

RKKY 相互作用の導出 (2003/04/09)

Ruderman と Kittel¹が 金属中にある 2 つの磁性不純物の核スピン間に働く有効相互作用を議論した。その後, Kasuya²と Yoshida³は独立に, 希釈合金の理論に適用し, 局在スピンと遍歴スピン間の相互作用を議論し, 強磁性やヘリカル磁性等の可能性を議論している。

ホスト金属 (例えば Cu) 中の局在スピン (例えば Mn) が他の局在スピンを感ずるシナリオは次のとおりである。

1. spin S のある状態にある伝導電子は局在スピン S_1 の影響を受けて交換相互作用 $S_1 \cdot S$ によって散乱される。
2. 2 番目の局在スピン S_2 は, 散乱された電子の密度を相互作用 $S_2 \cdot S$ を通して感ずる。

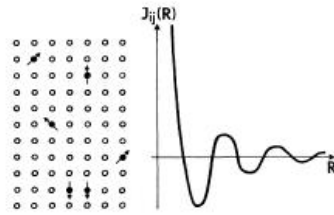


FIG. 5. Schematic sketch of magnetic moments randomly diluted in a metallic matrix, and the resulting RKKY exchange integral plotted as a function of distance. From Binder (1977a).

実際に相互作用の形を見て行くことにする。位置 R_1 にある局在スピンと伝導電子との相互作用は,

$$H = \sum_j A(\mathbf{x}_j - \mathbf{R}_1) \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_1 \quad (1)$$

と表される。ここで, \mathbf{x}_i は電子の位置を表す。電子は自由電子と仮定して, その波動関数は,

$$\psi_{ks}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} |s\rangle \equiv \psi_k(\mathbf{x}) |s\rangle \quad (2)$$

と表す。 s をスピンの index として, S_z を \uparrow, \downarrow と書く。式 (1) を第 2 量子化で表すために電子場を導入する。

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}) &= \sum_{ks} c_{ks} \psi_{ks}(\mathbf{x}), \\ \Psi^\dagger(\mathbf{x}) &= \sum_{ks} c_{ks}^\dagger \psi_{ks}^*(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (3)$$

第 2 量子化で表すと,

$$\mathcal{H} = \int d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{x}) H \Psi(\mathbf{x})$$

¹M.A.Ruderman and C.Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).

²T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16** 45 (1956).

³K. Yoshida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k,k',s,s'} \left[\int d^3x c_{k's'}^\dagger \psi_{k's'}^*(x) A(\mathbf{x} - \mathbf{R}_1) \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_1 c_{ks} \psi_{ks}(x) \right] \\
&= \sum_{k,k'} \sum_{s,s'} \int d^3x \psi_{k'}^*(x) A(\mathbf{x} - \mathbf{R}_1) \psi_k(x) \langle s' | c_{k's'}^\dagger \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_1 c_{ks} | s \rangle
\end{aligned}$$

空間積分部分は，

$$\begin{aligned}
\text{積分} &= \int d^3x \psi_{k'}^*(\mathbf{x}) A(\mathbf{x} - \mathbf{R}_1) \psi_k(\mathbf{x}) \\
&= e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_1} \int d^3x \psi_{k'}^*(\mathbf{x} - \mathbf{R}_1) A(\mathbf{x} - \mathbf{R}_1) \psi_k(\mathbf{x} - \mathbf{R}_1) \\
&= e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_1} J(\mathbf{k}, \mathbf{k}'),
\end{aligned}$$

where

$$J(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv \int d^3x \psi_{k'}^*(\mathbf{x}) A(\mathbf{x}) \psi_k(\mathbf{x})$$

スピン部分は，

$$\begin{aligned}
\sum_{s,s'} \langle s' | c_{k's'}^\dagger \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_1 c_{ks} | s \rangle &= \sum_{s,s'} \langle s' | (S_x S_1^x + S_y S_1^y + S_z S_1^z) c_{k's'}^\dagger c_{ks} | s \rangle \\
&= \sum_{s,s'} \langle s' | \left(\frac{1}{2} S_1^- S^+ + \frac{1}{2} S_1^+ S^- + S_1^z S_z \right) c_{k's'}^\dagger c_{ks} | s \rangle \\
&= \frac{1}{2} \left(S_1^- c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + S_1^+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + S_1^z (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) \right)
\end{aligned}$$

ここまでまとめると，

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{k,k'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_1} J(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left(S_1^- c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + S_1^+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + S_1^z (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) \right) \quad (4)$$

ここで， $J(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ が \mathbf{k}, \mathbf{k}' に依存しないと仮定する．例えば， $A(\mathbf{x}) = J\delta(\mathbf{x})$ だとすると， $J(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = J$ となる．2つの局在スピン間の相互作用は2次の摂動として計算される．つまり，式(4)の有効ハミルトニアンに対して，

$$\mathcal{H}''(\mathbf{x}) = \sum_{k,k',s,s'} \frac{\langle ks | \mathcal{H} | k's' \rangle \langle k's' | \mathcal{H} | ks \rangle}{\epsilon_k - \epsilon_{k'}} , \quad \mathbf{x} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 \quad (5)$$

で与えられる．

$$\begin{aligned}
\langle ks | \mathcal{H} | k's' \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2} e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}_1} J(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \delta_{k, k_1} \delta_{k', k_2} \times \\
&\quad \left(S_1^- \delta_{s\uparrow} \delta_{s'\downarrow} + S_1^+ \delta_{s\downarrow} \delta_{s'\uparrow} + S_1^z (\delta_{s\uparrow} \delta_{s'\uparrow} - \delta_{s\downarrow} \delta_{s'\downarrow}) \right) \\
&= \frac{1}{2} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_1} J(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left(S_1^- \delta_{s\uparrow} \delta_{s'\downarrow} + S_1^+ \delta_{s\downarrow} \delta_{s'\uparrow} + S_1^z (\delta_{s\uparrow} \delta_{s'\uparrow} - \delta_{s\downarrow} \delta_{s'\downarrow}) \right)
\end{aligned}$$

まとめると,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}''(\mathbf{x}) &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', s, s'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \frac{J^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'}} \times \\
&\quad \left(S_1^- \delta_{s\uparrow} \delta_{s'\downarrow} + S_1^+ \delta_{s\downarrow} \delta_{s'\uparrow} + S_1^z (\delta_{s\uparrow} \delta_{s'\uparrow} - \delta_{s\downarrow} \delta_{s'\downarrow}) \right) \times \\
&\quad \left(S_2^- \delta_{s'\uparrow} \delta_{s\downarrow} + S_2^+ \delta_{s'\downarrow} \delta_{s\uparrow} + S_2^z (\delta_{s'\uparrow} \delta_{s\uparrow} - \delta_{s'\downarrow} \delta_{s\downarrow}) \right) \\
&= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \frac{J^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'}} \left(S_1^- S_2^+ + S_1^+ S_2^- + 2S_1^z S_2^z \right) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \frac{J^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'}} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\
&\quad \downarrow \text{(仮定: } J(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = J, \text{自由電子エネルギー } \epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m^*}) \\
&= m^* J^2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}}}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}'^2}
\end{aligned}$$

もう一息. \mathbf{k} 和をとる.

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}}}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}'^2} &= \frac{1}{(2\pi)^3} 2\pi \int_{-1}^1 d\mu \int k'^2 dk' \frac{e^{-ik'x\mu}}{k^2 - k'^2} \\
&= \frac{1}{2\pi^2} (ix)^{-1} \int_0^\infty dk' \frac{k'}{k^2 - k'^2} \left(e^{-ik'x} - e^{+ik'x} \right) \\
&\quad \downarrow (\rho = k'r, \sigma = kr) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} (ix)^{-1} \int_0^\infty d\rho \left\{ \frac{\rho e^{-i\rho}}{\rho^2 - \sigma^2} - \frac{\rho e^{+i\rho}}{\rho^2 - \sigma^2} \right\} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{2ix} \int_{-\infty}^\infty d\rho \left\{ \frac{\rho e^{-i\rho}}{\rho^2 - \sigma^2} - \frac{\rho e^{+i\rho}}{\rho^2 - \sigma^2} \right\} \\
&\quad \downarrow \text{(それぞれポールを拾う...)} \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{2ix} \pi i \cos(\sigma) \times 2 = -\frac{1}{4\pi x} \cos(kx)
\end{aligned}$$

なので, 結局和の部分は,

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}}}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}'^2} &= \frac{1}{(2\pi)^6} 2\pi \int_0^{k_F} d^3 k \int_{k_F}^\infty d^3 k' \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}}}{k^2 - k'^2} \\
&\quad \downarrow \text{えーい} \\
&= -\frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{k_F} k'^2 dk' \frac{1}{4\pi x} \cos(kx) e^{ikx\mu}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{2x} \int_0^{k_F} dk' \frac{1}{ix} k \cos(kx) [e^{ikx} - e^{-ikx}] \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{x^2} \int_0^{k_F} dk' k \cos(kx) \sin(kx) \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{x^2} \frac{1}{2} \int_0^{k_F} dk' k \sin(2kx) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{(2x)^4} 2 [2k_F x \cos(2k_F x) - \sin(2k_F x)] \quad (6)
\end{aligned}$$

というわけで、

$$\mathcal{H}''(x) = \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \frac{2m^* J^2 k_F^4}{(2\pi)^3} \frac{2k_F x \cos(2k_F x) - \sin(2k_F x)}{(2k_F x)^4} \quad (7)$$

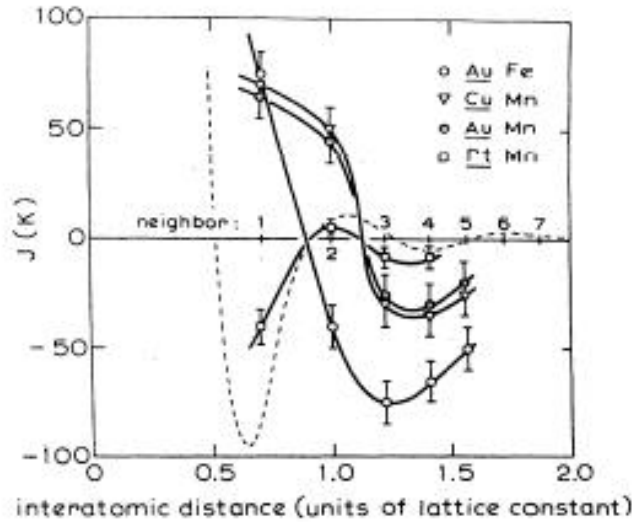


FIG. 6. Estimated exchange parameters J as a function of distance for four spin glass systems. The dashed line represents the RKKY conduction electron polarization around a Mn ion in Cu, according to Cohen and Slichter (1978). From Morgownik and Mydosh (1983a).

この図は、距離の関数として実験的に測った相互作用の大きさ。破線がRKKY相互作用。定量的にはあんまり合っていない。もっとも、上記の計算ではたくさんの重要なことが欠けている。例えば、電子は自由電子だとしているが、当然バンドの効果等があるはず。定量的に示すのは難しい問題だが、スピングラス物理として重要なのは、相互作用の符号が実際に変わることなのである(?)。