

マンダーリンモデルの汎関数積分法 による取り扱い

阪大・理・梶 壽 史

序)

この研究の本来的目的は、巡歴電子磁性(主に遷移金属)における振幅の大きな量子的なスピンのゆらぎを取り扱う有効な方法を汎関数積分法を用いて開発することにある。

ある種の遷移金属合金においては、不純物の磁性状態に対する複数個の平均場解と見ることがある^{1),2)}。典型的な場合断熱ポテンシャルは不純物のモーメントの関数としてダブルミニマムの形になるが、問題は両極小間のポテンシャル差、 ΔE , が局所環境、合金の濃度にしたがって変化し、非常に小さくなりうることにある。 ΔE がポテンシャルの山をたぬくトンネル現象の振動数、 ω , に近づくと、トンネル効果、いかえれば“局所的ではあるが”振幅の大きな量子的なスピンのゆらぎ(LQSF)を取り入れる必要が生じる。こうしたLQSFはノーマルな金属中に局在すると、Kondo効果で問題となるゆらぎと同一であり、理論はマンダーリンモデルに適用すると、たとえば厳密解から得られる結果を再現する必要がある。

こうしたLQSFを取り扱うために、我々はHS変換を通じた汎関数積分法を用いた。同法を用いるメリットは(1)量子化の一般的方法としておと広いモデルに適用され得る、(2)まわりの磁化の影響を取り入れられる、(3)動的な性質、たとえば動的帯磁率等について議論できる、(4)温度の効果も簡単に取り入れられる等である。特に高温では有効と考えられるstaticな近似の枠内で遷移金属の性質が議論されてきており、それに対して量子効果を取り入れる意味からも望ましい。

(マンダーリンモデルの)
汎関数積分法(FIHS)で状態和は

$$\mathcal{Z} = \int_{\Omega} \exp(-\mathcal{E}(\xi)) \delta\mu(\xi) \quad [1]$$

の形で書ける。ここで $\xi = \xi(\tau)$ は内部磁場のpathを示す $[0, \beta]$ で定義された関数で、 $\mathcal{E}(\xi)$ は一体の d -電子のグリーン関数 $G_0(\tau - \tau')$ を使って

$$\mathcal{E} = -\text{Tr} \int_{\sigma=\pm 1} \ln [\delta(\tau - \tau') - \sigma \xi(\tau) G_0(\tau - \tau')] \quad [2]$$

と書ける。Trは虚数時間 $[0, \beta]$ にわたって対角和を取ることを意味する。測度 $\delta\mu$ は似下で定義される。

$$\delta\mu(\xi) = \exp\left\{-\frac{1}{2U} \int_0^{\beta} \xi^2(\tau) d\tau\right\} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{\ell=1}^N \sqrt{\frac{\beta}{2\pi N}} d\xi(\ell\beta/N) \quad [3]$$

(1) 関数空間, Ω

積分を実行する時, はじめに積分領域, Ω (関数空間) を明確にする必要がある。その上での被積分関数 $\exp(\Phi)$, のふるまいを調べなければならぬ。近似は被積分関数の単純化の中に集約し, 積分領域は正確に考慮するのが自然であり, 明解である。

$\delta\mu(\xi)$ を調べることにより次のことが分かる。

[1] 連続な関数の集合は測度 0

[2] 有界な関数の集合でも, 0

[3] $L_1\left(\int_0^{\beta} |\xi(\tau)| d\tau < \infty\right)$ class の関数を含めることにより $\mu=1$ になりうる。

[1] の条件から関数, Φ , は不連続な関数に対しても有界であるとはならない。以前, Hamann³⁾ 及び Hamann-Schrieffer⁴⁾ がアンダーリンモデルを関数積分法を用いて議論したか, その時の Φ はこの条件を満足しない。すなわち, Ω のほとんどすべてで, 被積分関数は 0 であり, こうした Φ を使うかぎり状態和, $Z(\log [1])$ は 0 にしかならない。彼らの"まちがい"は d-電子のグリーン関数の漸近形から Φ をもとめたことによる。s-電子に関していえば, Kondo-limit で Fermi level 付近 ($\sim T_K$) のみの電子が重要であるが, d-電子はスピンをつくるという重要な働きがあり, そのために $1/U$ 程度の時間スケールの運動を無視できない。物理的に無意味なことをするかぎり, 数学的に無意味な結果となることも不思議はない。アンダーリンモデルを拡張して断熱ポテンシャルにむと速い時間スケールのゆらぎの効果を含めて独立のパラメータとして取り扱えば, 以下の項で述べる様に, 彼らの"まちがい"はより明確になるであろう。(Kondo 温度, T_K , あるいはゆらぎを特徴づける振動数, ω_c , は断熱ポテンシャルのバリアーの高さによるであろうか 幅によつて異なるであろうか)

[2] の条件から, Φ の局所的な性質は価値がなくなる。 Φ の関数の大きさ (ゆらぎの振幅) に関する展開の収束半径は有限であるので, 本来的振動的なアプローチは意味がない。このことはフーリエ相互作用の定数, U , の振動展開が不可能であることとすぐたは意味しないが, 可能であることの証明にも成功していない。いずれにしてもポテンシャルの山とこえる大きなゆらぎを"必ず"取り入れる必要がある。

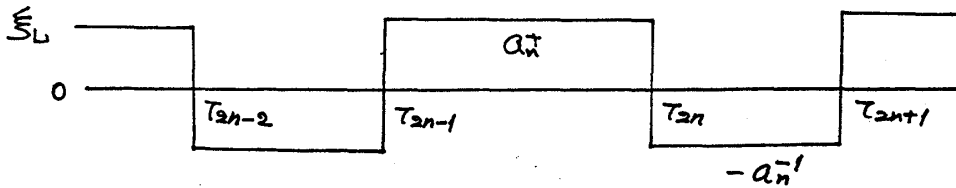
エレクトロニホール対称性を持つアンダーリンモデルにおける,

最も簡単な大きなゆらぎを表わす関数, $\xi_L(z)$, は以下で示す様なステップ型のものである。

$$\xi_L(z) = a_n^+ \quad \tau_{2n-1} < z < \tau_{2n} \quad [4]$$

$$\xi_L(z) = -a_n^- \quad \tau_{2n} < z < \tau_{2n+1} \quad [5]$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, N; \quad N = 0, 1, 2, \dots, \beta/2\Delta \quad \tau_{1+\beta} = \tau_{2N+1}$$



ここで, Δ は $\ll \omega a^l$ である定数. $\xi=0$ の位置はポテンシャルの maximum 点である. $\{a_n^{\pm}\}$ は連続な正の変数である. 任意関数, $\xi(z)$, はこれに最も近い $\xi_L(z)$ とそれからの変化, $\phi(z)$, によって書かれる。

$$\xi(z) = \xi_L(z) + \phi(z) \quad [6]$$

すなわち

$$\int_{\tau_i}^{\tau_{i+1}} \phi(z) dz = 0 \quad i = 1, 2, 3, \dots, 2N \quad [7]$$

$$\xi(z) > 0 \quad \tau_{2n-1} < z < \tau_{2n} \quad [8]$$

$$\xi(z) < 0 \quad \tau_{2n} < z < \tau_{2n+1} \quad [9]$$

$\{\tau_n\}$ の set を与えると, Ω の subspace, $\Omega_{N, \{\tau_n\}}$ が定義できる。

$\Omega_{N, \{\tau_n\}}$ は上の形の関数からできているが, $\phi(z)$ はポテンシャルの山と谷に依るので, $\phi(z)$ に関する静的近似 (0次の展開) や低い次数の展開が有効であると期待できる. いいかえれば, Ω 全体的では展開は意味はないが subspace $\Omega_{N, \{\tau_n\}}$ 内部では静的近似や低い次数の展開が意味を持つ. ここでは, $\Omega_{N, \{\tau_n\}}$ 内部では静的近似を行ない各 subspace からの寄与を数値的に和する。

$\Omega_{N, \{\tau_n\}}$ の set Ω_N を考える. Ω_N は平均周期, β/N を持つ大きなゆらぎ, ξ_L , をすべて含む. Ω_N からの寄与はこの周期を持つ大きなゆらぎの重要性を示唆する。

(2) 汎関数, Φ

Φ はダイソニ方程式

$$G_{\xi}(z, z') = G_0^{\circ}(z, z') + \int_0^{\beta} G_0^{\circ}(z, z'') \xi(z'') G_{\xi}(z'', z) dz'' \quad [10]$$

から求まるグリーン関数, $G_{\xi}(z, z')$, を用いて

$$\Phi = - \int_0^{\beta} \int_0^{\beta} \xi(z) \{ G_{\xi}(z, z-0) - G_{\xi}(z, z-0) \} dz dz' \quad [11]$$

と書ける。 G_{ξ} を求めるためには演算子, $[\delta - G_0^{\circ} \xi]$, あるいは $[\delta - \xi G_0^{\circ}]$, の逆演算子

$$[\delta - G_0^{\circ} \xi]^{-1} = \delta + \vec{K} \quad [12]$$

$$[\delta - \xi G_0^{\circ}]^{-1} = \delta + \overleftarrow{K} \quad [13]$$

が必要であるが, ここで \vec{K} および \overleftarrow{K} が満足する次の恒等式に注目する。

$$\vec{K} = \vec{K}_{\xi_0} + \vec{K} (\delta - \xi_0^{-1} \xi_0) (\delta + \vec{K}_{\xi_0}) \quad [14]$$

$$\overleftarrow{K} = \overleftarrow{K}_{\xi_0} + (\delta + \overleftarrow{K}_{\xi_0}) (\delta - \xi_0 \xi_0^{-1}) \overleftarrow{K} \quad [15]$$

ここで \vec{K}_{ξ_0} は定数, ξ_0 , に対する \vec{K} である。右辺の $\vec{K}, \overleftarrow{K}$ に非摂動のグリーン関数 G_0° , を

$$G_0^{\circ} = - \frac{\pi}{\beta} \frac{A(z-z')}{\sin \frac{\pi}{\beta} (z-z')} \quad [16]$$

と書いた時, $\vec{f}(z, z'') = \frac{1}{\pi} \arctan(\pi A(z-z'') \xi(z''))$, $\overleftarrow{f}(z', z) = \frac{1}{\pi} \arctan(\pi \xi(z') A(z-z))$ の最低次で得られるものを用い

$$G(z, z-0) = G_0^{\circ} + \frac{1}{2} \{ \vec{K} G_0^{\circ} + G_0^{\circ} \overleftarrow{K} \} \quad [17]$$

を求めた後, $\xi_0 \rightarrow \xi(z)$ とする。漸近的には (フェルミ面付近の寄与の部分) Hamann 等の漸近形近似から得られたものと一致し, $O(1/\xi(z))$ 程度の時間スケールの変化に対してもよい近似になっている。当然, 非連続な関数に対しても Φ は有界である。

(3) 状態和, \mathcal{Z}

各 Ω_N からの各の寄与を \mathcal{Z}_N として状態和は

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \mathcal{Z}_N = \sum_{N=0}^{\infty} \exp(-\beta F_N) \quad [18]$$

の形にかける。十分高温においては、($\gg \omega_c$), $\Omega_{N=0}$ からの寄与が最大であり、大きなゆらぎは重要でなく静的近似が有効であると期待される。温度が下がるにつれて、最大の寄与とする Ω_{N^*} の N^* は増えていき、低温では β に比例し、 β/N^* が ω_c に対応することになる。

(1)項で説明した $\chi_L(\omega)$ にステップ型の関数を用い $\Omega_{N, \text{int}}$ 内では静的近似を適用する方法は、 $U \rightarrow 0$ で当然厳密に正確になると同時に、 $U \rightarrow \infty$ では $\phi(\omega)$ が相対的に小さくなるので「正しい表現」となる。実際、 $U \rightarrow \infty$ でよく知られた $s-d$ モデルの Anderson-Yuval 型の状態和の表現と与える。ただし、正しく $s-d$ モデルに近づけるのは非擾動の d -電子の状態密度あるいは s -電子の状態密度に幅が定義できる場合のみであることが分かる。

この limit での低温の比熱と帯磁率との比もこうした近似の下に正しく求まる。

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{T \chi(0)}{C_V} = \frac{\frac{1}{2} (g \mu_B)^2}{(k_B T)^2} \quad [19]$$

任意の U の値の場合は数値的な議論とするしかないが、静的帯磁率の低温での種々の U に対する値、温度変化等の厳密解との一致もよい。その他動的帯磁率、 d -電子のグリーン関数及び自己エネルギー等の議論もできる。

こうして定性的にも定量的にも正当化された大きなゆらぎの取り入れ方を用いて遷移金属等における LQSF の効果を考える。以下次の事実のみを記す。

- ① single-orbital モデルでは $\omega_c \sim 10^1 \text{ eV}$ 。
- ② この様な大きな ω_c では鉄も強磁性たりえない。
- ③ Multi-orbital の効果を取り入れて $\omega_c \sim 10^2 \text{ eV}$ になり得る。

強磁性鉄中のマンガンの静的、動的ふるまいはマンガン atom に局在した $\omega_c \sim 10^2 \text{ eV}$ 程度の LQSF の存在で統一的に理解できる。その他の遷移金属合金でもこの程度の磁的相互作用は得られており、NiFe 系の場合も LQSF の効果を考慮する必要がある。

索 引

- 1) T. Jo and H. Miwa, J. Phys. Soc. Japan 40 (1976) 706
- 2) T. Jo, J. Phys. Soc. Japan 40 (1976) 715
- 3) D. R. Hamann, Phys. Rev. B2 (1970) 1373
- 4) D. R. Hamann, and J. R. Schrieffer "Magnetism V" e.d. G. T. Rado and Harry Suhl