Nagaokaの解とHamannの解の関係について

近　藤　　淳（電試*）

（3月15日受理）

§1　序

s－d相互作用に基いて電子の散乱の確率を計算すると J^3 の項に対数発散が現われる。[1] この問題を解決するためにAbrikosov[2] はいわゆるmost divergent term を加え合わせた。これで対数発散は除かれたが、この解がある characteristic な温度 T_c 以下で complex pole をもつことをSuhl が指摘した。[3] この点に関して2つの考え方があつた。1つは低温においては摂動展開に基ずく解がだめになり、これとは解析的に異つた解が存在するという考え方であつてNagakaによるものである。[4] Nagaoka はグリーン函数の運動方程式を適当な所で切断して、self-consistency eq. を求め、これを低温で展解によらずにといた。この解は

$$kT_c = D\exp(1/2J\rho) \tag{1}$$

という表式が含まれており、J についての展開でこれを得ることは出来ない。もう1つの考え方は、complex pole は most divergent term のみをとるという摂動計算が不備であることから生じたもので、これを改良してあらゆる対数項をとるようにすれば除かれるだろうというものである。今までにあらゆる対数項を正しく集めた人はいないが、Suhl は永い間この問題にたずさわつていて、complex pole を含まない解を求めることに成功した。[5] 彼は高温で摂動展開に一致する解を求め、それを T_c 以下に解析接続したが、そのとき complex pole を生じなかつた。最近Hamann[6] も非常に似た結果を得た。

---

* ベル電話研究所に在職中。

彼はその結果を用いて帯磁率を計算し、それが T_C 以下で何らの異状も示さないことを見出した。これらの事実は才2の考え方が正しいことを証明するものといつてよい。

しかしこのことは直ちにこれらの人々の解が低温で最も安定な解であることを保証するものではない。それは次のような考察によつてわかる。我々はさきに、我々の系（1つの局在スピンと伝導電子）の基底状態について考察を行い2つの解があることを示した。[7] 1つは摂動展開に一致するもので、もう1つはこれより(1)の程度エネルギーが低いものである。(このエネルギーの下りを簡単のため binding energy とよぼう）　我々はTが T_C 以上に上つたときにはこの binding energy はゼロに近づくと期待する。なぜならこの binding energy はフエルミ面の sharpness から生じたものと考えられるからである。そこでどのようにゼロに近づくかが問題である。一つの可能性は、ある criticalな温度 T_K があり、そこで完全にゼロになる場合である。(T_K はおそらく T_C の程度であろう）この場合には T_Kはある意味の転移温度であつて、それより上で摂動展開が成立ち、それより下で別の解に移る。もう一つの可能性は binding energy はゼロに近づくけれどもいつまでたつても完全にはゼロにならない場合である。このときは不連続は起らないが、摂動展開はどんな温度でもよくないことになる。従つて高温で摂動展開に一致し、そのまま解析的に低温にまでつなげていつて我々の得た低い方の解に到達することは不可能となる。従つて Suhl や Hamann の解は低温で安定な解ではあり得ない。

これらの人々の理論はすべて高温で摂動展開に一致するという要請の下に作られたものである。しかし我々の得た結果[7]から、この要請は次の要請によつておきかえらるべきものと考えられる。即ち、正しい解は T＝0 で摂動展開と較べて(1)だけのエネルギーの下りをもつ。この論文ではこのような解をみつけることを試みる。

§2　Hamann の式のもう一つの解

我々は Hamann[6] によつて reformulate された Nagaoka の式を用いる。

$$\psi(\omega)=[1-\alpha+r\int\{f(\omega')-(1/2)\}/(\omega-\omega'+i\delta)d\omega']/$$

$$[1+\alpha+r\int\{f(\omega')-(1/2)\}\psi^{*}(\omega')/(\omega-\omega'+i\delta)d\omega'] \tag{2}$$

ここに $r=2J\rho$, $\alpha=S(S+1)(\pi r/2)^2$ であり、ψ はSマトリクスのon-shell成分である。Nagaokaの式のreformulationはFalkとFowler[8]によつてもなされ、(2)と本質的に同じ積分方程式がえられている我々は(2)をiterationで解くことを考えよう。才一項は $\psi=1$ であり、これを右辺の ψ に代入すると $\psi=1-2\alpha$ がえられ、これをまた右辺に代入して $\psi=1-2\alpha(1-2r\mathcal{g}(\omega))$ をうる。ここで

$$\mathcal{g}(\omega)=\int\{f(\omega')-(1/2)\}/(\omega-\omega'+i\delta)d\omega'$$

このようにして $r\mathcal{g}(\omega)$ についての展開をうるが、これはHamannの解を展開したものと（完全にではなくても）一致するであろう。

この解はユニークのようにみえる。なぜなら才一項 $\psi=1$ は(2)からユニークにきまるから、それから先の項もユニークにきまるようにみえる。しかしそうではない。今

$$\psi(\omega)=\{(\omega-i\Delta)/(\omega+i\Delta)\}\phi(\omega) \qquad (\Delta>0) \tag{3}$$

とおいてみる。Δ はのちに定める。ϕ についての式は

$$\phi(\omega)=[1-\alpha+r\int\{f(\omega')-(1/2)\}/(\omega-\omega'+i\delta)d\omega']/$$

$$[1+\alpha(\omega-i\Delta)/(\omega+i\Delta)+r\int\{f(\omega')-(1/2)\}\phi^{*}(\omega')/(\omega-\omega'+i\delta)d\omega'] \tag{4}$$

となる。但し Δ は

$$\int\{f(\omega)-(1/2)\}\phi^{*}(\omega)/(\omega-i\Delta)d\omega=r^{-1} \tag{5}$$

によつて定めるものとする。従つて(4)(5)は連立方程式となる。これを再びiterationで解くことを考えると才一項は $\phi=1$ となる。従つてこれは $\psi=1$ とは異つた解である。$\phi=1$ はじつはNagaokaの解[4]にほかならない。(註：

Falk と Fowler[8]は Nagaoka の解が彼らの積分方程式を近似的にみたすことを示した）$\phi=1$から出発して(4)(5)を iteration でといてゆけば Nagaoka の解の不満足な点は除かれるだろう。これを実行することは次節にゆずり、ここで(4)(5)についての注意をのべる。

Hamannの (2.32) によりψの実部はωの偶函数、虚部は奇函数だからϕについても同様のことがいえる。従つて(5)の虚部は自動的にみたされている。

今次の変換

$$\phi(\omega)=\{(\omega-i\Delta')/(\omega+i\Delta')\}\rho(\omega) \quad (\Delta'>0) \tag{6}$$

によつてρに移つたとき、また別の解がえられないかという疑問がおきるが、そうではない。全く同様の process によつて、ρについての式と Δ' についての式

$$\int\{f(\omega)-(1/2)\}\rho^*(\omega)/(\omega-i\Delta')d\omega=r^{-1} \tag{7}$$

がえられる。(5)を(6)に代入した式と(7)とから

$$\{(\Delta'+\Delta)/(\Delta'-\Delta)\}\Big[\int\{f(\omega)-(1/2)\}\rho^*(\omega)/(\omega-i\Delta')d\omega$$
$$-\int\{f(\omega)-(1/2)\}\rho^*(\omega)/(\omega-i\Delta)d\omega\Big]=0$$

をうるから、$\Delta'=-\Delta$ がえられ、$\rho=\psi$となる。

§ 3　その解は我々の要請をみたす

我々は(2)に対する Hamann の解と(4)(5)の解を比較しようとする。しかし(4)(5)を解析的に解くことは出来なかつたので、逐次近似で解き、それと(2)の逐次近似解とを比較しよう。

(4)(5)を iteration で解くことは初めの数項ならやさしい。我々は J^3 まで行つた。まず$\phi=1$を(5)にいれると$J<0$のとき

$$\Delta=\Delta_0\equiv D\exp(1/2J\rho) \qquad (T=0) \tag{8}$$

これは勿論 Nagaoka の結果にひとしい。これと$\phi=1$を(4)に代入して

$(\phi=\phi_1+i\phi_2$ として)

$$\phi_1=1-2\alpha\omega^2/(\omega^2+\Delta_0^2)$$
$$\phi_2=2\alpha\Delta_0\omega/(\omega^2+\Delta_0^2) \tag{9}$$

をうる。これを(5)に代入して再びΔを求めると

$$\Delta=\Delta_0\,(1+O(J\rho))$$

となり殆んどΔ_0とかわらない。このことは次の次数でもそうである。このようにして逐次解が求まるが、これは$\omega\gg\Delta_0$ではHamann の解に近づく。このようにしてえられた解とHamannの解を比較するために(2)の解を逐次近似で同じ次数まで求め、2つの解を用いてground state のエネルギーシフトΔEを計算し比較する。

$$\Delta E=-4\sum_k\int d\omega\,\omega\,f(\omega)\,I_m\,\Delta G_{kk}(\omega+i\delta) \tag{10}$$

ここに

$$\Delta G_{kk}(\omega)=t(\omega)/2\pi(\omega-\epsilon_k)^2 \tag{11}$$

tは$\phi=1-2\pi i\rho t$によつて定義される。(10)におけるkについての和を積分でおきかえる際にHamannにならつてρをローレンツ型にとる。すると

$$\Delta E=-2N\rho_0 D\int d\omega\,\omega\,f(\omega)I_m\{t(\omega+i\delta)/(iD+\omega)^2\} \tag{12}$$

今求めたϕからtが定まり、これを上式に代入するとΔEが求まる。ローレンツ型でも上の積分は発散するので積分の範囲を(D, −D)に限定する。すると(2)の逐次解からは

$$\Delta E=\sum_n c_n(J\rho)^n D \tag{13}$$

がえられ、(4)の逐次解からは

$$\Delta E=-(2/\pi)\Delta_0+\sum_n c_n(J\rho)^n D \tag{14}$$

がえられる。但し (14)では次の量を省略した。$\Delta_0 J\rho$，$\Delta_0 J^2\rho^2$，…；$(\Delta_0^2/D)(1/J\rho)$，(Δ_0^2/D)，$(\Delta_0^2/D)J\rho$，…；$(\Delta_0^3/D^2)(1/J\rho)$，$(\Delta_0^3/D^2)$，$(\Delta_0^3/D^2)J\rho$，… 等。ここで c_n は 1 の程度の量であるが、これはエネルギーシフトを通常の摂動展開で求めたときにえられるものと完全には一致していない。それはHamann の式が対数でない項については正確でないが、そのような項もエネルギーシフトには対数項と同じ寄与をするからである。このことは今の問題には本質的ではないであろう。 重要なのは (14)が(13) にくらべて丁度 binding energy だけ低くなつているということである。すなわち (14) は我々の結果を[7] reproduce している。(註：(14)の才一項はNagaoka[9] によつてえられている) 従つてNagaoka の解から出発してえられる解が我々の要請をみたしているということがいえよう。

従つて我々が次になすべきことは(4)を任意の温度で解いて色々な物理量を計算することであるが、これは数値計算にたよるほかはないと思う。ここでは予備的考察をのべよう。

まず $T\gg T_c$ の場合には、ω のいかんにかかわらず展開の最初の数項で十分よい近似であろう。一番粗い近似では $\phi\sim 1$ としてよかろう。これを(5)に代入すれば $T\gg T_c$ ではこれをみたす Δ は存在しないことがわかる。すなわち$\Delta=0$。このことは critical な温度 T_K があつて、それより上では Hamann の解が成立ち、T が T_K より下になると Nagaoka の解に移ることを意味する。

T_K の近くで Δ はどのように 0 に近づくか。もし $\Delta\sim(T_K-T)^\alpha$ $(\alpha>0)$ ならば T_K は(5)において $\Delta=0$ とおいて定めることが出来る。$\Delta=0$ では $\phi=\psi$ だから

$$\int\{f(\omega)-(1/2)\}\psi^*(\omega)/(\omega-i\delta)d\omega=r^{-1} \tag{15}$$

から T_K が定められる。(2)において $\omega=0$ とおいて (15)を考慮すると

$$\psi(0)=\alpha^{-1}\left[1-\alpha+r\int\{f(\omega')-(1/2)\}/(-\omega'+i\delta)d\omega'\right]$$

がえられる。$\psi(0)$ として Hamann の解

$$\psi(\omega)=X(\omega)\{X(\omega)^2+s(s+1)\pi^2\}^{-1/2}$$

$$X(\omega)=-r^{-1}\left[1-\alpha+r\int\{f(\omega')-(1/2)\}/(\omega-\omega'+i\delta)\,d\omega'\right]$$

を用いると

$$\{X(0)^2+s(s+1)\pi^2\}^{1/2}=-s(s+1)\pi^2 r/4$$

となるが、$X(0)\cong \ell n(T/T_C)$ であるからこれをみたすようなTは存在しない。このことは最初の仮定 $\Delta\sim(T_K-T)^\alpha$ がよくないことを意味する。すなわち Δ は T_K において0から突然有限の値にとぶ。

文　　献

1) J. Kondo, Prog. Theor. Phys. 32 (1964) 37.
2) A. A. Abrikosov, Physics 2 (1965) 5.
3) H. Suhl, Phys. Rev. 138 (1965) A515, 141 (1966) 483.
4) Y. Nagaoka, Phys. Rev. 138 (1965) A1112.
5) H. Suhl and D. Wong, Physics 3 (1967) 17.
6) D. R. Hamann, preprint.
7) J. Kondo, 物性研究 6,196. Phys. Rev. 154 (1967)
8) D. S. Falk and M. Fowler, preprint.
9) Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. 37 (1967) 13.