s−d 相互作用による基底状態のエネルギー

近　藤　　　淳[*)]（電試）

（7月20日受理）

金属中に常磁性不純物を一コいれた場合の基底状態のエネルギーは、Jが小さいときすでに議論したように次のように表わされると推定される。[1)]

$$E = -k_1 J^2 \rho^2 D - k_2 D \exp(-1/k_3 |J| \rho) + \cdots\cdots \tag{1}$$

ここにkは1の程度の常数、ρは一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。第一項は伝導電子の散乱からくる通常の摂動の最初の項であり、第二項は束縛状態による下りとみなされる。すでにJが負の場合は$k_3=2$であろうと推定したが、[1)] この論文ではたしかに$k_3=2$であることを示しかつk_1の値も定める。

そのために次のように考える。通常の散乱項は(1)の第一項と、そのほかJ^3，J^4…に比例する項があるが、それらには$J\rho$が小さい限り摂動展開が適用出来るとする。しかしこのことは直ちにEがJで展開出来ることを意味するのではなくEからある値（(1)の第二項）を引いた残りに摂動論を適用すべきであると考える。そのためにRayleigh−SchrōdingerとBrillouin−Wignerの中間のような方式を用いることにする。

波動函数を次のように展開する。

$$\phi = \phi_0 + \phi_1 + \phi_2 + \cdots \tag{2}$$

ここでϕ_0は無摂動の基底状態で、伝導電子がフエルミ球をみたし局在スピンが$S_Z=S$であるような状態、ϕ_1はこれからelectron−hole pairを一つ作った状態、ϕ_2は二コ作った状態とする。これを$(H_0+V)\phi = E\phi$にいれて両辺の

*) 現在ベル電話研究所に在職中。

pair の数の等しい部分をくらべると

$$H_0\,\phi_0 + {}^{0}(v\phi_1) = E\,\phi_0 \tag{3}$$

$$H_0\phi_1 + v\phi_0 + {}^{1}(v\phi_1) + {}^{1}(v\phi_2) = E\phi_1 \tag{4}$$

等がえられる。ここで、例えば ${}^{1}(v\phi_2)$はvϕ_2 のうちの electron-hole pair が一コの部分を表わす。

これらの式をϕ_1，ϕ_2… について摂動でとく。そのために

$$\phi_1 = \phi_1^{(1)} + \phi_1^{(2)} + \cdots$$

$$\phi_1 = \phi_2^{(2)} + \phi_2^{(3)} + \cdots$$

と展開する。ここで $\phi_i^{(j)}$ は ϕ_i の j 次の部分。またEは

$$E = E_0 + E_2 + E_3 + \cdots \tag{5}$$

と展開する。E_2，E_3… はJについて2，3… 次とする。E_0 はすでにのべたように無摂動のエネルギー$<\phi_0\,H_0\,\phi_0>$ と必らずしも等しくない。これらを(4)に代入すると

$$\phi_1^{(1)} = (E_0 - H_0)^{-1}\,v\,\phi_0$$

$$\phi_1^{(2)} = (E_0 - H_0)^{-1}\ {}^{1}(v\,(E_0 - H_0)^{-1} v\,\phi_0)$$

等をうる。これを(3)に代入すれば

$$
\begin{aligned}
E &= E_0 + E_2 + E_3 + \cdots \\
&= <\phi_0 H_0\ \phi_0> + <\phi_0 v\,(E_0 - H_0)^{-1}\,v\phi_0> \\
&\quad + <\phi_0\ v(E_0 - H_0)^{-1} v(E_0 - H_0)^{-1} v\,\phi_0> \\
&\quad + <\phi_0 V(E_0 - H_0)^{-1} V(E_0 - H_0)^{-1} V(E_0 - H_0)^{-1} V\phi_0> \\
&\quad - E_2 <\phi_0 V(E_0 - H_0)^{-2} V\phi_0> + \cdots
\end{aligned}
$$

をうる。これはE_0 をself-consistent に定める式である。明らかに$E_0 = <\phi_0 H_0 \phi_0>$という解が存在する。この場合(6)はRayleigh-Schrödingerの摂動論と一致する。しかしJが負の場合にはこれよりエネルギーの低い解があることを示そう。

そのため(6)のマトリクス・エレメントを計算する。
そうするとn次の項には$a\{\log(a/D)\}^r$　$(0 \leq r \leq n-1)$に比例した項が含まれることが判る。ここに$a \equiv <\phi_0 H_0 \phi_0> - E_0$．我々は最も強く発散する項$(r=n-1)$　のみとることにする。
すると

$$
\begin{aligned}
E &= E_0 + E_2 + E_3 + \cdots \\
&= <\phi_0 H_0 \phi_0> - 4\log 2 \cdot s(s+1) J^2 \rho^2 D + 0(J^3 \rho^3) \\
&\quad - 2J^2 \rho^2 s(s+1)\, a \log(a/D)\{1 + 2J\rho \log(a/D) \\
&\qquad + (2J\rho \log(a/D))^2 + \cdots\}
\end{aligned}
\tag{7}
$$

がえられる。ここで第2、3項はJの2、3次であつてE_2，E_3はこれに等しいとおく。対等の級数は幾何級数と推定されるから結局$E_0 - <\phi_0 H_0 \phi_0> = -a$から

$$
a = 2J^2 \rho^2 s(s+1)\, a \log(a/D)\{1 - 2J\rho \log(a/D)\}^{-1} \tag{8}
$$

がえられる。これから、すでにのべたようにa=0 という解があることが判る。Jが正のときはこれが唯一の解であつて

$$
E = <\phi_0 H_0 \phi_0> - 4\log 2 \cdot s(s+1) J^2 \rho^2 D + 0(J^3 \rho^3) \tag{9}
$$

となつてRayleigh-Schrödinger と一致する。しかしJが負のときは

$$
1 - 2J\rho \log(a/D) = 2J^2 \rho^2 s(s+1) \log(a/D) \tag{10}
$$

が解をもつ。最も強く発散する項のみ残すという我々の近似とconsistent

であるためにはこれを

$$1-2J\rho\log(a/D)=O(Jp) \tag{11}$$

とすべきであり、これから

$$a=k_2 D\exp(1/2J\rho) \qquad (J<0) \tag{12}$$

となる。k_2 は1の程度の量。これからEは

$$E=<\phi_0 H_0 \phi_0>-4\log 2\cdot s(s+1)J^2\rho^2 D+O(J^3\rho^3)$$

$$-k_2 D\exp(1/2J\rho) \qquad (J<0) \tag{13}$$

となる。これは$J\rho$が1よりも小さい極限で正しい。これはRayleigh—Schrö—dinger 摂動にくらべて最後の項だけ低い。

我々の基底状態は $(2s+1)$ 重に縮退している。しかしこれは必ずしもスピンが生きのこつていることを意味しない。

この点をしらべるために我々の波動函数(2)でS_Z の平均を計算しよう。すると

$$<S_Z>-S=2J^2\rho^2 s\log(a/D)\{1+2J\rho\log(a/D)$$

$$+(2J\rho\log(a/D))^2+\cdots\}$$

$$=2J^2\rho^2 s\log(a/D)\{1-2J\rho\log(a/D)\}^{-1} \tag{14}$$

がえられる。ここで再び最も強く発散する項のみ残した。不幸にして (11) から判るように 我々の最も強く発散する項のみ残すという近似では (14) の値を正確に定めることは出来ない。しかしS_Z の変化が1の程度であることは判る。すなわち、例えば$S=½$の場合をとると、ϕ_0ではスピンは例えば上向であつたのが、相互作用によつて下向きの状態も1の程度混ざるということになる。(或いは逆に、これが1の程度であるという要請をおくと (14) から$1-2J\rho\log(a/D)$が$J\rho$ の程度でなければならず、従つて$k_3=2$ がえられるといつてよい。) 上向きと下向きとが正確に同じだけ混つているかどうかは判らなかつた

が、我々はそうであろうと推定する。そうすると我々の基底状態のもつスピンの２重縮退は伝導電子のスピンの向きから生じていることになりこれは（不純物が有限の fraction あれば）トリビアルといえる。

文　献

1) 近藤　淳、　物性研究　（１９６６年）　６月号