6　ハバード模型の強磁性

バンド電子

へんれき itinerant な電子の磁性

6.1　ストーナー条件

以下，ハバード模型を用いて，遍歴磁性体の強磁性について議論しよう。に注意してハバード相互作用を以下のように変形する。まず，平均値 $\bar{n}_\uparrow$, $\bar{n}_\downarrow$ を定義して

平均場近似

mean field

$$c^\dagger_{i\uparrow} c_{i\uparrow} = n_{i\uparrow} = \bar{n}_\uparrow + \delta n_{i\uparrow}$$

$$c^\dagger_{i\downarrow} c_{i\downarrow} = n_{i\downarrow} = \bar{n}_\downarrow + \delta n_{i\downarrow}$$

とおいて，平均場近似の精神で揺らぎの 2 乗を無視して

$U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$

$$\begin{aligned}
n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} &= (\bar{n}_\uparrow + \delta n_{i\uparrow})(\bar{n}_\downarrow + \delta n_{i\downarrow}) \\
&\sim \bar{n}_\downarrow \delta n_{i\uparrow} + \bar{n}_\uparrow \delta n_{i\downarrow} + \bar{n}_\uparrow \bar{n}_\downarrow \\
&= \bar{n}_\downarrow n_{i\uparrow} + \bar{n}_\uparrow n_{i\downarrow} - \bar{n}_\uparrow \bar{n}_\downarrow
\end{aligned}$$

$\cancel{\delta n_{i\uparrow} \delta n_{i\downarrow}}$

$\delta n_{i\uparrow} = n_{i\uparrow} - \bar{n}_\uparrow$

としよう。これより，エネルギー分散を $\epsilon(k)$，全サイト数を L^d として $\sum_i n_i = \sum_k n_k$ だから

$\sum_i n_{i\uparrow} = \sum_k n_{k\uparrow}$

$$H - \mu \hat{N} = t \sum_{\langle i,j \rangle} c^\dagger_{i,s} c_{j,s} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu N$$

$U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$

$\sum \epsilon_k (n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow})$

$$\sim H_{MF} - \mu N$$

$$H_{MF} - \mu \hat{N} = \sum_k \left[(\epsilon_k + U\bar{n}_\downarrow - \mu) n_{k\uparrow} + (\epsilon_k + U\bar{n}_\uparrow - \mu) n_{k\downarrow} - U\bar{n}_\uparrow \bar{n}_\downarrow \right]$$

自由エネルギー F を

$$e^{-\beta F} = \Xi = \mathrm{Tr} e^{-\beta(H_{MF} - \mu \hat{N})}$$

として $\bar{n}_s$ を $\delta F = 0$ から定めれば

↑↓

$$0 = \frac{\partial F}{\partial \bar{n}_\uparrow} = \frac{\partial}{\partial \bar{n}_\uparrow}\left(-\frac{1}{\beta}\log \Xi\right) = \sum_k U(\langle n_{k\downarrow}\rangle - \bar{n}_\downarrow)$$

これと $\frac{\partial F}{\partial \bar{n}_\downarrow} = 0$ から

$$\bar{n}_\uparrow = \frac{N_\uparrow}{L^d}, \quad N_\uparrow = \sum_k \langle n_{k\uparrow}\rangle$$

$$\bar{n}_\downarrow = \frac{N_\downarrow}{L^d}, \quad N_\downarrow = \sum_k \langle n_{k\downarrow}\rangle$$

$\langle * \rangle = \mathrm{Tr}\rho * = \dfrac{\mathrm{Tr} * e^{-\beta(H-\mu N)}}{\Xi}$

となる。統計平均は密度行列 $\rho = e^{\beta(F - H_{MF})}$ に対して定める。

$$\sum_k A(\varepsilon_k) \simeq \int d\varepsilon D(\varepsilon) A(\varepsilon)$$

$$N_\uparrow = \sum_k f(\epsilon_k + U\bar{n}_\downarrow - \mu) = \int d\epsilon D(\epsilon) f(\epsilon + U\bar{n}_\downarrow - \mu)$$

$$N_\downarrow = \sum_k f(\epsilon_k + U\bar{n}_\uparrow - \mu) = \int d\epsilon D(\epsilon) f(\epsilon + U\bar{n}_\uparrow - \mu)$$

f: fermi 分布

だから体積当たりの状態密度を $\tilde{D}(\epsilon) = D(\epsilon)/L^d$ とすれば，平均場 $\bar{n}_\uparrow, \bar{n}_\downarrow$ を定めるセルフコンシステントな条件は，次のようになる。

$$\boxed{\begin{aligned} \bar{n}_\uparrow &= \int d\epsilon \tilde{D}(\epsilon) f(\epsilon + U\bar{n}_\downarrow - \mu) \\ \bar{n}_\downarrow &= \int d\epsilon \tilde{D}(\epsilon) f(\epsilon + U\bar{n}_\uparrow - \mu) \end{aligned}}$$

$\bar{n}_\uparrow, \bar{n}_\downarrow$ を定める式

また全粒子数 N として粒子数は不変だから

$$\boxed{\bar{n} = \bar{n}_\uparrow + \bar{n}_\downarrow}$$

$$m = \frac{1}{2}(\bar{n}_\uparrow - \bar{n}_\downarrow)$$

サイトあたりの

S_z の期待値

として $\bar{n}$ は定数で $U = 0$ の時 $\bar{n}_\uparrow = \bar{n}_\downarrow$, つまり $m = 0$ に注意して

$$\boxed{\begin{aligned} \bar{n}_\uparrow &= \frac{1}{2}\bar{n} + m \\ \bar{n}_\downarrow &= \frac{1}{2}\bar{n} - m \end{aligned}}$$

m は

十分に小い

と以下考える

これを使ってセルフコンシステントな条件を書けば

$$\bar{n}_\uparrow = \frac{1}{2}\bar{n} + m = \int d\epsilon \tilde{D}(\epsilon) f(\epsilon + \frac{1}{2}U\bar{n} - Um - \mu)$$

$$\bar{n}_\downarrow = \frac{1}{2}\bar{n} - m = \int d\epsilon \tilde{D}(\epsilon) f(\epsilon + \frac{1}{2}U\bar{n} + Um - \mu)$$

よって $\bar{n}$ 一定の関係式と共に平均場は次の 2 式から定まる

$$\bar{n} = \int d\epsilon \tilde{D}(\epsilon)\left[f(\epsilon + \frac{1}{2}U\bar{n} - Um - \mu) + f(\epsilon + \frac{1}{2}U\bar{n} + Um - \mu)\right]$$

$$m = \frac{1}{2}\int d\epsilon \tilde{D}(\epsilon)\left[f(\epsilon + \frac{1}{2}U\bar{n} - Um - \mu) - f(\epsilon + \frac{1}{2}U\bar{n} + Um - \mu)\right]$$

以下，m は十分に小さく，絶対零度で $\mu \to \mu_F^0 + \mu' m + \frac{1}{2}\mu'' m^2$ として $f(x) \to 1 - \theta(x)$ に注意して m^2 まで展開しよう[7]。ただし，μ は m の関数とする。

m が小として展開（テイラー展開）

$$\frac{d}{dx}\int^x dt\, F(t) = F(x)$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}\bar{n} + m &= \int^{\mu_F^0 - \frac{U}{2}\bar{n} + (\mu' + U)m + \frac{1}{2}\mu'' m^2} d\epsilon\, \tilde{D}(\epsilon) \\
&= \int^{\mu_F^0 - \frac{U}{2}\bar{n}} d\epsilon\, \tilde{D}(\epsilon) + \tilde{D}_F\left[(\mu' + U)m + \frac{1}{2}\mu'' m^2\right] + \frac{\tilde{D}'_F}{2}(\mu' + U)^2 m^2 \qquad (*1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}\bar{n} - m &= \int^{\mu_F^0 - \frac{U}{2}\bar{n} + (\mu' - U)m + \frac{1}{2}\mu'' m^2} d\epsilon\, \tilde{D}(\epsilon) \\
&= \int^{\mu_F^0 - \frac{U}{2}\bar{n}} d\epsilon\, \tilde{D}(\epsilon) + \tilde{D}_F\left[(\mu' - U)m + \frac{1}{2}\mu'' m^2\right] + \frac{\tilde{D}'_F}{2}(\mu' - U)^2 m^2 \qquad (*2)
\end{aligned}$$

ここで，$\tilde{D}_F = \tilde{D}(\mu_F^0 - \frac{U}{2}\bar{n})$, $\tilde{D}'_F = \tilde{D}'(\mu_F^0 - \frac{U}{2}\bar{n})$ である。

$$\bar{n} = 2\int^{\mu_F^0 - \frac{U}{2}\bar{n}} d\epsilon\, \tilde{D}(\epsilon) + \tilde{D}_F(2\mu' m + \mu'' m^2) + \tilde{D}'_F\big((\mu')^2 + U^2\big)m^2$$

m で微分して

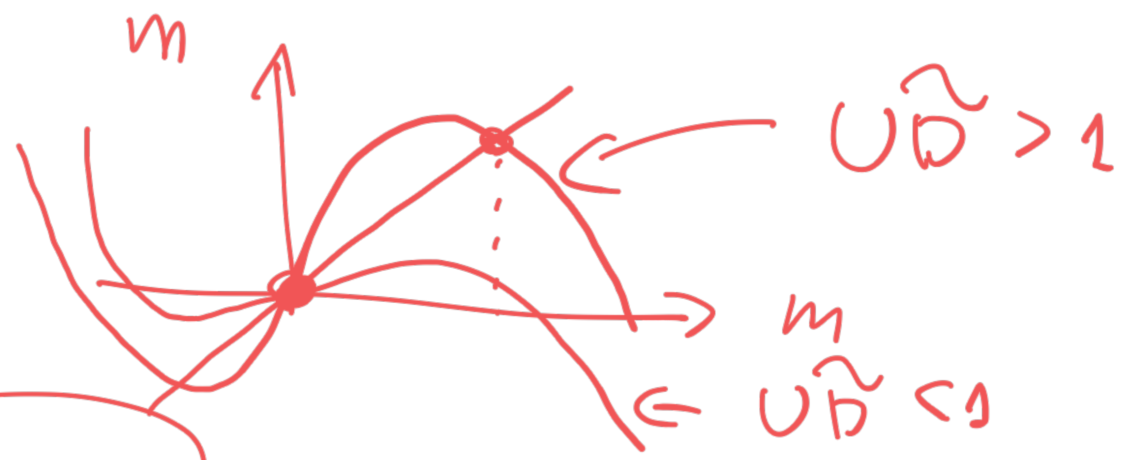
$$0 = \tilde{D}_F\left[2\mu'' m + 2\mu' + \mu''' m^2 + 2\mu'' m)\right] + \tilde{D}'_F(2\cancel{\mu'\mu'' m^2} + 2\big((\mu')^2 + U^2\big)m)$$

よって m の最低次で

$$\boxed{0 = \tilde{D}_F \mu' + \tilde{D}'_F\big((\mu')^2 + U^2\big)m}$$

$$\mu' = -C\frac{D'_F}{D_F}m$$

$$C = (\mu')^2 + U^2 > 0$$



mの3次まで

また，$*1, *2$ を m について書けば

$$m = U\tilde{D}_F m + 2\tilde{D}'_F \mu' U m^2 = U\tilde{D}_F m - 2C\frac{(\tilde{D}'_F)^2}{\tilde{D}_F}Um^3$$

これが，m をセルフコンシステントに決定する方程式である。この m の3次の項の係数は負だから $m \neq 0$ の解を持つ条件は原点での右辺の傾きを考えて

$$\boxed{U\tilde{D}_F > 1}$$

$T \to 0$

となる。これをストーナー条件と呼ぶ。これは

$$m = \frac{1}{2}(N_\uparrow - N_\downarrow)/L^d = \frac{1}{L^d}\sum_i \langle S_{i,z} \rangle$$

$B = 0$

であるから，m は単位体積当たりの磁化であり，ストーナー条件は強磁性が絶対零度で，自発的対称性の破れにより発現する条件である。