Andersonモデルにおける Hartree-Fock 解の不安定性及び s − d モデルとの同等性について

東教大理　　沢田克郎　柴田文明

（７月５日受理）

一般的な処法にもとづいて Andersonモデルと s − d モデルとの関係が吟味される。即ち完全系を用いて状態ベクトルを展開すれば，両モデル間の対応はただちにつけられる。

更に Andersonモデルにおける Hartree − Fock 解のうちで magnetic な解は不安定であり，新しくここで得られた状態は symmetry un−broken であることが示される。

§ 1.　序

Andersonモデル[1] と s − d モデルとの関係については Kondo[2] による所謂 s − d 異常散乱の発見以来，数多くの議論がなされてきている。まず Schrieffer と Wolff[3] によって Andersonモデルは変換によって s − d モデルに移行されることが示されたが，彼等の方法はいくつかのあいまいさを含んでおり（例えば d − level に２個および０個の電子が存在することより生ずる Hamiltonian を捨てており，これが後に論ずる Schotte[4] による Schrieffer − Wolff (SW) 変換批判の原因となっており，又変換の高次の項を無視している。) Oguchi[5], Theumann[6], Mamada − Takano[7], Schotte[4] という人々の理論は果してＳＷ変換が正しいかという点に疑問を投げかけた訳である。この点を明らかにするために非常に面倒な摂動展開が Keiter − Kimball[8] と Mamada − Shibata[9] によって行なわれ $V_{\mathbf{k}d}^{6}$ の項までの異常性が吟味され，結論的にはＳＷのとりあつかいが正しい事が確認された。特に Mamada − Shibata の計算過程で明らかにされたことは Anderson モデルにはいわば “shadow anomaly” が有り，近似の程度何如ではこの “影” が “本物” に干渉し誤まった結果に導くという事である。

そこで我々はこの小論においてSWの結果を極めて簡単な一般的手法から導き，更にその結果を用いてAndersonモデルのHartree-Fock解のmagnetic な解の不安定性を論じ正しい状態においてはsymmetry は un-broken であることを示す。

§2. Formulation

A. Anderson モデル

Andersonによって与えられたHamiltonianは [1]

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}_0^c+\epsilon_d\sum_\sigma n_\sigma+\sum_{\mathbf{k}\sigma}V_{\mathbf{k}d}(C_{\mathbf{k}\sigma}^+d_\sigma+d_\sigma^+C_{\mathbf{k}\sigma})+Un_\uparrow n_\downarrow \tag{2.1}$$

$$\mathscr{H}_0^c=\sum_{\mathbf{k}\sigma}\epsilon_{\mathbf{k}}C_{\mathbf{k}\sigma}^+C_{k\sigma}$$

であり記号の説明は明らかなので省略する。

このモデルを解くためにはまずSchrödinger方程式を立てる。

$$\mathscr{H}\Psi=E\Psi \tag{2.2}$$

$$\Psi=\varphi+d_\uparrow^+\varphi_\uparrow+d_\downarrow^+\varphi_\downarrow+d_\uparrow^+d_\downarrow^+\varphi_{\uparrow\downarrow}. \tag{2.3}$$

上式においてすべてのφ_iは伝導電子に対する状態ベクトルをあらわし(d電子の真空を含む)φはd電子が0個の状態に対応する伝導電子の状態，$\varphi_\uparrow$は上向きスピンのd電子が1個いる状態に対応する伝導伝子の状態，等である。我々の現在の目的のためにはΨのこまかい構造を具体的に書く必要はない。

(2.1)~(2.3)よりただちに

$$\begin{aligned}&E(\varphi+d_\uparrow^+\varphi_\uparrow+d_\downarrow^+\varphi_\downarrow+d_\uparrow^+d_\downarrow^+\varphi_{\uparrow\downarrow})\\
&=(\mathscr{H}_0^c+\sum_\sigma\Lambda_\sigma d_\sigma^+)\varphi+(\mathscr{H}_0^c+\epsilon_d)d_\uparrow^+\varphi_\uparrow+\Lambda_\uparrow^+\varphi_\uparrow+\Lambda_\downarrow d_\uparrow^+d_\downarrow^+\varphi_\uparrow\\
&+(\mathscr{H}_0^c+\epsilon_d)d_\downarrow^+\varphi_\downarrow+\Lambda_\downarrow^+\varphi_\downarrow-\Lambda_\uparrow d_\uparrow^+d_\downarrow^+\varphi_\downarrow\\
&+(\mathscr{H}_0^c+2\epsilon_d+U)d_\uparrow^+d_\downarrow^+\varphi_{\uparrow\downarrow}+\Lambda_\uparrow^+d_\downarrow^+\varphi_{\uparrow\downarrow}-\Lambda_\downarrow^+d_\uparrow^+\varphi_{\downarrow\uparrow}\end{aligned} \tag{2.4}$$

という関係式が得られるがここで

$$\Lambda_\sigma = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\,d}\, C_{\mathbf{k}\,\sigma}$$

という量を定義した。

この(2.4)式に $d_\uparrow d_\downarrow$, $d_\downarrow$, $d_\uparrow$ を作用することにより

$$[E-(\mathscr{H}_0^c+2\varepsilon_d+U)]\,\varphi_{\uparrow\downarrow}=\Lambda_\downarrow\varphi_\uparrow-\Lambda_\uparrow\varphi_\downarrow, \qquad (2.5)$$

$$[E-(\mathscr{H}_0^c+\varepsilon_d)]\,\varphi_\downarrow=\Lambda_\downarrow\varphi-\Lambda_\uparrow^+\varphi_{\uparrow\downarrow}, \qquad (2.6)$$

$$[E-(\mathscr{H}_0^c+\varepsilon_d)]\,\varphi_\uparrow=\Lambda_\uparrow\varphi+\Lambda_\downarrow^+\varphi_{\uparrow\downarrow}, \qquad (2.7)$$

という関係を得，さらに上式を(2.4)式と組合わせることにより

$$[E-\mathscr{H}_0^c]\,\varphi=\Lambda_\uparrow^+\varphi_\uparrow+\Lambda_\downarrow^+\varphi_\downarrow \qquad (2.8)$$

を得る。

(2.5)~(2.8)式より φ と $\varphi_{\uparrow\downarrow}$ を消去すれば

$$[\Lambda_\uparrow^+(E-\mathscr{H}_0^c-2\varepsilon_d-U)^{-1}\Lambda_\downarrow-\Lambda_\downarrow(E-\mathscr{H}_0^c)^{-1}\Lambda_\uparrow^+]\,\varphi_\uparrow$$
$$+[E-\mathscr{H}_0^c-\varepsilon_d-\Lambda_\downarrow(E-\mathscr{H}_0^c)^{-1}\Lambda_\downarrow^+-$$
$$\Lambda_\uparrow^+(E-\mathscr{H}_0^c-2\varepsilon_d-U)^{-1}\Lambda_\uparrow]\,\varphi_\downarrow=0, \qquad (2.9)$$

$$[E-\mathscr{H}_0^c-\varepsilon_d-\Lambda_\uparrow(E-\mathscr{H}_0^c)^{-1}\Lambda_\uparrow^+-\Lambda_\downarrow^+(E-\mathscr{H}_0^c-2\varepsilon_d-U)^{-1}\Lambda_\downarrow]\,\varphi_\uparrow$$

$$+[\Lambda_\downarrow^+(E-\mathscr{H}_0^c-2\varepsilon_d-U)^{-1}\Lambda_\uparrow-\Lambda_\uparrow(E-\mathscr{H}_0^c)\Lambda_\downarrow^+]\,\varphi_\downarrow=0$$

という $\varphi_\uparrow$ と $\varphi_\downarrow$ に対する連立の式となる。

これまでの議論は極めて一般的でありexact な式であるが以下ではS－dモデルとの対応上興味深い場合，即ちelectron－hole の対称性のある時($2\varepsilon_d+U=0$)でUの比較的大きい場合を論ずる。

エネルギーの最も低い状態に reduce して中間状態のエネルギーはこの状態から余り離れていないと仮定すると

$$-\frac{4}{U}A_{\uparrow}^{+}A_{\downarrow}\varphi_{\uparrow}+\left[\hat{E}-\mathscr{H}_{0}^{c}+\frac{2}{U}\left(A_{\uparrow}^{+}A_{\uparrow}-A_{\downarrow}^{+}A_{\downarrow}\right)\right]\varphi_{\downarrow}=0,$$

(2.11)

$$\left[\hat{E}-\mathscr{H}_{0}^{c}-\frac{2}{U}\left(A_{\uparrow}^{+}A_{\uparrow}-A_{\downarrow}^{+}A_{\downarrow}\right)\right]\varphi_{\uparrow}-\frac{4}{U}A_{\downarrow}^{+}A_{\uparrow}\varphi_{\downarrow}=0,$$

となりここで

$$\hat{E}=E+\frac{U}{2}+\frac{2}{U}\sum_{k}V_{kd}^{2} \qquad (2.11)'$$

という量を定義しており上記の仮定は

$$\left(E_{0}+\frac{U}{2}-\mathscr{H}_{0}^{c}\right)\varphi_{\sigma}^{(0)}\doteqdot 0$$

という事である。

B. s−d モデル

s−dモデルとは

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}_{0}^{c}-\frac{J}{2N}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\left\{\left(C_{\mathbf{k}\uparrow}^{+}C_{\mathbf{k}'\uparrow}-C_{\mathbf{k}\downarrow}^{+}C_{\mathbf{k}'\downarrow}\right)S_{z}+C_{\mathbf{k}\uparrow}^{+}C_{\mathbf{k}'\downarrow}S_{-}+C_{\mathbf{k}\downarrow}^{+}C_{\mathbf{k}'\uparrow}S_{+}\right\} \qquad (2.12)$$

でありAnderson モデルと同様に

$$\mathscr{H}\Phi=\varepsilon\Phi \qquad (2.13)$$

$$\Phi=\bar{\varphi}_{\downarrow}\chi_{\downarrow}+\bar{\varphi}_{\uparrow}\chi_{\uparrow} \qquad (2.14)$$

というSchrödinger方程式を立てた時にχはスピンの部分の状態を示し$(S=\frac{1}{2})$ (2.4)式に応じて

$$\left(\varepsilon-\mathscr{H}_{0}^{c}\right)\left(\bar{\varphi}_{\downarrow}\chi_{\downarrow}+\bar{\varphi}_{\uparrow}\chi_{\uparrow}\right)$$

$$=-\frac{J}{2N}\left(\bar{A}_{\uparrow}^{+}\bar{A}_{\uparrow}-\bar{A}_{\downarrow}^{+}\bar{A}_{\downarrow}\right)\frac{1}{2}\left(\bar{\varphi}_{\uparrow}\chi_{\uparrow}-\bar{\varphi}_{\downarrow}\chi_{\downarrow}\right)$$

$$-\frac{J}{2N}\bar{A}^{+}_{\uparrow}\bar{A}_{\downarrow}\bar{\varphi}_{\uparrow}\chi_{\downarrow}-\frac{J}{2N}\bar{A}^{+}_{\downarrow}\bar{A}_{\uparrow}\bar{\varphi}_{\downarrow}\chi_{\uparrow}, \tag{2.15}$$

$$\bar{A}_{\sigma}\equiv\sum_{k}C_{k\sigma}, \tag{2.16}$$

となり前と同様にして

$$\frac{J}{2N}\bar{A}^{+}_{\uparrow}\bar{A}_{\downarrow}\bar{\varphi}_{\uparrow}+\left[\varepsilon-\mathscr{H}^{c}_{0}-\frac{J}{4N}(\bar{A}^{+}_{\uparrow}\bar{A}_{\uparrow}-\bar{A}^{+}_{\downarrow}\bar{A}_{\downarrow})\right]\bar{\varphi}_{\downarrow}=0,$$

$$\left[\varepsilon-\mathscr{H}^{c}_{0}+\frac{J}{4N}(\bar{A}^{+}_{\uparrow}\bar{A}_{\uparrow}-\bar{A}^{+}_{\downarrow}\bar{A}_{\downarrow})\right]\bar{\varphi}_{\uparrow}+\frac{J}{2N}\bar{A}^{+}_{\downarrow}\bar{A}_{\uparrow}\bar{\varphi}_{\downarrow}=0. \tag{2.17}$$

という$\bar{\varphi}_{\uparrow}$と$\bar{\varphi}_{\downarrow}$とに対する連立の式を得る。

§ 3. 縮退と不安定性

Andersonモデルとs－dモデルとの対応を論ずる前にここでは縮退とそれに絡む不安定性の議論を行なう。

前節の結果を参照すればφ及び$\varphi_{\uparrow\downarrow}$は$\varphi_{\uparrow}$と$\varphi_{\downarrow}$に比較してV／Uだけ低い order の量であることが解るので以下では$\varphi_{\uparrow}$と$\varphi_{\downarrow}$とについて吟味を行なう。全スピンのz－成分をM_zと書けば

$$(\sigma_z+S^{d}_{z})\Psi=M_z\Psi \tag{3.1}$$

であり，ここでσ_zは伝導電子に対する，S^{d}_{z}はd電子に対するz－成分のスピン演算子である。するとただちに

$$\begin{aligned}\sigma_z\varphi_{\uparrow}&=(M_z-\frac{1}{2})\varphi_{\uparrow},\\ \sigma_z\varphi_{\downarrow}&=(M_z+\frac{1}{2})\varphi_{\downarrow},\end{aligned} \tag{3.2}$$

という関係式が成立していることがわかる。

（3．1）と（3．2）を見れば

$$|M_z-\frac{1}{2}|=|M_z+\frac{1}{2}|$$

という条件のもとで（2．11）式は縮退を起すことが解る。（i，e．，$M_z \equiv 0$）この理由は以下の如く説明される；$M_z = 0$のとき

$$\mathscr{H}_0^{\sigma} \varphi_{\sigma}^{(0)} = \hat{E}^{(0)} \varphi_{\sigma}^{(0)},$$

$$\mathscr{H}_0^{\sigma} = \mathscr{H}_0^{c} + \sigma \frac{2}{U} (\Lambda_{\uparrow}^{+} \Lambda_{\uparrow} - \Lambda_{\downarrow}^{+} \Lambda_{\downarrow}),$$

から得られる$\varphi_{\uparrow}^{(0)}$，$\varphi_{\downarrow}^{(0)}$に対して

$$\varphi_{\uparrow}^{(0)} \neq 0,\ \varphi_{\downarrow}^{(0)} = 0 \text{（又はこの逆）}$$

から出発して摂動計算を行なえば（（2．11）式中の$4U^{-1}\Lambda_{\sigma}^{+}\Lambda_{-\sigma}$の項を摂動として）最初の補正で状態ベクトルは発散してしまう。この事は$\varphi_{\downarrow}^{(0)}$を0に等しくはとれない事をあらわしている。即ち縮退の有る場合の摂動計算を行なわねばならないわけである。そこで計算を行なってみると$\varphi_{\uparrow}$と$\varphi_{\downarrow}$とはスピン反転の演算子で関係ずけられていることが解る。

そこで以下では

$$R = \exp \left[-i\frac{\pi}{2} \sum_{\ell} (C_{\ell\uparrow}^{+} C_{\ell\downarrow} + C_{\ell\downarrow}^{+} C_{\ell\uparrow}) \right], \qquad (3.3)$$

というスピン回転演算子を導入して話を進める。この演算子は

$$R C_{k\downarrow} R^{-1} = i C_{k\uparrow}$$

の如き変換を行うことを注意しておく。

Rを（2．11）式に演算すると

$$-\frac{4}{U} \Lambda_{\downarrow}^{+} \Lambda_{\uparrow} R\varphi_{\uparrow} + \left[E - \mathscr{H}_0^{c} + \frac{2}{U} (\Lambda_{\downarrow}^{+} \Lambda_{\downarrow} - \Lambda_{\uparrow}^{+} \Lambda_{\uparrow}) \right] R\varphi_{\downarrow} = 0,$$

$$\left[\hat{E} - \mathscr{H}_0^{c} + \frac{2}{U} (\Lambda_{\uparrow}^{+} \Lambda_{\uparrow} - \Lambda_{\downarrow}^{+} \Lambda_{\downarrow}) \right] R\varphi_{\uparrow} - \frac{4}{U} \Lambda_{\uparrow}^{+} \Lambda_{\downarrow} R\varphi_{\downarrow} = 0, \qquad (3.4)$$

という様に変換される。

さて$R\varphi_{\uparrow}$という状態と$\varphi_{\downarrow}$という状態とが同じσ_zの固有値を持っているわけであるから，又更に（3．4）式を見て解るように$R\varphi_{\uparrow}$と$R\varphi_{\downarrow}$とは$\hat{E}$というエネルギーに属する固有函数であるから

$$R\varphi_{\uparrow}=A\varphi_{\downarrow},\qquad R\varphi_{\downarrow}=A\varphi_{\uparrow},\tag{3.5}$$

でなければならない。
このAを決めるには

$$RR\varphi_{\uparrow}=(-1)^{\Sigma_{\ell}(C^{+}_{\ell\uparrow}C_{\ell\uparrow}+C^{+}_{\ell\downarrow}C_{\ell\downarrow})}\cdot\varphi_{\uparrow}$$

$$=e^{\pm i\pi\Sigma_{\ell}(C^{+}_{\ell\uparrow}C_{\ell\uparrow}+C^{+}_{\ell\downarrow}C_{\ell\downarrow})}\cdot\varphi_{\uparrow}$$

$$=A^{2}\varphi_{\uparrow},$$

であることより

$$A=e^{\pm i\frac{\pi}{2}\Sigma_{\ell}(n_{\ell\uparrow}+n_{\ell\downarrow})}\tag{3.6}$$

と求まる。
　したがって $\varphi_{\uparrow}$ と $\varphi_{\downarrow}$ との間には

$$\varphi_{\downarrow}=e^{\mp i\frac{\pi}{2}\Sigma_{\ell}(n_{\ell\uparrow}+n_{\ell\downarrow})}\cdot R\varphi_{\uparrow}\tag{3.7}$$

という関係が成立している。
　一方，$\langle n_{\uparrow}\rangle$ と $\langle n_{\downarrow}\rangle$ は $\varphi_{\uparrow}$，$\varphi_{\downarrow}$ と

$$\langle n_{\uparrow}\rangle=|\varphi_{\uparrow}|^{2},\qquad \langle n_{\downarrow}\rangle=|\varphi_{\downarrow}|^{2}\tag{3.8}$$

という関係式で結びついているので（3．7），（3．8）式及び φ_{i} に対する規格化の条件を用いれば

$$|\varphi_{\uparrow}|^{2}=|\varphi_{\downarrow}|^{2}=\langle n_{\uparrow}\rangle=\langle n_{\downarrow}\rangle=\frac{1}{2},\tag{3.9}$$

が導かれる。この式に含まれる物理的意味は次節で解釈する。
　この節の議論を了える前に（3．5）式は $M_{z}=0$ の時にのみ成立すること，即ち（3．5）式は縮退に対する必要十分条件であることを示そう。

σ_zを(3.5)式に演算すると

$$\sigma_z R\varphi_\uparrow^{M_z} = RR^{-1}\sigma_z R\varphi_\uparrow^{M_z}$$
$$= -R\sigma_z\varphi_\uparrow^{M_z}$$
$$= (-M+1)R\varphi_\uparrow^{M_z},$$
$$\sigma_z R\varphi_\downarrow^{M_z} = (-M-1)R\varphi_\downarrow^{M_z},$$

であるが，$R\varphi_\uparrow^{M_z}$，$R\varphi_\downarrow^{M_z}$は(3.4)式を満足することを考慮して

$$R\varphi_\uparrow^{M_z} \propto \varphi_\downarrow^{-M_z},\quad R\varphi_\downarrow^{M_z} \propto \varphi_\uparrow^{-M_z},$$

$$E_{M_z} = E_{-M_z}.$$

したがって$M_z=0$の時にのみ(3.5)式が満足され，$\varphi_\uparrow \neq 0$，$\varphi_\downarrow = 0$(又はこの逆)の状態から出発する摂動計算は意味を成さず，故に縮退が生じているわけである。

§4. 討論及び結論

前節迄の経過を見れば明らかな様に以下の2点が結論される。

まず(2.11)式及び(2.17)式とを比較すれば明らかな様にこの二つのモデルを記述する方程式は全く同一の構造を持ちパラメータ間の対応は

$$\frac{J}{N} = -\frac{8V^2}{U}, \qquad (4.1)$$

でありこれはSWの結果である。我々はこの小論ではelectron-hole の間に対称性のある特別な場合を扱ったが，(2.9)(2.10)式が与えられれば一般的にSWの結果が導かれる。そしてSchotte[4]の論議は実は正しくない事が解るのであるが，この点に関しては別に論じているので[10]これ以上の深入りはしない。(Theumann[6], Mamada-Takano[7], Oguchi[5]の仕事に関する評価に関してはMamada-Shibata[9]の論文に詳細に論じられているのでこれをも参照して載きたい。)

さて§3.の解析から引き出される結論について考えてみよう。(2.11)′

の式からわかる様にエネルギースペクトルの最初の項は$-\frac{U}{2}$でありこの値はAnderson が彼のHartree-Fock 解で得た“magnetic” なものに相当する。(即ち, $\langle n_{\sigma}\rangle_{H.F}=1$, $\langle n_{-\sigma}\rangle_{H.F}=0$)。一方我々が詳しく調べた様に$M_z=0$である限り$\langle n_{\uparrow}\rangle=\langle n_{\uparrow}\rangle=\frac{1}{2}$となっていなければならない。言いかえれば$M_z=0$の時に限って$\langle n_{\uparrow}\rangle_{H.F}=1$, $\langle n_{\downarrow}\rangle_{H.F}=0$及び$\langle n_{\downarrow}\rangle_{H.F}=1$, $\langle n_{\uparrow}\rangle_{H.F}=0$という2組のHartree-Fockの“Magnetic” な解の縮退はV^2/Uという結合定数を持つ摂動によって解かれ, ついに$\langle n_{\uparrow}\rangle=\langle n_{\downarrow}\rangle=\frac{1}{2}$という状態となって落ち着くというわけである。したがって摂動が何如程小さかろうともスペクトルのうちで半分は上に昇り残りの半分は下降するという事になる。(これを我々はHartree-Fock 解の不安定性と呼んだ。)

もし$M_z\fallingdotseq 0$であれば縮退は存在せずHartree-Fock のMagnetic statesはほとんど安定でありexact な解においては余りHartree-Fockから変るとは考えられず, 又我々の興味の対象でもない。

この様にして得られた状態は対称性を破っておらず物理的にも考え易いと思われる。なぜなら1個の不純物が相転移を起すとは考えられないからである。

References

1) P. W. Anderson, Phys. Rev. 124 (1961), 1030.
2) J. Kondo, Prog. Theor. Phys. 32 (1964), 37.
3) J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, Phys. Rev. 149 (1966), 491.
4) K. D. Schotte, Z. Physik 235 (1970), 155.
5) A. Oguchi, Prog. Theor. Phys. 43 (1970), 257.
6) A. Theumann, Phys. Rev. 178 (1969), 978.
7) H. Mamada and F. Takano, Prog. Theor. Phys. 43 (1970), 1458.
8) H. Keiter and J. C. Kimball, Phys. Rev. Letters 25 (1970), 672 and to be published.
9) H. Mamada and F. Shibata, Prog. Theor. Phys. 45 (1971),

Andersonモデルにおける Hartree-Fock 解の不安定性及びs-d
モデルとの同等性について
1028-

10) F. Shibata and K. Sawada, to be published.