

周期的アンダーソンハミルトニアンに於けるフェルミ液体理論

東大 物性研 大川房義

1. 序

$U \rightarrow +\infty$ の周期的アンダーソンハミルトニアンで記述される系に最も特徴的な事は、Kondo効果と交換相互作用の競合である。¹⁾ サイト間相互作用を無視して、一重項基底状態の束縛エネルギーは

$$E_B = n_\lambda \frac{\Delta}{\pi} \left(\frac{1}{n_f} - 1 \right), \quad (1)$$

と計算できる。ここで、 n_λ はスピンも含めたレベルの縮重度、 Δ は mixing エネルギーで n_f は基底状態におけるサイト当りの f 電子数である。 $U \rightarrow +\infty$ のため $0 < n_f < 1$ 。

なお、 n_f は scaling relation²⁾ によりレベルの深さと一対一対応をしている。

$$E_f - \mu + (n_\lambda - 1) \frac{\Delta}{\pi} \ln \frac{D}{\Delta} = n_\lambda \frac{\Delta}{\pi} \left\{ \frac{1}{n_f} - 1 + \ln \frac{n_\lambda}{\pi} \left(\frac{1}{n_f} - 1 \right) \right\}, \quad (2)$$

ここで、 E_f はレベルの位置、 μ はケミカルポテンシアルで、 D は伝導帯のバンド中である。この関係は、又 Hohenberg-Kohn³⁾ による density functional theorem と類似の density function theorem の表現ともとれる。 E_B と E_f を用いて表わると、レベルが浅い時は

$$E_B \approx E_f - \mu + (n_\lambda - 1) \frac{\Delta}{\pi} \ln \frac{D}{\Delta}, \quad (3)$$

と書け、混成項に関する最低次の摂動計算に一致する。(3) 式の右辺で定義される量が真にあるほどレベルが深い時は

$$E_B \approx D \left(\frac{\Delta}{D} \right)^{1/n_\lambda} \exp \left\{ \frac{\pi}{n_\lambda \Delta} (E_f - \mu) \right\}, \quad (4)$$

と書け、いわゆる next divergent の結果を再現する。

一方、交換相互作用は

$$J = \frac{z}{2} \frac{\Delta}{\pi} \frac{|F(r)|}{2 \ln(D/\Delta)}, \quad (5)$$

と計算できる。ここで、 z は格子の配位数で、 $F(r)$ は f サイト間の距離 r の関数で RKKY 的な振動関数である。したがって、 $E_B \approx J$ の競合により系は分類できる。周期系における電気的中性の条件を考慮すると、この系では E_f よりも n_f による場合分けが便利である。

(i) $n_f \approx 1$ の時は $E_B \ll J$ で、低温で磁気秩序が期待できる RKKY 領域。(ii) $n_f \approx 1$ の時は $E_B \approx J$ で、競合領域。(iii) $n_f < 1$ の時は $E_B \gg J$ で 1 サイト的な視点で単独なレベル領域である。(ii) の領域で $E_B > J$ の場合、あるいは (iii) の領域では、磁気秩序の実現は難しい。今、order parameter としては磁気的なものを考えているから、磁気的秩序が存在しないという事は、系が正常なフェルミ液体である事を示唆する。

ここでは、系が正常フェルミ液体であると仮定して、周期的アンダーソンハミルトニア

ここで記述される系において厳密に成立する関係を導く。そして、フェルミ液体理論を利用して、状態密度と電気抵抗を計算する。

2. フェルミ液体理論⁴⁾

モデルハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{n=1}^r \sum_{k\sigma} (\epsilon_{n\sigma}(k) - \mu) a_{nk\sigma}^+ a_{nk\sigma} + \sum_{i\sigma} (E_{f\sigma} - \mu) f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} \\ & + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i,n,k\sigma} (V_n e^{-i k R_i} a_{nk\sigma}^+ f_{i\sigma} + h.c.) \\ & + \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i-\sigma}^+ f_{i-\sigma} f_{i\sigma}, \end{aligned} \quad (6)$$

である。ここで伝導帯は r 枚、 f バンドは 1 枚とする。

$$\epsilon_{n\sigma}(k) = \epsilon_n(k) - g_c \sigma \mu_B H, \quad (7)$$

$$E_{f\sigma} = E_f - g_f \sigma \mu_B H, \quad (8)$$

で $g_c = g_f$ を仮定する。 U は有限とする。

ここで注目すべきは、相互作用 U は f 電子間のみ働くことである。混成項は非摂動状態で厳密に取りこみ、 U を摂動として Feynman ダイアグラムの方法で各項を考えると、現われるのは f 電子の Green 関数のみである。したがって、 f 電子の Green 関数は

$$G_{ff\sigma}(i\epsilon, k) = \frac{1}{i\epsilon - E_{f\sigma} - \Sigma_{\sigma}(i\epsilon, k) - \sum_n \frac{|V_n|^2}{i\epsilon - \epsilon_{n\sigma}(k)}}, \quad (9)$$

と書ける。ここでセルフエネルギー Σ_{σ} は U の摂動で求められるもので、当然 $U \rightarrow 0$ では消える項である。Luttinger⁵⁾ に従って熱力学関数を書き下す事ができて

$$\begin{aligned} \Omega = & -k_B T \sum_{i\sigma} \sum_{i\epsilon_l} e^{i\epsilon_l 0^+} \left[\ln \left\{ -i\epsilon_l + E_{f\sigma} + \Sigma_{\sigma}(i\epsilon_l, k) + \sum_n \frac{|V_n|^2}{i\epsilon_l - \epsilon_{n\sigma}(k)} \right\} \right. \\ & \left. + \sum_{\sigma}(i\epsilon_l, k) G_{ff\sigma}(i\epsilon_l, k) \right] + \Omega' \\ & - k_B T \sum_{n|k\sigma} \sum_{i\epsilon_l} e^{i\epsilon_l 0^+} \ln \left\{ -i\epsilon_l + \epsilon_{n\sigma}(k) \right\}, \end{aligned} \quad (10)$$

ここで、 Ω' は熱力学関数のスケルトンダイアグラムで、一体の Green 関数を全て $G_{ff\sigma}$ で置き換えたものである。Luttinger の結果と形式的に違うのは (10) 式の最後の項で、これは $U \rightarrow 0$ の時、熱力学関数を正しく表現するために必要である。(U の零次の項)

熱力学関数を微分する事により、種々の物理量が求まる。証明は省略するが、次の3つの関係が証明できる。

i) Fermi surface sum rule
全電子数 n_e は次で与えられる。

$$n_e = \sum_{\alpha k \sigma} \theta(\mu - E_{\alpha \sigma}^*(k)), \quad (11)$$

ここで $E_{\alpha \sigma}^*(k)$ は (9) 式の pole で定義される準粒子スペクトルであり、 α はフェルミ面が複数存在する時、各々の準粒子を示す。フェルミ面と交わらない分枝も適当に含む。

ii) 比熱

低温での比熱は $C = \gamma T + O(T^2)$ と書ける

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \sum_{\alpha \sigma} \rho_{\alpha \sigma}^*(\mu), \quad (12)$$

$$\rho_{\alpha \sigma}^*(\mu) = \sum_k \delta(\mu - E_{\alpha \sigma}^*(k)) \quad (13)$$

iii) 帯磁率

$$\chi_s = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} g_{\alpha} g_{\alpha}^* \mu_B^2 \rho_{\alpha \sigma}^*(\mu), \quad (14)$$

ここで g_{α}^* は準粒子の g 因子。

準粒子のスペクトルについては、セルフエネルギー Σ_{σ} の展開係数を用いて表わす事ができる。

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}(E+i0, k \sim k_{F\alpha}) &= \Sigma_{0\alpha} + (1 - \tilde{\chi}_{1\alpha})(E - \mu) \\ &+ (1 + \tilde{\chi}_{2\alpha}) g_f \sigma \mu_B H + \frac{\hbar^2}{m_{f\alpha}} k_{F\alpha} (k - k_{F\alpha}) + \dots \end{aligned} \quad (15)$$

パラメター $\Sigma_{0\alpha}$, $\tilde{\chi}_{1\alpha}$, $\tilde{\chi}_{2\alpha}$ と $m_{f\alpha}$ を使って (11) - (14) 式は explicit に書く事ができる。

以上、厳密な関係を議論したが、次に4つのパラメターを estimate する。 $U > D$ で $E_B > J$ の場合を考えよう。この場合 spin fluctuation は 1 サイト的である。 E が J を超えて 1 サイト系のそれと置き換えても、order of magnitude の議論には正しいであろう。

$$\Sigma_0 = \mu - E_f + \Delta \cot\left(\frac{\pi}{2} n_f\right), \quad (16)$$

$$\tilde{\chi}_1 = \frac{\pi \Delta}{4 E_B} \operatorname{cosec}^2\left(\frac{\pi}{2} n_f\right) n_f \left\{ 1 + (1 - n_f)^2 \right\}, \quad (17)$$

$$\tilde{\chi}_2 = \frac{\pi \Delta}{2 E_B} \operatorname{cosec}^2\left(\frac{\pi}{2} n_f\right) n_f, \quad m_f = \infty \quad (18)$$

ここでパラメターは α に依らないので省略した。ここで $n_f \approx 1$ の場合は $\tilde{\chi}_1 \gg 1$, $\tilde{\chi}_2 \gg 1$ である。この事は charge fluctuation よりも spin fluctuation が主であると言える。そして spin fluctuation は 1 サイト的であるから (16) - (18) の estimation は 枠組として self-consistent である。

3. フェルミ液体理論の応用

伝導帯の数は2枚 ($r=2$) として、平行な分散を仮定する。

$$E_1(k) = E_c(k) + E_0, \quad (19)$$

$$E_2(k) = E_c(k) - E_0. \quad (20)$$

これは、糸が確実に金属となる最も簡単なモデルと思われ、 CeSn_3 等に可能性のあるモデルである。以下では、 Σ_c は展開形を使い $m_f = \infty$ と近似する。この条件下ではフェルミ面は1枚である。

このモデルで注目すべきは、準粒子質量が E_0 に大きく依存し、質量は E_0 の増加関数である。ケミカルポテンシアル付近の状態密度は、 f 電子は camel back 構造を、伝導電子は dip を持つ。この構造のエネルギー中は $\Delta/\tilde{\epsilon}_f$ の程度である。この量は、もし定義できるならば Kondo 温度の程度である。又、ケミカルポテンシアル付近の f 電子の状態数は $1/\tilde{\epsilon}_f$ 程度しかない。残りは裸のレベル E_f 付近と、 $E_f + U$ 付近にある。 E_f 付近の状態密度については dynamical 効果が必要でないので、CPA が有効であり、その計算によるものは Δ より幾分広い。

最後に、Ce原子をLa原子で置き換えた様な場合の残留抵抗をCPAで考える。

$$H_{\text{imp}} = \sum_{\{R_i\}} \Delta E_f f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} \quad ; \quad \Delta E_f \gg D, \quad (21)$$

f 電子のセルフエネルギーは2つの場合に分けられる。

$$\Sigma(\mu+i0) = \Sigma_{\sigma}(\mu+i0) + \Sigma_i(\mu+i0), \quad (22)$$

ここで、 $\Sigma_{\sigma}(\mu+i0)$ は不純物が存在する時の準粒子のセルフエネルギーであり、残りが $\Sigma_i(\mu+i0)$ である。 $\Sigma_{\sigma}(\mu+i0)$ は $T=0\text{K}$ で実数である事に注意。1サイト糸に於ては

$$\tilde{E}_f \equiv E_f + \Sigma_{\sigma}(\mu+i0) - \mu = \Delta \cot\left(\frac{\pi}{2} n_f\right) \quad (23)$$

である。 $\Sigma_i(\mu+i0)$ はCPAで計算して電気抵抗を求めろ。不純物の濃度 n_i が $10^{-2} \lesssim n_i < 1$ においては、結果は \tilde{E}_f の値に鈍感である。したがって、この領域では結果はCPAの範囲で信頼できる。

$n_i \ll 1$ ($n_i < \sim 0.3$) では、結果は E_0 に非常に敏感である。 E_0 が小さいと、つまり準粒子の質量が軽いと残留抵抗は小さい。逆に E_0 が大きいと残留抵抗が大きい。CPAで計算した $\Sigma_i(\mu+i0)$ の虚数部は n_i の増加に伴って小さくなる。伝導電子との混成効果より大きくなると、つまり

$$|\text{Im} \Sigma_i(\mu+i0)| > \frac{V^2}{E_0} \quad (24)$$

になると、抵抗は dilute limit から concentrated limit へ移る。concentrated limit (Ceは dilute) での残留抵抗は、近似的に