S−d 相互作用に於ける Bound State

沢 田 克 郎 （東教大理）

（9月20日受理）

1この不純物のあるS−d相互作用している系でハミルトニアンが

$$H = \Sigma_k \varepsilon_k (c^*_{k\uparrow} c_{k\uparrow} + c^*_{k\downarrow} c_{k\downarrow})$$

$$+ \frac{g}{V} \Sigma_k \Sigma_{k'} ((c^*_{k\uparrow} c_{k'\uparrow} - c^*_{k\downarrow} c_{k'\downarrow}) S_z$$

$$+ S_+ c^*_{k\downarrow} c_{k'\uparrow} + S_- c^*_{k\uparrow} c_{k'\downarrow}) \qquad (1)$$

に於て（$S_z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$），ハートレーフォックの解 ϕ_0（フエルミ球でスピン↑，↓の粒子が下から k_F 迄つまっているもの）から得られる"perturbative"な解が存在するとした時のこの解のエネルギーの上・下限をきめて，之と，いわゆる"Bound"state の解をくらべて，Bound state の存在をギロンしてみる。ここで"perturbative"な解と言うのは，それを Ψ_α とすると

$$|(\phi_0, \Psi_\alpha)|^2 \sim 1 \qquad (2)$$

のものを意味する。この様な Ψ_α があるとした時のエネルギーの上・下限をきめるのに，次の変分原理を使う。

今，

$$J = (\Psi, (H - \bar{E})^2 \Psi) \quad (\geq 0) \qquad (3)$$

という量を任意の Ψ，$\bar{E}$ を使って計算したとして，その値を $\alpha^2(\bar{E})$ としよう。

すると

$$\Sigma_n \left((E_n - \bar{E})^2 - \frac{\alpha^2(\bar{E})}{(\Psi, \Psi)} \right) \frac{|(\Psi_n, \Psi)|^2}{|(\Psi, \Psi)|^2} = 0 \qquad (4)$$

であるから，若し

$$\frac{|(\Psi_a, \Psi)|^2}{|(\Psi, \Psi)|^2} \sim 1$$

になる様な"perturbative"な Ψ_a が存在すれば，そのエネルギー E_a は

$$\overline{E} - \frac{\alpha(\overline{E})}{\sqrt{(\Psi,\Psi)}} \lesssim E_a \lesssim \overline{E} + \frac{\alpha(\overline{E})}{\sqrt{(\Psi,\Psi)}} \qquad (5)$$

のはんいになければならない。何故なら，余り（5）のはんいより外に E_a が存在すると，それは（4）の左辺に正の大きな寄与をするので，残りの $\frac{|(\Psi_n, \Psi)|^2}{|(\Psi, \Psi)|^2}$（$n \neq \alpha$）では Cancell できなくなる。（詳しくは註を見て下さい。）

（5）で $\alpha(\overline{E})$ を $\overline{E}$ について極小にした方が巾が狭くなるので，その様に $\overline{E}$ をきめると

$$\frac{\delta J}{\delta \overline{E}} = 0 \ ; \quad \overline{E} = \frac{(\Psi, H\Psi)}{(\Psi, \Psi)} \qquad (6)$$

となって，ふつうのエネルギーの期待値となる。

以上の事をフエルミ球 ϕ_0 に対してやってみるのであるが，以下のギロンを簡単にする為に k_F より上の方と下の方で，（相互作用の所だけでよいが），アンバランスにしておく，即ち

十一
内高

$$\frac{1}{V}\sum_{k>k_F}^{k_{max}} 1 = N(0)\,D, \quad \frac{1}{V}\sum_{\substack{k<k_F \\ k_{min}}} 1 = N(0)\,D\,\beta^2 \qquad (7)$$

として $\beta^2 < 1$ としておく。

Ψ として ϕ_0 をとると，$\overline{E}$ は

$$\overline{E} = 2 \sum_{k<k_F} \varepsilon_k \quad (= (\phi_0, H\phi_0)) \qquad (8)$$

また，(3) のJをこの $\overline{E}$ を使って計算すると

$$(\phi_0, H^2\phi_0) = (2\sum_{k<k_F}\varepsilon_k)^2 + \frac{3}{2}\left(\frac{g}{V}\right)^2 \sum_{k>k_F}^{k_{max}} 1 \cdot \sum_{\substack{k<k_F \\ k_{min}}} 1$$

となるので

$$J = \frac{3}{2} g^2 N^2(0)\, D^2 \beta^2 \qquad (9)$$

故に，(5) より，若し ϕ_0 に"perturbative"につながる true state Ψ_a があるとすれば，そのエネルギーは

$$2\sum_{k<k_F}\varepsilon_k - \sqrt{\frac{3}{2}}\, g N(0)\, D\beta \lesssim E_a \lesssim 2\sum_{k<k_F}\varepsilon_k + \sqrt{\frac{3}{2}}\, g N(0)\, D\beta \qquad (10)$$

である。

次に"Bound" state の変分エネルギーを出すのであるが，之はよく知られた様に，例えば $g>0$ では singlet の

$$\Psi_1 = \sum_{k \geqq k_F}^{k_{max}} \xi_k \,(C^*_{k\uparrow}\phi_{0\downarrow} - C^*_{k\downarrow}\phi_{0\uparrow}) \qquad (11)$$

(但し $\phi_{0\downarrow}$, $\phi_{0\uparrow}$ は ϕ_0 と同じフェルミ球で，不純物スピン下向・上向)，をとると，$\overline{E}$ の一番低い状態として

$$\overline{E} = 2\sum_{k<k_F}\varepsilon_k + \varepsilon_{k_F} - \triangle\omega$$

$$1 = -\frac{3}{2}\frac{g}{V}\sum_{\ell>k_F}^{k_{max}} \frac{1}{\varepsilon_{k_F} - \triangle\omega - \varepsilon_\ell} \qquad (12)$$

で

$$\triangle\omega \sim D\, e^{-\frac{2}{3gN(0)}} \qquad (13)$$

である。故に，この singlet の状態に対して，次のエネルギーの正確なじようたいが存在する。

$$E_1 \leqq 2\sum_{k<k_F} \varepsilon_k + \varepsilon_{k_F} - \triangle\omega \qquad (14)$$

そこで（14）と（10）を見くらべてみると，（11）の変分函数の方が，粒子が1個多いので，（14）の ε_{k_F} を別にすると，（10）の巾の方には β（<1とした）がかかっているから，$g N(0)$ の或るきまった値に対して，β が適当に小さいと，（10）の不確定さのバンドから（14）が separate する。故に，次の事が言える。

β の値が適当に小さければ，このはんいのギロンで ϕ_0 から "perturbative" につながる true state Ψ_a よりも下に Ψ_1（11）つながる true Bound state が存在する。

勿論 ϕ_0, Ψ_1 を Improve してゆけば，ϕ_0 に対する巾（10）は小さくなるし，E_1（14）の上限は下って行くので，"β の値が適当に小さければ" という表現はだんだんゆるくなる。

$g<0$ では triplet 状態で同じギロンをすると，やはり β を小さくすると "Bound" state が "perturbatiue" な解より下に出る。

ここで使ったいみの "perturbatiue" な解というのは，"Bound" state に対する "scattoring" state を意味する事は明らかであろう。

同じ β に対しては triplet では $\triangle\omega \sim D e^{-\frac{2}{|g|N(0)}}$ であるから，triplet は（10）の不確定さのバンドの中にはいってしまい，singlet はバンドの下に separate する事が β の値によってはおこる。このいみで triplet の方が singlet より "存在しにくい。" 之は芳田さんの結果とはむじゅんしない。

（註）　（4）式で $\frac{|(\Psi_n, \Psi)|^2}{|(\Psi, \Psi)|^2} = P_n$ と，かく事にすると，（4）式の左辺の負に寄与する項はエネルギーが，

$$\bar{E} - \frac{\alpha(\bar{E})}{\sqrt{(\Psi,\Psi)}} \leqq E_m \leqq \bar{E} + \frac{\alpha(\bar{E})}{\sqrt{(\Psi,\Psi)}}$$

であって，

$$負の項の和 = \sum_m \left((E_m - \overline{E})^2 - \frac{\alpha^2(\overline{E})}{(\Psi,\Psi)} \right) P_m \geqq - \frac{\alpha^2(\overline{E})}{(\Psi,\Psi)} \Sigma_m P_m$$

であるから，E_a（$P_a \sim 1$ のもの）が（5）の不等号の中にない時には，之は更に

$$\geqq - \frac{\alpha^2(\overline{E})}{(\Psi,\Psi)} (1 - P_a)$$

となる。

故に（4）式の左辺の正の項は

$$正の項の和 \leqq \frac{\alpha^2(\overline{E})}{(\Psi,\Psi)} (1 - P_a)$$

となるが，

$$\left((E_a - \overline{E})^2 - \frac{\alpha^2}{(\Psi,\Psi)} \right) P_a \leqq 正の項の和$$

であるから，

$$(E_a - \overline{E})^2 \leqq \frac{\alpha^2(\overline{E})}{(\Psi,\Psi)} \frac{1}{P_a}$$

（之は（5）の不等号の外に E_a があるとした結果である。）

故に，E_a が（5）の不等号の外にはみ出しても，次のはんいの中におさまる。

$$\overline{E} - \frac{\alpha}{\sqrt{(\Psi,\Psi)}} \frac{1}{\sqrt{P_a}} \leqq E_a \leqq \overline{E} + \frac{\alpha}{\sqrt{(\Psi,\Psi)}} \frac{1}{\sqrt{P_a}}$$

故に，P_a が或る値（0 に近くない）ならば（5）である。