*s−d Bound State からの励起 I

東大理　川村　清

（8月11日受理）

s−d 相互作用については，これまで多くの理論が出された。初期の多彩な formalism の提案の時期がすぎると，与えられた方程式をいかに数学的に厳密に解くかということが興味をひいているように思われる。そうして得られた T−matrix の "unphysical pole" が取り除かれ，t−matrix がいわゆる unitary limit で physical な振舞をもつことから，何かさいさきのよい感じを与えているように思われる。しかし，それでは Nagaoka−Hamann 方程式[1),2)]なり Suhl 方程式[3)]なりは，どの程度信頼出来るのであろうか。

数学的にいえば，それらの方程式の解は，いわゆる "most singular term" については完全であり，"next singular term" は入っておらずそれより "higher order term" が一部入っている。したがって "higher order term" がものをいう領域，すなわち温度 T 及び入射粒子のエネルギー $|\varepsilon|$ が近藤温度 T_K と同じかあるいはそれより小さくなると，当然無視している next singular term が効いて来るおそれがある。物理的に考える為に Yosida[4)]の提案した bound state にある target に電子をあてる process を考えて見よう。電子がぶつかると target は triplet state に上げられるから，これは丁度 electron−phonon 相互作用によって固体が励起状態に上るのに似ている。後者では，よく知られているように T→0 で抵抗はなくなる。われわれの問題でも target を励起するだけのエネルギーをもち合わせない電子を散乱する real process はないはずである。したがって，Fermi 面上の電子に対して大きな cross section を与える Nagaoka−Hamann 方程式は，都合の悪い解を与えている。

上の2つの事柄，すなわち摂動展開における next singular term の効果と target state が singlet state と triplet state に分離していることとは密接に関係している。すでに知られているように[5)] next singular term は $[H, S] \neq 0$ という事実に由来している。Nagaoka−Hamann

方程式では，この効果がおちているから[6] next singular term は入って来ない。一方，t−matrix は次のように書ける。[7]

$$t(i\varepsilon) = t^{(2)}(i\varepsilon) + t^{(3)}(i\varepsilon) + \cdots \tag{1}$$

ここでは特に $t^{(2)}(i\varepsilon)$ を考える。

$$t^{(2)}(i\varepsilon) = -(J/N)^2 T \Sigma_{\varepsilon'} F(i\varepsilon')\mathcal{S}(\varepsilon,\varepsilon'), \tag{2a}$$

$$F(z) = \Sigma_p (z-\varepsilon_p)^{-1}, \tag{2b}$$

$$\mathcal{S}(\varepsilon,\varepsilon') = \langle\langle (S\cdot\sigma)_{\alpha\beta}(\varepsilon-\varepsilon'),\ (S\cdot\sigma)_{\beta\alpha}(\varepsilon'-\varepsilon)\rangle\rangle. \tag{2c}$$

Spin Green 関数に対する Lehmann 展開から

$$\mathcal{S}(\varepsilon,\varepsilon') = Z^{-1}\Sigma_{nm} \langle n|(S\cdot\sigma)_{\alpha\beta}|m\rangle\langle m|(S\cdot\sigma)_{\beta\alpha}|n\rangle \times \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{i\varepsilon - i\varepsilon' - (E_m - E_n)} \tag{3}$$

上でのべた $[H, S] = 0$ ということは $E_m = E_n$ ということで，その結果は

$$\mathcal{S}(\varepsilon,\varepsilon') = -S(S+1)\,\delta_{\varepsilon,\varepsilon'}/T \tag{4}$$

これを (2a) に代入するとよく知られた first Born term が出る。Next singular term を考えることは形式的には (3) で $E_m \neq E_n$ とすることである。あきらかに $|E_n - E_m| \gtrsim T$ で (4) は (3) の近似式にはならない。(Next singular term の効果が効いて来るのは T あるいは $|\varepsilon|$ が T_K の付近から下だから[5] $|E_n - E_m| \sim T_K$ と思ってよい。) そこで $[H, S] \neq 0$ ということを一般的に取り入れることはやめて，$T = 0$ でしかも ground state は singlet state にある場合を考えよう。$\langle t|s|0\rangle \neq 0$ なる state $|t\rangle$ は triplet state で

$$|0\rangle = \psi_\downarrow \alpha - \psi_\uparrow \beta$$

と書くと，

$$|t\rangle = \psi_{\downarrow}\alpha + \psi_{\uparrow}\beta, \quad \psi_{\uparrow}\alpha, \quad \psi_{\downarrow}\beta$$

ただし，$|t\rangle$は一般に Hamiltonian の固有状態ではない。そこで (3) は次のようになる。

$$\mathcal{S}(\varepsilon, \varepsilon') = \Sigma_{tm} |\langle t|m\rangle|^2 \langle 0|(S\cdot\sigma)_{\alpha\beta}|t\rangle\langle t|(S\cdot\sigma)_{\beta\alpha}|0\rangle$$

$$\times \left[\frac{1}{i\varepsilon - i\varepsilon' - E_m} - \frac{1}{i\varepsilon - i\varepsilon' + E_m}\right] \tag{4}$$

（ t についての和は triplet の 3 つの state についての和を意味し，それらは縮退していることを使った）。(4) はあきらかに phonon の Green 関数と同じである。$E_m \neq 0$ ということは spin が conserve しないために残ったと考えてよいから，next singular term の入っていない方程式は，target が bound state にあることを記述出来ないことが判る。

〔H，S〕$\neq 0$ として正直に摂動計算を行なうことはやっかいである。ところで，他方，Ishii and Yosida[8] は static susceptibility が $T=0$ で $\chi \propto T_K^{-1}$ を示した。χ は 2 体の spin Green 関数で書けるから，彼らの結果を使うと (4) はもう少し先まで議論出来る。行列要素を explicit に計算して，

$$\mathcal{S}(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{3}{4}\int_0^{\infty} A(\alpha)\left[\frac{1}{i\varepsilon - i\varepsilon' - \alpha} - \frac{1}{i\varepsilon - i\varepsilon' + \alpha}\right] d\alpha. \tag{5}$$

$\varepsilon = \varepsilon'$ で $\mathcal{S}(\varepsilon, \varepsilon')$ は χ に比例するから，Ishii−Yosida の結果から $A(\alpha)/\alpha$ で 0 から ∞ までの積分領域で積分可能でなくてはならない。すなわち $A(\alpha)$ は $\alpha \to 0$ で zero になる。(5) を (2a) に代入し，$i\varepsilon \to \varepsilon + i0$ とし，

$$\mathcal{I}_m\, t^{(2)}(\varepsilon + i0) \propto \int_0^{\infty} d\alpha\, A(\alpha)\left[f(\varepsilon+\alpha) - f(\varepsilon-\alpha) + 1\right] \tag{6}$$

を得る。$A(\alpha)$ は，$\alpha \sim T_K$ で plak をもつことはこれまでの議論から明きらかである。$\alpha \ll T_K$ で $A(\alpha)$ は α^n に比例するとしよう。そうすると $|\varepsilon| \ll T_K$ なる ε に対し，(6) は

$$\mathscr{I}_m\, t^{(2)}(\varepsilon+i0) \propto |\varepsilon|^{n+1} \qquad (7)$$

を与える。

以上の議論より $T_K \gg |\varepsilon|$ では，$t^{(2)}(i\varepsilon)$ は first Born term とは全く異なるふるまいをすることが判った。それでは $t^{(3)}(i\varepsilon)$ 以下はどうなるだろうか。それを考えるためには，もう少し formalism を整備する必要があるので別稿にゆずることにする。

文　献

1) Y. Nagaoka, Phys. Rev. 138 (1965), A1112; Prog. Theor. Phys. 37 (1967), 13.
2) D. R. Hamann, Phys. Rev. 158 (1967), 856.
3) H. Suhl, Phys. Rev. 141 (1966), 483.
4) K. Yosida, Phys. Rev. 147, (1966), 223.
5) 川村 清, 物性研究, 11 (1968), 24.
6) 川村 清, 物性研究, 12 (1969), 1.
7) 川村 清, 物性研究, 10 (1968), 282.
8) H. Ishii and K. Yosida, Prog. Theor. Phys. 38 (1967), 61.

s−d Bound State からの励起 II

東大理　川 村　清

（8月11日受理）

§1 序 論

s−d 相互作用で couple している一個のスピンと，s−電子からなる系を考える。その系は Yosida[1] の提案した bound state にあるとする。（絶対