

Title	Anderson Modelの厳密解
Author(s)	興地, 斐男
Citation	大阪大学低温センターだより. 40 P.4-P.7
Issue Date	1982-10
Text Version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/11094/7111
DOI	
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/repo/ouka/all/>

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。そのような状況のもので 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。

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{d\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d a_{d\sigma}^\dagger a_{d\sigma} \\ + \sum_{k\sigma} [V_k a_{k\sigma}^\dagger a_{d\sigma} + V_k a_{d\sigma}^\dagger a_{k\sigma}] + U a_{d\uparrow}^\dagger a_{d\uparrow} a_{d\downarrow}^\dagger a_{d\downarrow}$$

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 $U = -2\epsilon_d$ とし (これを symmetric Anderson Model と呼ぶ)、さらに $U \rightarrow \infty$ 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⁾

$$\exp(ik_j L) = \prod_{\beta=1}^M \frac{iB(k_j) - iA_{\beta} - UV^2/2}{iB(k_j) - iA_{\beta} + UV^2/2} \\ \times \frac{1 + \frac{1}{2} iV^2/(k_j - \epsilon_d)}{1 - \frac{1}{2} iV^2/(k_j - \epsilon_d)}, \quad j=1, \dots, N.$$

$$- \prod_{j=1}^N \frac{iB(k_j) - iA_{\alpha} + UV^2/2}{iB(k_j) - iA_{\alpha} - UV^2/2} = \prod_{\beta=1}^M \frac{iA_{\alpha} - iA_{\beta} - UV^2}{iA_{\alpha} - iA_{\beta} + UV^2}, \quad \alpha=1, \dots, M.$$

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 $U, \epsilon_d, |V|$ 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。 $B(k) = k(k - U - 2\epsilon_d)$, L は1次元になった系の長さ, k_j は電子のquasi-momentum, A_{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ヶ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 $U = -2\epsilon_d$, 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、 $U \rightarrow 0$ 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⁾

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

ここで

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

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

$$x' \equiv dx/dA, \quad y' \equiv dy/dA,$$

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

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

である。積分領域 B は

$$N/L = 2M/L = 2 \int_B \sigma(A) dA$$

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

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

となる。これを用いて不純物部分の ground state energy は

$$E/L = \int_{-\infty}^{B_1} 2x(A) \sigma(A) dA$$

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 になる様にしている。 χ_m の第 2 項を見ると $U \sim 0$ 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 $U \rightarrow \infty$ 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 $U \rightarrow \infty$ にしてやると第 2 項から出てくる。こ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⁾ は無理ではなからうかと思う。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 $U \neq -2\epsilon_d$ 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 $U \rightarrow \infty$ (s-d Hamiltonian) まで系を記述す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,

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

と書ける。⁶⁾そこで比 $\chi_m/\gamma_{\text{imp}}$ 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. $U \rightarrow \infty$ 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: Quantum 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 Univ. **30** (1980) 351.
- 8) A. Okiji and N. Kawakami: J. Phys. Soc. Jpn. **51** (1982) No. 10.