

Niemeyer-van Leeuwen の

方法による希薄強磁性体

日大理工(習志野) 松 平 升

Niemeyer と van Leeuwen¹⁾は2次元3角格子に対して有限格子近似の方法を提案し、摂動およびクラスター法で臨界温度、臨界指数の良い値を得ている。我々はこの方法を非磁性不純物を含んだ正方格子の強磁性体に適用する。近似の説明のために(I)で不純物のない場合を扱い、(II)でこれを希薄な場合に拡張する。

(I) pure な場合

格子を図1のようにセルに分け、セルの番号を $p, q, \dots$ とすると、格子スピンは p と j ($j=1, 2, 3, 4$) で指定される ($S_p^j = \pm 1$)。各セルにセルスピン $S'_p = \pm 1$ を与える。 S_p^j の configuration は $2^4 = 16$ 通りあるが、その中の8通りに対して $S'_p = 1$ 、残りに対して $S'_p = -1$ とする。8通りの configuration に番号 σ_p^ℓ ($\ell=1, 2, \dots, 8$) をつける。ハミルトニアンは S'_p と σ_p^ℓ で書かれる。

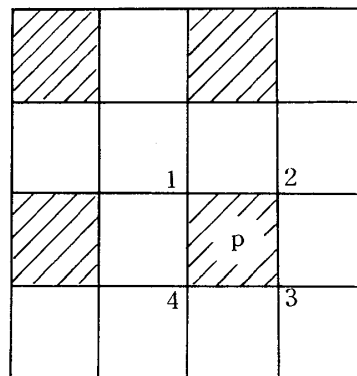


図 1

$$H(S) = \sum_{\alpha} K_{\alpha} \sum^{(\alpha)} S_p^j S_q^k = H(S', \sigma) \quad ; \quad K_{\alpha} = -\frac{J_{\alpha}}{kT} \quad (1)$$

くりこみ変換は

$$\exp H'(S') = \sum_{(\sigma)} \exp H(S', \sigma) \quad (2)$$

で与えられる。変換されたハミルトニアン H' は (1) と同じ形になる。

$$H'(S') = \sum_{\alpha} K'_{\alpha} \sum^{(\alpha)} S'_p S'_q \quad ; \quad K'_{\alpha} = K'_{\alpha}(K) \quad (3)$$

固定点 $K_{\alpha}^* = K'_{\alpha}(K^*)$ と、その近くでの線形変換行列の固有値 (λ) と固有ベクトルを求めることによって臨界温度と臨界指数がわかる。

H をセル内相互作用 H^0 とセル間相互作用 V を摂動として 2 次まで cumulant 展開する。結果は次の通りである。ここに (A) は 1 次摂動、(B) と (C) は 2 次近似で、(B) は最近接相互作用 (K_1) のみを考えた場合、(C) は第 2 近接相互作用 (K_2) を H^0 にとり入れた場合である。

	$k T_c / J$	λ
(A)	1. 9 2 8	2. 0 0 8 2
(B)	2. 1 7 0	2. 0 3 3 9
(C)	2. 3 2 6	2. 0 5 2 1
正 確 値	2. 2 6 9	2

(II) Dilute な場合

ハミルトニアン (1) を

$$H(s, t) = \sum_{\alpha} K_{\alpha} \sum_{\langle p, q \rangle} S_p^j S_q^k t_p^j t_q^k \quad (4)$$

と拡張する。

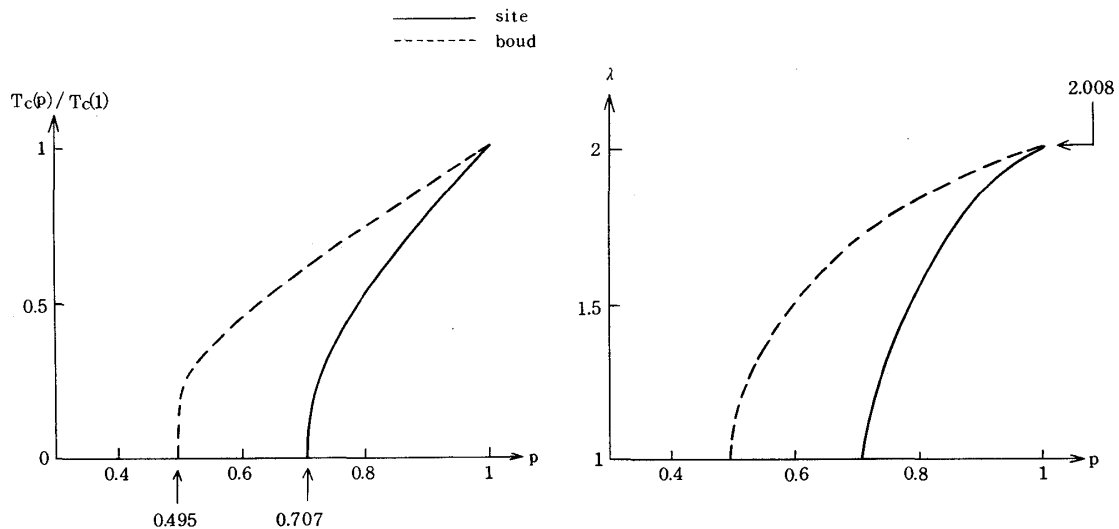


図 2 1 次近似

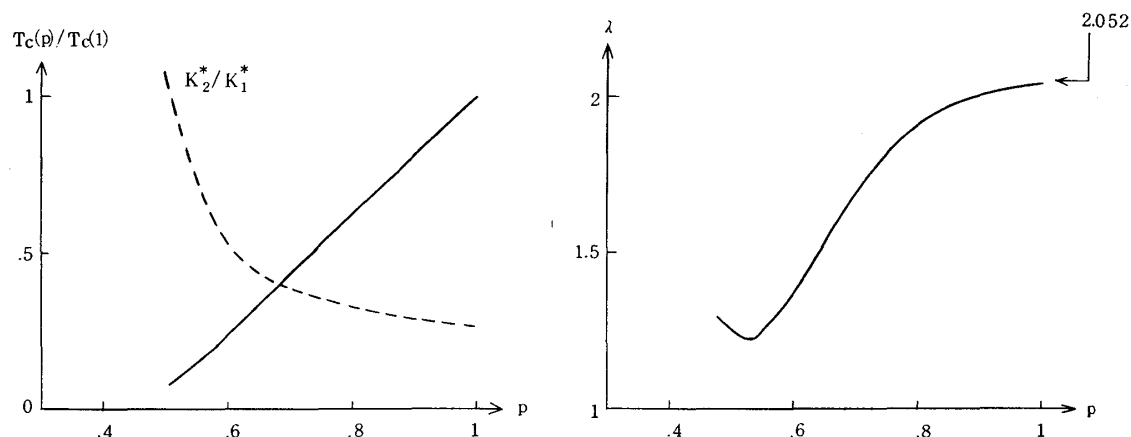


図3 2次近似

ここに $t = 1$ は磁性原子の存在, $t = 0$ は不在を表す。 $t^2 = t$ で, $\langle t \rangle_{\text{random}} = p$ は磁性原子の濃度である。(4)について, (I)と同様の計算を実行する。相互作用として上記の(C)をとると, 図2, 図3の結果を得る。なお, 図2の点線は Tatsumi-Kawasaki²⁾が bond problem についてる3角格子に対して行ったものを正方格子に適用したものである。臨界濃度は $p_c = 0.590 \pm 0.010$ (site), $p_c = 0.500$ (bond) である。

図3にみるように, $p_c \lesssim 0.6$ で近似が悪くなっている。これは K_2^*/K_1^* (図3)が大きくなるためである。これを改良するには, (i) 相互作用 V にも K_2 をとり入れる。(ii) 臨界面の平面からのずれを考えることが必要である。これについては計算中である。

参 考 文 献

- 1) Niemeyer and van Leeuwen : Physica 71 (1974) 17
- 2) Tatsumi and Kawasaki : P. T. P. 55 (1976) 612