

•Ground State Energy of Conduction Electrons
Interacting With a Localized Spin* について

近 藤 淳 (電試*)

(8月16日受理)

我々は「s-d相互作用による基底状態のエネルギーその2」(物性研究 1966年8月号)においてs-d相互作用による基底状態のエネルギーは $J < 0$ のときRayleigh-Schrödinger の摂動論のエネルギーより binding energy だけ低いことを示した。芳田氏は表題の論文においてフェルミ面の外におかれた一コの extra-electron が局在スピンの bound されて binding energy だけエネルギーが下ることを示された。しかしこのことは我々の得た結論からみるとおかしいと思われる。なぜなら系のエネルギーは extra-electron なしにすでに binding energy だけ下っているのであるからこれに新たに extra-electron を加えても、もはやこれが bound されて更にエネルギーを下げることはないと思われるからである。以下でこのことを示す。

芳田氏によると extra-electron の波動関数を ϕ_k で展開したときの係数 Γ_k は

$$\Gamma_k \propto (\epsilon_k + 4\epsilon_k - E)^{-1}$$

で与えられる。 $4\epsilon_k$ はフェルミ面の外kに一コの電子がいるときに、系のエネルギーシフトを通常の摂動で(但し $\tilde{E}$ を分母にくんで)計算したものである。

この量は我々の論文に現われた計算によつてlogの高次まで求められるがそれによると

* 現在ベル電話研究所

近藤 淳

$$\Delta \epsilon_k = \Delta E + \Delta \epsilon'_k$$

ここに ΔE は extra-electron がいない場合にエネルギーシフトを通常の摂動論で ($\tilde{E}$ をくりこまずに) 計算したものであり、 $\Delta \epsilon'_k$ は

$$\Delta \epsilon'_k = -2J^2 \rho^2 (3/4) (\epsilon_k - \tilde{E}) \log((\epsilon_k - \tilde{E})/D)$$

$$\times \{ 1 + 2J \rho \log((\epsilon_k - \tilde{E})/D) + \dots \}$$

ここで $\tilde{E} = E - \Delta E_0$ またこの J は芳田氏の J の半分。

(筆者は「s-d相互作用による基底状態のエネルギーについて」(物性研究最近号)において $\Delta \epsilon'_k$ の中に現われた $\tilde{E}$ の代りに E とおいたが芳田氏の principle に従えばこれは $\tilde{E}$ となり、 $J^4 \log J^2$ のような項は出てこず、当然の結果となつた。) したがつて

$$\Gamma_k \propto (\epsilon_k - \tilde{E}) \{ 1 - 2J^2 \rho^2 (3/4) \log((\epsilon_k - \tilde{E})/D) \}$$

$$\times (1 + 2J \rho \log((\epsilon_k - \tilde{E})/D) + \dots)^{-1}$$

ϵ_k を 0 に近づけたとき ($-\tilde{E}$ は我々の a で binding energy を表わすから) これは

$$\Gamma_k \propto \{ a - a 2J^2 \rho^2 (3/4) \log(a/D) \{ 1 + 2J \rho \log(a/D) + \dots \} \}^{-1}$$

となる。今 binding energy a が我々の(8)できまつていけるとすると分母は 0 であつて Γ_k は ϵ_k^{-1} のようにフェルミ面で発散する。即ち空間的に広がつた状態となる。従つて extra-electron はもはや binding energy に寄与せず、 a は我々の(8)で定められる値にとどまる。即ち consistency が成立つたことになる。

この結論は直ちに、singlet が基底状態でないことを意味するのではないと思う。ただ芳田氏の考えられた singlet は bound されないことを示したに過ぎない。おそらく芳田氏が electron のみを考え hole を考えられなかつたことと関係があるのだと思われる