

方程式(2)および(3)を連立して解くことによってグリーン関数(1)を求めることができる。有限温度への拡張は、Thermofield Dynamics⁽²⁾を用いて行うことができる⁽³⁾。我々は連立方程式(2), (3)を iteration による最低次の近似で解き, f 電子のスペクトル関数と状態密度をフェルミ準位近傍で求めた。得られた結果は次のようにまとめられる。

くりこまれた f 準位が, フェルミ準位に近い時, 低温できわめて重い有効質量を持つ準粒子状態がフェルミ面近傍の狭い領域に出現する。又, その外側に準粒子的描像の成り立たない resonance レベルも存在する。状態密度曲線には, この準粒子状態は, フェルミ準位を中心にする鋭いピークとして現われる。重い電子状態, あるいはコヒーレント状態と呼ばれる重い電子系の低温の状態は, したがって, このような重い準粒子状態の存在によって特徴づけられる。この重い準粒子の作るバンドはきわめて狭いため, 温度の上昇とともに準粒子状態は, 熱的ゆらぎによって急激に不安定化する。したがって, この準粒子のバンド幅程度の温度では, 準粒子状態は存在できず, resonance レベルに変わる。フェルミ準位近傍の状態密度曲線には, この温度では, resonance レベルの幅の広いピークのみ残ることになり, single impurity の Kondo resonance 状態と類似した状態に移りかわる。このような変化が, 重い電子系で観測されるクロスオーバーであると考えられる。

- (1) T. Koyama and M. Tachiki, to be published in Phys. Rev. B.
- (2) H. Umezawa, H. Matsumoto and M. Tachiki, Thermo Field Dynamics and Condensed States (North-Holland, Amsterdam, 1982).
- (3) T. Koyama and M. Tachiki, preprint.

3. 周期的アンダーソン模型の重い電子状態

新潟大・理 久保晴彦, 加賀裕之

1. はじめに

我々の目的は CeCu_2Si_2 , CeAl_3 , CeCu_6 , UBe_{13} , UPt_3 等の化合物で低温で現われる重い電子状態^{1,2)}を記述する理論を作ることである。モデルは周期的アンダーソン模型を用い, 運動方程式の切断の方法³⁾で f 電子のグリーン関数を求める。状態密度の数値計算の結果をもとに, コヒーレント近藤状態とインコヒーレント近藤状態の間のクロスオーバー転移を

議論する。さらに価数揺動系についても同じ理論の枠内で記述することを試み、real gap が存在するか⁴⁾ どうかを調べる。最後に、比熱係数のピークの温度として実験的に示されているコヒーレント温度 T_0 ¹⁾ の意味を明らかにする。この温度 T_0 と、系にコヒーレンスが現われ始める温度 T_K^0 とは異なるが¹⁾、それらの間の関係も明らかにする。

2. 周期的アンダーソン模型のグリーン関数

軌道縮退のない周期的アンダーソン模型を扱う。

$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k d_{k\sigma}^+ d_{k\sigma} + \varepsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{i k\sigma} (e^{ikR_i} d_{k\sigma}^+ f_{i\sigma} + e^{-ikR_i} f_{i\sigma}^+ d_{k\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

f 電子のグリーン関数の運動方程式は、

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_f - \frac{V^2}{\omega - \varepsilon_k}) \sum_i e^{ikR_i} \langle\langle f_{i\sigma}, f_{j\sigma}^+ \rangle\rangle \\ = e^{ikR_j} + \sum_i e^{ikR_i} U \langle\langle f_{i\sigma} n_{i-\sigma}, f_{j\sigma}^+ \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

となり、 $\langle\langle f_{i\sigma} n_{i-\sigma}, f_{j\sigma}^+ \rangle\rangle$ の運動方程式は、

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_f - U) \langle\langle f_{i\sigma} n_{i-\sigma}, f_{j\sigma}^+ \rangle\rangle \\ = \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} \langle\langle d_{k\sigma} n_{i-\sigma}, f_{j\sigma}^+ \rangle\rangle - \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} \langle\langle d_{k-\sigma} f_{i-\sigma}^+ f_{i\sigma}, f_{j\sigma}^+ \rangle\rangle \\ + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_k e^{+ikR_i} \langle\langle d_{k-\sigma}^+ f_{i\sigma} f_{i-\sigma}, f_{j\sigma}^+ \rangle\rangle + \langle n_{i-\sigma} \rangle \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (3)$$

となる。もう一段階運動方程式を立て、新たに現われた二体のグリーン関数のうち、格子点の一致しないものを平均と一体のグリーン関数で置き換える切断近似を行うと、運動方程式は閉じて、スピン揺動が最低次で入った、セルフ・コンシステント f 電子グリーン関数がえられる。

グリーン関数を k 表示に変換し、小さい非対角項を落とす近似で、 f 電子のグリーン関数は次のように求まる。ここで、 $\langle n_{i\sigma} \rangle = \langle n_{\sigma} \rangle$ とする。

$$\langle\langle f_{k\sigma}, f_{k\sigma}^+ \rangle\rangle = 1 / [H^{-1}(\omega) - V^2 / (\omega - \epsilon_k)], \quad (4)$$

$$H(\omega) \equiv A(\omega) / [\omega - \epsilon_f(\omega)], \quad (5)$$

$$A(\omega) = 1 + U / (\omega - \epsilon_f - U + 2i\Delta) \times [\langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{V}{N} \sum_{k'} \langle f_{k'-\sigma}^+ d_{k'-\sigma} \rangle \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_{k'}} - \frac{1}{\omega + \epsilon_{k'} - 2\epsilon_f - U} \right)], \quad (6)$$

$$\epsilon_f(\omega) = \epsilon_f - U / (\omega - \epsilon_f - U + 2i\Delta) \times [-i\Delta \langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{V^2}{N} \sum_{k'} \langle d_{k'-\sigma}^+ d_{k'-\sigma} \rangle \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_{k'}} - \frac{1}{\omega + \epsilon_{k'} - 2\epsilon_f - U} \right)], \quad (7)$$

ここで、 $\Delta \equiv \pi V^2 / (2D)$ 、 $2D$ はバンド幅。

3. 状態密度と比熱係数

3-1 状態密度の特徴と特性温度

f 電子の状態密度を(5)の $H(\omega)$ で表わすと、次のようになる。

$$\begin{aligned} \rho_f(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_k \langle\langle f_{k\sigma}, f_{k\sigma}^+ \rangle\rangle \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[H(\omega) \left\{ 1 - \frac{\Delta}{\pi} H(\omega) \ln \left(\frac{D - \omega + V^2 H(\omega)}{-D - \omega + V^2 H(\omega)} \right) \right\} \right], \quad (8) \end{aligned}$$

$U \rightarrow \infty$ の場合、 $H(\omega)$ についての積分方程式は(4), (5), (6), (7)から、次のように求まる。

$$H(\omega) = \frac{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{\Delta}{\pi} \int \frac{H^*(\omega') f(\omega')}{\omega' - \omega + V^2 H^*(\omega')} d\omega'}{\omega - \epsilon_f + i\Delta \langle n_{-\sigma} \rangle + P(\omega)}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned}
 P(\omega) &= \frac{A}{\pi} \int_{-D}^D \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega - i\delta} d\omega' \\
 &= \frac{A}{\pi} \left[\ln \left(\frac{2\pi k_B T}{D} \right) + \operatorname{Re} \Psi \left(\frac{1}{2} - i \frac{(\omega - \epsilon_F)}{2\pi k_B T} \right) \right] + i A f(\omega), \quad (10)
 \end{aligned}$$

ここで、 ϵ_F はフェルミ準位、 $f(\omega)$ はフェルミ分布関数、 Ψ はディ・ガンマ関数である。 $H(\omega)$ の積分方程式(9)の中で積分の項は、被積分関数の分母の虚数部が無小でないと期待されるので、近似的に無視することができる(数値計算では、 ω の各点で $H(\omega)$ をセルフ・コンシステントに求めた)。

この時、近藤格子極限 ($\langle n_\sigma \rangle = 1/2$) において、 $\rho_f(\epsilon_F)$ は次のような温度依存性を示す。

$$\left. \begin{aligned}
 k_B T_K^0 &= CD \exp \left[-\frac{\pi}{A} (\epsilon_F - \epsilon_f) \right], \quad \rho_f = \frac{3}{8\pi A} \\
 k_B T_K &= CD \exp \left[-\frac{\pi}{2A} (\epsilon_F - \epsilon_f) \right], \quad \rho_f \simeq \frac{3A}{\pi (\epsilon_F - \epsilon_f)^2}, \\
 k_B T &= CD \gg k_B T_K, \quad \rho_f \simeq \frac{3A}{4\pi (\epsilon_F - \epsilon_f)^2}
 \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

ただし、 $C \equiv (2/\pi) e^{\gamma} = 1.13$ 。すなわち、フェルミ面上での状態密度は、 T_K で盛り上がり、 T_K^0 で極大値を持ち、さらに低温では減少して行く。従って T_K^0 は、系がコヒーレンスを持ち始める温度と云う事ができる。以上のことは数値計算の結果からも示すことができる。

3-2 重い電子状態

数値計算は $H(\omega)$ と f 電子数についてセルフ・コンシステントに行った。使用したパラメータの値は、 $D = 1$ (eV), $U/D = 30$, $V/D = 0.1$ である。

近藤格子領域での f 電子の状態密度の温度変化を Fig. 1 に示す。十分高温では裸の f 準位の所に共鳴準位が存在する。 T_K でフェルミ面上に近藤共鳴が現われ始める。 T_K^0 になると近藤共鳴の成長は止まり重い電子状態 (Heavy Fermion 状態) が現われ始める。更に低温では、Heavy Fermion 状態が成長すると同時にフェルミ面上にギャップが形成されて行く。この時、Heavy Fermion 状態のバンド幅及びピーク位置は $k_B T_K^0/10$ 程度である¹⁾。

次に比熱係数の計算結果を Fig. 2 に示す。比熱係数 γ のピークを与える温度 T_0 は Heavy Fermion のバンド幅に相当する温度程度である。ここで得られた、 γ ピークの温度 T_0 と T_K^0 の関係及び γ の温度依存性は、 CeCu_2Si_2 , CeAl_3 の実験結果の傾向を定性的に説明して

いる¹⁾。

3-3 価数揺動状態

価数揺動領域での f 電子の状態密度の温度変化を Fig. 3 に示す。どの温度でも、f 準位の共鳴だけが現われている。フェルミ面上のギャップは近藤格子に比べてかなり高温から現われて、real gap になるように思われる⁴⁾。

近藤格子領域から価数揺動領域への遷移は、裸の f 準位をフェルミ準位に近づけて来ると、連続的に起こることがわかった。そして、裸の f 準位がフェルミ面の極めて近傍に来れば完全な価数揺動状態になる。

4. 結論

- ① 比熱係数のピークを与える温度として実験的に求めたコヒーレント温度 T_0 は、Heavy Fermion のバンド幅に対応した特性温度である。
- ② 不純物的な各サイトでの近藤共鳴がコヒーレンスを持ち始める温度は T_K^0 である。 T_K^0 は T_0 より一桁くらい大きい¹⁾。
- ③ 実験的に観測されている Heavy Fermion 状態は価数揺動に近い Heavy Fermion 状態と思われる。 T_K^0 が非常に小さい近藤格子極限の場合には、 T_0 は更に低いので近藤共鳴しか観測されないこともあると思われる。

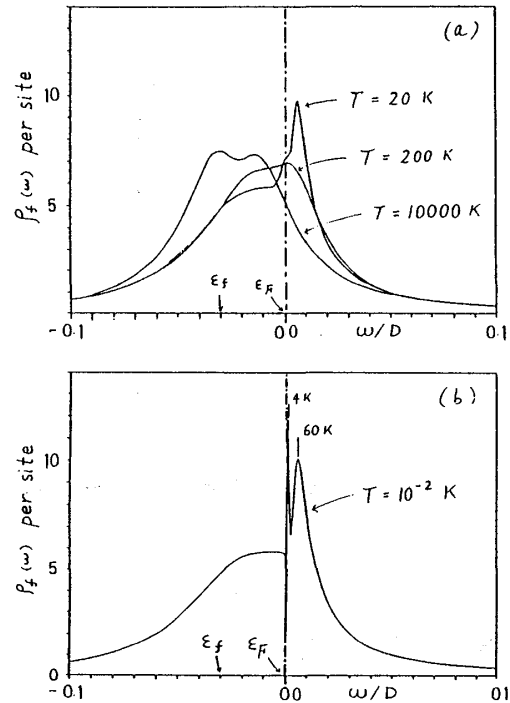


Fig. 1 近藤格子領域の状態密度。 $\epsilon_f = -0.03$, $T_K = 580$ K, $T_K^0 = 29$ K。(a) $T = 10000$ K ($n_f = 0.66$), $T = 200$ K ($n_f = 0.75$), $T = 20$ K ($n_f = 0.74$)。 (b) $T = 10^{-2}$ K ($n_f = 0.73$)。 Heavy Fermion ピークの位置及びバンド幅は 4 K 程度。

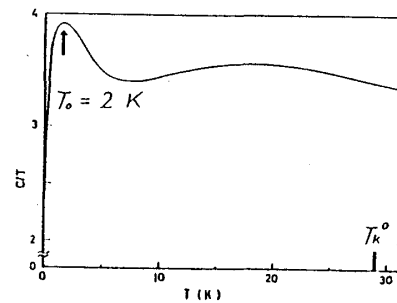


Fig. 2 近藤格子領域の比熱係数。 $\epsilon_f = -0.03$, $T_K = 580$ K, $T_K^0 = 29$ K。

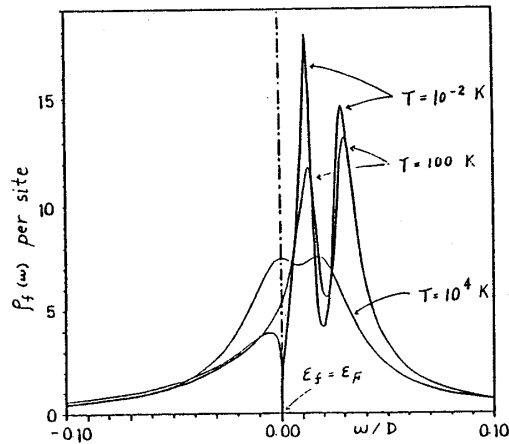


Fig. 3 価数揺動領域の状態密度。 $\epsilon_f = \epsilon_F$ 。 $T = 10^4$ K ($n_f = 0.66$), $T = 100$ K ($n_f = 0.48$), $T = 10^{-2}$ K ($n_f = 0.44$)。

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

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma m} E_f f_{k\sigma m}^+ f_{k\sigma m}$$