# On Random Phase and Callen Approximations to Ferromagnet with Anisotropic Exchange Interaction

# On Random Phase and Callen Approximations to Ferromagnet with Anisotropic Exchange Interaction

Seitaro MATAYOSHI*

**Abstract**

The random phase and Callen approximations to ferromagnet with anisotropic exhange interactions have been discussed on the basis of rigorous theory.

When compared with the reslts of one and two dimensional systems, it has been found that these approximations are good in the case of isotropic and oblate anisotropic interactions but not in the case of prolate anisotropic interactions.

We have also suggested improvements to the approximations mentioned above.

## §1. Introduction

Heisenbergがferromagnetについてのmodel を出して以来，これについての研究が数多くなされてきた。それらは大別すると次のように分類出来る。

(i) 高温展開の方法[1)〜4)]

(ii) 有効ハミルトニアンの方法[5)〜9)]

(iii) スピン波の理論[10)〜13)]

(iv) Green関数法の応用[14)〜22)]

高温展開法は文字通り温度の逆数についての展開であって，何らの近似も導入せずに$T \gg T_c$で有効な結果が得られる。然し，次数が高くなるにつれ，その算出は極めて，困難となる。現在，zero-field susceptibility $\chi$ 等の物理量が$T^{-7}$まで計算されている[29)]。

有効ハミルトニアンの方法では，多くて，数個のスピンの系に働らく有効場（分子場）を仮定し，この場についてのself-consistent equationを導出する。この方法はCurie point $T_c$ 近傍ではかなりよいと考えられているが，低温領域ではよくない。現在のところ，constant coupling近似[9)]によるものが，一番よいようである。

Heisenberg modelでは低い状態の固有energyは容易に求まるので低温領域（$T \ll T_c$）で，Blochによって導入されたスピン波の概念[10)]は比較的簡単にしかも厳密に理論構成出来る。しかし，$T_c$などの高温度領域に理論を拡張するのは不可能であろう。スピン波間の相互作用を考慮してDyson[12)]やOguchi[13)]等がmagnetization等の物理量を$T^4$まで求めた。

以上の三方法にはどれにも一長があって，一短がある。$T \ll T_c$，$T \simeq T_c$，$T \gg T_c$ などの全領域でうまく理論構成できる方法が強く望まれる。そのような方法があるならば，そのような方法こそ勢力的に研究するに価するものであろう。

このときに，登場したのが，TyablikovによるGreen関数法の応用[14)]で，全温度領域でかなり

Received April 30, 1978

* Dept of Physics, Sci & Eng Div, Univ of the Ryukyus.

よい結果を与えた。Green関数は低温領域では，collective mode を良く表現し，高温領域では individual mode をよく表現するからである。このGreen 関数法に全く問題がないわけではない。否，むしろ，重大な難点が存在する。Green 関数についての運動方程式の系が，一般に閉じないので，どのように閉じさせるかというところに大きな問題が発生するのである。

Tyablikov はともかくもR. P. A. で，運動方程式の系を閉じさせ，全般的にかなり良好な結果を得たのであるが，近似の粗さから混入してくる悪い影響をさけることはできなかった。

この近似の粗さを克服するために，多くの研究者が挑戦したけれども，本命と思われる改良の方法は未だ見つかっていない。

これらの理論のうち，Callen[15] のものはTyablikovのものについで簡単な理論である。Callenの近似（*C. A.*）は *R. P. A.* による項の他に spin deviation を考慮した新しい項を附加している。このような近似法でCallenはTyablikov のものよりも大体において良い結果を得た。この他の理論は，その近似法と計算において複雑であり，結果は大同小異になるかある場合には悪くするかである。[16]~[22]

この論文では，以上の近似法のうち全温度領域でかなり良好な結果を与え，且比較的簡単である *R. P. A.* と *C. A.* をとりあげて，$\lambda$ がスピンの$Z$成分に作用し，$\mu$ が$X-Y$成分に作用するような一軸系のanisotropic Heisenberg ferromagnet に応用する。このような,ferromagnet に応用すると，近似の本質はみやすくなる。こうして近似の妥当性を検討し，どのようにすれば改良できるのかを議論するのが目的である。

以上のための計算プロセスに，Green 関数法を使用しないで，演算子についての運動方程式を使用する。Green 関数という牛刀を使用しないでも，殆んど同じ形式で理論の展開が可能であり，且同じ結果に到達するからである。

我々が具体的に算出するのは一次元と二次元の系のcurie point $T_c$である。三次元の系とは異なり，これらの次元ではIsing modelやHeisenberg modelなどの特別な場合に $T_c$ の厳密な値がわかっている[20],[25]ので，近似理論の検討のためには好都合である。

Dalton and Wood[23] もanisotropic Heisenberg ferromagnet を研究したが，彼等の近似法は *R. P. A.* で且 $\lambda=1$，$1\geq\mu\geq 0$ の場合に限定している。従って，我々の理論の中に含まれることになる。

さて，$\lambda$と$\mu$の特別な値における厳密理論から $T_c$ について以下のように推測される。任意の$\lambda$と$\mu$について，$T_c=T_c(\lambda,\mu)$ とおくと，

a）一次元の系では，$T_c(\lambda,\mu)=0$

b）二次元の系では，$\dfrac{kT_c(1.0)}{J}=1.135\cdots$から出発して，$\mu$の単調減少関数としてふるまい，$\lambda=\mu=1$ で $T_c(1.1)=0$ となる。$0\leq\lambda\leq\mu=1$ のときは，常に $T_c(\lambda,1)=0$。

それでは我々の *R. P. A.* と *C. A.* による結果はどうなっているか？ 以下に，これをみてみよう。

i） oblate anisotropic case（$\lambda\leq\mu=1$）

一次元，二次元の系で

$$T_c^{R,P,A}=T_c^{C,A}=0$$

となって，上記の推測通りになっている。

ii ) prolate anisotropic case ( $1=\lambda>\mu$ )

一次元，二次元の系で

$$T_C^{W,A} \geq T_C^{R,P,A} \geq T_C^{C,A}$$

となって推測値よりかなりはずれており $\mu=0$ でそれが最大になっている。従って，oblate anisotropic case に比べて，近似は悪くなっていると考えざるを得ない。それでも，*C. A.* は *R. P. A.* よりましである。

これらに加えて，次のこともわかった。

iii) $T_C^{P,P,A}(1,\mu)$ に比べて $T_C^{C,A}(1,\mu)$ はおだやかに変化する。特に，二次元の系で，$\lambda=1$，$\mu\lesssim 1$ のときの突然に変化する変化の仕方は $T_C^{R,P,A}(1,\mu)$ に比べて，$T_C^{C,A}(1,\mu)$ はおだやかである。

§ 2 では，anisotropic Heisenberg ferromagnet についての運動方程式を *R. P. A.* と *C. A*，で線形化し，critical point $T_c$ を算出する。§ 3 では結果の解釈と近似についての検討並びにその改良についての議論を行なう。Appendix では Weiss 近似 (*W. A.*) を運動方程式の立場でまとめ，近似の検討に寄与せしめる。

## § 2. Linearlization of Equation of Motion by R. P. A. and C. A. and Calculation of Curie Point $T_C$.

我々の議論の出発点は次のハミルトニアンである。強磁性体の磁化容易軸は通常の通りに $Z$ 軸方向にあるものとする。

$$\mathcal{H}=-g\mu_B H\sum_j S_j^z-2J\sum_{(i,j)}\left\{\lambda S_i^z S_j^z+\frac{\mu}{2}\left(S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+\right)\right\}$$

$\lambda$ と $\mu$ は先に述べたように anisotropic parameter であり，$\lambda=1$，$\mu=0$ ならば Ising model になり，$\lambda=\mu=1$ ならば Heisenberg model になり，$\lambda=0$，$\mu=1$ ならば $X-Y$ model になる。自然界に存在する ferromagnet は，これらの limit model の中間状態のハミルトニアンで記述される。$S_j$ は $j$ 格子点の上にあるスピンであることを示す。

スピンの大きさは $S=\frac{1}{2}$ であるとする。これは計算を簡単にするためばかりではなく，他にも意図がある。*C. A.* は $S\geq 1$ の場合には良好な近似であるが，$S=\frac{1}{2}$ の場合にはそれ程よいとは言えない。このよいとは言えない場合で *C. A.* を検討し，改良するにはどうしたらよいかを議論したいためである。

交換積分 $J$ は正で，最近接格子間だけに働くものと仮定されている。

次のように Pauli operator を導入する。

$$S_j^+=b_j\,,$$

$$S_j^-=b_j^+\,,$$

$$S_j^z=\frac{1}{2}-b_j^+b_j=\frac{1}{2}-n_j\,.$$

lattice site j に，spin deviation を $b_j^+$ は作り出し，$b_j$ はこわす働きをする。この operator は次の交換関係に従う。

$$\left[b_i, b_j^+\right] = \delta_{ij}\left(1 - 2\, n_j\right)$$

$$\left[b_i, b_j\right] = \left[b_i^+,\ b_j^+\right] = 0$$

$$b_i^2 = \left(b_i^+\right)^2 = 0$$

Pauli operatorは同じ格子点では，Fermi的にふるまい，異る格子点では，Bose 的にふるまう。

ハミルトニアンをPauli operatorで書き換える。

$$\mathfrak{H} = E_0 + \left(g\mu_B H + ZJ\lambda\right)\sum_j n_j - 2\,J\sum_{(ij)}\left(\lambda\, n_i\, n_j + \mu b_i^+ b_j\right) \qquad (1)$$

ここで，$Z$は最近接格子点の数であり，$E_0$は系の基底energyであって，次の式で支えられる。

$$E_0 = -\frac{1}{2}Ng\mu_B H - \frac{1}{4}NZJ\lambda$$

operator

$$b_j(\beta) = e^{\beta\mathfrak{H}}\, b_j\, e^{-\beta\mathfrak{H}},\quad b_i(0) = b_j$$

について運動方程式を作る。

$$\frac{d}{\alpha\beta}b_j = -\left[b_j, \mathfrak{H}\right]$$

$$= -\left(g\mu_B H + ZJ\lambda\right)b_j + J\mu\sum_\rho b_{i+\rho}$$

$$+ 2\,J\sum_\rho\left(\lambda\, n_{j+\rho}\, b_j - \mu n_j\, b_{j+\rho}\right) \qquad (2)$$

ここで，$\rho$はある格子点$j$から，その最近接格子点までのベクトルであることを示す。

この方程式は，これだけでは閉じていないので解くことは出来ない。

方程式（2）の右辺第二項に$R.\,P.\,A.$を施して，運動方程式を線形化しよう。

$$\sum_\rho\left(\lambda\, n_{j+\rho}\, b_j - \mu n_j\, b_{j+\rho}\right) \simeq \bar{n}\sum_\rho\left(\lambda\, b_j - \mu\, b_{j+\rho}\right)$$

ここで，系にtranslational symmetryを仮定しているので

$$\bar{n} = \langle n_j\rangle = \langle n_{j+\rho}\rangle$$

である。$\langle n_j\rangle$は$n_j$のensemble averageであることを示す。

以上の線形化された方程式を解いて，magnetization $\sigma$についてのself-consistent equation（$S.\,C.\,E.$）作る。

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{2}{N}\sum_k \coth\frac{\beta E_k}{2} \qquad (3)$$

$$E_k = g\mu_B H + 2\,ZJ\sigma(\lambda - \mu\gamma_k)$$

$$\gamma_k=\frac{1}{Z}\sum_{\rho}e^{ik\rho}$$

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

$k$は第一ブリルアン，ゾーンにおける波数ベクトルである。

このS. C. E.（3）は外場$H$について，当然，期待される anti-symmetric relation $\sigma(\beta, H)=-\sigma(\beta, -H)$を満たしている。方程式（3）で$\lambda=\mu=1$とおくと，Tyablikov がG. F. 法で得た結果になる。

又，$\lambda=1$，$1\geq\mu\geq0$とおくと，Dalton and Wood理論の対応する式に一致する。

さて，方程式（3）で$H=0$，$\sigma\to0$として被積分関数を展開すると，curie point $T_c$を定める式が得られる。

$$\frac{J}{kT_c}=\frac{2}{NZ}\sum_k\frac{1}{\lambda-\mu\gamma_k}$$

これをlinear chain latticeとsimple quadratic latticeについて具体的に計算すると次の通りになる。

a）linear chain lattice（$Z=2$, $\gamma_k=\cos ak$, aはlattice constant）

$$\frac{kT_c}{J}=\begin{cases}\sqrt{\lambda^2-\mu^2} & \text{for} \quad \lambda\geq|\mu| \\ 0 & \text{for} \quad |\lambda|<\mu\end{cases}$$

b）simple quadratic lattice $\left(Z=4,\ \gamma_k=\dfrac{\cos ak_x+\cos ak_y}{2}\right)$

$$\frac{kT_c}{J}=\begin{cases}\dfrac{\Pi\lambda}{K\left(\dfrac{\mu}{\lambda}\right)} & \text{for} \quad \lambda\gtrsim|\mu| \\ 0 & \text{for} \quad |\lambda|<\mu\end{cases}$$

ここで$K$は第一種完全楕円積分[26], [27]である。parameter $k$が$k\to0$，$k\to1$の場合に次のようなふるまいをする。

$$K(k)\simeq\begin{cases}\dfrac{\Pi}{2}\left(1+\dfrac{1}{4}k^2+\cdots\right) & \text{for} \quad k\to0 \\ \ell n\dfrac{4}{\sqrt{1-k^2}} & \text{for} \quad k\to1\end{cases}$$

この$K$の$k\to1$でのふるまいから，$\mu\simeq\lambda=1$近傍で$T_c$は突然の変化をしてzeroになることがわかる。

以上のR. P. A.による結果を詳しく吟味する前にC. A.による結果も出しておこう。

運動方程式（2）を線形化するために，Callenに従って次のように近似する。

$$\begin{aligned}&\sum_{\rho}\left(\lambda n_{j+\rho}b_j-\mu n_j b_{j+\rho}\right)\\&\simeq\bar{n}\sum_{\rho}\left(\lambda b_j-\mu b_{j+\rho}\right)\\&\quad+2\sigma\sum_{\rho}\langle b_j^+ b_{j+\rho}\rangle\left(\lambda b_{j+\rho}-\mu b_j\right)\end{aligned}$$