

Functional Integral Approach to Itinerant Electron Ferromagnetism I .

— Formulation —

九大・教養 西 村 久

(4 月 1 9 日 受 理)

§ 1 ま え が き

電子間相関と金属強磁性¹⁾の問題は固体電子論の本質的な課題であるが、その理論的解明への道はけわしい。この報告では、Hubbard model²⁾を最近話題になっている functional integral の方法で調べ、問題解決への第一歩としたい。

この方法は、多体系の分配関数の計算を Gauss (汎関数) 積分変換によって一体問題にひきなおす方法であって、Stratonovich³⁾により初めて議論され、Hubbard⁴⁾がさらに発展させた。当時、当然のことながら、超伝導の問題にこの方法が適用された。⁵⁾⁻⁷⁾最近、この方法で人々⁸⁾⁻¹⁰⁾は Anderson model を詳細に調べている。また、s-d exchange model¹¹⁾にも適用されている。¹²⁾Evanson, Schrieffer, Wang はこの方法で Hubbard model を調べ、金属強磁性の問題を議論しようとしているが、まだ途上である。ここでは、まず問題の定式化をやり、ついで、最も簡単な近似にもとずいた結果の一部を報告する。

§ 2 分配関数の積分変換

強磁性金属では d-band が問題になるが、縮退を無視して、ここでは s-band を考える。Hubbard hamiltonian は

$$H = \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.1)$$

である。Stratonovich 変換をつかうには、(2.1) の第 2 項を対角な二次形式におきかえなければならない。その形は無数にあるが、ここでは次の形を選ぶ、¹²⁾

西村 久

$$\begin{aligned}
 U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} &= \frac{U}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \\
 &- \frac{U}{3} \sum_i \{ c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow} c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow} c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow} \\
 &+ \frac{1}{2} (c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow})^2 \} \quad (2.2)
 \end{aligned}$$

この形は spin の回転に対して不変である。そこで, hamiltonian を Bloch 表示で次のようにかく,

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_1 \\
 H_0 &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{\sigma} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{U}{2} + \sigma \mu_B h, \\
 H_1 &= - \frac{U}{3N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \{ c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\uparrow} + c_{\mathbf{k}'\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \\
 &+ \frac{1}{2} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}) (c_{\mathbf{k}'\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\uparrow} - c_{\mathbf{k}'\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}) \} \quad (2.3)
 \end{aligned}$$

ここで, $c_{\mathbf{k}\sigma}$ は Bloch 状態 $\mathbf{k}$ にある spin σ の電子を消す operator, $c_{\mathbf{k}\sigma}^+$ は作る operator, $\epsilon_{\mathbf{k}}$ は band エネルギーで, 以下, エネルギーの原点を chemical potential μ にとる。N は atomic site の数で, 磁場 h は z 方向にとられた。

分配関数は次のように書かれる。

$$Z = Z_0 \langle T_{\tau} \exp \left[- \int_0^{\beta} d\tau H_1(\tau) \right] \rangle \quad (2.4)$$

Z_0 は H_0 に対する分配関数, $\langle \dots \rangle$ は H_0 についての熱的平均値, $H_1(\tau)$ は相互作用表示, T_{τ} は ordering operator である。そこで, Stratonovich 変換

$$\exp |a|^2 = \int \delta^2 x \exp \left[-\pi |x|^2 - \sqrt{\pi} (a^+ x + a x^*) \right] \quad (2.5)$$

をつかって, 次の式をうる。

$$\begin{aligned}
 Z &= \int \prod_{\mathbf{q}} \delta^2 x_{\mathbf{q}}(\tau) \delta^2 y_{\mathbf{q}}(\tau) \delta^2 z_{\mathbf{q}}(\tau) \\
 &\times \exp\left(-\int_0^\beta d\tau \pi \sum_{\mathbf{q}} [|x_{\mathbf{q}}(\tau)|^2 + |y_{\mathbf{q}}(\tau)|^2 + |z_{\mathbf{q}}(\tau)|^2] / \beta \right) \\
 &\times Z(x, y, z), \\
 Z(x, y, z) &= Z_0 \langle T_\tau \exp \left[-\int_0^\beta d\tau \widetilde{H}_1(\tau) \right] \rangle,
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

$$\begin{aligned}
 \widetilde{H}_1(\tau) &= \left(\frac{\pi U}{3N\beta} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \{ c_{\mathbf{k}\uparrow}^+(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}(\tau) [x_{\mathbf{q}}(\tau) + y_{\mathbf{q}}(\tau)] \\
 &+ \frac{1}{\sqrt{2}} [c_{\mathbf{k}\uparrow}^+(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau) - c_{\mathbf{k}\downarrow}^+(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}(\tau)] z_{\mathbf{q}}(\tau) \\
 &+ \text{h.c.} \} .
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

ここで、 $x_{\mathbf{q}}(\tau)$ などは τ に陽に依存する複素変数である。結局、二体の Coulomb 相互作用をもつ系の分配関数が、random な一体の potential field (あるいは magnetic field) をもつ系の分配関数の Gauss (汎関数) 平均で置き換えられたことになる。

§ 3 $Z(x, y, z)$ の計算

一体の相互作用 (2.7) を次のようにかく、

$$\begin{aligned}
 \widetilde{H}_1(\tau) &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \{ c_{\mathbf{k}\uparrow}^+(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}(\tau) v_{\mathbf{q}}(\tau) \\
 &+ \frac{1}{\sqrt{2}} [c_{\mathbf{k}\uparrow}^+(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau) - c_{\mathbf{k}\downarrow}^+(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}(\tau)] u_{\mathbf{q}}(\tau) \\
 &+ \text{h.c.} \} ,
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

$$\begin{aligned}
 v_{\mathbf{q}}(\tau) &= c [x_{\mathbf{q}}(\tau) + y_{\mathbf{q}}(\tau)] , \\
 u_{\mathbf{q}}(\tau) &= c z_{\mathbf{q}}(\tau), \quad c \equiv \left(\frac{\pi U}{3N\beta} \right)^{1/2}
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

西村 久

$Z(x, y, z)$ を計算するために coupling constant λ を導入し, これを v_q にかけて $v_{q\lambda}$ と表わす。 λ を含むすべての量は添字で, 例えば, $Z_\lambda(x, y, z)$ のように表わされることになる。 そうすると, $Z(x, y, z)$ は次のように書きかえられる。

$$\begin{aligned} Z(x, y, z) = & Z_0 \exp \left(- \int_0^1 d\lambda \int_0^\beta d\tau \right. \\ & \times \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \{ g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}\lambda}^{\downarrow\uparrow}(\tau, \tau^+) v_{\mathbf{q}}(\tau) + g_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}\lambda}^{\uparrow\downarrow}(\tau, \tau^+) v_{\mathbf{q}}^*(\tau) \\ & + [g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}\lambda}^{\uparrow\uparrow}(\tau, \tau^+) - g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}\lambda}^{\downarrow\downarrow}(\tau, \tau^+)] u_{\mathbf{q}}(\tau) / \sqrt{2} \\ & \left. + [g_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}\lambda}^{\uparrow\uparrow}(\tau, \tau^+) - g_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}\lambda}^{\downarrow\downarrow}(\tau, \tau^+)] u_{\mathbf{q}}^*(\tau) / \sqrt{2} \right\}, \quad (3.3) \end{aligned}$$

ここに, Green 関数

$$\left. \begin{aligned} g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'\lambda}^{\downarrow\uparrow}(\tau, \tau') = & - \langle T_\tau c_{\mathbf{k}\downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}'\uparrow}^+(\tau') \mathcal{S} \rangle / \langle \mathcal{S} \rangle \\ \mathcal{S} = & T_\tau \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \tilde{H}_{1\lambda}(\tau) \right], \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

などを導入した。

Green 関数 (3.4) などは, 例えばグラフの方法で求めることができる。 相互作用が一体だからグラフは簡単で, 次の Dyson 方程式がえられる。

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'\lambda}^{\downarrow\uparrow}(\tau, \tau') = & \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \int_0^\beta d\tau_1 g_{\mathbf{k}, \mathbf{q}_1\lambda}^{\downarrow}(\tau, \tau_1) v_{\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2\lambda}^*(\tau_1) g_{\mathbf{q}_2, \mathbf{k}'\lambda}^{\uparrow}(\tau_1, \tau') \\ & + \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_4} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 g_{\mathbf{k}, \mathbf{q}_1\lambda}^{\downarrow}(\tau, \tau_1) v_{\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2\lambda}^*(\tau_1) g_{\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3\lambda}^{\uparrow}(\tau_1, \tau_2) \\ & \times v_{\mathbf{q}_4-\mathbf{q}_3\lambda}(\tau_2) g_{\mathbf{q}_4, \mathbf{k}'\lambda}^{\downarrow\uparrow}(\tau_2, \tau'), \quad (3.5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'\lambda}^\sigma(\tau, \tau') = & \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g_{0\mathbf{k}}^\sigma(\tau - \tau') \\ & + \sigma \sum_{\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 g_{0\mathbf{k}}^\sigma(\tau - \tau_1) \frac{1}{\sqrt{2}} u_{\mathbf{q}\lambda}(\tau_1) g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'\lambda}^\sigma(\tau_1, \tau') \\ & + \sigma \sum_{\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 g_{0\mathbf{k}}^\sigma(\tau - \tau_1) \frac{1}{\sqrt{2}} u_{\mathbf{q}\lambda}^*(\tau_1) g_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}'\lambda}^\sigma(\tau_1, \tau'), \quad (3.6) \end{aligned}$$

ここに, $g_{0\mathbf{k}}^\sigma(\tau)$ は第 0 次の Green 関数である。Fourier 変換,

$$g_{0\mathbf{k}}^\sigma(\tau) = \beta^{-1} \sum_n g_{0\mathbf{k}}^\sigma(\omega_n) e^{-i\omega_n \tau},$$

$$u_{\mathbf{q}}(\tau) = \beta^{-1} \sum_n u_{\mathbf{q}}(\nu_n) e^{-i\nu_n \tau},$$

などをほどこせば, (3.5), (3.6) 式は形式的に解けて次のようになる。

$$G_{\lambda}^{\downarrow\uparrow} = [1 - \beta^{-2} K_{\lambda}^{\downarrow} g_0^{\downarrow} \hat{v}_{\lambda}^* K_{\lambda}^{\uparrow} g_0^{\uparrow} \hat{v}_{\lambda}]^{-1} K_{\lambda}^{\downarrow} g_0^{\downarrow} \hat{v}_{\lambda}^* K_{\lambda}^{\uparrow} g_0^{\uparrow}, \quad (3.7)$$

$$g_{\lambda}^{\sigma} = \beta K_{\lambda}^{\sigma} g_0^{\sigma}, \quad (3.8)$$

$$K_{\lambda}^{\sigma} = [1 - \sigma \beta^{-1} g_0^{\sigma} \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{u}_{\lambda} + \hat{u}_{\lambda}^*)]^{-1}, \quad (3.9)$$

これらの式は matrix form であって, 例えば,

$$(G_{\lambda}^{\downarrow\uparrow})_{\mathbf{k}, \omega_n; \mathbf{k}', \omega'_n} = G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \lambda}^{\downarrow\uparrow}(\omega_n, \omega'_n),$$

$$(\hat{u}_{\mathbf{q}\lambda})_{\mathbf{k}, \omega_n; \mathbf{k}', \omega'_n} = u_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}\lambda}(\omega_n - \omega'_n),$$

などである。全く同様にして, $G_{\lambda}^{\uparrow\uparrow}$ なども求められるので, これらを (3.3) 式に代入して, λ について積分すれば次の式をうる,

$$Z(x, y, z) = Z_0 \exp \{ \text{Sp} \log [(1 - \beta^{-2} K_{\lambda}^{\downarrow} g_0^{\downarrow} \hat{v}_{\lambda}^* K_{\lambda}^{\uparrow} g_0^{\uparrow} \hat{v}_{\lambda}) \times (K_{\lambda}^{\uparrow} K_{\lambda}^{\downarrow})^{-1}] \}, \quad (3.10)$$

$$K^{\sigma} = K_{\lambda=1}^{\sigma}, \quad (3.11)$$

ここに, Sp は $\mathbf{k}, \omega_n$ についての跡をとることを意味する。かくして, Fourier 変換されたのち, (2.6) 式は次のように書くことができる。

$$Z = \int \prod_{\mathbf{q}, n} \delta^2[\beta^{-1} x_{\mathbf{q}}(\nu_n)] \delta^2[\beta^{-1} y_{\mathbf{q}}(\nu_n)] \delta^2[\beta^{-1} z_{\mathbf{q}}(\nu_n)] \\ \times \exp \{ -\pi \beta^{-2} \sum_{\mathbf{q}, n} [|x_{\mathbf{q}}(\nu_n)|^2 + |y_{\mathbf{q}}(\nu_n)|^2 + |z_{\mathbf{q}}(\nu_n)|^2] \}$$

$$\times Z(x, y, z), \quad (3.12)$$

$Z(x, y, z)$, (3.10) は $x_q(\nu_n)$, $y_q(\nu_n)$, $z_q(\nu_n)$ を $v_q(\nu_n)$ および $u_q(\nu_n) + u_{-q}^*(-\nu_n)$ の形でのみ含んでいる。したがって、次の変換

$$v_q(\nu_n) = c [x_q(\nu_n) + y_q(\nu_n)],$$

$$v'_q(\nu_n) = c [x_q(\nu_n) - y_q(\nu_n)],$$

$$w_q(\nu_n) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_q(\nu_n) + u_{-q}^*(-\nu_n)]$$

$$w'_q(\nu_n) = \frac{1}{\sqrt{2}i} [u_q(\nu_n) - u_{-q}^*(-\nu_n)],$$

をおこなえば, $v'_q(\nu_n)$ および $w'_q(\nu_n)$ についての積分は直ちに実行できて, (3.12) 式は

$$\begin{aligned} Z = & \int \prod_{q,n} \delta^2 \left(\frac{v_q(\nu_n)}{\sqrt{2} c \beta} \right) \delta \left(\frac{w_q(\nu_n)}{\sqrt{2} c \beta} \right) \\ & \times \exp \left\{ - \frac{\pi}{2 c^2 \beta^2} \sum_{q,n} [|v_q(\nu_n)|^2 + |w_q(\nu_n)|^2] \right\} \\ & \times Z(\{v_q(\nu_n), w_q(\nu_n)\}), \end{aligned} \quad (3.13)$$

となる。 $Z(\{v_q(\nu_n), w_q(\nu_n)\})$ は (3.10) 式に与えられているものである。

(3.13) 式は exact である。窮極の目的はこの式から自発磁化の出現という協力現象を導くことであるが, この式を厳密にとりあつかうことは困難である。まず, $\nu_n = 0$ の成分のみを残す近似 — static approximation — が考えられる。この近似は, Hubbard model の場合にも, $U = 0$ の極限およびバンド幅ゼロの極限の両方で exact になる。(バンド幅ゼロの極限では H_0 は $\uparrow, \downarrow$ スピンの電子総数 $N_\uparrow, N_\downarrow$ の一次結合になり, H_1 と交換可能になる)。しかし, この近似でも, (3.13) 式の中にはすべての q 成分が含まれているので, まだ取扱いが困難である。それで, 最も簡単な近似として, $\nu_n = 0$ かつ $q = 0$ の成分のみを残し, 他の成分 $v_q(\nu_n), w_q(\nu_n)$ ($q \neq 0, \nu_n \neq 0$) はすべて無視する。残された成分は一種の分子場の役割を演ずるので, この近

似を分子場近似と呼んでおこう。

§ 4 分子場近似

(3.13) 式で random potential の時間および空間平均値，即ち $v_{\mathbf{q}=0} (\nu_n=0)$, $w_{\mathbf{q}=0} (\nu_n=0)$ のみを残し，他の成分は無視する。これらを v_0 , w_0 と書けば，(3.13) 式は

$$Z = \int \delta^2 \left(\frac{v_0}{\sqrt{2} c \beta} \right) \delta \left(\frac{w_0}{\sqrt{2} c \beta} \right) \exp \left[-\frac{\pi}{2 c^2 \beta^2} (|v_0|^2 + w_0^2) \right] Z_m(v_0, w_0), \quad (4.1)$$

となる。ここに， $Z_m(v_0, w_0)$ は (3.10) 式で v_0 , w_0 のみを考慮して次のようにとられたものである，

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \log \left[1 - \beta^{-2} K^\downarrow g_0^\downarrow \hat{V}^* K^\uparrow g_0^\uparrow \hat{V} \right] \\ & \rightarrow \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \log \left[1 - \beta^{-2} |v_0|^2 K_{\mathbf{k}}^\downarrow(\omega_n) g_{0\mathbf{k}}^\downarrow(\omega_n) K_{\mathbf{k}}^\uparrow(\omega_n) g_{0\mathbf{k}}^\uparrow(\omega_n) \right], \\ & \text{Sp} \log K^\uparrow K^\downarrow \\ & \rightarrow - \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \log \left[1 - \beta^{-1} g_{0\mathbf{k}}^\uparrow(\omega_n) w_0 \right] \left[1 + \beta^{-1} g_{0\mathbf{k}}^\downarrow(\omega_n) w_0 \right]. \end{aligned}$$

これらの式を通常のやり方で計算すれば，次の式に導かれる，

$$\begin{aligned} Z_m(v_0, w_0) &= \prod_{\mathbf{k}} \left\{ 1 + \exp \left[-\beta (\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \sqrt{(\mu_B h + \beta^{-1} w_0)^2 + \beta^{-2} |v_0|^2}) \right] \right\} \\ &\quad \times \left\{ 1 + \exp \left[-\beta (\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} + \sqrt{(\mu_B h + \beta^{-1} w_0)^2 + \beta^{-2} |v_0|^2}) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

ここに，

$$\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{U}{2}, \quad (4.3)$$

$$Z_0 = \prod_{\mathbf{k}} \{ 1 + \exp(-\beta \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^\downarrow) \} \{ 1 + \exp(-\beta \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^\uparrow) \}, \quad (4.4)$$

が考慮された。(4.1) 式の v_0 についての積分で，被積分関数が $|v_0|$ のみの関数であるから， $\arg(v_0)$ については直ちに積分できる。

西村 久

以下、磁場 $h = 0$ の場合を考える。そのとき、 $(|v_0|, w_0)$ 平面での積分は半平面での積分であって、(4.1) 式は次のように書くことができる。

$$Z = \sqrt{2} \pi \int_0^\infty d\xi \xi^2 \exp\left(-\frac{\pi}{2} \xi^2\right) Z_m(\xi),$$

$$Z_m(\xi) = \prod_{\mathbf{k}} \{1 + \exp[-\beta(\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} - c\xi)]\} \{1 + \exp[-\beta(\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} + c\xi)]\}. \quad (4.5)$$

バンドの状態密度 $D(\epsilon)$ として適当なものを一、二とって、(4.5) 式を数値的に評価しなければならないが、結果は次の機会に報告する。なお、

$U \cdot D(-\frac{U}{2})/N \ll 1$ の場合には、(4.5) 式は直ちに、

$$Z = Z_0 \{1 + U \cdot D(-\frac{U}{2})/N\} \quad (4.6)$$

となることを附記しておく。

§ 5 帯 磁 率

$$\chi = \beta^{-1} (\partial^2 \log Z / \partial h^2)_{h=0}. \quad (5.1)$$

磁場 h は (3.13) 式の $Z(\{v_{\mathbf{q}}(\nu_n), w_{\mathbf{q}}(\nu_n)\})$ の中の分子場 w_0 とのみ結合して加わっているので、 $w'_0 = w_0 + \beta \mu_B h$ とおいて、(5.1) 式を書き換えれば、次の式がえられる。

$$\chi = \frac{\pi \mu_B^2}{c^2 \beta} \{ \ll w_0^2 \gg - 1 \}, \quad (5.2)$$

$$\ll w_0^2 \gg = (Z^{h=0})^{-1} \int \delta^2\left(\frac{v_0}{\sqrt{2}c\beta}\right) \int \delta\left(\frac{w_0}{\sqrt{2}c\beta}\right) \frac{\pi}{c^2 \beta^2} w_0^2$$

$$\times \int \prod_{\substack{\mathbf{q} \neq 0 \\ \nu_n \neq 0}} \delta^2\left(\frac{v_{\mathbf{q}}(\nu_n)}{\sqrt{2}c\beta}\right) \delta\left(\frac{w_{\mathbf{q}}(\nu_n)}{\sqrt{2}c\beta}\right) \exp\left[-\frac{\pi}{2c^2 \beta^2} \sum_{\mathbf{q}, \nu_n} (|v_{\mathbf{q}}(\nu_n)|^2 + w_{\mathbf{q}}(\nu_n)^2)\right] \\ \times Z^{h=0}(\{v_{\mathbf{q}}(\nu_n), w_{\mathbf{q}}(\nu_n)\}). \quad (5.3)$$

前節の意味での分子場近似, 即ち v_0 , w_0 だけ残すことにすれば, (5.3) 式は,

$$\begin{aligned} \langle\langle w_0^2 \rangle\rangle &\equiv \langle\langle \xi^2 \rangle\rangle \\ &= (Z^{h=0})^{-1} \frac{\sqrt{2}\pi^2}{3} \int_0^\infty d\xi \xi^4 \exp\left(-\frac{\pi}{2}\xi^2\right) Z_m^{h=0}(\xi), \quad (5.4) \end{aligned}$$

と書かれる。ここに, $Z^{h=0}$, $Z_m^{h=0}(\xi)$ は (4.5) 式に与えられている。

(5.4) 式の数値計算の結果の報告も次の機会にゆずる。

なお, $U \rightarrow 0$ の極限では勿論

$$\chi = 2 \mu_B^2 D\left(-\frac{U}{2}\right) \quad (5.5)$$

がえられる。

§ 6 あとがき

これまで, 縮退のない単一のエネルギー帯に対する Hubbard model をい
わゆる functional integral の方法で調べてきた。実際の遷移金属に対し
ては multiorbital-band model で考える必要があろう。§ 4 で議論され
た分子場近似を改良するために, random potential の空間, 時間的な flu-
ctuation $v_q(\nu_n)$, $w_q(\nu_n)$ ($q \neq 0$, $\nu_n \neq 0$) を, まず (3.10) 式の最低
次でとり入れることが考えられる。これを実行すれば, spin wave excita-
tion が得られることが期待される。目標は (3.13) 式から協力現象を導き出
すことであろう。

文 献

- 1) C.Herring, Magnetism vol.4 (edited by G.T.Rado and H.Suhl, Academic Press. 1966)
E.D.Thompson, Adv. Phys. 14, 213 (1965)
- 2) J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. (London) A276, 283 (1963);
A277, 237 (1964); A281, 401 (1964)
- 3) R.L.Stratonovich, Soviet. Phys. Doklady 2, 416 (1958)

西村 久

- 4) J.Hubbard, Phys. Rev. Letters 3, 77 (1959)
- 5) B.M^uhlschlegel, J.Math. Phys. 3, 522 (1962)
- 6) J.S.Langer, Phys. Rev. 134, A553 (1964)
- 7) T.M.Rice, J.Math. Phys. 8, 1581 (1967)
- 8) S.Q.Wang, W.E.Evenson, and J.R.Schrieffer, Phys. Rev. Letters 23, 92 (1969)
- 9) D.R.Hamann, Phys. Rev. Letters 23, 95 (1969); Phys. Rev. B2, 1373 (1970)
- 10) H.Keiter, Phys. Rev. B2, 3777 (1970)
- 11) A.Yoshimori and A.Sakurai, Tech. Report ISSP Ser.A No.439 1970
- 12) W.E.Evenson, J.R.Schrieffer, and S.Q.Wang, J.Appl. Phys. 41, 1199 (1970); Phys. Rev. B2, 2604 (1970)