"高濃度近藤系"の半現象論

阪大基礎工　吉森昭夫
阪大工　笠井秀明

"高濃度近藤系"の高温および低温のふるまいがいわゆる"周期的アンダーソンモデル"から導くことができるのかどうか，導けるものとしたならばどんな形になるのだろうかという問題がある。この話は selfenergy および vertex part への相互作用 U の高次の inter-site の寄与が無視できるとすれば興味のある結果がえられるというもので，pure な系に対する取扱いと，それをCPAを用いて合金系に拡張した結果について述べる。
"周期的アンダーソンモデル"のハミルトニアンは pure な系に対して，

$$H = \sum \varepsilon_k c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma} + V \sum \left(c_{k\sigma}^{+} f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma} \right) + \sum \varepsilon_v(k) f_{k\sigma}^{+} f_{k\sigma} + U \sum f_{i\uparrow}^{+} f_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^{+} f_{i\downarrow} , \qquad (1)$$

と書ける。系は完全な電子空孔の対称性を持つものとする。$U=0$ で系が金属的としたいので，f電子のバンドにもバンドエネルギーの k 依存性を導入し，簡単のために，$\varepsilon_v(k) = \alpha \varepsilon_k$ （$\alpha > 0$, $\alpha \ll 1$）とする。$U \neq 0$ では $\varepsilon_v(k)$ に常数項 $-U/2$ があるがこれは selfenergy に含ませることにする。ε_k は電子空孔の対称性を充し，$\varepsilon_k = 0$ は $V=0$ でのフェルミ準位とする。f電子に対する温度グリーン関数の Fourier 変換　$G_k(i\omega_n)$ は，

$$G_k(i\omega_n) = \left[i\omega_n - \varepsilon_v(k) - \Sigma_k(i\omega_n) - V^2 (i\omega_n - \varepsilon_k)^{-1} \right]^{-1}, \qquad (2)$$

で与えられる。selfenergy Σ_k は一般には相互作用 U の site の異なる項の寄与があるが，ここでは同じ site の項からの寄与が主要で intersite の寄与は無視できるものと仮定をする。この仮定の妥当性は結果が実験結果と比較して興味があるかどうかで今のところは検定しようというわけである。この仮定をすれば Σ_k は k によらなくなる。また selfenergy のスケルトンは1個の不純物の近藤効果のものと同じになり，それについて知られている結果を利用できることになる。例えば $\Sigma(\omega)$ は $\tilde{T}_K$ を特性温度として持つが，それは $-\mathrm{Im}\, G_{ii}(i\delta) = -\mathrm{Im} \sum_k G_k(i\delta)/N = \tilde{\Delta}^{-1}$ として $\tilde{T}_K = \sqrt{8U\tilde{\Delta}/\pi}\, \exp(-\pi U/8\tilde{\Delta})$ で与えられ，$\tilde{\Delta} = \alpha/\pi\rho$ （ρ は伝導電子のフェルミ準位での状態密度で，状態密度は1に規格化されている。）である。
電気伝導度 σ は vertex part への intersite の寄与がやはり無視できるとすると，

$$\sigma = A \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k} \right)^2 \left(\mathrm{Im}\, G_k^c(\varepsilon + i\delta) \right)^2 , \qquad (3)$$

で表はされる。ここでG_k^cは伝導電子に対する温度グリーン関数のFourier変換である。この表式はε_k－依存性の弱い部分はFermi準位の値で置き換えて，kについての和を行うと，

$$\sigma = A\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon}\left[\,|\tilde{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)|^2+\gamma\tilde{\Delta}^2\right]/\tilde{\Sigma}_I(\varepsilon+i0^+), \quad (4)$$

となる。$\tilde{\Sigma}$はintersiteの寄与を無視したselfenergyで$\tilde{\Sigma}_I$はその虚部である。γは$\gamma=(\pi\rho V^2)/\alpha$で与えられる。$T \gtrsim \tilde{T}_K$で$\tilde{\Sigma}_I(i0^+)/\tilde{\Delta} = 1-((\mathrm{Im}\,t(i0^+))_{T=0}/\mathrm{Im}\,t(i0^+))$において$t(i0^+)$にSuhl-Nagaoka-Hamannのものを用いると，電気抵抗をRとして，

$$R = A'\left[\left(\sqrt{\log^2(T/\tilde{T}_K)+a}+\log(T/\tilde{T}_K)\right)^2+\gamma\left(\sqrt{\log^2(T/\tilde{T}_K)+a}-\log(T/\tilde{T}_K)\right)^2\right]^{-1}, (5)$$

がえられる。aは$a=3\pi^2/4$である。$T \ll \tilde{T}_K$でも$\tilde{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)$は判っており，

$$R = A'\,\frac{8}{3\gamma}\left(\frac{T}{\tilde{T}_K}\right)^2 \quad (6)$$

となる。この結果は高温，低温とも"高濃度近藤系"のRとして実験的にえられているものに定性的に一致する。

次に合金系に対しての拡張を試みる。f電子の準位に2種類あり，l番目のsiteにA原子がいる時はε_A，B原子がいる時はε_Bとし，$\varepsilon_A=-U/2$，$\varepsilon_B\to\infty$と置き，A原子の濃度をxとする。その他のハミルトニアンの部分はpureな系と同じである。CPAの処理をこの系に適用すると，A，Bの分布はランダムとして，コヒーレントポテンシャル$\bar{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)$は$\varepsilon\sim0$で，

$$-\frac{1-x}{\bar{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)-\tilde{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)} = \frac{1}{N}\sum_k \frac{\varepsilon_k}{-\alpha\varepsilon_k^2-\bar{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)\varepsilon_k+V^2}, \quad (7)$$

により決められる。$\tilde{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)$は前と同じく1個の不純物の近藤効果のものと同じスケルトンで与えられ，それを計算するためのグリーン関数はあるsiteがAでしめられている時のグリーン関数（f電子に対する）

$$G_A(z) = \frac{1}{N}\,\frac{1}{x}\sum_k \frac{1}{z-\bar{\Sigma}(z)-\alpha\varepsilon_k-\dfrac{V^2}{z-\varepsilon_k}}, \quad (8)$$

である。上の2つの表式を得るためにpureな系に対すると同様にselfenergyに対するintersiteの寄与は無視できるとした。$\tilde{\Sigma}$はやはり特性温度$\bar{T}_K$を持ち，それは$\tilde{T}_K$に対する表式の$\tilde{\Delta}$を$\bar{\Delta}$で置換えればよく，$\bar{\Delta}$は$-\mathrm{Im}\,G_A(i0^+)=\bar{\Delta}^{-1}$でえられる。上の2つの表式から$\bar{\Delta}=-x(1-x)^{-1}\bar{\Sigma}_I(i0^+)$と表はされる。$\bar{\Sigma}_I$は$\bar{\Sigma}$の虚部。

電気伝導度σは，同様にvertex partへのintersiteの項を無視すると，

$$\sigma = A\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, \frac{df}{d\varepsilon}\, \frac{|\bar{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)|^2+\gamma\tilde{\Delta}^2}{\bar{\Sigma}_I(\varepsilon+i0^+)}\,, \tag{9}$$

と書ける。したがって(7)式で $\varepsilon=0$, $T=0K$ ($T=0K$ で $\tilde{\Sigma}(i0^+)=0$ に注意) として $\bar{\Delta}$ を求め，$\bar{T}_K$ を定め，$\tilde{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)$ 与えられているとして，再び(7)式より $\bar{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)$ を求めれば σ が計算できることになる。以上の結果は $x\to 1$ で上記の pure な場合に一致し，$x\to 0$ で1個の不純物の近藤効果の結果に一致する。

$1-x\sim 0$ で $1-x$ の1次までの近似で R を求めると，$T\gtrsim \bar{T}_K$ で，

$$R = A'\frac{\tilde{\Delta}}{\bar{\Delta}}\left[\left(\sqrt{\log^2(T/\bar{T}_K)+a}+\log(T/\bar{T}_K)\right)^2+\bar{\gamma}\left(\sqrt{\log^2(T/\bar{T}_K)+a}-\log(T/\bar{T}_K)\right)^2\right]^{-1}, \tag{10}$$

となり，($\bar{\gamma}=\gamma(\tilde{\Delta}/\bar{\Delta})^2$)，$T\ll \bar{T}_K$ では

$$R = A'\,Q(T/\bar{T}_K)\,,$$

$$Q(0) = \frac{1-x}{\gamma}\cdot\frac{4}{3\pi^2}\,,\quad Q(T/\bar{T}_K) = \frac{8}{3\gamma}\left(\frac{\bar{\Delta}}{\tilde{\Delta}}\right)\left(\frac{T}{\bar{T}_K}\right)^2,$$

$$1 \gg (T/\bar{T}_K)^2 \gg (1-x)\tilde{\Delta}/\pi^2\bar{\Delta}\,,$$

で与えられることになる。

(4) 及び (9) の結果でみると，低温で coherent な状態になっているが，高温でも一種の coherent な状態になっている。(5) 及び (10) 式の結果は $T\gg \tilde{T}_K, \bar{T}_K$ で始めて独立な局在スピンによる散乱の和という形になる。また (4) 及び (9) の表式ではスケール則が成立っていない。R の温度変化は $\tilde{T}_K$ または $\bar{T}_K$ だけでは定らず，パラメーター $\gamma\tilde{\Delta}^2$ を含んでいる。(9) 式では $x\to 0$ の極限で始めてスケール則が成立することになる。