

s - d 相互作用

電試 近 藤 淳

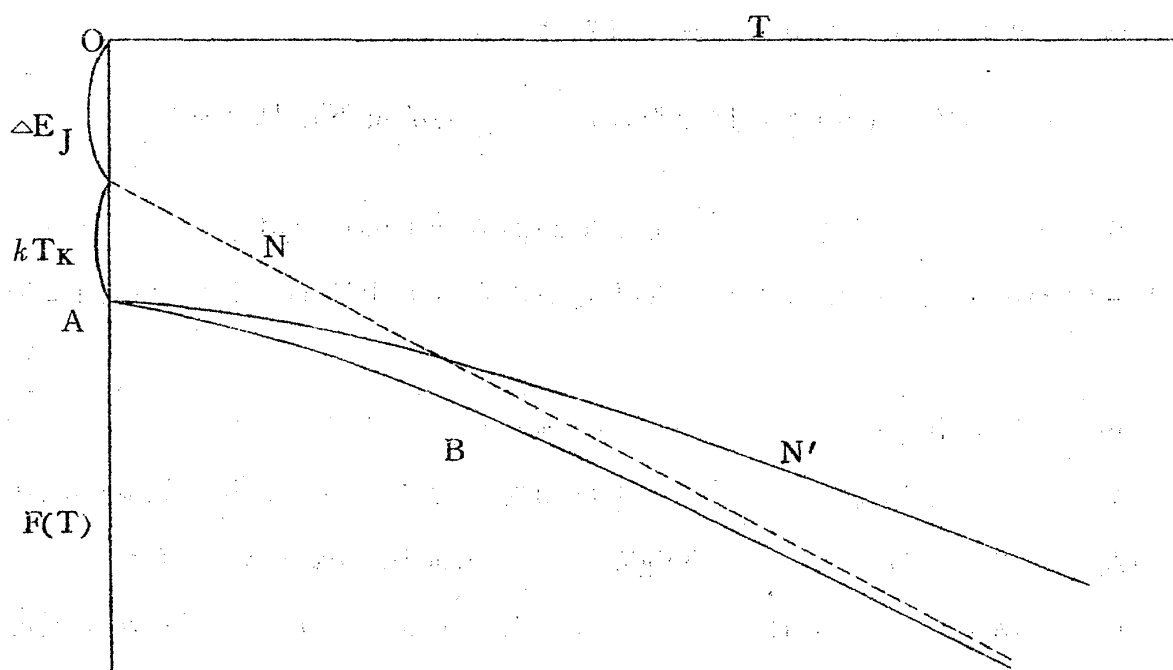
(11月6日受理)

最近 s - d 相互作用の問題もようやく収束する方向へ向いつつある。J < 0 のときの Complex pole に関して二つの考え方があった。一つは、高温で摂動展開に一致する解を、うまく低温に解析接続して complex pole が生じないような結果をえられればそれでよいのだというものである。もう一つの考え方はそのようなやり方は問題の一面のみをみるものであってそれでは見落している別の面（いわゆる bound state）があるというもの。前者は Suhl によるもので後者は芳田グループで代表されるものである。我々は原理的に前可の考え方でよいのだということを10月のシンポジウムでのべ、それを支持する色々の論拠をあげた。前者の考え方をくわしく定義すれば次のようにいってよかろう。まず高温で J が正のとき成立つ解を求める。J が正の時には bound state の問題はおこらないと一般に信ぜられているから、この解は展開したら摂動展開に一致するものと考えられる。（いわゆる normal state の解）その解の J の符号を変えたものは J < 0 のときの解になっているが、それが J < 0 の正しい解であり、それを低温に滑かにつなげば ground state に到達するというものである。勿論 J > 0 のときも高温の解を低温に滑かにつなげればよく、J が正のときと負のときで本質的な差はない。（勿論 T = 0 に近づけたときの種々の物理量の値は非常に違うであろうが、それに到達する principle は両方の場合同じである。）これに対し芳田グループの考え方は J < 0 の場合は J > 0 の場合と本質的に異なるというものである。

前者の考え方は簡単明瞭でありその限りにおいて問題はない。しかしそれには大きな困難が附随していた。芳田・三輪氏¹⁾によると s - d 相互作用によるフリーエネルギーのシフトを高温展開で求めると實際上温度によらない

結果がえられる。即ち normal state のフリーエネルギーは $F(T) = \Delta E_J - K_B T \log 2$ ($S = 1/2$ の場合) となる。但し ΔE_J は J のべきで表わされる項で T によらない。これは J の正負によらず成立つ。この高温展開を低温になめらかにつなげば図の N がえられる。従って normal state の ground state energy は ΔE_J ということになる。しかし $T=0$ では $J < 0$ のとき ΔE_J よりも KT_K の程度低い解 (図の点 A , いわゆる bound state) があることが解っているから normal state ではこれに到達することは出来ないということになる。従って $J < 0$ のとき normal state とは essential に違った bound state というものを考えねばならぬということになる。

次に温度をあげていったときこの bound state がどのようなになるかを考え



てみよう。今 A から出発したとして、十分温度の高い所では bound state の線は normal state の線に近づかねばならないと考えられる。しかしある温度で直線 N に完全にのり移るとすると、そこで不連続が生じなければならない。そのようなことが起らないためには A から出発した bound state の線 B が直線 N に漸近的に近づくと考えねばならぬ。²⁾ しかしこのことは温度が極

めて高くなっても（例えば電子系がボルツマン分布になる程高くなっても）
bound state が消えずに残るということを意味するわけでこのことは非常に
考えにくい。

これに対して我々は次のような提案を行った。即ち bound state というもの
が特別に存在するのではなく normal state のフリーエネルギーが N では
なくて図の N' のようになっている。従って normal state の解を低温へつ
なげばそれで正しい ground state A に到達出来る。従ってこれは最初に出
た二つの考え方のうち前者を正しいとするものである。この提案は次の事
実に基いている。

1. 後にのべるように unperturbed state（スピンについて縮退した状態）
を出発点として A というエネルギーがえられる。³⁾
2. 高温展開によって芳田・三輪の値のほかに

$$- (8/3) \pi^2 S(S+1) J^3 \rho^3 KT [1 + 6 J \rho \log(KT/D) + \dots]$$

という項があることが判った。⁴⁾ 従って高温で normal state のフリーエネ
ルギーは芳田・三輪の値 N よりも（ $J < 0$ のとき）上にありかつ上に凸であ
る。

3. normal state の立場に立つ Suhl 理論を用いてフリーエネルギーを計
算してみる。すると高温でたしかに上の項を含むことがわかり、低温へ滑か
につながって $T=0$ でたしかに KT_K の程度の binding energy をもつ。⁵⁾

これらの結果から normal state の（正しい）フリーエネルギーが全温度
領域で図の N' のように振舞うと考えることは極めて自然であろう。また T
 $=0$ におけるエントロピー（ $-dF/dT$ ）は、等方的な $s-d$ 相互作用で S
 $= 1/2$ の場合 0 になるのではないかと期待される。Suhl 理論ではこれが
 $K_B (\log 2 - \log (27/16))$ となる。勿論 Suhl 理論は近似を含んでおり、そ
れを改良してゆけば正しい答に近づくだらうと予想される。

次に $T=0$, $H=0$ の場合を考える。bound state に基く計算は石井・芳

田氏によってなされている。彼等の波動函数は

$$\phi_B = \phi_1 + \phi_3 + \phi_5 + \dots$$

と表わされる。こゝで ϕ_1 はフェルミ面の外に一口電子があつてスピンと結合している状態、 ϕ_3 はそれに更に electronhole pair を一つ作った状態、 ϕ_5 は二つ作った状態、 $\dots$ である。 ϕ_B を用いて石井氏がえたエネルギー $E_B(H)$ を H に対して描くと丁度前の図の曲線 B のようになる。⁶⁾ 但し横軸を H とし、直線 N は $\Delta E_J - \mu H$ を表わすとする。

一方同じ場合に、normal state に基く計算が筆者によってなされている。³⁾ 我々の波動函数は

$$\phi_N = \phi_0 + \phi_2 + \phi_4 + \dots$$

とする。こゝに ϕ_0 unperturbed state (フェルミ球と $S_z = S$ のスピンstate) ϕ_2 はそれに electron-hole pair が一つ出来た状態 (スピンの向きが違っててもよい)、 $\dots$ である。この波動函数を用いて磁場が 0 のときには点 A がえられる。また磁場の十分大きい所では前の図の N' のようになる。つまり直線 N の値 ($\Delta E_J - \mu H$) のほかに

$$- \mu H J \rho [1 + 2 J \rho \log (2 \mu H / D) + \dots$$

という項があり、そのため $J < 0$ のとき N' は N より上にきて上に凸となる。磁場の場合には Suhl のような計算はないが、 A 点と高磁場側をなめらかに結べば全域で曲線 N' のようになるものと考えられる。

このように我々は温度の場合にも磁場の場合にも、フリーエネルギー又はエネルギーが図の N' のように振舞いまたそれが唯一の正しい解であると主張する。この考え方には反対も多い。それは、 N' が A より出発して直線 N を切りその上に出ることが物理的におかしい、 B のように下にあるべきだという議論である。²⁾ これに対する我々の考え方は、現在我々が信用出来るの

は高温度又は高磁場側でスピンのダイナミカルな性質が押えられた領域における摂動展開のみである。それが N' のように N より上に出たのならともかくそれは認めねばならないというものである。

それではなぜ石井氏は B のような結果をえたのだろうか。我々は石井氏の計算をやり直して、 ϕ_B を用いても少くとも高磁場においては ϕ_N と同じエネルギー（図の N' ）がえられることを見出した。次にこれについてのべる。芳田氏のいわゆる第一近似 $\phi_B = \phi_1 + \phi_3$ にとどめ

$$\phi_1 = \sum_{k \geq k_F} (C_k a_{k-}^* + d_k a_{k+}^*) \phi_{F, s}$$

ととる。ここに C_k, d_k は変分パラメータ。全エネルギーを次のようにおく

$$E = E_N(H) - a$$

ここに $E_N(H)$ は磁場のあるときの ϕ_N によるエネルギー（即ち図の N' ） a は binding energy でこれから定めようとするもの。あとは両氏の計算と全く同じにして a に対して次の式をうる。

$$\begin{aligned} & 8C + (4C - 8D) J \Sigma_1 (\epsilon_1 + a)^{-1} \\ & + (2D - C) J^3 \Sigma_{123} \{ (\epsilon_1 + a) (\epsilon_2 + a) (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + a) \}^{-1} \\ & + (4C - 2D) J^3 \Sigma_{123} \{ [(\epsilon_1 + a) (\epsilon_2 + 2\mu H + a) (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + a)]^{-1} \\ & + [(\epsilon_1 + a) (\epsilon_2 + 2\mu H + a) (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + 2\mu H + a)]^{-1} \} = 0 \end{aligned}$$

このほか第二の式として C と D をいれかえて分母の数ヶ所に $2\mu H$ をつけ加えた式がえられる。ここで $C = \sum c_k, D = \sum d_k$

まず $2\mu H$ が十分大きい極限では $2\mu H$ を分母に含む項を省略すると第二の式から $D = 0$ となり、上の式は

$$\begin{aligned} & 8 + 4J \Sigma_1 (\epsilon_1 + a)^{-1} \\ & - J^3 \Sigma_{123} \{ (\epsilon_1 + a) (\epsilon_2 + a) (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + a) \}^{-1} = 0 \end{aligned}$$

となる。これは static potential の場合に bound state を求める方程式と同一であることがわかる。これは当然で、 $2\mu H$ が十分大きければスピンの向きは不変と思ってよい。従って static な問題に reduce するわけである。static の場合には我々は bound state などは生じないことを知っている。容易に判るように上の static の場合の式は解をもたない。即ち $2\mu H$ が十分大きい所では bound state はきえて $a=0$ となり ϕ_B によるエネルギーは ϕ_N によるエネルギーに等しい。

一方 $H=0$ の場合には芳田理論となり解が存在する。中間の場合は上の積分を行わねばならぬ。すると $2\mu H = D \exp(-2/9|J|\rho)$ までは $a=0$ でそれより H が小さくなると不連続的に解が現われることがわかる。勿論これは近似のせいで ϕ_B の高次の項を考慮すれば a の現われる磁場はだんだん小さくなるものと期待される。

次に $a=0$ の意味を考える。 $C_k \propto (\epsilon_k + a)^{-1}$, $d_k \propto (\epsilon_k + 2\mu H + a)^{-1}$ であるから $a=0$ のときは $\sum |C_k|^2$ は ∞ となり $\sum |d_k|^2$ は有限である。従って波動関数を 1 に normalize して考えれば d_k は 0 としてよい。そして $a=0$ ならば c_k はフェルミ面の所に peak をもつから、実空間ではこの電子はスピンの bound されていない。従って $a=0$ ならば、 ϕ_N と ϕ_B とが同じエネルギー E_N をもつけれども、essential なのは ϕ_N であって ϕ_B における extra electron は余計者であることがわかる。

H が小さい所では $a \neq 0$ の解が生じる。しかし我々のやり方は H の大きいときに信頼できるものである。そしてそこで binding energy が 0 という reasonable な結果をえた。すでにみたようにこの結果をうるためにはエネルギーを、磁場のあるときの ϕ_N によるエネルギーと binding energy の和の形にしておくことが大切であった。さて極めて自然な仮定として、磁場を小さくしていったとき不連続的な変化はおこるべきでないと考えられる。そうすれば今の我々のやり方（エネルギーのわけ方）は H が非常に小さい極限まで続けねばならぬ。 H の小さい所では高次項を ∞ 次まで (most divergent

以外の項も含めて) とりいれねばならぬだろうが, 不連続が生じないということから $a = 0$ という結果は最後まで成立っているだろう。つまり ϕ_B によるエネルギーが図の N' にひとしいということは H の全域で成立たねばならぬ。しかしこのことはまた ϕ_B の extra electron が bound されないという結果が $H = 0$ の極限まで成立つことを意味する。これは筆者がすでにのべた芳田理論に対する批判そのものである。⁷⁾ そこでは, $H = 0$ のときにも ϕ_B によるエネルギーは ϕ_N によるエネルギーと等しいから extra electron は bound されないとのべた。したがって $H = 0$ のときには ϕ_B は singlet state を表わすが, それは bound されていない電子と local spin との間の singlet state であってトリビアルなものであるとのべた。このように $H = 0$, $T = 0$ でスピンのようになるかをしるためには ϕ_N を調べるのが大切である。我々はすでにスピンの程度減少していることを見出した。³⁾ スピンに限らず色々な物理量を求める時にも ϕ_N を用いることが essential である。

結論として $s-d$ 相互作用の問題にはもはや原理的に解決しなければならないことはないといえよう。normal state の立場に立って矛盾のない説明を行うことが出来る。bound state といった立場に立つこともできるのであるが, 両方の立場で正しく計算を行ったならば全く同一の結果に達するであろう。従って normal state の立場では見落とし, bound state の立場でのみとりいれられるような効果があるとは考えられない。むしろ逆に bound state の立場には trivial なものを含んでおり, essential には normal state でつくされている。また現在実際に有限温度又は有限磁場で reasonable な計算がされているのは normal state の場合のみである。

中村彬氏には有益な討論をして頂いた事を感謝します。

文 献

- 1) K. Yosids & H. Miwa, Phys. Rev. 144, 375 (1966).
- 2) 芳田グループの考え方。特に5月の教育大における集り。
- 3) J. Kondo, phys. Rev. 154, 644 (1967)
- 4) J. Kondo, Progr. Theor. Phys. 40, No4 (1968) .
- 5) J. Kondo, Progr. Theor. Phys. 40, No.4 (1968).
- 6) H. Ishii, Progr. Theor. Phys. 40, 201 (1968) .
- 7) J. Kondo, Phys. Rev. 161, 598 (1967).