# 双極子-双極子相互作用について

安崎遼路 (Ryoji Anzaki)
permanent email: anzaki[at]gakushikai.jp
GitHub: ryojianzaki

東京大学

2020 年 1 月 24 日

## 1　双極子-双極子相互作用

薄膜内の離散点に分布した磁気双極子の相互作用を考える．各双極子は薄膜表面の法線方向の成分のみを持つとする．以下では $\hat{i}$ は $i$ 軸方向の単位ベクトル，$A^\top$ は行列 $A$ の転置，$\hat{1}_n$ は $n$ 次単位行列である．

いま，2 つの磁気双極子 $\vec{m}_i\,(i=1,2)$ があるとき，それらの相互作用のエネルギーは，

$$G(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)=(\vec{m}_1\cdot\nabla_1)(\vec{m}_2\cdot\nabla_2)\frac{1}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}=\frac{\vec{m}_1^\top(\hat{1}_2-3\hat{n}\hat{n}^\top)\vec{m}_2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|^3} \tag{1}$$

ただし，$\hat{n}=(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)/|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|$．ここで，薄膜の厚さ方向に $z$ 軸を取り，$\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{r},z)$ とする．このとき，薄膜の厚さ $a>0$ に比べて 2 つの磁気双極子間の距離が十分長いときは，

$$|\boldsymbol{r}|^2+z^2\simeq|\boldsymbol{r}|^2;\quad \hat{n}\simeq\hat{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{r}/|\boldsymbol{r}| \tag{2}$$

とできる．こうして，磁気双極子が厚さ方向の成分しか持たない場合は遠距離での漸近形

$$G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\sim\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|^3} \tag{3}$$

を得る．

## 2　数値的な評価法

任意の点 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{r},z)$ での磁化 $\vec{m}$ が $z$ 成分 $\phi(\boldsymbol{r})$ しか持たないので，$G_{\mathbf{k}}$ の (行列としての) 部分空間 $V=\{(0,0,z):z\in\mathbb{R}\}$ への制限 $G_{\mathbf{k}}^\perp=G_{\mathbf{k}}\big|_V=\hat{z}^\top G_{\mathbf{k}}\hat{z}$ を考えれば十分．

まず，離散点での和で式 (11) を評価する．

$$G_{\mathbf{k}} = \frac{1}{a}\sum_{\boldsymbol{r}\neq 0}\sum_{z=0}^{a}\frac{\hat{1}_3 - 3\hat{n}\hat{n}^\top}{\left(|\boldsymbol{r}|^2+z^2\right)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}}. \tag{4}$$

このとき，角座標での波数ベクトル

$$\mathbf{k} = k(\cos\varphi, \sin\varphi, 0) \tag{5}$$

に対して，

$$G_{\mathbf{k}}^{\perp} = \frac{1}{a}\sum_{\boldsymbol{r}\neq 0}\sum_{z=0}^{a}\left[\frac{1}{\left(|\boldsymbol{r}|^2+z^2\right)^{3/2}} - \frac{3z^2}{\left(|\boldsymbol{r}|^2+z^2\right)^{5/2}}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{6}$$

実際上は，非負整数 $L/2, a$ に対して点集合 $\mathbb{P}$

$$\mathbb{P} = \{(x,y,z)\in\mathbb{Z}^3 : -L/2+1 \le x, y \le L/2,\ 0\le z\le a-1\} \tag{7}$$

で定義し，その上で定義された関数 $g:\mathbb{P}\ni(\boldsymbol{r},z)\mapsto g(\boldsymbol{r},z)\in\mathbb{R}$ を

$$g(\boldsymbol{r},z) = \begin{cases} \frac{1}{\left(|\boldsymbol{r}|^2+z^2\right)^{3/2}} - \frac{3z^2}{\left(|\boldsymbol{r}|^2+z^2\right)^{5/2}} & (\boldsymbol{r},z)\neq(0,0,0) \\ 0 & (\boldsymbol{r},z)=(0,0,0)\end{cases} \tag{8}$$

のように定義し，そこから

$$\overline{g}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{a}\sum_{z=0}^{a-1} g(\boldsymbol{r},z) \tag{9}$$

として，

$$G_{\mathbf{k}}^{\perp} = \mathbf{DFT}\left[\overline{g}(-)\right](\mathbf{k}) \tag{10}$$

を得る．

## 参考文献

[1] arXiv:cond-mat/0610142

## 付録 A　Fourier 変換（以下は参考）

薄膜も厚み $a$ を持っているので，Fourier 変換も本来は

$$G_{\mathbf{k}} = \frac{1}{a}\int_{\mathbb{R}^2}\left[\int_0^a \frac{\hat{1}_3 - 3\hat{n}\hat{n}^\top}{\left(|\boldsymbol{r}|^2+z^2\right)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}z\right]\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{11}$$

となる．

$$\boldsymbol{r} = (x,y) = r(\cos\theta, \sin\theta) \tag{12}$$

として，式 (11) に入れると，被積分関数は，

$$\frac{\hat{1}_3}{\left(r^2+z^2\right)^{3/2}} - 3\frac{(r\hat{\boldsymbol{r}}+z\hat{z})(r\hat{\boldsymbol{r}}+z\hat{z})^\top}{\left(r^2+z^2\right)^{5/2}} \tag{13}$$

となる．ただし，

$$\hat{n} = \frac{r\hat{\boldsymbol{r}}+z\hat{z}}{\sqrt{r^2+z^2}} \tag{14}$$

を使った．ここで，

$$(r\hat{\boldsymbol{r}}+z\hat{z})(r\hat{\boldsymbol{r}}+z\hat{z})^\top = r^2\hat{\boldsymbol{r}}\hat{\boldsymbol{r}}^\top + rz(\hat{\boldsymbol{r}}\hat{z}^\top + \hat{z}\hat{\boldsymbol{r}}^\top) + z^2\hat{z}\hat{z}^\top \tag{15}$$

より，$G_{\mathbf{k}}$ の (行列としての) 部分空間 $V = \{(0,0,z) : z \in \mathbb{R}\}$ への制限 $G^\perp_{\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}}\big|_V$ は，角座標での波数ベクトル

$$\mathbf{k} = k(\cos\varphi, \sin\varphi, 0) \tag{16}$$

に対して，

$$G^\perp_{\mathbf{k}} = \frac{1}{a}\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^{2\pi} r\mathrm{d}\theta \int_0^a \mathrm{d}z \left[\frac{\hat{1}_2}{\left(r^2+z^2\right)^{3/2}} - 3\frac{z^2}{\left(r^2+z^2\right)^{5/2}}\right] \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr\cos(\theta-\varphi)} \tag{17}$$

被積分関数第 1 項の積分 I は，

$$\mathrm{I} = \frac{1}{a}\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^{2\pi} r\mathrm{d}\theta \int_0^a \mathrm{d}z \frac{1}{\left(r^2+z^2\right)^{3/2}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr\cos(\theta-\varphi)} \tag{18}$$

被積分関数第 1 項の積分 II は，

$$\mathrm{II} = -\frac{3}{a}\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^{2\pi} r\mathrm{d}\theta \int_0^a \mathrm{d}z \frac{z^2}{\left(r^2+z^2\right)^{5/2}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr\cos(\theta-\varphi)} \tag{19}$$

当然，何らかの粗視化をしないとこれらは発散するが，$k^n$ の項を求めることはできて，まず，

$$\lim_{k\to 0}\frac{\mathrm{d}^n\mathrm{I}}{\mathrm{d}k^n} = 0 \tag{20}$$

一方，

$$\lim_{k\to 0}\frac{\mathrm{d}^n\mathrm{II}}{\mathrm{d}k^n} = -\frac{3}{a}\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^{2\pi} r\mathrm{d}\theta \int_0^a \mathrm{d}z \frac{z^2}{\left(r^2+z^2\right)^{5/2}} (-\mathrm{i}r\cos(\theta-\varphi))^n \tag{21}$$

整理し直して，

$$\lim_{k\to 0}\frac{\mathrm{d}^n\mathrm{II}}{\mathrm{d}k^n} = -\frac{3(-\mathrm{i})^n}{a}\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^a \mathrm{d}z \frac{z^2 r^n}{\left(r^2+z^2\right)^{5/2}} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \cos^n(\theta-\varphi) \tag{22}$$

偶奇性から，$n$ が奇数なら積分は 0.

# 付録 B　逆 3 乗則の Fourier 変換

磁化の TDGL で、2 体相互作用のグリーン関数 $G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ を

$$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = G(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}', 0) = \frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|^3} \tag{23}$$

とおく。この時、その Fourier 変換

$$G_{\mathbf{k}} = \int_{\mathbb{R}^2} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}} G(\boldsymbol{x}, 0) \mathrm{d}^2 x \tag{24}$$

は発散する。そこで、円盤領域 $B(0, d) = \{\boldsymbol{x} : |\boldsymbol{x}| < d\}$ $(d > 0)$ を除いた連結領域 $D(d) = \mathbb{R}^2 \backslash B(0, d)$ での積分に替える。

$$G_{\mathbf{k}} = \int_{D(d)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}} G(\boldsymbol{x}, 0) \mathrm{d}^2 x \tag{25}$$

この関数 $G_{\mathbf{k}}$ の Taylor 展開の 1 次の項を評価する。まず、$G_{\mathbf{k}}$ が $\mathbf{k}$ の方向によらないことを確認する。任意の回転行列 $R$ ($R^\top = R^{-1}$, $\det[R] = 1$, $R \in \mathbf{GL}(2, \mathbb{R})$) に対して、

$$G_{R\mathbf{k}} = \int_{D(d)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(R\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{x}} G(\boldsymbol{x}, 0) \mathrm{d}^2 x \tag{26}$$

であるが、

$$(R\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{x} = (R\mathbf{k})^\top \boldsymbol{x} = \mathbf{k} R^\top \boldsymbol{x} = \mathbf{k} \cdot (R^\top \boldsymbol{x}) = \mathbf{k} \cdot (R^{-1} \boldsymbol{x}) \tag{27}$$

なので、$\boldsymbol{x}' = R^{-1}\boldsymbol{x}$ とおくと、$\boldsymbol{x} = R\boldsymbol{x}'$ で、

$$\begin{aligned} G_{R\mathbf{k}} &= \int_{D(d)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot R^{-1}\boldsymbol{x}} G(\boldsymbol{x}, 0) \mathrm{d}^2 x \\ &= \int_{D(d)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}'} G(R\boldsymbol{x}', 0) \mathrm{d}^2 x \end{aligned} \tag{28}$$

$$\tag{29}$$

$\det[R] = 1$ で、しかも $D(d)$ が $R$ で変わらないことを使って積分変数を $\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}'$ と変換すると、

$$G_{R\mathbf{k}} = \int_{D(d)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}'} G(R\boldsymbol{x}', 0) \mathrm{d}^2 x' \tag{30}$$

ところで、$R^\top = R^{-1}$ より $|R\boldsymbol{x}| = |\boldsymbol{x}|$。故に

$$G(R\boldsymbol{x}, 0) = \frac{1}{|R\boldsymbol{x}|^3} = \frac{1}{|\boldsymbol{x}|^3} = G(\boldsymbol{x}, 0) \tag{31}$$

結局、任意の回転行列 $R$ に対して

$$G_{R\mathbf{k}} = G_{\mathbf{k}} \tag{32}$$

そこで、

$$G_{\mathbf{k}} = g(k), \quad k = |\mathbf{k}| \tag{33}$$

と書ける。今、

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} g(k)\right|_{k=0} = \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} \int_{D(d)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}} G(\boldsymbol{x}, 0) \mathrm{d}^2 x\right|_{k=0} \tag{34}$$

であるが、

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{\mathrm{d}k} = \frac{\mathbf{k}}{k} = \hat{k} \tag{35}$$

より、

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} g(k)\right|_{k=0} = \int_{D(d)} (-\mathrm{i}\hat{k}\cdot\boldsymbol{x}) G(\boldsymbol{x}, 0) \mathrm{d}^2 x \tag{36}$$

ここで、反転 $\boldsymbol{x} \to -\boldsymbol{x}$ をすると、$G(-\boldsymbol{x}, 0) = G(\boldsymbol{x}, 0)$ より

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} g(k)\right|_{k=0} &= \left.\int_{D(d)} (-\mathrm{i}\hat{k}\cdot(-\boldsymbol{x})) G(-\boldsymbol{x}, 0) (-1)^2 \mathrm{d}^2 x\right|_{k=0} \\
&= \left.\int_{D(d)} (-\mathrm{i}\hat{k}\cdot(-\boldsymbol{x})) G(\boldsymbol{x}, 0) \mathrm{d}^2 x\right|_{k=0} \qquad (37) \\
&= -\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} g(k)\right|_{k=0} \qquad (38)
\end{aligned}$$

故に、

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} g(k)\right|_{k=0} = 0 \tag{39}$$

ここから、$G_{\mathbf{k}}$ の Taylor 展開は 1 次の係数が 0 であると分かる。

# 付録 C　Green 関数の Fourier 変換の漸近形

薄膜も厚み $a$ を持っているので，Fourier 変換も本来は

$$G_{\mathbf{k}} = \frac{1}{a} \int_{\mathbb{R}^2} \left[ \int_0^a \frac{\hat{1}_3 - 3\hat{n}\hat{n}^\top}{(|\boldsymbol{r}|^2 + z^2)^{3/2}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}} \mathrm{d}z \right] \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{40}$$

となる．原点付近の円盤領域 $B(0, d) = \{(x, y) : x^2 + y^2 \leq d^2\}$ を除いた領域 $D(d) = \mathbb{R}^2 \backslash B(0, d)$ での積分値を $G^\circ_{\mathbf{k}}(d)$ とおくと，

$$G^\circ_{\mathbf{k}}(d) = \frac{1}{a} \int_{D(d)} \left[ \int_0^a \frac{\hat{1}_3 - 3\hat{n}\hat{n}^\top}{(|\boldsymbol{r}|^2 + z^2)^{3/2}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}} \mathrm{d}z \right] \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{41}$$

先の漸近形から，

$$\lim_{d\to\infty} \left[ G^\circ_{\mathbf{k}}(d) - \hat{1}_3 \int_{D(d)} \frac{1}{|\boldsymbol{r}|^3} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \right] = 0 \tag{42}$$