

Bound State in Metals due to a Fluctuating Perturbation

近 藤 淳 (電試)

(3月23日受理)

1 序

s-d 相互作用による低温での異常¹⁾は多くの人が問題にしているが、特に $J < 0$ のときに現われるかもしれない bound state に多くの人が関心を持っている。²⁾しかしながら今までの議論では bound state がもし現われるとしたらそれはどのような物理的機構によるかの説明が行われていない。殊になぜそれが $J < 0$ と結びついているかをなつとくさせるだけの議論がなかつた。我々は $J < 0$ のときには伝導電子のスピンの fluctuation が起りその結果フェルミ面の近傍のプロツホ函数から成る bound state が生じることを簡単な変分函数を用いて示そう。

$J < 0$ のときには d スピン ($S = 1/2$ とする) と伝導電子スピンとは反平行に結合するが、その向きはたえず fluctuate している。今問題にしている伝導電子の波動函数をプロツホ軌道から作ることを考える。s-d 相互作用を得するためにはこの波動函数は d スピンの位置になるべく局在した方がよい。しかし一方では運動エネルギーを考慮しなければならない。もしこの波動函数を作るのにフェルミ面より上のプロツホ軌道を使つたとすると、当然その軌道のもつ運動エネルギーが必要になる。しかしフェルミ面より下のプロツホ軌道を使つたとすると事情は異なる。すでにのべたようにこの軌道にはいる電子のスピンは fluctuate しているからこの軌道には電子は一コしかはいれない。しかしもともこの軌道には電子が二コあつたのだから一コはフェルミ面まで持上げられなければならない。従つてそれに要するエネルギーがこの軌道を用いるために必要となる。つまりフェルミ面からどちらの方向に離れても運動エネルギーは増大する。従つて用いられるプロツホ軌道はフェルミ面の近傍になければならない。

ここでポテンシャル散乱の問題との違いを考えるとよい。この場合には軌道の組替が起るだけであつて、電子は組替えられた軌道に下から順につめられていく。つまり問題は一電子の問題であつて運動エネルギーを得するために bound state はバンドの底から生じる。その場合にはバンドの底の状態密度が大切であり、三次元ではポテンシャルがバンド巾程度にならないと、bound state は生じない。³⁾しかし今の問題は本質的に多体問題であり、スピンの fluctuate しているときに軌道をフェルミ面よりずつと下の状態を用いて作ったのでは全系のエネルギーとしては損になる。従つてフェルミ面の近傍のプロツホ函数を用いて波動函数を作らなければならないが、フェルミ面の近くでは状態密度は一定とみてよくどんなに弱い摂動でも bound state が生じる。

2 変分函数

s-d 相互作用のハミルトニアンとしては通常のものとする。¹⁾我々は次の変分函数を考えよう。

$$\psi = 2^{-1/2}(a_{0\downarrow}^* \alpha - a_{0\uparrow}^* \beta) \prod_n a_{n\uparrow} a_{n\downarrow}^* |10\rangle \quad (1)$$

ここに α, β は d スピンのスピン函数。 a_0, a_n はプロツホ軌道 a_k から作られる。

$$a_0 = \sum_k c_{0k} a_k \quad (2)$$

$$a_n = \sum_k c_{nk} a_k \quad (3)$$

(1) によるエネルギーの平均値は

$$E = 2 \sum_n^{\text{occ.}} \sum_k |c_{nk}|^2 \epsilon_k + \sum_k |c_{0k}|^2 \epsilon_k - (3|J|/2N) |\sum_k c_{0k}|^2 \quad (4)$$

ここで ϵ_k はフェルミエネルギーから測つた電子の運動エネルギー、 J は負とした。 c は規格直交条件

$$\sum_k c_{nk}^* c_{n'k} = \delta_{nn'} \quad (n=0 \text{ も含む}) \quad (5)$$

の下に (4) を極小にするように定める。今 c_{0k} を固定したとすると c_{nk} と直交するという条件の下で (4) の第一項を極小にするように定められる。こう

近藤 淳

して求められた (4) の極小値を c_{0k} について極小にする。

まず c_{nk}^* についての微分から

$$c_{nk} = \mu_n c_{0k} / 2(\epsilon_k - \lambda_n) \quad (6)$$

と定まる。 λ_n, μ_n は Lagrange multiplier であつてその値は c が (5) をみたすという条件から定められる。まず c_{0k} と c_{nk} の直交性から

$$\phi(\lambda_n) \equiv \sum_k |c_{0k}|^2 / (\lambda_n - \epsilon_k) = 0 \quad (7)$$

によつて λ_n が定まる。 λ_n は伝導電子の固有エネルギーに相当する。なぜなら (4) の第一項を $E^{(1)}$ とすると、(6) を代入して

$$E^{(1)} = 2 \sum_n \lambda_n \quad (8)$$

となるからである。ここに (7) と c_{nk} の規格化条件とを用いた。 c_{nk} は $n \neq n'$ のとき直交条件 (5) をみたすことも (7) を用いて簡単に示される。

非摂動状態のエネルギー E_0 と $E^{(1)}$ との差は

$$E^{(1)} - E_0 = 2 \sum_n (\lambda_n - \epsilon_k) \quad (9)$$

となるが、 λ_n は (7) によつて定められるからこれは c_{0k} の函数である。その函数形をみるために今 c_{0k} が $k \leq k_F$ に対してのみ有限の値をもつ場合を考える。 $c_{0k} = 0, k > k_F$ すると c_{0k} との直交条件はフェルミ面より上のブロッホ軌道に対しては影響を与えないからそのエネルギーもシフトされない。従つて (9) は $\phi(\lambda)$ のすべての zero の和からすべての pole の和を引いたものの 2 倍である。これは、 $\sum_k |c_{0k}|^2 = 1$ を用いれば

$$E^{(1)} - E_0 = -2 \sum_{k \leq k_F} \epsilon_k |c_{0k}|^2 \quad (10)$$

となる。また $c_{0k} = 0$ for $k \leq k_F$ の場合にはフェルミ面内のブロッホ軌道は変化をうけないから $E^{(1)} - E_0$ は 0 となり、やはり (10) が成立つ。

c_{0k} が一般の場合にはもつと複雑になる。まず

$$\phi(\lambda) = \prod_n (\lambda - \lambda_n) \prod_k (\lambda - \epsilon_k)^{-1}$$

により

$$E^{(1)} - E_0 = (\pi i)^{-1} \int_C \lambda (d/d\lambda) \ln \phi(\lambda) d\lambda \quad (11)$$

となる。ここに C は実軸の直下を $-\infty$ から 0 まで走りそこから実軸の直上を通つて $-\infty$ まで行く積分路である。すると部分積分して

$$\begin{aligned} E^{(1)} - E_0 &= -(\pi i)^{-1} \int_C \ln \phi(\lambda) d\lambda \\ &= -(\pi i)^{-1} \int_{-\infty}^0 \{ \ln \phi(\lambda - is) - \ln \phi(\lambda + is) \} d\lambda \\ &= (2/\pi) \int_{-\infty}^0 \delta(\lambda) d\lambda \end{aligned} \quad (12)$$

ここに

$$\delta(\lambda) = \tan^{-1} \{ \pi |c_{0k\lambda}|^2 \rho(\lambda) / \int |c_{0k}|^2 \rho(\epsilon_k) / (\epsilon_k - \lambda) d\epsilon_k \} \quad (13)$$

k_λ は $\epsilon_{k\lambda} = \lambda$ で定義される波数。 c_{0k} の球対称を仮定した。 ρ は unit cell 当りの状態密度。(12), (13) によつて $E^{(1)} - E_0$ が c_{0k} の函数として与えられる。もし c_{0k} がある k_0 のまわりに集中していて、ほかでは 0 であるとするとき $\delta(\lambda)$ は λ が k_0 の附近を通過するときに 0 から π まで変るから

$$E^{(1)} - E_0 = \begin{cases} 0 & k_0 > k_F \\ -2\epsilon_{k_0} & k_0 < k_F \end{cases}$$

となつて一致する。

我々の定性的な議論には一般に (10) を用いても大きな誤りはないであろう。すると (4) から

$$E - E_0 = \sum_k |\epsilon_k| \cdot |c_{0k}|^2 - (3|J|/2N) |\sum_k c_{0k}|^2 \quad (14)$$

となる。ここに $|\epsilon_k|$ が現われたのはすでにのべたようにフェルミ面から上に離れても下に離れても運動エネルギーが増加することに対応する。固有値は

$$1 = (3|J|/2N) \sum_k (|\epsilon_k| - \epsilon)^{-1} \quad (15)$$

から定められ

$$\epsilon \cong -D \exp(-1/3|J|\rho) \quad (16)$$

となる。但し $2D$ はバンドの巾で、この巾の中で ρ は一定とした。このような近似が許されるのはフェルミ面の近傍が問題になっているからであり、もしポテンシャル散乱の場合のようにバンドの底から bound state が生じる場合には底の近辺の ρ の形が大切であり、そのため bound state はポテンシャルがある程度以上大きくならないと生じない。³⁾ 我々の場合には $|J|$ の大きにかかわらずフェルミ面のすじ下に bound state が生じる。

3 Discussion

(16)において $\exp$ の肩に $3|J|\rho$ がきているが、摂動展開が成立なくなる目安を与える温度の式には $2|J|\rho$ がくる。これは (1) の変分函数がよくないため、量子力学的な fluctuation の効果のみをきかせるように変分函数をとるべきであるが、この点は将来の問題といえよう。

J が正の場合には d スピンと伝導電子のスピンとは平行に結合しており、スピンの fluctuation はおこらないと期待される。従つてここでのべたような bound state は生じないであろう。事実この場合に

$$\psi = a_{0\uparrow}^* \alpha \Pi_n a_{n\uparrow}^* \Pi_m a_{m\downarrow}^* |0\rangle$$

という変分函数をとれば軌道の組替が起るだけである。

我々には s-d 相互作用による電気抵抗の異常が、s-d 相互作用のダイナミカルな性質と、フェルミ統計に基づく伝導電子の性質とからきていることを示したが、¹⁾ この二つの要素は今の場合にも役をはたしている。即ちスピンの fluctuation は s-d 相互作用のダイナミカルな性質に基づいているし、またスピンの fluctuate する場合には軌道に一つの電子しかはいれないというフェルミ統計が (15) において $|\epsilon_k|$ をもたらしめている。

文 献

- 1) J. Kondo : Prog. Theor. Phys. 32 , 37 (1964)
- 2) H. Suhl : Phys. Rev. 138 , A515 (1965)
 Y. Nagaoka : Phys. Rev. 138 . A1112 (1965)
 K. Yosida and A. Okiji : Prog. Theor. Phys. 34, 505 (1965)
 高野、小川、大沢、高中 : 物性研究 5 , 19 (1965)
 P. W. Anderson : サンフランシスコにおける磁性会議での講演
 (1965)
- 3) G. F. Koster and J. C. Slater : Phys. Rev. 96, 1208
 (1965)

附記

(3 月 2 8 日 受 理)

この論文のプレプリントを芳田先生にお送りしたところ、先生からその内容が先生が前に書かれた論文の内容と同じである旨のご指摘をうけました。しかし私はそう思いませんので、その点についてのべたいと思います。

芳田先生はフェルミ面の外に一つの電子を考え、これだけをスピンと相互作用させて bound state が生じることを示しておられますが、このようにするとポテンシャル散乱の場合にも bound state が生じます。しかしこの場合エルミ面の内側の電子も散乱されることを考慮にいれて a_k から a_n に組替えると (ポテンシャルが十分大きくない限り) bound state は生じないことはよく知られています。そこで s-d の場合にすべての電子が摂動をうける形に変分函数をとつてもなお bound state が残るかどうかをみたのがこの論文です。

そうすると電子はフェルミ面から内にも外にも離れられないことが出てきました。(芳田先生は電子をフェルミ面の外に限ると仮定されています) 内にも離れられないのはもし内にはいろいろとすると伝導電子が a_k から a_n に組替えられそのために伝導電子系のエネルギーが高まることから来ています。ポテンシャル散乱の場合にはこの高まりは、考えている電子のエネルギーの下りと打消しますが、スピンが fluctuate しているときは前者は後者の2倍で全体と

近藤 淳

してエネルギーが上ります。その結果bound stateが生じることは本文にのべた通りです。

芳田先生は、 a_k を a_n に組替えた効果は何れも現われていないといわれますが上述の理由により、 a_k を a_n に組替えたことがこの重要なポイントと考えます。最後にこの論文で主張したかったことをくり返しますと「Jが負のときはスピンの fluctuation によつて bound state が生じる。」ということです。