s−d 相互作用に関する摂動展開について

三　輪　　　浩（東大物性研）

（9月24日 受理）

これは、近藤氏の最近の論文[6] "A New Type of Divergence Due to s-d Interaction" に対するコメントとして、プログレスのLetter 欄へ投稿したのと本質的に同じ内容のもので、「物性研究」編集部の依頼に応じて書いたものである。　（9月21日）

近藤氏の投稿がありましたので、論争点を明白にする為に特に依頼したものです。　（編集部）

近藤氏が[1] s−d 相互作用による電子の散乱確率を高次のBorn 近似まで求めて、稀薄合金の抵抗極小を説明されて以来、s−d 相互作用のダイナミカルな特徴や、交換相互作用の定数J に関する展開の収斂性などが多くの人によつて議論されるようになつた。[2)−5)] 最近、近藤氏は、局在スピンや伝導電子の緩和時間・帯磁率などの量を摂動で計算すると、対数的な発散とは別に・新しい種類の発散の困難が生じることを指摘された。[6)] しかるに、もし有限温度での物理量に対する表式を使つて、展開パラメタ J の各次数をまとめて計算すれば、エネルギー分母がゼロになるための摂動計算の困難は避けられるという例を示すのがこの小文の目的である。

まず、s−電子と相互作用している１つの局存スピンの帯磁率を考えよう。磁場が局在スピンだけに作用するという仮想的な場合を考えると、Curie 定数の補正はスピンの大きさが変つたことによるものと解釈することができよう。磁場がない時のスピンの大きさを有限温度で計算することには、スピン空間へのプロジエクションに関して曖昧な点があるので、意味のはつきりしている帯磁率をとるのがよい。

ハミルトニアンは標準的な次の形のものをとる：−

三輪　浩

$$H = H_K + H_{sd} \quad , \tag{1}$$

$$H_K = \Sigma_{k,s}\varepsilon_k a^*_{ks} a_{ks} \quad , \tag{2}$$

$$H_{sd} = -(J/N)\Sigma_{k',s'}\Sigma_{k,s}(\vec{S}\cdot\vec{\sigma}_{s's})a^*_{k's'}a_{ks} \quad , \tag{3}$$

H_K がｓ－電子のバンド・エネルギー（Fermi エネルギーからはかつて）H_{sd} がｓ－ｄ交換相互作用である。帯磁率の公式：[7]

$$\chi_{zz} = g^2\mu_B^2\int_0^\beta d\lambda < e^{\lambda H}S_z e^{-\lambda H}S_z > \quad , \tag{4}$$

を使う。<……> は grand canonical 分布での平均を表わす。

$$<A> = \mathrm{Tr}\exp(-\beta H)A/\mathrm{Tr}\exp(-\beta H) \qquad (\beta = 1/kT) \; . \tag{5}$$

(4)式の exponential を J に関して展開して２次までとり、項を適当に整理すると、

$$\chi_{zz} = \chi_0\Big[1 - \frac{4J^2}{H^2}\Sigma_{k'}\Sigma_{k''}f(\varepsilon_{k'})(1-f(\varepsilon_{k''}))\Big\{\frac{1}{(\varepsilon_{k''}-\varepsilon_{k'})^2} - \frac{2}{\beta(\varepsilon_{k''}-\varepsilon_{k'})^3}\Big\} + \cdots\Big] \quad , \tag{6}$$

が得られる。ここで $\chi_0 = g^2\mu_B^2 S(S+1)/3kT$ は自由なスピンの帯磁率、$f(\varepsilon)$ は Fermi 分布函数である。帯磁率がスピンの大きさの２乗に比例することを考えると、(6)式の中かつこの第一項は、芳田、興地両氏[5]の求めたスピンの大きさに対する補正と本質的に同じものであることがわかる（今の場合は２倍）。両氏は、この和（または同等な積分）で $\varepsilon_{k'} \cong \varepsilon_{k''}$ における発散は、物理的に意味を持たないとして捨てたが、一方、近藤氏は[6]エネルギー分母に緩和による幅を導入して、積分が収斂するようにした。

しかし、(6)式の中かつこ内の第二項を、Fermi 分布の実際の形を使つて

$$-(1/\beta)\big[1-\exp\{-\beta(\varepsilon_{k''}-\varepsilon_{k'})\}\big]/(\varepsilon_{k''}-\varepsilon_{k'})^3$$

のように書き直すと、第１項と合わせて $\varepsilon_{k'} = \varepsilon_{k''}$ の所で積分可能な形になつていることが容易に知れる。発散の帳消しは、$|\varepsilon_{k''}-\varepsilon_{k'}| \lesssim kT$ の範囲で起

ると考えてよいから、幅を導入しても、それが kT より小さい間は本質的な役割を演ずることはあるまいと思われる。一方、第1項から出てくる log kT という低温の形は、付け加わつた第2項によつて影響されないことも確かめることができる。

実際、(4)式のような場合に λ についての積分を実行してみると、2つの状態のエネルギー差がゼロになつても何ら困難は生じないのであつて、例えば有限の境界条件を与えてとびとびの準位についての和の形に書いたとすれば、$\varepsilon_{k'}=\varepsilon_{k''}$ の所では2次の項全体を別の正しい表式（Fermi 分布函数の微分を含んだ）で置換えればよいことになる。

次に s－電子の散乱を考えよう。近藤氏は、J の4次まで計算すると、effective な2電子散乱に対応して、上に論じた第一項と同じ形の発散項が現われることを示された。完全な議論をするには、例えば1電子グリーン函数の self-energy part を計算するのも一つであるが、ここでは直観的なやり方で遷移行列を調べ、しかも発散の形の項だけを取上げることにする。

遷移確率を4次まで計算するには、遷移行列を3次まで求めておく必要があるが、3次の項には、第1図で現わされる項があつて（点線はスピン・オペレーターを表わす）　これと1次の項との積が、ちようど2電子散乱（2次の行列要素の2乗）の発散を打消していることがわかる。すなわち、問題の2つの項を取出すと、s－電子 k の遷移確率は次のようになる。

$$\Sigma_{k'} W(k\to k')(1-f(\varepsilon')) \propto J^4 S(S+1)\,\Sigma_{k'}\Sigma_{k_1}\Sigma_{k_2}\frac{(1-f(\varepsilon'))\,f(\varepsilon_1)\,(1-f(\varepsilon_2))}{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)}$$
$$\times\left\{\frac{\delta(\varepsilon-\varepsilon'+\varepsilon_1-\varepsilon_2)}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}-\frac{\delta(\varepsilon-\varepsilon')}{\varepsilon_2-\varepsilon_1+\varepsilon'-\varepsilon}\right\}\quad,(7)$$

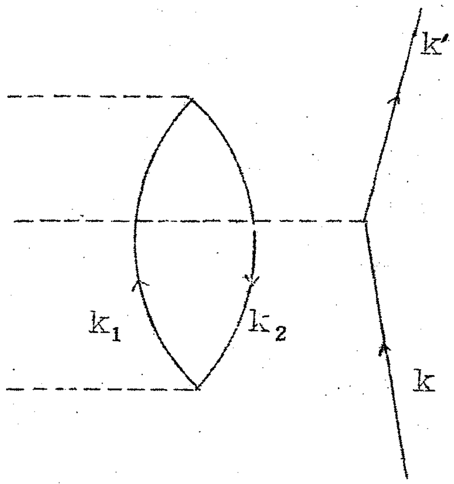
ただし、この式では ε につく添字 k を全て省略してある。第1項が2電子散乱に対応し、第2項が上に述べた1電子散乱に対応する。ここで再び有限温度の Fermi 分布を考慮すれば、2つの項の発散部分は $|\varepsilon_2-\varepsilon_1|\lesssim kT$ で消し合つていることが確かめられる。

以上は、摂動計算で或る次数の全ての項を拾えば、エネルギー分母がゼロになるための困難は起らないという例であるが、このことは、密度行列や温度グリーン函数を使つて物理量の熱平均を計算する場合には、どの次数をとつても

三輪　浩

自然に成立つているように思われる（もちろん，摂動の行列要素が強いsingularity を持つている場合はこの限りでない)。こうして求めたs－d相互作用の摂動展開そのものが収斂するか否かは一応別の問題であつて，ここでは取上げなかつた。[4),5)] 稀薄合金のいろいろな実験結果を説明するために、エネルギーレベルの幅を考慮に入れることは重要かも知れないが，おそらく、近藤氏の導かれたのとは違つた意味においてであろう。

終りに、有益な討論をしていただいた芳田奎先生，興地斐男，田中実両氏および、preprint を見せて戴いた近藤淳氏に厚く感謝します。



第　1　図

文　　献

1) J. Kondo, Prog. Theor. Phys. 32 (1964) 37.
2) H. Suhl, Phys. Rev. 138 (1965) A515.
3) Y. Nagaoka, Phys. Rev. 138 (1965) A1112.
4) A.A. Abrikosov, to be published.
5) K. Yoshida and A. Okiji, Prog. Theor. Phys. (in press).
6) J. Kondo, Prog. Theor. Phys. (in press).
7) 例えば、久保亮五：「固体物理学」（永宮・久保編　岩波書店(1961)） p.375 .