

遍歴強相関電子系における 多極子秩序の理論

角田 峻太郎

東京大学総合文化研究科

この講義の目的

- 遍歴磁性の研究で用いられる理論手法の解説
 - 典型的なハバード模型 + (弱相関側の)多体計算手法
 - 温故知新：強磁性から一般の磁気多極子へ(例：交替磁性)
- 実際に計算してみる：数値計算コード(Julia言語)
https://github.com/shuntarosumita/asymmetry_autumn_school_2024
 - 平均場理論による秩序変数の計算(3節)
 - RPA/FLEX近似による(磁気)感受率の計算(4節)



2節 遍歴電子系の典型的な模型：ハバード模型

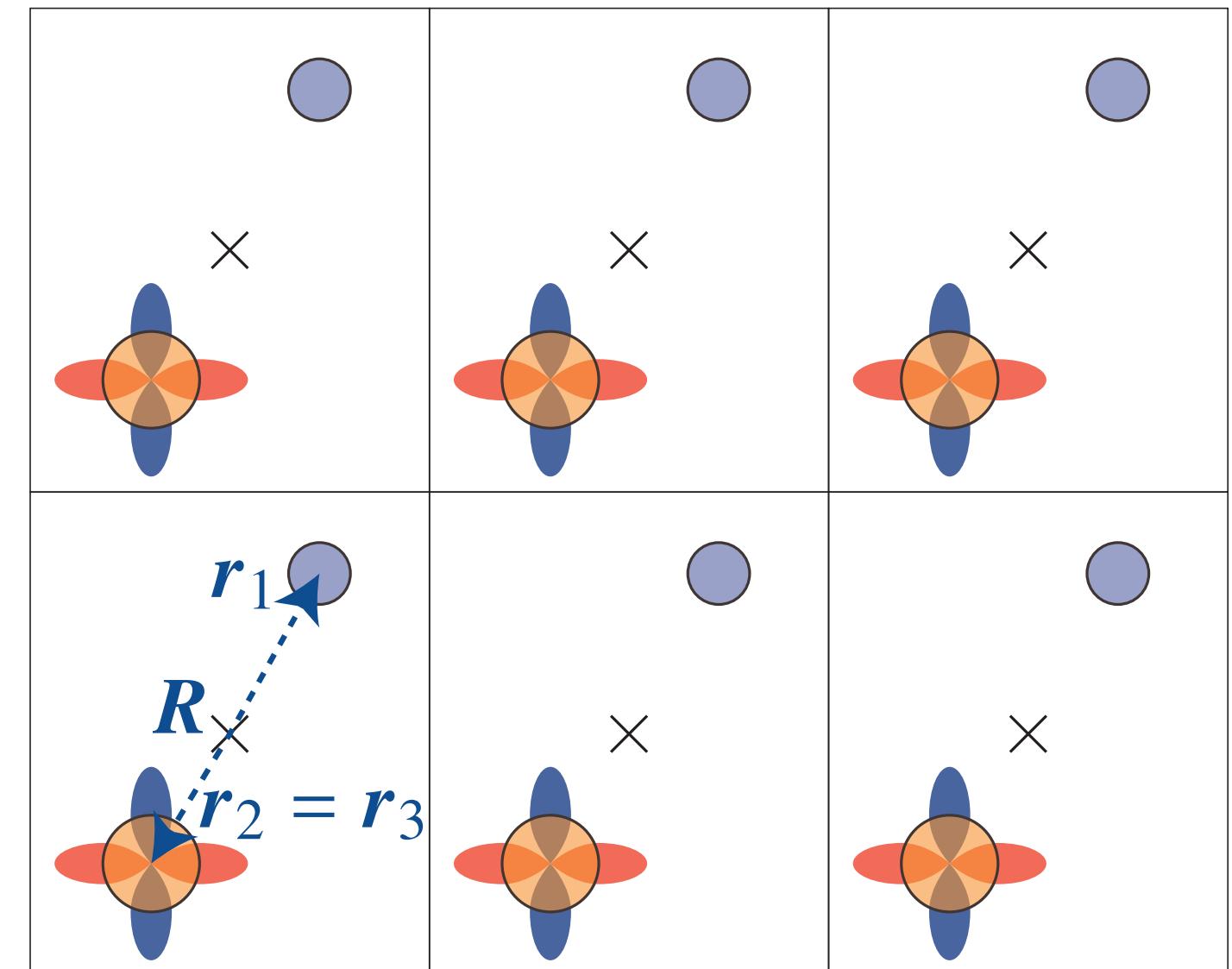
強束縛模型

- (金属)結晶：離散並進対称性
 - s : スピン / ζ : 軌道・副格子
 - R : 単位胞 / r_ζ : 副格子の内部座標
- 第2量子化での1電子ハミルトニアン
$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\zeta, \zeta'} \sum_{s, s'} \frac{H_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}')_{\zeta s, \zeta' s'}}{= H_0(\mathbf{R} - \mathbf{R}')_{\zeta s, \zeta' s'}} c_{\mathbf{R}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{R}', \zeta' s'} \quad (2.1)$$

"遷移積分"
- フーリエ変換：運動量について対角的

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\zeta, \zeta'} \sum_{s, s'} H_0(\mathbf{k})_{\zeta s, \zeta' s'} c_{\mathbf{k}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{k}, \zeta' s'} \quad (2.4)$$

例



ハバード模型

- 遮蔽された電子間クーロン斥力(短距離)
 - 第一近似：同一サイト・同一軌道内の相互作用 $U_\zeta > 0$

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} U_{\zeta} n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} = \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} U_{\zeta} c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \quad (2.6)$$

- (多軌道模型では U', J, J' を考える場合も多い) J. Kanamori,
Prog. Theo. Phys. 30, 275 (1963)
- フーリエ変換し、一体部分とまとめる

ハバード模型の一般形

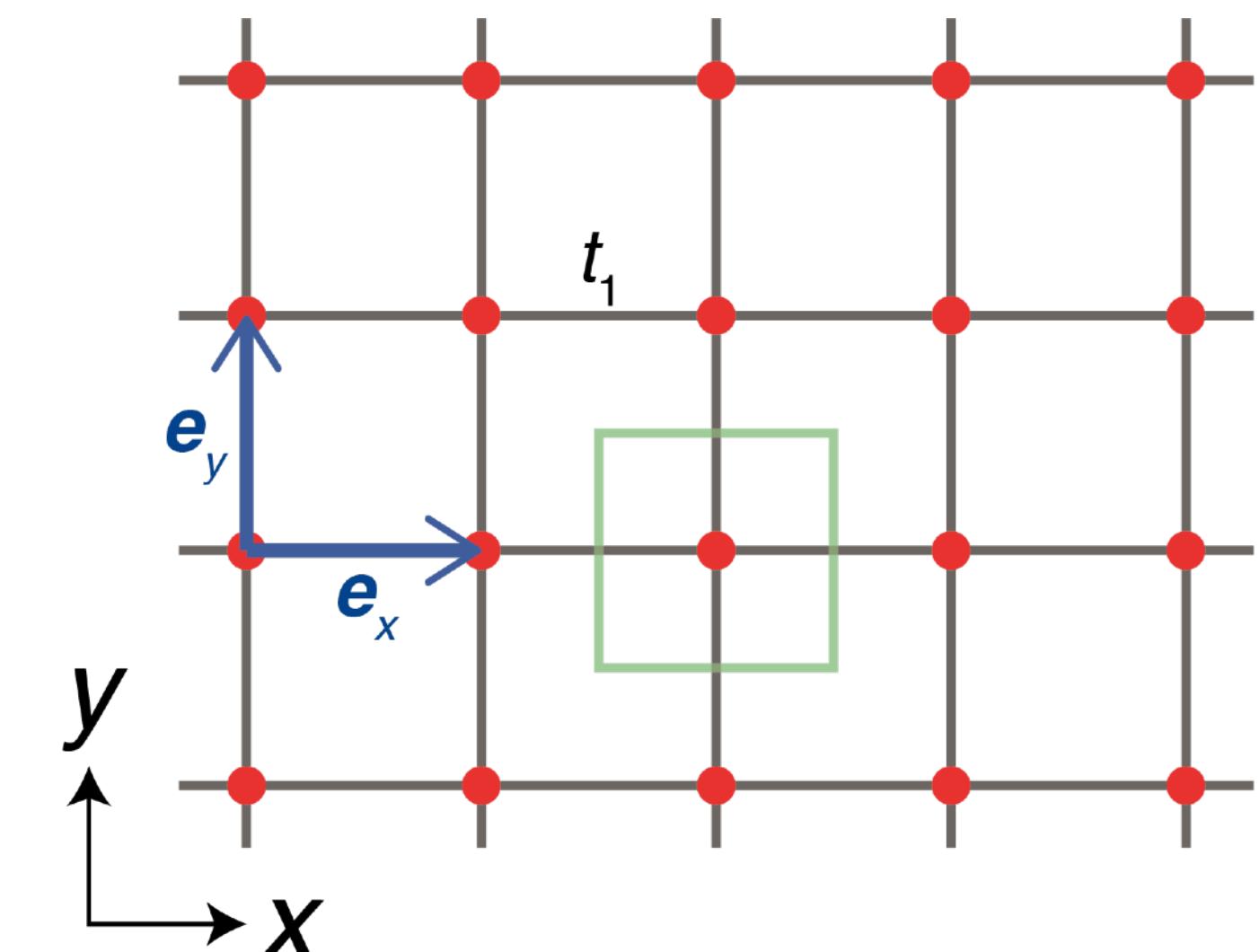
$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Hubbard}} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\zeta, \zeta'} \sum_{s, s'} H_0(\mathbf{k})_{\zeta s, \zeta' s'} c_{\mathbf{k}, \zeta s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \zeta' s'} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}} \sum_{\zeta} U_{\zeta} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \zeta \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \zeta \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_2, \zeta \downarrow} c_{\mathbf{k}_1, \zeta \uparrow} \end{aligned} \quad (2.8)$$

例2.1 正方格子ハバード模型

- 1軌道・1副格子・スピノン軌道結合なし

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} &= - \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_s t(\mathbf{R} - \mathbf{R}') c_{\mathbf{R}, s}^\dagger c_{\mathbf{R}', s} + U \sum_{\mathbf{R}} n_{\mathbf{R}, \uparrow} n_{\mathbf{R}, \downarrow} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_s \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, s}^\dagger c_{\mathbf{k}, s} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \downarrow} c_{\mathbf{k}_1, \uparrow} \quad (2.9)\end{aligned}$$

- 最近接サイト間の遷移積分 t_1 のみとすると
エネルギー分散は $\varepsilon(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} t(\mathbf{R}) = -2t_1(\cos k_x + \cos k_y)$
- 銅酸化物高温超伝導体などの文脈で多くの研究がある



例2.2 異方的な正方格子ハバード模型

注：一般的な名前ではない

- 1軌道・2副格子・スピinn軌道結合なし

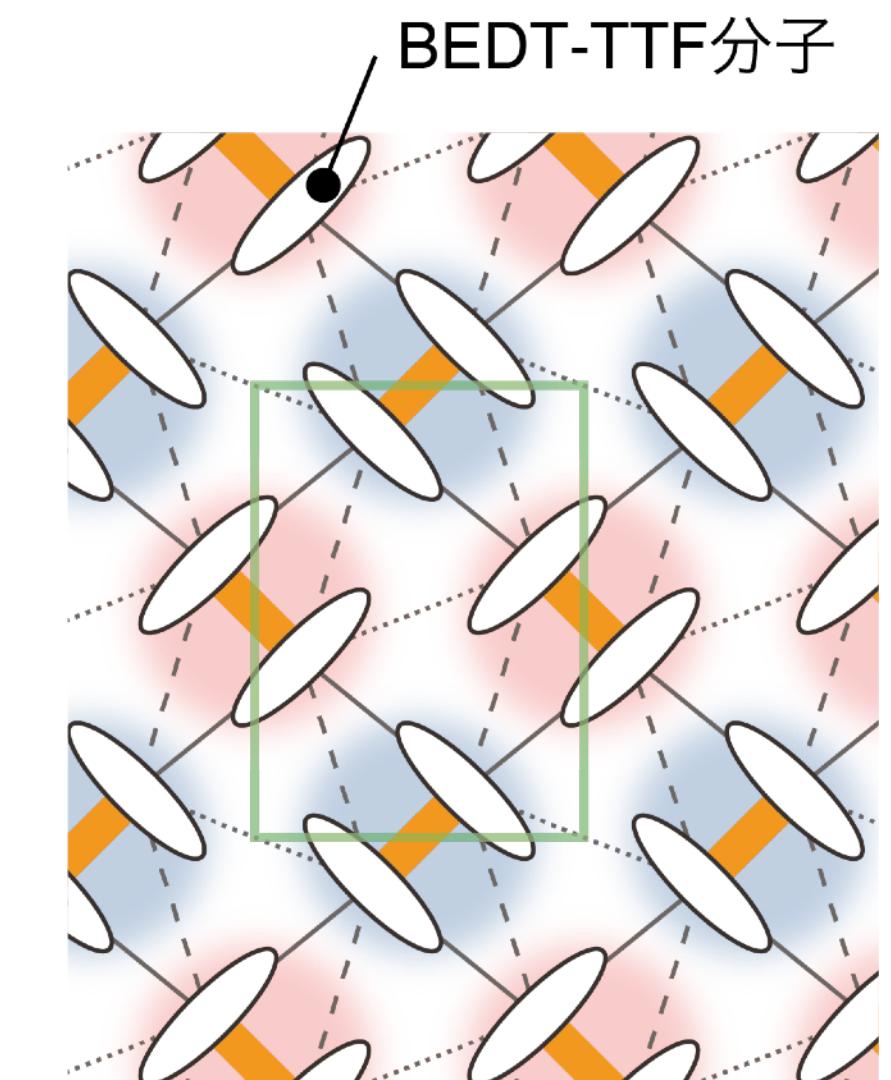
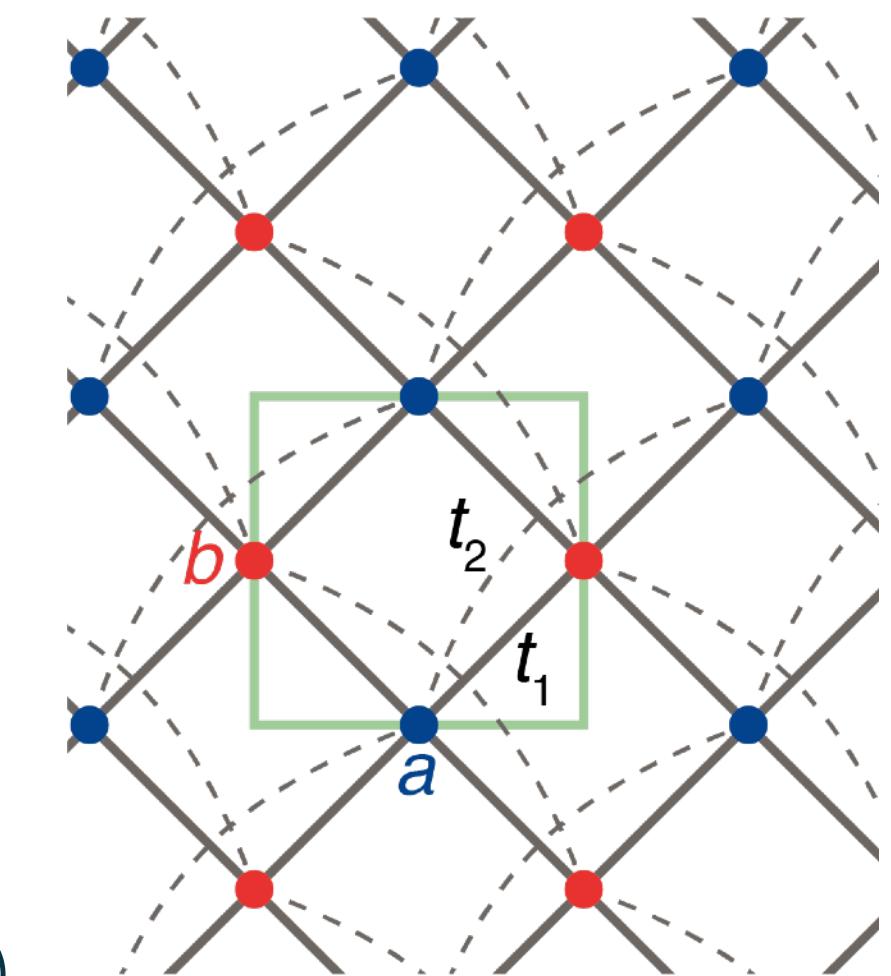
$$\mathbf{r}_a = (1/2, 0), \mathbf{r}_b = (0, 1/2); U_a = U_b = U$$

$$\hat{H}_0(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} -2t_2 \cos(k_x + k_y) & -4t_1 \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} \\ -4t_1 \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} & -2t_2 \cos(k_x - k_y) \end{bmatrix} \otimes \hat{\sigma}^0 \quad (2.10)$$

cf.) T. A. Maier and S. Okamoto, PRB **108**, L100402 (2023).

- t_2 : 異方的な遷移積分 ($t_2 = 0$ で正方格子模型に一致)
- 有機導体 $\kappa\text{-}(BEDT-TTF)}_2X$ を単純化したもの
- 伝導面：単位胞内に4つのBEDT-TTF分子
向きが異なる2つのダイマーを形成

K. Kanoda, Physica C Supercond. **282-287**, 299 (1997)



3節 平均場理論

3.1 Warm-up: 遍歴強磁性体の平均場理論

はじめに

- ハバード模型の解析によって遍歴磁性を調べたい
 - 相互作用：近似(簡単化)が必要 → **平均場理論** (as a first step)
- ここでの前提
 - 軌道自由度なし： ζ は副格子自由度のみを表す
 - すべての副格子は結晶学的に等価な位置にある
 - 任意の ζ に対し $U_\zeta = U$

強磁性体の平均場近似

- (強磁性と共に役な)一様磁場 h を印加したハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\zeta, \zeta'} \sum_s H_0(\mathbf{R} - \mathbf{R}')_{\zeta, \zeta'} c_{\mathbf{R}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{R}', \zeta' s} + U \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} - \frac{h}{2} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} (n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} - n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}) \quad (3.2)$$

- 平均場近似 : 平均値からの揺らぎの2次を無視

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} &= U \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \\ &= U \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} (\langle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle + n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} - \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle) (\langle n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle + n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} - \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle) \quad (3.3) \end{aligned}$$

$$\simeq U \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} (\langle n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} + \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} - \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle) \quad (3.4)$$

相互作用項の整理

- 1サイトあたりの電子数・磁化の期待値(d : 副格子自由度)

$$n_e = \frac{1}{Nd} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta, s} \langle n_{\mathbf{R}, \zeta s} \rangle, \quad m = \frac{1}{2Nd} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} (\langle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle - \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle) \quad (3.6, 3.7)$$

- 強磁性状態の並進対称性 および 各サイトの等価性から

$$\begin{aligned} n_e &= \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle + \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle, \quad m = \frac{1}{2} (\langle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle - \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle) \\ \therefore \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle &= \frac{1}{2} n_e + m, \quad \langle n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle = \frac{1}{2} n_e - m \end{aligned} \quad (3.8)$$

- これより、相互作用項は

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{U n_e}{2} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta, s} n_{\mathbf{R}, \zeta s} - U m \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} (n_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} - n_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}) + \text{const.} \quad (3.9)$$

平均場近似のハミルトニアン

- 平均場ハミルトニアン(実空間 → 運動量空間へフーリエ変換)

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\zeta, \zeta'} \sum_s \left[H_0(\mathbf{k})_{\zeta, \zeta'} + \frac{U n_e}{2} \delta_{\zeta, \zeta'} \right] c_{\mathbf{k}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{k}, \zeta' s} - \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\zeta} \frac{h_{\text{eff}}}{2} (c_{\mathbf{k}, \zeta \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \zeta \uparrow} - c_{\mathbf{k}, \zeta \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \zeta \downarrow}) \quad (3.10)$$

- 磁場中の一體問題と等価：有効磁場 $h_{\text{eff}} := h + 2Um$ (3.11)
- バンド表示
- 対角化： $\hat{V}(\mathbf{k})^\dagger \hat{H}_0(\mathbf{k}) \hat{V}(\mathbf{k}) = \text{diag}[\varepsilon(\mathbf{k})_1, \dots, \varepsilon(\mathbf{k})_d]$ (3.12)

$$d_{\mathbf{k}, \alpha s}^\dagger := \sum_{\zeta} c_{\mathbf{k}, \zeta s}^\dagger V(\mathbf{k})_{\zeta, \alpha}, \quad d_{\mathbf{k}, \alpha s} := \sum_{\zeta} V(\mathbf{k})_{\zeta, \alpha}^* c_{\mathbf{k}, \zeta s} \quad (3.13)$$

$$\rightarrow \mathcal{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha, s} E(\mathbf{k})_{\alpha s} d_{\mathbf{k}, \alpha s}^\dagger d_{\mathbf{k}, \alpha s}, \quad E(\mathbf{k})_{\alpha s} := \varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha} - s \frac{h_{\text{eff}}}{2} \quad (3.14)$$

自由フェルミオン系と等価

期待値計算

- 平衡状態では $\langle d_{\mathbf{k},\alpha s}^\dagger d_{\mathbf{k},\alpha s} \rangle = f[E(\mathbf{k})_{\alpha s}] = \frac{1}{e^{\beta[E(\mathbf{k})_{\alpha s} - \mu]} + 1}$ (3.15)

- 電子数期待値

$$\begin{aligned} n_e &= \frac{1}{Nd} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} \left\{ f \left[\varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha} - \frac{h_{\text{eff}}}{2} \right] + f \left[\varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha} + \frac{h_{\text{eff}}}{2} \right] \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \left[f \left(\varepsilon - \frac{h_{\text{eff}}}{2} \right) + f \left(\varepsilon + \frac{h_{\text{eff}}}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

1サイト・1スピンあたりの状態密度

$$\rho(\varepsilon) := \frac{1}{Nd} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha}) \quad (3.17)$$

- 磁化

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{2Nd} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} \left\{ f \left[\varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha} - \frac{h_{\text{eff}}}{2} \right] - f \left[\varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha} + \frac{h_{\text{eff}}}{2} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \left[f \left(\varepsilon - \frac{h_{\text{eff}}}{2} \right) - f \left(\varepsilon + \frac{h_{\text{eff}}}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.18)$$

強磁性発現の条件

- 自由電子系の1サイトあたりの磁化率を $\chi_0(T)/2$ とする
- 平均場ハミルトニアン：自由電子系 + 一様静磁場 h_{eff} と等価

$$m = \frac{1}{2}\chi_0(T)h_{\text{eff}} = \chi_0(T)\left(\frac{h}{2} + Um\right) \quad (3.19)$$

$$\therefore \chi(T) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{m}{h} = \frac{1}{2} \frac{\chi_0(T)}{1 - U\chi_0(T)} \quad \dots \dots \dots \quad (3.20)$$

- 低温($k_B T \ll \varepsilon_F$) \rightarrow ゾンマーフェルト展開

$$\chi_0(T) = \rho(\varepsilon_F) \left[1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 R \right], \quad R := \left(\frac{\rho'(\varepsilon_F)}{\rho(\varepsilon_F)} \right)^2 - \frac{\rho''(\varepsilon_F)}{\rho(\varepsilon_F)} \quad (3.21)$$

$\rho''(\varepsilon_F) < 0$ とすると

$T = 0$ で最大値 $\rho(\varepsilon_F)$

ストーナー条件

有限温度で磁化率が発散し
強磁性が出現するためには

$$U\rho(\varepsilon_F) > 1 \quad (3.22)$$

磁化率

- $U\chi_0(T_C) = 1$ より、キュリー温度 $T_C = \left\{ \frac{6[U\rho(\varepsilon_F) - 1]}{\pi^2 k_B^2 U\rho(\varepsilon_F) R} \right\}^{1/2}$ (3.23)
- 自由電子系の磁化率

$$\frac{1}{2}\chi_0(T) = \frac{1}{2}\rho(\varepsilon_F) \left[1 - \frac{U\rho(\varepsilon_F) - 1}{U\rho(\varepsilon_F)} \left(\frac{T}{T_C} \right)^2 \right] \quad (3.24)$$

- $T_C < T \ll T_F$ のとき、平均場理論による磁化率は

$$\frac{1}{\chi(T)} = 2 \left[\frac{1}{\chi_0(T)} - \frac{1}{\chi_0(T_C)} \right] \simeq \frac{2[U\rho(\varepsilon_F) - 1]}{U\rho(\varepsilon_F)^2} \frac{T^2 - T_C^2}{T_C^2} \quad (3.26)$$

T^2 の温度依存性によって支配

→ キュリー・ワイス則 [$\chi(T)^{-1} \propto (T - T_C)$] に反する

磁化

- 平均場理論による磁化

守谷亨「磁性物理学」(朝倉書店, 2006)

上田和夫「磁性物理の基礎概念強相関電子系の磁性」(内田老鶴園, 2020)

$$m(T)^2 = m(0)^2 \left[1 - \left(\frac{T}{T_C} \right)^2 \right] \quad (3.27)$$

$$m(0)^2 = \frac{U\rho(\varepsilon_F) - 1}{U^3\rho(\varepsilon_F) \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\rho'(\varepsilon_F)}{\rho(\varepsilon_F)} \right)^2 - \frac{1}{6} \frac{\rho''(\varepsilon_F)}{\rho(\varepsilon_F)} \right]} \quad (3.28)$$

- 転移温度直下で $m(T) \propto (T_C - T)^{1/2} \rightarrow \underline{\text{臨界指数 } 1/2}$
(ランダウ理論と同一)

- 実際には臨界指数は次元に依存：平均場近似のartifact

3節 平均場理論

3.2 一般化：遍歴磁気多極子系の平均場理論

強磁性から広範な遍歴磁性体へ

- single- \mathbf{Q} の磁気秩序
 - (通常の)反強磁性 (2D正方格子 : $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$)
 - スピン密度波 (非整合な \mathbf{Q} など)
 - より高次の磁気多極子 (磁気四極子、磁気八極子 or 交替磁性)
- ここでは議論しないもの : multi- \mathbf{Q} の磁気秩序
 - スキルミオン格子 etc.

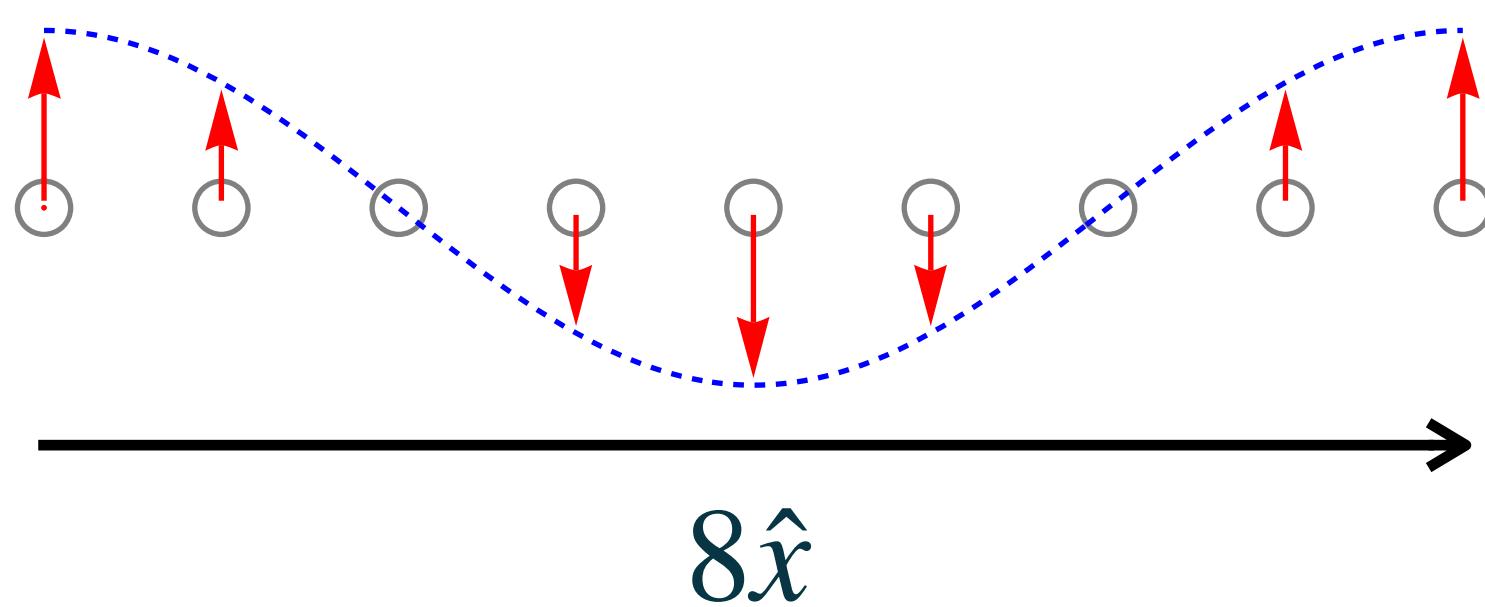
磁気配列の与え方

$v_{R,\zeta}$: 単位胞 R 内の副格子 $\zeta = 1, \dots, d$ に対する磁気配列

例3.1 スピン密度波(1副格子)

$$v_R = \cos(Q \cdot R) e_z \quad (3.35)$$

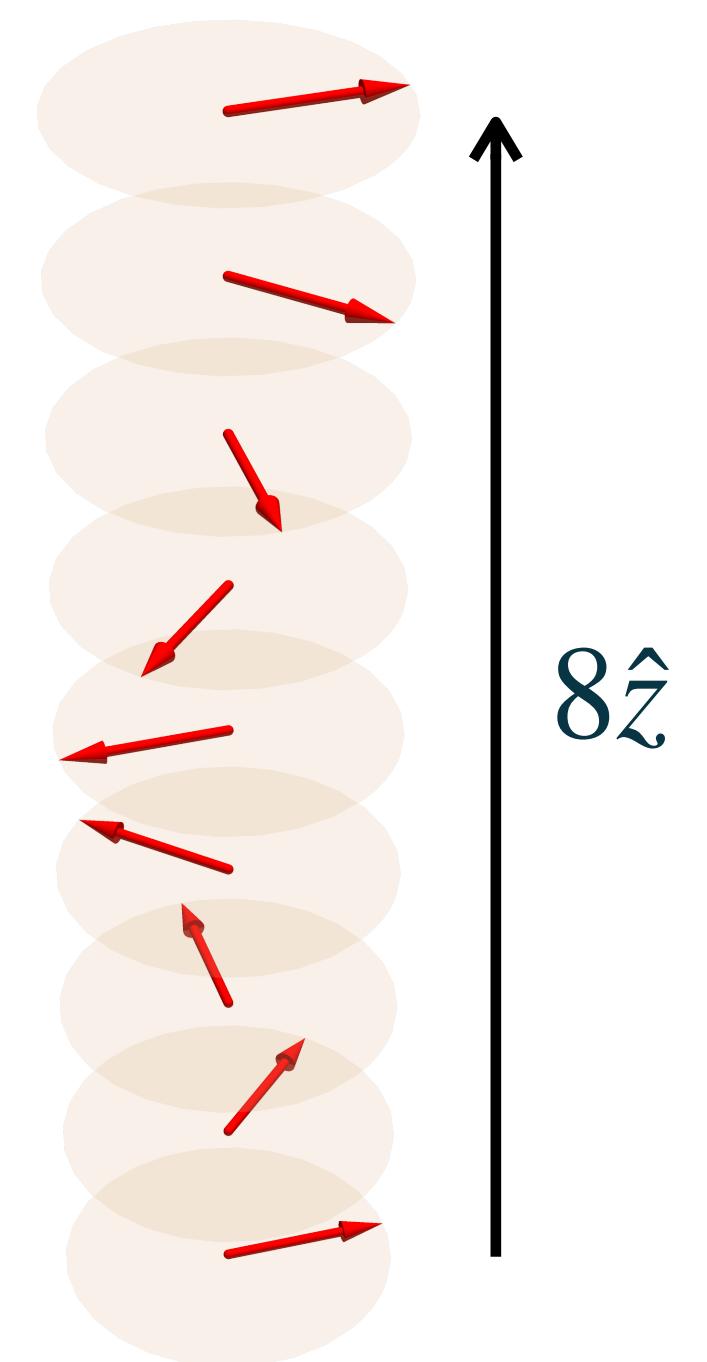
整合的 $Q = 2\pi/8\hat{x}$ の場合 ↓



例3.2 スパイラル秩序(1副格子)

$$v_R = \frac{1}{\sqrt{2}} [\cos(Q \cdot R) e_x + \sin(Q \cdot R) e_y] \quad (3.36)$$

整合的 $Q = 2\pi/8\hat{z}$ の場合 →

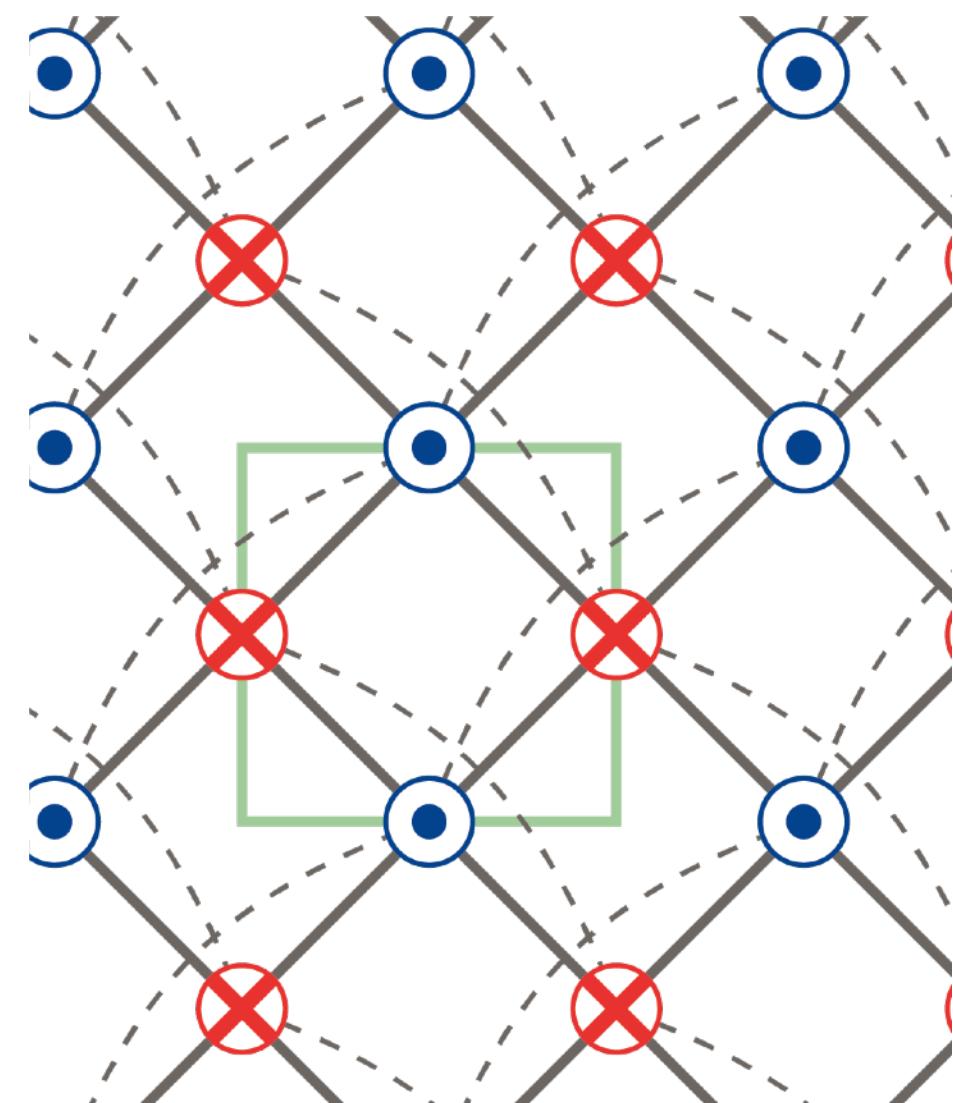


磁気配列の与え方

$v_{R,\zeta}$: 単位胞 R 内の副格子 $\zeta = 1, \dots, d$ に対する磁気配列

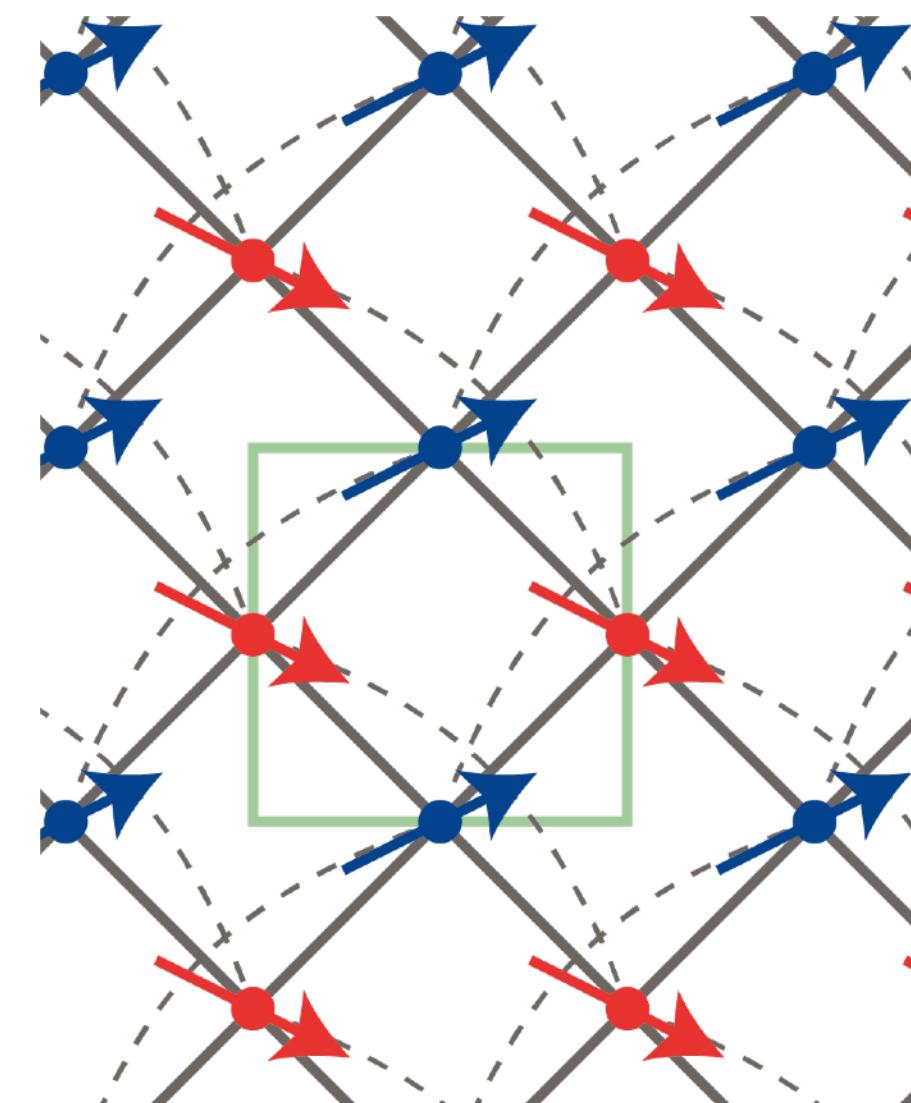
例3.3 反強磁性 or 磁気八極子(2副格子)

$$v_{R,\zeta} = v_\zeta = (-1)^{\zeta-1} e_z \quad (3.37)$$



例3.4 キャント磁性(2副格子)

$$v_{R,\zeta} = \lambda_x e_x + (-1)^{\zeta-1} \lambda_y e_y \quad (3.38)$$



秩序変数の定義

- 副格子 ζ 上のスピン演算子

$$S_{\mathbf{R},\zeta} := \frac{1}{2} \sum_{s,s'} c_{\mathbf{R},\zeta s}^\dagger \sigma_{s,s'} c_{\mathbf{R},\zeta s'}, \quad S_{\mathbf{q},\zeta} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s,s'} c_{\mathbf{k},\zeta s}^\dagger \sigma_{s,s'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\zeta s'} \quad (3.30, 3.31)$$

- 秩序変数：欲しい磁気配列 $v_{\mathbf{R},\zeta}$ が $\langle S_{\mathbf{R},\zeta} \rangle$ と平行なとき有限

$$m = \frac{1}{Nd} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} v_{\mathbf{R},\zeta} \cdot \langle S_{\mathbf{R},\zeta} \rangle = \frac{1}{N^2 d} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\zeta} v_{-\mathbf{q},\zeta} \cdot \langle S_{\mathbf{q},\zeta} \rangle \quad (3.33)$$

注： $v_{\mathbf{q},\zeta} = v_{-\mathbf{q},\zeta}^*$

- single-Q の磁気配列を仮定しているので

$$v_{Q,\zeta} = v_{-Q,\zeta}^* = N\eta v_{\zeta}, \quad v_{\mathbf{q},\zeta} = \mathbf{0} \quad (q \neq \pm Q) \quad (3.34)$$

磁気秩序演算子

- 秩序変数を磁気秩序演算子の平均として表す

$$m = \frac{1}{Nd} \sum_{\mathbf{R}} \langle \underline{\mathcal{M}_{\mathbf{R}}} \rangle \quad (3.39)$$

- 一様磁化 : $\mathcal{M}_{\mathbf{R}} := \sum_{\zeta} S_{\mathbf{R}, \zeta}^z$ 一般の秩序 : $\mathcal{M}_{\mathbf{R}} := \sum_{\zeta} \nu_{\mathbf{R}, \zeta} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}, \zeta}$ (3.40)
- 演算子の行列表示 : $(O_{\mathcal{M}})_{\zeta s, \zeta' s'} := \delta_{\zeta, \zeta'} (\nu_{\zeta}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}_{s, s'}) / 2$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\mathbf{R}} &= \frac{1}{2} \sum_{\zeta} \left(\nu_{\zeta}^* e^{-i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_{\zeta})} + \nu_{\zeta} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_{\zeta})} \right) \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}, \zeta} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\zeta, \zeta'} \sum_{s, s'} \left[(O_{\mathcal{M}})_{\zeta s, \zeta' s'} e^{-i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_{\zeta})} c_{\mathbf{R}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta' s'} + \text{H.c.} \right] = \frac{1}{2} (\mathcal{M}_{\mathbf{Q}} + \mathcal{M}_{-\mathbf{Q}}) \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\mathcal{M}_{\mathbf{q}} := \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\zeta, \zeta'} \sum_{s, s'} (O_{\mathcal{M}})_{\zeta s, \zeta' s'} c_{\mathbf{k}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \zeta' s'} \quad (3.42)$$

ハバード模型の平均場理論

- 考えている磁気秩序と共に役な“磁場”を導入：

$$\mathcal{H}_{\text{ext}} = -h \sum_{\mathbf{R}} \mathcal{M}_{\mathbf{R}} = -\frac{h}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\zeta, \zeta'} \sum_{s, s'} \left[(\mathcal{O}_{\mathcal{M}})_{\zeta s, \zeta' s'} c_{\mathbf{k}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \zeta' s'} + (\mathcal{O}_{\mathcal{M}})^*_{\zeta' s', \zeta s} c_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{k}, \zeta' s'} \right] \quad (3.43)$$

- 相互作用項の平均場近似(フォック項も含む)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} &= U \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \\ &\simeq U \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} \left(\langle c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} + c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \langle c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle \langle c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} - c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \langle c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow} \rangle \langle c_{\mathbf{R}, \zeta \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \zeta \uparrow} \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$= \dots = \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} \langle n_{\mathbf{R}, \zeta} \rangle n_{\mathbf{R}, \zeta} - \frac{2U}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\zeta} \langle \mathbf{S}_{-\mathbf{q}, \zeta} \rangle \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{q}, \zeta} + \text{const.} \quad (3.45)$$

ハバード模型の平均場理論

- $\langle n_{R,\zeta} \rangle = n_e, \langle S_{q,\zeta} \rangle = m v_{q,\zeta}$ とすると

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\zeta, \zeta'} \sum_{s, s'} \left\{ n_e \delta_{\zeta, \zeta'} \delta_{s, s'} c_{\mathbf{k}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{k}, \zeta' s'} - 2m \left[(\mathcal{O}_M)_{\zeta s, \zeta' s'} c_{\mathbf{k}, \zeta s}^\dagger c_{\mathbf{k} + Q, \zeta' s'} + \text{H.c.} \right] \right\} \quad (3.47)$$

- 平均場ハミルトニアンの行列表示
 - k と $k + Q$ の空間を作つて冗長性(redundancy)を持たせる

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{MF}} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} c_{\mathbf{k}}^\dagger & c_{\mathbf{k}+Q}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{H}_0(\mathbf{k}) & -h_{\text{eff}} \hat{\mathcal{O}}_M \\ -h_{\text{eff}} \hat{\mathcal{O}}_M^\dagger & \hat{H}_0(\mathbf{k}+Q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{\mathbf{k}} \\ c_{\mathbf{k}+Q} \end{bmatrix} \quad (3.48) \\ &= \hat{H}_{\text{MF}}(\mathbf{k}) : \text{一体のハミルトニアン} \end{aligned}$$

ハバード模型の平均場理論

- 平均場ハミルトニアンの対角化

$$\hat{V}_{\text{MF}}(\mathbf{k})^\dagger \hat{H}_{\text{MF}}(\mathbf{k}) \hat{V}_{\text{MF}}(\mathbf{k}) = \text{diag}[E(\mathbf{k})_1, \dots, E(\mathbf{k})_{4d}] \quad (3.51)$$

$$\hat{V}_{\text{MF}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \hat{v}_1(\mathbf{k}) \\ \hat{v}_2(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \quad (3.52)$$

- 期待値計算

- 電子数 : $n_e = \frac{1}{2Nd} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=1}^{4d} f[E(\mathbf{k})_\alpha] \quad (3.55)$

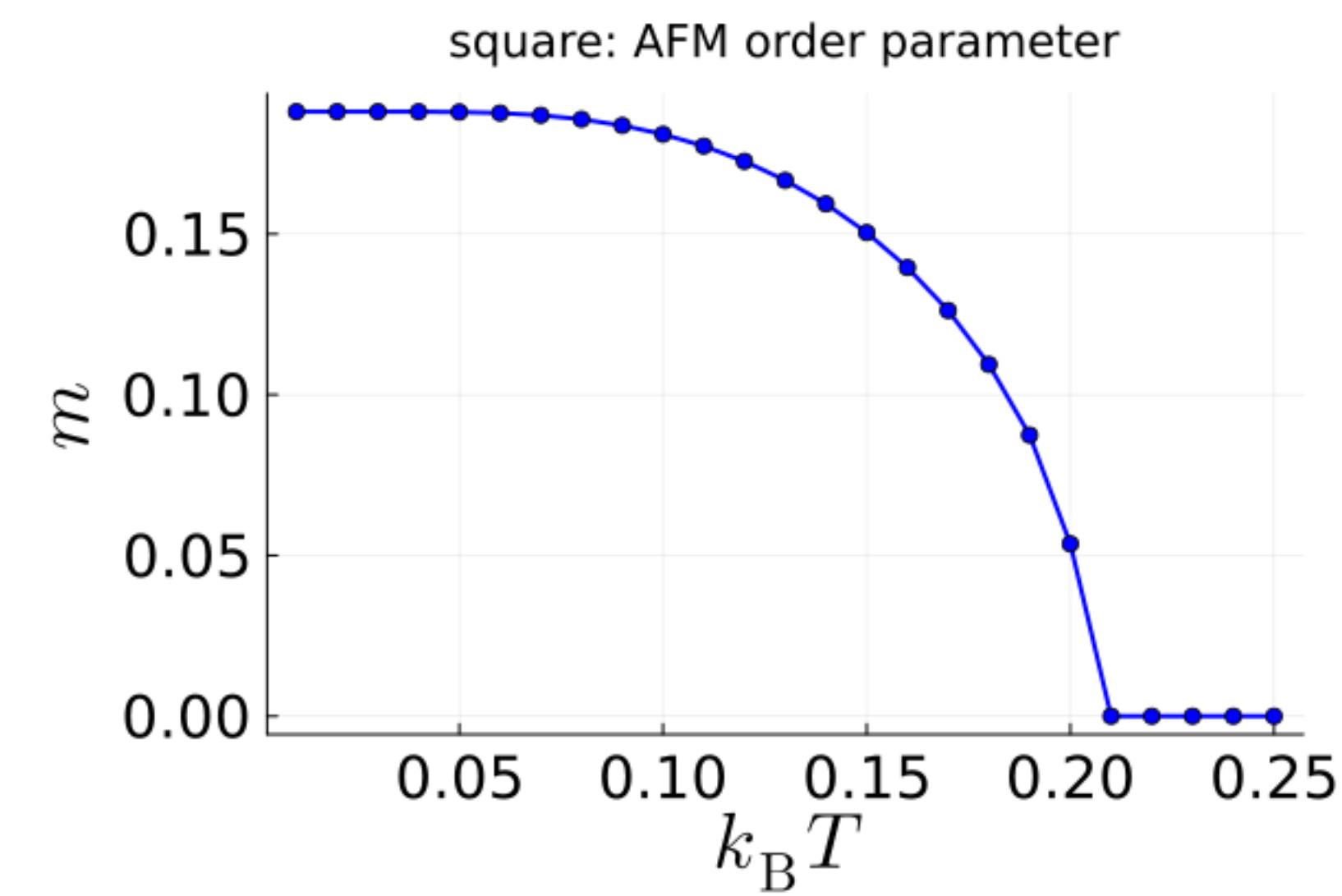
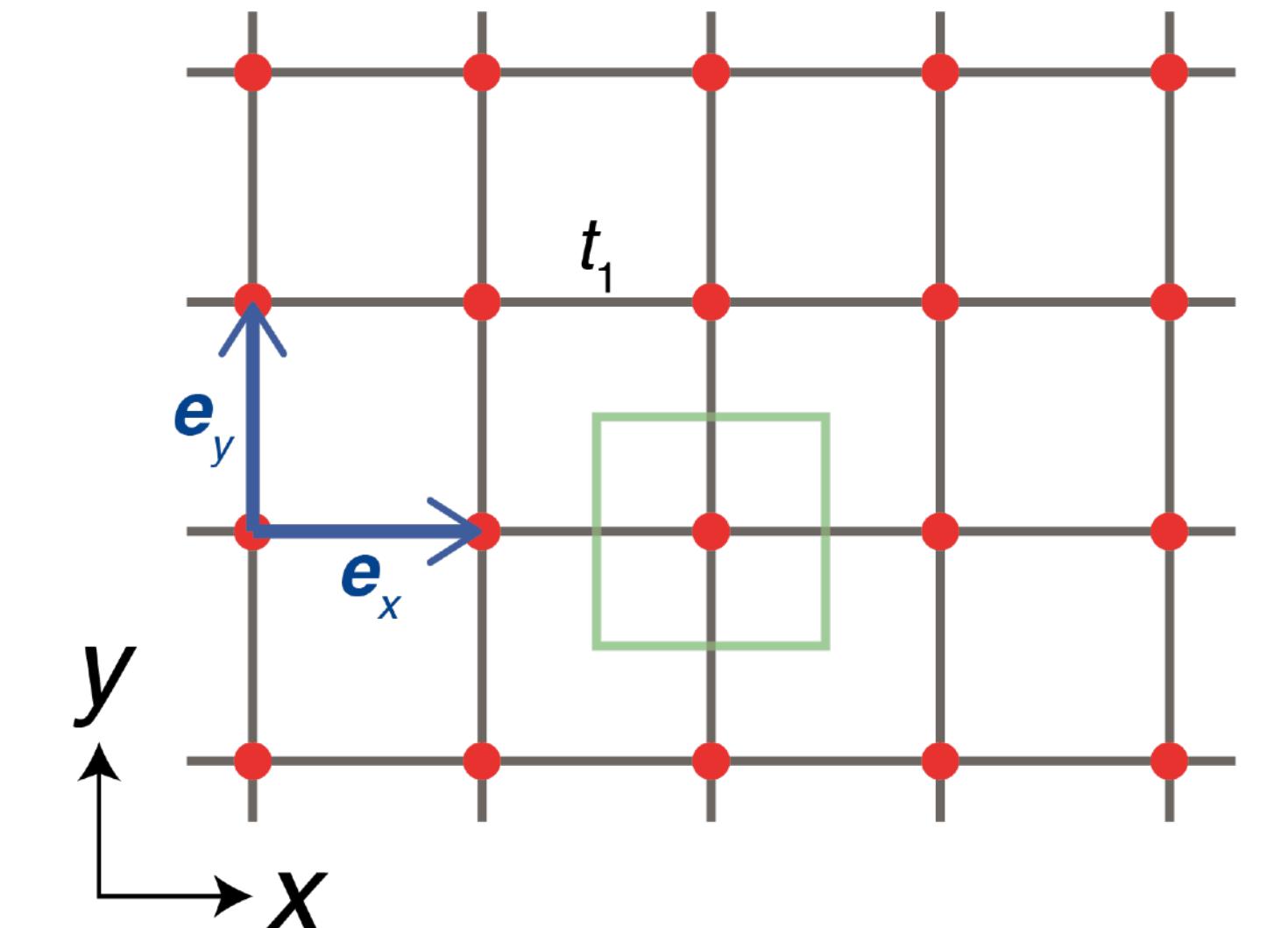
- 磁気秩序変数 : $m = \frac{1}{Nd} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=1}^{4d} f[E(\mathbf{k})_\alpha] \text{Re} [\hat{v}_1(\mathbf{k})^\dagger \hat{\mathcal{O}}_{\mathcal{M}} \hat{v}_2(\mathbf{k})]_{\alpha,\alpha} \quad (3.56)$

3節 平均場理論

3.3 具体例：正方格子ハバード模型上の反強磁性とその拡張

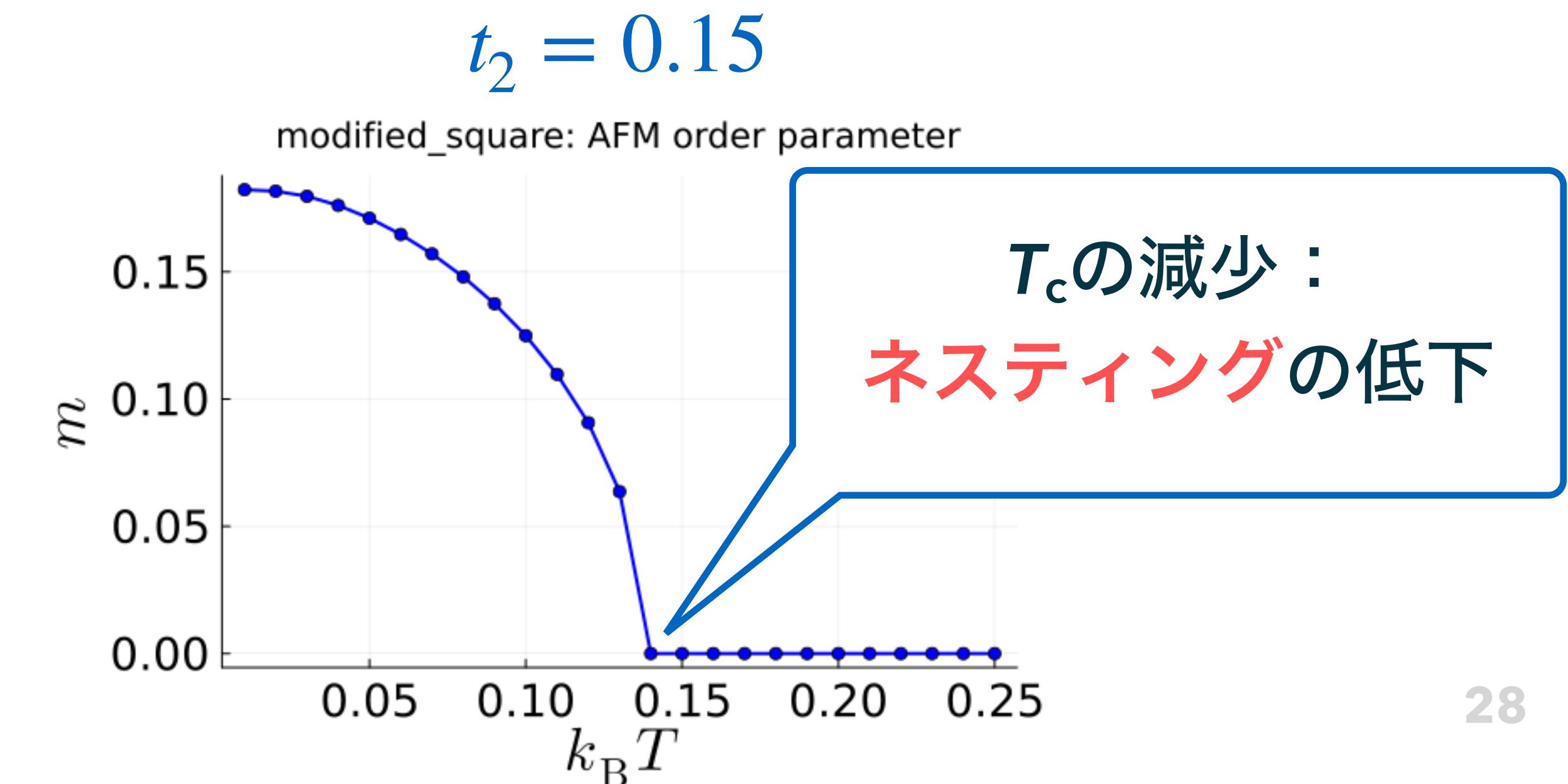
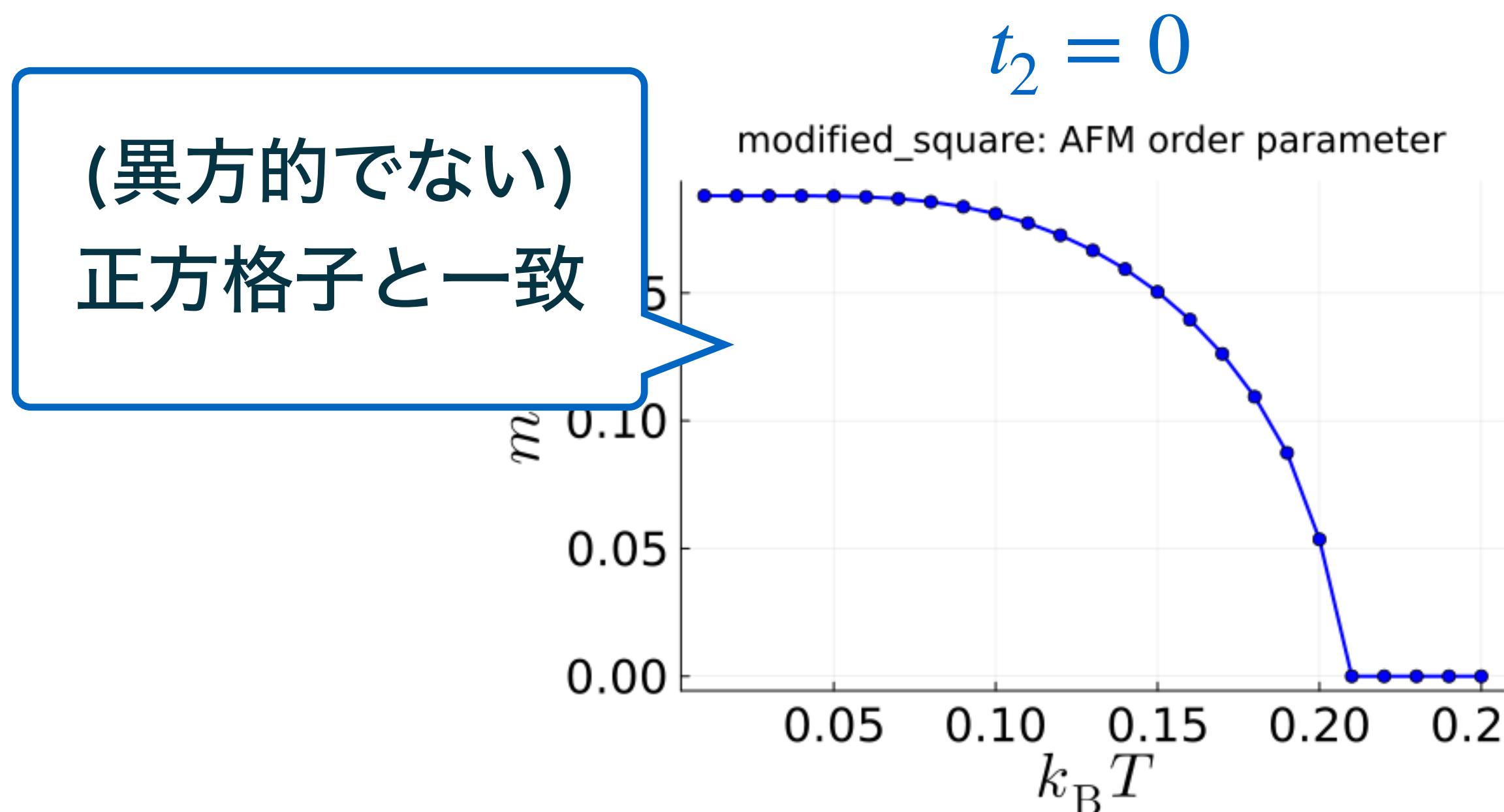
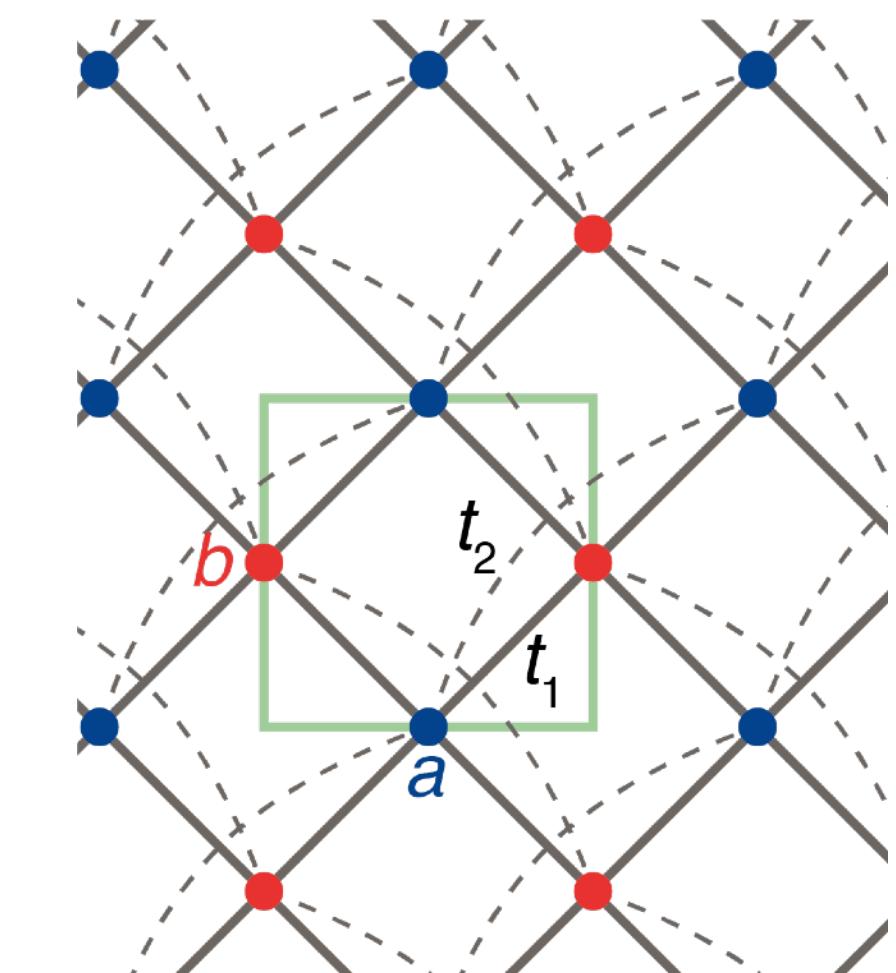
正方格子ハバード模型

- 計算条件
 - 磁気秩序演算子 : $\hat{O}_M = \hat{\sigma}_z/2$
 - 秩序ベクトル $Q = (\pi, \pi)$ 、 half-filling ($n_e = 1$)
 - $t_1 = 1, U = 2$
- 平均場理論に基づいて秩序変数を計算
 - T_c 直下で $(T_c - T)^{1/2}$ の立ち上がり
 - 低温では定数に収束



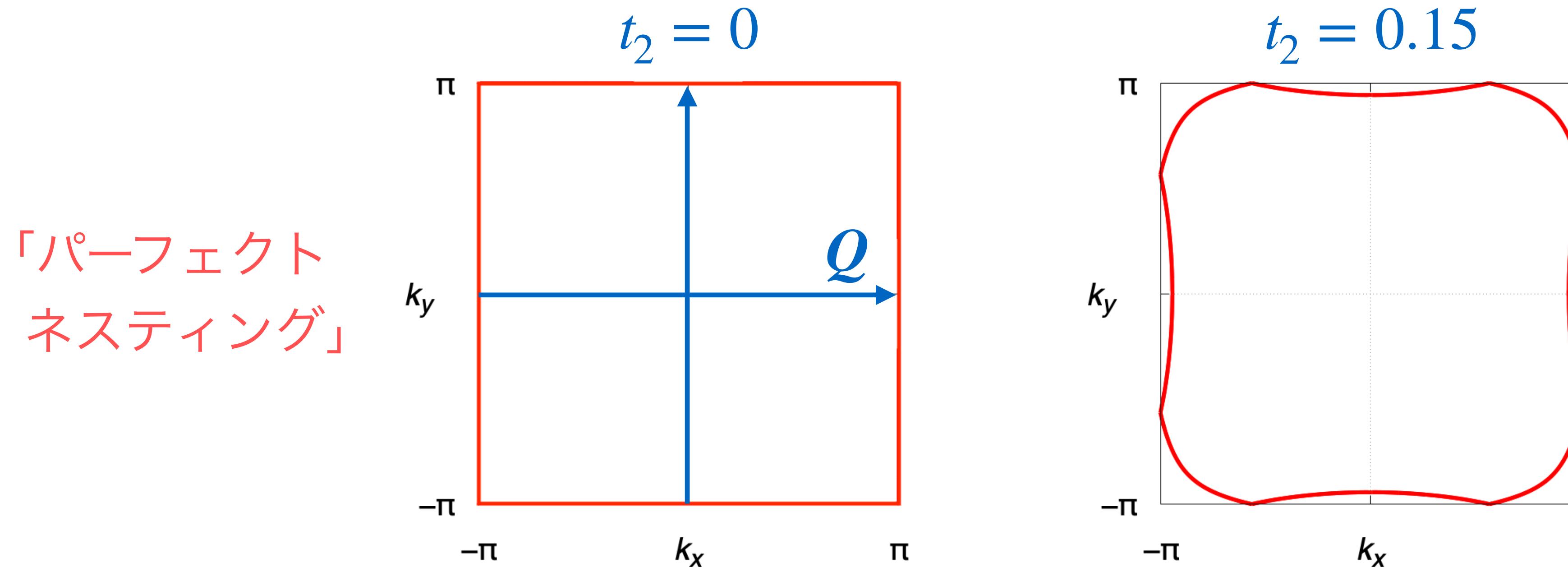
異方的な正方格子ハバード模型

- 計算条件
- 磁気秩序演算子 : $\hat{O}_M = \hat{\tau}_z \otimes \hat{\sigma}_z / 2$
- 秩序ベクトル $Q = \mathbf{0}$ 、half-filling ($n_e = 1$)、 $t_1 = 1$, $U = 2$



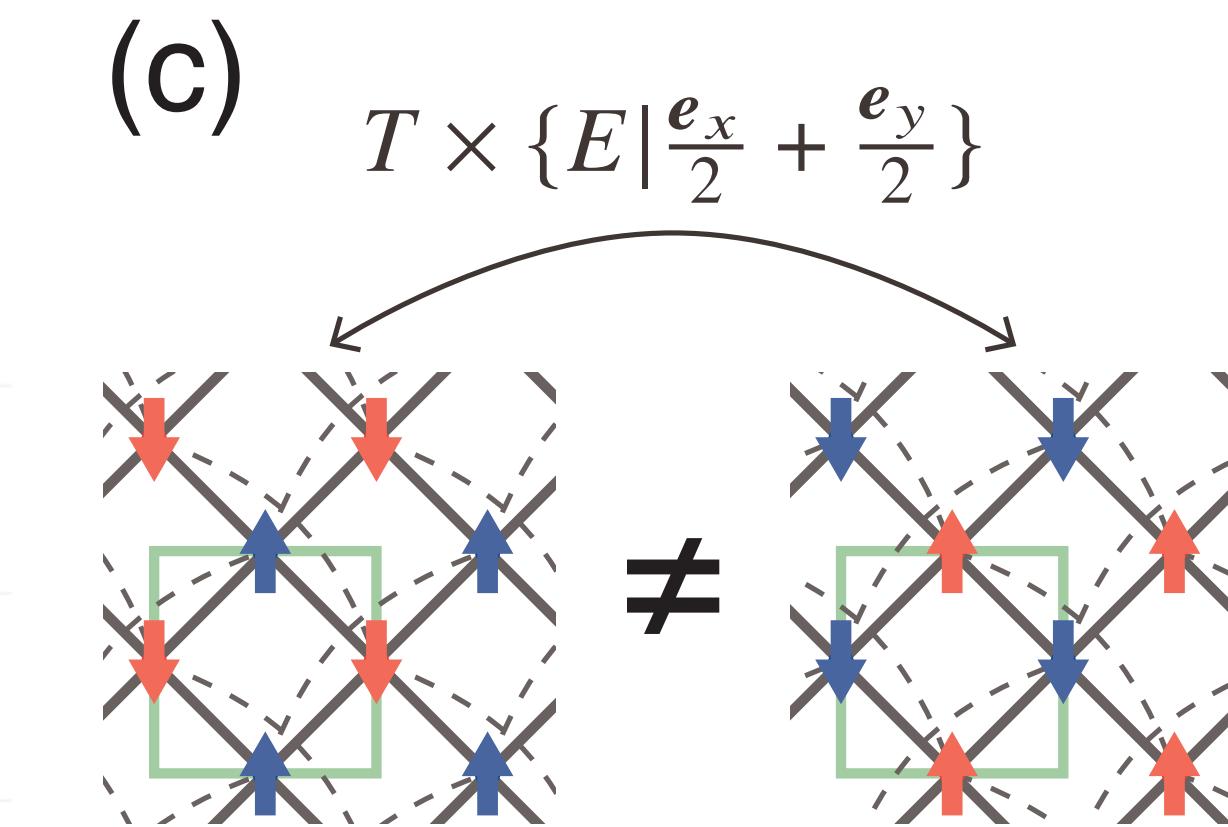
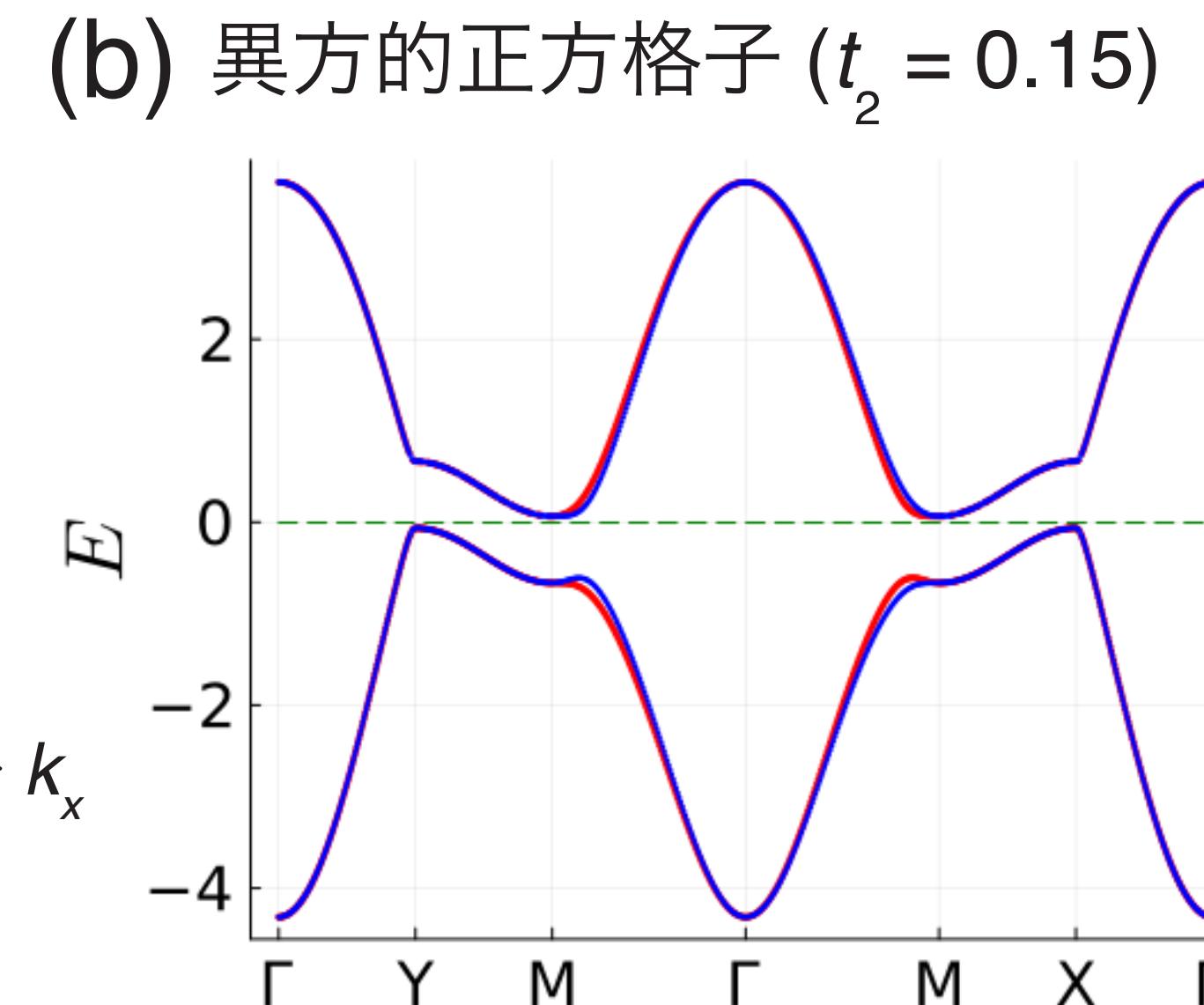
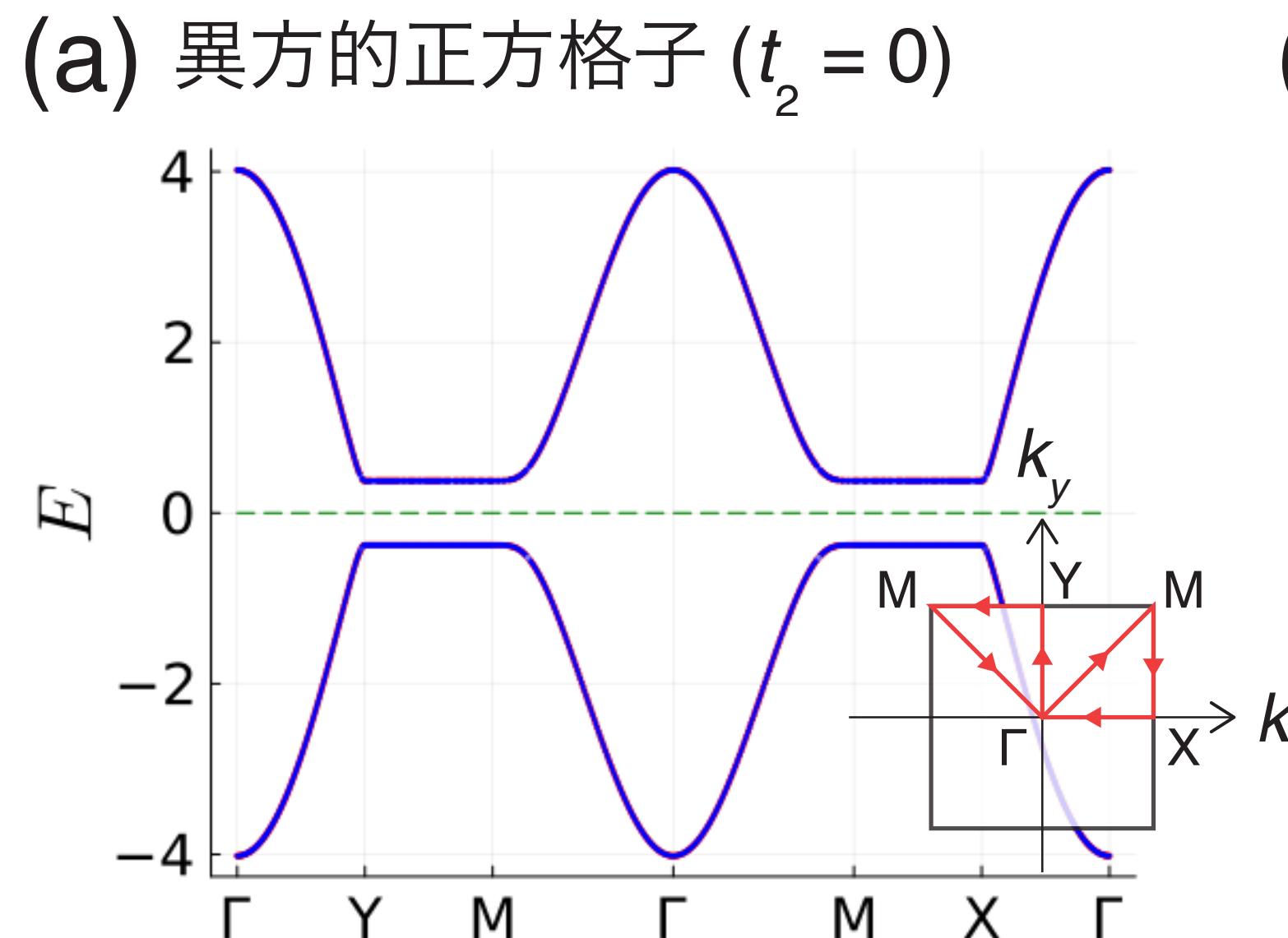
ネスティング

- ネスティングベクトル $Q \neq 0$
- フェルミ面を Q だけシフトしたものが元のフェルミ面と有限の領域にわたって重なる



磁気秩序相でのエネルギーバンド構造

- E_F 付近でギャップが開いて絶縁化(スレーター転移)
- $t_2 \neq 0$ のときバンド構造にスピンドル分裂が生じる
- 副格子 a, b が並進操作で結ばれない → **交替磁性！**



3節 平均場理論

3.4 平均場近似の問題点

守谷亨「磁性物理学」(朝倉書店, 2006)

高橋慶紀・吉村一良「遍歴磁性とスピンゆらぎ」(内田老鶴園, 2012)

上田和夫「磁性物理の基礎概念強相関電子系の磁性」(内田老鶴園, 2020)

平均場近似の問題点

- 常磁性磁化率 $\chi(T)^{-1} \propto (T^2 - T_C^2)$
- キュリー・ワイス則 [$\chi(T)^{-1} \propto (T - T_C)$] を再現しない
- 磁気転移温度を数倍～1桁ほど高く見積もる
- 低温における熱力学量の温度依存性を正しく記述しない
- 正しい臨界指数を与えない
- 分子場近似：ギンツブルク・ランダウ理論と同様の結果

「平均場近似は、遍歴磁性体を記述する万能な手段ではない」

4節 多極子秩序の揺らぎ(動的感受率)

4.1 線形応答理論、4.2 動的多極子感受率

動的感受率

- 磁化率：磁性体の基本的性質を示す
 - 磁気秩序と共に役をなす(仮想的な)磁場をかけたときの応答
- 時間的に振動する磁場 → 動的磁化率・動的感受率
 - 線形応答理論(久保公式)に基づく
 - 実験結果とも関連 高橋慶紀、物性研究 75, 1 (2000)
「遍歴電子磁性体におけるスピンのゆらぎ」
 - X線回折・中性子散乱における微分断面積
 - 核磁気共鳴の緩和時間

線形応答理論(結果のみ)

- 時間に依存した外力が加えられている : $\mathcal{H}_{\text{ext}}(t) = -BF(t)$ (4.1)
- 周波数 ω の振動外力をゆっくりと加える : $F(t) = F_0 e^{\delta t} e^{-i\omega t}$
- 物理量 A の、熱平衡状態からの差分

$$\Delta A(t) := \overline{A(t)} - \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\tilde{A}(t-t'), B] \rangle F_0 e^{-i(\omega+i\delta)t'} \quad (4.9)$$

$$= \chi_{AB}^{(R)}(\omega) F_0 e^{-i(\omega+i\delta)t} \quad (4.10)$$

● 複素感受率

$$\chi_{AB}^{(R)}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t) \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle e^{i(\omega+i\delta)t} \quad (4.11)$$

$$\chi_{AB}^{(R)}(t) := \frac{i}{\hbar} \theta(+t) \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle \quad (4.12)$$

応答関数

動的多極子感受率

- 平均場理論のときと同様、一般的な磁気秩序を考える

- 共役な振動“磁場” $\mathbf{h}_{\mathbf{R},\zeta}(t) = h\nu_\zeta e^{i[\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r}_\zeta)-(\omega+i\delta)t]}$

$$\begin{aligned} \rightarrow \text{ハミルトニアン} : \mathcal{H}_{\text{ext}}(t) &= - \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\zeta} \mathbf{h}_{\mathbf{R},\zeta}(t) \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R},\zeta} \\ &= -h \sum_{\zeta} \nu_\zeta \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q},\zeta} e^{-i(\omega+i\delta)t} = -h\mathcal{M}_{-\mathbf{q}} e^{-i(\omega+i\delta)t} \end{aligned} \quad (4.14)$$

- 磁気多極子 \mathcal{M}_q の動的感受率

$$\chi_{\mathcal{M}}^{(\text{R})}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\xi_1, \dots, \xi_4} (\mathcal{O}_{\mathcal{M}})_{\xi_1, \xi_2} \chi^{(\text{R})}(\mathbf{q}, \omega)_{\xi_1 \xi_2, \xi_3, \xi_4} (\mathcal{O}_{\mathcal{M}})_{\xi_4, \xi_3} \quad (4.16)$$

$$\chi^{(\text{R})}(\mathbf{q}, \omega)_{\xi_1 \xi_2, \xi_3, \xi_4} = \frac{i}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \int_0^\infty dt \theta(t) \left\langle [\tilde{c}_{\mathbf{k}, \xi_1}^\dagger(t) \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \xi_2}(t), c_{\mathbf{k}', \xi_4}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \xi_3}] \right\rangle e^{i(\omega+i\delta)t} \quad (4.17)$$

一般化感受率

4節 多極子秩序の揺らぎ(動的感受率)

4.3 亂雜位相近似

一般化感受率のバンド表示

- $\hat{V}(\mathbf{k})$: ハミルトニアンの一体部分を対角化するユニタリ行列
- バンド α に対応するブロッホ電子の生成・消滅演算子

$$d_{\mathbf{k}, \alpha s}^\dagger := \sum_{\zeta} c_{\mathbf{k}, \zeta s}^\dagger V(\mathbf{k})_{\zeta, \alpha}, \quad d_{\mathbf{k}, \alpha s} := \sum_{\zeta} V(\mathbf{k})_{\zeta, \alpha}^* c_{\mathbf{k}, \zeta s} \quad (3.13)$$

- 一般化感受率のフーリエ成分

$$\begin{aligned} \chi^{(R)}(\mathbf{q}, t)_{\xi_1 \xi_2, \xi_3, \xi_4} &= \frac{i}{N\hbar} \theta(t) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left\langle [\tilde{c}_{\mathbf{k}, \xi_1}^\dagger(t) \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \xi_2}(t), c_{\mathbf{k}', \xi_4}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \xi_3}] \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_4} V(\mathbf{k})_{\xi_1, \alpha_1}^* V(\mathbf{k} + \mathbf{q})_{\xi_2, \alpha_2} V(\mathbf{k}' - \mathbf{q})_{\xi_3, \alpha_3} V(\mathbf{k}')_{\xi_4, \alpha_4}^* \\ &\quad \times \frac{i}{\hbar} \theta(t) \left\langle [\tilde{d}_{\mathbf{k}, \alpha_1}^\dagger(t) \tilde{d}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \alpha_2}(t), d_{\mathbf{k}', \alpha_4}^\dagger d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \alpha_3}] \right\rangle \quad (4.20) \\ &=: \chi(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; t)_{\alpha_1 \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4} \end{aligned}$$

一般化感受率の運動方程式

運動方程式

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; t)_{\alpha_1 \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4} &= -\delta(t) \left\langle [d_{\mathbf{k}, \alpha_1}^\dagger d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \alpha_2}, d_{\mathbf{k}', \alpha_4}^\dagger d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \alpha_3}] \right\rangle \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \theta(t) \left\langle \left[e^{i\mathcal{H}t/\hbar} [d_{\mathbf{k}, \alpha_1}^\dagger d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \alpha_2}, \mathcal{H}] e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}, d_{\mathbf{k}', \alpha_4}^\dagger d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \alpha_3} \right] \right\rangle \end{aligned} \quad (4.22)$$

ハバード模型の場合、計算すべき交換関係は

- $[d_{\mathbf{k}, \alpha_1}^\dagger d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \alpha_2}, d_{\mathbf{k}', \alpha_4}^\dagger d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \alpha_3}]$
- $[d_{\mathbf{k}, \alpha_1}^\dagger d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \alpha_2}, \mathcal{H}_0]$
- $[d_{\mathbf{k}, \alpha_1}^\dagger d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \alpha_2}, \mathcal{H}_{\text{int}}]$ → さらに高次の項：運動方程式が閉じない

乱雑位相近似(RPA)

- 平均場近似を動的な問題へ拡張したもの (\neq 動的平均場理論)
 - 「『バブル』や『ラダー』のダイアグラムを取る」
- 相互作用項にRPAを適用し、 $t \rightarrow \omega$ へフーリエ変換(付録B参照)

$$\hat{\chi}^{(R)}(\mathbf{q}, \omega) = \left[\hat{\mathbf{1}} - \hat{\chi}_0^{(R)}(\mathbf{q}, \omega) \hat{U} \right]^{-1} \hat{\chi}_0^{(R)}(\mathbf{q}, \omega) \quad (4.27)$$

既約感受率

$$\chi_0^{(R)}(\mathbf{q}, \omega)_{\xi_1 \xi_2, \xi_3 \xi_4} := -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \frac{f[\varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha_1}] - f[\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})_{\alpha_2}]}{\hbar(\omega + i\delta) + \varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha_1} - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})_{\alpha_2}} V(\mathbf{k})_{\xi_1, \alpha_1}^* V(\mathbf{k} + \mathbf{q})_{\xi_2, \alpha_2} V(\mathbf{k})_{\xi_3, \alpha_1} V(\mathbf{k} + \mathbf{q})_{\xi_4, \alpha_2}^* \quad (4.25)$$

$$U_{\xi_1 \xi_2, \xi_3 \xi_4} := \delta_{\zeta_1, \zeta_2} \delta_{\zeta_2, \zeta_3} \delta_{\zeta_3, \zeta_4} U_{s_1 s_2, s_3 s_4}^{(s)}, \quad U_{s_1 s_2, s_3 s_4}^{(s)} := \begin{cases} U & (s_1 s_2, s_3 s_4) = (\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow) \text{ or } (\downarrow\uparrow, \downarrow\uparrow) \\ -U & (s_1 s_2, s_3 s_4) = (\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow) \text{ or } (\downarrow\downarrow, \uparrow\uparrow) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.24)$$

例4.2 動的磁化率

- 1軌道・1副格子・スピニン軌道結合なし
 - 任意の \mathbf{k} 点でスピニン縮退したエネルギーバンド $\varepsilon(\mathbf{k})$
- 既約感受率

$$\chi_0^{(R)}(\mathbf{q}, \omega)_{s_1 s_2, s_3 s_4} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f[\varepsilon(\mathbf{k})] - f[\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\hbar(\omega + i\delta) + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \delta_{s_1, s_3} \delta_{s_2, s_4} =: \chi_0(\mathbf{q}, \omega) \delta_{s_1, s_3} \delta_{s_2, s_4} \quad (4.28)$$

- 縦磁化率： $\hat{O}_M = \hat{\sigma}^z / 2$ として計算
- $\omega = 0$ (静的)のとき、
平均場近似の磁化率と一致

$$\begin{aligned} \chi^{zz}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{4} \sum_{s_1, \dots, s_4} \sigma_{s_1, s_2}^z \chi^{(R)}(\mathbf{q}, \omega)_{s_1 s_2, s_3 s_4} \sigma_{s_4, s_3}^z \\ &= \dots = \frac{1}{2} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U\chi_0(\mathbf{q}, \omega)} \end{aligned} \quad (4.30)$$

リントハルト関数

- 自由電子系：感受率を解析的に計算できる数少ない例

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.31)$$

- $T = 0$ における感受率(リントハルト関数)

(注) 途中で無次元化している：
 $\tilde{\omega} := \hbar\omega/\varepsilon_F$, $\tilde{q} := k/k_F$

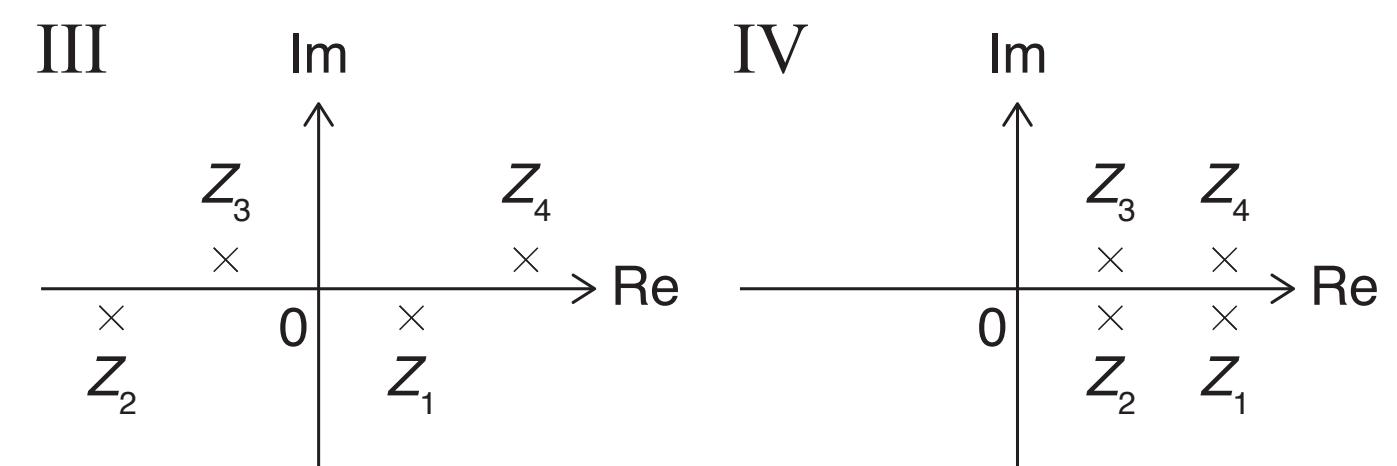
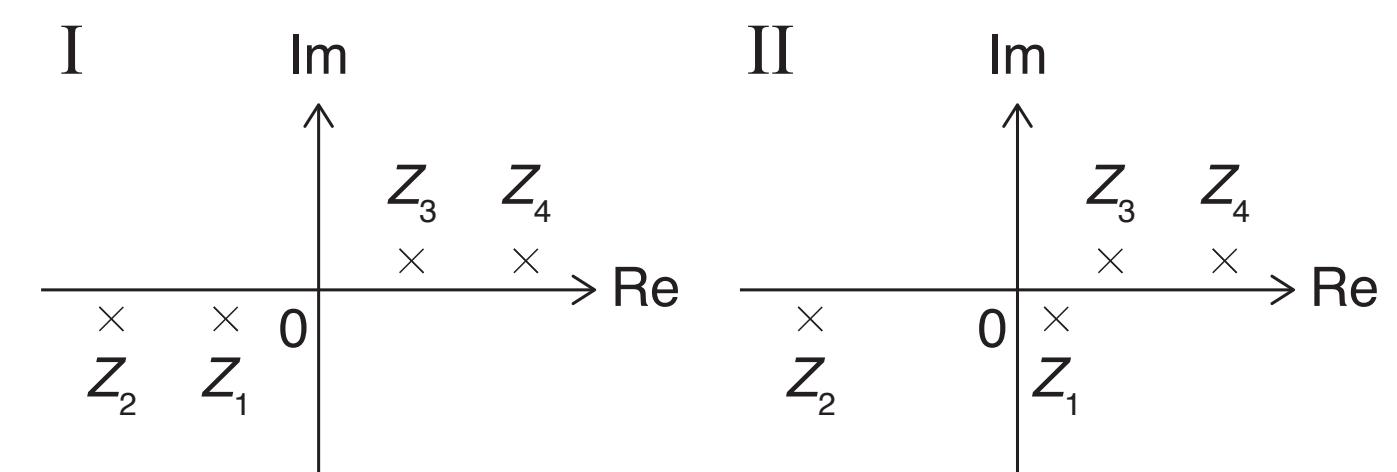
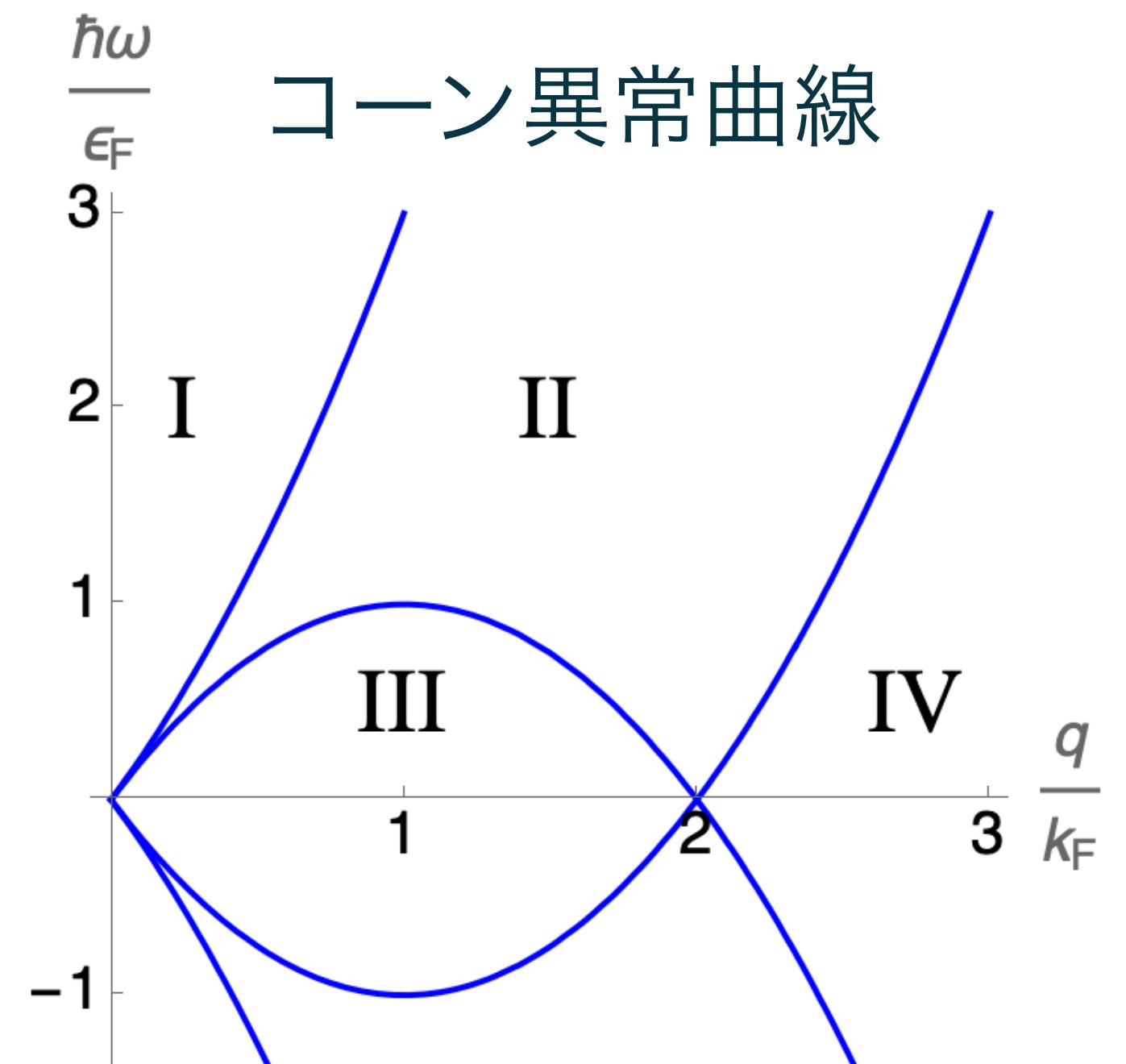
$$\begin{aligned} \chi_0^{(R)}(q, \omega) &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f[\varepsilon(\mathbf{k})] - f[\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\hbar(\omega + i\delta) + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\ &= \dots = \rho(\varepsilon_F) \frac{1}{2\tilde{q}} \left\{ \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{+\tilde{\omega} + \tilde{q}^2}{2\tilde{q}} \right)^2 \right] \ln \frac{Z_4(\tilde{q}, \tilde{\omega})}{Z_3(\tilde{q}, \tilde{\omega})} + \frac{+\tilde{\omega} + \tilde{q}^2}{2\tilde{q}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{-\tilde{\omega} + \tilde{q}^2}{2\tilde{q}} \right)^2 \right] \ln \frac{Z_2(\tilde{q}, \tilde{\omega})}{Z_1(\tilde{q}, \tilde{\omega})} + \frac{-\tilde{\omega} + \tilde{q}^2}{2\tilde{q}} \right\} \quad (4.32, 4.36) \end{aligned}$$

$$Z_{1,2}(q, \omega) := -\tilde{\omega} \pm 2\tilde{q} + \tilde{q}^2, \quad Z_{3,4}(q, \omega) := +\tilde{\omega} \mp 2\tilde{q} + \tilde{q}^2 \quad (4.35)$$

リントハルト関数

- Z_i の性質(右図)よりリントハルト関数を計算
- 虚部

$$\text{Im}[\chi_0^{(\text{R})}(q, \omega)] = \begin{cases} 0 & (\text{領域 I, IV}) \\ \rho(\epsilon_F) \frac{\pi}{4\tilde{q}} \left[1 - \left(\frac{-\tilde{\omega} + \tilde{q}^2}{2\tilde{q}} \right)^2 \right] & (\text{領域 II}) \\ \rho(\epsilon_F) \frac{\pi}{4} \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{q}} & (\text{領域 III}) \end{cases} \quad (4.37)$$



リントハルト関数

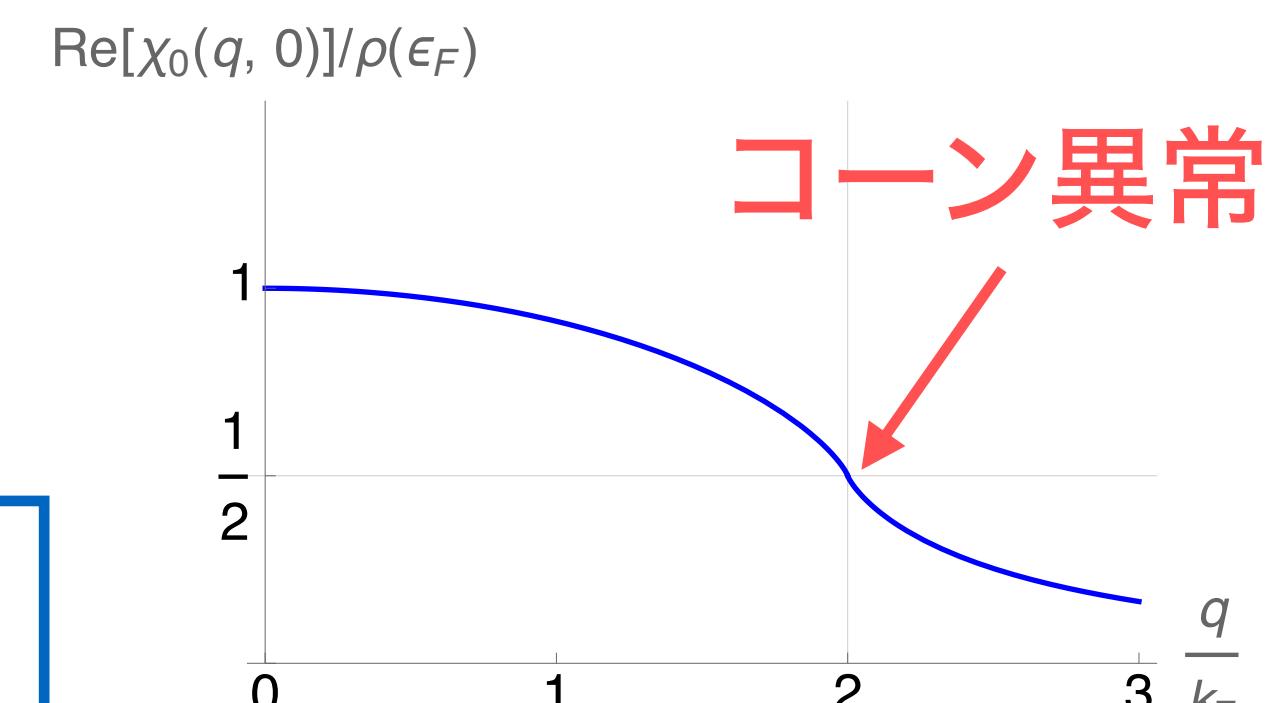
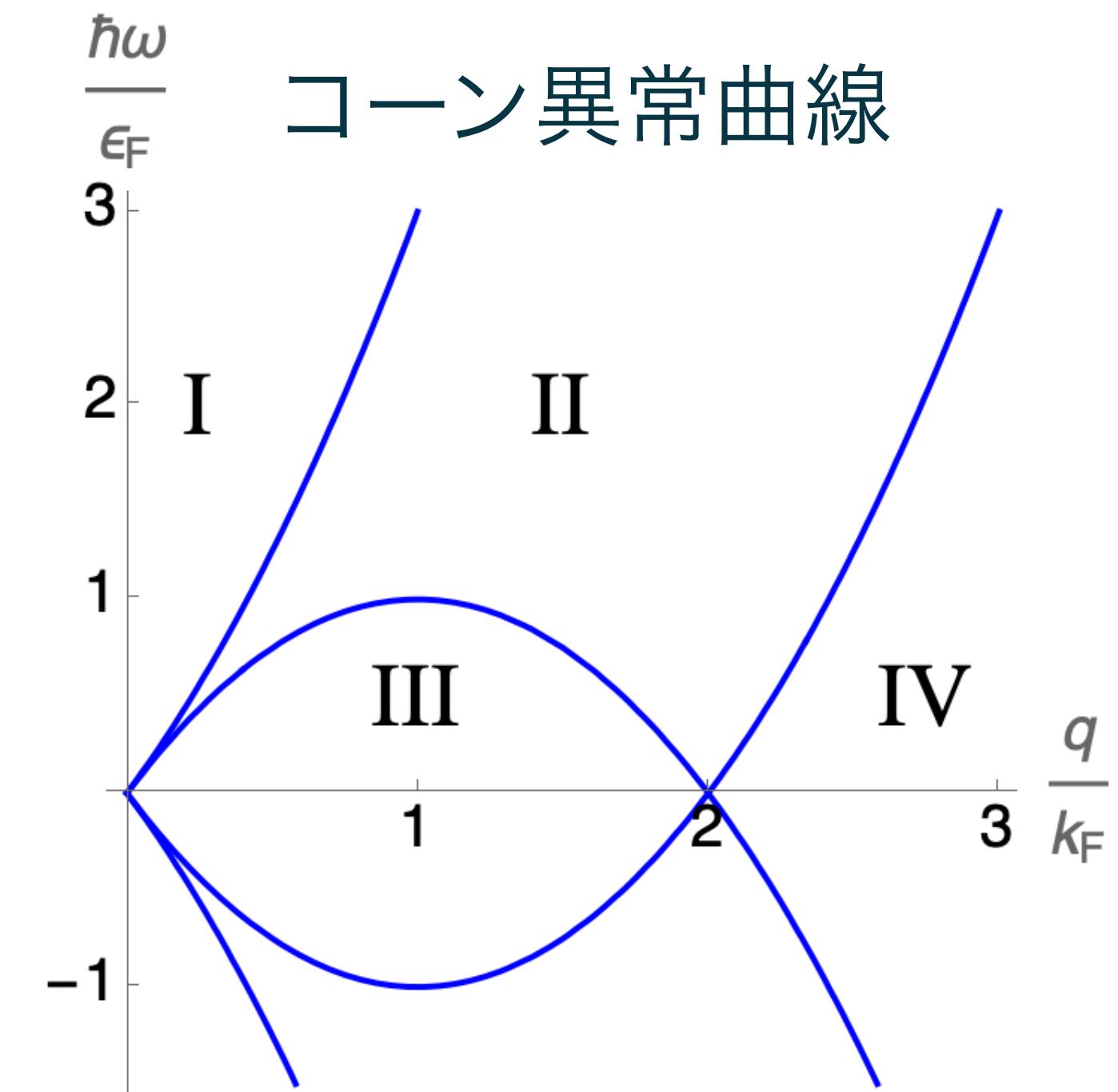
- Z_i の性質(右図)よりリントハルト関数を計算
- 実部(静的極限: $\omega = 0$)

$$\text{Re}[\chi_0^{(\text{R})}(\tilde{q}, 0)] = \rho(\epsilon_F) \frac{1}{2\tilde{q}} \left[\left(1 - \frac{\tilde{q}^2}{4}\right) \ln \left| \frac{2 + \tilde{q}}{2 - \tilde{q}} \right| + \tilde{q} \right] \quad (4.38)$$

- $q = 2k_F$ に異常(フェルミ球の直径)
- 特に、低温で重要なIIIの領域での展開形は

$$\chi_0^{(\text{R})}(q, \omega) \approx \rho(\epsilon_F) \left[1 - A_0 \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 + iC_0 \frac{\hbar\omega}{\epsilon_F} \frac{k_F}{q} \right] \quad \left(A_0 = \frac{1}{12}, C_0 = \frac{\pi}{4} \right) \quad (4.39)$$

$$\chi^{(\text{R})}(q, \omega)^{-1} \approx \frac{1}{\rho(\epsilon_F)} \left[\delta_0 + A_0 \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 - iC_0 \frac{\hbar\omega}{\epsilon_F} \frac{k_F}{q} \right] \quad (4.40)$$



松原グリーン関数との関係

- 数値計算を行う際などに威力を発揮
- 松原振動数 : $\varepsilon_m := (2m + 1)\pi k_B T / \hbar$ (フェルミオン)
 $\omega_n := 2n\pi k_B T / \hbar$ (ボソン)
- 相互作用のない1粒子グリーン関数 $\hat{G}_0(\mathbf{k}, i\varepsilon_m) := [(i\hbar\varepsilon_m + \mu)\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_0(\mathbf{k})]^{-1}$ (4.41)
- 置み込み和 → 既約感受率

$$\begin{aligned}\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n)_{\xi_1 \xi_2, \xi_3 \xi_4} &:= -\frac{k_B T}{N} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{k}} G_0(\mathbf{k}, i\varepsilon_m)_{\xi_3, \xi_1} G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_m + i\omega_n)_{\xi_2, \xi_4} \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \frac{f[\varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha_1}] - f[\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})_{\alpha_2}]}{i\hbar\omega_n + \varepsilon(\mathbf{k})_{\alpha_1} - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})_{\alpha_2}} V(\mathbf{k})_{\xi_1, \alpha_1}^* V(\mathbf{k} + \mathbf{q})_{\xi_2, \alpha_2} V(\mathbf{k})_{\xi_3, \alpha_1} V(\mathbf{k} + \mathbf{q})_{\xi_4, \alpha_2}^* \quad (4.44)\end{aligned}$$

$i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ と解析接続 : RPAの既約感受率と一致 !

4節 多極子秩序の揺らぎ(動的感受率)

4.4 揺らぎ交換近似

揺らぎ交換近似(FLEX近似)

- RPA: $\omega = 0$ で平均場近似と一致
 - 同一のモード(波数)の揺らぎのみが過大評価
- **FLEX近似** : モード・モード結合を取り込む最も簡単な近似

$$\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n)_{\xi_1 \xi_2, \xi_3 \xi_4} = -\frac{k_B T}{N} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{k}} \frac{G(\mathbf{k}, i\varepsilon_m)_{\xi_1, \xi_3} G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_m + i\omega_n)_{\xi_4, \xi_2}}{\hat{G}_0 \text{ から } \hat{G} \text{ に変更}} \quad (4.45)$$

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_m) = [(i\hbar\varepsilon_m + \mu)\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_0(\mathbf{k}) - \hat{\Sigma}(\mathbf{k}, i\varepsilon_m)]^{-1} \quad (4.47)$$

$$\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, i\varepsilon_m)_{\xi, \xi'} = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\xi_1, \xi_2} V^{(n)}(\mathbf{q}, i\omega_n)_{\xi \xi_1, \xi' \xi_2} G(\mathbf{k} - \mathbf{q}, i\varepsilon_m - i\omega_n)_{\xi_1, \xi_2} \quad (4.48)$$

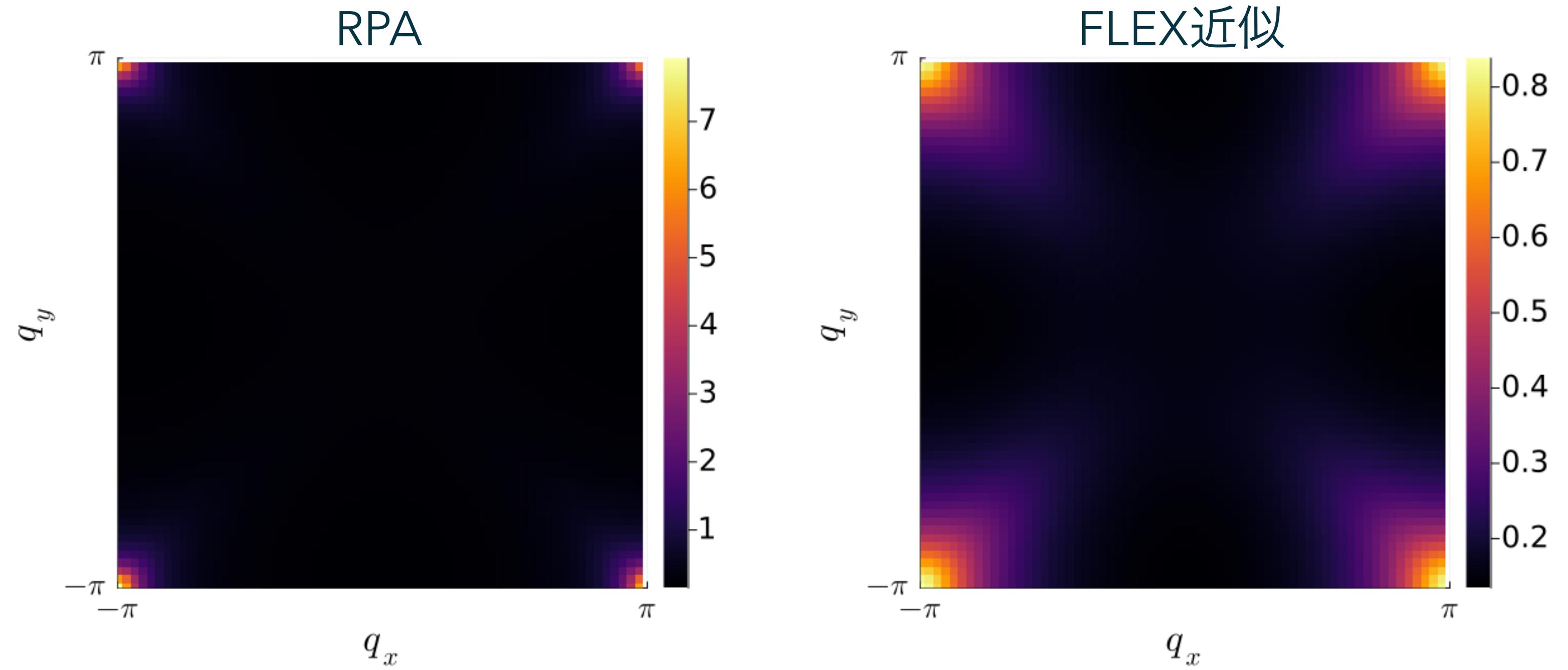
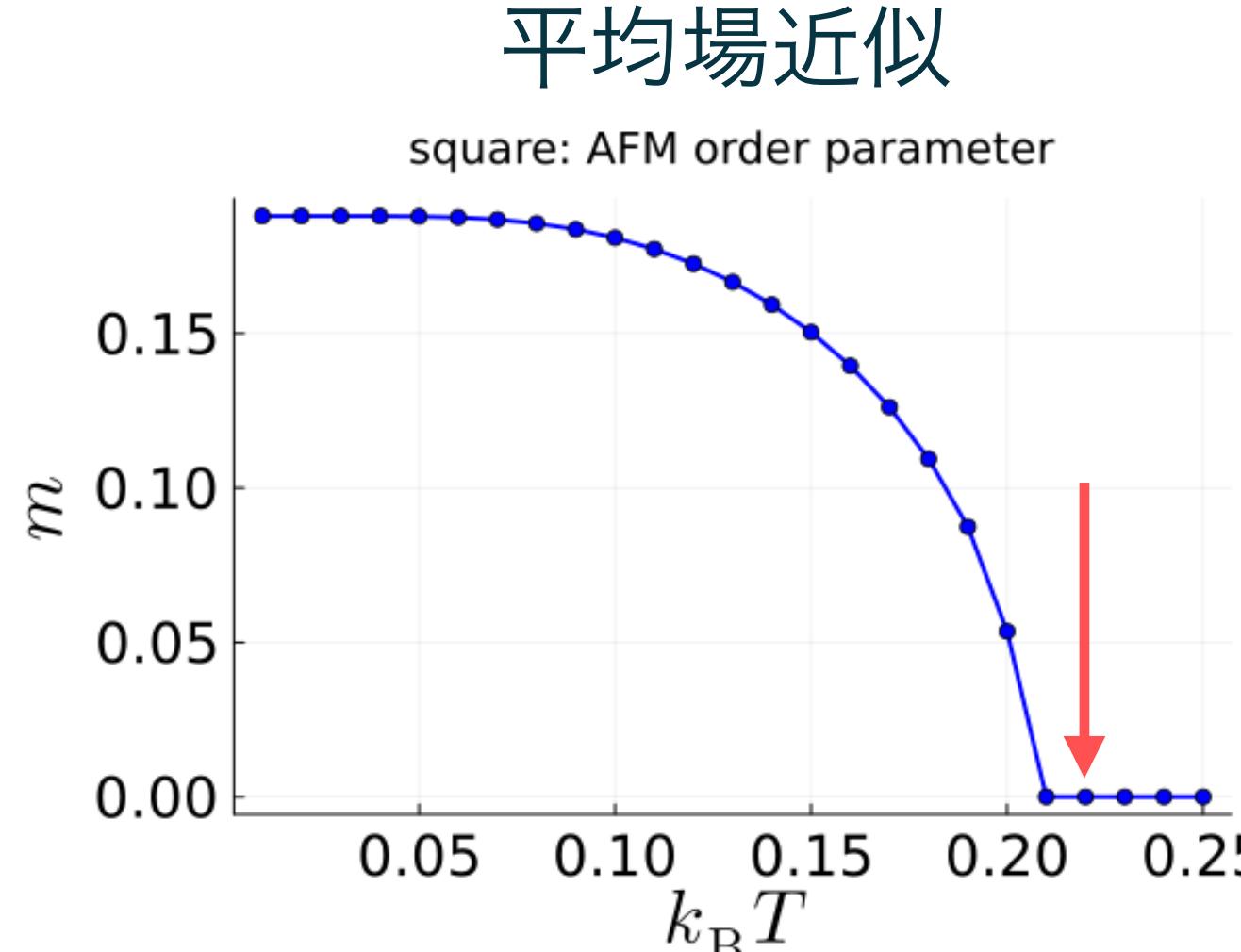
$$\hat{V}^{(n)}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \hat{U} \left[\hat{\chi}(\mathbf{q}, i\omega_n) - \frac{1}{2} \hat{\chi}_0(\mathbf{q}, i\omega_n) \right] \hat{U} \quad (4.49)$$

4節 多極子秩序の揺らぎ(動的感受率)

4.5 具体例：正方格子ハバード模型上の反強磁性とその拡張(再)

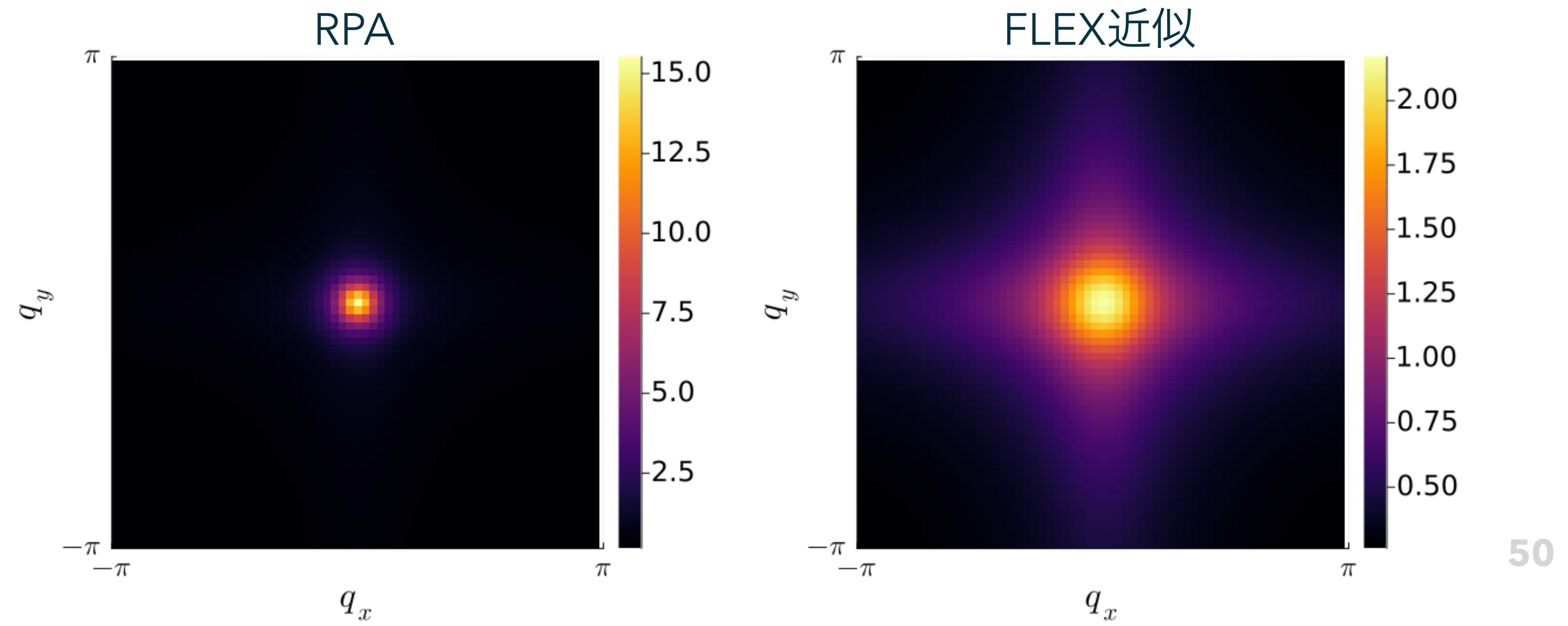
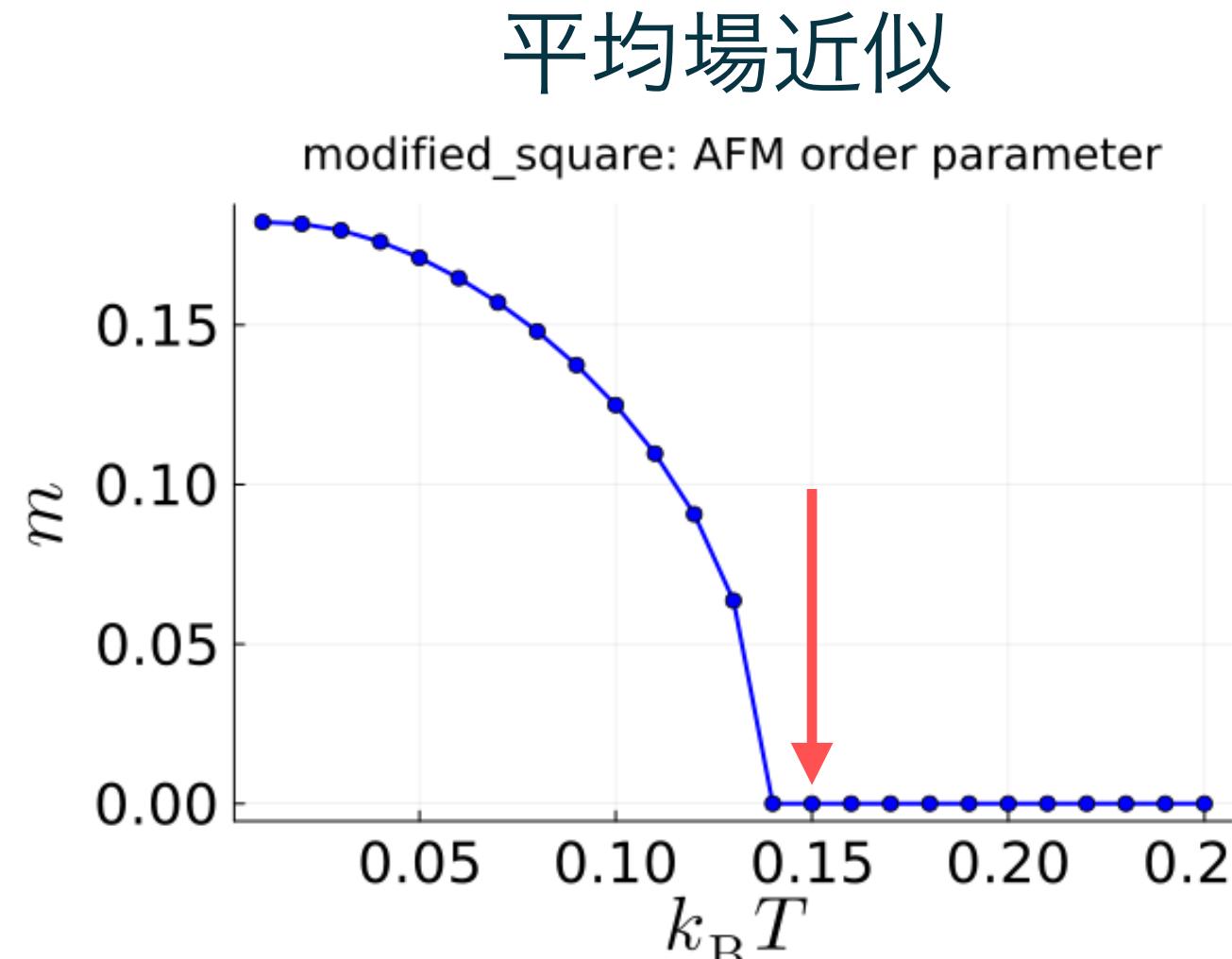
正方格子ハバード模型

- 平均場理論での転移点直上($k_{\text{B}}T = 0.22$)の磁気感受率
- 反強磁性揺らぎ[$Q = (\pi, \pi)$]の発達
- FLEX近似：転移温度が抑えられる



異方的な正方格子ハバード模型

- 平均場理論での転移点直上($k_{\text{B}}T = 0.15$)の磁気感受率
- 強的スタッガード磁気揺らぎ[$Q = 0$]の発達
- FLEX近似：転移温度が抑えられる



5節 おわりに：まとめと展望

さらなる発展へ

- 遍歴磁性体の弱相関側からのアプローチ
- 平均場近似・RPA：相互作用の最も簡便な近似方法
 - 様々な磁気秩序を取り扱うことができる
 - 問題点：転移温度の定量性、キュリー・ワイス則を破る
- モード・モード結合を取り込んだ理論の必要性
 - FLEX近似：RPAよりもかなり転移温度を抑制する
 - 自己無撞着な揺らぎの理論(SCR理論)
 - キュリー・ワイス則の再現に成功

多極子へ応用可能？

T. Moriya & A. Kawabata, J. Phys. Soc. Jpn. **34**, 639 (1973); *ibid.* **35**, 669 (1973)

守谷亨「磁性物理学」(朝倉書店, 2006); 高橋慶紀・吉村一良「遍歴磁性とスピンゆらぎ」(内田老鶴園, 2012)

おわりに

- 遍歴磁性・多体計算は私自身もまだまだ勉強中
 - テキストへの質問・コメント、関連話題など歓迎します
- 数値計算コード
 - せっかく作ったので色々遊んでみてください
(パラメータを変える、模型を変える etc.)
 - 研究にも使える...?
- 今回の講義内容が少しでも皆様の役に立てば幸いです



Thank you for listening!