

一体アンダーソンモデルにおける厳密解
「一体の基底状態はどこまでわかったか」

阪大工 興地斐男

アンダーソンハミルトニアン¹⁾

$$H = \sum_{k,\alpha} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \sum_{k\alpha} V_k (c_{k\alpha}^\dagger d_\alpha + d_\alpha^\dagger c_{k\alpha}) + \epsilon_d \sum_\alpha d_\alpha^\dagger d_\alpha + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \quad (1)$$

は(a) V_k は k によらず一定, (b) $\epsilon_k = k$ とすると一次元系のハミルトニアン

$$H = \sum_\alpha \int dx \left[c_\alpha^\dagger(x) \left(-i \frac{d}{dx}\right) c_\alpha(x) + V \delta(x) \{c_\alpha^\dagger(x) d_\alpha + d_\alpha^\dagger c_\alpha(x)\} \right] + \epsilon_d \sum_\alpha d_\alpha^\dagger d_\alpha + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \quad (2)$$

と書き直せる。ただしここでは不純物を $x=0$ におき, エネルギー原点をフェルミレベルにとってある。これにバート仮説を用いると次のバート・ヤン型の方程式を得る。

$$e^{ik_j L} \cdot \frac{k_j - \epsilon_d - iV^2/2}{k_j - \epsilon_d + iV^2/2} \cdot \prod_{\beta=1}^M \frac{B(k_j) - \Lambda_\beta - iUV^2/2}{B(k_j) - \Lambda_\beta + iUV^2/2} = 1 \quad j=1, 2, \dots, N. \quad (3a)$$

$$-\prod_{j=1}^N \frac{B(k_j) - \Lambda_\alpha - iUV^2/2}{B(k_j) - \Lambda_\alpha + iUV^2/2} \cdot \prod_{\beta=1}^M \frac{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta - iUV^2}{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta + iUV^2} = 1 \quad \alpha=1, 2, \dots, M \quad (3b)$$

L は一次元系の長さ, Λ はスピンに関する変数である。ただし(3)式はエネルギー固有値 $E = \sum k_j$, 全スピンの z 成分 $S_z = (N/2) - M$ に対してたてられている。ここで N は全電子数, M は下向きスピンの数である。(3)式より基底状態では $B(k_j^\pm) = \Lambda_\alpha \pm iUV^2/2$ (ただし Λ_α は実数) を満足する複素数 k_j^\pm が解となり,³⁾ 磁気的励起は実数解 k_j で表わされる。⁴⁾ 以下では解析的な表現が得られている対称アンダーソンモデル($U+2\epsilon_d=0$) について述べる。系を熱力学的極限で考え, 基底エネルギー E を求めると

$$\begin{aligned} [E - E(U=0)]/V^2 &= -\frac{1}{\pi} \left[u \tan^{-1} u - \frac{1}{2} \log(1+u^2) \right] \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \frac{\sqrt{x} \operatorname{cosech} \pi(x+y^2)}{(y+\sqrt{u}/2)^2 + u/4} \end{aligned} \quad (4)$$

となる。³⁾ ただし $u = U/V^2$ 。(4)式は u の小さいときは以前に得られていた擾動計算の答えを与え, u の大きい極限では $s-d$ モデルで得られていた結果を出す。帯磁率 χ_m , 電荷感受率 χ_c も同様に計算できて

$$\pi V^2 \chi_m = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(1+u^2-4ux^2)e^{-\pi x^2} dx}{(1+u^2-4ux^2)^2 + 16u^3 x^2} + \frac{\pi}{2\sqrt{u}} \exp \left[\frac{\pi}{4} \left(u - \frac{1}{u} \right) \right] \quad (5)$$

$$\frac{\pi V^2}{4} \chi_c = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(1+u^2+4ux^2)e^{-\pi x^2} dx}{(1+u^2+4ux^2)-16u^3x^2} \quad (6)$$

となる。 χ_{ma} が2項が u が大きいとき $S-d$ モデルで得られている結果を導き、 $u \sim 1$ 程度で1項(振動論で導かれる項)よりもずっと大きい値となり、 $u=0$ に特異点を持つ。これらのことより $S-d$ モデルでの多体効果(近藤効果)は $u \sim 0$ 附近まで存在すると考えられ、 u が小さいところから出発する振動論的アプローチではこのモデルの本質をつかみ得ないことを示している。さらに低温での電子比熱係数は $U=Ed=0$ で規格化した値 γ で書くと $\gamma = (\bar{\chi}_m + \bar{\chi}_c)/2$ となる⁹⁾。

次に帯磁率、比熱の温度変化の計算結果を図に示す。これらは対称アンダーソンモデルの場合でも数値的にしか得られない⁹⁾(図1, 図2参照)。これらの図を見ても $S-d$ モデルでの多体効果が u の比較的小さい値でも存在していることがよくわかる。さらに磁場中での比熱の計算結果も図3に示した。

非対称アンダーソンモデル($U \neq 2Ed$)の上記の物理量および磁気抵抗の計算結果は原論文を参照していただきたい⁹⁾。

以上述べてきたことから次のことがいえると思う。すなわちアンダーソンモデルではたとえ u の値が小さくとも有限である限りは、振動論的アプローチで得られる状態とは本質的に異なる状態が基底状態として実現されており、その状態は $S-d$ モデルで実現されている一重項束縛状態と基本的に同じものであると考えてよい。そしてくりこみ群、ベータ仮説の方法が $S-d$ モデル、アンダーソンモデルに適用され、有限温度での帯磁率、比熱の計算がなされたことにより、近藤効果と呼ばれる局所的電子相関効果により生ずる物理現象の全貌がようやく明らかにされたといえる。

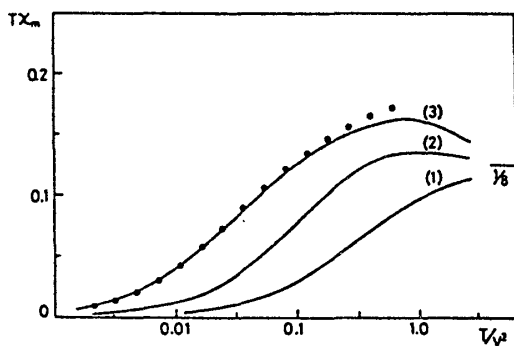


図1 帯磁率の温度変化

(1) $U/V^2=0$, (2) 2.0, (3) 4.0

くりこみ群による $S-d$ モデルの結果を黒丸で記入してある⁹⁾

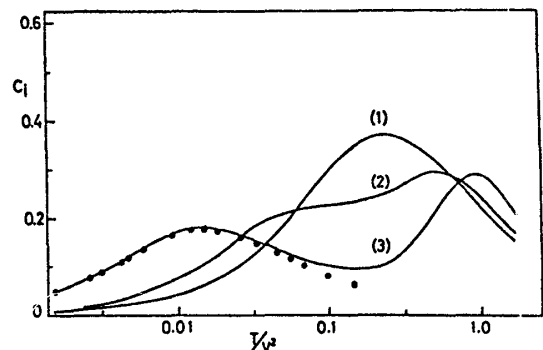
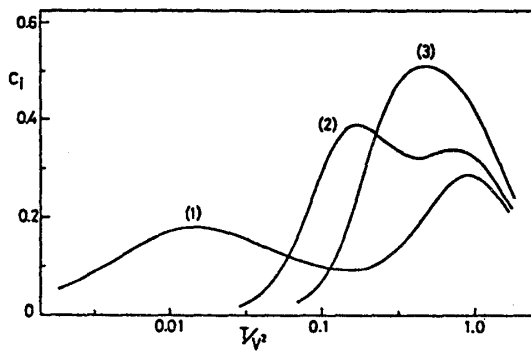


図2 比熱の温度変化

(1) $U/V^2=0$, (2) 2.0, (3) 4.0

黒丸は $S-d$ モデルの厳密解で得られたもの¹⁰⁾を記入したものである



オ3図 外部磁場中での比熱の温度変化
 $U/V^2 = 4.0$, (1) $H/V^2 = 0$ (2) 0.5
 (3) 1.0

References

- 1) P.W. Anderson, Phys. Rev. 124 (1961) 41
- 2) P.B. Wiegmann, Phys. Lett. 80A (1980) 163
- 3) N. Kawakami and A. Okiji, Phys. Lett. 86A (1981) 483
- 4) A. Okiji and N. Kawakami, Solid State Commun. 43 (1982) 365
 P.B. Wiegmann, V.M. Filyov and A.M. Tsvetlick, JETP Lett. 35 (1982) 92
- 5) K. Yosida and A. Yoshimori, Magnetism V ed. H. Suhl (Academic Press, New York, 1973) p253
- 6) N. Kawakami and A. Okiji, Solid State Commun. 43 (1982) 467
 V.M. Filyov, A.M. Tsvetlick and P.B. Wiegmann, Phys. Lett. 89A (1982) 157
- 7) A. Okiji and N. Kawakami to be published
- 8) N. Kawakami and A. Okiji, J. Phys. Soc. Jpn. 51 (1982) 1145, 2043
 A. Okiji and N. Kawakami, J. Phys. Soc. Jpn. 51 (1982) 3192
 P.B. Wiegmann and A.M. Tsvetlick, JETP Lett. 35 (1982) 120
- 9) H.R. Krishna-murthy, K.G. Wilson and J.W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 1101
 H.R. Krishna-murthy, J.W. Wilkins and K.G. Wilson, Phys. Rev. B21 (1980) 1003
- 10) V.T. Rajan, J.H. Lowenstein and N. Andrei, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 497
 H.U. Desgranges and K.D. Schotte, Phys. Lett. 91A (1982) 240
 V. Melnikov, Pisma Zh. Eksp. Theor. Fiz. 35 (1982) 414