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

$R.P.A.$ との相異は右辺第二項の存在にある。この近似を使って，前と同じように $S.C.E.$ を導びくのは容易である。

$$\frac{1}{\sigma}=\frac{2}{N}\sum_k \coth\frac{\beta E_k}{2}$$

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

$$f=\frac{2\sigma}{N}\sum_k \gamma_k \coth\frac{\beta E_k}{2}$$

この $S.C.E.$ でも anti-symmetric relation $\sigma(\beta,H)=-\sigma(\beta,-H)$ が成立している。 $\lambda=\mu=1$ とおくと， $S=\frac{1}{2}$ の場合のCallenの式に一致する。又， $f=0$ とおくと $R.P.A.$ によるものに一致する。

curie point T_c を定める式は，次で与えられる。

$$\frac{J}{kT_c}=\frac{2}{NZ}\sum_k\frac{1}{(\lambda-\mu\gamma_k)+(\mu-\lambda\gamma_k)f} \tag{4}$$

$$f=\frac{kT_c}{J}\frac{2}{NZ}\sum_k\frac{\gamma_k}{(\lambda-\mu\gamma_k)+(\mu-\lambda\gamma_k)f} \tag{5}$$

この二式より，sum $\sum_k$ の項を消去すると，次が得られる。

$$f^2=1-\frac{2}{Z}\frac{kT_c}{J\lambda}$$

すなわち

$$f=\pm\sqrt{1-\frac{2}{Z}\frac{kT_c}{J\lambda}}$$

と

$$0\leq\frac{kT_c}{J}\leq\frac{Z}{2}\lambda \tag{6}$$

が得られる。

ここで $f=f(\lambda,\mu)$ の符号を定めよう。（４）と（５）で $\lambda=\mu=1$ とおく。然らば，被積分関数の $k\simeq0$ での値が積分に大きく効く。このことから $f(1,1)>0$ を得る。これにつながらなくてはならないので

$$f(\lambda,\mu)=\sqrt{1-\frac{2}{Z}\frac{kT_c}{J\lambda}}\geq0 \tag{7}$$

となる。

さて， T_c を具体的に計算する。

a） linear chain lattice

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

且

$$f=\begin{cases}\dfrac{|\mu|}{\lambda} & \text{for} \quad \lambda\geq|\mu| \\ 1 & \text{for} \quad |\lambda|<\mu\end{cases}$$

b ） simple quadratic lattice

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

この式と（７）とで，T_cを与える。

§ 3. Discussion

現在の強磁性理論のなかで，全温度領域的にかなり良い結果を与え，且簡単なものと考えられるTyablikovとCallenの近似法をとりあげてみた。更に，AppendixにはWeissの近似法(W, A,）についてもまとめておいた。

ここで，これらの近似法を比較し，検討する。

まず，$W. A.$ からみてみる。

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

$$\simeq\lambda\bar{n}\sum_{\rho}b_j=Z\lambda\bar{n}b_j$$

この式で注意しなければならないことは$\mu=0$という特別な場合だけの近似式ではないということである。換言するならば，任意のμについて，成立している近似式であるということを主張している。然らば，$W. A.$ は一見して片手落ちになっている感はまぬがれない。事実，例えば，低温領域で主役を演ずるcollective modeが欠落している。

この点を反省したのが，Tyablikovの $R. P. A.$ による理論であると言ってさしつかえあるまい。

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

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

$W. A.$ との相異は右辺のμ項の存在にある。 このμ項から上述のcollective modeなどが出てくる。こういうことで，$R. P. A.$ は $W. A.$ を改良したものとして考えられるのである。

ハミルトニアン（１）を見るとoff-diagonal μ−termとして $b_i^+b_j$がある。これはensemble average $\langle b_i^+b_j\rangle$を通してenergyやspecitic heat等の物理量に影響することを意味する。それだけではなく，$\langle b_i^+b_j\rangle$ からの影響はmagnetization等の他の物理量にも一般的にあるはずであると考えるのは自然であろう。こう考えると，$R. P. A.$ の改良の可能性が浮び上がってくる。その最も簡単なものとして次のものに思い到る。

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

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

$$+\sum_{\rho}\langle b_j^+b_{j+\rho}\rangle\left(\lambda b_{j+\rho}-\mu b_j\right)$$

これは Hartree-Fock 近似（*H. F. A.*）である。しかし，Katsura and Horiguchi[28] が指摘したように，これから得られる σ はantisymmetric relation を満たさないので，良い結果を期待することはできない。むしろ，*H. F. A.* は *R. P. A.* を改悪するものであると考えられる。

しかし，ここで

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

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

$$+ B\sum_{\rho}\langle b_j^{+} b_{j+\rho}\rangle\left(\lambda b_{j+\rho} - \mu b_j\right)$$

とおいて，B に anti-symmetric relation $B(\beta, H) = -B(\beta, -H)$ を要請するならば，$\sigma(\beta, H) = -\sigma(\beta, -H)$ は復活するので，*R. P. A.* の改良になる可能性も復活する。実際，isotropic interaction の場合に，Callen は $B = 2\sigma$ とおいて $S = \frac{1}{2}$ のときに，*R. P. A.* によるものよりも悪くない結果を得た。しかし，この選びは，もちろん，ユニークなものではない。事実，Copeland and Gersch[17] は $B = 8\sigma^3$ とおいて，定性的に Callen によるものと同じ結果を得ている。

それでは，以下に，我々が得た結果を吟味しよう。

C. A. から導かれた不等式（6）は任意の μ について成立しているものである。これを見ると，正しい Curie point は *W. A.* で与えられる $\frac{kT_c^{W.A}}{J} = \frac{Z}{2}\lambda$ よりも小さく，且 long range order が存在するためには parameter $\lambda > 0$ は有限の大きさを持っていなければならないことを主張している。換言すれば，$X - Y$ model は三次元ですら ferromagnet にはなり得ないということを意味する。これは Obokata, Ono and Oguchi[29] の padé 近似による conjecture とも consistent になっている。

T_c についての我々の具体的な計算は，一次元，二次元のそれらだけであった。確かなものと比較して，近似の良悪を判断するという観点に立つならば，三次元の T_c を計算しても現在のところは仕方のないことであると考えたからである。以下に一，二次元ひっくるめて吟味する。

R. P. A. と *C. A.* による T_c は両方共 isotropic case（$\lambda = \mu = 1$）では Mermin and Wagner[25] の定理の通り $T_c^{R.P.A} = T_c^{C.A} = 0$ になっている。oblate anisotropic case（$\lambda < \mu = 1$）でも，やはり，$T_c^{R.P.A} = T_c^{C.A} = 0$ であるが恐らく，正しい結果であろう（一次元 $X - Y$ model についての厳密理論[30] によれば，$T_c = 0$ である）。ハミルトニアン（1）における λ-term は order を create し，μ-term は destroy する働きをしていると考えられるので，parameter μ が大きくなるにつれて，order は単調に減少するであろう。従って，T_c は一般に μ について単調減少関数になっていると考えてさしつかえあるまい。特に，$\mu = 0$ で $T_c = 0$ ならば任意の λ と μ で $T_c = 0$ になるはずである。一次元の系がこれにあたるものと思われる。λ に関する T_c のふるまいも同じように論議できる。以上を要約すると，

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} T_c(\lambda, \mu) \geq 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \mu} T_c(\lambda, \mu) \leq 0$$

となる。

我々のT_cはいずれのcase（$\lambda \gtreqless \mu$）でも上に述べた傾向を確かに示している。のみならず，case（$\lambda \leq \mu$）での結果は正しくて，満足すべきものであろうとも述べた。しかし，prolate anisotropic case（$\mu < \lambda \neq 1$）では良いとは言えない。特に，Ising model近傍（$\lambda = 1$，$\mu \simeq 0$）では良くない。この近傍では $T_c^{W.A} = T_c^{R.P.A} = T_c^{C.A}$ となっている。それにしても，$R.P.A.$ と $C.A.$ によるT_cを比較するならば一般に$T_c^{W.A} \geq T_c^{R.P.A} \geq T_c^{C.A}$となっていて，$T_c^{C.A}$の方が期待される真の$T_c$に近いと考えられるので$C.A.$によるものが良いとは言えるけれども。

更に，Heisenberg model近傍（$\mu \lesssim \lambda = 1$）について一言するならば，μについてのT_cの変化は急である。特に，二次元の場合は，突然の変化をする。しかし，$T_c^{R.P.A}$と$T_c^{C.A}$とを比べるならば$T_c^{C.A}$は比較的おだやかに変化している。このことはT_c近傍での specific heat 等の critical exponent[23] にも影響するものと思われるが，調べてない。近似の精度が上がるにつれ，更におだやかになるのかどうか興味あるところである。

さて，何故に同じ近似が oblate anisotropic caseでは良いのに，prolate anisotropic case では良くないのであろう。

ここでは近似の良くないcase（$\lambda > \mu$）だけをとりあげてみる。この良くないcase について理解できれば，良いcase（$\lambda \leq \mu$）での事は直ちに理解できるはずだからである。これを，特に，Ising model近傍（$\lambda = 1, \mu \simeq 0$）という最も悪いcaseで吟味する。しかし，これは吟味するまでもなく，明らかである。つまり，$R.P.A.$ は $W.A.$ そのものに，当然のことながら，移行する。$C.A.$ も $\mu \simeq 0$ で $f \simeq 0$ となるため，$C.A.$ としての特性を失い，これも又，$W.A.$ に移行してしまう。結局，簡単に言えば，$R.P.A.$ や $C.A.$ は $W.A.$ そのものであって，改良したものではないかということである。今後は，このへんの事情をきちんと考慮に入れて，理論構成しなければなるまい。換言すれば，Ising model 近傍で近似を良くするのが理論を改良する近道ではなかろうかと言うことである。

もし，そうならば，λ－term に $W.A.$ を改良した Oguchi 近似[6] 又は Bethe 近似[7),8] 等の考え方を使い，μ－termには $R.P.A.$ 又は$C.A.$ でがまんしたとしても，理論は大きく改良されるのではないかと考えるのである。

又，この節の前半に，近似の改良についての議論を $W.A.$ から始めて $C.A.$ まで行った。この一連の議論を更に推進するのも興味のあることである。

$$\sum_\rho (\lambda n_{j+\rho} b_j - \mu n_j b_{j+\rho})$$

$$\simeq A \sum_\rho (\lambda b_j - \mu b_{j+\rho})$$

$$+ B \sum_\rho \langle b_j^+ b_{j+\rho} \rangle (\lambda b_{j+\rho} - \mu b_j)$$

$$A = \frac{1}{2} + a_1 \sigma + a_3 \sigma^3 + a_5 \sigma^5 + \cdots$$

$$B = b_1 \sigma + b_3 \sigma^3 + b_5 \sigma^5 + \cdots$$

とおいたとき，例えば，T_c近傍でa_1やb_1の影響は大きい。これが先述のf等にも影響して，$\mu \simeq 0$のとき$f \neq 0$となる可能性が出る。つまり，ここに，改良の可能性が存在するのである。もちろん，AやBはここでantisymmetric relation $\sigma(\beta, H) = -\sigma(\beta, -H)$ を満たすように仮定されている。しかし，ここに問題がある。それは係数a_nやb_nをどのように決定するかということで

あるが，これを高温展開による結果と一致するように定めるのは一つの方法であろうし，変分原理を使うのも又，他の一方法であろう。

以上のような考え方に従っての仕事は次の論文に発表する予定である。

最後に興味ある問題として，異方度の増したハミルトニアンを見てみたい。

$$\mathcal{H}=-2J\sum_{(i,j)}\left(\lambda S_i^z S_j^z+\mu S_i^y S_j^y+\upsilon S_i^x S_j^x\right)$$

$$=-2J\sum_{(i,j)}{}'\left\{\lambda S_i^z S_j^z+\frac{\mu+\upsilon}{4}\left(S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+\right)\right.$$

$$\left.+\frac{\mu-\upsilon}{4}\left(S_i^+S_j^++S_i^-S_j^-\right)\right\}$$

それはS^+S^+やS^-S^-のtermが存在することである。anti-ferromagnetでNeél stateがground stateではないように，この糸はperfect ordering stateはground stateではない。このようなferromagnetic systemではいくつかのspin waveのbound stateができやすくなるはずである。これがどのようなshort range orderを作り，long range orderとどう関わりあうのか興味ある研究課題であるが，後の機会にまわすことにする。

Acknowledgements

著者は，Dr. Ginoza と Dr. Tankeiがhelpful suggestionとvaluable discussionをして下さったことに深く感謝します。

Appendix

運動方程式の立場で，$W.\ A.$ に対応するものをここでまとめておく。

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

$$\simeq\lambda\bar{n}\sum_{\rho}b_j=Z\lambda\bar{n}b_j$$

のように近似するとself-consistent equationは任意のμに対して

$$\frac{1}{\sigma}=2\coth\frac{\beta}{2}\left(g\mu_B H+2ZJ\lambda\sigma\right)$$

となる。これはW，A，そのものにおけるselt-consistent eq.である。

Curie point T_cは

$$\frac{kT_c}{J}=\frac{Z}{2}\lambda \qquad \text{for arbitrary} \quad \mu$$

で与えられる。

References

1) W. Opechowski : Physica **4** (1937) 181.
2) H. A. Brown and J. M. Luttinger : Phys. Rev. **100** (1955) 685.
3) H. A. Brown : Phys. Rev. **104** (1956) 624.
4) G. S. Rushbrooke and P. J. Wood : Mol. Phys. **1** (1958) 257.
5) P. Weiss : J. Phys. Radium **4** (1907) 661.

6) T. Oguchi : Progr. Theor. Phys. **13**(1955) 148.
7) R. Peierls : Proc. Camb. Phil. Soc. **32**(1936) 477.
8) P. R. Weiss : Phys. Rev. **74**(1948) 1498.
9) P. W. Kasteleijn and J. Van Kranendonk : Physica **22**(1956) 317.
10) F. Bloch : Zeits. Phys. **61**(1930) 206.
11) F. J. Dyson : Phys. Rev. **102**(1956) 1217.
12) F. J. Dyson : Phys. Rev. **102**(1956) 1230.
13) T. Oguchi : Phys. Rev. **117**(1960) 117.
14) S. V. Tyablikov : Ukrain. Math. Zh. **11**(1959) 287.
15) H. B. Callen : Phys. Rev. **130**(1963) 890.
16) R. A. Tahir-Kheli : Phys. Rev. **132**(1963) 689.
17) J. A. Copeland and H. Gersh : Rev. **143**(1965) 236.
18) V. Mubayi and R. V. Lange : Phys. Rev. **178**(1969) 882.
19) Tahir-Kheli and Ter Haar : Phys. Rev. **127**(1962) 88, 95.
20) T. Morita and T. Tanaka : Phys. Rev. **137**(1965) A648; **138**(1965) A1395.
21) I. Ortenburger : Phys. Rev. **136**(1964) A1374.
22) J. F. Cooke and H. A. Gersch : Phys. Rev. **153**(1966) 641.
23) N. W. Dalton and D. W. Wood : Proc. Phys. Soc. **90** (1967) 459.
24) C. Domb : Magnetism, ed. Suhl and Rado, (1965) Vol. 2, A.
25) N. D. Mermin and H. Wagner : Phys. Rev. Letters **17** (1966) 1133.
26) E. Jahnke and F. Emde : Tables of Functions (Dover Publications, Inc., New York, 1943)
27) P. F. Byrd and M. D. Friedman : Hand Book of Elliptic Integrals for Engineers and Physicist (Springer-Verlag, Berlin, 1954)
28) S. Katsura and T. Horiguchi : J. Phys. Soc. Japan. **25** (1968) 60.
29) T. Obokata, I. Ono and T. Oguchi : J. Phys. Soc. Japan **23** (1967) 516
30) E. Liep, T. Schultz and D. Mattis : Ann. Phys. **16**(1967) 407.