

Title	高密度近藤系中の重い電子：運動方程式の方法を用いた摂動展開(Anderson Model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)	黒田, 義浩
Citation	物性研究 (1986), 45(5): 36-40
Issue Date	1986-02-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/91880
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

高密度近藤系中の重い電子

— 運動方程式の方法を用いた擾動展開 —

名大理 黒田義浩

最近、Ce化合物やU化合物で発見された異常に大きい有効質量を持つ伝導電子の起源は、高密度系特有の性質に由来していると考えられている。(文献1及び2) しかし、高密度近藤系の性質を調べるための信頼にたつ一般的な手法は未だない。ここでは、周期的Anderson模型を用いて、そのような手法開発のための1つの試みを報告したい。

ここでの高密度近藤系の問題に取り組むための基本的な考え方は次の通りである。先づ、話を解り易くするために、Anderson模型で記述される磁性不純物を含んだ合金系の性質を調べることを想定しよう。その不純物濃度が十分に低い時には、問題は単一不純物問題に帰着し、その場合は、Bethe仮説の方法等を援用すれば、原理的には厳密解を知ることが出来る。さて、不純物濃度が高くなると、不純物同志の相関(或は干渉)効果を考慮する必要が生じる。しかし、不純物濃度が余り高くなりゃは、相関効果も弱く擾動論的な取り扱いが十分に意味を持つ筈である。不純物濃度が高くなって、或は、磁性イオン自身が規則格子を作程(いわゆる周期的Anderson模型で記述されるような状態の場合)になると、そのような低次の擾動論的な取り扱いだけでは不十分で、より高次の相関効果を考慮しなくてはならなくなるかも知れない。しかし、系の基本的な性質(例えば、重い電子の存在等)は、或る程度、低次の相関効果にも現われている筈である。すなわち、単一不純物問題で判っている答を出発的にして、磁性イオン間の相関効果を漸次考慮して行けば、高密度近藤系の性質の基本的な部分の理解は可能な筈というわけ、我々の基本的な考えである。(文献2及び3) 実際、1粒子Green関数において、磁性イオン間の相関効果と表わす自己エネルギー補正を考慮すれば、単一不純物問題で与えられる近藤温度 T_K 程度の揺らぎを持った電子帯が生じることを示すことが出来た(文献2及び3)。しかし、このような取り扱いが可能なのは、現在までのところ、低温の極限においてのみに限られる。その理由は、単一不純物問題自体において、1粒子Green関数に関する知見が未だ充分ではないからである。今回の研究では、軌道縮退のある周期的Anderson模型を用い、原子内Coulomb反発力の大きな極限では、運動方程式の方法を援用すれば、1粒子Green関数に関するより具体的な知見を得ることが出来ることが判ったので、それについて報告する。

先づ、単一不純物問題を考えることにする。用いるモデルは、次のような軌道縮退のあるAnderson模型である。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_f + \mathcal{H}_{sf}$$

---[1.1]

$$\left\{ \begin{aligned} \mathcal{H}_s &\equiv \sum_{\lambda=1}^{N_\lambda} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger c_{\mathbf{k}\lambda}, & (N_\lambda: \text{スピンある軌道の縮退数}) \\ \mathcal{H}_f &\equiv \sum_{\lambda=1}^{N_f} \epsilon_f f_{\lambda}^\dagger f_{\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\lambda' \neq \lambda} U \hat{n}_{\lambda} \hat{n}_{\lambda'}, & \text{----- [2.1]} \\ \mathcal{H}_{sf} &\equiv \frac{1}{\sqrt{N}} V_{sf} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} (c_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger f_{\lambda} + \text{h.c.}). \end{aligned} \right.$$

そこで、 \mathcal{H}_f を対角化する演算子を導入する。次のような演算子を定義すると。

$$\left[\begin{aligned} \hat{n}_{\lambda}^+ &\equiv \hat{n}_{\lambda}, & \hat{n}_{\lambda}^- &\equiv 1 - \hat{n}_{\lambda}, & \hat{O}_f &\equiv \prod_{\lambda=1}^{N_f} \hat{n}_{\lambda}^-, & \hat{f}_{\mu} &\equiv \prod_{\lambda \neq \mu} \hat{n}_{\lambda}^+, \\ \tilde{f}_{\mu} &\equiv \hat{f}_{\mu} f_{\mu}, & \tilde{n}_{\mu} &\equiv \hat{f}_{\mu} \hat{n}_{\mu}, & \text{-----} & & & \end{aligned} \right. \quad \text{--- [2.2]}$$

\mathcal{H}_f を対角化する演算子は、次のようになる。

$$\left[\begin{aligned} [\tilde{f}_{\mu}, \mathcal{H}_f] &= \epsilon_f \tilde{f}_{\mu}, & [\tilde{n}_{\nu} f_{\mu}, \mathcal{H}_f] &= (\epsilon_f + U) \tilde{n}_{\nu} f_{\mu}, \\ [\tilde{f}_{\mu}^\dagger f_{\mu}, \mathcal{H}_f] &= 0, & [f_{\mu}^\dagger f_{\mu}, \mathcal{H}_f] &= (2\epsilon_f + U) f_{\mu}^\dagger f_{\mu}, & \text{--- [2.3]} \\ [\tilde{n}_{\eta} n_{\nu} f_{\mu}, \mathcal{H}_f] &= (\epsilon_f + 2U) \tilde{n}_{\eta} n_{\nu} f_{\mu}, & \text{-----} & & \end{aligned} \right.$$

これは、 f 電子の軌道縮退の自由度を全て指定する演算子であることが判る。この表式を用いると、演算子 f_{μ} は次のように分解される。

$$\begin{aligned} f_{\mu} &= \left(\prod_{\lambda \neq \mu} \hat{n}_{\lambda}^+ \right) f_{\mu} + \sum_{\nu} \left(\prod_{\lambda \neq \mu, \nu} \hat{n}_{\lambda}^- \right) \hat{n}_{\nu}^+ f_{\mu} + \sum_{\eta} \sum_{\lambda \neq \mu, \eta} \prod_{\lambda \neq \mu, \eta} \hat{n}_{\lambda}^- \hat{n}_{\eta}^+ \hat{n}_{\eta}^+ f_{\mu} + \text{-----} \\ &= \sum_{\{\alpha, \lambda\}} \left(\prod_{\lambda \neq \mu} \hat{n}_{\lambda}^{\alpha, \lambda} \right) f_{\mu} \end{aligned} \quad \text{--- [2.4]}$$

第1項、第2項はそれぞれ ϵ_f 、 $\epsilon_f + U$ 、第3項は $\epsilon_f + 2U$ 、... の状態を表わす。演算子である。
今 [2.4] の中の 1 つの演算子を \hat{A} と置き、 $\langle\langle \hat{A}; f_{\mu}^+ \rangle\rangle_z$ の運動を考えると、

$$\langle\langle \hat{A}; f_{\mu}^+ \rangle\rangle_z = \langle [\hat{A}, f_{\mu}^+] \rangle + \langle\langle [\hat{A}, \mathcal{H}_f]; f_{\mu}^+ \rangle\rangle_z, \quad \text{--- [2.5]}$$

又、 $[\hat{A}, \mathcal{H}_s] = 0$ 故に $[\hat{A}, \mathcal{H}_f] = E_f(A) \cdot \hat{A}$ を考慮すると

$$\langle\langle \hat{A}; f_{\mu}^+ \rangle\rangle_z = \frac{1}{z - E_f(A)} \left[\langle [\hat{A}, f_{\mu}^+] \rangle + \langle\langle [\hat{A}, \mathcal{H}_f]; f_{\mu}^+ \rangle\rangle_z \right], \quad \text{--- [2.6]}$$

ここで、 $U \rightarrow \infty$ の極限を考えると、もし $E_f(A)$ が U を含んでいない場合は

$$\langle\langle \hat{A}; f_{\mu}^+ \rangle\rangle_z \lesssim O\left(\frac{1}{U}\right) \rightarrow 0 \quad (\text{for } U \rightarrow \infty). \quad \text{--- [2.7]}$$

従って、 $\langle\langle f_{\mu}; f_{\mu}^+ \rangle\rangle_z$ の運動を考えると、この極限では、[2.4] の第1項のみ、即ち

$$f_{\mu} \simeq \left(\prod_{\lambda \neq \mu} \hat{n}_{\lambda}^- \right) f_{\mu} \equiv \tilde{f}_{\mu}, \quad \text{--- [2.8]}$$

と置いてよい事が判る。同様の考察を $[f_{\mu}, \mathcal{H}_{sf}]$ にも適用し、更に高次の運動方程式をおいてみると、最初の3段階の方程式は次のように与えられる。

$$\textcircled{1} \quad \langle f_\mu; f_\mu^+ \rangle_z \simeq \langle \tilde{f}_\mu; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_f} \left[\langle \tilde{f}_\mu \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_1} \langle [\tilde{f}_\mu C_{\mu} - \sum_{\nu \neq \mu} \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu} f_\mu]; f_\mu^+ \rangle_z \right], \quad \dots [3.1]$$

$$\textcircled{2} \quad \langle \sum_{\mu} C_{\mu} f_\mu; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_f} \frac{V_{sf}}{N} \langle \{ \tilde{f}_\mu f_\mu + \sum_{K_2} \sum_{\nu} (f_\nu^+ C_{\nu} C_{\mu} - C_{\nu}^+ \tilde{f}_\nu C_{\mu}) \}; f_\mu^+ \rangle_z, \quad \dots [3.2]$$

$$\langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu} f_\mu; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_f} \left[\langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu} \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_2} \sum_{\nu} \langle (f_\nu^+ C_{\nu} C_{\mu} - C_{\nu}^+ \tilde{f}_\nu C_{\mu}); f_\mu^+ \rangle_z \right], \quad \dots [3.3]$$

$$\textcircled{3} \quad \langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu} C_{\mu}; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_f - \epsilon_2 + \epsilon_f} \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_3} \langle (- \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu}^+ C_{\nu} C_{\mu} + \sum_{\eta \neq \nu} \tilde{f}_\eta^+ C_{\eta} C_{\nu}^+ f_\eta C_{\mu}); f_\mu^+ \rangle_z, \quad \dots [3.4]$$

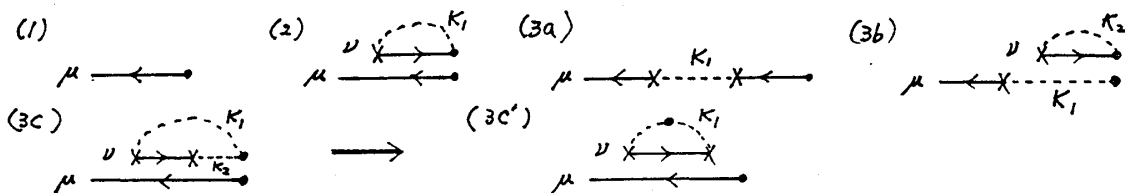
$$\langle C_{\nu}^+ \tilde{f}_\nu C_{\mu}; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_f + \epsilon_2 - \epsilon_f} \left[\langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu}^+ f_\nu C_{\mu} \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_3} \langle (\tilde{f}_\nu^+ C_{\nu}^+ C_{\nu} C_{\mu} - \sum_{\eta \neq \nu} \tilde{f}_\eta^+ C_{\eta} C_{\nu}^+ f_\eta C_{\mu}); f_\mu^+ \rangle_z \right], \quad \dots [3.5]$$

$$\langle C_{\nu}^+ C_{\nu} \tilde{f}_\nu; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_f + \epsilon_2 - \epsilon_f} \left[\langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu}^+ C_{\nu} \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_3} \langle (\tilde{f}_\nu^+ C_{\nu}^+ C_{\nu} C_{\mu} - \sum_{\eta \neq \nu} \tilde{f}_\eta^+ C_{\eta} C_{\nu}^+ C_{\nu} f_\eta); f_\mu^+ \rangle_z \right], \quad \dots [3.6]$$

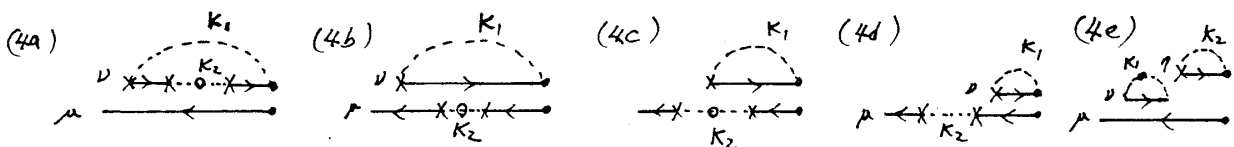
ここで、期待値 $\langle \rangle$ を含み項のみを拾い集めると、

$$\langle f_\mu; f_\mu^+ \rangle_z \simeq \frac{1}{z - \epsilon_f} \left[\langle \tilde{f}_\mu \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_1} \frac{1}{z - \epsilon_f} \left\{ - \sum_{\nu \neq \mu} \langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu} \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \frac{\langle \tilde{f}_\mu \rangle}{z - \epsilon_f} + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_2} \sum_{\nu} \left(\frac{\langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu}^+ f_\nu C_{\mu} \rangle}{z - \epsilon_f + \epsilon_2 - \epsilon_f} + \frac{\langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu}^+ C_{\nu} \rangle}{z - \epsilon_f + \epsilon_2 - \epsilon_f} \right) \right\} \right], \quad \dots [3.7]$$

以上の如く、運動方程式の各ステップは、 V_{sf} の展開によって判る。更に高次の展開項を求めよるためには、resolvent展開と同様なグラフによる表式を導入すると便利である。例えば、[3.7]の4種の展開項は順次以下の様に表現される。



ここで、 $\langle \tilde{f}_\mu C_{\mu}^+ C_{\nu} \rangle = \langle \tilde{f}_\mu \rangle \langle C_{\nu}^+ C_{\nu} \rangle \delta_{K_2, K_1}$ の関係が成立することを考慮すると、(3c)は(3c')のように表わせる。同様な記法を V_{sf} の3次の項に適用すると、次の5種類のグラフで表わされる。



ただし、 $\dots \bullet \dots \equiv \dots \bullet \dots$ を用いた。

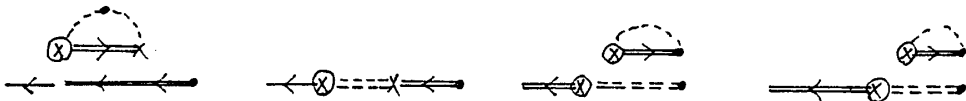
上記グラフの各項は、くり込まれたグラフで描くと、次の2通りに大別される。

$$(4a) + (4b) + (4d) + (4e) \subset \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}, \quad (4c) \subset \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}$$

ここで、

$$\left[\begin{array}{l} \text{---} \text{---} \text{---} \equiv \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \equiv \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \equiv \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \right.$$

同様にして、 V_f の4次の展開項は、24種類ありわけのべ、くり込まれたグラフで描くと、次の4種類に含まれる。



ここで、

$$\left[\begin{array}{l} \text{---} \text{---} \text{---} \equiv \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \equiv \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \equiv \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \right.$$

更に高次項も上述のようなグラフによる表記法を用いれば、容易に書き下すことが出来る。結局、求める Green 関数は、次のようになる。

$$\langle\langle f_{\mu} \rangle\rangle_{\mu}^{\dagger} = \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \equiv \text{---} \text{---} \text{---}$$

ここで、 $G_f(z) \equiv \text{---} \text{---} \text{---} = \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---}$

$$= [z - \epsilon_f - \Sigma_f^{(a)}(z) - \Sigma_f^{(b)}(z)]^{-1} \quad \dots [4.1]$$

今、 $\otimes \approx X + O(1/\epsilon_f)$ とし、 $O(1/\epsilon_f)$ の補正項を無視すると、

$$\left[\begin{array}{l} \Sigma_f^{(a)}(z) = (N_s - 1) V^2 \sum_K n_K G_a(z, K), \\ \Sigma_f^{(b)}(z) = V^2 \sum_K G_b(z, K), \end{array} \right] \dots [4.2]$$

$$G_a(z, K) \equiv [z - \epsilon_K - \Sigma_a(z, K)]^{-1}, \quad G_b(z, K) = [z - \epsilon_K - \Sigma_b(z, K)]^{-1} \dots [4.3]$$

$$\left[\begin{array}{l} \Sigma_a(z, K) \approx V^2 \sum_q (1 - n_q) \{ G_f(z - \epsilon_K + \epsilon_q) - G_f(-z + \epsilon_K + \epsilon_q) \}, \\ \Sigma_b(z, K) \approx V^2 \sum_q n_q \{ G_f(z - \epsilon_K + \epsilon_q) - G_f(-z + \epsilon_K + \epsilon_q) \}. \end{array} \right] \dots [4.4]$$

[4.1] ~ [4.4] は、Self-consistent equations を構成する。これら一連の表式は、 $(1/N_s)$ 展開 $\textcircled{4}$

NCA $\textcircled{5}$ 等の近似法を更に一般化したものである。

以上の方式を、同期的 Anderson 模型の場合にも適用することが出来る。[2.1] で導入したハミルトニアン H_f, H_{sf} を、各格子点に f 電子状態があるものとして、 $\sum_i (H_{fi} + H_{si})$

