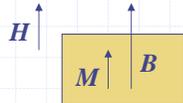




## 磁化率

外部磁場  $H$  を物質にかけると磁化  $M$  が生じるため物質内部の磁束密度  $B$  は  $B = \mu_0(H + M)$  となる。



$$\chi = M/H \quad \text{磁化率}$$

$\chi < 0$   $B < \mu_0 H$  反磁性 対電子のない物質  
 $\chi > 0$   $B > \mu_0 H$  常磁性 対電子のある物質

## 原子の反磁性

対電子のない物質 → 原子軌道による回転運動

$$I = (-Ze) \left( \frac{1}{2\pi} \frac{eB}{m} \right) \frac{1}{2}$$

電荷 サイクロトロン振動数  $\omega_c$

(磁気モーメント) =  $I \times$  (円の面積)

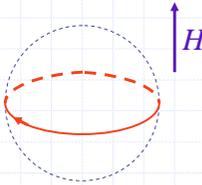
$$\mu = -\frac{Ze^2 B}{4m} \langle x^2 + y^2 \rangle = -\frac{Ze^2 B}{6m} \langle r^2 \rangle$$

よって  $\frac{2}{3} \langle r^2 \rangle$

$$\chi = \frac{N\mu}{B} = -\frac{NZe^2}{6m} \langle r^2 \rangle \quad \text{原子によって決まる反磁性 } \chi < 0$$

常磁性を求める場合も原子あたりの反磁性の和(Pascal反磁性)を補正する。

回転電流  $I$



## キュリー常磁性

対電子スピンによる磁気モーメント

$$\mu = \gamma \hbar S = -g \mu_B S$$

磁場  $H$  をかけるとエネルギーがゼーマン分裂

$$E = -g \mu_B H S = -\mu H$$

$S = 1/2$  とすると2つに分裂。熱平衡で

$$\frac{N_\uparrow}{N} = \frac{e^{\mu H / k_B T}}{e^{\mu H / k_B T} + e^{-\mu H / k_B T}} \quad \frac{N_\downarrow}{N} = \frac{e^{-\mu H / k_B T}}{e^{\mu H / k_B T} + e^{-\mu H / k_B T}}$$

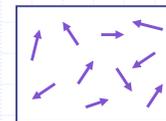
より

$$M = \mu_B (N_\uparrow - N_\downarrow) = N \mu \tanh \frac{\mu H}{k_B T} \approx N \mu \left( \frac{\mu H}{k_B T} \right) \leftarrow \frac{\mu H}{k_B T} \ll 1 \text{ だから}$$

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{N \mu^2}{k_B T} = \frac{C}{T} \quad \text{キュリー定数} \quad S=1/2 \text{ 以外のときも } C = \frac{NS(S+1)g^2 \mu_B^2}{3k_B}$$

常磁性物質の  $\chi$  は  $T$  に反比例

は  $S$  だけで決まる。

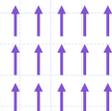


スピンはランダム  
 磁場をかけると方向がそろろう。  
 低温ほどそろいやすい。



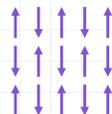
## 磁気秩序

強磁性: スピンが全部平行  
 物質が全体として磁石となる。  
 ferromagnetism



$J > 0$   
 $S_i // S_j$  が安定

反強磁性: スピンが全部反平行  
 antiferromagnetism

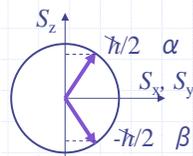


$J < 0$   
 $S_i$  と  $S_j$  が反平行が安定

## スピンハミルトニアン

$$\hat{H} = -\sum_{i,j} 2J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g \mu_B H \sum_i \vec{S}_i$$

相互作用 ゼーマン分裂



$S_i$  は  $(S_x, S_y, S_z)$  といったベクトルである(Heisenberg model)。  
 しかし磁気異方性が大きい(結晶場など)によりスピンが常に一方向( $S_z$ )を向いているときは  $S_z$  のみ考えることができる。

(Ising model)

$S_i = 1/2, S_j = 1/2$  を入れると(相互作用) =  $-J/2$   
 $S_i = 1/2, S_j = -1/2$  を入れると(相互作用) =  $J/2$  } エネルギー差  $J$

古い文献などでは(相互作用) =  $-\sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  と定義していることがあるので注意。  
 $J$  の大きさが2倍になる。

## 分子場近似

スピンハミルトニアンで  $j$  の  $\Sigma$  だけ先に計算できるとする。



$$\hat{H} = \sum_i S_i \left( -\sum_j 2J_{ij} S_j - g \mu_B H \right) = -g \mu_B (H_{\text{eff}} + H) \sum_i S_i$$

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{g \mu_B} \sum_j 2J_{ij} \langle S_j \rangle$$

は周りのスピン  $S_j$  との相互作用を、 $S_j$  が  $i$  の位置につくる磁場(有効磁場 or 内部磁場)に置き換えたもの。

$S_i$  は本来場所によって刻一刻変化するが、平均値  $\langle S_j \rangle$  で置き換えてよければ、上のように簡単になる(分子場近似 or 平均場近似)。

キュリー常磁性のときと同様に統計分布を考えると

$$M = \frac{N \mu^2 H}{k_B T} \xrightarrow{H \rightarrow H_{\text{eff}} + H} M = \chi_0 (H_{\text{eff}} + H)$$

ところで  $M = N g \mu_B \langle S \rangle$  だから、

$$H_{\text{eff}} = \frac{\sum_j 2J_{ij} \langle S_j \rangle}{N (g \mu_B)^2} M = aM$$

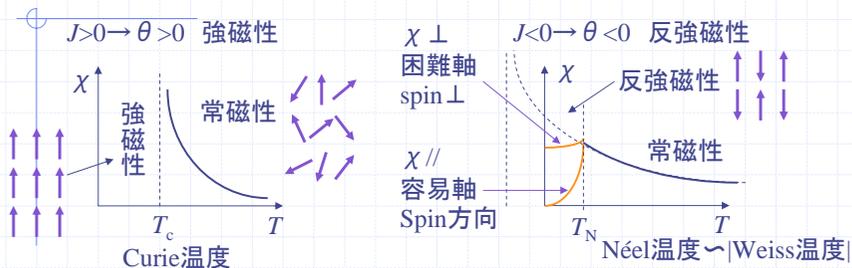
分子磁場係数

これを上の式に入れて

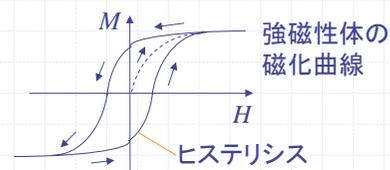
$$M = \chi_0 (aM + H) \quad M \left[ (1 - \chi_0 a) \right] = \chi_0 H \quad \rightarrow \quad \chi = \frac{M}{H} = \frac{\chi_0}{1 - \chi_0 a} = \frac{C}{T - \theta} \quad \text{Curie-Weiss 則}$$

$$\theta = \frac{1}{k_B} \sum_j 2J_{ij} = \frac{2zJ}{k_B} \leftarrow \text{最近接の} J \text{のみ考えて、配位数を} z \text{とすると。}$$

Weiss温度



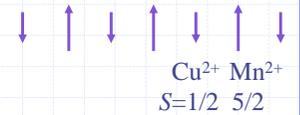
$T \rightarrow T_c$  で  $\chi \rightarrow \infty$   
 $T < T_c$  では  $H=0$  でも  $M \neq 0$   
 自発磁化 → 強磁性  
 $T_c$  Fe 1043 K Ni 627 K



通常の強磁性体は磁区と呼ばれるドメインごとに勝手な方向を向いている。これを磁場をかけてそろえると、バルクの磁石になる。

### フェリ磁性 ferrimagnetism

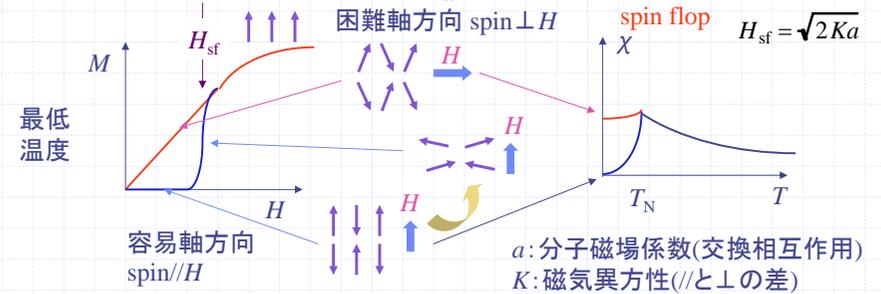
長さの異なるスピン(例えば異種金属)を交互に並べると、 $J < 0$ で交互に反平行でも



全体として磁気モーメントが残る。  
 フェライト  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  の磁性  $\text{Fe}^{3+}$  と  $\text{Fe}^{2+}$  が混じっている。  
 ほとんどの分子磁性体の原理。

### 反強磁性体の容易軸

反強磁性になったときスピンの方向が結晶軸の特定方向を向く。  
 1) 双極子相互作用 2) 結晶場 のため。  
 容易軸方向の  $H$  を大きくしていくと  $H_{sf}$  で急に  $\text{spin} \perp H$  になる。



### 低次元ゆらぎ

一次元磁性体は不可能である。(Landau, Lifshitz 統計物理学 最終節)

一次元強磁性体(長さ  $L$  原子)に  $n$  個の界面があるとき  
 の統計的加重率は

$$W = \frac{L!}{(L-n)!n!}$$

$$\ln W = L \ln L - (L-n) \ln(L-n) - n \ln n$$

$$= L \ln \frac{L}{L-n} + n \ln \frac{L-n}{n} \approx -n \ln \frac{n}{L} \quad n \ll L \text{ より 第1項} \sim 0$$

自由エネルギーは  $G = G_0 - TS + nJ = G_0 + k_B T n \ln \frac{n}{L} + nJ$   
 実現される  $n$  は  $G$  を最小にするものだから

$$\frac{\partial G}{\partial n} = k_B T \ln \frac{n}{L} + J (=0)$$

$n/L$  が小さいとき  $\ln(n/L)$  は負の大きい値だから  $n \sim 0$  の近くでしたがって  $n$  が増加すると  $G$  は減少する。よって有限の  $n \neq 0$  に  $G$  の最小値がある。

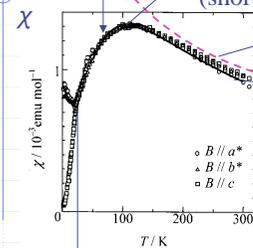
有限温度  $T \neq 0$  では一次元強磁性体には界面がどんどん入ってしまい、磁気秩序(long range order)はできない。強磁性に限らない。

多次元になって配位数が大きくなり  $J$  の損が大きくなればこうならない。

一般に一次元系は有限温度で相転位しない。

### 低次元磁性体: 1方向または2次元面内だけで $J$ が大きい

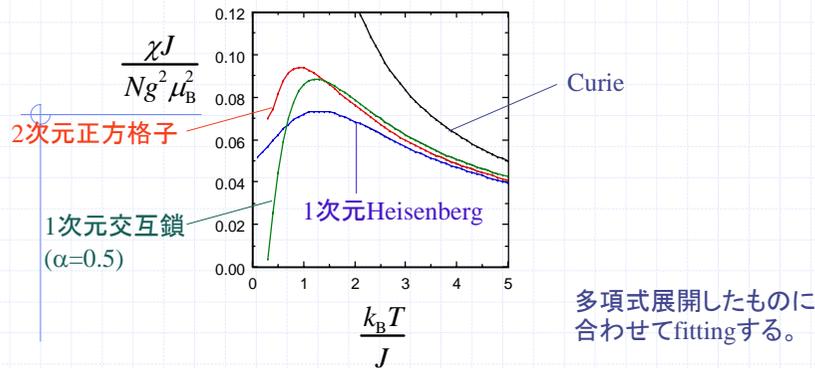
低次元ゆらぎの効果  
 ピークが相互作用が強い方向の  $J$  を反映している。  
 (short range order) しかし相転移は起こらない。  
 高温で Curie に漸近する。



低次元磁性体の  $\chi(T)$  は数値計算に fitting する。  
 Bonner & Fischer, *Phys. Rev. A* **135**, 640 (1964).  
 de Jongh & Miedema, *Experiments on Simple Magnetic Model Systems*, Taylor (1974).

低温で鎖間(面間)相互作用のため3次元(long range) order (反強磁性)





- 1次元Heisenberg, W. E. Estes et al. *Inorg. Chem.* **17**, 1415 (1978).
- 1次元交互Heisenberg, J. M. Hall et al. *Inorg. Chem.* **20**, 1033 (1981).
- 2次元正方格子, M. E. Lines, *J. Phys. Chem. Solids*, **31**, 101 (1970);  
J. Wang, *Phys. Rev. B* **44**, 2396 (1991).
- 2次元三角格子, N. Elstner, et al. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1629 (1993);  
M. Tamura and R. Kato, *J. Phys. Cond. Matter.* **14**, L729 (2002).
- 1次元フェリ, R. Georges et al. *Magnetism: Molecules to Materials*, ed. by  
J. S. Miller and M. Drillon, Wiley (2001), p1.

### 電子相関 (electron correlation)

#### 電子間のクーロン反発を考慮した分子軌道法

$$H = \sum_i \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_n \frac{Z_n e^2}{r_{ni}} \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

電子についての和      核からの引力      電子間反発

「量子力学では同種粒子を区別できない。」

粒子1, 2の番号を付け替えたとき  $\Psi(1,2) = \pm\Psi(2,1)$   
 +(対称) Bose粒子    スピン整数    光子, フォノン,  $^4\text{He}$   
 -(反対称) Fermi粒子    スピン半整数    電子, 陽子, 中性子

反対称にするには

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(1)\varphi_2(2) - \varphi_1(2)\varphi_2(1)) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_1(2) \\ \varphi_2(1) & \varphi_2(2) \end{vmatrix}$$

電子の番号      状態(分子軌道)の番号

一般にN電子系では

$$\Psi(1,2,\dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_1(2) & \dots & \varphi_1(N) \\ \varphi_2(1) & \varphi_2(2) & \dots & \varphi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(1) & \varphi_N(2) & \dots & \varphi_N(N) \end{vmatrix} \quad \text{Slater行列式}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum P^{(-1)} \varphi_1(1)\varphi_2(2)\dots\varphi_N(N)$$

電子の番号のあらゆる置換。  
1↔2と1個の置換をすることにより-をつける。

- (1) 電子1↔2を交換 → 1,2列が入れ代わる → -がつく。(反対称)
- (2)  $\varphi_1$ と $\varphi_2$ が同じ → 1,2行が同じ → |行列式|=0  
→ 2つの電子(フェルミ粒子)は同一状態に入れない。(Pauliの排他原理)

Slater行列式を  $E = \int \Psi^* H \Psi d\tau$  に入れると

$$E = \sum_k H_k + \sum_{k \neq l} (J_{kl} - K_{kl})$$

$$H_k = \int \varphi_k^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_n \frac{Z_n e^2}{r_n} \right] \varphi_k d\tau \quad \text{一電子部分}$$

kは分子軌道の番号

$$J_{kl} = \int \varphi_k^*(1)\varphi_l^*(2) \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_{12}} \right) \varphi_k(1)\varphi_l(2) d\tau$$

クーロン積分

$$= \int \frac{e^2 \rho_k(1)\rho_l(2)}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} d\tau > 0$$

電子分布  $\rho_k$ をもった分子軌道kと、分子軌道lとの間の平均の電子反発。

$$K_{kl} = \int \varphi_k^*(1)\varphi_l^*(2) \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_{12}} \right) \varphi_k(2)\varphi_l(1) d\tau > 0$$

交換積分  
1と2を入れ替えたもの

- (1)  $\int \alpha(1)\beta(1) d\tau = 0$ なので、逆向スピンの場合には  $K_{kl} = 0$   
Pauli排他原理のため同スピンは同じ場所に来れない(Fermi孔)。この分を  $J_{kl}$  から補正。

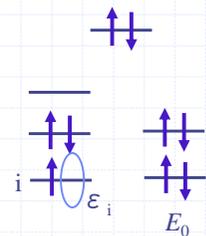
- (2) 1つの分子軌道に2電子の場合  $E = 2H_i + J_{ii}$

- (3) i番目の軌道から1個の電子を取り去った場合。

$$E = E_0 - \left[ H_i + \sum_{k \neq i} (J_{ik} - K_{ik}) \right]$$

$\epsilon_i$

i番目の電子のエネルギーと思えばよい。  
(Koopmansの定理)



全エネルギーは  $E_0 = \sum_i \varepsilon_i$  と、一電子エネルギーであるかのように扱える。

j番目の分子軌道に余分の電子を加えた状態は

$$E = E_0 + [H_j + \sum_k (J_{jk} - K_{jk})] = E_0 + \varepsilon_j$$

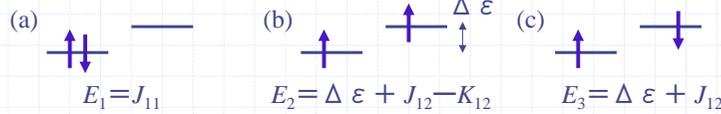
(4) i→jと励起すると

一重項  $\Delta E = \varepsilon_j - \varepsilon_i - (J_{ij} - K_{ij})$

三重項  $\Delta E = \varepsilon_j - \varepsilon_i - J_{ij}$

三重項の方が  $K_{ij}$  だけ安定。

(5) 2レベル2電子の安定性



$J_{11} < \Delta \varepsilon + J_{12} - K_{12}$  の場合(a)一重項が安定→化学結合など。  
 $J_{11} > \Delta \varepsilon + J_{12} - K_{12}$  の場合(b)三重項が安定→特に  $\Delta \varepsilon = 0$  のときHundの規則エネルギーが縮退すると三重項が安定となる。triplet instability



磁性で  $J$  (交換相互作用) と書いたのが  $K$  (交換積分)

(1) 縮退した2レベル(例えば同一分子上の)

三重項の方が交換積分

$$K_{12} = \int \phi_1^*(1)\phi_2^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} \phi_1(2)\phi_2(1) d\tau > 0 \text{ だけ安定 (potential exchange).}$$

→スピンは平行(強磁性的)に。(Hundの規則)←これが本来の交換積分

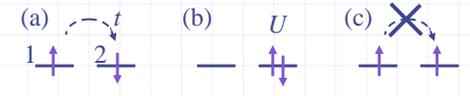
(2) 隣合った2原子

原子1から原子2へ電子が transfer 積分  $t$  で飛ぶと、

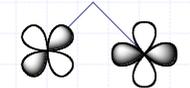
エネルギーは on-site Coulomb 積分  $U$  だけ上昇する(b)。これから(a)の状態に戻ると、(b)を混ぜることで(a)の状態は2次摂動によりだけ安定化する。平行スピン(c)についてはこのような動きが Pauliの排他原理によって禁止されているので、反平行の(a)の方が  $J$  だけ安定 (kinetic exchange)。

通常の原子間では(2) >> (1) なので反強磁性  $J < 0$  のほうが安定。

例外: 隣り合う原子の軌道が直交する場合は  $t \rightarrow 0$  になるため(2)  $\rightarrow$  0で(1)だけが残って強磁性  $J > 0$  になる。(Kanamori-Goodenough則)



$$J = -\frac{2t^2}{U}$$



分子軌道法における電子相関

$$\alpha - \beta \quad \phi = \chi_A - \chi_B$$

水素分子では結合軌道に2電子が入っている(右図)ので、分子全体では

$$\alpha + \beta \quad \phi = \chi_A + \chi_B$$

$$\Psi = (\chi_A(1) + \chi_B(1))(\chi_A(2) + \chi_B(2))(\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1))$$

Slater行列式にするとスピン部分のみ反対称→一重項→この部分は無視

$$\rightarrow \underbrace{\chi_A(1)\chi_A(2)}_{\text{電子が2つともAのH上にある H-H+イオン性}} + \underbrace{\chi_A(1)\chi_B(2) + \chi_B(1)\chi_A(2)}_{\text{共有結合性}} + \underbrace{\chi_B(1)\chi_B(2)}_{\text{電子が2つともBのH上にある H+H-イオン性}}$$



分子軌道法ではイオン性の寄与が50%もあり、明らかに過大である。これは他の電子の影響を平均場近似でならしてしまっただけのため、電子が互いに避けあう効果(電子相関 electron correlation)が入っていないため。

原子価結合法 Valence Bond Theory (Heitler Lindon法)

$\Psi$  の代わりに  $\Psi = \chi_A(1)\chi_B(2) + \chi_B(1)\chi_A(2)$  を使う。

水素分子のハミルトニアン  $H = \sum_{i=1,2} [-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} (\frac{1}{r_{Ai}} + \frac{1}{r_{Bi}})] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} (\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{AB}})$

から  $E = \int \Psi H \Psi d\tau / \int \Psi \Psi d\tau$  を計算すると

$$E_+ = 2\alpha + \frac{J+K}{1+S^2}$$

$\alpha$  は水素原子の1電子エネルギー

$$J = \iint \chi_A(1)\chi_B(2) \frac{1}{4\pi\epsilon_0} [\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{AB}} - \frac{1}{r_{A2}} - \frac{1}{r_{B1}}] \chi_A(1)\chi_B(2) d\tau_1 d\tau_2 < 0$$

$$K = \iint \chi_A(1)\chi_B(2) \frac{1}{4\pi\epsilon_0} [\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{AB}} - \frac{1}{r_{A2}} - \frac{1}{r_{B1}}] \chi_A(2)\chi_B(1) d\tau_1 d\tau_2 < 0$$

順序が逆

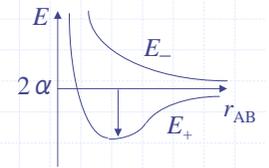
隣の核から引かれる引力



分子軌道法のクーロン積分、交換積分(>0)とは別物。隣の核からの引力を表わしており常に<0。これが共有結合の起源。

ちなみに  $\Psi = \chi_A(1)\chi_B(2) - \chi_B(1)\chi_A(2)$  からは

$$E_- = 2\alpha + \frac{J-K}{1-S^2}$$



配置間相互作用

CI (configuration interaction)

分子軌道法で電子相関を取り入れるため励起状態の寄与を線形結合

$$\Psi = \Psi_1 + c\Psi_2$$

$$= (\chi_A(1) + \chi_B(1))(\chi_A(2) + \chi_B(2)) + c(\chi_A(1) - \chi_B(1))(\chi_A(2) - \chi_B(2))$$

$$= (1+c)(\chi_A(1)\chi_A(2) + \chi_B(1)\chi_B(2)) + (1-c)(\chi_A(1)\chi_B(2) + \chi_B(1)\chi_A(2))$$

イオン性

共有結合性

$c = -1$ とすると原子価結合法と同様、(イオン性)=0

$c = 0$ とするとイオン性50%の通常の分子軌道法

エネルギー最小になるように $c$ を決める。 $(-1 < c < 0)$

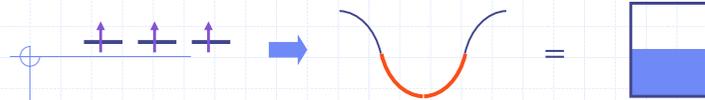
分子軌道計算でも励起状態を求めるためにはCI計算を行なう。



$$\Psi = \Psi_1 + c\Psi_2$$

固体における電子相関

電子が1個ずつまった状態でエネルギーバンドを考えると



Mott絶縁体

$$\rho \propto \exp(E_g/k_B T)$$

磁性体(Curie-Weiss則)

$$\chi = C/(T - \theta)$$

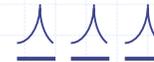
局在(localized)

イオン性の寄与小

原子価結合法的

電子相関によるポテンシャルエネルギー > 運動エネルギー

電子密度小 バンド幅小  
電子雲の重なり小  $t$ 小



half-filled band

金属

$$\rho \propto T$$

磁性なし(Pauli常磁性)

$$\chi = \text{一定}$$

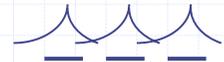
非局在(遍歴性itinerant)

イオン性の寄与大

分子軌道法的

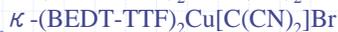
電子相関によるポテンシャルエネルギー < 運動エネルギー

電子密度大 バンド幅大  
 $t$ 大 電子雲の重なり大



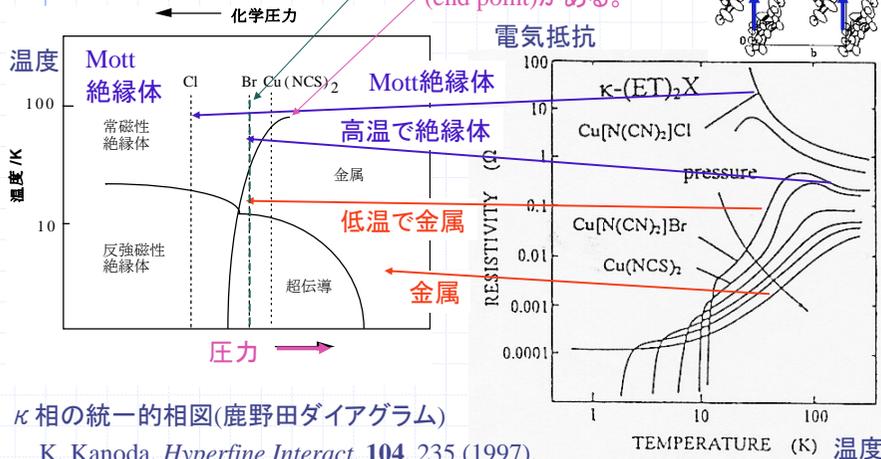
圧力などで $t$ を大きくしていきと絶縁体から金属へ転移(Mott転移)

$\kappa$  相有機伝導体の金属-絶縁体転移



熱収縮のため境界が右にシフト

液-気線と同様臨界点(end point)がある。



$\kappa$  相の統一的相図(鹿野ダイアグラム)

K. Kanoda, *Hyperfine Interact.* **104**, 235 (1997).

Mott絶縁体を数学的に表現するモデル

(1) Gutzwiller波動関数

$$\Psi_G = \prod_i (1 - \eta m_{i\uparrow} n_{i\downarrow}) \Psi_0 = \exp(-\eta \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}) \Psi_0$$



波動関数から二重占有状態(イオン性の寄与)を引く。CIと同じようなもの。しかし具体的な計算はやりにくい。

(2) Hubbardモデル

二重占有状態のエネルギーが $U$  (on-site Coulomb repulsion)だけ大きくなるとする。

$$H = \sum_{i \neq j} t_{ij} a_i^\dagger a_j + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$



$U$ だけ損

エネルギーバンド サイト $i$ が二重占有だと $U$ だけエネルギーが $2t \cos ka$ と同じ。上がる。 $n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}$ のどちらかが0なら0。

ただし、第二量子化の記号で

$a_j$ :  $j$ サイトの電子を消滅させる。 $a_i^\dagger$ :  $i$ サイトの電子を生成する。

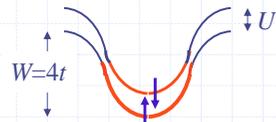
$n_{i\uparrow} = a_i^\dagger a_i$ :  $i$ サイトの電子数

Uがバンドの形を変えないと近似すると

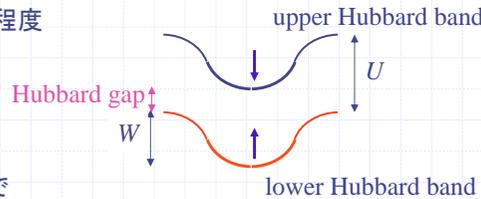
$$E_{\uparrow} = 2t \cos ka \quad \text{1個目の電子のバンド}$$

$$E_{\downarrow} = 2t \cos ka + U \quad \text{2個目の電子のバンド}$$

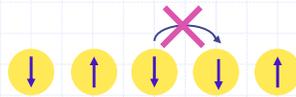
(1)  $t \gg U$   
 バンド幅  $W=4t$  の通常の  
 エネルギーバンド



(2)  $t \ll U$   
 ↑と↓のエネルギーバンドがU程度  
 分裂する。  
 $U > W$ だとHubbard gapができ、  
 half-filledだと絶縁体になる。  
 $U$ が $W$ を越えるのがMott転移。



lower Hubbard bandには1個まで  
 しか電子が入らない。(通常は2個)  
 スピンの向きはランダム(常磁性)でよい。  
 いずれ低温で反強磁性になる。

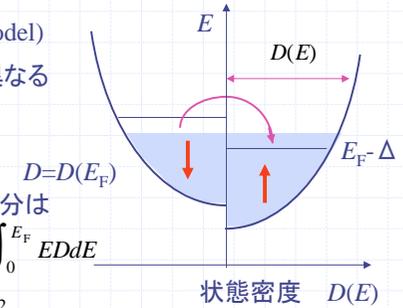


Hubbard modelはhalf-filledの場合のみ絶縁体を与える。(他はすべて金属。)

Hubbard modelの平均場解 (Stoner model)

図のように↑電子と↓電子の数が異なる  
 強磁性金属になるとする。磁化は

$$m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow} = \int_{E_F - \Delta}^{E_F + \Delta} D(E) dE = 2D\Delta$$



この移動による運動エネルギーの増分は

$$\Delta E = \int_0^{E_F + \Delta} E D dE + \int_0^{E_F - \Delta} E D dE - 2 \int_0^{E_F} E D dE$$

$$= \int_{E_F - \Delta}^{E_F + \Delta} E D dE = D\Delta^2 = \frac{m^2}{4D} = \frac{1}{4} W m^2$$

上式より バンド幅  $W \sim 1/D$  とすると

このスピン分極によるUの項の得点は、 $n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$ ,  $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$

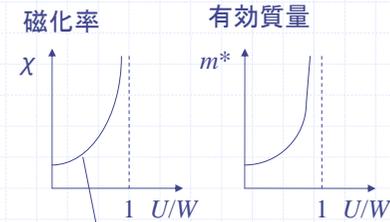
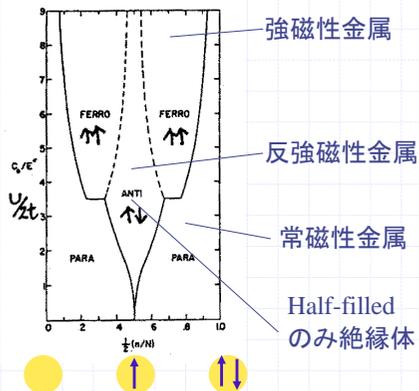
を使って  $E = U n_{\uparrow} n_{\downarrow} = \frac{U}{4} (n^2 - m^2)$

上2式を加えると  $E = \frac{W - U}{4} m^2 + \frac{U}{4} n^2$

$W > U$  E極小は  $m=0$  常磁性金属  
 $W < U$  E極小は  $m \neq 0$  磁性金属

$W$ (Stoner limit)以上にUが大きくなると、電子は分極して磁性金属になる。

平均場近似での解



$$\chi = \frac{\chi_0}{1 - UD}$$

Stoner limitで  $\chi$  が  $\infty$  に発散(Curieになる。)

W. F. Brinkman and T. M. Rice,  
 Phys. Rev. B 2, 4302 (1970)

反強磁性絶縁体



D. R. Penn, Phys. Rev. 142, 350 (1966).

Hubbard modelは1次元のみ厳密解がある。

half-filledのみが  $U \neq 0$  (どんなに小さくても)で絶縁体。

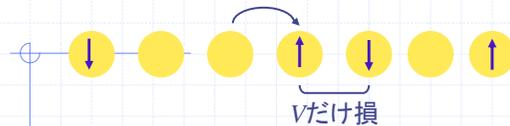
E. H. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. 20, 1445 (1968).

2次元以上では数値計算

J. E. Hirsch, Phys. Rev. B 31, 4403 (1985).

電荷整列: half-filled以外の場合

$$H = \sum_{i \neq j} t_{ij} a_i^{\dagger} a_j + U \sum_i n_{\uparrow} n_{\downarrow} + V \sum_{i \neq j} n_i n_j$$



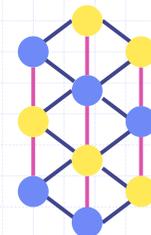
拡張Hubbardモデル

Coulomb repulsionは本来  $\propto 1/r$  で、on-siteのみではない。  
 隣のサイトに来るとV (off-site Coulomb repulsion)だけエネルギーが  
 高くなるとすると、上のような1/4-filledの場合でも、電子が1個おき  
 に並んだ状態が安定。→電荷整列(電荷秩序charge order)による絶縁化。  
 (half-filledのみが絶縁体になるのは、むしろon-siteのみ考えたことに  
 起因するartifact)

ただし電荷整列の場合は上のように2倍周期が出る。  
 (Mott絶縁体では何も新しい周期は出ない)  
 (一次元系の場合の  $4k_F$  電荷密度波に相当)

2次元では右のようにVの小さい方向に電荷が  
 並ぶ。(stripe)

| > とする。



# 金属-絶縁体転移の原因と実験的区別

	電気抵抗率	静磁化率 (SQUID)	スピン磁化率 (ESR)	X線散乱
電荷密度波 (CDW) (Peierls 転移)			$\chi_s$ は同左 線幅は $T_{MI}$ で連続 $\chi \propto \frac{1}{k_B T (3 + e^{E_g/k_B T})}$	$2k_F$ の長周期 $> T_{MI}$ 散漫散乱 $< T_{MI}$ スポット
スピン密度波 (SDW)			線幅は発散 強度は0へ	なし
モット絶縁体・電荷整列			$\chi_s$ は同左 線幅は $T_{MI}$ で連続 通常さらに低温でSDWか spin-Peierlsのどちらかが起こる。	モット: なし 電荷整列: 長周期
Spin-Peierls 転移			$\chi_s$ は同左 線幅は $T_{MI}$ で連続 CDW同様 singlet-triplet model	$2k_F$ の長周期

# 拡張Hubbardモデルの1次元で基底状態 (g-ology)

$$H = \sum_{i \neq j} t_{ij} a_i^\dagger a_j + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{i \neq j} n_i n_j$$

