

S-d 相互作用に於ける Bound State

沢 田 克 郎 (東教大理)

(9月20日受理)

1 この不純物のある S-d 相互作用している系でハミルトニアンが

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_k \epsilon_k (c_{k\uparrow}^* c_{k\uparrow} + c_{k\downarrow}^* c_{k\downarrow}) \\
 & + \frac{g}{V} \sum_k \sum_{k'} ((c_{k\uparrow}^* c_{k'\uparrow} - c_{k\downarrow}^* c_{k'\downarrow}) S_z \\
 & + S_+ c_{k\downarrow}^* c_{k'\uparrow} + S_- c_{k\uparrow}^* c_{k'\downarrow}) \quad (1)
 \end{aligned}$$

に於て ($S_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$), ハートレーフオックの解 ϕ_0 (フェルミ球でスピン $\uparrow, \downarrow$ の粒子が下から k_F 迄つまっているもの) から得られる "perturbative" な解が存在するとした時のこの解のエネルギーの上・下限をきめて、之と、いわゆる "Bound" state の解をくらべて、Bound state の存在をギロンしてみる。ここで "perturbative" な解と言うのは、それを Ψ_α とすると

$$|(\phi_0, \Psi_\alpha)|^2 \sim 1 \quad (2)$$

のものを意味する。この様な Ψ_α があるとした時のエネルギーの上・下限をきめるのに、次の変分原理を使う。

今、

$$J = (\Psi, (H - \bar{E})^2 \Psi) \quad (\geq 0) \quad (3)$$

という量を任意の $\Psi, \bar{E}$ を使って計算したとして、その値を $\alpha^2(\bar{E})$ としよう。すると

$$\sum_n ((E_n - \bar{E})^2 - \frac{\alpha^2(\bar{E})}{(\Psi, \Psi)}) \frac{|(\Psi_n, \Psi)|^2}{|(\Psi, \Psi)|^2} = 0 \quad (4)$$

であるから、若し

$$\frac{|(\Psi_a, \Psi)|^2}{|(\Psi, \Psi)|^2} \sim 1$$

になる様な "perturbative" な Ψ_a が存在すれば, そのエネルギー E_a は

$$\bar{E} - \frac{\alpha(\bar{E})}{\sqrt{(\Psi, \Psi)}} \lesssim E_a \lesssim \bar{E} + \frac{\alpha(\bar{E})}{\sqrt{(\Psi, \Psi)}} \quad (5)$$

のはんいになければならない。何故なら, 余り (5) のはんいより外に E_a が存在すると, それは (4) の左辺に正の大きな寄与をするので, 残りの

$\frac{|(\Psi_n, \Psi)|^2}{|(\Psi, \Psi)|^2}$ ($n \neq a$) では Cancell できなくなる。(詳しくは註を見て下さい。)

(5) で $\alpha(\bar{E})$ を $\bar{E}$ について極小にした方が巾が狭くなるので, その様に $\bar{E}$ をきめると

$$\frac{\delta J}{\delta \bar{E}} = 0 ; \quad \bar{E} = \frac{(\Psi, H\Psi)}{(\Psi, \Psi)} \quad (6)$$

となって, ふつうのエネルギーの期待値となる。

以上の事をフェルミ球 ϕ_0 に対してやってみるのであるが, 以下のギロンを簡単にする為に k_F より上の方と下の方で, (相互作用の所だけでよいが), アンバランスにしておく, 即ち

$$\frac{1}{V} \sum_{k > k_F}^k 1 = N(0) D, \quad \frac{1}{V} \sum_{k < k_F}^k 1 = N(0) D \beta^2 \quad (7)$$

として $\beta^2 < 1$ としておく。

Ψ として ϕ_0 をとると, $\bar{E}$ は

$$\bar{E} = 2 \sum_{k < k_F}^k \epsilon_k \quad (= (\phi_0, H \phi_0)) \quad (8)$$

また, (3) の J をこの $\bar{E}$ を使って計算すると

$$(\phi_0, H^2 \phi_0) = \left(2 \sum_{k < k_F} \epsilon_k \right)^2 + \frac{3}{2} \left(\frac{g}{V} \right)^2 \sum_{k > k_F}^{k_{\max}} \frac{1}{\epsilon_{k_{\min}}} \sum_{k < k_F} 1$$

となるので

$$J = \frac{3}{2} g^2 N^2(0) D^2 \beta^2 \quad (9)$$

故に, (5) より, 若し ϕ_0 に "perturbative" につながる true state Ψ_a があるとすれば, そのエネルギーは

$$2 \sum_{k < k_F} \epsilon_k - \sqrt{\frac{3}{2}} g N(0) D \beta \leq E_a \leq 2 \sum_{k < k_F} \epsilon_k + \sqrt{\frac{3}{2}} g N(0) D \beta \quad (10)$$

である。

次に "Bound" state の変分エネルギーを出すのであるが, 之はよく知られた様に, 例えば $g > 0$ では singlet の

$$\Psi_1 = \sum_{k \geq k_F}^{k_{\max}} \epsilon_k (C_{k\uparrow}^* \phi_{0\downarrow} - C_{k\downarrow}^* \phi_{0\uparrow}) \quad (11)$$

(但し $\phi_{0\downarrow}$, $\phi_{0\uparrow}$ は ϕ_0 と同じフェルミ球で, 不純物スピン下向・上向), をとると, $\bar{E}$ の一番低い状態として

$$\begin{aligned} \bar{E} &= 2 \sum_{k < k_F} \epsilon_k + \epsilon_{k_F} - \Delta \omega \\ 1 &= - \frac{3}{2} \frac{g}{V} \sum_{\ell > k_F}^{k_{\max}} \frac{1}{\epsilon_{k_F} - \Delta \omega - \epsilon_{\ell}} \end{aligned} \quad (12)$$

で

$$\Delta \omega \sim D e^{-\frac{2}{3gN(0)}} \quad (13)$$

である。故に, この singlet の状態に対して, 次のエネルギーの正確なじやうたいが存在する。

$$E_1 \leq 2 \sum_{k < k_F} \epsilon_k + \epsilon_{k_F} - \Delta \omega \quad (14)$$

そこで (14) と (10) を見くらべてみると, (11) の変分函数の方が, 粒子が 1 個多いので, (14) の ϵ_{k_F} を別にすると, (10) の巾の方には β (< 1 とした) がかかっているから, $gN(0)$ の或るきまった値に対して, β が適当に小さいと, (10) の不確定さのバンドから (14) が separate する。故に, 次の事が言える。

β の値が適当に小さければ, このはんいのギロンで ϕ_0 から “perturbative” につながる true state Ψ_a よりも下に Ψ_1 (11) につながる true Bound state が存在する。

勿論 ϕ_0 , Ψ_1 を Improve してゆけば, ϕ_0 に対する巾 (10) は小さくなるし, E_1 (14) の上限は下って行くので, “ β の値が適当に小さければ” という表現はだんだんゆるくなる。

$g < 0$ では triplet 状態で同じギロンをすると, やはり β を小さくすると “Bound” state が “perturbative” な解より下に出る。

ここで使ったいみの “perturbative” な解というのは, “Bound” state に対する “scattering” state を意味する事は明らかであろう。

同じ β に対しては triplet では $\Delta \omega \sim D e^{-\frac{2}{|g|N(0)}}$ であるから, triplet は (10) の不確定さのバンドの中にはいってしまい, singlet はバンドの下に separate する事が β の値によってはおこる。このいみで triplet の方が singlet より “存在しにくい。” 之は芳田さんの結果とはむじゆんしない。

(註) (4) 式で $\frac{|(\Psi_n, \Psi)|^2}{|(\Psi, \Psi)|^2} = P_n$ と, かく事にすると, (4) 式の左

辺の負に寄与する項はエネルギーが,

$$\bar{E} - \frac{\alpha(\bar{E})}{\sqrt{(\Psi, \Psi)}} \leq E_m \leq \bar{E} + \frac{\alpha(\bar{E})}{\sqrt{(\Psi, \Psi)}}$$

であって,

$$\text{頁の項の和} = \sum_m \left((E_m - \bar{E})^2 - \frac{\alpha^2(\bar{E})}{(\Psi, \Psi)} \right) P_m \geq - \frac{\alpha^2(\bar{E})}{(\Psi, \Psi)} \sum_m P_m$$

であるから, E_a ($P_a \sim 1$ のもの) が (5) の不等号の中にない時には, 之は更に

$$\geq - \frac{\alpha^2(\bar{E})}{(\Psi, \Psi)} (1 - P_a)$$

となる。

故に (4) 式の左辺の正の項は

$$\text{正の項の和} \leq \frac{\alpha^2(\bar{E})}{(\Psi, \Psi)} (1 - P_a)$$

となるが,

$$\left((E_a - \bar{E})^2 - \frac{\alpha^2}{(\Psi, \Psi)} \right) P_a \leq \text{正の項の和}$$

であるから,

$$(E_a - \bar{E})^2 \leq \frac{\alpha^2(\bar{E})}{(\Psi, \Psi)} \frac{1}{P_a}$$

(之は (5) の不等号の外に E_a があるとした結果である。)

故に, E_a が (5) の不等号の外にはみ出しても, 次のはんいの中におさまる。

$$\bar{E} - \frac{\alpha}{\sqrt{(\Psi, \Psi)}} \frac{1}{\sqrt{P_a}} \leq E_a \leq \bar{E} + \frac{\alpha}{\sqrt{(\Psi, \Psi)}} \frac{1}{\sqrt{P_a}}$$

故に, P_a が或る値 (0 に近くない) ならば (5) である。