s-d 相互作用による基底状態のエネルギーについて

近　藤　　　淳（電試*）

（8月15日受理）

最近芳田氏は"Ground State Energy of Conduction Electrons Interacting With a Localized Spin"という論文（プレプリント）を書かれたが、そこにえられた結果は私が前に物性研究に投稿した論文「s-d 相互作用による基底エネルギー、その2」の結果と類似の点が多いので、両者の比較、疑問の点などをのべてみたいと思います。

両者の最も大きな違いは、我々の波動函数がスピンについて縮退しているのに対し、芳田氏のそれは electron と hole について縮退していることと思う。芳田氏はフエルミ面の外にある一コの電子が bound される可能性を論じておられるが同様に hole が bound されることも可能であり、二種類の bound state があることになる。しかしこのような二重縮退は現実にあるとは考えられず、両者はまざりあつてエネルギーを下げ、正しい波動函数は electronと hole について対称になつているのではなかろうか。実際我々が別の所（物性研究１９６６年4月号）で示したようにスピンについて singlet で electronと hole について対称な波動函数を作ることも可能である。芳田興地氏のえたlogの級数がまとまらないこと、J が正のとき bound state が出来たり消えたりすることは波動函数の非対称性と関係があるのではないかと思う。我々の運動函数は electronと hole について対称であつてlogの級数がまとまり、J が正のときには binding energy はなく、J が負のときにはそれは $cDe^{1/J\rho}$ となつたが（J は芳田氏の定義）、これは most divergent な項をすべて集めたという意味で exact であると思う。

我々はスピンについて縮退した波動函数から出発して binding energy を

---

* 現在ベル電話研究所に在職中

えた。これはsinglet stateの方が縮退のある状態よりbinding energyだけ低いという芳田氏の主張を否定するようにみえる。しかしこの点は我々の波動函数のスピン構造をもうすこしよく調べないとはつきりしたことはいえないと思う。

最後に計算上のことをのべる。芳田氏が一旦Jで展開した項のうちのあるものを再び集めてエネルギー分母にくりこんだのは我々のとつたRayleigh-SchrödingerとBrillouin-Wignerの中間の摂動法と同等であるように思う。しかしよくみると計算上の細かいところに差異がある。芳田氏によつて

$$\int_0^D [\epsilon_k - E + \Delta E + \Delta\epsilon'_k]^{-1} d\epsilon_k$$

を計算する。ここに

$$\Delta E = -(3\log 2 / 4) J^2 \rho^2 D + \cdots\cdots$$

$$\Delta\epsilon'_k = -(3/8) J^2 \rho^2 (\epsilon_k - E|/D) \log(|\epsilon_k - E|/D) + \cdots\cdots$$

ΔE がR−S 摂動によるエネルギーの下りである。我々の場合に$\Delta\epsilon'_k$ はなかつた。芳田氏は$\Delta\epsilon'_k$ を省略されたがこれは正しくないと思う。今$J\rho \ll 1$として$J^2\rho^2 D \gg \beta \gg J^4\rho^4 D$なる勝手な$\beta$をとり積分を2つにわける。

$$\int_0^\beta \simeq \int_0^\beta [\epsilon_k - E + \Delta E + (3/8) J^2 \rho^2 E \log|E/D|]^{-1} d\epsilon_k$$

$$\simeq \log|\beta / \{-E + \Delta E + (3/8) J^2 \rho^2 E \log|E/D|\}|$$

ここで$-E+\Delta E \ll \beta \ll -E$を用いた。

$$\int_\beta^D \simeq \int_\beta^D (\epsilon_k + \Delta\epsilon'_k)^{-1} d\epsilon_k \simeq \int_\beta^D \epsilon_k^{-1} d\epsilon_k = \log(D/\beta)$$

これから

$$E = \Delta E + (3/8) J^2 \rho^2 E \log|E/D| - cDe^{d/J\rho}$$

$$\simeq \Delta E + (3/8) J^2 \rho^2 \Delta E \log|\Delta E/D| - cDe^{\alpha/J\rho}$$

これは芳田氏の結果より第二項だけ高く、これは$J\rho$が小さければbinding energyを打消してしまう。しかし$J^4 \log J^2$のような形の式は本来現われないはずのものと思う。