

高密度近藤系中の重い電子

—運動方程式の方法を用いた擾動展開—

名古屋 黒田義浩

最近、Ce化合物やU化合物で発見された異常に大きい有効質量を持つ伝導電子の起源は、高密度系特有の性質に由来していると考えられている。(文献1及び2) しかし、高密度近藤系の性質を調べるための信頼にたつ一般的手法は未だない。ここでは、周期的Anderson模型を用いて、そのような手法開発のための1つの試みを報告したい。

ここでの高密度近藤系の問題に取り組むための基本的な考え方は次の通りである。先づ、話を解り易くするために、Anderson模型で記述される磁性不純物を含んだ合金系の性質を調べることを想定しよう。その不純物濃度が十分に低い時には、問題は単一不純物問題に帰着し、その場合は、Bethe仮説の方法等を援用すれば、原理的には厳密解を知ることが出来る。さて、不純物濃度が高くなると、不純物同志の相関(或は干渉)効果を考慮する必要が生じる。しかし、不純物濃度が余り高くない場合は、相関効果も弱く擾動論的な取り扱いが十分に意味を持つ筈である。不純物濃度が高くなって、むしろ、磁性イオン自身が規則格子を作る程(いわゆる周期的Anderson模型で記述されるような状態の場合)になると、そのような低次の擾動論的な取り扱いだけでは不十分で、より高次の相関効果を考慮しなければならなくなるかも知れない。しかし、系の基本的な性質(例えば、重い電子の存在等)は、或る程度、低次の相関効果にも現われている筈である。すなわち、単一不純物問題で判っている答を出発的にして、磁性イオン間の相関効果を漸次考慮して行けば、高密度近藤系の性質の基本的な部分の理解は可能な筈というわけ、我々の基本的な考えである。(文献2及び3) 実際、1粒子Green関数において、磁性イオン間の相関効果を表わす自己エネルギー補正を考慮すれば、単一不純物問題で与えられる近藤温度 T_K 程度の振がりを持った電子帯が生じることを示すことが出来た(文献2及び3)。しかし、このような取り扱いは可能なのは、現在までのところ、低温の極限においてのみに限られる。その理由は、単一不純物問題自体において、1粒子Green関数に関する知見が未だ充分ではないからである。今回の研究では、軌道縮退のある周期的Anderson模型を用い、原子内Coulomb反発力の大きな極限では、運動方程式の方法を援用すれば、1粒子Green関数に関するより具体的な知見を得ることが出来ることが判ったので、それについて報告する。

先づ、単一不純物問題を考えることにする。用いるモデルは、次のような軌道縮退のあるAnderson模型である。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_f + \mathcal{H}_{sf}$$

---[1.1]

$$\left\{ \begin{aligned} \mathcal{H}_s &\equiv \sum_{\lambda=1}^{N_\lambda} \sum_k \epsilon_k c_{k\lambda}^\dagger c_{k\lambda}, & (N_\lambda: \text{スピンある軌道の縮退数}) \\ \mathcal{H}_f &\equiv \sum_{\lambda=1}^{N_\lambda} \epsilon_f f_\lambda^\dagger f_\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\lambda' \neq \lambda} U \hat{n}_\lambda \hat{n}_{\lambda'}, \\ \mathcal{H}_{sf} &\equiv \frac{1}{\sqrt{N}} V_{sf} \sum_{\lambda} \sum_k (c_{k\lambda}^\dagger f_\lambda + \text{h.c.}). \end{aligned} \right. \quad \text{----- [2.1]}$$

そこで、 $\mathcal{H}_f$ を対角化する演算子を導入する。次のような演算子を定義すると。

$$\left\{ \begin{aligned} \hat{n}_\lambda^+ &\equiv \hat{n}_\lambda, & \hat{n}_\lambda^- &\equiv 1 - \hat{n}_\lambda, & \hat{O}_f &\equiv \prod_{\lambda=1}^{N_\lambda} \hat{n}_\lambda^-, & \hat{f}_\mu &\equiv \prod_{\lambda \neq \mu} \hat{n}_\lambda^+, \\ \tilde{f}_\mu &\equiv \hat{f}_\mu f_\mu, & \tilde{n}_\mu &\equiv \hat{f}_\mu \hat{n}_\mu, & \text{-----}, & & \end{aligned} \right. \quad \text{--- [2.2]}$$

$\mathcal{H}_f$ を対角化する演算子は、次のようになる。

$$\left\{ \begin{aligned} [\tilde{f}_\mu, \mathcal{H}_f] &= \epsilon_f \tilde{f}_\mu, & [\tilde{n}_\mu f_\mu, \mathcal{H}_f] &= (\epsilon_f + U) \tilde{n}_\mu f_\mu, \\ [\tilde{f}_\mu^\dagger f_\mu, \mathcal{H}_f] &= 0, & [f_\mu^\dagger f_\mu, \mathcal{H}_f] &= (2\epsilon_f + U) f_\mu^\dagger f_\mu, \\ [\tilde{n}_\mu n_\mu f_\mu, \mathcal{H}_f] &= (\epsilon_f + 2U) \tilde{n}_\mu n_\mu f_\mu, & \text{-----} & \end{aligned} \right. \quad \text{--- [2.3]}$$

これは、 f 電子の軌道縮退の自由度を全て指定する演算子であることが判る。

この表式を用いると、演算子 f_μ は次のように分解される。

$$\begin{aligned} f_\mu &= \left(\prod_{\lambda \neq \mu} \hat{n}_\lambda^+ \right) f_\mu + \sum_{\nu} \left(\prod_{\lambda \neq \mu, \nu} \hat{n}_\lambda^- \right) \hat{n}_\nu^+ f_\mu + \sum_{\eta} \sum_{\lambda \neq \mu, \eta} \prod_{\lambda \neq \mu, \eta} \hat{n}_\lambda^- \hat{n}_\eta^+ \hat{n}_\eta^+ f_\mu + \text{-----} \\ &= \sum_{\{\alpha_\lambda\}} \left(\prod_{\lambda \neq \mu} \hat{n}_\lambda^{\alpha_\lambda} \right) f_\mu \end{aligned} \quad \text{--- [2.4]}$$

第1項はエネルギー ϵ_f 、第2項は $\epsilon_f + U$ 、第3項は $\epsilon_f + 2U$ 、... の状態を表わす。
今 [2.4] の中の 1 つの演算子を $\hat{A}$ と置き、 $\langle\langle \hat{A}; f_\mu^\dagger \rangle\rangle_z$ の運動を考えると。

$$z \langle\langle \hat{A}; f_\mu^\dagger \rangle\rangle_z = \langle [\hat{A}, f_\mu^\dagger] \rangle + \langle\langle [\hat{A}, \mathcal{H}_f]; f_\mu^\dagger \rangle\rangle_z, \quad \text{--- [2.5]}$$

又、 $[\hat{A}, \mathcal{H}_s] = 0$ 故に $[\hat{A}, \mathcal{H}_f] = E_f(A) \cdot \hat{A}$ を考慮すると

$$\langle\langle \hat{A}; f_\mu \rangle\rangle_z = \frac{1}{z - E_f(A)} \left[\langle [\hat{A}, f_\mu^\dagger] \rangle + \langle\langle [\hat{A}, \mathcal{H}_f]; f_\mu^\dagger \rangle\rangle_z \right], \quad \text{--- [2.6]}$$

ここで、 $U \rightarrow \infty$ の極限を考えると、もし $E_f(A)$ が U を含んでいなければ

$$\langle\langle \hat{A}; f_\mu \rangle\rangle_z \lesssim O\left(\frac{1}{U}\right) \rightarrow 0 \quad (\text{for } U \rightarrow \infty). \quad \text{--- [2.7]}$$

従って、 $\langle\langle f_\mu; f_\mu^\dagger \rangle\rangle_z$ の運動を考えると、この極限では、[2.4] の第1項のみ、即ち

$$f_\mu \simeq \left(\prod_{\lambda \neq \mu} \hat{n}_\lambda^+ \right) f_\mu \equiv \tilde{f}_\mu, \quad \text{--- [2.8]}$$

と置いてよい事が判る。同様の考察を $[f_\mu, \mathcal{H}_{sf}]$ にも適用し、更に高次の運動方程式を求めてみると、最初の3段階の方程式は次のように与えられる。

$$\textcircled{1} \quad \langle f_\mu; f_\mu^+ \rangle_z \simeq \langle \tilde{f}_\mu; f_\mu^+ \rangle_z$$

$$= \frac{1}{z - \epsilon_f} \left[\langle \tilde{f}_\mu \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_1} \langle [\tilde{f}_\mu C_\mu - \sum_{\nu \neq \mu} \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu\mu}] ; f_\mu^+ \rangle_z \right], \quad \dots [3.1]$$

$$\textcircled{2} \quad \langle \tilde{f}_\mu C_\mu; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_1} \frac{V_{sf}}{N} \langle \{ \tilde{f}_\mu f_\mu + \sum_{K_2} \sum_{\nu} (f_\nu^+ C_{\nu\mu} C_{\mu\nu} - C_{\nu\mu}^+ \tilde{f}_\nu C_{\mu\nu}) \} ; f_\mu^+ \rangle_z, \quad \dots [3.2]$$

$$\langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu\mu} f_\mu; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_1} \left[\langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu\mu} \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_2} \sum_{\nu} \langle (f_\nu^+ C_{\nu\mu} C_{\mu\nu} - C_{\nu\mu}^+ \tilde{f}_\nu C_{\mu\nu}) ; f_\mu^+ \rangle_z \right], \quad \dots [3.3]$$

$$\textcircled{3} \quad \langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu\mu} C_{\mu\eta}; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_1 - \epsilon_2 + \epsilon_f} \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_3} \langle \{ (-\tilde{f}_\nu^+ C_{\nu\mu}^+ C_{\mu\eta} + \sum_{\eta \neq \mu} \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu\mu} C_{\mu\eta}^+ f_\eta C_{\eta\mu}) ; f_\mu^+ \rangle_z, \quad \dots [3.4]$$

$$\langle C_{\nu\mu}^+ \tilde{f}_\mu; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_f} \left[\langle \tilde{f}_\mu^+ C_{\nu\mu} \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_3} \langle (\tilde{f}_\mu^+ C_{\nu\mu}^+ C_{\nu\mu} - \sum_{\eta \neq \mu} \tilde{f}_\eta^+ C_{\eta\mu} C_{\nu\mu}^+ f_\eta C_{\eta\mu}) ; f_\mu^+ \rangle_z \right], \quad \dots [3.5]$$

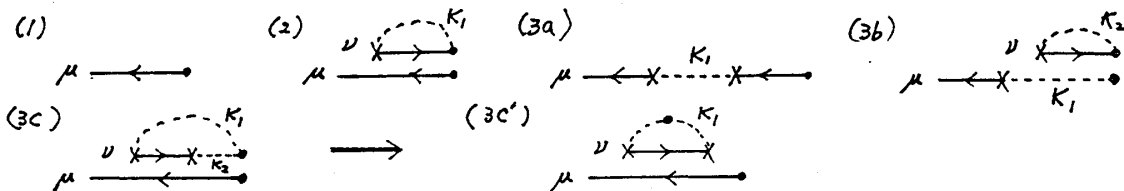
$$\langle C_{\nu\mu}^+ C_{\mu\eta} \tilde{f}_\mu; f_\mu^+ \rangle_z = \frac{1}{z - \epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_f} \left[\langle \tilde{f}_\mu^+ C_{\nu\mu}^+ C_{\mu\eta} \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_3} \langle (\tilde{f}_\mu^+ C_{\nu\mu}^+ C_{\mu\eta} C_{\mu\eta} - \sum_{\eta \neq \mu} \tilde{f}_\eta^+ C_{\eta\mu} C_{\nu\mu}^+ C_{\mu\eta} f_\eta) ; f_\mu^+ \rangle_z \right]. \quad \dots [3.6]$$

ここで、期待値 $\langle \rangle$ を含む項のみを拾い集めると、

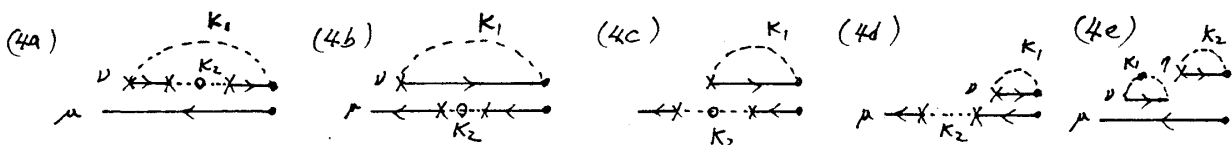
$$\langle f_\mu; f_\mu^+ \rangle_z \simeq \frac{1}{z - \epsilon_f} \left[\langle \tilde{f}_\mu \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_1} \frac{1}{z - \epsilon_1} \left\{ - \sum_{\nu \neq \mu} \langle \tilde{f}_\nu^+ C_{\nu\mu} \rangle + \frac{V_{sf}}{N} \frac{\langle \tilde{f}_\mu \rangle}{z - \epsilon_f} \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{V_{sf}}{N} \sum_{K_2} \sum_{\nu} \left(\frac{\langle \tilde{f}_\mu^+ C_{\nu\mu}^+ f_\nu C_{\mu\nu} \rangle}{z - \epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_f} + \frac{\langle \tilde{f}_\mu^+ C_{\nu\mu}^+ C_{\nu\mu} \rangle}{z - \epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_f} \right) \right\} \right]. \quad \dots [3.7]$$

以上の如く、運動方程式の各ステップは、 V_{sf} の展開になっている事が判る。更に高次の展開項を求めるためには、resolvent展開と同様なグラフによる表式を導入すると便利である。例えば、[3.7]の4種の展開項は順次以下のように表わされる。



ここで、 $\langle \tilde{f}_\mu^+ C_{\nu\mu}^+ C_{\mu\eta} \rangle \simeq \langle \tilde{f}_\mu^+ \rangle \langle C_{\nu\mu}^+ C_{\mu\eta} \rangle \delta_{K_2, K_1}$ の関係が成立することを考慮すると、(3c)は(3c')のように表わせる。同様な記法を V_{sf} の3次の項に適用すると、次の5種類のグラフで表わされる。



ただし $\cdots \bullet \cdots \equiv \cdots \bullet \cdots$ を用いた。

$$(4a) + (4b) + (4d) + (4e) \subset \text{diagram} \quad (4c) \subset \text{diagram}$$

$\left. \begin{array}{l} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \equiv \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \\ \equiv \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \\ \equiv \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \end{array}$

Handwriting practice sheet for the letter 'z'. The page is divided into two main sections by a vertical line. The left section is for the letter 'z' and contains two rows of practice lines. The first row shows the letter 'z' written on a set of three horizontal lines (top, middle, and bottom). The second row shows the letter 'z' written on a set of three horizontal lines, with the letter 'z' written on the middle line. The right section is for the letter 'z' and contains two rows of practice lines. The first row shows the letter 'z' written on a set of three horizontal lines, with the letter 'z' written on the middle line. The second row shows the letter 'z' written on a set of three horizontal lines, with the letter 'z' written on the middle line.

$$\langle\langle f_\mu \rangle f_\mu^+ \rangle_g = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} = \text{diagram 5}$$

$$\text{Def. 1.} \quad \epsilon_f(z) \equiv \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \\ = [z - \epsilon_f - \Sigma_f^{(a)}(z) - \Sigma_f^{(b)}(z)]^{-1} \quad \text{--- [4.1]} \quad \text{--- [4.1]}$$

$$\left. \begin{aligned} \Sigma_f^{(a)}(z) &= (N_\lambda - 1) V^2 \sum_K n_K G_a(z, K), \\ \Sigma_f^{(b)}(z) &= V^2 \sum_K G_b(z, K), \end{aligned} \right\} \dots [4.2]$$

$$G_a(z, K) \equiv [z - G_K - \Sigma_a(z, K)]^{-1}, \quad G_b(z, K) = [z - G_K - \Sigma_b(z, K)]^{-1}, \quad \dots [4.3]$$

$$\left[\begin{aligned} \Sigma_a(z, k) &\simeq V^2 \sum_f (1 - n_f) \{ G_f(z - \epsilon_k + \epsilon_f) - G_f(-z + \epsilon_k + \epsilon_f) \}, \\ \Sigma_b(z, k) &\simeq V^2 \sum_f n_f \{ G_f(z - \epsilon_k + \epsilon_f) - G_f(-z + \epsilon_k + \epsilon_f) \}. \end{aligned} \right] \dots [4.4]$$

[4.1] ~ [4.4] は Self-consistent equations を構成する。これから連立の表式は、 $(1/N_\lambda)$ 展開、
NCA⁽⁵⁾ 等の近似法を更に一般化したものである。

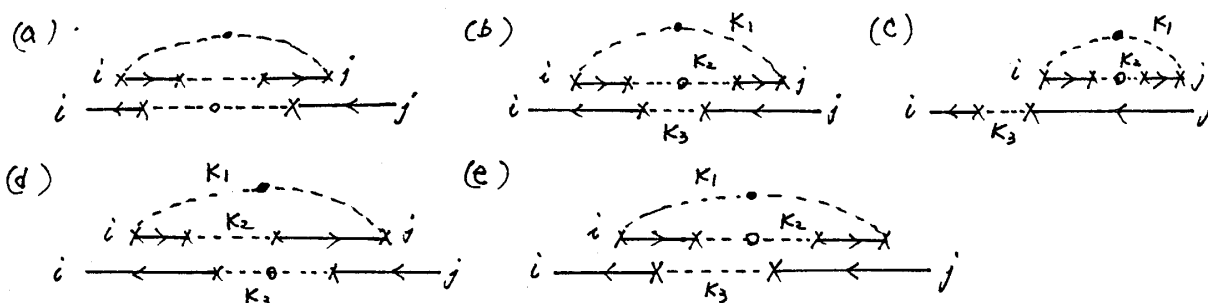
- 39 -

新しいハミルトニアンとして、 $\langle f_{\mu}; f_{\mu}^{\dagger} \rangle_2$ の運動を考へればよい。結局、 $\langle f_{\mu}; f_{\mu}^{\dagger} \rangle_2$ を表わすのに用いたと同様のグラフで $\langle f_{\mu}; f_{\mu}^{\dagger} \rangle_2$ を表わすと、

$$\langle\langle f_{i\mu}, f_{j\mu}^\dagger \rangle\rangle_z = \overleftarrow{i} \overleftarrow{j} \boxed{}, \quad \dots [5, 1]$$

$$\begin{aligned} G_{ij}(z) &\equiv \text{diagram with two vertices } i \text{ and } j \text{ connected by a double line} = \text{diagram with vertex } i \text{ connected to } j \text{ by a single line } \delta_{ij} + \text{diagram with vertex } i \text{ connected to } j \text{ by a loop } K_i \text{ and a single line } + \text{diagram with vertex } i \text{ connected to } j \text{ by a loop } Z_{i,l} \text{ and a single line}, \\ G_i(z) &\equiv \text{diagram with a single vertex } i \text{ connected to itself by a double line} = [z - \epsilon_f - \Sigma_f^{(0)}(z)]^{-1} \end{aligned} \quad \dots [5.2]$$

又、 $\Sigma_{ik}(R)$ は、2個の磁性イオン間の相関効果を表わす自己エネルギー補正で、最も低次の摂動展開項は次のグラフで与えられる。



今、 $(\Delta^2/|g_1| T_k) < 1$ を仮定すると、 $(a), (b) \sim O(\Delta)$, $(c), (d), (e) \sim O(T_k)$ or $O(\Delta^3/|g_1| T_k)$ であることが判り、結局、 $(a), (b)$ が最も重要であることが判る。さて、[5.2] を Fourier 変換すると、

$$G_f(k, z) = [z - \epsilon_f - \Sigma_f^{(0)}(z) + V_{sf}^2 G_b(k, z) - \Sigma_f(k, z)]^{-1} \quad \dots [5.3]$$

そこで、 $G_f(kz)$, $\Sigma_f(kz)$ は、夫々、 $G'_{ij}(z)$, $\Sigma'_{il}(z)$ の Fourier 変換である。又、 $\Sigma_f^{(1)}(z) = \Sigma_f^{(1)}(0) + z(1 - \hat{\chi})$ (for $|z| \leq T_K$) を用いると。

$$G_f(k, z) \simeq (\tilde{\chi})^{-1} \left[z - \frac{\epsilon_f + \Sigma_f^{(1)}}{\tilde{\chi}} + \frac{V_f^2}{\tilde{\chi}} G_0(k, z) - \frac{\Sigma_f(k, z)}{\tilde{\chi}} \right]^{-1}, \quad \dots [5.8]$$

い。す。 $T \rightarrow 0$ の時、 $[E_F + \Sigma_F^{(1)}(\omega)]/\tilde{\omega} \sim O(T_K)$, $\Sigma_F^{(0)}(k, z)/\tilde{\omega} \sim O(T_K)$ を考慮すると、 $\eta_F(k, z)$ は高々、エネルギー中 $O(T_K)$ の狭い電子帯の存在を示唆していることが判る。

「參考文獻」

1. G. R. Stewart, Rev. Mod. Phys. 56 (1984) 755.
2. H. Tichu, T. Matsunura and Y. Kuroda, Prog. Theor. Phys. 72 (1984) 366.
3. H. Tichu, T. Matsunura and Y. Kuroda, J. Mag. Mag. Mat. 52 (1985) 242.
4. T. V. Ramakrishnan and K. Sur, Phys. Rev. B26 (1982), 1798.
5. P. Coleman, Phys. Rev. B29, (1984), 3035; H. Keiter and G. Cydholm, J. Mag. Mag. Mat. 31-34, (1983), 477; Y. Kuramoto, J. Mag. Mag. Mat. 31-34, (1983), 463; F. C. Zhang and T. K. Lee, Phys. Rev. B30 (1984), 1556. N. Greene, S. Phys. B53, (1983), 271.