma(\vec{q})\}^2} \right\} + \sum_q (\hbar\omega_q^+ A_q^* A_q + \hbar\omega_q^- B_q^* B_q)$$

スピンの零点振動によるエネルギーの下がり

$$\hbar\omega_q^\pm = JzS \sqrt{(1+\alpha)^2 - \{\gamma(\vec{q})\}^2} \pm g\mu_B H$$

## 基底状態のエネルギー

$D=0, H=0$ のとき

$$E_g = -\frac{NzJS^2}{2} - JzS \sum_q \left(1 - \sqrt{1 - \{\gamma(\vec{q})\}^2}\right) = -\frac{NzJS^2}{2} \left[1 + \frac{1}{S} \left\{1 - \frac{2}{N} \sum_q \sqrt{1 - \{\gamma(\vec{q})\}^2}\right\}\right]$$

**1次元鎖**  $\gamma(q) = \cos(qa)$ ,  $E_g = -NJS^2 \left(1 + \frac{0.363}{S}\right) = -\frac{NJ}{4} \times 1.726$  (for  $S = \frac{1}{2}$ )

厳密解 (Bethe)  $E_g = -\frac{NJ}{4} \times 1.773$

ダイマー・シングレット  $E = -\frac{NJ}{4} \times 1.5$  古典的なネール状態よりはエネルギーが低い。

## 2次元正方格子

$$\gamma(q) = \frac{1}{2} \{\cos(q_x a) + \cos(q_y a)\}, \quad E_g = -2NJS^2 \left(1 + \frac{0.158}{S}\right) = -NJ \times 0.658 \quad \left(\text{for } S = \frac{1}{2}\right)$$

厳密対角化  $E_g = -NJ \times 0.67$

## 3次元立方格子

$$E_g = -3NJS^2 \left(1 + \frac{0.093}{S}\right)$$

## 基底状態でのモーメントの縮み

$D=0, H=0$ のとき

$$\sum_j \langle S_j^z \rangle = \frac{NS}{2} - \sum_q \langle a_q^* a_q \rangle = \frac{NS}{2} - \sum_q \sinh^2 \theta_q = \frac{NS}{2} \left[ 1 - \frac{1}{2S} \left\{ \frac{2}{N} \left( \sum_q \sqrt{\frac{1}{1-\gamma_q^2}} - 1 \right) \right\} \right]$$

$$\sum_j \langle S_j^z \rangle = \begin{cases} \frac{NS}{2} \left( 1 - \frac{0.197}{S} \right) : 2D \\ \frac{NS}{2} \left( 1 - \frac{0.078}{S} \right) : 3D \end{cases}$$

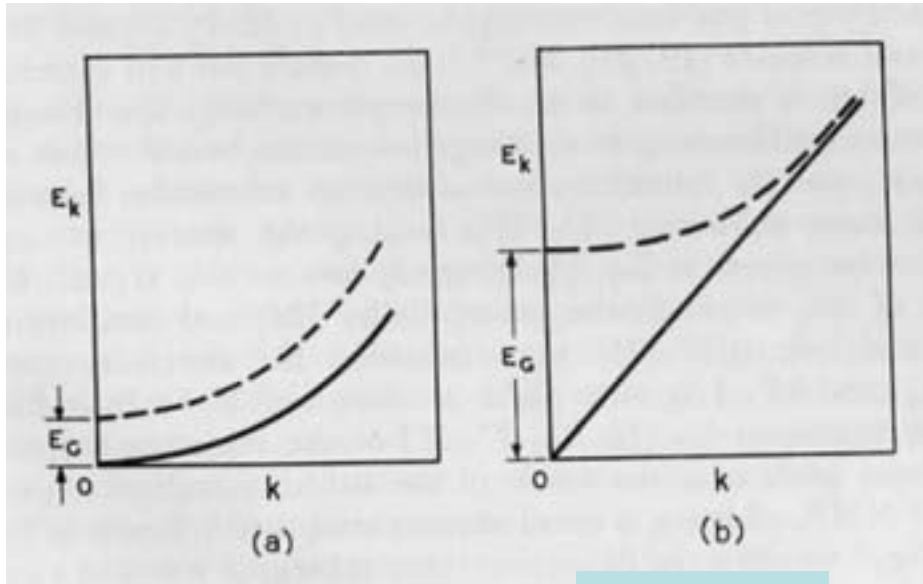
1次元では $q \sim 0$ で対数発散

1次元では長距離秩序が存在しない。  
2次元正方格子では $T=0$ においてのみ  
長距離秩序が存在する。

$$\langle S_{jz} \rangle \sim 0.31$$

# スピン波分散関係

$$\hbar\omega_q^\pm = JzS\sqrt{(1+\alpha)^2 - \{\gamma(\vec{q})\}^2} \pm g\mu_B H$$



強磁性

反強磁性

$$\alpha = \frac{2D}{Jz} = \frac{H_A}{H_E}$$

$$\gamma(q) = \frac{1}{z} \sum_{jl} e^{i\vec{q}\cdot\vec{\rho}_{jl}} \propto 1 - \beta q^2 \text{ for small } q$$

反強磁性体では \$D=0, H=0\$ なら  $\hbar\omega_q = c|q|$  for small \$q\$

## 部分格子磁化の温度変化

$$M(T) - M(0) \propto \sum_q \langle a_q^* a_q \rangle = \sum_q \langle A_q^* A_q \rangle (\cosh^2 \theta_q + \sinh^2 \theta_q) \propto T^2$$

部分格子磁化の温度変化はNMRを用いて精密に測定できる。

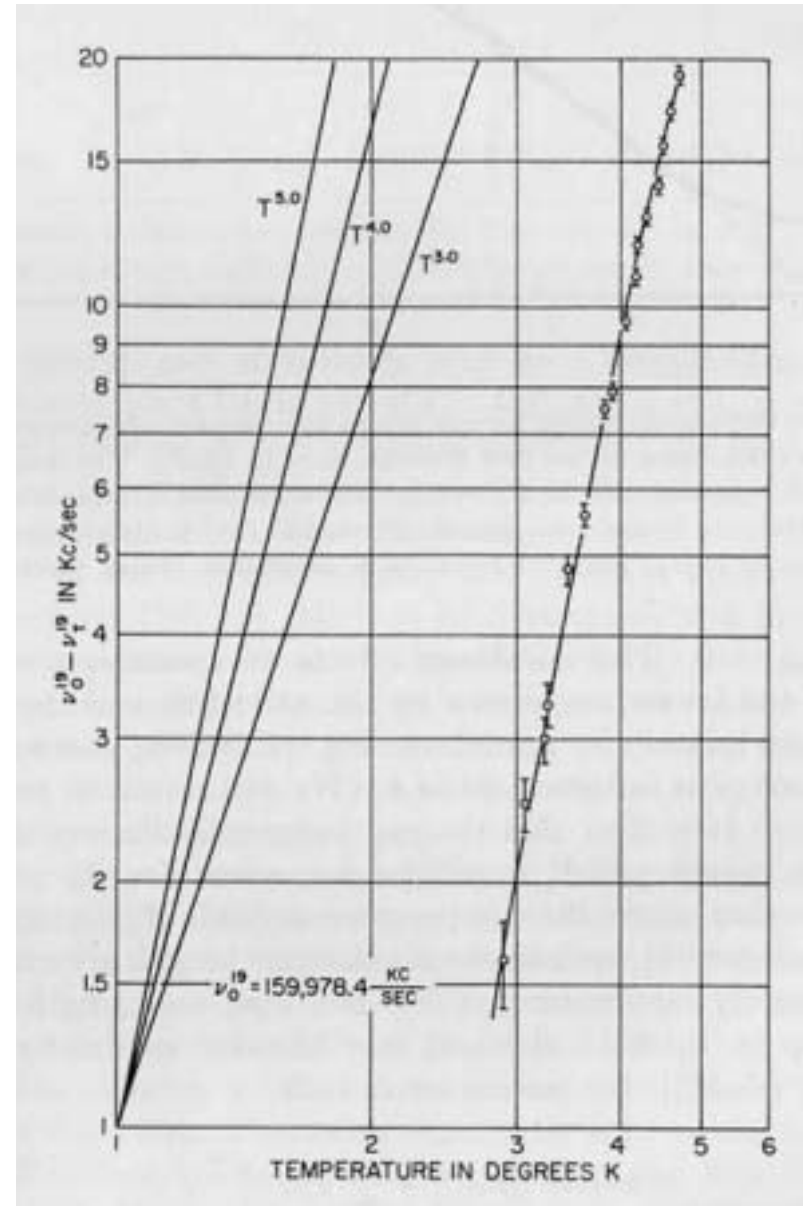
$$\omega_{\text{res}} = \gamma H_n = \gamma A \langle S_{jz} \rangle$$

MnF<sub>2</sub>の実験結果

(10<sup>-5</sup>程度の相対精度)

比熱の温度変化 D=0, H=0なら

$$C \propto T^3$$



# 反強磁性共鳴

$q=0$ のモードは一様な振動磁場によって励起できる。

$$\hbar\omega_q^\pm = JzS\sqrt{(1+\alpha)^2 - \{\gamma(\vec{q})\}^2} \pm g\mu_B H \quad \alpha = \frac{2D}{Jz} = \frac{H_A}{H_E} \quad \gamma(0) = 1$$

$$\frac{\omega^\pm}{\gamma} = \sqrt{2H_E H_A + H_A^2} \pm H_0$$

$$g\mu_B H_E = JzS$$

$$g\mu_B H_A = 2DS$$

$$\gamma = g\mu_B/\hbar$$

