

S-D 交換相互作用の摂動論 (II)

都立大理 福島 謙二

(12月28日受理)

§ 1.

S-D 交換相互作用の問題は数多くの人々によって研究され、今までに多数の論文が出されてきた。しかしこの段階でも、S-D 交換相互作用の摂動論の形式的な整備を行なうことは、摂動展開の方法が広い適用範囲をもっていることとにらみ合せて、充分意味があると筆者は考えている。こゝでは Doniach¹⁾ 流の摂動論を取扱うが、それは Abrikosov²⁾ による方法に較べてはるかに簡単であると言う理由にある。most divergent diagram の和は Abrikosov²⁾ をはじめ多くの人々によって求められたが、その和は温度を下げていくと複素エネルギー面上で正しくない振舞いを示すことがよく知られている。しかし後で述べるようにもう少し枠を拡げた部分和を考えると、その和は複素平面上で正しい振舞いを示し、温度を下げてても何ら異常性を示さない。もし意味のある部分和が伝導電子と不純物スピンの間の特定の相関の仕方を表わしているとするれば、上の事実は most divergent diagram によって代表される相関の仕方を取入れるだけでは不十分で、もう少し枠をひろげた相関を取入れることの必要を意味してはいないだろうか。例えば、resolvent operator の摂動展開を考え、most divergent diagram の部分和をとる。この部分和は複素平面上で正しい振舞いを示すだろうか。この問題は別の機会に議論したいと思う。§ 2 では、前論文³⁾ のダイアグラムの方法を多少修正してもう一度紹介する。こゝでは Doniach の方法を、ダイアグラムの方法と関連させて系統的な計算に堪えるように整備する。§ 3 では most divergent ダイアグラムだけではなく、もう少し枠をひろげた部分和を考える。この部分和は、Nagaoka⁴⁾ の decoupling approximation が集めえたと思われるダ

福島謙三

イアグラムの集合と同一になるようにとられる。§ 4 では伝導電子の self-energy-part の部分和が満す積分方程式が導びかれ、その近似解が求められる。結果は Nagaoka の方程式の Hamann⁵⁾ の近似解と一致する。したがって摂動展開の解析接続は複素平面上で正しい振舞いを示し温度を下げてても異常性を示さない。他方、Bloomfield - Hamann⁶⁾ の厳密解は $T > T_K, J \rightarrow 0$ で異常性をもたないから本質的に摂動論的な解である。したがって Nagaoka の方程式は、超電導の場合とは異って散乱状態しか与えないようである。S (S+1) を零とおいた Nagaoka 方程式は Bloomfield - Hamann が言っているように非摂動論的な解をもっているが、今の所そう置いてよい理由はないようである。

§ 2.

この節では前論文で紹介したダイアグラムの方法を、多少修正した点もあるのでもう一度簡単に説明する。

温度グリーン関数

$$G_{pp'}(\tau - \tau') = - \langle T A_{p\mu}(\tau) A_{p'\mu}^+(\tau') \rangle \quad (21)$$

の n 次の摂動展開は、

$$G_{pp'}^{(n)}(\tau - \tau') = \left(\frac{J}{N}\right)^n \sum_{p_j i_j} \int_0^\beta \pi d\tau_j G_p^{(0)}(\tau - \tau_j) G_{p_1}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) \dots \dots \dots G_p^{(0)}(\tau_n - \tau') (\sigma_1^{i_1} \sigma_2^{i_2} \dots \sigma_n^{i_n})_{\mu\mu'} \langle T S^{i_1}(\tau_1) S^{i_2}(\tau_2) \dots S^{i_n}(\tau_n) \rangle \quad (22)$$

ここで

$$\langle O \rangle = T_r(O) / T_r(1) \quad (23)$$

と定義する。S - D 交換相互作用は

$$V = \frac{J}{N} \sum_{kk', \lambda\lambda'} (\sigma_{\lambda\lambda'} \cdot S) a_{k\lambda}^+ a_{k'\lambda'} \quad (24)$$

ととった。

(2.2) 式は電子線の closed loop を含まない展開項に対応している。

closed loop を含む項は重要でないので以後無視する。問題は不純物スピン S の T 積 $\Gamma_{12\dots n}^n$ の取扱いである。

$$\Gamma_{12\dots n}^n = TS^{i_1}(\tau_1) S^{i_2}(\tau_2) \dots S^{i_n}(\tau_n) \dots (25)$$

電子スピン σ と不純物スピン S は電子線上の vertex と結びついているが、(2.2) 式の電子スピンの積は一本の電子線上に並ぶ vertex の順序と同じ順序に並べられている。この順序での積を normal product と呼び、スピンの normal product の中で占めるべき位置をそのスピンの normal position と呼ぶことにする。例えば、(2.5) 式右辺のスピンは normal position を占めている。(2.5) 式を τ_1 で微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau_1} \Gamma_{12\dots n}^n &= \delta(\tau_1 - \tau_2) \Gamma_{123\dots n}^{n-1} + \delta(\tau_1 - \tau_3) \Gamma_{213\dots n}^{n-1} + \dots \\ &\dots + \delta(\tau_1 - \tau_n) \Gamma_{23\dots 1n}^{n-1} \dots (26) \end{aligned}$$

ただし、

$$\Gamma_{213\dots n}^{n-1} = TS^{i_2}(\tau_2) \{S^{i_1}, S^{i_3}\}(\tau_3) \dots S^{i_n}(\tau_n), \text{ etc } \dots (27)$$

である。即ち交換関係 $\{S^{i_1}(\tau_1), S^{i_3}(\tau_3)\}$ は再びスピン演算子であるが、そのスピンの時間依存性としては normal position が右側のスピン $S^{i_3}(\tau_3)$ の時間 τ_3 を、同様に normal position として右側のスピンの normal position を付与することにする。

(2.6) 式を初期条件

$$\Gamma_{12\dots n}^n(\tau_1 = \beta) = S^{i_1} \Gamma_{23\dots n}^{n-1}$$

のもとで積分すると

$$\Gamma_{12\dots n}^n = S^{i_1} \Gamma_{23\dots n}^{n-1} - \theta(\tau_2 - \tau_1) \Gamma_{12\dots n}^{n-1} - \theta(\tau_n - \tau_1) \Gamma_{23\dots n}^{n-1} \quad (2.8)$$

を得る。

初期条件

$$\Gamma_{12\dots n}^n (\tau_i = 0) = \Gamma_{23\dots n}^{n-1} S^{i_1}$$

のもとで積分すると、

$$\Gamma_{12\dots n}^n = \Gamma_{23\dots n}^{n-1} S^{i_1} + \theta(\tau_1 - \tau_2) \Gamma_{12\dots n}^{n-1} + \theta(\tau_1 - \tau_n) \Gamma_{23\dots n}^{n-1} \quad (2.8')$$

を得る。(2.8)と(2.8')の平均をとると、

$$\Gamma_{12\dots n}^n = : S^{i_1}, \Gamma_{23\dots n}^{n-1} : - \varepsilon(\tau_1 - \tau_2) \Gamma_{12\dots n}^{n-1} - \varepsilon(\tau_1 - \tau_n) \Gamma_{23\dots n}^{n-1} \quad (2.9)$$

ただし

$$\varepsilon(\tau) = -\frac{1}{2}(\theta(\tau) - \theta(-\tau)) \quad (2.10)$$

$$\text{又} \quad : A, B : = \frac{1}{2}(AB + BA) \quad (2.11)$$

即ち記号 $: :$ は一種の対称化を表わしている。(2.9)式の右辺は $n-1$ 個のスピンのT積であるから、(2.9)式は漸化式になっている。 Γ^{n-1} をreduceするには τ_2 で微分する。更に τ_3, τ_4, \dots の順序で微分することによって次数を順次下げることが出来る。(2.9)式で重要なことは、スピン交換関係 $[S(\tau_i), S(\tau_j)]$ に結びついて、スピンプロパゲータ $\varepsilon(\tau_i - \tau_j)$ が現われることである。以後スピンの交換関係を作ることを縮約と名付けよう。具体的に Γ^2, Γ^3 をかくと、

$$\Gamma_{12}^2 = : S^1 S^2 : - \varepsilon(\tau_1 - \tau_2) [S^1, S^2]$$

$$\Gamma_{123}^3 = : S^1 : S^2 S^3 : - \varepsilon(\tau_1 - \tau_2) : [S^1, S^2] S^3 :$$

$$\begin{aligned}
 & -\varepsilon (\tau_2 - \tau_3) : S^1 [S^2, S^3] : -\varepsilon (\tau_1 - \tau_3) : S^2 [S^1, S^3] : \\
 & + \varepsilon (\tau_1 - \tau_2) \varepsilon (\tau_2 - \tau_3) [(S^1, S^2), S^3] \\
 & + \varepsilon (\tau_1 - \tau_3) \varepsilon (\tau_2 - \tau_3) [S^2, (S^1, S^3)] \quad (212)
 \end{aligned}$$

である。(2.12)式の例からも推測出来るように、ダイアグラムの方法の一般則は次のようになる。

1) $S(\tau_i), S(\tau_j)$ を縮約するときには、 τ_i から τ_j に向う矢印をもった点線を描く。但し、矢印は常に normal position が右側にある Vertex から左側にある Vertex に向う。

2) 一つの Vertex から二本以上の点線が出ることはない。入る方の数には制限がない。上の法則を用いて各次数の可能なダイアグラムを書き下すことが出来る。例えば3次では図1のようになる。

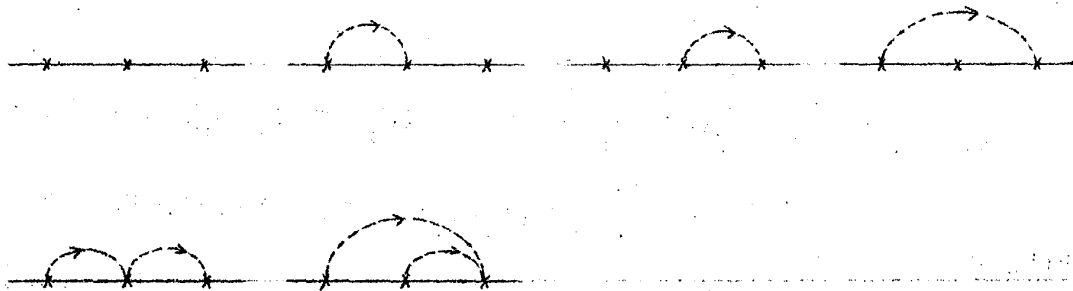


図 1

次に或るダイアグラムで表現される展開項は次の法則によって与えられる。

- 1) τ_i, τ_j を結びつける点線にはスピンプロパゲータ $\varepsilon(\tau_i - \tau_j)$ が対応する。
- 2) 更に τ_i から τ_j に向う点線は縮約 $-[S(\tau_i)S(\tau_j)]$ を意味する。縮約の時間と normal position とを $S(\tau_j)$ のそれと一致させる。
- 3) 一つの Vertex に二本以上の点線が入って来るときには、normal position が左側にあるスピンから先に縮約をとっていく。

福島謙二

4) 縮約をとり終えたら, (2.11) 式の意味でスピン積を対称化する。三次の例としては, 図1と(2.12)式とを比較して載ければわかると思う。以上でダイアグラムの方法の説明は終りである。次にフーリエ変換に移ろう。前論文で指摘したように, スピンプロパゲータはフェルミタイプなので, 奇数箇のプロパゲータ (電子のプロパゲータを含めて) が出入りする Vertex では振動数の保存が成り立たず, フーリエ変換は非常に面倒になる。然し結果そのものは非常に simple である。三次を例にとると, スピンについて統計平均をとった後で可能なダイアグラムは図2になる。

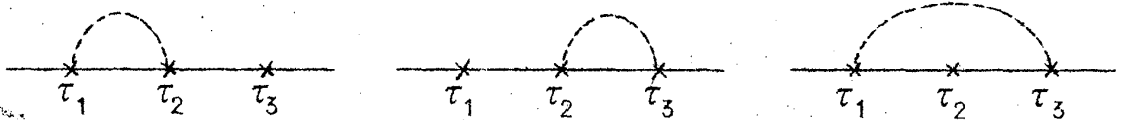


図 2

式でかくと,

$$\begin{aligned}
 G_{pp'}^{(3)}(\tau-\tau') = & - \left(-\frac{J}{N}\right)^3 \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_p^{(0)}(\tau-\tau_1) G_{p'}^{(0)}(\tau_3-\tau') \times \\
 & \times \sum_{p_1 p_2} G_{p_1}^{(0)}(\tau_1-\tau_2) G_{p_2}^{(0)}(\tau_2-\tau_3) [\varepsilon(\tau_1-\tau_2) + \varepsilon(\tau_2-\tau_3) - \varepsilon(\tau_1-\tau_3)] \times \\
 & \times (\sigma^1 \sigma^2 \sigma^3)_{\mu\mu} \langle [S^1, S^2] S^3 \rangle \quad (2.13)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{ただし} \quad (\sigma^1 \sigma^2 \sigma^3)_{\mu\mu} \langle [S^1, S^2] S^3 \rangle &= (\sigma^1 \sigma^2 \sigma^3)_{\mu\mu} \langle S^1 [S^2, S^3] \rangle \\
 &= - (\sigma^1 \sigma^2 \sigma^3)_{\mu\mu} \langle S^2 [S^1, S^3] \rangle
 \end{aligned}$$

を用いた。(2.13) 式のフーリエ変換は多少面倒な計算をすると,

$$\begin{aligned}
 G_{pp'}^{(3)}(\omega_n) = & - \left(-\frac{J}{N}\right)^3 G_p^{(0)}(\omega_n) G_{p'}^{(0)}(\omega_n) \times \\
 & \times \sum_{pp'} [F_{\omega_n} G_{p_1}^{(0)} \cdot G_{p_2}^{(0)}(\omega_n) + G_{p_1}^{(0)}(\omega_n) \cdot F_{\omega_n} G_{p_2}^{(0)} \\
 & \quad - F_{\omega_n} G_{p_1}^{(0)} G_{p_2}^{(0)}] \quad (2.14)
 \end{aligned}$$

ただし

$$G_p^{(0)}(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_p}, \quad \epsilon(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n}, \quad \omega_n = \frac{2n+1}{\beta} \pi, \quad (2.15)$$

$$F_\omega G_p^{(0)} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{f-\frac{1}{2}}{\omega-x} (G_p^{(0)}(x+i\delta) - G_p^{(0)}(x-i\delta)), \text{ etc} \quad (2.16)$$

を用いた。(2.14)式からも推測出来るように(実際4次までたしかめたが)フーリエ変換のあとではスピンプロパゲータはオペレーション F_ω に対応する。以後証明なしでこのことを使う。

§ 3.

この節では、伝導電子の self-energy part の部分和を求める。

Nagaoka⁴⁾ の decouple されたグリーン関数が most divergent term をすべて含んでいることに着目して、Nagaoka の decoupling をそのまま exact に満すダイアグラムの集合は何かを考える。今 i 番目と j 番目の不純物スピンの縮約するとき、その縮約が電子スピンの積にどのような効果を及ぼすかを調べる。 $[S^i, S^j] = i\epsilon_{ijk} S^k$ を用いて、

$$\begin{aligned} & i\epsilon_{ijk} \langle \sigma^1 \dots \sigma^{i-1} \sigma^i \sigma^{i+1} \dots \sigma^{j-1} \sigma^j \sigma^{j+1} \dots \sigma^n \rangle \\ &= \langle \sigma^{i+1} \dots \sigma^{j-1} \sigma^R \rangle \langle \sigma^1 \dots \sigma^{i-1} \sigma^{j+1} \dots \sigma^n \rangle \\ & \quad - \langle \sigma^{i+1} \dots \sigma^{j-1} \rangle \langle \sigma^1 \dots \sigma^{i-1} \sigma^R \sigma^{j+1} \dots \sigma^n \rangle \end{aligned} \quad (3.1)$$

この式は exact である (Appendix 1 参照)。

記号 $\langle \rangle$ は (2.3) 式で定義されている。Nagaoka は電子スピンの decoupling (3.1) 式に対応して不純物スピンの T 積を同じように decouple した。即ち

$$\begin{aligned} & \langle T S^{i+1} \dots S^{j-1} S^k \rangle \langle T S^1 \dots S^{i-1} S^{j+1} \dots S^n \rangle \\ & \quad + \langle T S^{i+1} \dots S^{j-1} \rangle \langle T S^1 \dots S^{i-1} S^k S^{j+1} \dots S^n \rangle \end{aligned} \quad (3.2)$$

福島謙二

(3.2)の decoupling を exact に満すダイアグラムの集合は次の条件を満さなければならない。

1) $S^{i+1} \dots S^{j-1}$ をのりこえて縮約された二つのスピンを S^i, S^j とし、その縮約を S^K とする。

この時内部のスピンの $(S^{i+1}, \dots, S^{j-1})$ は外部のスピンの $(S^{i+1}, \dots, S^{j-1})$ 以外のスピンのと縮約しない。即ちスピンプロパゲータはクロスしない。

2) S^K が外部のスピンのと T 積を作るときには、内部のスピンの T 積は exact に C-number になっていなければならない。

3) S^K が内部のスピンのと T 積を作るときには、 $TS^{i+1} \dots S^{j-1} S^K$ は exact に C-number にならなければならない。

§ 4.

前節の条件を満す伝導電子の self-energy part $\Sigma(\omega_n)$ の部分和を求めよう。一般に

$$\Sigma(\omega_n) = \Sigma^0(\omega_n) + (\sigma \cdot S) \Sigma^\sigma(\omega_n) \quad (4.1)$$

Σ^0 は不純物スピンを含まない部分である。一電子グリーン関数 $G_{pp'}(\omega_n)$ のかわりに、不純物スピンについて統計平均をとらない $\hat{G}_{pp'}(\omega_n)$ を考えよう。 $\hat{G}_{pp'}(\omega_n)$ は次のようにかける。

$$G_{pp'}(\omega_n) = \delta_{pp'} G_p^{(0)}(\omega_n) + G_p^{(0)}(\omega_n) G_{p'}^{(0)}(\omega_n) \times \\ \times \frac{1}{N} : \frac{\Sigma^0 + \Sigma^\sigma(\sigma \cdot S)}{1 - F(\Sigma^0 + \Sigma^\sigma(\sigma \cdot S))} : \quad (4.2)$$

ここで

$$F(\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_p G_p^{(0)}(\omega_n) \quad (4.3)$$

Σ^σ は前節の第 2 の条件を満す Self-energy part であって、

$$(\sigma \cdot S) \Sigma^0(\omega_n) = \text{---} = \chi + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---}$$

である。太線 --- は第2の条件によって、 \hat{G} のスピンの依存しない部分である。即ち

$$\begin{aligned} \Sigma^0(\omega_n) &= -J [1 + (-J)F\langle\hat{G}\rangle + (-J)^2F\langle\hat{G}\rangle \cdot F\langle\hat{G}\rangle + \dots] \\ &= -J \frac{1}{1+JF\langle\hat{G}\rangle} \end{aligned} \quad (4.4)$$

ここで

$$\hat{G}(\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{pp'} \hat{G}_{pp'}(\omega_n) \quad (4.5)$$

Σ^0 は第3の条件を満たすダイアラムの集合であって

$$\Sigma^0(\omega_n) = \text{---} + \text{---} + \text{---}$$

である。ここで二重線 = は \hat{G} のスピンの依存する部分である。即ち

$$\begin{aligned} \Sigma^0(\omega_n) &= \Sigma^\sigma (1 - F\langle\hat{G}\rangle \Sigma^\sigma + F\langle\hat{G}\rangle \Sigma^\sigma F\langle\hat{G}\rangle \Sigma^\sigma \dots) \times \\ &\quad \times F\langle\hat{G}(\sigma S)\rangle \Sigma^\sigma \\ &= -\Sigma^\sigma \frac{1}{1+F\langle\hat{G}\rangle \Sigma^\sigma} F\langle\hat{G}(\sigma S)\rangle \Sigma^\sigma \end{aligned}$$

上式で Σ^σ の F はその右側にあるすべての関数にオペレートするので最後の式は形式的である。これをとくと、

$$\frac{\Sigma^0}{\Sigma^\sigma} = - (F\langle\hat{G}\rangle \Sigma^0 + F\langle\hat{G}(\sigma S)\rangle \Sigma^\sigma) \quad (4.6)$$

になる。(4.2)式から、記号 $::$ に注意して

$$\langle\hat{G}\rangle = \frac{F(1-F\Sigma^0)}{(1-F\Sigma^0)^2 - \frac{1}{4}S(S+1)(F\Sigma^0)^2} \quad (4.7)$$

$$\langle \hat{G}(\sigma S) \rangle = \frac{S(S+1)}{4} \frac{F^2 \Sigma^0}{(1-F\Sigma^0)^2 - \frac{1}{4}S(S+1)(F\Sigma^0)^2}$$

が得られる。(4.7)式を(4.4), (4.6)式に代入して,

$$\Sigma^0 = -J \left[1 + JF \frac{F(1-F\Sigma^0)}{(1-F\Sigma^0)^2 - \frac{1}{4}S(S+1)(F\Sigma^0)^2} \right]^{-1} \quad (4.8)$$

$$\Sigma^0 = -\Sigma^0 F \frac{1-F\Sigma^0}{(1-F\Sigma^0)^2 - \frac{1}{4}S(S+1)(F\Sigma^0)^2} \quad (4.9)$$

(4.8), (4.9)式は self-energy part Σ^0 , Σ^0 に対する連立積分方程式である。次に Hamann 流の近似解を求める。 $F(\varphi(\omega))$ を $\varphi(\omega)$ の実関数としよう。

$$\varphi(\omega) = \int_{-D}^D \frac{f - \frac{1}{2}}{\omega - x} dx \quad (4.10)$$

このとき近似的に

$$\int_{-D}^D \frac{f - \frac{1}{2}}{\omega - x} \operatorname{Re} F(\varphi(x)) dx \doteq \int_0^{\varphi(\omega)} F(\varphi) d\varphi \quad (4.11)$$

が成り立つ。誤差は $(\ln \frac{D}{T})^{-3}$ の程度である。この近似の範囲内では Σ^0 を無視することが出来る。

$$Z(\omega) = -\frac{J}{\Sigma^0} \quad (4.12)$$

とおくと, (4.8)式は(4.11)式を使って

$$Z(\omega) = 1 + \gamma \int_0^{\varphi(\omega)} d\varphi \frac{Z^2}{Z^2 + S(S+1) \left(\frac{\pi}{2}\gamma\right)^2} \quad (4.13)$$

となる。

ここで $\gamma = J\rho$

ρ は状態密度である。

これをとくと、

$$Z(\omega) = \frac{1}{2} \left(X + \sqrt{X^2 + S(S+1)\pi^2 r^2} \right) \quad (4.14)$$

こゝで

$$X(\omega) = 1 + \gamma \gamma(\omega) - S(S+1) \left(\frac{\pi}{2} r \right)^2 \quad (4.15)$$

とした。Hamann に従って関数 $t(\omega)$, $\varphi(\omega)$ を導入する。即ち

$$G_{pp'}(\omega) = \delta_{pp'} G_p^{(0)}(\omega) + G_p^{(0)} G_{p'}^{(0)} t(\omega)$$

$$\varphi(\omega) = 1 + 2NF t(\omega) \quad (4.16)$$

(4.7) 式と比較すると、

$$\begin{aligned} 1 + NF t &= \frac{1 + \varphi}{2} = \frac{1 - F \Sigma^0}{(1 - F \Sigma^0)^2 - \frac{1}{4} S(S+1) (F \Sigma^0)^2} \\ &\doteq \frac{Z^2}{Z^2 + S(S+1) \left(\frac{\pi}{2} r \right)^2} \end{aligned} \quad (4.17)$$

(4.17), (4.14) 式から、

$$\varphi(\omega) = \frac{Z^2 - S(S+1) \left(\frac{\pi}{2} r \right)^2}{Z^2 + S(S+1) \left(\frac{\pi}{2} r \right)^2} = \frac{X}{\sqrt{X^2 + S(S+1)\pi^2 r^2}} \quad (4.18)$$

これは Nagaoka 方程式の Hamann の解と一致している。

福島謙二

Appendix 1.

縮約を全部とったあとで、積 $\sigma^{i+1} \dots \sigma^{j-1}$ は C-number になるか、一つのスピンの σ になるかのいずれかである。はじめに一つのスピンの σ^l なる場合を考えよう。k を固定して

$$\begin{aligned} i \epsilon_{ijk} \sigma^i \sigma^l \sigma^j &= -\frac{1}{4} \delta_{lk} = \langle \sigma^l \sigma^k \rangle \\ &= \langle \sigma^{i+1} \dots \sigma^{j-1} \sigma^k \rangle \end{aligned} \quad (A1)$$

が成り立つ。次に C-number になる場合は、

$$i \epsilon_{ijk} \sigma^i \sigma^j = -\sigma^k = -\langle \sigma^{i+1} \dots \sigma^{j-1} \rangle \sigma^k \quad (A2)$$

(A1)か (A2) かのいずれかであるから (3.1) 式になる。

- 1) S. Doniach, phys. Rev. 144 (1966), 382
- 2) A. A. Abrikosov, physics 2 (1965), 5
- 3) 福島謙二, 物性研究 Vol. 11 No.1 (1967) P14
- 4) Y. Naguoka, Phys. Rev. 138 (1965), A1112
- 5) D. R. Hamann, phys. Rev. 158 (1967), 570
- 6) P. E. Bloembergen and D. R. Hamann, phys. Rev. 164 (1967) 856