

稀薄磁性体について

桂 重 俊 (東北大工学部応物)

辻山 文 治 郎 (東北大理学部物理)

(10月6日受理)

§ 1 序 論

磁性体に対して、その磁氣的原子の一部を非磁氣的原子で置きかえた稀薄磁性体に対する研究は、Heisenberg 模型或は Ising 模型に対して、Rushbrooke and Morgan^{1,2,3} Elliott and Heop⁴, Abe⁵ 等によつて行われ、非磁氣的原子の添加による強磁性 Curie 点の変化、強磁性の存在に対する非磁氣物質の臨界濃度等が研究されている。これ等の研究は何れも状態和の高温展開によるものであるが、ここでは Ising spin に対する場合、この問題が母函数を導入することによつて定式化されることを示し、一次元の場合この母函数を求めることは、固有値問題に reduce され、更にこの固有値方程式は厳密にとけて、自由エネルギー、エネルギー、帯磁率の正確解がえられることを示そう。帯磁率を求めるには、摂動論を用いるが、得られた結果は厳密なものであることは注意すべきである。

§ 2 母函数法による定式化

今、結晶格子を考え、格子点を $i = 1, 2, \dots$ とする。格子の各点には Ising スピン又は非磁氣原子が存在するものとする。全エネルギーは近接格子点間の相互作用エネルギーのみの和で表わされたとし、非磁氣原子同志、及び非磁氣原子と Spin の間に相互作用は働かないものとする、このような系の全エネルギーは各格子点の状態を $\mu_i = 1, 0, -1$ として

$$E = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j - m \mathcal{H} \sum_i \mu_i$$

で表わされる。 m は Spin の磁気能率 ($= \frac{1}{2} g \mu_B$)、 $\mathcal{H}$ は外部磁場である。

$J > 0$ は強磁性的、 $J < 0$ は反強磁性的相互作用である。 $\langle i, j \rangle$ は隣接格子点对を示し、第二項は Zeeman energy である。 $\mu = 1, -1$ が Ising

桂・辻山

spin に、 $\mu = 0$ が非磁気物質に対応する。今、Ising Spinの存在する確率が p ，非磁氣的原子の存在する確率が $(1-p)$ で与えられている問題を考えると、Spin に対して $\mu_i^2 = 1$ ，非磁気物質に対して $\mu_i^2 = 0$ であるから $\langle \mu_i^2 \rangle = p$ である。 p の代りにパラメーター D をもつた母函数

$$Z = \sum_{\mu_i = \pm 1} e^{K \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j + C \sum \mu_i + D \sum \mu_i^2}$$

$$K = \frac{J}{2kT}, \quad C = \frac{m\mathcal{H}}{kT}$$

を作ると $\frac{\partial \ln Z}{\partial D} = \langle \mu_i^2 \rangle = p$ (1)

より $p = p(K, D, C)$ が求まるから、これを逆にいて $D = D(K, p, C)$ を求め、

エネルギー $E = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial K} \right)_{C, D}$ 磁化 $M = \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial C} \right)_{K, D}$

に入れば E, M を、 K, p, C の函数として表わすことができる。

§ 3 一次元の場合の固有値問題

前節の定式化は一次元の場合には固有値問題に導かれる。今、

$$A(\mu_i, \mu_{i+1}) = \exp(K\mu_i \mu_{i+1} + \frac{1}{2}C\mu_i + \frac{1}{2}C\mu_{i+1} + \frac{1}{2}D\mu_i^2 + \frac{1}{2}D\mu_{i+1}^2)$$

とすると $Z = \text{Tr} \prod_{i=1}^N A(\mu_i, \mu_{i+1})$

であるから $= \text{Tr} (V_1 V_2 V_3)^N$

と書ける。ここに

$$V_1 = \begin{pmatrix} e^K & 1 & e^{-K} \\ 1 & 1 & 1 \\ e^{-K} & 1 & e^K \end{pmatrix} \quad V_2 = \begin{pmatrix} e^C & & \\ & 1 & \\ & & e^{-C} \end{pmatrix} \quad V_3 = \begin{pmatrix} e^D & & \\ & 1 & \\ & & e^D \end{pmatrix}$$

故に

$$V_1 V_2 V_3 = \begin{pmatrix} e^{K+C+D} & e^{\frac{1}{2}(C+D)} & e^{-K+D} \\ e^{\frac{1}{2}(C+D)} & 1 & e^{-\frac{C}{2}+\frac{D}{2}} \\ e^{-K+D} & e^{\frac{1}{2}(D-C)} & e^{K-C+D} \end{pmatrix} \quad (2)$$

これは三次の行列であるので固有値問題は3次方程式の解法に帰せられる。しかしこの行列の対称性より、 $C=0$ の場合の固有値 λ 及び λ を C^2 で展開したときの C^2 の系数は、二次方程式をとくことのみで正しく求まることを示そう。

ここで、 $V = V_1 V_2 V_3$ が変換Matrix S で対称化出来たとすると

$$S^{-1} V S = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_3 \end{pmatrix}$$

V の固有値の最大なものを $\lambda_{\max}$ とすれば $N \rightarrow \infty$ では

$$\lim_{N \rightarrow \infty} Z^{\frac{1}{N}} = \lambda_{\max}$$

次に $\lambda_{\max}$ を求めるが、我々はエネルギーと帯磁率を問題とするから $\lambda_{\max}$ を C の2次の項迄(1次の項はない) 正確に求めればよい。

$$V = \begin{pmatrix} k^2 d^2 \operatorname{ch} C & d \operatorname{ch} \frac{C}{2} & k^{-2} d^2 \\ d \operatorname{ch} \frac{C}{2} & 1 & d \operatorname{ch} \frac{C}{2} \\ k^{-2} d^2 & d \operatorname{ch} \frac{C}{2} & k^2 d^2 \operatorname{ch} C \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k^2 d^2 \operatorname{sh} C & d \operatorname{sh} \frac{C}{2} & 0 \\ d \operatorname{sh} \frac{C}{2} & 0 & -d \operatorname{sh} \frac{C}{2} \\ 0 & -d \operatorname{sh} \frac{C}{2} & -k^2 d^2 \operatorname{sh} C \end{pmatrix}$$

但し、 $e^K = k^2$, $e^D = d^2$

Matrix $S_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ & 1 & -1 \end{pmatrix} = S_1^{-1}$ で相似変換を行つて

$$S_1^{-1} V S_1 = \begin{pmatrix} k^2 d^2 \operatorname{ch} C + k^{-2} d^2 & \sqrt{2} d \operatorname{ch} \frac{C}{2} & 0 \\ \sqrt{2} d \operatorname{ch} \frac{C}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & k^2 d^2 \operatorname{ch} C - k^{-2} d^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & k^2 d^2 \operatorname{sh} C \\ 0 & 0 & \sqrt{2} d \operatorname{sh} \frac{C}{2} \\ k^2 d^2 \operatorname{sh} C & \sqrt{2} d \operatorname{sh} \frac{C}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

桂・辻山

次に $S_2 = \begin{pmatrix} \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = S_2^{-1}$ で θ なる座標回転をほどこすと

$$S_2^{-1} S_1^{-1} V S_1 S_2 = \begin{pmatrix} u & w & 0 \\ w & v & 0 \\ 0 & 0 & t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & q \\ 0 & 0 & r \\ q & r & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

ここで

$$\begin{aligned} u &= (k^2 d^2 \operatorname{ch} C + k^{-2} d^2) \sin^2 \theta + 2(\sqrt{2} d \operatorname{ch} \frac{C}{2}) \sin \theta \cos \theta + \cos^2 \theta \\ v &= (k^2 d^2 \operatorname{ch} C + k^{-2} d^2) \cos^2 \theta - 2(\sqrt{2} d \operatorname{ch} \frac{C}{2}) \sin \theta \cos \theta + \sin^2 \theta \\ w &= (\sqrt{2} d \operatorname{ch} \frac{C}{2}) \cos^2 \theta - (\sqrt{2} d \operatorname{ch} \frac{C}{2}) \sin^2 \theta + (k^2 d^2 \operatorname{ch} C + k^{-2} d^2 - 1) \sin \theta \cos \theta \\ t &= k^2 d^2 \operatorname{ch} C - k^{-2} d^2 \\ q &= k^2 d^2 \operatorname{sh} C \times \sin \theta + \sqrt{2} d \operatorname{sh} \frac{C}{2} \times \cos \theta \\ r &= k^2 d^2 \operatorname{sh} C \times \cos \theta - \sqrt{2} d \operatorname{sh} \frac{C}{2} \times \sin \theta \end{aligned}$$

(3)の第1項を対角化する為には、 $W \equiv 0$ なる θ を求める。即ち

$$\tan 2\theta = \frac{-2\sqrt{2} d \operatorname{ch} \frac{C}{2}}{k^2 d^2 \operatorname{ch} C + k^{-2} d^2 - 1} (= \frac{A}{B}) \quad (4)$$

$$A, B \text{ を用いると } \sin 2\theta = \frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}}, \quad \cos 2\theta = \frac{B}{\sqrt{A^2 + B^2}}$$

これを、 u, v に代入すると次の如くなる。

$$u \rightarrow H_1^{(0)} \quad v \rightarrow H_2^{(0)} \quad t = H_3^{(0)}$$

$$\text{又(4)での } A, B \text{ を用いると、} \sin \theta = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{B}{\sqrt{A^2 + B^2}} \right)}, \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{B}{\sqrt{A^2 + B^2}} \right)}$$

これを q, r に代入すると次の如くなる、

$$q \rightarrow H_{13}^{(1)} (= H_{31}^{(1)}) \quad r \rightarrow H_{23}^{(1)} (= H_{32}^{(1)})$$

結局(2)は、次の様に変形された

$$S_2^{-1} S_1^{-1} V S_1 S_2 = H^{(0)} + H^{(1)} = \begin{pmatrix} H_1^{(0)} & & \\ & H_2^{(0)} & \\ & & H_3^{(0)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & H_{13}^{(1)} \\ 0 & 0 & H_{23}^{(1)} \\ H_{31}^{(1)} & H_{32}^{(1)} & 0 \end{pmatrix}$$

但し

$$H_1^{(0)} = \frac{1}{2} [(k^2 \operatorname{ch} C + k^{-2}) d^2 + 1 - \{d^4 (k^2 \operatorname{ch} C + k^{-2})^2 - 2d^2 (k^2 \operatorname{ch} C + k^{-2}) - 4 \operatorname{ch}^2 \frac{C}{2}\} + 1]^{1/2}$$

$$H_2^{(0)} = \frac{1}{2} [(k^2 \operatorname{ch} C + k^{-2}) d^2 + 1 + \{d^4 (k^2 \operatorname{ch} C + k^{-2})^2 - 2d^2 (k^2 \operatorname{ch} C + k^{-2}) - 4 \operatorname{ch}^2 \frac{C}{2}\} + 1]^{1/2}$$

$$H_3^{(0)} = k^2 d^2 \operatorname{ch} C - k^{-2} d^2$$

$$H_{13}^{(1)} (= H_{31}^{(1)}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{B}{\sqrt{A+B^2}}\right)} \quad k^2 d^2 \operatorname{sh} C + \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{B}{\sqrt{A+B^2}}\right)} \sqrt{2} d \operatorname{sh} \frac{C}{2}$$

$$H_{23}^{(1)} (= H_{32}^{(1)}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{B}{\sqrt{A+B^2}}\right)} \quad k^2 d^2 \operatorname{sh} C + \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{B}{\sqrt{A+B^2}}\right)} \sqrt{2} d \operatorname{sh} \frac{C}{2}$$

ここで $C \simeq 0$ での λ を求める為には $H^{(0)}$ を非摂動項、 $H^{(1)}$ を摂動項として λ を求めよう。摂動論より

$$\lambda_n = H_n^{(0)} + \sum_j' \frac{H_{nj}^{(1)} H_{jn}^{(1)}}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_j^{(0)}}$$

ここでは $H^{(0)}$ の固有値の最大のものは明らかに $H_2^{(0)}$ なる故 λ_2 のみを求めればよい。

$$\lambda_{\max} (= \lambda_2) = H_2^{(0)} + \frac{(H_{23}^{(1)})^2}{H_2^{(0)} - H_3^{(0)}}$$

$C \simeq 0$ なる故に注意して C について $H_2^{(0)}$ を展開すると

$$H_2^{(0)} = \lambda_{C=0}^{(0)} + \frac{1}{4} \left\{ \frac{d^4 (k^2 + k^{-2}) k^2 - d^2 (k^2 - 2)}{\sqrt{d^4 (k^2 + k^{-2})^2 - 2d^2 (k^2 + k^{-2}) - 4}} + k^2 d^2 \right\} C^2 + O(C^4)$$

同様に $H_{23}^{(1)2}$ を展開すると

$$H_{23}^{(1)2} = \left(\frac{k^4 d^4}{2} + \frac{d^2}{4} \right) C^2 + \frac{d^2 [(k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1) (\frac{k^4 d^2}{2} - \frac{1}{4}) + 2d^2 k^2]}{\sqrt{d^2 k^2 + k^{-2} d^2 - 1}^2 + 8d^2} C^2 + O(C^4)$$

又

$$H_2^{(0)} - H_3^{(0)} = \frac{1}{2} \{ d^2 (3k^{-2} - k^2) + 1 + \sqrt{(k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2} \} + O(C^2)$$

故に

$$\frac{H_{23}^{(1)2}}{H_2^{(0)} - H_3^{(0)}} = \frac{1}{d^2 (3k^{-2} - k^2) + 1 + \sqrt{(k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}} \times \left[k^4 d^4 + \frac{d^4}{2} + \frac{d^2 (k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1) (k^4 d^2 - 1/2) + 4d^2 k^2}{\sqrt{(k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}} \right] \times C^2$$

$$+ O(C^4)$$

3 次以上の摂動項から $O(C^2)$ の項はあらわれない。

$\therefore \lambda_{\max} = \lambda^{00} + C^2 \lambda^{01} + C^2 \lambda^{11} + O(C^4)$ と表わされる。但し

$$\lambda^{00} = \lambda_{C=0} = \frac{1}{2} [d^2(k^2 + k^{-2}) + 1 + \sqrt{(d^2 k^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}]$$

$$\lambda^{01} = \frac{1}{4} \left[\frac{d^4(k^2 + k^{-2})k^2 - d^2(k^2 - 2)}{\sqrt{(d^2 k^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}} + k^2 d^2 \right]$$

$$\lambda^{11} = \frac{k^4 d^4 + \frac{d^2}{2} + \frac{d^2 \{ (k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1)(k^4 d^2 - 1/2) + 4d^2 k^2 \}}{\sqrt{(d^2 k^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}}}{d^2 (3k^{-2} - k^2) + 1 + \sqrt{(d^2 k^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}}$$

これで(2)の最大固有値が C^2 のオーダー迄正しく求められた。

$\mathcal{M} = 0$ に於る p と D の関係は

$$p = \frac{\partial \ln \lambda_{C=0}}{\partial D} = \frac{d^2(k^2 + k^{-2}) \sqrt{(d^2 k^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2} + (k^2 + k^{-2})^2 d^4 - (k^2 + k^{-2} - 4)d^2}{\{d^2(k^2 + k^{-2}) + 1 + \sqrt{(d^2 k^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}\} \sqrt{(d^2 k^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}}$$

これを逆に解けば

$$e^{-D} = d^{-2} = \frac{(k^2 + k^{-2} - 4)p(p-1) - 1 - |2p-1| \sqrt{2(2-k^2-k^{-2})p(p-1)+1}}{p(p-1)(k^2 + k^{-2})^2} \quad (5)$$

($0 \leq p \leq 1$)

ここで $p \sim 1$ では

$$e^{-D} = d^{-2} = \frac{(k^2 + k^{-2})^2}{2} \times \frac{p(1-p)}{(1-2p)^2} + \dots$$

である。 $\mathcal{M} = 0$ のときエネルギーは

$$\frac{E}{N} = -\frac{1}{4} \frac{k^2 - k^{-2}}{k^2 + k^{-2} - 2} \times \left[1 + \frac{-4d^2 + d^2(k^2 + k^{-2}) - 1}{\sqrt{(d^2 k^2 + d^2 k^{-2} - 1) + 8d^2}} \right] \quad (6)$$

次に帯磁率を求める。 $\bar{\chi} = \frac{kT\chi}{N m^2}$ として

$$\begin{aligned} \bar{\chi}(C=0, K, D) &= \frac{\partial^2 \ln \lambda}{\partial C^2} \Big|_{C=0} = \frac{2(\lambda^{01} + \lambda^{11})}{\lambda^{00}} \quad \text{なる故} \\ \bar{\chi}(C=0, KP) &= \frac{1}{d^2(k^2 + k^{-2}) + 1 + \sqrt{(k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}} \left\{ \frac{d^4(k^2 + k^{-2})k^2 - d^2(k^2 - 2)}{\sqrt{(k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}} + k^2 d^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{4k^4 d^4 + 2d^2 + \frac{4d^2\{(k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1)(k^4 d^2 - 1/2) + 4d^2 k^2\}}{\sqrt{(k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}}}{d^2(3k^{-2} - k^2) + 1 + \sqrt{(k^2 d^2 + k^{-2} d^2 - 1)^2 + 8d^2}} \right\} \quad (7) \end{aligned}$$

(6) 及び (7) の d^2 は (5) により p で表わされたものとする。

上式は高温展開では $\bar{x} = p(1 + 2pK + O(K^2))$ となる。 $p = 1$ を入れると、

Ising model の場合のよく知られた結果

$$E_{NJ} = -\frac{1}{2} \tan K, \quad \bar{\chi} = e^{2K}$$

が再現される

§ 4 結論及び討論

稀薄磁性体の問題が母函数法で定式化されること、一次元の場合には固有値問題に直され、この固有値問題には磁場の自乗の n 項まで正確にとけることが示され、エネルギー、帯磁率が、Spin と非磁気物質の混合比の函数として求められた。

Fig. 1 に $C = 0$ の場合の $\ell n \lambda_{\text{max}}$ を D の函数として示す。エネルギー, 帯磁率を p をパラメーターとして温度の函数としてのカーブは目下計算中である。数値計算は東北大学計算センターの NEAC 2230 によつた。

猪苗代助教授の討論に感謝する。

REFERENCES

1. G.S. Rushbrooke and D.J. Morgan, Mol. Phys. 4, 1 (1961)
2. " , Mol. Phys. 4, 291 (1961)

桂・辻山

3. G.S. Rushbrooke, J. Math. Phys. 5, 1106 (1964)
4. R.J. Elliott and B.R. Heap. Proc. Roy. Soc A 256, 264 (1962)
5. R. Abe, Prog. Theor. Phys. 31, 412 (1964)

$\ln \lambda$

Fig. 1

10

$K=15,000$

8402

$K=\pm 1,099$
 $K=\pm 1,699$

$K=0$

-5 -4 -3 -2 -1 0 1 2 3 4 5

D

