

強磁性不規則スピン系のスピン波(I)^{*}

川 村 清 (東大物性研)

(4月9日受理)

§ 1 Introduction

次のようなハミルトニアンで記述される系を考える。

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.1)$$

ここで、 i, j は、スピンの存在する格子点をあらわすが、そのスピンは、結晶の中に at random に分布しているものとする。 J_{ij} は、 i -site のスピンと j -site のスピン間の＜交換相互作用の行列要素で、 i -site と j -site の距離のみに依存しているとする。しかも

$$J_{ij} = J(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) > 0 \quad (1.2)$$

を仮定する。このようなハミルトニアンで記述される不規則スピン系は、ある条件のもとでは低温で強磁性体になるものと考えられる。その条件は複雑であろうが、このノートでは、強磁性体であることを仮定し、自発磁化の方向を z -軸とする。

$$\langle S_z \rangle \neq 0 \quad \langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0 \quad (1.3)$$

次に、

$$S \gg 1 \quad (1.4)$$

を仮定すると、(1.1) の spin operator の各成分は (1.3) の下で次のように近似的にあらわせる。

*) この仕事は、筆者がアトム型研究員として、京大基研滞在中に行われた。

$$\begin{aligned} S_{ix} &= (S/2)^{\frac{1}{2}} (b_i^+ + b_i) \\ S_{iy} &= (S/2)^{\frac{1}{2}} i (b_i^+ - b_i) \\ S_{iz} &\cong S - (1/2S) [S_{ix}^2 + S_{iy}^2] \end{aligned} \quad (1.5)$$

ここでもしも

$$[b_i, b_j^+] = \delta_{ij} \quad (1.6)$$

を仮定すれば (1.5) の各成分は $S \gg 1$ でたしかにスピンの交換関係を満足する。(1.5) は強磁性金属のスピンの波近似と同じ形をしている。ただ違うのは、スピンの規則的に並んでいないから、スピン "波" になるかどうか怪しいということである。われわれは、以下で b_i^+ で作られ b_i で消される boson を "localized magnon" と呼ぶ。

(2.2) を (2.1) に代入して、(1.4) を使うと、

$$H = \sum_i W_i b_i^+ b_i + \sum_{ij} V_{ij} b_i^+ b_j \quad (1.7)$$

となる。ここで

$$\begin{cases} V_{ij} = -S J_{ij} \\ W_i = S \sum_{\ell} J_{i\ell} = \sum_{\ell} U_{i\ell}, \quad U_{i\ell} = -V_{i\ell} \end{cases} \quad (1.8)$$

(1.7) で $W_i = 0$ とおくと、(1.7) は、まさに Matsubara and Toyozawa¹⁾ によって考察された不純物伝導の Hamiltonian と同じ形をしている。ところが今は、 $W_i \neq 0$ でしかも、場所毎に異なる値を持っている。²⁾ 不純物伝導で、 $V_{ii} \neq 0$ という場合は、Matsubara and Kaneyoshi によって考察された。彼らの場合、(1.7) の W_i は、 V_{ij} と独立な random variables である。しかし、われわれの場合は、(1.8) があるから、 W_i は、 V_{ij} の分布についての完全な知識が与えられれば一意的に決るものである。ここに、われわれの問題が不純物伝導の問題より更に一段むづかしいところがある。

その困難を乗り越えるべき方法はまだ見つけていない。このノートは、したがって、特定の研究結果の報告でもなければ、また、見通しのついたものについての予告編でもない。むしろ、問題の提起と思っていただきたい。

§ 2 Green関数と問題の定式化

ここで magnon の Green 関数を定義しておこう。

$$G_{ij}(z) = \langle 0 | b_i (z-H)^{-1} b_j^+ | 0 \rangle \quad (2.1)$$

ここで $|0\rangle$ は、magnon の全くない状態で、すべての spin が完全にそろった ground state である。(1.7) を (2.1) に代入して

$$\begin{aligned} G_{ij}(z) &= G_i(z) \delta_{ij} + G_i(z) (V_{ij}/z) G_j(z) \\ &\quad + G_i(z) \sum_{k_1} (V_{ik_1}/z) G_{k_1}(z) (V_{k_1j}/z) G_j(z) \\ &\quad + G_i(z) \sum_{k_1 k_2} (V_{ik_1}/z) G_{k_1}(z) \\ &\quad \times (V_{k_1 k_2}/z) G_{k_2}(z) + \dots \end{aligned} \quad (2.2)$$

ここで

$$G_k(z) = \langle 0 | b_k (z - W_k b_k^+ b_k)^{-1} b_k^+ | 0 \rangle \quad (2.3)$$

(2.2) は、一見、Matsubara - Kaneyoshi の展開に似ているが、前述のような事情で、取り扱い是一段と複雑である。たとえば右辺第3項は、 k_1 -site の磁場 W_{k_1} の関数 $G_{k_1}(z)$ を含んでいる。この W_{k_1} は (1.8) で分るように $G_{k_1}(z)$ の両側の V_{ik_1} 及び V_{k_1j} によっている。

更に、(2.3) を (W/z) で展開し、(2.2) に代入すると、(2.2) の各項は、

$$\sum_{k_1 k_2 \dots k_n} V_{ik_1} V_{k_1 k_2} \dots V_{k_n j}$$

のように suffix のつながっている項と、

$$\sum_{k_1 k_2} V_{ik_1} (\sum_l U_{k_1 l}) V_{k_1 k_2} \dots$$

のように suffix について，独立に和をとる項がある。

以上の方法で展開した各項を計算するために，まず不純物の位置について各項を平均する。その前に，次のような random parameter を導入する。

$$\xi_k \equiv \xi(R_k) = \begin{cases} 1 & R_k \text{ という位置に不純物がある時} \\ 0 & \text{その他の場合} \end{cases}$$

したがって，

$$V_{ij} \rightarrow \xi_i V_{ij} \xi_j$$

というおきかえをやり，同様のことを U にも行えばこれまでの不純物の site についての和は結晶全体の格子点の和におきかえられる。以下では，Formulation の便利の為に，上の ξ と全く同じ性質をもつ η という parameter を導入し，

$$U_{il} \rightarrow \xi_i U_{il} \eta_l^i$$

というおきかえをやる。

故に，最終的には，

$$\sum_{\text{all sites}} \xi_{k_1} \dots \xi_{k_n} \eta_{l_1}^{\alpha} \dots \eta_{l_m}^{\beta} < \xi_{k_1} \dots \xi_{k_n} \eta_{l_1}^{\alpha} \dots \eta_{l_m}^{\beta} > \\ \times V_{ik_1} \dots V_{knj} (U_{k\alpha l_1}) \dots (U_{k\beta l_m})$$

が計算出来ればよい。ここで $< \dots >$ は，不純物の位置についての平均である。

§ 3 Graphical Representation のむづかしさ

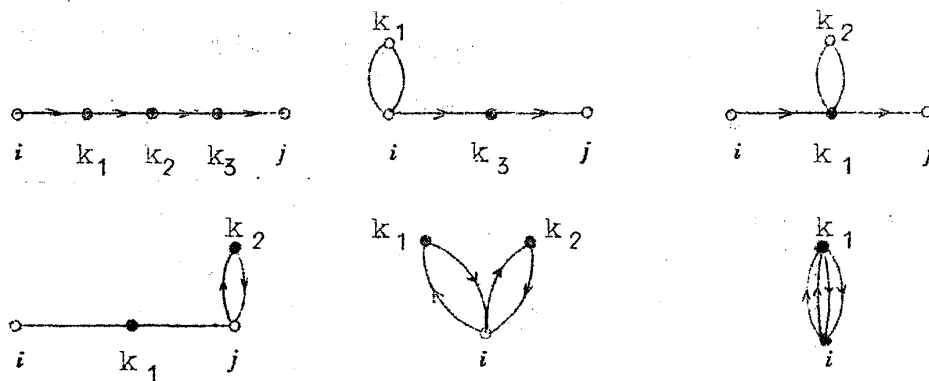
さて，前節で formal に $G_{ij}(z)$ を書いたが，この計算法は実は大変やっかいである。展開の各項は，これまでの他の研究者の議論を使って形式的に議論出来るが，各グラフの寄与を具体的に計算するのは，実にやっかいである。筆者の現段階での考えは，その困難を直接的に突破すべきか，あるいは，回り道をして逃げるべきか，決まっていない。両方を試みているが，そ

れは後に廻すとして、ここでは、グラフ法のむづかしさを指摘するにとどめたい。

我々の問題のむづかしさは、 U の存在に由来している。(1.7) で $W_i = 0$ 1) とおいた場合は、これまでに Matsubara - Toyozawa, Yonezawa - Matsubara 3) 及び Matsubara - Kaneyoshi 2) の議論がある。この場合は $\langle \xi_i \dots \xi_k \rangle$ を cumulant で展開すればよい。たとえば

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 k_2 k_3} V_{ik_1} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_3} V_{k_3 j} \langle \xi_i \xi_{k_1} \xi_{k_2} \xi_{k_3} \xi_j \rangle \\ &= \sum_{k_1 k_2 k_3} \left[V_{ik_1} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_3} V_{k_3 j} \right. \\ & \quad \langle \xi_i \rangle_c \langle \xi_{k_1} \rangle_c \langle \xi_{k_2} \rangle_c \langle \xi_{k_3} \rangle_c \langle \xi_j \rangle_c \\ & \quad + V_{ik_1} V_{k_1 i} V_{ik_3} V_{k_3 j} \langle \xi_i \xi_{k_2} \rangle_c \langle \xi_{k_1} \rangle_c \langle \xi_{k_3} \rangle_c \langle \xi_j \rangle_c \\ & \quad + V_{ik_1} V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_1} V_{k_1 j} \langle \xi_i \rangle_c \langle \xi_{k_1} \xi_{k_3} \rangle_c \langle \xi_{k_2} \rangle_c \langle \xi_j \rangle_c \\ & \quad + V_{ik_1} V_{k_1 j} V_{jk_2} V_{k_2 j} \langle \xi_i \rangle_c \langle \xi_{k_1} \rangle_c \langle \xi_{k_2} \rangle_c \langle \xi_{k_3} \xi_j \rangle_c \\ & \quad + V_{ik_1} V_{k_1 i} V_{ik_3} V_{k_3 i} \langle \xi_i \xi_{k_2} \xi_j \rangle_c \langle \xi_{k_1} \rangle_c \langle \xi_{k_3} \rangle_c \delta_{ij} \\ & \quad \left. + V_{ik_1} V_{k_1 i} V_{ik_1} V_{k_1 i} \langle \xi_i \xi_{k_2} \xi_j \rangle_c \langle \xi_{k_1} \xi_{k_3} \rangle_c \delta_{ij} \right] \quad (3.1) \end{aligned}$$

ここで独立な random variables を含む cumulant は消えること 4) 及び V の対角要素は zero とおいてよいことを使った。(3.1) の各項は第1図のような graph で表現出来る。



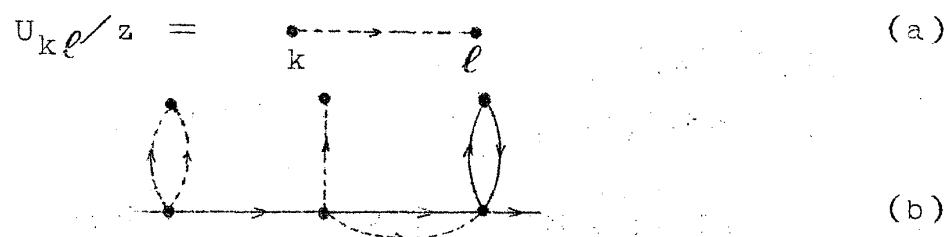
第 1 図

これらの graph で s ・本の線が入るか出る点は、

$$P_s(c) = \langle \xi^s \rangle_c$$

をあらわす。ただし、 c は不純物の濃度である。

われわれの問題を同じように graph であらわすには第1図の他に U をあらわす line をつけ加えればよい。 U_{kl}/z を第2図aのように記して、第2図bのような点線の入った graph を考えればよい。



第 2 図

ただし、点線の入った graph は、読み方が少し面倒である。実線より簡単なのは、点線の出て行く点の cumulant の order をあげないことで、(b) の実線上の点は左から右へ

$$P_1(c), \quad P_1(c), \quad P_3(c)$$

を与える。

まず第一に面倒なのは、第3図のように一つの点から出る点線のあつまりは、決して点と線の各 element の寄与の積ではないということである。余計な factor (第3図の場合 = 3) がつく。

$$= 3 (U_{kl_1}/z)^2 (U_{kl_2}/z)^2$$

第 3 図

この factor の出所は、次のような量を考えれば判る。

$$\sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4} (U_{k\ell_1}/z) (U_{k\ell_2}/z) (U_{k\ell_3}/z) (U_{k\ell_4}/z) \times \langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_2} \eta_{\ell_3} \eta_{\ell_4} \rangle \quad (3.3)$$

η の積の平均値を cumulant で書くと、 η を二つずつふくむ cumulant の積の項を explicit に残すと、つぎの形になる。

$$\begin{aligned} & \langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_2} \eta_{\ell_3} \eta_{\ell_4} \rangle \\ &= \langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_2} \rangle_c \langle \eta_{\ell_3} \eta_{\ell_4} \rangle_c + \langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_3} \rangle_c \langle \eta_{\ell_2} \eta_{\ell_4} \rangle_c \\ &+ \langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_4} \rangle_c \langle \eta_{\ell_2} \eta_{\ell_3} \rangle_c + \dots \end{aligned} \quad (3.4)$$

これを (3.3) に代入すると三つの term の寄与が等しくなって factor 3 が出る。

しかし、この factor がいかにややこしくとも、一つの点線から出る点線のあつまりは、もし、それが実線上の他の点におちないかぎり、

$$G^{(0)}(z) = \langle z / (z - W_i) \rangle$$

を与えることは明らかだから扱い方は何とかなる。($V=0$ $W \neq 0$ の場合は、第3図のような graph しかない。)

もっとやっかいなのは、実線がまじわっている graph である。例として、次の3つの量の平均値を考えよう。

$$\sum_{k_1 k_2 k_3 \ell_1 \ell_2} (U_{k_1 \ell_1}/z) (U_{k_1 \ell_2}/z) (V_{k_1 k_2}/z) (V_{k_2 k_3}/z) \times \langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_2} \xi_{k_1} \xi_{k_2} \xi_{k_3} \rangle \equiv F_1(z)$$

$$\sum_{k_1 k_2 k_3 \ell_1 \ell_2} (U_{k_1 \ell_1}/z) (V_{k_1 k_2}/z) (V_{k_2 k_3}/z) (U_{k_2 \ell_2}/z) \times \langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_2} \xi_{k_1} \xi_{k_2} \xi_{k_3} \rangle \equiv F_2(z)$$

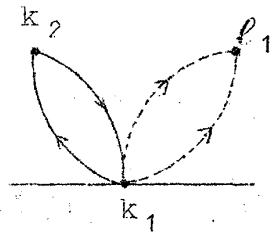
川村 清

$$\sum_{k_1 k_2 k_3 \ell_1 \ell_2} (V_{k_1 k_2} / z) (V_{k_2 k_3} / z) (U_{k_3 \ell_1} / z) (U_{k_3 \ell_2} / z) \\ \times \langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_2} \xi_{k_1} \xi_{k_2} \xi_{k_3} \rangle \equiv F_3(z)$$

これらの中にあるモーメントを cumulant で展開し, $\langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_2} \rangle_0$
 $\langle \xi_{k_1} \xi_{k_3} \rangle_0$ を含む項は全て,

$$\sum_{k_1 k_2 \ell_1} (U_{k_1 \ell_1} / z)^2 (V_{k_1 k_2} / z) (V_{k_2 k_1} / z) \\ \times \langle \eta_{\ell_1} \eta_{\ell_2} \rangle_0 \langle \xi_{k_1} \xi_{k_3} \rangle_0 \langle \xi_{k_2} \rangle_0$$

を与えるから第4図の graph は余計な factor 3 を与える。



$$= 3 P_2(c) P_1(c) P_2(c)$$

$$\times \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} (U_{k_1 \ell_1} / z)^2 (V_{k_1 k_2} / z)^2$$

第 4 図

第4図のような graph は

$$\langle (\eta_k z / (z - W_k))^2 \rangle = \langle \eta_k z / (z - W_k) \rangle^2$$

だけでは説明がつかない。この量は, $F_1(z)$, $F_3(z)$ が寄与するが, $F_2(z)$ の寄与は, 他の形で与えられなくてはならないからである。

§ 4 Discussion

“Discussion” と銘うって, 何も physics に寄与しない。この小稿を書いた言い訳をかかせて頂く。まず第一に Matsubara — Yonezawa³⁾ Matsubara — Kaneyoshi²⁾ の cumulant 法は, 数学的に確実なものでありながら, 今の問題に適用すると実にやっかいであり, 余計な factor が出るということを強調しておく必要があるということである。近年, 不

純物スピン系が ordered state にある時，それからの excitation が関心を引いているが，いずれ以上指摘したややこしさに，誰もがつき当ると思われるので，あらかじめその点を例示しておくことは意味のないことではなからう。

第二に，筆二に，筆者としては，今後，いささか逃げ腰の議論をして行くつもりである。その時，何故これまでに確立された方法をまじめに follow しないのかという疑問を引きおこされては困るということがある。その時の言い分けの為の布石として，正攻法が私の手には負えませんという白状をしておきたかったということが，この小稿の第二の動機である。

謝 辞

私が不純物スピン系のマグノンに興味を抱いたのは，中嶋教授の示唆による。また，基研に滞在して，不規則系の研究グループの方々から，いろいろ教えて頂く機会を得たのも，中嶋教授に負う所が多い。滞在中，いろいろとお世話して下さい，松原先生，松田先生，武野先生，米沢さんに，心から感謝する。

文 献

- 1) T.Matsubara and Y.Toyozawa, Prog. Theor. Phys., 26, 739, (1961)
- 2) T.Matsubara and T.Kaneyoshi, Prog. Theor. Phys., 36, 695, (1966).
- 3) F.Yonezawa and T.Matsubara, Prog. Theor. Phys., 35, 357, (1966).
- 4) R.Kubo. J.Phys. Soc. Japan, 17, 1100, (1962).