Dynamic Properties of the Impure Classical Heisenberg Chain

神戸大 理　利根川　孝

低次元磁性体混晶系の動的性質についての研究が最近盛んになりつつある。本研究では，二種類の磁性イオンH，Iから成る一次元古典ハイゼンベルグ磁性体混晶による中性子非弾性散乱の微分断面積を計算する。

系のハミルトニアンを次のように書く：

$$H=-\sum_{i=1}^{N} J_{i-1,i}\,\boldsymbol{S}_{i-1}\cdot\boldsymbol{S}_{i} \tag{1}$$

ここで $J_{i-1,i}$ は i－1及び i 番目の site を占める磁性イオンの種類によって J_{HH}, J_{HI}, J_{II} なる値をとる。又 $\boldsymbol{S}_i$ は大きさ S_i ($=S_H$ or S_I) の classical spin vector である。Van Hove[1] によれば，計算すべき微分断面積は次のように与えられる：

$$\frac{d^2\sigma_{mag}}{d\Omega\, d\omega}\propto F(k,\omega)=\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\omega t}G(k,t) \tag{2}$$

但し

$$G(k,t)=\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ikm}<\tilde{g}_{\ell,\ell+m}(t)>_{conf} \tag{3}$$

$$\tilde{g}_{\ell,\ell+m}(t)=3\mu_B^2 g_\ell g_{\ell+m}< S_\ell^z(0)S_{\ell+m}^z(t)> \tag{4}$$

ここで$<\cdots\cdots>_{conf}$, $<\cdots\cdots>$はそれぞれ配置平均，熱平均を示し，又 g_ℓ ($=g_H$ or g_I) は磁性イオンの g-factor を示す。森の理論[2] によれば，$G(k,t)$のラプラス変換

$$R(k,p)=\int_0^{\infty} e^{-pt}G(k,t)\,dt \tag{5}$$

は $F(k,\omega)$ の $2n$ 次のモーメント$<\omega^{2n}>_k$ を用いて，連分数表示で表わされる。ここでは，Lovesey-Meserve[3] に従って $R(k,p)$ を次のように近似する：

$$R(k, p) = \cfrac{1}{P + \cfrac{\delta_1(k)}{P + \cfrac{\delta_2(k)}{P + \tau^{-1}(k)}}} \cdot G(k, 0) \tag{6}$$

但し

$$\delta_1(k) = <\omega^2>_k, \quad \delta_2(k) = \frac{<\omega^4>_k}{<\omega^2>_k} - <\omega^2>_k, \quad \tau(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi \delta_2(k)}}$$

$$<\omega^{2n}>_k = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \omega^{2n} F(k, \omega) d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} F(k, \omega) d\omega}$$

$$= (-1)^n \left. \frac{d^{2n} G(k, t)}{d t^{2n}} \right|_{t=0} \Big/ G(k, 0) \tag{7}$$

この時，(2)式で与えられる $d^2\sigma_{mag}/d\Omega\, d\omega$ は次のように計算される：

$$\frac{d^2\sigma_{mag}}{d\Omega\, d\omega} \propto F(k, \omega) = 2 \cdot \mathrm{Re}[R(k, i\omega)]$$

$$= \frac{2\tau(k)\delta_1(k)\delta_2(k) \cdot G(k, 0)}{\{\delta_1(k) - \omega^2\}^2 + \tau^2(k)\omega^2\{\delta_1(k) + \delta_2(k) - \omega^2\}^2} \tag{8}$$

考えている混晶系に対する $d^{2n} G(k, t)/d t^{2n}|_{t=0}$ は

$$\frac{d}{dt} S_i^z = \{S_i^z, H\}_P, \quad \frac{1}{k_B T} < A \frac{dB}{dt} > = - < \{A, B\}_P > \tag{9}$$

ここで $\{\cdots\cdots, \cdots\cdots\}_P$ はPoisson bracketなる関係[4]を用いて $d^{2n}\tilde{g}_{\ell, \ell+m}(t)/dt^2|_{t=0}$ を同時刻のmany-spin correlation functionで表わし，その結果を以前に混晶系の静的性質を計算した際に用いた方法[5]で配置平均し，更にその結果をフーリエ変換して得られる。この時，同時刻のmany-spin correlation functionの計算には富田一増山の方法[4]を用いる。

pure antiferromagnet ($J_{i-1, i} = J < 0$) の場合[3,4]，$T \to 0$ の極限で $<\omega^{2n}>_k = [4J^2 S(S+1) \cdot \sin^2 k]^n$ となり，従って $T \to 0$ で $\delta_1(k) = 4J^2 S(S+1) \cdot \sin^2 k$，$\delta_2(k) = 0$ となる。このことは絶対零度の付近に於て，(8)式で与えられる $d^2\sigma_{mag}/d\Omega\, d\omega$ が $\omega = \omega_k \equiv 2|J|\sqrt{S(S+1)} \cdot \sin k$ でデルタ関数的なpeakを持つことを示している。温度が上がるにつれてこのpeakは巾を持つようになり（勿論peakの位置もずれる），

十分高温ではpeakは消える。一方 impure antiferromagnet ($J_{HH}, J_{HI}, J_{II} < 0$) の場合には，$T \to 0$ で $G(k, 0) \equiv k_B T \cdot \chi(k) = \rho_H \rho_I \cdot [g_H \sqrt{S_H(S_H+1)} - g_I \sqrt{S_I(S_I+1)}]^2 + O(k_B T/|J_{HH}|)$ [6] (ここで $\chi(k)$ は帯磁率，ρ_H, ρ_I はそれぞれH，Iイオンの濃度)，$d^2 G(k, t)/dt^2|_{t=0} = O(k_B T/|J_{HH}|)$，$d^4 G(k, t)/dt^4|_{t=0} = O(k_B T/|J_{HH}|)$ となる故，$d^2\sigma_{mag}/d\Omega d\omega$ は k の値にかかわらず $\omega = 0$ で鋭い を持つことになる。温度が上がるにつれてこのpeakは急速に消え，$d^2\sigma_{mag}/d\Omega d\omega$ の形は定性的にはpure systemの場合と似た形のものになる。

参 考 文 献

1) L. Van Hove, Phys. Rev. **95**, 1374 ('54).
2) H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 ('65) and **34**, 399 ('65).
3) S. W. Lovesey and R. A. Meserve, Phys. Rev. Letters **28**, 614 ('72).
4) H. Tomita and H. Mashiyama, Prog. Theor. Phys. **48**, 1133 ('72).
5) T. Tonegawa, H. Shiba and P. Pincus, Phys. Rev. B **11**, 4683 ('75);
T. Tonegawa, Phys. Rev. B **14**, 3166 ('76);
S. Katsura, Canad. J. Phys. **53**, 854 ('75).
6) $k = \pi$ の場合を除く。この場合には，$T \to 0$ で $G(k = \pi, 0) = O(|J_{HH}|/k_B T)$ となる。