

強相関化合物の有効模型と 平均場近似

岡山大学 異分野基礎科学研究所

大槻純也

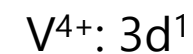
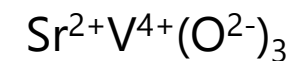
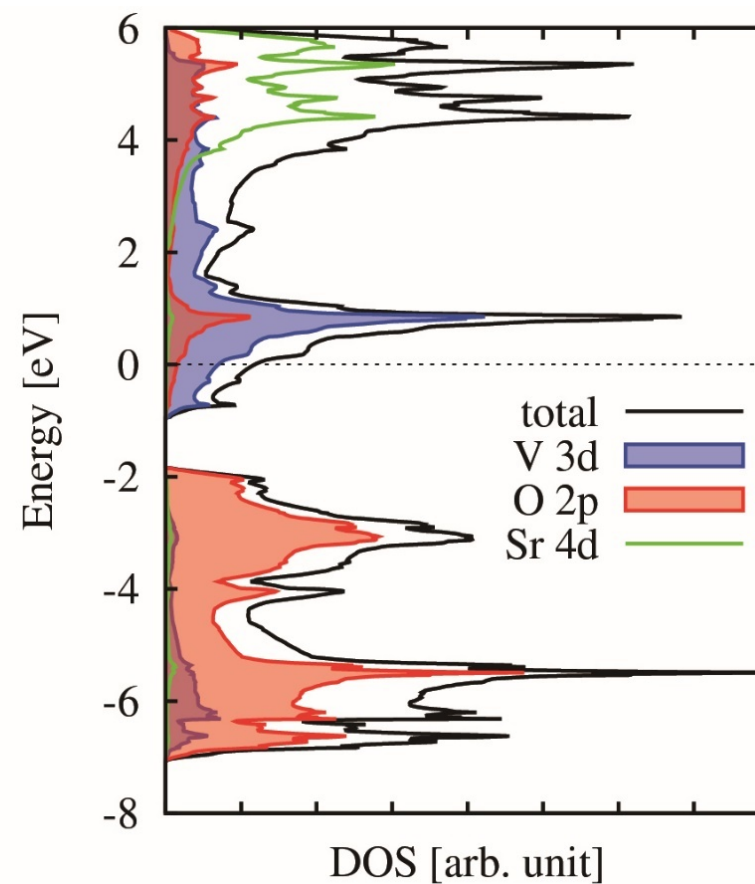
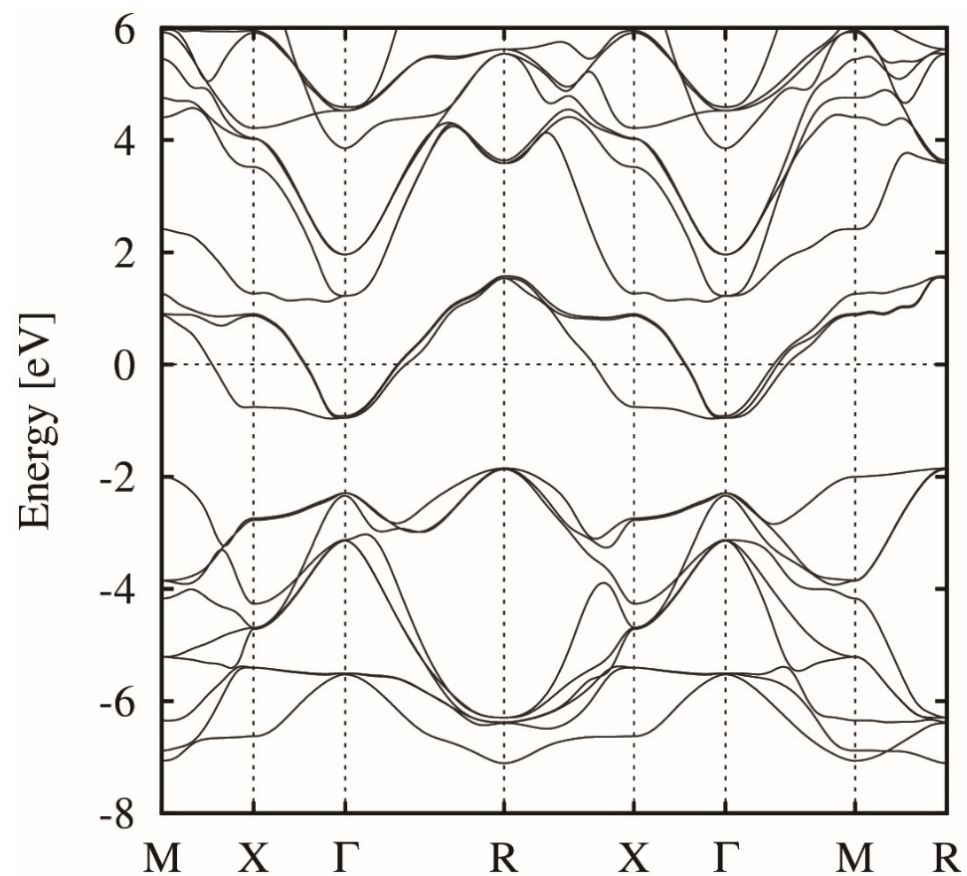


今回やること

- 強相関化合物の有効模型
 - d電子系とf電子系の違いを理解する
- 平均場近似を適用
 - スピンゆらぎが大きくなることを理解する
(原子極限と同じ結論)

d電子系の例：SrVO₃

局所密度近似（電子相関なし）



d電子系：ハバード模型

エネルギー分散

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{ij, \alpha\beta, \sigma} t_{ij, \alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \epsilon_{\mathbf{k}\lambda} c_{\mathbf{k}\lambda\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\lambda\sigma}$$

α, β : 軌道 $d_{xy}, d_{yz}, d_{zx}, d_{z^2}, d_{x^2-y^2}$

σ : スピン

λ : バンドインデックス

単一軌道の場合

$$\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_i \underline{n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}$$

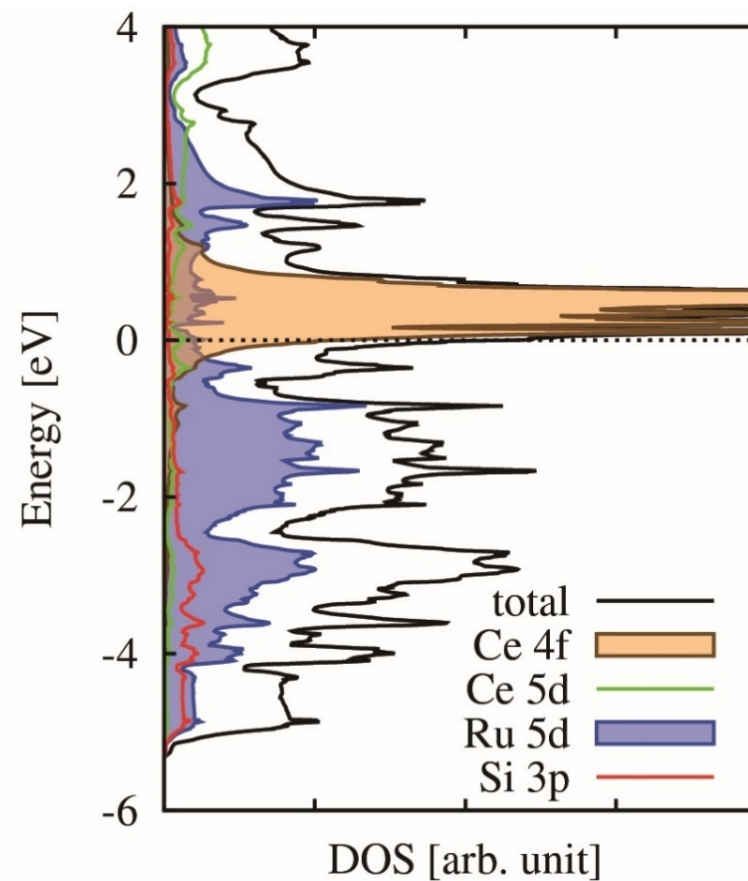
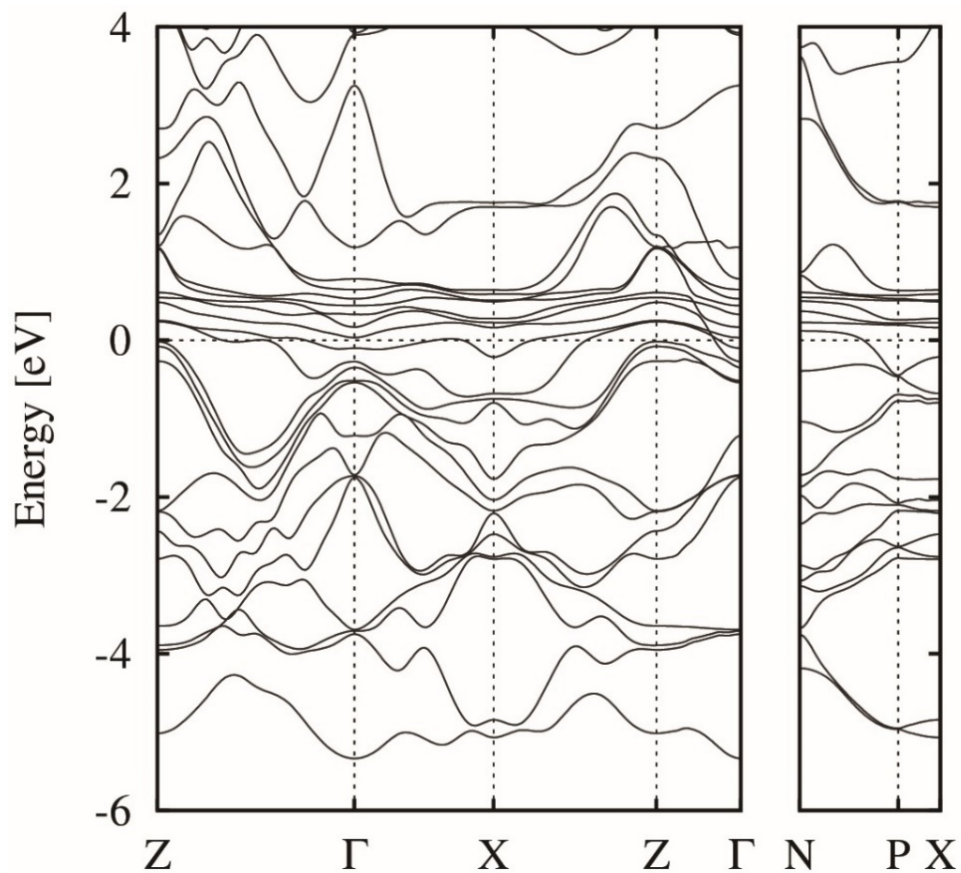
遮蔽された短距離クーロン相互作用

金属中では遮蔽効果により、クーロンポテンシャルが遮蔽されて短距離型（湯川型）になる

$$\frac{1}{r} \rightarrow \frac{e^{-\gamma r}}{r}$$

f電子系の例：CeRu₂Si₂

局所密度近似（電子相関なし）



Ce: 4f²6s²
Ce³⁺: 4f¹

周期アンダーソン模型

幅の狭いfバンドと幅の広い伝導バンド(d, p)

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left[\sum_{\lambda} \epsilon_{\mathbf{k}\lambda} c_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\lambda} + \sum_{\gamma} \epsilon_{f\gamma} f_{\mathbf{k}\gamma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\gamma} + \sum_{\lambda\gamma} \left(V_{\mathbf{k}\lambda\gamma} f_{\mathbf{k}\gamma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\lambda} + V_{\mathbf{k}\lambda\gamma}^{*} c_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\gamma} \right) \right]$$

λ, γ :
バンドインデックス
(スピンも含む)

単一軌道の場合

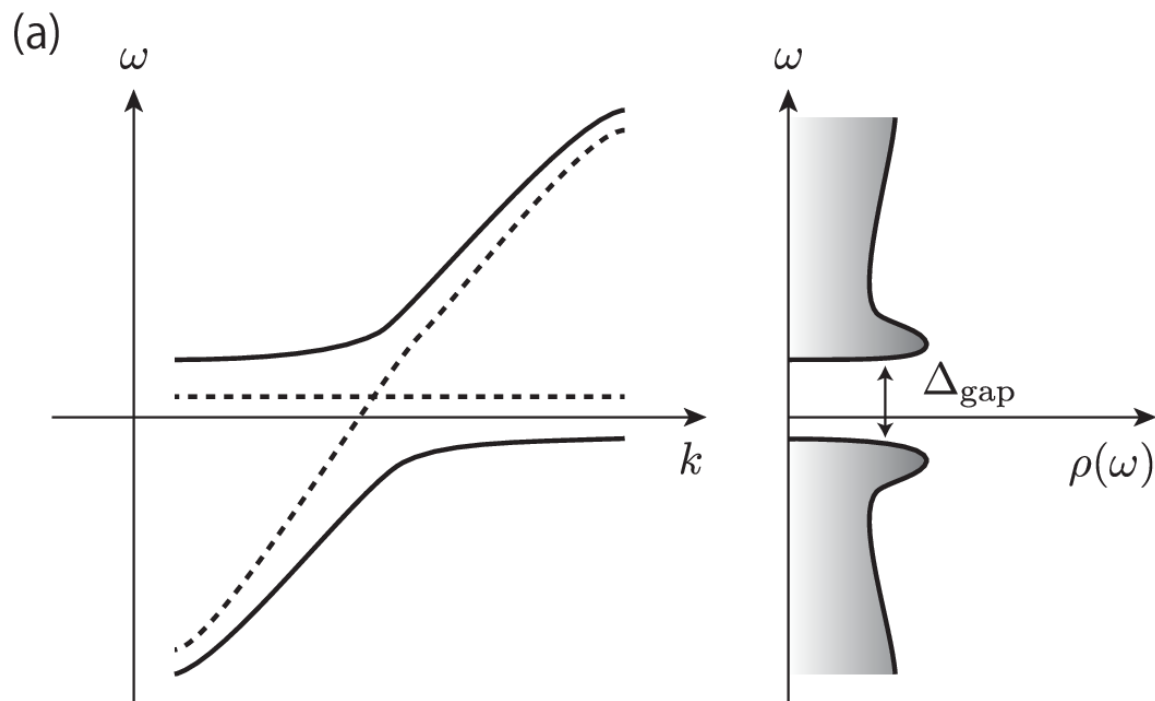
$$\mathcal{H}_{\text{PAM}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + (\epsilon_f - \mu) f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\mathbf{k}}^{*} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} \right] + U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f$$

遮蔽された短距離クーロン相互作用

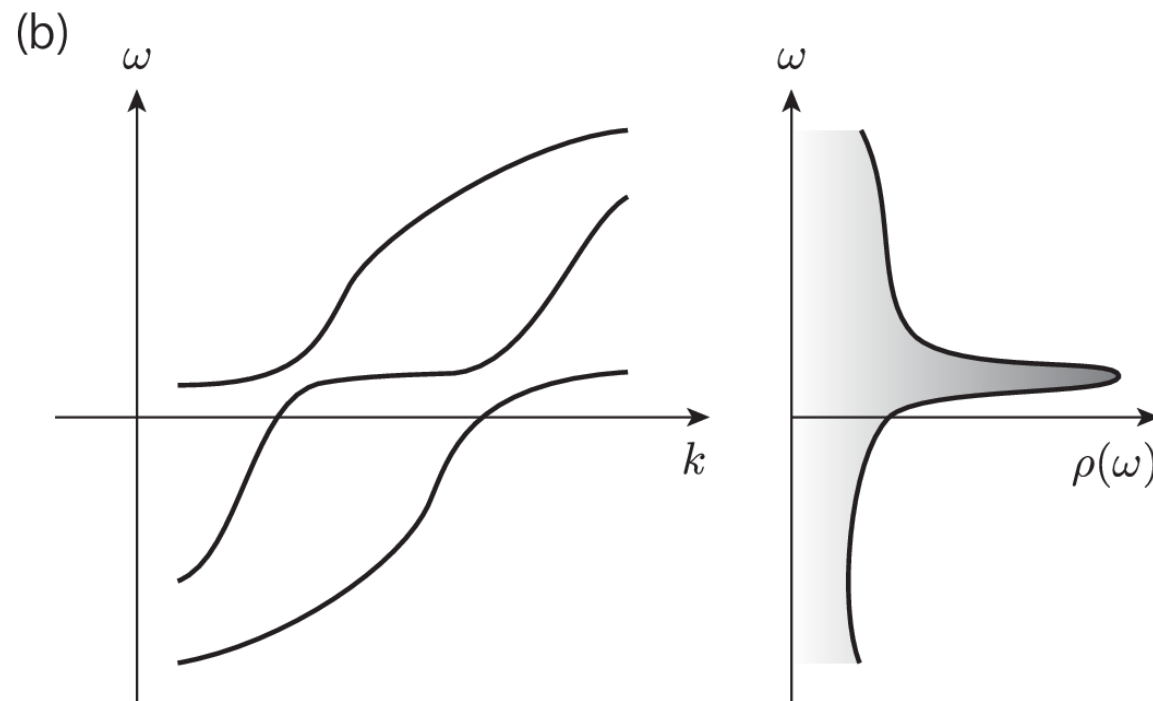
c電子間のクーロン斥力やcf間の
クーロン斥力を考える場合もある

$$U^{cc} \sum_i n_{i\uparrow}^c n_{i\downarrow}^c, \quad U^{cf} \sum_i n_i^c n_i^f$$

混成バンド



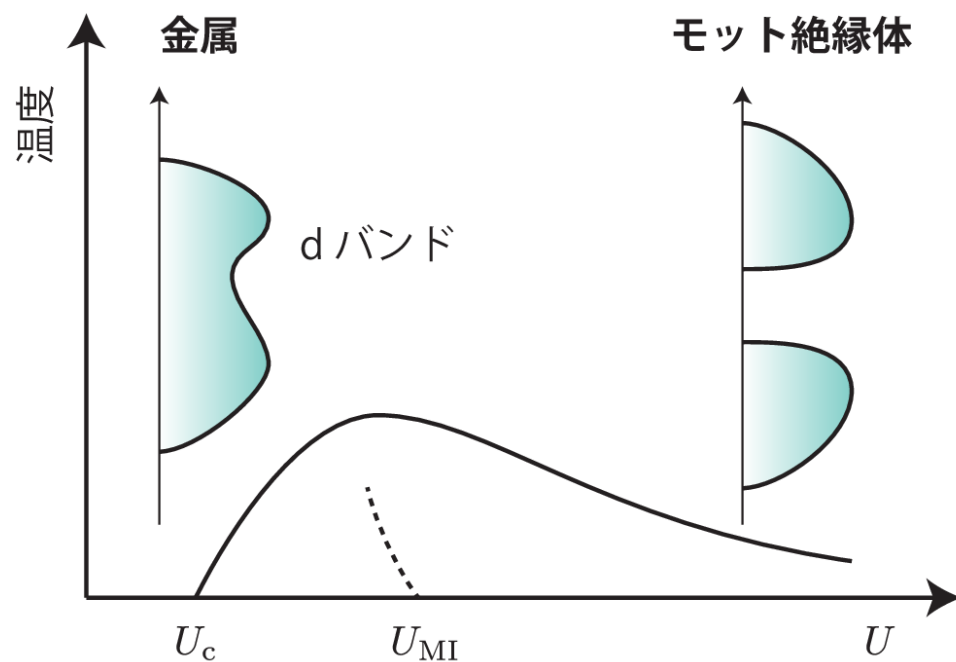
エネルギーギャップの開く場合
→近藤絶縁体
高温でギャップが閉じる



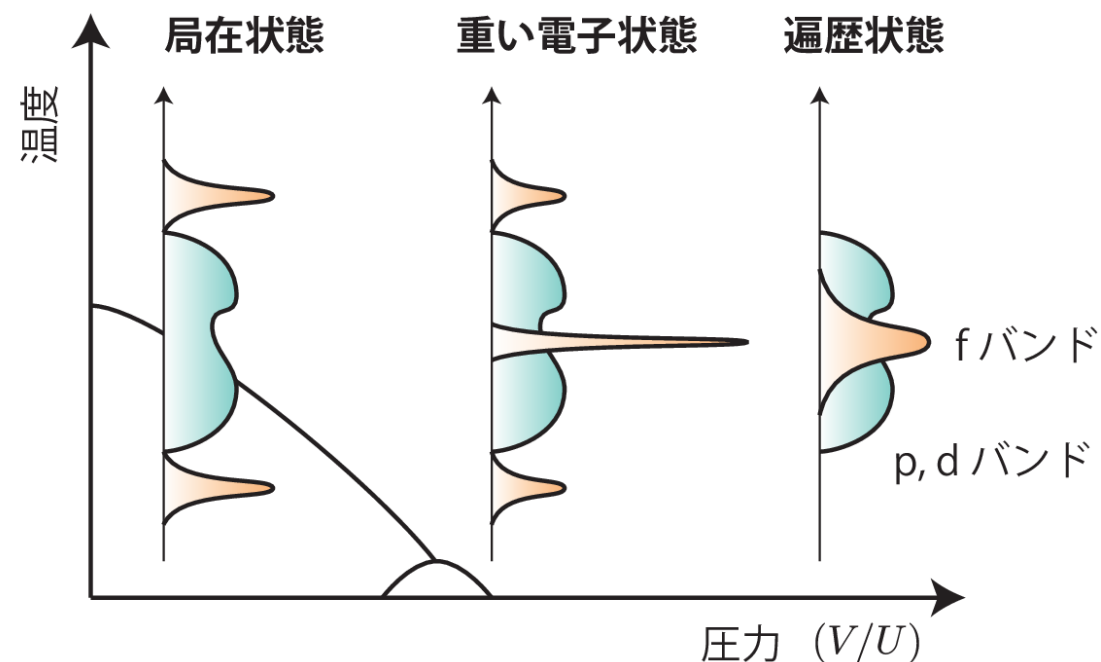
エネルギーギャップの開かない場合
→金属（フェルミ液体）
高温で準粒子ピークがなくなる

d電子系とf電子系の違い

(a) d 電子系



(b) f 電子系



平均場近似(ハートリー・フォック近似)

周期アンダーソン模型に平均場近似を適用して、
磁気モーメントが安定化することを確認する

