統計力学II

電子スピン共鳴 (ESR)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - he^{i\omega t}M_x - HM_z$$

$$\begin{aligned}
\chi(\omega) &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty Tr[M_x, M_x(t)]e^{-\beta\mathcal{H}_0 + i\omega t}dt/Z \\
&= \frac{1}{i\hbar Z}\int_0^\infty Tr(M_x e^{i\mathcal{H}_0 t}M_x e^{-i\mathcal{H}_0 t} - e^{i\mathcal{H}_0 t}M_x e^{-i\mathcal{H}_0 t}M_x)e^{-\beta\mathcal{H}_0 + i\omega t}dt \\
&= \frac{1}{i\hbar Z}\sum_{m,n}\int_0^\infty dt|\langle m|M_x|n\rangle|^2[e^{i(E_n - E_m + \omega)} - e^{i(E_m - E_n + \omega)t}]e^{-\beta E_n}dt \\
&= \frac{1}{i\hbar Z}\sum_{m,n}\int_0^\infty dt|\langle m|M_x|n\rangle|^2 e^{i(E_n - E_m + \omega)t}(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \\
&= \frac{1}{2\hbar Z}\sum_{m,n}\int_{-\infty}^\infty dt|\langle m|M_x|n\rangle|^2(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})e^{i(E_n - E_m + \omega)t} \\
&= \frac{1}{2Z}\sum_{m,n}|\langle m|M_x|n\rangle|^2(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})2\pi\delta(E_n - E_m + \omega)
\end{aligned}$$

よって $\chi''(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{m,n}|\langle m|M_x|n\rangle|^2 e^{-\beta E_n}(1 - e^{-\beta\omega})\pi\delta(E_n - E_m + \omega)$

スピン 1 個の系

$\mathcal{H} = -he^{i\omega t}M_x - g\mu_B H\cdot S$ なので
$\omega = g\mu_B H, \langle\uparrow|S^x|\downarrow\rangle = 1/4$ より

$$\chi''(\omega) = \frac{1}{4}\pi\delta(\omega - g\mu_B H)(1 - e^{-\beta\omega})P_\uparrow$$

よって $\omega = g\mu_B H$ のときのみ吸収される

スピン 2 個の系

$$\mathcal{H} = -JS_1\cdot S_2 - H(S_1^z + S_2^z)$$

位相空間は $(|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle)$ ここで $S_1\cdot S_2 = \frac{1}{2}(S_1^+S_2^- + S_1^-S_2^+) + S_1^zS_2^z$ よって

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -J/4 - H & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J/4 & -J/2 & 0 \\ 0 & -J/2 & J/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J/4 + H \end{pmatrix}$$

よって (固有状態、固有値) は $(|++\rangle, -J/4 - H), \left(\frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}}, -J/4\right), (|++\rangle, -J/4 + H), \left(\frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}}, 3J/4\right)$
$\langle m|M_x|n\rangle|^2 = \langle m|S^+ + S^-|n\rangle|^2$ より $\delta m = \pm 1$ でないと遷移しない

また全スピンが違うと遷移しない。以上を踏まえると遷移は図 1 のようになる。
よって $\omega = g\mu_B H$ のときのみ吸収される

異方性のあるスピン２個の系

$$\mathcal{H} = -JS_1 \cdot S_2 - H(S_1^z + S_2^z) - \Delta S_1^z S_2^z$$

このとき

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -(J+\Delta)/4 - H & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (J+\Delta)/4 & -J/2 & 0 \\ 0 & -J/2 & (J+\Delta)/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(J+\Delta)/4 + H \end{pmatrix}$$

より遷移は図 2 のようになる。よってよって $\omega = \omega_1, \omega_2$のとき吸収される

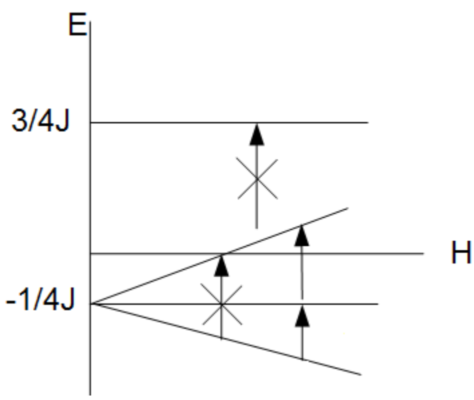

図 1　2 準位系

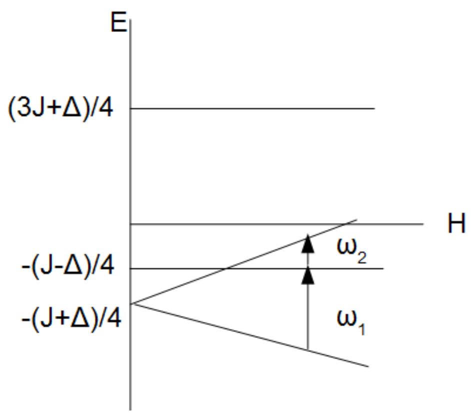

図 2　異方性のある 2 準位系