分子場のゆらぎを考慮した Heisenbergスピン系の相転移

愛知教育大学　間々田博司

§0. はじめに

数年前，筆者らは分子場の分布をかなり直接的に考慮にいれた型でIsing系の相転移に関する近似理論[1]を提示した。そのもっとも簡単な第一近似においても，不充分ながら，Short range order を考慮しているためと思われるが，Weiss近似を越えBethe近似にかなり近いT_cの値を得ている。分子場の分布を求める試みは古くはMarshall[2]等の理論から，また最近でも，Amorphous magnetism またはSpin glassといった問題との関係から，様々の議論[3]がなされているようである。我々の近似理論は，これらの問題についても応用可能であるように思われるが，一種のアンサンブルでの平均に関して，何らかの明確なよりどころが，今のところ見つかっていない。このため，ここでは単純に我々の近似理論をHeisenberg スピン系に応用することを考え，我々の近似理論の意味を考えること，と同時にその応用の可能性をさぐってみたい。特に計算の便宜上Heisenberg 模型の特徴を失わず，かつその計算が単純である$S=\frac{1}{2}$の場合を論じてみることにする。

§1. 分子場と有効ハミルトニアン

$S=\frac{1}{2}$のHeisenberg系で最隣接相互作用だけを考慮することにすると，そのハミルトニアンは，

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2}\sum_{<i,j>}\phi_i\cdot\phi_j - \sum_i \mathbf{H}_0\cdot\phi_i \qquad (1)$$

J．は交換相互作用，ϕ_i は i−site のパウリのスピン行列，$\mathbf{H}_0$ は適当な次元で考えた外部磁場である。また，$<i,j>$ は最隣接格子点での和を意味する。Ising 系での第一近似に対応して，i−site のスピンに対する有効ハミルトニアンを

$$\mathcal{H}_{\mathrm{eff}} = -\mathbf{H}\cdot\phi_i \tag{2}$$

ととることにし，$\mathbf{H}$ を外場を含めた有効磁場（分子場）とする。このハミルトニアンから i－スピンに対する密度行列は，有効磁場 $\mathbf{H}$ のもとで，

$$\rho_{\mathbf{H}}(\phi_i) = e^{-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{eff}}}/T_r\ e^{-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{eff}}}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{1 + \frac{\phi\cdot\mathbf{H}}{H}\tanh\beta H\right\} \tag{3}$$

で与えられる。但し，$|\mathbf{H}| = H$ である。

ここで，$\mathbf{H}$ の分布関数が厳密に知られていれば，その分布関数 $P(\mathbf{H})$ で平均して，一体の密度行列は厳密に

$$\rho(\phi_i) = \int d\mathbf{H}\ P(\mathbf{H})\ \rho_{\mathbf{H}}(\phi_i)$$

$$= \frac{1}{2}\left\{1 + \mathbf{X}\cdot\phi_i\right\} \tag{4}$$

で与えられる。ここで，$\mathbf{X}$ は，

$$\mathbf{X} = \left\langle\frac{\mathbf{H}}{H}\tanh\beta H\right\rangle = \int d\mathbf{H}\frac{\mathbf{H}}{H}\tanh\beta H\cdot P(\mathbf{H}) \tag{5}$$

で定義されている。ϕ_i の期待値は

$$\bar{\phi}_i = T_r\left[\phi_i\ \rho(\phi_i)\right] = \mathbf{X} \tag{6}$$

で与えられ，$\mathbf{X}$ は order parameter と考えられる。以上の式は，分子場の分布 $P(\mathbf{H})$ が厳密に与えられていれば，一応厳密と考えて良いものである。

§ 2. 分子場の分布関数

さて，分子場の分布関数 $P(\mathbf{H})$ を求めるために，最隣接の z 個のスピン集団の密度行列を知る必要がある。なんとなれば，$\mathbf{H}$ は z 個のスピン状態によって決まるはずのものだからである。z 個のスピン集団の密度行列は，$\mathbf{X}$ 以外に多くのパラメーターを含む

ため，最終的に閉じた代数方程式の組を作るのが困難なため，Ising系での第一近似に対応して，最隣接 z－スピン系の密度行列を，一体の密度行列の積で近似すると，分布関数 P(H) は，(1)，(2) 式の対応から，

$$P(\mathbf{H}) = T_r\left[\delta\left(H-\frac{J}{2}\sum_{j}^{z}\phi_j-H_0\right)\prod_{j=1}^{z}\rho(\phi_j)\right] \tag{7}$$

で与えられる。ここで

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{H}\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{H}}P(\mathbf{H}) \tag{8}$$

で特性関数を定義すれば，(3) 式より

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = T_r\left(\prod_{j=1}^{z} e^{-i\frac{J}{2}\mathbf{k}\cdot\phi_j}\rho(\phi_j)\right)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{H}_0}$$

$$= e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{H}_0}\left[\cos\frac{J}{2}k-i\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{X}}{k}\sin\frac{J}{2}k\right]^z \tag{9}$$

を得る。逆変換して，

$$P(\mathbf{H}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}\ e^{i\mathbf{k}(\mathbf{H}-\mathbf{H}_0)}\left[\cos\frac{J}{2}k-i\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{X}}{k}\sin\frac{J}{2}k\right]^z \tag{10}$$

を得る。

(10) 式は Ising 系の場合，一次元の積分であるから厳密に積分出来て，分布関数は単純に δ－関数の和で書けたが，いまの場合はかなり複雑な積分となる。外場 $\mathbf{H}_0$ が加えられていさえすれば，$\mathbf{X}$ は $\mathbf{H}_0$ に平行であるから，(10) 式は $\mathbf{H}-\mathbf{H}_0$ を極軸とした積分で，次のように書ける。

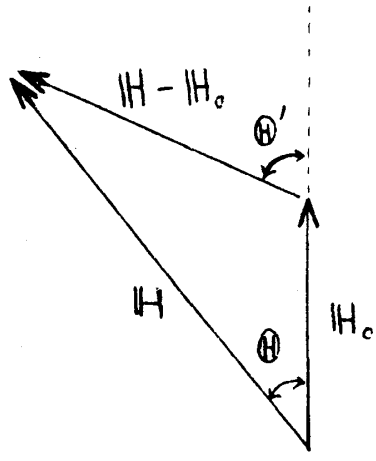

図　1.

$$P(\mathbf{H}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint k^2 \sin\theta \, dk \, d\theta \, d\varphi \, e^{ikK\cos\theta}$$
$$\times \left\{\cos\frac{J}{2}k - iX\,(\cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos\varphi)\sin\frac{J}{2}k\right\}^z \qquad (11)$$

但し，$K = |\mathbf{H}-\mathbf{H}_0| = (H^2+H_0^2-2H\,H_0\cos\theta)^{1/2}$ であり，また，図からわかるように θ は $\mathbf{H}$ と $\mathbf{H}_0$ $(\mathbf{X})$ との成す角で，θ' は $\mathbf{H}-\mathbf{H}_0$ と $\mathbf{H}_0$ の成す角である。(11) 式の積分は正確に行うのが難しいため，とりあえず T_c を求めることを目的として，X の展開で満足することにする。計算は単純ではあるが，かなり長くなるため，結果だけを書くと，例えば，$z=2$ に対して，

$$P(\mathbf{H}) = -\frac{1}{4\pi K}\frac{d}{dK}\left[\delta(K)+\frac{1}{2}\delta(K+J)+\frac{1}{2}\delta(K-J)\right]$$
$$+ X\cos\theta'\cdot\frac{1}{4\pi}\frac{d}{dK}\left[\frac{1}{K}\{\delta(K+J)-\delta(K-J)\}\right]$$
$$+ X^2\left\{\cos^2\theta'\cdot\frac{1}{16\pi}\frac{d^2}{dK^2}\left[\frac{1}{K}(2O(K)-O(K+J)-O(K-J))\right]\right.$$
$$\left.+\sin^2\theta'\frac{1}{16\pi}\frac{1}{K}\frac{d}{dK}\left[\frac{1}{K}(2O(K)-O(K+J)-O(K-J)\right]\right\} \qquad (13)$$

同様に，$z=4$ に対して，

$$P(\mathbf{H}) = -\frac{1}{4\pi K}\frac{d}{dK}\left[\frac{3}{4}\delta(K)+\frac{1}{2}\{\delta(K+J)+\delta(K-J)\}\right.$$
$$\left.+\frac{1}{8}\{\delta(K+2J)+\delta(K-2J)\}\right]$$
$$+ X\cos\theta'\cdot\frac{4}{16\pi}\frac{d}{dK}\left[\frac{\delta(K+J)-\delta(K-J)}{K}+\frac{\delta(K+2J)-\delta(K-2J)}{2K}\right]$$
$$+ X^2\left\{\frac{3\cos^2\theta'}{32\pi}\frac{d^2}{dK^2}\left[\frac{2O(K)-O(K+J)-O(K-J)}{K}\right]\right.$$
$$\left.+\frac{\sin^2\theta'}{64\pi}\frac{1}{K}\frac{d}{dK}\left[\frac{2O(K)-O(K+J)-O(K-J)}{K}\right]\right\} \qquad (14)$$
$$+ O(X^3)$$

但し，O は階段関数である。他の z の値に対しても同様に計算出来るが，非常に長い式となるため，ここには書かないことにする。また，X^3 以上の項も必要ではあるが，一応略しておく。

§3. Curie 温度

このようにして得られた分子場の分布関数 $P(\mathbf{H})$ を用いると，order parameter の大きさ $X=|\mathbf{X}|$ は (5) 式を用いて，

$$X = \int \cos\theta \tanh \beta H\, P(\mathbf{H})\, H^2 \sin\theta \, dH \, d\theta \, d\Phi$$

$$= 2\pi \int_0^{\infty} dH \int_{|H-H_0|}^{H+H_0} K\, dK \frac{H^2+H_0^2-K^2}{2H_0^2} \tanh \beta H \cdot P(\mathbf{H}) \qquad (15)$$

から計算される。積分の書き換えには (12) 式が用いられ，θ に関する積分はKの積分で表現されている。(15) 式は，それぞれの z の値に対して具体的に次のように書くことができる。$z=2$ のとき

$$X = \frac{1}{2H_0}\{H_0 \tanh \beta H_0 + \frac{1}{2}(J-H_0)\tanh\beta(J-H_0) + \frac{1}{2}(J+H_0)\tanh\beta(J+H_0)\}$$

$$- \frac{J}{4H_0^2} \int_{J-H_0}^{J+H_0} \tanh \beta H \cdot dH$$

$$+ X\cdot\Big[\frac{1}{2H_0}\{(J+H_0)\tanh\beta(J+H_0) - (J-H_0)\tanh\beta(J-H_0)\}$$

$$- \frac{1}{2H_0^3} \int_{J-H_0}^{J+H_0} (H^2-J^2)\tanh\beta H\, dH\Big]$$

$$+ O(X^2) \qquad (16)$$

$z=4$ のとき

$$X = \frac{1}{2H_0}\left\{\frac{3}{4}H_0 \tanh \beta H_0 + \frac{1}{2}(J-H_0)\tanh \beta (J-H_0) + \frac{1}{2}(J+H_0)\tanh \beta (J+H_0)\right.$$

$$\left. + \frac{1}{8}(2J-H_0)\tanh \beta (2J-H_0) + \frac{1}{8}(2J+H_0)\tanh \beta (2J+H_0)\right\}$$

$$- \frac{J}{4H_0^2}\int_{J-H_0}^{J+H_0} \tanh \beta H \ dH - \frac{2J}{16H_0^2}\int_{2J-H_0}^{2J+H_0} \tanh \beta H \ dH$$

$$+ X\left[\frac{1}{2H_0}\left\{(J+H_0)\tanh \beta (J+H_0) - (J-H_0)\tanh \beta (J-H_0)\right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{1}{2}(2J+H_0)\tanh \beta (2J+H_0) - \frac{1}{2}(2J-H_0)\tan \beta (2J-H_0)\right\}\right.$$

$$\left. - \frac{1}{2H_0^3}\int_{J-H_0}^{J+H_0} (H^2-J^2)\tanh \beta H \cdot dH - \frac{1}{4H_0^3}\int_{2J-H_0}^{2J+H_0} \left[H^2-(2J)^2\right]\tanh \beta H \cdot dH\right]$$

$$+ \ O(X^2) \qquad (17)$$

$z=6$，8，12 等も類似の表現を得ることができる。ここで，外部磁場 $H_0 \to 0$ の極限を考えると，X の偶数次の項は zero になることがわかり，Curie 温度 T_C を求める表式は，(16) (17) 式等の右辺，X の一次の係数が 1 に等しくなるという式から求まる。すなわち，$z=2$ に対して，

$$1 = \lim_{H_0 \to 0}\left[\frac{1}{2H_0}\left\{(J+H_0)\tanh \beta_c (J+H_0) - (J-H_0)\tanh \beta_c (J-H_0)\right.\right.$$

$$\left.\left. - \frac{1}{2H_0^3}\int_{J-H_0}^{J+H_0} (H^2-J^2)\tanh \beta_c H \ dH\right]\right.$$

よって，

$$1 = \frac{2}{3}\tanh \beta_c J + \frac{1}{3}\frac{\beta_c J}{\cosh^2 \beta_c J} \qquad (18)$$

を得る。同様に，他の z に対しても以下の式を導くことが出来る。

$$1 = \left[\frac{2}{3}\tanh \beta_c J + \frac{1}{3}\frac{\beta_c J}{\cosh^2 \beta_c J}\right] + \frac{1}{2}\left[\frac{2}{3}\tanh 2\beta_c J + \frac{1}{3}\frac{2\beta_c J}{\cosh^2 2\beta_c J}\right]$$

（z＝4 のとき） (19)

$$1 = \frac{15}{16}\left[\frac{2}{3}\tanh \beta_c J + \frac{1}{3}\frac{\beta_c J}{\cosh^2 \beta_c J}\right] + \frac{3}{4}\left[\frac{2}{3}\tanh 2\beta_c J + \frac{1}{3}\frac{2\beta_c J}{\cosh^2 2\beta_c J}\right]$$

$$+ \frac{3}{16}\left[\frac{2}{3}\tanh 3\beta_c J + \frac{1}{3}\frac{3\beta_c J}{\cosh^2 3\beta_c J}\right] \quad (z=6) \tag{20}$$

$$1 = \frac{7}{8}\left[\frac{2}{3}\tanh \beta_c J + \frac{1}{3}\frac{\beta_c J}{\cosh^2 \beta_c J}\right] + \frac{7}{8}\left[\frac{2}{3}\tanh 2\beta_c J + \frac{1}{3}\frac{2\beta_c J}{\cosh^2 2\beta_c J}\right]$$

$$+ \frac{3}{8}\left[\frac{2}{3}\tanh 3\beta_c J + \frac{1}{3}\frac{3\beta_c J}{\cosh^2 3\beta_c J}\right] + \frac{1}{16}\left[\frac{2}{3}\tanh 4\beta_c J + \frac{1}{3}\frac{4\beta_c J}{\cosh^2 4\beta_c J}\right]$$

（z＝8） (21)

といった式が得られる。これらの式を同様な近似で得られたIsing系でのT_cをきめる式[1]

$$1 = \frac{1}{2^z}\sum_{n=0}^{z}\binom{z}{n}(z-2n)\tanh\left(\frac{z-2n}{2}\beta_c J\right) \quad (\text{Ising}) \tag{22}$$

と比較すると，Ising系での $\tanh x$ を $\frac{2}{3}\tanh x + \frac{1}{3}\frac{x}{\cosh^2 x}$ の如く置き換えれば良いという単純な対応関係が成り立っていることがわかる。この理由がどこにあるのかは良くわからない。(14)(15) …… 式から得られるT_cは他の近似理論の結果とともに表にしておく。[4]

表　$\beta_c J = J/kT_c$ の値

z	2	4	6	8	12
分子場理論	1.00	0.500	0.333	0.250	0.167
Bethe-Peierls-Weiss の理論	×	∞	0.540	0.344	—
constant coupling 近似	×	∞	0.549	0.347	0.203
Present	×	1.048	0.472	0.318	0.194

ここで得られるT_cの値は，Bethe–Peierls–Weiss または constant coupling の近似に非常に近いが，やや高めである。これは我々の近似では short range order が不充分にしか取り入れられていないことが原因と思われる。また，$z=4$（二次元，$z=3$ でも同様）でT_cを持ってしまうという欠点も持っている。[4] これも同じことが原因と思われる。さらに，$z=4$（$z=3$も同様）では$T=0$がいわゆる anti–curie point の困難を表わしており，この近似が低温であまり良い結果を与えていない可能性を示している。

念のため$T\to 0$での order parameter Xの値を求めてみると，(5) 式に (10) 式を直接代入し，Hで先に積分すると，$T=0$でのX に対する代数方程式が得られる。（計算は Appendix）

$z=4$ に対して，

$$X = X - \frac{1}{5}X^3 \quad より \quad X(T=0)=0 \tag{23}$$

$z=6$ に対して，

$$X = \frac{5}{4}X - \frac{X^3}{2} + \frac{3}{28}X^5 \quad より \quad X(T=0) \fallingdotseq 0.755$$

$z=8$ に対して　　$X(T=0)=0.843$

$z=12$ に対して　　$X(T=0)=0.906$ (24)

等の値を得る。$T=0$ では本来$X=1$ が期待されるわけであるから，ここの結果は相当によくないわけである。同様な困難は constant coupling 近似においても存在する[4]が程度はづっと良い。我々の近似の悪さは，低温で特に重要となる相互作用の量子力学的な効果がかなり乱暴に扱われている点に原因があると思われる。例えば，H を演算子とみたとき，$[H_x, H_y]=2iJH_z$ と云った交換関係を満たすはずであるが，この関係は理論の中には取り入れられていない。

§4. 分子場の分布についての近似

この近似の範囲内で，ランダムな Heisenberg スピン系の critical concentration を求めるのは，Ising 系[1]における場合と同様に取り扱われる。最隣接に n 個のスピンがある場合の H の分布を $P^{(n)}(H)$ と書き，z 個の site に n 個のスピンがくる確率 $Q_n=$

$\binom{z}{n} p^n (1-p)^{z-n}$ （但し，p は磁性イオンの濃度）であるから，分子場の分布 $P(\mathbf{H})$ は，

$$P(\mathbf{H}) = \sum_{n=0}^{z} Q_n \, P^{(n)}(\mathbf{H}) \tag{25}$$

で与えられ，前節までの結果および，Appendix より，$H_0 \to 0$，$T \to 0$ のとき，order parameter X は

$$X = \sum_{n=0}^{z} Q_n \cdot X \cdot \sum_{m=0}^{\left[\frac{z-1}{2}\right]} (-X^2)^m \frac{2}{2m+3} \binom{n}{2m+1} \frac{(2m-1)!!\,(2\left[\frac{n}{2}\right]-2m-1)!!}{(2\cdot\left[\frac{n}{2}\right])!!} \tag{26}$$

から求められる。但し，$\ell!! = \ell\cdot\ell-2\cdot\ell-4\cdot\cdots\cdots$ であり，また $\left[\frac{n}{2}\right]$ は $\frac{n}{2}$ の整数部分を示している。

critical concentration は

$$1 = \sum_{n=0}^{z} \binom{z}{n} p_c^n (1-p_c)^{z-n} \cdot \frac{2}{3} \cdot n \cdot \frac{(2\left[\frac{n}{2}\right]-1)!!}{(2\left[\frac{n}{2}\right]J)!!} \tag{27}$$

から求められる。しかし前節でみたように，$T \to 0$ でこの近似はあまり良くないようなので，結果はここではぶくことにする。

これだけではあまり発展性はないようであるが，前書きにしるしたように，弱い長距離相互作用をもつ希薄な磁性合金系などには，まだ応用出来る可能性はあるように思う。そこでまとめの意味でその可能性をみることにする。まず最隣接相互作用の場合について，(10) 式より分子場の分布関数 $P(\mathbf{H})$ は次の特性関数の Fourier 変換で与えられる。特性関数 $\hat{P}(\mathbf{k})$ は

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = \left(\cos\frac{Jk}{2} - i\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{X}}{k}\sin\frac{Jk}{2}\right)^z$$

で与えられる。$|\mathbf{k}|$ の展開で近似して，

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = \exp\left\{ z \cdot \log\left(\cos\frac{Jk}{2} - i\,\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{X}}{k}\sin\frac{Jk}{2}\right)\right\}$$

$$\simeq \exp\left\{-i\,\frac{Jz}{2}\mathbf{X}\cdot\mathbf{k} - \frac{zJ^2}{8}\left[k^2-(\mathbf{X}\cdot\mathbf{k})^2\right]\right\}$$

の表現を用いれば，$P(\mathbf{H})$ は

$$P(\mathbf{H}) = \left(\frac{2}{\pi z J^2}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{1-X^2}}\exp\left\{-2\,\frac{H_x^2+H_y^2}{zJ^2} - \frac{2\left(H_z-H_0-\frac{Jz}{2}X\right)^2}{zJ^2}\right\} \quad (28)$$

対応する Ising 系について $P(H)$ は

$$P(H) = \left[\frac{2}{\pi z J^2(1-X^2)}\right]^{1/2}\exp\left\{-2\,\frac{\left(H-H_0-\frac{Jz}{2}X\right)^2}{zJ^2}\right\} \quad (29)$$

を得る。この分布からは，分子場近似と同じ T_c が得られ，簡単な手続きで分子場のゆらぎがとり入れられることがわかる。次に，Ising 系の特性関数は k の周期関数であることを考慮すると，Ising 系の $P(H)$ は

$$P(H) = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\frac{4\pi}{J}(H-H_0)} \times \int_{-\frac{2\pi}{J}}^{\frac{2\pi}{J}} \hat{P}(k)\, e^{ik(H-H_0)}\, dk$$

と書くことが出来る。n の和は $H-H_0$ が $J/2$ の整数倍のときを除いて zero であり，δー関数の和でおきかえても良いから，

$$P(H) = \mathcal{N}\sum_{(m)}\delta\left(H-H_0-\frac{J}{2}m\right)\int_{-\frac{2\pi}{J}}^{\frac{2\pi}{J}}\hat{P}(k)\, e^{ik(H-H_0)}\, dk \quad (30)$$

$\mathcal{N}$ は規格化の定数であり，m についての和は，物理的にゆるされる値だけにかぎるべきである。すなわち，$m = z, z-2, \cdots\cdots -z$ である。さらに，$\exp\left[-\frac{z}{8}(1-X^2)J^2\cdot\left(\frac{2\pi}{J}\right)^2\right] = \exp\left[-\frac{z}{2}(1-X^2)\right]$ が充分小さいとき，すなわち，z が大きく，X が 1 に近すぎないときは，(29) 式と同様な Gauss 積分で近似できて，

$$P(H) = \mathcal{N} \sum_{(m)} \exp\left[-\frac{(m-zX)^2}{2z(1-X^2)}\right] \cdot \delta\left(H-H_0-\frac{J}{2}m\right)$$

(Ising) (31)

が得られる。厳密な計算と較べて，δ－関数の係数が二項係数から誤差関数におきかわっていることがわかる。Heisenberg系でも類似な計算は可能であろう。

最後に，長距離相互作用を持つランダムなスピン系を考えてみる。我々の近似法をそのまま応用すれば，i－siteにあるスピンに作用する分子場$\mathbf{H}_i$は

$$P(\mathbf{H}_i) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{H}_i-\mathbf{H}_0)}\, \hat{P}(\mathbf{k})$$

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = \prod_j{}' \left(\cos J_{ij}k - i\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{X}}{k}\sin J_{ij}k\right) \qquad (32)$$

の分布にしたがう。J_{ij}はi，j site間の相互作用でありΠ'は磁性イオンのあるsiteに関する積とする。ここで，$\hat{P}(\mathbf{k}) = \exp\left[\log \hat{P}(\mathbf{k})\right]$としてkの展開をすれば，(28)(29)と同様に分る場近似を表わす単純なGauss分布が得られる。しかし，この立場はk～0で正しい。すなわちHが充分大きいときの型をきめていると考えねばならない。通常，今の問題においては，Hが小さい時の型が興味の対称となっている。$k\to\infty$での漸近型を問題にしなければならない。いま，$\mathbf{H}_0=0$とし，long range orderもないとすると，

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = \exp\left\{\sum_j{}' \log\left(\cos J_{ij}k\right)\right\} \qquad (33)$$

と書ける。$J_{ij} = \alpha/r_{ij}^3$を仮定し，cを濃度とすると，ランダム系について，(33)の｛　｝内は，

$$\sum_j{}' \log\left(\cos\frac{\alpha k}{r_{ij}^3}\right) = c\sum_j \log\left(\cos\frac{\alpha k}{r_{ij}^3}\right)$$

$$= \frac{c}{\Omega}\int_a^\infty 4\pi r^2\, dr \cdot \log\cdot\cos(\alpha k/r^3)$$

と書ける。ここでΩは分子体積，$a^3 \sim \Omega$ と考えておく。これから

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = \exp\left\{\frac{4\pi c}{\Omega}\int_0^{\infty} \log\cos(\alpha k\, x)\ \frac{dx}{x^2}\right\}$$

となる。但し，上限は$\frac{1}{\Omega}$程度を∞ととった。積分は

$$\int_0^{\infty} \frac{\log(\cos\alpha k\, x)}{x^2} = -\frac{\log(\cos\alpha k\, x)}{x}\Big|_0^{\infty} - d\mathbf{k}\,\Big|\int_0^{\infty}\frac{\tan\alpha k\, x}{x}\,dx$$

$$= -\alpha|k|\int_0^{\infty}\frac{\tan x}{x}\,dx$$

と書くことが出来，最後の積分は主値積分の意味で有限となり，1の程度の数値で与えられる。すなわち，$\hat{P}(\mathbf{k})$ は，

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = \exp\left\{-\frac{4\pi c}{\Omega}A\cdot|k|\right\}$$

と書いて良い。これをFourier変換して，

$$P(H) = \frac{1}{\pi}\frac{\triangle}{H^2+\triangle^2} \qquad \text{(Ising)}$$

また (34)

$$P(\mathbf{H}) = \frac{1}{\pi^2}\frac{\triangle}{(H^2+\triangle^2)^2} \qquad \left(\text{Heisenberg. } s=\frac{1}{2}\right)$$

が得られる。但し，$\triangle = \frac{4\pi\alpha}{\Omega}Ac$ で与えられ，濃度 c に比例する。(34) から

$$P(H=0) \propto \frac{1}{c} \qquad \text{(Ising)}$$

$$P(H_z=0) \propto \frac{1}{c} \qquad \text{(Heisenberg)}$$

が得られ，Marshall の示唆した型を得ることが出来る。類似な表現は，Rivier and Adkins 等[5]によっても導かれている。我々の導出根拠が単純であるため，すっきりしているような気がする。

spin glass 等の問題に対しては交換積分 J が様々の値をとり得ると考えられる。そ

の場合Jの値により，localなorder parameter **X** はかならずしもゼロではなくなり，さまざまな大きさ，方向を持つであろう。この場合，どの段階でJの平均を考え，また，同時に **X** の平均の手続きをどのように行なうか，等々，不確定な要素が多いため，今のところこれらの問題への応用はうまくいっていない。

参考文献

1) 間々田・高野，物性研究，第8巻，第3号，181ページ

2) W. Marshall, Phys. Rev. **118**, 1520 (1960)
M. Klein and R. Brout, Phys. Rev. **132**, 2412 (1963)
M. Klein, Phys. Rev. **173**, 552 (1968)

3) S. F. Edwards and P. W. Anderson, J. Phys. F; Met. Phys. **5**, 965 (1975)
D. Sherrington and B. W. Southern, J. Phys. F; Met. Phys. **5**, L49 (1975)
C. Held and M. Klein, Phys. Rev. Lett. **35**, 1783 (1975)

4) 小口武彦，磁性体の統計理論（裳華房），第2章

5) H. O. Hooper and A. M. de Graaf, Amorphous Magnetism. (Plenum Press) p-215

Appendix，T＝0 での **X** の大きさ

(5) 式より，T＝0 のとき

$$X = \int d\mathbf{H}\ \frac{H_z}{H}\ P(\mathbf{H})$$

(10) 式を代入して，

$$X = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{H}\ \frac{H_z}{H}\ e^{i\mathbf{k}(\mathbf{H}-\mathbf{H}_0)} \left(\cos\frac{Jk}{2} - i\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{X}}{k}\sin\frac{Jk}{2}\right)^2 \qquad (A\cdot1)$$

ここで，

$$\int d\mathbf{H}\ \frac{H_z}{H}\ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{H}} = -i\frac{\partial}{\partial k_2}\int \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{H}}}{H}\ d\mathbf{H} = -i\frac{\partial}{\partial k_z}\left(\frac{4\pi}{k^2}\right)$$

を用いると，

$$X = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{H}_0} \left(\cos\frac{Jk}{2} - i\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{X}}{k}\sin\frac{Jk}{2}\right)^z \cdot i\frac{8\pi k_z}{k^4}$$

$\mathbf{X}$, $\mathbf{H}_0$ が z 軸であるから，$\xi = \cos\theta$ として，

$$X = \frac{2i}{\pi}\int_{-1}^{1} \xi\, d\xi \int_0^{\infty} \frac{dk}{k}\, e^{-ikH_0\xi} \left(\cos\frac{Jk}{2} - iX\xi\sin\frac{Jk}{2}\right)^z \qquad (A\cdot 2)$$

この積分は，ξ で展開して，ξ の偶数次だけがのこるから，$H_0 \to 0$ の極限では，

$$X = \frac{2i}{\pi}\int_{-1}^{1} \xi\, d\xi \sum_{m=0}^{\left[\frac{z-1}{2}\right]} (-iX\xi)^{2m+1} \binom{z}{2m+1} \times \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} \left(\sin\frac{Jk}{2}\right)^{2m+1} \left(\cos\frac{Jk}{2}\right)^{z-2m-1} \qquad (A\cdot 3)$$

となる。但し，〔n〕は n の整数部分を示す。

（A·3）の積分は簡単にできて，T＝0 での X の値は．

$$X = X \cdot \sum_{m=0}^{\left[\frac{z-1}{2}\right]} (-X^2)^m \frac{2}{2m+3} \binom{z}{2m+1} \frac{(2m-1)!!\,(2\left[\frac{z}{2}\right]-2m-1)!!}{(2\cdot\left[\frac{z}{2}\right])!!} \qquad (A\cdot 4)$$

の根として与えられる。但し $n!! = n\cdot n-2$ …… を意味する。