

令和6年 ナノマテリアル・ナノデバイスデザイン学

「磁性理論と解析」

前半：絶縁体と局在磁性

兵庫県立大学 大学院理学研究科
物質科学専攻 応用数学分野(講座) 草部浩一

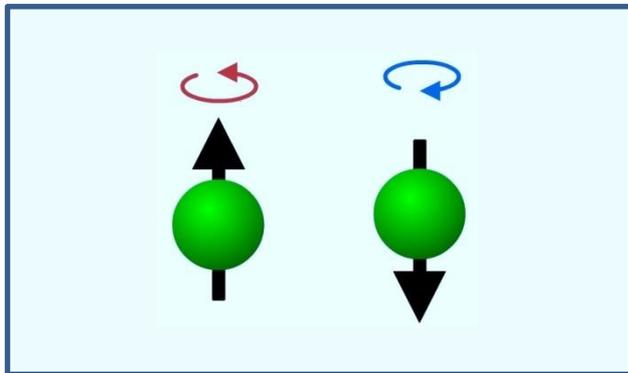
目次

- 前半：絶縁体と局在磁性
 - 局在磁性のもととなる電子相関の紹介
 - 有効磁気相互作用
- 後半：金属と遍歴磁性
 - 金属状態の表現としての密度汎関数理論の紹介
 - 金属磁性体の一般的取り扱いに向けて

常磁性共鳴にみる強相関量子物理

電子スピン共鳴

- 不対電子とその集団
- 外部磁場に対する応答
- 典型的にゼーマン効果
 - 正常ゼーマン効果
 - 異常ゼーマン効果



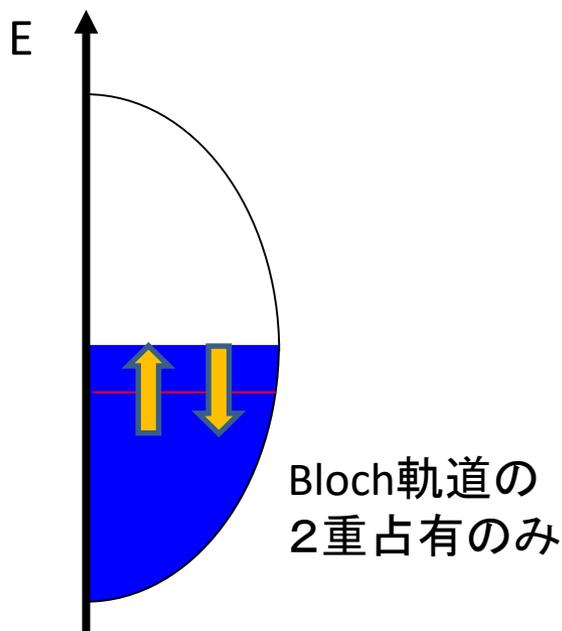
不対電子の形成

- 様々な物質中で発生
 - 気体：酸素分子
 - 液体：液体酸素、他
 - 非磁性体：金属、常磁性
 - 不純物：半導体不純物
 - 磁性体：強磁性、反強磁性
- 対にならないとは「軌道」を一つの電子だけで「占拠」していること \Leftrightarrow 強い相関
- U, J で表現される多体効果

2つの極限でのスピン状態

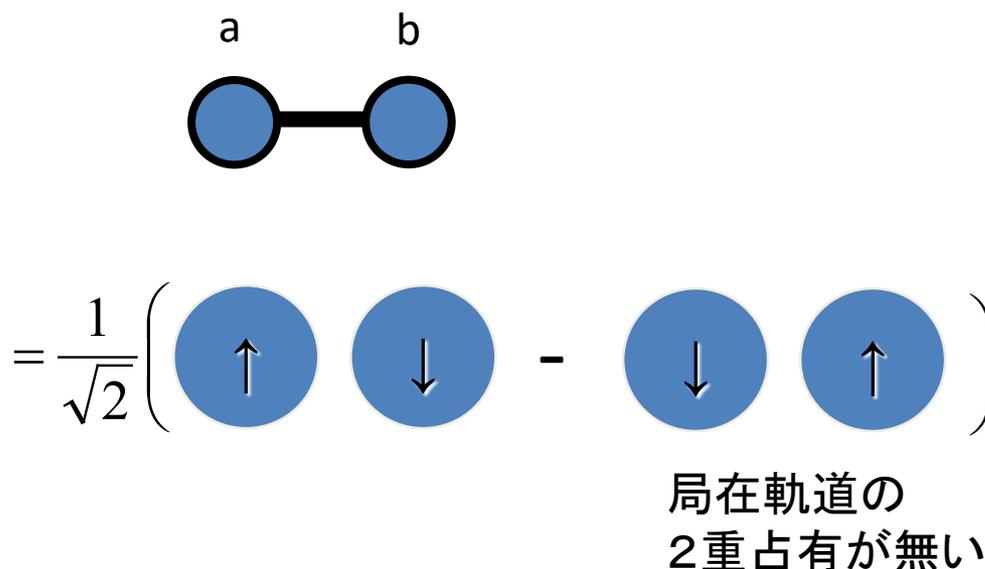
遍歴描像 (バンド状態)

「無相関」 独立粒子描像



局在描像 (エンタングルド状態)

「纏れた量子状態」 強相関描像

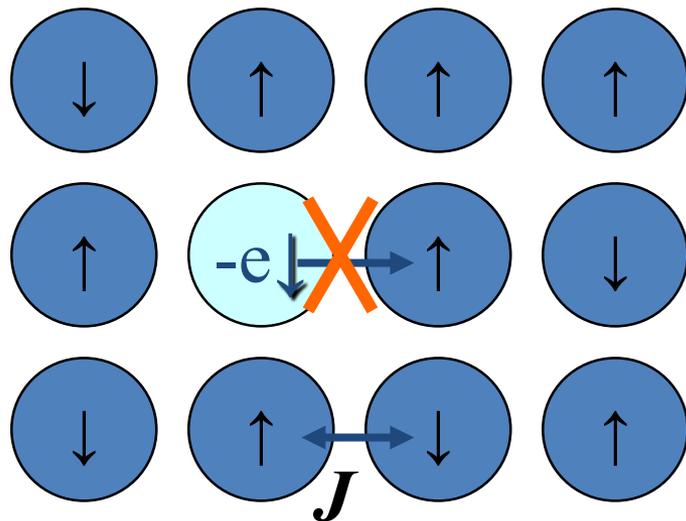


磁気モーメントが現れないs=0状態も色々！ 特に局在状態が重要！

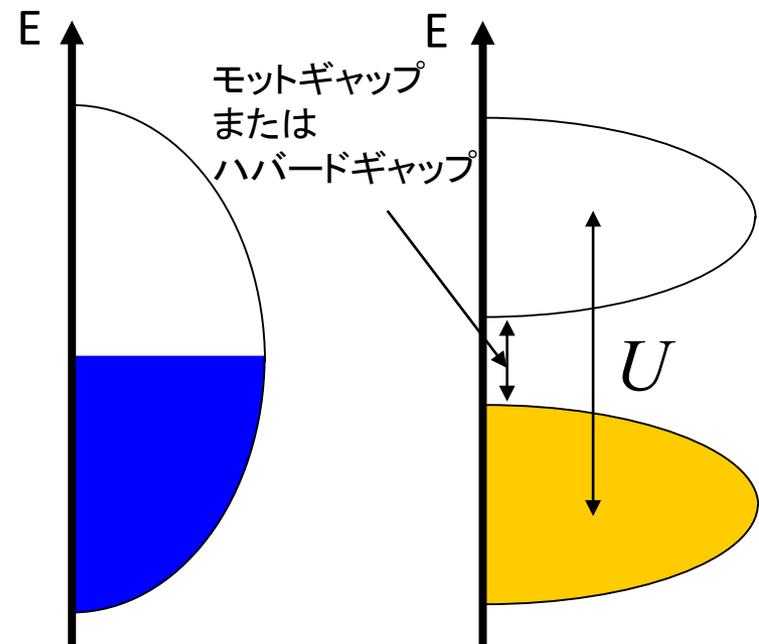
強相関=エンタングルド状態 (「量子情報・量子計算」のもと)

典型例：モット絶縁性物質

- 一つの軌道上に電子が遷移しようとする時、クーロン相互作用による反撥が“二重占有”を阻止する。

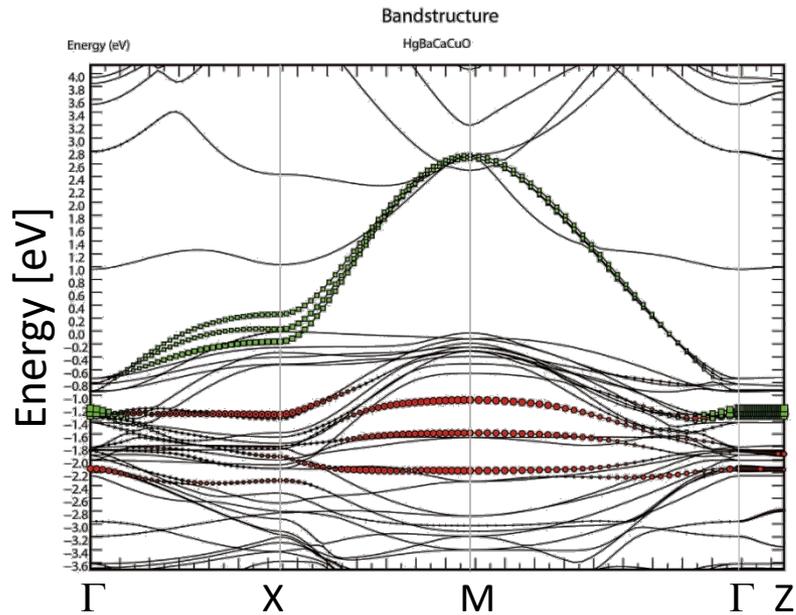


典型的には、ハーフフィルド
(各軌道が開殻・整数占有状態であるとき)
がモット型絶縁体状態を示す。

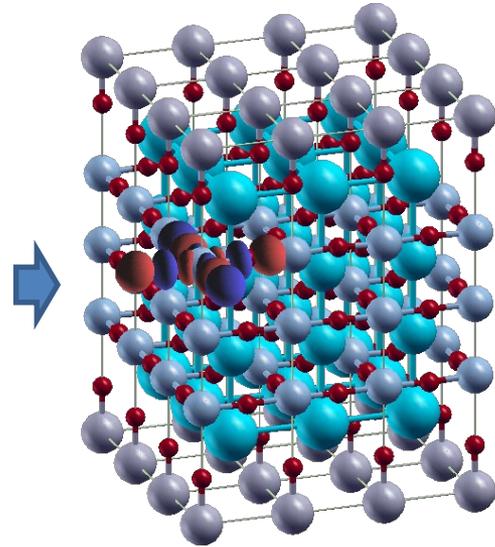


エネルギーギャップが形成されて、
一粒子状態密度が分解される。
(ハバード近似の描像に基づく概念図)

多バンドハバード模型



バンド構造



ワニエ軌道

$$U_l \quad (l = 1, 2, 3)$$
$$t_{ij}^{(ll')}$$

ハバード模型の
パラメータ

多バンドハバード模型
(強相関電子系)

多様な磁気秩序
と強相関効果

2重占有が生じない状態の表現法

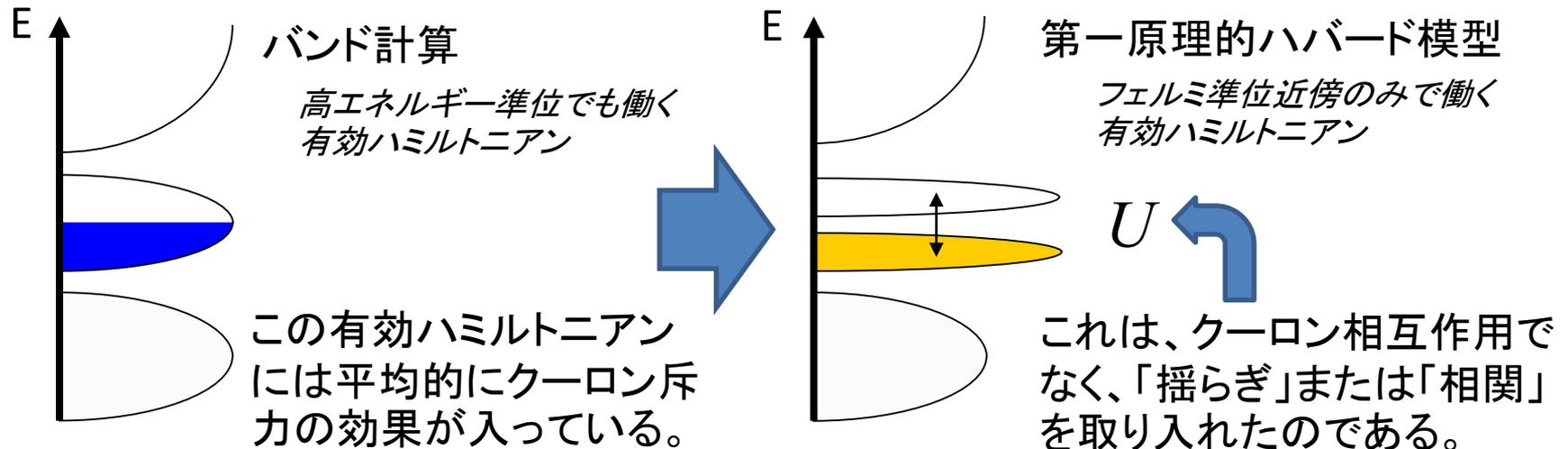
1. 状態ベクトルを射影演算子によって与える方法(変分法)

$$|S_z = 0; g\rangle = P_G \frac{1}{2} \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \downarrow \uparrow \\ \uparrow \downarrow \\ \bullet \\ \bullet \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right)$$

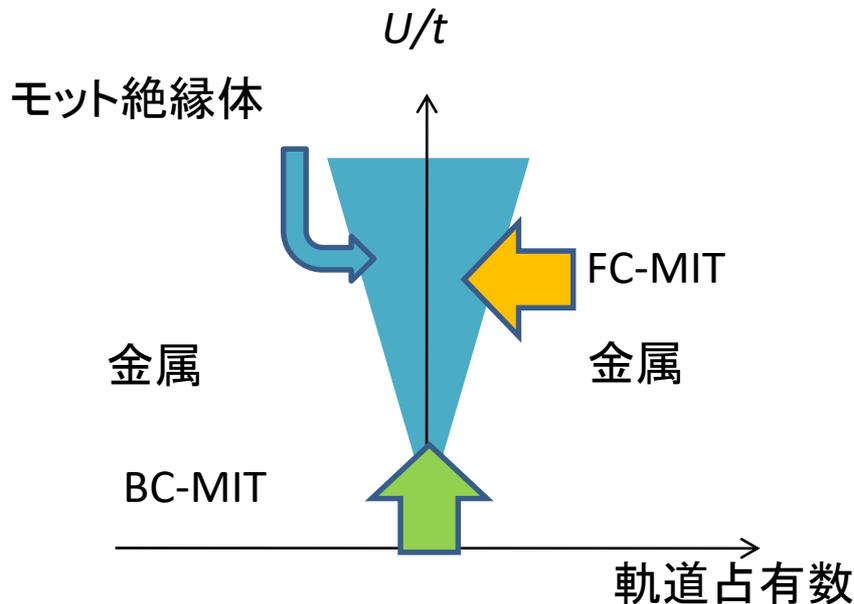
Gutzwiller projection operator (グッツヴィラーの射影演算子)

$$P_G = \prod_{i=a,b} (1 - \bar{g} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}), \quad \bar{g} = 1 - g, 0 \leq g \leq 1$$

2. 有効ハミルトニアンを用いる方法(繰り込み、ダウンフォールディングの方法)



モット金属・絶縁体転移



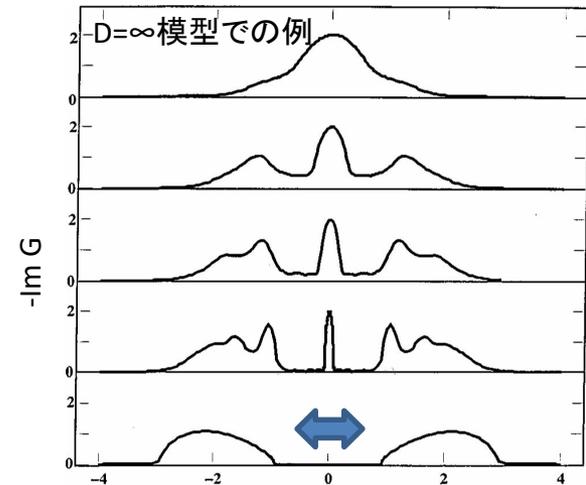
MIT: metal-insulator transition
(金属・絶縁体転移)

FC-MIT: filling control MIT
(占有数制御型モット金属・絶縁体転移)

BC-MIT: bandwidth control MIT
(バンド幅制御型モット金属・絶縁体転移)

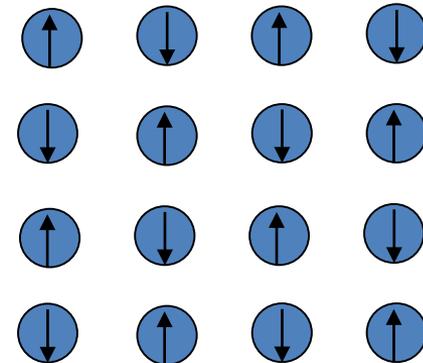
Cf: Imada, Fujimori & Tokura, RMP (1998).

モット絶縁体化したとき、
1. 電荷励起にギャップが開くと同時に、



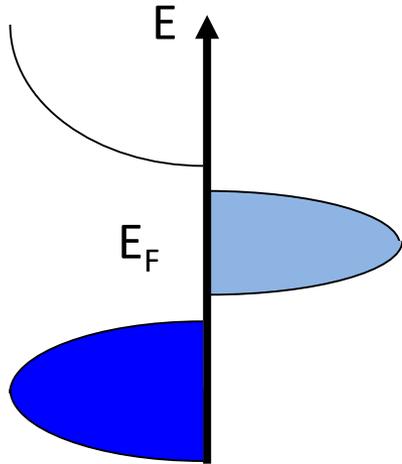
Cf. Georges, et al. RMP (1996).

2. 同時に、「局在磁性」を発生しやすい。



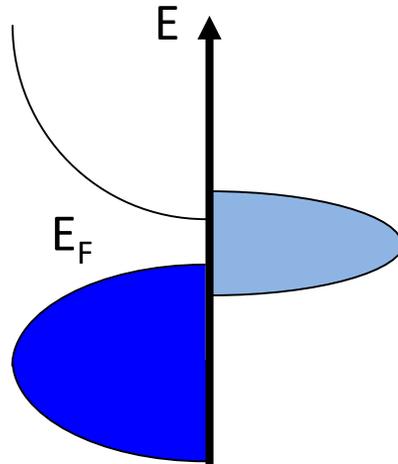
新しい密度汎関数法の効果

理想的な
孤立強相関バンド



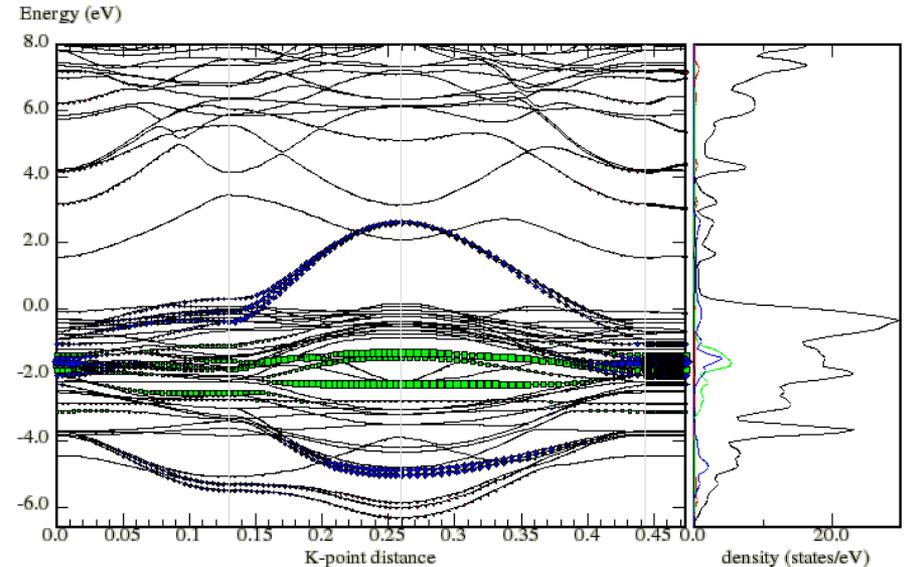
従来法
“Down folding”
でも扱える。

現実的な
孤立強相関バンド



新手法
“Up conversion”
でないと扱えない。

TI-系超伝導体のバンド構造



「強相関性バンド」は
「占有酸素バンド」と「非占有バッファ層」
の間にまたがって存在する。

さらに我々の“アップコンバージョンモデル”は自己無撞着計算法として

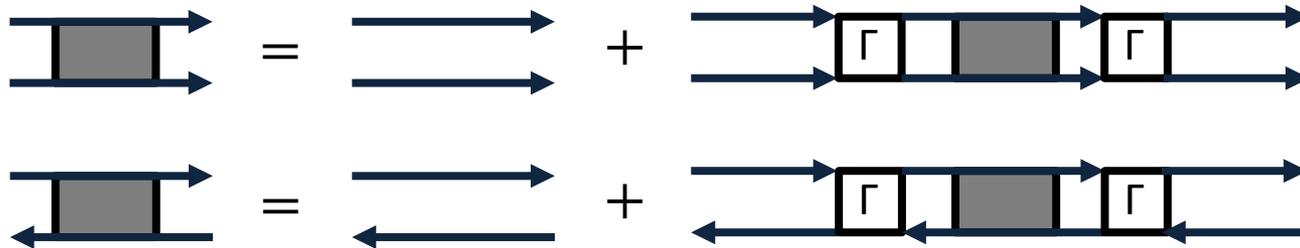
超交換相互作用、超ペア散乱、分散力、などの超過程も取り扱える。

量子相関としての遮蔽相互作用

新しい密度汎関数法による有効相互作用

一種のベーテ・サルペータ方程式

$$\left(\underbrace{H^1 + P_A V_{ee} P_A}_{\text{Hartree}} + \underbrace{H_{C,counter}^1 + P_A V_{ee} (1 - P_A)}_{\text{counter}} \frac{1}{H^1 + H_{C,counter}^1 - E} (1 - P_A) V_{ee} P_A \right) |\Psi_A\rangle = E |\Psi_A\rangle.$$



有効遮蔽相互作用 U

- 制限RPA法 (constrained RPA, cRPA)
 - GW-BSE法
- が近似計算法として与えられる。

Uの概算評価

制限RPA (cRPA)の方法による有効遮蔽相互作用の評価

Ref. F. Aryasetiawan, et al., Phys Rev B 70, 195104 (2004).

$$\begin{aligned} W &= [1 - vP]^{-1}v = [1 - vP_r - vP_d]^{-1}v \\ &= [(1 - vP_r)\{1 - (1 - vP_r)^{-1}vP_d\}]^{-1}v \\ &= \{1 - (1 - vP_r)^{-1}vP_d\}^{-1}(1 - vP_r)^{-1}v \\ &= [1 - W_rP_d]^{-1}W_r, \end{aligned}$$

$W_r = [1 - vP_r]^{-1}v$. この有効遮蔽相互作用を U として採用してもよい。

	Hg1201	Tl1201	CaCuO ₂
U_{bare} [eV]	12.2783	13.7685	13.7885
U_{screened} [eV]	2.9462	1.7088	3.0397

多体摂動論による導出方法も複数ある。

$$\bar{W}_r(\omega) = [1 - v(P_{(c,d)}(\omega) + P_{(d,v)}(\omega))]^{-1}v.$$

Ref. S. Teranishi, et al., J. Phys. Soc. Jpn., 87, 114701 (2018).

トランスファアの物質依存性

Material	U_{bare}	U_{screened}	U_{eff}/t
Si	> 10 eV	> 1 eV	~ 0.1
Al	> 10 eV	> 1 eV	~ 0.1
Cu oxides	> 10 eV	1 ~ 4 eV	2 ~ 6

- 軌道上の有効遮蔽相互作用強度(相関パラメータ) U_{eff} はある大きさに存在。
- バンド幅の差異が U_{eff}/t を決めている。
- 物質依存性はトランスファー t (バンド幅) に依っている。

絶縁性状態だけでなく、金属状態で U_{eff}/t が大きくなる系が知られている。

- 重い電子系 (Heavy Fermion system)
- 銅酸化物高温超伝導体

スピン間相互作用：全体像

Dipole interaction

Direct exchange : (Cf. Heitler-London theory)

Kinetic exchange : (Cf. the Hubbard model)

Super exchange

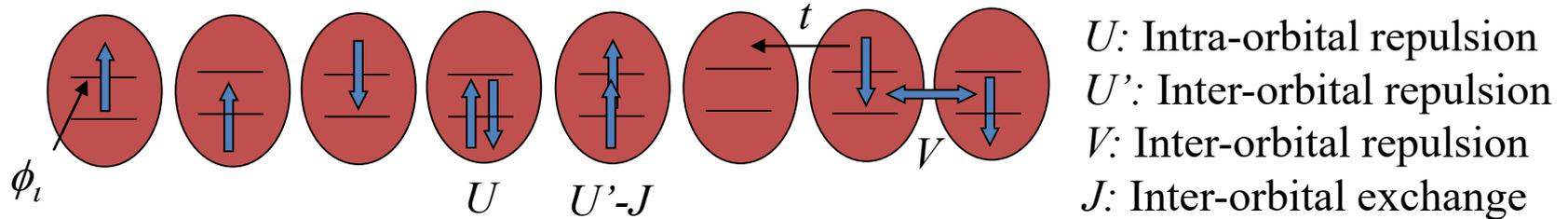
Double exchange

RKKY interaction

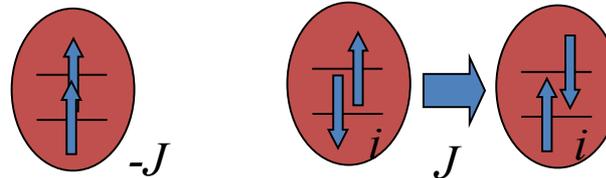
Anisotropic exchange interaction

Dzyaloshinsky-Moriya interaction

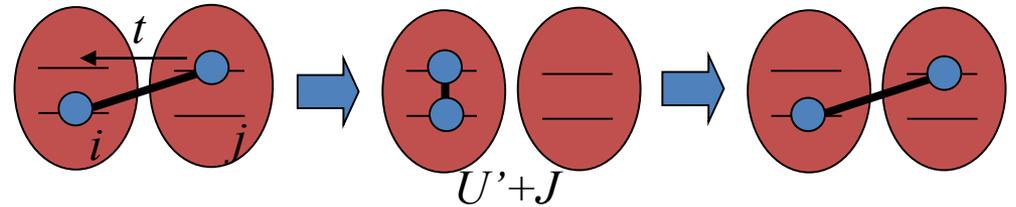
拡張ハバード模型と磁性相互作用



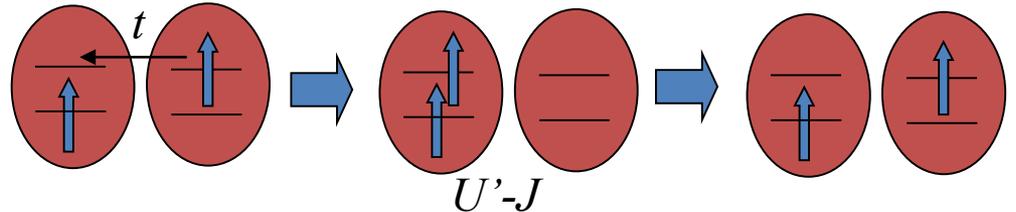
■ 直接交換相互作用



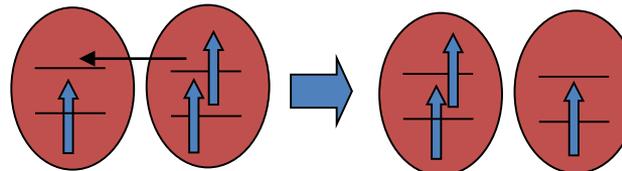
■ 運動交換相互作用 (AF channel)



■ 運動交換相互作用 (F channel)

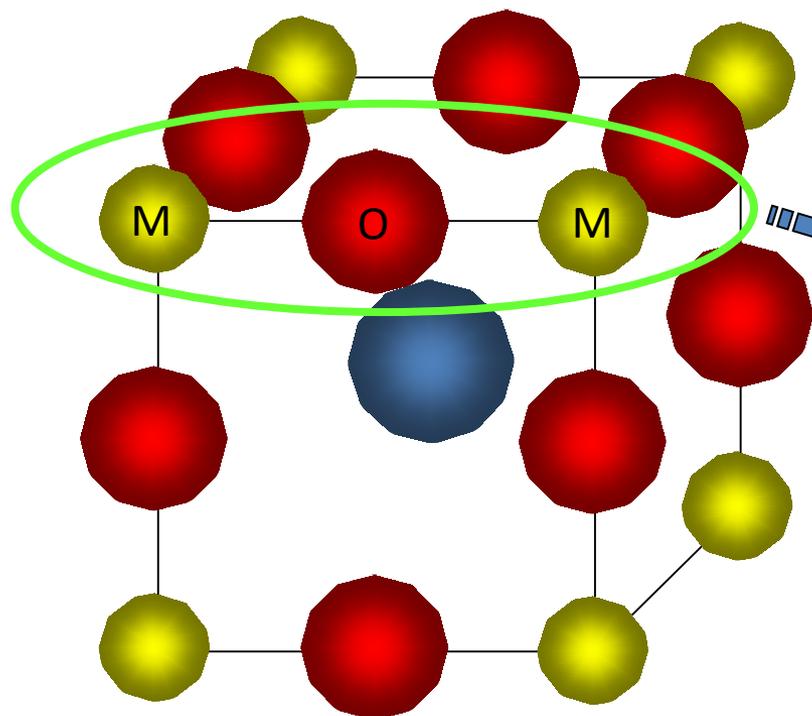


■ 二重交換相互作用 (metallic F)

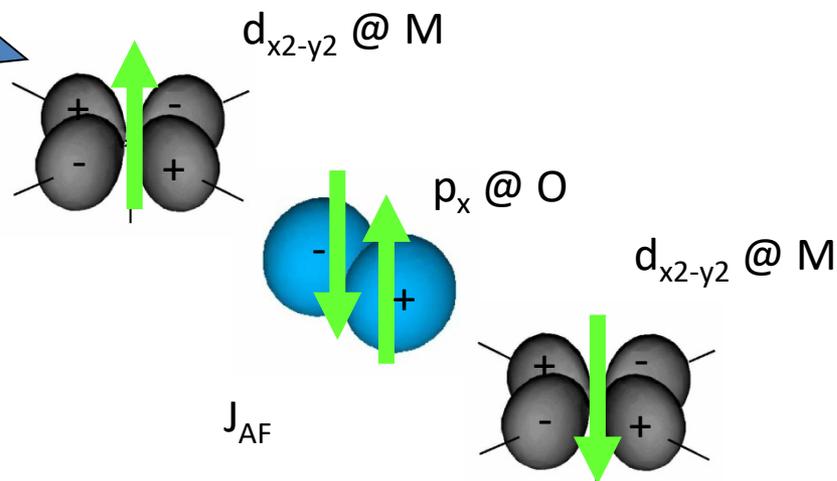


超交換相互作用

- ペロブスカイト型遷移金属酸化物結晶の、M-O-M (Mは遷移金属元素、Oは酸素)などの構造に典型的に見られる、非磁性元素を介したM上のスピンモーメント間の相互作用の総称.



Mott絶縁体を形成している場合が多く見られる. →開いたd殻をもつM

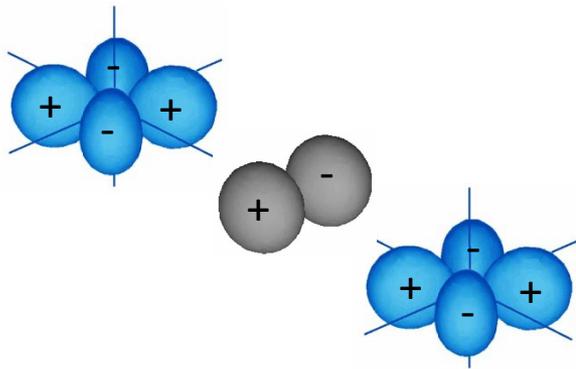


d-p模型とハバード模型

実際の電子系は複数の軌道によって記述されるが、Wannier軌道の取り方によって現れる模型が異なることがあり得る。

縮退ハバード模型：

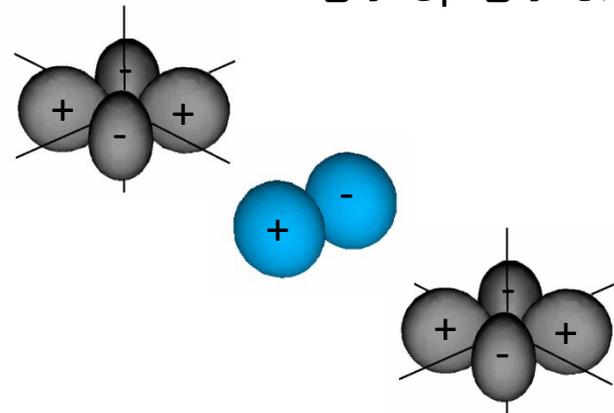
d電子のみが動く！



d-軌道のバンドのみからWannier軌道を構成すると、酸素の軌道を含んだ局在軌道が出来るが、遷移金属上のWannier軌道のみが現れる模型となる。

d-p模型：

d電子もp電子も動く！



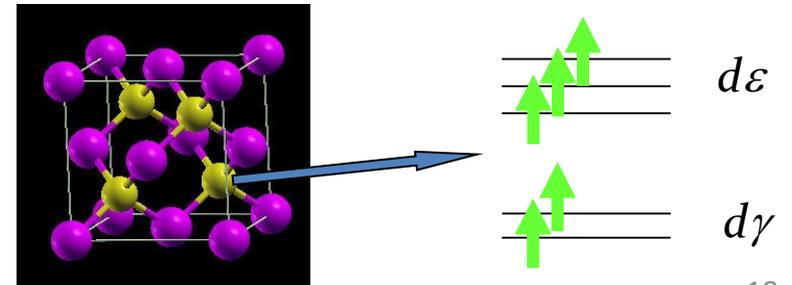
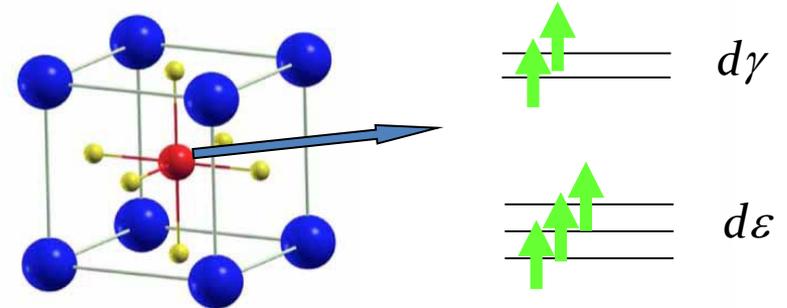
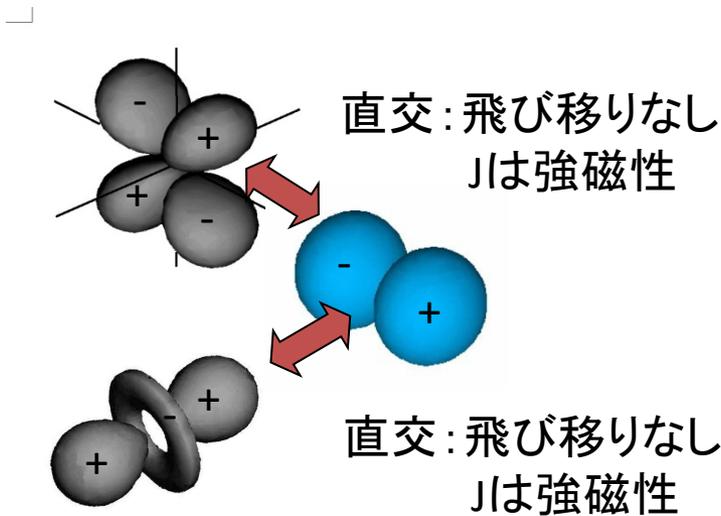
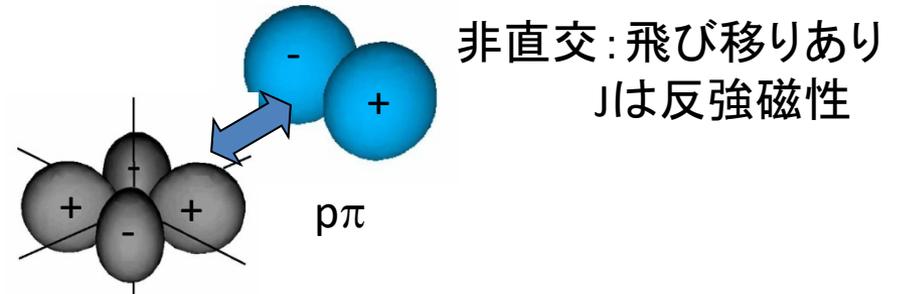
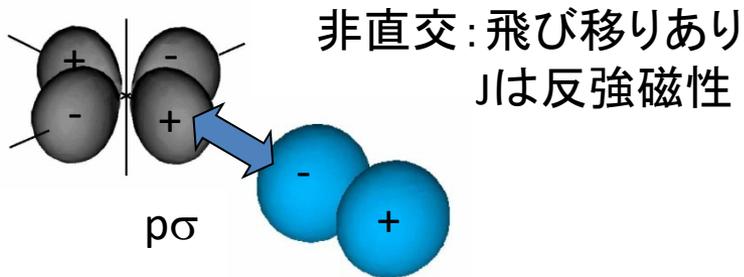
酸素軌道のバンドも考慮した多バンド系を考慮すると、遷移金属と酸素のそれぞれにWannier軌道をもつ模型が現れる。

The Kanamori-Goodenough rule

- OからMへの電子移動は非直交軌道間で起こる。
- d軌道とp軌道間の交換積分の符合は、
 - 2軌道が直交していれば直接交換により強磁性的
 - 2軌道が直交していなければ反強磁性的
- d軌道上の占有は、結晶場分裂とHund規則によりスピン状態が決定される。

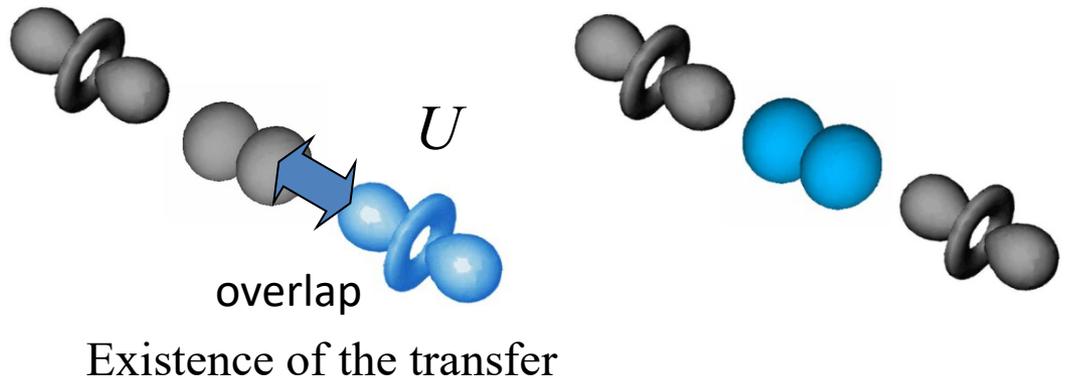
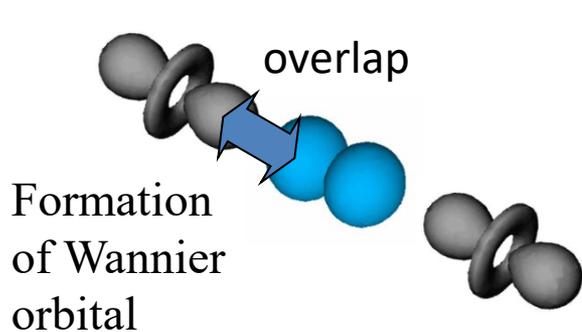
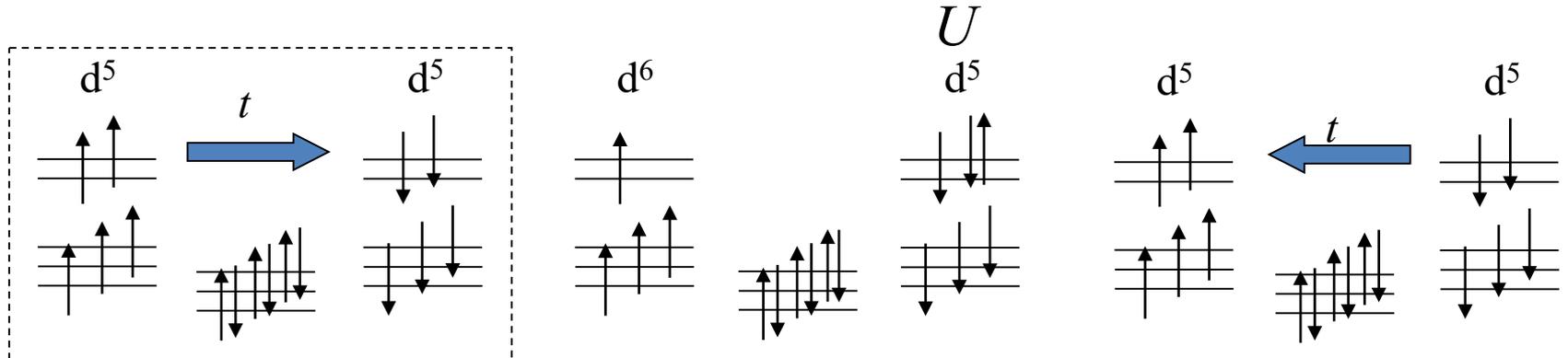
この規則により、個々の例に対して超交換相互作用の符合が決定される。

超交換相互作用導出のポイント



超交換相互作用

Half-filled d-shell

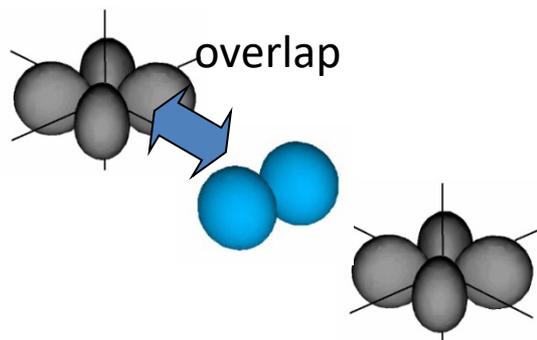


Antiferromagnetic exchange interaction

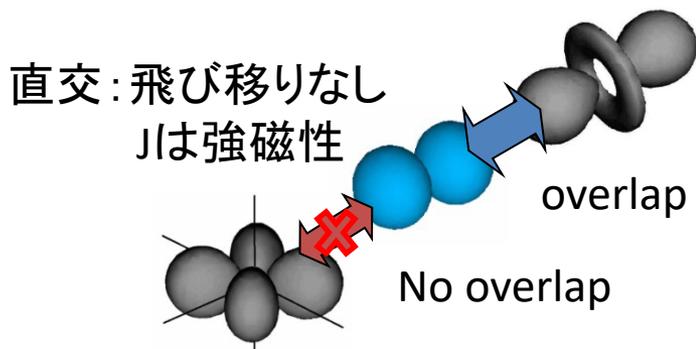
縮退ハバード模型によるAndersonによる統一的表現におけるもの。

超交換の解釈について

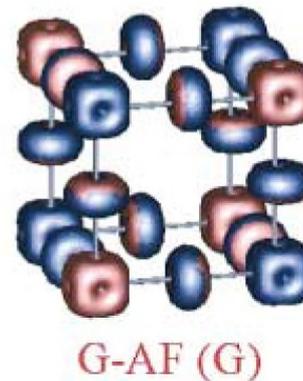
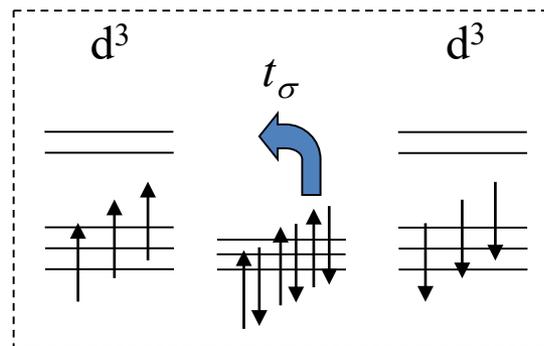
$\text{Sr}^{2+}\text{Mn}^{4+}\text{O}^{2-}_3$: Mn^{4+} は $(3d)^3$



反強磁性 超交換相互作用



反強磁性 超交換相互作用



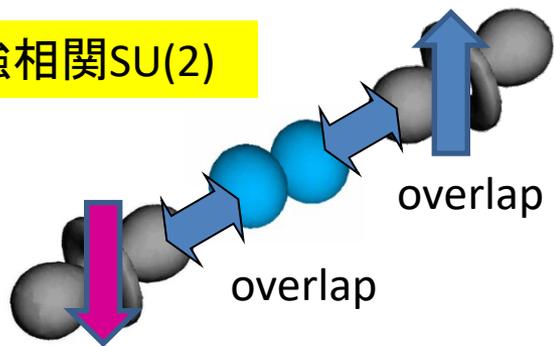
Fang, Solovyev & Terakura, PRL 84 (2000) 3169.

G-typeの反強磁性状態が発生

- : Kanamori-Goodenough則による考察
- : GGAによる計算結果、を比較しよう。

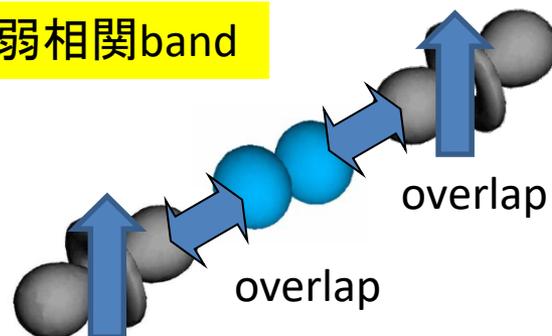
C-AF解に関する考察

強相関SU(2)



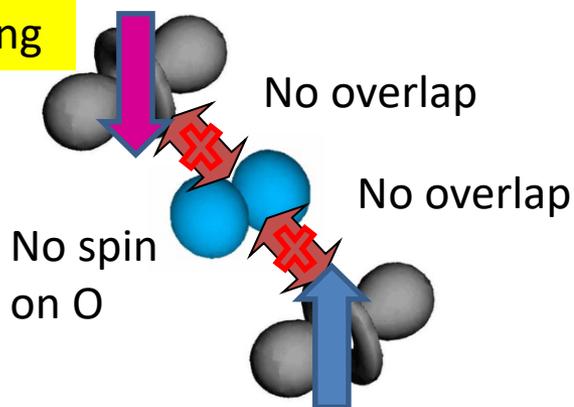
反強磁性 超交換相互作用
: 絶縁相での相互作用

弱相関band

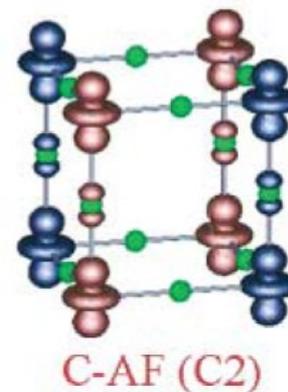


GGAによる二重交換相互作用
: 金属相での相互作用

強相関Ising



GGAにおける軌道の分化(Ising的)



GGA解 ($x=1$ の点を含む)
z軸方向金属、面内絶縁体

令和6年 ナノマテリアル・ナノデバイスデザイン学

「磁性理論と解析」

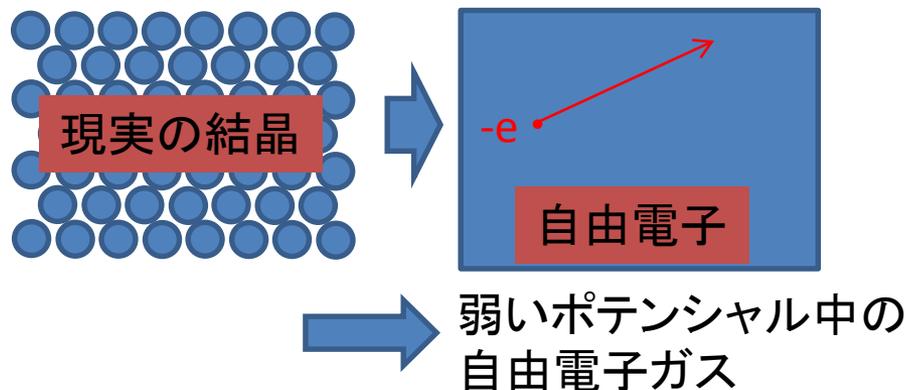
後半：金属と遍歴磁性

兵庫県立大学 大学院理学研究科
物質科学専攻 応用数学分野(講座) 草部浩一

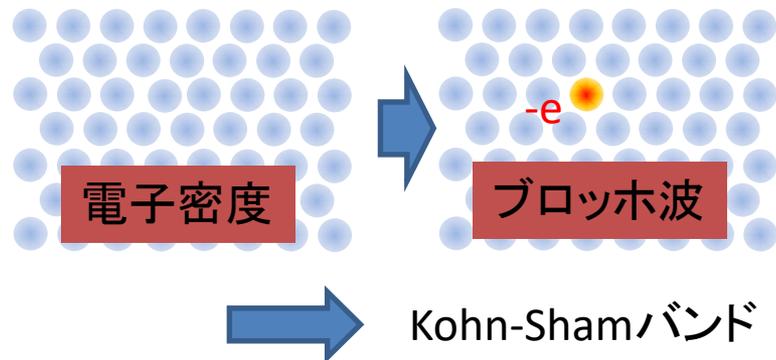
遍歴電子描像

バンド理論

ゾンマーフェルトの金属電子論

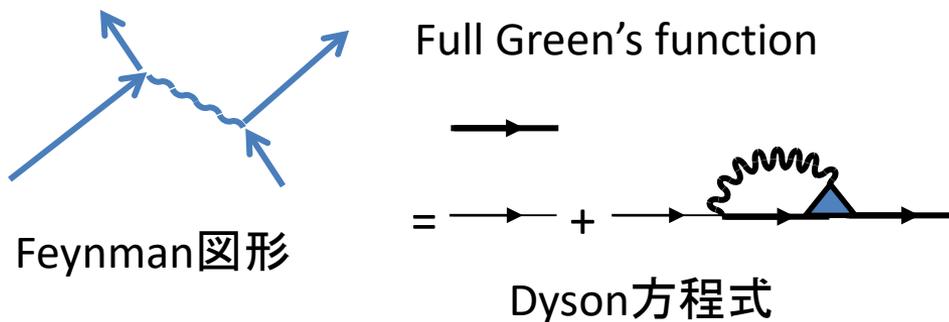


密度汎関数理論



フェルミ流体論

グリーン関数法



GW近似, GWΓ法

W: Wave

(Screened Coulomb interaction)



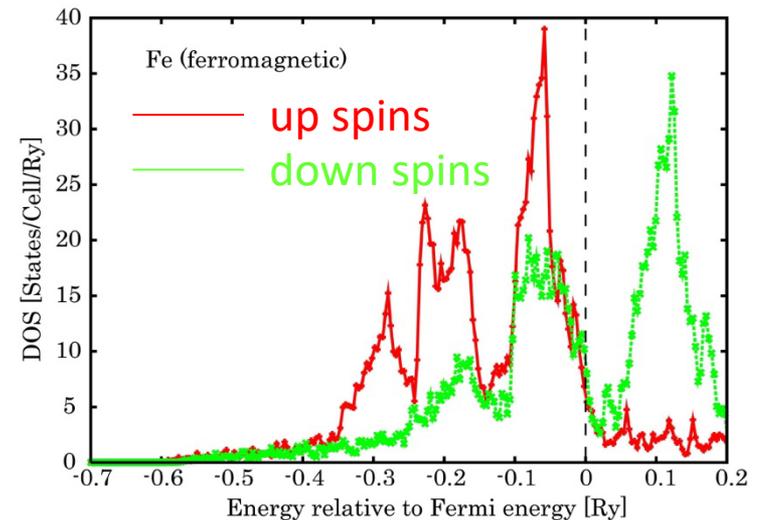
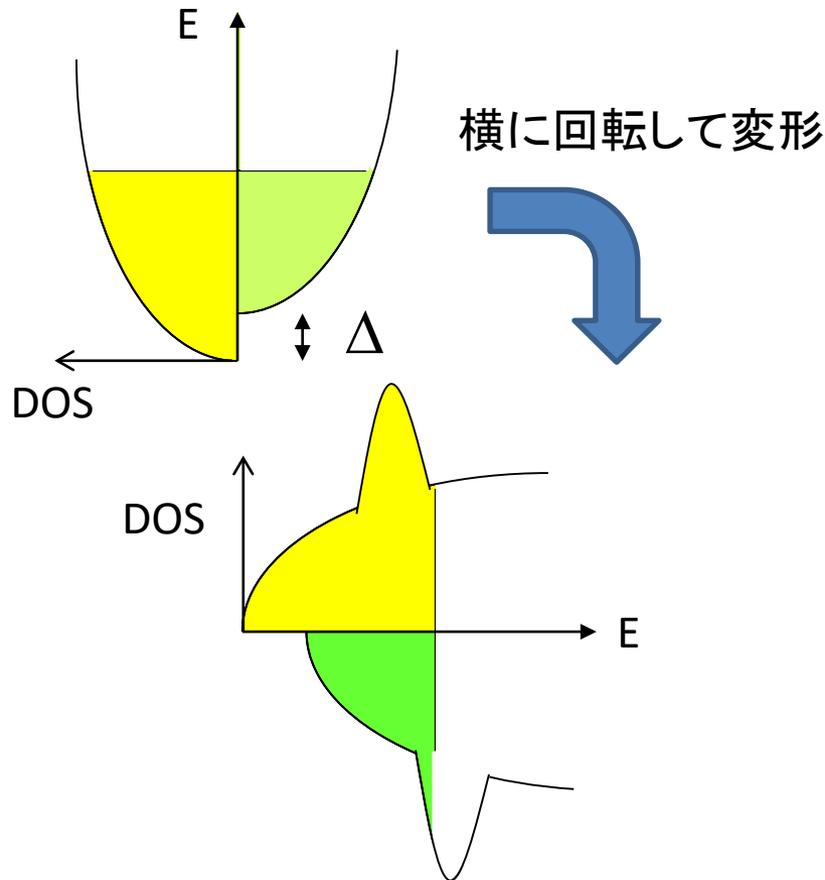
GW近似の自己相互作用



バンド理論による磁性状態

- 強磁性金属の状態密度

交換分裂 Δ が発生した、スピン依存ポテンシャル中の電子系



Thanks to Akai-KKR

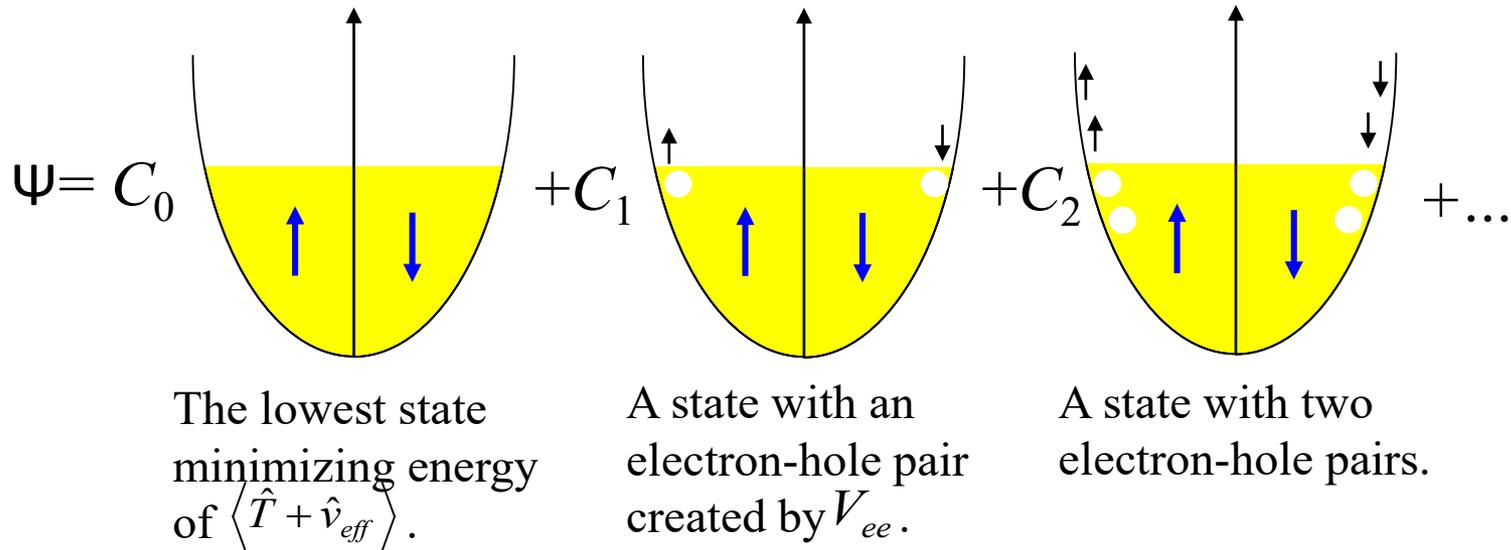
- この描像は、

- Up spinの密度
- Down spinの密度

が定まるときに相当して、金属強磁性では磁気モーメントの方向をz軸方向に定めると良く成り立つ。

多粒子状態の波動関数

- 固体中の波動関数を考えると、下図のようにスレータ積によって表現される状態を多数組み合わせ合わせて正しい解が書かれることが分かる。

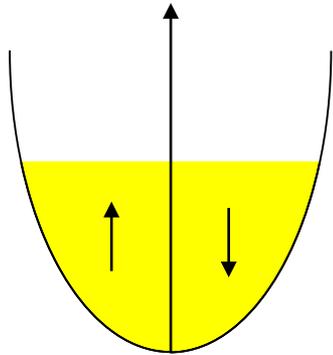


このような解が現れることは、摂動論の議論からすると容易に理解できる。実際、2次摂動は基底状態エネルギーを必ず下げる働きをする。

たとえば、出発点をハートレーフォック近似にとっても、LDA近似にとっても、同様の効果が期待され、真の解は多配置型波動関数で表される。

ハートレー・フォック近似

- $\langle \hat{T} + \hat{v}_{eff} \rangle$ を最小化する波動関数のうち、「単一スレータ行列式」で書けるものを見つけることを考える。



The lowest state
minimizing energy
of $\langle \hat{T} + \hat{v}_{eff} \rangle$

ここで決める必要があるのは、

- 有効ポテンシャル v_{eff}
- 最適化波動関数

$$x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_1(x_2) & \cdots & \phi_1(x_N) \\ \phi_2(x_1) & \phi_2(x_2) & \cdots & \phi_2(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(x_1) & \phi_N(x_2) & \cdots & \phi_N(x_N) \end{vmatrix}$$

ただし、この状態から全スピン S_{tot} の固有状態を作り出すときにはもう工夫が必要である。

ハートレー-フォック近似の変分空間

- ハートレー-フォック近似では、ハートレー-フォック方程式の解が与える単一スレータ積で表現される範囲で外場 $v(\mathbf{r})$ を受けている電子系のエネルギー最適化を行った。

$$E[\varphi] = E_{kin}[\varphi] + E_{Hartree}[\varphi] + E_{Fock}[\varphi] + \int dr^3 v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})$$

この式を、「外場 $v(\mathbf{r})$ が最適な $n(\mathbf{r})$ を決めている」、とみると、秩序変数 $n(\mathbf{r})$ として最適なものを波動関数を単一スレータ積に限定した範囲で探そうとしている、と見なすこともできる。

最適化をかける空間は、本来

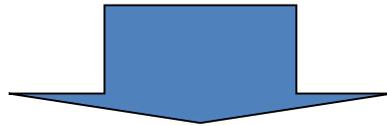
- 多体波動関数の空間全て
- 適切な有効一電子模型の与える解の空間であってよい。



密度汎関数法へ

密度汎関数法のストラテジー

- 密度(秩序変数)に対する外場の一意性証明
Hohenberg & Kohn (1964)
- 探索される密度空間の完全性証明
Harriman (1980), Lieb (1982)
- ユニバーサル・エネルギー汎関数の存在証明
Lieb (1982)

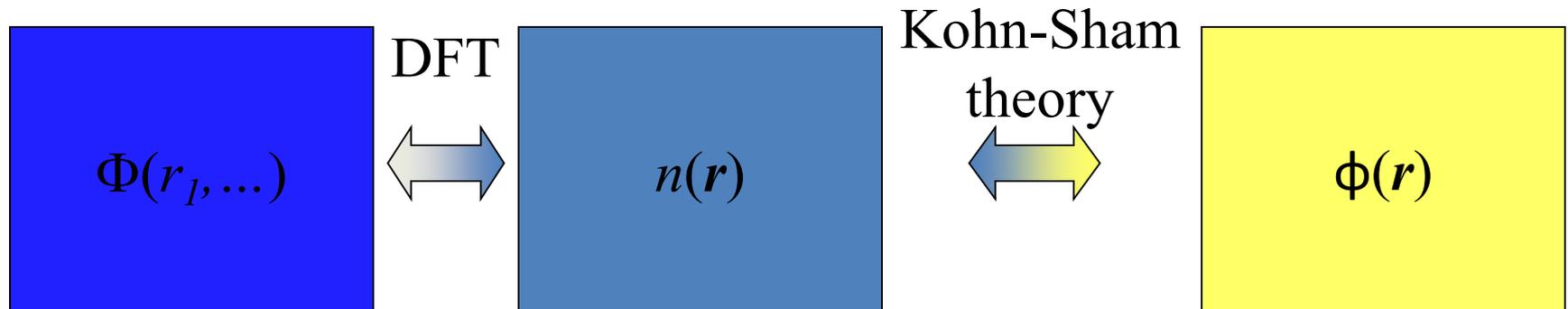


電子系の最適化問題は、
密度を変数とした変分法に置き換えられる。

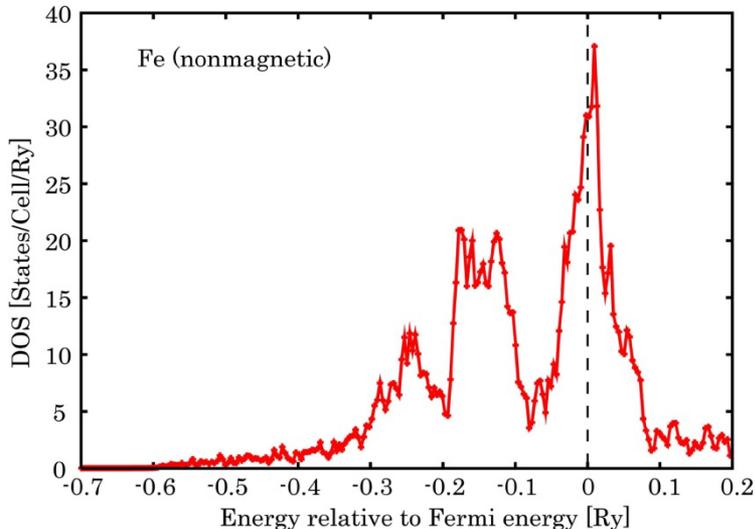
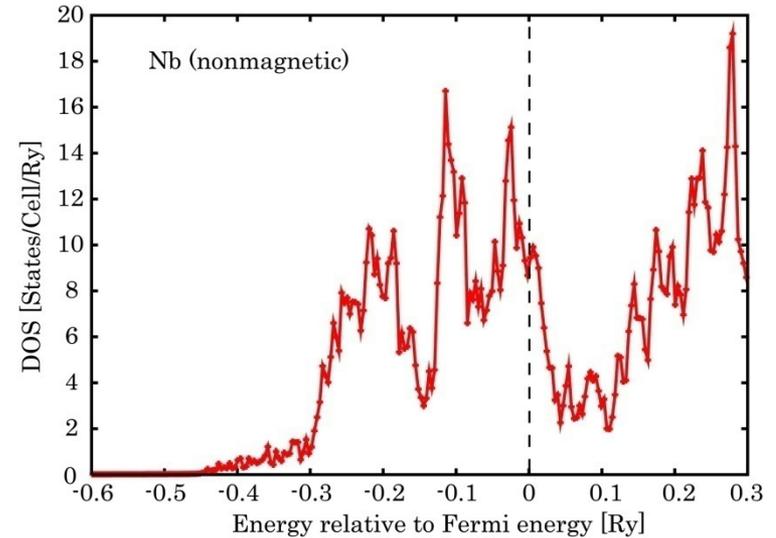
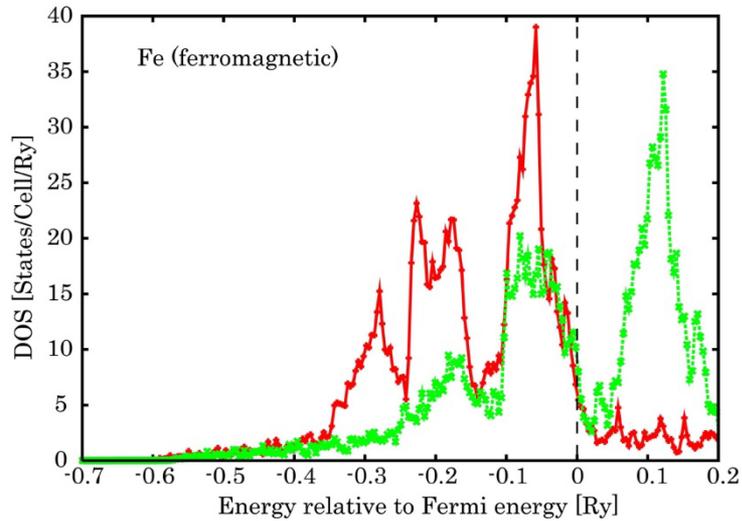
Hohenberg & Kohn (1964)

密度汎関数法(導入)

- 密度汎関数理論により一粒子密度 $n(\mathbf{r})$ が多粒子波動関数 $\Phi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2, \mathbf{r}_3, \sigma_3, \dots)$ に代わり変量となる。
- 密度 $n(\mathbf{r})$ という秩序変数の導入により、
 - もとのCoulomb相互作用する多体系
 - 有効場中の相互作用するFermion系が同一視され、後者の有効多体方程式に至る。



状態密度の比較



- Feは非磁性状態で大きな状態密度を有することから、磁性が発生してエネルギー安定化が生じる。
- Nbも対応の大きさの状態密度があるため、Stoner条件を満たす可能性もあるが、実際には u_{eff} が十分に大きく無いと考えられる。

3d遷移金属における金属強磁性の発生

- 3d遷移金属における電子状態の特徴は,
 - 単一原子にある複数のスピンの整列するフント結合
 - **フント則**は縮退軌道系の軌道角運動量Lとスピン角運動量Sが
 - 可能な最大のSをとりかつ
 - そのSが現れる中で可能な最大のLが現れることを結論する.
 - d-軌道は次の性質を一般にもっている.
 - 原子核近傍によく**局在する**.
 - それは, 狭い**dバンド**を形成する.

以下のような磁気モーメントを発生する強磁性状態は、遍歴電子描像 (an itinerant electron picture) によって記述されるべきである。

Element	T_c /K	M/μ_B	Configuration
Fe	1043	2.219	3d ⁶
Co	1404	1.715	3d ⁷
Ni	630	0.604	3d ⁸

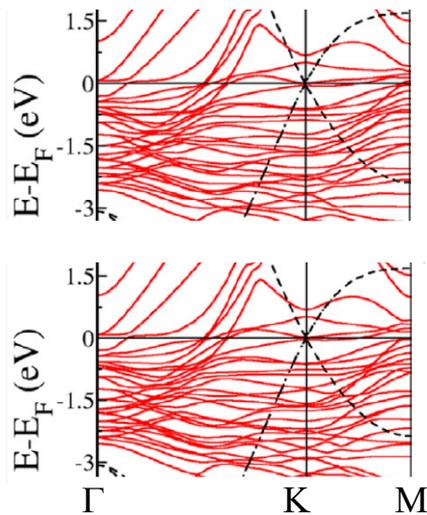
GGA計算の応用例

ディラックコーンでのギャップ開閉を伴うスピンバルブの設計例

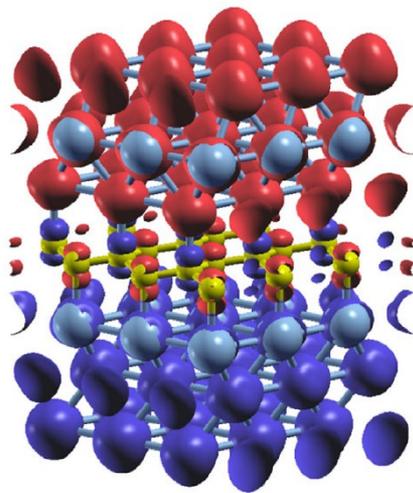
Y. Wicaksono, et al. CARBON 143, 828 (2019).

構造再現: PBEsolによりNi/grapheneの実験値を再現。

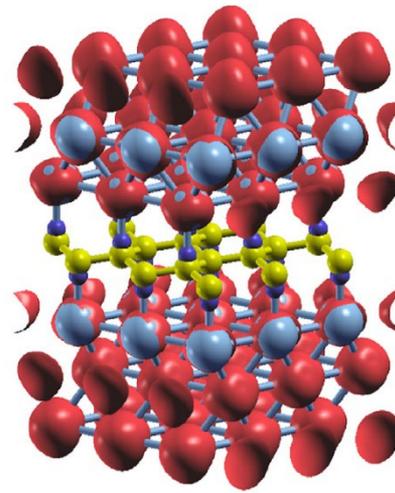
スピン構造の再現: 反平行磁化配置が最安定との実験を再現。



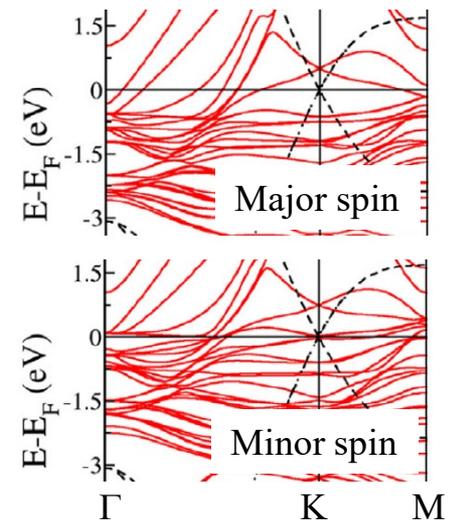
Dirac cone is open.



Anti-parallel



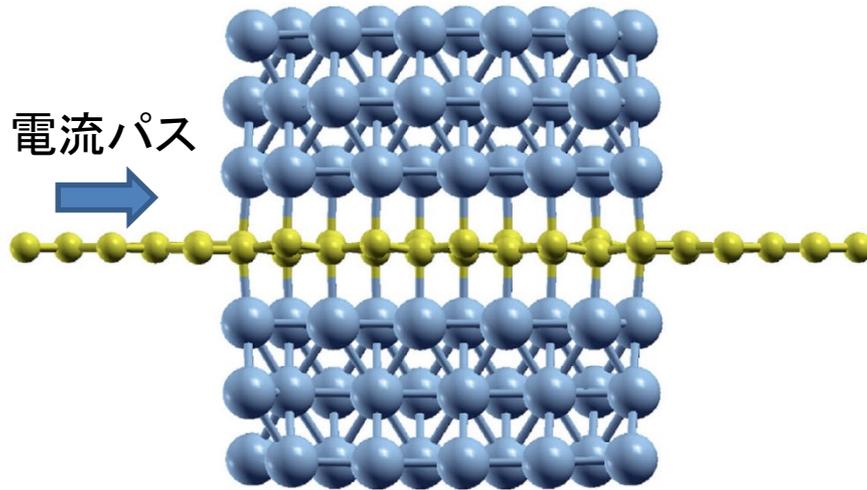
Parallel



Dirac cone is close.

デバイスを与える物質構造

提案されたスピン・バルブ



磁化	AP	P↑	P↓
↑電子	DC gap	Gapless Major	Gapless Minor
↓電子	DC gap	Gapless Minor	Gapless Major

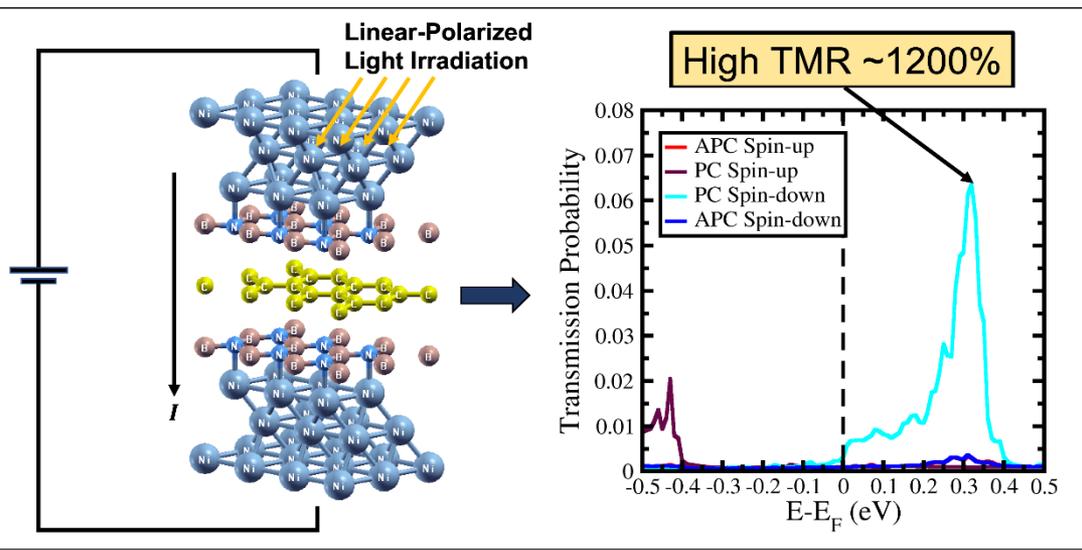
AP(反平行磁化配置)

- ⇒ スピン依存ポテンシャルにカイラル対称性破れ
- ⇒ ディラックコーンにギャップ

P(平行磁化配置)

- ⇒ スピン依存ポテンシャルはカイラル対称、ストーナーギャップ
- ⇒ ディラックコーンはギャップレス、スピン依存(フィルター効果)

多機能デバイスの設計



原子層物質 + 磁性体 (整合界面)

- 新しい物質群、デバイス構造
- スピンエレクトロニクス素子
- 交差相関効果

The cover of the journal "magnetochemistry" features a central illustration of a spin-topological electronic valve in a graphene-based magnetic junction. The illustration shows a 3D model of the junction with a legend for Nickel (blue), Boron (orange), Nitrogen (red), and Carbon (grey). A graph plots Transmission Probability (y-axis, 0 to 0.05) against Configuration (x-axis, HC1B-BC2H, BC1B-NC2H, BC1N-NC2B). A legend indicates the configurations: HC1B-BC2H, BC1B-NC2H, and BC1N-NC2B. A distance of 1.42 Å is marked between the configurations. The cover also includes the journal logo, impact factor (3.336), CITESCORE (3.0), and the title "Spin-Topological Electronic Valve in Graphene-Based Magnetic Junction".

Volume 9 · Issue 5 | May 2023

MDPI | mdpi.com/journal/magnetochemistry | ISSN 2312-7481

MgCu₂ 型ラーベス相物質のLSDA計算

MgCu ₂ type							
		Cu-site					
		Fe		Co		Ni	
Mg-site	Sc			meta	meta	para	para
	Y	ferro	ferro	meta	meta	para	para
	Ti			para	para		
	Zr	ferro	ferro	para	para		

left side:experimental result. right side:result of calculation
ferro= ferromagnet, para=paramagnet, meta= metamagnet

これら表中の物質ではLSDAの結果が実験を定性的に説明できている。

その一方で、

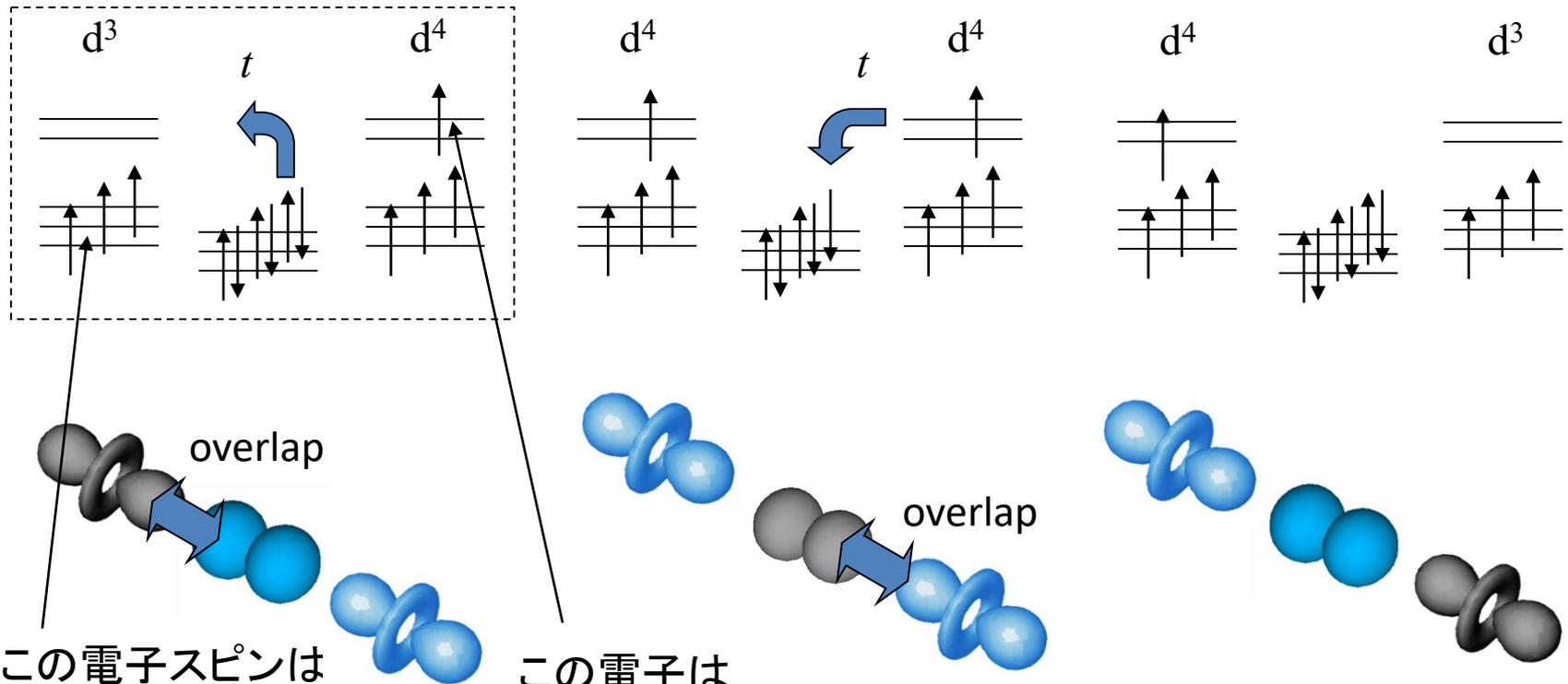
GGA 計算は YCo₂ を強磁性であると結論する。

この結果は Fe においてむしろGGAが磁性を再現する一方で、LSDAが全く機能しないという結果と対照的である。

➡ 近似汎関数による平均場近似手法の限界を示唆している。

二重交換相互作用

d^3 - d^4 -shell



この電子スピンは局在している。

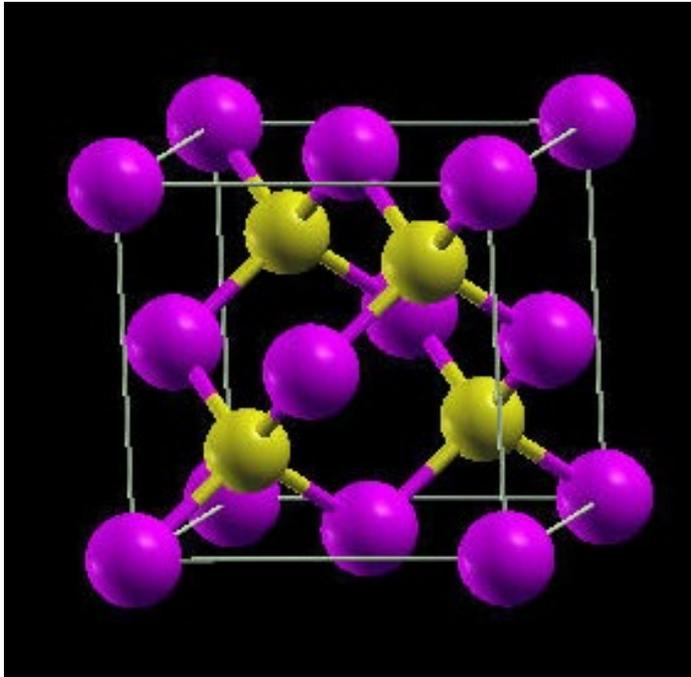
この電子は遍歴している。

強磁性 二重交換相互作用 (金属強磁性)

d_y はバンド状態を作っているため、軌道の埋まり方は電子の運動によって混じる。

ハーフメタル強磁性体CrAsの予測

By M. Shirai, et al.

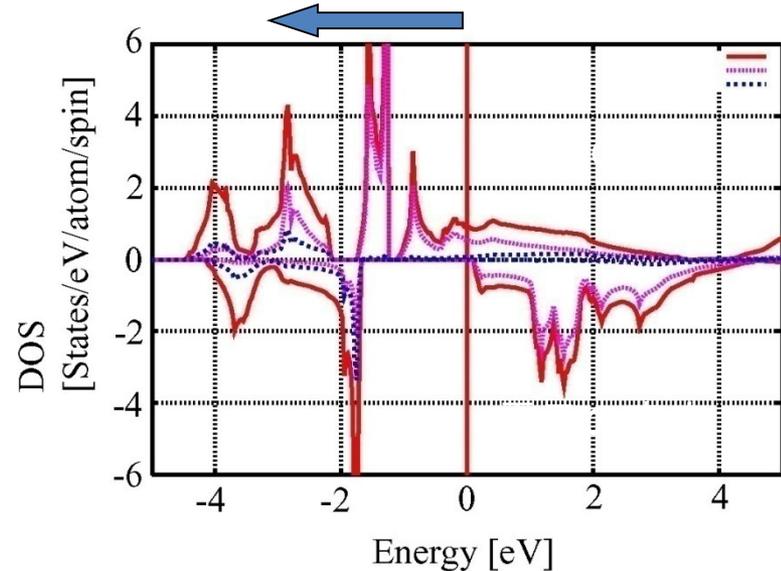


閃亜鉛鉱型CrAs



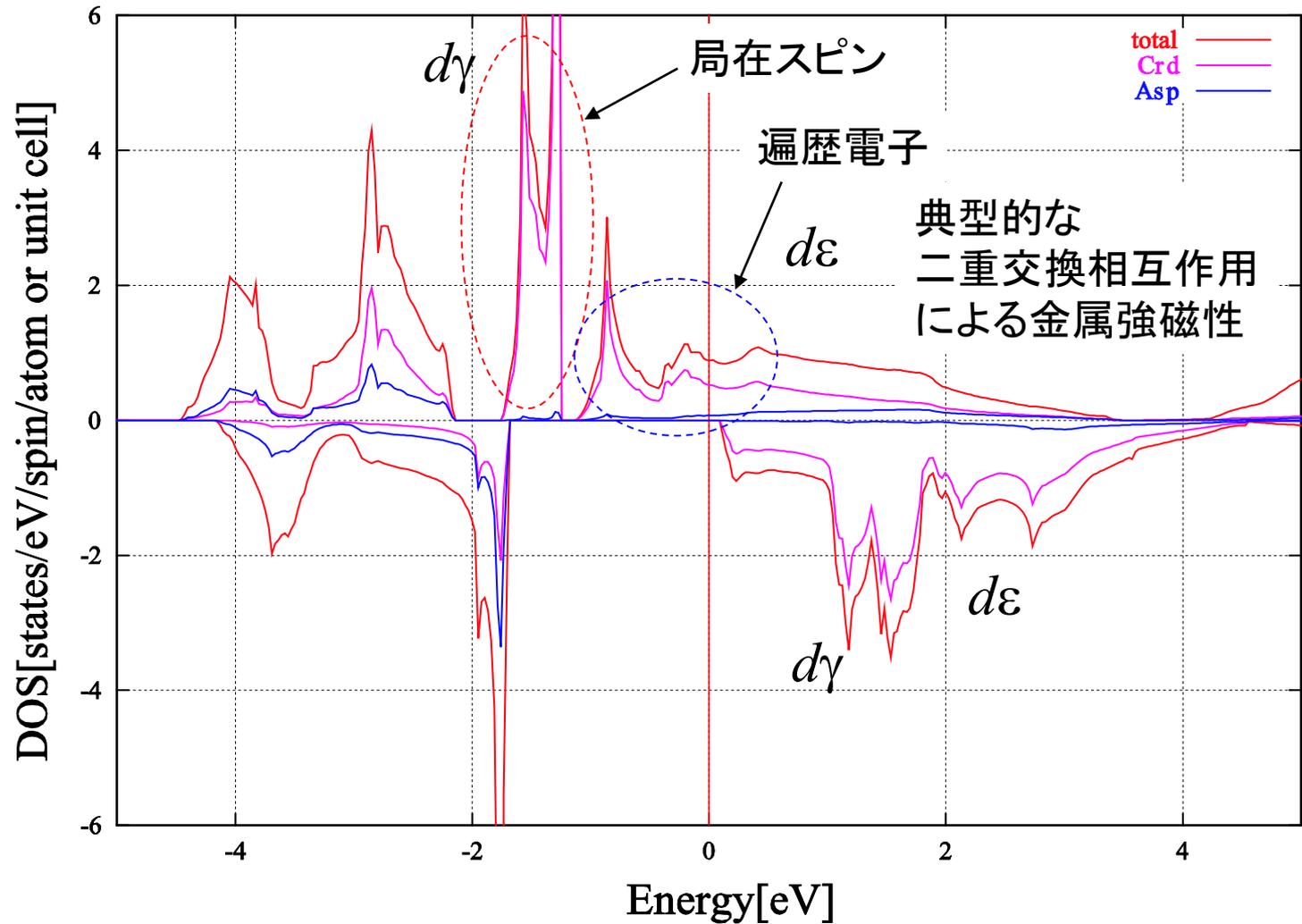
理論の存在予測の後で
実験で確認された。

この部分にのみ電子が入っている。

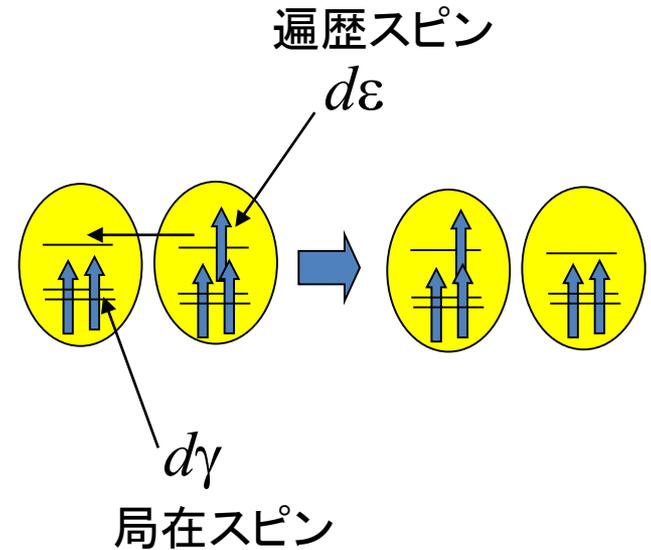
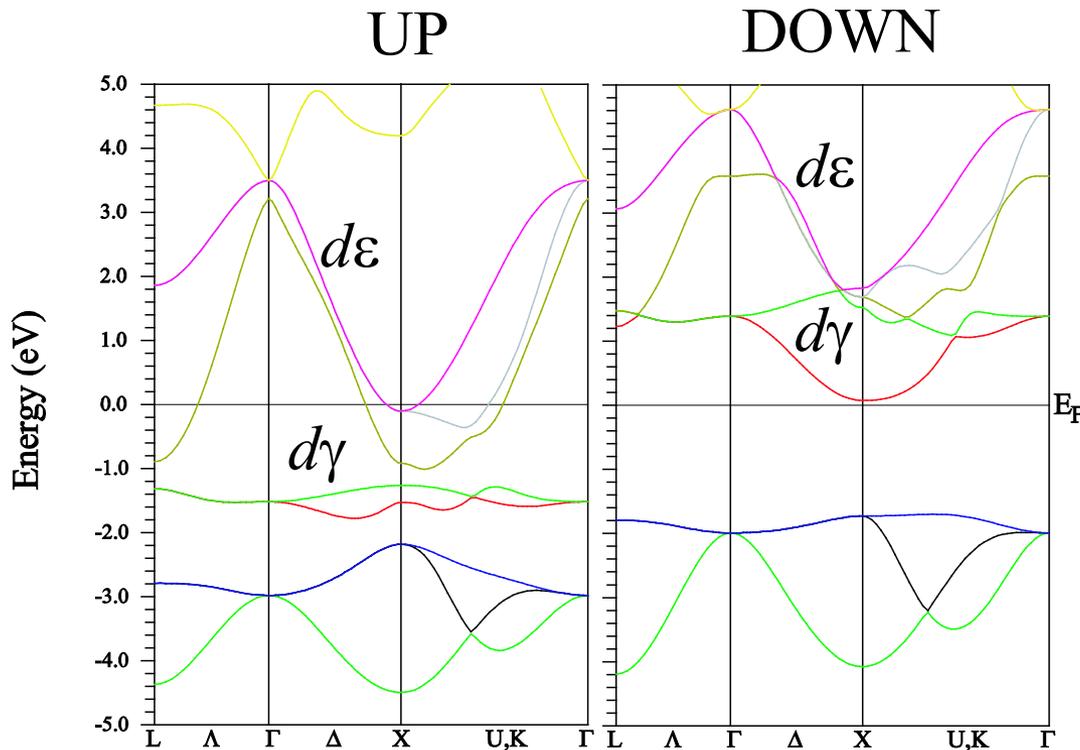


↑電子の密度が全体として多い
⇒ 強磁性体 (かつ↓電子の
状態密度にギャップがあるため
ハーフメタルになっている。)

閃亜鉛鉱型CrAsの電子状態



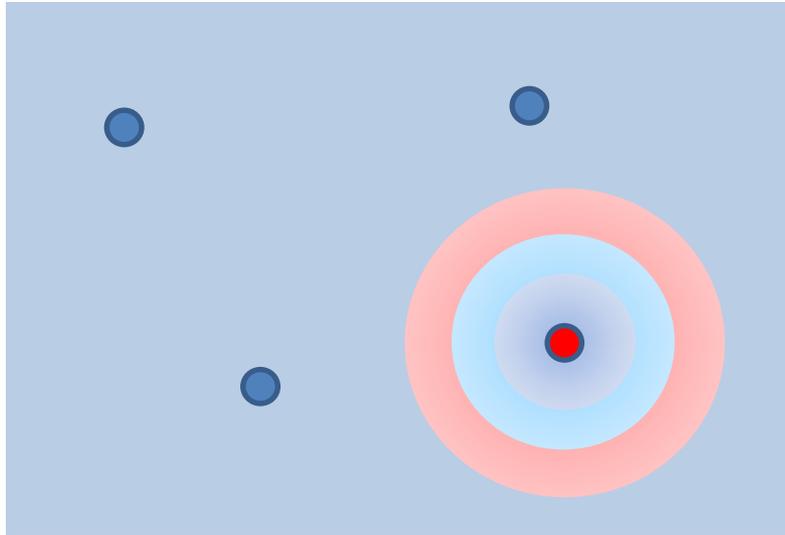
二重交換機構の解釈



GGA計算結果の電子状態は二重交換機構と符合している。

磁気モーメントが発生したバンド強磁性状態自身は、KS-DFT計算である程度予測できるものと考えられている。但し、競合する非磁性(または低スピン)状態が充分正しく再現されている保証は必ずしもないことに注意すべきである。

s-d 交換模型: 磁性不純物問題



金属中の磁性不純物:

磁性不純物は伝導電子の磁気偏極を誘起する。その結果、有効磁場が生まれ、磁性原子同志に有効磁気相互作用が発生する。

- 局在スピンモーメント \mathbf{S} と伝導電子のスピンモーメント \mathbf{s} の間に働く有効相互作用

$$\hat{H}_{eff} = -2J\delta(\mathbf{r})\mathbf{S} \cdot \mathbf{s}$$

磁気モーメント \mathbf{S} が作る有効磁場の表式 (古典的なスピンであると仮定して得ている。)

$$\mathbf{H}_{eff} = -\frac{2J\delta(\mathbf{r})}{g\mu_B}\mathbf{S} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{H}_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$$

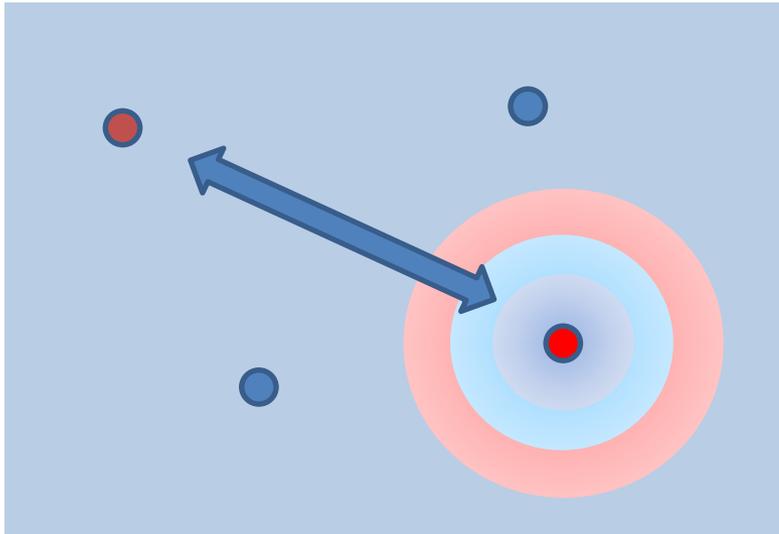
$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{H}_{\mathbf{q}} = -\frac{2J}{g\mu_B}\mathbf{S}$$

RKKY相互作用

導出の結果、2つの磁性スピン間に働く間接交換相互作用を表現する演算子は、

$$H_{eff} = \frac{\hbar^2 V D_F J^2}{4\pi^2} I(r) \hat{\mathbf{S}}_{imp1} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{imp2}$$

: Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida相互作用

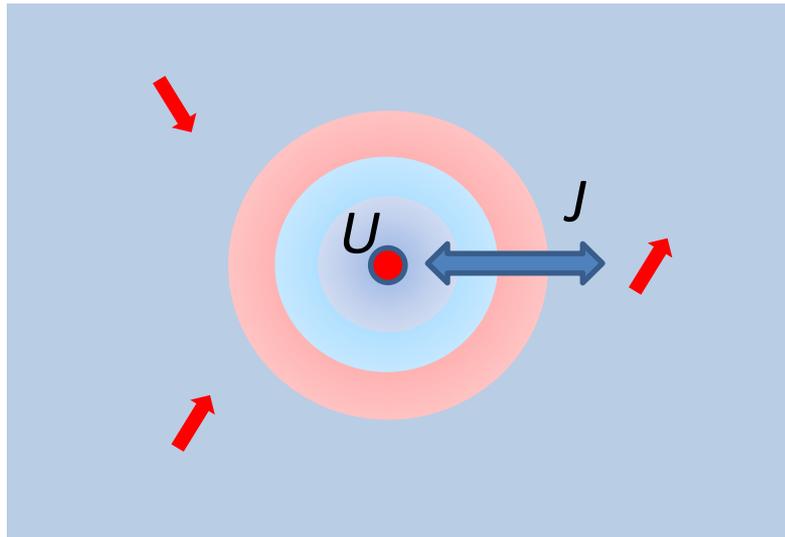


1. 磁性スピン間の距離 r
2. フェルミ波数 k_F

によって、

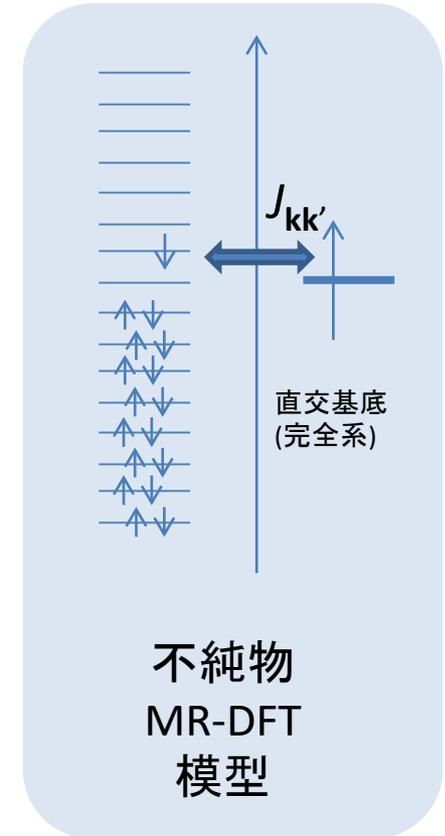
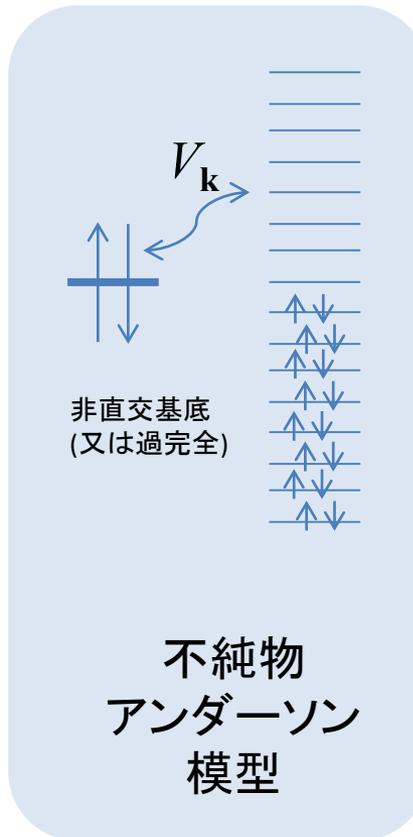
- 強磁性的にも、
- 反強磁性的にもなる。

強相関効果の典型例：近藤効果



- 局在スピンの発生 (U の効果)
- 局在電子と伝導電子の磁気相互作用

➡ 局在スピン・伝導電子間
シングレット形成

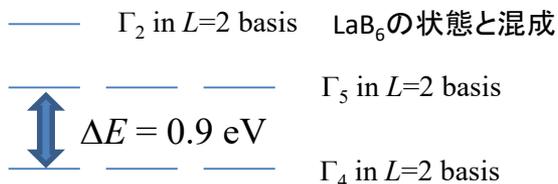


この強相関効果を初期原子配置から電子状態決定・原子配置再決定により確定しよう！

Ce_xLa_{1-x}B₆ (0 < x < 0.2): 正準近藤系

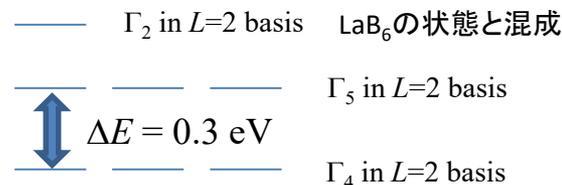
x=0.125

スーパーセル法 Γ -only計算



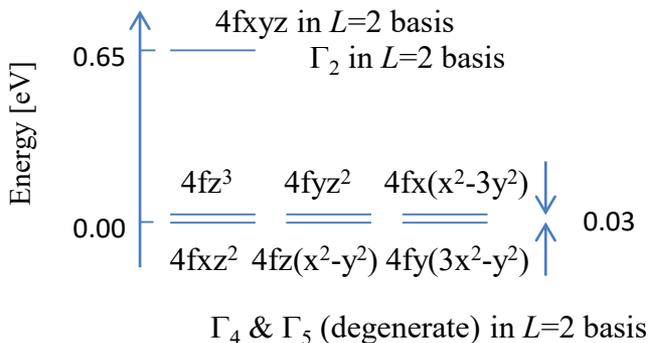
x=0.037

スーパーセル法 Γ -only計算



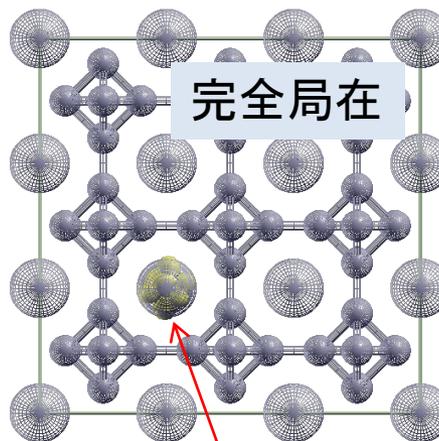
ΔE : 配位子場効果のオーダー

ワニエ化

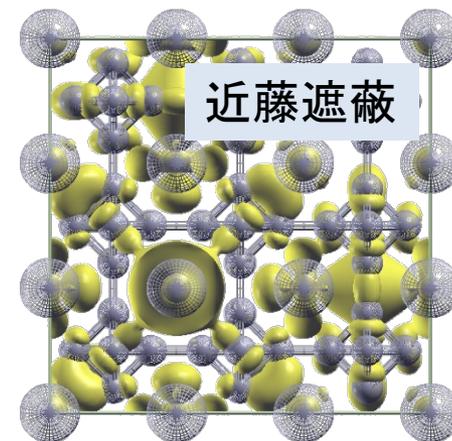


事実上 Γ_2 以外のみが縮退

⇒ 6順位間の配位場分裂 + LS相互作用
& 電子間相互作用 の全ての決定が重要



4f state

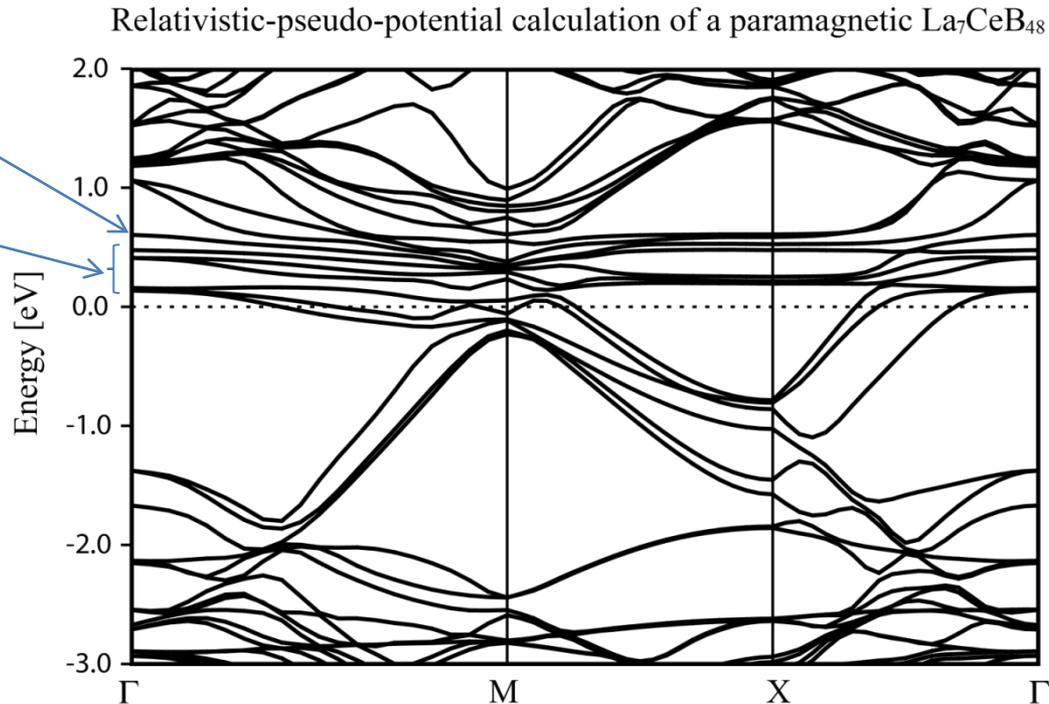


LaB₆ conduction state

配位子効果・相対論効果

$x=0.125$

Γ_2 in $L=2$ basis
Hybridized Γ_8 & Γ_7
(Hybridized Γ_4 & Γ_5
in $L=2$ basis)

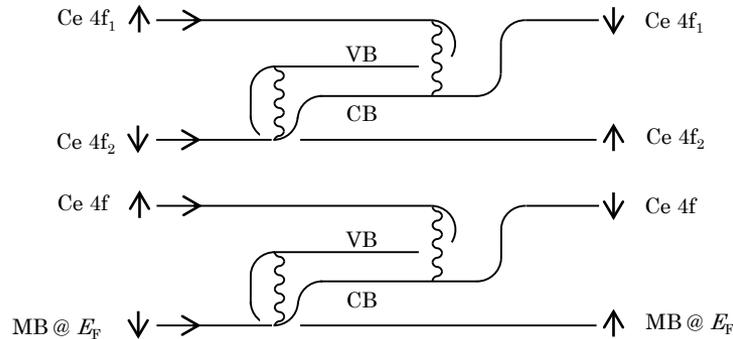


- 従来の希薄領域 ($0 < x < 0.2$) でも配位子効果 (バンド効果) により必ずしも “j-j coupling scheme” (Γ_8 が基底状態の4重縮退を与える) が適切と言えない混成した4f準位となっている。
- むしろL-S結合によるより小さい分裂は非相対論的評価による6重縮退準位を (4+2)重に分裂させていると理解することができる。

MR-DFTによるモデル化

$x=0.125$

交換散乱のファインマン図形



交換散乱の評価例

$$(J_{eff-cf})_{c_j f_i} = \begin{pmatrix} 4.1 & 5.1 \\ 3.7 & 5.5 \\ 6.0 & 3.2 \end{pmatrix} \begin{matrix} i=1 \\ i=2 \\ i=3 \end{matrix} \times 10^{-4} [\text{eV}]$$

$j=1 \quad j=2$

反強磁性的相互作用
⇒ 近藤遮蔽

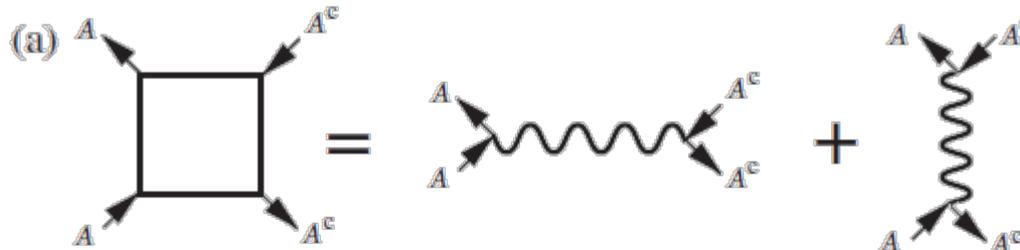
『超過程』を含むアップコンバージョンハミルトニアン

$$\left(\hat{H}_{1,i} + \hat{H}_2^{A_i \rightarrow A_i} - \hat{H}_2^{A_i^c \rightarrow A_i} P_B \frac{1}{\hat{H}_{1,i} + \hat{H}_2^{A_i \rightarrow A_i} + \hat{H}_2^{A_i \leftrightarrow A_i^c} - E} P_B \hat{H}_2^{A_i \rightarrow A_i^c} \right) |\Psi_i\rangle = E |\Psi_i\rangle,$$

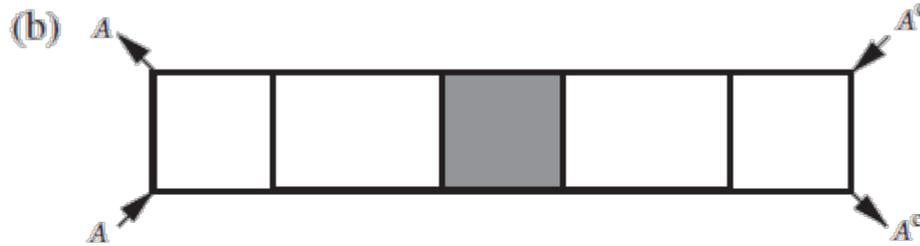
$$H_{1,i} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \lim_{r' \rightarrow r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \Delta_r \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \int d^3r \bar{v}_{eff}(\mathbf{r}) \hat{n}(\mathbf{r}) + \frac{\delta}{\delta \langle \Psi |} E_{g_i}[\Psi],$$

$$\bar{v}_{eff}(\mathbf{r}) = \frac{\delta}{\delta n(\mathbf{r})} \left\{ \frac{e^2}{2} \int d^3r d^3r' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{\varepsilon_i}[n] + \int d^3r v_{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) \right\}.$$

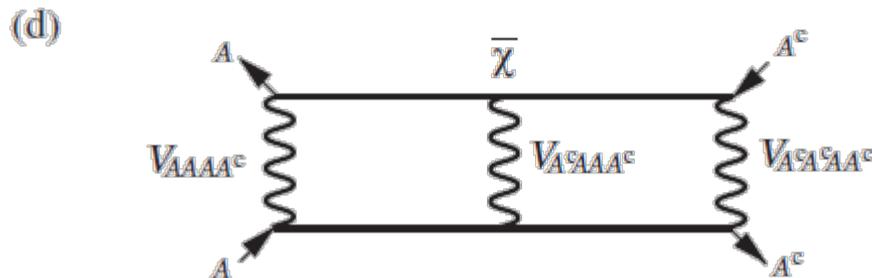
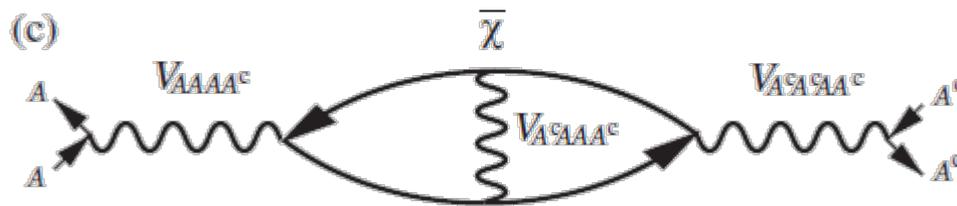
有効遮蔽相互作用の一般論



4点バーテックス関数



2粒子グリーン関数



このように、状態空間を「表現空間とその直交補空間」に分解すると、「密度汎関数法の高精度化法」が定義されることになる。

近藤遮蔽を発生する模型

近藤模型

$$H_{Kondo} = H_0 + H_J + H_c,$$

$$H_0 = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_0 c_{0\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + U \hat{n}_{0\uparrow} \hat{n}_{0\downarrow},$$

$$H_J = \sum_k J_k (c_{0\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{0\sigma'}) \cdot (c_{k\tau}^\dagger \vec{\sigma}_{\tau\tau'} c_{k\tau'}),$$

$$H_c = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}.$$

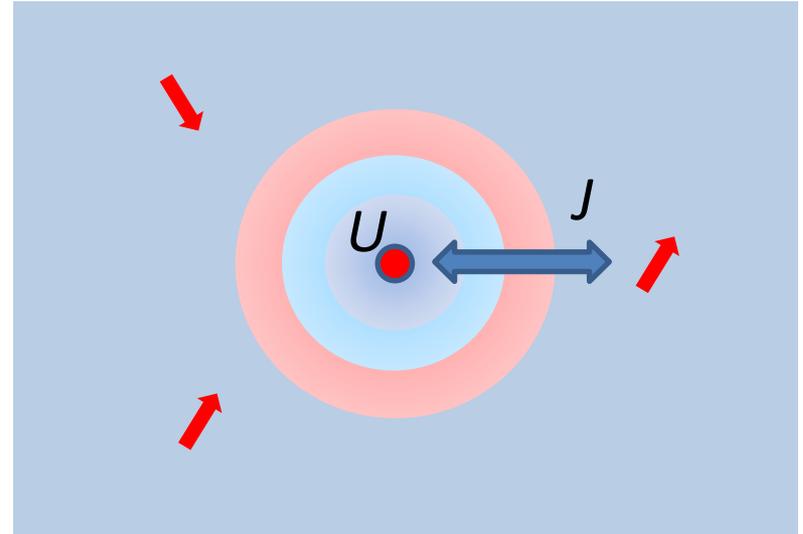
不純物アンダーソン模型

$$H_{Anderson} = H_0 + H_{hyb} + H_c$$

$$H_0 = \sum_{\alpha=1,2} \left[\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_\alpha c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma} + U_\alpha \hat{n}_{\alpha\uparrow} \hat{n}_{\alpha\downarrow} \right],$$

$$H_{hyb} = \sum_{\alpha=1,2} \sum_{k,\sigma} V_{k,\alpha} (c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + H.c.),$$

$$H_c = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}.$$



これらの有効模型を、多スレータ積を用いる、「多配置参照型電流密度汎関数理論」によって与えることができる。

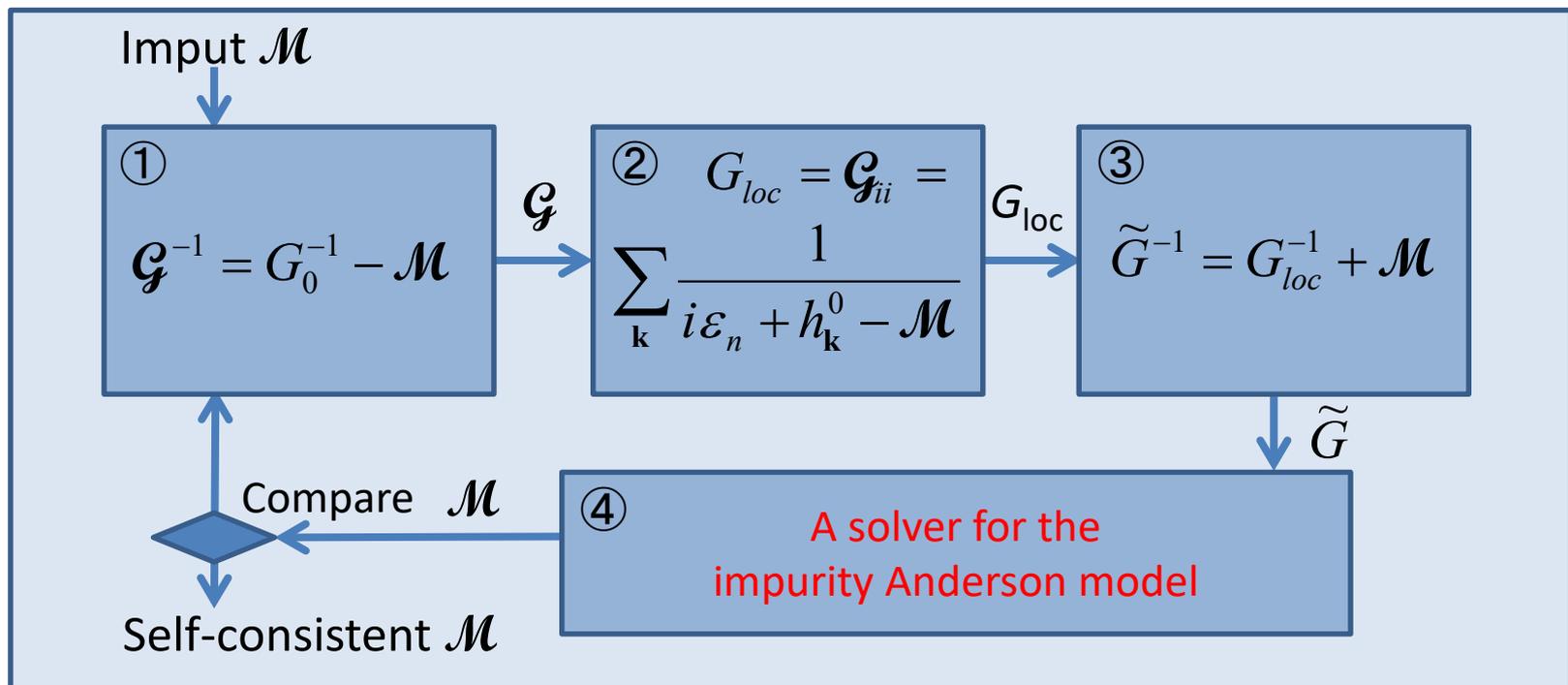
DMFT algorithm

Cf: Georges, et al., RMP 68, 13 (1996).

Kotliar, et al., RMP 78, 865 (2006).

DMFT: Dynamical mean field theory (動的平均場近似)

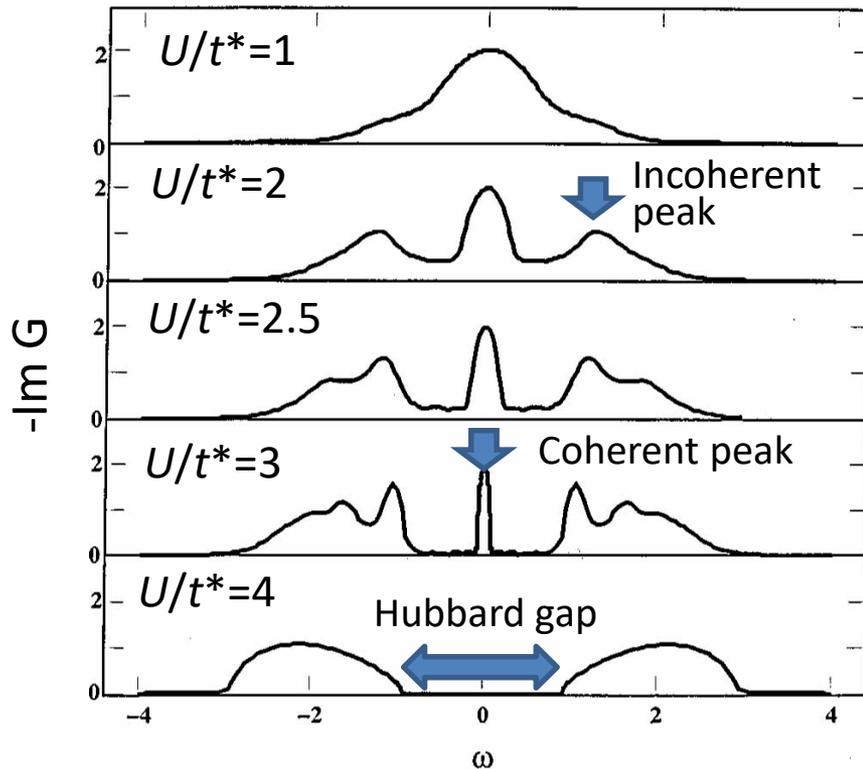
$d=\infty$ HM	$\Sigma(i\omega=i\varepsilon_n)$ $G(ij;i\omega=i\varepsilon_n)$	$\Rightarrow \mathcal{M}(i\omega)$ $\Rightarrow \mathcal{G}(i\omega)$	DMFT
---------------	--	--	------



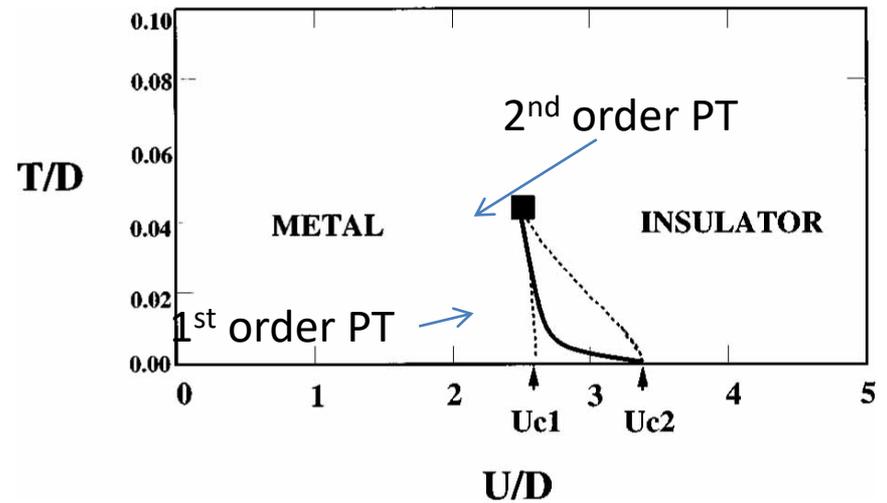
動的平均場近似 \Rightarrow 不純物アンダーソン模型に言い換えて解く!

無限次元ハバード模型の相図

DOS of $d=\infty$ Hubbard model at the half filling



Phase diagram of $d=\infty$ Hubbard model at h.f.



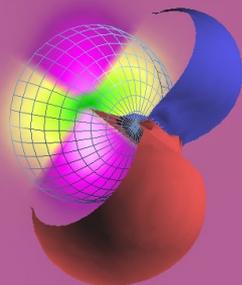
Georges, et al. RMP (1996).

3次元強相関物質でも類似の現象が現れると考えられている。

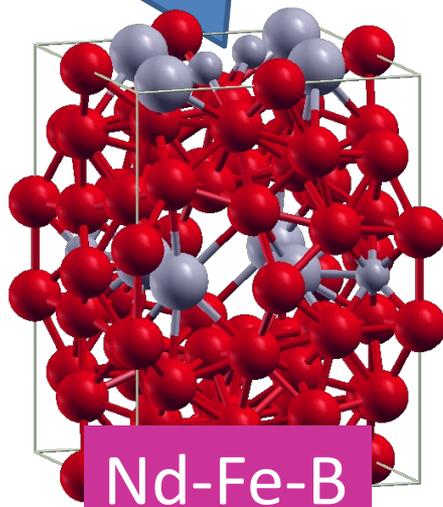
強磁性体

現代産業を支える
「フォース」
その元は「電子波動」

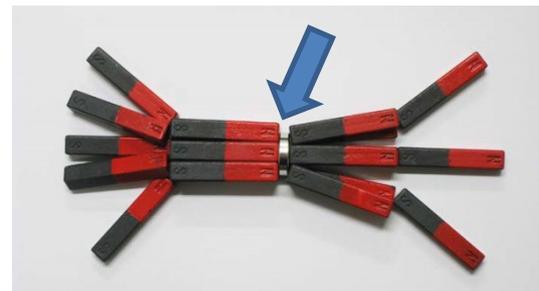
New PHASE が決める
神秘の「波動」



遍歴性と局在性を兼ね備えた
強相関電子系！



Nd-Fe-B 系永久磁石



永久磁石設計の戦略

- 安定磁気モーメントM: 強い局所電子相関で開殻系を作る (相関・元素戦略)
- 強い結晶磁気異方性: 異方的電場勾配を作る結晶電場中にMをおく (物質設計)
- 強い交換相互作用場: 超交換過程発生させる環境物質場を作る (量子場設計)