

Green 函数法による強磁性体の研究

桂 重 俊 (東北大工)

堀 口 剛 (東北大理)

(9月19日受理)

§ 1. 序

Heisenberg 強磁性体に対して, S. V. Tjablikov⁽¹⁾ は 2 時間 Green 函数の lowest order decoupling を用いて磁化 σ と磁場 H の関係を求めた。その結果は, 1) 1 次元, 2 次元では自発磁化は存在せず (零となり), 3 次元ではじめて自発磁化が存在する。2) 磁化の低温展開の $T^{\frac{3}{2}}$, $T^{\frac{5}{2}}$, $T^{\frac{7}{2}}$ の係数は, F. J. Dyson⁽²⁾ の値と, T^4 の係数は Dyson の 1st Born 近似の値と一致した。しかし, Dyson にない T^3 の係数が現われる。3) 高温展開は W. Opechowski⁽³⁾ のそれと leading term が一致する。4) 自発磁化が零になる温度としての Curie 点が存在し, (その値は, spherical model のそれと一致する。) Curie 点における critical index は $\beta = \frac{1}{2}$ である。5) 帯磁率は 4) における Curie 点で ∞ となり, critical index は r (高温) = 2 である。6) 温度一定のとき磁化と磁場の関係は磁場 H の符号をかえた時, $\sigma(-H) = -\sigma(H)$ になる。

これに対し, その後, 多くの人によって近似の度をあげる研究がなされた。これらの研究は lowest order における改良を試みたもの (T. Ogu-chi and A. Honma⁽⁴⁾, K. Kawasaki and H. Mori⁽⁵⁾, R. A. Tahir-Kheli and D. ter Haar⁽⁶⁾, H. B. Callen⁽⁷⁾, J. A. Copeland and H. A. Gersch⁽⁸⁾, R. A. Tahir-Kheli⁽⁹⁾, C. W. Haas and H. S. Jarrett⁽¹⁰⁾, M. Ristig and G. Obermair⁽¹¹⁾ 等) と次の order の Green 函数を考へることによる改良 (T. Morita and T. Tanaka⁽¹²⁾, R. A. Tahir-Kheli and D. ter Haar⁽⁶⁾, I. Ortenberger⁽¹³⁾, K. Kawasaki and H. Mori⁽⁵⁾, J. F. Cooke and H. A. Gersch⁽¹⁴⁾ 等) とに大別される。また, Tjablikov は $S = \frac{1}{2}$ で Pauli operator を用いたがこれらの諸研究には, Pauli operator を用いたもの, Spin operator を用いたもの, Bose operator を用いたもの等がある。また, これらの諸研究と密接に関係する研究

として Green 函数を用いてないが M. Bloch⁽¹⁵⁾の研究がある。これらの諸理論の多くは低温展開の精度を上げることを目的とし、その目的を達成しているものもあるが、その結果 Tjablikov 近似のもっていた全局的な（高温，低温，高磁場，低磁場）近似のよさを失ったものも少くない。（Callen 等の理論においてはこの全局性は保存されている。）即ち、高温の性質が悪くなったり、1次元の磁化が発散を起したり、Curie 点の値が $+\infty$ になったり、また磁化がある値以下で磁化の減少にともない温度が減少したりしている。Tjablikov の理論を吟味してみると、その全局的近似のよさは上の 1) ~ 6) のうち特に 6) に結びついていて、6) は Pauli operator（または Spin operator）が同じ格子点にある spin に対し反可換で異なった格子点にある spin に対し可換であるという性質にもとづいていることがわかる。我々はこの事実に着目して Pauli operator の同じ格子点で Fermion 的に異なった格子点で Boson 的な性質を保存しながら Tjablikov の近似の精度を上げることを試みたのでこれを報告する。

§ 5 で Wick の定理を援用して相関函数を contraction することにより Green 函数の decoupling を行なう。結果は「+」の交換関係で定義された Green 函数 ($G^{(+)}$ と記す) と「-」の交換関係で定義された Green 函数 ($G^{(-)}$ と記す) との連立方程式になる。それを解き相関函数を求めると磁化に対する方程式になる。§ 4 で自発磁化の低温展開、Curie 温度 critical index を求めた。尚、通常は spin 系に対する Green 函数としてどの研究者の論文にも $G^{(-)}$ が用いられてきた。だが $G^{(+)}$ でも同じように扱うことが出来る筈である。しかし、近似的に解いた場合どちらが良い結果を与えるかは断言しがたい。我々は § 5 で Tjablikov 近似を用いた場合、 $G^{(+)}$ から求めた結果が $G^{(-)}$ から求めた結果に全く一致することを示した。

§ 2. Green 函数

Heisenberg Hamiltonian を次のようにとる。

$$H = -g\mu H \sum_f S_f^Z - \sum_f \sum_m \{ J_{\perp}(f-m) (S_f^X S_m^X + S_f^Y S_m^Y) + J_{\parallel}(f-m) S_f^Z S_m^Z \} \quad (1)$$

μ ; Bohr magneton

g ; Landé の g -factor

ここで f と m についての和はすべての格子点にわたってとられる。 $\vec{S}_g$ は格子点 g における spin operator, また, $J_{\perp}(f-m)$, $J_{\parallel}(f-m)$ は格子点 f と m の間の交換積分である。我々は $S = \frac{1}{2}$ で交換積分は正とし, 最隣接格子相互作用だけを考える。

即ち, Δ を nearest neighbour lattice を結びつけている vector とすると,

$$\begin{aligned} J_{\perp, \parallel}(f-m) &= J_{\perp, \parallel} & f &= m + \Delta \\ &= 0 & f &\neq m + \Delta \end{aligned} \quad (2)$$

$S = \frac{1}{2}$ のときには spin operator を次の関係式を用いて Pauli operator に直すことが出来る。

$$\begin{aligned} S_f^x + iS_f^y &\equiv S_f^+ = b_f^+, & S_f^x - iS_f^y &\equiv S_f^- = b_f^- \\ S_f^z &= \frac{1}{2} - n_f, & n_f &= b_f^+ b_f^- \end{aligned} \quad (3)$$

これらの Pauli operator は次の交換関係をみたす。

(1) 同じ格子点で反可換で

$$[b_g, b_g^+]_+ = 1, [b_g, b_g]_+ = [b_g^+, b_g^+]_+ = 0 \quad (4)$$

(2) 異なった格子点 ($f \neq g$) において可換で

$$[b_g, b_f^+]_- = 0, [b_g, b_f]_- = [b_g^+, b_f^+]_- = 0 \quad (5)$$

(3) 共通の関係として

$$[b_g, b_f^+]_+ = 2b_f^+ b_g + \delta_{gf}(1-2n_f), [b_g, b_f]_- = \delta_{gf}(1-2n_f) \quad (6)$$

(1) の Hamiltonian を (3) を用いて書き直すと

$$H = -\frac{1}{4}ZNJ_{\parallel} - \frac{1}{2}g\mu HN - \sum_f \sum_m J_{\perp}(f-m) b_f^+ b_m \\ + (ZJ_{\parallel} + g\mu) \sum_f b_f^+ b_f - \sum_f \sum_m J_{\parallel}(f-m) b_f^+ b_f b_m^+ b_m \quad (7)$$

ここに Z は隣接格子点の数, N は全格子点の数
我々は (7) の Hamiltonian から出発する。先ず Heisenberg 表示の Pauli operator $b_g(t)$, $b_f^+(t)$ 等を含む 2 時間温度依存遅延 Green 関数を次のように定義する。

$$G_{g,f}^{(\pm)}(t, t') \equiv \langle\langle b_g(t); b_f^+(t') \rangle\rangle^{(\pm)} = -i\theta(t-t') \langle [b_g(t), b_f^+(t')]_{\pm} \rangle \quad (8)$$

$$G_{g\ell_m, f}^{(\pm)}(t, t') \equiv \langle\langle b_g^+(t) b_{\ell}(t) b_m(t); b_f^+(t') \rangle\rangle^{(\pm)} \\ = -i\theta(t-t') \langle [b_g^+(t) b_{\ell}(t) b_m(t), b_f^+(t')]_{\pm} \rangle \quad (9)$$

ここに

$$\theta(t-t') = 1 \quad t > t' \\ 0 \quad t < t'$$

$$\langle A \rangle = \text{Tr} (e^{-\beta H} A) / \text{Tr} e^{-\beta H}, \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

Green 関数 (8), (9) は時間の差 $(t-t')$ の関数であるから, 時間について Fourier 変換することができ, 次に書かれた運動方程式をみたす。

$$G_{g,f}^{(\pm)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{g,f}^{(\pm)}(t) e^{iEt} dt \quad (10)$$

$$EG_{g,f}^{(\pm)}(E) = \frac{1}{2\pi} \langle [b_g, b_f^+]_{\pm} \rangle + \langle\langle [b_g, H]_{\pm}; b_f^+ \rangle\rangle_E^{(\pm)} \quad (11)$$

ここで Green 関数の Fourier 成分に対し Green 関数と同じ記号を用いた。

もし方程式 (11) を $G_{g,f}^{(\pm)}(E)$ について解くことが出来れば, 次の式から相関函数 $\langle b_f^+(t') b_g(t) \rangle$ を計算することが可能である。

$$\langle b_f^+(t') b_g(t) \rangle^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_{g,f}^{(\pm)}(E+i\epsilon) - G_{g,f}^{(\pm)}(E-i\epsilon)}{e^{\beta E} \pm 1} e^{-iE(t-t')} dE \quad (12)$$

そこで方程式 (11) を Hamiltonian (7) を用いて具体的に書き表わすと

$$\begin{aligned} (E - ZJ_{\parallel} - g\mu H) G_{g,f}^{(+)} &= \frac{1}{2\pi} \langle 2b_f^+ b_g + \delta_{gf}(1-2n_f) \rangle \\ &- \sum_m J_{\perp}(g-m) G_{m,f}^{(+)} + 2 \sum_m J_{\perp}(g-m) G_{g+m,f}^{(+)} - 2 \sum_m J_{\parallel}(g-m) G_{m+m,g,f}^{(+)} \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} (E - ZJ_{\parallel} - g\mu H) G_{g,f}^{(-)} &= \frac{1}{2\pi} \langle 1-2n_f \rangle \delta_{gf} \\ &- \sum_m J_{\perp}(g-m) G_{m,f}^{(-)} + 2 \sum_m J_{\perp}(g-m) G_{g+m,f}^{(-)} - 2 \sum_m J_{\parallel}(g-m) G_{m+m,g,f}^{(-)} \end{aligned} \quad (14)$$

(13), (14) の右辺に現われている高次の Green 函数についてもある規則性により運動方程式を容易に次々と書き下すことが出来る。しかし我々は (13), (14) を近似的に解くことだけに話を限定する。

§ 3. Green 函数の decoupling 近似と運動方程式の解

方程式 (14) は多くの人々により研究されてきた。最初 Tjablikov は $S_g^z (= \frac{1}{2} - n_g)$ の fluctuation を無視して

$$G_{g+m,f}^{(-)} = \bar{n} G_{m,f}^{(-)}, \quad \bar{n} = \langle b_g^+ b_g \rangle \quad (15)$$

のように decoupling した (Random Phase Approximation)。処が

Callen は $\langle S_g^z \rangle (= \frac{1}{2} - \bar{n})$ のまわりの S_g^z の fluctuation を考慮して

$$\langle\langle S_g^z S_m^+; S_f^- \rangle\rangle_{g \neq m}^{(-)} = \langle S_g^z \rangle \langle\langle S_m^+; S_f^- \rangle\rangle^{(-)} - \alpha \langle S_g^- S_m^+ \rangle \langle\langle S_g^+; S_f^- \rangle\rangle^{(-)} \quad (16)$$

即ち

$$G_{ggm,f}^{(-)} = \bar{n} G_{m,f}^{(-)} + \alpha \langle b_g^+ b_m \rangle G_{g,f}^{(-)} \quad (17)$$

のような decoupling 近似をし、ある物理的な criterion から $\alpha = \frac{\langle S^z \rangle^3}{2S^2}$ とした。また Copland and Gersch は実験との比較から $\alpha = \frac{\langle S^z \rangle^3}{2S^4}$ を用いた。Haas and Jarrett は付加的な補正項として格子点 g, m, f の相対的な函数 $\rho(g, m, f)$ を加えて

$$\langle\langle S_g^z S_m^+; S_f^- \rangle\rangle_{g \neq m}^{(-)} = \langle S_g^z \rangle \langle\langle S_m^+; S_f^- \rangle\rangle^{(-)} - \alpha \langle S_g^- S_m^+ \rangle \langle\langle S_g^+; S_f^- \rangle\rangle^{(-)} + \rho(g, m, f) \quad (18)$$

の如く decoupling した。そこで我々は Callen の近似 (16) または (17) を少し詳細に分析する。Callen は Spin Operator (または Pauli Operator) が同じ格子点では Fermion 的で、異なった格子点では Boson 的であることを考慮しなかった。 S_g^z に対する式として

$$S_g^z = \frac{1}{2} - S_g^- S_g^+ \quad (19)$$

$$S_g^z = \frac{1}{2} (S_g^+ S_g^- - S_g^- S_g^+) \quad (20)$$

(19) に α を、(20) に $(1-\alpha)$ を掛け辺々加えて次式を出した。

$$S_g^z = \frac{1}{2} \alpha + \frac{1-\alpha}{2} S_g^+ S_g^- - \frac{1+\alpha}{2} S_g^- S_g^+ \quad (21)$$

(21) を用いると $\langle\langle S_g^z S_m^+; S_f^- \rangle\rangle^{(-)}$ の中には二つの Green 函数 $\langle\langle S_g^- S_g^+ \rangle\rangle^{(-)}$

$s_m^+; s_f^- \gg^{(-)}$ と $\ll s_g^+ s_g^- s_m^+; s_f^- \gg^{(-)}$ とが含まれているので、これらを decoupling する必要がある。

$$\ll s_g^- s_g^+ s_m^+; s_f^- \gg^{(-)} = \langle s_g^- s_g^+ \rangle \ll s_m^+; s_f^- \gg^{(-)} + \langle s_g^- s_m^+ \rangle \ll s_g^+; s_f^- \gg^{(-)} \quad (22)$$

$$\ll s_g^+ s_g^- s_m^+; s_f^- \gg^{(-)} = \langle s_g^+ s_g^- \rangle \ll s_m^+; s_f^- \gg^{(-)} + \langle s_g^- s_m^+ \rangle \ll s_g^+; s_f^- \gg^{(-)} \quad (23)$$

(22), (23) のように Green 函数を decoupling して (21) を用い (16) を出した。ところが (23) は $s_g^+ s_g^- = 1 - s_g^- s_g^+$ を用いて書き直すと

$$\ll s_g^- s_g^+ s_m^+; s_f^- \gg^{(-)} = \langle s_g^- s_g^+ \rangle \ll s_m^+; s_f^- \gg^{(-)} - \langle s_g^- s_m^+ \rangle \ll s_g^+; s_f^- \gg^{(-)} \quad (24)$$

となり、明らかに (22) と (24) は矛盾している。しかし (22) と (23) とは同等な式で、どちらの方がよい近似であるかについては何も言えない。ここに (21) を導き (22) と (23) を対称的に考慮して (17) を出した理由がある。

我々は Pauli Operator の性質 (4), (5) を利用して Green 函数の切断を行なう。即ち、同じ格子点で反可換、異なった格子点で可換であることを考え、Pauli operator に対して Wick の定理の精神で相関函数の contraction を行なう。g と m は異なった格子点であることに注意すること

$$\begin{aligned} & \langle b_g^+(t) b_g(t) b_m(t) b_f^+(t') \rangle \\ &= \langle b_g^+(t) b_g(t) \rangle \langle b_m(t) b_f^+(t') \rangle + \langle b_g^+(t) b_m(t) \rangle \langle b_g(t) b_f^+(t') \rangle \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned}
 & \langle b_f^+(t') b_g^+(t) b_g(t) b_m(t) \rangle \\
 &= \langle b_f^+(t') b_m(t) \rangle - \langle b_f^+(t') b_g(t) b_g^+(t) b_m(t) \rangle \\
 &= \langle b_f^+(t') b_m(t) \rangle - \langle b_f^+(t') b_g(t) \rangle \langle b_g^+(t) b_m(t) \rangle - \langle b_f^+(t') b_m(t) \rangle \\
 & \quad \langle b_g(t) b_g^+(t') \rangle \\
 &= \langle b_g^+(t) b_g(t) \rangle \langle b_f^+(t') b_m(t) \rangle - \langle b_g^+(t) b_m(t) \rangle \langle b_f^+(t') b_g(t) \rangle
 \end{aligned} \tag{26}$$

同様に

$$\begin{aligned}
 & \langle b_g(t) b_g^+(t) b_m(t) b_f^+(t') \rangle \\
 &= \langle b_g(t) b_g^+(t) \rangle \langle b_m(t) b_f^+(t') \rangle - \langle b_g^+(t) b_m(t) \rangle \\
 & \quad \langle b_g(t) b_f^+(t') \rangle
 \end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned}
 & \langle b_f^+(t') b_g(t) b_g^+(t) b_m(t) \rangle \\
 &= \langle b_f^+(t') b_g(t) \rangle \langle b_g^+(t) b_m(t) \rangle + \langle b_f^+(t') b_m(t) \rangle \\
 & \quad \langle b_g(t) b_g^+(t) \rangle
 \end{aligned} \tag{28}$$

(25) と (26), (27) と (28) からそれぞれ

$$\begin{aligned}
 \langle\langle b_g^+ b_g b_m; b_f^+ \rangle\rangle^{(\pm)} &= \langle b_g^+ b_g \rangle \langle\langle b_m; b_f^+ \rangle\rangle^{(\pm)} + \langle b_g^+ b_m \rangle \\
 & \quad \langle\langle b_g; b_f^+ \rangle\rangle^{(\mp)}
 \end{aligned} \tag{29}$$

$$\begin{aligned}
 \langle\langle b_g b_g^+ b_m; b_f^+ \rangle\rangle^{(\pm)} &= \langle b_g b_g^+ \rangle \langle\langle b_m; b_f^+ \rangle\rangle^{(\pm)} - \langle b_g^+ b_m \rangle \\
 & \quad \langle\langle b_g; b_f^+ \rangle\rangle^{(\mp)}
 \end{aligned} \tag{30}$$

このように我々の decoupling 近似 (29), (30) は Callen の近似のような矛盾はなく, したがって (21) を用いても parameter α は入ってこ

ない。(29) を Green 函数の運動方程式 (13), (14) に代入すると, 結果は $G^{(+)}$ と $G^{(-)}$ の連立方程式になる。

$$\begin{aligned}
 (E - Z \sigma J_{\parallel} - g \mu H) G_{g,f}^{(+)} &= \frac{1}{2\pi} \sigma \delta_{gf} + \frac{2}{2\pi} \langle b_f^+ b_g \rangle \\
 &\quad - \sigma \sum_m J_{\perp}(g-m) G_{m,f}^{(+)} \\
 + 2\xi \sum_m J_{\perp}(g-m) \langle b_g^+ b_m \rangle G_{g,f}^{(-)} &- 2\xi \sum_m J_{\parallel}(g-m) \langle b_m^+ b_g \rangle G_{m,f}^{(-)} \quad (31)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (E - Z \sigma J_{\parallel} - g \mu H) G_{g,f}^{(-)} &= \frac{1}{2\pi} \sigma \delta_{gf} - \sigma \sum_m J_{\perp}(g-m) G_{m,f}^{(-)} \\
 + 2\xi \sum_m J_{\perp}(g-m) \langle b_g^+ b_m \rangle G_{g,f}^{(+)} &- 2\xi \sum_m J_{\parallel}(g-m) \langle b_m^+ b_g \rangle G_{m,f}^{(+)} \quad (32)
 \end{aligned}$$

$$\sigma = 1 - 2\bar{n}$$

ここに導入された parameter ξ は, $\xi=0$ で Tjablikov 近似 (R. P. A.) を, $\xi=1$ で我々の近似を示す。(31), (32) を解くために, 格子の並進対称性を利用して逆格子 vector に Fourier 変換する。

$$G_{g,f}^{(\pm)} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} e^{i\lambda(g-f)} G_{\lambda}^{(\pm)} \quad (33)$$

$$\delta_{gf} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} e^{i\lambda(g-f)} \quad (34)$$

$$\langle b_f^+ b_g \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} e^{i\lambda(g-f)} n(\lambda) \quad (35)$$

$$J(\lambda) = \sum_m J(g-m) e^{i\lambda(g-m)} = J_Z r(\lambda) \quad (36)$$

$$r(\lambda) = \frac{1}{Z} \sum_{\delta} e^{i\delta \cdot \lambda} \quad (37)$$

逆格子 vector についての和は 1st Brillouin zone に限る。Green 関数は容易に解けて次のようになる。

$$G_{\lambda}^{(+)} = \frac{1}{2\pi} \frac{n(\lambda)}{E - E(\lambda, \sigma) + Q(\lambda)} + \frac{1}{2\pi} \frac{n(\lambda) + \sigma}{E - E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)} \quad (38)$$

$$G_{\lambda}^{(-)} = \frac{1}{2\pi} \frac{-n(\lambda)}{E - E(\lambda, \sigma) + Q(\lambda)} + \frac{1}{2\pi} \frac{n(\lambda) + \sigma}{E - E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)} \quad (39)$$

$$E(\lambda, \sigma) = g\mu H + Z\sigma J_{\parallel} - \sigma Z J_{\perp} \cdot r(\lambda) \quad (40)$$

$$Q(\lambda) = \xi \frac{2}{N} \sum_{\nu} \{ Z J_{\perp} r(\nu) - Z J_{\parallel} r(\nu - \lambda) \} n(\nu) \quad (41)$$

時間に依存しない相関関数は，(12) に (38)，(39) を代入して $t = t'$ とおくと求まり

$$\begin{aligned} \langle b_f^+ b_g \rangle^{(+)} &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} e^{i\lambda \cdot (g-f)} n^{(+)}(\lambda) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \left\{ \frac{n(\lambda)}{e^{\beta \{E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)\}} + 1} + \frac{n(\lambda) + \sigma}{e^{\beta \{E(\lambda, \sigma) + Q(\lambda)\}} + 1} \right\} e^{i\lambda(g-f)} \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \langle b_f^+ b_g \rangle^{(-)} &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} e^{i\lambda \cdot (g-f)} n^{(-)}(\lambda) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \left\{ \frac{-n(\lambda)}{e^{\beta \{E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)\}} - 1} + \frac{n(\lambda) + \sigma}{e^{\beta \{E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)\}} - 1} \right\} e^{i\lambda(g-f)} \end{aligned} \quad (43)$$

(42)，(43) で $e^{i\lambda(g-f)}$ の係数を比較し，簡単な計算をすると

$$n^{(+)}(\lambda) = \frac{e^{\beta \{E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)\}} + 1}{e^{2\beta E(\lambda, \sigma)} - 1} \sigma \quad (44)$$

$$n^{(-)}(\lambda) = \frac{e^{\beta \{E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)\}} - 1}{e^{2\beta E(\lambda, \sigma)} - 2e^{\beta \{E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)\}} + 1} \sigma \quad (45)$$

(42), (43) には $n(\lambda)$, $n^{(+)}(\lambda)$, $n^{(-)}(\lambda)$ の三つの量が含まれている。 $n(\lambda)$ は本来 Green 函数の運動方程式の中に入っていた量で, $n^{(+)}(\lambda)$ と $n^{(-)}(\lambda)$ は (12) からそれぞれ $q^{(+)}$ と $q^{(-)}$ を用いて計算された量である。我々は (44) では $n^{(+)}(\lambda) = n(\lambda)$ とし, また, (45) では $n^{(-)}(\lambda) = n(\lambda)$ として解いた。(44), (45) を用いると相対的磁化 $\sigma (= 1 - 2\bar{n})$ を計算することができる。以下 $q^{(+)}$ に由来する量には (+) の, $q^{(-)}$ に由来する量には (-) の添字をつけることにすると,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma^{(+)}} &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{e^{2\beta E(\lambda, \sigma)} + 2e^{\beta \{E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)\}} + 1}{e^{2\beta E(\lambda, \sigma)} - 1} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{\cosh \beta E(\lambda, \sigma) + \cosh \beta Q(\lambda) - \sinh \beta Q(\lambda)}{\sinh \beta E(\lambda, \sigma)} \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma^{(-)}} &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{e^{2\beta E(\lambda, \sigma)} - 1}{e^{2\beta E(\lambda, \sigma)} - 2e^{\beta \{E(\lambda, \sigma) - Q(\lambda)\}} + 1} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{\sinh \beta E(\lambda, \sigma)}{\cosh \beta E(\lambda, \sigma) - \cosh \beta Q(\lambda) + \sinh \beta Q(\lambda)} \end{aligned} \quad (47)$$

ここで Tjablikov 近似 ($\xi = 0$ 従って $Q(\lambda) = 0$) の場合を考察する。(44), (45) から, また (46), (47) からそれぞれ

$$n^{(+)}(\lambda) = n^{(-)}(\lambda) = \frac{1}{e^{\beta E(\lambda, \sigma)} - 1} \sigma \quad (48)$$

$$\frac{1}{\sigma^{(+)}} = \frac{1}{\sigma^{(-)}} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \coth \frac{1}{2} \beta E(\lambda, \sigma) \quad (49)$$

となり「+」の交換関係で定義された Green 函数を用いて解いた結果が Tjablikov の結果 (「-」の交換関係で定義された Green 函数で解いた結果) と一致した。このことは注目すべきことである。

§ 4. 低温展開, Curie 温度, critical index

我々はこの節では $\xi = 1$ で $J_{\parallel} = J_{\perp} = J$, 即ち等方的な交換積分の場合を考察する格子は単純立方格子とする。 $Q(\lambda)$ は格子の対称性を利用すると

$$\begin{aligned} Q(\lambda) &= \frac{2}{N} \sum_{\nu} J \sum_{\nu} \{ r(\nu) - r(\nu - \lambda) \} n(\nu) \\ &= 2 \sum_{\nu} J \{ 1 - r(\lambda) \} P \end{aligned} \quad (50)$$

$$P \equiv \frac{1}{N} \sum_{\nu} r(\nu) n(\nu) \quad (51)$$

と変形することが出来る。以下 $n^{(+)}(\lambda)$, $\sigma^{(+)}$ だけを議論するため, 添字(+)を省略する。

1) 低温展開

先ず (44), (46) を $\exp(-\beta E(\lambda, \sigma))$ で展開する。

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma} &= 1 + \frac{2}{N} \sum_{n=0} \sum_{\lambda} e^{-(2n+1)\beta E(\lambda, \sigma) - \beta Q(\lambda)} \\ &\quad + \frac{2}{N} \sum_{n=0} \sum_{\lambda} e^{-2(n+1)\beta E(\lambda, \sigma)} \end{aligned} \quad (52)$$

$$n(\lambda) = \sigma \sum_{n=0} e^{-(2n+1)\beta E(\lambda, \sigma) - \beta Q(\lambda)} + \sigma \sum_{n=0} e^{-2(n+1)\beta E(\lambda, \sigma)} \quad (53)$$

(51) と (53) から

$$\begin{aligned} \frac{P}{\sigma} &= \frac{1}{N} \sum_{n=0} \sum_{\lambda} r(\lambda) e^{-(2n+1)\beta E(\lambda, \sigma) - \beta Q(\lambda)} \\ &\quad + \frac{1}{N} \sum_{n=0} \sum_{\lambda} r(\lambda) e^{-2(n+1)\beta E(\lambda, \sigma)} \end{aligned} \quad (54)$$

ここで外磁場 (H) を零とし, 逆格子 vector についての和を積分に置き換えて, 変形 Bessel 函数の漸近展開式を用いて積分を展開し, 最後に n

についての和をとること Riemann の ζ 函数にまとめることができる。 $\frac{P}{\sigma}$ の leading term が $\beta^{-\frac{3}{2}}$ であることがわかるから $O(\beta^{-\frac{9}{2}})$ まで求めると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma} = & 1 + \frac{2}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} (2\beta\sigma J)^{-\frac{3}{2}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{3}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} (2\beta\sigma J)^{-\frac{3}{2}} 2^{-\frac{5}{2}} \zeta\left(\frac{5}{2}, \frac{1}{2}\right) \left(\frac{2P}{\sigma}\right) \\ & + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{3}{4} (2\beta\sigma J)^{-\frac{5}{2}} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{15}{8} (2\beta\sigma J)^{-\frac{5}{2}} 2^{-\frac{7}{2}} \zeta\left(\frac{7}{2}, \frac{1}{2}\right) \left(\frac{2P}{\sigma}\right) \\ & + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{33}{64} (2\beta\sigma J)^{-\frac{7}{2}} \zeta\left(\frac{7}{2}\right) + O(\beta^{-\frac{9}{2}}) \end{aligned} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \frac{P}{\sigma} = & \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} (2\beta\sigma J)^{-\frac{3}{2}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{8} (2\beta\sigma J)^{-\frac{5}{2}} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \\ & - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{7}{128} (2\beta\sigma J)^{-\frac{7}{2}} \zeta\left(\frac{7}{2}\right) - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{3}{2} (2\beta\sigma J)^{-\frac{3}{2}} 2^{-\frac{5}{2}} \zeta\left(\frac{5}{2}, \frac{1}{2}\right) \left(\frac{2P}{\sigma}\right) \\ & + O(\beta^{-\frac{9}{2}}) \end{aligned} \quad (56)$$

ここに

$$\zeta(Z, a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(a+n)^Z}, \quad \zeta(Z, 1) = \zeta(Z)$$

$$\zeta\left(Z, \frac{1}{2}\right) = (2^Z - 1) \zeta(Z)$$

(55), (56) を self consistent に iteration して解くと自発磁化の低温展開式が得られる。

$$\sigma = 1 - a\beta^{-\frac{3}{2}} - b\beta^{-\frac{5}{2}} - \left(c + \frac{1}{2}a^2\right)\beta^{-3} - d\beta^{-\frac{7}{2}} - (e + 2ab)\beta^{-4} + O(\beta^{-\frac{9}{2}}) \quad (57)$$

$$a = \frac{2}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} (2J)^{-\frac{3}{2}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$$

$$b = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{3}{4} (2J)^{-\frac{5}{2}} \zeta\left(\frac{5}{2}\right)$$

$$c = -\frac{3}{(2\pi)^3} (2J)^{-3} 2^{-\frac{3}{2}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{5}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$d = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{33}{64} (2J)^{-\frac{7}{2}} \zeta\left(\frac{7}{2}\right)$$

$$e = \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \frac{3}{8} (2J)^{-4} \left[2^{\frac{3}{2}} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \zeta\left(\frac{5}{2}, \frac{1}{2}\right) - 5 \cdot 2^{\frac{5}{2}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{7}{2}, \frac{1}{2}\right) \right]$$

この結果, $T^{\frac{3}{2}}$, $T^{\frac{5}{2}}$, $T^{\frac{7}{2}}$ は Dyson の Born 近似による正確な値と一致した。 T^3 の係数は零にはならなかったが Tjablikov の値に比べて小さくなり, 符号反対で絶対値はその 37% の値がえられた。 T^4 の係数は Dyson の結果と異なった。

2) Curie 温度

我々は Curie 温度を $\sigma \rightarrow 0$, $\frac{H}{\sigma} \rightarrow 0$ の極限として求めることが出来る。(51) で表わされる P の Curie 点での値を求めるため (44) の $n(\lambda)$ を展開する。先ず $Q(\lambda) = A F P \cdot \frac{1}{\beta}$ とおくと $A = Z J \beta$, $F = 1 - r(\lambda)$ 従って

$$n(\lambda) = \frac{-1}{2} \sigma + \sigma \frac{2 - 2AFP + \frac{1}{2}(2AFP)^2 - \frac{1}{3}(2AFP)^3 + \frac{1}{4}(2AFP)^4 - \frac{1}{5}(2AFP)^5 -}{2\beta g \mu H + 2\beta \sigma AF} \quad (58)$$

Curie 点における量には添字 C をつけて表わすと

$$n_c(\lambda) = \frac{1}{A_c F} - P_c + A_c F P_c^2 - \frac{2}{3} (A_c F)^2 P_c^3 + \frac{1}{3} (A_c F)^3 P_c^4 - \frac{2}{15} (A_c F)^4 P_c^5 - \quad (59)$$

(51) に代入して和を積分に直して計算すると

$$P_c = \frac{0.51639}{A_c} - \frac{1}{6} A_c P_c^2 + \frac{2}{9} A_c^2 P_c^3 - \frac{41}{216} A_c^3 P_c^4 + \frac{17}{135} A_c^4 P_c^5 + \dots \quad (60)$$

また (46) を展開した (61) を用いて

$$A_c = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{1 + e^{-Q_c}}{1 - r(\lambda)} \quad (61)$$

または $\frac{1}{N} \sum n_c(\lambda) = \frac{1}{2}$ を用いて $\beta_c J$ に対する展開式を求めると

$$\beta_c J = 0.50546 - \frac{A_c P_c}{3} + \frac{(A_c P_c)^2}{3} - \frac{7}{27} (A_c P_c)^3 + \frac{1}{6} (A_c P_c)^4 - \frac{149}{1620} (A_c P_c)^5 + \dots \quad (62)$$

(60) を iteration して $A_c P_c = 0.49$ と求め (62) に代入して Curie 点を $\beta_c J = 0.40$ と求めることが出来る。

この結果は Tjablikov の 0.505, 分子場近似の 0.33, Callen の 0.370 と比べてみると Callen の値に近い。

3) Critical index

$T \leq T_c$ における磁化 σ の温度依存性は (46) で $H = 0$ とし σ について展開することにより求まる。

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma} &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{e^{2\sigma AF} + 2e^{\sigma AF - 2PAF} + 1}{e^{2\sigma AF} - 1} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{2 + 2e^{-2APF}}{2\sigma AF} + \frac{1}{3N} \sum_{\lambda} \frac{2 - e^{-2APF}}{2\sigma AF} (\sigma AF)^2 \end{aligned} \quad (63)$$

$$A = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{1 + e^{-2APF}}{F} + \frac{\sigma^2}{6N} \sum_{\lambda} (2 - e^{-2APF}) F A^2 \quad (64)$$

(64) の才1項は (61) により Curie 温度を与えることがわかる。従って

$$\sigma \simeq (T_c - T)^{-\frac{1}{2}}$$

このように critical index $\beta = \frac{1}{2}$ となる。

また $T \gtrsim T_c$ のときの帯磁率を $\sigma \rightarrow 0$, $H \rightarrow 0$ の極限と考えて求める。

$$\beta Z J = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \frac{1 + e^{-\beta Q(\lambda)}}{\frac{1}{J Z \chi_T} + 1 - r(\lambda)} \quad (65)$$

$$P = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} r(\lambda) \frac{1 + e^{-\beta Q(\lambda)}}{\frac{1}{J Z \chi_T} + 1 - r(\lambda)} \cdot \frac{1}{\beta Z J} \quad (66)$$

(65), (66) が帯磁率 χ_T を与える式である。 $\chi_T \rightarrow \infty$ とすると Curie 温度を与える式になる。 $Q(\lambda) = 0$ のときは Tjablikov 近似で $\chi_T \simeq (T - T_c)^{-2}$ 。我々は $\exp(-\beta Q(\lambda))$ を 2 項まで展開して求めたが critical index r は Tjablikov 近似の場合と変わらず $r = 2$ である。

§ 5. 討 論

我々は $n^{(+)}(\lambda)$, $\sigma^{(+)}$ から, 低温展開や Curie 温度 critical index を求めた。当初 $Q^{(+)}$ から求めた結果と $Q^{(-)}$ から求めた結果がさほど違わないことを期待した。しかし $n^{(-)}(\lambda)$, $\sigma^{(-)}$ は我々の期待する結果を与えなかった。 $E(\lambda, \sigma) \rightarrow 0$ の極限で $n^{(+)}(\lambda)$ と $n^{(-)}(\lambda)$ は異なった様子を示す。 $n^{(-)}(\lambda)$ からの Curie 点は ∞ になる不都合を含んでいる。現在 $n^{(-)}(\lambda)$ の分析をして, そのような原因が何に起因するのかを考察中である。

終りに, 有益な議論をして下さった守田徹助教授, 猪苗代盛助教授, 並びに研究室の方々に感謝致します。

Reference

- (1) S. V. Tjablikov, Ukr. Mat. Zh. 11, 287 (1959)
- (2) F. J. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217, 1230 (1956)
- (3) W. Opechowski, Physica 4, 181 (1937); 6, 1112 (1938)
- (4) T. Oguchi and A. Honma, J. Appl. Phys 34, 1153 (1963)
- (5) K. Kawasaki and H. Mori, Prog. Theor. Phys. 28, 690 (1962)
- (6) R. A. Tahir-Kheli and D. ter Haar, Phys. Rev. 127, 88, 95 (1962)
- (7) H. B. Callen, Phys. Rev. 130, 890 (1963)
- (8) J. A. Copeland and H. A. Gersch, Phys. Rev. 143, 236 (1965)
- (9) R. A. Tahir-Kheli, Phys. Rev. 132, 689 (1963)
- (10) C. W. Haas and H. S. Jarrett, Phys. Rev. 135, 1089 (1964)
- (11) M. Ristic und G. Obermair, Z. Physik. 186, 114 (1965)
- (12) T. Morita and T. Tanaka, Phys. Rev. 137, 648 (1965),
138, 1395 (1965)
- (13) I. Ortenburger, Phys. Rev. 136, 1374 (1964)
- (14) J. F. Cooke and H. A. Gersch, Phys. Rev. 153, 641 (1966)
- (15) M. Bloch, Phys. Rev. Letters 9, 286 (1962); J. Appl.
Phys. 34, 1151 (1963)