s–d相互作用による基底状態のエネルギー

近　藤　　　淳*（電試）

（5月19日受理）

1　序

金属中に常磁性不純物を一コいれた場合の基底状態には最近多くの人が関心を持つている。エセンシヤルな点は伝導電子の中間状態にパウリ原理がきく[1]ということで、このことを最も簡単にとりいれたのはいわゆるクーパー・モデルであろう。[2] これは問題を一電子問題とみなし、多体の効果を、電子がフエルミ面の中にはいれないという制限でおきかえるもので超電導の場合と全く類似で、ただ電子対の代りに一電子を考える点だけが異つている。このようなモデルによつて束縛状態が生じるであろうことは最初Sawada[3]によつて注意された。Nagaoka[4] はグリーン函数の方法でこの点をくわしく調べ、Jが負の場合には局在スピンと反平行に結合した束縛状態が生じることを示した。Suhl[5]はJが負のときもマトリクスに不安定なpoleを見出している。この束縛状態を実際の波動函数で表わそうという試みは筆者[6]及びYosida[7]によつてなされているが、いずれもまだ現在のところはNagaoka の結果のくりかえしにすぎない。

これらの結果から、系のエネルギーはJが負で小さいとき

$$E = -k_1 J^2 \rho^2 D - k^2 D \exp(-1/k_3 |J| \rho) + \cdots \qquad (1)$$

と近似されると推定される。ここにkは1の程度の常数、ρは1原子当りの状態密度、2Dはバンドの巾で、ρは一定とし、フエルミ・エネルギーはバンドの中央とする。ところがエネルギーをJで展開すると異常性を示す項は生じないことはYosida と Miwa が示した。[8] 従つてJが充分小さければ、その展開は収斂するであろう。一方(1)はJについて展開できないからどちらが正しいか

＊現在ベル研究所に在職中。

という疑問が生じる。* この論文ではJについての展開の各項をスピンのゼーマン分離Δの函数として表わし、Δが十分大きいと展開は収斂するが、Δがある値より小さくなると級数は発散すること、またはじめに$\Delta=0$とおけば級数は収斂することを示す。Δのクリイテイカルな値から$k_3=2$と推定する。

2　計　算

局在スピン1コを考え、ハミルトニアンとしては通常のものをとり[1]、そのほか局在スピンのゼーマン・レベルが分離しているものとして$H_Z=-S_Z\Delta$をつけ加える。H_Zと伝導電子の運動エネルギーを無摂動項とし、s－d相互作用を摂動とする。今T＝0を考え無摂動の基底状態は、電子がフエルミ球をみたし、スピンは$S_Z=S$となつている状態を考える。摂動エネルギーをRayleigh-Schrödingerによつて J のベキで展開する。J^nの項には$\Delta\{\log(\Delta/D)\}^r$ $(0\leq r\leq n-1)$に比例する項が含まれるが、このうち最も強く発散する項として最高次$(r=n-1)$のもののみとる。このような方法は、無限項を集めたときに級数の性質によつては特異点でより強く発散する級数を見逃している可能性があるが、その場合でもΔがのちにのべるΔ_Cに近い所ではよい近似でなくてもΔ_Cから十分離れれば少くも漸近的にはよいと期待される。logを含まないものはJの最低次のみをとる。そうすると長い計算の結果

$$E=-S\Delta-2J^2\rho^2D[S(S+1)2\log 2 +S(\Delta/D)\log(\Delta/D)\{1+2J\rho\log(\Delta/D)+(2J\rho\log(\Delta/D))^2+\cdots\}] \quad (2)$$

がえられる。これからわかるようにΔが

$$\Delta_C=D\exp(-1/2|J|\rho) \quad (3)$$

より小さくなるとJのどちらの符号に対しても上の級数は発散する。この級数をまとめて

---

* 長岡氏による。

$$E = -S\Delta - 2J^2\rho^2 D\left\{S(S+1)2\log 2 + \frac{S(\Delta/D)\log(\Delta/D)}{1-2J\rho\log(\Delta/D)}\right\} \tag{4}$$

とすると、J > 0 に対しては $\Gamma = \Delta_C$ でスムースであるが、J < 0 に対しては発散する。

(4)から基底状態における S_Z の平均値は

$$\langle S_Z\rangle = -\frac{dE}{d\Delta} = S\left\{1 - \frac{2J^2\rho^2\log(\Delta/D)}{1-2J\rho\log(\Delta/D)}\right\} \tag{5}$$

と求められる。但し最も強く発散する項だけを残した。ここで Δ の代りに kT とおくと、Yosida と Okiji[9] が $\Delta=0$, $T \neq 0$ の場合に求めた値と一致する。しかしここでは T = 0 と考えているので彼等の場合のような発散の困難は起らない。

3 Discussion

まずJ < 0 のときを議論しよう。$\Delta < \Delta_C$に対して摂動展開がよくないことは明らかであつて、これはもともと(1)のように展開出来ないものを展開したためと解釈してよかろう。(2)で $\Delta = 0$ とおいたものはYosida と Miwaの才一項に一致するが、この値は意味がない。$\Delta < \Delta_C$ ではNagaoka のいうようにスピンと反平行に結合した束縛状態が生じていると解釈するのが一番自然のように思われる。そのときは(5)で与えられる$\langle S_Z\rangle$も勿論意味がなく、永久モーメントはなくなつている。μ_B^2/Δ_C 程度の van Vleck paramag. が残るものと推定される。$\Delta > \Delta_C$に対しては(2)は絶対収斂するが、Δ_C 近傍の振舞いから少くともその近傍では正しい値とは思えない。このことは二通りに解釈できよう。(i)展開は収斂しても本来展開できないものである。(ii)さきにのべた級数の集め方が悪く、すべての項を集めれば正しい値に収斂する。(ii)が正しいとすると Δ が Δ_C より大きくなると束縛状態が消えて展開が出来るようになると解釈できよう。(i)が正しければ $\Delta = \Delta_C$ で特別のことは起らず、Δ が増すと漸近的に正しい値に近づいて行くが、束縛状態はいつまでも消えないと期待される。いずれにしても Δ_C が摂動展開の良否の目安であつて Δ_C と(1)の才二項とは同程度の量と期待され、従つて $k_3=2$と推定される。k_2 はここで考慮しなかつ

た級数によつて影響されるから、$k_2=1$ とはいえない。

次に $J>0$ の場合には(4)はもつともらしく振舞う。しかしこの場合も(i)(2)の級数は $\Delta<\Delta_C$ で発散するから本来展開できない。(ii)(4)が正しい値である。という二通りの解釈ができる。(i)が正しいとすれば $J>0$ の場合にも(1)のような表式になるかもしれないと期待される。

文　献

1) J. Kondo, Prog. Theor. Phys. 32 (1964) 37.
2) J. Kondo, Prog. Theor. Phys. 34 (1965) 204.
3) K. Sawada, private communication
4) Y. Nagaoka, Phys. Rev. 138 (1965) A1112.
5) H. Suhl, Phys. Rev. 138 (1965) A515.
Physics 2 (1965) 39.
Phys. Rev. 141 (1966) 483.
6) 近藤淳， 物性研究１９６６年４月号.
7) K. Yosida, preprint.
8) K. Yosida and H. Miwa, Phys. Rev. 144 (1966) 375.
9) K. Yosida and A. Okiji, Prog. Theor. Phys. 35 (1965) No.4.