23. Abrikosov の s－d 模型に対する pseudo-fermion 法への comment

京大・理　加藤　勝，恒藤　敏彦

1. 序

重い電子系を考察する上で，周期的 s－d 模型は 1 つの出発点になる。しかし Spinのもつ自由度の取り扱いが重要であり，例えば，摂動展開は Spin 演算子が含まれるためにうまく行えない。Abrikosov は 1 個の d－Spin の場合に，$S=1/2$ の時 Spin の up，down 状態に独立に fermion を対応させ，電子の Green 関数の高温側からの摂動展開を行った。しかし Abrikosov の方法は周期的な場合に拡張するためには，修正を必要とし，それは 1 個の d Spin の場合にも実は必要なのである。

2. 定式化

簡単のため d Spin 1 個の場合のみを考察する。局在 moment の up，down にそれぞれ，pseudo－fermion の演算子 $a_\uparrow$，$a_\downarrow$ を対応させる。すると Hamiltonian

$$H=J\sum_{\sigma,\tau}a_\sigma^+\boldsymbol{S}_{\sigma\sigma'}a_{\sigma'}c_\tau^+\boldsymbol{\sigma}_{\tau\tau'}c_{\tau'}+\sum_{k\sigma}\varepsilon_k c_{k\tau}^+c_{k\tau}\tag{1}$$

を得る。

一電子 Green 関数を求める。s－d 結合の項を摂動として摂動展開すれば，

$$\mathcal{G}^{tr}_{\sigma\sigma'}(i\tau,j\tau')=-\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\,\mathrm{T}_\tau[c_{i\sigma}(\tau)c^+_{j\sigma'}(\tau')]\}$$

$$=-\frac{\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta d\tau_1\cdots\int_0^\beta d\tau_n\mathrm{T}_\tau[\hat{K}_1(\tau_1)\cdots\hat{K}_1(\tau_n)c_{i\sigma}(\tau)c^+_{j\sigma}(\tau')]\}}{\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta d\tau_1\cdots\int_0^\beta d\tau_n\mathrm{T}_\tau[\hat{K}_1(\tau_1)\cdots\hat{K}_1(\tau_n)]\}}\tag{2}$$

$$\hat{\rho}=e^{\beta(\Omega-\hat{K})},\quad \hat{\rho}_0=e^{\beta(\Omega_0-\hat{K}_0)},\quad e^{-\beta\Omega}=\mathrm{Tr}\,e^{-\beta\hat{K}},\quad e^{-\beta\Omega_0}=\mathrm{Tr}\,e^{-\beta\hat{K}_0}$$

$$\hat{K}=\hat{K}_0+\hat{K}_1=\sum_{k\sigma}(\varepsilon_k-\mu)n_{k\sigma}+J\sum_{\sigma\tau}(\boldsymbol{S}_{\tau\tau'}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'})a_\tau^+a_{\tau'}c_\sigma^+c_{\sigma'}$$

を得る。ここでTrはpseudo-fermionがSpinとして意味をもつ状態のみに関してtraceをとる。よってWickの定理は適用できない。だがTraceを非物理的状態まで拡張したTr′で置き換え密度演算子も対応したものに変えれば，Wickの定理は適用でき，各展開項の値は，非物理的状態に関する期待値が0であるから，元の値に余分な因子がつくのみである。$\mathcal{G}^{tr}$の分母分子でSpinと相互作用する項としない項とで因子が異なるために分子において非連結Diagramのcancellationが行われず，各展開項に補正項がつく。

今，pseudo-fermionによるproper-self energyをΣ，Green関数を$\mathcal{G}$，Spinによるproper-self energyをΣ^{tr}とすれば，これらの間には

$$\mathcal{G}(i\omega, k, k') = \mathcal{G}^0(i\omega, k)\,\delta_{kk'} + \sum_{k''} \mathcal{G}^0(i\omega, k)\,\Sigma_{kk''}(i\omega)\,\mathcal{G}(i\omega, k'', k')$$

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{tr}(i\omega, k, k') &= \mathcal{G}^0(i\omega, k)\,\delta_{kk'} + \sum_{k''} \mathcal{G}^0(i\omega, k)\,\Sigma^{tr}_{kk''}(i\omega)\,\mathcal{G}^{tr}(i\omega, k'', k') \\ &= A(\mathcal{G}(i\omega, k, k') - \mathcal{G}^0(i\omega, k)\,\delta_{kk'}) \\ &\quad + \mathcal{G}^0(i\omega, k)\,\delta_{kk'}\end{aligned} \tag{4}$$

$$A = \frac{2Z-1}{2Z} \quad (z：大分配関数)$$

という関係がある。第3項は$\mathcal{G}^{tr}$の展開項のうち$\mathcal{G}^0$以外はすべて同じ因子Aをもつことを表わしている。これを解けば，

$$\Sigma^{tr}_{kk'} = \frac{A\Sigma_{kk'}}{1-(1-A)\sum_{k''}\mathcal{G}^0(k'')\,\Sigma_{k''k''}} \tag{5}$$

を得る。この式から，Spinによる既約なself energyはpseudo-fermionによる可約なself energyを含むことがわかる。

3. まとめ

2で求めたように self-energy は補正は受けるが，その補正は最強発散項および第2最強発散項には影響しない。高温展開から低温側へ外挿するためには独立だとした pseudo-fermion 間の Spin としての相関が重要となるはずで，上で述べた補正が必要であろう。周期的な場合には (5) の様な厳密な関係式はないが，低次から逐次的に self-energy を求めることは可能であり，重い電子状態も記述できるであろう。