

弱い反強磁性金属のスピンの中らぎの理論

東大物性研 中山和也

I. 目的

弱い強磁性体で成功したFCR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、スピンの中らぎの縦、横成分を区別した計算をあらわして行なう。

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、

$$(1) \quad \chi_a = \left[-\frac{\alpha_a - 1}{\chi_0(a)} + \frac{5}{3} \bar{\Gamma}_{1a} \tilde{m}^2 \right] M_a + \bar{\Gamma}_{1a} M_a^3,$$

$$\frac{5}{3} \tilde{m}^2 = 3 \chi_a^2 + 2 \chi_L^2, \quad \chi_L^2 = \sum_{\vec{q}}' \langle |S_{a+\vec{q}}|^2 \rangle, \quad \alpha_a = 2 I \chi_0(a).$$

また、スピンの中らぎ χ_L^2 は揺動散逸定理より、

$$(2) \quad \begin{cases} \chi_L^2 = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\omega/T} - 1} \right) \sum_{\vec{q}}' \Im \chi_L(a+\vec{q}, \omega), \\ \Im \chi_L = (1 + \delta_{av}) \frac{\Gamma_0}{\alpha_a \bar{A}} \frac{\omega}{\Gamma_{2v}^2 + \omega^2}, \end{cases}$$

$$\Gamma_{2v} = \Gamma_0 (q^2 + K_v^2), \quad K_v^2 = 1/\alpha_a \bar{A} \chi_v, \quad \Gamma_0 = A/c, \quad \bar{A} = A/\chi_0(a), \quad \delta_{av} = \chi_0(a)/\alpha_a \chi_v$$

($\chi_0(a+\vec{q}, \omega)/\chi_0(a) = 1 - Aq^2 - \dots + iC\omega + \dots$ 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

$$(3) \quad \begin{cases} \frac{1}{\chi_L} = \frac{\chi_a}{M_a} = -\frac{\alpha_a - 1}{\chi_0(a)} + \frac{5}{3} \bar{\Gamma}_{1a} \tilde{m}^2 + \bar{\Gamma}_{1a} M_a^2, \quad \frac{1}{\chi_L} = \frac{\partial \chi_a}{\partial M_a} = \frac{1}{\chi_L} + M_a \frac{\partial}{\partial M_a} \frac{1}{\chi_L}, \\ \chi_L^2 = (1 + \delta_{av}) \frac{v_0}{2\pi^3} \frac{\Gamma_0}{\alpha_a \bar{A}} \int_{q_c}^{q_B} dq^2 \left[\ln u_{qv} - \frac{1}{2u_{qv}} - \psi(u_{qv}) \right], \quad u_{qv} = \frac{\Gamma_{2v}}{2\pi T}. \end{cases}$$

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、スピンの中らぎの零点振動の項は、温度依存性が弱いので α_a 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、 $M_a = 0$ 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 $Ma(0)$ 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 $1/\chi < 0$ の非物理的領域での χ^2 の振舞を定義する必要がある。ここでは $1/\chi < 0$ のとき、(i) χ^2 は飽和し一定値をとる、(ii) 単に解析接続する、の二通りの仮定を用いて計算した。結果は、いずれの方法によっても同じであった。これは、 χ^2 が連続である限り、 $1/\chi < 0$ 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の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

$$(4) \quad \omega_m \approx \frac{Da}{B} (S_L^2(T) - Ma(0)), \quad S_L^2 = \sum_i \langle |\vec{S}_{a+i}|^2 \rangle, \quad B: \text{bulk modulus},$$

$$(5) \quad \omega_m = -\frac{2}{5} \frac{Da}{B} Ma(0) \quad \text{at } T = T_N$$

(ii) NMR

$$(6) \quad (T_1^{-1})_{N.R.} = (\chi_N A_{Hf})^2 T \sum_i \langle \text{Im } \chi^{-+} / \omega \rangle$$

$$(7) \quad \Rightarrow \frac{1}{4\pi} (\chi_N A_{Hf})^2 \frac{v_0}{\Gamma_0 \sqrt{\alpha_a \bar{A}}} T \sqrt{\chi} \quad (T > T_N \text{ のとき})$$

(iii) 中性子散乱

$$(8) \quad \frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \propto \frac{1}{1 - e^{-\omega/T}} \langle \text{Im } \chi \rangle$$

このうち、中性子散乱は特に有効で、 $Ma(0)$, 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、 $T_N \approx 1.80 \times (\alpha_a \Gamma_0^{1/2} \bar{A} Ma(0) / v_0)^{2/3}$ 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) $\alpha_a \approx 1$ の他、 $Ma(0) = (\alpha_a - 1) / \chi_{a0} \bar{F}_{1a}$, $\bar{F}_{1a}$, 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、 $1/\chi < 0$ のときの χ^2 の定義に任意性が残るという課題が残されている。