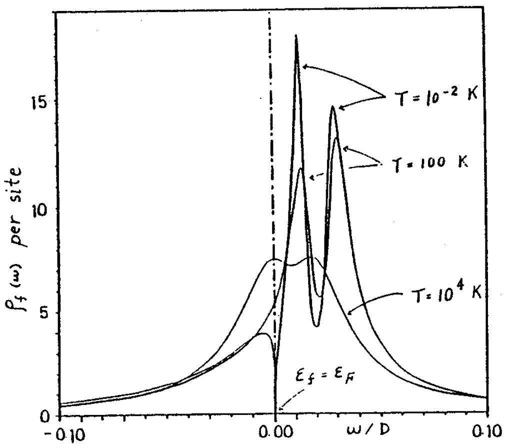

Fig. 3 価数揺動領域の状態密度。$\varepsilon_f=\varepsilon_F$。$T=10^4K(n_f=0.66)$, $T=100$K $(n_f=0.48)$, $T=10^{-2}$K$(n_f=0.44)$。

参　考　文　献

1) C. D. Bredl et al., Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 1982.

2) G. R. Stewart et al., phys. Rev. **B30** (1984) 482.

3) Y. Nagaoka, Phys. Rev. **138** (1965) A1112: C. Lacroix, J. Phys. F: Metal Phys. **11** (1981) 2389.

4) P. Wachter et. al., J. Mag. Mag. Mat. **47-48** (1985) 423.

4. 軌道縮退のある周期的アンダーソン・モデルのフェルミ液体論

阪大・理　岡田耕三
基研　山田耕作
東理大　芳田　奎

軌道縮退のある周期的アンダーソン模型

$$H=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k c^+_{k\sigma}c_{k\sigma}+\sum_{k\sigma m}E_f f^+_{k\sigma m}f_{k\sigma m}$$

$$+\sum_{k\sigma m}(V_{km}c^{+}_{k\sigma}f_{k\sigma m}+V_{mk}f^{+}_{k\sigma m}c_{k\sigma})+\frac{U}{2N}\sum_{\substack{kk'q\\(\sigma m)\neq(\sigma' m')}}f^{+}_{k+q\,\sigma m}f^{+}_{k'-q\,\sigma' m'}f_{k'\sigma' m'}f_{k\sigma m}$$

をフェルミ液体論により議論する。ここで $c^{+}_{k\sigma}$ $(c_{k\sigma})$，$f^{+}_{k\sigma m}$ $(f_{k\sigma m})$ は各々，伝導電子，f 電子の生成（消滅）演算子，m は軌道磁気量子数，$V_{km}=V_{kl}Y_{l}^{m}(\Omega_{k})$（$Y_{l}^{m}$ は球面調和関数）であり，$(\sigma m)\neq(\sigma' m')$ はスピン σ と m が同時に等しい組合せを除く事を意味する。

まず，$U=0$ の無摂動状態について議論する。 この場合，問題は一体問題であるので容易にグリーン関数を求めることが出来る。例えば，f 電子グリーン関数 $g^{f}_{k\sigma mm'}(\omega)$ は次式で表される。

$$g^{f}_{k\sigma mm'}(\omega)=\frac{\delta_{mm'}}{\omega-E_{f}}+\frac{V_{mk}}{\omega-E_{f}}\,g^{c}_{k\sigma}(\omega)\frac{V_{km}}{\omega-E_{f}}$$

但し，

$$g^{c}_{k\sigma}(\omega)=\left[\,\omega-\varepsilon_{k}-\sum_{m}\frac{|V_{km}|^{2}}{\omega-E_{f}}\right]^{-1}$$

は伝導電子のグリーン関数である。m に関する非対角的な f 電子グリーン関数が存在するのは，このモデルでは各格子点ですべての m の状態が伝導電子状態と混合するので m は結晶全体に対する良い量子数にはなっていないことを反映している。

この系のエネルギー固有値はグリーン関数の極から求めることが出来る。 E_{f} の位置に$2l$重に縮退した分散の無いバンドと，それらの上下に１枚ずつ伝導電子と f 電子の混合によるバンドができる。磁場が加えられていないときはこのモデルでは$-m$ と m の状態が同じ比重 でこれらのエネルギー固有状態の形成に寄与しており，磁場を加えた場合でも磁場の１次（又は，奇数次）のオーダーでは軌道によるエネルギー固有値の動きは無い。但し，軌道による磁化は磁場の１次のオーダーでも存在しており，ゼロでない値を持つ。これは，波動関数が磁場の１次のオーダーで変化するためである。例えば，$q=0$，$\omega=0$ に対する軌道帯磁率は絶対零度では次のように与えられる。

$$\begin{aligned}\chi^{\mathrm{orbit}}(q=0,\ \omega=0)&=-\mathrm{i}\sum_{\substack{\omega' k\sigma\\ mm'}}mm'\,g^{f}_{k\sigma mm'}(\omega')\,g^{f}_{k\sigma m'm}(\omega')\\&=\frac{4}{3}\,l(l+1)\sum_{k}\frac{1}{(E^{-}_{k}-E_{f})^{2}}\,\frac{(2l+1)(V_{kl})^{2}}{E^{+}_{k}-E^{-}_{k}}\,\theta(\varepsilon_{\mathrm{F}}-E^{-}_{k})\end{aligned}$$

但し,

$$E_k^{\pm} = \frac{1}{2}\left[E_f + \varepsilon_k \pm \sqrt{(E_f - \varepsilon_k)^2 + (2l+1)|V_{kl}|^2} \right]$$

$U \neq 0$の場合を議論しよう。R. P. A. に依る計算では, f 電子スピンが長距離秩序を起こすUの臨界値U_cは, フェルミ・エネルギーでの状態密度が同じである縮退のない周期的アンダーソン模型でのそれと比較すると, $(2l+1)$倍になる。これは, 電子が色々な軌道に入ることができるためにパウリ排他原理の効果が弱められるからである。一方, 軌道の長距離秩序に対する不安定もスピンの場合とほぼ同じU_cで起こることを示すことができる。これらの結果は, 軌道縮退がある模型では長距離磁気秩序が発生しにくい事を示していて, 従って, 常磁性状態を基底状態にして行うUに関する摂動計算がより大きいUの値に対しても有効であることを示している。

$U \neq 0$の場合をフェルミ液体論により議論しよう。相互作用Uによる自己エネルギーを$\hat{\Sigma}_{k\sigma mm'}(\omega)$とし, この系のグリーン関数行列$\hat{G}_{k\sigma}(\omega)$を

$$\left(\begin{array}{c|c} (\omega - E_f)\delta_{mm'} + \Sigma_{k\sigma mm'}(\omega) & -V_{mk} \\ \hline -V_{km} & \omega - \varepsilon_k \end{array} \right) \hat{G}_{k\sigma}(\omega) = 1$$

により定義すると, 準粒子のエネルギー固有値は$\hat{G}$の極から求められる。

電子比熱係数γは, フェルミ・エネルギーでの準粒子状態密度を評価する事により

$$\gamma = \sum_{k\sigma} \left\{ \mathrm{Tr}\left(1 - \frac{\partial \hat{\Sigma}}{\partial \omega}\right) \hat{\rho}^f_{k\sigma}(\varepsilon_F) + \hat{\rho}^c_{k\sigma}(\varepsilon_F) \right\}$$

と求められる。$\hat{\rho}^f_{k\sigma}$は f 電子の状態密度行列, $\hat{\rho}^c_{k\sigma}$は伝導電子の状態密度である。また, スピン帯磁率χ_sは, 準粒子エネルギーの磁場微分と準粒子状態密度の積をフェルミ・エネルギーで評価する事により

$$\chi_s = \mu_B^2 \sum_{k\sigma} \left\{ \left[\hat{\chi}_{\uparrow\uparrow k} + \hat{\chi}_{\uparrow\downarrow k} \right] \hat{\rho}^f_{k\sigma}(\varepsilon_F) + \hat{\rho}^c_{k\sigma}(\varepsilon_F) \right\}$$

ただし

$$\hat{\chi}_{\uparrow\uparrow} = 1 - \frac{\partial \hat{\Sigma}}{\partial H_\sigma}, \quad \hat{\chi}_{\uparrow\downarrow} = \frac{\partial \hat{\Sigma}}{\partial H_{-\sigma}}$$

と求められる。

ワードの恒等式についても, バーテックス関数の定義へmに関する添字を考慮する事により, 軌道縮退のないアンダーソン・モデルの場合と平行に議論することができる。

尚，$\hat{G}_{k\sigma}(\omega)$ の定義はバンド計算との関係を意識させるが，電子相関による γ と χ_s の増大因子 $1-\partial\hat{\Sigma}/\partial\omega$，$\hat{\chi}_{\uparrow\uparrow}+\hat{\chi}_{\uparrow\downarrow}$ はバンド計算には取り入れられていないものである。我々はこれらの増大因子をUに関する摂動計算に依り評価することを目指す。

5. 周期的アンダーソンモデルの変分理論

東大・物性研　柳沢　孝，斯波弘行

(1) はじめに

高密度近藤系は電子間に強い相関のある系であり，低温では Fermi 流体であると思われているがその理論的取り扱いは難しい。変分法はこのような強い相関のある系を扱う一つの有力な方法であり，それによって調べた効果を紹介する。

モデルとして，周期的 Anderson モデル

$$H=\sum_{k\sigma}\varepsilon_{k}c^{+}_{k\sigma}c_{k\sigma}-V\sum_{k\sigma}(c^{+}_{k\sigma}f_{k\sigma}+f^{+}_{k\sigma}c_{k\sigma})+\varepsilon_{f}\sum_{k\sigma}f^{+}_{k\sigma}f_{k\sigma}+U\sum_{j}n_{fj\uparrow}n_{fj\downarrow} \quad (1)$$

をとり，$U\to\infty$ とする。変分波動関数は single impurity problem の第一近似である Varma − Yafet の波動関数を格子の場合に自然に拡張した

$$\Psi=\prod_{j}\left(1+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k\sigma}e^{ikR_j}\Gamma_{k}f^{+}_{j\sigma}c_{k\sigma}\right)|\mathrm{F}> \quad (2)$$

をとる。ここで $|\mathrm{F}>$ は伝導電子だけがつまった Fermi 球であり，Nは格子点の数である。エネルギーを最小にするようにΓ_{k} を決めればよい。実は，この波動関数を用いてエネルギー期待値の計算をすることは難しく，どうやって計算するかが変分計算の一つのポイントになる。

(2) Gutzwiller 近似

Hubband モデルに対して用いられた Gutzwiller 近似[1]を周期的 Anderson モデルに適用した計算が Rice-Ueda ら[2]によってなされている。エネルギー期待値は一種の平均場近似を行うことにより

$$E=E_{\mathrm{kin}}+\sum_{\sigma}q_{\sigma}E_{\mathrm{mix},\sigma}+\varepsilon_{\mathrm{f}}n_{\mathrm{f}} \quad (3)$$