# 5. 荷電粒子の運動と直交定理

京産大理　桜　井　明　夫

金属中の荷電粒子の運動を論ずるには，その粒子をスクリーンする伝導電子の影響を取り入れる必要がある。たとえば場所 i から f へ荷電粒子が移動するとき，その遷移をあらわす行列要素 $w$ は，遮蔽電子の雲もまた移動することを考慮すれば，$w \to \widetilde{w} = |<\Psi_f|\Psi_i>|$ となる。[1] すなわち因子 $|<\Psi_f|\Psi_i>|$ の分だけ小さくなる。ここで $\Psi_i$ は場所 i に荷電粒子が居るときの，そのポテンシャルを受けた伝導電子の波動関数であり，$<\Psi_f|\Psi_i>$ は多電子系の重なり積分である。この重なり積分に関しては一般に直交定理として知られる重要な定理があるので，それを御紹介する。

直交定理は 1967 年 Anderson により最初に示された。それは局所摂動 $V$（散乱される電子のフェルミ面における位相のずれ $\delta$）を受けた伝導電子系（$N \to \infty$）の基底状態 $\Phi_f$ と，無摂動状態であるフェルミ球 $\Phi_0$ との直交性であった。[2] これを摂動の形で書けば，

$$
\begin{aligned}
|<\Phi_f|\Phi_0>| &= \exp\left\{-\frac{V^2}{2}\sum_{k,k'}\frac{f_k(1-f_{k'})}{(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'})^2}+\cdots\right\} \\
&= \exp\left\{-\frac{\rho V^2}{2}\log\frac{D}{\mu_+-\mu_-}+\cdots\right\} \equiv N^{-K} \to 0 \qquad (N \to \infty)
\end{aligned}
$$

ここで $\rho$ は伝導電子の状態密度，$D$ はバンド巾，$\mu_+$，$\mu_-$ はフェルミ面近傍のカットオフであり，有限の粒子数の系で想定される。フェルミ・レベル直上，直下の一電子レベルである。フェルミ面近くで低エネルギーの電子・正孔対励起が容易に起きることが，この直交性の由来である。上式を高次までまとめて位相のずれであらわせば，直交性の度合いを決める　は

$$
K = \frac{1}{2}\left(\frac{\delta}{\pi}\right)^2 = \frac{n^2}{2}
$$

となる。$n$ は荷電粒子をスクリーンするために集まってきた電子数であり，$\delta$ と Friedel の総和則により結ばれている。

Anderson の直交定理は山田・芳田の一連の仕事により，相互作用する伝導電子系に対して一般化され，又，球対称に限らず任意の局所摂動に対しても成立することが示された。[3] この一般化により荷電粒子の運動が扱えることになり，直交性を決める　は一般に，

$$K = -\frac{1}{8\pi^2}\,\mathrm{Tr}\,(\log\widehat{S}_\mathrm{f}\cdot\widehat{S}_\mathrm{i}^{+})^2 = K \quad (x,\ \delta)$$

のように，場所 i，f における散乱行列 $\widehat{S}_\mathrm{i}$，$\widehat{S}_\mathrm{f}$ により厳密に表わされることが判った。右辺はこれが位相のずれ $\delta$ と粒子の移動距離 $a = |\,r_\mathrm{i} - r_\mathrm{f}\,|$ の関数として書けることを示したもので，$x = \mathrm{j}_0^2\,(k_\mathrm{F}\,a)$（$\mathrm{j}_0$ は 0 次救ベッセル関数，$k_\mathrm{F}$ はフェルミ波数）である。実際，$K(x,\delta)$ は散乱が単一部分波 $l_0$ に限る場合，閉じた形で求められ，スピンの自由度を含めて次のようになる。[4)]

$$K(x,\delta) = 2\,(2\,l_0+1)\left\{\frac{1}{\pi}\tan^{-1}\left[\frac{\sqrt{1-x}\,\tan\delta}{\sqrt{1+x\,\tan^2\delta}}\right]\right\}^2, \qquad (\delta \le \frac{\pi}{2})$$

$$= 2\,(2\,l_0+1)\left\{\frac{2}{\pi}\tan^{-1}\sqrt{\frac{1-x}{x}} - \frac{1}{\pi}\tan^{-1}\left[\frac{\sqrt{1-x}\,|\tan\delta|}{\sqrt{1+x\,\tan^2\delta}}\right]\right\}^2, \qquad (\delta > \frac{\pi}{2}).$$

この式から判るように $K\,(x,\ \delta)$ は $x$ の減少関数，$\delta$ の増加関数であって｛ ｝内は常に 1 より小さい。

さて以上の直交定理は，粒子数 $N\to\infty$ の極限での多電子波動関数の重なり積分を，漸近的に厳密に与えるものであった。系が有限温度（$=T$）にある場合や，摂動が有限時間（$=t$）だけ働く場合には，$N=\infty$ であってもフェルミ面近傍での電子レベルのぼやけがカットオフとなり，低温あるいは長時間の極限で重なり積分はそれぞれ

$$|<\Psi_\mathrm{f}\,|\,\Psi_\mathrm{i}>| = \left(\frac{kT}{D}\right)^K \qquad (T\to 0)$$

$$= (\,Dt\,)^{-K} \qquad (\,t\to\infty\,)$$

のようになる。従って荷電粒子の移動をあらわす行列要素 $\widetilde{w}$ も特徴的な温度依存性を持つ。これを反映し金属中の $\mu$ 粒子の拡散係数には $T^{2K-1}$ に比例する温度依存性があることが本研究会で近藤，山田により示された。

一方，粒子のバンド的ないしトンネル的運動を $T=0$ で考察するとき，各場所に粒子が滞在する時間 $t$ を $1/\widetilde{w}$ で見積ると，$\widetilde{w}/w = (\,\widetilde{w}/D)^K$ をセルフコンシステントに解いて，

$$\widetilde{w}/w = (\,w/D\,)^{K/1-K} \qquad K<1$$

$$= 0 \qquad K\ge 1$$

となる。すなわち $K\ge 1$ のとき荷電粒子が局在する可能性がある訳で，$K(x,\ \delta)$ の一般形とフ

リーデルの総和則を用いて調べると，荷電$\geq 2|e|$の粒子が$s$波で遮蔽されるときこの自縄自縛が起ることが判る。共鳴光放出の実験から，CuやNi中で2つのdホールが束縛状態をつくって局在すると推定されているが，直交定理による局在の可能性がある。

文　献

1) J. Kondo, Physica **84B** (1976) 40, 207.
2) P.W. Anderson, Phys. Rev. Lett **18** (1967), 1049.
3) K. Yamada and K. Yosida, Prog. Theor. Phys. **60** (1978) 353, **68** (1982), 1504.
4) K. Yamada, A. Sakurai and M. Takeshige, Prog. Theor. Phys. **70** (1983), 73.

# 6. $\mu^+$の拡散－密度行列の方法

基研　山　田　耕　作

## 1. はじめに

鉄中の$\mu^+$の拡散は以前，藤井・植村[1]によってKagan-Klinger達[2]の密度行列の方法を用いて議論された。その時は$\mu^+$の電荷を遮蔽する伝導電子の役割には大きな注意をはらわれなかった。最近，低温での$\mu^+$の拡散の実験が進歩し，銅やアルミニウム中でいわゆるCoherent Diffusionと呼ばれる温度の低下と共に速く拡散する事実が明らかにされた。[3] 10Kから0.1K位までの低温で$\mu^+$の拡散を支配するものとして，金属の格子振動との相互作用を考えると実験で観測される$T^{-\alpha}$($0<\alpha<1$)というゆるやかな温度変化を説明できない。$\mu^+$と相互作用をする他のものとしては金属中の電子以外に考えられない。[4,5] そこで，上記の密度行列を用いた議論に伝導電子の効果を含めて金属中の$\mu^+$の拡散を議論したい。

## 2. 電子との相互作用も含めた密度行列の方法による$\mu^+$の拡散

電子と格子を含めた断熱ポテンシャル$U_0$の谷（銅やアルミニウムのような面心立方の金属中では正八面体位置）の間を$\mu^+$はトンネル効果によって移動すると考える。

$$(K+U_0)\,|\,\boldsymbol{n}> = \varepsilon_{\boldsymbol{n}}\,|\,\boldsymbol{n}> + J_0\sum_{\boldsymbol{g}}|\,\boldsymbol{n}+\boldsymbol{g}>, \tag{1}$$

$K$は運動エネルギーで，$|\,\boldsymbol{n}>$は$\boldsymbol{n}$という格子点にある$\mu^+$の波動関数，$J_0$は他の格子点にトンネルする行列要素とする。この時，低温では$\mu^+$は格子のひずみと伝導電子の雲を伴って移動