

CDW中の共鳴準位不純物 —— 束縛状態とピン止め ——

常磐大学 三 沢 進

(1986年10月3日受理)

要 旨

1次元電荷密度波(CDW)中に $U=0$ Anderson不純物(共鳴準位不純物)が1個あるときの, 束縛状態とピン止めへの寄与をGreen函数の方法で考察する。

§1 序 論

最近, Tüttö-Zawadowski¹⁾は, 電荷密度波(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。一方, 磁性不純物については, Everson-Coleman²⁾が, NbSe_3 のCDW中のFe不純物による非線形伝導を観測している。また, Tüttö-Zawadowski-Ruvalds³⁾(TZR)は, スピン $\frac{1}{2}$ 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, 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 $U=0$ のAnderson不純物(以下では「共鳴準位不純物」と呼ぶ; U は局在電子間のクーロン斥力)をGreen函数の方法で考察する。この方法は, 正常金属中の1個の共鳴準位不純物のときには厳密解を与える。CDW状態については, Brazovskii-Dyalooshinskii⁴⁾(BD)の用いた方法により「位相」(phase fluctuation)を導入する。このような手法を用いて, CDW中に1個の共鳴準位不純物があるときの, 束縛状態エネルギーや, 熱力学ポテンシャルの位相依存性を求め, CDWのピン止めへの寄与を調べてみる。

§2 モデル

1次元Peierls-Frölich系中の共鳴準位不純物に対するtotal HamiltonianはBD⁴⁾のCD

Wの表現法を利用して、次のように表わされる。

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

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

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

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

$$H_d = \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}, \quad (2.5)$$

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

ここで、 $Q (= 2 k_F)$ 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 $c_{\sigma\pm}(x) e^{\pm i Q x}$ とするとき、

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

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

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。振動数 $\omega(q)$ のフォノンの消滅演算子を b_q とすると、フォノン場 $P(x) e^{i Q x}$ は

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

で与えられ (N は格子点数)、電子-フォノン結合定数を λ で表した。局在電子については、エネルギー ε_d 、スピン σ の d 電子の消滅演算子を d_{σ} で表した。s-d mixing V によって、 $\hat{V}(x)$ は

$$\hat{V}(x) = V \begin{bmatrix} e^{-i Q x/2} \\ e^{-i Q x/2} \end{bmatrix}, \quad (2.10)$$

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、BD⁴⁾ にならって、

$$\lambda P(x) = A e^{i\varphi(x)}, \quad (2.11)$$

とする。ここで、 A は平衡値で、CDW相のオーダーパラメタと考える。 $\varphi(x)$ はphase fluctuationであり、amplitude fluctuationは無視した。伝導電子場に位相(ゲージ)変換

$$\hat{a}_\sigma(x) \equiv \left[\frac{a_{\sigma+}(x)}{a_{\sigma-}(x)} \right] = \exp \left\{ -i \frac{\varphi(x)}{2} \hat{\tau}_3 \right\} \hat{c}_\sigma(x), \quad (2.12)$$

$$a_{\sigma n}(x) = e^{-in\varphi(x)/2} c_{\sigma n}(x)$$

$$= \sum_{|k| < Q/2} a_{k+nQ, \sigma} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}} \quad \text{for } n = \pm, \quad (2.13)$$

をほどこすと、Hamiltonianは

$$H_c + H_{c-p} + H_d + H_{c-d} \rightarrow H_0 + H_1(\varphi_i) + H_2, \quad (2.14)$$

のように変換される。ここで、

$$H_0 = \sum_{k\sigma} v_F k \hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{a}_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} A \hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{\tau}_1 \hat{a}_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_\sigma^\dagger d_\sigma, \quad (2.15)$$

$$H_1(\varphi_i) = \sum_{k\sigma} \hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{v}_k(\varphi_i) d_\sigma + \sum_{k\sigma} d_\sigma^\dagger \hat{v}_k^\dagger(\varphi_i) \hat{a}_{k\sigma}, \quad (2.16)$$

$$H_2 = \sum_{\sigma} \int dx \hat{a}_\sigma^\dagger(x) \frac{v_F}{2} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \hat{a}_\sigma(x). \quad (2.17)$$

ただし、

$$\hat{v}_k(\varphi_i) = V \frac{e^{-ikx_i}}{\sqrt{L}} \left[\frac{e^{-i\varphi_i/2}}{e^{i\varphi_i/2}} \right], \quad (2.18)$$

$$\varphi_i \equiv Q x_i + \varphi(x_i), \quad (2.19)$$

であり、 k 和は $|k| < Q/2$ の領域に限る。BD⁴⁾の汎函数積分法によれば、 H_2 と H_p 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もち、Pietronero-Strässler-Toombs⁵⁾やFukuyama⁶⁾の導いたphase Hamiltonian H_{phase} に従うと考えることができる。従って、我々はeffective Hamilto-

$$H_{\text{eff}} = H_0 + H_1(\varphi_i) + H_{\text{phase}}, \quad (2.20)$$

を考えるが, $\varphi(x)$ の具体的な運動は追わず, φ_i を断熱パラメタと考え,

$$H = H_0 + H_1(\varphi_i), \quad (2.21)$$

に従う系の束縛状態や, 熱力学ポテンシャルを考察する。

§3 方法

我々は, 次のような2時間Green函数を導入する。

$$\begin{aligned} \hat{G}_{kk'\sigma}(\omega) &= \ll \hat{a}_{k\sigma}; \hat{a}_{k'\sigma}^\dagger \gg \\ &= \begin{bmatrix} \ll a_{k+k_F\sigma}; a_{k'+k_F\sigma}^\dagger \gg & \ll a_{k+k_F\sigma}; a_{k'-k_F\sigma}^\dagger \gg \\ \ll a_{k-k_F\sigma}; a_{k'+k_F\sigma}^\dagger \gg & \ll a_{k-k_F\sigma}; a_{k'-k_F\sigma}^\dagger \gg \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$G_{d\sigma}(\omega) = \ll d_\sigma; d_\sigma^\dagger \gg, \quad (3.2)$$

$$\hat{G}_{kd\sigma}^\dagger(\omega) = \ll \hat{a}_{k\sigma}; d_\sigma^\dagger \gg = \begin{bmatrix} \ll a_{k+k_F\sigma}; d_\sigma^\dagger \gg \\ \ll a_{k-k_F\sigma}; d_\sigma^\dagger \gg \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \hat{G}_{dk\sigma}(\omega) &= \ll d_\sigma; \hat{a}_{k\sigma}^\dagger \gg \\ &= [\ll d_\sigma; a_{k+k_F\sigma}^\dagger \gg \quad \ll d_\sigma; a_{k-k_F\sigma}^\dagger \gg]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

これらのGreen函数に対する(2.21)による運動方程式は, 次のように解くことができる。

$$\hat{G}_{kk'\sigma}(\omega) = \hat{G}_{k\sigma}^0(\omega) \delta_{kk'} + \hat{G}_{k\sigma}^0(\omega) \hat{v}_{k\sigma}(\varphi_i) G_{d\sigma}(\omega) \hat{v}_{k'\sigma}(\varphi_i) \hat{G}_{k'\sigma}^0(\omega), \quad (3.5)$$

ここで

$$\hat{G}_{k\sigma}^0(\omega) = (\omega - v_F k \hat{\tau}_3 - \Delta \hat{\tau}_1)^{-1}, \quad (3.6)$$

$$G_{d\sigma}(\omega) = (\omega - \varepsilon_d - F(\omega))^{-1}, \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned}
 F(\omega) &= \sum_k \hat{v}_{k\sigma}^\dagger(\varphi_i) \hat{G}_{k\sigma}^0(\omega) \hat{v}_{k\sigma}(\varphi_i) \\
 &= -\frac{\Gamma(\omega + \Delta \cos \varphi_i)}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}, \quad (3.8)
 \end{aligned}$$

$$\Gamma = V^2 / v_F. \quad (3.9)$$

また,

$$\hat{G}_{kd\sigma}(\omega) = \hat{G}_{k\sigma}^0(\omega) \hat{v}_{k\sigma}(\varphi_i) G_{d\sigma}(\omega), \quad (3.10)$$

$$\hat{G}_{dk\sigma}(\omega) = G_{d\sigma}(\omega) \hat{v}_{k\sigma}^\dagger(\varphi_i) \hat{G}_{k\sigma}^0(\omega). \quad (3.11)$$

よって,

$$\begin{aligned}
 \sum_k \hat{v}_{k\sigma}^\dagger(\varphi_i) \hat{G}_{kd\sigma}(\omega) &= \sum_k \hat{G}_{dk\sigma}(\omega) \hat{v}_{k\sigma}(\varphi_i) \\
 &= F(\omega) G_{d\sigma}(\omega). \quad (3.12)
 \end{aligned}$$

§4 束縛状態

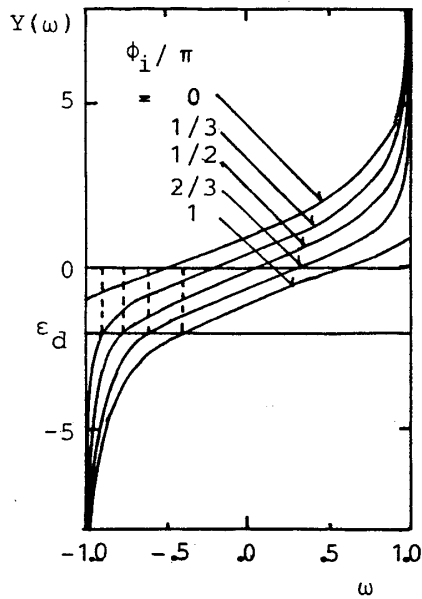


図1：束縛状態の位置の決定。 $\Delta = 1$, $\Gamma = 1$, $\epsilon_d = -2$ 。

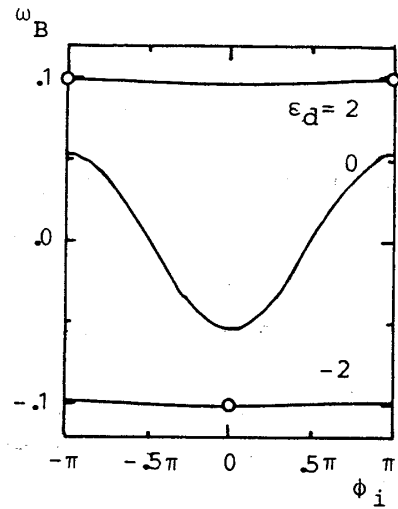


図2：いくつかの ϵ_d の値に対する束縛状態エネルギー $\omega_B(\varphi_i)$ の φ_i 依存性。 $\Delta = 0.1$, $\Gamma = 0.1$, $v_F k_F = 10$ 。

三沢 進

束縛状態の位置 $\omega = \omega_B(\varphi_i)$ は, (3.7) の $G_{d\sigma}(\omega)$ の pole によって決定される。すなわち,

$$Y(\omega) \equiv \omega_B(\varphi_i) + \Gamma \frac{\omega_B(\varphi_i) + A \cos \varphi_i}{\sqrt{A^2 - \omega_B^2(\varphi_i)}} = \varepsilon_d. \quad (4.1)$$

これを $\omega_B(\varphi_i)$ について解くと, 図 1, 2 に示すように, 個数は 1 個 ($\varphi_i = 0, \pi$ のときは ε_d の値によって 1 個または 0 個) であり, Machida-Shibata⁷⁾ が超伝導体中の同じ不純物に対して得た結果 (束縛状態の個数は 2 個で, Fermi 準位に関して対称の位置にある) と異なる。また, 図 1, 2 に見るように, $\omega_B(\varphi_i)$ の φ_i 依存性は, $|\varepsilon_d| \ll A$ のときは比較的大であるのに対し, $|\varepsilon_d| \gg A$ のときは微小である。このことは, Γ が小さいとしたときの, 次の近似式からも理解できる。すなわち,

$\Gamma \ll |\varepsilon_d| \ll A$ のとき

$$\omega_B(\varphi_i) \cong \varepsilon_d - \Gamma \frac{\varepsilon_d + A \cos \varphi_i}{\sqrt{A^2 - \varepsilon_d^2}}, \quad (4.2)$$

$\Gamma \ll A \ll |\varepsilon_d|$ のとき

$$\omega_B(\varphi_i) \cong A \operatorname{sgn} \varepsilon_d \left[1 - \frac{\Gamma^2 (1 + \operatorname{sgn} \varepsilon_d \cdot \cos \varphi_i)}{2 \varepsilon_d^2} \right]. \quad (4.3)$$

§5 ピン止め

共鳴準位不純物の CDW のピン止めに対する効果を調べるため, 我々は, 熱力学ポテンシャルの mixing V が 0 のときの値との差を次のように計算する。

$$\Omega_V - \Omega_0 = \int_0^1 \frac{dg}{g} \langle g H_1 \rangle_g. \quad (5.1)$$

ここで, $\langle \rangle_g$ は $V \rightarrow gV$ とした Hamiltonian のもとでの期待値であり, (5.1) は (3.12) を利用して次のように計算される。

$$\Omega_V - \Omega_0 = -\frac{4}{\pi} \operatorname{Im} \int_0^1 dg \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \frac{g F(\omega)}{\omega - \varepsilon_d - g^2 F(\omega)}. \quad (5.2)$$

ここで, $f(\omega) = (e^{\beta\omega} + 1)^{-1}$; $\beta = 1/T$ (T は系の温度) である。式 (5.2) は $T = 0^\circ K$

のときには、さらに次のように計算される。

$$\Omega_V - \Omega_0 = \frac{2}{\pi} \text{Im} \int_{-\sqrt{v_F^2 k_F^2 + D^2}}^0 d\omega [\log(\omega - \varepsilon_d - F(\omega)) - \log(\omega - \varepsilon_d)], \quad (5.3)$$

$$= 2 [\omega_B(\varphi_i) \theta(-\omega_B(\varphi_i)) + D - \varepsilon_d \theta(-\varepsilon_d) - \sqrt{v_F^2 k_F^2 + D^2}] \\ + \frac{2}{\pi} \int_{-\sqrt{v_F^2 k_F^2 + D^2}}^{-D} \left\{ \frac{\pi}{2} + \tan^{-1} \left[\frac{(\omega - \varepsilon_d) \sqrt{\omega^2 - D^2}}{\Gamma(\omega + D \cos \varphi_i)} \right] \right\}. \quad (5.4)$$

ただし、 $\varphi_i = 0, \pi$ で $\omega_B(\varphi_i)$ が存在しないときは、上式で各々 $\omega_B(\varphi_i) = -D, D$ とした値に等しい。式(5.4)はCDWに対する近似のわく内で厳密であるといえ、 $D=0$ のとき正常状態にある系に対する厳密解を再現する。有限の D と、いくつかの ε_d に対する $\Omega_V - \Omega_0$ の数値計算の結果は、図3に示すような φ_i 依存性をもつ。これは、式(2.15)–(2.16)で φ_i 依存性をもつのは $V \neq 0$ のときだけであるから、 Ω_V がこのような φ_i 依存性をもつことを意味する。従って、§2で述べたように、 φ_i を断熱パラメタと考えると、 Ω_V をピン止めエネルギーと考えることができ、共鳴準位不純物もCDWのピン止めへ寄与することを示している。

Ω_V の φ_i 依存性の様相を考察するために、(5.3)の Γ の1次までの ($|\varepsilon_d|, D \ll v_F k_F$ のときの) 近似形を求めると、

$$\Omega_V - \Omega_0 \cong \frac{2}{\pi} \text{Im} \int_{-v_F k_F}^0 \frac{\Gamma(\omega + D \cos \varphi_i)}{(\omega - \varepsilon_d) \sqrt{D^2 - \omega^2}}, \quad (5.5)$$

$$= \begin{cases} -\frac{2\Gamma}{\pi} \left[\log \left| \frac{2v_F k_F}{D} \right| + \frac{\varepsilon_d + D \cos \varphi_i}{\sqrt{\varepsilon_d^2 - D^2}} \log \left| \frac{\varepsilon_d - \sqrt{\varepsilon_d^2 - D^2}}{D} \right| \right] \\ \text{for } |\varepsilon_d| > D, \end{cases} \quad (5.6)$$

$$= \begin{cases} -\frac{2\Gamma}{\pi} \left[\log \left| \frac{2v_F k_F}{D} \right| + \frac{\varepsilon_d + D \cos \varphi_i}{\sqrt{D^2 - \varepsilon_d^2}} \left\{ \pi \theta(-\varepsilon_d) - \frac{\pi}{2} \right\} \right] \\ \text{for } |\varepsilon_d| < D, \end{cases}$$

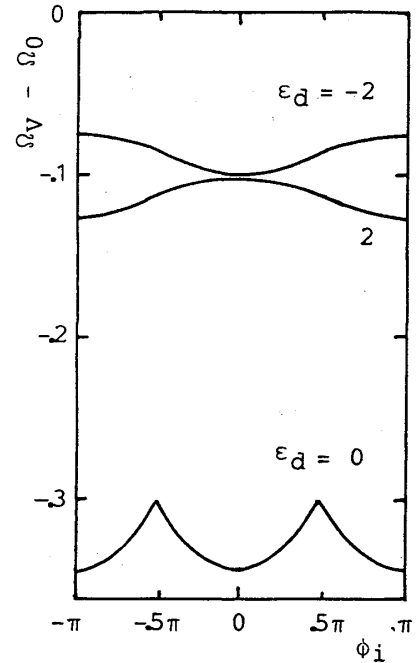


図3：いくつかの ε_d の値に対する熱力学ポテンシャル $\Omega_V - \Omega_0$ の φ_i 依存性。 $D = 0.1$, $\Gamma = 0.1$, $v_F k_F = 10$ 。

$$\left[+ \sin^{-1} \frac{v_F k_F \epsilon_d + D^2}{D(v_F k_F + \epsilon_d)} \right] \quad \text{for } |\epsilon_d| < D. \quad (5.7)$$

よって共鳴準位不純物によるピン止めは、TZR³⁾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 $\cos \varphi_i$ に寄与する。

さらに、(5.6)式は $|\epsilon_d| \gg D$ のとき、次のように近似される。

$$\Omega_V - \Omega_0 \cong -\frac{2\Gamma}{\pi} \left[\log \left| \frac{2v_F k_F}{\epsilon_d} \right| - \frac{D \cos \varphi_i}{\epsilon_d} \log \left| \frac{2\epsilon_d}{D} \right| \right]. \quad (5.8)$$

この結果は次のように考えることができる。正常状態のときのものとのHamiltonianの $H_c + H_{c-d} + H_d$ の部分は、 $|\epsilon_d| \gg v_F k_F$ のとき

$$H_c + H_{c-d} + H_d \rightarrow -\frac{V^2}{\epsilon_d} \sum_{kk'\sigma} c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (5.9)$$

のように、 $\epsilon_d < 0$ ($\epsilon_d > 0$) のとき、斥力(引力)ポテンシャルをもつ不純物として考えることができる。もし、(5.9)のようなポテンシャルをもつ不純物がCDW中にあるとすると、これはピン止めエネルギーに

$$\frac{2\Gamma D \cos \varphi_i}{\pi \epsilon_d} \log \left| \frac{2v_F k_F}{D} \right| \quad (5.10)$$

の寄与をし、(5.8)とよく似た形をしている。従って、(5.8)も $\epsilon_d \ll -D$ ($\epsilon_d \gg D$) のとき斥力(引力)ポテンシャルをもつ不純物として振舞っているものと考えられる。高次の Γ の寄与を含む図3の $\epsilon_d = \pm 2$ のときの振舞も、同様に理解できる。

これに対して、 $|\epsilon_d| \ll D$ のときの振舞は、高次の Γ の寄与を含むときには、図3の $\epsilon_d = 0$ のときのように特異である。これは、このときの束縛状態エネルギーが、§4で見たようになり大きい φ_i 依存性を持ち、それが負になるような範囲(図3では $-0.5\pi < \varphi_i < 0.5\pi$)のみで寄与するためである。このような振舞は Γ の1次まででは現われず、 $|\epsilon_d| \ll D$ のときにはより高次の項の寄与が重要になってくることを示している。

§6 結 論

CDW中に共鳴準位不純物が1個あるときには、束縛状態は超伝導体中と異なり1個(位相 $\varphi_i = 0, \pi$ のときは、 ϵ_d の値により1個または0個)である。位相 φ_i を断熱パラメタとして

束縛状態エネルギー $\omega_B(\varphi_i)$ を計算すると、特に $|\varepsilon_d| \ll 4$ のときにはかなり大きい φ_i 依存性をもつ。熱力学ポテンシャル $\mathcal{Q}_V$ も φ_i 依存性をもち、これがピン止めエネルギーと考えられ、共鳴準位不純物も CDW のピン止めへ寄与することがわかった (s-d 交換結合 model のときとは異なり、位相の first harmonic $\cos \varphi_i$ へ寄与する)。ピン止めの様相 ($\mathcal{Q}_V$ の φ_i 依存性) は、 $\varepsilon_d \ll -4$ ($\varepsilon_d \gg 4$) のとき斥力 (引力) ポテンシャルをもつ不純物として振舞うが、 $|\varepsilon_d| \ll 4$ のときには、束縛状態エネルギー $\omega_B(\varphi_i)$ の寄与も重要になり、特異な振舞をする。

参考文献

- 1) I. Tütto and A. Zawadowski : Phys. Rev. B32 (1985) 2449.
- 2) M. P. Everson and R. V. Coleman : Phys. Rev. B28 (1983) 6659.
- 3) P. F. Tua, A. Zawadowski and J. Ruvalds : Phys. Rev. B29 (1984) 6525.
- 4) S. A. Brazovskii and I. E. Dzyaloshinskii : Sov. Phys.-JETP 44 (1976) 1233.
- 5) L. Pietronero, S. Strässler and G. A. Toombs : Phys. Rev. B12 (1975) 5213.
- 6) H. Fukuyama : J. Phys. Soc. Jpn. 41 (1976) 513.
- 7) K. Machida and F. Shibata : Prog. Theor. Phys. 47 (1972) 1817.