

# 強磁性半導体中の伝導電子状態 II

—— 基礎方程式 ——

高 橋 正 雄\*

## Conduction Electron States in Ferromagnetic Semiconductors II

—— Fundamental Equations ——

Masao TAKAHASHI

### Abstract

Conduction electron states in ferromagnetic semiconductors are studied by s-f model theoretically. A new Green function method with  $t$ -matrix is proposed, which agrees with CPA method in high temperature limit and takes in f spin short range order near Curie temperature. The relation between Green function method and electronic resistivity is also discussed.

### 1. は じ め に

前の論文<sup>1)</sup>(以下では前論文 I と引用)で我々は、完全結晶をなす強磁性半導体中を動きまわる伝導電子の運動状態について議論をした。

温度  $T$  が、キュリー温度  $T_c$  に比べて十分高温のときには、磁性体をなす f スピンは各格子点において完全にランダムな方向を向き、伝導電子である s 電子はその f スピン系に散乱されながら運動する。一方、温度がキュリー温度に近くなると ( $T \sim T_c$ )、f スピン系は局所的にスピンの向きを揃え、狭い領域でのスピン秩序 (short range order) を、結晶内のあちらこちらにつくる。このため、s 電子は各格子的に同じ確率で滞在するよりは、f スピン系が同じ方向に揃った領域に長く滞在した方が (電子の存在確率の大きい方が) s-f 交換相互作用によるエネルギーの利得がある。この効果は長距離的には f スピン系の秩序が認められない温度領域 ( $T > T_c$ ) であっても存在し、s 電子のエネルギー単位はただ単純に  $-I\langle S_z \rangle_{av}$  では記述できない。 ( $IS$  は s-f 交換相互作用の大きさ、 $\langle S_z \rangle_{av}$  は f スピン  $S$  の  $z$  成分の熱平均値で、 $T > T_c$  で  $\langle S_z \rangle_{av} = 0$  であ

る)。これらの現象は実験的には、臨界磁性散乱 (critical magnetic scattering) といわれる  $T \sim T_c$  での電気抵抗の異常な増大となって観測されている。

s 電子の状態はまた、伝導電子のバンド幅  $W$  と s-f 交換相互作用の大きさ  $IS$  の大きさの比によっても様相が大きく異なることが予想される。

我々の研究の目的は、強磁性半導体中の伝導電子状態について、温度と  $IS/W$  の広い範囲にわたっての統一的な理解を得ることである。この目的のために我々は、前論文 I において、グリーン関数法を用いて、スピン対相関関数を含む最も簡単なダイアグラムの項を自己エネルギーとして採用し、伝導電子の状態密度を計算した (以下この方法を G.F. 法 I と呼ぶ)。G.F. 法 I は基本的には  $IS/W$  が小さいときに有効な摂動計算であり、その範囲内での  $T_c$  近くでの伝導電子状態に関する知見を得ることはできた。しかし、CPA で求めた結果と G.F. 法 I の高温の極限との比較によれば、我々が G.F. 法 I によって求めた結果はたかだか  $IS/W \lesssim 0.2$  の範囲内で物理的に合理的な意味をもつ結果を与えたにすぎない。その最大の原因は、前論文 I でも指摘しておいたように、G.F. 法 I が 1 サイトでの多重散乱を正しく繰り込んでいないためである。そこで、本論文では  $t$ -行列を用いて、この点の改善を試みる。

平成 2 年 9 月 28 日受理

\* 一般教育学科

## 2. モデル・ハミルトニアンと基本設定

完全結晶をなす強磁性半導体中を1つのs電子が運動しているものとして、この全系のモデル・ハミルトニアン  $H_t$  を次のように記述する。

$$H_t = H + H_f \quad (1)$$

$$H = H_s + H_{sf} \quad (2)$$

$$H_s = \sum_{\mathbf{k}\mu} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\mu}^\dagger a_{\mathbf{k}\mu} \quad (3)$$

$$H_{sf} = -I \sum_{l\mu\nu} a_{l\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} \cdot S_l a_{l\nu} \quad (4)$$

$$H_f = -\sum_{ll'} J_{ll'} S_l \cdot S_{l'} \quad (5)$$

すなわち全系のハミルトニアン  $H_t$  は、s電子の運動を記述する  $H$  とfスピン系のみを記述する  $H_f$  とからなる。この  $H$  はまたs電子の運動エネルギーを表す  $H_s$  とs-f交換相互作用を表す  $H_{sf}$  とからなる。

$H_s$  を定義する(3)式の中で、 $a_{\mathbf{k}\mu}^\dagger$  と  $a_{\mathbf{k}\mu}$  はそれぞれ波数ベクトル  $\mathbf{k}$ 、電子スピン  $\mu$  のブロッホ電子の生成演算子と消滅演算子である。 $\epsilon_{\mathbf{k}}$  はいわゆる分散式とよばれるもので、エネルギー・バンドの構造を与える。

$H_{sf}$  を定義する(4)式の中の  $a_{l\mu}^\dagger$  と  $a_{l\mu}$  はそれぞれ  $l$  サイトでのスピン  $\mu$  のワニエ電子の生成演算子と消滅演算子である。 $\sigma$  は通常のパウリ行列で、 $S_l$  は  $l$  サイトにおかれたfスピンの演算子である。s-f交換相互作用の大きさは  $IS(>0)$  で表される。

$H_f$  はfスピン間の相互作用を表し、ハイゼンベルク型の交換相互作用を仮定する。強磁性を対象とするから最隣接fスピン間の交換作用  $J_{ll'}$  は  $J_{ll'} > 0$  である。

この系は次の3つのパラメータによって特徴づけられる。すなわち、

$W$  伝導電子帯のバンド幅

$IS$  s-f交換相互作用の大きさ

$J_0 S^2 (= 2 \sum J_{ll'} S^2)$  fスピン間相互作用の大きさ

通常の磁性半導体では  $W \gg J_0 S^2$ 、 $IS \gg J_0 S^2$  を仮定してよい。すなわちs電子の運動を決定する  $W$  および  $IS$  は、fスピン系の状態を決定する  $J_0 S^2$  よりはるかに大きい。このことはまずあるfスピンの配列に対してs電子の運動状態を求め、その後いろいろなfスピン配列に対する熱平均を取ることによって、物理量を求めてよい、ということを経正化する。これは断熱近似を適用できるということである。このとき、磁性ポーラロン状態の場合と違って、s電子は結晶全体に広がっているから、s電子の存在はfスピン系に何ら

影響を与えないものとしてよい。

このように問題を設定すると、もはや伝導電子状態を扱うのに(1)式の  $H_t$  をそのまま直接的に扱う必要はなく、s電子の関与する(2)式の  $H$  でよいことになる。fスピン間相互作用を表す  $H_f$  はただ単にfスピン系の熱平均  $\langle \rangle_{av}$  を取るときに関係してくる。

## 3. 行列要素

まずハミルトニアンの行列要素を求めておこう。ブロッホ状態  $|k\mu\rangle = |k\rangle |\mu\rangle$  は波数ベクトル  $\mathbf{k}$  と電子スピン  $\mu$  で指定する。ワニエ状態  $|l\mu\rangle = |l\rangle |\mu\rangle$  はサイト  $l$  と電子スピン  $\mu$  で指定する。ブロッホ状態  $|k\mu\rangle$  とワニエ状態  $|l\mu\rangle$  とは

$$|k\mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{ik \cdot l} |l\mu\rangle \quad (6)$$

という関係がある。 $N$  は全サイトの数で  $l$  の和は全サイトにわたってとるものとする。

(3)式で定義された  $H_s$  はブロッホ表示で対角的で、

$$\langle k\mu | H_s | k'\mu' \rangle = \epsilon_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mu\mu'} \quad (7)$$

と書ける。

(4)式で定義された  $H_{sf}$  はワニエ表示においてサイトでは対角的であるが、電子スピンの向きについては非対角的で、次のような行列要素をもつ。

$$\langle l\uparrow | H_{sf} | l'\uparrow \rangle = -IS_{lz} \delta_{ll'} \quad (8.a)$$

$$\langle l\downarrow | H_{sf} | l'\downarrow \rangle = +IS_{lz} \delta_{ll'} \quad (8.b)$$

$$\langle l\uparrow | H_{sf} | l'\downarrow \rangle = -IS_{l-} \delta_{ll'} \quad (8.c)$$

$$\langle l\downarrow | H_{sf} | l'\uparrow \rangle = -IS_{l+} \delta_{ll'} \quad (8.d)$$

ここで  $S_{l+}$  と  $S_{l-}$  はそれぞれ

$$S_{l+} = S_{lx} + iS_{ly} \quad (9.a)$$

$$S_{l-} = S_{lx} - iS_{ly} \quad (9.b)$$

である。

容易にわかるように、(8.a)と(8.b)はs電子スピンの保存されるプロセスに、(8.c)と(8.d)はs-f交換相互作用によりs電子のスピン反転とfスピンの向きの変化を伴うプロセスに対応している。

## 4. 1粒子グリーン関数

我々が求めたい物理量の多くは、1粒子グリーン関数

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega I - H} \quad (10)$$

の f スピンについての熱平均をとった,

$$G_{av}(\omega) \equiv \langle G(\omega) \rangle_{av} = \left\langle \frac{1}{\omega I - H} \right\rangle_{av} \quad (11)$$

に含まれている。ここで  $\langle \rangle_{av}$  は f スピン系についての熱平均を意味する。 $\omega$  は一般に複素エネルギーを表す。 $I$  は単位演算子で,

$$I = \sum_{k\mu} |k\mu\rangle\langle k\mu| \quad (12.a)$$

$$= \sum_{l\mu} |l\mu\rangle\langle l\mu| \quad (12.b)$$

である。

$G_{av}(\omega)$  から導かれる 1 粒子的物理量の代表的なものとしては、電子状態密度

$$D(E) = \frac{1}{N} \text{Tr} \langle \delta(EI - H) \rangle_{av} \\ = -\frac{1}{N\pi} \text{Im} \text{Tr} G_{av}(E + i0) \quad (13)$$

ある。

さて、 $G_{av}(\omega)$  を決める (13) 式の中で、f スピンの熱的ゆらぎが  $H$  に含まれているので、このままでは熱平均を求めることは一般には困難である。こういう場合の常套手段として次の 3 段階を経て  $G_{av}(\omega)$  を求めることを考える。

- (i)  $H$  を、無摂動項  $K$  (熱的ゆらぎを含まない項) と、摂動項  $(H - K)$  (熱的ゆらぎを含む項) とに分離して、

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega I - H} = \frac{1}{(\omega I - K) - (H - K)} \quad (14)$$

を、

$$P(\omega) = \frac{1}{\omega I - K} \quad (15)$$

と  $(H - K)$  を使って、摂動展開をする。

- (ii) 展開された各項で f スピン系の熱平均をとる。

- (iii) 熱平均を求めた各項の和を求める。

この過程をふむと、平均される量は (ii) でみられるように  $(H - K)$  のベキ乗の形になっているので、 $H$  が分数の分母に入っている場合より扱いやすくなるのである。(i) で述べた  $H$  の分離の方法は一義的に決まらない。そこで後に述べるように  $(H - K)$  のベキ乗の効果が小さくなるように選ぶことができる。ここでは、 $K$  として次の形に書かれるものを選んだ場合を考

えよう。

$$K = \sum_{k\mu} \varepsilon_k a_{k\mu}^\dagger a_{k\mu} + \sum_{k\mu} \Sigma_\mu a_{k\mu}^\dagger a_{k\mu} \quad (16)$$

一般に  $\Sigma_\mu$  は電子スピン  $\mu$  によって異なった値をとる複素数である。

(16) 式を用いると  $H$  は、

$$H = H_s + H_{sf} = K + (H - K) \quad (17)$$

$$H - K = -I \sum_{l\nu} a_{l\nu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} \cdot S_l a_{l\nu} - \sum_{l\nu} \Sigma_\mu a_{l\nu}^\dagger a_{l\nu} \\ = \sum_l v_l \quad (18) \quad (19)$$

と書ける。ここで (18) を導くときに

$$\sum_k a_{k\mu}^\dagger a_{k\mu} = \sum_{l\mu} a_{l\mu}^\dagger a_{l\mu} \quad (20)$$

を用いた。(19) 式の  $v_l$  は

$$v_l = -I \sum_{\mu\nu} a_{l\nu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} \cdot S_l a_{l\nu} - \sum_\mu \Sigma_\mu a_{l\mu}^\dagger a_{l\mu} \quad (21)$$

で定義される。結局  $H$  は

$$H = K + \sum_l v_l \quad (22)$$

と書ける。

(15) 式と (21) 式を使って  $G$  を書き換えると、

$$G = P + P \sum_l v_l P + P \sum_l v_l P \sum_m v_m P \\ + P \sum_l v_l P \sum_m v_m P \sum_n v_n P + \dots \quad (23)$$

と書ける。

(23) 式の中で、同じ格子点による繰り返しの散乱 (多重散乱) の効果をまとめて  $t_l$  と書くと、 $G$  は

$$G = P + P \sum_l t_l P + P \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \\ + P \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n P + \dots \quad (24)$$

となる。格子点  $l, m, n$  などについての和は、相続くもの同士は等しくないという条件の下に行なわれる。演算子  $t_l$  は、

$$t_l \equiv v_l [I - P v_l]^{-1} \quad (25)$$

と書ける。

$G$  に対する  $t$  行列  $T$  を、 $G = P + PTP$  で定義すると、 $P$  にはもはや f スピンの演算子は含まれていないから、その熱平均  $\langle T \rangle_{av}$  を使って、

$$G_{av} = P + P \langle T \rangle_{av} P \quad (26)$$

$$T = \sum_l t_l + \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m \\ + \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n + \dots \quad (27)$$

と書ける。表式からわかるように、f スピン系の熱的ゆらぎの効果はすべて  $T$  に入っている。

この段階では、非摂動系としてとった  $K$  に入っている  $\Sigma_\mu$  の値は未知数であるが、これを

$$\langle T \rangle_{av} = 0 \quad (28)$$

という条件から決定することを考えよう。すると、(26) 式より

$$G_{av} = P \quad (29)$$

となって、 $P$  が求める  $G_{av}$  に等しいことになる。(28) 式の条件は摂動項の効果をも 0 にするように非摂動項  $K$  (すなわち  $\Sigma_\mu$ ) を取ることを意味する。

次の問題は (28) 式の f スピン系の熱平均の取り方と和の求め方である。(27) 式を使って (28) 式の条件を書き下すと、

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_{av} = & \sum_l \langle t_l \rangle_{av} + \sum_m \sum_{l(\neq l)} \langle t_l P t_m \rangle_{av} \\ & + \sum_l \sum_{m(\neq l)} \sum_{n(\neq m)} \langle t_l P t_m P t_n \rangle_{av} + \dots \quad (30) \end{aligned}$$

となる。もし各サイトでの f スピン系の熱的ゆらぎが完全にランダムであれば、例えば

$$\langle t_l P t_m \rangle_{av} = \langle t_l \rangle_{av} P \langle t_m \rangle_{av} \quad (31)$$

と置くことができ、 $\langle T \rangle_{av} = 0$  の条件は

$$\langle t_l \rangle_{av} = 0 \quad (32)$$

という条件によって満足される。これは CPA 近似そのものであり、Rangette *et. al.*<sup>3)</sup> や Kubo<sup>4)</sup> によってすでに議論されているものに対応する。

しかし、温度  $T$  がキューリー温度  $T_c$  に近いときには、f スピン対同士の相関が生ずるために、(31) 式の近似そのものがもはや成り立たない。そこで我々は (28) 式の条件として、

$$\langle t_l \rangle_{av} + \sum_{m(\neq l)} \langle t_l P t_m \rangle_{av} = 0 \quad (33)$$

を条件として取扱うことを提案する(これを G.F. 法 II または「 $t$  行列を用いた G.F. 法」とよぶことにする)。

G.F. 法 II では、(30) 式中での第 1 項 (1 サイトでの多重散乱) と第 2 項 (2 サイトでの f スピン対相関による散乱) のみを含み、第 3 項以下 (3 つ以上の f スピン相関による散乱) を落としている。

## 5. 常磁性温度領域での表式

常磁性温度領域 ( $T > T_c$ ) での条件 (33) 式の具体的

表式を求めよう。

この温度領域では  $\uparrow$  スピンの s 電子も  $\downarrow$  スピンの s 電子も全く同じ s-f 交換相互作用を受ける。そこで非摂動項  $K$  の中でとった  $\Sigma_\mu$  (以下では自己エネルギーとよぶ) は電子スピンの向きを表す  $\mu$  によらない ( $\Sigma_\uparrow = \Sigma_\downarrow$ )。そこで

$$\Sigma = \Sigma_\uparrow = \Sigma_\downarrow \quad (34)$$

$$F = \langle l \uparrow | P | l \uparrow \rangle = \langle l \downarrow | P | l \downarrow \rangle \quad (35)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_k \langle k | \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma} | k \rangle \quad (36)$$

で  $\Sigma$  と  $F$  を定義する。 $\Sigma$  と  $F$  は一般に  $\omega$  の関数であり、 $\Sigma(\omega)$ 、 $F(\omega)$  と書くべきであるが、混同はないと思われるので  $\omega$  を省略した。

すると  $T > T_c$  での 1 サイトでの  $t$  行列は次のように書ける ( $t$  行列の求め方は、これに続く論文 III にまとめた)。

$$t_l = \begin{pmatrix} \langle l \uparrow | t_l | l \uparrow \rangle & \langle l \uparrow | t_l | l \downarrow \rangle \\ \langle l \downarrow | t_l | l \uparrow \rangle & \langle l \downarrow | t_l | l \downarrow \rangle \end{pmatrix} \quad (37a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)]} \times \\ &\begin{pmatrix} (-IS_{lz} - \Sigma) + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma) & -IS_{l-} \\ -IS_{l+} & (IS_{lz} - \Sigma) + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma) \end{pmatrix} \quad (37b) \end{aligned}$$

$T > T_c$  では  $\langle S_{lz} \rangle_{av} = 0$  であることに注意して、(33) 式の第 1 項を書き下すと、

$$\begin{aligned} \langle l \uparrow | t_l | l \uparrow \rangle_{av} &= \frac{-\Sigma + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma)}{[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)]} \quad (38a) \end{aligned}$$

$$= \frac{S+1}{2S+1} \times t_p + \frac{S}{2S+1} \times t_a \quad (38b)$$

と書ける。ここで、 $t_p$ 、 $t_a$  は s 電子スピンと f スピン  $S$  とが平行 (para) な場合と反平行 (anti-para) な場合とに対応する  $t$  行列で、

$$t_p = \frac{-IS - \Sigma}{1 - F(-IS - \Sigma)} \quad (39)$$

$$t_a = \frac{I(S+1) - \Sigma}{1 - F(I(S+1) - \Sigma)} \quad (40)$$

で定義される。(38b) 式は Rangette *et. al.* によって導かれた式と本質的に同じである。s 電子スピンと f スピン  $S$  とが平行状態では、エネルギー固有値  $-IS$  を持ち、 $(S+1)$  重に縮重し、一方、反平行な状態ではエネルギー固有値  $+I(S+1)$  を持ち、 $S$  重に縮重してい

る。(38.b)式は、 $t$  行列が  $t_p$  と  $t_a$  にそれぞれの縮重度の比率を重みとしてかけた形になっている。Rangette *et. al.* は、

$$\langle l \uparrow | t_l | l \uparrow \rangle = \frac{S+1}{2S+1} \times t_p + \frac{S}{2S+1} \times t_a = 0 \quad (41)$$

という条件から自己エネルギー  $\Sigma$  を求めた。しかしこれでは前に指摘したように、 $f$  スピン対相関が入ってこないし、 $T_c$  近くでの  $f$  スピン系のゆらぎの効果を取り込むことはできない。

次に、(33)式の第2項を書き下すことを考えよう。熱平均を取った後の系は並進対称性を回復しているから  $\mathbf{k}$  空間で対角化できる。そこでまず(33)式の第1項を  $\mathbf{k}$  空間での要素で求めると、

$$\langle \mathbf{k} \uparrow | t_l | \mathbf{k} \uparrow \rangle = \frac{1}{N} \langle l \uparrow | t_l | l \uparrow \rangle \quad (42)$$

となり、(38), (39), (40)式ですぐ求めることができる。

一方(33)式の第2項は、

$$\begin{aligned} & \sum_{m(\neq l)} \langle \mathbf{k} \uparrow | t_l P t_m | \mathbf{k} \uparrow \rangle_{av} \\ &= \left( \frac{I}{N} \right)^2 \frac{1}{[1+F(IS+\Sigma)]^2 [1-F(I(S+1)-\Sigma)]^2} \\ & \times \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \Sigma} \sum_{m(\neq l)} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')(\mathbf{m}-l)} \end{aligned} \quad (43)$$

となる。

(38), (42), (43)式をまとめると結局(33)の条件式は、

$$\begin{aligned} & \{-\Sigma + F(IS+\Sigma)(I(S+1)-\Sigma)\} \\ & + \frac{1}{[1+F(IS+\Sigma)][1-F(I(S+1)-\Sigma)]} \\ & \times \frac{I^2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \Sigma} \sum_{m(\neq l)} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')(\mathbf{m}-l)} \\ & = 0 \end{aligned} \quad (44)$$

となる。

## 6. 結果の検討と今後の課題

ここでは、本論文で導いた(44)式をいろいろな角度から検討してみよう。

高温の極限 ( $T \gg T_c$ ) では  $f$  スピン系は完全にランダムな向きを向くから、 $l \neq m$  では  $\langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} = 0$  となるので、(44)式の第2項は0となる。従って、すぐわかるように、(44)式は高温の極限では(44)式は

(41)式と一致し Rangette *et. al.* の CPA の条件式と一致する。

次に、前論文 I で考察した式：

$$\begin{aligned} & \{-\Sigma + FI^2S(S+1)\} \\ & + \frac{I^2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \Sigma} \sum_{m(\neq l)} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')(\mathbf{m}-l)} = 0 \end{aligned} \quad (45)$$

と比較すると、

(i) 非摂動系に  $\Sigma$  を取り込んだために、第1項で  $IS \rightarrow IS + \Sigma$ ,  $I(S+1) \rightarrow I(S+1) - \Sigma$  と置き換えられたこと

(ii) 多重散乱を取り込んだため第2項に、 $1/[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)]$  という因子が付加されたこと

が相違点として挙げられる。

また、(44)式を  $\Sigma$  の決定するための条件として用いると  $\Sigma$  は  $\mathbf{k}$  に依存することになる。これは一番最初の仮定(16)式と矛盾する。しかし、今までの研究結果から  $\Sigma$  の  $\mathbf{k}$  依存性は鈍いと思われるので<sup>5)</sup>,  $\Sigma$  の  $\mathbf{k}$  依存性を無視して、 $\mathbf{k}=0$  での値で代用することとすれば、数値計算が実行可能となる。その後に  $\mathbf{k}$  依存性の効果を見積もればよい。

$f$  スピン対の相関関数としては和法則：

$$\sum_m \sum_q \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{iq \cdot (\mathbf{m}-l)} = NS(S+1) \quad (46)$$

を満足するような関数形を仮定する必要がある。

次にこの方法では  $\mathbf{P} = \mathbf{G}_{av}$  となるから、電子状態密度  $D(E)$  は(13)式と(36)式より

$$D(E) = -\frac{1}{N\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma} \quad (47)$$

で求められる。

また、 $s$ - $f$  交換作用がはたらかなければ固有エネルギー  $E = \varepsilon_{\mathbf{k}}$  を持っていた  $s$  電子状態は、 $s$ - $f$  交換相互作用がはたらいたために  $f$  スピン系による散乱を受けて、 $E = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \Sigma$  の複素エネルギーを持つようになったと考えることができる。このとき自己エネルギー  $\Sigma$  を  $\Sigma = \Sigma_R + i\Sigma_I$  ( $\Sigma_R, \Sigma_I$  は実数) と実部と虚部に分けて書き表せば、状態の時間変化は

$$e^{iEt} = e^{-\Sigma_I t} \times e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \Sigma_R)t} \quad (48)$$

と書ける。すなわち自己エネルギーの虚数部分  $\Sigma_I$  と緩和時間  $\tau$  とは、

$$\tau = \frac{1}{2\Sigma_I} \quad (49)$$

という関係がある。従って、易動度  $\mu$  は、

$$\mu \propto \tau \quad (50.a)$$

$$\propto \frac{1}{2\Sigma_I} \quad (50.b)$$

となる。

また電気抵抗  $\rho$  は、伝導電子数が一定であるとすれば、

$$\rho \propto \frac{1}{\tau} \quad (51.a)$$

$$\propto 2\Sigma_I \quad (51.b)$$

でその温度変化を求めることができる。これらは今後の課題である。

## 7. 謝 辞

最後に、無機材質研究所の梅原雅捷博士には、本原稿に目を通していただき、いろいろ貴重なコメントを

いただきました。厚く御礼を申し上げます。

また亀沢泰先生には長い間にわたって暖かい励ましとご配慮をいただきました。心から感謝いたします。

## 参 考 文 献

- 1) 高橋正雄：幾徳工業大学研究報告 B-11 (1987) 143  
高橋正雄：日本物理学会第 41 回年会講演 31p-FB-9 予稿集 (1986) p. 181
- 2) 1 粒子グリーン関数と CPA の解説については、例えば  
米沢富美子：岩波講座現代物理学の基礎 6「物性 I」(1978) 補章 D コヒーレントポテンシャル近似 (CPA)
- 3) A. Rangement, A. Yanase and J. Kübler: Solid State Commun. **12** (1973) 171
- 4) K. Kubo: J. Phys. Soc. Japan **36** (1974) 32
- 5) 高橋正雄：博士学位論文 (東北大, 1981) Fig. 36