

Anderson model における摂動計算

電 試 近 藤 淳

(6月10日受理)

金属内不純物に対する Anderson model において、その d レベルがフェルミ面より上にある場合についての摂動計算を我々は行なった。¹⁾ それに対して 2, 3 の人達からその結果に対する疑問が出された。^{2) 3)} 我々も前と同じ計算をやや異なる方法で計算した結果、先に得たような項は現われないという結果をえた。

最も簡単な Anderson model において、電子グリーン函数を Zubarev の方法で計算する。このとき s-d mixing V を摂動として V について展開する。 U については V の各次において exact にとり入れる。我々は V^6 までの展開を行なった。その結果、 t マトリックスの実部に V^6 で対数項が現われた。その結果を用いて帯磁率を計算すると V^4 で T に比例する項がえられた。我々はこの項が、実験的にしばしば見出されている $\chi \propto 1/(T + T_K)$ を展開したときの T の一次の項に対応するのではないかと考えた。しかし帯磁率はもうすこし僅かの手間で計算出来ることが判った。それには自由エネルギーを計算すればよい。摂動による自由エネルギーのシフトは、摂動項の平均が求まればすぐに求まる。今の場合摂動項は s-d mixing であってその平均は

$$V \sum_{ks} \langle a_{ks}^* b_s + b_s^* a_{ks} \rangle$$

但し b_s は局在電子のオペレータ。この平均を求めるには $\langle\langle a_{ks} | b_s^* \rangle\rangle$ という Zubarev グリーン函数を知ればよい。ところが

$$\langle\langle a_{ks} | b_s^* \rangle\rangle = \frac{V}{\omega - \epsilon_{ks}} \langle\langle b_s | b_s^* \rangle\rangle$$

であるから、フリーエネルギーを V^n まで正しく求めるには $\langle\langle b_s | b_s^* \rangle\rangle$ を V^{n-2} まで正しく求めればよい。従って帯磁率を V^4 まで求めるには、 $\langle\langle b_s | b_s^* \rangle\rangle$ を V^2 まで求めればよい。我々は先に¹⁾ $\langle\langle b_s | b_s^* \rangle\rangle$ を V^4 ま

で求め、それから $\langle b_{\uparrow}^* b_{\uparrow} \rangle - \langle b_{\downarrow}^* b_{\downarrow} \rangle$ を計算して帯磁率を V^4 まで求めた。しかし上の方法によれば $\langle\langle b_s | b_s^* \rangle\rangle$ を V^2 まで求めれば、帯磁率が V^4 まで求まる。 $\langle\langle b_s | b_s^* \rangle\rangle$ を V^2 まで求めることは比較的容易であり、その結果には対数項のようなものは何ら含まれないことがすぐ判る。従ってそれから上の方法で帯磁率を計算しても V^4 には何ら特別の項は現われず、温度変化は通常の T^2 となる。この論法はもっと高次までのばすことが出来る。もし帯磁率に V^4 で特別の項が現われないなら $(\langle b_{\uparrow}^* b_{\uparrow} \rangle - \langle b_{\downarrow}^* b_{\downarrow} \rangle) / H$ が帯磁率であるから) $\langle\langle b_s | b_s^* \rangle\rangle$ の V^4 にも特別の項が現われてはならず、上の方法を用いるなら帯磁率の V^6 にも特別の項が現われてはならない。これをくり返せば V のすべての次数で特別の項があってはならないことになる。

このようにここで得られた結論は我々の先の結論とは異なる。上の推論はどう考えても間違っているようには思えない。また和田さんが前の論文²⁾で示されたように、我々と逆にはじめ V を正しくとりいれてから U について展開して、我々と同じ次数の項 ($V^6 U^3$) を較べるとそこには対数項は現われないということである。これらの点を考えると我々が先に得たような対数項は現われないと考えるのが正しいように思われる。

東大理の和田靖氏にはご注意を頂き、また上記論文を発表前に見せて頂いたことを感謝します。

- 1) 近藤 淳, 1970年春の分科会。(東北学院大学)
- 2) 和田 靖, 物性研究(この号)。
- 3) E. Muller-Hartmann, 私信。