Anderson Modelの厳密解

工学部　興　地　斐　男（吹田 4676）

金属中に微量に含まれた不純物の電子状態を記述するHamiltonian として，もっとも一般的に用いられているのがAnderson Model である。これは不純物上での電子－電子相互作用を簡単な形でとり入れたModelであり，近藤効果で用いられるS-d Hamiltonian を一般化したものと考えてよい。超伝導と並んで理論家達の興味を引いたresistance minimum の問題に近藤氏が磁性不純物を記述するs-d Hamiltonian を用いて説明を与えられたことは周知の事実であるが，このs-d Hamiltonian の日本人とのかかわりは深く，芳田氏，糟谷氏によってその性質がていねいに調べられていた。一方金属中の磁性不純物についてはフランスのFriedel 氏によって，やや異なる立場から，その電気的，磁気的性質が理論的に調べられていた。そのような情況のもので1961年にアメリカのAnderson氏により，より微視的な立場から導入されたModelがAnderson Modelと呼ばれているもので，次の様なHamiltonianで記述されるModelである。

$$H=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\, a^{+}_{k\sigma}\, a_{d\sigma}+\sum_{\sigma}\varepsilon_d\, a^{+}_{d\sigma}\, a_{d\sigma}$$

$$+\sum_{k\sigma}\left[V_k\, a^{+}_{k\sigma}\, a_{d\sigma}+V_k\, a^{+}_{d\sigma}\, a_{k\sigma}\right]+U a^{+}_{d\uparrow} a_{d\uparrow} a^{+}_{d\downarrow} a_{d\downarrow}$$

第1項は伝導電子の運動エネルギー，第2項は不純物原子のd軌道にある電子のエネルギー（簡単のため軌道縮退は無視），第3項はd軌道と伝導電子の状態間のとび移りを表わし，第4項はd電子間のクーロン相互作用を表わす。ただし簡単のためδ－関数型の相互作用とする。ここで$U=-2\varepsilon_d$ とし（これをsymmetric Anderson Modelと呼ぶ），さらにU→∞にしたのがs－d Hamiltonian と考えてよい。このAnderson Hamiltonian を用いてこれまでに種々の磁気的な物理量の計算がなされている。さらにこのHamiltonian は表面吸着子の電子状態，Valence mixing の問題等にも活用され，固体物理学の分野では最も大切なHamiltonian の一つと考えられている[1)]。

私自身も芳田先生の指導を受けた一人として，s-d Hamiltonian や Anderson Hamiltonian との付き合いは長い。しかしこのHamiltonian が厳密に解けるなどとは思ってもみなかった。それは私だけではなく，芳田先生も，他の著名な先生方も同じであったと思える。そのことは例えば，芳田氏編の「物理学会論文選集[2)]」，アメリカのWilson 氏達の長大な論文[3)]（2編でPhys. Rev.約80頁）を見れば推察できる。ところがこのAnderson Hamiltonianが厳密に解けるのではないかとの論文をソ連のWiegmann氏が書いたのである。彼はBethe Ansatz を用いて基本的な式を導き出しながら，その複雑さのため，s-d limit(s-d Hamiltonian) での帯磁率の計算のみを行った。

我々（共同研究者の川上則雄氏と私）はWiegmann氏の作った方程式を厳密に解く事を試みた。

Wiegmannの式とは[4)]

$$\exp(\mathrm{i}k_j L)=\prod_{\beta=1}^{M}\frac{\mathrm{i}B(k_j)-\mathrm{i}\Lambda_\beta-UV^2/2}{\mathrm{i}B(k_j)-\mathrm{i}\Lambda_\beta+UV^2/2}$$

$$\times\frac{1+\frac{1}{2}\mathrm{i}V^2/(k_j-\varepsilon_d)}{1-\frac{1}{2}\mathrm{i}V^2/(k_j-\varepsilon_d)},\quad j=1,\cdots,N.$$

$$-\prod_{j=1}^{N}\frac{\mathrm{i}B(k_j)-\mathrm{i}\Lambda_\alpha+UV^2/2}{\mathrm{i}B(k_j)-\mathrm{i}\Lambda_\alpha-UV^2/2}=\prod_{\beta=1}^{M}\frac{\mathrm{i}\Lambda_\alpha-\mathrm{i}\Lambda_\beta-UV^2}{\mathrm{i}\Lambda_\alpha-\mathrm{i}\Lambda_\beta+UV^2},\quad \alpha=1,\cdots,M.$$

である。記号の意味を説明する前に，この式を導くのに用いられた仮定について述べる。まず V_k は波数 k によらない。従って V_k は V と書く。さらに U，ε_d，$|V|$ は Fermi energy に比べて小さいとする。この2つの仮定から系は1次元になり，エネルギー ε_k は k の1次になることがわかる。しかも上の仮定は物理的にみて，モデルの一般性は失っておらず，また過去において計算された近似論の結果はすべて導き出せる。さて上式の記号の説明に移る。$B(k)=k(k-U-2\varepsilon_d)$，$L$ は一次元になった系の長さ，k_j は電子の quasi-momentum，Λ_α は spin に関係した変数，N は全電子数，M は up-spin をもった電子の総数である。不慣れなこともあって我々は Wiegmann の式を自分達で導き出すのに3ケ月以上もかかったことを付記する。次に上式から系の基底エネルギーを求めてみよう。

ここからは簡単のため $U=-2\varepsilon_d$，すなわち symmetric Anderson Model について述べる。まず上式を解いて，物理的に意味のある解を得るためには quasi-momentum k を実数ではなく複素数にしなければならないことがわかる。もし k を実数のままで問題を解き，$U\to 0$ の一体問題にして基底状態の電子分布を調べると，なんと Fermi 面より上にのみ電子がつまり，Fermi 面以下はからっぽという結果になる。すなわち実数 k は励起状態に対応しているのである。さて，基底状態は singlet になるので $N=2M$ となり，上式の thermodynamic limit をとると，次の積分方程式になることがわかる。[5)]

$$\int_B\frac{2UV^2\sigma(\Lambda')d\Lambda'}{(UV^2)^2+(\Lambda-\Lambda')^2}+2\pi\sigma(\Lambda)=A(\Lambda)+\frac{1}{L}Z(\Lambda)$$

ここで

$$A(\Lambda)=-2x'$$

$$Z(\Lambda)=-2\left[\frac{(x+\frac{1}{2}U)y'-(y-\frac{1}{2}V^2)x'}{(x+\frac{1}{2}U)^2+(y-\frac{1}{2}V^2)^2}-\frac{(x+\frac{1}{2}U)y'-(y+\frac{1}{2}V^2)x'}{(x+\frac{1}{2}U)^2+(y+\frac{1}{2}V^2)^2}\right],$$

$$x'\equiv dx/d\Lambda,\quad y'\equiv dy/d\Lambda,$$

$$x(\Lambda)=-\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Lambda+(\Lambda^2+U^2V^4/4)^{\frac{1}{2}}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$y(\Lambda)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[-\Lambda+(\Lambda^2+U^2V^4/4)^{\frac{1}{2}}\right]^{\frac{1}{2}}$$

である。積分領域Bは

$$N/L=2M/L=2\int_B \sigma(\Lambda)\,d\Lambda$$

から決める。そして上式からΛの分布関数$\sigma(\Lambda)$を求めればよい。$1/L$に比例した部分を拾い出した結果は

$$\sigma(\Lambda)=\frac{1}{4\pi L}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{V^2}{(k+\frac{1}{2}U)^2+\frac{1}{4}V^4}\times\frac{1}{UV^2}\ \mathrm{sech}\left[\frac{\pi(k^2-\Lambda)}{UV^2}\right]dk$$

となる。これを用いて不純物部分のground state energyは

$$E/L=\int_{-\infty}^{B_1}2x(\Lambda)\sigma(\Lambda)\,d\Lambda$$

と書ける。なおB_1の平方根が伝導電子のバンド幅の半分に対応した量になっている。

さらにmagnetic susceptibilityもcharge susceptibility も計算出来る。その式は[6]

$$\chi_m=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(1+c^2-4cx^2)e^{-\pi x^2}dx}{(1+c^2-4cx^2)^2+16c^3x^2}+\frac{\pi}{2}\frac{1}{\sqrt{c}}e^{\frac{\pi}{4}(c-\frac{1}{c})},$$

$$\chi_c=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(1+c^2+4cx^2)e^{-\pi x^2}dx}{(1+c^2+4cx^2)^2-16c^3x^2}$$

となる。ただし$c=U/V^2$で，χ_mもχ_c も$U=0$の値が1になる様にしてある。χ_mの第2項を見ると$U\sim0$で展開出来ない形になっている。またχ_mの第1項を強引に展開してやると山田氏によって摂動計算された答えを出すことができる。しかしこの項は$U\to\infty$では0になってしまう。一方s-d limitで出されていたmagnetic susceptibilityは$U\to\infty$にしてやると第2項から出てくる。それらの事を総合すると，芳田氏，山田氏を初め多くの人々によって展開された，Anderson Hamiltonian の摂動理論[2]は無理ではなかろうかと思う。すなわち$U=0$のみが例外で，このときのみ系は一体問題になり，Uがいかに小さい値であろうとも，s-d Hamiltonian (一部でKondo Hamiltonian とも呼ばれている）で記述される系で予想された多体効果が残っていると考えるべきであろう。しかもこのことは非常に当然のことのように思える。以上のことは何もsymmetric Anderson Hamiltonianに限らず$U\neq-2\varepsilon_d$ の場合にもいえることがわかっている。余談になるが，$U=0$から出発し$U\to\infty$ (s-d Hamiltonian)まで系を記述しうるという主張に対して，多少の疑問をもち，加藤氏と共にそのことについて調べていた私には[7]，上の事実はそのことをはっきりさせた点でも大変有意義な結果であった。

さらに低温での電子比熱係数の不純物部分 γ_{imp} は,

$$\gamma_{imp} = \frac{1}{2}(\chi_m + \chi_c)$$

と書ける。[6] そこで比 χ_m/γ_{imp} について考えてみると $U=0$ では $\chi_m=\chi_c=1$, したがって, この値は1。$U\to\infty$ では χ_m の第1項と χ_c は0になるから, この比の値は2になる。この結果はFermi流体, renormalization groupによる研究から予測されていたものであるがそれを正確に導いたことになる。[2] さらに我々は有限磁場のAsymmetric Anderson Hamiltonian($U \neq -2\varepsilon_d$)の計算を終え,[8] 現在は有限温度の計算を行っている。蛇足になるがこの計算では系列が2つある無限につながったnon-linear な積分方程式を解かなければならない。コンピューターの計算も大変である。

参考文献

1) 芳田 奎:磁性Ⅱ 朝倉書店(1972),またはC. Kittel:Quantnm Theory of Solid, John-Wiley and Sons (1963).

2) 芳田 奎編:物理学論文選集 193 日本物理学会(1976).

3) H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins and K. G. Wilson: phys. Rev. **B21**(1980) 1003, 1044.

4) P. B. Wiegmann:phys. Lett. **80A** (1980) 163.

5) N.Kawakami and A. Okiji:Phys Lett. **86A** (1981) 483.

6) N. Kawakami and A. Okiji:Solid State Commun. **43** (1982) 467.

7) A. Kato and A. Okiji:Tech. Rep. Osaka Uriv. **30** (1980) 351.

8) A. Okiji and N. Kawakami:J. Phys. Soc. Jpn. **51** (1982) No.10.