

非対称アンダーソンモデルの熱的性質

阪大工 興地 斐男

アンダーソンモデルは固体物理の分野の物理現象の解明によく用いられているが、とりわけ非対称アンダーソンモデルは希土類元素と不純物を含む化合物の示す強揺動状態を記述する最も簡単なモデルではないかと考えられ、近年多くの研究がなされている。ここではベーター説の方法を用いた非対称アンダーソンモデルの帯磁率と比熱の計算結果について述べることにする。

アンダーソンモデルは次のハミルトニアンで記述されるモデルである。¹⁾

$$\mathcal{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + V \sum_{k,\sigma} (C_{k\sigma}^+ d_{\sigma} + d_{\sigma}^+ C_{k\sigma}) + \epsilon_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^+ d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^+ d_{\uparrow} d_{\downarrow}^+ d_{\downarrow}. \quad (1)$$

ここで ϵ_k (ϵ_d) は伝導電子 (不純物軌道) のエネルギー, U は不純物位置でのクーロン反発エネルギー, V は混ざりの行列要素である。伝導電子の状態密度が一定 ($1/2\pi$) の時、このハミルトニアンは対角化できることが知られている。²⁾ さらに、その熱力学的性質は次の形の熱力学ポテンシャルで記述できることがわかってゐる。³⁾

$$\Omega^i = \Omega^i(T=0, U=-2\epsilon_d) - T \int_{-\infty}^{\infty} \rho G(x) dk - T \int_{-\infty}^{\infty} \sigma G(\epsilon_i^+) d\lambda, \quad (2)$$

ここで

$$\sigma(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} L(k) Q(k^2 - \lambda) dk,$$

$$\rho(k) = \int_{-\infty}^{\infty} 2k F(k^2 - \lambda) \sigma(\lambda) d\lambda + L(k),$$

$$G(x) = \log(1 + e^{x/T}),$$

であり、 $L(x)$, $Q(x)$, $F(x)$ は $\exp(-V^2|\omega|/2 - i\omega U/2)$, $\frac{1}{2} \operatorname{sech}(UV^2\omega/2)$, $\exp(-UV^2|\omega|/2)$ の Fourier 変換, さらに (2) 式に現れる $\mathcal{K}$, ϵ_i^+ は次の方程式を満足してゐる。

$$\mathcal{K}(k) = \mathcal{K}_s + T \int_{-\infty}^{\infty} Q(k^2 - \lambda) [G(\epsilon_i^+) - G(\epsilon_i^-)] d\lambda,$$

$$\epsilon_i^{\pm}(\lambda) = T Q * G(\epsilon_i^{\pm}) - T \int_{-\infty}^{\infty} 2k Q(k^2 - \lambda) G(\pm \mathcal{K}) dk,$$

$$\epsilon_n^\pm(\Lambda) = T Q * [G(\epsilon_{n-1}^\pm) + G(\epsilon_{n+1}^\pm)], \quad n=2, 3, \dots,$$

ここで * は convolution を表わしており.

$$\mathcal{H}_S = k + 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 F(k^2 - \Lambda) Q(\Lambda - x^2) dx d\Lambda$$

である。パラメータ U, ϵ_d および 磁場 $H (g\mu_B=1)$ に関する条件式は.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \epsilon_n^+ / n = U + 2\epsilon_d, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \epsilon_n^- / n = H$$

で与えられる。

ここでは、上記の積分方程式を非対称アンダーソンモデル ($U \gg |\epsilon_d|, V^{3/2}$) に対して解き、得られた結果について簡単な説明を行う³⁾。計算方法は、上記の積分方程式を有限個 n で切り、 n を変えても結果が変化しないところまで繰り返し行った。計算誤差は 2, 3% 程度である。

数値計算の結果は図 1, 2 に示されている。 $T \gg U$ の高温領域では、すべての impurity configuration (価数 $n_d = 0, 1, 2$ に対応する configuration) が同等に熱的に励起されるため、有効キュリー定数 $TX_m \sim 1/8$, 局在電子数 $n_d(T) \sim 1$, 比熱 $C_i \sim 0$ となる。温度が下がってくると、 $n_d = 2$ の configuration への熱的励起は起こりにくくなり、 $TX_m \sim 1/6$, $n_d(T) \sim 2/3$ で特徴づけられる価数揺動領域に入る。この価数揺動領域では、 $n_d = 0, n_d = 1$ の状態が熱的に同程度励起されており、比熱は再び $C_i \sim 0$ となるが、高温領域から価数揺動領域に入る時に、比熱はシヨットキーフの振舞を示す。さらに温度が下がってくると、不純物レベルの位置によって物理的性質が異なってくる。 ϵ_d の位置がフェルミ面よりかなり深い場合には、比熱は低温で 2 つのピークを持つ。高温側のピークは価数

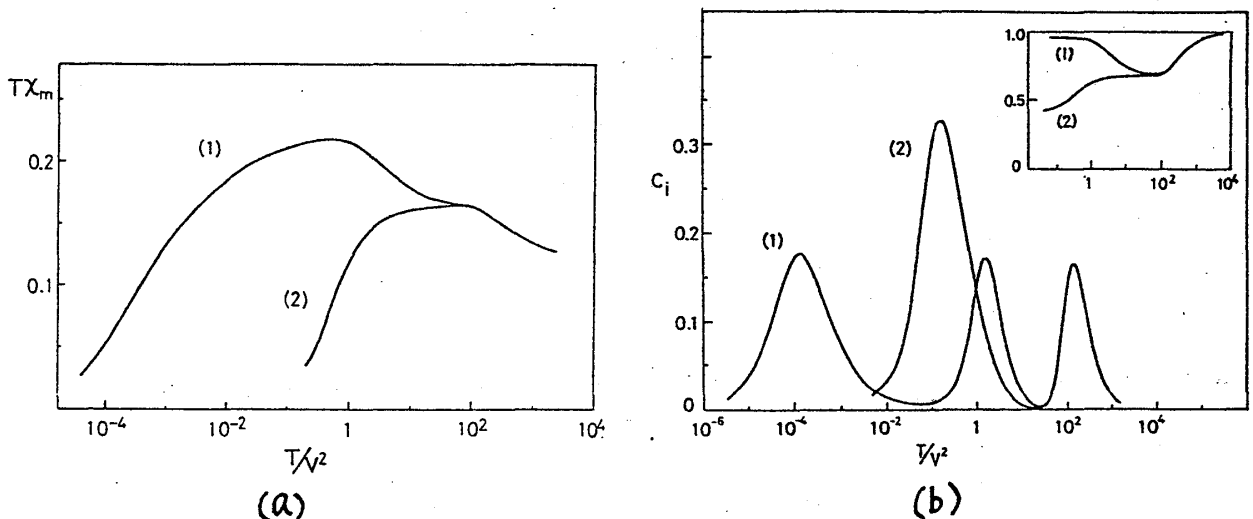


図1. (a) 有効キュリー定数 TX_m , (b) 比熱 C_i の温度変化。 $U/V^2 = 10^3/\pi$, (1) $\epsilon_d/V^2 = -10/\pi$, (2) $\epsilon_d = 0$ 。 (b) の挿入図は $n_d(T)$ の変化。

揺動領域から局在スピン領域($TX_m \sim 1/4$)への転移に対応し、低温側は局在スピンから強結合領域($TX_m \sim 0$)への転移に対応している。(曲線(1)). 一方 E_d がフェルミ面に近い場合には、近藤効果は現わらず、価数揺動領域から強結合領域へ直接転移する。この転移に対応する帯磁率、比熱の変化は曲線(2)に示されている。この場合基底状態は“混合原子価状態”になっている ($n_d(T)$ の値に注意)。なお帯磁率の温度変化は繰り込み群の結果とよく一致を示している。⁴⁾ 比熱の磁場による変化は図2に示されている。

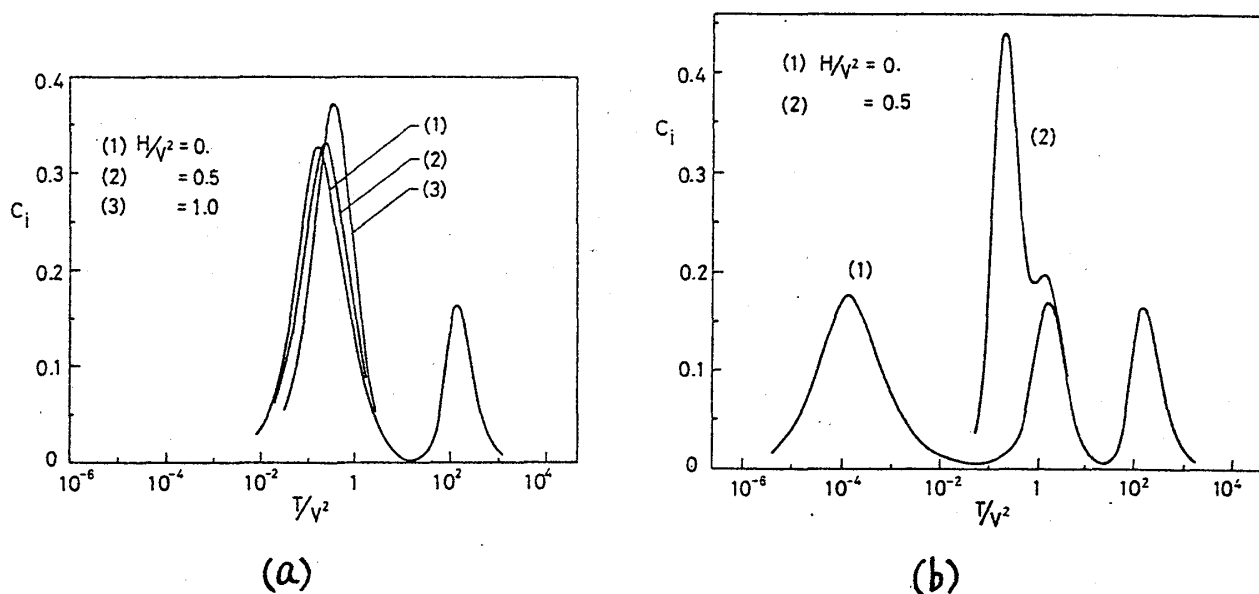


図2. 比熱 C_i の温度変化. (a) $E_d/V^2 = 0$, (b) $E_d/V^2 = -10/\pi$.

- 1). P.W. Anderson, Phys. Rev. 124 (1961) 41.
- 2). P.B. Wiegmann, Phys. Lett 80A (1980) 163.
- 3). N.Kawakami and A.Okiji, Phys. Lett. 98A (1983) 54, Phys. Rev. Lett. in press,
A.Okiji and N.Kawakami, J. Appl. Phys. in press.
- 4). H.R. Krishna-murthy, J.W. Wilkins and K.G. Wilson, Phys. Rev. B21 (1980) 1044.