

s-d 相互作用による異常性について

高野文彦
小川泰
大沢健郎
高中健二
(東教大理)

(9月24日 受理)

§ 1. 序

金属の伝導電子が局在スピンと交換相互作用

$$\mathcal{H}' = -\frac{J}{2N} \sum_{k,k'} [S_j^z (c_{k'}^+ c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^+ c_{k'\downarrow}) + S_j^+ c_{k\downarrow}^+ c_{k'\uparrow} + S_j^- c_{k\uparrow}^+ c_{k'\downarrow}] e^{i(k-k')R_j} \quad (1)$$

をしているとき、伝導電子の life time が低温で異常に大きくなり、このため電気抵抗に極小があらわれることを Kondo¹⁾ が最初に示した。しかしその計算は摂動によるものであり、こういう異常性を示すとき摂動計算がいかどうか疑問が残る。そこでいろいろな人が、いろいろな方法でこの問題について調べている。Nagaoka²⁾ はグリーン関数を用いた self consistent method で、Suhl³⁾ は T-matrix の方法で、また Abrikosov⁴⁾ はスピン演算子をフェルミ演算子でかいて、温度グリーン関数を展開し、特別なグラフの和をとるという方法を用いている。しかしこれらの結果は必ずしも一致せず、またいろいろな近似計算に分らない点もあるので、吾々はまずこれらの計算を check しようと試みた。この結果は次に述べる点で、他の人の結果とちがっている。ここにそれを報告し、皆様の御批判をうけたいと思う。

今までのいろいろな人による計算は、細かい点でかなりちがう結果を与えているが、どの場合でも $J < 0$ (反強磁性的な相互作用) のときだけ異常があらわれるという点では一致している。我々はまず Abrikosov 流のグラフの和の一部を正直に計算してみたが、 J の正負に限らず異常性があらわれることが分

高野・小川・大沢・高中

つた。さらに Nagaoka 流の self consistent method をもつと簡単に逐行する方法を用いても、同じ結論に達する。元来 $J < 0$ のときにのみ異常を示すことに何か物理的な意味があるのかどうか、よく分らないが、 J の正負によらず異常を示すこともありうるのではないかと思っている。

以下ではまず self consistent method による計算を示し、さらに帯磁率の計算をする。Abrikosov 流のグラフの部分和の議論では Appendix で示すことにする。

以下の計算では、局在スピン間の相関は無視し、ただ 1 個の局在スピンが原点にある場合を考える。電子の life time などは 1 個の場合に局在スピンの数をかければよい。

§ 2. Self consistent method

Nagaoka は不純物のスピンの $\frac{1}{2}$ の場合を考え、retarded Green's function

$$G_{kk'}(\omega) \equiv \langle\langle c_{k\uparrow} | c_{k'\uparrow}^+ \rangle\rangle_{\omega}, \quad (2)$$

ただし

$$\langle\langle A | B \rangle\rangle_t \equiv \begin{cases} -i \langle \{ A(t), B(0) \} \rangle & t > 0, \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

の Fourier 成分を $\langle\langle A | B \rangle\rangle_{\omega}$ とかいた。 $G_{kk'}$ の運動方程式を作ると、(1) のような相互作用のため

$$\langle\langle c_{k\uparrow} S_z | c_{k'\uparrow}^+ \rangle\rangle, \quad \langle\langle c_{k\downarrow} S^+ | c_{k'\uparrow}^+ \rangle\rangle \quad (3)$$

のような高次の Green 関数が入ってくる。そこで(3)の Green 関数の方程式を作ると、さらに高次の Green 関数が現われるが、ここでこれら高次のものを(2)と(3)を用いて表わす(decoupling)。このとき係数に $\langle c_{1\uparrow}^+ c_{1\uparrow} \rangle$ や $\langle c_{1\uparrow}^+ c_{1\downarrow} S^- \rangle$, $\langle c_{1\downarrow}^+ c_{1\uparrow}^+ S^+ \rangle$ のような平均値が現われるが、これらは(2), (3)の Green 関数を用いて計算できる。こうして self consistent な方程式が得られるが、この方程式は非常に複雑で、正直には解けない。Nagaoka は

は近似的に解いて、たとえば

$$\sum_{k'} G_{kk'}(\omega) = \frac{\omega}{(\omega - \xi_k)(\omega + i\Delta)}$$

のように、虚軸上に pole をもつ Green 関数を得た。Δ は

$$1 = \frac{|J|\rho}{N} \int_0^D \frac{\xi}{\xi^2 + \Delta^2} \operatorname{th} \frac{\xi}{2T} d\xi \quad (4)$$

から決められるが、(4)は超伝導における gap の方程式によく似て居り、

$$1 = \frac{|J|\rho}{N} \int_0^D \frac{1}{\xi} \operatorname{th} \frac{\xi}{2T_c} d\xi \quad (4')$$

できまる T_c 以下でのみ $\Delta \neq 0$ である。こうして電子の Green 関数は $T < T_c$ で虚軸上に pole をもち、このため電気抵抗にも異常が現われることになるが Nagaoka 自身も述べているように、彼の近似法は Δ が余り小さい所では使えないので、(4') できまる T_c が実際に存在するかどうかは疑わしい。

ところで、Nagaoka の方法は超伝導理論でいえば Zubarev⁵⁾ の方法に対応している。それならば超伝導の方には Gor'kov⁶⁾ の方法があり、この方法がずっと簡単で、本質的に同じ結果を与えたことを思い起せば、今の場合もこれに対応する解き方があるはずである。Gor'kov は 2 体の Green 関数 $\langle\langle \psi(1)\psi(2)\psi^+(3)\psi^+(4) \rangle\rangle$ を $\langle\psi\psi\rangle$ $\langle\langle \psi^+\psi^+ \rangle\rangle$ という decoupling をして成功している。 $\psi^+\psi^+$ の真の平均は 0 になるはずであるが、Cooper pair に相当する bound state を表わすには都合のよいものであつた。今の場合でも、局在スピンと伝導電子のスピンとの間にある意味で bound state ができていると考えられるから、Gor'kov に対応して(3)の Green 関数を人工的に分けることを考える。それには

$$S_z = \frac{1}{2} (a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow})$$

$$S^+ = a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\downarrow}$$

$$S^- = a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\uparrow}$$

高野・小川・大沢・高中

のように $a_{\uparrow}, a_{\downarrow}$ というフェルミ演算子を導入し、たとえば

$$\langle\langle c_{k\downarrow} s^- | c_{k'\uparrow}^+ \rangle\rangle = \langle c_{k\downarrow} a_{\downarrow}^+ \rangle \langle\langle c_{k\downarrow} a_{\downarrow}^+ \rangle\rangle \langle\langle a_{\uparrow} | c_{k'\uparrow}^+ \rangle\rangle \quad (5)$$

と decouple すればよい。そこで考える Green 関数として(2)の $G_{kk'}$, および

$$G'_{kk'}(\omega) \equiv \langle\langle c_{k\downarrow} | c_{k'\uparrow}^+ \rangle\rangle$$

$$F_{k'} \equiv \langle\langle a_{\uparrow} | c_{k'\uparrow}^+ \rangle\rangle$$

$$F'_{k'} \equiv \langle\langle a_{\downarrow} | c_{k'\uparrow}^+ \rangle\rangle$$

の3種類を考え、高次のものはみな(5)のように decouple し、方程式を作る。まず後の便利のために磁場を入れた全ハミルトニアンをかく。

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{k,\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} - \frac{J}{2N} \sum_{kk'} \left\{ \frac{1}{2} (a_{\uparrow}^+ a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^+ a_{\downarrow}) (c_{k\uparrow}^+ c_{k'\uparrow} - c_{k\downarrow}^+ c_{k'\downarrow}) \right. \\ & \left. + a_{\uparrow}^+ a_{\downarrow} c_{k\downarrow}^+ c_{k'\uparrow} + a_{\downarrow}^+ a_{\uparrow} c_{k\uparrow}^+ c_{k'\downarrow} \right\} \\ & - \mu H \left\{ g \sum_k (c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^+ c_{k\downarrow}) + g' (a_{\uparrow}^+ a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^+ a_{\downarrow}) \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

ただし伝導電子と局在スピンとで g 因子がちがいうることを考慮して g, g' とかいた。

G, F, F' の運動方程式を以上の方針に従って作ると

$$\begin{aligned} (\omega - \xi_k + g\mu H) G_{kk'}(\omega) + \frac{J}{2N} \{ s_z \mathcal{S}_{k'} - \sqrt{N} (\frac{1}{2} a^+ + a^-) F_{k'} + \frac{\sqrt{N}}{2} \beta^- F'_{k'} \} &= \frac{1}{2\pi} \delta_{kk'} \\ (\omega - \xi_k - g\mu H) G'_{kk'}(\omega) + \frac{J}{2N} \{ -s_z \mathcal{S}'_{k'} - \sqrt{N} (\frac{1}{2} a^- + a^+) F_{k'} + \frac{\sqrt{N}}{2} \beta^+ F'_{k'} \} &= 0 \\ (\omega + g'\mu H) F_{k'}(\omega) + \frac{J}{2N} \{ \sigma_z(0) F'_{k'} - \sqrt{N} (\frac{1}{2} a^+ + a^-) \mathcal{S}'_{k'} + \frac{\sqrt{N}}{2} \beta^+ \mathcal{S}'_{k'} \} &= 0 \\ (\omega - g'\mu H) F'_{k'}(\omega) + \frac{J}{2N} \{ -\sigma_z(0) F'_{k'} - \sqrt{N} (\frac{1}{2} a^- + a^+) \mathcal{S}'_{k'} + \frac{\sqrt{N}}{2} \beta^- \mathcal{S}'_{k'} \} &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

ここに

$$s_z = \frac{1}{2} \langle a_{\uparrow}^+ a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^+ a_{\downarrow} \rangle \quad (8)$$

$$\begin{aligned}\sigma_Z(0) &= \frac{1}{2} \sum_{kk'} \langle c_{k\uparrow}^+ c_{k'\uparrow} - c_{k\uparrow}^+ c_{k'\downarrow} \rangle, \\ \alpha^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} \langle a_{\uparrow}^+ c_{k'\uparrow} \rangle, \quad \alpha^- = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} \langle a_{\downarrow}^+ c_{k'\downarrow} \rangle \\ \beta^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} \langle a_{\uparrow}^+ c_{k'\downarrow} \rangle, \quad \beta^- = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} \langle a_{\downarrow}^+ c_{k'\uparrow} \rangle\end{aligned}\quad (9)$$

また

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{k'} &= \sum_k G_{kk'}(\omega) \\ \mathcal{G}'_{k'} &= \sum_k G'_{kk'}(\omega)\end{aligned}\quad (10)$$

とかいた。 $\alpha^{\pm}, \beta^{\pm}$ は実数と仮定した。また a, a^+ と c, c^+ とは互に反可換であるとしたが、可換であるとしても最後の結果には変わりはない。

まず(7)を $H=0$ のときに解いてみる。このときは当然

$$\begin{aligned}s_Z = \sigma_Z(0) &= 0, \\ \alpha^+ = \alpha^- &\equiv \alpha, \quad \beta^+ = \beta^- \equiv \beta\end{aligned}$$

であるから(7)は

$$\begin{aligned}(\omega - \xi_k) G_{kk'} + \frac{J}{2\sqrt{N}} \left(-\frac{3}{2} \alpha F_{k'} + \frac{1}{2} \beta F'_{k'} \right) &= \frac{1}{2\pi} \delta_{kk'}, \\ (\omega - \xi_k) G'_{kk'} + \frac{J}{2\sqrt{N}} \left(\frac{1}{2} \beta F_{k'} - \frac{3}{2} \alpha F'_{k'} \right) &= 0,\end{aligned}\quad (7')$$

$$\omega F_{k'} + \frac{J}{2\sqrt{N}} \left(-\frac{3}{2} \alpha \mathcal{G}_k + \frac{1}{2} \beta \mathcal{G}'_k \right) = 0,$$

$$\omega F'_{k'} + \frac{J}{2\sqrt{N}} \left(\frac{1}{2} \beta \mathcal{G}_k - \frac{3}{2} \alpha \mathcal{G}'_k \right) = 0.$$

となる。(7)の第1, 2式を $\omega - \xi_k$ で割り、 k について和をとると、 $\mathcal{G}_k, \mathcal{G}'_k$ の方程式が得られる。すると

$$\sum_k \frac{1}{\omega - \xi_k} \equiv P(\omega)\quad (11)$$

高野・小川・大沢・高中

という関数が現われるが、Nagaoka と同じように

$$P(\omega) = -i\pi\rho(\omega) \quad (12)$$

と近似してしまう（実数部分を無視する）。 ρ は伝導電子の状態密度である。

こうして(7')を解くと

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'} &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}'}} \frac{\omega(\omega + iA)}{(\omega + iA)^2 + B^2} \\ \mathcal{G}'_{\mathbf{k}'} &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}'}} \frac{i\omega B}{(\omega + iA)^2 + B^2} \\ F_{\mathbf{k}'} &= \frac{J}{2\sqrt{N}} \frac{\frac{3}{2}\alpha(\omega + iA) - \frac{1}{2}i\beta B}{2\pi(\omega - \xi_{\mathbf{k}'})[(\omega + iA)^2 + B^2]} \\ F'_{\mathbf{k}'} &= \frac{J}{2\sqrt{N}} \frac{\frac{3}{2}i\alpha B - \frac{1}{2}\beta(\omega + iA)}{2\pi(\omega - \xi_{\mathbf{k}'})[(\omega + iA)^2 + B^2]} \end{aligned} \quad (13)$$

となる。ただし

$$\begin{aligned} A &\equiv \frac{\pi\rho J^2}{4N} \left(\frac{9}{4}\alpha^2 + \frac{1}{4}\beta^2 \right) \\ B &\equiv \frac{\pi\rho J^2}{4N} \frac{3}{2}\alpha\beta \end{aligned} \quad (14)$$

とおいた。 α, β は $F_{\mathbf{k}'}, F'_{\mathbf{k}'}$ より

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{2}{\sqrt{N}} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} f(\omega) d\omega \\ \beta &= -\frac{2}{\sqrt{N}} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}'} F'_{\mathbf{k}'} f(\omega) d\omega \\ f(\omega) &= 1/(e^{\beta\omega} + 1) \end{aligned} \quad (15)$$

のようにきめられるが、(13)の第3, 4式を用いれば次のようなself-consistent equation が得られる。

$$\alpha [1 - 3V - 3(A^2 + B^2)U] + 2ABU\beta = 0 \quad (16)$$

$$\beta [1+V+(A^2+B^2)U] - 6ABU\alpha = 0 \dots$$

ただし

$$U \equiv \frac{J\rho}{4N} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \frac{\omega}{[(\omega^2+(A+B)^2)(\omega^2+(A-B)^2)]} d\omega$$

$$V \equiv \frac{J\rho}{4N} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \frac{\omega^3}{[\omega^2+(A+B)^2][\omega^2+(A-B)^2]} d\omega \quad (17)$$

であり、 ρ の変化は小さいとして積分の外に出した。

こうして(16), (14), (17) を解けばよいのであるが、これらの一見複雑な方程式は次のようにして解ける。まず(16) から $\alpha=\beta=0$ 以外の解をもつ条件として

$$[1-3V-3(A^2+B^2)V][1+V+(A^2+B^2)U] + i2A^2B^2U^2 = 0 \quad (18)$$

が得られ、さらに(16)の上式に β 、下式に 3α をかけて引くと、(14)の定義を用いて

$$B[(A^2-B^2)U - (\frac{1}{3} + V)] = 0 \quad (19)$$

が得られる。

(19)の解は

$$B = 0 \quad (20)$$

または

$$(A^2-B^2)U = \frac{1}{3} + V \quad (20')$$

であるが、まず(20')の場合を調べよう。

(Case I) $B \neq 0$

(18), (20') を U, V について解くと

$$U = \pm \frac{1}{3A\sqrt{A^2-B^2}}$$

$$V = \pm \frac{\sqrt{A^2-B^2}}{3A} - \frac{1}{3} \quad (21)$$

となる。±は U, V が J と反対符号であることに注意して、 J の正、負にした

高野・小川・大沢・高中

がつて選べばよい。さて U , V をもつと簡単な積分にする。それには

$$W(y) \equiv \frac{J\rho}{4N} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \frac{\omega}{\omega^2 + y^2} d\omega \quad (22)$$

という積分を定義すると

$$U = \frac{1}{4AB} (W(A-B) - W(A+B))$$

$$V = \frac{1}{4AB} ((A+B)^2 W(A-B) - (A-B)^2 W(A+B))$$

となるから、(21)に入れると

$$W(A-B) = \pm \frac{2B}{3A} \sqrt{\frac{A-B}{A+B}} - \frac{1}{3} \quad (23)$$

$$W(A+B) = \mp \frac{2B}{3A} \sqrt{\frac{A+B}{A-B}} - \frac{1}{3}$$

が得られる。ところで $T=0\text{K}$ では

$$W(y) \sim \frac{J\rho}{4N} \log \frac{y}{D} \quad (24)$$

(D は考えている band の下端のエネルギーで A, B に比べるとずっと大きいと考える) で与えられるから (23) の上式から下式をひくと

$$\frac{J\rho}{4N} \log \frac{A-B}{A+B} = \pm \frac{2B}{3A} \left(\sqrt{\frac{A-B}{A+B}} + \sqrt{\frac{A+B}{A-B}} \right) = \pm \frac{4B}{3\sqrt{A^2 - B^2}}$$

ここで $\sqrt{A+B}/\sqrt{A-B} = t$ とおくと、上式は

$$\frac{J\rho}{2N} \log t^2 = \pm \frac{4}{3} \frac{t^2 - 1}{t} \quad (25)$$

となるが、(25) は $t=1$ という根をもつが、これは $B=0$ に対応するからここでは考えない。これ以外に(25)が根をもつためには

$$\frac{|J|\rho}{N} > \frac{16}{3} \quad (26)$$

でなければならず、これは実際の場合 $|J|\rho/N \sim 0.1$ であることを考えると実現されないと考えてよい。こうして $|J|$ が十分小さい場合には $B=0$ の場合だけを考えればよいことになる。

(Case II) $B = 0$

このときは (18) より直ちに

$$A^2 U + V = \frac{1}{3} \quad \text{または} \quad -1 \quad (27)$$

となり、前者では $\beta = 0$ 、後者では $\alpha = 0$ になっていることがすぐ分る。ところが (17) を用いると

$$A^2 U + V = \frac{J\rho}{4N} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \frac{\omega}{\omega^2 + A^2} d\omega$$

であるから、 $f(\omega)$ は $\omega < 0$ でほとんど 1 であり、 $\omega > 0$ ではほとんど 0 であることを考慮すると、最後の結果は次のようにまとめられる。

$J > 0$ では $\alpha = 0$ であり、 β をきめる方程式は

$$\frac{J\rho}{4N} \int f(\omega) \frac{\omega}{\omega^2 + A^2} d\omega = -1, \quad (28)$$

$$A = \frac{\pi\rho J^2}{16N} \beta^2.$$

$J < 0$ では $\beta = 0$ で、 α をきめる方程式は

$$\frac{J\rho}{4N} \int f(\omega) \frac{\omega}{\omega^2 + A^2} d\omega = \frac{1}{3}$$

$$A = \frac{9\pi\rho J^2}{16N} \alpha^2$$

で与えられる。

(28), (29) の A は Nagaoka の A と全く同じものであり、 $A \neq 0$ のときは伝導電子のグリーン関数は虚軸上に pole をもち、電気抵抗は異常を示す。

(28), (29) は Nagaoka の式(4)と本質的に同じであり、ただ数因子が少しちがうだけであることがすぐ分る。ただ大きな差は、Nagaoka の計算では $J < 0$

高野・小川・大沢・高中

のときにのみ $d \neq 0$ であつたのが、今の計算では J の正負にかかわらず 0 でない A が得られる。すなわち電気抵抗などの異常は反強磁性的相互作用だけに限らないことになる。

また Nagaoka の方法は計算が複雑なため、 A (すなわち d) が余り小さいときには使えないような近似をしているため、(28), (29) で $A = 0$ になる温度については何も言えなかつた。しかしここではある温度 T_0 があり、それ以下では $A \neq 0$ の解をもつことが示され、 T_0 では何らかの意味で相転移のようなものが起きているといつてもよい。その転移温度ともいうべき T_0 は

$$\frac{J\rho}{4N} \int_0^D \frac{1}{\omega} \operatorname{th} \frac{\omega}{2T_0} d\epsilon = 1 \quad J > 0$$

または $-\frac{1}{3} \quad J < 0$

で与えられる。

上の結果の物理的な意味を考えてみよう。不純物スピンと伝導電子スピンの correlation を考えるために

$$p = \langle (a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow}) \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}) \rangle \quad (30)$$

という量を計算しよう。(9)の α, β の定義を考慮に入れて p を α, β でかくと

$$p = (-2\alpha^2 + 2\beta^2) N$$

となり、(28), (29) より、 $J > 0$ のときは $\alpha = 0, \beta \neq 0$ で $p > 0$

$$J < 0 \quad \text{では} \quad \alpha \neq 0, \beta = 0 \quad \text{で} \quad p < 0$$

となり、 J の正負によつて p が正または負になつていくことがわかる。

§ 3. 帯磁率

外からの磁場 H がかかっている場合、 S_z や $\langle \sigma_z \rangle$ の計算を § 2 の近似で実行してみよう。このときは(7)を解くのであるが、磁場に linear な範囲で計算すればよい。簡単のため、初めから α, β のいずれかは 0 の場合だけを考え、まず $J < 0, \alpha \neq 0$ の場合をとり上げよう。 H がかかっても $\beta^{\pm} = 0$ であることはすぐに確かめられる。また対称性より

$$\begin{aligned} \alpha^+ &= \alpha + \delta \alpha \\ \alpha^- &= \alpha - \delta \alpha \end{aligned} \quad (31)$$

とかけるから、考える方程式は

$$\begin{aligned} (\omega - \xi_k + g\mu H) C_{kk'} + \frac{J}{2N} \{ S_z \mathcal{G}_{k'} - \sqrt{N} \left(\frac{3}{2} \alpha - \frac{1}{2} \delta \alpha \right) F_{k'} \} &= \frac{1}{2\pi} \delta_{kk'} \\ (\omega + g'\mu H) F_{k'} + \frac{J}{2N} \{ \sigma_z(0) F_{k'} - \sqrt{N} \left(\frac{3}{2} \alpha - \frac{1}{2} \delta \alpha \right) \mathcal{G}_{k'} \} &= 0 \end{aligned} \quad (32)$$

となる。(32)の上式を $\omega - \xi_k + g\mu H$ で割り、 k で和をとって $\mathcal{G}_{k'}$ を作ると

$$\mathcal{G}_{k'} + \frac{J}{2N} (-i\pi\rho_+) \{ S_z \mathcal{G}_{k'} - \sqrt{N} \left(\frac{3}{2} \alpha - \frac{1}{2} \delta \alpha \right) F_{k'} \} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \xi_{k'} + g\mu H} \quad (32')$$

となる。 ρ_+ は $\rho(\omega + g\mu H)$ を略記したものである。(32')と(32)の下式を H について一次の項までの範囲で解くと

$$\begin{aligned} \sum_{k'} \mathcal{G}_{k'} &= -\frac{i}{2} \frac{\omega \rho_+}{\omega + iA_+} + \frac{\rho}{2} \frac{1}{(\omega + iA)^2} \left\{ A(g'\mu H + \frac{J}{2N} \sigma_z(0)) \right. \\ &\quad \left. + \omega \left(\frac{J}{2N} \pi \rho \omega S_z + \frac{3J^2}{8N} \pi \rho \alpha \delta \alpha \right) \right\} \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \sum_{k'} F_{k'} &= -\frac{3J}{8\sqrt{N}} \alpha \frac{\rho_+}{\omega + iA_+} + \frac{\frac{J}{8\sqrt{N}} \rho}{(\omega + iA)^2} \left\{ (\omega - iA) \delta \alpha + 3\alpha (g'\mu H + \frac{J}{2N} \sigma_z(0)) \right. \\ &\quad \left. - i \frac{3J}{2N} \pi \rho \alpha S_z \right\} \end{aligned} \quad (34)$$

となる。ただし A は (29) で与えられ、 A_+ は (29) の ρ を $\rho_+ = \rho(\omega + g\mu H)$ で置きかえたものである。

(33), (34) より

$$n_{\uparrow}(0) = -2 \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \sum_{k'} \mathcal{G}_{k'} f(\omega) d\omega \quad (35)$$

$$\alpha + \delta \alpha = -\frac{2}{\sqrt{N}} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \sum_{k'} F_{k'} f(\omega) d\omega \quad (36)$$

高野・小川・大沢・高中

を作り、さらに $\sigma_z(0) = \frac{1}{2} (n_{\uparrow}(0) - n_{\downarrow}(0))$ が計算できる。 S_z を計算するには別の Green 関数が必要になる。すなわち

$$L \equiv \langle\langle a_{\uparrow} | a_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} \quad (37)$$

を考え、その運動方程式を作り、前と同じ近似をすると

$$M_k \equiv \langle\langle c_{k\uparrow} | a_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} \quad (38)$$

が必要になる。この2つの連立方程式を作り、磁場に一次の範囲で解くと $\sum_k M_k$ は (34) と全く同じになり、 L は

$$L = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega + iA_+} - \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(\omega + iA)^2} \left\{ (g\mu H + \frac{J}{2N} \sigma_z(0)) - \frac{J}{2N} \pi \rho A S_z - i\pi \rho \frac{3J^2}{8N} \alpha \delta \alpha \right\} \quad (39)$$

となる。これから

$$\langle a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} \rangle = -2 \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} L f(\omega) d\omega$$

を計算し、 $S_z = \frac{1}{2} \langle a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow} \rangle$ を作れば、(35)、(36) とともに S_z 、 $\sigma_z(0)$ 、 $\delta \alpha$ の連立方程式が得られる。そのとき、たとえば

$$\int \frac{\omega}{\omega^2 + A_+^2} \rho_+ f(\omega) d\omega = \int \frac{(\omega - g\mu H) \rho(\omega)}{(\omega - g\mu H)^2 + A^2} f(\omega - g\mu H) d\omega$$

として、 $g\mu H$ で展開してその第1項までを計算する。すると連立方程式は

$$S_z = -\frac{2A}{\pi} v_1 \left[g\mu H + \frac{J}{2N} \sigma_z(0) - \frac{J}{2N} \pi \rho A S_z \right] - \frac{3J^2}{4N} \rho \alpha (v_2 - A^2 v_0) \delta \alpha \quad (40)$$

$$\sigma_z(0) = 2\rho A^2 v_1 \left[g\mu H + \frac{J}{2N} \sigma_z(0) - g\mu H \right] + \frac{3J^2}{8N} \pi \rho^2 A \alpha v_2 \delta \alpha$$

$$+ \frac{J}{N} \pi \rho^2 A v_3 S_z$$

$$\delta \alpha = -\frac{3J}{4N} \rho \alpha (v_2 - A^2 v_0) \left[g\mu H + \frac{J}{2N} \sigma_z(0) - g\mu H \right]$$

$$- \frac{J}{4N} \rho (v_3 - 3A^2 v_1) \delta \alpha + \frac{3J^2}{4N^2} \pi \rho^2 \alpha A v_2 S_z$$

となる。ただし

$$v_n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega^n}{(\omega^2 + A^2)^\varepsilon} f(\omega) d\omega \quad (41)$$

とかいた。

(41) の v のうち、 v_0, v_1, v_2 はそのまま収斂するから 0°K の値でおきかえてよい、すなわち

$$v_0 = \frac{\pi}{4 A^3}, \quad v_1 = -\frac{1}{2 A^2}, \quad v_2 = \frac{\pi}{4 A} \quad (42)$$

とし、 v_3 は変形して (29) を用いると

$$v_3 = \frac{4N}{3J\rho} + \frac{1}{2} \quad (43)$$

となる。(42), (43) を (40) に入れ、 A の定義を用いると

$$S_z = \frac{\left(\frac{4}{3} + y\right) \frac{\rho}{N} (g + gy) \mu H}{\frac{9}{4} \pi^2 y^2 a^2 \left[\left(1 + \frac{2}{3} y\right) \left(\frac{4}{3} + y\right) - \frac{\pi^2}{4} y \right]} \quad (44)$$

が得られる。ただし

$$y \equiv \frac{J \rho}{2N} \quad (45)$$

とおいた。

さらに

$$\sigma_z = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle$$

を上と同じ近似で計算すると

$$\sigma_z = \rho g \mu H + \frac{J \rho}{2N} S_z \quad (46)$$

以上の議論は $A \neq 0$ のときにのみ正しく、 $A = 0$ では使えない。すなわち $T < T_c$ でのみ正しい。 $T > T_c$ では今の方法では不純物スピンは全く自由であり、 S_z/H は Curie の法則で与えられる。今の方法が $T > T_c$ でのふるまいについては無力であることは、超伝導の Gor'kov の方法と全く同じである。

$T < T_c$ での帯磁率のふるまいをしらべると、 S_z/H は $T \rightarrow T_c^-$ のとき、 $(T_c - T)^{-1}$ で ∞ になることが分る ($\alpha \propto (T_c - T)$)。温度が下がると α が大きくなって S_z/H は単調に減少し、 $T = 0^\circ\text{K}$ でも有限に留まる。このふるまいが系全体の帯磁率にそのまま現われることは (46) から分る (ただし $|y| < 1$ として)。

以上の議論は $J > 0$ の場合にもそのままあてはまる。計算は全く平行に行われるので、詳細は省き S_z の式だけをかいておく。

$$S_z = \frac{4}{\pi^2 y^2 \beta^2} \frac{(g' + gy) \mu H}{1 + 2y - \frac{\pi^2}{4} y^2} \quad (47)$$

§ 4. む す び

s-d 相互作用による異常性については、多くの人がいりいろな方法で調べているが、ここでは伝導電子のスピンと局在スピンとの間にある種の束縛状態を作ると考え、超伝導に対する Gor'kov の理論にならつて、特殊な Green 関数を作つて調べてみた。この方法は Fermi 粒子系に対する Hartree-Fock solution の安定性の議論⁷⁾ から類推されるものである。

ここでの結果は、Nagaoka の結果と本質的に同じであるが、Nagaoka の議論は T_c 近傍では使えないのに反し、この方法は T_c まで使え、数学的にも極めて簡単になつている。ただ T_c より高い温度では何もいえないので、たとえば別に摂動計算を実行しなければならない。

この方法はの数学的な簡単さは、帯磁率の計算を容易にし、実際帯磁率は T_c に低温から近づくと $(T_c - T)^{-1}$ で発散することが示された。

このような異常は、この議論によれば J の正負に拘らず存在し、従来の研究とちがっている。はじめにも述べたように反強磁性的相互作用のときのみ異常を示すことに、どのような物理的な意味がつけられるかは極めて疑問であり、吾々は $J > 0$ のときにも、同じような異常が存在してもよいのではないかと考えている。このことは付録に示すように、Abrikosov 流のグラフの和のうち、一部の和をとつて、伝導電子の life time を計算すると、やはり J の

正負に関らず同じような異常を示すことによつて支持される。もちろん他のグラフが異常性をもつ場合には打ち消すことはありうるが、吾々には極めて improbable だと思われる。

ここでの方法は、s-d mixing (Anderson モデル⁸⁾) があるときには、そのまま用いられ、そのときには T_0 が存在するかどうかなど面白そうな問題もあるが、まだ計算は行つていない。その他いろいろと多くの問題もあるが、それらの検討は後の機会にゆずることにする。

文 献

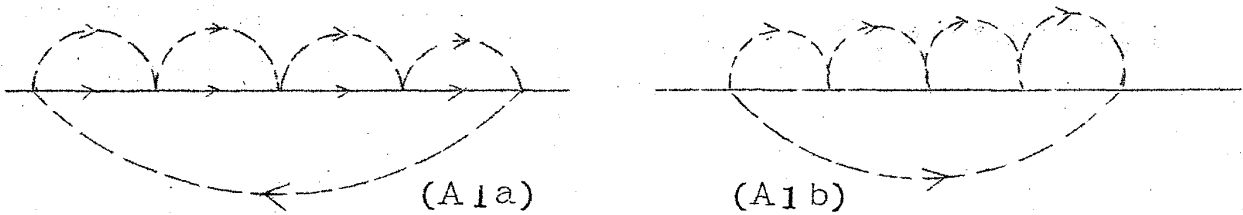
- 1) J. Kondo : Prog. Theor. Phys. 32, 37 (1964).
- 2) Y. Nagaoka : Phys. Rev. 138, A1112 (1965).
- 3) H. Suhl : Phys. Rev. 138, A515 (1965).
および preprint.
- 4) A.A. Abrikosov : preprint.
- 5) D.N. Zubarev : Soviet Physics-Uspèkhi 3, 320 (1960)
- 6) L.P. Gor'kov : Soviet Physics-JETP 7, 505 (1958).
- 7) N. Fukuda et al : Progress supplement, 印刷中.
- 8) P.W. Anderson : Phys. Rev. 124, 41 (1961).

Appendix

Abrikosov は一般のスピン演算子を仮想的なフェルミ粒子の演算子 a_β, a_β^+ ; $\{a_\beta, a_{\beta'}^+\} = \delta_{\beta\beta'}$ $\beta = -s, \dots, s$; を導入し

$$\vec{s} = \sum_{\beta\beta'} \vec{S}_{\beta\beta'} a_\beta^+ a_{\beta'}$$

と書き、温度グリーン関数を摂動展開し、coupling constant の小ささを相殺し、2次の摂動と同じ大きさの寄与をするグラフを全部拾いあげて和をとった。その結果伝導電子の self-energy part に $J < 0$ に限つて、 ω -plane に pole が生じた。そこではグラフの寄与を、積分方程式に直して求めているので、スピン演算子の処理の仕方にやや分り難いところがある。ここではスピン演算子の計算も含めて、正確に表現の求められる次の class のグラフの総和を求めよう。



上図で点線は仮想的なフェルミ粒子の温度グリーン関数

$$G_{\beta\beta'} = -\langle T_{\tau} a_{\beta}(\tau) a_{\beta'}^{\dagger}(0) \rangle$$

の Fourier 変換である。

impurity spin は $2S+1$ 個の状態を必ず 1 つだけ占めるので、物理的に許されるのは $\sum a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} = 1$ なる部分空間だけである。その為ハミルトニアンに $\lambda \sum a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta}$ を入れておき、 $e^{\lambda/T}$ に比例する項だけ拾う。すなわち $e^{\lambda/T}$ をかけて、 $\lambda \rightarrow \infty$ の操作で生き残る寄与を求める。したがって

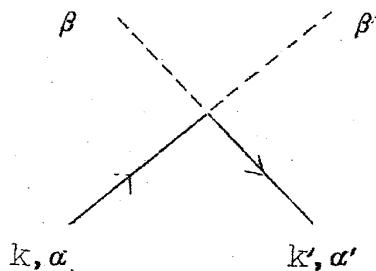
$$G_{\beta\beta'}(\omega) = \delta_{\beta\beta'} \frac{1}{i\omega_n - \lambda},$$

$$\omega_n = (2n+1)\pi T.$$

実線は自由な電子のグリーン関数

$$G_{k\alpha, k'\alpha'} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_k} \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'}$$

を表わす。s-d 相互作用に対応する vertex



には $(\vec{S} \cdot \vec{\sigma})_{\alpha\beta, \alpha'\beta'} \left(-\frac{J}{N}\right) e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}_n}$ が対応する。最後に各々の impurity spin とその位置について平均をとる。

(A1a) の J の $(n+1)$ 次の摂動の self-energy part への寄与は運動量保存を表わす δ 関数を除いて

$$\Sigma_{\alpha, \alpha'}^{(a, n)} = - \frac{N_i}{2S+1} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\lambda/T} S_p(\vec{s}, \vec{\sigma})_{\alpha \alpha'}^{n+1} \prod_{j=1}^n \int d^3 p_j$$

$$T \Sigma_{\omega'} \frac{1}{i\omega' - \lambda} T \Sigma_{\omega_j} \frac{1}{i\omega_j - \lambda} \frac{1}{i(\omega + \omega' - \omega_j) - \xi_j}$$

A(2)

となる。ここで S_p は行列 S についてのみとる。

$$\frac{1}{i\omega_1 - \lambda} \frac{1}{i(\omega + \omega' - \omega_1) - \xi_1} = \left(\frac{1}{i\omega_1 - \lambda} + \frac{1}{i(\omega + \omega' - \omega_1) - \xi_1} \right) \frac{1}{i(\omega + \omega') - \xi_1 - \lambda}$$

と

$$\Sigma_n \frac{1}{i(2n+1)\pi T - x} = - \frac{1}{2T} \text{th} \frac{x}{2T}$$

を利用して ω_j の和をとると (A2) の第2行以下は

$$T \Sigma_{\omega'} \left(-\frac{1}{2}\right)^n \frac{1}{i\omega' - \lambda} \prod_{j=1}^n \left(1 + \text{th} \frac{\xi_j}{2T}\right) \frac{1}{i(\omega + \omega') - \xi_j - \lambda}$$

となる。 ω' の和は

$$\prod_{j=1}^n \frac{1}{i(\omega + \omega') - \xi_j - \lambda} = \sum_{j=1}^n \frac{1}{i(\omega + \omega') - \xi_j - \lambda} A_j, \quad A_j = \prod_{i \neq j} \frac{1}{\xi_i - \xi_j}$$

を利用し

$$\left(-\frac{1}{2}\right)^{n+1} \prod_{j=1}^n \left(1 + \text{th} \frac{\xi_j}{2T}\right) \sum_{j=1}^n A_j \left(\text{th} \frac{\lambda}{2T} - \text{th} \frac{\lambda + \xi_j}{2T}\right) \frac{1}{i\omega - \xi_j}$$

$\lambda \rightarrow \infty$ の極限では $\text{th} \frac{\lambda}{2T} - \text{cth} \frac{\lambda + \xi_j}{2T} \rightarrow \frac{4 e^{-\lambda/T}}{1 + \text{th} \frac{\xi_j}{2T}}$

であるから、

$$\Sigma_{\alpha, \alpha'}^{(a, n)} = \frac{4}{2S+1} [S_p(\sigma, s)^{n+1}]_{\alpha \alpha'} N_i \left(\frac{J}{2N}\right)^{n+1} \int \prod_{k=1}^n d^3 p_k \sum_{j=1}^n \prod_{i \neq j} \frac{1 + \text{th} \frac{\xi_i}{2T}}{\xi_j - \xi_i} \frac{1}{i\omega + \xi_j}$$

$$= \frac{4 N_i}{2S+1} [S_p(\sigma, s)^{n+1}]_{\alpha \alpha'} \left(\frac{J}{2N}\right)^{n+1} \frac{m p_0}{2\pi^2} \frac{J}{2N} (-i\pi \text{sign } \omega) \sum_{j=1}^n \left(\int d\xi \frac{1 + \text{th} \frac{\xi}{2T}}{i\omega - \xi}\right)^{n-1}$$

$$= \frac{4 N_i}{2S+1} [S_p(\sigma, s)^{n+1}]_{\alpha \alpha'} \left(-\frac{J}{2N} \frac{m p_0}{\pi^2} \log \frac{eT}{|\omega|}\right)^{n+1} \frac{m p_0}{2\pi^2} \left(\frac{J}{2N}\right)^2 (-i\pi \text{sign } \omega).$$

高野・小川・大沢・高中

n についての和をとるには $S_p(\sigma \cdot s)^{n+1}$ の計算が必要である。

$$\begin{aligned} a_n &\equiv \frac{1}{2s+1} \frac{1}{s(s+1)} S_p(\sigma \cdot s)^{n+1} \\ &= \frac{1}{2s+1} \frac{1}{s(s+1)} S_p\{[s(s+1) - \sigma \cdot s](\sigma \cdot s)^{n-1}\} \\ &\equiv -a_{n-1} + s(s+1) a_{n-2} \end{aligned}$$

この差分方程式を解く為 $a_n = a^n$ と置くと a は次の方程式

$$a^2 + a - s(s+1) = 0$$

から、 s 、 $-(s+1)$ と求まる。一般解は

$$a_n = c_1 s^n + c_2 (-s-1)^n$$

で初期条件 $a_0 = 0$ 、 $a_1 = 1$ から

$$c_1 = \frac{1}{2s+1}, \quad c_2 = -\frac{1}{2s+1}$$

と求まる。

以上から、 n についての和が求まり、(A1a) の class の self-energy part への寄与 $\Sigma^{(a)}$ は

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\alpha'}^{(a)} &= \sum_{n=1}^{\infty} \Sigma_{\alpha\alpha'}^{(a,n)} = -\frac{i}{2\tau_0} \text{sign } \omega \left\{ \frac{s}{2s+1} \sum_n \left(-\frac{J}{2N} \frac{mp_0}{\pi^2} s \log \frac{\epsilon_F}{|\omega|} \right)^n \right. \\ &\quad \left. + \frac{s+1}{2s+1} \sum_n \left(\frac{J}{2N} \frac{mp_0}{\pi^2} (s+1) \log \frac{\epsilon_F}{|\omega|} \right)^n \right\} \\ &= -\frac{i}{2\tau_0} \text{sign } \omega \frac{1}{2s+1} \left\{ \frac{S}{\left(1 + \frac{J}{2N} \frac{mp_0}{\pi^2} S \log \frac{\epsilon_F}{|\omega|}\right)^2} + \frac{S+1}{\left(1 - \frac{J}{2N} \frac{mp_0}{\pi^2} (S+1) \log \frac{\epsilon_F}{|\omega|}\right)^2} \right\} \end{aligned} \quad (A3)$$

但し τ_0 は 2 次の摂動で計算した伝導電子の life-time で

$$\frac{1}{\tau_0} = \left(\frac{J}{N}\right)^2 S(S+1) N i \frac{mp_0}{\pi}$$

で与えられる。

class (A1b) のグラフの寄与は (A1a) の寄与と全く同じであることは容易に分る。(A3) は明らかに J の正負の如何にかかわらず pole をもつ。これは Abrikosov の与えた δ の表現と異なる。我々の計算では、特定の class のグラフしか考慮していないので、(A3) の右辺の第 2 項を相殺するグラフの class の存在の可能性は残る。しかし第 1 項には殆んど影響を与えず、第 2 項を全く相殺してしまうような効果は物理的には考えにくい。

(A3) の pole の位置を $\log \frac{\epsilon F}{|\omega|}$ を変数として考えると

$$\frac{J}{2N} \frac{m p_0}{\pi^2} \log \frac{\epsilon F}{|\omega|} = -\frac{1}{S} \quad J < 0$$

$$\frac{1}{S+1} \quad J > 0$$

となるが、J の正負により、この比は $S/S+1$ になつている。S = $\frac{1}{2}$ のときはこれは丁度 $\frac{1}{3}$ になり、本文 (28), (29) の A を決める方程式の右辺の比に等しい。このことは偶然とは考えにくく、異常は J の正負に関係しないという考えのうらづけとなる。