

近藤効果 (完全版)

(作成日)2008/6/27

物理講義室・改 管理人

のまネコ (量産型)

<http://shrcat.blog91.fc2.com/>

目次

1	$s-d$ ハミルトニアン ^{の導出から近藤シングレットへ}	3
1.1	電気抵抗極小現象概要	3
1.2	有効ハミルトニアン ^{の導出}	4
1.3	$s-d$ モデル	9
2	電気抵抗極小現象 ^{の説明}	10
2.1	電気伝導度 ^{の導出}	10
2.2	一次摂動 ^{の範囲での計算}	11
2.3	二次摂動 ^{の範囲での計算}	15
2.4	電気抵抗 ^{の計算結果}	21
3	付録	22
3.1	二次摂動 ^{の計算の詳細}	22

1 $s-d$ ハミルトニアンからの近藤シングレットへ

1.1 電気抵抗極小現象概要

- 近藤効果とは

一般に不純物を含む金属の電気抵抗は、温度の低下とともに有限の残留抵抗の値に向かって下がっていくがその不純物が磁性不純物の場合は、電気抵抗がある温度で極値を取って、低温で電気抵抗が上昇し始めることがわかった。(これが近藤効果である。当時では、この現象を電気抵抗極小現象と呼んでいた。)

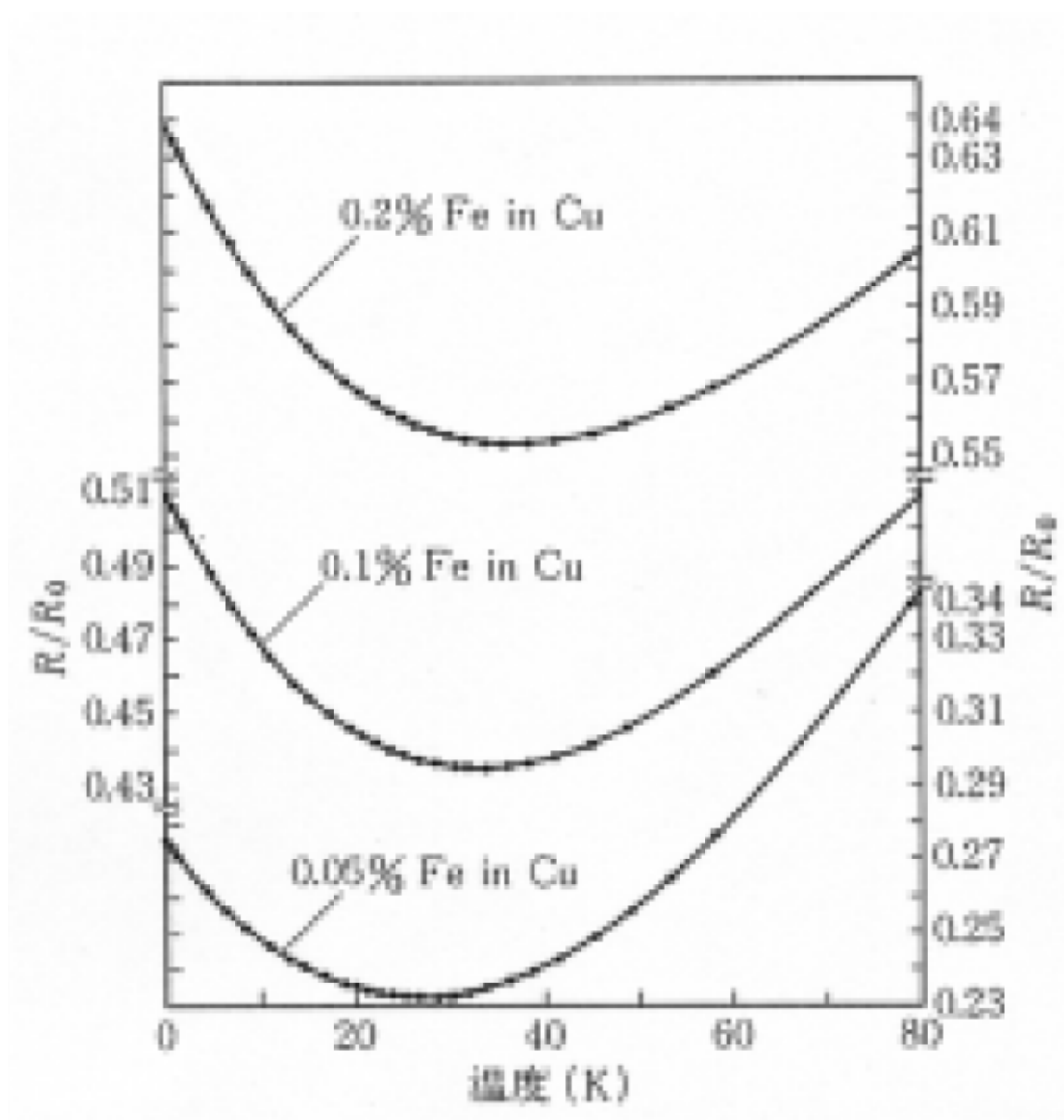


図1 電気抵抗極小現象概要

1.2 有効ハミルトニアン の 導出

この現象を解析するため下記の Anderson ハミルトニアンから $s-d$ モデル ($U \rightarrow \infty$ の有効ハミルトニアン) を導出する。

[Anderson ハミルトニアン]

$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \epsilon_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} d_{\uparrow} + \sum_{k\sigma} (V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + V_{dk} d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) \quad (1)$$

$$\mathcal{H}_{mix} \equiv \sum_{k\sigma} (V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + V_{dk} d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) \quad (\text{混成項}) \quad (2)$$

上のハミルトニアンにおいて、 $c_{k\sigma}^\dagger (c_{k\sigma}), d_{k\sigma}^\dagger (d_{k\sigma})$ はそれぞれ伝導電子と d 電子の生成 (消滅) 演算子である。周期的 Anderson モデルではこれらが $V_{k\sigma}$ で混成し、同じ原子内の d 電子間には Coulmb 相互作用 U が働くことを表している。このハミルトニアンを Coulmb エネルギーが十分大きく混成が小さい状況で混成項について二次の摂動展開を行い有効ハミルトニアン ($s-d$ モデル) を導出する。

Coulmb エネルギー U が十分大きい $\implies \epsilon_d < \epsilon_F, U + \epsilon_d > \epsilon_F$

つまり、 d 準位は \uparrow のスピンを持つ一つの電子によって占有されている (平均電子数 1) 二次摂動で Anderson より低エネルギー領域での有効ハミルトニアンを求める。

[一般的な二次摂動]

$$\sum_m \frac{\langle f | \mathcal{H} | m \rangle \langle m | \mathcal{H} | i \rangle}{E_i - E_m}, \quad |i\rangle = d_{\sigma}^\dagger |FS\rangle, \quad E_i = E_0 + \epsilon_d \quad (3)$$

$|i\rangle$ を始状態とし伝導電子の Fermi 球 $|FS\rangle$ と一つの d 電子からなるとする、 $|m\rangle$ を中間状態、 $|f\rangle$ を終状態とする。以下、具体的に摂動を行う。

d 電子を \uparrow と取ったとき、中間状態を経て始状態とエネルギーの近い終状態に至るには 4 つの過程がある。

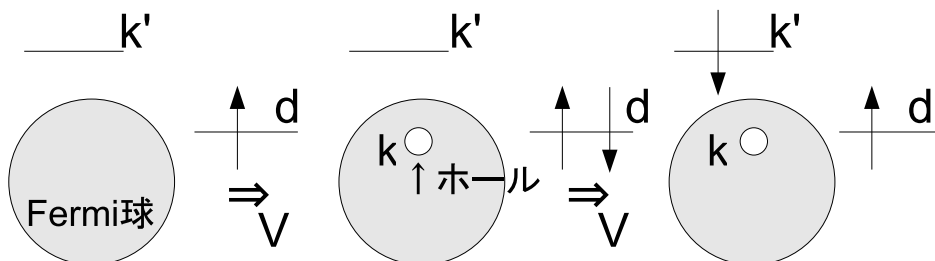


図 2 摂動過程 1

(k, \uparrow) 状態 (始状態エネルギー: $E_0 + \varepsilon_d$) の伝導電子を d 準位に移してから (中間状態エネルギー: $E_0 - \varepsilon_k + 2\varepsilon_d + U$)、電子を (k', \uparrow) 状態に移す。 d 準位には 電子が残る。(終状態)

この過程 (プロセス (1)) の有効ハミルトニアンを $\mathcal{H} \frac{1}{E_i - \mathcal{H}_0} \mathcal{H}$ で表す。

$$\begin{aligned} \text{プロセス (1)} &= \frac{V_{k'd}V_{dk}}{(E_0 + \varepsilon_d) - (E_0 - \varepsilon_k + 2\varepsilon_d + U)} c_{k'}^\dagger d d^\dagger c_k \\ &= \frac{V_{k'd}V_{dk}}{\varepsilon_k - U - \varepsilon_d} (c_{k'}^\dagger c_k - c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d) \end{aligned} \quad (4)$$

ただし、式変形の際 $\{c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'}$ (Fermi 演算子の反交換関係) を用いた。

プロセス (2): (1) の場合で始状態と終状態でスピンの向きが違う過程

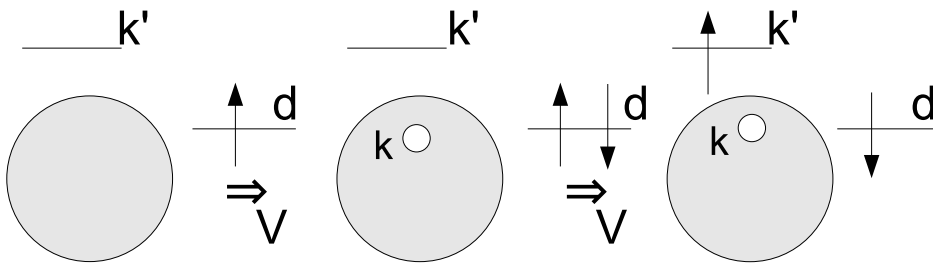


図3 摂動過程 2

$$\begin{aligned} \text{プロセス (2)} &= \frac{V_{k'd}V_{dk}}{\varepsilon - U - \varepsilon_d} c_{k'}^\dagger d d^\dagger c_k \\ &= -\frac{V_{k'd}V_{dk}}{\varepsilon_k - U - \varepsilon_d} c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d \end{aligned} \quad (5)$$

プロセス (3): d 準位の電子を (k', \uparrow) 状態に移してから (中間) (k, \uparrow) 状態の伝導電子を d 準位に移す。 d 準位には 電子が残る。(終)

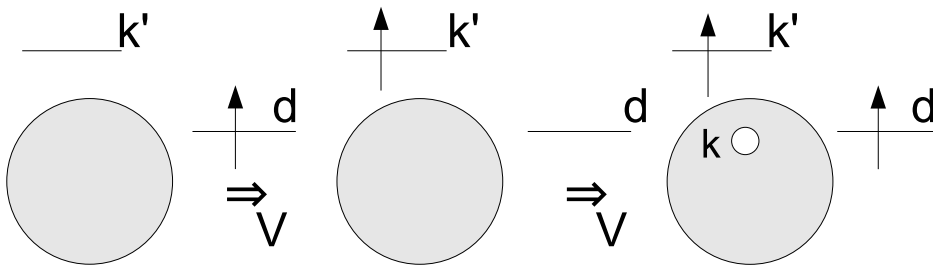


図4 摂動過程 3

$$\begin{aligned} \text{プロセス (3)} &= \frac{V_{dk}V_{k'd}}{E_0 + \varepsilon_d - (E_0 + \varepsilon_{k'})} d^\dagger c_k c_{k'}^\dagger d \\ &= \frac{V_{dk}V_{k'd}}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k'}} (d^\dagger d \delta_{kk'} - c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d) \end{aligned} \quad (6)$$

プロセス (4):(3) の場合で始状態と終状態でスピンの向きが違う場合

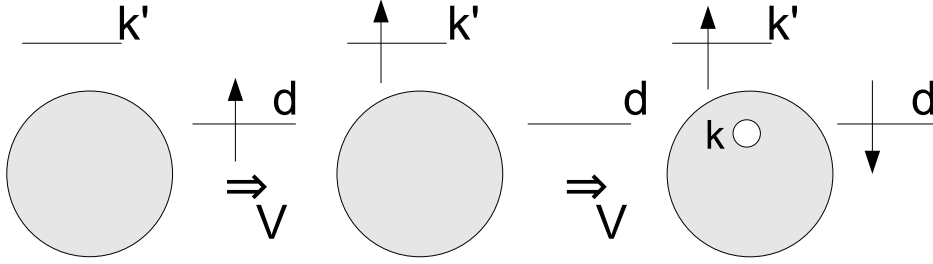


図5 摂動過程 4

$$\text{プロセス (4)} = -\frac{V_{dk}V_{k'd}}{\epsilon_d - \epsilon_{k'}} c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d \quad (7)$$

また、(1)~(4) の過程で始状態が の場合を考える。((1)'~(4)' とする)

$$(1)' = \frac{V_{k'd}V_{dk}}{\epsilon_k - U - \epsilon_d} (c_{k'}^\dagger c_k - c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d) \quad (8)$$

$$(2)' = \frac{V_{k'd}V_{dk}}{\epsilon_k - U - \epsilon_d} c_{k'}^\dagger d d^\dagger c_k \quad (9)$$

$$(3)' = \frac{V_{dk}V_{k'd}}{\epsilon_d - \epsilon_{k'}} (d^\dagger d \delta_{kk'} - c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d) \quad (10)$$

$$(4)' = \frac{V_{dk}V_{k'd}}{\epsilon_d - \epsilon_{k'}} d^\dagger c_k c_{k'}^\dagger d \quad (11)$$

よって、プロセス (1)~(4)、(1)'~(4)' 全ての過程を加えて、 k, k' について和をとると

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{s-d} = & \sum_{kk'} \frac{V_{k'd}V_{dk}}{\epsilon_d - \epsilon_k} (d^\dagger d + d^\dagger d) \delta_{kk'} + \sum_{kk'} \frac{V_{k'd}V_{kd}}{\epsilon_k - U - \epsilon_d} (c_{k'}^\dagger c_k + c_{k'}^\dagger c_k) \\ & - \sum_{kk'} \left(\frac{V_{k'd}V_{dk}}{\epsilon_k - U - \epsilon_d} + \frac{V_{k'd}V_{dk}}{\epsilon_d - \epsilon_{k'}} \right) (c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d + c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d + c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d + c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d) \end{aligned} \quad (12)$$

$s-d$ モデルハミルトニアンが得られる。また、ここで以下のような仮定をする。

d 軌道の広がりが小さいとして

$$V_{dk} \rightarrow V \quad (\text{混成の波数依存性を無視}) \quad (13)$$

つまり、実空間で同じサイトの s と d 電子が混成していると仮定する。

(本当は違う軌道 (違う方位量子数) は直交してゼロになってしまうはずだが、ここではそれを無視する。)

この仮定を踏まえると (12) 式は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{s-d} = & \sum_{kk'} \frac{V^2}{\varepsilon_d - \varepsilon_k} (d^\dagger d + d^\dagger d) \delta_{kk'} + \sum_{kk'\sigma} \frac{V^2}{\varepsilon_k - U - \varepsilon_d} c_\sigma^\dagger c_\sigma \\ & - \sum_{kk'} \left(\frac{V^2}{\varepsilon_k - U - \varepsilon_d} + \frac{V^2}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k'}} \right) (c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d + c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d + c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d + c_{k'}^\dagger c_k d^\dagger d) \end{aligned} \quad (14)$$

となる。ただし、変形の際に第 2 項を $c_{k'}^\dagger c_k + c_{k'}^\dagger c_k = \sum_\sigma c_\sigma^\dagger c_\sigma$ としてまとめた。

次に、 $s-d$ モデルハミルトニアンを直感的にわかりやすい形にするために、 d 電子演算子をスピン演算子 S_z, S_+, S_- を用いて書き直すことを考える。

$$S_z = \frac{1}{2} (d^\dagger d - d^\dagger d) *, \quad S_+ = d^\dagger d, \quad S_- = d^\dagger d \quad (15)$$

今、 $s-d$ モデルでは $U \rightarrow \infty$ となっているので d 電子の平均電子数は $1(n_d = d^\dagger d + d^\dagger d = 1)$ これを上 * 式に代入すると

$$\begin{aligned} d^\dagger d &= 2S_z + d^\dagger d \\ &= \frac{1}{2} + S_z \left(d^\dagger d = \frac{1}{2} - S_z \right) \end{aligned} \quad (16)$$

また、今 Fermi 面近傍での非常に狭い領域での伝導電子について考えているので

$$\varepsilon_k, \varepsilon_{k'} \ll U, |\varepsilon_d| \quad (\varepsilon_k, \varepsilon_{k'} \text{を無視}) \quad (17)$$

と近似する。(以後、 $\varepsilon_d < 0$ なので $-\varepsilon_d = |\varepsilon_d|$ とする。) この近似やスピン演算子により (14) 式を書き換えると

$$\begin{aligned} (14) = & - \sum_k \frac{V^2}{|\varepsilon_d|} - \sum_{kk'\sigma} \frac{V^2}{U + \varepsilon_d} c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \\ & - V^2 \sum_{kk'} \left(-\frac{1}{|\varepsilon_d|} - \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) \left\{ c_{k'}^\dagger c_k \left(\frac{1}{2} + S_z \right) + c_{k'}^\dagger c_k \left(\frac{1}{2} - S_z \right) + c_{k'}^\dagger c_k S_- + c_{k'}^\dagger c_k S_+ \right\} \end{aligned} \quad (18)$$

ここで、上式の第一項は伝導電子を含まないので無視する。すると (18) 式は

$$\begin{aligned} (18) = & -V^2 \sum_{kk'\sigma} \frac{1}{U + \varepsilon_d} c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{V^2}{2} \sum_{kk'\sigma} \left(\frac{1}{|\varepsilon_d|} + \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \\ & + V^2 \sum_{kk'} \left(\frac{1}{|\varepsilon_d|} + \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) \left\{ (c_{k'}^\dagger c_k - c_{k'}^\dagger c_k) S_z + c_{k'}^\dagger c_k S_- + c_{k'}^\dagger c_k S_+ \right\} \\ = & V^2 \sum_{kk'} \left(\frac{1}{|\varepsilon_d|} + \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) \left\{ (c_{k'}^\dagger c_k - c_{k'}^\dagger c_k) S_z + c_{k'}^\dagger c_k S_- + c_{k'}^\dagger c_k S_+ \right\} + \frac{V^2}{2} \sum_{kk'\sigma} \left(\frac{1}{|\varepsilon_d|} - \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \end{aligned} \quad (19)$$

となる。

今、(19) 式のように d 電子をスピン演算子を用いて表したわけだが、ここから更に解析を進め近藤シングレット (近藤 1 重項) を見るために d 電子 (スピン演算子) を含む第一項と d 電子を含まない第二項に分けて考える。第一項を exchange(交換) 項 \mathcal{H}_{ex} 、第二項を impurity(不純物) 項 \mathcal{H}_{imp} として定義すると

$$\mathcal{H}_{ex} = V^2 \sum_{kk'} \left(\frac{1}{|\varepsilon_d|} + \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) \left\{ (c_{k'}^\dagger c_k - c_{k'}^\dagger c_k) S_z + c_{k'}^\dagger c_k S_- + c_{k'}^\dagger c_k S_+ \right\} \quad (20)$$

$$\mathcal{H}_{imp} = \frac{V^2}{2} \sum_{kk'\sigma} \left(\frac{1}{|\varepsilon_d|} - \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (21)$$

となる。ここで、計算を簡単にするために以下のような仮定を行う。

[Particle hole symmetry(粒子正孔対称性)]

$$-\varepsilon_d = U + \varepsilon_d \quad (22)$$

電子とホールエネルギーが等しくなるときの式が成り立つ

この Particle hole symmetry が成り立つとき imp 項をゼロにすることができる。(実際に代入して容易に確かめられる) 残った ex 項について計算を進める。ex 項の演算子の部分を $S_\pm = S_x \pm iS_y$ を用いて以下のように書き換える。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ex} &= V^2 \sum_{kk'} \left(\frac{1}{|\varepsilon_d|} + \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) \left\{ (c_{k'}^\dagger c_k - c_{k'}^\dagger c_k) S_z + c_{k'}^\dagger c_k S_- + c_{k'}^\dagger c_k S_+ \right\} \\ &= V^2 \sum_{kk'} \left(\frac{1}{|\varepsilon_d|} + \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) \left\{ (c_{k'}^\dagger c_k + c_{k'}^\dagger c_k) S_x + i(c_{k'}^\dagger c_k - c_{k'}^\dagger c_k) S_y + (c_{k'}^\dagger c_k - c_{k'}^\dagger c_k) S_z \right\} \end{aligned} \quad (23)$$

ここで、Pauri のスピン行列 $\sigma_{\alpha\beta} = (\sigma_{\alpha\beta}^x, \sigma_{\alpha\beta}^y, \sigma_{\alpha\beta}^z)$ と $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ を用いて (23) 式を簡潔に表すことを考える。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [\text{Pauri のスピン行列}] \quad (24)$$

具体的に (23) 式の x 成分を書き直すと

$$(c_{k'}^\dagger c_k + c_{k'}^\dagger c_k) \sigma^x \begin{pmatrix} c_k \\ c_k \end{pmatrix} S_x = (c_{k'}^\dagger c_k + c_{k'}^\dagger c_k) S_x \quad (25)$$

となるので y, z 成分も同様に書き直すと (23) 式の ex 項は

$$\mathcal{H}_{ex} = -\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{kk'\alpha\beta} c_{k'\alpha}^\dagger \sigma_{k\beta} c_{k\beta} \cdot \mathbf{S} \quad (26)$$

と表せる。ただし、書き直す際に結合エネルギー J_{eff}

$$J_{eff} \equiv -2NV^2 \left(\frac{1}{|\varepsilon_d|} + \frac{1}{U + \varepsilon_d} \right) \quad (27)$$

を定義した。

1.3 s-d モデル

[s-d モデルの exchange 項]

$$\mathcal{H}_{ex} = -\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{kk'\alpha\beta} c_{k'\alpha}^\dagger \sigma_{c_{k\beta}} \cdot \mathbf{S} \quad (28)$$

今、 J_{eff} を負と定義しているので ex 項全体を負にする (エネルギーを低く) するためには $\sigma \cdot \mathbf{S} < 0$ となる必要がある。つまりこれは伝導帯全体の電子と d 準位の 1 つの電子が反強磁性的 (反平行) に並ぶことを表している (近藤シングレット)。

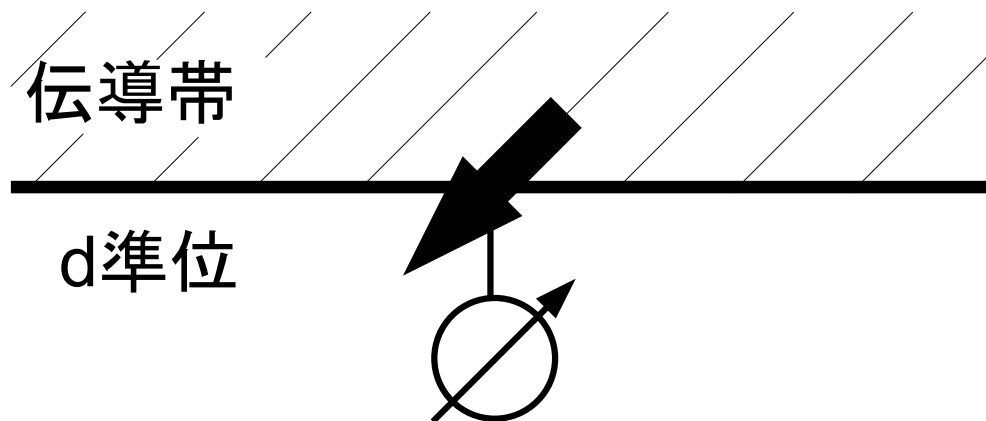


図 6 s-d モデル概念図

2 電気抵抗極小現象の説明

2.1 電気伝導度の導出

まず、Boltzmann 方程式より以下の電気伝導度 $\sigma(T)$ を導出する。

[電気伝導度]

$$\sigma(T) = \frac{1}{\Omega} \frac{e^2}{m} \frac{4}{3} \int d\epsilon_k \rho(\epsilon_k) \epsilon_k \tau(\epsilon_k) \left(-\frac{\partial f(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \quad (29)$$

$\tau(\epsilon_k)$ は電場により電流が流れているときの分布関数が Fermi 分布関数 $f(\epsilon_k) = \left(e^{\frac{\epsilon_k - \epsilon_F}{k_B T}} + 1 \right)^{-1}$ に緩和するまでの時間を表している。以下 (29) 式の導出を示す。

伝導電子の不純物原子局在スピンによる散乱によって生じる電気抵抗を考える。外部電場 $\mathbf{E} = (E, 0, 0)$ によって生じた、電子による電流密度 $j_{\uparrow, \downarrow}$ は

$$j_{\uparrow, \downarrow} = -\frac{e}{\Omega} \sum_k \frac{\hbar k_x}{m} \{f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k) - f_0(\epsilon_k)\} \quad (30)$$

と表される。 $f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)$: 外部電場により電流が流れている場合での Fermi 分布関数, $f_0(\epsilon_k)$: 電場の無い場合での Fermi 分布関数である。次に、Boltzmann 方程式

$$\frac{df_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)}{dt} = \frac{\partial f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)}{\partial t} + \frac{\partial k}{\partial t} \frac{\partial f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)}{\partial k} + \frac{\partial r}{\partial t} \frac{\partial f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)}{\partial r} = \left(\frac{\partial f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)}{\partial t} \right)_{\text{collision}} \quad (31)$$

において、中辺を定常状態: $\frac{\partial f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)}{\partial t} = 0$, 一様な系: $\frac{\partial f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)}{\partial r} = 0$ を仮定し、更に、Newton 方程式 $\left(\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right)$ より

$$\frac{\partial k}{\partial t} = -\frac{e}{\hbar} E \quad (32)$$

と書き直す。最右辺を平均寿命 $\tau_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)$ 後には、 $f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)$ は $f_0(\epsilon_k)$ に戻るとして

$$f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k) = f_0(\epsilon_k) + e^{-\frac{t}{\tau_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)}} \quad (33)$$

というような依存性を持つと仮定する。すると、Boltzmann 方程式は外場一次の範囲で

$$-\frac{eE}{\hbar} \left(\frac{\partial f_0(\epsilon_k)}{\partial k} \right) = -\frac{f_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k) - f_0(\epsilon_k)}{\tau_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_k)} \quad (34)$$

と書くことができる。書き直された Boltzmann 方程式の左辺を計算すると

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= -\frac{eE}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k} \left(\frac{\partial f_0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \\ &= \frac{\hbar^2 k}{m} \left(\frac{\partial f_0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \end{aligned} \quad (35)$$

となるので、これを元の (34) 式に代入すると

$$f_{\uparrow,\downarrow}(\varepsilon_k) - f_0(\varepsilon_k) = \frac{\tau_{\uparrow,\downarrow}(\varepsilon_k) e E \hbar k}{m} \left(\frac{\partial f_0(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} \right) \quad (36)$$

となる。これを (30) 式の電流密度の定義式に代入すると

$$(30) = -\frac{2e^2 E}{m\Omega} \sum_k \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \tau_{\uparrow,\downarrow}(\varepsilon_k) \left(\frac{\partial f_0(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} \right) \quad (37)$$

今、一様な系を考えているので $\frac{1}{3}\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ と書き換えることができる。また、具体的に計算を行うために状態和を状態密度 $\rho(\varepsilon_k)$ を用いて積分に書き換えると (37) 式は

$$(37) = -\frac{2e^2 E}{3m\Omega} \int d\varepsilon_k \rho(\varepsilon_k) \varepsilon_k \tau_{\uparrow,\downarrow}(\varepsilon_k) \left(\frac{\partial f_0(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} \right) \quad (38)$$

となる。 $j = \sigma E$ より ($j_{\uparrow} + j_{\downarrow} = 2j_{\uparrow,\downarrow}$)

$$\sigma = \frac{j_{\uparrow} + j_{\downarrow}}{E} = -\frac{4e^2 E}{3m\Omega} \int d\varepsilon_k \rho(\varepsilon_k) \varepsilon_k \tau_l(\varepsilon_k) \left(\frac{\partial f_0(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} \right) \quad (39)$$

が導かれる。

2.2 一次摂動の範囲での計算

次に、 $\tau_l(\varepsilon_k)$ を求めるために Fermi の黄金率を用いて一次摂動の範囲内での遷移確率を求める。

[Fermi の黄金率]

$$W[(k, \sigma) \rightarrow (k', \sigma')] = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k\sigma | T | k'\sigma' \rangle|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) \quad (40)$$

一次摂動の範囲での $(k, \sigma) \rightarrow (k', \sigma')$ への遷移確率を表わす (T : 遷移行列)

遷移行列 T は具体的に

$$T = \mathcal{H}_{ex} + \mathcal{H}_{ex} \frac{1}{E_i - \mathcal{H}_0} \mathcal{H}_{ex} + \dots \quad \left(\mathcal{H}_{ex} = -\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{kk'\alpha\beta} c_{k'\alpha}^\dagger \sigma c_{k\beta} \cdot \mathbf{S} \right) \quad (41)$$

と \mathcal{H}_{ex} を用いて表される。始状態の $|k\sigma\rangle$ は、Fermi 球 $|FS\rangle$ の外側に $(k\sigma)$ の電子がいる状態であり、そのエネルギーは Fermi 球のエネルギー E_0 と (k, σ) の伝導電子のエネルギーの和である。同様に終状態は Fermi 球の外側に (k', σ') の電子がいる状態となる。

$$|k\sigma\rangle = c_{k\sigma}^\dagger |FS\rangle \quad (42)$$

$$\langle k'\sigma'| = \langle FS| c_{k'\sigma'} \quad (43)$$

$$E_i = E_0 + \varepsilon_k \quad (44)$$

まず、 $(k, \uparrow) \rightarrow (k', \uparrow)$ の散乱過程の行列要素を計算する。

$$\begin{aligned} \langle k' \uparrow | \mathcal{H}_{ex} | k \uparrow \rangle &= \langle FS | c_{k' \uparrow} \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{k_1 k_2 \sigma \sigma'} c_{k_1 \sigma'}^\dagger \sigma_{\sigma \sigma'} c_{k_2 \sigma} \cdot \mathbf{S} \right) c_{k \uparrow}^\dagger | FS \rangle \\ &= -\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{k_1 k_2 \sigma \sigma'} \langle FS | c_{k' \uparrow} c_{k_1 \sigma'}^\dagger \sigma_{\sigma \sigma'} c_{k_2 \sigma} c_{k \uparrow}^\dagger | FS \rangle \cdot \mathbf{S} \end{aligned} \quad (45)$$

x, y, z 成分をそれぞれ計算する。 x 成分について

$$(x \text{ 成分}) = -\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{k_1 k_2} \langle FS | c_{k' \uparrow} (c_{k_1 \uparrow}^\dagger \sigma_{\uparrow \uparrow}^x + c_{k_1 \downarrow}^\dagger \sigma_{\downarrow \downarrow}^x c_{k_2 \uparrow} + c_{k_1 \downarrow}^\dagger \sigma_{\downarrow \downarrow}^x c_{k_2 \downarrow}) c_{k \uparrow}^\dagger | FS \rangle S_x \quad (46)$$

真空の定義 $c_{k\sigma} | FS \rangle = 0$, $\langle FS | c_{k\sigma}^\dagger = 0$ より

$$(46) = -\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{k_1 k_2} \langle FS | c_{k' \uparrow} c_{k_1 \uparrow}^\dagger \sigma_{\uparrow \uparrow}^x c_{k_2 \uparrow} c_{k \uparrow}^\dagger | FS \rangle S_x \quad (47)$$

Pauri のスピン行列より

$$\sigma_{\uparrow \uparrow}^x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (48)$$

となるので、 x 成分は結局

$$(x \text{ 成分}) = 0 \quad (49)$$

同様にして y 成分も

$$(y \text{ 成分}) = 0 \quad (50)$$

次に z 成分について計算を行う。真空の定義を用いると

$$(z \text{ 成分}) = -\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{k_1 k_2} \langle FS | c_{k' \uparrow} c_{k_1 \uparrow}^\dagger \sigma_{\uparrow \uparrow}^z c_{k_2 \uparrow} c_{k \uparrow}^\dagger | FS \rangle S_z \quad (51)$$

Pauri のスピン行列より

$$\sigma_{\uparrow \uparrow}^z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \quad (52)$$

となるので、 z 成分は

$$(z \text{ 成分}) = -\frac{J_{eff}}{2N} \langle FS | c_{k' \uparrow} c_{k \uparrow}^\dagger c_{k \uparrow} c_{k' \uparrow}^\dagger | FS \rangle S_z \quad (53)$$

更に、Fermi の反交換関係 $\{c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}\} = \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}$ を用いると z 成分は

$$(z \text{ 成分}) = -\frac{J_{eff}}{2N} S_z \quad (54)$$

と計算される。

$$\therefore \langle k' \uparrow | \mathcal{H}_{ex} | k \uparrow \rangle = -\frac{J_{eff}}{2N} S_z \quad (55)$$

次に、同様にして ($k \uparrow \rightarrow k' \downarrow$) の散乱過程の計算を行う。

$$\begin{aligned} \langle k' \downarrow | \mathcal{H}_{ex} | k \uparrow \rangle &= \langle FS | c_{k' \downarrow} \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{k_1 k_2 \sigma \sigma'} c_{k_1 \sigma'}^\dagger \sigma_{\sigma \sigma'} c_{k_2 \sigma} \cdot \mathbf{S} \right) c_{k \uparrow}^\dagger | FS \rangle \\ &= -\frac{J_{eff}}{2N} \sum_{k_1 k_2 \sigma \sigma'} \langle FS | c_{k' \downarrow} c_{k_1 \sigma'}^\dagger \sigma_{\sigma \sigma'} c_{k_2 \sigma} c_{k \uparrow}^\dagger | FS \rangle \cdot \mathbf{S} \end{aligned} \quad (56)$$

x 成分は

$$\sigma_{\uparrow \downarrow}^x = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \quad (57)$$

より

$$(x \text{ 成分}) = -\frac{J_{eff}}{2N} S_x \quad (58)$$

y 成分は

$$\sigma_{\uparrow \downarrow}^y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i \quad (59)$$

となるので

$$(y \text{ 成分}) = -\frac{J_{eff}}{2N} i S_y \quad (60)$$

z 成分は

$$\sigma_{\uparrow \downarrow}^z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (61)$$

となるので

$$(z \text{ 成分}) = 0 \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \therefore \langle k' \downarrow | \mathcal{H}_{ex} | k \uparrow \rangle &= -\frac{J_{eff}}{2N} (S_x + i S_y) \\ &= -\frac{J_{eff}}{2N} S_+ \end{aligned} \quad (63)$$

よって、一次摂動の範囲内での遷移確率は Fermi の黄金率を用いて

$$W^{(1)}[(k, \uparrow) \rightarrow (k', \uparrow)] = \frac{2\pi}{\hbar} \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_z^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) \quad (64)$$

$$W^{(1)}[(k, \uparrow) \rightarrow (k', \downarrow)] = \frac{2\pi}{\hbar} \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_- S_+ \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) \quad (65)$$

となることが分かる。スピン演算子 $S_z^2, S_- S_+$ の値に関しては常磁性を仮定して、スピンの向きについて平均をとる。 $\mathbf{S}^2 (= S_x^2 + S_y^2 + S_z^2)$ の固有値が $S(S+1)$ となることを使い

$$\bar{S}_z^2 = \frac{1}{3} S(S+1) \quad (66)$$

とする。同様にして、 $S_- S_+ = (S_x - i S_y)(S_x + i S_y) = S_x^2 + S_y^2$ なので

$$S_- \bar{S}_+ = \frac{2}{3} \quad (67)$$

とする。

緩和時間 $\tau(\epsilon_k)$ の逆数は、遷移確率 $W[(k, \sigma) \rightarrow (k', \sigma')]$ の全ての終状態の和で表せる。

$$\frac{1}{\tau(\epsilon_k)} = \sum_{k'} W[(k, \sigma) \rightarrow (k', \sigma')] \quad (68)$$

この状態和を状態密度 $\rho(\epsilon_k)$ を用いてエネルギー積分に書き直して計算する。(66),(67) を (64),(65) に代入し積分を計算すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau^{(1)}(\epsilon_k)} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S(S+1) \int d\epsilon_{k'} \rho(\epsilon_{k'}) \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \rho(\epsilon_k) \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S(S+1) \end{aligned} \quad (69)$$

となるので、緩和時間 $\tau(\epsilon_k)$ は

$$\tau^{(1)}(\epsilon_k) = \frac{\hbar}{2\pi\rho(\epsilon_k)S(S+1)} \left(-\frac{2N}{J_{eff}} \right)^2 \quad (70)$$

と求めることができる。よって、電気伝導度の式へ代入すると

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)} &= \frac{4e^2}{3\Omega m} \int \frac{\hbar\epsilon_k}{2\pi S(S+1)} \left(-\frac{2N}{J_{eff}} \right)^2 \left(-\frac{\partial f_0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) d\epsilon_k \\ &= \frac{1}{\Omega} \frac{2e^2\hbar}{3m\pi} \epsilon_F \left(-\frac{2N}{J_{eff}} \right) \frac{1}{S(S+1)} \end{aligned} \quad (71)$$

となる。ただし、式変形の際に

$$\left(-\frac{\partial f_0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \simeq \delta(\epsilon_F - \epsilon_k) \quad (T \ll T_F) \quad (72)$$

となることを用いた。故に電気抵抗は

$$R^{(1)} = \frac{3m\pi\Omega}{2e^2\hbar\epsilon_F} S(S+1) \quad (73)$$

となる。これは、Born 近似 (一次摂動) の範囲では電気抵抗が温度に依存せず、電気抵抗極小現象が説明できないことを示している。

2.3 二次摂動の範囲での計算

次に、摂動範囲を二次の範囲まで広げて考えてみる。まず、 $(k, \uparrow) \rightarrow (k', \uparrow)$ の摂動過程を考える。

(1) (k, \uparrow) の伝導電子を (k'', \uparrow) に移してから電子を (k', \uparrow) 状態に移す。⇒ スピン反転なし

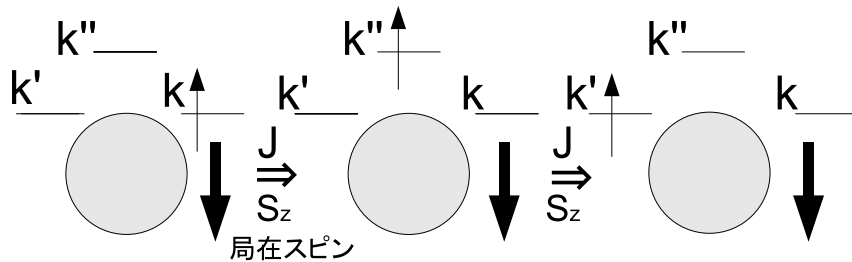


図7 摂動過程 1

$$(1) \text{ の過程} = \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_z^2 \sum_{k''} \langle k' \uparrow | \frac{c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k''\uparrow} c_{k''\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow}}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} | k \uparrow \rangle \quad (74)$$

(2) (k'', \uparrow) のホールと (k', \uparrow) の電子を生成 (k, \uparrow) の電子と (k', \uparrow) のホールが結合する。⇒ スピン反転なし

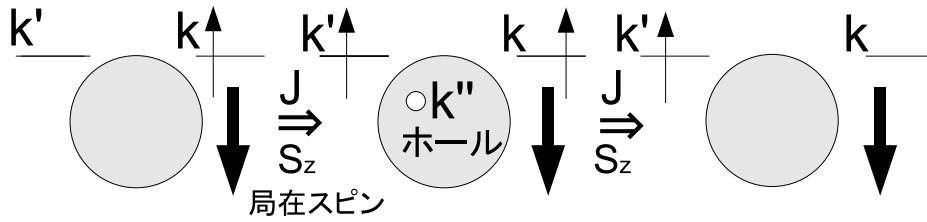


図 8 摂動過程 2

$$(2) \text{ の過程} = \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_z^2 \sum_{k''} \langle k' \uparrow | \frac{c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k''\uparrow}}{\epsilon_{k''} - \epsilon_{k'}} | k \uparrow \rangle \quad (75)$$

(3) (k, \uparrow) の伝導電子を (k'', \downarrow) に移してから電子を (k', \uparrow) 状態に移す。⇒ スピン反転あり

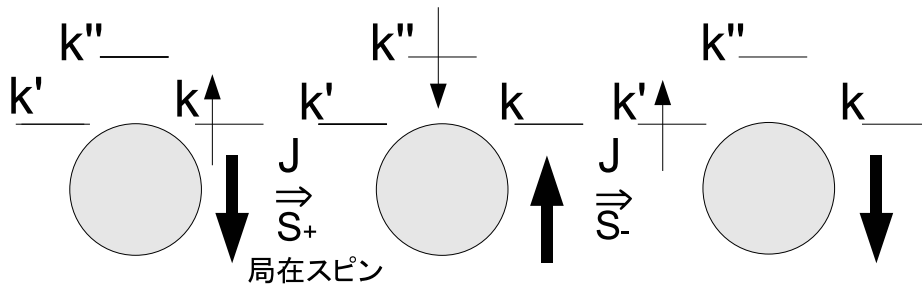


図 9 摂動過程 3

$$(3) \text{ の過程} = \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_- S_+ \sum_{k''} \langle k' \uparrow | \frac{c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k''\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} | k \uparrow \rangle \quad (76)$$

(k'', \downarrow) のホールと (k', \uparrow) の電子を生成してから (k, \uparrow) の電子と (k'', \downarrow) のホールが結合する。
⇒ スピン反転あり

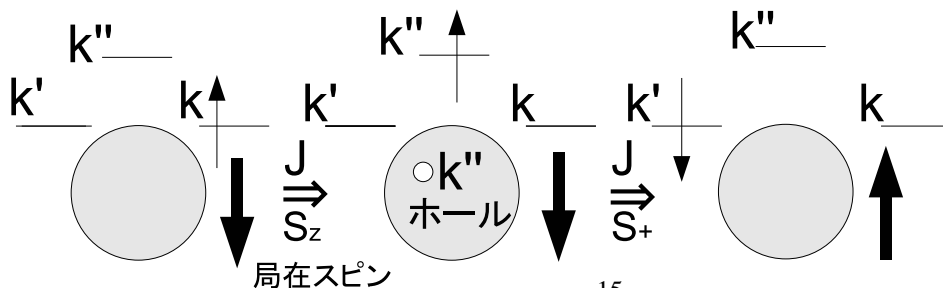


図 10 摂動過程 4

$$(4) \text{ の過程} = \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_- S_+ \sum_{k''} \langle k' \uparrow | \frac{c_{k''\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k''\downarrow}}{\varepsilon_{k''} - \varepsilon_{k'}} | k \uparrow \rangle \quad (77)$$

実は、二次摂動で初めて現れるこのスピン反転を伴う中間状態が近藤効果では重要なファクターとなっている。(S_z : 局在スピンの z 成分を変えない摂動, S_\pm : 局在スピンの z 成分を変える摂動)

(1),(2) の過程の寄与

$$\begin{aligned} (1) + (2) &= \left(\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_z^2 \sum_{k''} \left(\langle k' \uparrow | \frac{c_{k\uparrow}^\dagger c_{k''\uparrow} c_{k''\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow}}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k''}} | k \uparrow \rangle + \langle k' \uparrow | \frac{c_{k''\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k''\uparrow}}{\varepsilon_{k''} - \varepsilon_{k'}} | k \uparrow \rangle \right) \\ &= \left(\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_z^2 \sum_{k''} \left(\frac{1 - f(\varepsilon_{k''})}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k''}} + \frac{-f(\varepsilon_{k''})}{\varepsilon_{k''} - \varepsilon_k} \right) = \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_z^2 \sum_{k''} \frac{1}{\varepsilon_{k''} - \varepsilon_k} \end{aligned} \quad (78)$$

同様にして

$$\begin{aligned} (3) + (4) &= \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 \sum_{k''} \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k''}} \left(\frac{S_- S_+ + f(\varepsilon_{k''})(S_+ S_- - S_- S_+)}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k''}} \right) \\ &= \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 \sum_{k''} \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k''}} (S(S+1) + S_z(2f(\varepsilon_{k''}) - 1)) \end{aligned} \quad (79)$$

第一項は J_{eff}/ε_F が十分小さいと無視できるので

$$\therefore (3) + (4) = \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 \sum_{k''} \frac{2f(\varepsilon_{k''}) - 1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k''}} S_z \quad (80)$$

ただし、式変形の際に $[S_+, S_-] = 2S_z$

$$\langle k' \downarrow | c_{k\uparrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k''\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} | k \uparrow \rangle = 1 - f(\varepsilon_{k''}) \quad (81)$$

$$\langle k' \downarrow | c_{k''\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k''\downarrow} | k \uparrow \rangle = -f(\varepsilon_{k''}) \quad (82)$$

を用いた。

(78) より、中間状態にスピン反転を友和内課程からの寄与では $f(\varepsilon_{k''})$ が相殺して、他の電子の存在によらない一体問題として考えることができる。

(79) より、中間状態にスピンの反転を伴う課程では $f(\varepsilon_{k''})$ が現れていて、他の電子の存在が影響を与えることがわかる。つまり、内部自由度を持つ局在スピンによる電子の散乱は、一体問題として扱うことが許されない。

次に、 $(k, \uparrow) \rightarrow (k', \downarrow)$ の過程についての二次摂動を考える。

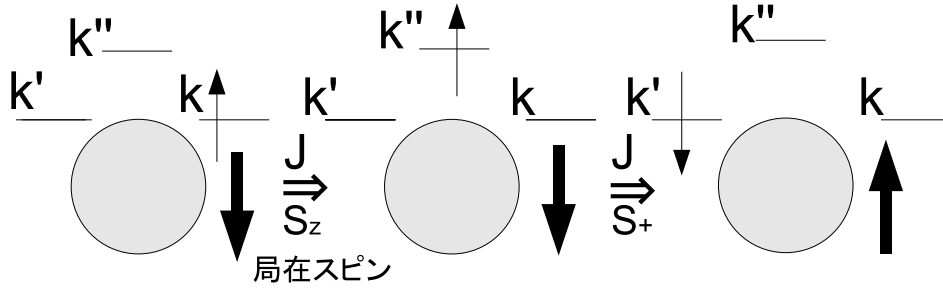


図 11 摂動過程 1'

$$(1') = \left(-\frac{J_{eff}}{2N}\right)^2 S_+ S_z \sum_{k''} \langle k' \downarrow | \frac{c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\uparrow}}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} | k \uparrow \rangle \quad (83)$$

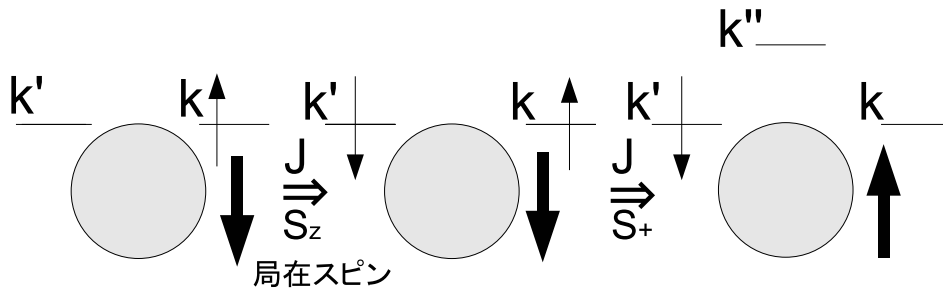


図 12 摂動過程 2'

$$(2') = \left(-\frac{J_{eff}}{2N}\right)^2 (-S_+ S_z) \sum_{k''} \langle k' \downarrow | \frac{c_{k''\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow}}{\epsilon_{k''} - \epsilon_{k'}} | k \uparrow \rangle \quad (84)$$

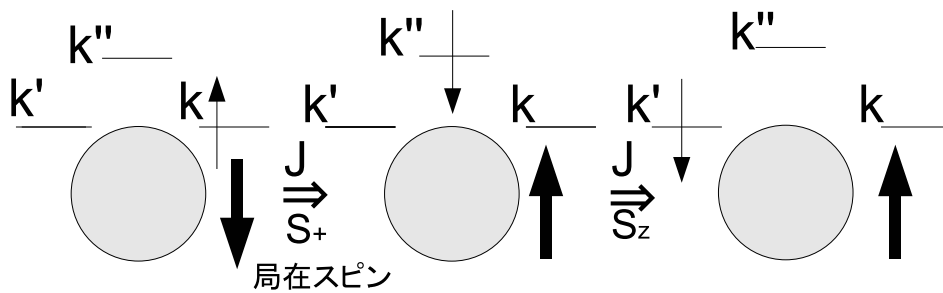


図 13 摂動過程 3'

$$(3') = \left(-\frac{J_{eff}}{2N}\right)^2 (-S_z S_+) \sum_{k''} \langle k' \downarrow | \frac{c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k''\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} | k \uparrow \rangle \quad (85)$$

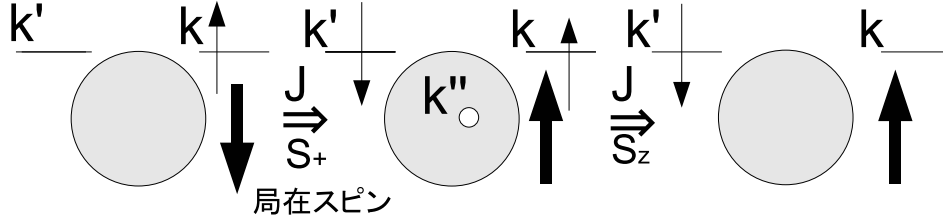


図 14 摂動課程 4'

$$(4') = \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_z S_+ \sum_{k''} \langle k' \downarrow | \frac{c_{k''\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow}}{\epsilon_{k''} - \epsilon_{k'}} | k \uparrow \rangle \quad (86)$$

$$\langle k' \downarrow | c_{k''\uparrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} | k \uparrow \rangle = 1 - f(\epsilon_{k''}) \quad (87)$$

$$\langle k' \downarrow | c_{k''\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} | k \uparrow \rangle = -f(\epsilon_{k''}) \quad (88)$$

を用いて (1') ~ (4') をまとめる。(k = k' とする)

$$\begin{aligned} (1') + (2') + (3') + (4') &= \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 \sum_{k'} \left(S_+ S_z \frac{1 - f(\epsilon_{k''})}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} + S_+ S_z \frac{-f(\epsilon_{k''})}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} - S_z S_+ \frac{1 - f(\epsilon_{k''})}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} - S_z S_+ \frac{-f(\epsilon_{k''})}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} \right) \\ &= \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 \sum_{k'} \left(\frac{1 - f(\epsilon_{k''})}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} [S_+, S_z] - \frac{f(\epsilon_{k''})}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} [S_+, S_z] \right) \\ &= \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_+ \sum_{k''} \frac{2f(\epsilon_{k''}) - 1}{\epsilon_k - \epsilon_{k''}} \end{aligned} \quad (89)$$

ただし、変形の際に $[S_+, S_z] = -S_+$ となることを用いた。

よって、これらをまとめることにより摂動の二次までの遷移行列の表記が得られる。

$$(k, \uparrow) \rightarrow (k', \uparrow) \quad \langle k' \uparrow | T | k \uparrow \rangle = S_z (1 + J_{eff} g(\epsilon_k)) \quad (90)$$

$$(k, \uparrow) \rightarrow (k', \downarrow) \quad \langle k' \downarrow | T | k \uparrow \rangle = S_+ (1 + J_{eff} g(\epsilon_k)) \quad (91)$$

ただし

$$g(\epsilon_k) \equiv \frac{1}{2N} \sum_{k''} \frac{2f(\epsilon_{k''}) - 1}{\epsilon_{k''} - \epsilon} \quad (92)$$

とする。g(ε) の詳しい計算は巻末の付録に譲る。(92) の計算結果は

$$g(\epsilon) = \begin{cases} \rho \ln\left(\frac{|\epsilon|}{D}\right) & (|\epsilon| \gg k_B T) \\ \rho \ln\left(\frac{\pi k_B T}{2e^\gamma D}\right) & (|\epsilon| \ll k_B T) \end{cases} \quad (93)$$

となる。ただし、ここで γ は Euler の定数であり D はバンド幅を表す量である。g(ε) は、 $k_B T$ と $|\epsilon|$ の大きい方の対数を考える特異な関数である。これより、摂動の二次までの遷移確率は

$$W^{(2)}[(k, \uparrow) \rightarrow (k', \uparrow)] = \frac{2\pi}{\hbar} \left(-\frac{J_{eff}}{2N} \right)^2 S_z^2 (1 + J_{eff} g(\epsilon_k))^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) \quad (94)$$

$$W^{(2)}[(k, \uparrow) \rightarrow (k', \downarrow)] = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{-J_{eff}}{2N} \right)^2 S_- S_+ (1 + J_{eff}g(\epsilon_k))^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) \quad (95)$$

局在スピンの平均化を行い $W[(k, \sigma) \rightarrow (k', \sigma')]$ の全ての終状態の和をとり $\tau(\epsilon_k)$ の逆数を求める。

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau^2(\epsilon_k)} &= \int d\epsilon_{k'} \rho(\epsilon_{k'}) \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{-J_{eff}}{2N} \right)^2 S(S+1) \{1 + J_{eff}g(\epsilon_k)\}^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \rho(\epsilon_k) \left(\frac{-J_{eff}}{2N} \right)^2 S(S+1) \{1 + J_{eff}g(\epsilon_k)\}^2 \end{aligned} \quad (96)$$

この (96) 式を電気伝導の式 (26) 式へ代入する。

$$\sigma(\tau) = \frac{4e^2\hbar}{3\Omega m 2\pi} \frac{1}{S(S+1)} \int d\epsilon_k \frac{\epsilon_k}{(1 + J_{eff}g(\epsilon_k))^2} \left(-\frac{\partial f(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \quad (97)$$

ここで、Fermi 分布関数の微分を

$$-\frac{\partial f(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \approx \delta(\epsilon_F - \epsilon_k) \quad (\because k_B T \ll |\epsilon_k|) \quad (98)$$

と近似を行い積分を実行する。

$$(97) = \frac{1}{\Omega} \frac{2e^2\hbar}{3m\pi} \epsilon_F \left(\frac{-2N}{J_{eff}} \right)^2 \frac{1}{S(S+1)} [1 + J_{eff}g(\epsilon_F)]^2 \quad (99)$$

(71) 式の第一次摂動の範囲での電気伝導度を σ_B とすると (99) 式は

$$(99) = \sigma_B \left(1 + J_{eff}\rho \ln \frac{k_B T}{D} \right)^{-2} \quad (100)$$

の様に書き換えられる。ただし、変形の際に

$$g(\epsilon_F) \approx \rho \ln \frac{\pi k_B T}{2e\gamma D} \sim \rho \ln \frac{k_B T}{D} \quad (101)$$

を用いた。また、電気抵抗は電気伝導度の逆数なので

$$R(T) = \frac{1}{\sigma_B} \left(1 + J_{eff}\rho \ln \frac{k_B T}{D} \right)^2 \quad (102)$$

更に

$$\left(1 + J_{eff}\rho \ln \frac{k_B T}{D} \right)^2 \approx 1 + 2J_{eff}\rho \ln \frac{k_B T}{D} \quad (J_{eff} \ll \epsilon_F) \quad (103)$$

と展開することにより

$$(102) \approx 1 + 2J_{eff}\rho \ln \frac{k_B T}{D} \quad (104)$$

が得られる。

2.4 電気抵抗の計算結果

- $J_{eff} < 0$ であるので、電気抵抗は $k_B T \sim D$ 程度の高温での値 R_B から、温度が下がるにつれて、 $-\ln \frac{k_B T}{D}$ に従って増加することになる。格子の熱振動からの電気抵抗が T^5 に比例することと合わせて考えると、ある温度で電気抵抗が極小値をもつことになり電気抵抗極小現象を説明できる。
- 電気抵抗の対数異常は、スピン演算子の非可換性と Fermi 面の存在によるものであることがわかる。すなわち、電気抵抗極小効果は量子多体効果によるものである。

全電気抵抗を $R_A(T)$ とすると、 $R_A(T)$ は格子の熱振動からの項 (係数を a とする) と $s-d$ 交換相互作用による対数項 (係数を $R_1 > 0$ とする) と不純物による残留抵抗 (R_0 とする) から、次のように表される。

$$R_A = aT^5 + cR_0 - cR_1 \ln T \quad (c: \text{不純物濃度}) \quad (105)$$

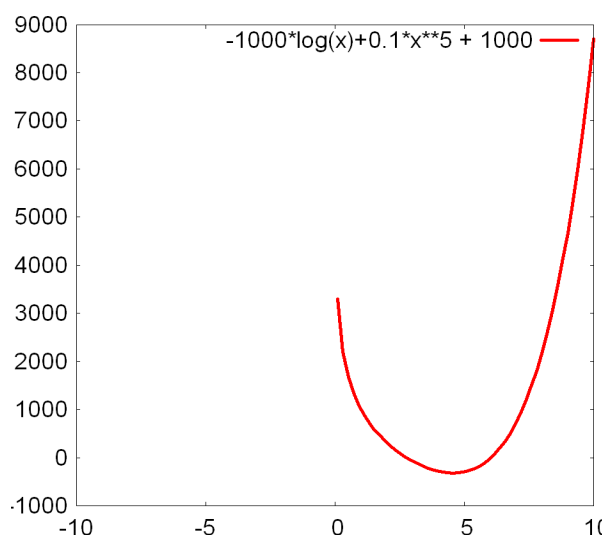


図 15 (105) 式のグラフ

- $-\ln T$ の寄与で原点付近で電気抵抗が増加して、結果極値を持つことがわかる。

これより、極値を計算すると

$$\frac{dR_A(T)}{dT} = 5aT^4 - \frac{cR_1}{T} = 0 \quad (106)$$

$$T_{min} = \left(\frac{R_1}{5a} \right)^{1/5} c^{1/5} \quad (107)$$

不純物濃度の $1/5$ 乗に比例するので、 T_{min} はあまり不純物に依らない。これは、極少量の不純物によって、かなり高温 ($10 \sim 20K$) に電気抵抗の極小が見られる実験事実とも対応している。

3 付録

3.1 二次摂動の計算の詳細

具体的な計算に入る前に必要な特殊関数を定義しておく

[ガンマ関数]

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \quad (108)$$

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (\text{ガンマ関数の数表示}) \quad (109)$$

$$\Gamma(z+1) = z! \quad (110)$$

[ゼータ関数]

$$\zeta(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^z} \quad (111)$$

ここでは、深くは触れないが、 z が偶数の場合には解析的に計算することができて $\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$ となる。

[Euler の定数]

$$\gamma \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \ln n \right] = 0.5772156 \dots \quad (112)$$

以下、二次摂動に関する関数 $g(\varepsilon)$ の計算を行う。

[二次摂動の解析的な計算]

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{2N} \sum_{k''} \frac{2f(\varepsilon_{k''}) - 1}{\varepsilon_{k''} - \varepsilon} \quad (113)$$

まず、状態和を状態密度 $\rho(\varepsilon')$ を用いて積分に書き直す。その際に、積分範囲を D (バンド幅に対応する量) を目安に打ち切る。

$$(113) = \frac{1}{2} \int_{-D}^D d\varepsilon' \{1 - 2f(\varepsilon')\} \frac{\rho(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon'} \quad (114)$$

ここで、 $|\varepsilon|, k_B T \ll \varepsilon_F$ より状態密度を

$$\rho(\varepsilon) \equiv \begin{cases} \rho & (|\varepsilon| \leq D) \\ 0 & (|\varepsilon| \geq D) \end{cases} \quad (115)$$

と仮定して ρ を積分の外へ出して計算する。

$$(114) = \frac{\rho}{2} \left(-(1-2f(D)) \ln|\varepsilon - D| + (1-2f(D)) \ln|\varepsilon + D| - 2 \int_{-D}^D d\varepsilon' \frac{df(\varepsilon')}{d\varepsilon'} \ln|\varepsilon - \varepsilon'| \right) \\ \approx \frac{\rho}{2} \left(-\ln|\varepsilon - D| - \ln|\varepsilon + D| + 2 \int_{-D}^D d\varepsilon' \ln|\varepsilon - \varepsilon'| \left(-\frac{df(\varepsilon')}{d\varepsilon'} \right) \right) \quad (116)$$

ただし、変形の際に $f(D) \approx 0, f(D) \approx 1$ を用いた。(116) 式の最右辺括弧内第三項の積分を以下の様に I と置いて計算する。

$$I \equiv 2 \int_{-D}^D d\varepsilon' \ln|\varepsilon - \varepsilon'| \left(-\frac{df(\varepsilon')}{d\varepsilon'} \right) \quad (117)$$

$|\varepsilon'| \gg k_B T$ の範囲では $\left(-\frac{df(\varepsilon')}{d\varepsilon'} \right) \approx \delta(\varepsilon')$ となるので

$$I \approx 2 \ln|\varepsilon| \quad (118)$$

と表せる。また、 $|\varepsilon| \ll k_B T$ の範囲では Fermi 分布関数の微分が

$$\left(-\frac{df(\varepsilon')}{d\varepsilon'} \right) = \frac{1}{4k_B T \cosh^2\left(\frac{\varepsilon'}{2k_B T}\right)} \quad (119)$$

となることと $|\varepsilon| \ll k_B T \rightarrow \varepsilon \approx 0$ とを用いると

$$I \approx \frac{1}{2} \left(\ln(k_B T) \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{x}{2}\right)} + \int_{-\infty}^{\infty} dx \ln\left| \frac{\varepsilon}{k_B T} \right| \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{x}{2}\right)} \right) \\ = 2 \ln|k_B T| + \int_0^{\infty} dx \ln|x| \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{x}{2}\right)} \quad (120)$$

と計算される。ただし、 $\varepsilon' = k_B T$ として変数変換を行った。(120) 式の積分を計算するために

$$I_n \equiv \int_0^{\infty} \frac{z^{n-1}}{\cosh^2(z)} dz \quad (121)$$

という積分を考える。

$$(121) = 4 \int_0^{\infty} z^{n-1} e^{-2z} (1 + e^{-2z})^{-2} dz \quad [2z = t \text{ として変数変換を行う}] \\ = 2 \int_0^{\infty} \left(\frac{t}{2}\right)^{n-1} e^{-t} (1 + e^{-t})^{-2} dt \quad [(1 + e^{-t}) = \sum_k (-1)^{k+1} k e^{-t(k-1)} \text{ と展開する}] \\ = 2^{2-n} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \int_0^{\infty} k t^{n-1} e^{-kt} dt \quad [\text{積分の部分を (108) で紹介したガンマ関数に帰着させる}] \\ = 2^{2-n} \Gamma(n) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k^{n-1}} \quad (122)$$

更に、最右辺の和の部分を変ゼータ関数で置き換えるが、その際にまず

$$\phi(n) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k^n} \quad (123)$$

という関数を定義して、この関数とゼータ関数の差を考える。

$$\begin{aligned}
\zeta(n) - \phi(n) &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^n} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k^n} \quad [\text{和の部分について、それぞれ奇数項と偶数項にわけける}] \\
&= \sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{1}{(2l)^r} + \frac{1}{(2l-1)^r} \right] - \sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{-1}{(2l)^r} + \frac{1}{(2l-1)^r} \right] \quad [\text{奇数項がキャンセルされる}] \\
&= \frac{1}{2^{r-1}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^r} = \frac{1}{2^{r-1}} \zeta(n)
\end{aligned} \tag{124}$$

よって

$$\phi(n) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k^n} = (1 - 2^{1-n}) \zeta(n) \tag{125}$$

となるので (122) 式は最終的にゼータ関数を用いて

$$(122) = \int_0^{\infty} \frac{z^{n-1}}{\cosh^2(z)} dz = 2^{2-n} \Gamma(n) (1 - 2^{2-n}) \zeta(n-1) \tag{126}$$

と表せる。次に (126) 式の両辺を n で微分する。

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{\cosh^2(z)} \frac{dz^{n-1}}{dn} dz = \frac{d}{dn} \{ 2^{2-n} \Gamma(n) (1 - 2^{2-n}) \zeta(n-1) \} \tag{127}$$

$$(127) \text{ 左辺} = \int_0^{\infty} \frac{z^{n-1} \ln z}{\cosh^2(z)} dz \quad [\text{対数微分を行った}] \tag{128}$$

$$\begin{aligned}
(127) \text{ 右辺} &= 2^{2-n} \ln 2 \Gamma(n) (1 - 2^{2-n}) \zeta(n-1) + 2^{2-n} \frac{d\Gamma(n)}{dn} (1 - 2^{2-n}) \zeta(n-1) \\
&\quad + 2^{2-n} \Gamma(n) 2^{2-n} \ln 2 \zeta(n-1) + 2^{2-n} \Gamma(n) (1 - 2^{2-n}) \frac{d\zeta(n-1)}{dn}
\end{aligned} \tag{129}$$

ここでガンマ関数の微分を計算するためにジ・ガンマ関数 $\psi(n)$ を定義しておく

$$\psi(n) \equiv \frac{1}{\Gamma(n)} \frac{d\Gamma(n)}{dn} = -\gamma - \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{m+n} - \frac{1}{m+1} \right) \tag{130}$$

ただし、変形の際に Weierstrass の無限乗積を用いた。

$$(129) = 2^{2-n} \Gamma(n) \left[\ln 2 (2^{3-n} - 1) \zeta(n-1) \ln 2 + (1 - 2^{2-n}) \left(\psi(n) \zeta(n-1) + \frac{d\zeta(n-1)}{dn} \right) \right] \tag{131}$$

$$\therefore \int_0^{\infty} \frac{z^{n-1}}{\cosh^2(z)} dz = 2^{2-n} \Gamma(n) \left[\ln 2 (2^{3-n} - 1) \zeta(n-1) \ln 2 + (1 - 2^{2-n}) \left(\psi(n) \zeta(n-1) + \frac{d\zeta(n-1)}{dn} \right) \right] \tag{132}$$

特に、 $n=1$ のとき上式は $\Gamma(1) = 1$, $\zeta(0) = -1/2$, $\frac{d\zeta(0)}{dn} = -\frac{1}{2} \ln(2\pi)$, $\psi(1) = -\gamma$ より

$$\int_0^{\infty} \frac{\ln z}{\cosh^2(z)} dz = \ln \left(\frac{\pi}{4e^{\gamma}} \right) \tag{133}$$

となる。よって、まとめると I は範囲別に

$$I = \begin{cases} 2 \ln \left(\frac{\pi k_B T}{2e^{\gamma}} \right) & (|\varepsilon| \ll k_B T) \\ 2 \ln |\varepsilon| & (|\varepsilon| \gg k_B T) \end{cases} \tag{134}$$

よって、(93) 式のように $g(\varepsilon)$ が求まることがわかる。

参考文献

- [1] 近藤 淳「金属電子論」裳華房
- [2] 芳田 奎「磁性」岩波書店
- [3] 上田 和夫, 大貫 惇睦「重い電子系の物理」裳華房
- [4] 伊達 宗行「大学院 物性物理 2」講談社サイエンティフィク
- [5] 丹羽 雅昭「超伝導の基礎」東京電機大学出版局
- [6] 後藤 憲一, 山本 邦夫, 神吉 健「物理応用 数学演習」共立出版株式会社
- [7] 小野寺 嘉孝「物理のための 応用数学」裳華房