スピン波の寿命 (I)

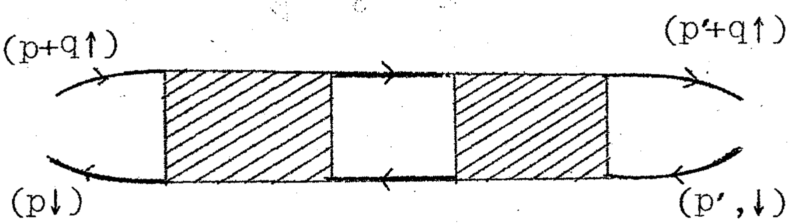
川村　　清（東大理）

（11月5日受理）

1　band model でも spin wave が存在し得ることは、すでに多くの人人によつて指摘されている。[1] 今までの議論は、Hartree-Fock 近似で、$\chi_{+-}(\mathbf{q},\omega)$ の pole を求めたものであつて、Kondrachenko[2]の理解し難い論文を除いて、一般的には correlation effect は議論されていない。

これまで議論されて来た Fermi-Liquid Theory は、"quasi-particle" という概念を導入することによつて、ある種の物理量に関して、Hartree-Fock 近似の結果を若干 modify するような結果を与え、多体効果が定性的な傾向まで変えるようなものではなかつた。[3] しかし、それはもちろん "low excitation" が関与するような現象のみを考えていたからであつて、Fermi 面からはなれたところの電子、hole が関与する現象では、Hartree-Fock の結果は、必ずしもあてにはならない。たとえば spin wave は、$(\mathbf{p}\uparrow)$-state と $(\mathbf{p}+\mathbf{q}\downarrow)$-state の電子が "bound-state" を作ることによつて出現する。この時、hole が、up spin band の Fermi 面に近いと、出来た電子は、down spin band の Fermi 面から、かなりはなれた所にあるはずである。それはもはや quasi-particle とは名付け難いような大きな damping を示すはずである。このような場合にも Hartree-Fock 近似の結果は正しいだろうか―これが Herring の疑問である。[4]

通常、$\chi_{+,-}(\mathbf{q},\omega)$ を計算する diagram は、オ一図のような形をしている。

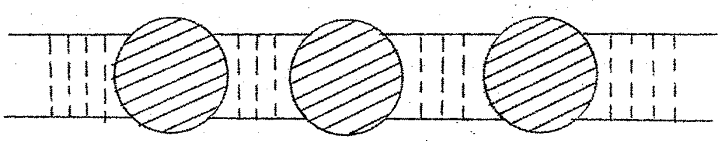


オ 1 図

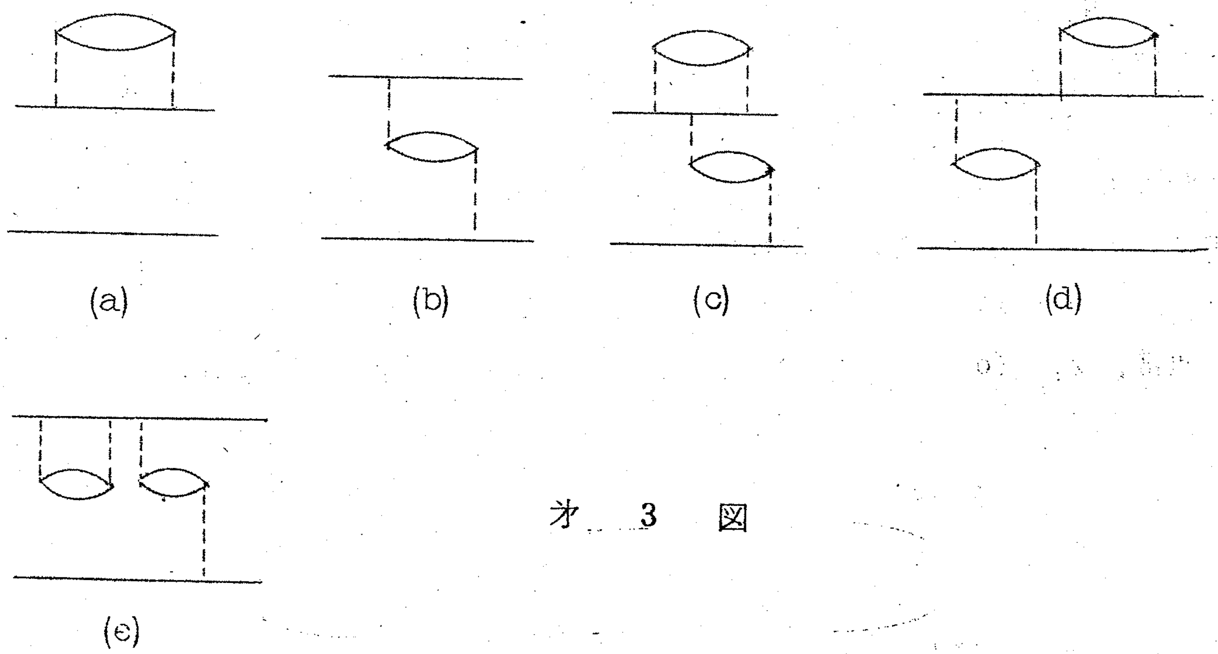
実線は、Self Energy をくり込んだ一体の Green 函数である。斜線を引いた長方形は、"four vertex function" である。途中に $G_{\uparrow}(p''+q)G_{\downarrow}(p'')$ という積が出て来るが、$q\to 0$ でも up spin の電子のエネルギーと down spin のそれとが等しくない為に、singularity が一致せず、Landau 理論[3]のありがたみがなくなつてしまう。

以下で、Herring の疑問に答え、その心配のないことを示し、他の種類の困難があり得ることを指摘したい。

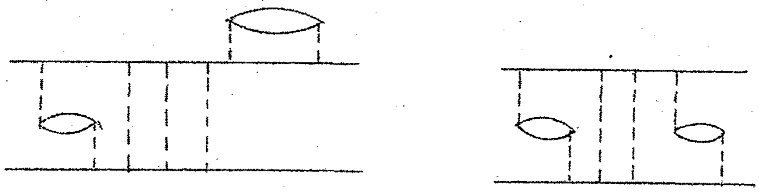
2　普通見かける才1図のような diagram を次のように書き換える。才2図では、実線は Hartree-Fock のみをいれた電子線を表わし、点線は相互作用をあらわす。丸に斜線を引いた部分は、ladder, exchange self-energy 以外のあらゆる diagram を含む。たとえば、才3図(a)(b)(c)のようなものである。



才　2　図



才　3　図



(a)　　(b)

才 4 図

才3図(d),(e)のようなdiagram は考えない。というのは、これらに対応して必ず、才4図(a),(b)のような(a),(b) のようなdiagramがあるからで、結局、才2図の斜線部として、才3図(a),(b) を考えたものにすぎないからである。すなわち、才2図の円形には、ladder 以外の "irreducible four vertex part" か exchange 以外の "irreducible self energy part" の一方か、または両者の入り乱れたもの（才3図(c)）のみが入つてくる。

3　才2図を式で書くと次のようになる。

$$G^{\mathrm{II}}_{pp'}(\mathbf{q},\omega_m)=G^{H-F}_{pp'}(\mathbf{q},\omega_m)$$

$$+\Sigma_{p''}G^{H-F}_{pp''}(\mathbf{q},\omega_m)\Gamma^{(0)}_{p''p'''}(\mathbf{q},\omega_m)G^{\mathrm{II}}_{p'''p'}(\mathbf{q},\omega_m) \qquad (1)$$

(1)で G^{H-F} は、Hartree-Fock 近似で求めた二体の Green 関数、$\Gamma^{(0)}$は、丸い部分でこれを "correlation part" と呼ぶ。G^{H-F} は次の式に従う。

$$G^{H-F}_{pp'}=-G^{0}_{p+q\uparrow}(\epsilon_n+\omega_m)G^{0}_{p\downarrow}(\epsilon_n)\delta_{pp'}\frac{\delta_{nm'}}{T}$$

$$-T\Sigma_{n''p''}G^{0}_{p+q\uparrow}(\epsilon_n+\omega_m)G^{0}_{p\downarrow}(\epsilon_n)v(p-p'')G^{H-F}_{p''p'}(\mathbf{q},\omega_m) \qquad (2)$$

d-electron を頭において、

$$v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')=\mathrm{const}=v \qquad (3)$$

とおく。[1] (2)で一体の Green 函数 $G^{0}_{p}(\epsilon_n)$ は Hartree-Fock 近似で与えられていて

$$G^{0\,-1}_{p\sigma}(\epsilon_n)=\epsilon_n-\tilde{\epsilon}_{p\sigma}(\mathbf{p}) \qquad (4)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{p\sigma}(\mathbf{p}) = \varepsilon_p - v \sum_{p'} f_{p'\sigma} \tag{5}$$

(2)から、

$$G^{H-F}_{pp'}(\mathbf{q},\omega_m) = -G^0_{p+q\uparrow}(\varepsilon_n+\omega_m)G^0_{p\downarrow}(\varepsilon_n)$$

$$\times\left[\delta_{pp'}\frac{\delta_{nn'}}{T} + \frac{vG^0_{p'+q\uparrow}(\varepsilon_n+\omega_m)G^0_{p'\downarrow}(\varepsilon_n)}{1+vT\Sigma_{p,n}G^0_{p+q\uparrow}(\varepsilon_n+\omega_m)G^0_{p\downarrow}(\varepsilon_n)}\right] \tag{6}$$

(6)の〔　　〕の才二項分母は

$$1+vT\Sigma_{pn}G^0_{p+q\uparrow}(\varepsilon_n+\omega_m)G^0_{p\downarrow}(\varepsilon_n)$$

$$=1+\frac{v}{2\pi}\Sigma_p\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\ \mathrm{th}\frac{\varepsilon}{2T}\left[G^0_{p+q\uparrow}(\varepsilon+\omega_m)\mathscr{I}m G^{0R}_{p\downarrow}(\varepsilon)\right.$$

$$\left.+\mathscr{I}m\,G^{0R}_{p+q\uparrow}(\varepsilon)\,G^0_{p\downarrow}(\varepsilon-\omega_m)\right)$$

$$=1+v\Sigma_p\frac{f(\tilde{\varepsilon}_{p\downarrow})-f(\tilde{\varepsilon}_{p+q\uparrow})}{\omega_m+\tilde{\varepsilon}_{p\downarrow}-\tilde{\varepsilon}_{p+q\uparrow}} \tag{7}$$

(7)の zero-point は Izuyama et al[1] によつて調べられていて、Stoner excitation による連続スペクトルと spin wave による孤立スペクトルを与える。後者の zero-point の近くで

$$\Gamma^{H-F}_{p,p'}(\mathbf{q},\omega) \propto (\omega-\omega(\mathbf{q}))^{-1} \tag{8}$$

と書ける。故に今後、次のように書く。

$$\Gamma^{H-F}_{p,p'}(\mathbf{q},\omega_m) = \frac{\Delta(p,q)\Delta(p',q)}{\omega_m-\omega(\mathbf{q})} \tag{9}$$

$$\Delta(p,q) = G_{p+q}(\varepsilon_n+\omega_m)G_p(\varepsilon_n)v \tag{10}$$

4　そこで、才2図の diagram は(1)より

$$\Gamma_{p,p'}(\mathbf{q},\omega_m) = \frac{\Delta(p,q)\Delta(p',q)}{\omega_m-\omega(\mathbf{q})}$$

$$+T^2\Sigma_{n''m'''}\Sigma_{p''p'''}\frac{\Delta(p,q)\Delta(p'',q)}{\omega_m-\omega(\mathbf{q})}\Gamma^{(0)}_{p''p'''}(\mathbf{q},\omega_m)\Gamma_{p'''p'}(\mathbf{q},\omega_m) \quad (11)$$

(11)を解くと

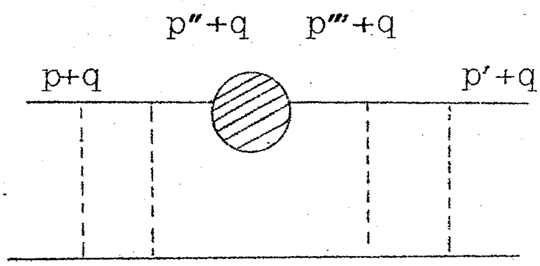
$$\Gamma_{p,p'}(\mathbf{q},\omega_m)=\frac{\Delta(p,q)\Delta(p',q)}{\omega_m-\omega(\mathbf{q})-\Pi(\mathbf{q},\omega_m)} \quad (12)$$

ただし

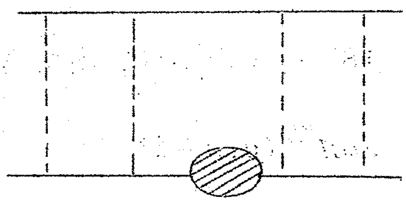
$$\Pi(\mathbf{q},\omega_m)=T^2\Sigma_{n''n'''}\Sigma_{p''p'''}\Delta(p'',q)\Gamma^{(0)}_{p''p'''}(\mathbf{q},\omega_m)\Delta(p''',q) \quad (13)$$

は bound state の Green 関数の "self energy part" である。

5　まず、才5図のように、一体の Green 関数が correlation をいれて modify されることによる効果を考える。そうすることによつて、一体の Green 関数が有限の寿命を持つことによつて、Hartree-Fock 近似の結果出来た bound state が本当にこわれるかどうかが判る。才5図(a)からの $\Gamma^{(0)}$ への寄与は、



(a)



(b)

才　5　図

$$\Gamma^{(a)}_{p''p'''}(\mathbf{q},\omega_m)=G^{-1}_{p''}(\varepsilon_{n''})\Sigma_{p''+q}(\varepsilon_{n''}+\omega_m)\delta_{p''p'''}\frac{\delta_{n''n'''}}{T} \quad (14)$$

これを(13)に代入すると、Π に対する才5図(a)の寄与は、

$$\Pi^{(a)}(\mathbf{q},\omega_m)=T\Sigma_{n''}\Sigma_{p''}\Delta(p''q)G^{-1}_{p''}(\varepsilon_{n''})$$

$$\times\Sigma_{p''+q}(\varepsilon_{n''}+\omega_m)\Delta(p''q)$$

$$=Tv^2\Sigma_{n''}\Sigma_{p''}G_{p''\downarrow}(\varepsilon_{n''})(G_{p''+q}(\varepsilon_{n''}+\omega_m))^2\Sigma_{p''+q}(\varepsilon_{n''}+\omega_m) \quad (15)$$

同様にして才5図(b)からの寄与は

$$\Pi^{(b)}(q,\omega_m)=Tv^2\Sigma_{n''}\Sigma_{p''}(G_{p''\downarrow}(\epsilon_n))^2\Sigma_{p''\downarrow}(\epsilon_{n''})G_{p''+q\uparrow}(\epsilon_{n''}+\omega_m) \quad (16)$$

(15)を解析接続の方法で計算すると、

$$\Pi^{(a)}(q,\omega+i\delta)=\frac{v^2}{4\pi i}\Sigma_{p''}\int d\epsilon''\,\mathrm{th}\frac{\epsilon''}{2T}[G^R_{p''}(\epsilon'')-G^A_{p''}(\epsilon'')]$$

$$\times(G^R_{p''+q}(\epsilon''+\omega))^2\Sigma^R_{p''+q}(\epsilon''+\omega)$$

$$+\frac{v^2}{4\pi i}\Sigma_{p''}\int d\epsilon''\,\mathrm{th}\frac{\epsilon''+\omega}{2T}G^A_{p''}(\epsilon'')$$

$$\times[(G^R_{p''+q}(\epsilon''+\omega))^2\Sigma^R_{p''+q}(\epsilon''+\omega)-(G^A_{p''+q}(\epsilon''+\omega))^2\Sigma^A_{p''+q}(\epsilon''+\omega)]$$

(17)

spin wave の寿命を求める為には、(17)の imaginary part が必要である。

$$\mathcal{I}m\,\Pi^{(a)}(q,\omega+i\delta)$$

$$=-v^2\Sigma_{p''}[f(\tilde{\epsilon}_{p''\downarrow}+\omega)-f(\tilde{\epsilon}_{p''\downarrow})]\mathcal{I}m[(G^R_{p''+q}(\tilde{\epsilon}_{p''\downarrow}+\omega))^2\Sigma^R_{p''+q}(\tilde{\epsilon}_{p''\downarrow}+\omega)]$$

(18)

(18) を ω の小さい所で考えると、

$$\mathcal{I}m\,\Pi^{(a)}(q,\omega+i\delta)$$

$$=-v^2\omega\Sigma_{p''}\frac{\partial f(\epsilon_{p''\downarrow})}{\partial\epsilon_{p''\downarrow}}\mathcal{I}m[(G^R_{p''+q\uparrow}(\tilde{\epsilon}_{p''}+\omega))^2\Sigma_{p''+q}(\tilde{\epsilon}_{p''\downarrow}+\omega)] \quad (19)$$

ところで、

$$\mathcal{I}m[G^R_{p''+q\uparrow}(\tilde{\epsilon}_{p''\downarrow}+\omega)]^2$$

$$=\mathcal{I}m\left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}_{p''\downarrow}+\omega-\tilde{\epsilon}_{p''+q\uparrow}+i\delta}\right)^2 \quad (20)$$

(20)の singularity は $\omega=\tilde{\epsilon}_{p''+q\uparrow}-\tilde{\epsilon}_{p''\downarrow}$ にあるが、これはStoner excitation の spectrum の order で spin waveの振動数よりはるかに大きい。故に (20) は、今考えている振動数の範囲では、 zero である。そこ

で(19)は

$$-v^2\omega\Sigma_{p''}\frac{\partial f(\varepsilon_{p''\downarrow})}{\partial\varepsilon_{p''\downarrow}}\mathrm{Re}\left[G^2_{p''+q}(\tilde{\varepsilon}_{p''}+\omega)\right]\mathscr{I}m\Sigma_{p''+q}(\tilde{\varepsilon}_{p''\downarrow}+\omega) \tag{21}$$

Fermi 分布の微分により (21)は $\tilde{\varepsilon}_{p''\downarrow}=0$ が効く。そこで[5]

$$\mathscr{I}m\Sigma_{p''+q}(\tilde{\varepsilon}_{p''\downarrow}+\omega)=0(\omega^2) \tag{22}$$

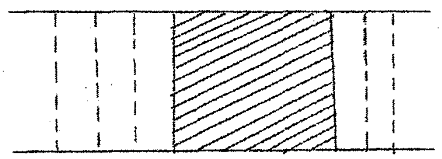
故に(21) は、$0(\omega^3)$ でありこのことから、

$$\mathscr{I}m\,\Pi^{(a)}(\mathbf{q},\omega)=0(\omega^3) \tag{23}$$

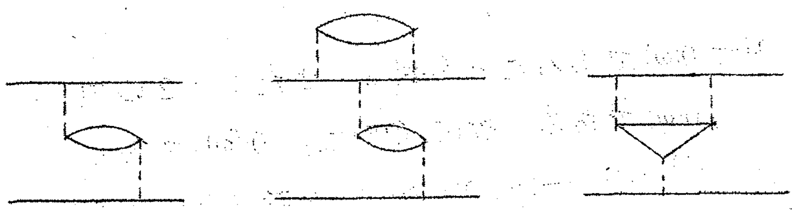
であることが判つた。同様のことが$\Pi^{(b)}(\mathbf{q},\omega)$ についてもいえる。

以上のことから、Herring の指摘は正しくないことが判つたが、今までの計算を振り返つて見ると、それは、いわば当然のことである。というのは、$(\mathbf{p}+\mathbf{q},\downarrow)$－stateは、なるほどそこに一個だけ粒子があるならFermi energy より大きなエネルギーを持つて、早くdamp するが、今は、この電子は、$(\mathbf{p},\uparrow)$ state の hole と "bound state" を作つていて、エネルギーが、単一粒子の場合より遥かに下つているのである。したがつて、(22)の order estimation が出来て、依然、quasi-particle と hole の "bound state" という像を描くことが出来る。

6　次に、才6図(a)のようなcorrelation partを考える。斜線を引いた長方形の部分には、例えば、才6図(b)のようなdiagram の集りをあらわす。



(a)



(b)

実は、spin wave の寿命に関して困るのは、こちらの部分の寄与である。オ6図から (12)のΠへの寄与は

$$\Pi^{(c)}(\mathbf{q},\omega_m)=T^2\Sigma_{n''n'''}\Sigma_{p''p'''}\Delta(p'',q)\Gamma^{(c)}_{p''p'''}(\mathbf{q},\omega_m)\Delta(p''',q)$$

$$=(Tv)^2\Sigma_{n''n'''}\Sigma_{p''p'''}G_{p''+q\uparrow}(\varepsilon_{n''}+\omega_m)G_{p''\downarrow}(\varepsilon_{n''})$$

$$\times\Gamma^{(c)}_{p''p'''}(\mathbf{q},\omega_m)G_{p''+q\uparrow}(\varepsilon_{n'''}+\omega_m)G_{p'''\downarrow}(\varepsilon_{n'''}) \qquad (24)$$

(25)の計算は、Eliashberg[6] の notation を使つて次のように書ける。

$$\left(\frac{v}{4\pi i}\right)^2\Sigma_{p''}\Sigma_{p'''}\iint d\varepsilon''\,d\varepsilon'''\,\lambda_i(p'',k)\,g_i(p'',k)$$

$$\times\mathcal{T}^{(ij)}_{p''p'''}(k)\,g_j(p''',k) \qquad (25)$$

g_j とか$\mathcal{T}$とかの explicit な形は、文献(6)を見て頂きたい。

$$\begin{cases}\lambda_1=\mathrm{th}\dfrac{\varepsilon''}{2T}\\[2ex]\lambda_2=\mathrm{th}\dfrac{\varepsilon''+\omega}{2T}-\mathrm{th}\dfrac{\varepsilon''}{2T}\\[2ex]\lambda_3=-\mathrm{th}\dfrac{\varepsilon''+\omega}{2T}\end{cases} \qquad (26)$$

再び$\Pi^{(c)}$の虚部を考える。まず

$$\mathcal{I}m\,(g_1\mathcal{T}_{11}g_1)=\mathcal{I}m\,(g_3\mathcal{T}_{33}g_3)+0(\omega)$$

$$\mathcal{I}m\,(g_1\mathcal{T}_{13}g_3)=\mathcal{I}m\,(g_3\mathcal{T}_{31}g_1)+0(\omega)$$

を使うと

$$\lambda_1(p''k)-\lambda_3(p''k)=0(\omega)$$

から、(26)の i, j ＝1 or 3の項は $0(\omega)$ であることが判る。また i ＝2の項は、$\lambda_i=0(\omega)$ であり、j=2 は、$\mathcal{T}_{i2}=0(\omega)$ である。故に (25)は、$0(\omega)$ であることは判るが、それ以上のことは、$\mathcal{T}^{(ij)}$ の ω-dependence を考えないことには判らない。しかし、$\mathcal{T}^{ij}$ の singularityのひつかからないような場合に

は、 (25)の寄与は小さく、Hartree-Fockによる結果が"effective interaction"を導入することによつて若干modifyされるような結果で終るかも知れない。

筆をおくにあたつて、この問題を考える機会を与えて下さつた、中嶋先生、渡部氏に感謝します。また、渡部氏には、多くの議論をして頂き、有益でした。

(1) 例えば、Izuyama, Kim and Kubo: J. Phys. Soc. Japan, 18,1025 (1963)

(2) P. S. Kondrachenko: Soviet Phys. JETP 19,972 (1964)

(3) A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dyaloshinski: "Method of Quantum Field Theory in Statistical Physics"

(4) C. Herring: "Exchang Interaction among Itinerant Electrons" (preprint)

(5) J. M. Luttinger, Phys. Rev. 121,942 (1961)

(6) G. M. Eliashberg, Soviet Phys. JETP 14,886 (1962)