

Direct Derivation of Nagaoka—Hamann Equation

東大理 川 村 清

(3月10日受理)

§ 1 序 論

Nagaoka の二時間 Green 関数の方法は、¹⁾ s-d 相互作用のもたらす困難は摂動論では除き得ないという期待を背景としていたはずであった。その後、²⁾ Hamann, ³⁾ Bloomfield and Hamann 及び ⁴⁾ Miller and Zittarz によって彼の方程式は研究された。そうして分ってきたことは、Nagaoka の方程式の解が、⁵⁾ Suhl のたてた Chew—Low 方程式の解と同等であることであつた。特に、⁶⁾ Zittarz の最近の研究によると、Nagaoka—Hamann 方程式及び Suhl 方程式から、ある量についての Hilbert 問題を作ると、それが完全に同等であることも分つた。Suhl の方法は本質的には摂動展開の部分和を集めることであるから、両者の一致は、とりもなおさず、Nagaoka—Hamann 方程式も摂動法で求めるということである。この論文では筆者が以前に発表した多時間 Green 関数による摂動展開の方法⁷⁾で、Nagaoka—Hamann 方程式を導びく。結局、Nagaoka の decoupling 法は、“abnormal” な量を含んでいないことになる。

最近、⁸⁾ Doniach の方法を改良した福島⁹⁾ は、その解が Hamann の解と一致するような方程式を出した。文献7で述べたように、筆者の方法は Doniach の定式化と同じだから、福島の方法も少し改良すれば、同様に Nagaoka—Hamann 方程式を導びけるだろう。

§ 2 基礎方程式

いつものように、われわれの考える Hamiltonian は、

$$\begin{cases} H = H_0 + H_1 & (1a) \\ H_0 = \sum_p \epsilon_p a_p^+ a_p & (1b) \\ H_1 = (-J/N) \sum_{pp'} a_p^+ (S \cdot \sigma) a_{p'}, & (1c) \end{cases}$$

Thermal Green 関数を考えることにする。振動数 $i\varepsilon$ の電子の散乱の t -matrix は、¹⁰⁾

$$t(i\varepsilon) = - \sum_{n=1}^{\infty} (-J/N)^{n+1} T^n \sum_{\{\varepsilon\}} \prod_{j=1}^n F(i\varepsilon_j) \mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) \quad (2)$$

と書ける。ここで $\{\varepsilon\}$ は、 $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$ の組である。また、

$$F(z) = \sum_p (z - \varepsilon_p)^{-1} \quad (3)$$

また、

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) \\ = \frac{1}{2} \ll (S \cdot \sigma) \alpha \alpha_1 (\varepsilon - \varepsilon_1), (S \cdot \sigma) \alpha_1 \alpha_2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_2), \dots, \\ (S \cdot \sigma) \alpha_n \alpha (\varepsilon_n - \varepsilon) \gg \end{aligned} \quad (4)$$

今後簡単の為に $(S \cdot \sigma) \alpha_{k-1} \alpha_k \equiv S_k$ とおく、Ref. 10 で $\mathcal{A}$ -関数の方程式を求めたが、ここでは少しちがった方法を使う。

$$\begin{aligned} (d/d\tau_{n+1}) \ll S_1(\tau_1), S_2(\tau_2), \dots, S_{n+1}(\tau_{n+1}) \gg \\ = \ll S_1(\tau_1), S_2(\tau_2), \dots, [H, S_{n+1}](\tau_{n+1}) \gg \\ + \ll [S_{n+1}, S_1](\tau_1), S_2(\tau_2), \dots, S_n(\tau_n) \gg \delta(\tau_1 - \tau_{n+1}) \\ + \ll S_1(\tau_1), [S_{n+1}, S_2](\tau_2), \dots, S_n(\tau_n) \gg \delta(\tau_2 - \tau_{n+1}) \\ + \dots \\ + \ll S_1(\tau_1), S_2(\tau_2), \dots, [S_{n+1}, S_n](\tau_n) \gg \delta(\tau_n - \tau_{n+1}) \end{aligned} \quad (5)$$

(5) の右辺第 1 項は、Ref. 10 で述べた “spin precession term” であるが、この項は無視する。これは、「中間状態として one-particle state のみを考える」という Suhl の仮定⁵⁾ と consistent にするためである。(5) の Fourier 変換を行なう。この際、

$$\begin{cases} d/d\tau_{n+1} \rightarrow (i\varepsilon - i\varepsilon_n) \\ [S_{n+1}, S_k](\tau_k) \delta(\tau_k - \tau_{n+1}) \rightarrow [S_{n+1}, S_k](\varepsilon_{k-1} - \varepsilon_k + \varepsilon_n - \varepsilon) \end{cases}$$

というおきかえをすればよい。両辺を $(i\varepsilon - i\varepsilon_n)$ で割れば、 $\varepsilon \neq \varepsilon_n$ の時の $\mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$ の表式が求まる。

$\varepsilon = \varepsilon_n$ の時の表式は

$$\begin{aligned}
 & \lim_{\tau_{n+1} \rightarrow \tau_n + 0} \ll \dots, (S \cdot \sigma)_{\alpha_{n-1}} \alpha_n(\tau_n), (S \cdot \sigma)_{\alpha_n} \alpha(\tau_{n+1}) \gg \\
 &= S(S+1) \ll S_1(\tau_1), \dots, S_{n-1}(\tau_{n-1}) \gg \\
 & \quad - \ll S_1(\tau_1), S_2(\tau_2), \dots, S_n(\tau_n) \gg \dots \dots \dots (6)
 \end{aligned}$$

を Fourier 変換して得られる。すなわち、

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n = \varepsilon) \\
 &= - \sum_{\varepsilon_n (\neq \varepsilon)} \mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n) \\
 & \quad + S(S+1) T^{-2} \delta_{\varepsilon \varepsilon_n} \delta_{\varepsilon \varepsilon_{n-1}} \mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{n-2}) \\
 & \quad - T^{-1} \delta_{\varepsilon, \varepsilon_n} \mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{n-1}) \dots \dots \dots (7)
 \end{aligned}$$

以上のことから、次の式を得る。

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) \\
 &= (i\varepsilon - i\varepsilon_n)^{-1} (1 - \delta_{\varepsilon \varepsilon_n}) \sum_{m=1}^n \mathcal{A}_{n+1, m}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) \\
 & \quad - \delta_{\varepsilon_n \varepsilon} \sum_{\varepsilon_n (\neq \varepsilon)} (i\varepsilon - i\varepsilon_n)^{-1} \sum_{m=1}^n \mathcal{A}_{n+1, m}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) \\
 & \quad + S(S+1) T^{-2} \delta_{\varepsilon \varepsilon_n} \delta_{\varepsilon \varepsilon_{n-1}} \mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{n-2}) \\
 & \quad - T^{-1} \delta_{\varepsilon \varepsilon_n} \mathcal{A}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{n-1}) \dots \dots \dots (8)
 \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{A}_{n+1, m}(\varepsilon, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) \\
 &= \ll S_1(\varepsilon - \varepsilon_1), \dots, [S_{n+1}, S_m](\varepsilon_{m-1} - \varepsilon_m + \varepsilon_n - \varepsilon), \dots S_n(\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_n) \gg
 \end{aligned}$$

川村 清

(2.8) の両辺に $T^n F(i\epsilon_1) \cdots F(i\epsilon_n)$ をかけ, $\epsilon_1 \cdots \epsilon_n$ で和をとる。

$$\mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_n; m) = T^m \sum_{\epsilon_1 \cdots \epsilon_m} \left\{ \prod_{j=1}^m F(i\epsilon_j) \right\} \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_1, \dots, \epsilon_m, \epsilon_n) \quad (2.9)$$

を定義すると (2.8) から,

$$\begin{aligned} & T \sum_{\epsilon_n} F(i\epsilon_n) \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_n; n-1) \\ &= T \sum_{\epsilon_n} [F(i\epsilon_n) - F(i\epsilon)] (i\epsilon - i\epsilon_n)^{-1} (1 - \delta_{\epsilon \epsilon_n}) \\ & \quad \times \sum_{m=0}^{n-1} \mathcal{A}_m(\epsilon, \epsilon_n) \cdots \\ &+ S(S+1) F^2(i\epsilon) T \sum_{\epsilon_{n-2}} F(i\epsilon_{n-2}) \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_{n-2}; n-3) \\ &- F(i\epsilon) T \sum_{\epsilon_{n-1}} F(i\epsilon_{n-1}) \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_{n-1}; n-2). \quad (2.10) \end{aligned}$$

ただし

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_m(\epsilon, \epsilon_n) &= T^{n-1} \sum_{\epsilon_1 \cdots \epsilon_{n-1}} \left\{ \prod_{j=1}^{n-1} F(i\epsilon_j) \right\} \\ &\times \ll S_1(\epsilon - \epsilon_1), \dots, [S_{n+1}, S_{n-m}](\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_{n-\epsilon}), \\ &\dots, S_n(\epsilon_{n-1} - \epsilon_n) \gg \quad (2.11) \end{aligned}$$

この論文の主眼は, $\mathcal{A}_m$ に対する次の式の証明で, それは次節で行なう。

$$\begin{aligned} (i) \quad \mathcal{A}_0(\epsilon, \epsilon_n) &= 2 T \sum_{\epsilon_{n-1}} \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_{n-1}; n-2) F(i\epsilon_{n-1}) \\ (ii) \quad \mathcal{A}_{n-1}(\epsilon, \epsilon_n) &= -2 T \sum_{\epsilon_{n-1}} \mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon_{n-1}; n-2) F(i\epsilon_{n-1}) \\ (iii) \quad \mathcal{A}_m(\epsilon, \epsilon_n) &= 2 F(i\epsilon) T \sum_{\epsilon'} \mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon'; m-1) F(i\epsilon') \\ &\quad \times T \sum_{\epsilon''} F(i\epsilon'') \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon''; n-m-3) \\ &\quad - 2 F(i\epsilon_n) T \sum_{\epsilon'} \mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon'; m-2) F(i\epsilon') T \sum_{\epsilon''} \\ &\quad \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon''; n-m-2) F(i\epsilon'') \quad (2.12) \end{aligned}$$

もし、(2.12)が証明されれば(2.10)と(2.12)から Nagaoka-Hamann 方程式が導びかれることを以下で示す。(2.12)を(2.10)に代入すると、

$$\begin{aligned}
 & T \sum_{\epsilon_n} F(i\epsilon_n) \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_n; n-1) \\
 &= T \sum_{\epsilon_n} \left\{ 2 [F(i\epsilon_n) - F(i\epsilon)] (i\epsilon - i\epsilon_n)^{-1} (1 - \delta_{\epsilon, \epsilon_n}) \right. \\
 &\quad \times T \sum_{\epsilon'} [\mathcal{A}(\epsilon, \epsilon'; n-2) - \mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon'; n-2)] F(i\epsilon') \} \\
 &\quad - F(i\epsilon) T \sum_{\epsilon'} F(i\epsilon') \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon'; n-2) \} \\
 &+ S(S+1) F^2(i\epsilon) T \sum_{\epsilon'} F(i\epsilon') \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon'; n-3) \\
 &+ 2 T \sum_{\epsilon_n} (i\epsilon - i\epsilon_n)^{-1} (1 - \delta_{\epsilon, \epsilon_n}) [F(i\epsilon_n) - F(i\epsilon)]^2 \\
 &\quad \times \sum_{m=1}^{n-2} \{ T \sum_{\epsilon'} \mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon'; m-1) F(i\epsilon') \} \{ T \sum_{\epsilon''} F(i\epsilon'') \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon''; n-m-3) \} \\
 &\dots\dots\dots (2.13)
 \end{aligned}$$

(2.2) から判るように、t-matrix の (n+1) 次の項 $t^{(n+1)}$ は

$$t^{(n+1)}(i\epsilon) = -(-J/N)^{n+1} T \sum_{\epsilon_n} F(i\epsilon_n) \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_n; n-1) \dots\dots\dots (2.14)$$

で与えられる。故に (2.13) から

$$\begin{aligned}
 t(i\epsilon) &= \{ (J/N)^2 S(S+1) F(i\epsilon) + (2J/N) T \sum_{\epsilon_n} \\
 &\quad [F(i\epsilon_n) - F(i\epsilon)] t(i\epsilon_n) \times (i\epsilon - i\epsilon_n)^{-1} \} \\
 &\times \{ 1 + R(i\epsilon) - (J/N)^2 S(S+1) F^2(i\epsilon) \\
 &\quad - (2J/N) T \sum_{\epsilon_n} (i\epsilon - i\epsilon_n)^{-1} [F(i\epsilon_n) - F(i\epsilon)]^2 t(i\epsilon_n) \}^{-1} \\
 &\dots\dots\dots (2.15)
 \end{aligned}$$

ただし、

$$\begin{aligned}
 R(i\epsilon) &= - (2J/N) T \sum_{\epsilon_n} [F(i\epsilon_n) - F(i\epsilon)] (i\epsilon - i\epsilon_n)^{-1} \\
 &\quad + (J/N) F(i\epsilon) \dots\dots\dots (2.16)
 \end{aligned}$$

(2.15) は、まさに Nagaoka-Hamann 方程式である。

§ 3 $S_m(\epsilon, \epsilon_n)$ の計算

定義より $S_0(\epsilon, \epsilon_n)$ は,

$$\ll S_1(\epsilon - \epsilon_1), S_2(\epsilon_1 - \epsilon_2), \dots, [S_{n+1}, S_n](\epsilon_{n-1} - \epsilon) \gg$$

を含んでいる。ところで

$$[(S \cdot \sigma)_{\alpha\beta}, (S \cdot \sigma)_{\beta\gamma}] = -2(S \cdot \sigma)_{\alpha\gamma}$$

を使うと,

$$\omega_0(\epsilon, \epsilon_n) = 2T \sum_{\epsilon_{n-1}} \omega(\epsilon, \epsilon_{n-1}; n-2) F(i\epsilon_{n-1}) \quad (3.1a)$$

はすぐに証明出来る。同様にして

$$\omega_{n-1}(\epsilon, \epsilon_n) = -2T \sum_{\epsilon_{n-1}} \omega(\epsilon_n, \epsilon_{n-1}; n-2) F(i\epsilon_{n-1}) \quad (3.1b)$$

も証明出来る。故に問題は、 $1 \leq m \leq n-2$ に対する計算である。この論文では、一貫して Suhl の中間状態に対する仮定を使う。⁵⁾ そのことはわれわれの方法では次のことに対応している。

ω_m を計算する為に、次の Green 関数を考えよう。

$$\begin{aligned} & \omega_{n+1, m}(\epsilon, \epsilon_1, \dots, \epsilon_n) \\ &= \ll S_1(\epsilon - \epsilon_1), \dots, [S_{n+1}, S_m](\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_n - \epsilon), \\ & \dots, S_n(\epsilon_{n-1} - \epsilon_n) \gg \quad (3.2) \end{aligned}$$

この Green 関数の運動方程式を考える。われわれは常に $\ll \quad \gg$ の中の一番右にある spin-operator の運動方程式を作っていく。そうすると

(3.2) は、 $[S_n, S_\ell]$ ($1 \leq \ell \leq n-1$) を含む Green 関数と結びつけられる。もしも $\ell \leq m-1$ であると、これをくりかえすと。いつかは、 $[S_{n+1}, S_m]$ の運動を追うことになる。その時、 $(i\epsilon - i\epsilon_n + i\epsilon_{n-m} - i\epsilon_{n-m-1})^{-1}$ という factor が出る。これはとりもなおさず中間状態として 3 粒子状態を考えていることになるから、今は考えなくてよい。いいかえれば、 $[S_n, S_\ell]$ と

いう commutator は, $\ell \geq m$ についてのみ考えればよい。ということは, 当面, (3.2) で $S_1, \dots, S_{n-m-1}$ はないも同然である。そこでこれらの operator は今後省略して, 次のように書く。

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{S}_{n+1, m}(\epsilon, \epsilon_1, \dots, \epsilon_n) \\
 &= \ll ; [S_{n+1}, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_n - \epsilon), \dots \\
 & \dots S_n (\epsilon_{n-1} - \epsilon_n) \gg
 \end{aligned}$$

まず簡単な例として, $m=1, 2$ の場合を考える。

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}_1(\epsilon, \epsilon_n) &= T^2 \sum F(i\epsilon_{n-2}) F(i\epsilon_{n-1}) \\
 &\times \ll ; [S_{n+1}, S_{n-1}] (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1} + \epsilon_n - \epsilon), S_n (\epsilon_{n-1} - \epsilon_n) \gg \quad (3.3)
 \end{aligned}$$

われわれは, Ref. 10 で次の式を証明した。

$$\begin{aligned}
 & \ll ; [S_{n+1}, S_{n-m}], S_{n-m+1}, \dots, S_n \gg \\
 &= (-1)^m \{ \ll ; S_n, S_{n-1}, \dots, S_{n-m} \gg \\
 & \quad + \ll ; S_{n-m}, S_n, \dots, S_{n-m+1} \gg \} \quad (3.4)
 \end{aligned}$$

これを使うと (3.3) の Green 関数は

$$(-1) [\ll ; S_{n-1}, S_n \gg + \ll ; S_n, S_{n-1} \gg]$$

という形をしており, $[S_n, [S_{n+1}, S_{n-1}]] = 0$ である。故に (3.3) を計算する時は elastic term のみを考えればよい。すなわち,

$$\begin{aligned}
 & \ll ; [S_{n+1}, S_{n-1}] (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1} + \epsilon_n - \epsilon), S_n (\epsilon_{n-1} - \epsilon_n) \gg \\
 &= -2 T^{-2} S(S+1) \delta_{\epsilon, \epsilon_{n-2}} \delta_{\epsilon_n, \epsilon_{n-1}}.
 \end{aligned}$$

故に,

川村 清

$$\begin{aligned} \omega_1(\epsilon, \epsilon_n) = & -2S(S+1)F(i\epsilon)F(i\epsilon_n)T\sum_{\epsilon_{n-3}}F(i\epsilon_{n-3}) \\ & \times \omega(\epsilon, \epsilon_{n-3}; n-4) \dots\dots\dots (3.5) \end{aligned}$$

ここで

$$\omega(\epsilon_n, \epsilon'; 0) = -S(S+1)T\delta_{\epsilon_n\epsilon'} \dots\dots\dots (3.6)$$

に注意すると (3.5) から $m=1$ の場合における (2.12) が証明された。

次に $\omega_2(\epsilon, \epsilon_n)$ を検討する。 ω_2 の定義にある Green 関数の運動方程式から、

$$\begin{aligned} & T^3\sum F(i\epsilon_{n-3})F(i\epsilon_{n-2})F(i\epsilon_{n-1}) \\ & \times \ll; [S_{n+1}, S_{n-2}] (\epsilon_{n-3}-\epsilon_{n-2}+\epsilon_n-\epsilon), S_{n-1}(\epsilon_{n-2}-\epsilon_{n-1}), \\ & \quad S_n(\epsilon_{n-1}-\epsilon_n) \gg \\ = & T\sum_{\epsilon_{n-1}} [F(i\epsilon_{n-1})-F(i\epsilon_n)] T^2\sum F(i\epsilon_{n-2})F(i\epsilon_{n-3}) \\ & \times (i\epsilon_n-i\epsilon_{n-1})^{-1} (1-\delta_{\epsilon_n\epsilon_{n-1}}) \\ & \times [\ll; [S_n, [S_{n+1}, S_{n-2}]] (\epsilon_{n-3}-\epsilon_{n-2}+\epsilon_{n-1}-\epsilon), S_{n-1}(\epsilon_{n-2}-\epsilon_{n-1}) \gg \\ & + \ll; [S_{n+1}, S_{n-2}] (\epsilon_{n-3}-\epsilon_{n-2}+\epsilon_n-\epsilon), [S_n, S_{n-1}] (\epsilon_{n-2}-\epsilon_n) \gg] \\ & + 2S(S+1)F^2(i\epsilon_n)T\sum_{\epsilon_{n-3}}F(i\epsilon_{n-3})\omega(\epsilon, \epsilon_{n-3}; n-4) \\ & - F(i\epsilon_n)T\sum_{\epsilon_{n-2}}F(i\epsilon_{n-2})\omega(\epsilon, \epsilon_{n-2}; n-3) \dots\dots\dots (3.7) \end{aligned}$$

(3.4) を使うことにより

$$\begin{aligned} & \ll; [S_{n+1}, S_{n-2}] (\epsilon_{n-3}-\epsilon_{n-2}+\epsilon_n-\epsilon), [S_n, S_{n-1}] (\epsilon_{n-2}-\epsilon_n) \gg \\ = & -2 \ll; S_{n-2}(\epsilon_{n-3}-\epsilon_{n-2}+\epsilon_n-\epsilon), S_{n-1}(\epsilon_{n-2}-\epsilon_n) \gg \\ & -2 \ll; S_{n-1}(\quad \quad \quad), S_{n-2}(\quad \quad \quad) \gg \\ = & -4S(S+1)T^{-2}\delta_{\epsilon_n\epsilon_{n-2}}\delta_{\epsilon\epsilon_{n-3}} \ll; \dots\dots, S_{n-3}(\epsilon_{n-4}-\epsilon) \gg \dots\dots (3.8) \end{aligned}$$

二番目の等式は, commutator の項がなくなることから elastic term のみを残した。同様にして,

$$\begin{aligned} & \ll; [S_n, [S_{n+1}, S_{n-2}]] (\epsilon_{n-3} - \epsilon_{n-2} + \epsilon_n - \epsilon), S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \gg \\ & = -4 S(S+1) T^{-2} \delta_{\epsilon} \epsilon_{n-3} \delta_{\epsilon} \epsilon_{n-1} \epsilon_{n-2} \ll \dots, S_{n-3} (\epsilon_{n-4} - \epsilon) \gg \end{aligned} \quad (3.9)$$

(3.9) は厳密ではない。というのは, $[S_{n-1}, [S_n, [S_{n+1}, S_{n-2}]]]$ は消えないので elastic term のみを取り出した (3.9) は正確ではない。この commutator の次は, 振動数の変数が 4 つある分母を出さないから, 一見すると 3-粒子状態を取り込んでいないように見える。もし, この項が残るとすると, $S(S+1)$ に比例する項を与える。そうして, Nagaoka-Hamann 方程式には出て来ない $S(S+1)$ に比例する項が t -matrix に付加される。しかも, Nagaoka-Hamann 方程式で $S(S+1)$ に比例する項は, most singular term を完全に尽しているから, 上に述べた項は, lower divergent term でなくてはならない。一方, Suhl の方程式の解で less singular term は, 少なくとも $[S(S+1)]^2$ に比例しているから, 上記の項は, Suhl の中間状態に対する制限により落とされるべきである。したがって Suhl の仮定の範囲では (3.9) が厳密である。

(3.8), (3.9) を (3.7) に代入し,

$$\begin{aligned} t^{(3)}(i\epsilon) &= -S(S+1) (-J/N)^3 F(i\epsilon_n) \\ &\times [2T \sum_{\epsilon_{n-1}} [F(i\epsilon_{n-1}) - F(i\epsilon_n)] (i\epsilon_n - i\epsilon_{n-1})^{-1} - F(i\epsilon_n)] \end{aligned} \quad (3.10)$$

を使うと,

$$\begin{aligned} S_2(\epsilon, \epsilon_n) &= -2F(i\epsilon_n) T \sum_{\epsilon_{n-1}} F(i\epsilon_{n-1}) \mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon_{n-1}; 0) \\ &\times T \sum_{\epsilon_{n-3}} F(i\epsilon_{n-3}) \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_{n-3}; n-4) \\ &+ 2F(i\epsilon) T \sum_{\epsilon_{n-1}} F(i\epsilon_{n-1}) \mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon_{n-1}; 1) \\ &\times T \sum_{\epsilon_{n-4}} F(i\epsilon_{n-4}) \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon_{n-4}; n-5) \end{aligned} \quad (3.11)$$

川村 清

故に $m=2$ の場合の (2.12) が証明された。

そこで一般の m に対して (2.12) を証明しよう。そのために次の運動方程式を考える。

$$\begin{aligned}
& T \sum_{\epsilon_{n-1}} F(i \epsilon_{n-1}) T^m \sum_{\epsilon_{n-2} \dots \epsilon_{n-m-1}} F(i \epsilon_{n-2}) \dots F(i \epsilon_{n-m-1}) \\
& \times \lll; [S_{n+1}, S_{n-n}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_n - \epsilon), \\
& \quad S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}), \dots, S_n (\epsilon_{n-1} - \epsilon_n) \ggg \\
& = T \sum_{\epsilon_{n-1}} [F(i \epsilon_{n-1}) - F(i \epsilon_n)] T^m \sum F(i \epsilon_{n-2}) \dots F(i \epsilon_{n-m-1}) \\
& \times (i \epsilon_n - i \epsilon_{n-1})^{-1} (1 - \delta_{\epsilon_n \epsilon_{n-1}}) \\
& \times [\lll; [S_n, [S_{n+1}, S_{n-m}]] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_{n-1} - \epsilon), \\
& \quad S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}), \dots, S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \ggg \\
& + \lll; [S_{n+1}, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_n - \epsilon), \\
& \quad [S_n, S_{n-m+1}] (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1} + \epsilon_{n-1} - \epsilon_n), \\
& \quad \dots, S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \ggg \\
& + \dots \\
& + 2 \lll; [S_n, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_n - \epsilon), S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}), \\
& \quad \dots, S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_n) \ggg] \\
& + S(S+1) F^2(i \epsilon_n) \mathcal{A}_{m-2}(\epsilon, \epsilon_n) - F(i \epsilon_n) \mathcal{A}_{m-1}(\epsilon, \epsilon_n) \dots (3.12)
\end{aligned}$$

われわれは、(3.12) のように、commutator のある項と elastic term とによって、セミコロンの右側にある operator の数を減らして行く。これをくり返すと、最後には、セミコロンの右側には、1 つも operator のない項か、1 つだけ残る項に到達する。このような多数の reduction process の中、セミコロンの右側の operator をなくしてしまうような process を

“process A”と名づけ、右側に一つだけ残すような process を “process B”と名づけよう。

最初に (3.12) を使って最後にセミコロンの右側に operator がなくなるように operator の数を減らして行く process を考える。その時、(3.12) 右辺の [] の第 1 次を

$$-2 \ll; [S_n, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_{n-1} - \epsilon), \\ S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}), \dots, S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \gg$$

でおきかえ、その代りに

$$\Phi_m(i\epsilon_n) \equiv \ll; [S_n, [S_{n+1}, S_{n-m}]] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_{n-1} - \epsilon), \\ S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}), \dots, S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \gg \\ + 2 \ll; [S_n, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_{n-1} - \epsilon), \\ \dots S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \gg \dots (3.13)$$

をつけ加えておく。“process A”を考えるかぎり $\Phi_m = 0$ としてよいことは Appendix で示す。そうすると、(3.12) は、t-matrix の recurrence formular (2.8) と全く同じ形をしている。ちがうのは一番左にある operator (コロンの右にある operator) が commutator であることと、左辺の Green 関数の一番右の変数が ϵ の代りに ϵ_n であることだけである。operator の commutator があることは本質的ではない。というのは、最終的にほしいのは、reduction の各段階で出て来る係数なのだから。したがって $\Phi_n = 0$ であるかぎり $\mathcal{A}_m(\epsilon, \epsilon_n)$ は、 $\mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon_{n-1}; m)$ と同じ recurrence formular で計算され “初期条件” は、 $\mathcal{A}_1(\epsilon, \epsilon_n)$ で与えられる。故に “process A” で決められる $\mathcal{A}_m(\epsilon, \epsilon_n)$ としては、(3.15) の $-S(S+1)F(i\epsilon_n)$ を

$$T \sum_{\epsilon'} F(i\epsilon') \mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon'; m-1)$$

でおきかえたものとなる。すなわち

$$\begin{aligned} \omega_m^{(A)}(\epsilon, \epsilon_n) &= 2 F(i\epsilon) T \Sigma_{\epsilon'} F(i\epsilon') \omega(\epsilon_n, \epsilon'; m-1) \\ &\times F(i\epsilon_n) T \Sigma_{\epsilon''} F(i\epsilon'') \omega(\epsilon, \epsilon''; n-m-3) \end{aligned} \quad (3.14)$$

これは、まさに (2.12) の右辺第1項である。

(3.12) に process B を適要すると次のようになる。まず (3.12) の右辺の [] 内第1項を無視する。そうして第2項を

$$\begin{aligned} -2 \ll; [S_n, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_n - \epsilon), S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \\ \epsilon_{n-m+1} + \epsilon_{n-1} - \epsilon_n), \dots, S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \gg \end{aligned}$$

でおきかえ、その代りに

$$\begin{aligned} \Phi_n(i\epsilon_n) &= 2 \ll; [S_n, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_n - \epsilon), \\ S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1} + \epsilon_{n-1} - \epsilon_n), \dots, S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \gg \\ &+ \ll; [S_{n+1}, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_n - \epsilon), [S_n, S_{n-m+1}] \\ &(\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1} + \epsilon_{n-1} - \epsilon_n), \dots, S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \gg \end{aligned} \quad (3.15)$$

を付け加える。(3.12) で今考えている項は、; の右にある operator より更に右の方に第2の交換関係があるから、当分一番左の交換子は考えなくてもよい。これは、新たなセミコロンの付け加わったようなものである。すなわち、当面は (3.12) の左辺で

$$\ll; [S_{n+1}, S_{n-m}], S_{n-m+1}, \dots, S_n \gg$$

を

$$\ll; S_{n-m+1}, \dots, S_n \gg$$

とおいたのと同じである。そうして、出来た運動方程式は $\Phi'_n = 0$ とするかぎり t-matrix と同じ recurrence formular に従い、“初期条件”は

$$\begin{aligned}
 & \ll ; S_{n-m+1}(\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}), S_{n-m+2}(\epsilon_{n-m+1} - \epsilon_n) \gg \\
 & = S(S+1) T^{-2} \delta_{\epsilon_{n-m+1} \epsilon_n} \delta_{\epsilon_{n-m}, \epsilon_n} \ll ; 1 \gg \\
 & = S(S+1) T^{-2} \delta_{\epsilon_{n-m+1} \epsilon_n} \delta_{\epsilon_{n-m} \epsilon_n} \\
 & \ll ; [S_{n-m+1}, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon) \gg \dots (3.16)
 \end{aligned}$$

この初期条件は (3.11) の右辺第 1 項で与えられるから、一般に “process B” で reduce されると、

$$\begin{aligned}
 S_m^{(B)}(\epsilon, \epsilon_n) &= -2F(i\epsilon_n) T \sum_{\epsilon'} F(i\epsilon') \mathcal{A}(\epsilon_n, \epsilon'; m-2) \\
 &\times T \sum_{\epsilon''} F(i\epsilon'') \mathcal{A}(\epsilon, \epsilon''; n-m-2) \dots (3.17)
 \end{aligned}$$

これはまさに (2.12) の右辺第 2 項である。 $\Phi_m' = 0$ の証明は Appendix にある。

§ 4 結 論

われわれは、t-matrix に対する摂動公式から出発した。spin Green 関数に対する運動方程式に対する若干の “trick” を使って Nagaoka-Hamann 方程式を導びいた。使った近似は、「中間状態には一電子のみがある」という Suhl の近似と同等である。これによって、Nagaoka-Hamann 方程式は、完全に摂動論の枠内にあり、“abnormal state” についての情報は含んでいないことが判った。

Appendix

この Appendix では $\Phi_m = 0$, $\Phi_m' = 0$ を示す。まず

$$\begin{aligned}
 \Phi_m(i\epsilon) &= 2 \ll ; [S_n, S_{n-m}] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_{n-1} - \epsilon), \\
 & S_{n-m+1}(\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}), \dots, S_{n-1}(\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \gg
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \lll; [S_n, [S_{n+1}, S_{n-m}]] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_{n-1} - \epsilon), \\
 & S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}) \dots, S_{n-1} (\epsilon_{n-2} - \epsilon_{n-1}) \ggg \dots \dots \dots (A.1)
 \end{aligned}$$

を考える。右辺を計算する為には運動方程式を考えればよい。その際、 S_{n-1} と、他の operator との commutator を作ればよい。その時、 S_{n-m+1} 及びそれより右にある operator との commutator は考えなくてよい。たとえば $[S_{n-1}, S_{n-2}]$ の項は、 Φ_{m-1} に帰着するし、 $[S_{n-1}, S_\ell], \dots S_{n-2}$ とある項はわれわれの scheme では t-matrix に比例する c-number でおきかえながら低次の Φ_m になる。したがって、われわれは "process A" では S_{n-m+2} 以後の Spin operator と一番左の量との commutator を考えればよい。

$$\begin{aligned}
 \Phi_m & \sim 2 \lll; [S_{n-m+2}, [S_{n-m+3} \dots [S_n, S_{n-m}]] \dots], \\
 & (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_{n-m+1} - \epsilon) S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}) \ggg \\
 & + \lll; [S_{n-m+2}, \dots [S_{n+1}, S_{n-m}] \dots] (\epsilon_{n-m-1} - \epsilon_{n-m} + \epsilon_{n-m+1} - \epsilon), \\
 & S_{n-m+1} (\epsilon_{n-m} - \epsilon_{n-m+1}) \ggg \dots \dots \dots (A.2)
 \end{aligned}$$

ここで n 個の operator の sequence

$$(S_1, S_2, \dots, S_n)$$

を考える。(3.4) から

$$\begin{aligned}
 & ([S_n, S_1], S_2, \dots, S_{n-1}) \\
 & = (-1)^n \{ (S_1, S_{n-1}, \dots, S_2) \\
 & \quad + (S_{n-1}, S_{n-2}, \dots, S_1) \}
 \end{aligned}$$

これを更に 3 回使うと

$$\begin{aligned}
 & ([S_{n-3}, [S_{n-2}, [S_{n-1}, [S_n, S_1] \dots]], S_2, \dots, S_{n-4}) \\
 &= (-1)^n \{ 2^3 (S_1, S_{n-4}, \dots, S_2) \\
 &\quad + (-1)^n ([S_{n-3}, [S_{n-2}, S_1]], S_2, \dots, S_{n-4}) \\
 &\quad + 2(-1)^{n+1} ([S_{n-3}, S_1], S_2, \dots, S_{n-4}) \} \quad (A.3)
 \end{aligned}$$

そこで

$$C_n \equiv ([S_3, [S_4, [S_5 \dots [S_n, S_1]] \dots]], S_2)$$

とおくと

$$C_n = (-1)^n 2^{n-3} (S_1, S_2) + C_{n-2} - 2 C_{n-3} \quad (A.4)$$

これから

$$C_{n+1} + 2 C_n = (C_{n-1} + 2 C_{n-2}) - 2 (C_{n-2} + 2 C_{n-3})$$

特に, $n=3, 4$ の場合は, これが消えるとは証明済みだから, (A.2) は消える。

Φ'_m は process B の reduction で出て来た。これも全く同様に証明出来る。

文 献

- 1) Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. 37, 13, (1967)
- 2) D. R. Hamann, Phys. Rev. 158, 570 (1967)
- 3) P. E. Bloomfield and D. R. Hamann, Phys. Rev. 164, 856 (1967)
- 4) J. Zittartz and E. Miiller-Hartmann, Zeit. Phys. 212, 380 (1968)
- 5) H. Suhl, Phys. Rev. 141, 483 (1966)

川村 清

- 6) J.Zittarz, Zeit. Phys. 217, 43 (1968)
- 7) K.Kawamura, Prog. Theor. Phys. 39, 1375 (1968)
- 8) S.Doniach, Phys. Rev. 144, 382 (1966)
- 9) 福島謙二, 物性研究 11, 292 (1969)
- 10) 川村 清, 物性研究 10, 282 (1968)