弱い反強磁性金属のスピンのゆらぎの理論

東大物性研　　中山和也

I、目的

弱い強磁性体で成功したSCR理論を弱い反強磁性体に適用し、実験的に決定可能な比較的小数個のパラメータにより、理論を表わす。これにより、理論と実験との定量的比較の可能性をさぐる。さらにネール点の下で、スピンのゆらぎの縦、横成分を区別した計算をあわせて行なう。

II、理論

弱い強磁性体の場合と同様の計算により、次の各式により理論は表わされる。但し、以下では、$g\mu_B=\hbar=k_B=1$，$\vec{Q}=(0,0,\pi/a)$ とする。

状態方程式は、

$$(1)\quad h_Q=\left[-\frac{\alpha_Q-1}{\chi_0(Q)}+\frac{5}{3}\bar{\bar{F}}_{1Q}\tilde{m}^2\right]M_Q+\bar{\bar{F}}_{1Q}M_Q^3\ ,$$

$$\frac{5}{3}\tilde{m}^2=3s_{/\!/}^2+2s_\perp^2\ ,\quad s_\nu^2=\sum_q{}'\langle|S_{Q+q\nu}|^2\rangle,\quad \alpha_Q=2I\chi_0(Q).$$

また、スピンのゆらぎs_ν^2は揺動散逸定理より、

$$(2)\left\{\begin{aligned}&s_\nu^2=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty d\omega\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{e^{\omega/T}-1}\right)\sum_q{}'\,\mathrm{Im}\,\chi_\nu(Q+q,\omega)\ ,\\&\mathrm{Im}\,\chi_\nu=(1+\delta_{Q\nu})\frac{\Gamma_0}{\alpha_Q\bar{A}}\frac{\omega}{\Gamma_{q\nu}^2+\omega^2}\ ,\end{aligned}\right.$$

$$\Gamma_{q\nu}=\Gamma_0(q^2+K_\nu^2)\ ,\ K_\nu^2=1/\alpha_Q\bar{A}\chi_\nu\ ,\ \Gamma_0=A/C\ ,\ \bar{A}=A/\chi_0(Q)\ ,\ \delta_{Q\nu}=\chi_0(Q)/\alpha_Q\chi_\nu$$

（$\chi_0(Q+q,\omega)/\chi_0(Q)=1-Aq^2-\cdots+iC\omega+\cdots$ を用いた）。

(1)、(2)より解くべき方程式は、次のように整理できる

$$(3)\left\{\begin{aligned}&\frac{1}{\chi_\perp}=\frac{h_Q}{M_Q}=-\frac{\alpha_Q-1}{\chi_0(Q)}+\frac{5}{3}\bar{\bar{F}}_{1Q}\tilde{m}^2+\bar{\bar{F}}_{1Q}M_Q^2\ ,\quad \frac{1}{\chi_{/\!/}}=\frac{\partial h_Q}{\partial M_Q}=\frac{1}{\chi_\perp}+M_Q\frac{\partial}{\partial M_Q}\frac{1}{\chi_\perp}\ ,\\&s_\nu^2=(1+\delta_{Q\nu})\frac{v_0}{2\pi^3}\frac{\Gamma_0}{\alpha_Q\bar{A}}\int_{q_c}^{q_B}dq\,q^2\left[\ln u_{q\nu}-\frac{1}{2u_{q\nu}}-\psi(u_{q\nu})\right]\ ,\quad u_{q\nu}=\frac{\Gamma_{q\nu}}{2\pi T}\ .\end{aligned}\right.$$

ここで、$\psi(x)$はダイガンマ関数、$q_B=(6\pi^2/v_0)^{1/3}$は積分の上限、q_cは積分の下限をそれぞれ表わすカットオフ波数である。また、スピンのゆらぎの零点振動の項は、温度依存性が弱いのでα_Qに繰り込んだと考え、以後、無視する。

III、$T>T_N$の場合

系は等方的であり、$M_Q=0$として(3)を解けば、T_Nや、$1/\chi$の温度変化を容易に求めることができる。

IV、$T<T_N$の場合

このとき、(3)は$M_Q\frac{\partial}{\partial M_Q}\frac{1}{\chi_L}$の項を含むため、微分積分方程式を解くことになる。解くためには初期条件が必要であるが、これを求めるために$1/\chi_L<0$の非物理的領域でのS_L^2の振舞を定義する必要がある。ここでは$1/\chi_L<0$のとき、(i) S_L^2は飽和し一定値をとる、(ii)単に解析接続する、の2通りの仮定を用いて計算した。結果は、いづれの方法によっても同じであった。これは、S_L^2が連続である限り、$1/\chi_L<0$での振舞に関係なく、自由エネルギーは物理的領域で同一へミニマムをとるためと考えられるが、このことの証明は今後の課題である。

V、実験との比較

次のような実験が代表的なものである。

(i)磁気体積効果

(4) $\omega_m \simeq \frac{D_Q}{B}\left(S_L^2(T) - M_Q^2(0)\right)$, $S_L^2=\sum_q\langle|\vec{S}_{Q+q}|^2\rangle$, B: bulk modulus ,

(5) $$\omega_m = -\frac{2}{5}\frac{D_Q}{B}M_Q^2(0) \quad \text{at } T=T_N$$

(ii) NMR

(6) $$(T_1^{-1})_{S.F.} = (\gamma_N A_{hf})^2\, T \sum_q \mathrm{Im}\,\chi^{-+}/\omega_0$$

(7) $$\Rightarrow \frac{1}{4\pi}(\gamma_N A_{hf})^2\frac{v_0}{\Gamma_0\sqrt{\alpha_Q \bar{A}}}\,T\sqrt{\chi}$$ （$T>T_N$のとき）

(iii)中性子散乱

(8) $$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \propto \frac{1}{1-e^{-\omega/T}}\,\mathrm{Im}\,\chi$$

このうち、中性子散乱は特に有効で、$M_Q(0)$, Γ_0, $\bar{A}$といったパラメータを決定でき、これと(3)を解いて得られる、$T_N\simeq 1.80\times(\alpha_Q\Gamma_0^{1/2}\bar{A}M_Q^2(0)/v_0)^{2/3}$という表式とを用いて、理論と実験との定量的な比較が可能となる。

VI. 結論

(i) $\alpha_Q\simeq 1$の他、$M_Q(0)=(\alpha_Q-1)/\chi_0(Q)\bar{F}_{1Q}$, $\bar{F}_{1Q}$, Γ_0, $\bar{A}$, v_0というパラメータのみで理論が表わされる。

(ii) その結果、理論と実験との定量的比較が容易になる。

(iii) 期待された通り、$T^{3/2}$則の他、弱い強磁性体の場合と同様の結果が得られた。

(iv) また、$T<T_N$の計算で、積分の下限のカットオフを考慮していない、$1/\chi_L<0$のときのS_L^2の定義に任意性が残るという課題が残されている。