

s-d Bound State からの励起 Ⅲ

— Truncate Hamiltonian を使った

デモンストレーション —

東大理 川 村 清

(1月16日受理)

§ 1. 序 論

[以下で述べることは, Prog. Theor. Phys. に投稿し, 若干のプレプリントは, 日頃御指導いただいている方々にはお送りした。したがって, その様な方々は, この論文はお読みいただかなくてもよい。]

Yosida が s-d bound state についてのモデルを発表してから¹⁾ その ground state について, 多くの研究がなされて来たが, その bound state からの励起については, あまり仕事がない様である。その中において, 筆者は Green 関数の計算を若干試みた。²⁾ その考察によると, フェルミ面近傍の電子は singlet state にある target に衝突しても target を励起するだけのエネルギーを持ち合わせず, 従って, 散乱されないことが判った。このことは, Suhl 達³⁾ 及び Hamann⁴⁾ の抵抗の計算結果と Yosida model とを短絡してはならないことを示唆する。一方, 外から入って来た電子が bound electron とおきかわる process があって, (それは普通の“散乱過程”では扱えない) それが低温での大きな抵抗⁵⁾ を説明するのではないかという希望もある。そこで, この論文では議論を簡単にするために Truncate Hamiltonian (後出) を使って Green 関数を求め, 上に示唆した process が実際存在することを示す。

Truncate Hamiltonian とは¹⁾

$$\begin{cases} H = H_0 + H_1 \end{cases} \quad (1.1)$$

$$\begin{cases} H_0 = \sum_p \epsilon_p a_p^+ a_p \end{cases} \quad (1.2)$$

$$\begin{cases} H_1 = (-J/N) \sum_{p,p'} a_p^+ (S \cdot \sigma) a_{p'} \end{cases} \quad (1.3)$$

川村 清

で記述され、Fermi 面より外側の電子のみが散乱されるという model である。勿論この Hamiltonian は s-d Hamiltonian とは異なるが、bound state が出ること、それは摂動計算では出ないという点において、両者は共通の性質をもっている。

§ 2. Graph 法

一体の Green 関数は次式で定義される。⁶⁾

$$G_{pp'}(t, t') = -i \langle \Psi_0 | T(\tilde{a}_p(t) \tilde{a}_{p'}^+(t')) | \Psi_0 \rangle \quad (2.1)$$

ここで $|\Psi_0\rangle$ は H の ground state で $\tilde{A}(t)$ は Heisenberg 表示をあらわす。たとえば $t > t'$ の時、(2.1) で定義される関数は次のように書ける。
(文献 6 の p 66)

$$G_{pp'}(t, t') = -i \text{Lim} \langle \Phi_0 | U(T-t) a_p U(t-t') a_{p'}^+ U(t'-T') | \Phi_0 \rangle \times \{ \langle \Phi_0 | U(T-T') | \Phi_0 \rangle \}^{-1} \quad (2.2)$$

ここで Lim は、 T と T' の虚部を $-\infty$ にもって行くことを指示する。 $|\Phi_0\rangle$ は ground state から断熱的に H' を小さくして得られる状態である。今の場合 ground state そのままをとって来ればよい。

$$U(t) = \exp(-iHt) \quad (2.3)$$

を H_1 について摂動展開すると、

$$\begin{aligned} G_{pp'}(t, t') &= -i \text{Lim} \exp\{iE_s(T-T')\} \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iJ/N)^n}{n!} \int_{T'}^T \cdots \int_{T'}^T dt_1 dt_2 \cdots dt_n \\ &\times \langle \Phi_0 | \exp(-iH_0 T) T[a_p(t) a_{p'}^+(t') \Sigma(a^+ a)(t_1) \cdots \Sigma(a^+ a)(t_n)] \\ &\times T[(S \cdot \sigma)_{\alpha_1 \beta_1}(t_1) \cdots (S \cdot \sigma)_{\alpha_n \beta_n}(t_n)] \exp(iH_0 T') | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.4)$$

(この式で二つの T-product は互いに相関があることに注意) 電子の operator の T-product は Wick の定理によって "contraction" と normal product に分解出来る。(文献 6 の p38.)

その際、他の問題と本質的に違うところがある。normal product は "annihilation operator" を右に "creation operator" を左にもって来た演算子の積である。annihilation operator とは、 $p > p_0$ なら a_p で $p < p_0$ なら a_p^+ である。普通の問題では、 $|\Phi_0\rangle$ が Fermi 真空故、normal product を operate すると消える。今の場合、Fermi 面の外側に一個電子があるため、normal product を operate しても消えない。ただし、Fermi 面の外側にあるのはただ一個だから、 $N(a^+ a^+ a a)$ のように 4 つの operator の normal product は考えなくてよい。結局、(2.4) の T-product は、contraction のみの積の和か、一個だけ normal product の入った項の和になる。

(2.4) の最初の T-積を contraction のみで書いた項は graph で書ける。水平軸を時間軸に選び T と T' の間に n 個の点を打つ。 t_j という点に $(S \cdot \sigma)_{\alpha\beta}(t_j)$ が対応し、 β という電子線が入り α という電子線が出て行く。全ての電子線は t' で表われ t で消えるものを除いて閉じなくてはならない。 t_{j+1} から t_j に走る電子線は $g_p(t_j - t_{j+1})$ をあらわす。ここで

$$g_p(t) = (-i) \exp(-i\epsilon_p t) \{ \theta(t)(1-f(\epsilon_p)) - \theta(-t)f(\epsilon_p) \} \quad (2.5)$$

そのような一つのグラフは、次の様な寄与を与える。

$$\begin{aligned} G_I^n(t, t') &\equiv (-1)^\ell \text{Lim} (-J/N)^n \exp \{ iE_S(T' - T) \} \\ &\times \int_{T'}^T \cdots \int dt_1 \cdots dt_n (\Pi g) \\ &\times \langle \Psi_0 | \exp(-iH_0 T) \Pi (S \cdot \sigma)(t_j) \exp(iH_0 T') | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.6)$$

ℓ は closed loop の数である。

n 次の項の残りの寄与は一つの contraction を (あるいは $(-i)^{-1} g$ を) normal product でおきかえて得られる。そのような寄与を表わすために、電子線のうちの一本を切り、その電子線が t_{k+1} から t_k に走っていたなら、

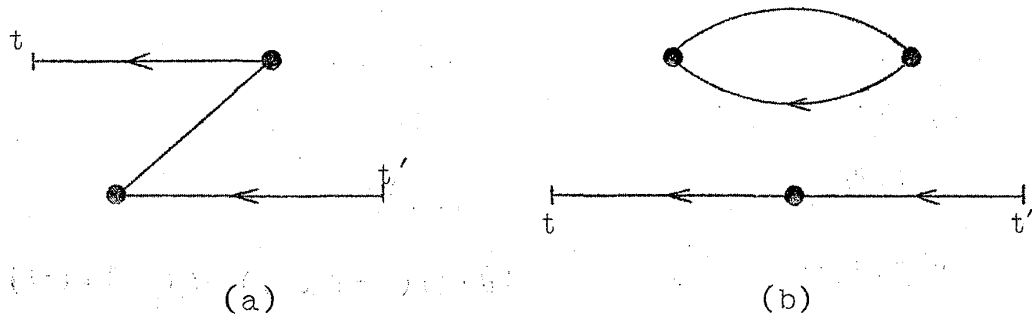
川村 清

その切断は, $(-i) N (a(t_k) a^\dagger(t_{k+1}))$ をあらわす。そのような graph は

$$\begin{aligned}
 G_{\parallel}^n(t, t') &\equiv (-i)(-1)^{\ell} \text{Lim} (-J/N)^n \exp \{ i E_S (T' - T) \} \\
 &\times \int_{T'}^T \cdots \int_{T'}^T dt_1 \cdots dt_n (\Pi g) \\
 &\times \langle \Psi_0 | \exp(-i H_0 T) \Pi (S \cdot \sigma)(t_j) N(a(t_{k+1}) a^\dagger(t_k)) \\
 &\exp(i H_0 T') | \Psi_0 \rangle
 \end{aligned} \quad (2.7)$$

ところで, 散乱される電子は全て Fermi 面の外側にある電子ばかりであることに注意すると, (2.5) から, $g_p(t)$ は $t > 0$ でのみ残る。このことはグラフ中の電子線のうち, 逆むきの線は存在しないことを示す。故に, 1 図(a)のような graph はない。また閉じた loop は少なくとも一本逆向きの線があるからこれもない。

すなわち 1 図(b)のような graph もない。



第 1 図

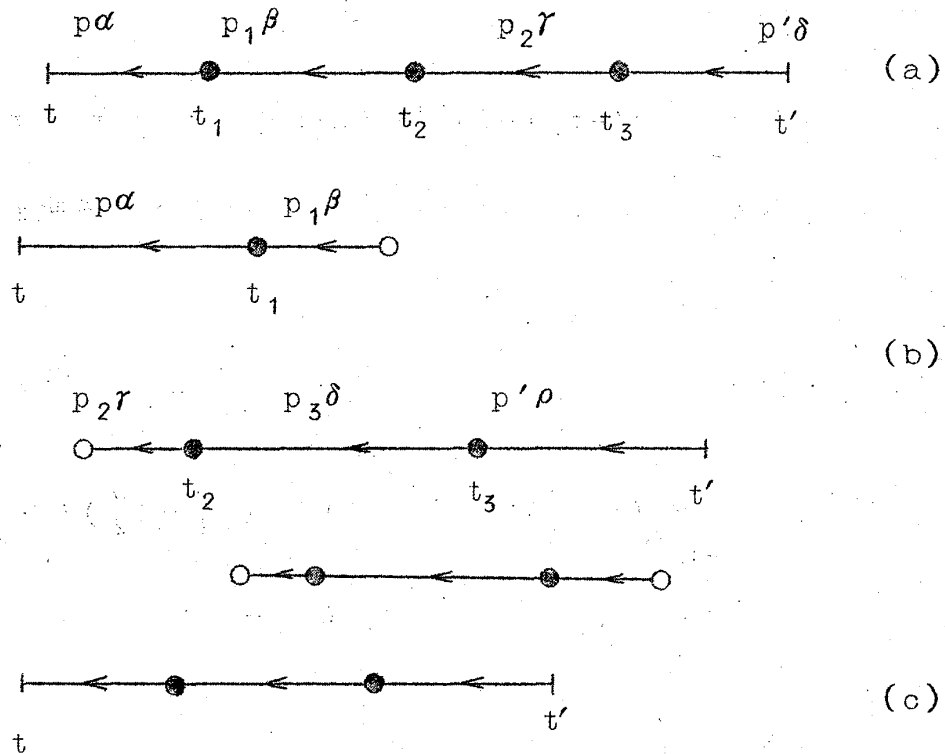
例として, 第 2 図(a)のグラフは, 次の寄与を与える。

$$\begin{aligned}
 (a) &= \text{Lim} (-J/N)^3 \int_{T'}^t dt_1 \int_{T'}^{t_1} dt_2 \int_{T'}^{t_2} dt_3 \exp \{ i E_S (T' - T) \} \\
 &\times g_{p\alpha}(t-t_1) g_{p_1\beta}(t_1-t_2) g_{p_2\gamma}(t_2-t_3) g_{p'\delta}(t_3-t') \\
 &\times \langle \Psi_0 | \exp(-i H_0 T) (S \cdot \sigma)_{\alpha\beta}(t_1) (S \cdot \sigma)_{\beta\gamma}(t_2) (S \cdot \sigma)_{\gamma\delta}(t_3) \\
 &\exp(i H_0 T') | \Psi_0 \rangle.
 \end{aligned} \quad (2.8)$$

もし, t_2 から t_1 へ行く線が切断されると, 第2図(b)のグラフのようになる。
 これからの寄与は, 次のようになる。

$$\begin{aligned}
 (b) = & (-i) (-J/N)^3 \text{Lim} \int_{T'}^t dt_2 \int_{T'}^{t_2} dt_1 \int_{T'}^{t_1} dt_3 \exp \{ iE_S(T'-T) \} \\
 & \times g_{p\alpha}(t-t_1) g_{p_3\delta}(t_2-t_3) g_{p'p}(t_3-t') \\
 & \times \langle \Psi_0 | \exp(-iH_0 T) (S \cdot \sigma)_{\alpha\beta}(t_1) (S \cdot \sigma)_{\gamma\delta}(t_2) (S \cdot \sigma)_{\delta\rho}(t_3) \\
 & N(a_{p_1\beta}(t_1) a_{p_2\gamma}(t_2)) \exp(iH_0 T') | \Psi_0 \rangle. \quad (2.9)
 \end{aligned}$$

第2図(c)は, 第1図(b)の closed loop の一本を切って得られる。



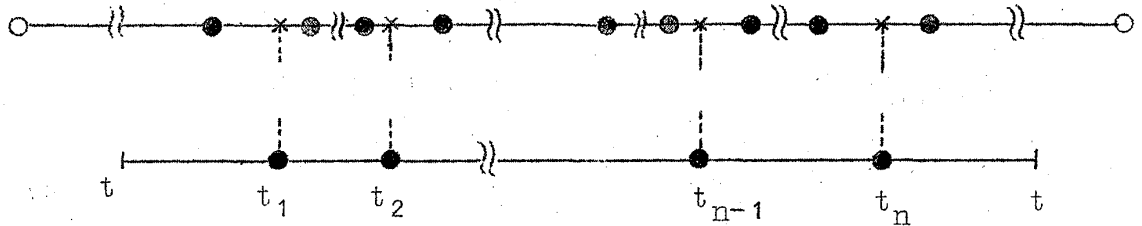
第2図

今後, t' から入って t でおわる電子線が切断されない graph を "normal graph" また2図bのように, それが切れている graph を "anomalous graph" と呼ぶ。

川村 清

§ 3. normal graph の寄与

normal graph は一般に第 3 図のように t' から t への“幹線”と、二つの円のついている“側線”からなる。



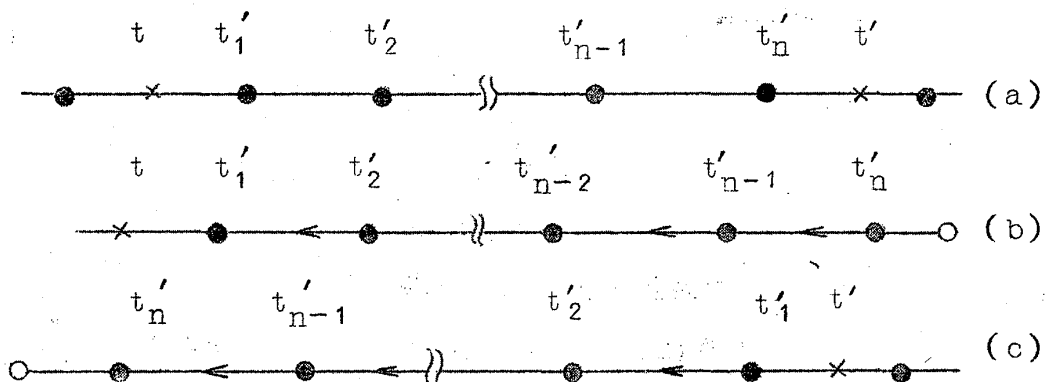
第 3 図

人為的に，“幹線”上の各点から側線に垂線をおろして，その足に×印をつける。 g の定義から

$$g(\tau' - \tau'') = g(\tau' - \tau) (-i)^{-1} g(\tau - \tau'') \quad \tau' > \tau > \tau''$$

故，上の×印は実線を二分し，因子 $(-i)^{-1}$ をかけることを表わす。側線上となりあう 2 つの×印の間の部分の寄与は，（第 4 図 a）

$$\begin{aligned} I(t_p; t'_p) &= \sum_{n=0}^{\infty} (-J/N)^n \int_{t'}^t dt'_1 \int_{t'}^{t'_1} dt'_2 \dots \int_{t'}^{t'_{n-1}} dt'_n \\ &\times \sum_{p_1 \dots p_{n-1}} g_p(t - t'_1) (S \cdot \sigma)(t'_1) g_{p_1}(t'_1 - t'_2) (S \cdot \sigma)(t'_2) \\ &\dots (S \cdot \sigma)(t'_n) g_{p_n}(t'_n - t') \end{aligned} \quad (3.1)$$



第 4 図

また、第4図(b)のように×一印と右側の丸との間の寄与は

$$\begin{aligned}
 J(tp; T') = & \sum_{n=0}^{\infty} (-J/N)^n \int_{T'}^{t'} dt'_1 \int_{T'}^{t'_1} dt'_2 \cdots \int_{T'}^{t'_{n-1}} dt'_n \\
 & \times \sum_{p_1 \cdots p_n} g_p(t-t'_1) (S \cdot \sigma)(t'_1) g_{p_1}(t'_1 - t'_2) \cdots \\
 & (S \cdot \sigma) a_{p_n}(t'_n) \exp(iH_0 T')
 \end{aligned} \quad (3.2)$$

また、第4図(c)のように、左側の丸と×一印との間の寄与は

$$\begin{aligned}
 K(T; t'p') = & \sum_{n=0}^{\infty} (-J/N)^n \int_{t'}^T dt'_n \int_{t'_n}^T dt'_{n-1} \cdots \int_{t'_2}^T dt'_1 \\
 & \times \exp(-iH_0 T) \sum_{p_1 \cdots p_n} a_{p_n}^+ (S \cdot \sigma)(t'_n) g_{p_{n-1}}(t'_n - t'_{n-1}) \\
 & \cdots (S \cdot \sigma)(t'_1) g_{p'}(t'_1 - t')
 \end{aligned} \quad (3.3)$$

これらの関数 I, J, K を使って第3図は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
 G_{pp'}(t, t'; n) = & (-i)(-J/N)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n \\
 & \times \langle \Psi_0 | K(T; t_1 p'_1) (-i)^{-1} (S \cdot \sigma)(t_1) I(t_1 p'_1; t_2 p'_2) (-i)^{-1} \\
 & (S \cdot \sigma)(t_2) \cdots (-i)^{-1} (S \cdot \sigma)(t_n) J(t_n p'_n; T') | \Psi_0 \rangle \\
 & \times g_p(t-t_1) g_{p_1}(t_1-t_2) \cdots g_{p_{n-1}}(t_{n-1}-t_n) g_{p'}(t_n-t') \\
 & \times \exp\{iE_s(T-T')\},
 \end{aligned} \quad (3.4)$$

J は、Fermi 面の外に一価だけ電子のある状態に作用することに注意すると

$$\begin{aligned}
 J(tp; T') = & \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{T'}^t dt_1 \int_{T'}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{T'}^{t_{n-1}} dt_n \\
 & \times a_p(t) H_1(t_1) H_1(t_2) \cdots H_1(t_n) \exp(iH_0 T')
 \end{aligned}$$

川村 清

$$= a_p(t) \exp(iH_0 t) \exp\{-iH(t-T')\} \quad (3.5)$$

とかける。同じように

$$K(T; t'p') = \exp\{-iH(T-t')\} \exp(-iH_0 t') a_{p'}^+(t') \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} I(tp; t'p') &= (-i) J(tp; t'p') a_{p'}^+ \exp(-iH_0 t') \\ &= (-i) a_p(t) \exp(iH_0 t) \exp\{-iH(t-t')\} a_{p'}^+ \exp(-iH_0 t') \end{aligned} \quad (3.7)$$

(3.5) から (3.7) を (3.4) に代入すると,

$$\begin{aligned} G_{pp'}^{(N)}(t, t') &= g_p(t-t') \delta_{pp'} \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} (-J/N)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n \\ &\times g_p(t-t_1) \langle \Psi_0 | (\tilde{S} \cdot \sigma)(t_1) (\tilde{S} \cdot \sigma)(t_2) \cdots (\tilde{S} \cdot \sigma)(t_n) | \Psi_0 \rangle \\ &\times \{g_{p_1}(t_1-t_2) \cdots g_{p_{n-1}}(t_{n-1}-t_n)\} g_{p'}(t_n-t') \end{aligned} \quad (3.8)$$

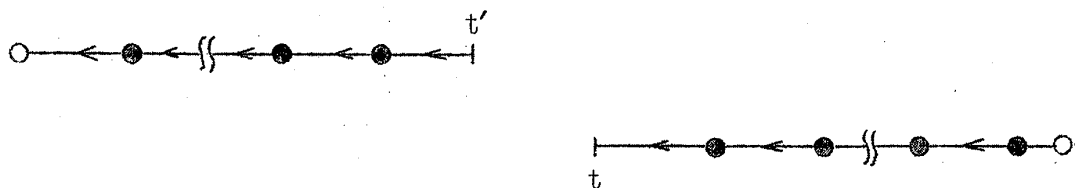
§ 1 で定義したように operator の上の波線は Heisenberg 表示をあらわす。

(3.8) の表式は, t -matrix の spin Green 関数による展開式に他ならな
7)
い。

§ 4. Anomalous graph の寄与

(i) $t < t'$ の場合

電子線は時間軸の“順方向”にしか走らないということから, normal graph からの寄与は $t > t'$ の時のみ残る。 $t < t'$ のときは, 第 5 図の anomalous graph のみが残る。このグラフの寄与は



第 5 図

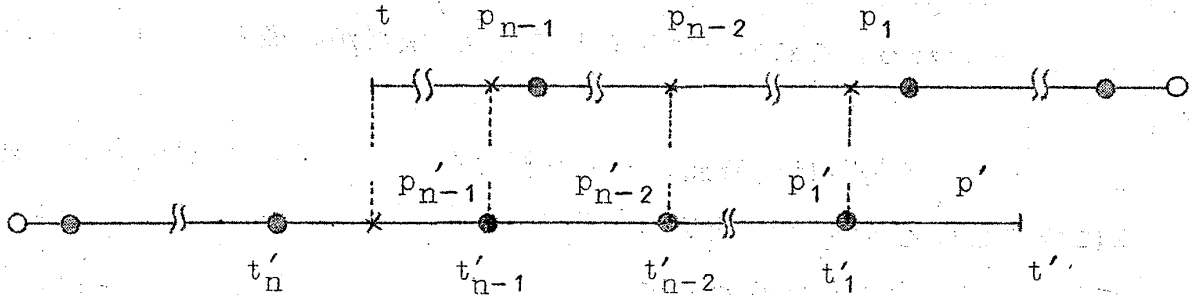
もちろん前出の関数 K および J を使って計算出来るが、今の場合はより直接的に (2.1) より、

$$\begin{aligned} G_{p\alpha p'\alpha'}(t < t') &= i \exp \{ i(E_S - E_F)(t - t') \} \langle \Psi_0 | a_{p'\alpha}^\dagger a_{p\alpha} | \Psi_0 \rangle \\ &= \frac{i}{2} \exp \{ i(E_S - E_F)(t - t') \} \Gamma_p^* \Gamma_p \delta_{\alpha\alpha'} \end{aligned} \quad (4.1)$$

と計算出来る。Truncate Hamiltonian の場合、上の項の存在が導出される formulation のみが正しい。逆にいえば、われわれの一見かわった摂動計算法は、第5図の graph の存在を可能にすることから、その正当性が保障される。

(iii) $t > t'$ の場合

この場合、第6図のような graph のみが残る。この graph からの寄与は



第6図

$$\begin{aligned} &\langle \Psi_0 | K(T; t p'_{n-1}) (-i)^{-1} I(t p; t_{n-1} p_{n-1}) (-i)^{-1} \\ &\quad \times (S \cdot \sigma)(t_{n-1}) I(t_{n-1} p_{n-1}; t_{n-2} p_{n-2}) \cdots (-i)(S \cdot \sigma)(t_1) \\ &\quad \times J(t_1 p_1; T') | \Psi_0 \rangle \\ &\quad \times g_{p'_{n-1}}(t - t'_{n-1}) \cdots g_{p'}(t'_1 - t_1) \end{aligned} \quad (4.2)$$

ここに出て来た J , I , K として、(3.5), (3.6) 及び (3.7) を使うと Green 関数の中に次のような項があることが判る。

$$G_{p\alpha p'\alpha'}^{(A)}(t > t') = i \sum_{n=0}^{\infty} (-J/N)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n$$

$$\begin{aligned}
 & \times \sum_{p_1 \dots p_n} \langle \Psi_0 | \exp(iHt) a_{p_1 \alpha_1}^+ a_{p \alpha} \exp(-iHt) \\
 & \times (\tilde{S} \cdot \sigma)_{\alpha_1 \alpha_2}(t_1) \dots (\tilde{S} \cdot \sigma)_{\alpha_n \alpha'}(t_n) | \Psi_0 \rangle \\
 & \times g_{p_1}(t-t_1) g_{p_2}(t_1-t_2) \dots g_{p_n}(t_{n-1}-t_n) g_{p'}(t_n-t')
 \end{aligned}
 \tag{4.3}$$

§ 5. 結論と討論

摂動計算を行なうにあたって, “unperturbed state” としては, ground state と直交しない state をえらばなくてはならない。そのことから, truncate Hamiltonian の場合, normal product が消えないことを考慮にいられた摂動計算を行なった。その結果, Green 関数は2つの部分からなり, (normal graph の寄与と anomalous graph の寄与) 前者は spin Green function で書かれる, これまでに知られていた⁷⁾ 項だが, 後者は新しい項である。

Normal graph の寄与は, 普通の散乱過程である。(3.8)を見ると, 時刻 t' で系につけくわえられた p' という電子が, $t_n, t_{n-1}, \dots, t_1$ と n 回散乱されて時刻 t でとりのぞかれる。その間 target は $\tilde{S}(t_n), \tilde{S}(t_{n-1}), \dots, \tilde{S}(t_1)$ で記述されるような n 回の変動を受ける。

一方, 実際には, 他の process もある。まだ target のまわりにある電子を取り除く。しかるのちに, 外から電子を供給すると, それはただちに target につかまってしまうだろう。それが § 4 の (i) で考察した process である。電子をとりのぞくまえに外から一個つけ加えると, 前述のようにその電子は target に何回も散乱される。あとからとり除く電子がその散乱されている電子ではなくて, bound electron そのものであれば target のまわりに孔があくから, 今まで散乱されていた電子がそこにおちこむ。これが § 4 の (iii) で考察した process である。実際 (4.3) はそういう形をしている。

さて, 普通の $s-d$ Hamiltonian の場合は, 何が予想されるだろうか。その場合, Yosida model¹⁾ が正しいとすれば ground state と Fermi 真空とは直交するから, やはり normal product が消えないような state から

出発しなくてはならない。したがって、やはり Green 関数は “nomal term” と “anomalous term” の二つからなり、前者は普通の spin Green 関数で展開出来る項であり¹¹⁾ 後者は、localized electron と外からの電子が交換する過程を与える。⁸⁾ 普通の散乱過程は、Nagaoka-Hamann 方程式を与える⁹⁾ から、逆にいえば Yosida-model からの励起は、これまで諸賢が苦心して解いて来た Nagaoka-Hamann 方程式、或いは Suhl 方程式¹⁰⁾ で記述出来ない部分を含んでいる。

文 献

- 1) K.Yosida, Phys. Rev. 147 (1966), 223.
- 2) 川村 清, 物性研究
- 3) H.Suhl and D.Wong, Physics 3 (1967), 17.
- 4) D.R.Hamann, Phys. Rev. 158 (1967), 570.
- 5) M.D.Daybell and W.A.Steyert, Phys. Rev. Letters. 18 (1967), 398.
- 6) D.J.Thouless, “The Quantum Mechanics of Many-Body Systems” (Academic Press, New York and London) p.66.
(この本は松原による訳本があるが、この論文中の引用頁は、全て原著に依った。)
- 7) K.Kawamura, Prog. Theor. Phys. 39 (1968), 1375.
- 8) D.R.Hamann, Phys. Rev. 158 (1967), 570.
- 9) K.Kawamura, Prog. Theor. Phys. 42 (1969), 1058.
- 10) H.Suhl, Phys. Rev. 138 (1965), A515.