強磁性半導体中の伝導電子状態 III

── s-f 交換相互作用の T 行列要素 ──

高　橋　正　雄*

Conduction Electron States in Ferromagnetic Semiconductors III

── T Matrix Elements of s-f Exchange Interaction ──

Masao TAKAHASHI

Abstract

The t-matrix elements of s-f exchange interaction are calculated exactly, which play essential role of multipli-scattering in magnetic semiconductor. The physical meanings of derived results are discussed by diagram method. The applications to para-magnetic temparture region and CPA are also discussed.

1. は じ め に

我々は前の論文 I と II において，完全結晶をなす強磁性半導体中の伝導電子状態についていろいろと議論をした。その中でわかったことは，IS/W の広い範囲をカバーする理論を構築するためには，1 サイトでの多重散乱をきちんと取り込まなければならない，ということである。このためには，t 行列の具体的表式を求めておく必要がある。

$T>T_C$ での t 行列については，すでに，論文 II の中でその表式を与えた。一方 $T<T_C$ においては自発磁化が生ずるため，複雑である。ここでは，z 方向に自発磁化があるものとして，全温度領域に適用できる t 行列の表式を導出する。

2. t 行列の導出

$\boldsymbol{l}$ サイトでの多重散乱を示す t 行列 $\boldsymbol{t}_l$ は

$$\boldsymbol{t}_l=\boldsymbol{v}_l[\boldsymbol{1}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{v}_l]^{-1} \tag{1}$$

で定義される。

平成 2 年 9 月 28 日受理
* 一般教育学科

ここで $\boldsymbol{v}_l$ は

$$\boldsymbol{v}_l=-I\sum_{\mu\nu}a_{l\mu}^{+}\boldsymbol{\sigma}_{\mu\nu}\boldsymbol{S}_l a_{l\nu}-\sum_{\mu}\Sigma_{\mu}a_{l\mu}^{+}a_{l\mu} \tag{2}$$

である。(特に断わり書きがない限り，表記法は前論文 II に準ずるものとする)。

$\boldsymbol{v}_l$ と $\boldsymbol{t}_l$ は f スピン演算子 $\boldsymbol{S}_l$ を含み，一般に非可換である。それに対し，$\boldsymbol{P}$ は f スピン演算子 $\boldsymbol{S}_l$ を含んでいないから，$\boldsymbol{t}_l$ や $\boldsymbol{v}_l$ と可換である。

$\boldsymbol{v}_l$ と $\boldsymbol{t}_l$ は，s 電子状態をワニエ表示 $|\boldsymbol{l}\rangle$ で表したとき，その行列要素は，$\boldsymbol{l}$ サイトについて対角要素のみをもち，非対角要素を持たない。そのため，(1) 式を展開したときに，$\boldsymbol{l}$ サイト以外の行列要素がでることはない。そこで，混同を生じないと思われるので以下ではサイト表示の $\boldsymbol{l}$ を省略し，次のような略記号を使用する。表式の中の ↑，↓ は s 電子スピンの向きに対応している。

$\boldsymbol{v}$ の行列要素を書き下せば，

$$v_{\uparrow\uparrow}=\langle\boldsymbol{l}\uparrow|\boldsymbol{v}_l|\boldsymbol{l}\uparrow\rangle=-IS_{lz}-\Sigma_{\uparrow} \tag{3.a}$$
$$v_{\downarrow\downarrow}=\langle\boldsymbol{l}\downarrow|\boldsymbol{v}_l|\boldsymbol{l}\downarrow\rangle=+IS_{lz}-\Sigma_{\downarrow} \tag{3.b}$$
$$v_{\uparrow\downarrow}=\langle\boldsymbol{l}\uparrow|\boldsymbol{v}_l|\boldsymbol{l}\downarrow\rangle=-IS_{l-} \tag{3.c}$$
$$v_{\downarrow\uparrow}=\langle\boldsymbol{l}\downarrow|\boldsymbol{v}_l|\boldsymbol{l}\uparrow\rangle=-IS_{l+} \tag{3.d}$$

である (以下で引用するときには (3) 式中の S_l の $\boldsymbol{l}$ 表示も省略する)。

$\boldsymbol{t}$ と $\boldsymbol{P}$ についても (3) 式に準じて電子スピンの向きで行列要素を表示する。

$\boldsymbol{P}$ については，s電子のスピンは保存されるから $P_{\uparrow\uparrow}$ と $P_{\downarrow\downarrow}$ しか行列要素がない。

以上のことを念頭において，(1) 式の行列要素を書き下すわけだが，(1) 式のままだと逆演算子が含まれているので，(1) 式を書き直す。両辺に右側から $(\mathbf{1}-\boldsymbol{Pv})$ をかけると，

$$\boldsymbol{t}(\mathbf{1}-\boldsymbol{Pv})=\boldsymbol{v} \tag{4}$$

となる。(4) 式の行列要素のうちの 2 式は，

$$t_{\uparrow\uparrow}-t_{\uparrow\uparrow}P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\uparrow}-t_{\uparrow\downarrow}P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow}=v_{\uparrow\uparrow} \tag{5.a}$$

$$t_{\uparrow\downarrow}-t_{\uparrow\uparrow}P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow}-t_{\uparrow\downarrow}P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\downarrow}=v_{\uparrow\downarrow} \tag{5.b}$$

である。(5) 式は $t_{\uparrow\uparrow}$ と $t_{\uparrow\downarrow}$ を未知の演算子として含む連立方程式である。

$\boldsymbol{t}$ と $\boldsymbol{v}$ は互いに非可換であることに注意して (5) 式を解くと，

$$\begin{aligned} t_{\uparrow\uparrow}=&\{v_{\uparrow\uparrow}(P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow})^{-1}(1-P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\downarrow})+v_{\uparrow\downarrow}\}\\ &\times\{(1-P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\uparrow})(P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow})^{-1}(1-P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\downarrow})\\ &-P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow})\}^{-1} \end{aligned} \tag{6.a}$$

$$\begin{aligned} t_{\uparrow\downarrow}=&\{v_{\uparrow\uparrow}+v_{\uparrow\downarrow}(P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow})^{-1}(1-P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\uparrow})\}\\ &\times\{-P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow}+(1-P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\downarrow})(P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow})^{-1}\\ &\times(1-P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\uparrow})\}^{-1} \end{aligned} \tag{6.b}$$

となる。(6) 式の $\boldsymbol{v}$ に (3) 式の表式を代入して，整理する。このとき，スピン $\boldsymbol{S}$ 同士の関係式

$$S_+S_-=S(S+1)-S_z^2+S_z \tag{7.a}$$

$$S_-S_+=S(S+1)-S_z^2-S_z \tag{7.b}$$

$$S_zS_+-S_+S_z=S_+ \tag{8.a}$$

$$S_zS_--S_-S_z=-S_- \tag{8.b}$$

$$S_-^{-1}=S_+[S(S+1)-S_z^2-S_z]^{-1} \tag{9.a}$$

$$S_+^{-1}=[S(S+1)-S_z^2-S_z]^{-1}S_- \tag{9.b}$$

などを使う。結果は，

$$t_{\uparrow\uparrow}=\frac{\{-(IS_z+\Sigma_\uparrow)+P_{\downarrow\downarrow}[I^2(S(S+1)-S_z^2-S_z)+(IS_z+\Sigma_\uparrow)(I(S_z+1)-\Sigma_\downarrow)]\}}{1-P_{\downarrow\downarrow}(I(S_z+1)-\Sigma_\downarrow)-P_{\uparrow\uparrow}\{-(IS_z+\Sigma_\uparrow)+P_{\downarrow\downarrow}[I^2(S(S+1)-S_z^2-S_z)+(IS_z+\Sigma_\uparrow)(I(S_z+1)-\Sigma_\downarrow)]\}} \tag{10}$$

$$t_{\uparrow\downarrow}=\frac{1}{1-P_{\downarrow\downarrow}(I(S_z+1)-\Sigma_\downarrow)-P_{\uparrow\uparrow}\{-(IS_z+\Sigma_\uparrow)+P_{\downarrow\downarrow}[I^2(S(S+1)-S_z^2-S_z)+(IS_z+\Sigma_\uparrow)(I(S_z+1)-\Sigma_\downarrow)]\}}(-IS_-) \tag{11.a}$$

$$t_{\uparrow\downarrow}=(-IS_-)\times\frac{1}{1-P_{\downarrow\downarrow}(IS_z-\Sigma_\downarrow)+P_{\uparrow\uparrow}\{I(S_z-1)+\Sigma_\uparrow)-P_{\downarrow\downarrow}[I^2(S(S+1)-S_z^2+S_z)+(I(S_z-1)+\Sigma_\uparrow)(IS_z-\Sigma_\downarrow)]\}} \tag{11.b}$$

となる。

(11.a) と (11.b) は同じ $t_{\uparrow\downarrow}$ の表式であるが，S_- の因子が式の前にくるか後にくるかで分母が異なる。

同様にして，(4) 式の行列要素より

$$t_{\downarrow\downarrow}-t_{\downarrow\downarrow}P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\downarrow}-t_{\downarrow\uparrow}P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow}=v_{\downarrow\downarrow} \tag{12.a}$$

$$t_{\downarrow\uparrow}-t_{\downarrow\downarrow}P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow}-t_{\downarrow\uparrow}P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\uparrow}=v_{\downarrow\uparrow} \tag{12.b}$$

を得るから，(12) 式を $t_{\downarrow\downarrow}$ と $t_{\uparrow\downarrow}$ を未知の演算子として含む連立方程式として解くと，

$$\begin{aligned} t_{\downarrow\downarrow}=&\{v_{\downarrow\downarrow}(P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow})^{-1}(1-P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\uparrow})+v_{\downarrow\uparrow}\}\\ &\times\{(1-P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\downarrow})(P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow})^{-1}(1-P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\uparrow})-P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow})^{-1} \end{aligned} \tag{13.a}$$

$$\begin{aligned} t_{\downarrow\uparrow}=&\{v_{\downarrow\downarrow}+v_{\downarrow\uparrow}(P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow})^{-1}(1-P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\downarrow})\}\\ &\times\{-P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow}+(1-P_{\uparrow\uparrow}v_{\uparrow\uparrow})(P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow})^{-1}\times(1-P_{\downarrow\downarrow}v_{\downarrow\downarrow})\}^{-1} \end{aligned} \tag{13.b}$$

を得る。$\boldsymbol{v}$ に (3) 式で示した行列要素を代入し，(7) 式で示した f スピン $\boldsymbol{S}$ の交換関係を用いると，$t_{\downarrow\downarrow}$ と $t_{\downarrow\uparrow}$ について次の表式を得る。

$$t_{\downarrow\downarrow}=\frac{\{(IS_z-\Sigma_\downarrow)+P_{\uparrow\uparrow}[I^2(S(S+1)-S_z^2+S_z)+(IS_z-\Sigma_\downarrow)(I(S_z-1)+\Sigma_\uparrow)]\}}{1+P_{\uparrow\uparrow}(I(S_z-1)+\Sigma_\uparrow)-P_{\downarrow\downarrow}\{(IS_z-\Sigma_\downarrow)+P_{\uparrow\uparrow}[I^2(S(S+1)-S_z^2+S_z)+(IS_z-\Sigma_\uparrow)(I(S_z-1)+\Sigma_\uparrow)]\}} \tag{14}$$

$$t_{\downarrow\uparrow}=\frac{1}{1+P_{\uparrow\uparrow}(I(S_z-1)+\Sigma_\uparrow)-P_{\downarrow\downarrow}\{I(S_z-\Sigma_\downarrow)+P_{\uparrow\uparrow}[I^2(S(S+1)-S_z^2+S_z)+(IS_z-\Sigma_\uparrow)(I(S_z-1)+\Sigma_\uparrow)]}\times(-IS_+) \tag{15.a}$$

$$t_{\downarrow\uparrow}=(-IS_+)\times\frac{1}{1+P_{\uparrow\uparrow}(IS_z+\Sigma_\uparrow)-P_{\downarrow\downarrow}\{I(S_z+1)-\Sigma_\downarrow)+P_{\uparrow\uparrow}[I^2(S(S+1)-S_z^2-S_z)+(IS_z+\Sigma_\uparrow)(I(S_z+1)-\Sigma_\downarrow)]\}} \tag{15.b}$$

$t_{\uparrow\downarrow}$ の表式のうち (15.a) と (15.b) は S_+ の因子が式の前にくるか後にくるかで分母が異なることに注意されたい。

(10), (11), (14), (15) 式が求める表式である。

3. t 行列の物理的意味

求めた t 行列の表式は，物理的意味がわかりにくい。見やすくするために，次の $V_{\uparrow}$, $V_{\downarrow}$, $U_{\uparrow}$, $U_{\downarrow}$, $W_{\uparrow}$, $W_{\downarrow}$ という記号を導入する。

$$V_{\uparrow}=-IS_z-\Sigma_{\uparrow} \tag{16}$$
$$V_{\downarrow}=+IS_z-\Sigma_{\downarrow} \tag{17}$$
$$U_{\uparrow}=-I(S_z-1)-\Sigma_{\uparrow} \tag{18}$$
$$U_{\downarrow}=I(S_z+1)-\Sigma_{\downarrow} \tag{19}$$
$$W_{\uparrow}=I^2[S(S+1)-S_z^2-S_z]=I^2S_-S_+ \tag{20}$$
$$W_{\downarrow}=I^2[S(S+1)-S_z^2+S_z]=I^2S_+S_- \tag{21}$$

それぞれの意味は次の通りである。

$V_{\uparrow}\cdots v_{\uparrow\uparrow}$（$S_z$ による↑電子の散乱）
$V_{\downarrow}\cdots v_{\downarrow\downarrow}$（$S_z$ による↓電子の散乱）
$U_{\uparrow}\cdots$（S_z-1 による↑電子の散乱）
$U_{\downarrow}\cdots$（S_z+1 による↓電子の散乱）
$W_{\uparrow}\cdots v_{\uparrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow}$（電子スピン↑→↓→↑ の散乱）
$W_{\downarrow}\cdots v_{\downarrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow}$（電子スピン↓→↑→↑ の散乱）

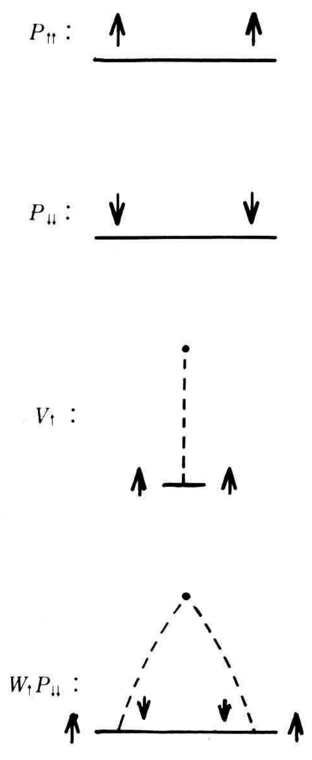

Fig. 1.

ここでは V, U, W は互いに可換であることが重要な点である。V, U, W を使うと t 行列の要素は次の通りになる。

$$t_{\uparrow\uparrow}=\frac{V_{\uparrow}+P_{\downarrow\downarrow}(W_{\uparrow}-V_{\uparrow}U_{\downarrow})}{1-P_{\downarrow\downarrow}U_{\downarrow}-P_{\uparrow\uparrow}V_{\uparrow}-P_{\uparrow\uparrow}P_{\downarrow\downarrow}(W_{\uparrow}-V_{\uparrow}U_{\downarrow})} \tag{22}$$

$$t_{\uparrow\downarrow}=\frac{1}{1-P_{\downarrow\downarrow}U_{\downarrow}-P_{\uparrow\uparrow}V_{\uparrow}-P_{\uparrow\uparrow}P_{\downarrow\downarrow}(W_{\uparrow}-V_{\uparrow}U_{\downarrow})}\times(-IS_-) \tag{23.a}$$

$$=(-IS_-)\times\frac{1}{1-P_{\downarrow\downarrow}V_{\downarrow}-P_{\uparrow\uparrow}U_{\uparrow}-P_{\uparrow\uparrow}P_{\downarrow\downarrow}(W_{\downarrow}-V_{\downarrow}U_{\uparrow})} \tag{23.b}$$

$$t_{\downarrow\downarrow}=\frac{V_{\downarrow}+P_{\uparrow\uparrow}(W_{\downarrow}-V_{\downarrow}U_{\uparrow})}{1-P_{\uparrow\uparrow}U_{\uparrow}-P_{\uparrow\uparrow}V_{\downarrow}-P_{\uparrow\uparrow}P_{\downarrow\downarrow}(W_{\downarrow}-V_{\downarrow}U_{\uparrow})} \tag{24}$$

$$t_{\downarrow\uparrow}=\frac{1}{1-P_{\uparrow\uparrow}U_{\uparrow}-P_{\downarrow\downarrow}V_{\downarrow}-P_{\uparrow\uparrow}P_{\downarrow\downarrow}(W_{\downarrow}-V_{\downarrow}U_{\uparrow})}\times(-IS_+) \tag{25.a}$$

$$=(-IS_+)\times\frac{1}{1-P_{\uparrow\uparrow}V_{\uparrow}-P_{\downarrow\downarrow}U_{\downarrow}-P_{\uparrow\uparrow}P_{\downarrow\downarrow}(W_{\uparrow}-V_{\uparrow}U_{\downarrow})} \tag{25.b}$$

t 行列の物理的意味を明らかにするために，例として $t_{\uparrow\uparrow}$ を P の3次の項まで展開してみると次のようになる。

$$\begin{aligned}t_{\uparrow\uparrow}=&V_{\uparrow}+[P_{\uparrow\uparrow}V_{\uparrow}^2+P_{\downarrow\downarrow}W_{\uparrow}]\\&+[P_{\uparrow\uparrow}^2V_{\uparrow}^3+2P_{\uparrow\uparrow}P_{\downarrow\downarrow}V_{\uparrow}W_{\uparrow}+P_{\downarrow\downarrow}^2W_{\uparrow}U_{\downarrow}]\\&+[P_{\uparrow\uparrow}^2V_{\uparrow}^4+3P_{\uparrow\uparrow}^2P_{\downarrow\downarrow}V_{\uparrow}^2W_{\uparrow}\\&+P_{\uparrow\uparrow}P_{\downarrow\downarrow}^2(W_{\uparrow}^2+2W_{\uparrow}V_{\uparrow}U_{\downarrow})+P_{\downarrow\downarrow}^3W_{\uparrow}U_{\downarrow}^2]\\&+\cdots\end{aligned} \tag{26}$$

これらの各項の物理的意味を1つ1つ示すのは大変なので，ダイヤグラムによって，視覚的に式の構造を理解することを考える。

Fig. 1 に示すように $P_{\uparrow\uparrow}$, $P_{\downarrow\downarrow}$, $V_{\uparrow}$, $W_{\uparrow}$ をダイヤグラムに対応させることにする。$V_{\uparrow}$ は↑電子が f スピン S_z によって↑電子のまま散乱される過程を示す。$W_{\uparrow}P_{\downarrow\downarrow}$ は↑電子が f スピン S_z によって散乱されスピンの向きを変え↓電子となり（そのとき f スピンは S_z から (S_z+1) に変化している），$P_{\downarrow\downarrow}$ という↓電子の進行過程を経て再び f スピンにより散乱されスピン

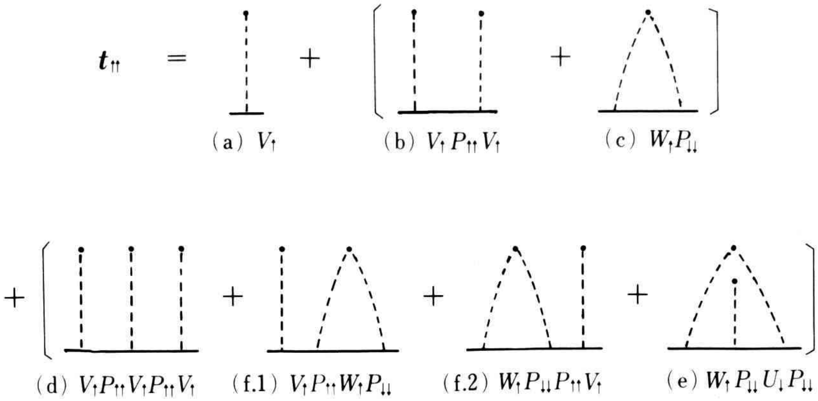

Fig. 2.

の向きを変え↑電子状態にもどる（このときfスピンも S_z にもどる）という過程を示す。

(26)式にあらわれた P の2次までの項を Fig. 2 に示した。(ただし電子スピンの向き↑，↓は省略した)。Fig. 2(e)に現われた $U_\downarrow$ は1度fスピン S_z によってスピン反転を起こした電子が↓電子のままfスピン (S_z+1) によって散乱される過程に対応する。

このようにして t 行列の物理的な意味は明らかになった。

4. 常磁性温度領域における t 行列要素

常磁性温度領域($T>T_C$)においては，fスピンの方向性はないから↑電子も↓電子も同じ作用を受ける。そのため，$\Sigma_\uparrow=\Sigma_\downarrow$ であり，$P_{\uparrow\uparrow}=P_{\downarrow\downarrow}$ となる。そこで，

$$\Sigma=\Sigma_\uparrow=\Sigma_\downarrow \qquad (27)$$

$$F=P_{\uparrow\uparrow}=P_{\downarrow\downarrow} \qquad (28)$$

で Σ と F を定義すると，t 行列の行列要素は次のようにまとめられる。

$$\boldsymbol{t}=\begin{pmatrix} t_{\uparrow\uparrow} & t_{\uparrow\downarrow} \\ t_{\downarrow\uparrow} & t_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \qquad (29.a)$$

$$=\frac{1}{[1+F(IS+\Sigma)][1-F(I(S+1)-\Sigma)]}\times$$

$$\begin{pmatrix} (-IS_z-\Sigma)+F(IS+\Sigma)(I(S+1)-\Sigma) & -IS_- \\ -IS_+ & (IS_z-\Sigma)+F(IS+\Sigma)(I(S+1)-\Sigma) \end{pmatrix} \qquad (29.b)$$

この表式が前論文IIで使われたものである。

5. 強磁性温度領域における CPA

強磁性温度領域（$T<T_C$）では z 方向にfスピンが揃い始めるから，↑電子と↓電子では受ける作用が異なる。そこで $t_{\uparrow\uparrow}$ と $t_{\downarrow\downarrow}$ についてfスピンの熱平均 $\langle\ \rangle_{av}$ を取り，

$$\langle t_{\uparrow\uparrow}\rangle_{av}=0 \qquad (30.a)$$

$$\langle t_{\downarrow\downarrow}\rangle_{av}=0 \qquad (30.b)$$

という式を連立させて解くことになる。$t_{\uparrow\uparrow}$ の中に $\Sigma_\downarrow$ や $P_{\downarrow\downarrow}$ も含まれているが原理的には数値解析が可能である。

謝　辞

馬場幸彦氏には長い間にわたって暖かい励ましをいただきました。心から感謝の意を表します。