Title	軌道縮退のあるアンダーソンモデルの厳密解 : spin-orbit coupling,結晶場の入った場合(アンダーソンモデルの厳密解とその応用に関する理論的研究,科研費研究会報告)
Author(s)	川上, 則雄; 興地, 斐男
Citation	物性研究 (1985), 43(6): 2-9
Issue Date	1985-03-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/91531
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

軌道縮退のあるアンダーソンモデルの厳密解
~ spin-orbit coupling，結晶場の入った場合 ~

阪大工　川上則雄，興地斐男

§1 はじめに

一次元系の問題で古くから用いられてきたBethe仮説の方法は1980年代になってs-dモデル，アンダーソンモデル等の不純物モデルに適用され大きな成功を収めてきた[1~7]。さらにこの方法を用いた取り扱いはCoqblin-Schriefferモデル[3,8~10]や強相関縮退アンダーソンモデル[11~14]等の，不純物原子内での軌道縮退を含んだcaseにも拡張された。これらの軌道縮退を含んだモデルはCe(Yb)不純物系や，さらに最近話題となっている価数揺動系(高密度近藤系)の研究と関連して近年熱心に研究が為されているモデルである。現在までの研究で軌道縮退の効果によって物理量の温度変化に質的な変化が生じることが分かっている[10,13,14]。例えば帯磁率$\chi(T)$はスピン$\frac{1}{2}$のs-dモデルの場合，温度の単調減少関数であるが，縮重度νが増えてゆくと[Coqblin-Schriefferモデル]，$\chi(T)$は有限温度でピークを持つ様になり，さらにνの増加と共にこのピーク構造が顕著になる[10]（縮退アンダーソンモデルも同様の傾向を持つ[13,14]）。この様なピーク構造はTh中のCe不純物の$\chi(T)$に関して観測されており[15]，また高密度近藤系においてもこれに似た振舞がみられる。

上に述べた軌道縮退モデルでは結晶場の効果は無視されているが，この結晶場の効果もそれと同程度の低温になると無視できなくなると考えられる。結晶場の効果を取り入れたCe(Yb)不純物系の低温での取り扱いはかなり以前に小川・吉森によって為されている[16]。最近その方法を用いて高密度近藤系に対する結晶場の効果が，山田・芳田・半沢によって調べられ[17]，近藤温度より結晶場がかなり大きくても，結晶場の効果が基底状態の物理に大きく反映されることが明らかにされた。これより少し後に，結晶場の効果を含めた場合も，縮退アンダーソンモデルの厳密な取り扱いが可能である事がSchlottmannにより指摘され，基底状態の性質が調べられた[18]。その結果は山田らによって得られた答と一致している。ここではSchlottmannの考えをもう少し一般化し，spin-orbit coupling，結晶場，磁場が存在する場合の縮退アンダーソンモデルの熱力学的な取り扱いを紹介する。§2でBethe仮説による対角化について簡単に触れ，§3で有限温度の定式化を行い低温での電子比熱の表式を求める。§4では具体的な応用例として立方対称場におけるCe不純物を取り上げフェルミ流体的関係式を導く。

§2 Bethe仮説を用いた対角化

ここで扱うモデルは次のハミルトニアンで記述される強相関縮退アンダーソンモデルである。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_W , \qquad (1)$$

$$\mathcal{H}_A = \sum_{k,m} \epsilon_k C^+_{km} C_{km} + V \sum_{k,m} \left[C^+_{km} C_{fm} + C^+_{fm} C_{km} \right] + \epsilon_f \sum_m C^+_{fm} C_{fm} + U \sum_{m \neq m'} C^+_{fm} C_{fm} C^+_{fm'} C_{fm'} ,$$

但し$U \to \infty$。ここでC^+_{fm}はν重に縮退した局在f電子の生成演算子でmは縮退した状態を分類するsuffixである。伝導電子の状態は部分波を用いて表示しており（生成演算子C^+_{km}）同じsuffix mを持つf電子とのみ混成が生ずると仮定する。ハミルトニアン第二項の$\mathcal{H}_W$は，

spin-orbit coupling，結晶場，磁場による寄与をまとめたものである。

Bethe仮説による不純物系の対角化はAndrei[1]とWiegmann[2]によって最初に指摘された様に伝導電子のdispersionが$\epsilon_k \propto k$〔即ち状態密度一定〕の時のみ可能である(軌道縮退がある場合も事情は同じ)。この条件の下でハミルトニアン(1)の対角化は$\mathcal{H}_w=0$の時[11]とほとんど同様に実行できるが，以下にその考え方を簡単にまとめる。先ず(1)式のハミルトニアンで$V=0$の場合を考える。この場合ν重に縮退したfレベルは$\mathcal{H}_w$によって分裂しているが，そのenergy splittingをW_m $(1\le m\le \nu)$と表わすことにする。但しW_mは

$$W_1\le W_2\le\cdots\le W_\nu\ ,\qquad \sum W_m=0 \qquad (2)$$

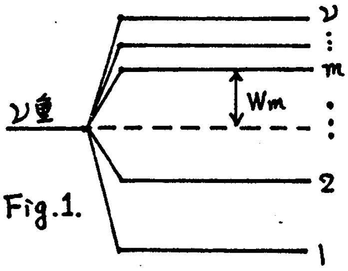

Fig.1.

を満足する様に選ぶ(Fig.1)。固有値W_mとそれに対応する固有関数$|m\rangle$は$\mathcal{H}_w$を具体的に与えることによって求まる。この固有関数$|m\rangle$をbaseにとり，ハミルトニアン(1)に現われているsuffix mをW_mで分類されたmと考える。この様なbase $|m\rangle$を用いることにより($\mathcal{H}_w$について対角的)，$\mathcal{H}$の対角化は$\mathcal{H}_w=0$の時と全く平行して実行することができる。

Bethe仮説を用いた(1)の対角化は次の2つのステップから成っている。先ず最初のステップとして，(1)の解を擬運動量$k_p^{(1)}$ $(p=1\sim N_1,\ N_1$:全電子数$)$で特徴づけられる平面波の重ね合わせとして求める。これはよく知られたBethe仮説の方法である。この解に対してフェルミオンの反対称性と周期的境界条件(不純物を中心として半径$L/2$の球に関して)を付加すると，問題は"スピン空間"での付加的な問題を解く事に帰着する。第二のステップは"スピン空間"の問題を解くことである。この問題もYang[20]及びSutherland[21]によって発展させられた一般化されたBethe仮説の方法で解くことができる。今の場合$|m\rangle$がν種類あるので"スピン空間"における対称性はFig.2に示したν行のYoungの図で表わされる。この図で第m行に属する粒子数は固有値W_mを持つ粒子数に対応している。この"スピン空間"の問題を完全に対角化するためにはSutherland[21]によって示された様に，さらに$(\nu-1)$種類の擬運動量$k_p^{(j)}$ $(2\le j\le\nu)$を導入しなければならない。この様にしてハミルトニアン(1)の対角化が実行され，擬運動量に対して一連の代数方程式が得られる。[19]

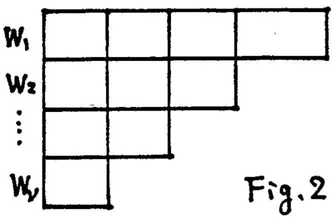

Fig.2

$$\exp(ik_p^{(1)}L)\,t(k_p^{(1)}-\epsilon_f)=\prod_{q=1}^{N_2}t(k_p^{(1)}-k_q^{(2)})\ ,$$

$$-\prod_{q=1}^{N_j}t\big((k_p^{(j)}-k_q^{(j)})/2\big)=\prod_{r=1}^{N_{j-1}}t(k_p^{(j)}-k_r^{(j-1)})\cdot\prod_{s=1}^{N_{j+1}}t(k_p^{(j)}-k_s^{(j+1)})\ ,\quad 2\le j\le\nu \qquad (3)$$

但し．$t(x)=(x-ic)/(x+ic)\ ,\ c=V^2/2$．

ここでN_j-N_{j+1}がFig.2のYoungの図でj番目の行に属する粒子数，即ちW_jで分類された粒子の数を表わしている。(3)式でspin-orbit coupling，磁場を零とおいたものがSchlottmannによって取り扱われた表式に対応している[18]。系の全エネルギーは(3)式の解を用いて$E=\sum_p k_p^{(1)}$と表わされる。

§3 有限温度での取り扱い

(3-1) 熱力学方程式の導出

ハミルトニアン(1)で記述される系の熱力学的性質を調べるためには(3)に現われている$k_p^{(j)}$のすべての種類の解を考慮しなければならない。この解は複素平面上で次の様に分類される:

(1) n次のcharge complex $k_g^{(j)}$: $k_g^{(j)}=k_g^{(j+1)}\pm ic$, $1\le j\le\nu-1$, $1\le n\le\nu$ で $k_g^{(n)}$ がreal,

(2) m次の spin complex $k_s^{(j)}$: $k_s^{(j)}=k_{sm}^{(j)}+i(m+1-2l)c$, $2\le j\le\nu$, $1\le l\le m$, $m=1,2,\cdots$ でk_{sm}がreal.

これらの解は複素平面上で虚軸に沿って等間隔に並んでおり, string solution と呼ばれているものである。熱力学的極限を考えて、charge及びspin complexの実部に対する分布関数 $\rho_0^{(j)}$及び$\rho_n^{(j)}$を導入する(ホールに関する分布は~をつけることにする)。これらの分布関数を用いると、エネルギーE, エントロピー S は次の形に書ける。

$$E=\sum_{j=1}^{N_1}k_j/L=\sum_{j=1}^{\nu}\int_{-\infty}^{\infty}jk\rho_0^{(j)}(k)\,dk\,, \tag{4}$$

$$S=\sum_{j=1}^{\nu}\int_{-\infty}^{\infty}dk\{(\rho_0^{(j)}+\tilde\rho_0^{(j)})\ln(\rho_0^{(j)}+\tilde\rho_0^{(j)})-\rho_0^{(j)}\ln\rho_0^{(j)}-\tilde\rho_0^{(j)}\ln\tilde\rho_0^{(j)}\}$$
$$+\sum_{j=2}^{\nu}\sum_{n=1}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}dk\{(\rho_n^{(j)}+\tilde\rho_n^{(j)})\ln(\rho_n^{(j)}+\tilde\rho_n^{(j)})-\rho_n^{(j)}\ln\rho_n^{(j)}-\tilde\rho_n^{(j)}\ln\tilde\rho_n^{(j)}\}\,. \tag{5}$$

ここで考えている系ではE, S の他に$\mathcal{H}_W$の項からの熱力学ポテンシャルへの寄与がある。これは次の様に表わされる。

$$W=\sum_{j=1}^{\nu}W_j(N_j-N_{j+1})$$
$$=\sum_{j=1}^{\nu}\sum_{i=1}^{j}W_i\int_{-\infty}^{\infty}\rho_0^{(j)}dk+\sum_{j=2}^{\nu}(W_j-W_{j-1})\sum_{n=1}^{\infty}n\int_{-\infty}^{\infty}\rho_n^{(j)}dk\,. \tag{6}$$

熱平衡における分布関数ρは熱力学ポテンシャル $\Omega=E-TS+W-\mu N_1$ (μは化学ポテンシャル)を最小にする様にして決定される。その結果得られる熱力学方程式は.

$$G(-\epsilon_0^{(j)})=\{j(k-\mu)+\sum_{i=1}^{j}W_i\}/T+\sum_{l=1}^{j}\sum_{i=l}^{\nu}[i+j-2l]*G(\epsilon_0^{(i)})$$
$$-\sum_{n=1}^{\infty}[n]*G(-\epsilon_n^{(j)}),\quad \text{for } 1\le j\le\nu\,, \tag{7a}$$

$$G(\epsilon_n^{(j)})=n(W_{j+1}-W_j)/T+[n]*G(\epsilon_0^{(j)})-\sum_{m=1}^{\infty}B_{nm}*\{G(-\epsilon_m^{(j-1)})+G(-\epsilon_m^{(j+1)})\}$$
$$+\sum_{m=1}^{\infty}A_{nm}*G(-\epsilon_m^{(j)}),\quad \text{for } 1\le j\le\nu-1,\ n=1,2,\cdots \tag{7b}$$

但し$G(x)=\ln(1+\exp(-x/T))$, $[n]$はフーリエ空間で$\exp(-nc|\omega|)$で与えられる積分核(*はたたみこみ)であり B_{nm}, A_{nm}は $[n]$を用いて

$$B_{nm}=\sum_{j=1}^{\min(n,m)}[|n-m|+2j-1]\,,\quad A_{nm}=B_{n,m-1}+B_{n,m+1}+[0]\delta_{nm}\,,$$

と表わされる。ここで熱力学方程式(7)を導く際に、分布関数のかわりに, $\epsilon_0^{(j)}=T\ln(\tilde\rho_0^{(j)}/\rho_0^{(j)})$, $\epsilon_n^{(j)}=-T\ln(\tilde\rho_n^{(j+1)}/\rho_n^{(j+1)})$ で定義される擬エネルギーを導入した。この擬エネルギーを用い

て、不純物部分からの熱力学ポテンシャルへの寄与 Ω^i は

$$\Omega^i = -T\sum_{j=1}^{\nu}\int_{-\infty}^{\infty}\Delta_j(k)\,G(\epsilon_0^{(j)})\,dk, \tag{8}$$

$$\text{但し}\quad \Delta_j(k) = \frac{jc/\pi}{(k-\epsilon_f)^2+(jc)^2}.$$

$\mathcal{H}_w$ の具体的な形とそれに対応する W_j を与えると、方程式(7),(8)を用いてハミルトニアン(1)の熱平衡における物理量を計算することができる。もし不純物レベル ϵ_f がフェルミ面の十分下方にあれば、(7),(8)は $\mathcal{H}_w$ の効果を含んだ Coqblin-Schrieffer モデルの熱力学方程式を記述する。

方程式(7)は無限和を含んでいるが、この式にフーリエ変換を用いて処理すると、無限和を含まない形に熱力学方程式を書きかえることができる。

$$\epsilon_0^{(\nu)}/T = (k-\mu)/T + R*G(-\epsilon_0^{(\nu)}) + \sum_{j=1}^{\nu-1} P_j*G(\epsilon_0^{(j)}), \tag{9a}$$

$$G(-\epsilon_n^{(j)}) = P_j*G(-\epsilon_0^{(\nu)})\delta_{n0} + \sum_{l=1}^{\nu-1}\{V_{jl}*G(\epsilon_n^{(l)}) - U_{jl}*[G(\epsilon_{n+1}^{(l)})+G(\epsilon_{n-1}^{(l)})]\}, \tag{9b}$$

$$\lim_{n\to\infty}(\epsilon_n^{(j)}/n) = W_{j+1}-W_j. \tag{9c}$$

ここで P_j, R はフーリエ空間で $\sinh(jc\omega)/\sinh(\nu c\omega)$, $\exp(-c|\omega|)\sinh[(\nu-1)c\omega]/\sinh(\nu c\omega)$ で与えられる積分核であり、U_{jl}, V_{jl} は P_j を用いて、

$$U_{jl}=\sum_{i=1}^{\min(j,l)}P_{|j-l|+2i-1},\quad V_{jl}=\sum_{i=1}^{\min(j,l)}(P_{|j-l|+2i}+P_{|j-l|+2i-2})$$

と表わされる。(9)の方程式を見ると、spin-orbit coupling，結晶場等の効果は(9c)の $n\to\infty$ の境界条件に W_j を通してのみ現われていることが分かる。この結果は後の数値的、解析的計算をかなり見通しのよいものにする。

(3-2) 低温での電子比熱

(7),(8)式あるいは(8),(9)式を用いれば任意温度における物理量を計算できるが、これは一般には数値計算に頼らなければならない。ここでは解析的な取り扱いに重点を置いて、低温での電子比熱の一般的な表式を求める。先ず $\epsilon_0^{(j)}$ を $\epsilon_0^{(j)}\sim\eta_j+T^2\phi_j$ の様に T^2 まで展開する（$\epsilon_n^{(j)}$ $(n\geq 1)$ からの熱力学ポテンシャルへの寄与は T^2 のオーダーまででは存在しない）。任意の関数 $f(x)$ と零点をもつ単調な関数 $g(x)$ に関して $T\to 0$ の時、

$$T\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\,G(|g(x)|)\,dx \to \frac{\pi^2}{6}f(\alpha)/|dg(\alpha)/d\alpha|,$$

となることに注意すると（但し α は $g(\alpha)=0$ で定義）Ω^i を T^2 まで展開することができる：

$$\Omega^i = \Omega^i(T=0) + T^2\sum_{j=1}^{\nu}\left[\int_{-\infty}^{Q_j}dk\,\Delta_j\phi_j - \frac{\pi^2}{6}\Delta_j(Q_j)/(d\eta_j/dQ_j)\right] \tag{10}$$

但し Q_j は $\eta_j(Q_j)=0$ で定義されている。(10)式の T^2 の係数から T-linear な比熱の表式が直接求められるが、この表式は絶対零度における不純物部分の分布関数 $\rho_I^{(j)}(k)$ と伝導電子部分の分布関数 $\rho_c^{(j)}(k)$ を用いると、より簡単な形にまとまる。

結果は[19]

$$C_{imp}/T = \frac{\pi}{6}\sum_{j=1}^{\nu}\{\rho_I^{(j)}(Q_j)/\rho_c^{(j)}(Q_j)\}, \tag{11a}$$

$$\sum_{l=1}^{i}\sum_{i=l}^{\nu}[i+j-2l]_i * \rho_I^{(i)} = \Delta_j, \tag{11b}$$

$$1 \le j \le \nu,$$

$$\sum_{l=1}^{i}\sum_{i=l}^{\nu}[i+j-2l]_i * \rho_c^{(i)} = j/2\pi, \tag{11c}$$

但し $[n]_i$ は $[n]_i = [n]\,\Theta(Q_i - k)$, $[0]_i = [0]$ で定義される積分核である。(11)式に現われている Q_j は種々の素励起に関する"フェルミレベル"に対応しているがこれは W_j を与えた時

$$\int_{-\infty}^{Q_j}\rho_c^{(j)}(k)\,dk = (W_{j+1} - W_j)/2\pi, \quad 1 \le j \le \nu - 1,$$

$$\sum_{j=1}^{\nu}\int_{-\infty}^{Q_j} j\,\rho_c^{(j)}(k)\,dk = N_1/L \quad (\text{全電子数}), \tag{12}$$

で与えられる(もともと Q_j は $\varepsilon_j(Q_j)=0$ で定義されているが $\rho_c^{(j)} = \frac{1}{2\pi}d\varepsilon_j/dk$ の関係を用いてこれを書き直した)。此契の表式(11)は素励起に関する"フェルミレベル"の分布関数のみで与えられており、フェルミ流体的な表式となっている。方程式(11b),(11c)から絶対零度の物理量も計算できるが、絶対零度における応答関数も $\rho(Q_j)$ を用いて表わされ、C_{imp} と絶対零度の応答関数の関係を求めることができる。これを実行するには具体的な系を設定しなければならないが次節でこれを行う。

§4 Ce不純物系への応用:立方対称場

Ceイオンでは原子内の電子間クーロン相互作用の大きさが5eV程度であるので、強相関縮退アンダーソンモデル(1)は金属中にCe不純物を含む系を記述する適当なモデルであると考えられている。Ceイオンのf^1状態は spin-orbit coupling により $J=\frac{5}{2}$(基底状態)と $J=\frac{7}{2}$(励起状態~300meV程度)の状態に分裂する。§3で行った定式化を用いると $J=\frac{7}{2}$ の状態も含めて計算が可能であるが、簡単のため以下の取り扱いでは $J=\frac{5}{2}$ の状態のみに注目する。立方対称場中ではこの $J=\frac{5}{2}$ の状態は Γ_7 2重項と Γ_8 4重項に分かれる。さらに磁場Hがかかると一般に縮退は完全に除かれる。この場合 energy splitting W_j は

$$W_j = \begin{cases} -\frac{1}{6}A - \frac{1}{2}H \pm [\frac{1}{4}A^2 - \frac{4}{3}AH + 4H^2]^{\frac{1}{2}}, \\ -\frac{1}{6}A + \frac{1}{2}H \pm [\frac{1}{4}A^2 + \frac{4}{3}AH + 4H^2]^{\frac{1}{2}}, \\ \pm\frac{1}{2}H, \end{cases} \tag{13}$$

で与えられる。ここでAは立方対称場における Γ_7 と Γ_8 の間の energy splitting を表わしている($A>0$ が Γ_7 基底状態, $A<0$ が Γ_8 基底状態に対応)。(2)式で注意した様に A, H の大きさに応じて W_j は $W_1 \le W_2 \le \cdots \le W_\nu$ となる様に選ばなければならない。(8),(9),(13)式を用いると立方対称場中でのCe不純物に対する熱力学的な諸量が任意の A, H, T に対して得られる。これは一般に数値計算で実行されるが、以下では低温,低磁場における解析的

な計算を行う。以下では $A>0$ (Γ_7基底状態)を扱う。$A<0$ の場合も以下に行うのと同様の方法で取り扱うことができる。

外部磁場 H が小さい場合には W_j を H の一次まで展開すると、Q_j を決定する方程式(12)は

$$2\pi\int_{-\infty}^{Q_j}\rho_c^{(j)}dk \approx \begin{cases} 5H/3 & , j=1 \\ A-8H/3 & , j=2 \\ 4H/3 & , j=3 \\ H & , j=4 \\ 4H/3 & ; j=5 \end{cases} \tag{14}$$

(13)は、$A=0$ とすれば結晶場がない場合の条件式(文献12))に、また $H=0$ とすれば Schlottmann によって導入された条件(文献18))に、(14)式は一致する。(14)と同様の展開を(6)式の W に関して H^2 まで行うと $T=0$ での帯磁率が求まる:[19]

$$\chi_m = \chi_7 + \chi_8 + \chi_V , \tag{15a}$$

$$\chi_7 = \frac{25}{36\pi}\lim_{Q_1\to-\infty}\left[\rho_I^{(1)}(Q_1)/\rho_c^{(1)}(Q_1)\right] , \tag{15b}$$

$$\chi_8 = \frac{65}{54\pi}\sum_{j=3,4,5}\lim_{Q_j\to-\infty}\left[\rho_I^{(j)}(Q_j)/\rho_c^{(j)}(Q_j)\right], \tag{15c}$$

$$\chi_V = \frac{80}{9A}\int_{-\infty}^{Q_2}\rho_I^{(2)}dk . \tag{15d}$$

ここで χ_7, χ_8, χ_V はそれぞれ Γ_7, Γ_8, van Vleck 常磁性からの帯磁率 χ_m への寄与を表わしている。これと類似の表式は既に Schlottmann によって伝導電子と不純物電子部分の分布関数を比較することにより得られている。[18]

ここでさらに次式で定義される"charge susceptibility"を導入する。

$$\chi_A = \partial(n_7-n_8)/\partial A , \tag{16a}$$

$$\chi_c = -\partial(n_7+n_8)/\epsilon_f , \tag{16b}$$

但し、n_7, n_8 はそれぞれ Γ_7, Γ_8 状態の電子占有数を表わしている。χ_c はよく知られた charge susceptibility である。$H=0$ では χ_A, χ_c は次の様に計算できる[19]:

$$\chi_A = \frac{\partial}{\partial A}\left[2\int_{-\infty}^{Q_2}\rho_I^{(2)}dk\right]$$

$$= \frac{1}{\pi}\,\frac{C_2D_6\,\rho_I^{(2)}(Q_2)/\rho_c^{(2)}(Q_2) - C_6D_2\,\rho_I^{(6)}(Q_6)/\rho_c^{(6)}(Q_6)}{C_2D_6-C_6D_2} , \tag{17a}$$

$$\chi_c = -\frac{\partial}{\partial\epsilon_f}\left[6\int_{-\infty}^{Q_6}\rho_I^{(6)}dk + 2\int_{-\infty}^{Q_2}\rho_I^{(2)}dk\right]$$

$$= \frac{3}{\pi}\,\frac{C_2D_6\,\rho_I^{(6)}(Q_6)/\rho_c^{(6)}(Q_6) - C_6D_2\,\rho_I^{(2)}(Q_2)/\rho_c^{(2)}(Q_2)}{C_2D_6-C_6D_2} , \tag{17b}$$

ここで

$$C_x = \left[\frac{\partial}{\partial Q_x}\int_{-\infty}^{Q_2}\rho_c^{(2)}dk\right]\Big/\rho_c^{(x)}(Q_x)\ ,$$

$$D_x = \left[\frac{\partial}{\partial Q_x}\int_{-\infty}^{Q_6}\rho_c^{(6)}dk\right]\Big/\rho_c^{(x)}(Q_x)\ ,\quad x=2,6$$

と定義した。以上の結果(11),(15),(17)から低温でのフェルミ流体的な関係式[19]

$$C_{imp}/T = \frac{6\pi^2}{25}\chi_7 + \frac{9\pi^2}{65}\chi_8 + \frac{\pi^2}{18}\chi_c + \frac{\pi^2}{6}\chi_A \tag{18}$$

が得られる。$A<0$ (Γ_8基底状態)に対しては、χ_Aを$2\chi_A$でおきかえれば(18)式がそのままの形で成立する。このフェルミ流体的な関係式にはvan Vleck常磁性は関与しないことが分かる。以下で(18)式のlimiting caseについて考察する。

(a) Coqblin-Schrieffer limit : $-(\epsilon_f-\frac{2}{3}A) \gg C$, $A \ll C$.

この場合は不純物レベルϵ_fがフェルミ面よりずっと深い所にあるため、電荷揺動が抑えられるので$\chi_c \to 0$となる。

(b) Kondo limit : $-(\epsilon_f-\frac{2}{3}A) \gg C$, $A \gg C$.

この極限では低温でΓ_7の状態のみが重要になり、(18)式でχ_8, χ_c, χ_Aは零になる。結局よく知られたWilsonの関係式,

$$C_{imp}/T = \frac{6\pi^2}{25}\chi_7\ ,\quad \chi_7 = 1/\pi T_K \tag{19}$$

が得られる。ここに現われたeffectiveな近藤温度T_Kは結晶場の効果を含んでおり、その表式は山田芳田・芳沢[17] および Schlottmann[18] によって与えられたものと同じものである。

(c) $A \to 0$.

結晶場が零の場合、χ_7, χ_8, χ_Aは独立ではなくなり、すべて$A=0$の時の帯磁率$\tilde{\chi}_m$に比例する。

$$\chi_7 = \frac{5}{63}\tilde{\chi}_m\ ,\quad \chi_8 = \frac{26}{63}\tilde{\chi}_m\ ,\quad \chi_A = \frac{4}{35}\tilde{\chi}_m\ .$$

結局、この場合(18)式は

$$C_{imp}/T = \frac{\pi^2}{21}\tilde{\chi}_m + \frac{\pi^2}{18}\chi_c \tag{20}$$

となり、結晶場が零の時に既に得られている結果を再現する。[19]

§5 まとめ

ここではspin-orbit coupling, 結晶場, 磁場($\mathcal{H}_W$)を含んだ場合の縮退アンダーソンモデルのBethe仮説による熱力学的取り扱いを紹介した。Bethe仮説による対角化はbase $|m\rangle$を$\mathcal{H}_W$が対角的になる様に選ぶことによって$\mathcal{H}_W=0$の時と平行して行うことができることを§2で述べた。この$\mathcal{H}_W$の効果は熱力学方程式(9)の境界条件にW_jを通してのみ現われており、以後の計算を見通しよいものにしている。具体的な応用例として立方対称場におけるCe不純物を取り上げフェルミ流体的関係式(18)を導いたが、他の系に対しても同様の

計算を実行すれば、フェルミ流体的関係式を容易に得ることができる。Ce(Yb)不純物系の実験結果との定量的な比較を行うためには(8),(9)式の数値計算が必要であるが、これについては現在実行中である。

文献

1) N. Andrei: Phys. Rev. Lett. 45(1980)379.
2) P.B. Wiegmann: J. Phys. C14(1981)1463.
3) N. Andrei, K. Furuya and J.H. Lowenstein: Rev. Mod. Phys. 55(1983)331.
4) P.B. Wiegmann: Phys. Lett. 80A(1980)163.
5) N. Kawakami and A. Okiji: Phys. Lett. 86A(1981)483.
6) A.M. Tsvelick and P.B. Wiegmann: Adv. Phys. 32(1983)453.
7) A. Okiji and N. Kawakami: J. Appl. Phys. 55(1984)1931.
8) A.M. Tsvelick and P.B. Wiegmann: J. Phys. C15(1982)1707.
9) A.C. Hewson and J.W. Rasul: J. Phys. C16(1983) 6799.
10) V.T. Rajan: Phys. Rev. Lett: 51(1983)308.
11) P. Schlottmann: Phys. Rev. Lett. 50(1983)1697.
12) N. Kawakami, S. Tokuono and A. Okiji; J. Phys. Soc. Jpn. 53(1984)51.
13) N. Kawakami and A. Okiji: Phys. Lett. 103A(1984)205.
14) P. Schlottmann: Z. Phys. B54(1984)207, B56(1984)127.
15) M. Luszik-Bhadra et al.: Phys. Rev. Lett. 47(1981)871.
16) A. Ogawa and A. Yoshimori: Prog. Theor. Phys. 53(1975)315
17) K. Yamada, K, Yosida and K. Hanzawa: Prog. Theo. Phys. 71(1984)450.
18) P. Schlottmann: Phys. Rev. B30(1984) 1454.
19) N. Kawakami and A. Okiji: J. Phys. Soc. Jpn. 54(1985) No.2.
20) C.N. Yang: Phys. Rev. Lett. 19(1967)1312.
21) B. Sutherland: Phys. Rev. Lett. 20(1967)98.