

Anderson Model での non-magnetic impurity

東大理 和田 靖

(6月8日受理)

最近、近藤さんは一つの興味ある可能性を指摘された。¹⁾ いわゆる s-d 相互作用をしている系では、スピンをもった不純物による電子散乱の t 行列に singularity があるが、普通 non-magnetic と考えられている不純物による散乱でも、その singularity が少し変った形で残るという可能性である。近藤さんは Anderson model をとり、²⁾ d level が Fermi level よりもずっと高い所にあるときの、s 電子の t 行列を s-d mixing V について6次まで計算されて、その結論を出された。その計算は実に大変なものであったらしいので、一つには結果を check することを目的とし、更には s-d mixing のより高次の項がどのような効果を及すかを調べるために、次の計算を行なってみた。

近藤さんの結果を見ると、t 行列で singular になる可能性のある項は V と d level の Coulomb 相互作用 U について $V^6 U^3$ の項から始まっている。従って s-d mixing の方は、はじめから完全に考慮に入れておいて、U について摂動展開をすることになれば、3次の項で何事か起ることが期待される。同時に V の高次の効果を調べることも出来る筈である。これが計算の動機であるが、結果はどうも思わしくない。何処かで間違っていることもあり得るので、御批判を頂ければ幸いである。

§ 1. s-d mixing

Anderson model の Hamiltonian を

$$H = \bar{H}_0 + \bar{H}'$$

$$\bar{H}_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^* c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_{d\sigma} n_{d\sigma} + V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^* c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^* c_{k\sigma}),$$

和田 靖

$$\bar{H}' = U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow},$$

と書く。ここで

$$n_{d\sigma} = c_{d\sigma}^* c_{d\sigma}$$

で, $\epsilon_{k\sigma}$, $\epsilon_{d\sigma}$ は Zeeman energy も含むとする。上記の $\bar{H}_0$ から摂動計算を始めたのでは, あまりに面白くないので, Anderson の最初の論文²⁾にある Hartree 近似までは, 非摂動項に入れよう。そのために, あとで定義する或る意味での平均 $\langle n_{d\sigma} \rangle$ を用いて

$$H = H_0 + H',$$

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^* c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_{d\sigma} n_{d\sigma} + V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^* c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^* c_{k\sigma}), \quad (1.1)$$

$$H' = U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} - \sum_{\sigma} U \langle n_{d-\sigma} \rangle n_{d\sigma} \quad (1.2)$$

$$E_{d\sigma} = \epsilon_{d\sigma} + U \langle n_{d-\sigma} \rangle$$

とまとめ直す。

H_0 は正準変換によって対角化出来るが, それを

$$c_{k\sigma} = \sum_n \xi_{kn}^{\sigma} a_{n\sigma}, \quad (1.3)$$

$$c_{d\sigma} = \sum_n \xi_{dn}^{\sigma} a_{n\sigma},$$

とおくと, ξ は固有値方程式

$$(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{n\sigma}) \xi_{kn}^{\sigma} + V \xi_{dn}^{\sigma} = 0,$$

$$\sum_k V \xi_{kn}^{\sigma} + (E_{d\sigma} - \epsilon_{n\sigma}) \xi_{dn}^{\sigma} = 0.$$

を満足する。これから

$$X_n^{\sigma} \equiv V \sum_k \xi_{kn}^{\sigma} \quad (1.4)$$

とおくと

和田 靖

$$S^\sigma S^{\sigma*} = 1$$

となる。これは S^σ が unitary 行列であることを意味し

$$S^{\sigma*} S^\sigma = 1$$

を与える。この対角成分をとれば

$$\sum_k |\xi_{kn}^\sigma|^2 + |\xi_{dn}^\sigma|^2 = 1$$

で、(1.5) を代入すると

$$\frac{X_n^\sigma}{\epsilon_{n\sigma} - E_{d\sigma}} = \left[1 + \sum_k \frac{V^2}{(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})^2} \right]^{-1/2} e^{i\varphi_{n\sigma}}, \quad \varphi_{n\sigma} \text{ real}$$

を得る。従って (1.5) から

$$\xi_{dn}^\sigma = \left[1 + \sum_k \frac{V^2}{(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})^2} \right]^{-1/2} e^{i\varphi_{n\sigma}}, \quad (1.7)$$

$$\xi_{kn}^\sigma = \frac{V \xi_{dn}^\sigma}{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}}, \quad (1.8)$$

となる。

このようにして固有値 $\epsilon_{n\sigma}$ が決まれば、非摂動エネルギー H_0 (1.1) は

$$H_0 = \sum_{n\sigma} \epsilon_{n\sigma} \alpha_{n\sigma}^* \alpha_{n\sigma} \quad (1.9)$$

で与えられ、その基底状態は、chemical potential μ を導入して、

$\epsilon_{n\sigma} > \mu$ の level は粒子が存在せず、 $\epsilon_{n\sigma} \leq \mu$ は存在する Fermi 分布となる。Hartree 近似での平均 $\langle n_{d\sigma} \rangle$ は、その Fermi 分布による平均としよう。

$$\langle n_{d\sigma} \rangle = \sum_{nn'} \xi_{dn}^{\sigma*} \xi_{dn'}^\sigma \langle \alpha_{n\sigma}^* \alpha_{n'\sigma} \rangle = \sum_{\epsilon_{n\sigma} \leq \mu} |\xi_{dn}^\sigma|^2, \quad (1.10)$$

従って、この $\langle n_{d\sigma} \rangle$ は近藤さんの記号 $\langle n_0 \rangle$ とは異っていることを注意しておく。

後の便宜のために particle-hole の記法を用いて

$$\alpha_{n\sigma} = \begin{cases} a_{n\sigma} & , \quad \epsilon_{n\sigma} > \mu \\ b_{n\sigma}^* & , \quad \epsilon_{n\sigma} \leq \mu \end{cases}$$

とし, H' を a, b について normal product で書く。normal product を Wick に従って,³⁾ $:$ $:$ で表わすと

$$\alpha_{n\sigma}^* \alpha_{n'\sigma} = : \alpha_{n\sigma}^* \alpha_{n'\sigma} : + \begin{cases} \delta_{nn'} & , \quad \epsilon_{n\sigma} \leq \mu \\ 0 & , \quad \epsilon_{n\sigma} > \mu \end{cases}$$

となるから, (1.2) は

$$\begin{aligned} H' = U \sum_{\substack{nn' \\ mm'}} \xi_{dn}^{\uparrow*} \xi_{dn}^{\uparrow} \xi_{dm}^{\downarrow*} \xi_{dm}^{\downarrow} : \alpha_{n\uparrow}^* \alpha_{n'\uparrow} \alpha_{m\downarrow}^* \alpha_{m'\downarrow} : \\ - U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle , \end{aligned} \quad (1.11)$$

となる。

固有値 $\epsilon_{n\sigma}$ を (1.6) から決めよう。簡単のために $\epsilon_{k\sigma}$ は等間隔に分布しているとし, 状態密度を ρ とすると

$$\epsilon_{k\sigma} = \epsilon_1 + \frac{n}{\rho}, \quad n=0, 1, 2, \dots, N. \quad (1.12)$$

である。 ρ は体系の大きさと共に大きくなる。Continuum 中の解をはじめに考える。 $n=n_0$ と n_0+1 の間にある固有値を

$$\epsilon_{n_0\sigma} = \epsilon_1 + \frac{n_0 + \Delta n}{\rho}, \quad 0 \leq \Delta n < 1 \quad (1.13)$$

とすると, (1.6) は

$$\epsilon_{n_0\sigma} - E_{d\sigma} = V^2 \sum_{n=0}^N \frac{\rho}{n_0 + \Delta n - n}$$

$$\begin{aligned}
 &= -V^2 \rho \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n-n_0-\Delta n} + V^2 \rho \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n+N+1-n_0-\Delta n} \\
 &= V^2 \rho \{ \psi(-n_0-\Delta n) - \psi(N+1-n_0-\Delta n) \},
 \end{aligned}$$

となる。 ψ は di-gamma 関数である。 n_0 が, continuum の中央附近にあるときは, $N-n_0$ と共に非常に大きな量になるので, di-gamma 関数を漸近展開することが出来る。

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{n_0 \sigma} - E_{d\sigma} &= V^2 \rho \{ \pi \cot \pi (n_0 + \Delta n) \\
 &\quad + \psi(1+n_0+\Delta n) - \psi(N+1-n_0-\Delta n) \} \\
 &\approx V^2 \rho \{ \pi \cot \pi \Delta n + \log \frac{n_0}{N-n_0} + O\left(\frac{1}{N}\right) \}. \quad (1.14)
 \end{aligned}$$

括弧中の第二項は, (1.13) を考えると

$$\log \frac{n_0}{N-n_0} = \log \frac{\epsilon_{k_0 \sigma} - \epsilon_1}{\epsilon_2 - \epsilon_{k_0 \sigma}},$$

である。ここで

$$\epsilon_{k_0 \sigma} = \epsilon_1 + \frac{n_0}{\rho},$$

とおいた。大きな体系で $N \rightarrow \infty$ のときは, (1.14) の左辺の $\epsilon_{n_0 \sigma}$ も $\epsilon_{k_0 \sigma}$ とおけるから, (1.14) より Δn が求まり, それを (1.13) へ代入して

$$\epsilon_{n_0 \sigma} = \epsilon_{k_0 \sigma} + \frac{1}{\pi \rho} \operatorname{arccot} \left[\frac{\epsilon_{k_0 \sigma} - E_{d\sigma}}{\Delta} + \frac{1}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{k_0 \sigma}}{\epsilon_{k_0 \sigma} - \epsilon_1} \right], \quad (1.15)$$

を得る。ここで Anderson に従って

$$\Delta = \pi V^2 \rho$$

とおいた。この結果は $\epsilon_{k_0 \sigma}$ が, ϵ_1 や ϵ_2 に近くなると使えないことは明らかである。

次に (1.7) より ξ_{dn}^σ を求めよう。 $\epsilon_{n\sigma}$ を決める方程式 (1.6) を V^2 について微分すれば

$$\frac{d\epsilon_{n\sigma}}{dV^2} - U \frac{d\langle n_{d-\sigma} \rangle}{dV^2} = \frac{\epsilon_{n\sigma} - E_{d\sigma}}{V^2} - V^2 \sum_k \frac{1}{(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})^2} \frac{d\epsilon_{n\sigma}}{dV^2}$$

となるから, (1.7) より

$$\frac{1}{|\xi_{dn}^\sigma|^2} = 1 + \sum_k \frac{V^2}{(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})^2} = \left\{ \frac{\epsilon_{n\sigma} - E_{d\sigma}}{V^2} + U \frac{d\langle n_{d-\sigma} \rangle}{dV^2} \right\} / \frac{d\epsilon_{n\sigma}}{dV^2}$$

を得る。(1.15) を用いて $d\epsilon_{n\sigma}/dV^2$ を求めると

$$\frac{d\epsilon_{n\sigma}}{dV^2} = + \frac{1}{\pi\rho} \frac{+ \frac{1}{\pi V^4 \rho} (\epsilon_{k\sigma} - E_{d\sigma}) + \frac{U}{\Delta} \frac{d\langle n_{d-\sigma} \rangle}{dV^2}}{1 + \left\{ \frac{\epsilon_{k\sigma} - E_{d\sigma}}{\Delta} + \frac{1}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{k\sigma}}{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_1} \right\}^2}$$

となるから, これを上式の式に代入して

$$|\xi_{dn}^\sigma|^2 = \frac{\Delta}{\pi\rho} \left[\Delta^2 + \left\{ \epsilon_{k\sigma} - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{k\sigma}}{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_1} \right\}^2 \right]^{-1} \quad (1.16)$$

となる。 $\epsilon_{k\sigma}$ は $\epsilon_{n\sigma}$ に最も近い s 電子の準位である。これは $\log$ の項を除けば Anderson の $|(n|d)_\sigma|^2$ にひとしい。 $\log$ の項は d level の level shift であるから, Anderson はそれを $E_{d\sigma}$ の中へくりこんだと考えたのである。(1.16) を Hartree 近似の条件 (1.10) へ代入すると

$$\langle n_{d\sigma} \rangle = \sum_k f_{k\sigma} \frac{\Delta}{\pi\rho} \left[\Delta^2 + \left\{ \epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{d\sigma} - U \langle n_{d-\sigma} \rangle + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{k\sigma}}{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_1} \right\}^2 \right]^{-1}$$

を得る。ここで

$$f_{k\sigma} = \begin{cases} 1, & \epsilon_{k\sigma} \leq \mu \\ 0, & \epsilon_{k\sigma} > \mu \end{cases}$$

和田 靖

とする。nonmagnetic impurity で $\epsilon_{d\sigma} > \mu$ のときにこの条件を V^2 の最低次までに近似すると

$$\langle n_{d\sigma} \rangle \cong \frac{\Delta}{\pi\rho} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma} / (\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \epsilon_{d\sigma})^2 \quad (1.17)$$

となる。

§ 2. U 摂動による Green 関数

前節で s-d mixing を完全にとり入れた結果, Hamiltonian は (1.9) と (1.11) より

$$H = -U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle + H_0 + H_I,$$

$$H_0 = \sum_{n\sigma} \epsilon_{n\sigma} \alpha_{n\sigma}^* \alpha_{n\sigma},$$

$$H_I = U \sum_{\substack{n n' \\ m m'}} \xi_{dn}^{\uparrow*} \xi_{dn'}^{\uparrow} \xi_{dm}^{\downarrow*} \xi_{dm'}^{\downarrow} : \alpha_{n\uparrow}^* \alpha_{n'\uparrow} \alpha_{m\downarrow}^* \alpha_{m'\downarrow} : ,$$

となった。次に絶対零度での s 電子の causal な Green 関数

$$G_{\sigma k k'}(t, t') = -i \langle \Psi_0 | T(c_{\mathbf{k}\sigma}(t) c_{\mathbf{k}'\sigma}^*(t')) | \Psi_0 \rangle$$

を H_I についての摂動で求めよう。 Ψ_0 は体系の基底状態である。c と α の関係 (1.3) によれば

$$G_{\sigma k k'}(t, t') = \sum_{n n'} \xi_{kn}^{\sigma} \xi_{k'n'}^{\sigma*} g_{\sigma n n'}(t-t'), \quad (2.1)$$

$$g_{\sigma n n'}(t-t') = -i \langle \Psi_0 | T(\alpha_{n\sigma}(t) \alpha_{n'\sigma}^*(t')) | \Psi_0 \rangle$$

である。

摂動計算のために, これからの記号は, すべて H_0 による相互作用表示であるとする, と,

$$g_{\sigma n n'}(t-t') = -i \frac{\langle T(\alpha_{n\sigma}(t) \alpha_{n'\sigma}^*(t)) S \rangle}{\langle S \rangle},$$

$$S = T \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} H_I(t) dt \right]$$

となる。 g の Fourier 変換を

$$g_{\sigma nn'}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} g_{\sigma nn'}(t) e^{i\omega t} dt$$

と定義すると, その最低次は

$$g_{\sigma nn'}^0(\omega) = \frac{\delta_{nn'}}{\omega - \epsilon_{n\sigma} + i\eta(1 - 2f_{n\sigma})}$$

である。

H_I による一次の補正は, Hartree 近似としてとり入れてしまったので, 考えなくともよい。二次の補正は Feynman diagram で書けば Fig. 2 しかない。これは相互作用が, スピンが反対の向きを向いている粒子の間だけに働いているためである。

内線のエネルギー成分についての積分を行なった結果は

$$\begin{aligned} g_{\sigma nn'}^{(2)}(\omega) &= U^2 \xi_{dn}^{\sigma*} \xi_{dn'}^{\sigma} g_{\sigma rn}^0(\omega) g_{\sigma n'n'}^0(\omega) \\ &\times \sum_{n_1 m_1 m_2} |\xi_{dn_1}^{\sigma}|^2 |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 \\ &\times \frac{f_{n_1\sigma}(1-f_{m_1-\sigma})f_{m_2-\sigma} + (1-f_{n_1\sigma})f_{m_1-\sigma}(1-f_{m_2-\sigma})}{\omega - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma} + i\eta \epsilon(\omega - \mu)} \end{aligned} \quad (2.2)$$

となる。分母の ϵ は符号関数で

$$\epsilon(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ -1, & x < 0 \end{cases}$$

である。(2.2) の分子は二項より成るが, その各々は時間の順序を指定した diagram で, Fig. 3 の各々の過程に対応する。左側の過程では中間状態の energy が $\epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_2-\sigma} - \epsilon_{m_1-\sigma}$ であり, 右側の過程では $2\omega + \epsilon_{m_1-\sigma}$

和田 靖

$-\varepsilon_{n_1\sigma} - \varepsilon_{m_2-\sigma}$ であるから, (2.2) の分母は, 初期状態の energy と中間状態の energy の差という, 摂動論特有の形をしていることが判る。

次に三次の補正を考えると, Feynman diagram としては, Fig. 4 に示した三種類がある。この中, 三番目の diagram は ω によらない寄与しか与えない。長いけれども初等的な計算を行なった結果

$$g_{\sigma n n'}^{(3)}(\omega) = U^3 \xi_{dn}^{\sigma*} \xi_{dn'}^{\sigma},$$

$$g_{\sigma n n}^0(\omega) g_{\sigma n' n'}^0(\omega) F(\omega)$$

$$(2.3)$$

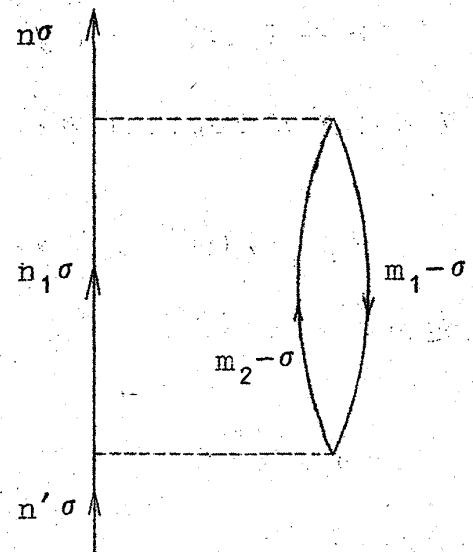


Fig. 2. Green 関数の二次補正

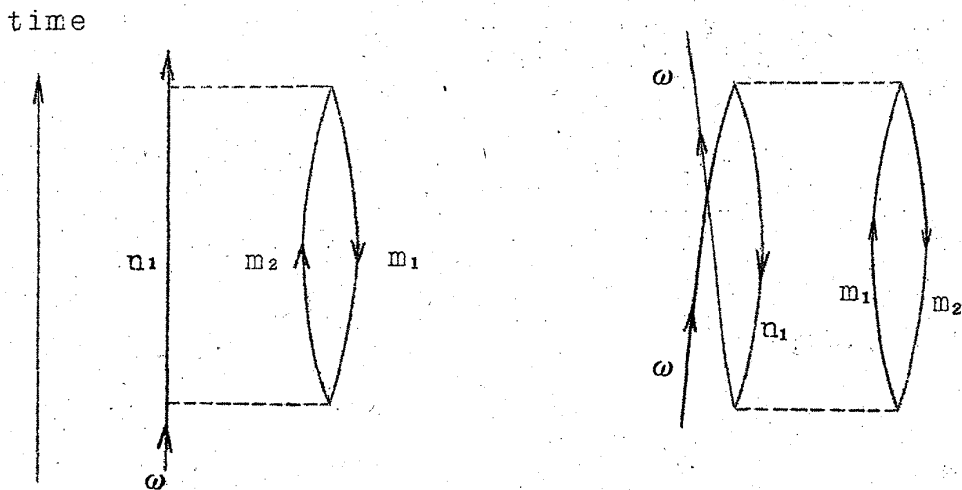


Fig. 3. (2.2) の第一項は右図に第二項は左図に対応する。

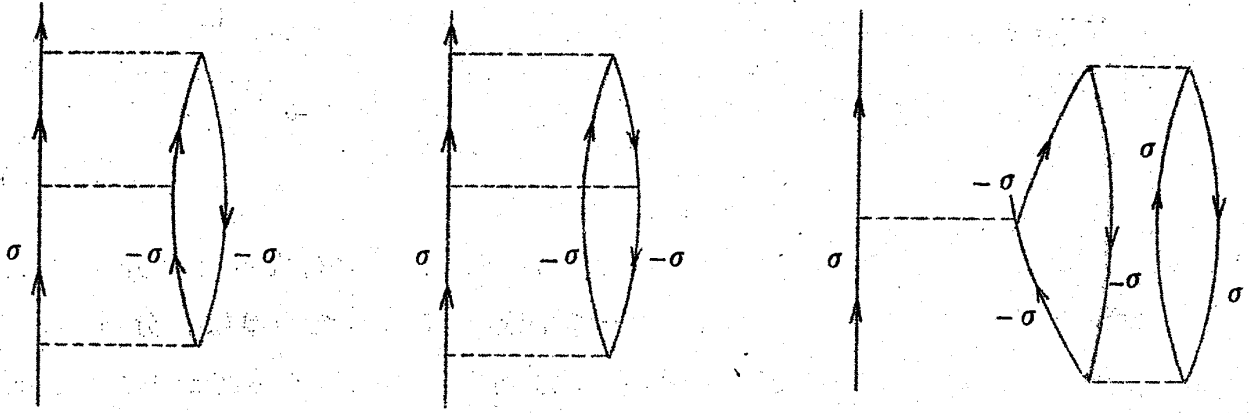


Fig. 4 Green 関数の三次補正

$$\begin{aligned}
 F(\omega) = & \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ m_1 m_2 m_3}} |\xi_{dn_1}^{\sigma}|^2 |\xi_{dn_2}^{\sigma}|^2 |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_3}^{-\sigma}|^2 \\
 & \times \left[\frac{f_{m_1-\sigma}(1-f_{m_2-\sigma})(1-f_{m_3-\sigma})(1-f_{n_1\sigma})(1-f_{n_2\sigma}) - (1-f_{m_1-\sigma})f_{m_2-\sigma}f_{m_3-\sigma}f_{n_1\sigma}f_{n_2\sigma}}{(\omega - \epsilon_{n_2\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma} + i\eta) \epsilon(\omega - \mu)} \right. \\
 & + 2 \frac{f_{m_1-\sigma}(1-f_{m_2-\sigma})(1-f_{m_3-\sigma})f_{n_1\sigma}(1-f_{n_2\sigma}) - (1-f_{m_1-\sigma})f_{m_2-\sigma}f_{m_3-\sigma}(1-f_{n_1\sigma})f_{n_2\sigma}}{(\epsilon_{n_1\sigma} - \epsilon_{n_2\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma}) (\omega - \epsilon_{n_1\sigma} - \epsilon_{m_1-\sigma} + \epsilon_{m_3-\sigma} + i\eta) \epsilon(\omega - \mu)} \\
 & - \frac{(1-f_{m_1-\sigma})f_{m_2-\sigma}f_{m_3-\sigma}(1-f_{n_1\sigma})(1-f_{n_2\sigma}) - f_{m_1-\sigma}(1-f_{m_2-\sigma})(1-f_{m_3-\sigma})f_{n_1\sigma}f_{n_2\sigma}}{(\omega - \epsilon_{n_2\sigma} - \epsilon_{m_1-\sigma} + \epsilon_{m_2-\sigma} + i\eta) \epsilon(\omega - \mu)} \\
 & + 2 \frac{(1-f_{m_1-\sigma})f_{m_2-\sigma}f_{m_3-\sigma}f_{n_1\sigma}(1-f_{n_2\sigma}) - f_{m_1-\sigma}(1-f_{m_2-\sigma})(1-f_{m_3-\sigma})(1-f_{n_1\sigma})f_{n_2\sigma}}{(\epsilon_{n_2\sigma} - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma}) (\omega + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{n_1\sigma} - \epsilon_{m_3-\sigma} + i\eta) \epsilon(\omega - \mu)} \\
 & \left. - 2 \frac{(1-f_{m_1-\sigma})f_{m_2-\sigma}f_{m_3-\sigma}(1-f_{n_1\sigma})f_{n_2\sigma} - f_{m_1-\sigma}(1-f_{m_2-\sigma})(1-f_{m_3-\sigma})f_{n_1\sigma}(1-f_{n_2\sigma})}{(\epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_3-\sigma}) (\epsilon_{n_1\sigma} - \epsilon_{n_2\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma})} \right]
 \end{aligned}$$

$$\left. \frac{(1-f_{m_1-\sigma})f_{m_2-\sigma}f_{m_3-\sigma}f_{n_1\sigma}(1-f_{n_2\sigma}) - f_{m_1-\sigma}(1-f_{m_2-\sigma})(1-f_{m_3-\sigma})(1-f_{n_1\sigma})f_{n_2\sigma}}{(-\epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{n_2\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma})(-\epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{n_2\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_3-\sigma})} \right\} \quad (2.4)$$

を得る。面倒な式であるが、各項に対して、Fig. 3 で行なった分析をすれば、その物理的意味を知ることが出来る。一つ注意しておきたい事は、分母のどの factor も、Fermi 面の外の ϵ については同符号で和になっており、Fermi 面の内の ϵ については、逆の符号で、それらどうしの間では揃った符号で加え合わされていることである。これは摂動論の構造から当然のことであるから、三次補正にかぎらず、あらゆる補正項が、この性質をもっている。

(2.2), (2.3) を $G_{\sigma kk'}$ の式 (2.1) に代入する。

$$\begin{aligned} G_{\sigma kk'}^0(\omega) &= \sum_n \xi_{kn}^\sigma \xi_{k'n}^{\sigma*} g_{\sigma nn}^0(\omega), \\ G_{\sigma kd}^0(\omega) &= \sum_n \xi_{kn}^\sigma \xi_{dn}^{\sigma*} g_{\sigma nn}^0(\omega) = \sum_n \xi_{dn}^\sigma \xi_{kn}^{\sigma*} g_{\sigma nn}^0(\omega), \end{aligned} \quad (2.5)$$

とおくと

$$\begin{aligned} G_{\sigma kk'}(\omega) &= G_{\sigma kk'}^0(\omega) \\ &+ U^2 G_{\sigma kd}^0(\omega) G_{\sigma k'd}^0(\omega) \sum_{n_1 m_1 m_2} |\xi_{dn_1}^\sigma|^2 |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 \\ &\times \frac{f_{n_1\sigma}(1-f_{m_1-\sigma})f_{m_2-\sigma} + (1-f_{n_1\sigma})f_{m_1-\sigma}(1-f_{m_2-\sigma})}{\omega - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma} + i\eta \epsilon(\omega - \mu)} \\ &+ U^3 G_{\sigma kd}^0(\omega) G_{\sigma k'd}^0(\omega) F(\omega), \end{aligned} \quad (2.6)$$

となる。

§ 3. retarded Green's function

前節までは Causal な Green 関数を扱って来たが、近藤さんの結果は Zubarev の retarded 又は advanced Green's function⁴⁾

$$G_{\sigma k k'}^{r,a}(t) = -i \frac{1}{2} (\epsilon(t) \pm 1) \langle \Psi_0 | [c_{k\sigma}(t), c_{k'\sigma}^*(0)]_{\pm} | \Psi_0 \rangle$$

で与えられている。ここで $[\dots]_{\pm}$ は anticommutator である。三種の Green 関数をスペクトル表示して、くればば、

$$G_{\sigma k k'}^{r,a}(\omega) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon(\omega')}{\omega - \omega' - \mu} \{G_{\sigma k k'}(\omega' + \mu) - G_{\sigma k' k}^*(\omega' + \mu)\} d\omega', \quad (3.1)$$

の関係があることが判る。但し G^r のときは、 ω を実軸の上側から、 G^a のときは下側から近づける。この式を用いて前節の結果 (2.6) を、Zubarev の Green 関数のそれに変えよう。 $\text{Im } \omega > 0$ として G^r の方だけを考えることにする。

(2.6) の零次の項は $\xi_{kn}^{\sigma} \xi_{k'n}^{\sigma*}$ が real であることから容易に

$$G_{\sigma k k'}^{r0}(\omega) = \sum_n \frac{\xi_{kn}^{\sigma} \xi_{k'n}^{\sigma*}}{\omega - \epsilon_{n\sigma}} \quad (3.2)$$

が導かれる。

二次の項については、(2.6) の $G_{\sigma kd}^0(\omega)$ に (2.5) の表式を代入すると、それは

$$\frac{1}{\omega - \epsilon_{n\sigma} + i\eta \epsilon(\omega - \mu)} \cdot \frac{1}{\omega - \epsilon_{n'\sigma} + i\eta \epsilon(\omega - \mu)} \cdot \frac{1}{\omega - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma} + i\eta \epsilon(\omega - \mu)}$$

という項の和から成る。この三項の積を部分分数に分けると、その各項の係数は real である。従って (3.1) の integrand の G の imaginary part は

$$\begin{aligned} & -2\pi i \delta(\omega' + \mu - \epsilon_{n\sigma}) \epsilon(\omega'), \quad -2\pi i \delta(\omega' + \mu - \epsilon_{n'\sigma}) \epsilon(\omega'), \\ & -2\pi i \delta(\omega' + \mu - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma}) \epsilon(\omega') \end{aligned}$$

という factor を与え、 ω' 積分は容易に出来る。その結果 $G_{\sigma k k'}^r(\omega)$ の二次補正は、(2.6) にある $G_{\sigma k k'}$ のそれで、形式的に $\eta = 0$ として、その代

和田 靖

りに $\mathcal{I}_m \omega > 0$ であるような ω を入れたものとなることが判る。

二次の項に対する上の議論は十分に一般的であって，三次補正に入って来る factor $F(\omega)$ の構造を (2.4) で見てみれば，三次の項に対しても同じ結論が成立つことが判る。従って

$$G_{\sigma kd}^{r0}(\omega) = \sum_n \frac{\xi_{kn}^{\sigma} \xi_{dn}^{\sigma*}}{\omega - \epsilon_{n\sigma}} \quad (3.3)$$

$$F^r(\omega) = F(\omega) \text{ で形式的に } \eta = 0 \text{ とおいたもの} \quad (3.4)$$

と定義すれば

$$\begin{aligned} G_{\sigma kk'}^r(\omega) &= G_{\sigma kk'}^{r0}(\omega) + U^2 G_{\sigma kd}^{r0}(\omega) G_{\sigma k'd}^{r0}(\omega) \\ &\quad \times \sum_{n_1 m_1 m_2} |\xi_{dn_1}^{\sigma}|^2 |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 \\ &\quad \times \frac{f_{n_1\sigma}(1-f_{m_1-\sigma}) f_{m_2-\sigma} + (1-f_{n_1\sigma}) f_{m_1-\sigma}(1-f_{m_2-\sigma})}{\omega - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma}} \\ &\quad + U^3 G_{\sigma kd}^{r0}(\omega) G_{\sigma k'd}^{r0}(\omega) F^r(\omega), \quad \mathcal{I}_m \omega > 0, \end{aligned} \quad (3.5)$$

で与えられる。

§ 4. t 行列

散乱の t 行列の定義は

$$t_{\sigma kk'}(\omega) = (\omega - \epsilon_{k\sigma})(\omega - \epsilon_{k'\sigma}) [G_{\sigma kk'}^r(\omega) - G_{\sigma kk'}^{r0}(\omega)] \quad (4.1)$$

である。これを求めるために (3.5) の各項を計算しよう。第一項で $k = k'$ のときを考えると，(3.2) から

$$G_{\sigma kk}^{r0}(\omega) = \sum_n \frac{1}{\omega - \epsilon_{n\sigma}} \cdot \frac{V^4}{(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})^2} \cdot \frac{1}{\Delta^2 + \left\{ \epsilon_{n\sigma} - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}}{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_1} \right\}^2}$$

Anderson Model での non-magnetic impurity である。ここで (1.8) と (1.16) を用いた。問題となるのは $1/(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})^2$ の項で imaginary part を含まないので、正しく和をとる必要がある。これ以外の factor を $f(\epsilon_{n\sigma})$ と書いて、次のように計算する。

$$\sum_n \frac{f(\epsilon_{n\sigma})}{(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})^2} = \sum_n \frac{f(\epsilon_{k\sigma})}{(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})^2} + \sum_n \frac{g(\epsilon_{n\sigma}, \epsilon_{k\sigma})}{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}} \quad (4.2)$$

但し

$$g(\epsilon_{n\sigma}, \epsilon_{k\sigma}) = \{f(\epsilon_{n\sigma}) - f(\epsilon_{k\sigma})\} / (\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})$$

である。(4.2) の第一項は、(1.15) で与えられた $\epsilon_{n_0\sigma}$ を

$$\epsilon_{n_0\sigma} = \epsilon_{k_0\sigma} + \Delta\epsilon(\epsilon_{k_0\sigma})$$

と書くと、 $\Delta\epsilon$ 自体が $\epsilon_{n_0\sigma}$ によるものであるが、これを $\epsilon_{k\sigma}$ での値におきかえる。これは $1/N$ を無視する範囲でよい近似である。すると

$$\begin{aligned} \sum_n \frac{f(\epsilon_{k\sigma})}{(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})^2} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{f(\epsilon_{k\sigma})}{\left(\frac{n}{\rho} + \Delta\epsilon(\epsilon_{k\sigma})\right)^2} = \frac{\rho^2 \pi^2 f(\epsilon_{k\sigma})}{\sin^2 \pi \rho \Delta\epsilon(\epsilon_{k\sigma})} \\ &= \rho^2 \pi^2 f(\epsilon_{k\sigma}) \left[1 + \left\{ \frac{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_1}{\Delta} + \frac{1}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{k\sigma}}{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_1} \right\}^2 \right] \\ &= \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\sigma}}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

となる。(4.2) の第二項で、関数 g は (4.2) の定義からも判るように、 $\epsilon_{n\sigma} = \epsilon_{k\sigma}$ で singular ではない。すると n の和の領域を二つに分ける。

$|\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}| \leq \delta \cdot N / \rho$ の領域で、ここで δ は無限小のパラメーターである。 $\delta \cdot N / \rho$ より小さいところでは g の変化は無視出来て $g(\epsilon_{k\sigma}, \epsilon_{k\sigma})$ でおきかえる。 $\delta \cdot N / \rho$ より大きいところでは $\Delta\epsilon$ を無視出来る。

$$\sum_n \frac{g(\epsilon_{n\sigma}, \epsilon_{k\sigma})}{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}} = \sum_{|\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}| < \delta \cdot N / \rho} \frac{g(\epsilon_{k\sigma}, \epsilon_{k\sigma})}{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}}$$

$$+ \sum_{|\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}| > \delta \cdot N / \rho} \frac{g(\epsilon_{n\sigma}, \epsilon_{k\sigma})}{(\epsilon_{n\sigma} - \Delta\epsilon) - \epsilon_{k\sigma}}$$

第一項は N の order の項の和であるが、 $\epsilon_{k\sigma}$ から遠くの方の項の寄与は打消し合って利がないので、和に対する制限を外せる。第二項は、 $\delta \rightarrow 0$ を考えると主値積分で、結局

$$\begin{aligned} \sum_n \frac{g(\epsilon_{n\sigma}, \epsilon_{k\sigma})}{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{g(\epsilon_{k\sigma}, \epsilon_{k\sigma})}{\frac{n}{\rho} + \Delta\epsilon(\epsilon_{k\sigma})} + \rho P \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{g(\epsilon, \epsilon_{k\sigma})}{\epsilon - \epsilon_{k\sigma}} \\ &= \rho \pi g(\epsilon_{k\sigma}, \epsilon_{k\sigma}) \cot \pi \rho \Delta\epsilon(\epsilon_{k\sigma}) + \rho P \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{g(\epsilon, \epsilon_{k\sigma})}{\epsilon - \epsilon_{k\sigma}} \end{aligned}$$

となるが、⁵⁾これを第一項の結果(4.3)とくらべると ρ の巾が一次低い。したがって、この項は $1/N$ の大きさであって無視することが出来る。我々は結局

$$G_{\sigma k k}^{r0}(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\sigma}} \quad (4.4)$$

という簡単な結論を得た。

次に $k \neq k'$ の場合を考えよう。(1.8) と (1.16), (3.2) より

$$\begin{aligned} G_{\sigma k k'}^{r0}(\omega) &= \sum_n \frac{1}{\omega - \epsilon_{n\sigma}} \cdot \frac{V^4}{\left[\Delta^2 + \left\{ \epsilon_{n\sigma} - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{n\sigma}}{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_1} \right\}^2 \right]} \cdot \frac{1}{(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma})(\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k'\sigma})} \\ &= [G_k - G_{k'}] \frac{V^2}{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{k'\sigma}}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

とおく。ここで

$$G_k = \sum_n \frac{1}{\omega - \epsilon_{n\sigma}} \cdot \frac{V^2}{\left[\Delta^2 + \left\{ \epsilon_{n\sigma} - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{n\sigma}}{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_1} \right\}^2 \right]} \cdot \frac{1}{\epsilon_{n\sigma} - \epsilon_{k\sigma}}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\sigma}} \cdot \frac{V^2}{\left[\Delta^2 + \left\{ \epsilon_{k\sigma} - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{k\sigma}}{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_1} \right\}^2 \right]} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\rho}{n + \rho \Delta \epsilon(\epsilon_{k\sigma})} \\
&+ \rho P \int \frac{d\epsilon}{\omega - \epsilon} \cdot \frac{V^2}{\left[\Delta^2 + \left(\epsilon - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon}{\epsilon - \epsilon_1} \right)^2 \right]} \cdot \frac{1}{\epsilon - \epsilon_{k\sigma}} \\
&= \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\sigma}} \cdot \frac{\Delta \cot \pi \rho \Delta \epsilon(\epsilon_{k\sigma})}{\left[\Delta^2 + \left\{ \epsilon_{k\sigma} - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{k\sigma}}{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_1} \right\}^2 \right]} + \text{第二項}, \quad (4.6)
\end{aligned}$$

とおいた。第二項の主値積分を行なうには、integrand の解析性を知らなくてはならない。もともとの n -sum は Fig. 1 の固有値についての和で、その最小・最大の固有値は、とび離れているが、それからの寄与は $1/N$ の order なので無視することになると、積分は ϵ_1 から ϵ_2 までとなる。しかし integrand は $|\epsilon|$ の大きいところで ϵ^{-4} となるから、この積分領域は $-\infty$ から $+\infty$ まで広げてよい。ところが integrand は $(-\infty, \epsilon_1)$ と $(\epsilon_2, +\infty)$ に cut をもつ外に、Fig. 1 の最小・最大固有値のところで、それぞれ pole をもつ。このことについては、(1, 15) の下で、我々の $\epsilon_{n\sigma}$ の式は、 ϵ_1, ϵ_2 の近くで使えないことを注意した。従って、これらの pole や cut は、spurious なものであらうと考えられる。Green 関数を求めるときには、実軸上にこのような singularity は存在しないかのようにして計算した方が正しい筈である。それでは実軸外の singularity はどうなっているであろうか。

現在問題としている factor を更に factorize して

$$\begin{aligned}
\Delta^2 + \left(z - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - z}{z - \epsilon_1} \right)^2 &= Q_1(z) Q_2(z) \\
Q_1(z) &= z - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - z}{z - \epsilon_1} \pm i \Delta \quad (4.7)
\end{aligned}$$

とおく。はじめに $Q_1(z)$ の zero を探す。Fig. 5 のように変数を導入すると

$$\log \frac{\epsilon_2 - z}{z - \epsilon_1} = \log \frac{r_2}{r_1} - i(\varphi_1 + \varphi_2),$$

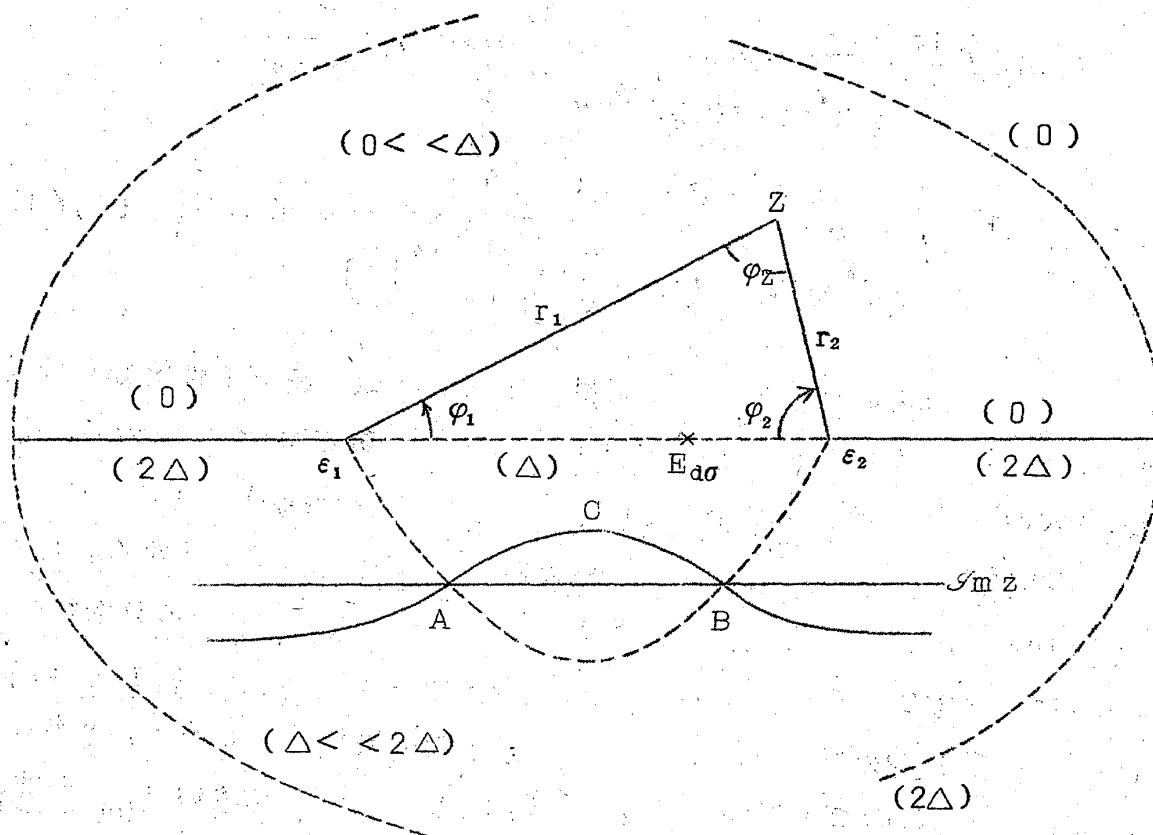


Fig. 5 $\Im Q_1(z) = 0$ の軌跡 ACB

となるから

$$\Im \left\{ \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - z}{z - \epsilon_1} + i\Delta \right\} = \text{const} \quad (4.8)$$

の軌跡は $\varphi_z = \text{const}$ の軌跡と同じで, const の値は上半面では 0 と Δ の間にあり, 下半面では Δ と 2Δ の間にある。 const の値を Fig. 5 の中に (.....) をつけて記した。それから

$$\Im Q_1(z) = 0$$

Anderson Model での non-magnetic impurity の根は下半面のみにあることが判る。それには (4.8) の軌跡と, $\mathcal{I}_{mz} = -\text{const}$ の実軸に平行な直線の交点 A, B である。交点が存在するためには当然

$$-2\Delta < \mathcal{I}_{mz} < -\Delta$$

でなければならないが, もう少し詳しく調べると上限は $-\Delta$ の代りに $-\Delta \left(1 + \frac{4\Delta}{\pi(\epsilon_2 - \epsilon_1)}\right)$ であることが判る。

$$\frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} - i\Delta \left(1 + \frac{4\Delta}{\pi(\epsilon_2 - \epsilon_1)}\right)$$

の点を C とすると, $\mathcal{I}_{mz} Q_1(z) = 0$ の軌跡は曲線 ACB で与えられる。

$\text{Re } Q_1(z) = 0$ の軌跡はどうなるか?

$$z = x + iy$$

とおくと, それは (4.7) より

$$x - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{r_2}{r_1} = 0$$

である。まず,

$$\frac{r_1}{r_2} = C ; \quad \text{constant}$$

の軌跡を考えると, 簡単のために

$$\epsilon_1 = -\epsilon_2$$

とおいて

$$\left(x + \frac{1+c^2}{1-c^2} \epsilon_2\right)^2 + y^2 = \epsilon_2^2 \frac{4c^2}{(1-c^2)^2} \quad (4.9)$$

となる。実軸上 $(1+c^2)\epsilon_2/(c^2-1)$ に中心があり, 半径 $2\epsilon_2 c/|1-c^2|$ の円である。この円と

$$\log \left\{ \frac{\pi}{\Delta} (x - E_{d\sigma}) \right\} = c \quad (4.10)$$

の y 軸に平行な直線の交点が $\operatorname{Re} Q_1 = 0$ を与える。その交点の軌跡は Fig. 6 に与えられる。ここで $\epsilon_{\min}$, $\epsilon_{\max}$ は固有値方程式 (1.6) の最小及び最大の根であり, x_0 は (1.6) を主値積分したときの根である。Fig. 6 の軌跡に Fig. 5 の曲線 ACB を重ねたときの交点が, $Q_1(z)$ の zero であり, Fig. 6 の z_0^* がそれである。 ϵ_1 の周りの閉曲線との間には交点がないことは次のように証明する。

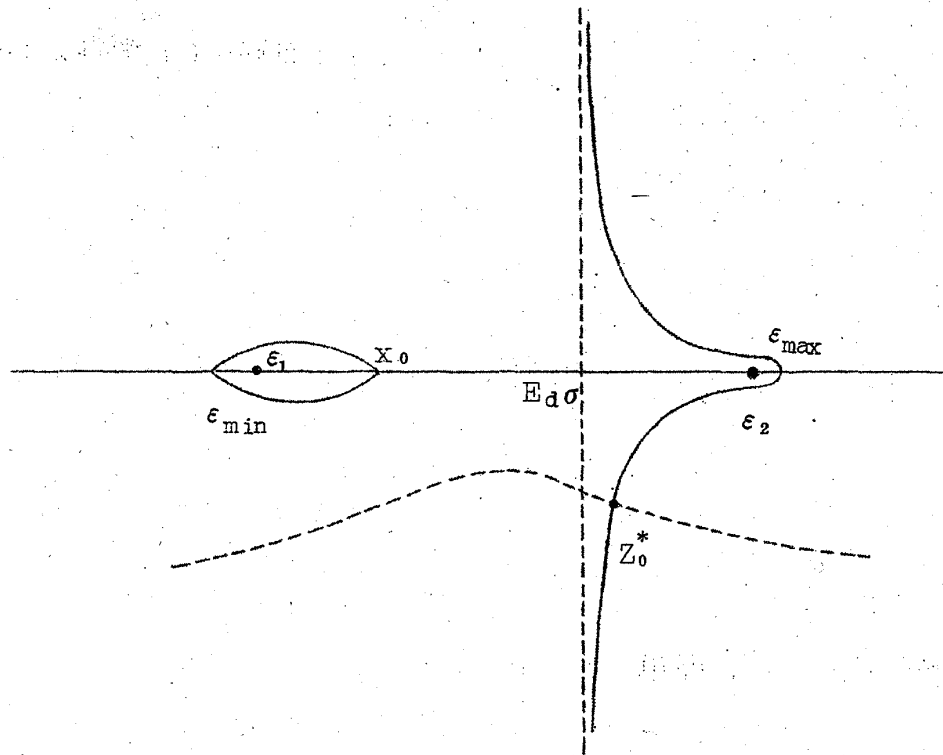


Fig. 6. 実線は $\operatorname{Re} Q_1(z) = 0$ の軌跡, z_0^* は Q_1 の zero.

この閉曲線と実軸との距離は, (4.9) の円の半径に (4.10) の式を代入した値

$$2\epsilon_2 \exp \left\{ \frac{\pi}{\Delta} (x - E_{d\sigma}) \right\} / \left[1 - \exp \left\{ \frac{2\pi}{\Delta} (x - E_{d\sigma}) \right\} \right] \quad (4.11)$$

Anderson Model での non-magnetic impurity より大きくはない。 $\epsilon_1 = -\epsilon_2$ のスケールでは

$$x \leq x_0 < 0,$$

であるから, (4.11) の分母は 1 の order である。分子は

$$2\epsilon_2 \exp \left\{ -\frac{\pi E_{d\sigma}}{\Delta} \right\} \quad (4.12)$$

より小さく, 現在

$$E_{d\sigma} \sim \epsilon_2 \gg \Delta$$

の場合と考えているから, (4.12) は Δ より小さく, 従って ϵ_f の周りの閉曲線は $\Im Q_1 = 0$ とは交点をもたない。

このようにして $Q_1(z)$ という関数は下半面の $z = z_0^*$ にのみ zero をもつことが判った。同じ議論を $Q_2(z)$ に行なえば, それは上半面の $z = z_0$ にのみ zero をもつことが判る。

いよいよ G_k の主値積分の項にとりかかる。 $\epsilon = \omega, \epsilon_{k\sigma}, z_0, z_0^*$ の singularity だけに注意すると

$$\begin{aligned} & \rho P \int \frac{d\epsilon}{\omega - \epsilon} \cdot \frac{V^2}{\left[\Delta^2 + \left(\epsilon - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon}{\epsilon - \epsilon_1} \right)^2 \right]} \cdot \frac{1}{\epsilon - \epsilon_{k\sigma}} \\ &= -\frac{1}{\omega - \epsilon_{k\sigma}} \cdot \frac{\epsilon_{k\sigma} - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{k\sigma}}{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_1}}{\Delta^2 + \left(\epsilon_{k\sigma} - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{k\sigma}}{\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_1} \right)^2} \\ &+ \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\sigma}} \cdot \frac{1}{\omega - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i\Delta} \end{aligned}$$

を得る。 G_k の式 (4.6) に代入すると, 第一項は cancel して

$$G_k = \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\sigma}} \cdot \frac{1}{\omega - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i\Delta}, \quad (4.13)$$

これを更に (4.5) に代入すれば

$$G_{\sigma k k'}^{r0}(\omega) = \frac{1}{(\omega - \epsilon_{k\sigma})(\omega - \epsilon_{k'\sigma})} \cdot \frac{V^2}{\omega - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i\Delta} \quad (4.14)$$

を得る。advanced Greens function のときは、形式的には最後の factor の分母が $i\Delta \rightarrow -i\Delta$ に変わるだけであることを注意しておこう。

次に (3.5) の第二項 $G_{\sigma k k'}^{r(2)}(\omega)$ を考える。 $G_{\sigma k d}^{r0}(\omega)$ は、その定義 (3.3) によれば $V \cdot G_k$ にひとしい。(4.13) より

$$G_{\sigma k d}^{r0}(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\sigma}} \cdot \frac{V}{\omega - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i\Delta}$$

である。 $G_{\sigma k d}^{r0}$ 以外の因子については

$$\sum_{n_1 m_1 m_2} |\xi_{dn_1}^\sigma|^2 |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 \frac{f_{m_1-\sigma} f_{m_1-\sigma} f_{m_2-\sigma} - f_{n_1\sigma} f_{m_1-\sigma} + f_{n_1\sigma} f_{m_2-\sigma}}{\omega - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma}} \quad (4.15)$$

と書けるが、この第一項は

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1 m_1} |\xi_{dn_1}^\sigma|^2 |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} \rho \int d\epsilon \frac{1}{\omega - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon} \cdot \frac{V^2}{\Delta^2 + \left\{ \epsilon - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \epsilon}{\epsilon - \epsilon_1} \right\}} \\ &= \sum_{n_1 m_1} |\xi_{dn_1}^\sigma|^2 |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} \frac{r_{-\sigma}^*}{\omega - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0-\sigma}^*} \quad (4.16) \end{aligned}$$

ここで、Fig. 6 の z_0^* を $z_{0\sigma}^*$ とし、 $E_{d\sigma}$ の代りに $E_{d-\sigma}$ とおいたときの z_0^* を $z_{0-\sigma}^*$ とした。 $r_{-\sigma}^*$ は

$$[r_{\sigma}^*]^{-1} = 1 + \frac{\Delta}{\pi} \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{(\epsilon_2 - z_{0\sigma}^*)(z_{0\sigma}^* - \epsilon_1)}$$

である。(4.16) は n_1 についての和は同じようにとれて

$$\sum_{m_1} |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} \frac{r_{\sigma}^* r_{-\sigma}^*}{\omega + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^*}$$

となる。(4.15) の f が二つかかった項についても、残りの一つについての和は同じようにとれる。このようにして $G_{\sigma k k'}^{r(2)}(\omega)$ は次のようになる。

$$\begin{aligned} G_{\sigma k k'}^{r(2)}(\omega) &= \frac{U^2 V^2}{(\omega - \epsilon_{k\sigma})(\omega - \epsilon_{k'\sigma})} \cdot \frac{1}{\left\{ \omega - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i\Delta \right\}^2} \\ &\times \left[\sum_{m_1} |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} \frac{r_{\sigma}^* r_{-\sigma}^*}{\omega + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^*} \right. \\ &- \sum_{m_1 m_2} |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} f_{m_2-\sigma} \frac{r_{\sigma}^*}{\omega + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma} - z_{0\sigma}^*} \\ &- \sum_{n_1 m_1} |\xi_{dn_1}^{\sigma}|^2 |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 f_{n_1\sigma} f_{m_1-\sigma} \frac{r_{-\sigma}^*}{\omega - \epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0-\sigma}^*} \\ &\left. + \sum_{n_1 m_2} |\xi_{dn_1}^{\sigma}|^2 |\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 f_{n_1\sigma} f_{m_2-\sigma} \frac{r_{-\sigma}}{\omega - \epsilon_{n_1\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma} + z_{0-\sigma}^*} \right], \end{aligned} \quad (4.17)$$

三次の補正項についても、計算の原理は、簡単である。(3.5) より

$$G_{\sigma k k'}^{r(3)}(\omega) = \frac{U^3 V^2}{(\omega - \epsilon_{k\sigma})(\omega - \epsilon_{k'\sigma})} \cdot \frac{F^r(\omega)}{\left\{ \omega - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i\Delta \right\}^2}, \quad (4.18)$$

で、 $F^T(\omega)$ は (3.4) の定義により (2.4) より求まる。 $G^{T(2)}$ を求めたときの経験から、 $F^T(\omega)$ で f 因子のかかっていない $\varepsilon_{l\sigma}$ についての和は、次のおきかえをすればとれることが判る。

分母で $\varepsilon_{l\sigma}$ が ω と同符号で入っているときは $\varepsilon_{l\sigma} \rightarrow z_{0\sigma}$, $|\xi_{dl}^\sigma|^2 \rightarrow r_\sigma$ とおきかえる。

ω と逆符号で入っているときは $\varepsilon_{l\sigma} \rightarrow z_{0\sigma}^*$, $|\xi_{dl}^\sigma|^2 \rightarrow r_\sigma^*$ とおきかえる。

例として f 因子が二つまでかかった項だけを書いてみると

$F^T(\omega)^*$ の一部

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{m_1} \frac{|\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} (r_\sigma^* r_{-\sigma}^*)^2}{(\omega - z_{0\sigma}^* + \varepsilon_{m_1-\sigma} - z_{0-\sigma}^*)^2} \\
 &- 2 \sum_{m_1 m_2} \frac{|\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} f_{m_2-\sigma} (r_\sigma^*)^2 r_{-\sigma}^*}{(\omega - z_{0\sigma}^* + \varepsilon_{m_1-\sigma} - \varepsilon_{m_2-\sigma}) (\omega - z_{0\sigma}^* + \varepsilon_{m_1-\sigma} - z_{0-\sigma}^*)} \\
 &- 2 \sum_{m_1 n_1} \frac{|\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dn_1}^\sigma|^2 f_{m_1-\sigma} f_{n_1\sigma} r_\sigma^* (r_{-\sigma}^*)^2}{(\omega - z_{0\sigma}^* + \varepsilon_{m_1-\sigma} - z_{0-\sigma}^*) (\omega - \varepsilon_{n_1\sigma} + \varepsilon_{m_1-\sigma} - z_{0-\sigma}^*)} \\
 &+ 2 \sum_{m_1 n_1} \frac{|\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dn_1}^\sigma|^2 f_{m_1-\sigma} f_{n_1\sigma} r_\sigma^* r_{-\sigma}^* r_{-\sigma}}{(\varepsilon_{n_1\sigma} + \varepsilon_{m_1-\sigma} - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^*) (\omega - \varepsilon_{n_1\sigma} - \varepsilon_{m_1-\sigma} + z_{0-\sigma})} \\
 &- 2 \sum_{m_2 m_3} \frac{|\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_3}^{-\sigma}|^2 f_{m_2-\sigma} f_{m_3-\sigma} (r_\sigma^*)^2 r_{-\sigma}^*}{(\omega - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^* + \varepsilon_{m_2-\sigma}) (\omega - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^* + \varepsilon_{m_3-\sigma})}
 \end{aligned}$$

Anderson Model での non-magnetic impurity

$$\begin{aligned}
 & - 2 \sum_{m_1 n_2} \frac{|\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dn_2}^{\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} f_{n_2\sigma} r_{\sigma}^* (r_{-\sigma}^*)^2}{(\epsilon_{n_2} + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^*)(\omega + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^*)} \\
 & + 2 \sum_{m_1 n_1} \frac{|\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dn_1}^{\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} f_{n_1\sigma} (r_{-\sigma}^*)^2 r_{\sigma}^*}{(\epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0-\sigma}^*)(\epsilon_{n_1\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^*)} \\
 & + 2 \sum_{m_1 n_2} \frac{|\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dn_2}^{\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} f_{n_2\sigma} (r_{-\sigma}^*)^2 r_{\sigma}^*}{(\epsilon_{n_2\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^*)(-z_{0\sigma}^* + \epsilon_{n_2\sigma} + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0-\sigma}^*)}
 \end{aligned} \quad (4.19)$$

となる。

(4.4), (4.14), (4.17), (4.18) を t 行列の定義式 (4.1) に代入すると

$$\begin{aligned}
 t_{\sigma kk'}(\omega) &= \frac{V^2}{\omega - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i\Delta} \\
 &+ \frac{U^2 V^2}{\{\omega - E_{d\sigma} + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i\Delta\}^2} \\
 &\times \left[\sum_{m_1} \frac{|\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} r_{\sigma}^* r_{-\sigma}^*}{\omega + \epsilon_{m_1-\sigma} - z_{0\sigma}^* - z_{0-\sigma}^*} \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{m_1 m_2} \frac{|\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 |\xi_{dm_2}^{-\sigma}|^2 f_{m_1-\sigma} f_{m_2-\sigma} r_{\sigma}^*}{\omega + \epsilon_{m_1-\sigma} - \epsilon_{m_2-\sigma} - z_{0\sigma}^*} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{n_1 m_1} |\xi_{dn_1}^\sigma|^2 |\xi_{dm_1}^{-\sigma}|^2 f_{n_1 \sigma} f_{m_1 - \sigma} \\
 & \times \left\{ \frac{r_{-\sigma}^*}{\omega - \epsilon_{n_1 \sigma} + \epsilon_{m_1 - \sigma} - z_0^*} - \frac{r_{-\sigma}}{\omega - \epsilon_{n_1 \sigma} - \epsilon_{m_1 - \sigma} + z_0 - \sigma} \right\} \\
 & + \frac{U^3 V^2 F^r(\omega)}{\left\{ \omega - E_d \sigma + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i \Delta \right\}^2} \quad (4.20)
 \end{aligned}$$

を得る。

§ 5. Kondo の結果との比較

まず V について低次の項、つまり V^4 までを較べよう。(4.20) から V^4 までを取り出すと

t の V^4 までの項

$$\begin{aligned}
 & = \frac{V^2}{\omega - \epsilon_{d\sigma}} \left\{ 1 - \frac{1}{\omega - \epsilon_{d\sigma}} (-U \langle n_{d-\sigma} \rangle + \frac{\Delta}{\pi} \log \frac{\epsilon_2 - \omega}{\omega - \epsilon_1} + i \Delta) \right\} \\
 & + \frac{U^2 V^2}{(\omega - \epsilon_{d\sigma})^2} \sum_{m_1} \frac{V^2 f_{m_1 - \sigma}}{(\epsilon_{m_1 - \sigma} - \epsilon_{d-\sigma})^2} \cdot \frac{1}{\omega + \epsilon_{m_1 - \sigma} - \epsilon_{d\sigma} - \epsilon_{d-\sigma}} \\
 & + \frac{U^3 V^2}{(\omega - \epsilon_{d\sigma})^2} \sum_{m_1} \frac{V^2 f_{m_1 - \sigma}}{(\epsilon_{m_1 - \sigma} - \epsilon_{d-\sigma})^2} \cdot \frac{1}{(\omega + \epsilon_{m_1 - \sigma} - \epsilon_{d\sigma} - \epsilon_{d-\sigma})^2},
 \end{aligned}$$

であって、 $\langle n_{d-\sigma} \rangle$ は (1.17) 式で与えられる。近藤さんの $\langle n_{-\sigma} \rangle$ も上の近似までの範囲では同じ式であることを考えると、上の式は $2\pi \langle\langle b_\sigma | b_0^* \rangle\rangle$ を V^4 までとって、それを U^3 まで展開したのと完全に一致している。

それでは問題の V^6 の項はどうなっているか。 V^6 の項は (4.20) の第一項・第二項からも出て来るが、それらには $\omega = \mu$ での singularity はない。第三項からの V^6 の項は $F^I(\omega)$ として (4.19) をとったものである。これにも singularity はない。singularity が出るためには

$$\sum_k \frac{f_{k\sigma}}{\omega - \epsilon_{k\sigma}}$$

という形の factor が必要であるが、そのためには energy 分母から $\epsilon_{d\sigma}$ がなくなった項がなければならない。

$$\epsilon_{d\sigma} \approx \text{Re } z_{0\sigma}$$

であるから、そのような項は (4.19) の中にはないことが判る。更に

$$\text{Im } z_{0\sigma} \approx \Delta$$

による虚数部が各 factor に入っていて、cancel しない。これは s-d mixing による d level のひろがりの影響で、たとえ V^6 の項に singularity があっても、より高次の項がそれをマスクしてしまうことを示している。

§ 6. Discussions

これまでの分析によって、 $V^6 U^3$ までの項には singularity は無さそうだという結論になった。それでは、より高次の項についてはどうだろうか。U についての任意の巾の、ごく一般的な項を考えたとき、それが energy 分母に $\epsilon_{d\sigma}$ も imaginary part も含まないような factor をもち得るかどうかを考えてみよう。ごく一般的な項は、(2.4) から得られる $F^I(\omega)$ に似た形をし、より複雑な構造をもつ項であろう。ただ一つ云えることは energy 分母は必ず

初期状態の energy — 中間状態の energy

という物理的意味をもっているので、(2.4) の下にも注意したように、Fermi 面外の ϵ と Fermi 面内の ϵ は、必ず異なる符号をつけて和になっている

和田 靖

ることである。Fermi 面外の ϵ についての和には $1-f$ という因子がつくが、この中1の項については積分が出来て、energy 分母中の ϵ は z_0 か z_0^* におきかわる。Fermi 面内の ϵ については、このおきかえがなされないために、この z_0 又は z_0^* は決して打消されない。残りの f の factor のついた積分は Fermi 面よりかなり高い所に d level があれば、 $\epsilon_{d\sigma}$ には insensitive であるから、それによって energy 分母の z_0 dependence を打消すことは出来ない。

このように摂動展開の各項の、ごく一般的な構造からして、U 展開では $\omega = \mu$ に t 行列の singularity を見出すことは出来ないと結論出来そうである。⁶⁾

色々と議論して下さった近藤さんと、教育大の高野先生にお礼申し上げます。

文 献

- 1) J. Kondo, 日本物理学会分科会 1970 東北学院大学,
private communications.
- 2) P.W. Anderson, Phys. Rev. 124 41 (1961)
- 3) G.C. Wick, Phys. Rev. 80 268 (1950)
- 4) D.N. Zubarev, Sov. Phys. Uspekhi 3 320 (1960)
- 5) J.J. Quinn and R.A. Ferrell, Phys. Rev. 112 812 (1958)
N. Fukuda and Y. Wada, Prog. Theor. Phys. Supplement 15
61 (1960)
- 6) 同じようなコメントが Muller-Hartmann から近藤さんへよせられた
由である。但し U 摂動で particle-particle と particle-hole
の ladder diagram についてのみの結論で、我々のものはより一般的
である。