s−d Bound Stateからの励起 Ⅲ

— Truncate Hamiltonianを使っての デモンストレーション —

東大理　川村　清

（1月16日受理）

§1. 序　論

〔以下で述べることは，Prog. Theor. Phys. に投稿し，若干のプレプリントは，日頃御指導いただいている方々にはお送りした。したがって，その様な方々は，この論文はお読みいただかなくてもよい。〕

Yosidaが s−d bound stateについてのモデルを発表してから[1]その ground stateについて，多くの研究がなされて来たが，その bound state からの励起については，あまり仕事がない様である。その中にあって，筆者は Green関数の計算を若干試みた。[2] その考察によると，フェルミ面近傍の電子は singlet stateにある targetに衝突しても targetを励起するだけのエネルギーを持ち合わせず，従って，散乱されないことが判った。このことは，Suhl達[3] 及び Hamann[4] の抵抗の計算結果と Yosida model とを短絡してはならないことを示唆する。一方，外から入って来た電子が bound electron とおきかわる processがあって，（それは普通の"散乱過程"では扱えない）それが低温での大きな抵抗[5] を説明するのではないかという希望もある。そこで，この論文では議論を簡単にするために Truncate Hamiltonian（後出）を使って Green関数を求め，上に示唆した process が実際存在することを示す。

Truncate Hamiltonian とは[1]

$$\begin{cases} H = H_0 + H_1 & (1\cdot1) \\ H_0 = \Sigma_p \epsilon_p \, a_p^+ a_p & (1\cdot2) \\ H_1 = (-J/N)\, \Sigma_{p,p'>p_0} a_p^+ (S\cdot\sigma)\, a_{p'} & (1\cdot3) \end{cases}$$

で記述され，Fermi面より外側の電子のみが散乱されるという model である。勿論この Hamiltonian は s－d Hamiltonian とは異なるが，bound state が出ること，それは摂動計算では出ないという点において，両者は共通の性質をもっている。

§2. Graph法

一体の Green 関数は次式で定義される。[6)]

$$G_{pp'}(t,t') = -i\langle\Psi_0|T(\tilde{a}_p(t)\,\tilde{a}^+_{p'}(t'))|\Psi_0\rangle \qquad (2\cdot1)$$

ここで $|\Psi_0\rangle$ は H の ground state で $\tilde{A}(t)$ は Heisenberg 表示をあらわす。たとえば $t > t'$ の時，(2·1) で定義される関数は次のように書ける。（文献6のp66）

$$G_{pp'}(t,t') = -i\,\mathrm{Lim}\,\langle\Phi_0|U(T-t)\,a_p\,U(t-t')\,a^+_{p'}\,U(t'-T')$$
$$|\Phi_0\rangle \times \{\langle\Phi_0|U(T-T')|\Phi_0\rangle\}^{-1} \qquad (2\cdot2)$$

ここで Lim は，T と T′ の虚部を $-\infty$ にもって行くことを指示する。$|\Phi_0\rangle$ は ground state から断熱的に H′を小さくして得られる状態である。今の場合 ground state そのままをとって来ればよい。

$$U(t) = \exp(-iHt) \qquad (2\cdot3)$$

を H_1 について摂動展開すると，

$$G_{pp'}(t,t') = -i\,\mathrm{Lim}\,\exp\{iE_s(T-T')\}$$
$$\times\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(iJ/N)^n}{n!}\int_{T'}^{T}\cdots\int_{T'}^{T}dt_1\,dt_2\cdots\cdots dt_n$$
$$\times\langle\Phi_0|\exp(-iH_0T)\,T[a_p(t)\,a^+_{p'}(t')\,\Sigma(a^+a)(t_1)\cdots\Sigma(a^+a)(t_n)]$$
$$\times T[(S\cdot\sigma)_{\alpha_1\beta_1}(t_1)\cdots(S\cdot\sigma)_{\alpha_n\beta_n}(t_n)]\exp(iH_0T')|\Phi_0\rangle$$
$$(2\cdot4)$$

（この式で二つの T−product は互いに相関があることに注意）電子の operator の T−product は Wick の定理によって "contraction" と normal product に分解出来る。（文献6の p38）

その際，他の問題と本質的に違うところがある。normal product は "anihilation operator" を右に "creation operator" を左にもって来た演算子の積である。anihilation operator とは，$p > p_0$ なら a_p で $p < p_0$ なら a_p^+ である。普通の問題では，$|\Phi_0\rangle$ が Fermi 真空故，normal product を operate すると消える。今の場合，Fermi 面の外側に一個電子があるため，normal product を operate しても消えない。ただし，Fermi 面の外側にあるのはただ一個だから，$N(a^+a^+aa)$ のように4つの operator の normal product は考えなくてよい。結局，(2・4) の T−product は，contraction のみの積の和か，一個だけ normal product の入った項の和になる。

(2・4) の最初の T 一積を contraction のみで書いた項は graph で書ける。水平軸を時間軸に選び T と T′ の間に n 個の点を打つ。t_j という点に $(S\cdot\sigma)_{\alpha\beta}(t_j)$ が対応し，β という電子線が入り α という電子線が出て行く。全ての電子線は t′ で表れ t で消えるものを除いて閉じなくてはならない。t_{j+1} から t_j に走る電子線は $g_p(t_j - t_{j+1})$ をあらわす。ここで

$$g_p(t) = (-i)\exp(-i\varepsilon_p t)\{\theta(t)(1-f(\varepsilon_p)) - \theta(-t)f(\varepsilon_p)\} \tag{2・5}$$

そのような一つのグラフは，次の様な寄与を与える。

$$\begin{aligned} G_I^n(t,t') \equiv\ & (-1)^{\ell}\,\mathrm{Lim}\,(-J/N)^n \exp\{iE_s(T'-T)\} \\ & \times \int\cdots\int_{T'}^{T} dt_1\cdots dt_n\ (\Pi g) \\ & \times \langle\Psi_0|\exp(-iH_0T)\Pi(S\cdot\sigma)(t_j)\exp(iH_0T')|\Psi_0\rangle \end{aligned} \tag{2・6}$$

ℓ は closed loop の数である。

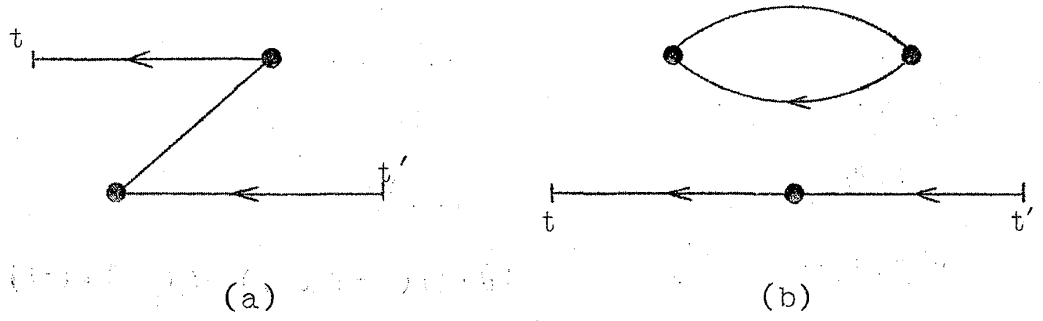
n 次の項の残りの寄与は一つの contraction を（あるいは $(-i)^{-1}g$ を）normal product でおきかえて得られる。そのような寄与を表わすために，電子線のうちの一本を切り，その電子線が t_{k+1} から t_k に走っていたなら，

その切断は，$(-i)\,N\,(a(t_k)\,a^{+}(t_{k+1}))$ をあらわす。そのような graphは

$$G_{\mathrm{II}}^{n}(t,t') \equiv (-i)(-1)^{\ell}\,\mathrm{Lim}\,(-J/N)^{n}\exp\{iE_s(T'-T)\}$$
$$\times \int\cdots\int_{T'}^{T} dt_1\cdots dt_n\,(\Pi\, g)$$
$$\times \langle\Psi_0|\exp(-iH_0T)\,\Pi\,(S\cdot\sigma)(t_j)\,N(a(t_{k+1})\,a^{+}(t_k))$$
$$\exp(iH_0T')\,|\Psi_0\rangle \qquad (2\cdot7)$$

ところで，散乱される電子は全て Fermi 面の外側にある電子ばかりであることに注意すると，(2·5) から，$g_p(t)$ は $t>0$ でのみ残る。このことはグラフ中の電子線のうち，逆むきの線は存在しないことを示す。故に，1図(a)のような graph はない。また閉じた loop は少くとも一本逆向きの線があるからこれもない。

すなわち1図(b)のような graph もない。



第 1 図

例として，第2図(a)のグラフは，次の寄与を与える。

$$(a) = \mathrm{Lim}\,(-J/N)^{3}\int_{T'}^{t} dt_1\int_{T'}^{t_1} dt_2\int_{T'}^{t_2} dt_3\,\exp\{iE_s(T'-T)\}$$
$$\times\, g_{p\alpha}(t-t_1)\,g_{p_1\beta}(t_1-t_2)\,g_{p2\gamma}(t_2-t_3)\,g_{p'\delta}(t_3-t')$$
$$\times \langle\Psi_0|\exp(-iH_0T)\,(S\cdot\sigma)_{\alpha\beta}(t_1)\,(S\cdot\sigma)_{\beta\gamma}(t_2)\,(S\cdot\sigma)_{\gamma\delta}(t_3)$$
$$\exp(iH_0T')\,|\Psi_0\rangle. \qquad (2\cdot8)$$

もし，t_2 から t_1 へ行く線が切断されると，第２図(b)のグラフのようになる。これからの寄与は，次のようになる。

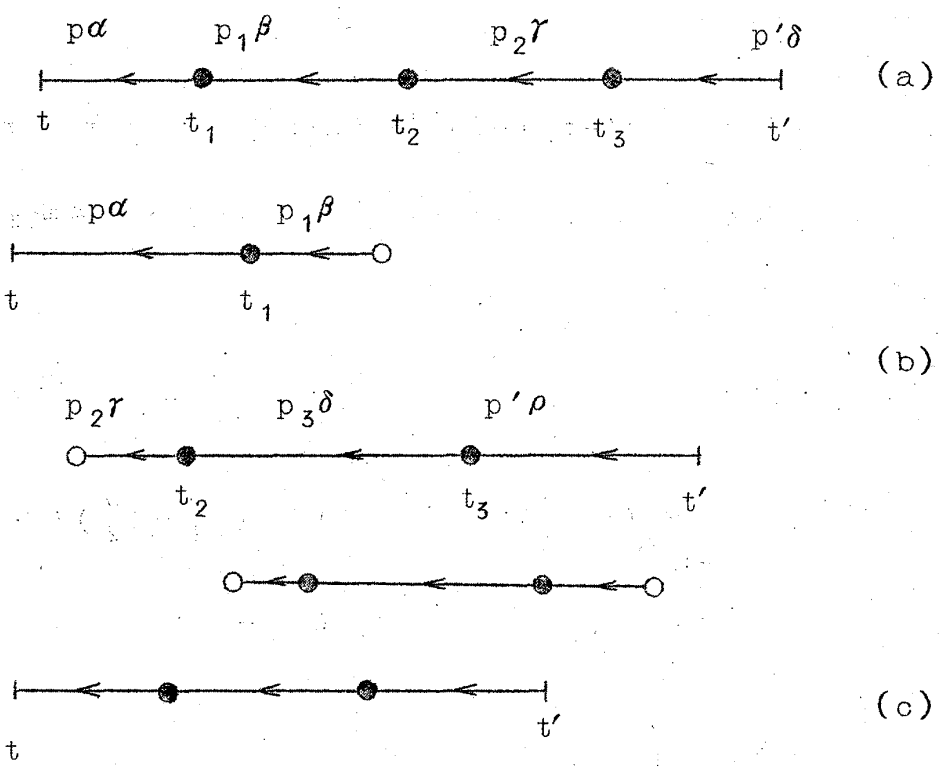
$$(b) = (-i)(-J/N)^3 \mathrm{Lim} \int_{T'}^{t} dt_2 \int_{T'}^{t_2} dt_1 \int_{T'}^{t_1} dt_3 \exp\{iE_s(T'-T)\}$$

$$\times g_{p\alpha}(t-t_1)\, g_{p_3\delta}(t_2-t_3)\, g_{p'p}(t_3-t')$$

$$\times \langle \Psi_0 | \exp(-iH_0T)(S\cdot\sigma)_{\alpha\beta}(t_1)(S\cdot\sigma)_{\gamma\delta}(t_2)(S\cdot\sigma)_{\delta\rho}(t_3)$$

$$N(a_{p_1\beta}(t_1)\, a^{+}_{p_2\gamma}(t_2)) \exp(iH_0T')|\Psi_0\rangle . \qquad (2\cdot9)$$

第２図(c)は，第１図(b)の closed loop の一本を切って得られる。

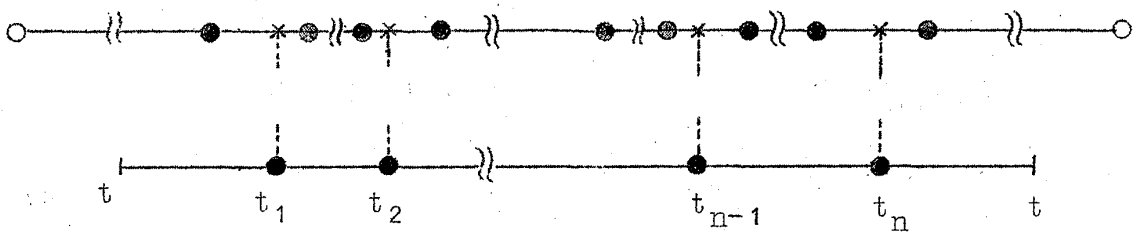


第２図

今後，t' から入って t でおわる電子線が切断されない graph を "normal graph" また２図 b のように，それが切れている graph を "anomalous graph" と呼ぶ。

§ 3. normal graph の寄与

normal graph は一般に第3図のように t′ から t への"幹線"と，二つの円のついている"側線"からなる。



第 3 図

人為的に，"幹線"上の各点から側線に垂線をおろして，その足に×印をつける。g の定義から

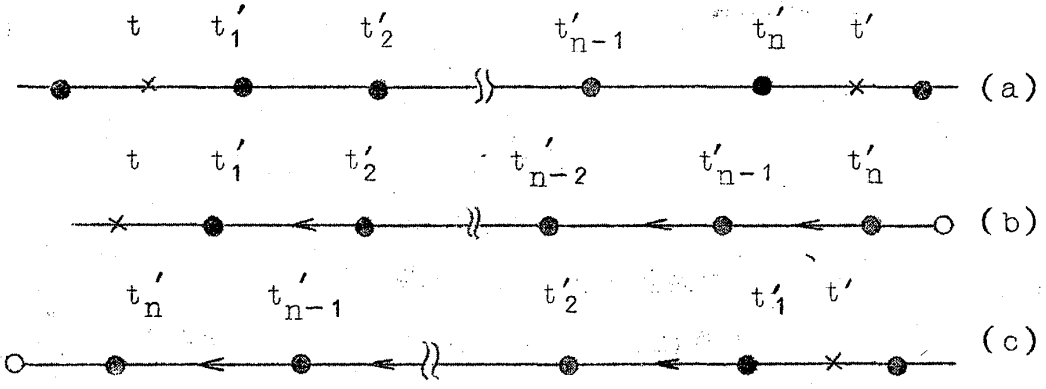
$$g(\tau'-\tau'') = g(\tau'-\tau)(-i)^{-1} g(\tau-\tau'') \qquad \tau' > \tau > \tau''$$

故，上の×印は実線を二分し，因子 $(-i)^{-1}$ をかけることを表わす。側線上となりあう2つの×印の間の部分の寄与は，（第4図 a）

$$I(tp;\, t'p') = \sum_{n=0}^{\infty} (-J/N)^n \int_{t'}^{t} dt_1' \int_{t'}^{t_1'} dt_2' \cdots \int_{t'}^{t_{n-1}'} dt_n'$$

$$\times \sum_{p_1 \cdots p_{n-1}} g_p(t-t_1')(S\cdot\sigma)(t_1') g_{p_1}(t_1'-t_2')(S\cdot\sigma)(t_2')$$

$$\cdots\cdots (S\cdot\sigma)(t_n') g_{p'}(t_n'-t') \qquad (3\cdot1)$$



第 4 図

また，第4図(b)のように×一印と右側の丸との間の寄与は

$$J(tp;T')=\sum_{n=0}^{\infty}(-J/N)^n\int_{T'}^{t'}dt_1'\int_{T'}^{t_1'}dt_2'\cdots\cdots\int_{T'}^{t_{n-1}'}dt_n'$$

$$\times\sum_{p_1\cdots p_n}g_p(t-t_1')(S\cdot\sigma)(t_1')g_{p_1}(t_1'-t_2')\cdots\cdots$$

$$(S\cdot\sigma)a_{p_n}(t_n')\exp(iH_0T') \qquad (3\cdot2)$$

また，第4図(c)のように，左側の丸と×一印との間の寄与は

$$K(T;t'p')=\sum_{n=0}^{\infty}(-J/N)^n\int_{t'}^{T}dt_n'\int_{t_n'}^{T}dt_{n-1}'\cdots\int_{t_2'}^{T}dt_1'$$

$$\times\exp(-iH_0T)\sum_{p_1\cdots p_n}a_{p_n}^{+}(S\cdot\sigma)(t_n')g_{p_{n-1}}(t_n'-t_{n-1}')$$

$$\cdots\cdots(S\cdot\sigma)(t_1')g_{p'}(t_1'-t') \qquad (3\cdot3)$$

これらの関数 I，J，K を使って第3図は次のように書ける。

$$G_{pp'}(t,t';n)=(-i)(-J/N)^n\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t'}^{t_{n-1}}dt_n$$

$$\times\langle\Psi_0|K(T;t_1p_1')(-i)^{-1}(S\cdot\sigma)(t_1)I(t_1p_1';t_2p_2')(-i)^{-1}$$

$$(S\cdot\sigma)(t_2)\cdots(-i)^{-1}(S\cdot\sigma)(t_n)J(t_np_n';T')|\Psi_0\rangle$$

$$\times g_p(t-t_1)g_{p_1}(t_1-t_2)\cdots\cdots g_{p_{n-1}}(t_{n-1}-t_n)g_{p'}(t_n-t')$$

$$\times\exp\{iE_s(T-T')\}, \qquad (3\cdot4)$$

J は，Fermi 面の外に一個だけ電子のある状態に作用することに注意すると

$$J(tp;T')=\sum_{n=0}^{\infty}(-i)^n\int_{T'}^{t}dt_1\int_{T'}^{t_1}dt_2\cdots\int_{T'}^{t_{n-1}}dt_n$$

$$\times a_p(t)H_1(t_1)H_1(t_2)\cdots H_1(t_n)\exp(iH_0T')$$

$$= a_p(t)\exp(iH_0 t)\exp\{-iH(t-T')\} \tag{3·5}$$

とかける。同じように

$$K(T;t'p') = \exp\{-iH(T-t')\}\exp(-iH_0 t')\,a^+_{p'}(t') \tag{3·6}$$

$$I(tp;t'p') = (-i)\,J(tp;t'p')\,a^+_{p'}\exp(-iH_0 t')$$

$$= (-i)\,a_p(t)\exp(iH_0 t)\exp\{-iH(t-t')\}\,a^+_{p'}\exp(-iH_0 t') \tag{3·7}$$

(3·5) から (3·7) を (3·4) に代入すると,

$$G^{(N)}_{pp'}(t,t') = g_p(t-t')\,\delta_{pp'}$$

$$+\sum_{n=1}^{\infty}(-J/N)^n\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t'}^{t_{n-1}}dt_n$$

$$\times\, g_p(t-t_1)\langle\Psi_0|(\tilde{S}\cdot\sigma)(t_1)(\tilde{S}\cdot\sigma)(t_2)\cdots\cdots(\tilde{S}\cdot\sigma)(t_n)|\Psi_0\rangle$$

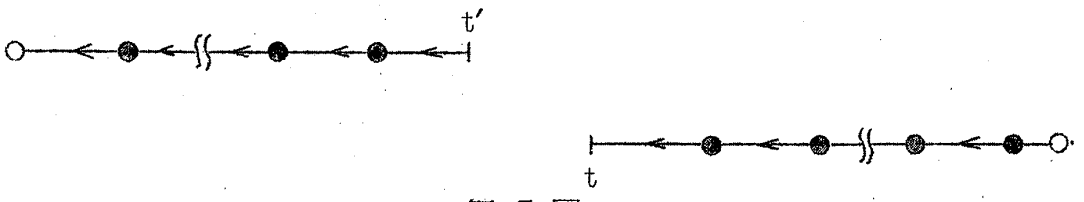
$$\times\,\{g_{p_1}(t_1-t_2)\cdots\cdots g_{p_{n-1}}(t_{n-1}-t_n)\}\,g_{p'}(t_n-t') \tag{3·8}$$

§1で定義したように operator の上の波線は Heisenberg 表示をあらわす。(3·8) の表式は, t-matrix の spin Green 関数による展開式に他ならない。[7)]

§4. Anomalous graph の寄与

(i) t < t′ の場合

電子線は時間軸の"順方向"にしか走らないということから, normal graph からの寄与は t > t′ の時のみ残る。t < t′ のときは, 第5図の anomalous graph のみが残る。このグラフの寄与は



第5図

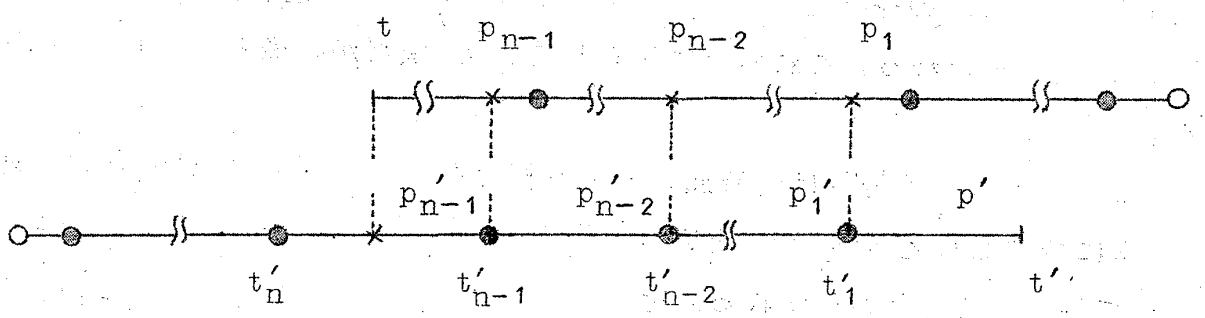
もちろん前出の関数KおよびJを使って計算出来るが，今の場合はより直接的に（2・1）より，

$$G_{p\alpha\, p'\alpha'}(t<t') = i\ \exp\{i(E_S-E_F)(t-t')\}\langle\Psi_0|a^{+}_{p'\alpha}\, a_{p\alpha}|\Psi_0\rangle$$
$$= \frac{i}{2}\exp\{i(E_S-E_F)(t-t')\}\,\Gamma^{*}_{p'}\Gamma_p\,\delta_{\alpha\alpha'} \qquad (4\cdot1)$$

と計算出来る。Truncate Hamiltonian の場合，上の項の存在が導出される formulation のみが正しい。逆にいえば，われわれの一見かわった摂動計算法は，第5図の graph の存在を可能にすることから，その正当性が保障される。

(ii) $t>t'$ の場合

この場合，第6図のような graph のみが残る。この graph からの寄与は



第 6 図

$$\langle\Psi_0|K(T;tp'_{n-1})(-i)^{-1}I(tp;t_{n-1}p_{n-1})(-i)^{-1}$$
$$\times(S\cdot\sigma)(t_{n-1})I(t_{n-1}p_{n-1};t_{n-2}p_{n-2})\cdots(-i)(S\cdot\sigma)(t_1)$$
$$\times J(t_1p_1;T')|\Psi_0\rangle$$
$$\times g_{p'_{n-1}}(t-t'_{n-1})\cdots g_{p'}(t'_1-t_1) \qquad (4\cdot2)$$

ここに出て来た J，I，K として，（3・5），（3・6）及び（3・7）を使うと Green 関数の中に次のような項があることが判る。

$$G^{(A)}_{p\alpha p'\alpha'}(t>t') = i\sum_{n=0}^{\infty}(-J/N)^n\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t'}^{t_{n-1}}dt_n$$

$$\times \sum_{p_1 \cdots p_n} \langle \Psi_0 | \exp(iHt) a^+_{p_1 \alpha_1} a_{p\alpha} \exp(-iHt)$$

$$\times (\tilde{S}\cdot\sigma)_{\alpha_1\alpha_2}(t_1) \cdots (\tilde{S}\cdot\sigma)_{\alpha_n\alpha'}(t_n) | \Psi_0 \rangle$$

$$\times g_{p_1}(t-t_1) g_{p_2}(t_1-t_2) \cdots g_{p_n}(t_{n-1}-t_n) g_{p'}(t_n-t') \tag{4·3}$$

§5. 結論と討論

摂動計算を行なうにあたって，"unperturbed state" としては，ground state と直交しない state をえらばなくてはならない。そのことから，truncate Hamiltonian の場合，normal product が消えないことを考慮にいれた摂動計算を行なった。その結果，Green 関数は2つの部分からなり，(normal graph の寄与と anomalous graph の寄与) 前者は spin Green function で書かれる，これまでに知られていた[7]項だが，後者は新しい項である。

Normal graph の寄与は，普通の散乱過程である。(3·8) を見ると，時刻 t' で系につけくわえられた p' という電子が，t_n, t_{n-1}, …, t_1 と n 回散乱されて時刻 t でとりのぞかれる。その間 target は $\tilde{S}(t_n)$, $\tilde{S}(t_{n-1})$, …, $\tilde{S}(t_1)$ で記述されるような n 回の変動を受ける。

一方，実際には，他の process もある。まで target のまわりにある電子を取り除く。しかるのちに，外から電子を供給すると，それはただちに target につかまってしまうだろう。それが §4 の(i) で考察した process である。電子をとりのぞくまえに外から一個つけ加えると，前述のようにその電子は target に何回も散乱される。あとからとり除く電子がその散乱されている電子ではなくて，bound electron そのものであれば target のまわりに孔があくから，今まで散乱されていた電子がそこにおちこむ。これが §4 の(ii) で考察した process である。実際 (4·3) はそういう形をしている。

さて，普通の s−d Hamiltonian の場合は，何が予想されるだろうか。その場合，Yosida model[1] が正しいとすれば ground state と Fermi 真空とは直交するから，やはり normal product が消えないような state から

出発しなくてはならない。したがって，やはり Green 関数は "nomal term" と "anomalous term" の二つからなり，前者は普通の spin Green 関数で展開出来る項であり[11] 後者は，localized electron と外からの電子が交換する過程を与える。普通の散乱過程は，Nagaoka-Hamann[8] 方程式を与えるから，逆にいえば Yosida-model からの励起は，これまで諸賢が苦心して解いて来た Nagaoka-Hamann[9] 方程式，或いは Suhl 方程式[10] で記述出来ない部分を含んでいる。

文　献

1) K.Yosida, Phys. Rev. 147 (1966), 223.

2) 川村　清，物性研究

3) H.Suhl and D.Wong, Physics 3 (1967), 17.

4) D.R.Hamann, Phys. Rev. 158 (1967), 570.

5) M.D.Daybell and W.A.Steyert, Phys. Rev. Letters. 18 (1967), 398.

6) D.J.Thouless, "The Quantum Mechanics of Many-Body Systems" (A cademic Press, New York and London) p.66. (この本は松原による訳本があるが，この論文中の引用頁は，全て原著に依った。)

7) K.Kawamura, Prog. Theor. Phys. 39 (1968), 1375.

8) D.R.Hamann, Phys. Rev. 158 (1967), 570.

9) K.Kawamura, Prog. Theor. Phys. 42 (1969), 1058.

10) H.Suhl, Phys. Rev. 138 (1965), A515.