Pair-product model of Heisenberg ferromagnets(III)

鈴 木 増 雄（東大理）

（7月17日 受理）

§ 1. Introduction

Spin 系の相転移の問題は、いろいろな角度から研究されている。[1)2)3)4)] 特に、Heisenberg model の特長を充分持つていて、数学的取扱いが、もつとずつと易しい Isig model に近い model として、著者は、前々号と前号に、pair-product model（ρ_S-model）を提案し、それを用いて、Ferro の Curie 点，比熱の jump，自発磁化，異方性の影響等を、又 anti-ferro の同様な物理量をいろいろ調べてみた。Ferro の場合には、ρ_S-model を Bethe 近似で解くと、Heisenberg model の constant coupling 近似の結果と全く一致することが示された。[3)]

又、一次元 ρ_S-model は、一般の anisotropic case でも、厳密に解けて、もとの Heisenberg model の特殊な場合（$J_x = J_y$，$J_z = 0$）と比較すると、転移点（$kT \gtrsim 3J$）近傍又は、それ以上では、よく両者が一致することが示された。[4)] 更に異方性の効果についてみると、Ferro では、横成分が強くなる程、Curie 点が下り、Ferro になりにくくなる。（常識的！）Anti-ferro では、横成分の存在は、Ferro の場合と較べて、ずつと、ordering に与える effect は小さい。むしろ、Bethe 近似では、却つて、ほんのわずか、Neel 点が、横成分が増すと共に、高くなる。

さて、今回は、pair-product model で、Bethe 近似を使つて、帯磁率を計算する。これも、高温側では、Kranendonk 達[5)]の constant coupling の結果と一致する。又、Weiss の Bethe 近似の結果とも近い。次に、critical scattering の問題を、ρ_S-model の Bethe 近似で扱つてみると、たて成分については（$a^2K_z^2$ のこと！），Elliott，Marshall と同じことになる。[6)] そして、最後に、ρ_S-model で、状態和，energy，帯磁率の x－展開の議論をしよう。出来れば、その結果を用いて、Padé 近似を行い、

転移点近傍の singularity の様子を様子を調べてみたい。

§ 2. 帯 磁 率 (Ferromagnetic case)

まず、field の無い時の model density matrix は

$$\rho_s = \{ \prod_{\text{pair}} \exp(K\,\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \}_{\text{sym}} \tag{1}$$

或いは、次のように書き直すことも出来る。

$$\boxed{\rho_s = a^{N_p} \{ \prod_{\text{pair}} (1 + x\,\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \}_{\text{sym}}} \tag{2}$$

ここで、

$$a = a(K) = e^{-K}(\cosh 2K + \frac{1}{2} \sin 2K)$$

$$x = x(K) = \tan 2K / (2 + \tanh 2K)$$

$$K = J / kT \quad .$$

次に、field のある場合の model density matrix は、(1)の自然な拡張として

$$\boxed{\rho_s(H) = \rho_s \cdot \exp(\frac{\mu_0 H}{kT} \sum_i S_i^z)} \tag{3}$$

或いは、書き直して

$$\boxed{\rho_s(H) = a^{N_p} \{ \prod_{\text{pair}} (1 + x\,\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \}_{\text{sym}} \cdot C_0^N \prod_i (1 + y_0 S_i^z)} \tag{4}$$

但し、$C_0 = \cosh h$, $y_0 = \tanh h$, $h \equiv \mu_0 H / kT$.

さて、状態和は

$$Z_s(H) = \mathrm{Tr}\,\rho_s(H) \; . \tag{5}$$

帯磁率は

$$\chi = \frac{\mu_0^2}{kT} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \log Z_s(h) \tag{6}$$

特にzero field susceptibility は、(6)を変形して、

$$\chi = \frac{\mu_0^2}{kT}\{<(\Sigma S_i^Z)^2>_0 - <\Sigma S_i^Z>_0^2\} \tag{7}$$

ここに

$$<A>_0 = \mathrm{Tr}\, A\rho_S(0)/\mathrm{Tr}\,\rho_S(0) \;.$$

更に、Curie 点より上では、

$$\chi = \frac{\mu_0^2}{kT}\sum_{\mathrm{all}\, ij} <S_i^Z S_j^Z>_0 \;, \quad (T \geqq T_C)\;. \tag{8}$$

或いは、磁化M(H)を先に求めて、それから

$$\chi = \left(\frac{\partial M(H)}{\partial H}\right)_{H=0} = \frac{N\mu_0^2}{kT}\left(\frac{\partial}{\partial h}<S_i^Z>\right)_{h=0}$$

$$\therefore \chi = \frac{N\mu_0^2}{kT}\left(\frac{\partial}{\partial h}\frac{\ll S_i^Z\gg}{\ll 1\gg}\right)_{h=0} \tag{9}$$

但し

$$\ll A\gg = \mathrm{Tr}\, A\{\prod_{\mathrm{pair}}(1 + x\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j)\}_{\mathrm{sym}}\cdot\Pi(1 + y_0 S_i^Z) \tag{10}$$

さて、Bethe 近似を用いて、帯磁率を計算してみよう。nearest neighbour の数をzとして

$$Z_S(H) = \mathrm{Tr}\prod_{i=1}^{z}\exp(K\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_i)\prod_{i=1}^{z}\exp\{(h+h')S_i^Z\}\cdot\exp(hS_0^Z) \tag{11}$$

ここで

$$C \equiv \cosh(h+h')\;, \quad y \equiv \tanh(h+h')$$

とおいて、yの二次まで求めると、

$$Z_S(H) = (ac)^Z C_0(1 + xy_0 y + {}_zC_2 x^2 y^2)\ \mathrm{Tr}\ 1 \tag{12}$$

i) $T \geqq T_C$ に於ける帯磁率．

$$\ll S_0^z \gg = \mathrm{Tr}\, S_0^z \Pi(1+x S_0 S_i) \Pi_i (1+y S_i^z) + \mathrm{Tr}\, S_0^z \cdot y_0 S_0^z$$

$$= (zxy + y_0)\,\mathrm{Tr}\, 1 + 0(y^2) \tag{13}$$

$$\ll S_i^z \gg = \mathrm{Tr}\, S_i^z \Pi(1+x \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_i) \Pi_i (1+y S_i^z) \cdot (1+y_0 S_0^z)$$

$$= \{ y + (z-1) x^2 y + x y_0 \} \mathrm{Tr}\, 1 + 0(y^2) \tag{14}$$

self consistent な条件 $\ll S_0^z \gg = \ll S_i^z \gg$ より、

$$\{ zx - 1 - (z-1) x^2 \} y = (x-1) y_0 \,,$$

ここで

$$\left(\frac{d y_0}{d h}\right)_0 = \left(\frac{d}{d h} \tanh h\right)_{h=0} = 1$$

$$\therefore \left(\frac{d y}{d h}\right)_0 = \frac{1}{1-(z-1)x} \tag{15}$$

故に

$$\chi = \frac{N \mu_0^2}{kT} \left(\frac{d}{dh} \frac{\ll S_0^z \gg}{\ll 1 \gg_0}\right)_0 = \frac{N \mu_0^2}{kT} \left(\frac{d}{dh} (zxy + y_0)\right)_0$$

$$\therefore \boxed{\chi = \frac{N \mu_0^2}{kT} \frac{1+x}{1-(z-1)x}} \quad \text{for } T \geqq T_c \tag{16}$$

これは、変形すると

$$\chi = \frac{N \mu_0^2}{kT} \frac{4 e^{4K}}{z-(z-4) e^{4K}} \tag{17}$$

となり、Constant coupling 近似の結果と一致する。更に、Curie 点近くの漸近形は、

$$\chi \fallingdotseq \frac{N \mu_0^2}{kT_c} \cdot \frac{k T_c^2}{(z-4)J} \cdot \frac{1}{T-T_c} \tag{18}$$

又、(16) で、x として、$x=\tanh K$ を入れると、Bethe 近似による Ising model の帯磁率になる；

$$\chi = \frac{N \mu_0^2}{kT} \frac{1+\tanh K}{1-(z-1)\tanh K} \quad \left(\begin{array}{c}\text{Ising,}\\ T \geqq T_c\end{array}\right) \tag{19}$$

特に、Tc の近くでは

$$\chi = \frac{2N\mu_0^2}{k(z-2)\log\{z/(z-2)\}}\cdot\frac{1}{T-T_C} \tag{20}$$

これは、以前に、Firgau[7]によって計算されたものと一致する。

ii) $T \leqq T_C$ での帯磁率，

低温側では、自発磁化の存在の為に、$h\to 0$ にしても、$h' \neq 0$，即ち、$y_0 \to 0$ でも、$y \neq 0$，しかし $y(h=0)$ は、Bethe 近似では $(T_C-T)^{\frac{1}{2}}$ に比例するから、Tc の近傍だけを議論するには、y^3 まで求めればよい。

$$\begin{aligned}\langle\langle S_0^Z\rangle\rangle &= (zxy + {}_zC_3x^3y^3)\,\mathrm{Tr}\,1 + \mathrm{Tr}\,S_0^3\cdot y_0S_0^Z\\ &\quad + y_0\cdot{}_zC_2\mathrm{Tr}\,S_0^Z(x\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_1)(x\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_2)\,y^2S_1^ZS_2^Z\cdot S_0^Z\\ &= (zxy + y_0 + {}_zC_3x^3y^3 + {}_zC_2x^2y_0y^2)\,\mathrm{Tr}\,1\end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned}\langle\langle S_1^Z\rangle\rangle &= \mathrm{Tr}\,S_1^Z\Pi(1+x\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_i)\,\Pi(1+yS_i^Z) + \\ &\quad + y_0\,\mathrm{Tr}\,S_0^ZS_1^Z\,\Pi(1+x\mathbf{S}_0\mathbf{S}_i)\,\Pi(1+yS_i^Z),\end{aligned}$$

$$\text{第二項} = y_0\,\mathrm{Tr}\,S_0^ZS_1^Z(x\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_1) + y_0\,y^2_{Z-1}C_2\,\mathrm{Tr}\,(S_0^Z\cdot S_1^Z)(x\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_2)(x\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_3),$$

故に

$$\begin{aligned}\langle\langle S_1^Z\rangle\rangle &= \{y + (z-1)x^2y + {}_{z-1}C_2x^2y^3 + {}_{z-1}C_3x^4y^3\}\,\mathrm{Tr}\,1\\ &\quad + y_0(x + {}_{z-1}C_2x^3y^2)\,\mathrm{Tr}\,1\end{aligned} \tag{22}$$

又、(12)より、

$$\langle\langle 1\rangle\rangle = (1 + xy_0y + {}_zC_2x^2y^2)\,\mathrm{Tr}\,1 \tag{23}$$

容易にわかるように、上式の第2項以下は、Tc の近傍では、帯磁率の singularity に対しては、higher order になり、neglect することができる。まず、self-consistent な条件より、($\langle\langle S_0^Z\rangle\rangle = \langle\langle S_1^Z\rangle\rangle$)，

$$\{zx - 1 - (z-1)x^2\}y + \{{}_zC_3x^3 - {}_{z-1}C_2x^2 - {}_{z-1}C_3x^4\}y^3$$

$$= y_0\{ x-1+y^2({}_{Z-1}C_2 x^3 - {}_Z C_2 x^2) \} \quad . \qquad (24)$$

これより．容易に、 paper 〔I〕 の(20)式を用いて、

$$\left(\frac{dy}{dh}\right)_0 = -\frac{x_C - 1}{2(z-2)(x-x_C)} = \frac{1}{2(z-1)} \frac{1}{x-x_C} \qquad (25)$$

（ T_C 近傍の漸近形！）

$$\therefore \quad \boxed{\chi_- \cong \frac{N\mu_0^2}{kT} Z x_C \left(\frac{dy}{dh}\right) = \frac{N\mu_0^2}{kT} \frac{Z}{2(z-1)^2} \frac{1}{x-x_C}} \qquad (26)$$

一方 $\chi_+ \cong \frac{N\mu_0^2}{kT} \frac{-Z}{(z-1)^2} \frac{1}{x-x_C}$,

故に、 $\chi_+ / \chi_- = 2$ となり、現象論の分子場理論（Landau theory）と一致する。

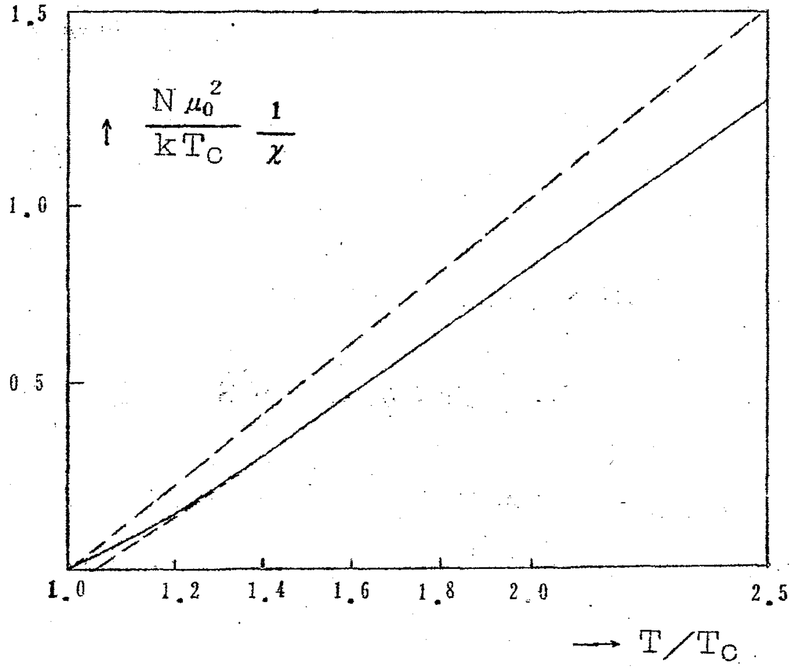
iii) 再び、 $T \geqq T_C$ での帯磁率をもう少し詳しく調べてみると、(16)式より

$$\frac{N\mu_0^2}{kT_C x} \equiv f(t) = \frac{t\{1-(z-1)x(t)\}}{1+x(t)} \quad ;$$

$$x(t) = \frac{\tanh(2K_C/t)}{2+\tanh(2K_C/t)} \quad ; \quad t = T/T_C$$

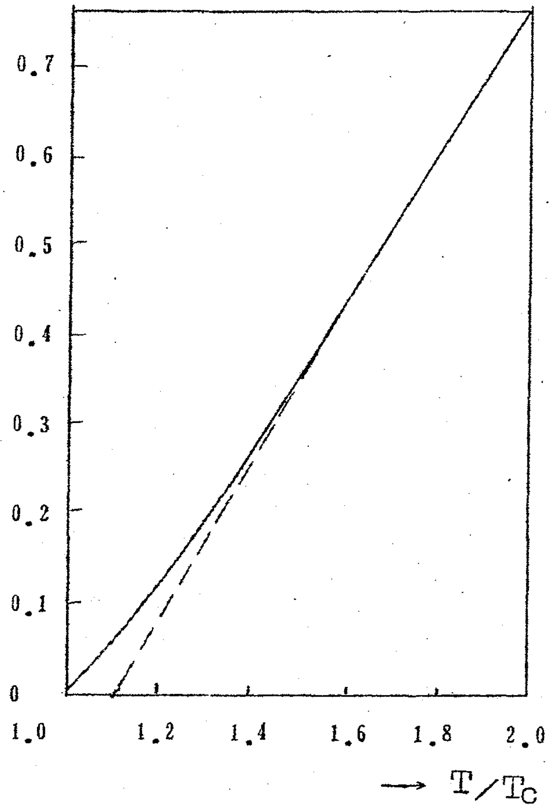
$$\lim_{t\to\infty} \{f(t)-t\} = \lim_{\theta\to 0}\left(-ZK_C \cdot \frac{\tanh\theta}{\theta}\right) = -ZK_C \qquad (27)$$

即ち、高温の極限では、Curie-Weiss の法則に従い、 ZK_C だけ、下側にある。中間の温度領域も調べて、図示すると、Fig.1 のようになる。



(i) b.c.c の帯磁率（$T \geqq T_C$）

Fig. 1



(ii) s c. の χ

P.R. Weiss[8)] の結果と非常によく一致している。short range order の effect で、T_C 近くでは、曲りが現れる。

§ 3. 一次元ρ_S-model の厳密解（field がある場合）と帯磁率

3 － 1）

一次元ρ_S-model では、field が存在しても厳密に解くことが出来る。まず、

$$\rho_S(H) = \{\prod_{i}^{N} \exp(K\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1})\}_{sym}\cdot\prod_{i}^{N}\exp(h S_i^z) \tag{28}$$

$$Z_S(H) = \mathrm{Tr}\,\rho_S(H) = a^{N_p}\cdot C_0^N\,\mathrm{Tr}\,\{\prod_i(1+x\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1})\}_{sym}\prod_i(1+y_0 S_i^z) \tag{29}$$

これは、paper〔1〕の公式(5)，(7)を応用して、少し調べると、$N\to\infty$では、sym の操作は不要であることがわかる。結局 $N_p = N$ より

$$\boxed{Z_S(H) = a^N C_0^N\cdot\mathrm{Tr}\prod_i(1+x\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_{i+1})\prod_i(1+y_0 S_i^z)} \tag{30}$$

容易に、aC_0 の factor を除くと、残りの項の計算は、数学的構造が Ising model と同じになる。ただ、$\tanh K\to x(K)$ なる置きかえをやればよい。transfer matrix を用いて、Ising model を解いた結果[9]を使うと、(30)は、spin 一個当り、

$$Z_S(H) = \frac{1+\mu+\sqrt{(1-\mu)^2+4\mu z_K^2}}{(1+z_K)\sqrt{\mu}}\times a \tag{31}$$

ここで、 $\mu = \exp(-2h)$ ， $z_k = \dfrac{1-x(K)}{1+x(K)}$ (32)

又、帯磁率χは、容易に (31) より、

$$\boxed{\chi = \frac{N\mu_0^2}{kT}\times\frac{1}{z_K}} \tag{33}$$

今、isotropic case を考えているから、

$$x(K) = \tanh 2K/(2+\tanh 2K)$$

$$\therefore\ z_K = (\cosh 2K/\exp(2K)$$

$$\therefore\ \underline{x = \frac{N\mu_0^2}{kT}\cdot\frac{\exp(2K)}{\cosh(2K)}} \tag{34}$$

もっと一般にanisotropic linear chain を考えると、同様にして、(33)がなり立ち、ただ

$$z_k = \{ 1 - X(J_x, J_y, J_z) \} / \{ 1 + X(J_x, J_y, J_z) \} \tag{35}$$

$$X(J_x, J_y, J_z) = \frac{\tanh \alpha_z - \tanh \alpha_y \tan \alpha_y}{1 - \tanh \alpha_x \tan \alpha_y \tanh \alpha_z} \tag{36}$$

$$\alpha_x = J_x / kT \ , \quad \alpha_y = J_y / kT \ , \quad \alpha_z = J_z / kT \ .$$

故に、 $\chi_0 \equiv N\mu_0^2 / kT$ (non interacting spin system)として、

$$\boxed{\chi / \chi_0 = e^{2\alpha_z} \cdot \frac{\cosh(\alpha_x - \alpha_y)}{\cosh(\alpha_x + \alpha_y)}} \tag{37}$$

特にT→0の漸近形を調べてみると、次のような面白い結果が得られる。

$$\chi / \chi_0 \cong \exp 2 \{ \alpha_z - \min(\alpha_x, \alpha_y) \}$$

$$= \exp[(2/kT)\{ J_z - \min(J_x, J_y) \}] \tag{38}$$

故に、cxchange interaction J_x, J_y, J_z の大小関係によって、次のようないろいろなsingularity を示す。

$$\left\{ \begin{array}{l} 1) \ J_z > \min(J_x, J_y) \rightarrow \ \chi \text{は指数関数的に発散。} \\ 2) \ J_z = \min(J_x, J_y) \rightarrow \ \chi \text{は} 1/T \text{で発散。} \\ 3) \ J_z < \min(J_x, J_y) \rightarrow \ \chi \text{は指数関数的に零になる。} \end{array} \right.$$

但し、もとのHeisenberg model の結果と比較する時は、 ρ_s-model は、定量的には、T→0のところが一番違いが大きくなるので注意を要する。しかし、上の定性的な結果は、充分信頼出来るものと思う。即ち、直観的には、横成分が小さいと、ferro になり易く、T→0で、完全にそろってしまうから、χは激しく発散する。逆に、横成分が大きいと、ferro になりにくく、T→0でもz-方向には、そろいにくく、χは急に零になる。isotropic case は丁度、境目に当り、χ / χ_0 はT→0で finite になる。χは $1/T$ で発散するがnon-interacting system でも現れる統計的な効果であって、協力現象と

してのsingularity はT＝0でも現れない。これは、z－成分と横成分とがお互に丁度cancel し合う結果と思われる。尚、もう一つ注意を要することはanisotropic case，特に $J_x \neq J_y$ の時は、total Hamiltonian と total magnetization (or Zeeman term)が commute しないことである。即ち、

$$[J_x S_i^x S_j^x + J_y S_i^y S_i^y + J_z S_i^z S_j^z ,\ S_i^z + S_j^z]$$

$$= 2i(J_y - J_x)(S_i^x S_{i+1}^y + S_i^y S_{i+1}^x) \neq 0 \tag{39}$$

この為に、Zeeman term を分離することが出来なくなり、(3)の $\rho_S(H)$のように分けると、T→0では、そこからも違いが出て来る。（勿論Tが大きいところでは、一致してくる。）それで、帯磁率も(7)又は(8)では表わされなくなり、generalized cumulant[10)]を用いねばならなくなる。しかし、今興味があるのは、絶対零度の近くではなくて、相転移点の近傍であるから、model としては、anisotropic case でも、(3)式を用いることにしよう。その立場では、勿論、(8)式が、成り立つ。

さて、もつと具体的に、帯磁率の温度依存性が anisotropy によつてどのように変るかを調べてみよう。

(i) $J_x = J_y = 0$,　$J_z = J$.　(Ising)

$$\chi = \chi_0 \cdot \exp(2K)$$

(ii) $J_x = J_y = J_z = J$　(isotropic case).

$$\boxed{\chi = \chi_0 \cdot \exp(2K) / \cosh(2K)}$$

(iii) もつと一般に，$J_x = J_y = \gamma J$,　$J_z = J$ の case.

$$\boxed{\chi = \chi_0 \cdot \exp(2K) / \cosh(2\gamma K)}$$

(iv) $J_x = J_y = J$,　$J_z = 0$.

$$\underline{\chi = \chi_0 \cdot \mathrm{sech}(2K)} \tag{40}$$

この最後の場合については、もとのHeisenberg model の厳密解が得られて

いるから、それと比較してみよう。Katsura[11]によると、

$$\chi = \chi_0 \cdot \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{d\omega}{\cosh^2(K\cos\omega)} \tag{41}$$

両者をplotすると、Fig.2のようになり、低温まで、相当良く一致することがわかる。

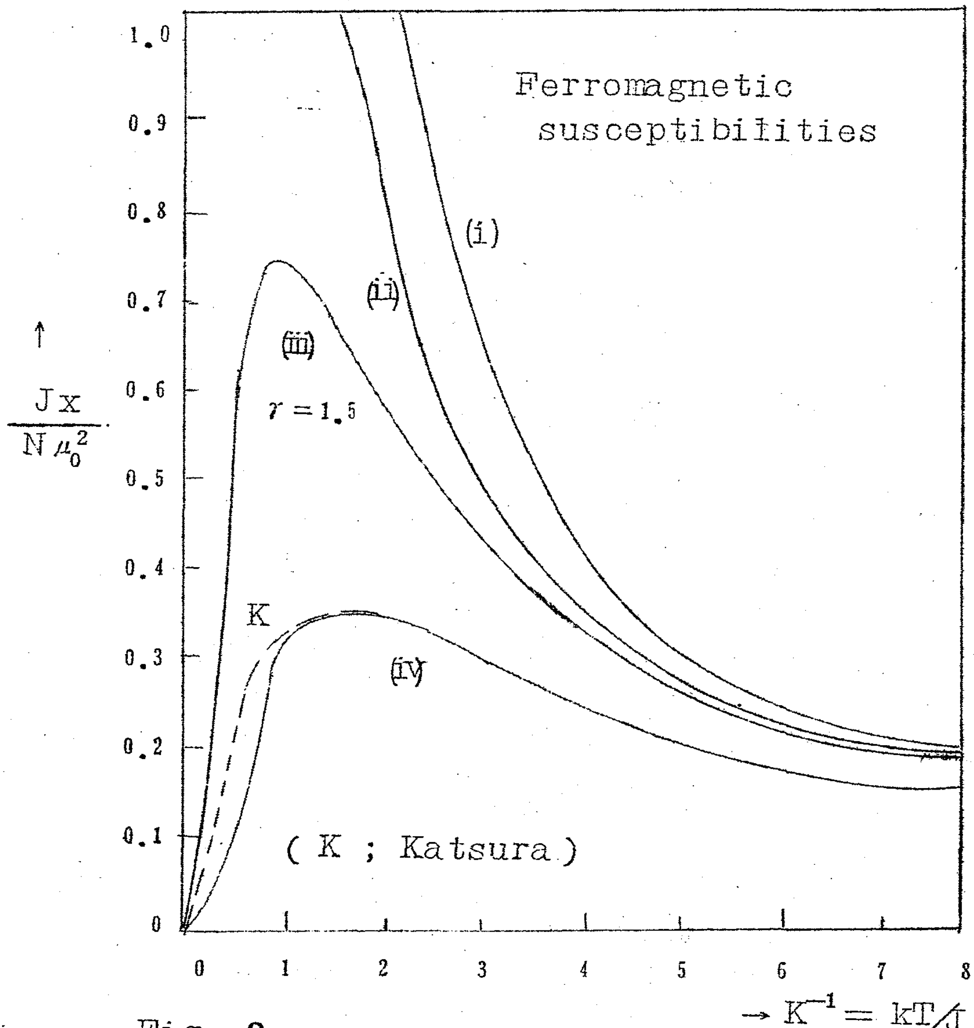


Fig. 2

3 — 2) magnetizationについて。

帯磁率の場合と全く同様にして、Ising modelの磁化Mの式で、$\tanh K \rightarrow X(K)$の置きかえを行えばよい。即ち、$\rho_S(H)$-modelの$M(H)$は

$$\boxed{M = N\mu_0(\sinh h) / \{\sinh^2 h + z_K^2\}^{\frac{1}{2}}} \tag{42}$$

但し

$$z_K = \exp(-2\alpha_z) \times \frac{\cosh(\alpha_x + \alpha_y)}{\cosh(\alpha_x - \alpha_y)} \tag{43}$$

i) $J_x = J_y = 0$, $J_z = J$ (Ising) の場合.

$$M = N\mu_0 (\sinh h)/\{\sinh^2 h + \exp(-4K)\}^{\frac{1}{2}} \tag{44}$$

ii) $J_x = J_y = J_z = J$ (isotropic case)

$$\boxed{M = N\mu_0 (\sinh h)/\{\sinh^2 h + \exp(-4K)\cosh^2 2K\}^{\frac{1}{2}}} \tag{45}$$

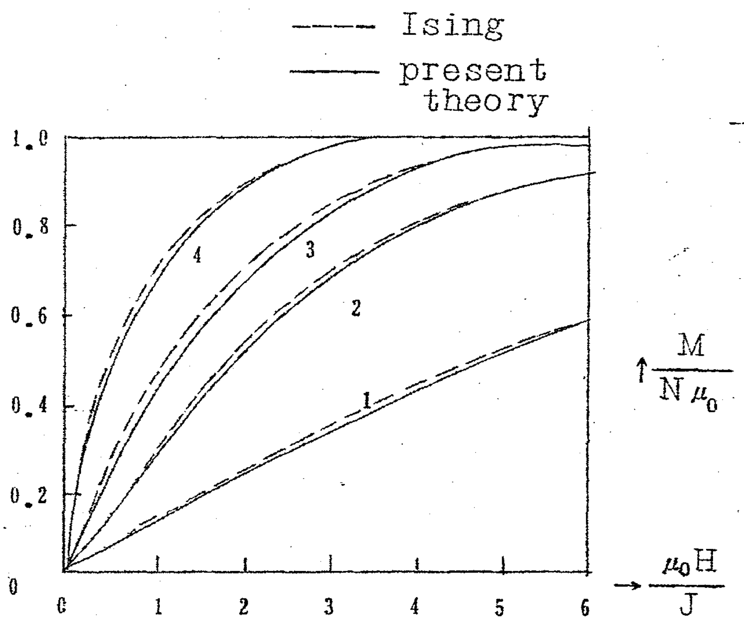
iii) $J_x = J_y = \gamma J$, $J_z = J$。

$$M = N\mu_0 (\sinh h)/\{\sinh^2 h + \exp(-4K)\cosh^2(2\gamma K)\}^{\frac{1}{2}} \tag{46}$$

iv) $J_x = J_y = J$, $J_z = 0$

$$M = N\mu_0 (\sinh h)/\{\sinh^2 h + \cosh^2(2K)\}^{\frac{1}{2}}$$

特に、isotropic case について、M−H curve を書いて、各温度で、Ising model の場合と比較するとFig.3 のようになる。



No.	$\tanh K$	kT/J
1	0.1	9.967
2	0.2	4.932
3	0.3	3.231
4	0.4	2.360

Fig.3. (Magnetization vs magnetic field)

図より、各温度で、isotropic case の方が、Ising model より、いつもほんのわずか、下になる。これは、横成分の影響で、Mが小さくなることを示している。しかし、ほとんど、一次元では、違わないことは注目に値する。

3 - 3) Anti-ferromagnetic case.

ferromagnetic case と帯磁率χ，磁化Mの式は全く同じで、ただ、$J \to -J$ に置きかえればよい。しかし、温度依存性は、全然異なる。$K = |J|/kT$ として、

i) $J_x = J_y = 0$, $J_z = J = -|J|$. (Ising)

$$\chi = \chi_0 \exp(-2K) ,$$

ii) $J_x = J_y = J_z = J$ (isotropic case).

$$\chi = \chi_0 \exp(-2K)/\cosh(2K) ,$$

iii) $J_x = J_y = rJ$, $J_z = J$.

$$\chi = \chi_0 \exp(-2K)/\cosh(2rK) ,$$

iv) $J_x = J_y = J$, $J_z = 0$.

$$\chi = \chi_0 \operatorname{sech}(2K) ,$$

いずれも、$T \to 0$で、指数関数的に零になる。この点が、ferro の場合と essencial に異なる。磁化Mもχと同様に$J \to -J$ ($K \to -K$) とすればよい。上の帯磁率を図示するとFig.4 のようになる。

もとのHeisenberg model では、一次元でも isotropic case や anisotropic case (iii) は解かれていないから、ρ_S-model の解によって、その大体の様子を知ることが出来る。特に温度Tが $T \gtrsim J/k$ では、定量的にも真実を表わしているものと思う。

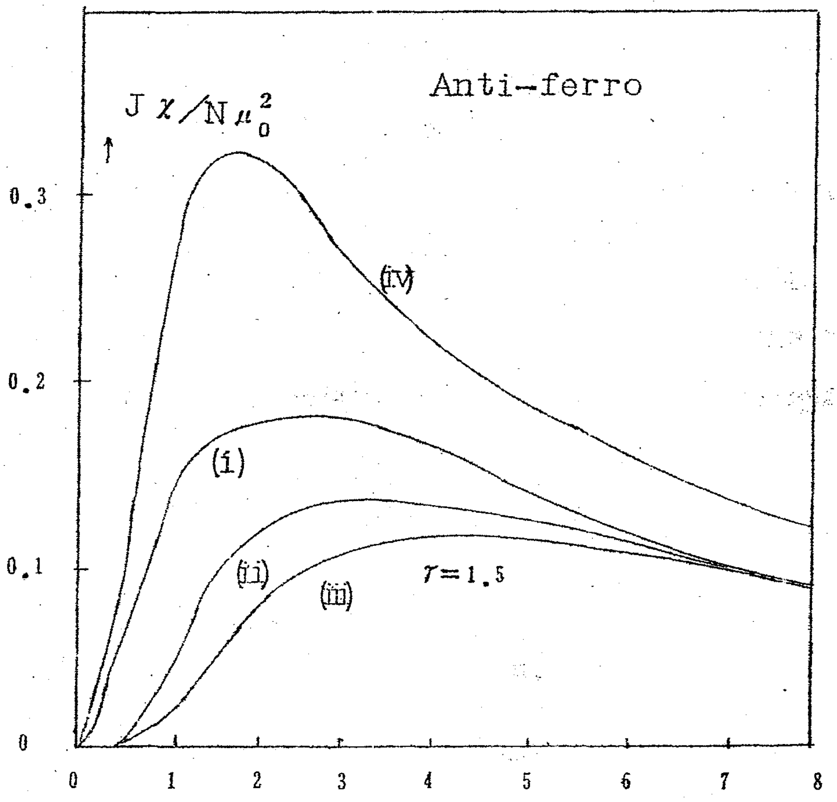


Fig. 4. $\longrightarrow kT/|J|$

§ 4. critical scattering

critical scattering の問題は、 localized model の立場では、 Elliott と Marshall によつて議論され[6]、又最近、 band theory の立場からも Izuyama, Kim, Kubo によつて議論されている[12]。ここでは、再び、 localized model の立場から、この問題を取り上げてみよう。即ち、 ρ_S-model で、 Bethe 近似を用いて、 scattering cross section を求めてみよう。磁性体に中性子をあてて起る磁気散乱は、転移点の近くになると fluctuation が大きくなる為に、急激に増加する。この critical scattering の現象は、理論的には、始め Van Hove によつて定式化された[13),14)]。即ち、散乱中性子の単位立体角と単位 energy 当りの cross section は

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \left(\frac{ge^2}{mc^2}\right)^2 \cdot \frac{k}{hk_0} |F(\mathbf{K})|^2 \sum_{\alpha\beta} (\sigma_{\alpha\beta} - e_\alpha e_\beta) \times \int \Gamma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) \exp(i(\mathbf{K}\cdot\mathbf{r} - \omega t))\, d\mathbf{r}\, dt \tag{47}$$

ここに、 $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}$ は入射及び散乱中性子の波数 vector, $\hbar\omega$ は散乱による

energy change, g(=1.91) は中性子の磁気能率，F(K) は form factor，$\mathbf{e}$ は $\mathbf{K}$ 方向の unit vector を表わす。spin の運動と、atom の thermal motion は、近似的には分離出来て、

$$\Gamma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) = \Sigma_R\, r^{\alpha\beta}(\mathbf{R}, t) G_R(\mathbf{r}, t) ,$$

$$r^{\alpha\beta}(R, t) = \langle S^{\alpha}(0, 0)\, S^{\beta}(\mathbf{R}, t) \rangle .$$

ここでは、spin operator の規格化を 1/2 とする。$G_R(\mathbf{r}, t)$ はatom の thermal motion の effect を表わす。oredered phase まで考えるには、更に、次のように置くとよい。

$$r^{\alpha\beta}(\mathbf{R}, t) = \langle S^{\alpha} \rangle \langle S^{\beta} \rangle + r'^{\alpha\beta}(\mathbf{R}, t)$$

又、thermal motion の effect G_R は、Debye-Waller factor e^{-2W} として置きかえることが出来る。更に energy transfer $\hbar\omega$ が incident energy に較べて小さければ、static な近似を使つてもよい。即ち、

$$\int \Gamma(\mathbf{r}, t) \exp(i(\mathbf{K}, \mathbf{r} - \omega t))\, dt \cong \delta(\omega) \Gamma(\mathbf{r}, 0) \exp(i\mathbf{K}, \mathbf{r})$$

以上のことから、結局critical scattering cross section を求めるには、static correlation $r'(R, 0)$ を計算すればよい。

さて、Elliott, Marshall は、Ising model に Bethe 近似を使つて次の結果を得ている。

$$(\nabla^2 - K_1^2) r'(\mathbf{R}) = 0$$

$$a^2 K_1^2 = \frac{t(1 + \lambda^2 + 2\lambda t)}{(t + \lambda)(1 + \lambda t)} \left[\frac{t + t\lambda^2 + 2\lambda}{\lambda(1 - t^2)} - z \right] \tag{48}$$

ここで、

$$t = e^{-2K} , \quad \lambda = e^{-2h} ,$$

a は unit cell の一辺の長さを表わす。

Heisenberg model の場合にも、Elliott, Marshall は、議論しているが、ここでは、ρ_S-model を使つて、static correlation $r'(R)$を調べてみよう。Bethe 近似の範囲では、容易にわかるように、ρ_S-model の$r'(R)$

は、Ising model の結果の式で、tanhK を x(K) に置きかえればよい。即ち、(48)式の t を次のように置きかえればよい。

$$t = e^{-2K} = (1 - \tanh K)/(1 + \tanh K)$$

より

$$t \to t' = \frac{1 - x(K)}{1 + x(K)} = \frac{\cosh 2K}{\exp(2K)} = \frac{1}{2}(1 + t^2) \tag{49}$$

依つて、$r'_{zz}(R)$ に対応する K_{1z} は、

$$a^2 K_{1z}^2 = \frac{2(1+t^2)[1+\lambda^2+\lambda(1+t^2)]}{(1+t^2+2\lambda)[2+\lambda(1+t^2)]} \times \left\{ \frac{2[(1+t^2)(1+\lambda^2)+4\lambda]}{\lambda(1-t^2)(3+t^2)} - z \right\} \tag{50}$$

尚、横成分の correlation $r'_{xx}(R)$, $r'_{yy}(R)$ に対応する $K_{1x}(=K_{1y})$ は、この方法では、求まらない。改めて考えねばならず、これは、今後に残された問題である。Elliott 達は、これも議論しているが、問題点があるようだ。たて成分については (50)式と全く一致している。それは、Elliott 達は、constant coupling 近似を用いて議論しているので、ρ_s-model の Bethe 近似と、今の場合、内容が等価だからである。しかし、ρ_s-modelで上のようにして出す方が、すつきりしているように思われる。

§5. parameter x による展開

今まで、ρ_s-model を使つて、いろいろ議論して来たが、厳密に解けたのは最とも一般の一次元model（外場のある場合）だけであつた。二次元，三次元 model では、Bethe 近似を用いて、議論した。更に近似を上げる方法もいろいろと考えられる。例えば、Bethe 近似を改良する方向としては、base にとるcluster を、もつと大きくとり、effective field も何種類かにふやす方法もある。一般に、こうした方法では、近似を上げるに従つて、Curie 点が下り、真実の値に近づくようになると思われる。又その他の熱力学的な量も、Tc から、ある t_1 以上離れた温度領域では、正確な値に非常に近く、近似を上げるたびに、t_1 が小さくなる。しかし t_1 よりも内側の Tc のごく近傍の数学的な性質（即ちsingularity）は、いくら近似を上げて行つても、有限の cluster である限り、分子場と本質的に同じである。或る意味で完全に、全て

の大きさの cluster を計算しなければ、正しい singularity は得られない。

そこで、この転移点近傍の singularity を調べるのに有効な方法として、最近、Padé 近似がよく使われるようになつてきた。これは、Free energy 比熱，帯磁率等を、ある parameter の級数展開によつて、最初の何項かを exact に求め、それを有理式で近似し、その Pole と留数から、もとの関数の singularity を推論する方法である。この方法には、大きな仮定がある。それは、問題にしている熱力学的量は real 軸上に singularity をもつという前提である。しかし、今の段階では、singularity を予想する最も有効な方法であると思われる。普通、展開 parameter としては、Heisenberg model では、J/kT が用いられる。即ち高温展開である。ρ_s-model の立場では、parameter x を用いることになる。これも、本質的には高温展開である。そこで、pair-product model で、展開式を作る際必要になる一般的な性質を調べてみよう。

(i) 状態和に現れる diagram。(no field の case)

状態和 Z は、

$$Z = \mathrm{Tr}\,\rho_s = a^{Np}\cdot\mathrm{Tr}\,\{\prod_{\text{pair}}(1 + x\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j)\}_{\text{sym}} \tag{51}$$

これを parameter x について展開すると、Ising model と非常に良く似た diagram になる。しかし、Heisenberg interaction の特長が随所に現われるから注意を要する。即ち、Heisenberg model の高温展開に対する graph[15] と共通な theorem が多い。pair-product model に対する展開の作り方の手続きを要約すると次のようになる。

a) 同じ辺は繰り返さずに、n-line から成る全ての diagram を書く。但し、open line のある diagram や improper diagram (single line を cut して二つの部分に分かれるもの) は除く (これらの diagram の trace は零になる)

b) それぞれの diagram に対応して、spin variable のあらゆる組み合せ (順席) の product を作り、trace をとり、それを組み合せの数で割つて、それを、その diagram の値とする。

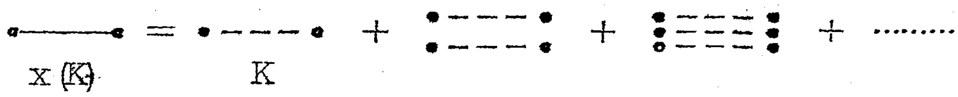
c) 各 diagram が、lattice 上に何個現れるかを数えて、その diagram

の値に倍数を行ない、総和をとる。

注 1) b) のところで、自分自身で cross しない diagram (ring diagram) は、どんな順序の product も trace をとると同じ値になるから、結局 $x^n \mathrm{Tr}(S_1 \cdot S_2)(S_2 \cdot S_3) \cdots (S_n \cdot S_1) = 3x^n \mathrm{Tr}\, I$ となる。

注 2) each line には、x (K)を対応させる。

注 3) Heisenberg model の高温展開では、同じ line を重複して持つ graph が無数に現れるが、pair-product model では、single-line による diagram しか現れないので、この点が、計算を非常に簡単化している。これは、言わば、ρ_S -model の single line は、Heisenberg model の展開に現れる K の line が無数に加え合わされた renormalize されたものになっているからである。即ち、



以上に議論した diagram の具体例を書くと、

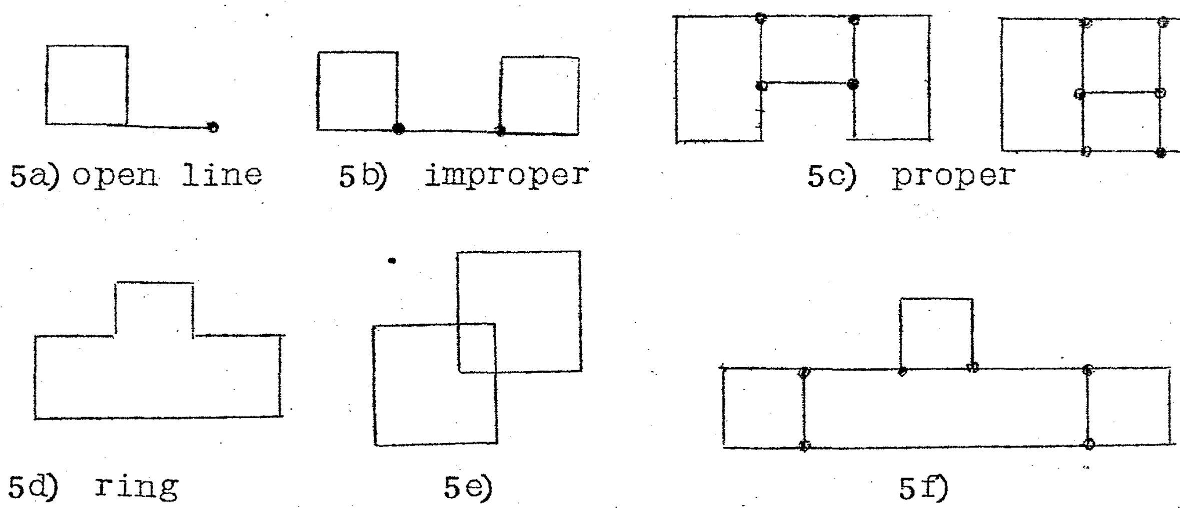


Fig. 5.

結局、5c), 5d), 5e), 5f) のような diagram の sum をすればよい。

(ii) 帯磁率の diagram.

energy や帯磁率は correlation がわかれば求まる。即ち、correlation $\ll S_i^z S_j^z \gg$ は

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{\ll S_i^z S_j^z \gg}{\ll 1 \gg} = \ll S_i^z S_j^z \gg_{\text{linked}} \tag{52}$$

(言わば、vacuum diagram は分子，分母 cancel する。)

(52)の diagram は(i)と同様にして作れる。具体例を例を書くと下のようになる。

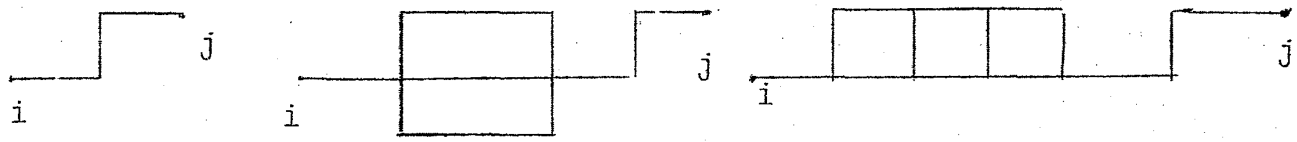


Fig. 6.

各次元の各 lattice についての diagram の計算とそれを用いた Padé 近似による singularity の研究は、次回に譲りたいと思う。

〔訂正〕この前の paper II の(35)式には、書き落しがあつたので、次の項を更につけ加える必要がある。

$$+2\sum_{\substack{x,y,z\\ \text{cyclic}}} \frac{J_xJ_y}{kT^2}\tanh\alpha_z \times \frac{\{1-\tanh^2\alpha_x\tanh^2\alpha_y+(\tanh^2\alpha_x+\tanh^2\alpha_y-2)\tanh\alpha_x\tanh\alpha_y\tanh\alpha_z\}}{(1-\tanh\alpha_x\tanh\alpha_y\tanh\alpha_z)^2}$$

最後に、御指導を下さつた久保先生に感謝致します。特に、critical scattering の問題は、久保先生から suggest されたものである。又、岡大の万成さん，川端さん，更に久保研の皆様には、有意義な discussion を戴き、感謝致します。

References

1) M. Suzuki, Bussei Kenkyu 3 (1965), 317.
2) M. Suzuki, Bussei Kenkyu 4 (1965), 1.
3) M. Suzuki, Bussei Kenkyu 4 (1965), 171.
4) M. Suzuki, Bussei Kenkyu 4 (1965), no.4.
5) J. Van Kranendonk and P.W. Kasteleijn, Physica 22 (1956), 317.
6) R.J. Elliott and W. Marshall, Rev. Mod. Phys. 30 (1958) 75.

7) U. Firgau, Ann. Physik 40 (1941), 295.
8) P.R. Weiss, Phys. Rev. 74 (1948), 1493.
9) C. Domb, Advances in Physics 9 (1960), 149.
10) R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 17 (1962), 1100.
11) S. Katsura, Phys. Rev. 127 (1962), 1508.
12) T. Izuyama, D.J. Kim, R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 18 (1963) 1025.
13) L. Van Hove, Phys. Rev. 93 (1954), 202.
14) L. Van Hove, Phys. Rev. 93 (1954), 1374.
15) G.S. Rushbrooke, P.J. Wood, Mod. Phys. 1 (1958), 257.