

# 講義ノート 磁性 第13回

2022年7月6日 勝本信吾 東京大学物性研究所(理学系研究科物理学専攻)

前回, Hubbard 模型の HF 近似で Stoner 条件が導かれ, これが満たされると,  $\uparrow$ バンドと $\downarrow$ バンドとの間にエネルギー差が生じることを見た. この描像・近似では, Slater-Pauling 曲線を説明するなどの実験に対する一定の理解が可能になった. 一方, 定量的・定性的にも, 近似の原理的問題として存在していることも見てきた. これに対して, 少なくとも基底状態においては満足すべき結果を与えたのが自己無撞着なスピンゆらぎ理論である. 今週はその解説に入っていきたいが, そのための準備(いずれも, 統計物理や固体物理で見た話だとは思いますが, 一応)から話を始める.

## 6.4 動的帯磁率

これまで, 静磁場に対する応答を主に考えてきたが, 振動する外場に対する応答を考えることにする. このような場合は, 線形応答理論を使う必要がある.

### 6.4.1 線形応答

外場部分を記述するハミルトニアンを  $\mathcal{H}_{\text{ext}}(t)$  とし, 全ハミルトニアンを  $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{ext}}(t)$  と表す. 前節で定義した式(6.9)密度行列  $\rho$  に対して, 時間依存を考えるとオブザーバブルとは符号が異なり,

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{ext}}(t), \rho(t)] \quad (6.54)$$

である. 変数は時間のみ示している. 初期状態の時間を  $t = -\infty$  とし, 初期条件を  $\mathcal{H}_0$  の熱平衡状態

$$\rho(-\infty) = \rho_{\text{eq}} = \frac{1}{Z_0} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}_0}{k_B T}\right). \quad (6.55)$$

に取る.  $Z_0 = \text{Tr}[\exp(-\mathcal{H}_0/k_B T)]$  は無摂動系の分配関数.

この時, 付録 13A に示したように, 密度行列は, 次の積分方程式を満たす.

$$\rho(t) = \rho_{\text{eq}} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [U_0(t-t') \mathcal{H}_{\text{ext}}(t') U_0^{-1}(t-t'), U_0(t-t') \rho(t') U_0^{-1}(t-t')] \quad (6.56)$$

$$= \rho_{\text{eq}} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' U_0(t-t') [\mathcal{H}_{\text{ext}}(t'), \rho(t')] U_0^{-1}(t-t'). \quad (6.57)$$

ただし, 式(13A.1)にも示したが,

$$U_0(t) \equiv \exp\left(\frac{\mathcal{H}_0}{i\hbar} t\right) \quad (6.58)$$

である. 式(6.57)の右辺交換関係式は,  $\rho_{\text{eq}}$  に加えての外場に対する応答部分であり, 最低次が1次から始まる.  $\mathcal{H}_{\text{ext}}$  も同様に時間依存部分であり定数項はないはずである. 従って, 外場に対する線形(1次)応答を考える上では, 式(6.57)の右辺で交換関係の中の  $\rho(t')$  は時間によらない  $\rho_{\text{eq}}$  で置換して良い.  $\rho_{\text{eq}}$  は, 無摂動 Hamiltonian  $\mathcal{H}_0$  の固有状態で作っていて可換であるから,

$$\rho(t) \simeq \rho_{\text{eq}} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [U_0(t-t') \mathcal{H}_{\text{ext}}(t') U_0^{-1}(t-t'), \rho_{\text{eq}}] \quad (6.59)$$

とできる.

外場の Hamiltonian が

$$\mathcal{H}_{\text{ext}}(t) = -PF(t) \quad (6.60)$$

と書けるとする。  $F(t)$  は場の強さを表す量であり、  $P$  はそれに対応する演算子である。この密度行列を使って一般の物理量  $Q$  の期待値を  $\text{Tr}\{\rho(t)Q\}$  により求める [1, 2].

$$\langle Q(t) \rangle = \text{Tr}\{\rho(t)Q\} = \langle Q_{\text{eq}} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [P, Q(t-t')] \rangle F(t'). \quad (6.61)$$

ここで、  $\langle Q_{\text{eq}} \rangle$ 、  $Q(t)$  はそれぞれ、

$$\langle Q_{\text{eq}} \rangle = \text{Tr}\{\rho_{\text{eq}}Q\}, \quad Q(t) = U_0(t)^{-1}QU_0(t) \quad (6.62)$$

と定義している。式 (6.61) からわかるように、  $\langle [P, Q(t-t')] \rangle$  という期待値は純虚数である。

振動数  $\omega$  の外場

$$F(t) = F_0 \cos(\omega t) = \text{Re}[F_0 e^{-i\omega t}] \quad (6.63)$$

を考え、感受率  $\chi(\omega)$  を

$$\Delta Q(t) = \langle Q(t) \rangle - \langle Q_{\text{eq}} \rangle = \text{Re}[\chi(\omega)F_0 e^{-i\omega t}] \quad (6.64)$$

と定義すると、

$$\Delta Q(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [P, Q(t-t')] \rangle \text{Re}[F_0 e^{-i\omega t'}] \quad (6.65)$$

であるから、(6.64) と (6.65) の右辺を等しいと置く。(6.64) 右辺は、次のようになる。

$$\text{Re}[\chi(\omega)F_0 e^{-i\omega t}] = \frac{F_0}{2} [\chi^*(\omega)e^{i\omega t} + \chi(\omega)e^{-i\omega t}]. \quad (6.66)$$

一方、(6.65) の方も同様に、

$$\frac{F_0}{2i\hbar} \left\{ \left[ \int_0^{\infty} d\tau \langle [P, Q(\tau)] \rangle e^{-i\omega\tau} \right] e^{i\omega t} + \left[ \int_0^{\infty} d\tau \langle [P, Q(\tau)] \rangle e^{i\omega\tau} \right] e^{-i\omega t} \right\} \quad (6.67)$$

であるから ( $\tau = t - t'$ )、  $\langle [P, Q(\tau)] \rangle$  が純虚数であったことを思い出すと、2式を比較して、次が得られる。

久保公式

$$\chi_{QP}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \langle [Q(\tau), P] \rangle e^{i\omega\tau} d\tau \quad (6.68)$$

と書くことができる。  $P \rightarrow Q$  という応答関係を表す添え字を加えている。(6.68) は、久保公式 (Kubo formula) と呼ばれる線形応答の係数に関する一連の数学表現の一種である [3]。これは、Nyquist などによって創始された線形応答理論の一定の到達点を示すもので、非常に広範囲の現象に適用されて多くの成果を挙げ、今後も永く使用されるものと思われる。一方、線形応答には、他にも様々な一般的定式化があり、問題に応じて使い分けられている [2].

## 6.4.2 揺動散逸定理

式 (6.68) は、(時間)→(振動数) の Fourier 変換の形式になっており、一方、式 (6.60) の外場に対する物理量  $Q$  の応答であり、時間  $\tau$  軸上で  $\langle [Q(\tau), P] \rangle$  という相関関数で感受率として伝達される\*1、のように見ることができる。そこで、(時間の変数記号を  $\tau \rightarrow t$  に戻し)

$$G_{QP}^{\pm}(t) = \mp \frac{i}{\hbar} \theta(\pm t) \langle [Q(t), P] \rangle \quad (6.69)$$

\*1 Green 関数は、George Green(1793-1841) の発明であり、電磁気などで導入したように、微分方程式を解くために多く使用され、例えば空間の一点での何らかの原因によって他の点にどのような影響が及ぶかを示す、ようなものである。その後、様々な形式で使用されるうち、ここで見たような相関関数一般においても Green 関数という名称が使われるようになった。なお、[4] によれば、Green's function というネーミングはおかしく、Green function と呼ぶべき、とのことである。

で、物理量  $P, Q$  に対する Green 関数を定義する。ただし、

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & (t \geq 0) \\ 0 & (t < 0) \end{cases} \quad (6.70)$$

は Heaviside 関数である。  $G_{QP}^+(t)$  を遅延グリーン関数 (retarded Green's function),  $G_{QP}^-(t)$  を先進 Green 関数 (advanced Green's function) と呼ぶ。式 (6.68) は、  $G_{QP}^+(t)$  の Fourier 変換と見ることができ、

$$\chi_{QP}(\omega) = -G_{QP}^+(\omega) = -\mathcal{F}_\omega\{G_{QP}^+(t)\} \quad (6.71)$$

のように書ける。  $\mathcal{F}_\omega\{\dots\}$  は、  $\dots$  の Fourier 変換である。

摂動と応答の相関関数を Fourier 変換した量  $S_{QP}$  (動的構造因子とも呼ぶ) を

$$S_{QP}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle Q(t), P \rangle e^{i\omega t} \quad (6.72)$$

と定義する。この時、次を示すことができる (付録 13B)。

$$S_{QP}(\omega) = \frac{i}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} [G_{QP}^+(\omega) - G_{QP}^-(\omega)]. \quad (6.73)$$

ただし、  $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$  である。式 (6.73) の左辺は相関関数の Fourier 変換であり、右辺は、線形応答の感受率である。このように相関関数と線形応答係数との比例関係を示すものを一般に**揺動散逸定理** (fluctuation dissipation theorem) と呼ぶ。もちろん、ゆらぎと散逸は異なる物理量でありこれらが等しくなる、というわけではなく、ゆらぎをエネルギー散逸を表すパラメーターである線形応答係数を使って表すことができる、ということである。

$\{|n\rangle\}$  を、  $\mathcal{H}$  の固有状態による完全系とすると、

$$G_{QP}^+(\omega) = \sum_{n,m} \langle n|Q|m\rangle \langle m|P|n\rangle \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_n - E_m + \hbar\omega + i\eta} \quad (6.74)$$

### 6.4.3 乱雑位相近似 (RPA)

外場を具体的に外部磁場として、

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (6.75)$$

また、系として Hubbard 模型

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,s} t_{ij} c_{is}^\dagger c_{js} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (6.25)$$

を考える。局所的な磁化密度は、  $-g\mu_B$  を単位とすると、

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\alpha,\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) c_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta} \quad (6.76)$$

と書くことができる。  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  は、Pauli 行列を要素とするベクトルである。従って、今の場合の外場を含む Hamiltonian(6.60) に相当するのは、

$$\mathcal{H}_{\text{ext}}(t) = g\mu_B \int \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = g\mu_B \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} \quad (6.77)$$

である。ここで、磁化の Fourier- $\mathbf{q}$  成分  $S_{\mathbf{q}}$  については、次のように定義されている。

$$\left. \begin{aligned} S_{\mathbf{q}+} &= S_{\mathbf{q}x} + iS_{\mathbf{q}y} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \\ S_{\mathbf{q}-} &= S_{\mathbf{q}x} - iS_{\mathbf{q}y} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}, \\ S_{\mathbf{q}z} &= (1/2) \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}). \end{aligned} \right\} \quad (6.78)$$

式 (6.77) と式 (6.60) を比較して、 $P$  に相当するのは  $g\mu_B \mathbf{S}_{-\mathbf{q}}$  である。一方、応答も磁化であり、線形応答であるから、 $g\mu_B \mathbf{S}_{\mathbf{q}}$  である。従って、動的帯磁率の  $z$  成分は

$$\chi_{zz}(\mathbf{q}, \omega) = (g\mu_B)^2 \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \langle [S_{\mathbf{q}z}(t), S_{-\mathbf{q}z}] \rangle e^{i\omega t} \quad (6.79)$$

と書くことができる。同様に、横成分は、相関関数を取った場合に残る応答成分を考えると、

$$\chi_{+-}(\mathbf{q}, \omega) = (g\mu_B)^2 \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \langle [S_{\mathbf{q}+}, S_{-\mathbf{q}-}] \rangle e^{i\omega t}. \quad (6.80)$$

である。

$\chi_{+1}(\mathbf{q}, \omega)$  を次のように求める。式 (6.78) の  $S_{\mathbf{q}+}(t)$  の表式で、 $\mathbf{k}$  の項を取り出し、これに対する Green 関数

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^+(t) = -i\theta(t) \langle [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}(t), S_{-\mathbf{q}-}] \rangle \quad (6.81)$$

を考える。以下、遅延の  $+$  を略す。この Green 関数の時間微分 (運動方程式) は、

$$i\hbar \frac{\partial G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}}{\partial t} = -i\theta(t) \langle [e^{i\mathcal{H}t/\hbar} [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \mathcal{H}] e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}, S_{-\mathbf{q}-}] \rangle + \delta(t) \hbar \langle [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}(t), S_{-\mathbf{q}-}] \rangle \quad (6.82)$$

と書くことができる。Hubbard Hamiltonian を、一粒子運動エネルギー項  $\mathcal{H}_k$  と、オンサイト相互作用の項  $\mathcal{H}_{\text{int}}$  に分け、右辺の交換関係をそれぞれ次のように計算する。

$$\begin{aligned} [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, S_{-\mathbf{q}-}] &= \sum_{\mathbf{k}'} [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow}] \\ &= a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \end{aligned} \quad (6.83a)$$

$$[a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \mathcal{H}_k] = (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \quad (6.83b)$$

$$\begin{aligned} [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \mathcal{H}_{\text{int}}] &= (U/N) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{p}} [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, a_{\mathbf{k}_1+\mathbf{p}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_2-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_2\downarrow} a_{\mathbf{k}_1\uparrow}] \\ &= -(U/N) \left[ \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{p}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_1+\mathbf{p}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{p}\downarrow} a_{\mathbf{k}_1\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{p}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_2\downarrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \right]. \end{aligned} \quad (6.83c)$$

ここで、相互作用の項 (6.83c) に生成消滅演算子の 2+2 の項があり、ここに平均場近似を用いる。すなわち、 $[\dots]$  内を

$$\begin{aligned} - \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{p}\downarrow} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \sum_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \langle a_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_1\uparrow} \rangle \\ - \sum_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \langle a_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_2\downarrow} \rangle + \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{p}\downarrow} \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \rangle \end{aligned} \quad (6.84)$$

のように近似する。このような動的なものに対する平均場近似を一般に**乱雑位相近似** (Random Phase Approximation, **RPA**) と呼ぶ。これは、乱雑な位相因子を持つ量は平均によって消える、という近似と考えることができる。

式 (6.84) で、第 2 項、第 3 項は、 $\uparrow$  の平均と  $\downarrow$  の平均の差を取っており、常磁性状態においては相殺するので、RPA における Green 関数時間微分 (6.81) は、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}}{\partial t} &= (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}(t) \\ &\quad - (U/N) (\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \rangle) \sum_{\mathbf{p}} G_{(\mathbf{k}+\mathbf{p})\mathbf{q}}(t) \\ &\quad + (\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \rangle) \delta(t) \end{aligned} \quad (6.85)$$

となり、両辺を Fourier 変換すると、

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}(\omega) = \frac{f_{\mathbf{k}\uparrow} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \left[ 1 - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{p}} G_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\omega) \right] \quad (6.86)$$

である。ここで、 $f_{\mathbf{k}s} = \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \rangle$  はフェルミ分布関数である。この両辺を  $\mathbf{k}$  について和を取ることで、

$$\chi_{+-}(\mathbf{q}, \omega) = N(g\mu_B)^2 \frac{2\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - 2U\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (6.87)$$

と求められる。ただし、

$$\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}+q\downarrow} - f_{\mathbf{k}\uparrow}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+q}} \quad (6.88)$$

は相互作用のない系に対するサイトあたりの帯磁率を  $(g\mu_B)^2$  で規格化したものである。

上を計算するため、次の計算を行う。ただし、見やすくするため、 $\hbar \rightarrow 1$ 、更に波数をフェルミ波数  $k_F$  をユニットに、エネルギーを  $\epsilon_F$  をユニットにして計算する。3次元のヤコビアンを使い、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}}}{\omega + \epsilon_{\mathbf{k}-q} - \epsilon_{\mathbf{k}}} &= \frac{1}{2} \rho(\epsilon_F) \int_0^1 k^2 dk \int_{-1}^1 \frac{d(\cos\theta)}{\omega + q^2 - 2kq \cos\theta} \\ &= \frac{1}{2} \rho(\epsilon_F) \int_0^1 k^2 dk \frac{1}{2kq} \log \frac{\omega + q^2 + 2kq}{\omega + q^2 - 2kq} \end{aligned} \quad (6.89)$$

である。公式

$$\int x \log(ax + b) dx = \frac{1}{2} \left[ x^2 - \left( \frac{b}{a} \right)^2 \right] \log(ax + b) - \frac{x^2}{4} + \frac{b}{2a} x$$

を用いて、

$$\begin{aligned} \chi^{(0)}(q, \omega) &= \frac{\rho(\epsilon_F)}{2} \frac{1}{2q} \left\{ \frac{1}{2} \left[ 1 - \left( \frac{\omega + q^2}{2q} \right)^2 \right] \log \frac{\omega + q^2 + 2q}{\omega + q^2 - 2q} + \frac{\omega + q^2}{2q} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \left[ 1 - \left( \frac{-\omega + q^2}{2q} \right)^2 \right] \log \frac{-\omega + q^2 - 2q}{\omega + q^2 + 2q} + \frac{-\omega + q^2}{2q} \right\} \end{aligned} \quad (6.90)$$

と計算できる。

(6.90) で  $\log$  の引数が負になり、帯磁率に **damping** が生じる場合を考えると、その境界は、

$$\omega = \pm(q^2 \pm 2q) \quad (6.91)$$

で与えられる (Kohn 異常境界)。これらを  $q - \omega$  平面に描くと、図 6.4 のようになり、上半平面を I~IV の 4 つの領域に分ける。領域 I, IV は虚部が 0 である。III では、虚部は、

$$\text{Im}[\chi^{(0)}(q, \omega)] = \frac{\rho(\epsilon_F)}{2} \frac{\pi}{4} \frac{\omega}{q} \quad (6.92)$$

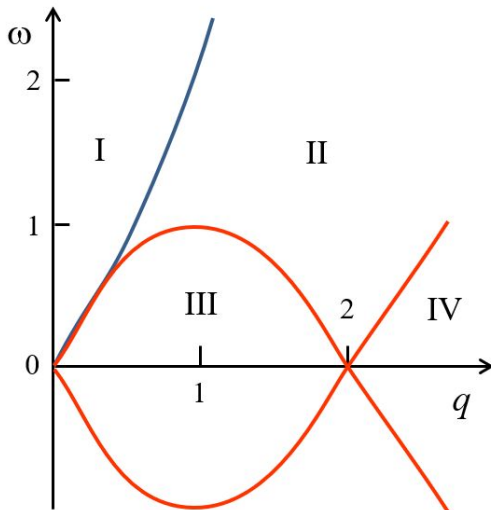


図 6.4 式 (6.91) によって表される、Kohn 異常の境界線とそれによって区切られる 4 種類の領域

$\text{Re}[\chi^{(0)}(q, 0)]$

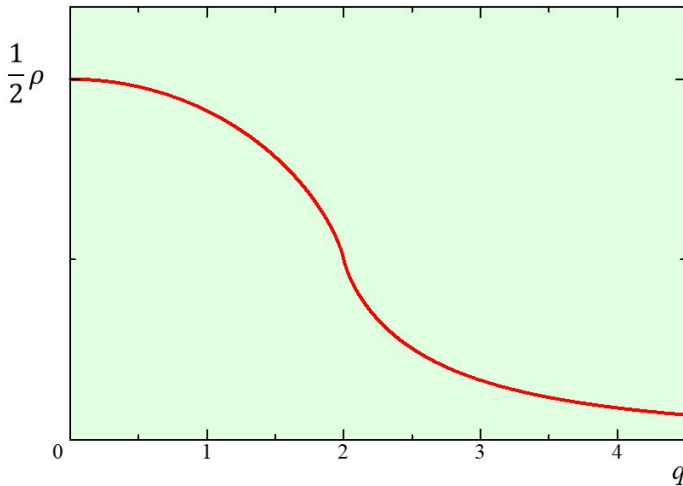


図 6.5 式 (6.93) の  $\chi^{(0)}(q, 0)$  の実部をプロットしたもの.  $q = 2$  で微分が発散する.

となり, 実部は  $\omega = 0$  では,

$$\text{Re}[\chi^{(0)}(q, 0)] = \frac{\rho(\epsilon_F)}{2} \frac{1}{2q} \left\{ \left(1 - \frac{q^2}{4}\right) \log \left| \frac{2+q}{2-q} \right| + q \right\} \quad (6.93)$$

となる. これをプロットすると, 図 6.5 のようになる. Kohn 異常境界の  $q = 2(k_F)$  のところで, 微分が発散する異常があることがわかる.

さて, (6.87) より, Hubbard 模型の動的帯磁率に対する RPA では, 上記のように相互作用のない系に対する  $\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$  を求め, 最大値を取る波数を  $\mathbf{q}_{\max}$  とすると,

$$U\chi^{(0)}(\mathbf{q}_{\max}, 0) \geq \frac{1}{2} \quad (6.94)$$

の場合に磁気秩序が生じる.  $\mathbf{q}_{\max} = 0$  の場合は, 図 6.5 のように,  $\chi^{(0)}(\mathbf{q}_{\max}) \rightarrow \rho(\epsilon_F)/2$  であるから, 当然ながら Stoner 条件に一致する. 一方,  $\mathbf{q}_{\max} \neq 0$  の場合は, 有限波数の磁気秩序が自発的に生じておりこれは, スピン密度波 (spin density wave, SDW) に相当する.

## 6.5 自己無撞着スピンゆらぎ理論

以上見てきたように, Hubbard 模型を基礎にした平均場 (HF 近似) 理論は, 原理的にも実験との比較でも色々と問題がある. 一方, Slater-Pauling 曲線を説明するなど, パラメーターの「調整」は入っているかもしれないが, 意外に実験事実を説明したりする. 研究のトレンドを一概に論じるのは無理であるが, 1つの見方として, HF 近似を一旦横において, 模型を単純化したり極限的な場合などを考えて, 相関効果をより強く取り入れた理論を純粋に数理科学的な問題として考える, という方向と, HF 近似を改良することで困難を解決できないか, という方向が考えられる. 前者からは多くの数理科学的に興味深い結果が得られ, 逆にこれらに近い系を実験で実現しようという動きもある. 一方, 後者の方向で大きな成功を収めたのが自己無撞着 (self-consistent renormalization, SCR) スピンゆらぎ理論である [5].

残る 1 回で数理科学的な方向を見ておくのは困難であるため, ここでは, SCR 理論を簡単に説明して講義を終えたいと思う. 数理科学的方向の解説や強相関系全般の教科書などもこの四半世紀の間, 多数出版されている [6, 7, 8, 9] ので, 興味のある方はそちらをご参照いただきたい.

(以下, 最終週へ)

## 付録 13A：積分方程式の計算

$\rho$  の相互作用表示  $\rho_I$  を

$$\rho(t) = e^{\mathcal{H}_0 t / (i\hbar)} \rho_I(t) e^{-\mathcal{H}_0 t / (i\hbar)} = U_0(t) \rho_I(t) U_0^{-1}(t), \quad U_0(t) \equiv \exp\left(\frac{\mathcal{H}_0}{i\hbar} t\right) \quad (13A.1)$$

と置く．  $\rho_I = U_0^{-1} \rho U_0$ ,  $[\mathcal{H}_0, U_0] = 0$  である． また,

$$\frac{\partial U_0}{\partial t} = \frac{\mathcal{H}_0}{i\hbar} U_0 = \frac{1}{i\hbar} U_0 \mathcal{H}_0, \quad \frac{\partial U_0^{-1}}{\partial t} = -\frac{\mathcal{H}_0}{i\hbar} U_0^{-1} = -\frac{1}{i\hbar} U_0^{-1} \mathcal{H}_0, \quad U_0^{-1}(t) = U_0(-t)$$

である． これより,  $\rho_I(t)$  の運動方程式は, (6.54) を用いて

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_I}{\partial t} &= i\hbar \left( \frac{\partial U_0^{-1}}{\partial t} \rho U_0 + U_0^{-1} \frac{\partial \rho}{\partial t} U_0 + U_0^{-1} \rho \frac{\partial U_0}{\partial t} \right) \\ &= i\hbar \left( -\frac{\mathcal{H}_0}{i\hbar} U_0^{-1} \rho U_0 + \frac{1}{i\hbar} U_0^{-1} [\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{ext}}, \rho] U_0 + U_0^{-1} \rho \frac{\mathcal{H}_0}{i\hbar} U_0 \right) \\ &= U_0^{-1} (\mathcal{H}_{\text{ext}} \rho - \rho \mathcal{H}_{\text{ext}}) U_0 \\ &= [U_0^{-1} \mathcal{H}_{\text{ext}} U_0, \rho_I] \end{aligned} \quad (13A.2)$$

である．

$t = -\infty$  で  $\rho = \rho_{\text{eq}}$ ,  $\mathcal{H}_{\text{ext}} = 0$  という条件から, 式 (13A.2) の両辺を  $(-\infty, t]$  で積分すると,

$$\rho_I(t) - \rho_I(-\infty) = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [U_0^{-1}(t') \mathcal{H}_{\text{ext}} U_0(t'), \rho_I(t')]. \quad (13A.3)$$

以上より,

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \rho(-\infty) + \frac{1}{i\hbar} U_0(t) \left\{ \int_{-\infty}^t dt' [U_0^{-1}(t') \mathcal{H}_{\text{ext}} U_0(t'), U_0^{-1}(t') \rho(t') U_0(t')] \right\} U_0^{-1}(t) \\ &= \rho_{\text{eq}} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' U_0(t-t') [\mathcal{H}_{\text{ext}}(t'), \rho(t')] U_0^{-1}(t-t'), \end{aligned} \quad (13A.4)$$

すなわち, (6.57) が示された．

## 付録 13B：揺動散逸定理

$$\mathcal{S}_{QP}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle Q(t), P \rangle e^{i\omega t}$$

に対して,  $Q$  と  $P$  の順番を入れ替えた形を

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \langle PQ(t) \rangle e^{i\omega t} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}} P e^{i\mathcal{H}t/\hbar} Q e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} \} e^{i\omega t} \quad (13B.1)$$

と置く． ここで, 一般に演算子  $A, B, C$  に対して  $\text{Tr}\{ABC\}$  が

$$\text{Tr}\{ABC\} = \text{Tr}\{CAB\} = \text{Tr}\{BCA\} \quad (13B.2)$$

を満たすことを使うと,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle PQ(t) \rangle e^{i\omega t} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ e^{i\mathcal{H}t/\hbar} Q e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} e^{-\beta \mathcal{H}} P \} e^{i\omega t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}} e^{(i/\hbar)\mathcal{H}(t-i\beta\hbar)} Q e^{-(i/\hbar)\mathcal{H}(t-i\beta\hbar)} P \} e^{i\omega(t-i\beta\hbar)} e^{-\beta\hbar\omega} \\ &= e^{-\beta\hbar\omega} \mathcal{S}_{QP}(\omega) \end{aligned} \quad (13B.3)$$

である。すなわち,

$$S_{QP}(\omega) = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle [Q(t), P] \rangle e^{i\omega t} = \frac{i}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} [G_{QP}^+(\omega) - G_{QP}^-(\omega)] \quad (13B.4)$$

が得られた。

## 参考文献

- [1] 川畑有郷. 電子相関 (パリティ物理学コース クローズアップ). 丸善, 3 1992.
- [2] Giuseppe De Nittis. *Linear Response Theory: An Analytic-Algebraic Approach (SpringerBriefs in Mathematical Physics)*. Springer, 6 2017.
- [3] Ryogo Kubo. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. i. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 12, No. 6, pp. 570–586, June 1957.
- [4] Philip Phillips. *Advanced Solid State Physics (English Edition)*. Cambridge University Press, 3 2012.
- [5] Tôru Moriya. Theory of itinerant electron magnetism. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 100, No. 1-3, pp. 261–271, November 1991.
- [6] 青木秀夫, 草部浩一. 強磁性 (多体電子論). 東京大学出版会, 12 1998.
- [7] Adolfo Avella and Ferdinando Mancini, editors. *Strongly Correlated Systems: Theoretical Methods (Springer Series in Solid-State Sciences)*. Springer, 1 2014.
- [8] 勝藤拓郎. 基礎から学ぶ強相関電子系 – 量子力学から固体物理、場の量子論まで (物質・材料テキストシリーズ). 内田老鶴圃, 6 2017.
- [9] Daniel P. Arovas, Erez Berg, Steven A. Kivelson, and Srinivas Raghu. The hubbard model. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, Vol. 13, No. 1, pp. 239–274, March 2022.