Wilson 比

$$\chi_P = \overbrace{\frac{g^2}{4}}^{\sim 1}\mu_B^2 N(E_F)$$

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3}k_B^2 N(E_F)$$

$$\frac{\chi_P}{\gamma} = \frac{3\mu_B^2}{\pi^2 k_B^2}$$ 定数

$$R_W = \frac{\chi_P}{\gamma} \Big/ \frac{3\mu_B^2}{\pi^2 k_B^2}$$

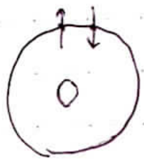
自由電子 1

「連続的状態分布」

2.3 遍歴から局在へ　　フェルミ液体，モット絶縁体

$$H = \underset{\text{重なり積分}}{t}\sum_i a_{i+1}^\dagger a_i = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k$$

クーロン相互作用



$$E_c = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \underset{10^{-10}\,m}{r}} \sim 10\,eV$$

数eV ～ 10eV

$$H = t\sum_i a_{i+1}^\dagger a_i + U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$

$$n_i = a_i^\dagger a_i$$

$$= \sum_k \varepsilon_k \underbrace{a_k^\dagger a_k}_{n_k} + U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$

$U/t \lesssim 1$　$U = 0$　$E = E_0 + \sum \epsilon_k \delta n_k$

$U \neq 0$　$\tilde{E} = \tilde{E}_0 + \sum \tilde{\varepsilon}_k \delta n_k$

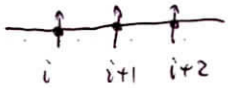
準粒子

$\boxed{1/\tau \propto \omega^2}$

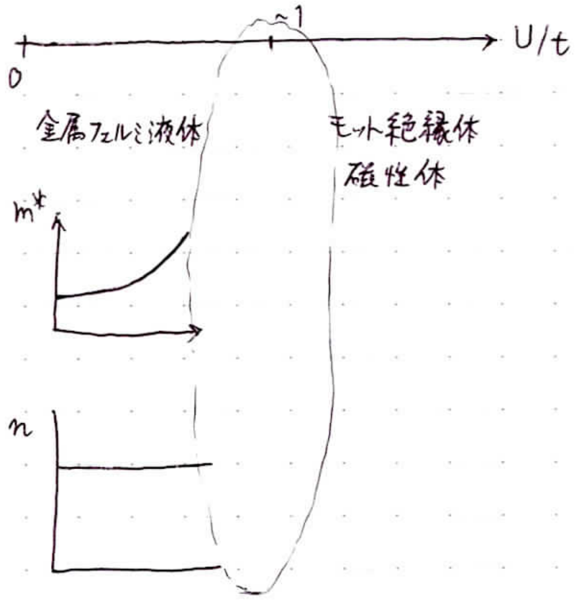
$\tilde{\varepsilon}_k \to m^*$

$R_W \sim 1$

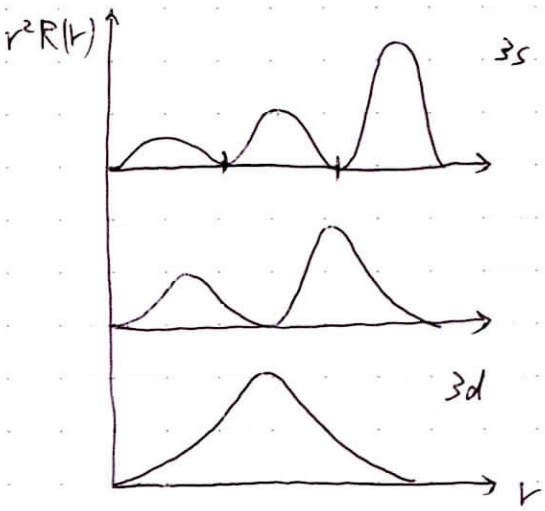
$U/t \gg 1$ 電子局在



磁性体



$U/t \gtrsim 1$ は　U大　軌道の拡がり小　3d, 4f
　　　　　　　t大　軌道の拡がり大　s, p



Fe [Ar] $3d^6 4s^2$
Fe^{2+} [Ar] $3d^6 4s^0$
Fe^{3+} [Ar] $3d^5 4s^0$

2.4 局在磁気モーメント　　Ti^{3+} 1個　Cr^{3+} 3

V^{3+} 2個　Mn 4

3d, 4f　複数　Fe^{3+} 5個

5個の電子の電子スピン，軌道モーメントの和

3d　$l=2$　$5\times 2=10$ 個の電子収容

電子数 $n=1$	$n=2$	$n=5$	$n=6$
$S=1/2,\ L=2$	$S=1,\ L=3$	$S=5/2,\ L=0$	$S=2,\ L=2$
$J=3/2$	$J=2$	$J=5/2$ スピンのみ	$J=4$

$n=9$

$S=1/2,\ L=2$

$J=5/2$

$\sum_i \mathbb{S}_i = \mathbb{S}$

$\sum_i \mathbb{l}_i = \mathbb{L}$

全角運動量 $\mathbb{J} = \mathbb{L} + \mathbb{S}$

スピン軌道相互作用 $\lambda\, \mathbb{L}\cdot\mathbb{S}$

$\mathbb{J}$が保存量

フント則

1　全スピン量子数 S 最大

2　全軌道量子数 L 最大

3　収容電子数　半分以下　$J=|L-S|$

半分以上　$J=|L+S|$

4f　$l=3$

La^{3+}　$4f^0$

Ce^{3+}　$4f^1$

Pr^{3+}　$4f^2$

Hund則の物理的起源

- パウリ排他律
- クーロン相互作用
- スピン軌道相互作用

1　S最大　なるべくスピン平行

2電子　φ_A　φ_B　↑↑　↑↓

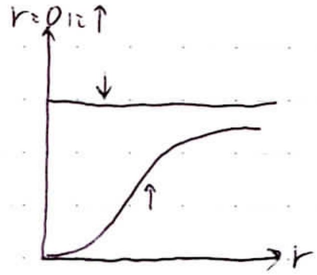
$$|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\varphi_A(1)\varphi_B(2) - \varphi_A(2)\varphi_B(1)\right\}\alpha(1)\alpha(2)$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\varphi_A(1)\varphi_B(2)\alpha(1)\beta(2) - \varphi_A(2)\varphi_B(1)\alpha(2)\beta(1)\right\}$$

$$\langle\uparrow\uparrow|\frac{e^2}{r_{12}}|\uparrow\uparrow\rangle = \underbrace{\int dr_1 dr_2\, |\varphi_A|^2|\varphi_B|^2\frac{e^2}{r_{12}}}_{U} - \underbrace{\int dr_1 dr_2\, \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)\varphi_A(2)\varphi_B(1)\frac{e^2}{r_{12}}}_{J_{ex}\ \text{交換}}$$

$$= U - J_{ex}$$

$$\langle\uparrow\downarrow|\frac{e^2}{r_{12}}|\uparrow\downarrow\rangle = U$$



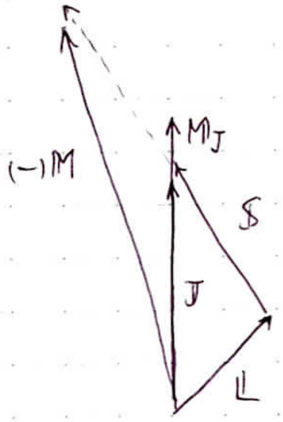
S最大　Coulomb最小

2　lが近い方がCoulomb小さい

3　スピン軌道相互作用　$\lambda \mathbb{L}\cdot\mathbb{S}$　10 meV − 1eV

$\mathbb{L}$と$\mathbb{S}$反対向き

角運動量 $\mathbb{J}$ の状態の作る磁気モーメント



$$\mathbb{J} = \mathbb{L} + \mathbb{S}$$

$$(-)\mathbb{M} = \mathbb{L}\mu_B + g\mathbb{S}\mu_B$$

$$\simeq (\mathbb{L} + 2\mathbb{S})\mu_B$$

$$M_J = \underbrace{g_L}_{\text{Lande } g \text{因子}} \mathbb{J}\mu_B$$

$$M_J \quad \underbrace{g_L J\mu_B, \cdots, -g_L J\mu_B}_{2J+1 \text{個}}$$

Lande の g 因子 $g_L = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$

2.5 軌道角運動量の消失

4f 希土類 Nd^{3+}

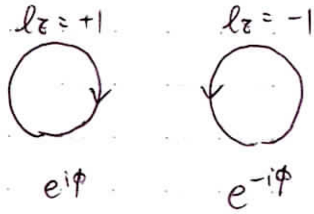
$4f^3$ $L=6$ $S=3/2$ $J=9/2$

V^{3+}

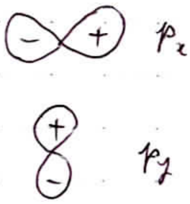
$3d^2$ $L=3$ $S=1$ $J=2$

$L=0$ $S=1$ $J=1$

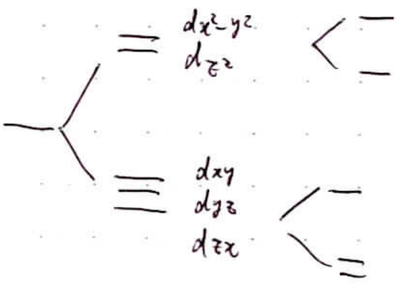
p軌道



$\longrightarrow$ $e^{i\phi} + e^{-i\phi}$, $\cos\phi$
$e^{i\phi} - e^{-i\phi}$, $\sin\phi$



d軌道



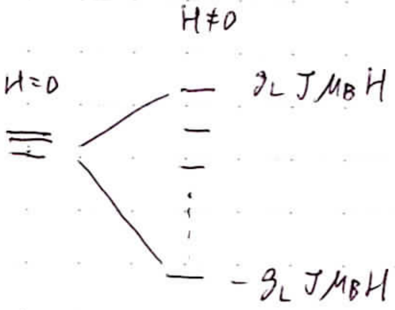
実関数
軌道角運動量消失

2.6 磁場中の磁気モーメント

$\Delta F = -\mathbb{M} \cdot d\mathbb{H}$

H方向の磁化

$$\underbrace{g_L J \mu_B,\ g_L (J-1)\mu_B,\ \cdots,\ g_L(-J)\mu_B}_{2J+1}$$



$$\langle M \rangle = \frac{\sum_{j=-J}^{J} g j \mu_B \exp\left(\frac{g j \mu_B H}{k_B T}\right)}{\sum_{j=-J}^{J} \exp\left(\frac{g j \mu_B H}{k_B T}\right)}$$

$$= g J \mu_B B_J\left(\frac{g \mu_B H J}{k_B T}\right)$$

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J} x - \frac{1}{2J} \coth \frac{x}{2J}$$ ；ブリルアン関数

$$x = \frac{g J \mu_B H}{k_B T}$$ ゼーマンE / 熱E

$x \to \infty \quad B_J \to 1 \quad \langle M \rangle \to g J \mu_B$

$x \to 0 \quad B_J \to \frac{J+1}{3J} x \quad \langle M \rangle \to g J \mu_B \frac{J+1}{3J} \underbrace{\frac{g J \mu_B H}{k_B T}}_{x}$

$\coth x \to \frac{1}{x} + \frac{x}{3}$