

氏 名 (本 籍)	川崎悦子 (佐賀県)
学 位 の 種 類	理 学 博 士
学 位 記 番 号	博 甲 第 5 号
学 位 授 与 年 月 日	昭和53年 3 月25日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 5 条第 1 項該当
研究科・専攻の名称	物理学研究科 物理学専攻
学 位 論 文 題 目	The Temperature Green function for the Spin System ——Tunneling Model—— (スピン系における温度グリーン函数 —トンネル模型—)

論 文 の 概 要

Tunneling Model は K D P 型強誘電体に関連して, Slater 以来多くの人々により調べられてきた。KH₂PO₄ の結晶の中で水素結合が強誘電性相転移に重要な役割りをする。水素結合には 2 つの平衡位置があり, disordered state ではその 2 つの位置をいったりきたり, トンネル運動を行う。それを形式的にスピン演算子を用いて表わしたものが, Tunneling Model である。我々は Tunneling Model で表わされる系の order parameter である $\langle S^z \rangle$ の共軛な場 (電場) に対する応答関数を disordered state ($T > T_c$) の場合に計算して, 系の動的性質を調べた。その時に温度 Green 関数を用い, 相互作用 J を摂動とした摂動計算を行った。この摂動展開は $\frac{1}{Z}$ 展開になっている。ここで Z は最隣接の格子の数である。

温度 Green 関数の各々の項はスピン演算子の積の期待値となっているが, その計算は簡単ではない。そのための色々な計算方法が考えられている。例えば, スピン演算子を Fermi 演算子, Bose 演算子などで置きかえるやり方がある。演算子の置きかえのとき, 演算子の数が増えるし, スピン演算子の期待値から Fermi 演算子の期待値に移るとき Factor が加わるので, かなり複雑で扱いにくい。我々はスピン演算子のまま直接計算する式を導いた。

その公式を用いて, 温度 Green 関数の摂動展開を計算したのであるが, その場合, 特別のダイアグラムを用いると, 便利であり, connected form にまとめることができた。

J の 3 次まで計算してから得られた Green 関数を Simple damped-harmonic oscillator function の形にして damping constant Γ を定義した。

そして, 多くのダイアグラムを取ることにして, 取りあえず相互作用 J, パラメータ $\langle S^x \rangle$ にく

りこまれるダイアグラムを取り入れることにより、有限な Γ が得られた。得られた Γ はかなり大きなものであり、今までの計算は consistent ではない。故に最初に有限な damping を含めた Green 関数を用い、 Γ を “Self” -consistent に計算した。

KDPに関する Kaminow and Damen の実験結果をみると、相当幅広い範囲で damping constant は温度に依存していない。

計算結果を実験と比較すると、計算結果はある程度の温度領域 ($2T_c$) でゆるやかな変化をしている。 Γ を計算するにあたって、積分するときかなり大ざっぱな近似をしたことを考えると、かなりいい結果なのではないかと思える。

審 査 の 要 旨

KDPという物質は強誘電性を或る温度以下で示す。この原因と考えられるのは、この物質中の水素結合で、水素のとり得る位置が2つあり、高温の間はそのどちらに居る確率も同じであるが低温になるとどちらか一方に偏って存在する事によると考えられている。勿論、物質中の水素同志又、水素とイオンの相互作用もあるので、之等をまとめて、簡単な系のハミルトニアンとして考えられたものがトンネル模型である。ここでは2つの可能な水素のとりうる状態をスピン ($\frac{1}{2}$) の固有状態に対応させ、1方から他方にうつす様な相互作用を同時に考える。又、水素同志は同じ状態を占める傾向をもつので、この事も考えに入れて、スピンを使ってハミルトニアンを作っている。この系の温度による性質を調べるために色々な計算方法が考えられ色々な人々により行われていたが、夫々、相当複雑で低い相互作用常数の次数の計算しか行われていなかった。本論文では、この点を、独自のグリーン函数を作り上げ、従来のものより、簡明に使用できる事を具体的に示し、改良した。特に、相互作用の有様をグラフで示すと、非常に簡単に整理が行えて、従来のフェルミオン又はボーズンの温度グリーン函数と同様に、つながったグラフのみで記述出来る事を示している。従来の方法では複雑すぎて実行されていなかった素励起の減衰常数の高次の計算を (相互作用常数でなく、相関の2次迄) 行い、之と Kaminow と Damen の実験とを比較し、最初の計算としてはかなり良い一致を得ている。

従来のスピン相関の計算が、スピンをボーズ又はフェルミ演算子で表現し直して色々行われていたために、計算規則そのものが相当複雑で、高い相互作用の次数の計算は非常にやっかいで実行されたものはなかった。本論文では、スピンをそのまま使用してグリーン函数の相互作用の次数による展開の規則をうまく作り上げ、計算が、グラフを使用する事により簡単なボーズ系又はフェルミ系と同様につながったグラフのみで行える事を示した点は高く評価されてよい。又、具体的にこの方法で素励起の減衰常数を計算し、実験のデータと比べて大体の傾向の一致を示した点は、実験の方の分析が非常に簡単化しすぎたと思われる形で行われている点からみると、実験の分析自身の方にも或る示唆を与えているし、モデル自体大体そう実物とかけはなれたものでない事を示したといえよう。将来の理論・実験的考察に重要な寄与をしたものと考えられる。

以上の論文審査と最終試験の結果にもとづき、著者には理学博士の学位を受けるのに十分な資格があるものと認める。

昭和 53 年 2 月 17 日

主査	筑波大学教授	理学博士	沢	田	克	郎
----	--------	------	---	---	---	---

副査	筑波大学教授	理学博士	高	野	文	彦
----	--------	------	---	---	---	---

副査	筑波大学教授	理学博士	小	寺	武	康
----	--------	------	---	---	---	---

副査	筑波大学助教授	理学博士	高	田		慧
----	---------	------	---	---	--	---