

CDW 中の $U \rightarrow \infty$, $N_J \rightarrow \infty$ Anderson 不純物

(1986年11月4日受理)

常盤大学 三 沢 進

要 旨

1次元電荷密度波 (CDW) 中の $U \rightarrow \infty$, $N_J \rightarrow \infty$ Anderson 不純物 (U は局在電子間の Coulomb 斥力, N_J はスピン軌道縮重度) の 1 重項状態を考察する。エネルギー, 価数 (局在電子数) と帯磁率を混合原子価領域から局在モーメント領域にわたって計算する。特にこれらの物理量が CDW の位相にどのように依存するかを調べ, ピン止めへの寄与を考察する。

§ 1. 序 論

近年, 擬 1 次元導体中の非整合電荷密度波 (CDW) と不純物の相互作用に大きな興味もたれている。Tütto-Zawadowski¹⁾ (TZ) は, CDW 中の非磁性不純物状態を quantum local perturbation によって考察し, 束縛状態や非線形伝導を詳しく調べた。磁性不純物については, NbSe₃ の CDW 中の Fe 不純物による非線形伝導が, Everson-Coleman²⁾ によって観測されている。また, Tua-Zawadowski-Ruvalds³⁾ (TZR) はスピン 1/2 磁性不純物の CDW の運動に対する効果を, s-d 交換結合の 2 次までの Josephson 的過程を調べることにより, 理論的に考察した。彼らは, この近似の枠内で, 磁氣的ピン止めは位相の second harmonic $\cos 2(\varphi - \varphi_0)$ には寄与するが, first harmonic $\cos(\varphi - \varphi_0)$ には寄与しないという結果を得た。本研究では, 1次元 CDW 中の $U \rightarrow \infty$, $N_J \rightarrow \infty$ Anderson 不純物 (U は局在電子間の Coulomb 斥力, N_J はスピン軌道縮重度) を考察する。

正常金属中の場合には, 大きな N_J をもつ $U \rightarrow \infty$ Anderson 不純物の理論は, 近年大きく進展した。 $1/N_J$ 展開^{4,5)} の結果は Bethe 仮説の厳密解とよく合うことが示された。^{6,7)} また, Gunnarson-Schönhammer⁹⁾ はこの方法が $N_J \rightarrow \infty$ の極限で厳密であることを示した。Rasul-Hewson⁸⁾ は, この方法が, 混合原子価領域 (局在電子準位が浅い) のみならず, 局在モーメント領域 (局在電子準位が深い) でも有効であることを示した。超伝導体中の場合につ

いては, Proetto-Balseiro¹⁰⁾ が混合原子価不純物に $1/N_j$ 展開を適用している。

本研究では, CDW 中の $U \rightarrow \infty$, $N_j \rightarrow \infty$ Anderson 不純物を, 混合原子価のみならず, 局在モーメント領域にわたっても調べ, この不純物の 1 重項状態の, エネルギー, 価数 (局在電子数) と帯磁率を計算し, ピン止めへの効果を議論する。CDW については, 簡単のため 1 次元系を考え, Brazovskii-Dyalooshinskii¹¹⁾ (BD) が不純物のない系に用いた方法より「位相」 (phase fluctuation) を導入する。

§ 2 モデル

1 次元 Peierls-Frölich 系中の N_j 重縮退 Anderson 不純物に対する total Hamiltonian は, BD による CDW の表現法を利用して, 次のように表わされる。

$$H_{tot} = H_c + H_{c-p} + H_p + H_d + H_{c-d}, \quad (2.1)$$

$$H_c = \sum_{\sigma} \int dx \hat{c}_{\sigma}^{\dagger}(x) \left[-i v_F \frac{\partial}{\partial x} \hat{\tau}_3 \right] \hat{c}_{\sigma}(x), \quad (2.2)$$

$$H_{c-p} = \sum_{\sigma} \int dx \hat{c}_{\sigma}^{\dagger}(x) \left[\lambda P(x) \hat{\tau}_+ + \lambda P^{\dagger}(x) \hat{\tau}_- \right] \hat{c}_{\sigma}(x), \quad (2.3)$$

$$H_p = \sum_q \omega(q) b_q^{\dagger} b_q, \quad (2.4)$$

$$H_d = \sum_m \varepsilon_{dm} d_m^{\dagger} d_m + \frac{U}{2} \sum_{m \neq m'} d_m^{\dagger} d_m^{\dagger} d_{m'} d_{m'}, \quad (2.5)$$

$$H_{c-d} = \sum_{\sigma m} \int dx \left[\hat{c}_{\sigma}^{\dagger}(x) \hat{V}(x) d_m + d_m^{\dagger} \hat{V}^{\dagger}(x) \hat{c}_{\sigma}(x) \right] \delta(x - x_i). \quad (2.6)$$

ここで, $Q (\equiv 2k_F)$ は CDW の波数であり, k_F は Fermi 波数である。スピン σ と $\pm k_F$ に近い波数をもつ伝導電子の消滅演算子を, $c_{\sigma\pm}(x) e^{\pm iQx/2}$ とするとき,

$$\hat{c}_{\sigma}(x) = \begin{bmatrix} c_{\sigma+}(x) \\ c_{\sigma-}(x) \end{bmatrix}, \quad (2.7)$$

$$c_{\sigma n}(x) = \sum_{|k| < Q/2} c_{k+nQ/2, \sigma} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}} \quad \text{for } n = \pm. \quad (2.8)$$

L は系の長さである。また,

$$\hat{\tau}_3, \hat{\tau}_{\pm} = \frac{1}{2} (\hat{\tau}_1 \pm i \hat{\tau}_2)$$

は Pauli 行列である。フォノン場 $P(x) e^{iQx}$ は振動数 $\omega(q)$ のフォノンの消滅演算子 b_q を用いて,

$$P(x) = \sum_{|q| \ll Q} \frac{1}{\sqrt{N}} (b_{Q+q} + b_{-Q-q}^{\dagger}) e^{iqx}, \quad (2.9)$$

で与えられ (N は格子点数), 電子-フォノン結合定数 λ で表わした。局在電子については, 磁気量子数 m ($-J \leq m \leq J$, $N_J = 2J + 1$) の d 電子の消滅演算子を d_m とした。磁場 H の下で, この d 電子準位 ε_{dm} は

$$\varepsilon_{dm} = \varepsilon_d - \mu_B g m H, \quad (2.10)$$

のように分裂する。ここで, μ_B は Bohr 磁子であり, g は Lande の g 因子である。

Coulomb 斥力 U は無限に大きく, d 電子の個数は 1 を越えないとする。s-d mixing V によって, $\tilde{V}(x)$ は,

$$\tilde{V}(x) = V \begin{bmatrix} e^{-iQx/2} \\ e^{iQx/2} \end{bmatrix}, \quad (2.11)$$

で与えられる。不純物の位置を x_i とした。

次に, Hartree-Fock 的な CDW 状態を考え, BD にならって

$$\lambda P(x) = \Delta e^{i\varphi(x)} \quad (2.12)$$

とする。ここで, Δ は $\lambda P(x)$ の平衡値で, CDW 相のオーダーパラメタとみなす。 $\varphi(x)$ は phase fluctuation であり, amplitude fluctuation は無視した。伝導電子場に次の位相 (ゲージ) 変換

$$\hat{a}_{\sigma}(x) = \begin{bmatrix} a_{\sigma+}(x) \\ a_{\sigma-}(x) \end{bmatrix} = \exp \left\{ -i \frac{\varphi(x)}{2} \hat{\tau}_3 \right\} \hat{c}_{\sigma}(x), \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} a_{\sigma n}(x) &= e^{-in\varphi(x)/2} c_{\sigma n}(x) \\ &= \sum_{|k| < Q/2} a_{k+nQ/2, \sigma} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}} \quad \text{for } n = \pm, \end{aligned} \quad (2.14)$$

をほどこすと, Hamiltonian の伝導電子部分は,

$$\begin{aligned}
 & H_c + H_{c-p} + H_{c-d} \\
 &= \sum_{k\sigma n} n v_F k a_{k+nQ/2,\sigma}^\dagger a_{k+nQ/2,\sigma} \\
 &+ \sum_{k\sigma} \Delta (a_{k+Q/2,\sigma}^\dagger a_{k-Q/2,\sigma} + a_{k-Q/2,\sigma}^\dagger a_{k+Q/2,\sigma}) \\
 &+ \sum_{\sigma} \int dx \hat{a}_{\sigma}(x) \frac{v_F}{2} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \hat{a}_{\sigma}(x) \\
 &+ \sum_{k\sigma m} \frac{V e^{-ikx_1}}{\sqrt{L}} (a_{k+Q/2,\sigma}^\dagger e^{-i\varphi_i/2} + a_{k-Q/2,\sigma}^\dagger e^{i\varphi_i/2}) d_m + \text{h.c.} \quad (2.15)
 \end{aligned}$$

のようになる。ここで,

$$\varphi_i \equiv Q x_i + \varphi(x_i), \quad (2.16)$$

であり, k とは $|k| < Q/2$ の領域に限る。BD の汎函数積分法によれば, H_p と (2.15) の第 3 項により phase Lagrangean が導かれる。我々の導入した phase mode は Zawadowski 達^{1,3)} のものと異なり位置依存性を持ち, Pietronero-Strässler-Toombs¹²⁾ や Fukuyama¹³⁾ の導いた phase Hamiltonian H_{phase} に従うと考えることができる。

さらに次の Bogoliubov 変換

$$\left\{ \begin{aligned} a_{k+Q/2,\sigma} &= u_k \alpha_{k\sigma} + v_k \beta_{-k\sigma}^\dagger, \\ a_{k-Q/2,\sigma} &= -v_k \alpha_{k\sigma} + u_k \beta_{-k\sigma}^\dagger, \end{aligned} \right. \quad (2.17)$$

$$\left\{ \begin{aligned} a_{k+Q/2,\sigma} &= u_k \alpha_{k\sigma} + v_k \beta_{-k\sigma}^\dagger, \\ a_{k-Q/2,\sigma} &= -v_k \alpha_{k\sigma} + u_k \beta_{-k\sigma}^\dagger, \end{aligned} \right. \quad (2.18)$$

をほどこすと, CDW 状態の準粒子と d 電子と phase mode に対する次の有効 Hamiltonian を得る:

$$H_{eff} = H_0 + H_1 + H_{phase}, \quad (2.19)$$

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \sum_{k\sigma} E_k \alpha_{k\sigma}^\dagger \alpha_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} E_{-k} (\beta_{k\sigma}^\dagger \beta_{k\sigma} - 1) \\
 &+ \sum_m \varepsilon_{dm} d_m^\dagger d_m + \frac{U}{2} \sum_{m \neq m'} d_m^\dagger d_m^\dagger d_m' d_m', \quad (2.20)
 \end{aligned}$$

$$H_1 = \sum_{k\sigma m} [A_k \alpha_{k\sigma}^\dagger d_m + \text{h.c.}] + \sum_{k\sigma m} [B_k \beta_{k\sigma} d_m + \text{h.c.}]. \quad (2.21)$$

ここで,

$$E_k = \sqrt{D^2 + (v_F k)^2}, \quad (2.22)$$

$$A_k = \frac{V}{\sqrt{L}} e^{-ikx_i} (u_k e^{-i\varphi_i/2} - v_k e^{i\varphi_i/2}), \quad (2.23)$$

$$B_k = \frac{V}{\sqrt{L}} e^{ikx_i} (v_{-k} e^{-i\varphi_i/2} + u_k e^{i\varphi_i/2}), \quad (2.24)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{v_F k}{E_k}\right), \quad (2.25)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{v_F k}{E_k}\right), \quad (2.26)$$

しかし、本研究では $\varphi(x)$ の具体的な運動は追わず、 φ_i を断熱パラメタと考え、

$$H = H_0 + H_1(\varphi_i) \quad (2.27)$$

に従う電子系の束縛状態を考察し、そのエネルギーを φ_i の関数として求め、それを phase mode $\varphi(x)$ に対するピン止めエネルギーと考える。この取扱いの有効性をみるため、上の方法を補遺で通常非磁性不純物に適用してみる。その結果は、Fukuyama-Lee¹⁴⁾ によって考察されている有効 Hamiltonian と本質的に一致する。

§ 3 方法

正常金属中の場合の Inagaki¹⁵⁾ と超伝導体中の Proetto-Balseiro¹⁰⁾ の摂動の方法に従って、(2.27) に従う系の 1 重項状態の波動関数を次のように表わす。

$$\psi_s = \psi_0 + \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}, \quad (3.1)$$

$$\psi_0 = \{ \tilde{\Gamma}_0 + \sum_{k\sigma} \sum_{k'\sigma'} \tilde{\Gamma}_{k'\sigma';k\sigma} \alpha_{k'\sigma'}^\dagger \beta_{k\sigma}^\dagger + \dots \} |0\rangle, \quad (3.2)$$

$$\psi_{\sigma} = \{ \sum_{km} \tilde{\Gamma}_{m;k\sigma} d_m^\dagger \beta_{k\sigma}^\dagger + \dots \} |0\rangle. \quad (3.3)$$

ここで、 $|0\rangle$ は不純物のない CDW の BCS 型の基底状態である。式 (3.1) の波動関数を

Schrödinger 方程式

$$(H_{eff} - E_s) \psi_s = 0 \quad (3.4)$$

に代入すると、1重項状態エネルギー E_s を決める一連の方程式が得られる。ここで、 E_s は不純物のないときの BCS 型の基底状態エネルギーからの差として定義されるものとする。

V の2次まででは、

$$\begin{aligned} E_s &= \sum_{k\sigma m} \frac{|B_k|^2}{E_s - \varepsilon_{dm} - E_k} \\ &= \sum_{k\sigma m} \frac{|V|^2 (1 - \Delta \cos \varphi_i / E_k)}{L(E_s - \varepsilon_{dm} - E_k)} \end{aligned} \quad (3.5)$$

式(3.5)の k 和 ($|k| < Q/2$) を積分におきかえると、

$$E_s = \Gamma_N N_J^{-1} \sum_m R(E_s - \varepsilon_{dm}). \quad (3.6)$$

ここで、

$$\Gamma_N = \sum_{\sigma, m} |V|^2 / (\pi v_F) = N_J \Gamma_1 \quad (\Gamma_1 = 2 |V|^2 / (\pi v_F)).$$

函数 $R(z)$ は次のように表わされる。

$$R(z) = -\ln \frac{2v_F k_F}{\Delta} - \frac{z - \Delta \cos \varphi_i}{\sqrt{z^2 - \Delta^2}} \ln \left| \frac{z - \sqrt{z^2 - \Delta^2}}{\Delta} \right| \quad \text{for } |z| > \Delta, \quad (3.7)$$

$$R(z) = -\ln \frac{2v_F k_F}{\Delta} - \frac{z - \Delta \cos \varphi_i}{\sqrt{\Delta^2 - z^2}} \left(\arcsin \frac{z}{\Delta} + \frac{\pi}{2} \right) \quad \text{for } |z| < \Delta. \quad (3.8)$$

ここで、 Δ , $|E_s - \varepsilon_{dm}| \ll v_F k_F$ とした。式(3.7)と(3.8)は $\Delta \cos \varphi_i$ の項をもち、この項の存在により、エネルギー、価数、帯磁率が位相依存性をもつことになる。

§ 4 エネルギー

1重項状態エネルギーは、(3.6)で、磁場 $H=0$ として得られる次式によって決められる。

$$E_s = \Gamma_N R(E_s - \varepsilon_d). \quad (4.1)$$

$N_J \rightarrow \infty$, $\Gamma_N = N_J \Gamma_1 =$ 一定の極限を考えると、正常金属 ($\Delta=0$) の場合には(4.1)は厳密であり、⁹⁾ 混合原子価領域のみならず局在モーメント領域をも描写できる。⁸⁾ 式(4.1)を

$$E_A \equiv E_s - \varepsilon_d \quad (4.2)$$

を用いて,

$$E_A + \varepsilon_d = \Gamma_N R(E_A), \quad (4.3)$$

と表わすと、解の概観は図1の $R(E_A)$ の形からわかる。

正常状態 ($\Delta = 0$) では E_A と E_s は多くの人々^{8,9)} によって求められているように、
 $|\varepsilon_d| \leq \Gamma_N$ (混合原子価領域) では、

$$E_{A0} \cong -\varepsilon_d - \Gamma_N \ln(2v_F k_F / \Gamma_N), \quad (4.4)$$

$$E_{s0} \cong -\Gamma_N \ln(2v_F k_F / \Gamma_N); \quad (4.5)$$

$\varepsilon_d \ll -\Gamma_N$ (局在モーメント領域) では、

$$E_{A0} \cong -v_F k_F \exp(\varepsilon_d / \Gamma_N), \quad (4.6)$$

$$E_{s0} \cong \varepsilon_d - v_F k_F \exp(\varepsilon_d / \Gamma_N). \quad (4.7)$$

一般の Δ の値のときの (4.1) または (4.3) の解を数値計算によって求め、結果を図2-4に

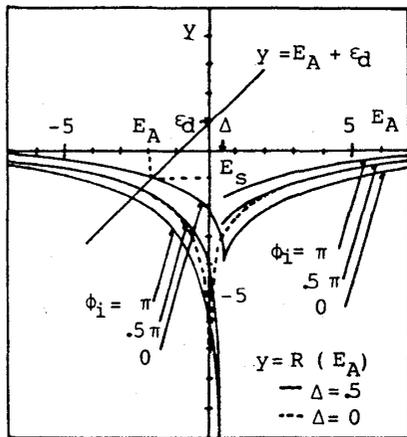


図1 $\Delta = 0.5, \Gamma_N = 1, v_F k_F = 10$ のときの函数 $R(E_A)$ 。曲線 $y = R(E_A)$ と直線 $y = E_A + \varepsilon_d$ の交点の座標 (E_A, E_s) が式 (4.3) の解を与える。

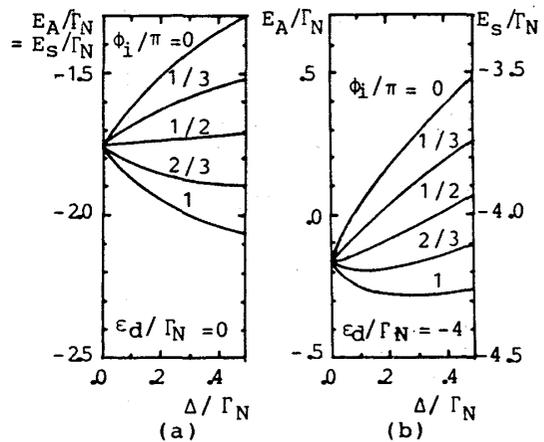


図2 $v_F k_F / \Gamma_N = 10$ と ϕ_i のいろいろな値のオーダーパラメータ Δ 依存性。(a)では $\varepsilon_d / \Gamma_N = 0$ (混合原子価領域), (b)では $\varepsilon_d / \Gamma_N = -4$ (局在モーメント領域) とした。

示す。図2に示すように、 E_A と E_S のオーダーパラメタ Δ 依存性は、 φ_i の値によって様々に変化する。 $\Delta \ll |E_{A0}|$ のときの E_A は近似的に

$$E_A \cong E_{A0} + n_{s0} \Delta \cos \varphi_i \cdot \ln(2|E_{A0}|/\Delta), \quad (4.8)$$

ここで、 $n_{s0} = \Gamma_N / (\Gamma_N + |E_{A0}|)$ は、後で§5でみるように、1重項状態不純物の価数の正常状態($\Delta=0$)中でのときの値である。

式(4.4)–(4.8)や図2からわかるように、 Δ が十分小さければ、 $E_A = E_S - \varepsilon_d$ は負であり、 Δ の値が

$$\Delta_c(\varphi_i) = 2v_F k_F \exp\left(\frac{\varepsilon_d}{\Gamma_N} - \frac{\pi \cos \varphi_i}{2}\right) \quad (4.9)$$

のところで、 $E_A = 0$ となる。この値は(4.1)で、 $E_A = 0$ とすることにより求められる。

$\Delta > \Delta_c(\varphi_i)$ では $E_A > 0$ となる。さらに、 $\Delta \gg \Delta_c(\varphi_i)$ のときには、 $0 < \Delta - E_A \ll \Delta$ の範囲に、

$$E_A \cong \Delta \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{2} \left[\frac{\Gamma_N (1 - \cos \varphi_i)}{\Delta + \varepsilon_d + \Gamma_N \ln(2v_F k_F / \Delta)} \right]^2 \right\} \quad (4.10)$$

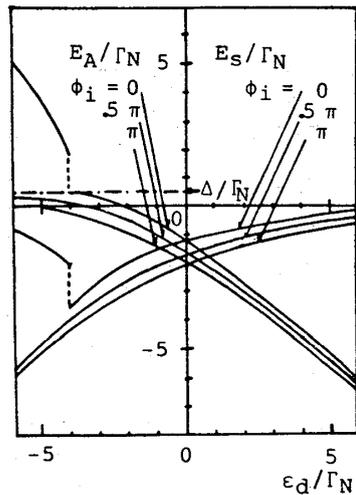


図3 $\Delta/\Gamma_N=0.5$, $v_F k_F/\Gamma_N=10$ と φ_i のいろいろな値のときの E_A と E_S の局在電子準位 ε_d 依存性。

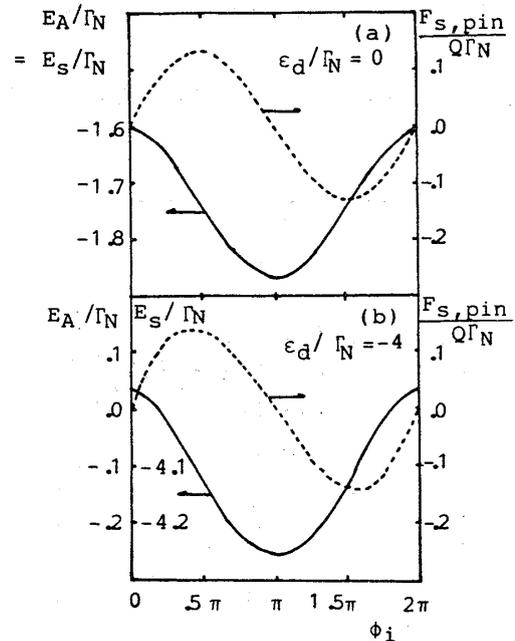


図4 $\Delta/\Gamma_N=0.1$ と $v_F k_F/\Gamma_N=10$ のときの E_A , E_S と $F_{S,pin}$ の位相 φ_i 依存性。(a)では $\varepsilon_d/\Gamma_N=0$ (混合電子価領域)、(b)では $\varepsilon_d/\Gamma_N=-4$ (局在モーメント領域)とした。

の解をもつ。但し、 $\varphi_i = 0$ のときを除く。 $\varphi_i = 0$ のときには、 $N_j \rightarrow \infty$ の極限では、 $E_A > \Delta$ の範囲に異常な解をもつ。これらの様相は、 E_A と E_s の ε_d を表わした図 3 にも現われている。

図 4 には、 E_A と E_s の位相 φ_i 依存性を示した。 $E_s(\varphi_i)$ を断熱ポテンシャルと考え、phase Hamiltonian H_{phase} を考えると、 $E_s(\varphi_i)$ の φ_i 依存性により、pinning がおこることになる。図 4 で、 $E_A(\varphi_i)$ の様相は、混合原子価と局在モーメントの両領域であまり差異がない。これは、(4.8) についてもいえる（混合原子価領域では、局在モーメント領域に比べて、 n_{s0} は小さく、 $|E_{A0}|$ は大きいので、両領域で $\cos \varphi_i$ の係数の大きさがあまり異なる）。

次に、pinning mode の動力学を調べるかわりに、TZ の熱力学的方法に従って、pinning force $F_{s, pin}$ を計算してみると、

$$F_{s, pin} \equiv -Q \frac{\partial E_s}{\partial \varphi_i} = -\frac{\partial E_A}{\partial \varphi_i} = \begin{cases} -\frac{Q \Gamma_N \Delta \sin \varphi_i}{(\Gamma_N R'(E_A) - 1) \sqrt{E_A^2 - \Delta^2}} \ln \left| \frac{E_A - \sqrt{E_A^2 - \Delta^2}}{\Delta} \right| & \text{for } |E_A| > \Delta, \\ -\frac{Q \Gamma_N \Delta \sin \varphi_i}{(\Gamma_N R'(E_A) - 1) \sqrt{\Delta^2 - E_A^2}} \left[\arcsin \frac{E_A}{\Delta} + \frac{\pi}{2} \right] & \text{for } |E_A| < \Delta. \end{cases} \quad (4.11)$$

ここで、 $R'(E_A)$ は $R(z)$ の 1 階導関数である。 $F_{s, pin}$ の数値計算による φ_i 依存性を、図 4 に示した。また、 $\Delta \ll |E_{A0}|$ のときの $F_{s, pin}$ は次のように近似される。

$$F_{s, pin} \cong Q n_{s0} \Delta \sin \varphi_i \cdot \ln(2|E_{A0}|/\Delta). \quad (4.12)$$

式(4.1)と(4.11)より、1重項状態の $U \rightarrow \infty$ Anderson 不純物による pinning は、TZ が s-d 交換結合モデルに対して得た結果と異なり、位相の first harmonic $\cos \varphi_i$ ($\sin \varphi_i$) に寄与することがわかる。

§ 5 価数と帯磁率

1重項状態不純物の価数 n_s と帯磁率 χ_s は、各々(4.1)と(3.6)から次のように求められる。

$$n_s = \frac{\partial E_s}{\partial \varepsilon_d} = \frac{\Gamma_N R'(E_A)}{\Gamma_N R'(E_A) - 1}, \quad (5.1)$$

$$\chi_s = - \frac{\partial^2 E_s}{\partial H^2} \Big|_{H=0} = \frac{1}{3} \mu_B^2 g^2 J(J+1) n_s \frac{R''(E_A)}{R'(E_A)}. \quad (5.2)$$

ここで、 $R''(z)$ は $R(z)$ の 2 階導関数である。

これらの物理量の Δ 依存性を図 5, 6 に示す。また、 $\Delta \ll |E_{A0}|$ のときの近似形は、

$$\begin{aligned} n_s &\cong \frac{\Gamma_N}{\Gamma_N - E_A} \left\{ 1 - \frac{\Delta \cos \varphi_i}{\Gamma_N - E_A} \left(\ln \frac{2|E_A|}{\Delta} - 1 \right) \right\} \\ &\sim n_{s0} \left\{ 1 - \frac{n_{s0} \Delta \cos \varphi_i}{\Gamma_N} \left[(1 - n_{s0}) \ln \frac{2|E_A|}{\Delta} - 1 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \chi_s / \frac{1}{3} \mu_B^2 J(J+1) &\cong - \frac{n_s}{E_A} \left\{ 1 + \frac{\Delta \cos \varphi_i}{E_A} \left(\ln \frac{2|E_A|}{\Delta} - 2 \right) \right\} \\ &\sim \frac{n_s}{|E_{A0}|} \left\{ 1 - \frac{\Delta \cos \varphi_i}{|E_{A0}|} \left[(1 - n_{s0}) \ln \frac{2|E_{A0}|}{\Delta} - 2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

ここで n_{s0} , χ_{s0} はこれらの量の正常状態 ($\Delta = 0$) 中での値であり、

$$n_{s0} = \Gamma_N / (\Gamma_N + |E_{A0}|), \quad (5.5)$$

$$\chi_{s0} = \frac{1}{3} \mu_B^2 g^2 J(J+1) \frac{n_{s0}}{|E_{A0}|}. \quad (5.6)$$

で与えられる。

図 7 に、 n_s と χ_s の φ_i 依存性を示した。式 (5.3) と (5.4) にみるように、これらの量の

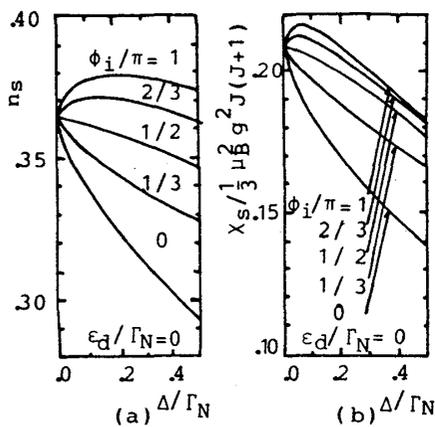


図 5 $\epsilon_d/\Gamma_N = 0$ (混合電子価領域) での $v_F k_F/\Gamma_N = 10$ と φ_i のいろいろな値のときの (a) 価数 n_s と (b) 帯磁率 χ_s の Δ 依存性。

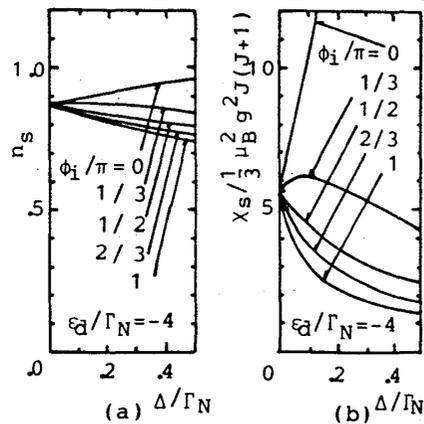


図 6 $\epsilon_d/\Gamma_N = -4$ (局在モーメント領域) での $v_F k_F/\Gamma_N = 10$ と φ_i のいろいろな値のときの (a) 価数 n_s と (b) 帯磁率 χ_s の Δ 依存性。

φ_i 依存性は、 $|E_{A0}|$ と n_{s0} の大きさによって大きく変化する。そして、函数 $n_s(\varphi_i)$ と $\chi_s(\varphi_i)$ の曲率は混合原子価領域 (図2にみるように $|E_{A0}|$ が比較的大で、 $n_{s0} \ll 1$) から局在モーメント領域 ($|E_{A0}|$ が小さく、 $n_{s0} \sim 1$) とで逆転している。また、局在モーメント領域における帯磁率は φ_i の変化によって比較的大きく変化し、CDW運動に伴うこの変化が実験的に観測される可能性もある。

最後に、ピン止めエネルギー $E_s(\varphi_i)$ への磁場 H の影響を調べる。弱い磁場 H に対して、このエネルギーは、

$$E_s(\varphi_i, H) \cong E_s(\varphi_i, H=0) - \chi_s(\varphi_i) H^2, \quad (5.7)$$

と近似される。従って、弱い磁場により、図7 (a) のときはピン止めが少し強められ、図7 (b) のときは弱められる。

§ 6 結 論

1次元CDW中の $U \rightarrow \infty$ Anderson 不純物の1重項状態を、縮重度 $N_j \rightarrow \infty$ の極限で、混合原子価から局在モーメントの全領域にわたって考察した。状態エネルギーは、位相 φ_i ($\equiv Qx_i + \varphi(x_i)$) 依存性をもち、このことがCDWのピン止めをもたらす。このピン止めは、s-d交換結合モデルに対して2次までの過程を調べた結果と異なり、phase mode の first harmonic ($\cos \varphi_i$) に寄与する。1重項状態不純物の価数と帯磁率も計算し、特に局在モーメント領域での帯磁率の位相依存性は観測できるほど大きくなり得ることがわかった。

補 遺

§2と同様の方法で、通常非磁性不純物の問題に適用してみる。不純物の位置 x_i での短距離力ポテンシャル $V_0 \delta(x - x_i)$ を仮定すると、相互作用の項は、

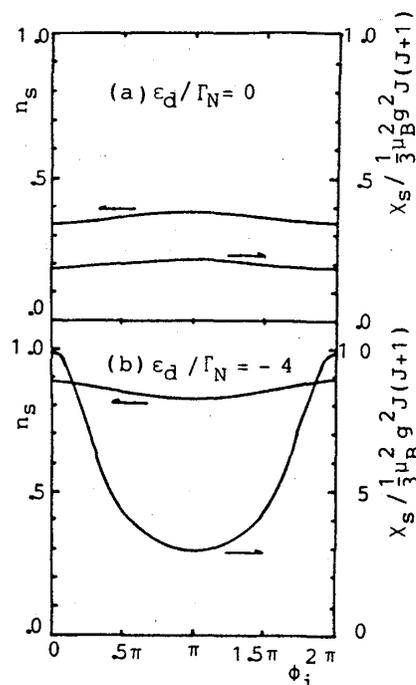


図7 $\Delta/\Gamma_N = 0.1$ と $v_F k_F/\Gamma_N = 10$ のときの n_s と χ_s の φ_i 依存性。(a) では $\epsilon_d/\Gamma_N = 0$ (混合原子価領域)、(b) では $\epsilon_d/\Gamma_N = -4$ (局在モーメント領域) とした。

$$H_{imp} = \sum_i \sum_{\sigma'n'} \sum_{\sigma n} \int dx c_{\sigma'n'}^\dagger(x) e^{-in'Qx/2} V_0 \delta(x-x_i) c_{\sigma n}(x) e^{inQx/2}, \quad (\text{A.1})$$

と表わされる。式(2.14)で与えられる位相変換をほどこすと,

$$H_{imp} = V_0 L^{-1} \sum_i \sum_{\sigma'n'} \sum_{\sigma n} a_{k'+n'Q,\sigma}^\dagger a_{k+nQ,\sigma} e^{i(n-n')\varphi_i/2} e^{i(k-k')x_i}. \quad (\text{A.2})$$

ここで, φ_i は(2.16)で与えられる。さらに, (2.17)と(2.18)で与えられる Bogoliubov 変換をほどこすと,

$$\begin{aligned} H_{imp} = & V_0 L^{-1} \sum_i \sum_{k'\sigma'} \sum_{k\sigma} e^{i(k-k')x_i} \\ & \times [(u_{k'} u_k + v_{k'} v_k + u_{k'} v_k e^{-i\varphi_i} - v_{k'} u_k e^{i\varphi_i}) \alpha_{k'\sigma'}^\dagger \alpha_{k\sigma} \\ & + (u_{k'} u_k + v_{k'} v_k + v_{k'} u_k e^{-i\varphi_i} + u_{k'} v_k e^{i\varphi_i}) \beta_{-k'\sigma'} \beta_{-k\sigma}^\dagger \\ & + (u_{k'} v_k - v_{k'} u_k + u_{k'} u_k e^{-i\varphi_i} - v_{k'} v_k e^{i\varphi_i}) \alpha_{k'\sigma'}^\dagger \beta_{-k\sigma}^\dagger \\ & + (v_{k'} u_k - u_{k'} v_k - v_{k'} v_k e^{-i\varphi_i} + u_{k'} u_k e^{i\varphi_i}) \beta_{-k'\sigma'} \alpha_{k\sigma}] . \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

φ_i を断熱近似の枠内でパラメタとみなせば, V_0 の1次の摂動で,

$$\begin{aligned} E_{imp} & \equiv \langle 0 | H_{imp} | 0 \rangle \\ & = V_0 L^{-1} \sum_i \sum_{k\sigma} (1 - \Delta \cos \varphi_i / E_k) . \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

ここで, $|0\rangle$ は不純物のない場合の CDW の BCS 型の基底状態である。 k と $(|k| < Q/2)$ を積分におきかえると,

$$E_{imp} = \sum_i V_0 \left[\frac{2k_F}{\pi} - \frac{2\Delta}{\pi v_F} \ln \left| \frac{2v_F k_F}{\Delta} \right| \cos \varphi_i \right] . \quad (\text{A.5})$$

φ_i を BD の汎函数積分法で量子力学的変数として扱い, $E_{imp}(\{\varphi_i\})$ を断熱近似でのピン止めのエネルギーとして考えれば, (A.5) は Fukuyama-Lee¹⁴⁾ の(2.5)と本質的に一致する ($\varphi(x)$ は, 有効Hamiltonian $H_{phase} + E_{imp}(\{\varphi_i\})$ に従うと考えられる)。

参考文献

- 1) I. Tüttö and A. Zawadowski : Phys. Rev. **B 32** (1985) 2449.
- 2) M. P. Everson and R. V. Coleman : Phys. Rev. **B 28** (1983) 6659.
- 3) P. F. Tua, A. Zawadowski and J. Ruvalds : Phys. Rev. **B 29** (1984) 6525.
- 4) T. V. Ramakrishnan and K. Sur : Phys. Rev. **B 26** (1982) 1978.
- 5) F. C. Zhang and T. K. Lee : Phys. Rev. **B 28** (1983) 33.
- 6) J. W. Rasul and A. C. Hewson : J. Phys. **C 17** (1984) 2555.
- 7) J. W. Rasul and A. C. Hewson : J. Phys. **C 17** (1984) 3337.
- 8) J. W. Rasul and A. C. Hewson : J. Phys. **C 16** (1983) L 933.
- 9) O. Gunnarsson and K. Schönhammer : Phys. Rev. **B 28** (1983) 4315.
- 10) C. R. Proetto and C. A. Balseiro : Phys. Rev. **B 31** (1985) 2847.
- 11) S. A. Brazovskii and I. E. Dyaloshinskii : Sov. Phys.-JETP **44** (1976) 1233.
- 12) L. Pietronero, S. Strässler and G. A. Toombs : Phys. Rev. **B 12** (1975) 5213.
- 13) H. Fukuyama : J. Phys. Soc. Jpn. **41** (1976) 513.
- 14) H. Fukuyama and P. A. Lee : Phys. Rev. **B 17** (1978) 535.
- 15) S. Inagaki : Prog. Theor. Phys. **62** (1979) 1441.