

磁性と超伝導の基礎

明治大学 理工学部

楠瀬博明

1

参考文献

磁性

- ・ 上田和夫「磁性入門」 裳華房 (2011)
- ・ 芳田奎「磁性」 岩波書店 (1991)
- ・ 金森順次郎「磁性」 培風館 (1969)
- ・ 近藤淳「金属電子論」 裳華房 (1983)
- ・ 近角聡信「強磁性体の物理 (上・下)」 裳華房 (1977, 1984)
- ・ 小口武彦「磁性体の統計理論」 裳華房 (1970)
- ・ A. Auerbach, "Interacting Electrons and Quantum Magnetism" Springer-Verlag (1994)

超伝導

- ・ 中嶋貞雄「超伝導入門」 培風館 (1971)
- ・ 恒藤敏彦「超伝導・超流動」 岩波書店 (2001)
- ・ 青木秀夫「超伝導入門」 裳華房 (2009)
- ・ P.G. de Gennes, "Superconductivity of Metals and Alloys" Westview Press (1999)
- ・ M. Tinkham, "Introduction to Superconductivity" 2nd ed., Dover Publications (2004)

物性

- ・ アシュクロフト=マーミン「固体物理の基礎 (上1,2, 下1,2)」 吉岡書店 (1981)
- ・ J. Solyom, "Fundamentals of the Physics of Solids" Vol.1-3, Springer (2007)
- ・ 「大学院物性物理 2 強相関電子系」 講談社 (1997)

2

なぜ磁性と超伝導が重要か？

凝縮系物理学の基本概念 P.W. Anderson (Basic Notions, 1984) cf. "More is different" (Science, 1972)

- ・自発的対称性の破れ： 相転移、秩序変数、新しい物性
- ・連続くりこみの原理： 揺らぎ、フェルミ液体、近藤効果、くりこみ群、普遍性
- ・トポロジー： 整数値、マクロ量子化、強固（量子ホール効果、トポロジカル絶縁体）

cf. X.G. Wen (Quantum Field Theory of Many-body Systems, 2003)

- ・手近な物質群で、多くの現象が実際に観測されている
- ・磁性と超伝導の研究境界領域で、新しい発見が相次いでいる
- ・軌道自由度への拡張、位相秩序の展開における基礎となっている

磁性

5

磁性の古典論

6

電磁気学の基本式

$$\left(c = \frac{\gamma}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \right)$$

マクスウェル方程式

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{4\pi\rho}{k\epsilon_0} \quad \left(\mathbf{E} = \frac{q\mathbf{r}}{k\epsilon_0 r^3} \right)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{\mu_0}{\gamma} \left[\frac{4\pi}{k} \mathbf{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right]$$

電磁ポテンシャル

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

ゲージ変換

$$\phi' = \phi - \frac{1}{\gamma} \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f$$

ローレンツ力

$$\mathbf{F} = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{\gamma} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right)$$

エネルギー密度

$$\frac{E}{V} = \frac{k}{8\pi} \left(\epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2 \right)$$

ポインティングベクトル

$$\mathbf{S} = \frac{k\gamma}{4\pi\mu_0} (\mathbf{E} \times \mathbf{B})$$

物質中

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \frac{4\pi}{k} \mathbf{P}$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{H} + \frac{4\pi}{k} \mathbf{M} \right)$$

SI $k = 4\pi, \gamma = 1$
(有理系)

CGS $k = \epsilon_0 = \mu_0 = 1$
(Gauss) (非有理系) ($\gamma = c$)

電束密度、分極

磁場の強さ、磁化 (E-B対応)

$$\left(\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \frac{4\pi}{k} \mathbf{M} \quad \text{磁化 (E-H対応)} \right)$$

7

cf. <http://ir.lib.hiroshima-u.ac.jp/metadb/up/81936204/Refunit43W.pdf>

単位系

$\zeta = 2.998 \times 10^{10}$ (cm/s単位での c の値: 無次元)

		SI単位系	CGS単位系
光速度	c	2.998×10^8 m/s	2.998×10^{10} cm/s
素電荷	e	1.602×10^{-19} C	4.803×10^{-10} esu
真空の誘電率	ϵ_0	$1/\mu_0 c^2 \approx 8.854 \times 10^{-12}$ N/V ²	1
真空の透磁率	μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$ N/A ²	1
ボア磁子	μ_B	9.274×10^{-24} J/T	9.274×10^{-21} erg/Oe

$$1 \mu_B \times 1 \text{ T} = 0.578 \times 10^{-4} \text{ eV} = 0.672 \text{ K}$$

$$M_{\text{mol}}/\mu_B N = 1.79 \times 10^{-4} M_{\text{mol}}$$

$$(N=6.02 \times 10^{23})$$

$$\left(\mu_B = \frac{e\hbar}{2m\gamma} \right)$$

		SI単位系 (E-B対応)	CGS単位系	備考
磁束密度	B	T (= Wb/m ²)	G (= Oe)	1 T = 10 ⁴ G, [1 T \Leftrightarrow (1/ μ_0) A/m]
磁場の強さ	H	A/m (= J/m ³ T)	Oe (= dyn/cm ² Oe)	1 A/m = 4 π \times 10 ⁻³ Oe
磁化	M	A/m	Oe	
磁気モーメント	μ	Am ² (= J/T)	cm ³ Oe (= erg/Oe)	emu = emu* Oe = emu** cm
体積磁化率	χ (=M/H)	無次元	無次元	emu/cm ³ Oe
モル磁化率	χ_{mol} (=MV _A /H)	m ³ /mol	cm ³ /mol	emu/Oe mol = emu*/mol
電荷	q	C	esu	1 C = ζ /10 esu
電場	E	V/m (= N/C)	dyn/esu	1 V/m = 10 ⁶ ζ dyn/esu

日本磁気学会、日本金属学会

ミクロ物性業界 : emu*

8 以下、CGS単位系を採用

磁性の源

静電磁気学 (ポアソン方程式)

$$\nabla^2 \phi = -4\pi\rho$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (\text{クーロンゲージ: } \nabla \cdot \mathbf{A} = 0)$$

$$\phi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \int d\mathbf{r}' \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

遠方 ($r \gg r'$)

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{Q}{r} + \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^3} + \dots$$

$$\mathbf{E}_\alpha = -\frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} = Q \frac{x_\alpha}{r^3} + \frac{1}{r^3} \sum_\beta \left(\frac{3x_\alpha x_\beta}{r^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) p_\beta + \dots$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r^3} (\boldsymbol{\mu}_\ell \times \mathbf{r}) + \dots$$

$$B_\alpha = (\nabla \times \mathbf{A})_\alpha = \frac{1}{r^3} \sum_\beta \left(\frac{3x_\alpha x_\beta}{r^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \mu_{\ell\beta} + \dots$$

全電荷

$$Q = \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}')$$

電気双極子モーメント

$$\mathbf{p} = \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \mathbf{r}'$$

磁気双極子モーメント

$$\boldsymbol{\mu}_\ell = \frac{1}{2c} \int d\mathbf{r}' [\mathbf{r}' \times \mathbf{j}(\mathbf{r}')]]$$

$$j_\alpha = \sum_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta} (x_\alpha j_\beta) - (\nabla \cdot \mathbf{j}) x_\alpha \quad \Rightarrow \quad \int d\mathbf{r}' \mathbf{j}(\mathbf{r}') = 0$$

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \sim \frac{1}{r} + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^3} + \dots$$

$$x_\alpha j_\beta = \frac{1}{2} (x_\alpha j_\beta + x_\beta j_\alpha) + \frac{1}{2} \sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (\mathbf{r} \times \mathbf{j})_\gamma$$

$$= \frac{1}{2} \left[\sum_\gamma \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (x_\alpha x_\beta j_\gamma) - (\nabla \cdot \mathbf{j}) x_\alpha x_\beta \right] + \frac{1}{2} \sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (\mathbf{r} \times \mathbf{j})_\gamma \quad \Rightarrow \quad \int d\mathbf{r}' (\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}') = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' (\mathbf{r}' \times \mathbf{j}(\mathbf{r}')) \times \mathbf{r} = c(\boldsymbol{\mu}_\ell \times \mathbf{r})$$

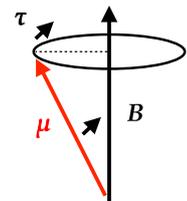
9

磁場との相互作用

磁場と磁気モーメントの相互作用

ゼーマン相互作用 $E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad \Rightarrow \quad \text{常磁性}$

トルク $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} \quad \Rightarrow \quad \text{歳差運動}$



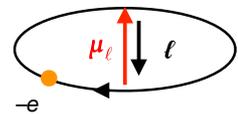
常磁性 (1つの電子: 電荷 $-e$)

軌道磁気モーメント

$$\boldsymbol{\mu}_\ell = \frac{1}{2c} \int d\mathbf{r}' [\mathbf{r}' \times \mathbf{j}(\mathbf{r}')] \quad \boldsymbol{\mu}_\ell = -\mu_B \boldsymbol{\ell}$$

角運動量 (通常定義 $\div \hbar$: 無次元)

$$\hbar \boldsymbol{\ell} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$



スピン磁気モーメント (量子力学特有の量: 相対論的ディラック方程式より導かれる)

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{g}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma}$$

$$(g=2.0023\dots)$$

パウリ行列

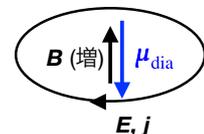
$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$



反磁性

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{dia}} = -\frac{e^2}{4mc^2} (\mathbf{r} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}))$$

$$\left(\begin{array}{l} \oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad E = -\frac{r}{2c} \frac{dB}{dt} \\ \hbar \frac{d\boldsymbol{\ell}}{dt} = \boldsymbol{\tau} \quad \hbar \frac{d\boldsymbol{\ell}}{dt} = \frac{er^2}{2c} \frac{dB}{dt} \\ \boldsymbol{\mu} = -\mu_B \boldsymbol{\ell} \quad \mu_{\text{dia}} = -\frac{e^2 r^2}{4mc^2} B \end{array} \right)$$



10

磁性の古典論

ミニマル電磁相互作用 (電子の電荷 $-e$)

$$H = \frac{p^2}{2m} \xrightarrow{\text{電磁場中}} H \rightarrow H + e\phi \quad p \rightarrow p + \frac{e}{c}A \quad \Rightarrow \quad H = \frac{1}{2m} \left(p + \frac{e}{c}A \right)^2 - e\phi \quad \begin{array}{l} r \text{ 正準座標} \\ p \text{ 正準運動量} \end{array}$$

正準方程式 $m \frac{dv}{dt} = -e \left[E + \frac{1}{c}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \right] \quad \mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$

運動量

$$mv = p + \frac{e}{c}A$$

kinetic 運動量 正準運動量 (r に共役) ゲージ不変でない
ゲージ不変 (観測量)

$$\left(\begin{array}{l} A \rightarrow A' = A + \nabla f \\ p \rightarrow p' = p - \frac{e}{c} \nabla f \end{array} \quad mv = mv' \right)$$

cf. ファインマン物理学「量子力学」21章

クーロンゲージ $\text{div } \mathbf{A} = 0$
対称ゲージ $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \quad \text{div } \mathbf{A} = 0$
ランダウゲージ $\mathbf{A} = (0, Bx, 0) \quad \text{div } \mathbf{A} = 0$

磁気モーメント

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{B}} \quad \text{対称ゲージ } \mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \text{ で計算してみる} \quad H = \frac{p^2}{2m} + \mu_B \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{8mc^2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2$$

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_B \boldsymbol{\ell} - \frac{e^2}{4mc^2}[\mathbf{r} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r})] = \boldsymbol{\mu}_\ell + \boldsymbol{\mu}_{\text{dia}}$$

磁性の古典統計力学

ボア=ファン・リューエンの定理

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2m} \left(p_i + \frac{e}{c}A(\mathbf{r}_i) \right)^2 - e\phi(\mathbf{r}_i) \right] + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$



反磁性の打ち消し

$$Z = \int \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{p}_1}{h^3} \int \frac{d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}_2}{h^3} \dots \int \frac{d\mathbf{r}_N d\mathbf{p}_N}{h^3} e^{-\beta H}$$

$$\pi_i = p_i + \frac{e}{c}A \text{ と変数変換すると}$$

$$= \int \frac{d\mathbf{r}_1 d\boldsymbol{\pi}_1}{h^3} \int \frac{d\mathbf{r}_2 d\boldsymbol{\pi}_2}{h^3} \dots \int \frac{d\mathbf{r}_N d\boldsymbol{\pi}_N}{h^3} e^{-\beta H'} \quad H' = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\boldsymbol{\pi}_i^2}{2m} - e\phi(\mathbf{r}_i) \right] + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$$

となり、磁場の情報が消えてしまう (ローレンツ力は仕事をしない)

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\partial F}{\partial \mathbf{B}} = \boldsymbol{\mu}_\ell + \boldsymbol{\mu}_{\text{dia}} = 0 \quad (\text{常磁性項と反磁性項がキャンセル})$$

古典統計力学では、磁性現象の記述は不可能

量子統計では

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + \mu_B \left(\boldsymbol{\ell}_i + \frac{g}{2} \boldsymbol{\sigma}_i \right) \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{8mc^2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}_i)^2 \right] + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{対称ゲージ})$$

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_B \sum_i \left(\boldsymbol{\ell}_i + \frac{g}{2} \boldsymbol{\sigma}_i \right) - \frac{e^2}{4mc^2} \sum_i [\mathbf{r}_i \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}_i)]$$

$$\left(\begin{array}{l} p_i \rightarrow -i\hbar \nabla_i \quad (\text{正準運動量に対して行う}) \\ [r_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \\ \hbar \boldsymbol{\ell} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad [\ell_x, \ell_y] = i\ell_z \end{array} \right)$$

- ・スピンの存在
- ・状態和において座標と運動量は独立でない
- ・量子状態はシュレディンガー方程式に従う

常磁性項と反磁性項のキャンセルは不完全 ... 磁性現象

独立原子の磁性

13

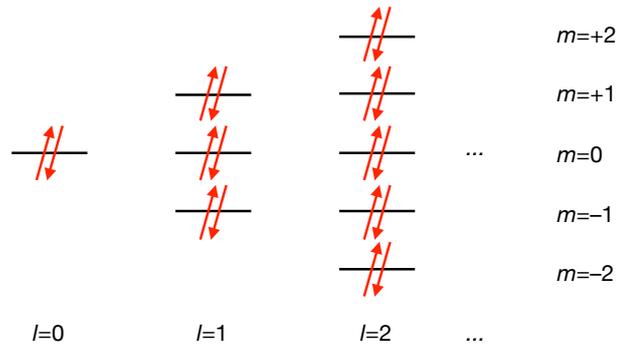
原子の磁性

希ガス (ラーモア反磁性)

$$L = \sum_i \ell_i = 0$$

$$S = \frac{1}{2} \sum_i \sigma_i = 0$$

閉殻構造では、全軌道角運動量、
全スピン角運動量ともに凍結



磁場による反磁性項のみ有限に残る

$$\mathbf{B} \parallel z \quad \text{原子 1 個あたり} \quad \mu_{\text{dia}} = -\frac{e^2}{4mc^2} \sum_i \langle r_{\perp}^2 \rangle B = -\frac{Ze^2}{6mc^2} \langle r^2 \rangle B$$

(等方性)

モル磁化率

$$\chi_{\text{dia}} = -\frac{NZe^2}{6mc^2} \langle r^2 \rangle$$

$$\chi' = M/B \quad \text{と} \quad \chi = M/H \quad ? \quad B = H + 4\pi M$$

$$\chi' = \frac{\chi}{1 + 4\pi\chi} \quad \chi \ll 1 \quad \text{磁化率が小さいとき、} \\ \text{違いは小さい}$$

	$-\chi_{\text{dia}} [\text{emu}^*/\text{mol}]$
He (Z=2)	1.5×10^{-6}
Ne (Z=10)	5.7×10^{-6}
Ar (Z=18)	21.5×10^{-6}
Kr (Z=36)	42×10^{-6}

14

量子論

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (x^2 + y^2) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) + \hbar \omega_L \ell_z$$

中心座標演算子およびサイクロトロン運動演算子

$$X = \frac{1}{2} \left(x - \frac{p_y}{m\omega} \right) \quad Y = \frac{1}{2} \left(y + \frac{p_x}{m\omega} \right) \quad K_x = \frac{\omega_1}{2\omega} (p_x - m\omega y) \quad K_y = \frac{\omega_1}{2\omega} (p_y + m\omega x)$$

$$H = \frac{\omega}{m\omega_1} (K_x^2 + K_y^2) + m\omega\omega_2 (X^2 + Y^2) \quad [X, Y] = \frac{i\hbar}{2m\omega} \quad [K_x, K_y] = -\frac{i\hbar m\omega_1^2}{2\omega}$$

昇降演算子 $a = i\sqrt{\frac{\omega}{\hbar m\omega_1^2}} (K_x - iK_y) \quad b = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} (X + iY) \quad [a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1$

$$H = \hbar\omega_1 \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} \right)$$

$$\ell_z = a^\dagger a - b^\dagger b$$

固有状態と固有エネルギー (n, m は非負の整数)

$$E_{n,m} = \hbar\omega_1 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(m + \frac{1}{2} \right)$$

$$|n, m\rangle = \frac{C}{\sqrt{n!m!}} (a^\dagger)^n (b^\dagger)^m |0, 0\rangle$$

角運動量の固有状態でもある

$$\ell_z |n, m\rangle = (n - m) |n, m\rangle$$

ラーモア反磁性 基底状態 $E_{0,0} = \hbar\sqrt{\omega_L^2 + \omega_0^2}$

$$\langle r_\perp^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{2}{m} \frac{\partial E_{0,0}}{\partial \omega_0^2} = \frac{\hbar^2}{mE_{0,0}}$$

$$\mu_{\text{dia}} = -\frac{\partial E_{0,0}}{\partial B} = -\frac{\hbar^2 \omega_L^2}{E_{0,0} B} = -\frac{e^2 \langle r_\perp^2 \rangle}{4mc^2} B$$

$B = 0$ 2次元調和振動子 $H = \hbar\omega_0 (a^\dagger a + b^\dagger b + 1)$

$$\omega_0 = 0$$

ランダウ準位

$$H = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

サイクロトロン振動数

$$\omega_c = 2\omega_L$$

m (中心座標)に関する縮退

17

波動関数 $\omega_0 \equiv 0$

$$z = \frac{1}{2l_B} (x - iy) \quad z^* = \frac{1}{2l_B} (x + iy) \quad \frac{\partial}{\partial z} = \frac{il_B}{\hbar} (p_x + ip_y) \quad \frac{\partial}{\partial z^*} = \frac{il_B}{\hbar} (p_x - ip_y) \quad l_B \approx 81 \text{ \AA} \quad (B=10 \text{ T})$$

$$\left(\begin{array}{l} a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(z + \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(z^* + \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(z - \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \end{array} \right) \quad \left(\begin{array}{l} b e^{-|z|^2} = 0 \\ [b^\dagger, z] = 0 \\ -\frac{\partial}{\partial z^*} e^{-|z|^2} = z e^{-|z|^2} \end{array} \right)$$

$$|n, m\rangle = \frac{C}{\sqrt{2^m n! m! l_B^m}} (a^\dagger)^n \left[r^m e^{-im\theta} e^{-r^2/4l_B^2} \right]$$

最低ランダウ準位 $|0, m\rangle = \frac{C}{\sqrt{2^m m! l_B^m}} r^m e^{-im\theta} e^{-r^2/4l_B^2}$

$$r_{\text{max}} \sim \sqrt{2m} l_B$$

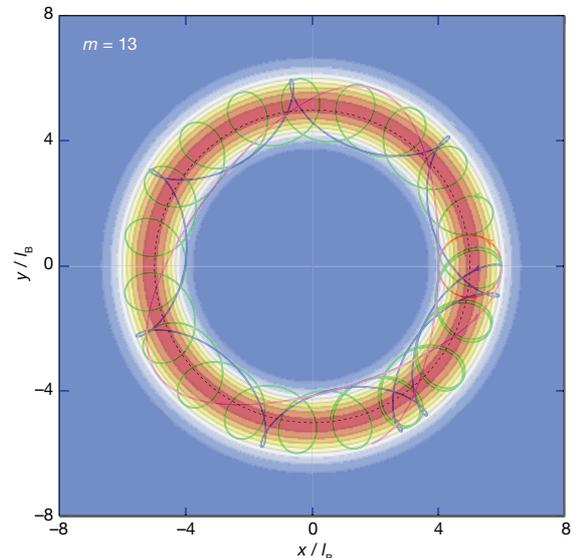
縮退度 $R \gg l_B$ R : 系のサイズ (半径)

$$r_{\text{max}} \leq R$$

$$n_L = m_{\text{max}} = \frac{1}{2} \left(\frac{R}{l_B} \right)^2 = \frac{\Phi}{\phi_0} \quad \text{磁束量子の本数}$$

磁束 $\Phi = \pi R^2 B$

磁束量子 $\phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e} = 2.07 \times 10^{-7} \text{ G cm}^2$



18

不完全殻の基底多重項 (フントの規則)

フントの規則 (経験則)

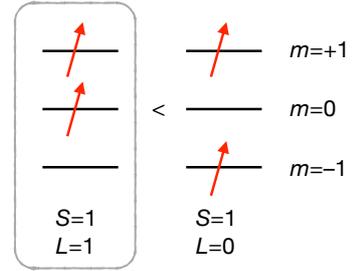
多電子配置の基底多重項は以下を満たすように決まる

- (1) 全スピン角運動量 S が最大
- (2) S 最大の中で、全軌道角運動量 L が最大

⇒ 基底 LS 多重項

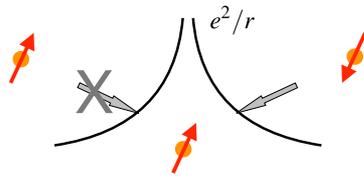
$$L = \sum_i \ell_i$$

$$S = \frac{1}{2} \sum_i \sigma_i$$



電子間のクーロン斥力とパウリ原理が原因

- (1) 平行スピン(σ)の電子はパウリ原理により近づく確率ゼロ



平行スピン
パウリ原理より近づきにくい
クーロン相互作用が働きにくい

反平行スピン
制限なし
クーロン相互作用が働く

- (2) なるべく同じ向き(m)で運動する方が電子間の衝突確率が小さい

電子配置	L	S	イオン
$3d^1$	2	1/2	Ti^{3+}, V^{4+}
$3d^2$	3	1	V^{3+}
$3d^3$	3	3/2	Cr^{3+}, V^{2+}
$3d^4$	2	2	Mn^{3+}, Cr^{2+}
$3d^5$	0	5/2	Fe^{3+}, Mn^{2+}
$3d^6$	2	2	Co^{3+}, Fe^{2+}
$3d^7$	3	3/2	Co^{2+}
$3d^8$	3	1	Ni^{2+}
$3d^9$	2	1/2	Cu^{2+}

第二量子化

一粒子状態: $\phi_m(\mathbf{r}), |m\rangle \Rightarrow |m\rangle = c_m^\dagger |0\rangle$

二粒子状態: $\psi_{mn}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \phi_m(\mathbf{r}_1) & \phi_n(\mathbf{r}_1) \\ \phi_m(\mathbf{r}_2) & \phi_n(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} \Rightarrow |mn\rangle = c_m^\dagger c_n^\dagger |0\rangle$
パウリ原理

一体相互作用

$$\sum_{i=1}^N f(\mathbf{r}_i), \sum_{i=1}^N \hat{f}_i \Rightarrow \sum_{mn} \langle m|\hat{f}|n\rangle c_m^\dagger c_n$$

$$\langle m|\hat{f}|n\rangle = \int d\mathbf{r} \phi_m^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r})$$

二体相互作用

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \hat{g}_{ij} \Rightarrow \frac{1}{2} \sum_{mnlk} \langle mn|\hat{g}|kl\rangle c_m^\dagger c_n^\dagger c_l c_k$$

$$\langle mn|\hat{g}|kl\rangle = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_m^*(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}') g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r}')$$

パウリ原理は、演算子の反交換関係に

$$\{c_m, c_n^\dagger\} = c_m c_n^\dagger + c_n^\dagger c_m = \delta_{mn}$$

$$\{c_m, c_n\} = \{c_m^\dagger, c_n^\dagger\} = 0$$

任意の行列要素

$$\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_N \psi_{m_1, m_2, \dots, m_N}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \hat{A} \psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \langle m_1, m_2, \dots, m_N | \hat{A} | n_1, n_2, \dots, n_N \rangle$$

スレーター行列 スレーター行列

通常の演算子

第二量子化表示

任意の行列要素は、どちらの表示でも互いに等しい

クーロン相互作用 (原子内)

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\{m_i\}} \sum_{\alpha\beta} V_{m_1 m_2, m_3 m_4} \overbrace{c_{m_1 \alpha}^\dagger c_{m_2 \beta}^\dagger c_{m_4 \beta} c_{m_3 \alpha}} \quad V_{m_1 m_2, m_3 m_4} = \int dr dr' \overbrace{\phi_{m_1}^*(r) \phi_{m_2}^*(r') \frac{e^2}{|r-r'|} \phi_{m_3}(r) \phi_{m_4}(r')} \\ \phi_m(r) = R_l(r) Y_{lm}(\hat{r})$$

最大 : $m_1=m_2=m_3=m_4 (=m)$ $U_m \equiv V_{m m, m m} > 0$ 直接積分

$$\sum_m U_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow} \quad n_{m\sigma} = c_{m\sigma}^\dagger c_{m\sigma}$$

ハバード相互作用 電子数演算子

二番目 : $m_1=m_3, m_2=m_4 (m_1 \neq m_2)$ $U(m_1, m_2) \equiv V_{m_1 m_2, m_1 m_2} > 0$ 直接積分

$$\frac{1}{2} \sum_{m_1 \neq m_2} U(m_1, m_2) n_{m_1} n_{m_2} \quad n_m = \sum_{\sigma} n_{m\sigma} \quad U(m_1, m_2) \text{は } |m_1 - m_2| \text{が小さいほど小さい}$$

⇒ フント則 (2)

三番目 : $m_1=m_4, m_2=m_3 (m_1 \neq m_2)$ $J(m_1, m_2) \equiv V_{m_1 m_2, m_2 m_1} > 0$ 交換積分

$$\frac{1}{2} \sum_{m_1 \neq m_2} \sum_{\alpha\beta} J(m_1, m_2) c_{m_1 \alpha}^\dagger c_{m_2 \beta}^\dagger c_{m_1 \beta} c_{m_2 \alpha} = -\frac{1}{4} \sum_{m_1 \neq m_2} J(m_1, m_2) (\sigma_{m_1} \cdot \sigma_{m_2} + n_{m_1} n_{m_2})$$

恒等式 ($2\delta_{14}\delta_{23} = \delta_{12}\delta_{34} + \sigma_{12} \cdot \sigma_{34}$)

強磁性的相互作用 ⇒ フント則 (1) $\sigma_m = \sum_{\alpha\beta} c_{m\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta} c_{m\beta}$ スピン演算子

$$H_C = \sum_m U_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{m_1 \neq m_2} U'(m_1, m_2) n_{m_1} n_{m_2} - \frac{1}{4} \sum_{m_1 \neq m_2} J(m_1, m_2) \sigma_{m_1} \cdot \sigma_{m_2} + \dots$$

$U'(m_1, m_2) = U(m_1, m_2) - \frac{1}{2} J(m_1, m_2)$

LS 結合

スピン軌道相互作用 (相対論的ディラック方程式より)

$$H_{SO} = \sum_i \xi(r_i) \mathbf{l}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_i$$

$$\xi = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle_i \approx \frac{Ze^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_i$$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$



+ トーマス因子 (1/2)
(等加速度運動)

Z が大きく内殻深くに
大きな振幅をもつ軌道

L_z, S_z は良い量子数ではない ⇒ $J = L + S$ J, J_z, L, S が良い量子数

全角運動量

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S$$

フント則 (1) ⇒ $n < 2\ell + 1$ $\frac{1}{2} \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i = \frac{1}{2S} \mathbf{S}$ $\lambda = \frac{\langle \xi \rangle_r}{2S}$

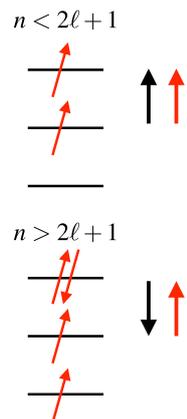
基底 LS 多重項の記号

$$2S+1 L_J$$

$$L = 0, 1, 2, 3, \dots, (S, P, D, F, \dots)$$

$n > 2\ell + 1$ 基底多重項 $J = |L - S|$

$n < 2\ell + 1$ 基底多重項 $J = L + S$



スピン軌道相互作用

1電子のディラックハミルトニアン

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + \dots \quad 1/c \text{ 展開 } (\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137)$$

$$H_0 = mc^2 \quad \text{静止エネルギー} \quad \text{微細構造定数}$$

$$H_1 = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(r) - \frac{g}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad \text{パウリ・ハミルトニアン}$$

$$H_2 = -\frac{1}{2mc^2} \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right]^2 + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V(r) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot [\nabla V(r) \times \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)]$$

無視 (運動エネルギーの高次項) ダーウィン項 (s波のみ) スピン軌道相互作用

ベクトルポテンシャル部分を無視して

$$\text{中心力ポテンシャル: } H_{SO} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \boldsymbol{\ell} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

$$\text{静電ポテンシャル: } H_{SO} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p})$$

$$\text{cf. } \mathbf{E} \parallel \mathbf{z} \quad H_{SO} = \alpha(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x) \quad \text{ラシュバ項}$$

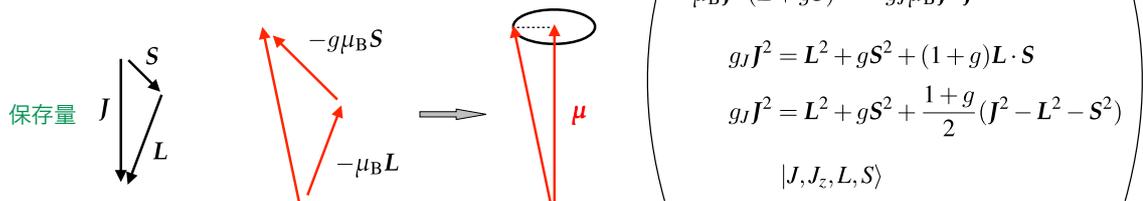
全角運動量と磁気モーメント

全磁気モーメント

スピン軌道相互作用 << クーロン相互作用 (フントの規則)

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_\ell + \boldsymbol{\mu}_s = -\mu_B(\mathbf{L} + g\mathbf{S}) = -g_J\mu_B\mathbf{J} \quad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

J, J_z, L, S が良い量子数



$$\text{ランダウの } g \text{ 因子 (LS基底多重項)} \quad g_J = \frac{1+g}{2} - \frac{g-1}{2} \frac{L(L+1) - S(S+1)}{J(J+1)}$$

$$L=0 \rightarrow g_J = g \quad S=0 \rightarrow g_J = 1$$

電子配置	L	S	J	g_J	イオン	電子配置	L	S	J	g_J	イオン
4f ¹	3	1/2	5/2	6/7	Ce ³⁺	4f ⁸	3	3	6	3/2	Tb ³⁺
4f ²	5	1	4	4/5	Pr ³⁺	4f ⁹	5	5/2	15/2	4/3	Dy ³⁺
4f ³	6	3/2	9/2	8/11	Nd ³⁺	4f ¹⁰	6	2	8	5/4	Ho ³⁺
4f ⁴	6	2	4	3/5	Pm ³⁺	4f ¹¹	6	3/2	15/2	6/5	Er ³⁺
4f ⁵	5	5/2	5/2	2/7	Sm ³⁺	4f ¹²	5	1	6	7/6	Tm ³⁺
4f ⁶	3	3	0	0	Eu ³⁺	4f ¹³	3	1/2	7/2	8/7	Yb ³⁺
4f ⁷	0	7/2	7/2	2	Gd ²⁺						

j-j 結合

スピン軌道相互作用 >> クーロン相互作用 (フントの規則)

$$H_{SO} = \sum_i \xi_i \mathbf{l}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_i$$

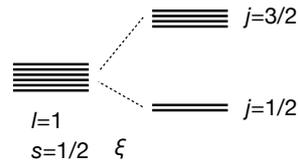
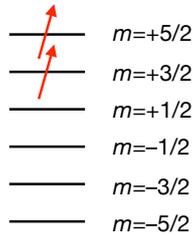
(1) スピン軌道相互作用を先に取り込む

$$\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_i \quad |jm\rangle = aY_{\ell, m+1/2}|\downarrow\rangle + bY_{\ell, m-1/2}|\uparrow\rangle$$

(2) クーロン相互作用を取り込む

全角運動量 J が最大になるように $J = \sum_i j_i$

例 f^2 配置 $j=5/2$ に 2 個詰める $J = 5/2 + 3/2 = 4$



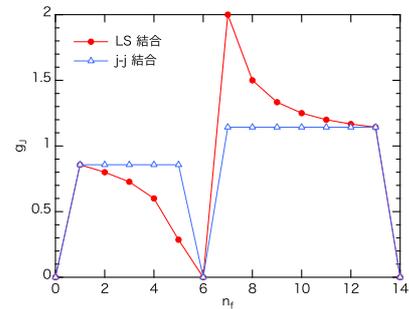
$$a = \left\langle \ell, m + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| j, m \right\rangle$$

$$b = \left\langle \ell, m - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \middle| j, m \right\rangle$$

クレブシュ・ゴールドン係数

ランダの g 因子は LS 基底多重項と異なる

$$\boldsymbol{\mu} = -g_J \mu_B \mathbf{J}$$



自由スピンの磁場応答

ゼーマン相互作用

$$\alpha = -g_J \mu_B$$

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \equiv -\alpha \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} \quad (J = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots)$$

$\mathbf{B} \parallel z$

自由エネルギー $F = -k_B T N \ln Z$ $Z = \sum_{M=-J}^J e^{\beta(\alpha B M)} = \frac{\sinh[\beta \alpha B (J + 1/2)/2]}{\sinh(\beta \alpha B / 2)}$

磁化 $M = -\frac{\partial F}{\partial B} = N \alpha J B_J(\beta \alpha J B)$

ブリルアン関数

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J} \coth\frac{x}{2J}$$

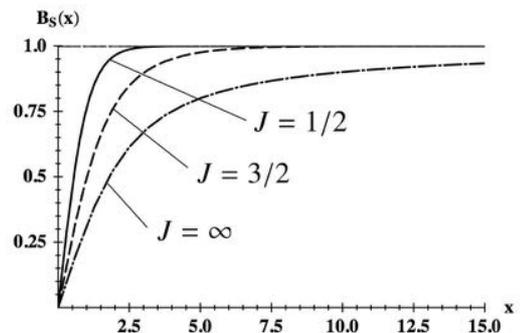
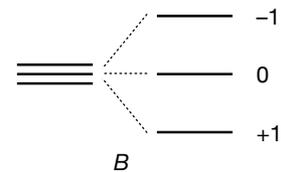
磁化率

$$M \sim \chi B \quad B_J(x) \sim \frac{J+1}{3J}x \quad (x \ll 1)$$

$$\chi = N \frac{\alpha^2 J(J+1)}{3k_B T} \quad \left(\chi = N \frac{\mu^2}{3k_B T} \right)$$

キュリー則

(温度に反比例、分子は有効磁気モーメントの2乗)



古典極限 $\alpha J \equiv \mu$ (const.), $J \rightarrow \infty$

$$L(x) = \lim_{J \rightarrow \infty} B_J(x) = \coth x - \frac{1}{x} \quad \text{ランジュバン関数}$$

$$M = N \mu L(\beta \mu B)$$

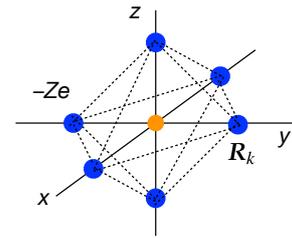
結晶場

結晶中の電子は、周りのイオンから生じる球対称ではない静電ポテンシャル下におかれ、 $2l+1$ 重の縮退が解ける

点電荷模型 周りのイオン (リガンド) が点 r に作るポテンシャル

$$\phi(\mathbf{r}) = - \sum_k \frac{Ze}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_k|}$$

例: 正八面体の中心に置かれた1つの電子 $\mathbf{R}_k = (\pm a, 0, 0), (0, \pm a, 0), (0, 0, \pm a)$

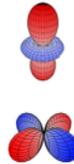


O_h (正八面体群) [立方対称点群の典型例]

$$\phi(\mathbf{r}) \approx \phi_0 + \phi_4 \left(x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5} r^4 \right) + \phi_6 \left[x^2 y^2 z^2 + \frac{r^2}{22} \left(x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5} r^4 \right) - \frac{r^6}{105} \right]$$

e_g (Γ_3) 軌道

$$\begin{cases} \psi_u = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{3z^2 - r^2}{r^2} R_{3d}(r) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} R_{3d}(r) (3 \cos^2 \theta - 1) \\ \psi_v = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{x^2 - y^2}{r^2} R_{3d}(r) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} R_{3d}(r) \sin^2 \theta \cos(2\phi) \end{cases}$$



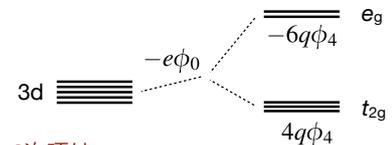
$$\phi_0 = -\frac{6Ze}{a} \quad \phi_4 = -\frac{35Ze}{4a^5} \quad \phi_6 = -\frac{693Ze}{8a^7}$$

$$q = \frac{2e}{105} \langle r^4 \rangle_{3d}$$

$$\langle r^n \rangle_\alpha = \int_0^\infty dr r^{n+2} R_\alpha^2(r)$$

t_{2g} (Γ_5) 軌道

$$\begin{cases} \psi_{yz} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{yz}{r^2} R_{3d}(r) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} R_{3d}(r) \sin(2\theta) \sin \phi \\ \psi_{zx} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{zx}{r^2} R_{3d}(r) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} R_{3d}(r) \sin(2\theta) \cos \phi \\ \psi_{xy} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{xy}{r^2} R_{3d}(r) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} R_{3d}(r) \sin^2 \theta \sin(2\phi) \end{cases}$$



6次項は

ルジャンドル多項式の直交性から消える

$$\int d\Omega P_2^* P_6 P_2 = 0 \quad > 2l$$

27

多電子の場合 多体波動関数 (基底 LS 多重項) に対する行列要素が必要

$$V_{M'M} = \left\langle \psi_{JM';LS}(\{\mathbf{r}_i\}) \left| -e \sum_i \phi(\mathbf{r}_i) \right| \psi_{JM;LS}(\{\mathbf{r}_i\}) \right\rangle$$

等価演算子法

r と J の偶数次多項式の対称性は等しい

⇒ 行列要素は比例 (ウィグナー=エッカートの定理)

$$x^k y^m z^n \rightarrow \frac{k!m!n!}{(k+m+n)!} \sum_p \mathcal{P}(J_x^k J_y^m J_z^n) \quad \text{等価演算子}$$

e.g. $x^2 y \rightarrow \frac{1}{3} (J_x^2 J_y + J_x J_y J_x + J_y J_x^2)$

m : 多項式の次数 (ランク)

$$\sum_{i=1}^n \phi_m(\mathbf{r}_i) = -\frac{Ze}{a^{m+1}} \langle r^m \rangle g_n^{(m)} \phi_m(J)$$

$$g_n^{(2)} = \theta_2 = \alpha_J$$

$$g_n^{(6)} = \theta_6 = \gamma_J$$

$$g_n^{(4)} = \theta_4 = \beta_J$$

$$x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5} r^4 \rightarrow \propto O_{40} + 5O_{44} \equiv 20 \left[J_x^4 + J_y^4 + J_z^4 - \frac{3}{5} J(J+1) \left(J(J+1) - \frac{1}{3} \right) \right]$$

$$x^2 y^2 z^2 + \frac{r^2}{22} \left(x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5} r^4 \right) - \frac{r^6}{105} \rightarrow \propto O_{60} - 21O_{64}$$

O_{mn} スチーブンス演算子

M.T. Hutchings, Solid State Phys. **16** (1964) 227

HK, JPSJ **77** (2008) 064710

28

その他の注意点

- ・ 実数の波動関数に対する軌道角運動量の期待値はゼロ $\langle \psi | L | \psi \rangle = -\langle \psi | L | \psi \rangle^* = -\langle \psi | L | \psi \rangle = 0$
 L は純虚数演算子 エルミート
- ・ 磁性イオンの電子とリガンド電子との混成があるため、点電荷模型は(特にd電子系では)定量的に良い近似ではない
- ・ 点電荷模型は対称性に関して正しい結果を与える

⇒ ϕ_m や等価演算子の置き換えによる比例係数を含めて、現象論的なパラメータ(B_{mn})と考える

$$H_{\text{CEF}} = \sum_{mp} B_{mp} O_{mp}$$

$$B_{mp} \leftrightarrow \frac{Ze^2}{a^{m+1}} A_{mp} \langle r^m \rangle g_n^{(m)}$$

点群対称性	(mp) [s がある場合は $O_{mp}(s)$ を用いる]
立方対称	
O_h, O, T_d	5(40)=(44), -21(60)=(64)
T, T_h	上記 + -(62)=(66)
六方、三方対称	
$D_6, C_{6v}, D_{3h}, D_{6h}$	(20), (40), (60), (66)
C_{3h}, C_6, C_{6h}	上記 + (66s)
D_3, C_{3v}, D_{3d}	(20), (40), (43), (60), (63), (66)
C_3, C_{3i}	上記 + (43s), (63s), (66s)
正方対称	
C_{4h}, D_{4h}	(20), (40), (44), (60), (64)
C_4, S_4, C_{4h}	上記 + (44s), (64s)
直方対称	
C_{2v}, D_2, D_{2h}	(20), (22), (40), (42), (44), (60), (62), (64), (66)
C_2, C_s, C_{2h}	上記 + (22s), (42s), (44s), (62s), (64s), (66s)

cf. <http://aquarius.mp.es.osaka-u.ac.jp/~tspace/angular/angular.pdf>

適合関係 (球対称 $\rightarrow O$) (O_h の場合は l の偶奇性)

J	ミリケン記号	ベーテ記号
0	A_1	Γ_1
1	T_1	Γ_4
2	$E+T_2$	$\Gamma_3+\Gamma_5$
3	$A_2+T_1+T_2$	$\Gamma_2+\Gamma_4+\Gamma_5$
4	$A_1+E+T_1+T_2$	$\Gamma_1+\Gamma_3+\Gamma_4+\Gamma_5$
5	$E+2T_1+T_2$	$\Gamma_3+2\Gamma_4+\Gamma_5$
6	$A_1+A_2+E+T_1+2T_2$	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+\Gamma_4+2\Gamma_5$
7	$A_2+E+2T_1+2T_2$	$\Gamma_2+\Gamma_3+2\Gamma_4+2\Gamma_5$
8	$A_1+2E+2T_1+2T_2$	$\Gamma_1+2\Gamma_3+2\Gamma_4+2\Gamma_5$
1/2	$E_{1/2}$	Γ_6
3/2	$G_{3/2}$	Γ_8
5/2	$E_{5/2}+G_{3/2}$	$\Gamma_7+\Gamma_8$
7/2	$E_{1/2}+E_{5/2}+G_{3/2}$	$\Gamma_6+\Gamma_7+\Gamma_8$
9/2	$E_{1/2}+2G_{3/2}$	$\Gamma_6+2\Gamma_8$
11/2	$E_{1/2}+E_{5/2}+2G_{3/2}$	$\Gamma_6+\Gamma_7+2\Gamma_8$
13/2	$E_{1/2}+2E_{5/2}+2G_{3/2}$	$\Gamma_6+2\Gamma_7+2\Gamma_8$
15/2	$E_{1/2}+E_{5/2}+3G_{3/2}$	$\Gamma_6+\Gamma_7+3\Gamma_8$

適合関係 ($O \rightarrow T$)

$A_1, A_2 \rightarrow A (\Gamma_1, \Gamma_2 \rightarrow \Gamma_1)$ $E_{1/2}, E_{5/2} \rightarrow E_{1/2} (\Gamma_6, \Gamma_7 \rightarrow \Gamma_5)$
 $E \rightarrow E (\Gamma_3 \rightarrow \Gamma_{23})$ $G_{3/2} \rightarrow G_{3/2} (\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_{67})$
 $T_1, T_2 \rightarrow T (\Gamma_4, \Gamma_5 \rightarrow \Gamma_4)$

適合関係 ($O \rightarrow D_4$)

$A_1 \rightarrow A_1 (\Gamma_1 \rightarrow \Gamma_1)$ $E_{1/2} \rightarrow E_{1/2} (\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_6)$
 $A_2 \rightarrow B_1 (\Gamma_2 \rightarrow \Gamma_3)$ $E_{5/2} \rightarrow E_{3/2} (\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_7)$
 $E \rightarrow A_1, B_1 (\Gamma_3 \rightarrow \Gamma_1, \Gamma_3)$ $G_{3/2} \rightarrow E_{3/2}, E_{1/2} (\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7, \Gamma_6)$
 $T_1 \rightarrow E, A_2 (\Gamma_4 \rightarrow \Gamma_5, \Gamma_2)$
 $T_2 \rightarrow E, B_2 (\Gamma_5 \rightarrow \Gamma_5, \Gamma_4)$

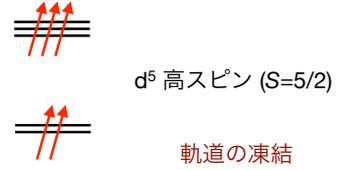
摂動の順序

(a) $H_C > H_{CEF} > H_{SO}$ (強い結晶場)

3d 電子系：結晶場分裂を無視してフント則(1)を適用
高スピン状態

$$U \sim \Delta \sim 10^{1-2} \text{ eV}$$

$$\lambda \sim 10^2 \text{ K}$$

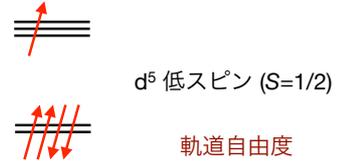


(b) $H_{CEF} > H_C > H_{SO}$ (強い結晶場)

3d 電子系：結晶場分裂した軌道の低準位側からフント則(1)を適用
低スピン状態

$$U \sim \Delta \sim 10^{1-2} \text{ eV}$$

$$\lambda \sim 10^2 \text{ K}$$



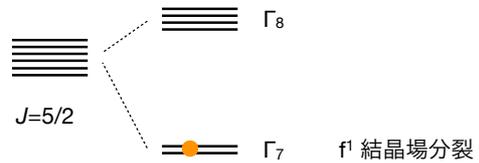
(c) $H_C > H_{SO} > H_{CEF}$ (弱い結晶場)

4f 電子系：LS-J 多重項に結晶場分裂を適用

$$U \sim 10^4 \text{ K}$$

$$\lambda \sim 10^3 \text{ K}$$

$$\Delta \sim 10^2 \text{ K}$$



5d, 5f では、 λ や Δ は 3d, 4f の中間程度となり拮抗する

弱い結晶場中の磁気応答

(局所)帯磁率

$$H = H_{CEF} + gJ\mu_B \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}$$

$$H|\psi_n\rangle = E_n(B)|\psi_n\rangle \quad H_{CEF}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$F(B) = -k_B T \ln Z(B) \quad Z(B) = \sum_n e^{-\beta E_n(B)}$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{cf. 線形応答理論} \\ \chi_{\alpha\beta} = \int_0^\beta d\tau \langle \delta M_\alpha(\tau) \delta M_\beta(0) \rangle \\ \delta M_\alpha(\tau) = e^\tau H_{CEF} \hat{M}_\alpha e^{-\tau H_{CEF}} - M_\alpha \\ \hat{M}_\alpha = -gJ\mu_B J_\alpha \end{array} \right)$$

2次摂動 (ゼーマン項)

$$E_n(B) = E_n + gJ\mu_B \langle n | \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} | n \rangle + (gJ\mu_B)^2 \sum_{m,n}^{E_m \neq E_n} \frac{\langle m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} | n \rangle \langle n | \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} | m \rangle}{E_n - E_m}$$

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{Z(0)} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \dots | n \rangle$$

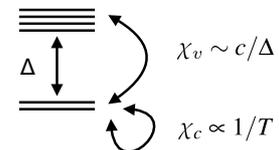
$$\mathbf{M} = \langle \hat{\mathbf{M}} \rangle = -\frac{\partial F(B)}{\partial \mathbf{B}} = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial \mathbf{B}} \right\rangle = \frac{1}{Z(0)} \text{Tr} (e^{-\beta H_{CEF}} \dots)$$

$$\chi_{\alpha\beta} = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial M_\alpha}{\partial B_\beta} = \lim_{B \rightarrow 0} \left[\frac{1}{k_B T} \left\{ \left\langle \frac{\partial H}{\partial B_\alpha} \frac{\partial H}{\partial B_\beta} \right\rangle - M_\alpha M_\beta \right\} - \left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial B_\alpha \partial B_\beta} \right\rangle \right] \quad \lim_{B \rightarrow 0} M_\alpha = 0$$

$$\chi_{\alpha\beta} = \frac{(gJ\mu_B)^2}{Z(0)} \left[\frac{1}{k_B T} \sum_{n,m}^{E_n = E_m} e^{-\beta E_n} \langle n | J_\alpha | m \rangle \langle m | J_\beta | n \rangle + \sum_{n,m}^{E_n \neq E_m} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m} \langle n | J_\alpha | m \rangle \langle m | J_\beta | n \rangle \right]$$

キュリー項
(1/T に比例)
 $\chi_c \propto 1/T$

ヴァン・ヴレック項
(温度に依らない)
 $\chi_v \sim c/\Delta$



磁性絶縁体

33

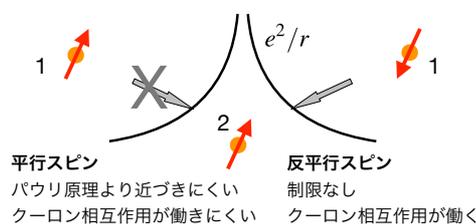
スピン間の相互作用

(a) ハイゼンベルグの交換相互作用

$$H_{\text{ex}} = -JS_1 \cdot S_2, \quad (J > 0)$$

強磁性的

フント起源: $J \sim 0.1 \text{ eV}$ 程度

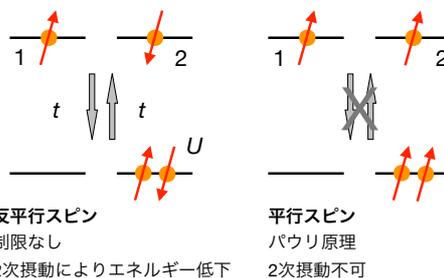


(b) アンダーソンの超交換相互作用

$$H_{\text{ex}} = JS_1 \cdot S_2, \quad (J > 0)$$

$$J = \frac{t^2}{U} \text{ 程度の大きさ}$$

$$\Delta E = - \sum_m \frac{\langle 0|t|m\rangle \langle m|t|0\rangle}{E_m - E_0} < 0$$



磁性イオン間の陰イオンを介するなど様々な交換パスがあり、相互作用の大きさ符号はパスに依存する

金森=グッドイナフ則 (経験則)

結晶場、p, d軌道の対称性より、符号に関する規則が得られる

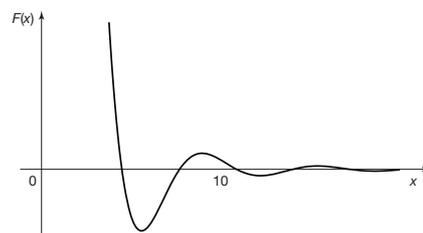
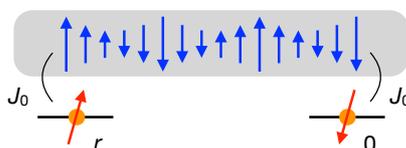
(c) 伝導電子を介した相互作用 (RKKY相互作用)

$$H_{\text{ex}} = -9\pi n^2 \frac{J_0^2}{\epsilon_F} F(2k_F r) S(r) \cdot S(0)$$

$$F(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^4}$$

ϵ_F : フェルミエネルギー

n : 電子密度

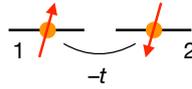


34

モット絶縁体 (磁性絶縁体)

2サイト問題

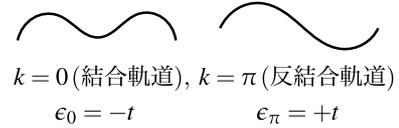
$$H_2 = -t \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma}) + U (n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow})$$



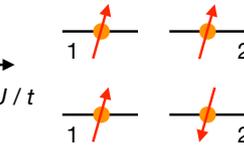
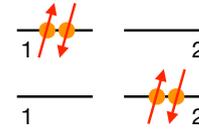
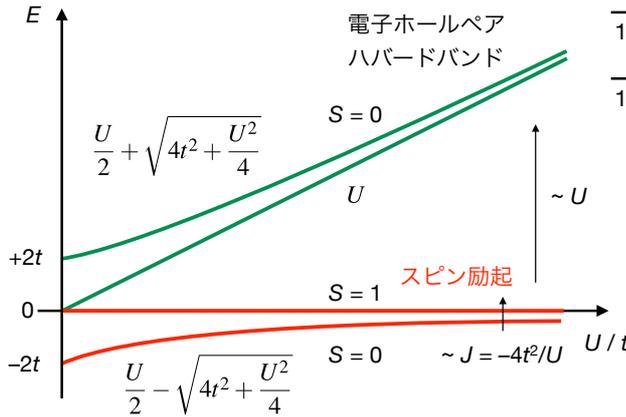
「運動量」表示 $c_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{1\sigma} + e^{-ik}c_{2\sigma})$

$$-t \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma}) = \sum_{\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}$$

$$\epsilon_k = -t \cos k$$



電子数 2 個



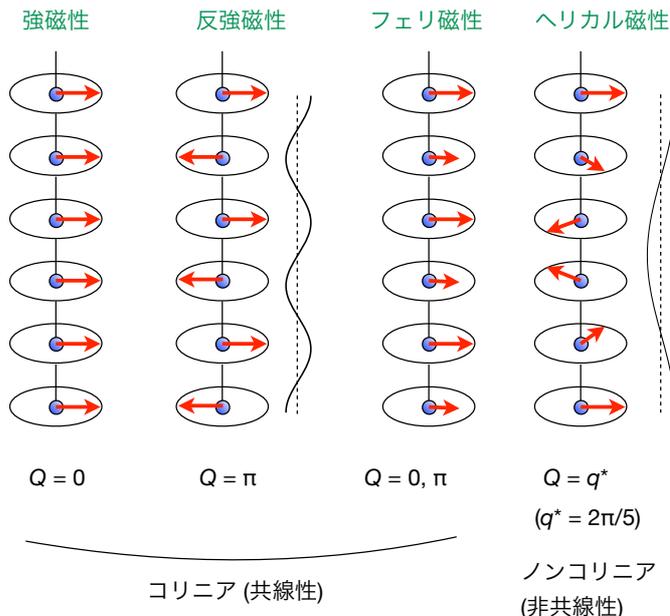
結合軌道に 2 個

各サイトに 1 個

$$H_2^{\text{eff}} = J \left(S_1 \cdot S_2 - \frac{1}{4} \right), \quad J = \frac{4t^2}{U}$$

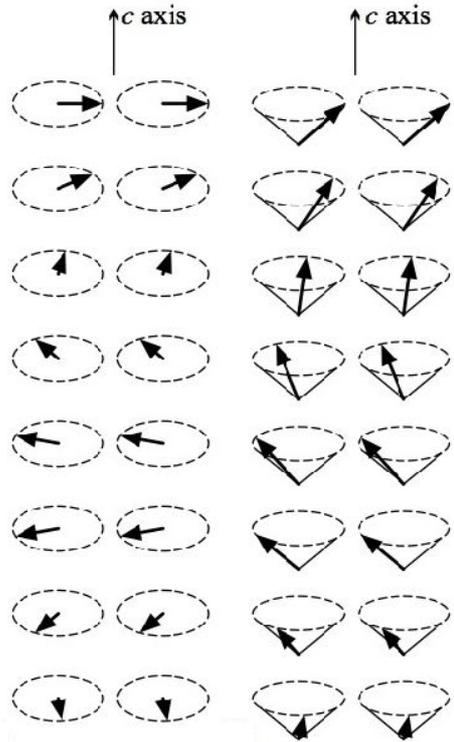
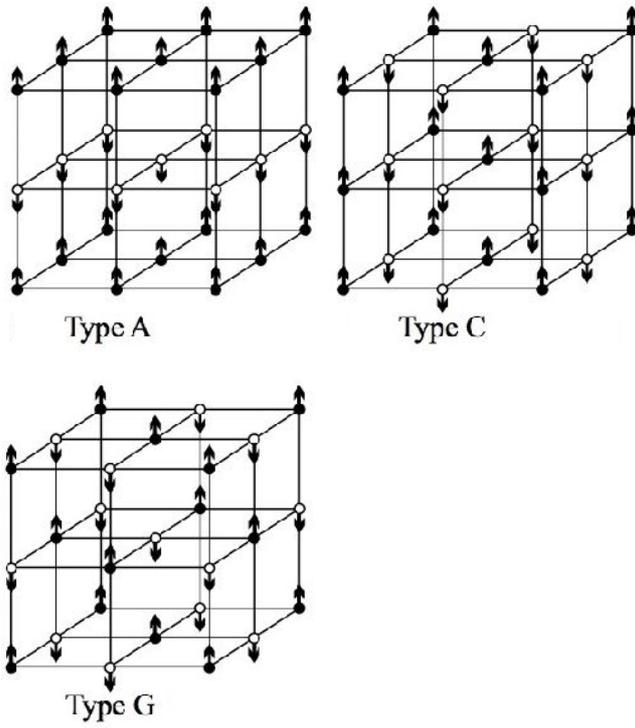
磁気秩序

秩序の種類



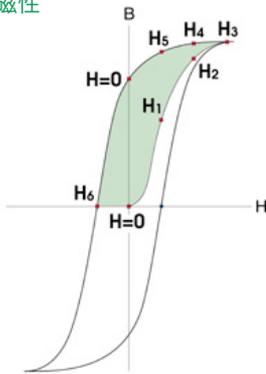
$$\mu(x) \propto \cos\left(\frac{Q}{a}x\right)$$

物質		T_C or T_N [K]
Ni	強磁性	627
Co	強磁性	1388
Fe	強磁性	1043
ZrZn ₂	強磁性	22
Sc ₃ In	強磁性	6
Gd	強磁性	292
La _{0.7} Sr _{0.3} MnO ₃	強磁性	360
Cr	反強磁性	308
MnO	反強磁性	116
MnTe	反強磁性	307
FeF ₂	反強磁性	79
FeO	反強磁性	198
CoCl ₂	反強磁性	25
CoO	反強磁性	291
NiO	反強磁性	525

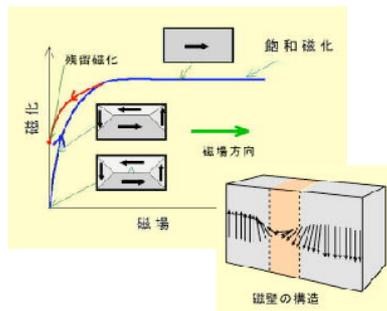


特徴

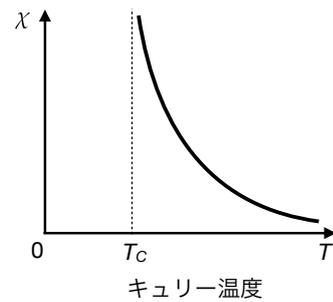
強磁性



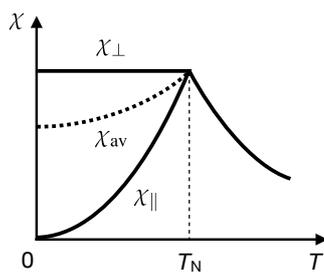
ヒステリシス (履歴)
磁区の移動による



キュリー=ワイス則 $\chi \propto (T - T_c)^{-1}$



反強磁性



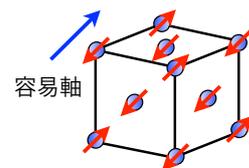
キュリー=ワイス則 $\chi \propto (T + \theta)^{-1}$

単結晶試料 (容易軸、困難軸)

異方性 $\chi_{\parallel} \neq \chi_{\perp}$

粉末試料

$$\chi_{av} = \frac{1}{3}\chi_{\parallel} + \frac{2}{3}\chi_{\perp}$$

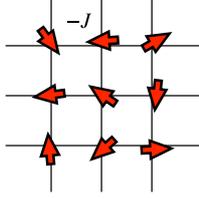


理論模型と秩序

理論模型 (局在スピンス)

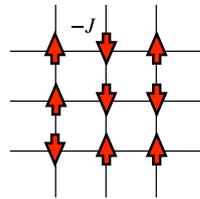
ハイゼンベルグ模型

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - h \cdot \sum_i S_i$$



イジング模型

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \cdot \sum_i S_i$$



$J > 0$ 強磁性的

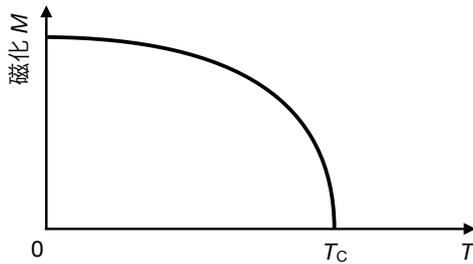
$J < 0$ 反強磁性的

$\langle i, j \rangle$ 最近接ペア

場合によっては

より長距離の相互作用も考慮する

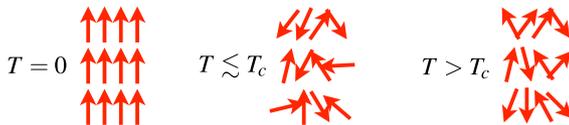
自発秩序



自由エネルギー：最小 $F = E - TS$

低温：エネルギー(E) 低、エントロピー(S) 小

高温：エネルギー(E) 高、エントロピー(S) 大



低温で自発的に秩序が発生する

39

1次元イジング模型

Nサイト模型

$$H = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - h \sum_{i=1}^N S_i$$

$$S_i = \pm 1$$

周期境界条件

$$S_{N+1} = S_1$$

パラメータ $K = \frac{J}{k_B T}$

$$B = \frac{h}{k_B T}$$

2サイト分配関数

$$Z_2 = \sum_{S_1} \sum_{S_2} e^{K(S_1 S_2 + S_2 S_1) + B(S_1 + S_2)} = \sum_{S_1} \sum_{S_2} e^{K S_1 S_2 + B(S_1 + S_2)/2} e^{K S_2 S_1 + B(S_2 + S_1)/2} = \sum_{S_1} \sum_{S_2} V(S_1, S_2) V(S_2, S_1)$$

$$= \text{Tr}(V^2)$$

転送行列
$$V = \begin{pmatrix} V(-1, -1) & V(-1, +1) \\ V(+1, -1) & V(+1, +1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K-B} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K+B} \end{pmatrix}$$

同様に

$$Z_3 = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \sum_{S_3} e^{K S_1 S_2 + B(S_1 + S_2)/2} e^{K S_2 S_3 + B(S_2 + S_3)/2} e^{K S_3 S_1 + B(S_3 + S_1)/2} = \text{Tr}(V^3)$$

$$Z_N = \text{Tr}(V^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \rightarrow \lambda_+^N$$

熱力学極限 ($N \rightarrow \infty$)

Vの固有値

$$\lambda_{\pm} = e^K \cosh B \pm \sqrt{(e^K \cosh B)^2 - 2 \sinh(2K)}$$

自由エネルギー

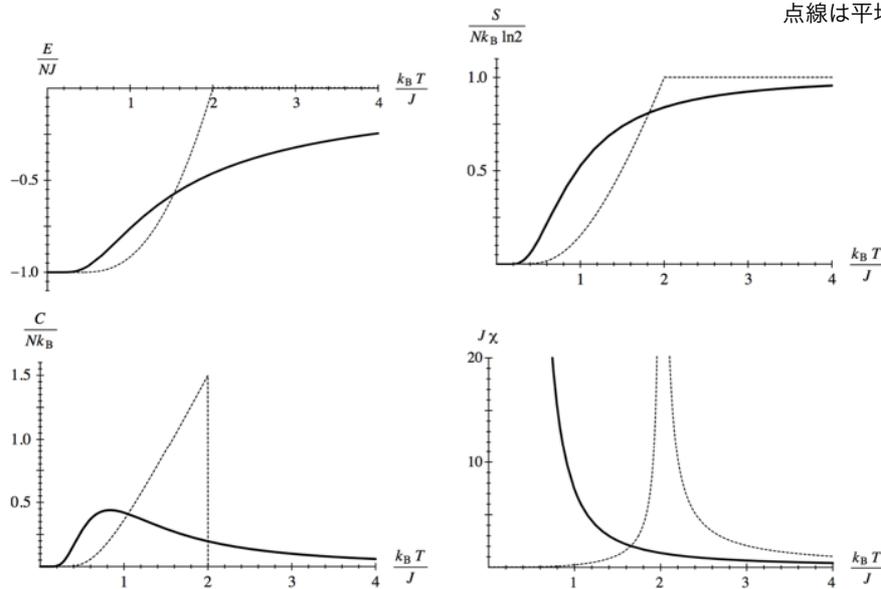
$$F = -N k_B T \ln \lambda_+$$

$$h=0 \quad E = -N J \tanh\left(\frac{J}{k_B T}\right) \quad S = -N k_B \left[\ln\left(2 \cosh \frac{J}{k_B T}\right) - \frac{J}{k_B T} \tanh \frac{J}{k_B T} \right]$$

$$\chi = \frac{e^{2J/k_B T}}{k_B T}$$

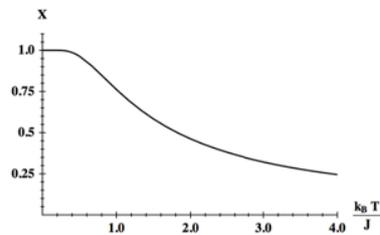
40

1次元強磁性イジング模型の熱力学量の温度変化



点線は平均場近似の結果

サイト相関



相転移は存在しない

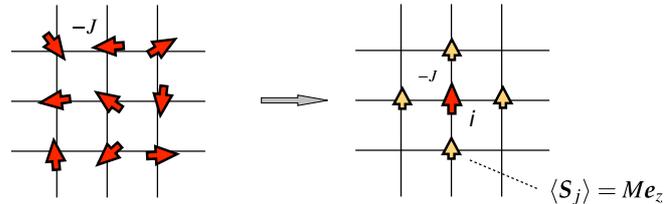
$$X = \langle S_i S_{i+1} \rangle = \tanh \frac{J}{k_B T}$$

低温でサイト相関が発達

平均場近似

ハイゼンベルグ模型 (S=1/2)

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - h \cdot \sum_i S_i$$



平均場近似

$$-J S_i \cdot \sum_j S_j \rightarrow -J S_i^z \langle S_j^z \rangle z$$

z : 最近接格子点数

$h \parallel z$

サイト相関 (揺らぎ) を無視

相互作用の相手が 増える (高次元) ほど良い近似

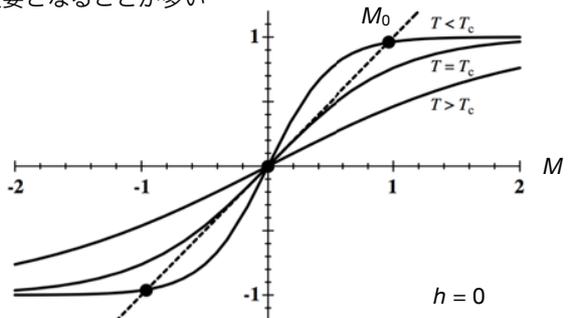
$$-J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i - M) \cdot (S_j - M)$$

$$H = -(h + zJ \langle S_j^z \rangle) \sum_i S_i^z = -h_{\text{eff}} \sum_i S_i^z$$

磁性は短距離相互作用の物理であり、揺らぎが重要となることが多い

有効磁場 $h_{\text{eff}} = h + zJM$ ($M = \langle S_j^z \rangle$)

磁化 $M = \sum_m \frac{\pm 1/2}{m} \frac{e^{-\beta h_{\text{eff}} m}}{\sum_m e^{-\beta h_{\text{eff}} m}} = \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{h + zJM}{2k_B T} \right)$



平均場 (自己無撞着) 方程式 磁気状態方程式

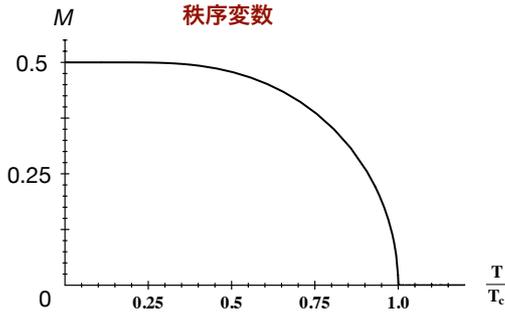
つじつまが合うように m を決める

$h = 0$ $T > T_c$: 解 $M = 0$

$T < T_c$: 解 $M = 0, \pm M_0$

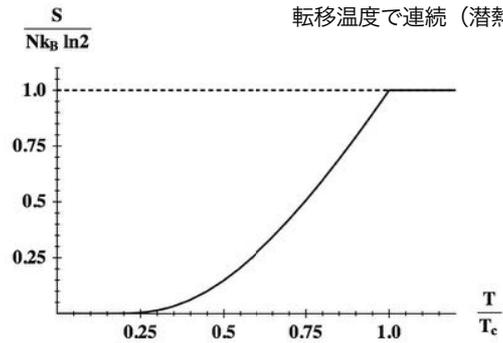
$$T_c = \frac{zJ}{4k_B} \left(T_c = \frac{S(S+1)zJ}{3k_B} \right)$$

磁化 秩序の有無を特徴づける量
秩序変数



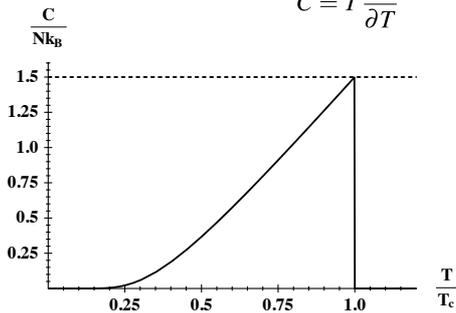
エントロピー 転移温度以下で秩序が急速に発達

転移温度で連続 (潜熱なし)

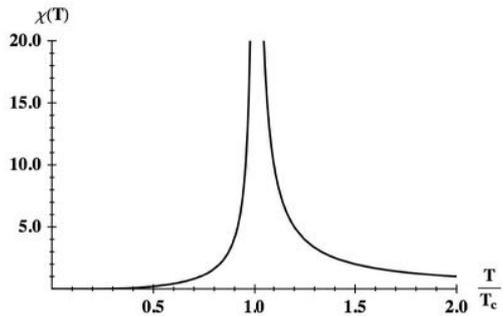


比熱 転移温度で不連続

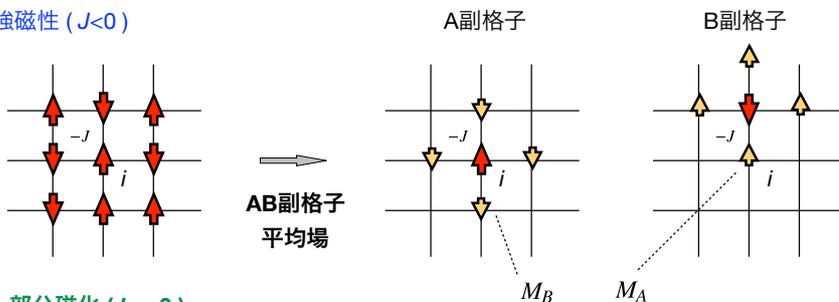
$$C = T \frac{\partial S}{\partial T}$$



帯磁率 転移温度で発散



反強磁性 ($J < 0$)



部分磁化 ($h = 0$)

ネール状態 固有状態ではない

$$M_A = \frac{1}{2} \tanh\left(-\frac{z|J|M_B}{2k_B T}\right)$$

$$M_B = \frac{1}{2} \tanh\left(-\frac{z|J|M_A}{2k_B T}\right)$$

$$M_B = -M_A \implies M_{A,B} = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{z|J|M_{A,B}}{2k_B T}\right)$$

強磁性の場合と形式的に同じ式

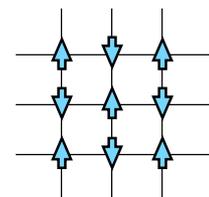
$$T_N = \frac{z|J|}{4k_B} \left(T_N = \frac{S(S+1)z|J|}{3k_B} \right)$$

一様磁化 $M_u = \frac{M_A + M_B}{2}$

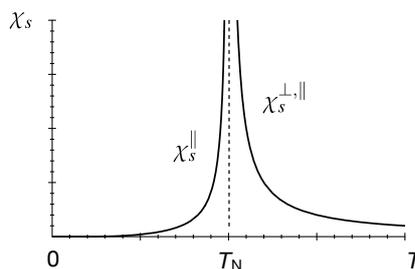
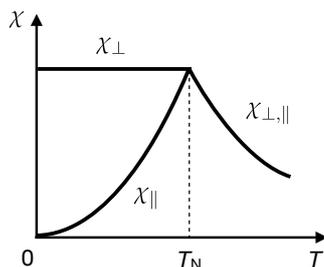
交替磁化 (秩序変数) $M_s = \frac{M_A - M_B}{2}$

一様磁化率 $\chi_\alpha = \lim_{h_\alpha \rightarrow 0} \frac{M_u^\alpha}{h_\alpha}$

交替磁化率 $\chi_s^\alpha = \lim_{h_s^\alpha \rightarrow 0} \frac{M_s^\alpha}{h_s^\alpha}$

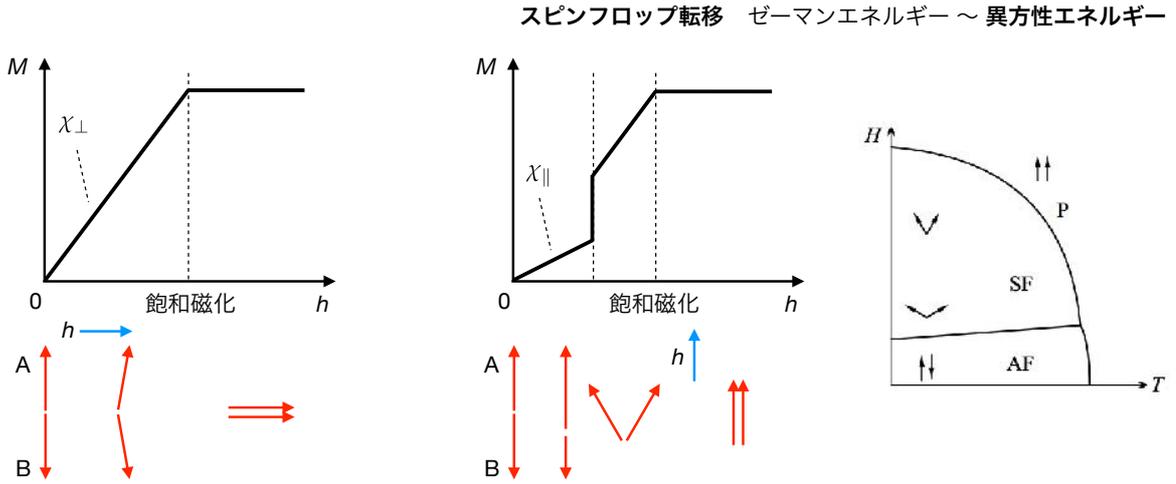


h_s 交替磁場 (秩序変数に共役な磁場)



χ_s^\perp は T_N 以下で常に発散 (等方性の現れ)

反強磁性体の磁化過程 ($T \ll T_N$)



等方的模型では、スピントロップ転移磁場はゼロ
自発磁化は磁場と常に垂直

異方性エネルギー

- ・ スピン軌道相互作用から生じる
- ・ $J=1$ 以上の場合に存在

$$(H_{ani} = DJ_z^2)$$

長距離秩序

対称性の自発的な破れ

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad S_i \rightarrow -S_i \text{ としてもハミルトニアンは不変 (対称性)}$$

⇒ 全スピンを反転してもエネルギーは変わらない

強磁性秩序とは？ 対称性を考慮すると、磁化は常にゼロ？

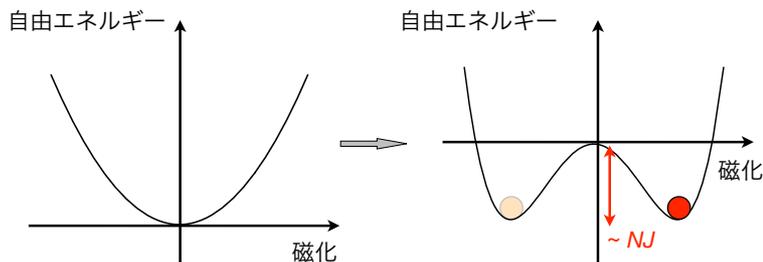


対称性の自発的な破れ (2次相転移)

ランダウの定義

cf. エーレンフェストの定義 (F の微係数の不連続性)

- 1次相転移: 秩序変数が不連続に変化 (対称性の低下を伴わない)
- 2次相転移: 秩序変数が連続的に変化 (対称性の低下を伴う)

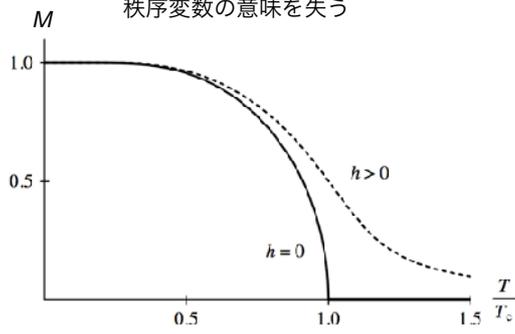


対称性の破れ: マクロ系別の状態へ移行不能

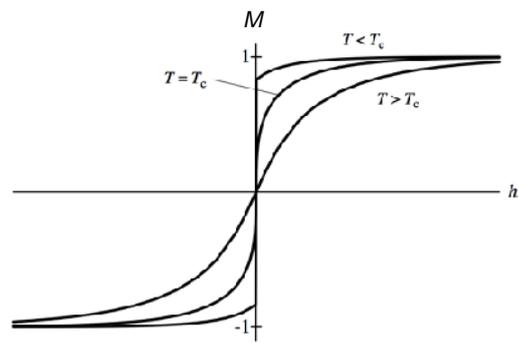
長距離秩序: 「剛性」の獲得

磁場下

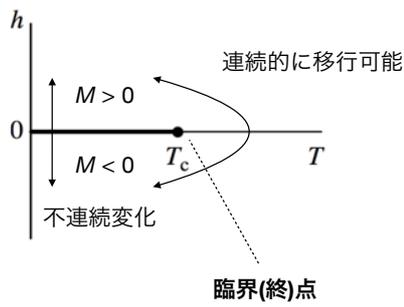
磁化 磁場をかけると対称性が低下し、秩序変数の意味を失う



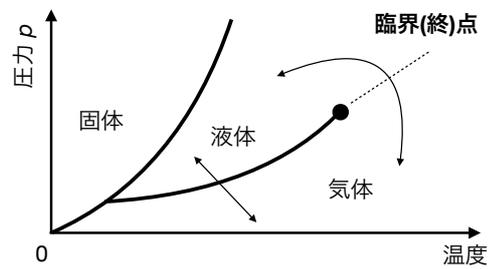
磁化過程 $T < T_c$ で磁化は $h=0$ で不連続に変化



温度-磁場相図



cf. 液体-気体転移 磁化 \Leftrightarrow 密度



秩序と揺らぎ

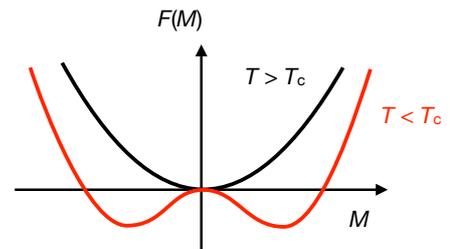
ギンツブルグ=ランダウ(GL)理論

2次相転移の一般論 (T_c 近傍：平均場的)

ランダウ理論 自由エネルギー(単位体積あたり)を磁化(秩序変数の候補) M の関数として、 $M=0$ の周りで展開

$$F(M) = F_0 + \frac{1}{2}aM^2 + \frac{1}{4}b(M^2)^2 - M \cdot B + \dots$$

- ・自由エネルギーは、等方的でありスカラー積のみが現れる
(自由エネルギーは、結晶の点群対称性に対して恒等表現である)
- ・3次以上の奇数次項は $M \rightarrow -M$ の対称性より消える
- ・ a は $T=T_c$ で符号を変える ($a = \alpha(T-T_c)$, $\alpha > 0$)
- ・ $|M| \rightarrow \infty$ での自由エネルギーの安定性より、 $b > 0$ 、 $T \sim T_c$ で温度依存性を無視
- ・平衡磁化は $F(M)$ 最小条件より決まる (磁気状態方程式)



T_c 近傍(臨界現象)の
平均場近似の結果が全て再現される

$$\frac{\partial F}{\partial M} = 0 = \alpha(T - T_c)M + bM^3 - B = 0$$

$$\Rightarrow M = \sqrt{\frac{\alpha(T_c - T)}{b}} \quad (T < T_c; B = 0) \quad M = \left(\frac{B}{b}\right)^{1/3}$$

$$\chi = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{1}{\alpha(T - T_c) + 3bM_{B=0}^2} = \begin{cases} \frac{1}{\alpha(T - T_c)} & (T > T_c) \\ \frac{1}{2\alpha(T_c - T)} & (T < T_c) \end{cases}$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\alpha}{2}M^2 = -\frac{\alpha^2}{2b}(T_c - T) \quad (T < T_c) \quad C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{\alpha^2 T}{2b} \quad (T < T_c)$$

$$S = 0 \quad (T > T_c)$$

$$C = 0 \quad (T > T_c)$$

$$\Delta C = \frac{\alpha^2 T_c}{2b}$$

臨界指数

- ・秩序変数の成分数、空間次元に依存する
- ・臨界指数のセットで特徴づけられる現象 = ユニバーサリティクラス

$$C \propto (T - T_c)^{-\alpha} \quad (T > T_c)$$

$$C \propto (T_c - T)^{-\alpha'} \quad (T < T_c)$$

$$M \propto (T_c - T)^\beta \quad (T < T_c)$$

$$\chi \propto (T - T_c)^{-\gamma} \quad (T > T_c)$$

$$\chi \propto (T_c - T)^{-\gamma'} \quad (T < T_c)$$

$$M \propto B^{1/\delta} \quad (T = T_c)$$

$$\xi \propto (T - T_c)^{-\nu} \quad \text{相関長 (後述)}$$

イジング模型の臨界指数

指数	実験 (3次元)	2次元	3次元 (MC)	平均場
α	0.110 ~ 0.116	0 (対数)	0.110(1)	0 (不連続)
β	0.316 ~ 0.327	1/8	0.3265(3)	1/2
γ	1.23 ~ 1.25	7/4	1.2372(5)	1
δ	4.6 ~ 4.9	15	4.789(2)	3
ν		1	0.6301(4)	1/2

スケーリング則 ユニバーサリティクラスによらず成立

$$\alpha + 2\beta + \gamma = \alpha + \beta(1 + \delta) = 2$$

ランダウ理論の問題点

- ・ $T \sim T_c$ では自由エネルギーが平坦になり、揺らぎが大きいはず？
- ・ $T = T_c$ は相転移点 (特異点)。自由エネルギーを正則な関数として展開してよいのか？

51

平均場近似との関係

自由エネルギー

$$F(T, h) = \frac{1}{2} zJM^2 - k_B T \ln \left[2 \cosh \left(\frac{h_{\text{eff}}}{2k_B T} \right) \right]$$

ルジャンドル変換 ($h \rightarrow M$)

$$F(T, M) = F(T, h) + Mh$$

$$= -2k_B T_c M^2 - k_B T \left[\ln 2 - \frac{1}{2} \left\{ (1+2M) \ln(1+2M) + (1-2M) \ln(1-2M) \right\} \right]$$

$$= -k_B T \ln 2 + 2k_B (T - T_c) M^2 + \frac{4k_B T}{3} M^4 + \frac{32k_B T}{15} M^6 + \dots$$

$$= F_0 + \frac{\alpha}{2} (T - T_c) M^2 + \frac{b}{4} M^4 + \dots$$

$$\left(\begin{array}{l} \ln \cosh \left(\frac{h_{\text{eff}}}{2k_B T} \right) = -\frac{1}{2} \ln(1 - 4M^2) \\ \frac{h_{\text{eff}}}{2k_B T} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+2M}{1-2M} \right) \\ k_B T_c = \frac{zJ}{4} \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{ll} F_0 = -k_B T_c \ln 2 \\ \alpha = 4k_B & b = \frac{16k_B T_c}{3} \end{array} \right)$$

磁化、感受率

$$M = -\frac{\partial F(h)}{\partial h} \quad \chi = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial h} = -\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial^2 F}{\partial h^2}$$



$$\frac{\partial F(M)}{\partial M} = \frac{\partial F}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial M} + h + M \frac{\partial h}{\partial M} = h$$

$$\lim_{M \rightarrow 0} \frac{\partial^2 F(M)}{\partial M^2} = \lim_{M \rightarrow 0} \frac{\partial h}{\partial M} = \chi^{-1}$$

$$\chi^{-1} = \alpha(T - T_c)$$

局所帯磁率

$$\chi_0 = \frac{1}{4k_B T} \quad h_{\text{eff}} = h + zJM$$

$$M = \chi_0 h_{\text{eff}} = \chi_0 (h + zJM)$$

$$M = \frac{\chi_0 h}{1 - \chi_0 zJ}$$

帯磁率

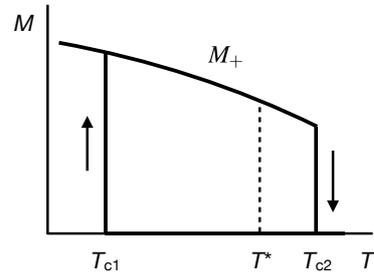
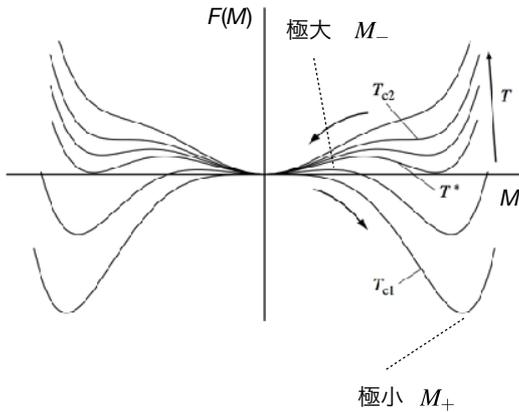
$$\chi = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial h} = \frac{\chi_0}{1 - \chi_0 zJ} = \frac{1}{4k_B (T - T_c)}$$

$$\chi^{-1} = \chi_0^{-1} - zJ$$

52

1次転移

$$F = F_0 + \frac{1}{2}\alpha(T - T_{c1})M^2 - \frac{1}{4}bM^4 + \frac{1}{24}cM^6 \quad (\alpha, b, c > 0) \quad M^4 \text{ の符号に注意}$$



- ・ヒステリシス
- ・秩序変数の不連続な変化

$$T_{c2} = T_{c1} + \frac{b^2}{\alpha c} \quad T^* = T_{c1} + \frac{3b^2}{4\alpha c}$$

$$M_{\pm} = \sqrt{\frac{2b}{c} \left(1 \pm \sqrt{\frac{T_{c2} - T}{T_{c2} - T_{c1}}} \right)}$$

臨界揺らぎ

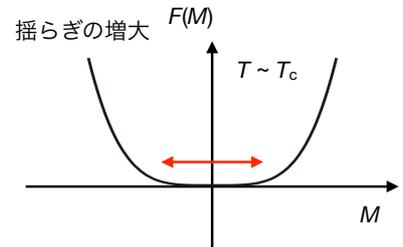
相関関数 $M \rightarrow M(r)$

自由エネルギー(単位体積あたり)

$$e^{-\beta F} = \int \mathcal{D}M e^{-S[M]} \quad \text{汎関数積分}$$

作用

$$S[M] = \beta \int_V dr \mathcal{F}(r)$$



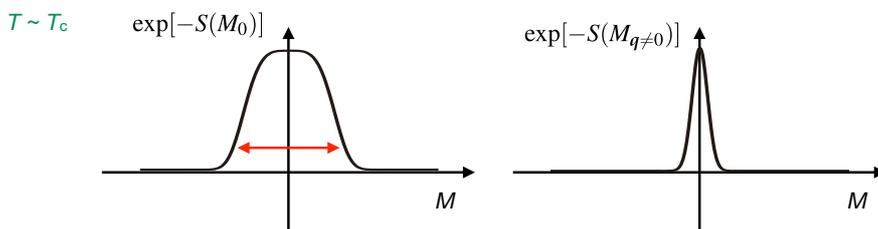
自由エネルギー密度

$$\mathcal{F}[M(r)] = \frac{1}{2}aM^2(r) + \frac{1}{4}bM^4(r) - M(r)B + c(\nabla M(r))^2 \quad \text{グラディエント項}$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{フーリエ変換 } M(r) = \sum_q M_q e^{iq \cdot r} \\ M_q = \frac{1}{V} \int_V dr M(r) e^{-iq \cdot r} \end{array} \right) \quad \mathcal{D}M = \prod_q dM_q \quad M_{-q} = M_q^* \quad M(r) : \text{実数} \quad (dM_q dM_{-q} = dM'_q dM''_q)$$

$$S[M] = \frac{\beta}{2} \sum_q (a + 2cq^2) |M_q|^2 + \frac{\beta b}{4} \sum_{q_i} M_{q_1} M_{q_2} M_{q_3} M_{q_4} \delta(\sum_i q_i = 0) - \beta M_0 B \quad \mathbf{q}=0 : \text{強磁性秩序変数 (+揺らぎ)}$$

$\mathbf{q} \neq 0$: 揺らぎ



鞍点近似

S[M] の極値で近似する (= GL理論)

$$e^{-\beta F} = \int \mathcal{D}M e^{-S[M]} \sim e^{-\beta F_{GL}} \implies F \sim F_{GL}$$

極値条件 $\frac{\partial F_{GL}}{\partial M_0} = 0$ $F_{GL} = \frac{1}{2}aM_0^2 + \frac{1}{4}bM_0^4 - M_0B$ $M_{q \neq 0} = 0$

ガウス近似

鞍点まわりの調和揺らぎを取り入れる

$$S[M] = \frac{\beta}{2} \sum_q (a + 2cq^2) |M_q|^2$$

ガウス模型 ・ 分配関数 Z はガウス積分で評価できる
・ 各波数の揺らぎは独立

相関関数 $\chi(r) = \langle M(r)M(0) \rangle = \sum_q \chi_q e^{iq \cdot r}$ $\chi_q^{-1} = \frac{\delta^2 F}{\delta M_q \delta M_{-q}}$ **汎関数微分**

ガウス模型 $\implies \chi_q = \frac{1}{a + 2cq^2}$ $\implies \chi(r) \propto \frac{1}{r^{(d-1)/2}} e^{-r/\xi}$ d : 空間次元

オルスタイン=ゼルニケ型 **湯川型**

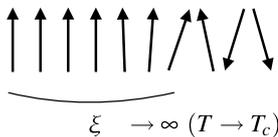
4次以上の揺らぎ

相関長 $\xi = \sqrt{\frac{2c}{\alpha(T - T_c)}} (T > T_c)$ $\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}$
 $\nu = 1/2$

- ・ 近似が必要
 - ・ 異なる波数の揺らぎの結合 (モード・モード結合)
- $$S_4[M] = \frac{\beta b}{4} \sum_{q_i} M_{q_1} M_{q_2} M_{q_3} M_{q_4} \delta(\sum_i q_i = 0)$$

摂動的取り扱い \implies **上部臨界次元 (d ≤ 4)** 強い発散：揺らぎが重要になる
 転移点に向かって **下部臨界次元 (d ≤ 2)** 弱い発散：有限温度の相転移の有無

スケーリング則とスケール不変性



臨界現象 ξ という唯一の長さスケールで特徴づけられる



スケーリング仮説

臨界領域では、長さのスケール変換に対して現象は不変

自由エネルギー(単位体積あたり) $F(t, h)$ $t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}$, $h \equiv \frac{g\mu_B B}{k_B T_c}$

スケール変換：長さの単位を s 倍 (粗視化) $\xi \rightarrow \xi/s (s > 1)$ ξ が少し短くなる (T_c から少し離れる)

n 回スケール変換 $t \rightarrow s^\eta t$ $h \rightarrow s^\zeta h$ $\implies t \rightarrow (s^\eta)^n t = (s^\eta)^n t$ $h \rightarrow (s^\zeta)^n h = (s^\zeta)^n h$

スケール不変 $F(t, h) \rightarrow \frac{1}{s^d} F(s^\eta t, s^\zeta h) = F(t, h)$

$s = t^{-1/\eta}$ と選べば $F(t, h) = t^{d/\eta} F(1, ht^{-\zeta/\eta}) \equiv t^{d/\eta} \Omega_t(ht^{-\zeta/\eta})$ $\Omega_t(x)$

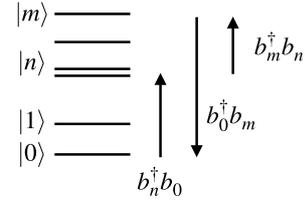
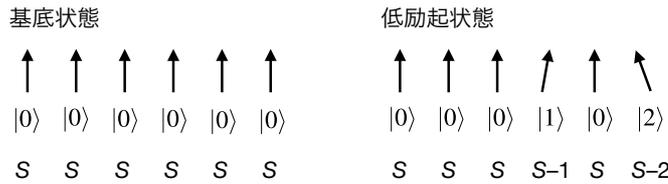
$s = h^{-1/\zeta}$ と選べば $F(t, h) = h^{d/\zeta} F(th^{-\eta/\zeta}) \equiv h^{d/\zeta} \Omega_h(th^{-\eta/\zeta})$ $\Omega_h(x)$ **スケーリング関数**

$$\left(\begin{array}{l} C(t, 0) \propto \frac{\partial^2 F(t, 0)}{\partial t^2} \propto t^{-(2-d/\eta)} \quad \alpha = 2 - \frac{d}{\eta} \quad \chi(t, 0) \propto \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial^2 F(t, h)}{\partial h^2} \propto t^{-(2\zeta-d)/\eta} \quad \gamma = \frac{2\zeta-d}{\eta} \\ M(t, 0) \propto \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial F(t, h)}{\partial h} \propto t^{(d-\zeta)/\eta} \quad \beta = \frac{d-\zeta}{\eta} \quad M(0, h) \propto \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\partial F(t, h)}{\partial h} \propto h^{(d-\zeta)/\zeta} \quad \delta = \frac{\zeta}{d-\zeta} \end{array} \right.$$

$\implies \alpha + 2\beta + \gamma = \alpha + \beta(1 + \delta) = 2$ **スケーリング則** **くりこみ群**

基底状態の(量子)揺らぎ

強磁性体のスピン波



スピン演算子 (ホルシュタイン=プリマコフ変換 : シュウィンガー表示)

$$\hat{S}^\alpha = \sum_{mn} S_{mn}^\alpha b_m^\dagger b_n \quad \sum_m b_m^\dagger b_m = 1 \quad [b_m, b_n^\dagger] = \delta_{mn}$$

ボゾン数で展開 $b_0, b_0^\dagger \approx \langle b_0 \rangle \equiv b \quad b_m^\dagger, b_m \ll b \quad (m \neq 0)$ $\sum_m' = \sum_m^{\neq 0}$

$$\hat{S}^\alpha = S_{00}^\alpha b^2 + \sum_m' (S_{m0}^\alpha b_m^\dagger + S_{0m}^\alpha b_m) b + \sum_{mn}' S_{mn}^\alpha b_m^\dagger b_n + \dots$$

$$\Downarrow \quad b^2 = 1 - \sum_m' b_m^\dagger b_m$$

$$\hat{S}^\alpha = S_{00}^\alpha + \sum_m' (S_{m0}^\alpha b_m^\dagger + S_{0m}^\alpha b_m) + \sum_{mn}' (S_{mn}^\alpha - S_{00}^\alpha \delta_{mn}) b_m^\dagger b_n + \dots$$

$$S^x = \sqrt{\frac{S}{2}} (a^\dagger + a) + \dots \quad S^y = \sqrt{\frac{S}{2}} i (a^\dagger - a) + \dots \quad S^z = S - a^\dagger a + \dots$$

$a = b_1, \quad a^\dagger = b_1^\dagger$

57

S=1/2 $S^x = \frac{1}{2}(a^\dagger + a) \quad S^y = \frac{i}{2}(a^\dagger - a) \quad S^z = \frac{1}{2} - a^\dagger a$

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = E_0 - J \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + zJ \sum_i a_i^\dagger a_i \quad E_0 = -\frac{zN}{2} \frac{J}{4}$$

$$= E_0 + \sum_q \epsilon_q a_q^\dagger a_q \quad \epsilon_q = \frac{zJ}{2} (\gamma_0 - \gamma_q) \quad \gamma_q = \frac{1}{z} \sum_{\eta}^{\text{n.n.}} e^{-iq \cdot \eta} \quad a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q e^{iq \cdot r_i}$$

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q^\dagger e^{-iq \cdot r_i}$$

- ・ 温度が高くなると、高次項が必要 (異なる波数のスピン波間の相互作用)
- ・ $\mathbf{q} \rightarrow 0$ で $\epsilon_q \sim \frac{J a^2}{2} q^2$ (S_{tot} が保存量であるため) [南部=ゴールドストーンモード] cf. 反強磁性の場合

物理量 ($T \ll T_c$)

磁化の縮み $\frac{M}{g\mu_B N} = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_i \langle a_i^\dagger a_i \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_q n(\epsilon_q)$

$$\sim \frac{1}{2} - \zeta \left(\frac{3}{2} \right) \left(\frac{k_B T}{2\pi J} \right)^{3/2} \left[S - \zeta \left(\frac{3}{2} \right) \left(\frac{k_B T}{4\pi JS} \right)^{3/2} \right]$$

ボーズ分布関数

$$n(x) = \frac{1}{e^{x/k_B T} - 1}$$

- ・ Sが小さいほど縮みが大きい
- ・ 平均場(指数関数)とは異なるべき

比熱 $E \sim E_0 + 6\pi JSN \zeta \left(\frac{5}{2} \right) \left(\frac{k_B T}{4\pi JS} \right)^{5/2}$

$$C \sim \frac{15}{4} N k_B \zeta \left(\frac{5}{2} \right) \left(\frac{k_B T}{4\pi JS} \right)^{3/2}$$

58

反強磁性体のスピン波 量子化軸が反対

Aサイト $S^x = \sqrt{\frac{S}{2}}(a^\dagger + a)$ $S^y = \sqrt{\frac{S}{2}}i(a^\dagger - a)$ $S^z = S - a^\dagger a$
 Bサイト $S^x = \sqrt{\frac{S}{2}}(b + b^\dagger)$ $S^y = \sqrt{\frac{S}{2}}i(b - b^\dagger)$ $S^z = -S - b^\dagger b$

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = E_0 + |J|S \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j + a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger)$$

$$= E_0 + z|J|S \sum_q^{\text{MBZ}} [a_q^\dagger a_q + b_q^\dagger b_q + \gamma_q (a_q b_q + a_q^\dagger b_q^\dagger)]$$

ネール状態のエネルギー

$$E_0 = -\frac{Nz}{2}|J|S^2$$

$$a_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q^{\text{MBZ}} a_q e^{iq \cdot r_i}$$

$$b_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q^{\text{MBZ}} b_q e^{-iq \cdot r_j}$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{ボゴリューボフ変換により対角化} \\ a_q = \alpha_q \cosh \theta_q - \beta_q^\dagger \sinh \theta_q \\ b_q = -\alpha_q^\dagger \sinh \theta_q + \beta_q \cosh \theta_q \end{array} \right. \quad \left. \begin{array}{l} \tanh(2\theta_q) = \gamma_q \\ [\alpha_q, \alpha_q^\dagger] = [\beta_q, \beta_q^\dagger] = 1 \\ \text{その他の交換関係はゼロ} \end{array} \right)$$

ゼロ点振動なしの基底エネルギー

$$E'_0 = E_0 - \frac{Nz}{2}|J|S = -\frac{Nz}{2}|J|S(S+1)$$

$$= E'_0 + \sum_q^{\text{MBZ}} \epsilon_q (\alpha_q^\dagger \alpha_q + \beta_q^\dagger \beta_q + 1)$$

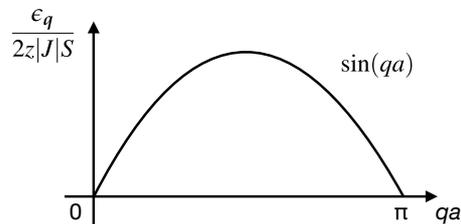
励起モードは2つ (無磁場では縮退)

$$\epsilon_q = 2z|J|S \sqrt{1 - \gamma_q^2}$$

$$\epsilon_q \sim \sqrt{2z|J|S} q a$$

q は Q から測った波数ベクトルの大きさ

1次元鎖の場合



基底状態 $E_g = E'_0 + \sum_q^{\text{MBZ}} \epsilon_q$ $E'_0 < E_g < E_0$

スピンの縮み $\langle S^z \rangle = S - \Delta S$ ネール状態は厳密な固有状態ではないので、量子ゆらぎによってスピンは縮む

$$\Delta S = \frac{2}{N} \sum_q^{\text{MBZ}} \langle a_q^\dagger a_q \rangle = \frac{2}{N} \sum_q^{\text{MBZ}} [\cosh^2 \theta_q \langle \alpha_q^\dagger \alpha_q \rangle + \sinh^2 \theta_q (\langle \beta_q^\dagger \beta_q \rangle + 1)] = \frac{2}{N} \sum_q^{\text{MBZ}} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_q^2}} - 1 \right)$$

比熱 $C = \frac{4\pi^2}{15} N k_B \left(\frac{k_B T}{\sqrt{2z|J|S}} \right)^3$

- ・1次元ではネール秩序は安定でない
- ・スピン波近似は次元やSが大きいほど良い

格子	$-E_g / E_0$	C/Nk_B	ΔS
1次元鎖	$1+0.363/S$	$\frac{2\pi}{3} \left(\frac{k_B T}{z J S} \right)$	発散
正方格子	$1+0.158/S$	$\frac{14.42}{\pi} \left(\frac{k_B T}{z J S} \right)^2$	0.197
単純立方格子	$1+0.097/S$	$\frac{4\sqrt{3}\pi^2}{5} \left(\frac{k_B T}{z J S} \right)^3$	0.078

ベーテ仮説によって厳密解：長距離秩序なし

$-E_g / E_0 = 1.339$ ($\Delta S = -0.193$) [QMC, $S=1/2$]

かなり良い近似になっている

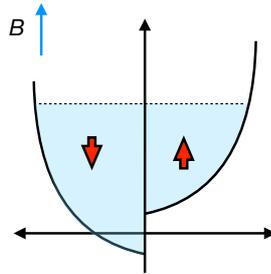
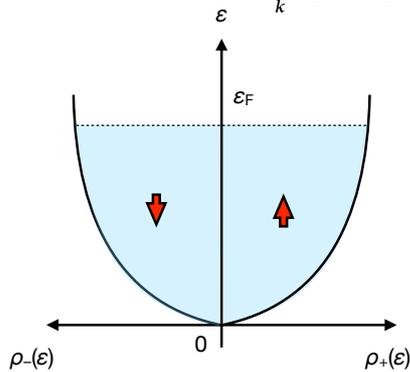
遍歴電子の磁性

61

自由電子の磁性

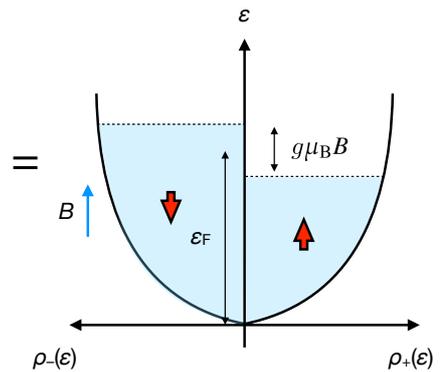
パウリ常磁性

$$H = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{g}{2} \mu_B \sigma \cdot B$$



$$D(\epsilon_F) = \frac{3N}{2\epsilon_F} = \frac{Vm}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m\epsilon_F}$$

(スピン自由度を含む)



フェルミ縮退 $N_{\text{eff}} \sim \frac{k_B T}{\epsilon_F} N$ 活性化自由度の数

スピンあたりの
状態密度 @ ϵ_F

$$\frac{g\mu_B B}{\epsilon_F} \sim 10^{-5} \quad (B = 10 \text{ T})$$

$$E \sim N_{\text{eff}} \times (k_B T) = \frac{N}{\epsilon_F} (k_B T)^2 \sim D(\epsilon_F) (k_B T)^2$$

$$\rho_F \equiv \frac{D(\epsilon_F)}{2}$$

フェルミ準位付近の少数の
電子だけが磁性に寄与する

$$\Rightarrow C \sim D(\epsilon_F) k_B^2 T \quad \text{電子比熱 (温度に比例)}$$

$$M \sim N_{\text{eff}} \times \frac{(g\mu_B/2)^2}{k_B T} B = \frac{(g\mu_B/2)^2}{k_B T} \frac{N}{\epsilon_F} B \sim \mu_B^2 D(\epsilon_F) B$$

キュリー則

$$\Rightarrow \chi_{\text{Pauli}} \sim \mu_B^2 D(\epsilon_F) \quad \text{パウリ帯磁率 (温度に依らない)}$$

アルカリ金属

$$\gamma = \frac{\pi^2 k_B^2}{3} D(\epsilon_F) \sim 1 \text{ mJ/mol}\cdot\text{K}^2$$

$$\chi_{\text{Pauli}} = \mu_B^2 D(\epsilon_F) \sim 10^{-4} \text{ emu}^*/\text{mol}$$

62

動的帯磁率

以下 $-\frac{g}{2}\mu_B \equiv 1$

B はフーリエ成分(\mathbf{q}, ω)の磁場の大きさ

時間・空間変化する磁場に対する電子の応答 $B(\mathbf{r}, t) = B e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$

磁化密度演算子 $\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \sigma \psi_{\beta}(\mathbf{r})$

動的帯磁率 $\langle \sigma_{\mathbf{q}}^i \rangle = \sum_j \chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) B^j$

$\chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt \langle [\sigma_{\mathbf{q}}^i(t), \sigma_{-\mathbf{q}}^j] \rangle e^{i\omega t} = \langle \langle \sigma^i; \sigma^j \rangle \rangle$

遅延グリーン関数 (のフーリエ変換)

ハイゼンベルグ表示 $A(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}$

$\chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{Z} \sum_{nm} \langle n | \sigma_{\mathbf{q}}^i | m \rangle \langle m | \sigma_{-\mathbf{q}}^j | n \rangle \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\hbar\omega + i0 + E_n - E_m}$

$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H})$

$\langle \dots \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta H} \dots)$

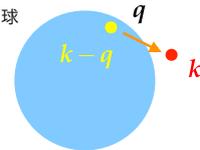
$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$

立方対称、常磁性相 $\sigma^{\pm} = \sigma^x \pm i\sigma^y$

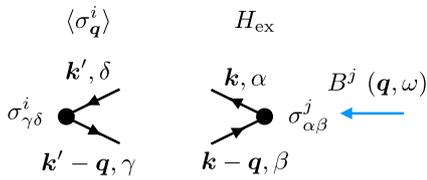
$(xx)=(yy)=(zz)$

$\chi_{+-} = \chi_{xx} + \chi_{yy} = 2\chi_{zz}$

フェルミ球

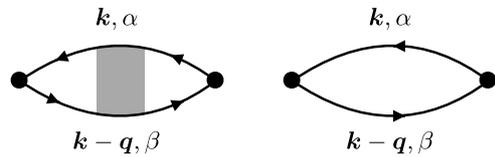


ファインマンダイアグラムによる表現



相互作用あり

相互作用なし



実際にはエネルギー依存性もあるので
次のように置き換える

$k \rightarrow (k, \epsilon)$

$k - q \rightarrow (k - q, \epsilon - \hbar\omega)$

相互作用のない感受率 $\chi_{zz}(\mathbf{q}, \omega) = 2\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$

$q \rightarrow 0, \omega = 0$ 極限

$\chi_{zz}(0, 0) = \frac{2}{N} \sum_k \left(-\frac{\partial f(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) = 2 \int d\epsilon \rho(\epsilon) \left(-\frac{\partial f(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) = D(\epsilon_F)$

パウリ帯磁率 [$x = (-g\mu_B/2)^2$]

$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{f(\epsilon_k) - f(\epsilon_{k-q})}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_k + \hbar\omega + i0}$

リントハルト関数

$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$T=0$

$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\rho_F}{4x} [I(y_+) - I(y_-)]$

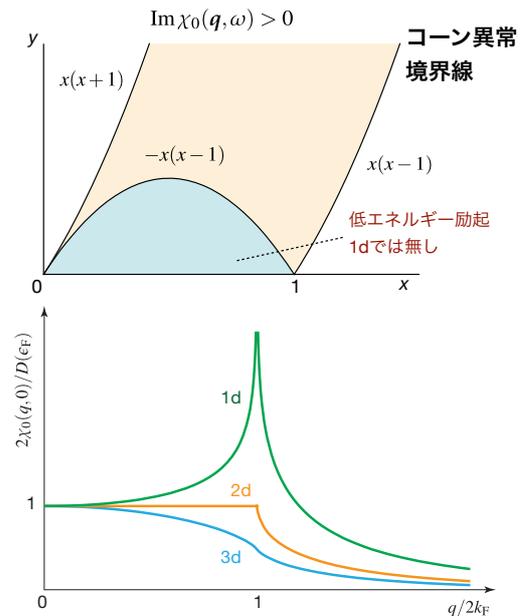
$\sim \rho_F \left[1 - \frac{x^2}{3} - \left(\frac{y}{x}\right)^2 + \frac{i\pi y}{2x} \right] \quad (x \rightarrow 0, y/x \rightarrow 0)$

$\chi_0^{1d}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\rho_F^{1d}}{4x} \ln \left[\frac{(y_+ + 1)(y_- - 1)}{(y_+ - 1)(y_- + 1)} \right]$

$\rho_F^{1d} = \frac{m}{\pi k_F}$

$\chi_0^{2d}(\mathbf{q}, \omega) = \rho_F^{2d} \left[1 - \frac{1}{2x} \left(\sqrt{y_+^2 - 1} - \sqrt{y_- + 1} \sqrt{y_- - 1} \right) \right]$

$\rho_F^{2d} = \frac{m}{2\pi}$



$\frac{1}{N} \sum_k \frac{f(\epsilon_k)}{\hbar\omega + i0 + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k} = \frac{\rho_F}{4x} \int_0^1 dk \int_{-1}^1 dt \frac{k^2}{y_+ - kt} = \frac{\rho_F}{4x} I(y_+)$

$x = q/2k_F$

$y = (\hbar\omega + i0)/4\epsilon_F$

$y_{\pm} = y/x \pm x$

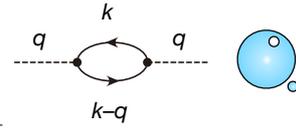
$I(x) = x - \frac{1}{2}(1-x^2) \ln \left| \frac{x-1}{x+1} \right| - \frac{i\pi}{2}(1-x^2)\theta(1-x^2)$

相互作用のない感受率

電子・ホール励起

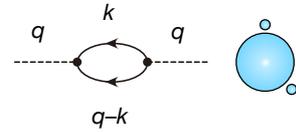
$$\chi_c(\mathbf{q}, \omega) = \langle \langle n_{\mathbf{q}}; n_{-\mathbf{q}} \rangle \rangle = 2\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$$

$$\chi_{zz}(\mathbf{q}, \omega) = \left(-\frac{g\mu_B}{2}\right)^2 2\chi_0(\mathbf{q}, \omega) \quad \chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})}{\hbar\omega + i0 - \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}$$



電子・電子励起

$$\psi_0(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - f(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f(\epsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}})}{\hbar\omega + i0 - \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}}$$



一様感受率 $\chi_0(0,0) = \int d\epsilon \rho(\epsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) = \rho_F$

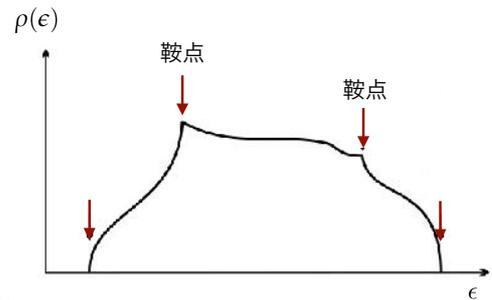
スピン格子緩和時間 (コリン八則)

$$\frac{1}{TT_1} \propto \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} \frac{\sum_{\mathbf{q}} \text{Im} \chi_0(\mathbf{q}, \omega_0)}{\pi \omega_0} = \int d\epsilon \rho(\epsilon)^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) = \rho_F^2$$

クーパー不安定性

$$\psi_0(0,0) = \int d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\tanh(\beta\epsilon/2)}{2\epsilon} \sim \rho_F \ln \left(\frac{2e^{\gamma} \omega_c}{\pi T}\right)$$

ファン・ホープ特異点



オイラーの定数 $\gamma \sim 0.5772$

平均場近似

基本模型

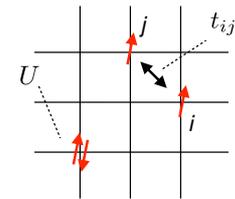
cf. 原子内クーロン相互作用

$$H_C = U \sum_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{m_1 \neq m_2} U'(m_1, m_2) n_{m_1} n_{m_2} - \frac{1}{4} \sum_{m_1 \neq m_2} J(m_1, m_2) \sigma_{m_1} \cdot \sigma_{m_2} + \dots$$

ハバード模型 (単一軌道) $H = H_K + H_C$

運動エネルギー $H_K = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \sigma B) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}$ $\epsilon_{\mathbf{k}} = \sum_j t_{ij} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}$

クーロン斥力 $H_C = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ $c_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{i\sigma}$, ($c_{i\sigma} \equiv \psi_{\sigma}(\mathbf{r}_i)$)



波の言葉と粒子の言葉が共存：強相関系

強磁性平均場 $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{1}{4} [(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) - (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})] \equiv \frac{1}{4}(n_i^2 - m_i^2)$

平均場近似

揺らぎの2乗

磁性に関しては引力

平均磁化 (サイトあたり)

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = -\frac{1}{4} [2m_i m - m^2 + (m_i - m)^2] + \frac{1}{4} n_i^2$$

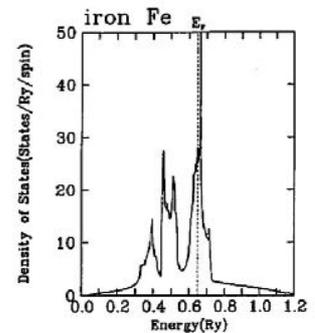
$$m = \langle m_i \rangle$$

$$\sim -\frac{m}{2} m_i + \text{const.} = -\frac{m}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{const.}$$

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \sigma B_{\text{eff}}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

平均場方程式 $m = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(f(\epsilon_{\mathbf{k}} - B_{\text{eff}}) - f(\epsilon_{\mathbf{k}} + B_{\text{eff}}) \right)$

$$B_{\text{eff}} = B + \frac{Um}{2} \implies \begin{cases} m = 2\chi_0 B_{\text{eff}} = 2\chi_0 \left(B + \frac{Um}{2} \right) \\ \chi = \frac{m}{B} = \frac{2\chi_0}{1 - U\chi_0} = \frac{2\rho_F}{1 - \rho_F U} \end{cases}$$



ストーナー条件 $U > U_c = \frac{1}{\rho_F}$

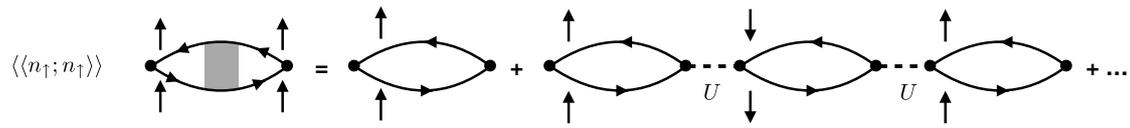
- ・Uがバンド幅程度より大きい
- ・フェルミ準位の状態密度が大きい

ストーナー(増強)因子 $(1 - \rho_F U)^{-1}$

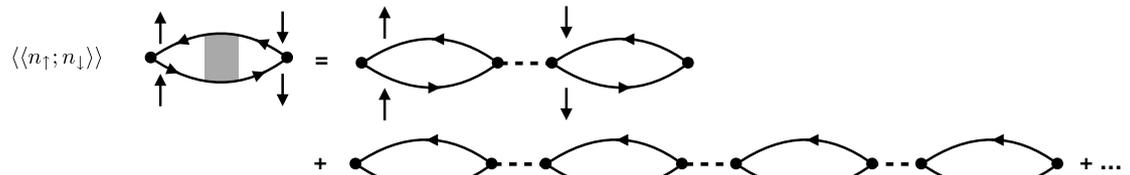
ファインマンダイアグラムでは

$$\chi_{zz} = \langle \langle n_{\uparrow} - n_{\downarrow}; n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \rangle \rangle = 2(\langle \langle n_{\uparrow}; n_{\uparrow} \rangle \rangle - \langle \langle n_{\uparrow}; n_{\downarrow} \rangle \rangle)$$

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



$$\langle \langle n_{\uparrow}; n_{\uparrow} \rangle \rangle = \chi_0 + (-U)^2 \chi_0^3 + (-U)^4 \chi_0^5 + \dots = \frac{\chi_0}{1 - U^2 \chi_0^2}$$



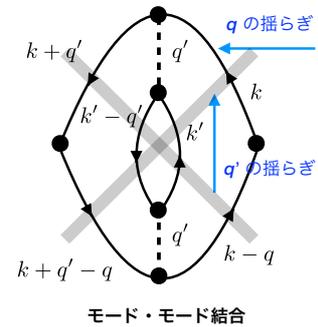
$$\langle \langle n_{\uparrow}; n_{\downarrow} \rangle \rangle = (-U) \chi_0^2 + (-U)^3 \chi_0^4 + \dots = \frac{-U \chi_0^2}{1 - U^2 \chi_0^2}$$

$$\chi_{zz} = 2 \left(\frac{\chi_0}{1 - U^2 \chi_0^2} - \frac{-U \chi_0^2}{1 - U^2 \chi_0^2} \right) = \frac{2\chi_0}{1 - U\chi_0}$$

cf. 電荷感受率 (圧縮率)

$$\chi_c = \frac{2\chi_0}{1 + U\chi_0}$$

平均場の結果が再現された!



乱雑位相近似 (RPA)

$$\chi_{zz} \rightarrow \chi_{zz}(\mathbf{q}, \omega) \quad \text{としても同じ}$$

$$\chi_0 \rightarrow \chi_0(\mathbf{q}, \omega) \quad \text{計算が成り立つ} \quad \Rightarrow \quad \chi_{zz}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}$$

\mathbf{Q} は $\chi_0(\mathbf{q}, 0)$ の最大値を与える波数ベクトル $\chi_0(\mathbf{Q}, 0) = 1/U$ 波数 \mathbf{Q} の磁気秩序が発生

69

反強磁性平均場

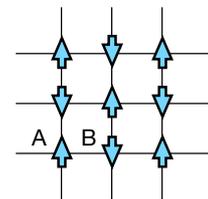
Aサイト $B_{\text{eff}}^A = B_s + \frac{Um_s}{2} \equiv \Delta \quad \langle m_A \rangle = m_s$

Bサイト $B_{\text{eff}}^B = -\Delta \quad \langle m_B \rangle = -m_s$

まとめて

$$B_{\text{eff}}^i = \Delta e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i}$$

$$\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a) \text{ 等}$$



$$\left(\begin{array}{l} -\sum_i B_{\text{eff}}^i m_i = -\Delta \sum_{k\sigma} \sigma c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma} \\ \sum_k (\dots) = \sum_k^{\text{MBZ}} (\dots) + \sum_k^{\text{MBZ}} (\dots)_{k \rightarrow k+Q} \\ = -\Delta \sum_{k\sigma} \sigma (c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma} + c_{k+Q\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) \end{array} \right) \left(\begin{array}{l} \sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} = \sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i} \sum_k e^{ik \cdot \mathbf{r}_i} c_{k\sigma}^\dagger \sum_{k'} e^{-ik' \cdot \mathbf{r}_i} c_{k'\sigma} \\ = \sum_{k,k'} \delta_{k',k+Q} c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} = \sum_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma} \end{array} \right)$$

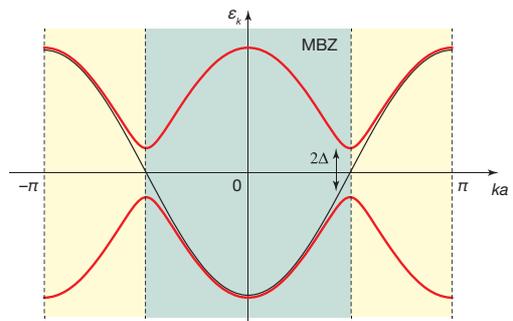
$$H_{\text{MF}} = \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger \ c_{k+Q\sigma}^\dagger) \begin{pmatrix} \epsilon_k & -\sigma\Delta \\ -\sigma\Delta & \epsilon_{k+Q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\sigma} \\ c_{k+Q\sigma} \end{pmatrix}$$

直交変換

$$\begin{pmatrix} c_{k\sigma} \\ c_{k+Q\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_k & \sigma \sin \theta_k \\ -\sigma \sin \theta_k & \cos \theta_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k\sigma} \\ b_{k\sigma} \end{pmatrix}$$

$$\tan 2\theta_k = \frac{-2\Delta}{\epsilon_k - \epsilon_{k+Q}}$$

$$H_{\text{MF}} = \sum_{k\sigma} (E_k^a a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + E_k^b b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma})$$



$$\epsilon_k = -\cos(ka)$$

$$E_k^{a,b} = \frac{\epsilon_k + \epsilon_{k+Q}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_k - \epsilon_{k+Q}}{2} \right)^2 + \Delta^2}$$

70

平均場方程式

$$m_s = \frac{1}{N} \sum_{i\sigma} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \sigma \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma} \rangle = -\frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \sin(2\theta_k) \left(\langle a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \rangle - \langle b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} \rangle \right)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k^{\text{MBZ}} \frac{\Delta}{\sqrt{(\epsilon_k - \epsilon_{k+Q})^2}} \left(f(E_k^a) - f(E_k^b) \right)$$

粒子数密度と化学ポテンシャルとの関係式と合わせて解く

$$n = \frac{2}{N} \sum_k^{\text{MBZ}} \left(f(E_k^a) + f(E_k^b) \right)$$

交替磁化率

$$m_s = 2\chi_0(\mathbf{Q}, 0)\Delta = 2\chi_0(\mathbf{Q}, 0) \left(B_s + \frac{Um_s}{2} \right) \implies \chi_s = \chi_{zz}(\mathbf{Q}, 0) = \frac{m_s}{B_s} = \frac{2\chi_0(\mathbf{Q}, 0)}{1 - U\chi_0(\mathbf{Q}, 0)}$$

ネスティング

ネスティング条件 $\epsilon_{k+Q} = -\epsilon_k$

$$\chi_0(\mathbf{Q}, 0) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{f(\epsilon_{k+Q}) - f(\epsilon_k)}{\epsilon_k - \epsilon_{k+Q}} \implies \chi_0(\mathbf{Q}, 0) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\tanh(\beta(\epsilon_k - \mu)/2)}{2\epsilon_k} \sim -\rho_F \ln(T/\omega_c)$$

対数発散

cf. $\epsilon_k = -\cos(ka)$

ハーフフィリング

超伝導

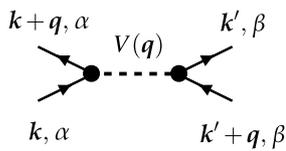
平均場近似の妥当性

- ・高次元ほど揺らぎが小さく、良い近似
- ・低温では熱揺らぎが小さく、良い近似（量子揺らぎが重要でなければ）
- ・磁化率の温度依存性が正確ではない
- ・転移温度が一桁ほど高く評価される

ファインマンダイアグラムによる表現

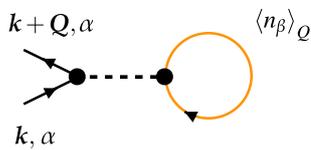
二体相互作用

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \sum_{q,k,k'} V(q) c_{k+q\alpha}^\dagger c_{k'\beta}^\dagger c_{k'+q\beta} c_{k\alpha}$$

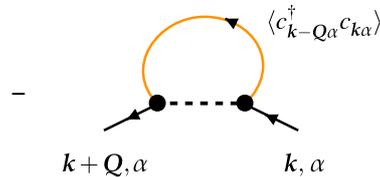


$$\sim \sum_{k\alpha} c_{k+Q\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \cdot \frac{V(Q)}{2} \sum_{\beta} \langle n_{\beta} \rangle_Q - \sum_{k\alpha} c_{k+Q\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \cdot \frac{V(Q)}{2} \langle c_{k-Q\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \rangle$$

平均場近似

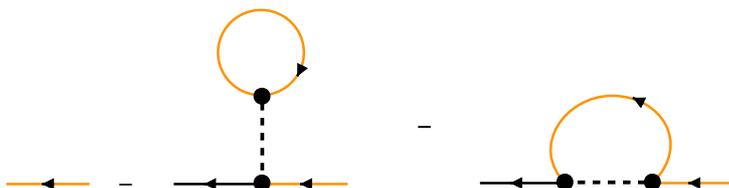


ハートリー項



フォック項 (ハバード模型ではゼロ)

自己無撞着方程式



自己無撞着くりこみ理論 (SCR)

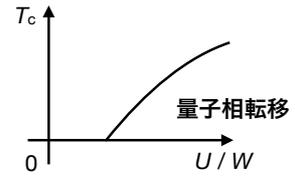
守谷=川畑

cf. 臨界揺らぎ

$$e^{-\beta F} = \int \mathcal{D}M e^{-S[M]} \quad S[M] = \beta \int_V dr \mathcal{F}(r)$$

自由エネルギー密度 (量子揺らぎも含むように拡張) $M(\mathbf{r}, \tau) = M(x)$

$$S[M] = \int_0^\beta d\tau \int_V dr \left[\frac{\chi^{-1}(x)}{2} M^2(x) + \frac{b}{4} M^4(x) \right]$$



$T_c \sim 0$ 近傍では、(量子)揺らぎが重要

$$\delta_0 = \chi_0^{-1}(0, 0) - U$$

cf. リントハルト関数

$$\chi^{-1} = \chi_0^{-1}(q) - U \sim \delta_0 + Aq^2 + \frac{|\omega_n|}{\Gamma_q}$$

$$A = (12k_F^2 \chi_0)^{-1}$$

$$\omega_n = 2\pi T n \quad \text{松原振動数}$$

$$\Gamma_q = \frac{4\epsilon_F}{\chi_0 \pi \hbar k_F} q$$

q に比例するのは強磁性モーメントが保存量であることの反映
反強磁性の場合は、 q によらない定数

$$\Gamma_q = \Gamma q^{z-2}$$

z : 動的指数 ($z=3$: 強磁性、 $z=2$: 反強磁性)

有効次元 $d+z$ の臨界現象に見える

$$S[M] = \frac{\beta}{2} \sum_n \sum_q \chi^{-1}(q) |M_q|^2 + \frac{\beta b}{4} \sum_{q_i} M_{q_1} M_{q_2} M_{q_3} M_{q_4} \delta(\sum_i q_i = 0)$$

鞍点解 GL理論

ガウス近似 ($b=0$) 自由エネルギーに調和揺らぎの補正

b 項の効果 摂動的取り扱い 転移点 ($\delta_0=0$) に近づくにつれて、空間4次元以下で発散 他の取り扱いが必要

73

最良ガウス近似 (T_c のくりこみを考慮)

$$\chi^{-1}(q) \rightarrow \chi^{*-1}(q) = \delta + Aq^2 + \frac{|\omega_n|}{\Gamma_q} \quad \delta: \text{変分パラメタ}$$

$$Z = \int \mathcal{D}M e^{-S_0} \langle \dots \rangle_0 = \frac{\int \mathcal{D}M e^{-S_0}}{Z}$$

cf. ガウス積分

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ax^2/2} = a^{-1/2}$$

$$\langle x^2 \rangle = a^{-1}$$

$$\langle x^4 \rangle \sim 3 \langle x^2 \rangle^2$$

ファインマンの変分法 $F(\delta) = F_0 + k_B T \langle S(\delta) - S_0 \rangle_0 \geq F_{\text{厳密}}$

$$S_0 = \frac{\beta}{2} \sum_q \chi^{*-1}(q) |M_q|^2 \quad \text{と選ぶと}$$

$$S(\delta) - S_0 = \frac{\beta}{2} \sum_q [\chi^{-1}(q) - \chi^{*-1}(q)] |M_q|^2 + S_4 = \frac{\beta(\delta_0 - \delta)}{2} \sum_q |M_q|^2 + S_4$$

$$F(\delta) = \frac{k_B T}{2} \left[\sum_q \ln[(k_B T \chi^*(q))^{-1}] + (\delta_0 - \delta) \sum_q \chi^*(q) + \frac{3b}{2} \left(k_B T \sum_q \chi^*(q) \right)^2 \right]$$

$$\frac{\partial F(\delta)}{\partial \delta} = 0 \quad \delta = \delta_0 + 3bk_B T \sum_q \chi^*(q) \quad \text{自己無撞着方程式} \quad \Rightarrow \quad \delta(T) \quad \text{特異な温度依存性}$$

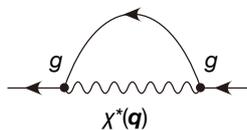
$$\chi^*(q) = \frac{1}{\delta + Aq^2 + |\omega_n|/\Gamma_q}$$

3次元、強磁性

$$\delta(T) \propto T^{4/3} \quad \text{cf. } \delta(T) \sim T \text{ (キュリー一則)}$$

$$\chi(\mathbf{q}, 0) = \frac{1}{\delta(T) + Aq^2} \quad \delta(T) \propto \xi^{-2}$$

電気抵抗



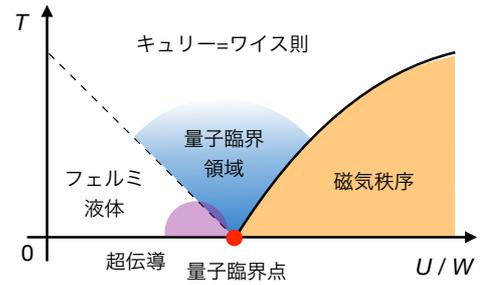
$$-\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}_F, \omega = 0) \propto g^2 T^{3/2}$$

cf. $\sim T^2$ (フェルミ液体)

74

量子臨界点 $\delta(0)=0$ における温度依存性

	強磁性 ($Q=0$)		反強磁性	
	3次元	2次元	3次元	2次元
$\delta, 1/\chi(Q,0)$	$T^{4/3}$	$-T \ln T$	$T^{3/2}$	$-T \ln \ln T / \ln T$
C/T	$-\ln T$	$T^{-1/3}$	$c-T^{1/2}$	$-\ln T$
$1/T_1$	$T\chi(Q,0)$	$T\chi^{3/2}(Q,0)$	$T\chi^{1/2}(Q,0)$	$T\chi(Q,0)$
ρ	$T^{5/3}$	$T^{4/3}$	$T^{3/2}$	T



$T=0$ 量子臨界点のまわりの $\delta(0)$ 依存性 (常磁性相)

	強磁性 ($Q=0$)		反強磁性	
	3次元	2次元	3次元	2次元
C/T	$-\ln \delta$	$\delta^{1/2}$	$c-\delta^{1/2}$	$-\ln \delta$
$1/T_1$	$T\chi(Q,0)$	$T\chi^{3/2}(Q,0)$	$T\chi^{1/2}(Q,0)$	$T\chi(Q,0)$
ρ	$\delta^{1/2}$	δ	$\delta^{1/2}$	δ

75

量子臨界点 $\delta(0)=0$ における δ の温度依存性 (適当な単位系で $k_B = \hbar = A = 1$ とする)

$$\delta = \delta_0 + 3bT \sum_n \sum_q \frac{1}{\delta + q^2 + |\omega_n|/\Gamma_q}$$

松原和 => 積分

$$\left(k_B T \sum_n g(i\omega_n) = \int_0^{\Gamma_q} \frac{d\omega}{\pi} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right) \text{Im} g(\omega) \right)$$

$$\delta = \delta_0 + 3b \sum_q \int_0^{\Gamma_q} \frac{d\omega}{\pi} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right) \frac{\omega/\Gamma_q}{(\delta + q^2)^2 + (\omega/\Gamma_q)^2}$$

q積分のカットオフ

$T=0$ では $0 = \delta_0 + 3b \sum_q \int_0^{\Gamma_q} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega/\Gamma_q}{q^4 + (\omega/\Gamma_q)^2}$ 元の式と差をとると

ボーズ分布

$$\delta = 3b \sum_q \int_0^{\Gamma_q} \frac{d\omega}{\pi} n(\omega) \frac{\omega/\Gamma_q}{(\delta + q^2)^2 + (\omega/\Gamma_q)^2} + 3b \sum_q \int_0^{\Gamma_q} \frac{d\omega}{\pi} \left[\frac{\omega/\Gamma_q}{(\delta + q^2)^2 + (\omega/\Gamma_q)^2} - \frac{\omega/\Gamma_q}{q^4 + (\omega/\Gamma_q)^2} \right]$$

有限温度の寄与

$$n(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1}$$

以下、3次元反強磁性の場合 ($\Gamma_q = \Gamma$) ($T \rightarrow 0, \delta \ll T$)

$$3b \sum_q \int_0^{\Gamma} \frac{d\omega}{\pi} n(\omega) \frac{\omega/\Gamma}{(\delta + q^2)^2 + (\omega/\Gamma)^2} \sim 3b \sum_q \int_0^T \frac{d\omega}{2\pi} \frac{T}{2\omega} \frac{\omega/\Gamma}{(\delta + q^2)^2 + (\omega/\Gamma)^2} = \frac{6bT}{\pi} \sum_q \frac{1}{\delta + q^2} \tan^{-1} \frac{T/\Gamma}{\delta + q^2}$$

$$\sim \frac{6bT}{\pi} \sum_q \frac{1}{q^2} \tan^{-1} \frac{T}{\Gamma q^2} = \frac{6b}{\pi \Gamma^{1/2}} T^{3/2} \int \frac{dx}{(2\pi)^3} \frac{1}{x^2} \tan^{-1} \frac{1}{x^2} = \frac{6b}{\pi \Gamma^{1/2}} T^{3/2} \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} = abT^{3/2}$$

$$3b \sum_q \int_0^{\Gamma} \frac{d\omega}{\pi} \left[\frac{\omega/\Gamma}{(\delta + q^2)^2 + (\omega/\Gamma)^2} - \frac{\omega/\Gamma}{q^4 + (\omega/\Gamma)^2} \right] \sim 3b \frac{\Gamma}{2\pi} \sum_q \ln \frac{q^2}{\delta + q^2} \quad (\delta + q^2 \ll \omega/\Gamma)$$

$$= \frac{b\Gamma}{2\pi} \delta^{3/2} \int_0^{1/\sqrt{\delta}} \frac{dx}{(2\pi)^3} \ln \frac{x^2}{1+x^2} = \frac{b\Gamma}{2\pi} \delta^{3/2} \frac{1}{2\pi^2} \left[2 \tan^{-1} \frac{1}{\sqrt{\delta}} - \frac{2}{\sqrt{\delta}} - \delta^{-3/2} \ln(1+\delta) \right] \sim -\frac{b\Gamma}{2\pi} \delta^{3/2} \frac{\delta^{-1/2}}{2\pi^2}$$

$$= -c\delta$$

$$\delta = abT^{3/2} - c\delta \quad \Rightarrow \quad \delta \propto T^{3/2}$$

76

高次多極子秩序

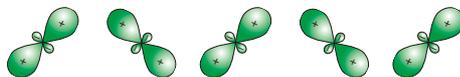


軌道なし $S=5/2$ 軌道あり $S=1/2$

磁性体の秩序 (反強磁性)



軌道の秩序 (反強軌道秩序、反強四極子秩序)



多極子自由度



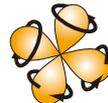
電気単極子
(電荷)



磁気双極子
(磁気モーメント)



電気四極子



磁気八極子

...

➡ 新しい形態の秩序

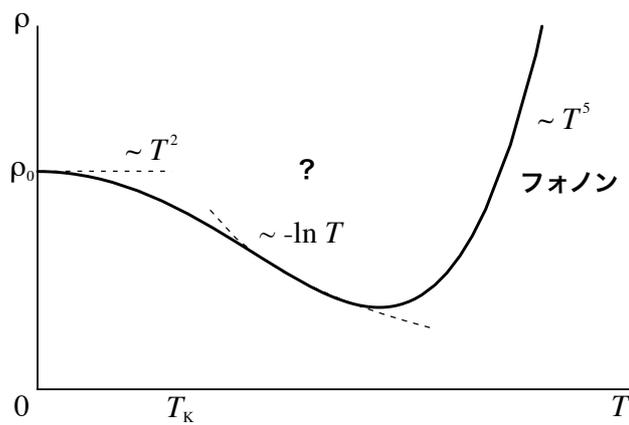
- ・ 隠れた秩序 (現時点で観測手段が限られている)
- ・ 磁気と電気の融合 (交差相関)
- ・ 新しい揺らぎ

近藤効果

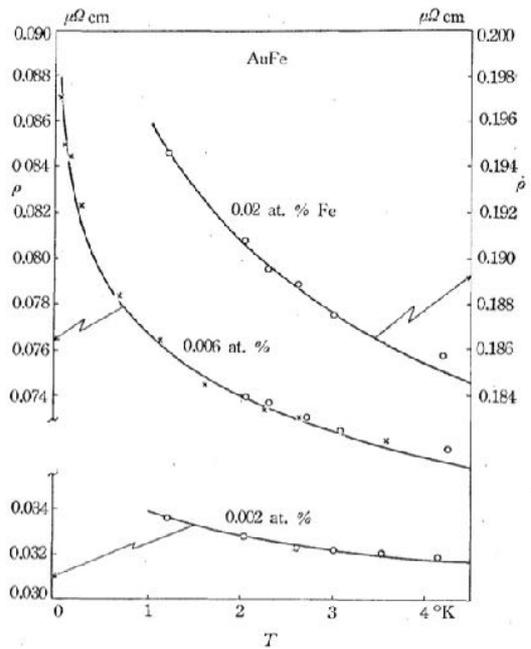
79

近藤効果

磁性不純物による異常な温度依存性



AuFe合金



80

近藤模型 (c-f 交換模型)

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J \mathbf{s} \cdot \mathbf{S} \quad \mathbf{s} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}'\beta}$$

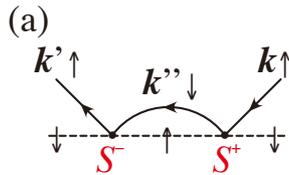
局在スピン $J > 0$

J に関する摂動 散乱行列を評価すると

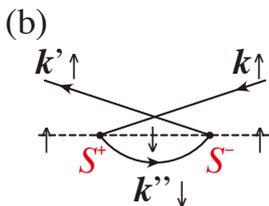
$O(J)$: ボルン近似 $T(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = J$ 通常の不純物散乱 (残留抵抗)

$O(J^2)$: 第2ボルン近似 **対数依存性**

- ・スピンの非可換性
- ・フェルミ面 (連続励起) の存在
- ・多体効果 (フェルミ分布関数)



$$T_a(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \left\langle \mathbf{k}' \uparrow \left| \sum_{\mathbf{k}''} \frac{(JS^- c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''\downarrow})(JS^+ c_{\mathbf{k}''\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow})}{-|\epsilon_{\mathbf{k}''}|} \right| \mathbf{k} \uparrow \right\rangle$$



$$T_b(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \left\langle \mathbf{k}' \uparrow \left| \sum_{\mathbf{k}''} \frac{(JS^+ c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''\uparrow})(JS^- c_{\mathbf{k}''\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow})}{|\epsilon_{\mathbf{k}''}|} \right| \mathbf{k} \uparrow \right\rangle$$

$$T_{a+b}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = J^2 [S^+, S^-] \sum_{\mathbf{k}''} \frac{\langle c_{\mathbf{k}''\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''\uparrow} \rangle}{|\epsilon_{\mathbf{k}''}|} \sim -\rho_F J^2 [S^+, S^-] \ln(k_B T / D)$$

第2ボルン近似による電気抵抗

$$\rho(T) = \rho_0 [1 + 2\rho_F J \ln(D/k_B T)] \sim \rho_0 \left(\frac{J_{\text{eff}}(T)}{J} \right)^2$$

ボルン近似の電気抵抗

$$\rho_0 \propto J^2 S(S+1)$$

ボルン近似で J を $J_{\text{eff}}(T)$ と置き換えたと考えられる

有効相互作用

$$J_{\text{eff}}(T) = J [1 + \rho_F J \ln(D/k_B T)]$$

近藤温度

$k_B T_K = D e^{-1/\rho_F J}$ で第1項と第2項が同程度の大きさになる

↓ 高次項が必要

最強発散項 $J[\rho_F J \ln(D/k_B T)]^n$ を集めると

$$J_{\text{eff}}(T) = \frac{J}{1 - \rho_F J \ln(D/k_B T)}$$

$T = T_K$ で J_{eff} が発散 ... 1重項形成を示唆

$J < 0$ の強磁性的な結合の場合は $J_{\text{eff}}(T)$ は降温とともに減少

熱力学量も $J_{\text{eff}}(T)$ を用いて表現できる

→
くりこみ

温度 T の世界を支配する相互作用は J ではなく $J_{\text{eff}}(T)$

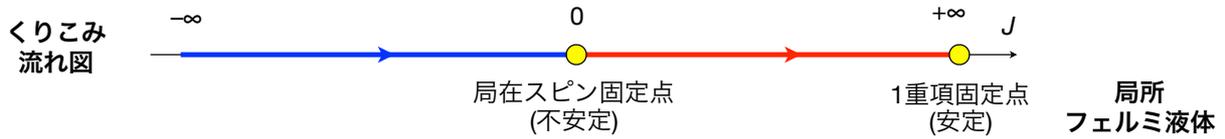
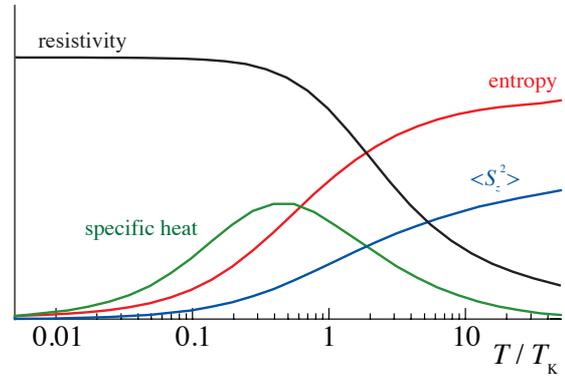
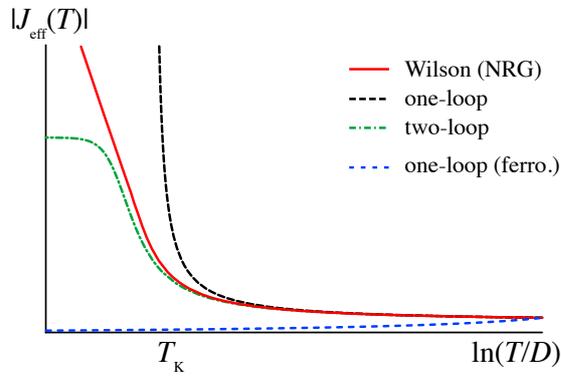
最強発散項 (one-loop)

$$\frac{dJ_{\text{eff}}(D)}{d \ln D} = -\rho_F J_{\text{eff}}(D)^2 \quad \Rightarrow \quad J_{\text{eff}}(T) = \frac{J}{1 - \rho_F J \ln(D/k_B T)}$$

第2発散項 (two-loop)

$$\frac{dJ_{\text{eff}}(D)}{d \ln D} = -\rho_F J_{\text{eff}}(D)^2 + \frac{1}{2} \rho_F^2 J_{\text{eff}}(D)^3 \quad \Rightarrow \quad k_B T_K = \sqrt{\frac{\rho_F J}{2}} D e^{-1/\rho_F J} \quad \text{より精度の高い近藤温度}$$

$$\rho_F J_{\text{eff}}(T_K) = 1$$



超伝導

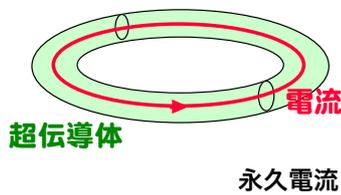
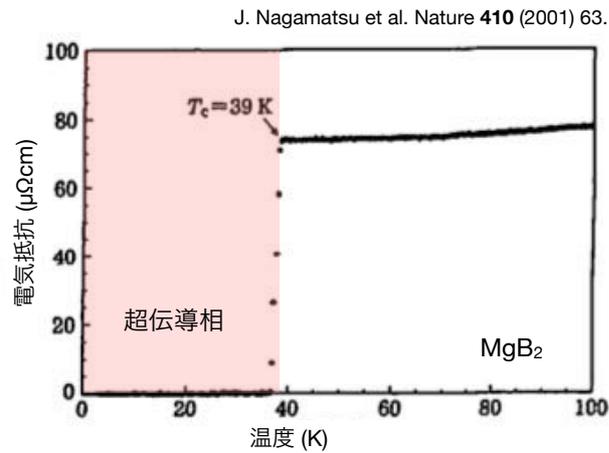
85

概観

86

超伝導現象

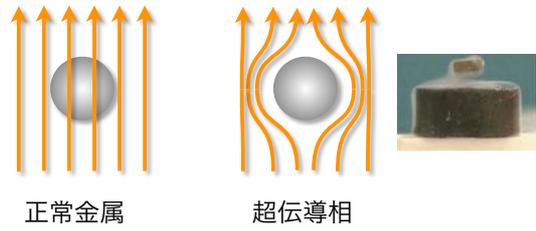
ゼロ抵抗



87

マイスナー効果

磁場は履歴によらず超伝導体に侵入できない

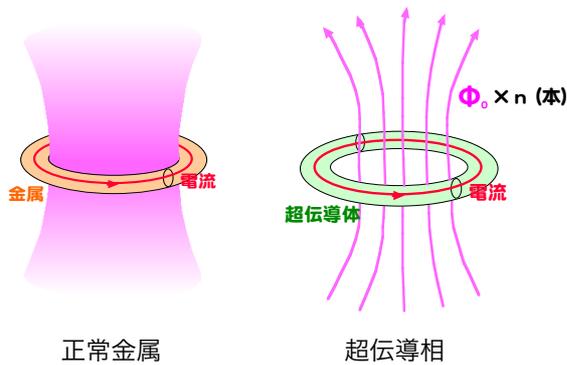


$$B = H + 4\pi M = 0$$

完全反磁性 $\chi = \frac{M}{H} = -\frac{1}{4\pi}$

磁束の量子化

超伝導リングを通過する磁束密度は磁束量子を単位として量子化される



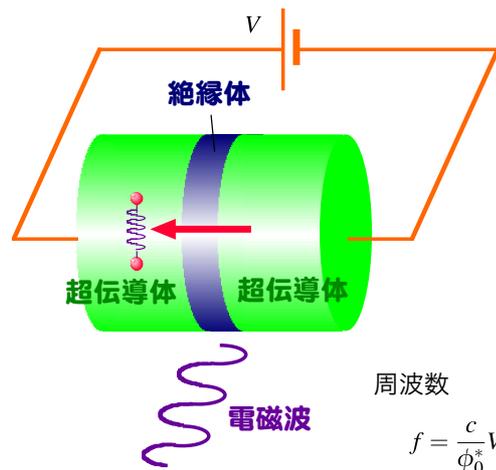
磁束量子 (超伝導)

$$\phi_0^* = \frac{2\pi\hbar c}{2e} = 2.068 \times 10^{-7} \text{ G cm}^2$$

電子ペアが重要な役割を果たしている証拠

ジョセフソン効果

絶縁体をトンネル効果によって通過する際量子化された周波数の電磁波を放出

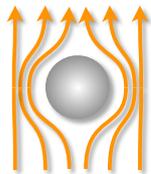


ジョセフソン定数

$$\kappa = \frac{c}{\phi_0^*} = 483593.420 \text{ GHz/V}$$

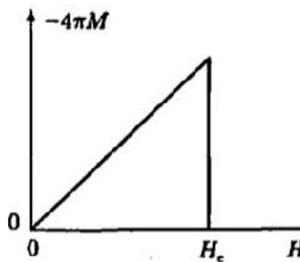
88

第1種超伝導体



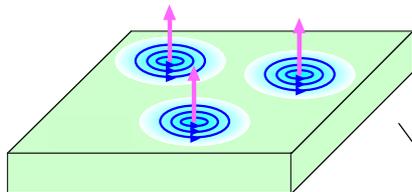
超伝導相

超伝導領域が大きい



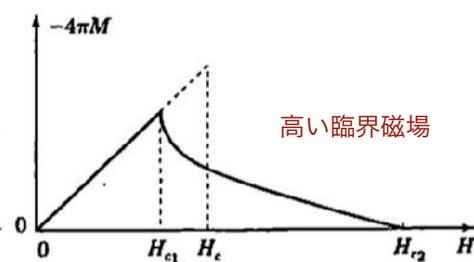
第2種超伝導体 (磁束格子)

磁場は渦糸として超伝導体に侵入
渦糸は格子を形成

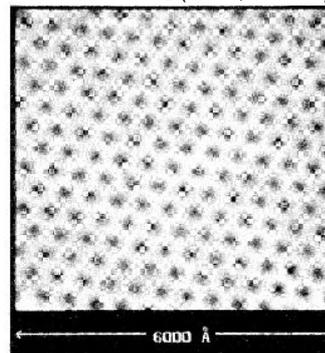


渦糸の周りには
超伝導遮蔽電流が流れる

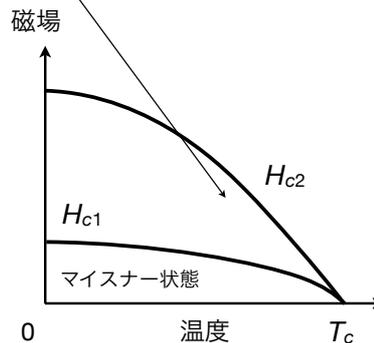
磁場によって壊れる
超伝導領域が小さい



STM像: NbSe₂ (H=1T, T=1.8K)

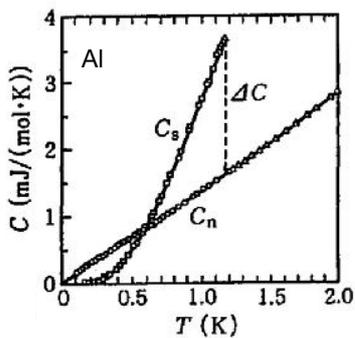


H.F. Hess et al. Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 214.

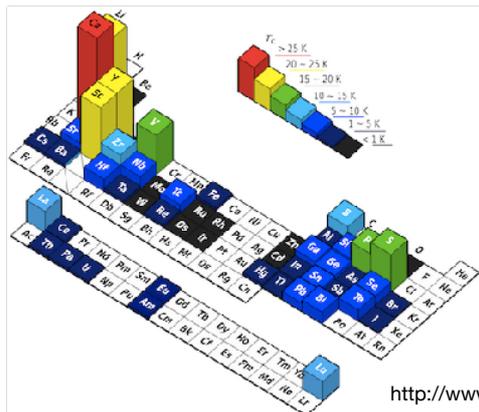


比熱

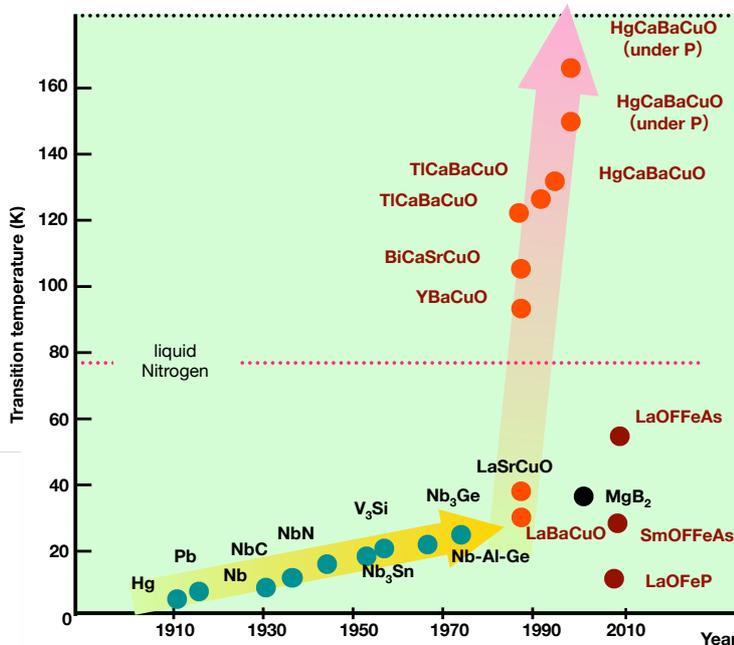
2次相転移
エネルギーギャップの存在



金属のありふれた基底状態



転移温度



理論的考察

超伝導電子の運動 (密度 n 、電荷 $-e^*$ 、質量 m^*)

$$m^* \frac{dv}{dt} = -e^* E \quad \Longrightarrow \quad \frac{d}{dt} \mathbf{j} = \frac{ne^{*2}}{m^*} \mathbf{E}$$

完全導体

マックスウェル方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c(\nabla \times \mathbf{E}) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\mathbf{B} + \frac{m^*c}{ne^{*2}} \nabla \times \mathbf{j} \right) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{B} + \frac{m^*c}{ne^{*2}} (\nabla \times \mathbf{j}) = \text{const.}$$

ロンドンの仮定

$$\mathbf{B} + \frac{m^*c}{ne^{*2}} (\nabla \times \mathbf{j}) = 0$$

$$\text{マックスウェル方程式} \quad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad \Longrightarrow \quad \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = \frac{4\pi}{c} (\nabla \times \mathbf{j}) = -\frac{4\pi}{c} \frac{ne^{*2}}{m^*c^2} \mathbf{B}$$

$$\text{左辺} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = -\nabla^2 \mathbf{B} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) = -\nabla^2 \mathbf{B}$$

ロンドン方程式

磁場侵入長

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B}$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{m^*c^2}{4\pi ne^{*2}}}$$

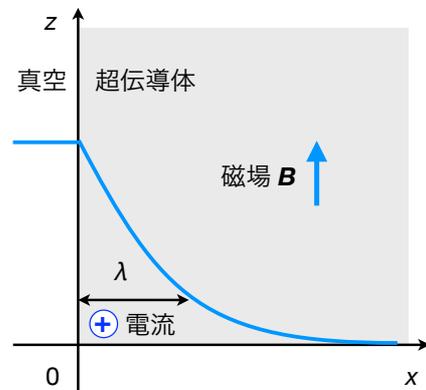
91

マイスナー効果

$$\frac{d^2}{dx^2} B_z(x) = \frac{1}{\lambda^2} B_z(x)$$

$$B_z(x) = B_z(0) e^{-x/\lambda}$$

$$j_y(x) = \frac{cB_z(0)}{4\pi\lambda} e^{-x/\lambda} \quad \left(\mathbf{j} = \frac{c}{4\pi} (\nabla \times \mathbf{B}) \right)$$



ロンドンの仮定の意味するところは？

ベクトルポテンシャルに比例する電流

$$\mathbf{B} + \frac{m^*c}{ne^{*2}} (\nabla \times \mathbf{j}) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{j} = -\frac{ne^{*2}}{m^*c} \mathbf{A}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad \text{ロンドンゲージ}$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

電荷の保存則より

$$\text{cf. 電流密度} \quad \mathbf{j} = -e^* n \mathbf{v} = -\frac{ne^*}{m^*} \mathbf{p} = -\frac{ne^{*2}}{m^*c} \mathbf{A}$$

常磁性電流

反磁性電流

超伝導電子の正準運動量は常にゼロ！

cf. (重心)運動量ゼロにボーズ凝縮

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$$

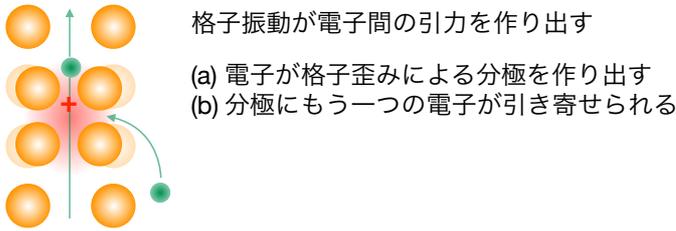
超伝導状態の波動関数は剛性を持っている

92

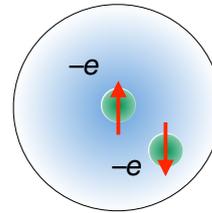
BCS理論の骨組み

二大要素 (1957)

(1) 電子間の引力の存在 (電子格子相互作用による)



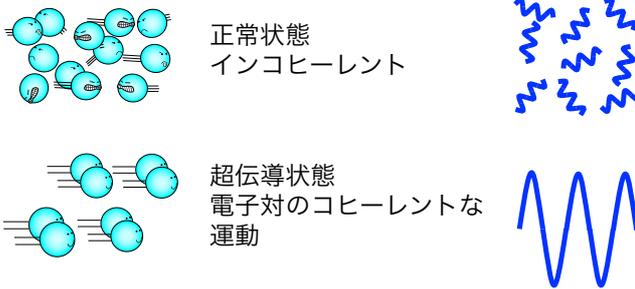
クーパーペア



- ・等方的 (s波)
- ・スピンゼロ (一重項)

$m^* = 2m, e^* = 2e$

(2) 電子ペア波動関数の位相のコヒーレンス



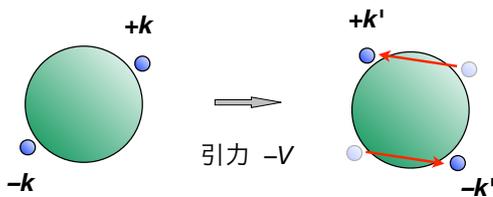
BCS理論で説明可

- ・2次相転移
- ・エネルギーギャップ
- ・マイスナー効果
- ・磁束の量子化
- ・臨界磁場
- ・ジョセフソン効果
- ・etc

すべての電子対が同じ動き \Rightarrow 巨視的な量子現象

クーバー問題

BCS理論へのブレークスルー：フェルミ球の外側においた2電子に引力が働く問題



$(+k\uparrow, -k\downarrow)$ の2体波動関数 (重心運動量ゼロ)

$$\psi_k(r_1, r_2) = e^{ik \cdot (r_1 - r_2)} \times \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)$$

軌道部分 スピン部分

2粒子のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \psi_k(r_1, r_2) - V \sum_{k'} \psi_{k'}(r_1, r_2) = (E + 2\epsilon_F) \psi_k(r_1, r_2) \quad \Rightarrow \quad \psi_k = \frac{V \sum_{k'} \psi_{k'}}{2\xi_k - E}$$

運動エネルギー 引力による散乱 E は ϵ_F からの増加分
(相互作用は等方的) $\xi_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \epsilon_F$

$$\sum_k \times \quad \Rightarrow \quad 1 = V \sum_k \frac{1}{2\xi_k - E} \sim \lambda \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{1}{2\xi - E} = \frac{\lambda}{2} \ln \left(\frac{E - 2\omega_D}{E} \right) \sim \frac{\lambda}{2} \ln \left(\frac{-2\omega_D}{E} \right)$$

$$\lambda = \frac{D(\epsilon_F) V}{2} \quad (E \ll \omega_D, \lambda \ll 1)$$

$\Rightarrow E = -2\omega_D e^{-2/\lambda}$ 電子対は束縛状態を形成 ($E < 0$) cf. 1次元系

cf. BCS理論の転移温度 $k_B T_c = 2\omega_D \frac{e^\gamma}{\pi} e^{-1/\lambda}$

cf. $\epsilon_F = 0$ ならば、束縛解を持つ条件は

\Rightarrow フェルミ球は無限小の引力に対して不安定 $\rho(\omega_D) V > 1$

現象論

95

ギンツブルグ=ランダウ理論

GL汎関数 相転移点近傍で、秩序変数の空間変化が十分緩やかな場合に妥当

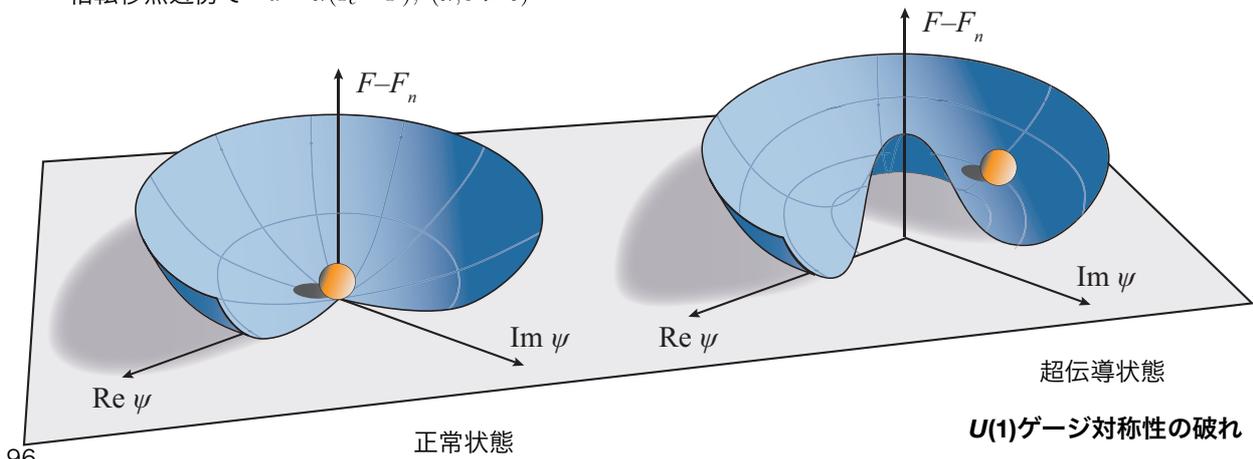
$$F[\psi, \psi^*, A] - F_n = \int_V dr \left[\underbrace{-a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4}_{\text{超伝導エネルギー}} + \underbrace{\psi^* \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\nabla + \frac{e^*}{c}A \right)^2 \psi}_{\text{グラディエント項}} + \underbrace{\frac{(\nabla \times A)^2}{8\pi}}_{\text{磁場エネルギー}} \right]$$

$m^* = 2m$ 任意
 $e^* = 2e$ 本質的

ψ : 秩序変数 (複素数) = ギャップ関数

ゲージ不変性 (量子系) $A \rightarrow A' = A + \nabla f(r)$ $\psi \rightarrow \psi' = \exp\left(-\frac{2\pi i}{\phi_0^*} f\right) \psi$

相転移点近傍で $a = \alpha(T_c - T)$, ($\alpha, b > 0$)



96

変分ゼロの条件より

$$\phi_0^* = \frac{2\pi\hbar c}{2e}$$

$$\delta F = \int dr \left[\frac{\delta A}{4\pi} \left\{ \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \right\} + \delta\psi^* \left\{ -\frac{\hbar^2}{4m} \left(\nabla + \frac{2\pi\mathbf{A}}{\phi_0^*} i \right)^2 - a + b|\psi|^2 \right\} \psi \right. \\ \left. + \delta\psi \left\{ -\frac{\hbar^2}{4m} \left(\nabla - \frac{2\pi\mathbf{A}}{\phi_0^*} i \right)^2 - a + b|\psi|^2 \right\} \psi^* \right] \\ \downarrow \\ + \int dS \cdot \left[\frac{1}{4\pi} \left\{ \delta\mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \right\} + \delta\psi^* \frac{\hbar^2}{4m} \left(\nabla + \frac{2\pi\mathbf{A}}{\phi_0^*} i \right) \psi + \delta\psi \frac{\hbar^2}{4m} \left(\nabla - \frac{2\pi\mathbf{A}}{\phi_0^*} i \right) \psi^* \right]$$

GL方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{4m} \left(\nabla + \frac{2\pi\mathbf{A}}{\phi_0^*} i \right)^2 - a + b|\psi|^2 \right] \psi = 0$$

境界条件

$$\mathbf{n} \cdot \left(\nabla + \frac{2\pi\mathbf{A}}{\phi_0^*} i \right) \psi = 0$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad \mathbf{j} = -\frac{e\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) - \frac{2e^2 |\psi|^2}{mc} \mathbf{A}$$

一見、シュレディンガー方程式と似ているが

- ・ ψ はマクロな秩序変数
- ・ 非線形項の存在

熱平衡状態の自由エネルギー $F_s(\mathbf{B}, T, V) - F_n = \int dr \left[-\frac{b}{2} |\psi|^4 + \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} \right]$ $G(\mathbf{H}, T, V) = F(\mathbf{B}, T, V) - \frac{\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}}{4\pi}$

磁場の強さ

$$\frac{\mathbf{H}}{4\pi} = \left(\frac{\partial F_s}{\partial \mathbf{B}} \right)_{T,V}$$

$$\frac{\mathbf{B}}{4\pi} = - \left(\frac{\partial G}{\partial \mathbf{H}} \right)_{T,V}$$

97

一様な解 $\mathbf{A} = 0 \quad \psi(\mathbf{r}) = \psi_0$

GL方程式 $(a - b|\psi_0|^2)\psi_0 = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_0 = \sqrt{\frac{a}{b}} \propto (T_c - T)^{1/2} \quad \text{cf. 平均場理論}$

自由エネルギー $F_s - F_n = -\frac{a^2}{2b} \equiv -\frac{H_c^2}{8\pi}$ **熱力学的臨界磁場**

$$H_c = \sqrt{\frac{4\pi}{b}} a \propto (T_c - T)$$

コヒーレンス長 $\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 + \psi_1(x)$

GL方程式 $\frac{d^2\psi_1}{dx^2} - 2\frac{\psi_1}{\xi^2} + O(\psi_1^2) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_1 \propto e^{-\sqrt{2}x/\xi}$

コヒーレンス長 (相関長) $\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4ma}} \propto (T_c - T)^{-1/2} \quad \text{cf. 平均場理論}$

98

cf. 単連結 (特異点なし)

電流と位相 $A \neq 0, \psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho(\mathbf{r})}e^{i\theta(\mathbf{r})} \quad \text{div} \mathbf{A} = 0$

$\nabla^2 \theta = 0, \rightarrow \theta = \text{const.}$

$\mathbf{j} = -2e\rho\mathbf{v}_s, \quad \mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{2m}\nabla\theta + \frac{e}{mc}\mathbf{A} \quad \text{位相の空間変化は電流を産み出す}$

超伝導電流

自由エネルギーを振幅と位相で表すと

$$F - F_n = \int d\mathbf{r} \left[-a\rho + \frac{b}{2}\rho^2 + m\rho\mathbf{v}_s^2 + \frac{\hbar^2}{4m\rho}(\nabla\rho)^2 + \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} \right]$$

古典流体描像

超伝導電流が流れると、質量 $2m$ 、密度 ρ の流体の運動エネルギーだけエネルギーが増加する

密度 ρ の空間変化にともなうエネルギー増加がある

$\nabla\rho$ の項を無視してよい条件は $H \ll \sqrt{2}\kappa H_c$

$$G(H) = \int d\mathbf{r} \left[-a\rho + \frac{b}{2}\rho^2 + m\rho\mathbf{v}_s^2 + \frac{\hbar^2}{4m\rho}(\nabla\rho)^2 + \frac{(\mathbf{B} - \mathbf{H})^2}{8\pi} \right] - \int d\mathbf{r} \frac{\mathbf{H}^2}{8\pi}$$

外場のエネルギー (無視)

ロンドン方程式 $\rho(\mathbf{r}) = n_s/2$ の空間変化が無視できるとき (cf. ロンドンの仮定)

$\nabla \times (\rho \nabla \theta) = \rho \nabla \times (\nabla \theta) = 0$

$\frac{4\pi}{c}(\nabla \times \mathbf{j}) = -\frac{1}{\lambda^2}\mathbf{B} \quad \lambda = \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi e^2 n_s}} = \sqrt{\frac{mc^2}{8\pi e^2}} \sqrt{\frac{b}{a}} \propto (T_c - T)^{-1/2} \quad \Rightarrow \quad \text{マイスナー効果}$

磁場侵入長 $n_s \sim 10^{22} \text{ cm}^{-3} \quad \lambda \simeq 10^{-5} \sim 10^{-6} \text{ cm}$

GLパラメータ

$\kappa = \frac{\lambda}{\xi}$ 温度によらない物質固有の定数

$\kappa < \frac{1}{\sqrt{2}}$: 第1種超伝導体 $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$: 第2種超伝導体

$-n\phi_0^* = \int d\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) - \frac{mc}{e} \oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{v}_s$

磁束の量子化

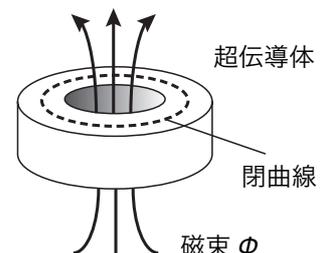
電流密度 $\Rightarrow -\frac{\phi_0^*}{2\pi}\nabla\theta = \mathbf{A} - \frac{mc}{e}\mathbf{v}_s$

閉曲線に沿って線積分 $-n\phi_0^* = \int d\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) - \frac{mc}{e} \oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{v}_s \quad (n \text{ は整数})$

閉曲線上で $\mathbf{v}_s = 0$ なら

フラクソイド

$\Phi = -n\phi_0^* \quad \text{磁束 (フラクソイド) は } \phi_0^* \text{ の整数倍のみ可}$



無次元化したGL方程式

無次元化した方程式群は、GLパラメタのみを含む

座標 $x = \frac{r}{\lambda}$

ベクトルポテンシャル $\mathbf{a} = \frac{\kappa \mathbf{A}}{\sqrt{2}\lambda H_c}$

電流 $\mathbf{i} = \frac{4\pi\lambda^2}{c} \frac{\kappa \mathbf{j}}{\sqrt{2}\lambda H_c}$

秩序変数 $f = \frac{\psi}{\psi_0}$

磁束密度 $\mathbf{b} = \frac{\kappa \mathbf{B}}{\sqrt{2}H_c}$

GL汎関数

$$\frac{F - F_n}{F_0} = 2 \int dx \left[-|f|^2 + \frac{1}{2}|f|^4 + \frac{1}{\kappa^2} \left\{ \left| \left(\frac{\partial}{\partial x} + i\mathbf{a} \right) f \right|^2 + \left(\frac{\partial}{\partial x} \times \mathbf{a} \right)^2 \right\} \right]$$

GL方程式

$$\left[\frac{1}{\kappa^2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i\mathbf{a} \right)^2 + 1 - |f|^2 \right] f = 0$$

境界条件

$$\frac{\partial}{\partial x} \times \left(\frac{\partial}{\partial x} \times \mathbf{a} \right) = \mathbf{i} \quad \mathbf{i} = -\text{Im} \left(f^* \frac{\partial}{\partial x} f \right) - |f|^2 \mathbf{a} \quad \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} + i\mathbf{a} \right) f = 0$$

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{a}{b}}$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{mc^2 b}{8\pi e^2 a}}$$

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4ma}}$$

$$H_c = \sqrt{\frac{4\pi}{b}} a$$

$$F_0 = \frac{H_c^2}{8\pi}$$

$$\phi_0^* = \frac{2\pi\hbar c}{2e}$$

$$\kappa = \frac{\lambda}{\xi}$$

第2種超伝導体

上部臨界磁場 (H_{c2})

「核」形成

$B = H = H_{c2}$: ψ は十分小さく、非線形項は無視 $\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$

GL方程式 $-\frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{d}{dy} + \frac{2ehx}{ch} i \right)^2 \right] \psi = a\psi$

ψ は x のみの関数とすると

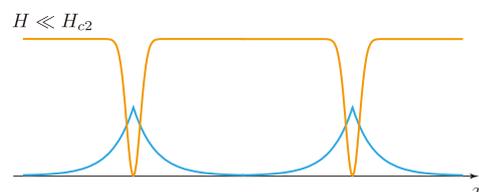
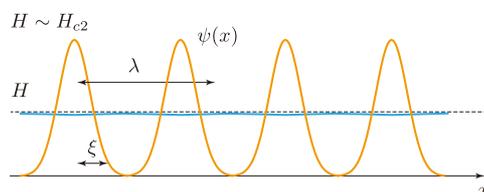
$$\left[-\frac{\hbar^2}{4m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{e^2 H^2}{mc^2} x^2 \right] \psi(x) = a\psi(x) \quad \omega = \frac{2eH}{mc} \quad E = 2a \text{ の調和振動子と同型}$$

$$E > \frac{\hbar\omega}{2} \Rightarrow H < \frac{2mac}{e\hbar} = \frac{\phi_0^*}{2\pi\xi^2} \equiv H_{c2} \quad \text{上部臨界磁場}$$

ξ 程度の領域に磁束量子1本の割合

秩序変数 cf. 調和振動子の基底状態

$$\psi(x, y) \propto e^{-x^2/2\xi^2} = g(x)$$



$$H_{c2} = \sqrt{2}\kappa H_c$$

$\kappa > 1/\sqrt{2} \rightarrow H_{c2} > H_c$ 第2種超伝導体

$\kappa < 1/\sqrt{2} \rightarrow H_{c2} < H_c$ 第1種超伝導体 マイスナー状態 (安定)
 正常状態 (準安定)

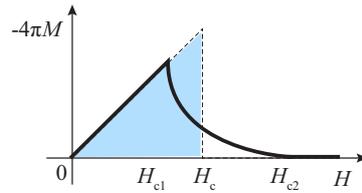
$T, V = \text{一定}$

$$dG = -\frac{BdH}{4\pi} = -MdH - \frac{HdH}{4\pi} \implies G(H_{c2}) - G(0) = -\int_0^{H_{c2}} MdH \sim G_n(0) - G_s(0) = \frac{H_c^2}{8\pi}$$

外場分(無視)

$$\frac{H_c^2}{2} = \int_0^{H_{c2}} (-4\pi M) dH$$

実線と点線の囲む面積は等しい



アブリコソフの磁束格子

中心位置の自由度の存在 $\psi_k(x, y) = e^{-iky} g(x - x_k)$

GL方程式 $\left[-\frac{\hbar^2}{4m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{e^2 H^2}{mc^2} (x - \xi^2 k)^2 \right] g(x - x_k) = ag(x - x_k) \implies x_k = \xi^2 k$ と取ればよい

y 方向に周期 b $k = \frac{2\pi}{b} m \equiv k_m$ (m は整数)

アブリコソフの磁束格子解

$\psi(x, y) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m e^{-k_m y} g(x - \xi^2 k_m)$ 係数 $c_m = c_{m+\nu}$ の条件も課す

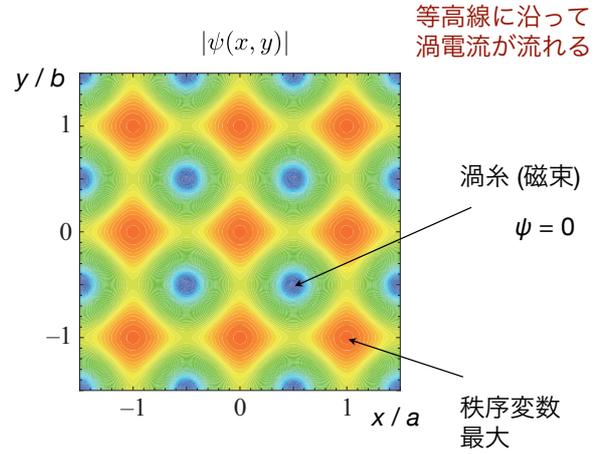
$\psi(x, y) = \psi(x, y + b) = e^{k_\nu y} \psi(x + a, y), \quad a \equiv \xi^2 k_\nu$ $|\psi|$ は x 方向に周期 a

$(ab)H_{c2} = \nu \phi_0^*$ 単位格子あたり、 ν 本の磁束量子

(a) アブリコソフ格子

$\nu = 1, c_m = \text{const.}$

$a = b = \sqrt{2\pi}\xi$ のとき、自由エネルギー最小

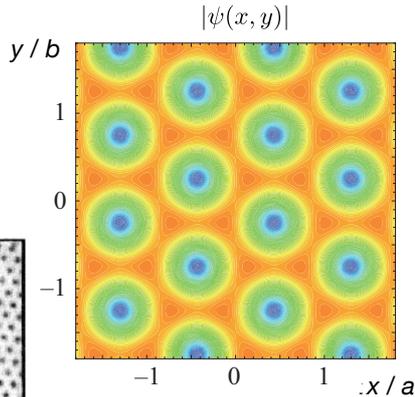


(b) クライナー格子

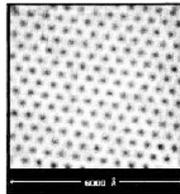
$\nu = 2, c_m = c (m = \text{偶数}), ic (m = \text{奇数})$

$a = \sqrt{3}b = (12)^{1/4}\sqrt{2\pi}\xi$

のとき、自由エネルギー最小



三角格子の方が自由エネルギーが低い



下部臨界磁場 (H_{c1})

$H \sim H_{c1}$ では、渦糸の密度は小さく、お互い十分に離れている \implies 1本の磁束の場合

下部臨界磁場

$$G(H) = \int dr \left[-a\rho + \frac{b}{2}\rho^2 + m\rho v_s^2 + \frac{\hbar^2}{4m\rho}(\nabla\rho)^2 + \frac{(B-H)^2}{8\pi} \right]$$

磁束がないとき

$$G_0(H) = \int dr \left[-a\rho_0 + \frac{b}{2}\rho_0^2 + \frac{H^2}{8\pi} \right]$$

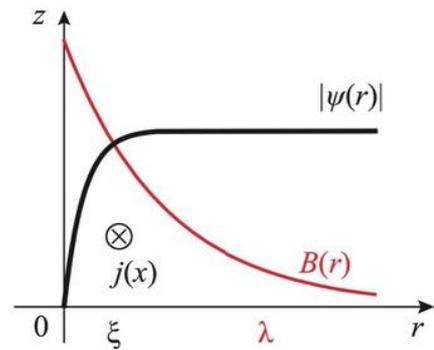
磁束があるとき

$$G(H) = \int dr \left[-a\rho + \frac{b}{2}\rho^2 + m\rho v_s^2 + \frac{\hbar^2}{4m\rho}(\nabla\rho)^2 + \frac{(B-H)^2}{8\pi} \right]$$

$$\Delta G = G - G_0 = \Delta\epsilon - \frac{H}{4\pi} \int dr B = \Delta\epsilon - \frac{H\phi_0^*}{4\pi}$$

$\Delta G < 0$ のとき磁束が侵入する

$$H > \frac{4\pi\Delta\epsilon}{\phi_0^*} = H_{c1} \quad \text{下部臨界磁場}$$



磁束の量子化 $\Phi = -n\phi_0^*$

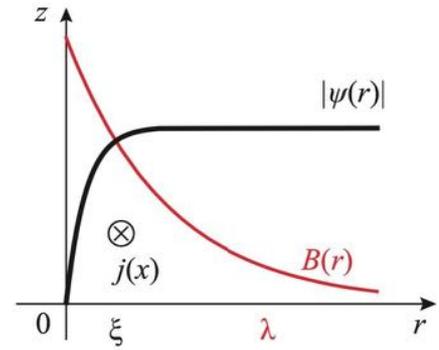
$$\Phi = \phi_0^* \rightarrow n = -1$$

$$\psi(r) = \sqrt{\rho(r)}e^{-i\theta}$$

渦糸を一周すると位相が -2π 変化する

$\Delta\epsilon$ の評価 $\kappa \gg 1$ $r > \xi$ の広い領域で ρ の空間変化が無視できる \Rightarrow ロンドン方程式が成立

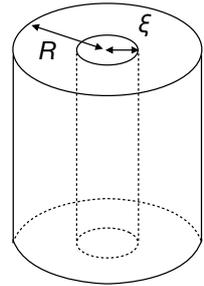
$$\begin{aligned} \Delta\epsilon &\sim \int dr \left[m\rho v_s^2 + \frac{B^2}{8\pi} \right] \quad \rho \text{ と } \rho_0 \text{ の差、 } \rho \text{ の空間変化 } r \lesssim \xi \ll \lambda \\ &= \frac{1}{8\pi} \int dr [\lambda^2 (\nabla \times \mathbf{B})^2 + B^2] \\ &= \frac{1}{8\pi} \int dr (-\lambda^2 \nabla^2 \mathbf{B} + \mathbf{B}) \cdot \mathbf{B} + \frac{\lambda^2}{8\pi} \int dS \cdot (\mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B})) \\ &\quad \text{ロンドン方程式} \\ &= \frac{\lambda^2}{8\pi} \int dS \cdot (\mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B})) = -\frac{\lambda^2}{8\pi} 2\pi r B(r) \frac{dB}{dr} \Big|_{r=\xi} \\ &\quad \mathbf{B} = B(r) \mathbf{e}_z \end{aligned}$$



磁束密度：ロンドン方程式 (円柱座標)

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right] B &= \frac{1}{\lambda^2} B \quad \Rightarrow \quad B(r) = C K_0(r/\lambda) \\ B(\infty) &= 0 \\ \phi_0^* &= \int_0^\infty dr B(r) 2\pi r = 2\pi \lambda^2 C \end{aligned}$$

n 次の第2種変形ベッセル関数 $K_n(x)$
 $K_0(x) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \quad (x \gg 1)$
 $K_0(x) \sim -\ln x \quad (x \ll 1)$



$$B(r) = \frac{\phi_0^*}{2\pi\lambda^2} K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \quad (r > \xi) \quad \Rightarrow \quad \Delta\epsilon = \left(\frac{\phi_0^*}{4\pi\lambda}\right)^2 \ln \frac{\lambda}{\xi} \quad \Rightarrow \quad H_{c1} = \frac{H_c}{\sqrt{2\kappa}} \ln \kappa$$

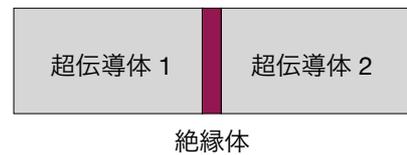
電流密度 $\mathbf{j} = j(r) \mathbf{e}_\theta$

$$j(r) = -\frac{c}{4\pi} \frac{dB}{dr} = \frac{c}{4\pi\lambda^2} \frac{\sqrt{2\lambda H_c}}{\kappa} K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right)$$

渦糸のまわりを遮蔽電流が流れる

ジョセフソン効果

ジョセフソン効果 (クーパー対トンネル効果)



$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = U_1 \psi_1 + K \psi_2 \quad U \text{ エネルギー、 } K \text{ 飛び移り振幅}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = U_2 \psi_2 + K \psi_1 \quad U_1 - U_2 = -2eV \quad V \text{ 電位差 (電子対)} \quad U_1 = -eV, U_2 = +eV$$

$$\Downarrow \quad \psi_1 = \sqrt{\rho_1} e^{i\theta_1}, \quad \psi_2 = \sqrt{\rho_2} e^{i\theta_2}$$

$$\frac{d\rho_1}{dt} = -\frac{2K\sqrt{\rho_1\rho_2}}{\hbar} \sin\theta \quad \frac{d\theta_1}{dt} = \frac{K}{\hbar} \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}} \cos\theta + \frac{eV}{\hbar}$$

$$\frac{d\rho_2}{dt} = +\frac{2K\sqrt{\rho_1\rho_2}}{\hbar} \sin\theta \quad \frac{d\theta_2}{dt} = \frac{K}{\hbar} \sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_2}} \cos\theta - \frac{eV}{\hbar}$$

$$\rho_1 = \rho_2 = \rho_0 \text{ (const.)}$$

位相差 $\theta = \theta_1 - \theta_2$

$$\Rightarrow \quad \frac{d\theta}{dt} = \frac{2eV}{\hbar} \quad \text{ジョセフソンの加速方程式}$$

1から2へ流れる電流 $I = -2e \frac{d\rho_1}{dt} = I_0 \sin\theta, \quad \left(I_0 = \frac{4eK\rho_0}{\hbar} \right)$

$$V = V_0 + V_1 \cos(\omega t) \quad \Rightarrow \quad \theta = \theta_0 + \Omega t + \frac{\Omega V_1}{\omega V_0} \sin(\omega t) \quad \Omega = \frac{2eV_0}{\hbar} \quad (\gg 1 \text{ sec}^{-1})$$

dc ジョセフソン効果 ($V_1=0$)

$$I = I_0 \sin(\theta_0 + \Omega t)$$

- ・電位差 V_0 があると、角振動数 Ω の交流発生。時間平均は $\langle I(t) \rangle_t = 0$
- ・電位差がなく位相差だけがあると $I = I_0 \sin(\theta_0)$

ac ジョセフソン効果 $V_1 \neq 0$

$$I = I_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n J_n \left(\frac{\Omega V_1}{\omega V_0} \right) \sin [\theta_0 + (\Omega - n\omega)t]$$

$$n\omega = \Omega \text{ のとき直流成分} \implies \omega = \text{固定、I-V特性: シャピロ・ステップ) } V_0 = \frac{\omega}{2\pi\kappa} n = \frac{\phi_0^*}{2\pi c} n$$

で階段状に変化

$$J_n(x) \text{ ベッセル関数 } e^{iz \sin \phi} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(z) e^{in\phi}$$

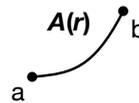
$$f = \frac{\Omega}{2\pi} = \kappa V_0 \quad \kappa = \frac{c}{\phi_0^*} \quad \text{ジョセフソン定数}$$

超伝導量子干渉計 (SQUID) cf. アハラノフ=ボーム効果

ベクトルポテンシャルと位相

aからbに電荷qの粒子が移動する確率振幅が
獲得する位相 (ゲージ不変性)

(cf. 格子系ではパイエルス位相) $\theta_b - \theta_a = \frac{q}{\hbar c} \int_a^b dl \cdot A$



$$\theta_{b1} - \theta_{a1} = -\frac{2e}{\hbar c} \int_{a1 \rightarrow b1} dl \cdot A \quad \theta_{b2} - \theta_{a2} = -\frac{2e}{\hbar c} \int_{a2 \rightarrow b2} dl \cdot A$$

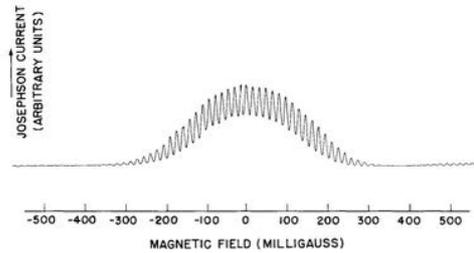
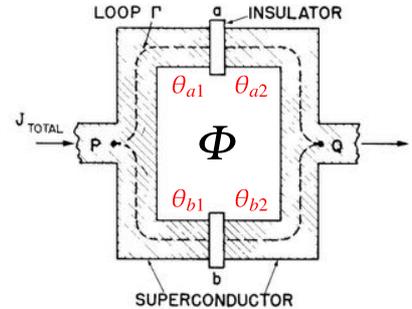
$$(\theta_{a1} - \theta_{a2}) - (\theta_{b1} - \theta_{b2}) = \frac{2e}{\hbar c} \oint dl \cdot A = \frac{2\pi\Phi}{\phi_0^*}$$

$$= \left(\theta_0 + \frac{\pi\Phi}{\phi_0^*} \right) - \left(\theta_0 - \frac{\pi\Phi}{\phi_0^*} \right)$$

$$I = I_0 [\sin(\theta_{a1} - \theta_{a2}) + \sin(\theta_{b1} - \theta_{b2})]$$

$$= 2I_0 \sin \theta_0 \cos \left(\frac{\pi\Phi}{\phi_0^*} \right)$$

$|I|_{\max}$ は $\Phi = n\phi_0^*$ (n : 整数) のとき生じる 微小磁場測定



アンダーソン=ヒッグス機構

超伝導基底状態まわりの揺らぎ

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{a}{b}}, \mathbf{A} = 0 \text{ のまわりの揺らぎを考える}$$

$$\mathcal{F} = -a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 + \frac{\hbar^2}{4m} \left| \left(\nabla + \frac{2ei}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + \frac{(\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi}$$

$$\psi(\mathbf{r}) = (\psi_0 + \psi_1(\mathbf{r})) e^{i\theta(\mathbf{r})}$$

$$\text{揺らぎを2次まで } \delta\mathcal{F} = -a \left[\left(1 - \frac{3b}{a} \psi_0^2 \right) \psi_1^2 - \xi^2 (\nabla \psi_1)^2 \right] + \frac{e^2 \psi_0^2}{mc^2} (\mathbf{A} + \nabla f)^2 + \frac{(\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi} \quad f = \frac{c\hbar\theta}{2e}$$

$$\text{正常状態の揺らぎ } (\psi_0 = 0) \quad \delta\mathcal{F} = -a [\psi_1^2 - \xi^2 (\nabla \psi_1)^2] + \frac{(\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi}$$

電子系 電磁場 独立

- ψ, ψ^* の揺らぎはエネルギーを増加させる (有限質量の励起 x 2)
- 電磁波 (光子: 質量ゼロの励起 x 2 横波)

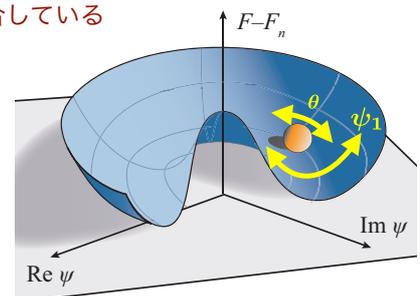
$$\text{超伝導相の揺らぎ } (\psi_0^2 = a/b) \quad \delta\mathcal{F} = a [2\psi_1^2 + \xi^2 (\nabla \psi_1)^2] + \frac{1}{8\pi\lambda^2} (\mathbf{A} + \nabla f)^2 + \frac{(\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi}$$

電子系と電磁波は結合している

$$\psi \rightarrow \psi' = \psi e^{-i\theta}, \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla f \text{ とゲージ変換すれば}$$

$$\delta\mathcal{F} = a [2\psi_1^2 + \xi^2 (\nabla \psi_1)^2] + \frac{1}{8\pi} \left[\frac{1}{\lambda^2} \mathbf{A}'^2 + (\nabla \times \mathbf{A}')^2 \right] \quad \text{独立}$$

質量項 ロンドン方程式



- $|\psi|$ の揺らぎはエネルギーを増加させる (有限質量の励起 x 1)
- 電磁波 (光子: 有限質量の励起 x 3 横+縦)

$$E = \sqrt{(m_0c^2)^2 + (cp)^2} \implies \omega = c\sqrt{(m_0c/\hbar)^2 + k^2} \implies m_0 = \frac{\hbar}{c[\text{長さ}]}$$

光子質量: $M_c = \frac{\hbar}{c\lambda} \propto e\psi_0$

cf. 中性粒子ならば $M_c = 0$ となり、質量ゼロの位相(音波)モードが生き残る

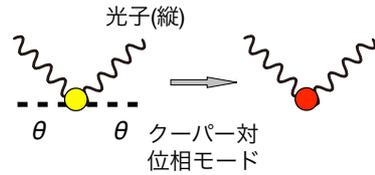
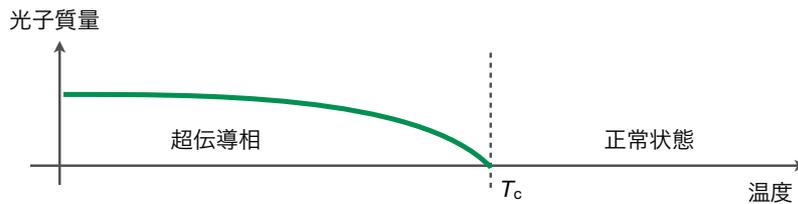
振幅モード質量: $M_\psi = \frac{\sqrt{2}\hbar}{c\xi}$

位相励起子 (フェイゾン) / ボゴリューボフ=アンダーソン・モード

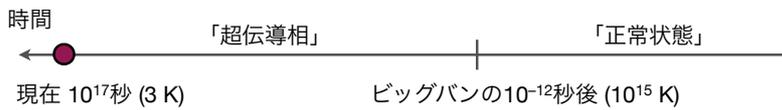
位相揺らぎ = 電荷密度揺らぎ(縦成分)、プラズマ振動と結合して高いエネルギーの励起に変化

cf. 転移温度近傍では、 ψ_0 が小さくクーロン相互作用が常伝導電子によって遮蔽されるため、位相モードが復活する (カールソン=ゴールドマン・モード)

ヒッグス機構との対比



真空の相転移 (南部陽一郎 1961)



標準理論

ワインバーグ=サラム、小林=益川、QCD、ヒッグス機構

光子 ~ W, Zボゾン (ゲージ場)

振幅モード ~ ヒッグスボゾン

電子 ~ フェルミオン素粒子

BCS理論

平均場近似

一般的な2体相互作用 $H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_q \sum_{k,k'} \sum_{\alpha\beta} V_q(k,k') c_{k\alpha}^\dagger c_{q-k\beta}^\dagger c_{q-k'\beta} c_{k'\alpha}$

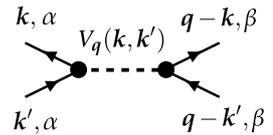
BCS模型と平均場近似

- $V > 0$ は電子格子相互作用による引力
- 引力が働くエネルギー領域 ($|\xi_k| < \omega_D$) のみ考える
- s波1重項 (重心運動量 $\mathbf{q} = 0$)

$$V_q(k,k') = \langle k\alpha, q - k\beta | V | k'\alpha, q - k'\beta \rangle$$

$$H_0 = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}$$

$$H_{\text{int}} = -V \sum_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$



電子対平均場

粒子数を保存しない特殊な平均場 (後述)

$$c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \sim \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} + c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle - \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle$$

ギャップ関数 $\Delta = V \sum_k \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle = |\Delta| e^{i\theta}$

$$H_{\text{MF}} = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} - \sum_k (\Delta^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + \Delta c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) + V^{-1} |\Delta|^2$$

$$= \sum_k (c_{k\uparrow}^\dagger \ c_{-k\downarrow}) \begin{pmatrix} \xi_k & -\Delta \\ -\Delta^* & -\xi_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_k \xi_k + V^{-1} |\Delta|^2$$

$$\Downarrow \quad u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right)} \quad v_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right)}$$

$$H_{\text{MF}} = \sum_{k\alpha} E_k a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + E_0$$

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2}$$

$$E_0 = - \sum_k (E_k - \xi_k) + V^{-1} |\Delta|^2$$

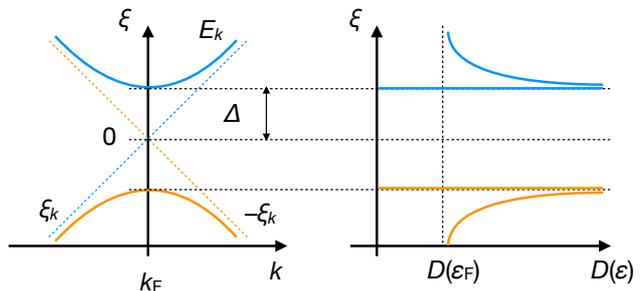
ボゴリューボフ変換

(cf. スピン波: ボーズ粒子)

準粒子

$$\begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & v_k e^{i\theta} \\ -v_k e^{-i\theta} & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k\uparrow} \\ a_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad \{a_{k\alpha}, a_{k\beta}^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta}$$



準粒子

$$a_{k\uparrow} = u_k c_{k\uparrow} - v_k e^{i\theta} c_{-k\downarrow}^{\dagger}$$

$$a_{k\downarrow} = u_k c_{k\downarrow} + v_k e^{i\theta} c_{-k\uparrow}^{\dagger}$$

BCS基底状態 = 準粒子なし

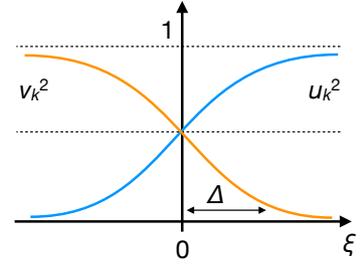
$$a_{k\alpha} |\Phi_{\theta}\rangle = 0$$

正常状態

粒子部分の割合 $u_k = \theta(\xi_k)$

ホール部分の割合 $v_k = \theta(-\xi_k)$

基底状態 = 粒子、ホールなし
フェルミ球



ギャップ方程式

$$\frac{\Delta}{V} = \sum_k u_k v_k \left(1 - \sum_{\alpha} \langle a_{k\alpha}^{\dagger} a_{k\alpha} \rangle \right) = \Delta \sum_k \frac{\tanh(\beta E_k/2)}{2E_k} \implies \frac{1}{\lambda} = \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh(\beta \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}/2)}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}$$

無次元の結合定数 $\lambda = \rho_F V$

転移温度 $T \rightarrow T_c, |\Delta| \rightarrow 0$ ($k_B T_c \ll \omega_D$)

ギャップ方程式 $\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\beta c \omega_D/2} dx \frac{\tanh x}{x} = \ln x \tanh x \Big|_0^{\beta c \omega_D/2} + \int_0^{\infty} dx \frac{\ln x}{\cosh^2 x} \sim \ln \left(\frac{\beta c \omega_D}{2} \right) + \ln \left(\frac{4e^{\gamma}}{\pi} \right) = \ln \left(\frac{2\omega_D e^{\gamma}}{\pi k_B T_c} \right)$

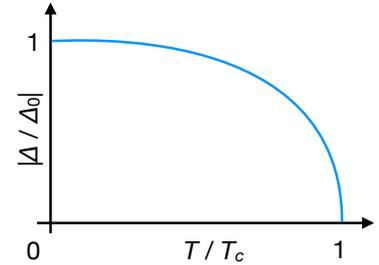
$\implies k_B T_c = \frac{2\omega_D e^{\gamma}}{\pi} e^{-1/\lambda} \sim 1.13 \omega_D e^{-1/\lambda}$ cf. クーパー問題の束縛エネルギー $|E| = 2\omega_D e^{-2/\lambda}$

$T=0$ $|\Delta| \rightarrow |\Delta_0|$

ギャップ方程式 $\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\omega_D/|\Delta_0|} dx \frac{1}{\sqrt{x^2+1}} = \ln \left(\frac{\omega_D}{|\Delta_0|} + \sqrt{(\omega_D/|\Delta_0|)^2 + 1} \right) \sim \ln \left(\frac{2\omega_D}{|\Delta_0|} \right)$

$\implies |\Delta_0| = 2\omega_D e^{-1/\lambda}$

物質によらない普遍定数 $\frac{|\Delta_0|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{e^{\gamma}} \sim 1.76$



115

BCS基底状態 クーパー対の重ね合わせ (粒子数は一定ではない)

変分波動関数

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (\text{正常状態 } |\Phi_N\rangle : \text{フェルミ球に電子を詰めた状態に対応})$$

$$|\Phi_{\theta}\rangle = \prod_k (u_k + e^{i\theta} v_k c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{-k\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle$$

ゲージ不変性が破れた状態
($c^{\dagger} \rightarrow e^{i\phi} c^{\dagger}$ に対して $|\Phi_{\theta}\rangle \rightarrow e^{i\alpha} |\Phi_{\theta}\rangle$ とならない)

平均粒子数 $N' = \langle \Phi_{\theta} | \hat{N} | \Phi_{\theta} \rangle = 2 \sum_k v_k^2 \propto N$

注意
 N' は $|\xi_k| < \omega_D$ 内の電子数 (定数)

揺らぎ $(\Delta N')^2 = \langle \Phi_{\theta} | \hat{N}^2 | \Phi_{\theta} \rangle - N'^2 = 4 \sum_k u_k^2 v_k^2 \propto N \quad \hat{N} = \sum_{k\alpha} c_{k\alpha}^{\dagger} c_{k\alpha}$

$\frac{\Delta N'}{N'} \sim \frac{\sqrt{N}}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}}$ $N \gg 1$ では揺らぎは無視でき、粒子数は N に確定していると考えてよい

ペア振幅 $F_k = \langle \Phi_{\theta} | c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} | \Phi_{\theta} \rangle = u_k v_k e^{i\theta} \quad F(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \langle \Phi_{\theta} | \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) | \Phi_{\theta} \rangle = \sum_k F_k e^{ik \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = e^{i\theta} \sum_k u_k v_k \equiv \frac{\Delta_0}{V}$$

ギャップ方程式 $E_0 = \langle \Phi_{\theta} | H | \Phi_{\theta} \rangle = 2 \sum_k \xi_k v_k^2 - V \sum_{kk'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} - \frac{V}{4} N'^2$

$$0 = \frac{\partial E_0}{\partial v_k} = 4\xi_k v_k - 2V \left(\sum_k u_k v_k \right) \left(u_k - \frac{v_k^2}{u_k} \right) \implies v_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right)} \quad u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right)}$$

$\xi_k \rightarrow \infty, v_k \rightarrow 0$

$$\frac{\Delta_0}{V} = e^{i\theta} \sum_k u_k v_k = \Delta_0 \sum_k \frac{1}{2\sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_0|^2}}$$

$T=0$ の平均場近似は
BCS基底状態の変分法と等しい

$a_{k\alpha} |\Phi_{\theta}\rangle = 0$ も確認できる

凝縮エネルギー

$$\Delta E = E_0 - E_N = \sum_k \left(\xi_k - \frac{\xi_k}{E_k} \right) - \frac{|\Delta_0|^2}{V} - 2 \sum_{k'}^{\xi_k < 0} \xi_{k'} = -\rho_F \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{(E_k - \xi_k)^2}{E_k} = -\rho_F |\Delta_0|^2 \int_0^{\infty} dx \frac{(\sqrt{x^2+1} - x)^2}{\sqrt{x^2+1}} = -\frac{\rho_F |\Delta_0|^2}{2}$$

116

クーパー対のサイズ

$$|F(\mathbf{r}, 0)| = \sum_k u_k v_k e^{ik \cdot \mathbf{r}} \sim \frac{\sin(k_F r)}{k_F r} K_0(r/\xi_0 \pi) \sim \frac{\sin(k_F r)}{k_F r} \sqrt{\frac{\xi_0 \pi^2}{2r}} e^{-r/\xi_0 \pi} \quad (r \gg \xi_0)$$

$$\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{\pi |\Delta_0|} \quad \text{ピパードの長さ}$$

フェルミ準位近傍 $|\xi| \lesssim |\Delta_0|$ ($\Delta k \lesssim |\Delta_0|/\hbar v_F$) の状態からなる波束のサイズ

$$\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k} = \frac{\hbar v_F}{|\Delta_0|} \sim \frac{\epsilon_F}{|\Delta_0|} k_F^{-1} \sim 10^{-4} \text{ cm} \implies \text{多くのペアが重なっている平均場がよい近似}$$

ξ_0 : クーパー対のサイズ

ξ : コヒーレンス長 (ペア間の相関距離)

$T \ll T_c$ で同程度だが、概念的には別物

非対角長距離秩序

長距離相関 短距離相関

$$1 \text{ 粒子密度行列 } \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle B^\dagger(\mathbf{r}) B(\mathbf{r}') \rangle = \langle B^\dagger(\mathbf{r}) \rangle \langle B(\mathbf{r}') \rangle + C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \implies \langle B^\dagger(\mathbf{r}) \rangle \langle B(\mathbf{r}') \rangle \neq 0$$

$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$

($\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ のとき $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ は粒子数密度)

ボーズ=アインシュタイン凝縮を特徴づける概念

BCS基底状態

$$B^\dagger = \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}) \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}) \quad \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow F(\mathbf{r}, \mathbf{r})^* F(\mathbf{r}', \mathbf{r}') = \frac{|\Delta_0|^2}{V^2}$$

熱力学量

自由エネルギー $F = -k_B T \ln Z + E_0 = -2k_B T \sum_k \ln \left(\frac{1 + e^{-\beta E_k}}{1 + e^{-\beta |\xi_k|}} \right) - \sum_k (E_k - |\xi_k|) + V^{-1} |\Delta|^2 + F_N$

$$0 = \frac{\partial F}{\partial |\Delta|} = 2|\Delta| \left(\frac{1}{V} - \sum_k \frac{\tanh(\beta E_k/2)}{2E_k} \right) \quad \text{ギャップ方程式は自由エネルギーの極小条件}$$

エントロピー $-\frac{\partial F}{\partial T} = 0$ に注意

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -2k_B \sum_k [f(E_k) \ln f(E_k) + (1 - f(E_k)) \ln(1 - f(E_k))] \quad T_c \text{ で連続}$$

比熱

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = 2 \sum_k \left[\frac{E_k^2}{T} - \frac{1}{2} \frac{d|\Delta|^2}{dT} \right] \left(-\frac{\partial f}{\partial E_k} \right)$$

エントロピーバランス

$$\int_0^{T_c} dT \frac{C}{T} = S(T_c) - S(0) = S(T_c) \rightarrow \int_0^{T_c} dT \frac{C_S}{T} = \int_0^{T_c} dT \frac{C_N}{T}$$

T_c 近傍 cf. ランダウ理論

$$|\Delta| \text{ で展開すると } F = F_N + \frac{a}{2} |\Delta|^2 + \frac{b}{4} |\Delta|^4 + \dots = \rho_F \left[|\Delta|^2 \ln \frac{T}{T_c} + \frac{7\zeta(3)}{16(\pi k_B T_c)^2} |\Delta|^4 + \dots \right]$$

$\zeta(x)$: リーマンのゼータ関数

$$a = \alpha(T - T_c) \quad \alpha = \frac{2\rho_F}{T_c}$$

$$\frac{a}{2} = \frac{1}{V} - \sum_k \frac{\tanh(\beta \xi_k/2)}{2\xi_k} = \rho_F \ln \frac{T}{T_c} \quad b = \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{\xi_k^3} \left[\tanh\left(\frac{\beta \xi_k}{2}\right) - \frac{\beta \xi_k/2}{\cosh^2(\beta \xi_k/2)} \right] = \frac{\rho_F}{4(k_B T)^2} \int_0^\infty dx \frac{1}{x^3} \left(\tanh x - \frac{x}{\cosh^2 x} \right) = \frac{7\zeta(3)}{4} \frac{\rho_F}{(\pi k_B T)^2}$$

比熱 $C_N = \gamma T_c \quad \gamma = \frac{2(\pi k_B)^2 \rho_F}{3} \quad C_S = \frac{\alpha^2 T_c}{2b} = \frac{8(\pi k_B)^2 \rho_F}{7\zeta(3)}$

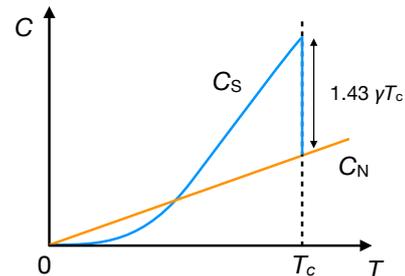
$$\frac{C_S - C_N}{\gamma T_c} = \frac{12}{7\zeta(3)} = 1.43 \quad \text{物質によらない普遍定数}$$

低温

$$C \sim 2 \sum_k \frac{E_k^2}{T} \left(-\frac{\partial f}{\partial E_k} \right) = \frac{k_B \rho_F}{(k_B T)^2} \int_0^\infty d\xi \frac{E^2}{\cosh^2(\beta E/2)}$$

$$\sim \frac{4k_B \rho_F |\Delta_0|^2}{(k_B T)^2} e^{-\beta |\Delta_0|} \int_0^\infty d\xi e^{-\beta \xi^2/2|\Delta_0|}$$

$$= 2\sqrt{2\pi} k_B \rho_F |\Delta_0|^{3/2} (k_B T)^{-3/2} e^{-\beta |\Delta_0|}$$



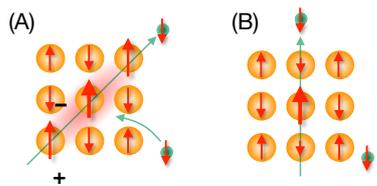
異方的超伝導

119

異方的超伝導

BCSとは異なる引力の起源

例：スピンの揺らぎ (反強磁性秩序の近く)

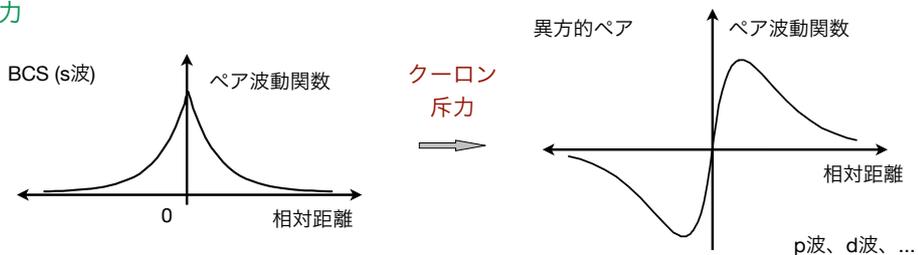


方向に依存した引力

(A) 対角線方向に移動する電子はスピン分極を引き起こし、他の電子を引きつける。

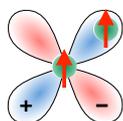
(B) 縦横に移動する電子の作る分極は(A)に比べて弱い

局所斥力



異方的クーパー対

新しい自由度をもつ基底状態と励起状態



- ・ 方向に依存した位相 (ノードの存在)
- ・ スピン3重項 (S=1)、1重項 (S=0)

120

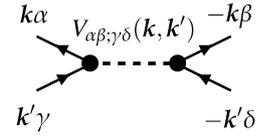
平均場近似

$$H_0 = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger c_{-k'\delta} c_{k'\gamma}$$

反交換関係 $V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_{\beta\alpha;\gamma\delta}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_{\alpha\beta;\delta\gamma}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$

エルミート $V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V_{\delta\gamma;\beta\alpha}(-\mathbf{k}', -\mathbf{k})^*$



ギャップ関数 $\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = - \sum_{k'\gamma\delta} V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{-k'\delta} c_{k'\gamma} \rangle = -\Delta_{\beta\alpha}(-\mathbf{k}) \quad \Delta_{\alpha\beta}^\dagger(\mathbf{k}) = \Delta_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k})$

$$H_{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{k\alpha\beta} (c_{k\alpha}^\dagger \ c_{-k\alpha}) \begin{pmatrix} \xi_k \delta_{\alpha\beta} & \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{\alpha\beta}^\dagger(\mathbf{k}) & -\xi_{-k} \delta_{\alpha\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\beta} \\ c_{-k\beta}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \sum_{k\alpha\beta} \langle c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger \rangle \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) + \sum_k \xi_k$$

空間反転対称性を仮定 (1重項/3重項に分類可)

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{k})(i\sigma^y)_{\alpha\beta} + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot (i\sigma\sigma^y)_{\alpha\beta}$$

dベクトル

$$\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) + d_z(\mathbf{k}) \\ -\Delta(\mathbf{k}) + d_z(\mathbf{k}) & d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta(-\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \text{Tr}[\hat{\Delta}(\mathbf{k})(i\sigma^y)^\dagger] \quad \text{偶パリティ}$$

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = -\mathbf{d}(-\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \text{Tr}[\hat{\Delta}(\mathbf{k})(i\sigma\sigma^y)^\dagger] \quad \text{奇パリティ}$$

1重項 $\Delta = \frac{1}{2}(\Delta_{\uparrow\downarrow} - \Delta_{\downarrow\uparrow}) \quad (S, S_z) = (0, 0)$

$$-d_x + id_y = \Delta_{\uparrow\uparrow} \quad (1, +1)$$

3重項 $d_z = \frac{1}{2}(\Delta_{\uparrow\downarrow} + \Delta_{\downarrow\uparrow}) \quad (1, 0)$

$$d_x + id_y = \Delta_{\downarrow\downarrow} \quad (1, -1)$$

ギャップの大きさ $\frac{1}{2} \text{Tr}[\hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k})\hat{\Delta}(\mathbf{k})] = |\Delta(\mathbf{k})|^2 + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 = D^2(\mathbf{k})$

スピン磁化 有限: 非ユニタリー $\mathbf{m}(\mathbf{k}) \perp \mathbf{d}(\mathbf{k}) \quad (1 \text{ or } 3 \text{重項})$

$$\frac{1}{2} \text{Tr}[\hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k})\sigma\hat{\Delta}(\mathbf{k})] = i[\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \mathbf{d}^*(\mathbf{k})] + [\Delta(\mathbf{k})\mathbf{d}^*(\mathbf{k}) + \Delta^*(\mathbf{k})\mathbf{d}(\mathbf{k})] = \mathbf{m}(\mathbf{k})$$

121

準粒子ハミルトニアン

$$H_{\text{MF}} = \sum_k \sum_\alpha^\pm E_{k\alpha} a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + E_0 \quad E_{k\pm} = \sqrt{\xi_k^2 + D^2(\mathbf{k}) \pm |\mathbf{m}(\mathbf{k})|} \quad E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{k\alpha} E_{k\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{k\alpha\beta} \langle c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger \rangle \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) + \sum_k \xi_k$$

引力の分解

$$V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{2} \sum_{kk'} \left[V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (i\sigma^y)_{\alpha\beta} (i\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger + V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (i\sigma\sigma^y)_{\alpha\beta} \cdot (i\sigma\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger \right]$$

$$V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V_s(\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = V_s(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_t(\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = -V_t(-\mathbf{k}, \mathbf{k}')$$

$$H_{\text{int}} = H_c + H_s \quad V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = [I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 2J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')]_{\text{even}} = \frac{1}{2} [I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 3J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + (\mathbf{k}' \rightarrow -\mathbf{k}')]_{\text{even}}$$

$$V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = [I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 2J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')]_{\text{odd}} = \frac{1}{2} [I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + (\mathbf{k}' \rightarrow -\mathbf{k}')]_{\text{odd}}$$

ギャップ方程式

1重項 $\Delta(\mathbf{k}) = \sum_{k'} V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\Delta(\mathbf{k}') \tanh(\beta E_{k'})/2}{2E_{k'}} \quad E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2} \quad \text{BCS} \quad V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V$

3重項 (ユニタリー) $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \sum_{k'} V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\mathbf{d}(\mathbf{k}') \tanh(\beta E_{k'})/2}{2E_{k'}} \quad E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2} \quad \Delta(\mathbf{k}) = \Delta$

$$H_c = - \sum_q I(q) n_q n_{-q} = - \sum_{kk'} \sum_{\alpha\beta} I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger c_{-k'\beta} c_{k'\alpha}$$

$$H_s = - \sum_q J(q) \sigma_q \cdot \sigma_{-q} = \sum_{kk'} \sum_{\alpha\beta} [J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + 2J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')] c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger c_{-k'\beta} c_{k'\alpha} \quad \sigma_{\alpha\gamma} \cdot \sigma_{\beta\delta} = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}$$

$$\frac{1}{2} \sum_{kk'} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger c_{-k'\delta} c_{k'\gamma} (i\sigma^y)_{\alpha\beta} (i\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger = \sum_{kk'} \sum_{\alpha\beta} V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger c_{-k'\beta} c_{k'\alpha} \quad (i\sigma^y)_{\alpha\beta} (i\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}$$

$$\frac{1}{2} \sum_{kk'} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger c_{-k'\delta} c_{k'\gamma} (i\sigma\sigma^y)_{\alpha\beta} \cdot (i\sigma\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger = \sum_{kk'} \sum_{\alpha\beta} V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger c_{-k'\beta} c_{k'\alpha} \quad (i\sigma\sigma^y)_{\alpha\beta} \cdot (i\sigma\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}$$

122

代表的なクーパー対

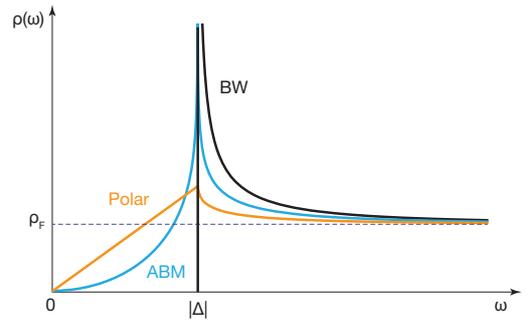
$$\hat{k} = k/k_F$$

p波 (^3He)

BW (Balian=Werthamer)状態 $d(k) = \Delta \hat{k}$

$$D^2(k) = |\Delta|^2 \quad \text{フルギャップ}$$

$$\rho(\omega) = \frac{\rho_F |\omega|}{\sqrt{\omega^2 - |\Delta|^2}} \theta(|\omega| - |\Delta|)$$

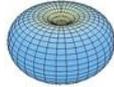


ABM (Andreson=Brinkman=Morel)状態 $d(k) = -i\Delta(\hat{k}_y, \hat{k}_x, 0)$

(Axial状態)

$$D^2(k) = |\Delta|^2(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) = |\Delta|^2 \sin^2 \theta \quad \text{ポイントノード}$$

$$\rho(\omega) = \frac{\rho_F |\omega|}{2|\Delta|} \ln \left| \frac{\omega + |\Delta|}{\omega - |\Delta|} \right| \propto \omega^2$$



低温の熱力学量

$$\rho(\omega) \propto \omega^\alpha$$

比熱 $C \propto \rho_F T^{\alpha+1}$

縦緩和率 $1/T_1 \propto \rho_F^2 T^{2\alpha+1}$

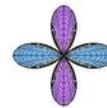
Polar状態 $d(k) = \Delta(0, 0, \hat{k}_z)$

$$D^2(k) = |\Delta|^2 \hat{k}_z^2 = |\Delta|^2 \cos^2 \theta \quad \text{ラインノード}$$

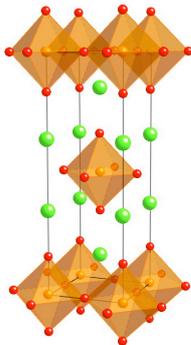
$$\rho(\omega) = \frac{\rho_F |\omega|}{|\Delta|} \left[\frac{\pi}{2} \theta(|\Delta| - |\omega|) + \theta(|\omega| - |\Delta|) \sin^{-1} \left| \frac{\Delta}{\omega} \right| \right] \propto \omega$$



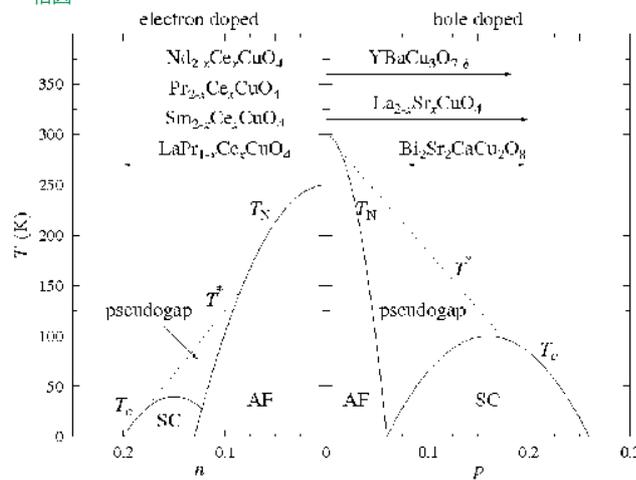
d波 (銅酸化物高温超伝導) $\Delta(k) = \Delta(\hat{k}_x^2 - \hat{k}_y^2) = \Delta \cos(2\phi)$ ラインノード



銅酸化物高温超伝導体



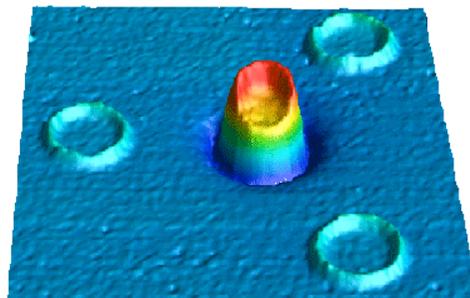
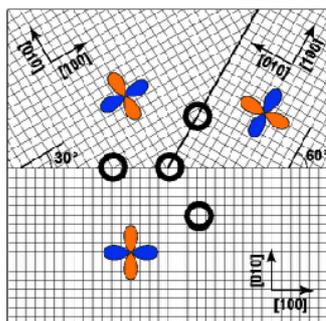
相図



相対位相の検出

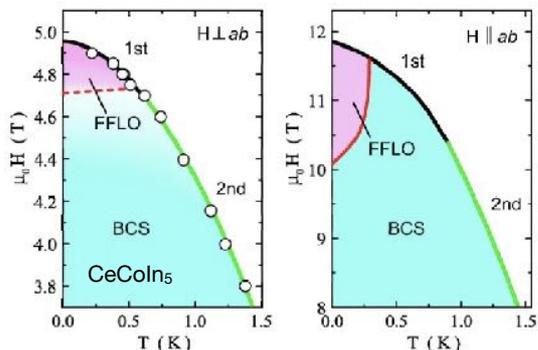
YBa2Cu3O7-δ

C.C. Tsuei et al. Phys. Rev. Lett. **75** (1994) 593.

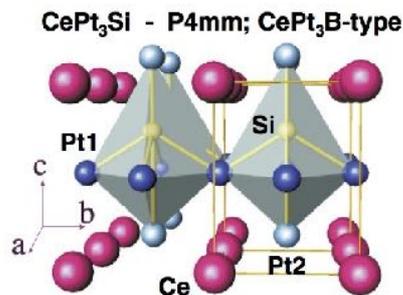


- ・スピンの揺らぎ ($J \sim 10^3$ K)
- ・擬2次元性

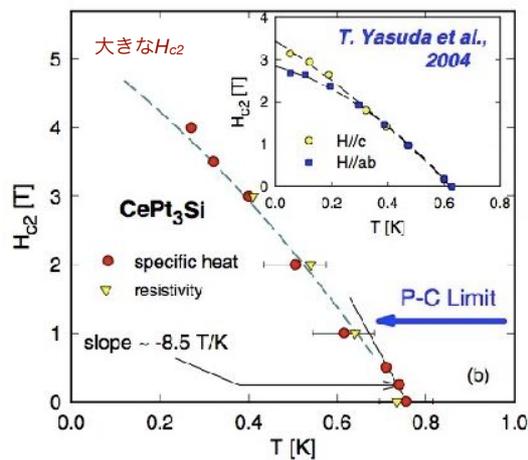
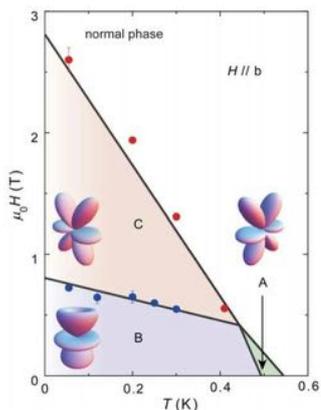
K. Kumagai et al.: J. Phys. Conf. Ser. **150** 052135 '09



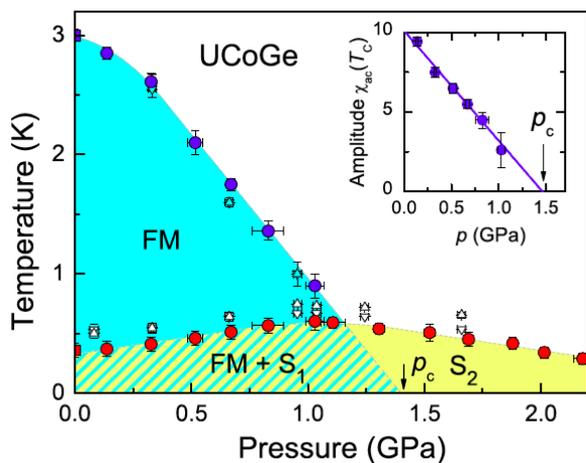
E. Bauer et al.: JPSJ **76** 051009 '07



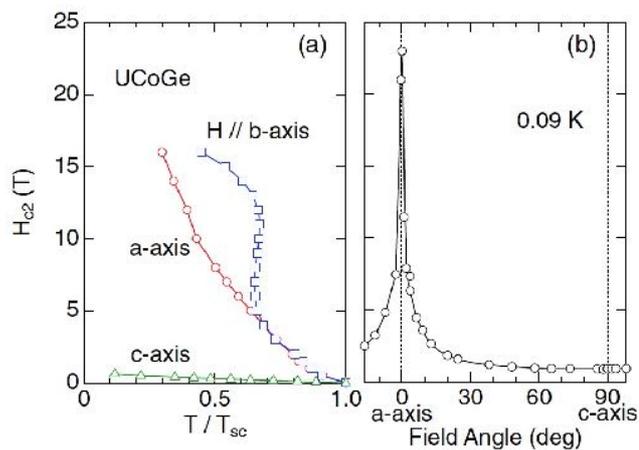
Y. Machida et al.: Phys. Rev. Lett. **108** 157002 '12



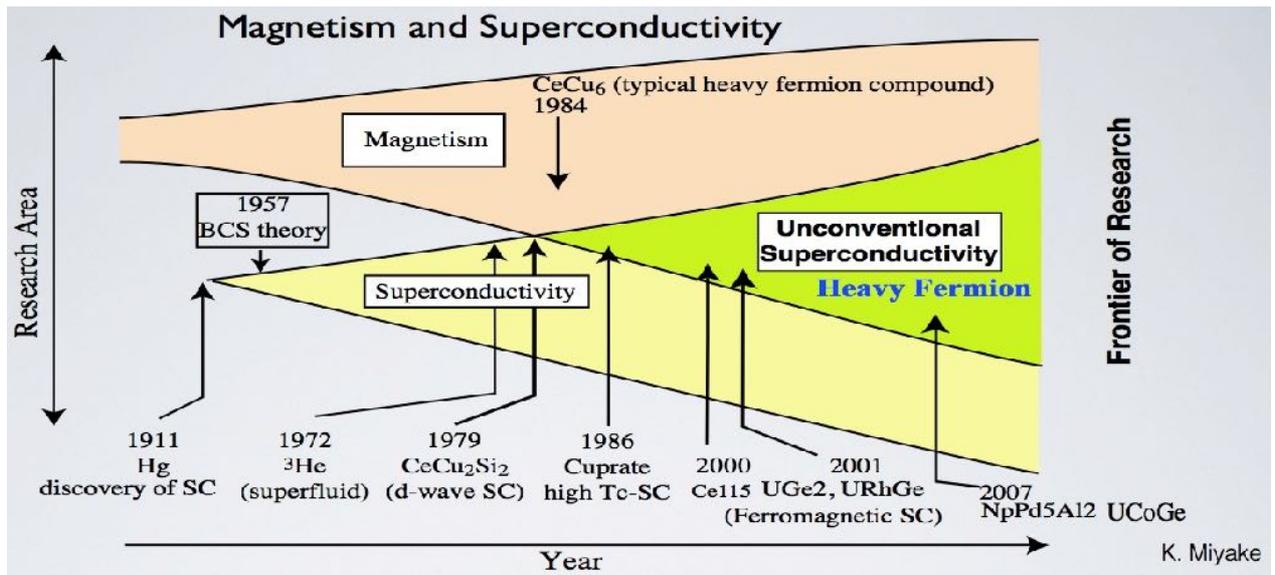
E. Slooten et al. Phys. Rev. Lett. **103** (2009) 097003.



D. Aoki et al. J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 113709.



- ・ 異常な異方性
- ・ 自己誘起磁束格子状態
- ・ 平行スピン対



付録

線形応答理論

断熱応答 $t=-\infty$ で熱平衡にあった系を熱浴から切り離し、外場 $H_{\text{ext}}(t)=-AF(t)$ をゆっくりと印加

時刻 t における B の期待値 $\langle B \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t-t') \chi_{BA}(t') F(t-t')$

ハイゼンベルグ表示

$$B(t) = e^{iHt/\hbar} B e^{-iHt/\hbar}$$

久保公式 (応答関数) $\chi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [B(t), A] \rangle$

密度演算子 $\rho = \frac{e^{-\beta K}}{Z}, \quad Z = \text{Tr}(e^{-\beta K})$

遅延グリーン関数 $G_{BA}^R(t) = -\theta(t) \chi_{BA}(t)$

フーリエ変換 $F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} F(\omega) e^{-i(\omega+i0)t}$

平衡期待値 $K = H - \mu N$

$$\langle \dots \rangle = \text{Tr}(\rho \dots)$$

複素感受率 $\langle B \rangle_{\omega} = \chi_{BA}(\omega) F(\omega), \quad \chi_{BA}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) \chi_{BA}(t) e^{i(\omega+i0)t}$

クラマース=クローニツヒの関係式

$\theta(t)$ の存在は因果律を表す $\longleftrightarrow \chi_{BA}(z)$ は z の上半面で解析的

スペクトル(レーマン)表示 $K|n\rangle = E'_n|n\rangle$

$$\rho_m = \frac{e^{-\beta E'_m}}{Z}, \quad Z = \sum_m e^{-\beta E'_m}$$

$$\chi_{BA}(\omega) = - \sum_{mm'} \frac{(\rho_m - \rho_{m'}) \langle m|B|n\rangle \langle n|A|m'\rangle}{\hbar\omega + i0 + E'_m - E'_n}$$

$$\begin{cases} \chi'_{BA}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\chi''_{BA}(x)}{\omega - x} \\ \chi''_{BA}(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\chi'_{BA}(x)}{\omega - x} \end{cases} \quad A = A' + iA''$$

$$= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho_{BA}(x)}{\omega + i0 - x}$$

スペクトル関数

$$\rho_{BA}(x) = (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \pi \sum_{mm'} \rho_m \langle m|B|n\rangle \langle n|A|m'\rangle \delta(\hbar\omega + E'_m - E'_n)$$

$$\chi_{BA}(\omega)^* = \chi_{B^\dagger A^\dagger}(-\omega)$$

$$\chi_{\dot{B}A}(\omega) = -i\omega \left[\chi_{BA}(\omega) + \frac{1}{\hbar\omega} \langle [B, A] \rangle \right]$$

$$\chi_{B\dot{A}}(\omega) = i\omega \left[\chi_{BA}(\omega) + \frac{1}{\hbar\omega} \langle [B, A] \rangle \right]$$

自由粒子系 $K = \sum_i (\epsilon_i - \mu) c_i^\dagger c_i$

$$\chi_{BA}(\omega) = - \sum_{ij} \frac{(f_i - f_j) \langle i|B|j \rangle \langle j|A|i \rangle}{\hbar\omega + i0 + \epsilon_i - \epsilon_j} \quad f_i = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} \pm 1}$$

+: フェルミ粒子
-: ボーズ粒子

動的相関関数

$$X_{AA^\dagger}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle A(t)A^\dagger \rangle = 2\pi\hbar \sum_{mn} \rho_m |\langle m|A|n \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E'_m - E'_n)$$

揺動散逸定理

$$\chi''_{AA^\dagger}(\omega) = \frac{1}{2\hbar} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) X_{AA^\dagger}(\omega)$$

散逸 揺動

等温感受率 外場の下で、常に熱平衡を保った状態における感受率

$$\begin{aligned} \chi_{BA}^T &= \lim_{F \rightarrow 0} \frac{\langle B \rangle_F - \langle B \rangle_0}{F} = \int_0^\beta d\tau \langle A(\tau)B \rangle \\ &= - \sum_{mn}^{E'_m \neq E'_n} \frac{(\rho_m - \rho_n) \langle m|B|n \rangle \langle n|A|m \rangle}{E'_m - E'_n} + \beta \sum_{mn}^{E'_m = E'_n} \rho_m \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle \\ &= \chi_{BA}(\omega \rightarrow 0) + \epsilon_{BA} \quad \epsilon_{BA} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\beta dt \langle A(t)B \rangle \end{aligned}$$

虚時間ハイゼンベルグ表示

$$A(\tau) = e^{\tau K} A e^{-\tau K}$$

一様静的感受率

散逸を伴わない場合: $\omega \rightarrow 0, q \rightarrow 0$ の順で極限を取れば $\epsilon_{BA} = 0$

散逸を伴う場合: $q \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$ の順で極限を取れば $\epsilon_{BA} = 0$

温度(松原)グリーン関数

時間順序演算子 (T積)

$$G_{BA}(\tau) = - \langle T_\tau(B(\tau)A) \rangle \quad T_\tau(A(\tau)B) = \theta(\tau)A(\tau)B \mp \theta(-\tau)BA(\tau) \quad -\beta < \tau < \beta$$

$G_{BA}(\tau + \beta) = \mp G_{BA}(\tau)$ 周期 β の反周期(周期)関数

松原振動数

$$\implies G_{BA}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau G_{BA}(\tau) e^{i\omega_n \tau} \quad \omega_n = \begin{cases} \frac{\pi}{\beta}(2n+1) & (\text{フェルミ粒子}) \\ \frac{2\pi}{\beta}n & (\text{ボーズ粒子}) \end{cases}$$

$$G_{BA}(i\omega_n) = \sum_{mn} \frac{(\rho_m - \rho_n) \langle m|B|n \rangle \langle n|A|m \rangle}{i\omega_n + E'_m - E'_n}$$

解析接続

$$G_{BA}(i\omega_n \rightarrow \omega + i0) = G_{BA}^R(\omega) \quad \omega_n > 0$$

各種関数の相関図

