

金属表面近傍で運動する原子または分子による全電子系の非断熱効果を議論する為に時間に依存するニューズ・アンダーソン模型が最近よく用いられる。この模型によれば電子系に対するハミルトニアンは原子（又は分子、以下単に原子と呼ぶ）の運動を反映する時間に依存するパラメーターを含む事になる。予め原子の運動を定めておいて電子系に対するハミルトニアンのパラメーターの時間依存性を与えようというわけで、この近似は軌道近似と呼ばれる。原子の運動と電子系の非断熱効果の結果に関連して不合理な結果を与える場合が有り問題を残しているが、現在の所適当な取り扱いがないままに軌道近似は非常によく用いられている。この模型に対するハミルトニアンは次のように与えられる。

$$H(t) = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_{k\sigma} + \sum_a \epsilon_a(t) \hat{n}_{a\sigma} + \sum_k [V_k(t) c_{k\sigma}^\dagger c_{a\sigma} + \text{h.c.}] + U(t) \hat{n}_{a\uparrow} \hat{n}_{a\downarrow}, \quad (1)$$

ここで記号は標準的なもので（たとえば、Brako, Makoshi, News 1984）、原子の上での電子間のクーロン相互作用、 $U$ 、も時間に依存するようになっているのは、例えば古典的な鏡影電荷によるスクリーニングが金属表面からの距離による為である。

ハミルトニアンが時間によらない場合のこの問題は今や厳密解が得られているわけであるが、時間に依存する場合は  $U=0$  の場合でさえ厳密な表式が得られていない場合がある。

(1) から出発して計算され、表面物理で問題となる物理量は現在までの所2種類に帰着される。一つは原子上の電子の占有数の期待値で、もう一つはエネルギー散逸である。

時間に依存するシュレーディンガー方程式の解を  $\Psi(t)$  として、必要な期待値は占有数に関しては、

$$n_{\sigma}(t) = \langle \Psi^\dagger(t) | \hat{n}_{a\sigma} | \Psi(t) \rangle, \quad (2)$$

で与えられ、エネルギー散逸については、

$$P(\epsilon) = \langle \Psi^\dagger(\infty) | \delta(\epsilon - H(\infty)) | \Psi(\infty) \rangle, \quad (3)$$

で与えられる。後者はAndersonの直交定理で代表されるフェルミ面効果を含んでおり、Nozieresとde Dominicisに依って解かれた吸収端異常の問題を特別な場合として含むような厳密と思われる漸近解は得られているものの、任意の時間依存性を持つパラメーターを含むハミルトニアンに対しては厳密なエネルギー散逸の表式はまだ得られていない。

一方電子の占有数の期待値に関してはエネルギー散逸の場合のようなフェルミ面効果は存在せず、一体問題を解いて初期条件としてフェルミ分布を与えれば十分であることがBlandin, Nourtier, Hone (1976)によってKeldyshグリーン関数を用いて示された。 $U$ が有限の場合は当然のことながら問題は非常に難しく、Yamada, Yosida (1978)によって直交定理の拡張が見事に証明されているだけである。平衡状態での厳密解をうまく時間に依存する場合に応用する試みもなされているが(Okiiji, A. and Kawakami, N. 1984),我々は

手始めとして時間に依存する平均場近似を用いて幾つかの簡単な場合を調べた(Makoshi, Kawai, Yoshimori 1984, Yoshimori, Makoshi, Kawai 1984, Yoshimori, Kawai, Makoshi 1984)。その中の興味のある幾つかの場合を紹介する。系のハミルトニアンは相互作用も一体の部分に近似されて、

$$H(t) = \sum \epsilon_{k\sigma} \hat{n}_{k\sigma} + \sum \epsilon_{\sigma}(t) \hat{n}_{a\sigma} + \sum [V_k(t) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{a\sigma} + \text{h.c.}],$$

$$\epsilon_{\sigma}(t) = \epsilon_a(t) - \sigma \epsilon_m + U(t) n_{-\sigma}(t), \quad (4)$$

のようになる。ここで原子上の状態のエネルギー準位は磁場に相当する項を含んでいる。これはもしこの項がなければ初期条件によってはスピン空間で系が対称になっつてしまい、平均場近似の磁気的な解へ全然行かない場合があり、その為に導入されたものである。占有数の期待値は所謂wide band limit、

$$V_k(t) = V_k u(t), \quad \Delta(\epsilon) [\equiv \pi \sum_k |V_k|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_k)] = \Delta, \quad (5)$$

では、次のような表式に得られ、

$$n_{\sigma}(t) = ik_B T \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^t dt_2 u(t_1) u(t_2) \exp[i \int_{t_2}^{t_1} dt_3 \epsilon_{\sigma}(t_3) - \int_{t_1}^t dt_3 u(t_3)^2 - \int_{t_2}^t dt_3 u(t_3)^2] / [\sinh\{\pi k_B T(t_1 - t_2 + i0^+)\}]$$

$$+ n_{\sigma}(-\infty) \exp[-2 \int_{-\infty}^t dt_3 u(t_3)^2], \quad (6)$$

は初期条件で与えられる。ここで $\Delta = 1$ 、 $\hbar / \Delta = 1$ 、即ちエネルギーは $\Delta$ を単位とし、時間は $\hbar / \Delta$ を単位としてパラメーターを表わした。この表式は右辺にも占有数が含まれていて、占有数を時間の関数として定める為の非線形の積分方程式で、時間に依存する平均場の近似の基本方程式である。我々はここではこれを簡単な場合に数値的に解く、即ち適当な時間の関数としての占有数を仮定し、上の式で占有数を計算して再びこれを出発点とする。これを収束するまで繰り返して解を求める。ここで最も簡単な場合として、

$$u(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 & t > 0 \end{cases}, \quad (7)$$

と仮定し、初期条件として  $n_{\uparrow}(0) = n_{\downarrow}(0) = 0$  を与えたときの解を第1図に示した。ここでパラメーターは平衡状態での所謂磁気的な解を安定にするような値に取っており、初期条件がスピンに関して対称であるのでこのまま数値解を求めても磁気的な解に到達しないので、 $\epsilon_m$  を有限に取り、0.001, 0.01, 0.1の場合を計算した。

この結果には幾つかの特徴的な事がある。時間変化に3段階が有り、第1段階では電荷の流入が起こり、次いでスピンの分極が始まり、最後に振動しながら平衡値に近かずく。

第2の段階は $\epsilon_m$ の大きさに支配されており、 $\epsilon_m$ の3つの場合は最終段階の曲線が等間隔にずれている。第2段階はスピンの分極の成長の時間変化が指数関数的に起こるとして説明する事ができ、また最終段階も平衡状態からのずれが小さいとして説明する事ができる。以下に簡単にそれを述べる。

まずスピン分極の指数関数的な成長は(6)を書き直した

$$n_{\sigma}(t) = -\frac{1}{\pi} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \frac{\exp(-2t+t_1+t_2)}{t_1-t_2} \sin\left[ \int_{t_2}^{t_1} \epsilon_{\sigma}(t') dt' \right] + \frac{1}{2} [1-\exp(-2t)], \quad (8)$$

で被積分関数を

$$\int_{t_2}^{t_1} \epsilon_{\sigma}(t') dt' = \epsilon_{\sigma} \left( \frac{t_1+t_2}{2} \right) (t_1-t_2), \quad (9)$$

のように近似する事により次のような微分方程式を得、

$$\ddot{m}(t) + 4\dot{m}(t) + 4\left(1-\frac{U}{\pi}\right)m(t) = \frac{4}{\pi}(2-e^{-t}),$$

$$m(t) = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})/\epsilon_m, \quad (10)$$

初期条件●

$$m(0) = \dot{m}(0) = 0, \quad (11)$$

を与えて解いた解の漸近形

$$m(t) \propto \exp[2((U/\pi)^{1/2} - 1)t], \quad (12)$$

で理解できる。当然のことながら、指数関数的な成長が磁気的な解が安定に存在する条件の下で起こるようになっているが、興味があるのはUの平方根のようなU依存性が現われることで、もしかすると厳密な取り扱いでもUの大きいところで適当な対応する量にこのような依存性が現われるかもしれない。数値的に得られた解と上記の近似解との比較は第2図に示した。

次に最終段階で振動が現われることであるが、これは次のようにして理解できるようである。(6)式から出発して占有数の平衡値からのずれが小さいとして1次までの範囲内

で次のような積分微分方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{dX_{\sigma}}{dt} &= \frac{2}{\pi} \int_t^{\infty} dt' \frac{\exp(-t')}{t'} \sin(E_{\sigma} t') - 2X_{\sigma} - \int_0^t dt' K_{\sigma}(t, t-t') X_{-\sigma}(t'), \\ X_{\sigma}(t) &= n_{\sigma}(t) - n_{\sigma}(\infty), \\ E_{\sigma} &= \varepsilon_a - \sigma \varepsilon_m + U n_{-\sigma}(\infty), \\ K_{\sigma}(t, t-t') &= \frac{2U}{\pi} \int_{t-t'}^t d\tau \frac{\exp(-\tau)}{\tau} \cos(E_{\sigma} \tau). \end{aligned} \quad (13)$$

$t$ が大きいとして右辺の第1項を無視し、積分核にもその近似を用いると、

$$X_{\sigma} = A \exp(-t) \sin(yt + \phi), \quad (14)$$

のような解が得られる。積分定数を数値解の2点で定めた時の  $U=4.1$  及び  $U=16$  の場合の比較を第3図に示した。 $y$ は  $U$ が大きい所で、漸近的に  $y=U/2 - (U/4)\exp(-\pi U/4) \dots$  のように与えられるのは興味がある。 $y$ は  $U$ が  $3.84 \dots$  より小さいところでは  $0$  になってしまう。

時間に依存する平均場の近似の範囲内ではあるけれど、幾つかの興味ある結果が得られた。占有数が平衡値からのずれが小さい時の結果は振動数に依存する帯磁率に関係している筈で、この量には厳密に結果が得られている場合もあり、比較は興味があり検討中である。

### 文献

- Brandin, A. Nourtier, A. and Hone, D. 1976, J. Phys. (Paris) 37, 369.  
 Brako, R. Makoshi, K. and Newns, D. M. 1984, J. Vac. Sci. Tech. in press, Proc. ICVC Madrid.  
 Makoshi, K. Kawai, H. and Yoshimori, A. 1984, J. Phys. Soc. Japan 53, 2441.  
 Okiji, A. and Kawakami, N. 1984, Proc. VII Taniguchi Symposium (Springer Verlag) 83.  
 Yamada, K. and Yosida, K. 1978, Prog. Theor. Phys. 60, 353.  
 Yoshimori, A. Kawai, H. and Makoshi, K. 1984, Prog. Theor. Phys. Supple. in press.  
 Yoshimori, A. Makoshi, K. and Kawai, H. 1984, Proc. VII Taniguchi Symposium (Springer Verlag) 69.

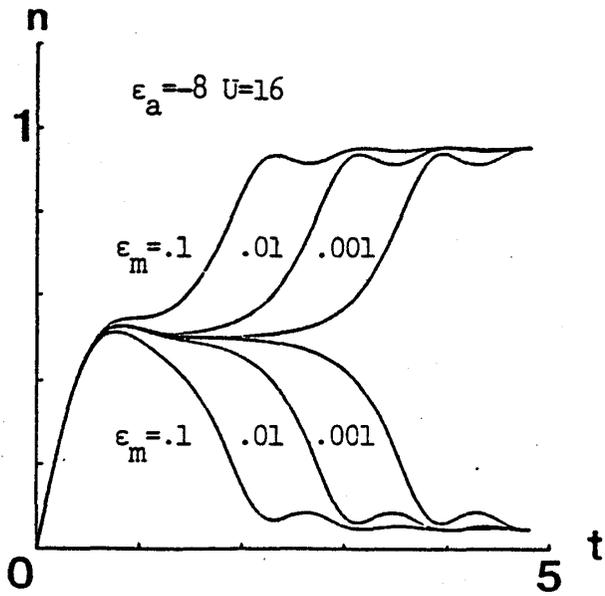


図 1

2つの実線は、それぞれupスピンとdownスピンの電子の占有数に対応している。

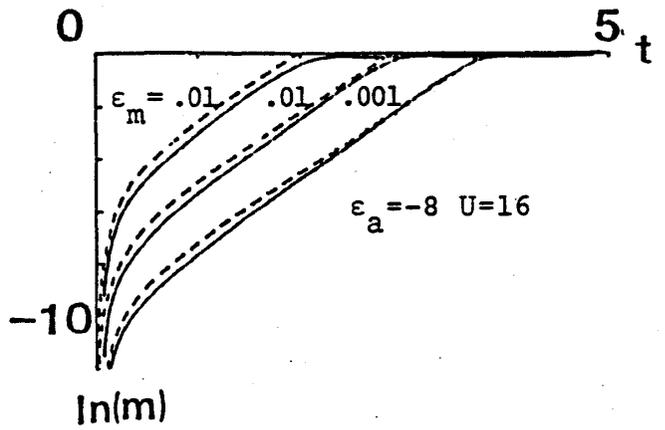


図 2

実線は、(8)を数値計算した結果であり、点線は、(10)を解いた結果である。

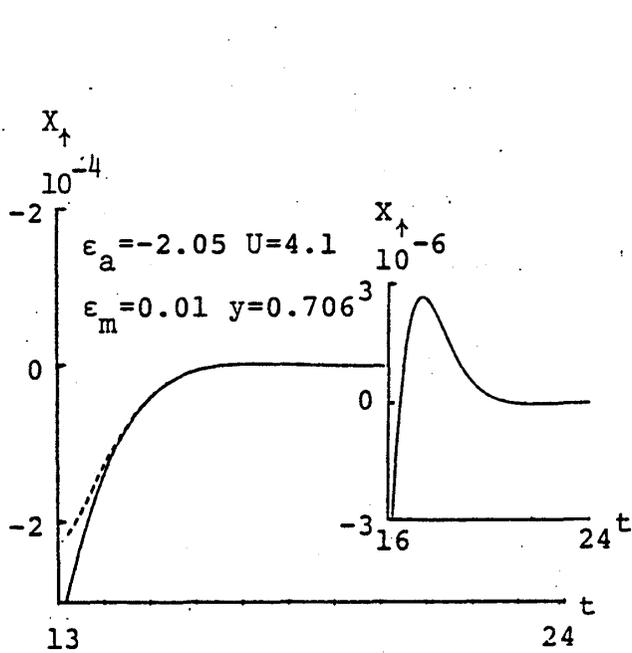


図 3 (a)

実線は数値計算の結果により、点線は(14)による。(a)には、一部分を拡大したものを示した。

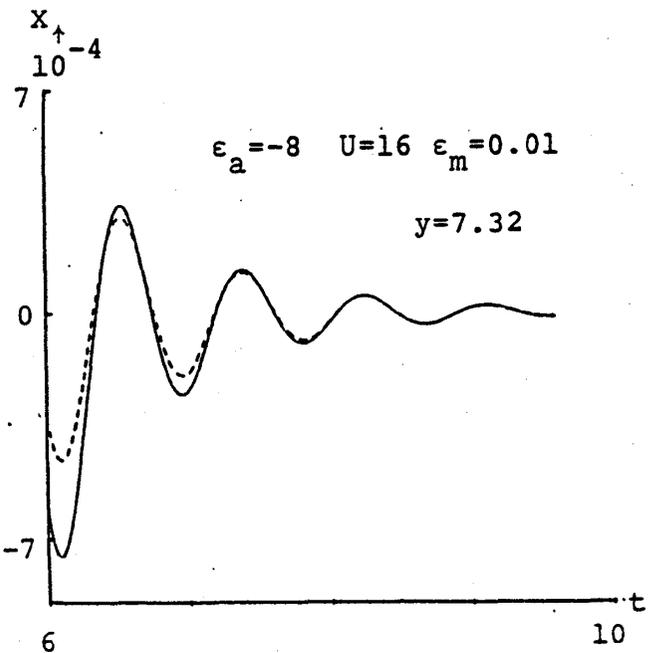


図 3 (b)