

"高濃度近藤系"の半現象論

阪大基礎工 吉森昭夫
阪大工 笠井秀明

"高濃度近藤系"の高濃度低濃度のふりまいかいゆり"同軸的アンダーソンモデル"から導くことができるのかどうか、導けるものとしたならばどんな形になるのかという問題がある。この話は selfenergy は vertex part への相互作用 U の高次の interference の寄与が無視できるとすれば興味のある結果がえられるというもので、pure な系に対する取扱いと、それと CPA による完全系に拡張した結果について述べる。

"同軸的アンダーソンモデル"のハミルトニアンは pure な系になして、

$$H = \sum \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V \sum (c_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) + \sum \epsilon_v(k) f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + U \sum f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\downarrow}, \quad (1)$$

と表わす。系は完全な電子空孔の対称性を持つものとする。 $U=0$ で系が金属的としたので、 f 電子のバンドにもバンドエネルギーの k 依存性を導入し、簡単のために、 $\epsilon_v(k) = \alpha \epsilon_k$ ($\alpha > 0$, $\alpha \ll 1$) とする。 $U \neq 0$ では $\epsilon_v(k)$ に常数項 $-U/2$ があるがこれは selfenergy に含ませることとする。 ϵ_k は電子空孔の対称性をなし、 $\epsilon_k = 0$ は $V=0$ の至り準位とする。 f 電子に対する温度グリーン関数の Fourier 変換 $G_k(i\omega_n)$ は、

$$G_k(i\omega_n) = [i\omega_n - \epsilon_v(k) - \Sigma_k(i\omega_n) - V^2(i\omega_n - \epsilon_k)^{-1}]^{-1}, \quad (2)$$

で与えられる。selfenergy Σ_k は一般には相互作用 U の site の異なる項の寄与があるが、ここでは同じ site の項の寄与が主要な interference の寄与は無視できるものと仮定をする。この仮定の妥当性は結果が実験結果と比較して興味があるかどうかで今のところは判定しようというわけである。この仮定をすれば Σ_k は k によらなくなる。また self-energy のスケルトンは1個の不純物の近藤効果のものと同一になり、それについて知られている結果を引用できることになる。例えば Σ_k は $\tilde{T}_K$ を特性温度として持つが、それは $-\text{Im} G_{cc}(i0) = -\text{Im} \Sigma_k(i0)/N = \tilde{\Delta}^2$ として $\tilde{T}_K = \sqrt{8U\tilde{\Delta}/\pi} \exp(-\pi U/8\tilde{\Delta})$ で与えられ、 $\tilde{\Delta} = \alpha/\pi\rho$ (ρ は f 電子のフェルミ準位での状態密度で、状態密度は1に規格化されている。)である。

電気伝導度 σ は vertex part への interference の寄与がやはり無視できるとすると、

$$\sigma = A \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{d\epsilon}{d\epsilon} \sum_k \left(\frac{\partial \epsilon_k}{\partial k} \right)^2 \left(\text{Im} G_k^C(\epsilon + i0) \right)^2, \quad (3)$$

と表はされる。ここで G_k^C は伝導電子に対する温度グリーン関数の Fourier 変換である。この表式は ε_k -依存性の弱い部分は Fermi 準位の値で置き換えて、 k についての和 Σ 行くと、

$$\sigma = A \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{d f}{d \varepsilon} [1 \tilde{\Sigma}(\varepsilon + i0^+) + \gamma \tilde{\Delta}^2] / \tilde{\Sigma}_I(\varepsilon + i0^+), \quad (4)$$

となる。 $\tilde{\Sigma}$ は inter-site の寄与を無視した self energy で $\tilde{\Sigma}_I$ はその虚部である。 γ は $\gamma = (\pi P V^2) / \alpha$ で与えられる。 $T \gtrsim T_K$ で $\tilde{\Sigma}_I(i0^+) / \tilde{\Delta} = 1 - ((\text{Im } t(i0^+))_{T=0} / \text{Im } t(i0^+))$ において $t(i0^+)$ に Suhl-Nagaoka-Hamann のものを用いると、電気抵抗を R とし、

$$R = A' [(\sqrt{\log(T/T_K)} + a + \log(T/T_K)) + \gamma(\sqrt{\log(T/T_K)} + a - \log(T/T_K))^2]^{-1}, \quad (5)$$

がえられる。 a は $a = \pi^2/4$ である。 $T \ll T_K$ でも $\tilde{\Sigma}(\varepsilon + i0^+)$ は判るであろう、

$$R = A' \frac{8}{3\gamma} \left(\frac{T}{T_K} \right)^2 \quad (6)$$

となる。この結果は高温、低温ともに“高濃度近藤”の R とし実験的に与えられているものに定性的に一致する。

次に合金系に対する拡張を試みる。 f 電子の準位に 2 種類あり、それぞれ A 原子に在る時は ε_A 、 B 原子に在る時は ε_B とし、 $\varepsilon_A = -V/2$ 、 $\varepsilon_B \rightarrow \infty$ と置き、 A 原子の濃度を x とする。その他ハミルトニアン部分は pure 系と同じである。CPA の取組をこの系に適用すると、 A, B の分布はランダムとして、コヒーレントポテンシャル $\tilde{\Sigma}(\varepsilon + i0^+)$ は $\varepsilon \sim 0$ で、

$$-\frac{1-x}{\tilde{\Sigma}(\varepsilon + i0^+) - \tilde{\Sigma}(\varepsilon + i0^+)} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\varepsilon_k}{-\alpha \varepsilon_k^2 - \tilde{\Sigma}(\varepsilon + i0^+) \varepsilon_k + V^2}, \quad (7)$$

により定められる。 $\tilde{\Sigma}(\varepsilon + i0^+)$ は前と同じく 1 個の不純物の近藤効果のものと同じスケルトンで与えられ、それを計算するに必要のグリーン関数がある A 原子に在る時のグリーン関数 (f 電子に対する)

$$G_A(z) = \frac{1}{N} \frac{1}{x} \sum_k \frac{1}{z - \tilde{\Sigma}(z) - \alpha \varepsilon_k - \frac{V^2}{z - \varepsilon_k}}, \quad (8)$$

である。上の 2 つの表式を得るために pure 系に対すると同様に self energy に在る inter-site の寄与は無視できるとして。 $\tilde{\Sigma}$ はやはり特性温度 T_K を持ち、それは T_K に対する表式の $\tilde{\Delta}$ を $\tilde{\Delta}$ で置き換えるだけで、 $\tilde{\Delta}$ は $-\text{Im } G_A(i0^+) = \tilde{\Delta}^{-1}$ とえられる。上の 2 つの表式から $\tilde{\Delta} = -x(1-x)^{-1} \tilde{\Sigma}_I(i0^+)$ と表はされる。 $\tilde{\Sigma}_I$ は $\tilde{\Sigma}$ の虚部。電気伝導度は、同様に vertex part Λ の inter-site の項を無視すると、

$$\sigma = A \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} \frac{|\bar{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)|^2 + \gamma \tilde{\Delta}^2}{\bar{\Sigma}_I(\varepsilon+i0^+)}, \quad (9)$$

と書ける。したがって(7)式で $\varepsilon=0$, $T=0K$ ($T=0K$ は $\bar{\Sigma}(i0^+)=0$ に注意) として $\bar{\Delta}$ を求め、 $\bar{T}_K$ を定め、 $\bar{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)$ を与えられていゝとして、再び(7)式より $\bar{\Sigma}(\varepsilon+i0^+)$ を求めれば σ の計算ができることになる。以上の結果は $x \rightarrow 1$ で上記の pure な場合に一致し、 $x \rightarrow 0$ で 1 個の不純物の近接効果の結果に一致する。

$1-x \sim 0$ で $1-x$ の 1 次までの近似で R を求めると、 $T \gg \bar{T}_K$ で、

$$R = A' \frac{\tilde{\Delta}}{\bar{\Delta}} \left[\left(\sqrt{\log(T/\bar{T}_K) + a} + \log(T/\bar{T}_K) \right)^2 + \gamma \left(\sqrt{\log(T/\bar{T}_K) + a} - \log(T/\bar{T}_K) \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (10)$$

となり、 $(\bar{\gamma} = \gamma(\tilde{\Delta}/\bar{\Delta})^2)$, $T \ll \bar{T}_K$ では

$$R = A' Q(T/\bar{T}_K),$$

$$Q(0) = \frac{1-x}{\gamma} \cdot \frac{4}{3\pi^2}, \quad Q(T/\bar{T}_K) = \frac{8}{3\gamma} \left(\frac{\bar{\Delta}}{\tilde{\Delta}} \right) \left(\frac{T}{\bar{T}_K} \right)^2, \\ 1 \gg (T/\bar{T}_K)^2 \gg (1-x)\tilde{\Delta}/\pi^2\bar{\Delta},$$

で与えられることになる。

(4) はび(9)の結果をみると、低温で coherent な状態になっているが、高温でも一種の coherent な状態になっている。(5) はび(10)式の結果は $T \gg \bar{T}_K$, $\bar{T}_K$ で始めて独立な局在スピンの自由散乱の和という形になる。また(4) はび(9)の表式ではスケール則が成立っていない。 R の温度変化は $\bar{T}_K$ より $\bar{T}_K$ だけでは定まらず、パラメータ $\gamma\tilde{\Delta}^2$ を与えている。(9) 式では $x \rightarrow 0$ の極限で始めてスケール則が成立することになる。