

s-f モデルと電子状態 III

— 基礎方程式の改良 —

高橋 正雄*・三井 和博*・梅原 雅捷**

s-f Model and Electron States III

— Improvements of Fundamental Equations —

Masao TAKAHASHI*, Kazuhiro MITSUI* and Masakatsu UMEHARA**

Abstract

Conduction electron states in ferromagnetic semiconductors are studied theoretically by s-f model. A new Green Function method is proposed, which takes in higher order t -matrices. The conditions to determine the self-energy Σ are also discussed.

1. はじめに

先の論文 II¹⁾ で私達は、完全結晶をなす強磁性半導体を動きまわる伝導電子の運動状態について s-f モデルを基にいろいろと議論をした。そして、s-f 交換相互作用の大きさ IS と s 電子の伝導帯のバンド幅 W の比 IS/W の値の広い範囲に適用できる理論の構築をめざし、1 サイトでの多重散乱の効果を t 行列として取り込み、かつ、 $T \sim T_c$ (T_c はキュリー温度) で重要となる f スピン対相関 (f スピン系の短距離秩序) を取り込んだ新しい方法 (グリーン関数法 II) を提案した。

グリーン関数法 II は、グリーン関数 G を t 行列を用いて展開した式において、 t 行列の 1 次と 2 次の項のみを取り入れ高次の項の効果を無視したものであった。この方法によって私達は、部分的には、 T_c 近くの温度での状態密度の変化を知ることができたものの、論文 I²⁾ でも指摘したように、いくつかの物理的に不合理な結果につきあたった。これはグリーン関数法 II の限界を示すものである。

そこで、この論文で私達は、グリーン関数法 II を見直し、その改良について議論する。

2. s-f モデルとグリーン関数法

モデル・ハミルトニアンと基本設定については、すでに詳略に論じてあるからここでは繰り返さない (参考文献 1), 2) 及びその引用文献を参照のこと)。

ここでは、次の s-f モデルから出発する。すなわち、s 電子の運動状態を、

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_s + \mathbf{H}_{sf} \quad (1)$$

$$\mathbf{H}_s = \sum_{k\mu} \epsilon_k a_{k\mu}^\dagger a_{k\mu} \quad (2)$$

$$\mathbf{H}_{sf} = -I \sum_{l\nu} a_{l\nu}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\mu\nu} \cdot \mathbf{S}_l a_{l\nu} \quad (3)$$

で記述する (特に断りのない限り式の記号の定義も参考文献 1), 2) に準ずるものとする)。

さて私達は未知の自己エネルギー Σ を導入して、ハミルトニアン \mathbf{H} を次の形に書き直す。

$$\mathbf{H} = \mathbf{K} + \mathbf{V} \quad (4)$$

$$\mathbf{K} = \sum_{k\mu} (\epsilon_k + \Sigma_\mu) a_{k\mu}^\dagger a_{k\mu} \quad (5)$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{H} - \mathbf{K} \quad (6.a)$$

$$= - \sum_{l\nu} a_{l\nu}^\dagger (I \boldsymbol{\sigma}_{\mu\nu} \cdot \mathbf{S}_l + \Sigma_\mu \delta_{\mu\nu}) a_{l\nu} \quad (6.b)$$

$$= \sum_l \mathbf{v}_l \quad (6.c)$$

ここで、(6.b) 式を導くときに、

平成 3 年 9 月 28 日受理

* 一般科

** 無機材質研究所

$$\sum_k a_{k\mu}^\dagger a_{k\nu} = \sum_l a_{l\mu}^\dagger a_{l\nu} \quad (7)$$

を用いた。また (6.c) 式の v_l は、

$$v_l = -\sum_{\mu\nu} a_{l\mu}^\dagger (I\sigma_{\mu\nu} \cdot S_l + \sum_{\mu} \delta_{\mu\nu}) a_{l\nu} \quad (8)$$

で定義できる。

ここで 1 粒子グリーン関数 $G(\omega)$ を

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega I - H} \quad (9)$$

で定義しよう。 I は単位演算子である。

熱平均をとった G_{av} を

$$G_{av}(\omega) \equiv \langle G(\omega) \rangle_{av} = \left\langle \frac{1}{\omega I - H} \right\rangle_{av} \quad (10)$$

で定義しよう。 $\langle \rangle_{av}$ は f スピン系について熱平均を意味し、 I は単位演算子である。

さて、(5) 式で定義した (非摂動ハミルトニアン) K に対応するグリーン関数 P を、

$$P(\omega) = \frac{1}{\omega I - K} \quad (11)$$

と定義する。すると G は P と摂動ハミルトニアン V とで展開できて、

$$G = \frac{1}{\omega I - H} = \frac{1}{\omega I - K - V} = \frac{1}{P^{-1} - V} \quad (12.a)$$

$$= P + PVP + PVPVP + PVPVPVP + \dots \quad (12.b)$$

$$= P + P \sum_l v_l P + P \sum_l v_m P \\ + P \sum_l v_l P \sum_m v_m P \sum_n v_n P + \dots \quad (12.c)$$

(12.c) 式の中で、同じ格子点による繰り返しの散乱 (多重散乱) の効果をまとめるために、(l サイトでの) t 行列を

$$t_l = v_l + v_l P v_l + v_l P v_l P v_l + \dots \quad (13.a)$$

$$= v_l [I - P v_l]^{-1} \quad (13.b)$$

と定義して導入すると、(12) 式は

$$G = P + P \sum_l P + P \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \\ + P \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n P + \dots \quad (14)$$

と書ける。ここで格子点、 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制限の下に行われる。

次に G に対する T 行列を、

$$G = P + PTP \quad (15)$$

で定義すると、

$$T = \sum_l t_l + \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m \\ + \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n + \dots \quad (16)$$

である。(15) 式中で P にはもはや f スピン演算子が含まれていないから熱平均を取る必要がないことに注意すれば、f スピン系の熱平均を取った後の T を T_{av} と表して、

$$G_{av} = P + P T_{av} P \quad (17)$$

と書ける。

ここで T_{av} は

$$T_{av} = \langle T \rangle_{av} \quad (18.a)$$

$$= \sum_l \langle t_l \rangle_{av} + \sum_l \sum_{m(\neq l)} \langle t_l P t_m \rangle_{av} \\ + \sum_l \sum_{m(\neq l)} \sum_{n(\neq m)} \langle t_l P t_m P t_n \rangle_{av} + \dots \quad (18.b)$$

である。CPA 近似は (18) 式の中で

$$\langle t_l \rangle_{av} = 0 \quad (19)$$

という条件を課し、私達が先に提案したグリーン関数 II では

$$\langle t_l \rangle_{av} + \sum_{m(\neq l)} \langle t_l P t_m \rangle_{av} = 0 \quad (20)$$

という条件を課することによって

$$T_{av} = 0 \quad (21)$$

すなわち

$$G_{av} = P \quad (22)$$

を得ようとするものであった。

CPA 近似は f スピン間に相関が強い場合には無意味で、私達の提案したグリーン関数法 II も (18.b) の第 3 項以下を落としている点で (IS/W) の値の大きいところでは有効ではない。

そこでまず (18.b) の第 3 項以下をどのように取り込むかについて考察したい。

3. t 行列の切断 (decoupling)

私達は (18.b) の第 3 項以下をどのように取り込むかを次に考えるが、f スピンが 3 つの以上含む項について熱平均をそのまま取ることは事実上不可能であ

る。そこである程度の知見が得られている1スピンの熱平均と、2スピンの熱平均へと分解して熱平均を取することを考える、このとき(18)式の和の中に $m(\neq l)$ などの制限があることが事態複雑にする。そこで目で見てわかりやすいようにダイアグラムによる方法を採用する。

まず(18.b)を第5項まで具体的に書き下そう。

$$T = \sum_l t_l \tag{23.a}$$

$$+ \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m \tag{23.b}$$

$$+ \sum_l t_l \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n \tag{23.c}$$

$$+ \sum_l t_l \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n P \sum_{i(\neq n)} t_i \tag{23.d}$$

$$+ \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n P \sum_{i(\neq n)} t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j + \dots \tag{23.e}$$

となる。

ここで、Fig.1(a)に示すように

$$\sum_l t_l \tag{24.a}$$

を黒丸と点線で(黒丸は l についての和に制限がないことを意味する)、Fig.1(b)に示すように

$$P \tag{24.b}$$

を横線でそれぞれ表すと、

$$\sum_l t_l \sum_{m(\neq l)} t_m \tag{24.c}$$

のような項は、Fig.1(c)で示される(白丸は m につい

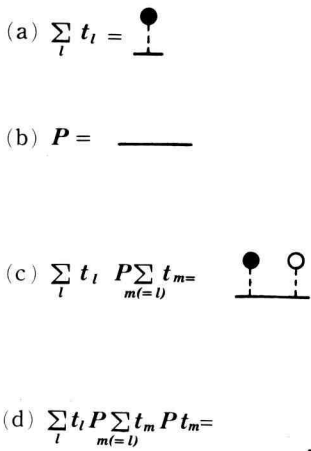


Fig. 1.

ての和の中に $m \neq l$ という制限があることを示す)。一方

$$\sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m \tag{24.d}$$

のように同じサイトでの t 行列が続いて結ばれているときには、Fig.1(d)のように、四角形で連続している丸印を囲んだ。

(23)式の各々はFig.2の(a)~(e)に対応することはすぐわかるだろう。

次に、 t 行列をどのように切断すべきかを、(23.e)を例にとり、説明する。和の制限をはずすことによって、(24.d)のような形の余分な項がいくつか現われる。(23.e)を t の5次の項という意味で $T(5)$ と書くことにすると、

$$T(5) \equiv \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n P \sum_{i(\neq n)} t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j \tag{25.a}$$

$$= \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \times \sum_n t_n P \sum_{i(\neq n)} t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j - \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P \sum_{i(\neq m)} t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j \tag{25.b}$$

$$= \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \times \sum_n t_n P \sum_{i(\neq n)} t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j - \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P \times \sum_i t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j + \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P t_m P \sum_{j(\neq m)} t_j \tag{25.c}$$

$$= \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \times \sum_n t_n P \sum_{i(\neq n)} t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j - \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P \times \sum_i t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j + \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P t_m P \times \sum_j t_j - \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P t_m P t_m \tag{25.d}$$

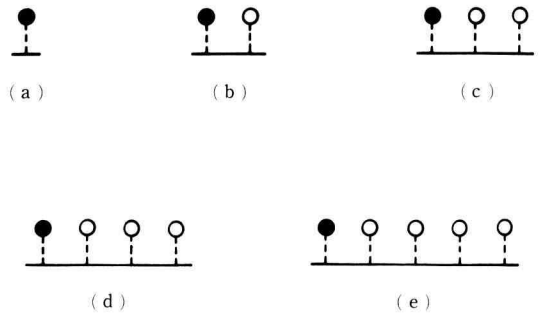


Fig. 2.

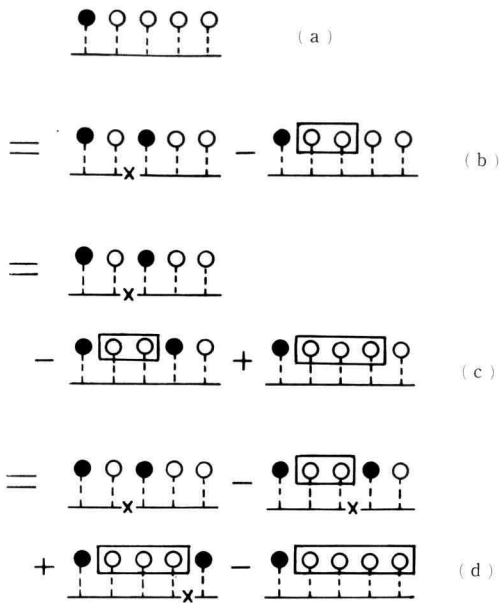


Fig. 3.

となる。(25)式の変形の様子は、Fig. 3によって視覚的に理解することができる ((25)式の a~d が Fig. 3の a~d に対応している)。

次の f スピン系について熱平均を取るのだが、(25)式中に現われた × 印のところで切断して熱平均を取るという近似を導入する。× 印の次に出てくるサイトの和にはもはや制限がないことに注意したい。すると、

$$\begin{aligned}
 T_{av}(5) &\equiv \langle T(5) \rangle_{av} \\
 &= \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n P \sum_{i(\neq n)} t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j \rangle_{av} \quad (26.a) \\
 &\simeq \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \rangle_{av} \times \langle \sum_n t_n P \sum_{i(\neq n)} t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j \rangle_{av} \\
 &- \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P \rangle_{av} \times \langle \sum_i t_i P \sum_{j(\neq i)} t_j \rangle_{av} \\
 &+ \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P t_m P \rangle_{av} \times \langle \sum_j t_j \rangle_{av} \\
 &- \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P t_m P t_m P \rangle_{av} \times P^{-1} \quad (26.b)
 \end{aligned}$$

と書ける。

ここで (23) 式の現われた t の各次数に対応する項の f スピンについて熱平均をとったものを $T_{av}(1)$, $T_{av}(2)$, $T_{av}(3)$, ... のように表わし, $T_{av}(0)$ は P^{-1} と定義することにする。すなわち,

$$T_{av}(0) = P^{-1} \quad (27.a)$$

$$T_{av}(1) = \langle \sum_l t_l \rangle_{av} \quad (27.b)$$

$$T_{av}(2) = \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m \rangle_{av} \quad (27.c)$$

$$\begin{aligned}
 T_{av}(3) &= \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n \rangle_{av} \\
 &\dots\dots\dots \quad (27.d)
 \end{aligned}$$

である。

一方 (26.b) 式中に現われた、同じサイトの t の積と異なるサイトの t の相関に対応する熱平均値を t の次数を数字で表わして、次のように C_{av} と定義する。すなわち、

$$C_{av}(2) = \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \rangle_{av} \quad (28.a)$$

$$C_{av}(3) = \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P \rangle_{av} \quad (28.b)$$

$$C_{av}(4) = \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P t_m P \rangle_{av} \quad (28.c)$$

$$\begin{aligned}
 C_{av}(5) &= \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P t_m P t_m P t_m P \rangle_{av} \\
 &\dots\dots\dots \quad (28.d)
 \end{aligned}$$

と定義される。

このように定義した $T_{av}(0)$, $T_{av}(1)$, $T_{av}(2)$, $T_{av}(3)$, ... と $C_{av}(2)$, $C_{av}(3)$, $C_{av}(4)$, $C_{av}(5)$... を用いて、例えば (26) 式の $T_{av}(5)$ は、

$$\begin{aligned}
 T_{av}(5) &\simeq C_{av}(2) T_{av}(3) - C_{av}(3) T_{av}(2) \\
 &+ C_{av}(4) T_{av}(1) - C_{av}(5) T_{av}(0) \quad (29)
 \end{aligned}$$

と書ける。(29) 式の右辺に出てくる $T_{av}(j)$ の j の値は、 $j \leq 3 (= 5 - 2)$ であることに注意したい。

一般に

$$T_{av}(j) = \sum_{i=2}^j (-1)^i \times C_{av}(i) T_{av}(j-i) \quad (30)$$

であることは容易に証明することができる ((30) 式の証明は Appendix A に示す)。 $T_{av}(j)$ を表す (30) 式の右辺は $C_{av}(2) T_{av}(j-2)$ で始まることに注意したい。

(30) 式を用いて $T_{av}(j)$ の各項を書き表すと、

$$T_{av}(1) \quad (31.a)$$

$$T_{av}(2) = C_{av}(2) T_{av}(0) \quad (31.b)$$

$$T_{av}(3) = C_{av}(2) T_{av}(1) - C_{av}(3) T_{av}(0) \quad (31.c)$$

$$\begin{aligned}
 T_{av}(4) &= C_{av}(2) T_{av}(2) - C_{av}(3) T_{av}(1) \\
 &+ C_{av}(4) T_{av}(0) \quad (31.d)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 T_{av}(5) &= C_{av}(2) T_{av}(3) - C_{av}(3) T_{av}(2) \\
 &+ C_{av}(4) T_{av}(1) - C_{av}(5) T_{av}(0) \\
 &\dots\dots\dots \quad (31.e)
 \end{aligned}$$

となる。

さて、私達の求めたいのは、(31)式の和である T_{av} である。
すなわち

$$T_{av} = \sum_{j=1}^{\infty} T_{av}(j) \quad (32.a)$$

$$= T_{av}(1) + T_{av}(2) + T_{av}(3) + T_{av}(4) + T_{av}(5) + \dots \quad (32.b)$$

$$= T_{av}(1) + C_{av}(2)[T_{av}(0) + T_{av}(1) + T_{av}(2) + T_{av}(3) + \dots] - C_{av}(2)[T_{av}(0) + T_{av}(1) + T_{av}(2) + \dots] + C_{av}(4)[T_{av}(0) + T_{av}(1) + \dots] - C_{av}(5)[T_{av}(0) + \dots] \quad (32.c)$$

$$= T_{av}(1) + \{C_{av}(2) - C_{av}(3) + C_{av}(4) - C_{av}(5) + \dots\} \times [T_{av}(0) + T_{av}] \quad (32.d)$$

ここで、

$$Q_{av} = C_{av}(2) - C_{av}(3) + C_{av}(4) - C_{av}(5) + \dots \quad (33.a)$$

$$= \sum_{j=2}^{\infty} (-1)^j \times C_{av}(j) \quad (33.b)$$

とおくと、(32.d)式は、

$$T_{av} = T_{av}(1) + Q_{av} \times [T_{av}(0) + T_{av}] \quad (34)$$

となる。これから、

$$(1 - Q_{av}) \times T_{av} = T_{av}(1) + Q_{av} T_{av}(0) \quad (35)$$

となり、

$$T_{av} = (1 - Q_{av})^{-1} \langle \sum_l t_l P \rangle_{av} + Q_{av} P^{-1} \quad (36)$$

と T_{av} が求まる。

従って、私達の関心は、 Q_{av} がどうやれば求められるかということに移る。

4. Q_{av} の計算

式(33)の Q_{av} の定義と式(28)の C_{av} の定義を使って、

$$Q_{av} = \sum_{j=2}^{\infty} (-1)^j \times C_{av}(j) \quad (37.a)$$

$$= \sum_{j=2}^{\infty} (-1)^j \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} (t_m P)^{j-1} \rangle_{av} \quad (37.b)$$

$$= \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} \sum_{j=2}^{\infty} (-1)^j (-t_m P)^{j-1} \rangle_{av} \quad (37.c)$$

$$= \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} [t_m P - (t_m P)^2 + (t_m P)^3 - (t_m P)^4 + \dots] \rangle_{av} \quad (37.d)$$

$$= \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P (1 + t_m P)^{-1} \rangle_{av} \quad (37.e)$$

ここで、

$$t_m P (1 + t_m P)^{-1} = v_m P \quad (38)$$

という関係式があることを用いれば(式(38)の証明は Appendix B に示す)、結局

$$Q_{av} = \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} v_m P \rangle_{av} \quad (39)$$

となる。

5. 自己エネルギー Σ の決定法

さて次に、未知の自己エネルギー Σ をどのように決定するかという問題を扱おう。そこために、今までの大筋をもう一度考え直してみることにする。

式(17)によれば、f スピン系についての熱平均をとった後のグリーン関係 G_{av} は、同じく f スピン系についての熱平均をとって T 行列の T_{av} と、

$$G_{av} = P + P T_{av} P \quad (40)$$

という関係がある。ここで P はもちろんであるが、 G_{av} も T_{av} も k 空間で対角化されていることに着目しよう。従って(40)式は

$$\langle k\mu | G_{av} | k\mu \rangle = \langle k\mu | P | k\mu \rangle + \langle k\mu | P | k\mu \rangle \langle k\mu | T_{av} | k\mu \rangle \langle k\mu | P | k\mu \rangle \quad (41)$$

と書ける。

さてここで、f スピン系が完全にランダムな場合は、 $\langle k\mu | T_{av} | k\mu \rangle$ は k に依存しない。従って CPA の場合は任意の k に対して

$$\langle k\mu | T_{av} | k\mu \rangle = 0 \quad (42)$$

とすれば

$$G_{av} = P \quad (43)$$

とすることができた。

しかし、f スピン系に短距離秩序が存在すれば、 $\langle k\mu | T_{av} | k\mu \rangle$ は k に依存することになるから、すくなくともすべての k に対して式(42)の条件を課すことはできない。私達は先の論文では $k=0$ という特定の k に対してのみ、式(42)の条件を課し、いろいろと物理的に矛盾のある結果を得ていたことになる。

私達が最も求めたい物理量は、電子の状態密度 $D(\omega)$ であり、またそれは、グリーン関数 G_{av} と、

$$D_{\mu}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \times \frac{1}{N} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\mu | G_{av} | \mathbf{k}\mu \rangle \quad (44)$$

という関係にある ($D_{\mu}(\omega)$ はスピン μ の状態密度)。

そこで私達は、(41) 式の両辺で \mathbf{k} についての和を取って、

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\mu | G_{av} | \mathbf{k}\mu \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\mu | P | \mathbf{k}\mu \rangle \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\mu | P | \mathbf{k}\mu \rangle \langle \mathbf{k}\mu | T_{av} | \mathbf{k}\mu \rangle \langle \mathbf{k}\mu | P | \mathbf{k}\mu \rangle \end{aligned} \quad (45)$$

とし、式 (42) のかわりに、

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\mu | P | \mathbf{k}\mu \rangle \langle \mathbf{k}\mu | T_{av} | \mathbf{k}\mu \rangle \langle \mathbf{k}\mu | P | \mathbf{k}\mu \rangle = 0 \quad (46)$$

という条件から自己エネルギー Σ を決定することにする。そうすれば (45) 式からすぐわかるように、

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\mu | G_{av} | \mathbf{k}\mu \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\mu | P | \mathbf{k}\mu \rangle \quad (47)$$

となって状態密度はすぐ求められることになる。

付言しておく、ここまでの表式は、電子が単に f スピン系と相互作用する場合に限らず、もっと一般的な場合にも適用できる。

6. 常磁性温度領域での表式

次に、常磁性温度領域 ($T \geq T_c$) での具体的な表式を求める。

Appendix C に示したように、 $Q_{av}(\mathbf{k})$ は、

$$\begin{aligned} Q_{av}(\mathbf{k}) &= \langle \mathbf{k}\uparrow | Q_{av} | \mathbf{k}\uparrow \rangle = \langle \mathbf{k}\downarrow | Q_{av} | \mathbf{k}\downarrow \rangle \\ &= \frac{P(\mathbf{k})}{N^2} \times \frac{1}{[1+F(IS+\Sigma)][1-F(S+1)-\Sigma]} \\ &\times \{ I^2 \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_{l, m(\neq l)} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)} \\ &- \Sigma [-\Sigma + F(IS+\Sigma)(I(S+1)-\Sigma)] \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \\ &\times \sum_{l, m(\neq l)} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)} \} \end{aligned} \quad (48)$$

と書ける。ここで (48) 式の中で、

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_{l, m(\neq l)} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)} \\ &= \sum_{l, m} \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)} - \sum_{l, \mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \end{aligned} \quad (49.a)$$

$$= \sum_{l, \mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_m e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)} - N^2 F \quad (49.b)$$

$$= \sum_{l, \mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') N \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - N^2 F \quad (49.c)$$

$$= N^2 P(\mathbf{k}) - N^2 F \quad (49.d)$$

である。ただし

$$F = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \quad (50)$$

である。ここで (50) 式の形をよく見ると、 F は $P(\mathbf{k})$ の \mathbf{k} 空間における平均値の形になっている。また (48) 式中で物理的に考えて最も大きな (特異な) 寄与をするのは、 $T \sim T_c$ のとき第 1 項の \mathbf{k}' の和の中の $\mathbf{k}' \sim \mathbf{k}$ の部分である。それ以外の $P(\mathbf{k})$ は、 \mathbf{k} 依存性があまり大きくないと考えて、その \mathbf{k} 空間の平均値である F で置き換えることにする ($P(\mathbf{k}) \sim F$)。

すると、(49) 式は近似的に 0 とみなすことができ、

$$\begin{aligned} Q_{av}(\mathbf{k}) &= \frac{I^2 P(\mathbf{k})}{[1+F(IS+\Sigma)][1-F(IS+\Sigma)]} \\ &\times \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_{m(\neq l)} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)} \end{aligned} \quad (51)$$

さて私達は、(36) 式と (46) 式から

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k} | P | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | T_{av} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | P | \mathbf{k} \rangle \\ = \sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k})^2 \times \frac{\langle I\uparrow | t_l | I\uparrow \rangle_{av} + Q_{av}(\mathbf{k}) P^{-1}(\mathbf{k})}{1 - Q_{av}(\mathbf{k})} \end{aligned} \quad (52)$$

を 0 とする条件から、自己エネルギー Σ を決定すべきであるが、これでは数値計算があまりに困難であるから、ある平均的な値 \mathbf{k}^* について、

$$\frac{1}{N} \langle I\uparrow | t_l | I\uparrow \rangle_{av} + Q_{av}(\mathbf{k}^*) P^{-1}(\mathbf{k}^*) = 0 \quad (53)$$

という条件から Σ を求めることにする。さて、この \mathbf{k}^* は (51) 式を導くときにした議論から、

$$P(\mathbf{k}^*) = F = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k}) \quad (54)$$

を満たす値であるべきである。以上のことから、結局 (53) 式的具体形を書き下すと、

$$\begin{aligned} &[-\Sigma + F(IS+\Sigma)(I(S+1)-\Sigma)] \\ &+ \frac{I^2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_{m(\neq l)} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}^*)(l-m)} = 0 \end{aligned} \quad (55)$$

となる。この方法をグリーン関数法 III とよぶことに

する。

7. 結果の検討と今後の課題

私達は今回、グリーン関数法 G を t 行列で展開した際、 t の 3 次以上の項を 1 次と 2 次で切断 (decoupling) し、 T_{av} を (36) 式の形に導いた。次に、非摂動グリーン関数 $P(k)$ のうち、

$$\langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(k-k')(l-m)} \quad (56)$$

に関与するものは、 $T \sim T_c$ のとき $k \sim k'$ で特異な効果をもつ可能性があるとして残し、それ以外は、 k 空間での $P(k)$ の平均値に相当する F で置き換えた。このような近似の背景にあるのは $Q_{av}(k)$ が k についてあまり大きく変化しないだろうという予想である。その延長の上に立って、私達は $T_{av}=0$ という条件 (52) 式を、平均的な k^* に対する条件 (53) 式に置き換えた。しかし、 $Q_{av}(k)$ の k 依存性が k に大きく依存しないという予想は確実なものではなく、きちんとチェックしなければならない。

次に、(55) 式を、グリーン関数法 II と比較するのは重要である。グリーン関数法 II では、

$$\begin{aligned} & [-\Sigma + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma)] \\ & + \frac{1}{[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)]} \\ & \times \frac{I^2}{N} \sum_{m(\neq l)} P(k') \sum_{m(\neq l)} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(k-k')(m-l)} = 0 \end{aligned} \quad (57)$$

であるから、グリーン関数法 III は、ただ単に (57) 式

の第 2 項の因子

$$\frac{1}{[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)]} \quad (58)$$

だけ異なるだけである。換言すると、3 次以上の t の効果はすべて、(58) の因子を排除するということに含まれてしまった。

しかし、(58) 式の分母=0 とする箇所での特異な性質は、このことによって解除することが期待される。

私達はグリーン関数法 I で、

$$\sum_m \langle v_l P v_m \rangle_{av} \quad (59)$$

に相当する項を計算し、 $(IS/W) \gg 1$ では不十分であることを見た。

次にグリーン関数法 II では、多重散乱の効果を取り入れ、

$$\langle t_l \rangle_{av} + \sum_{m(\neq l)} \langle t_l P t_m \rangle_{av} = 0 \quad (60)$$

の条件を検討した。しかし、(60) 式はむしろ多重散乱を多く取り込みすぎていて、 t の 3 次以上を取り込むと、むしろ (60) 式の第 2 項のうち t の一方が v で置き換わるべきで、

$$\langle t_l \rangle + \sum_{m(\neq l)} \langle t_l P v_m \rangle_{av} = 0 \quad (61)$$

が、状態を決める条件となっていることがわかった。

私達が導いた (55) 式をもとに Σ を計算し、状態密度を求め、それが物理的に正しい結果を与えるかどうかを、早急に結論づける必要がある。

Appendix A 式 (30) の証明

まず次の式で $D(i, j)$ を定義する。

$$D(i, j) = \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} (t_m P)^{j-1} \sum_{n(\neq m)} t_{n_1} P \sum_{n_2(\neq n_1)} t_{n_2} P \cdots \sum_{n_{i-j}(\neq n_{i-j-1})} t_{n_{i-j}} \quad (A.1)$$

ここで $2 \leq j \leq i$ である。とくに $j=i$ のときには、 $D(i, i)$ は、

$$D(i, i) = \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} (t_m P)^{i-1} \times P^{-1} \quad (A.2.a)$$

$$= C(i) \times P^{-1} \quad (A.2.b)$$

となって $C(i) \times P^{-1}$ に一致する。

さて、一般に

$$D(i, j) = C(j) T(i-j) - D(i, j+1) \quad (A.3)$$

であることは次のようにすればすぐわかる。

すなわち、

$$D(i, j) = \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} (t_m P)^{j-1} \sum_{n_1} t_{n_1} P \sum_{n_2(\neq n_1)} t_{n_2} P \cdots \sum_{n_{i-j}(\neq n_{i-j-1})} t_{n_{i-j}} \\ - \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} (t_m P)^j \sum_{n_2(\neq m)} t_{n_2} P \cdots \sum_{n_{i-j}(\neq n_{i-j-1})} t_{n_{i-j}} \quad (\text{A.4})$$

となることから明らかである。

さて次に、

$$D(i, j) = \sum_{n=0}^{i-j} (-1)^n C(j+n) T(i-j-n) \quad (\text{A.5})$$

を数学的帰納法で証明する。ただし、 $2 \leq j \leq n$ であるので、普通的手法とは異なり、まず $j=i$ で (A.5) 式が正しいことを示し、次に j のとき (A.5) 式が正しいければ $j-1$ でも (A.5) 式に対応する式が正しいことを示す。

まず $j=i$ のとき、(A.5) 式は

$$D(i, i) = C(i) T(0) = C(i) P^{-1} \quad (\text{A.6})$$

となり (A.6) 式は (A.2) 式に帰着する。

次に $D(i, j-1)$ を考えると、(A.3) 式より、

$$D(i, j-1) = C(j-1) T(i-j+1) - D(i, j) \quad (\text{A.7})$$

この式の $D(i, j)$ に (A.5) 式を代入すると、

$$D(i, j-1) = C(j-1) T(i-j+1) - \sum_{n=0}^{i-j} (-1)^n C(j+n) T(i-j-n) \quad (\text{A.8})$$

この (A.8) 式において $n' = n+1$ ($n = n'-1$) とおき、 n に関する和を n' の和で置き換えると、

$$D(i, j-1) = C(j-1) T(i-j+1) - \sum_{n'=1}^{i-j+1} (-1)^{n'-1} C(j+n'-1) T(i-j-n'+1) \quad (\text{A.9.a})$$

$$= C(j-1) T(i-(j-1)) + \sum_{n=1}^{i-(j-1)} (-1)^n C(j-1+n) T(i-(j-1)-n) \quad (\text{A.9.b})$$

となる。ただし、(A.9.b) で $n' \rightarrow n$ とラベルを貼り直した。すると、(A.9.b) の第1項は、第2項の $n=0$ に相当するものとして、 n の和に含めることができ、

$$D(i, j-1) = \sum_{n=1}^{i-(j-1)} (-1)^n C((j-1)+n) T(i-(j-1)-n) \quad (\text{A.10})$$

となり、 j に対して (A.5) 式が仮定されれば $j-1$ に対しても (A.5) 式に対応する式が成立することが示される。結局数学的帰納法により、 $j \leq i$ なる j に対して (A.5) 式が示されたことになる。

次に、

$$T(j) = C(2) \times T(j-2) - D(j, 3) \quad (\text{A.11})$$

であることは、次式から明らかである。すなわち、

$$T(j) = \sum_l t_l P \sum_{l_2(\neq l)} t_{l_2} P \sum_{l_3(\neq l_2)} t_{l_3} P \cdots \sum_{l_{j-1}(\neq l_{j-2})} t_{l_{j-1}} \quad (\text{A.12.a})$$

$$= \sum_l t_l P \sum_{l_2(\neq l)} t_{l_2} P \times \sum_{l_3(\neq l_2)} t_{l_3} P \cdots \sum_{l_4(\neq l_3)} \cdots \sum_{l_{j-1}(\neq l_{j-2})} t_{l_{j-1}} - \sum_l t_l P \sum_{l_2(\neq l)} (t_{l_2} P)^2 \times \sum_{l_3(\neq l_2)} t_{l_3} P \cdots \sum_{l_{j-1}(\neq l_{j-2})} t_{l_{j-1}} \quad (\text{A.12.b})$$

$$= C(2) \times T(j-2) - D(j, 3) \quad (\text{a.12.c})$$

である。(A.5) 式より

$$D(j, 3) = \sum_{i=0}^{j-3} (-1)^i C(3+i) T(j-3-i) \quad (\text{A.13})$$

であるから、これを (A.11) 式に代入すれば

$$T(j) = C(2)T(j-2) - D(j, 3) \tag{A.14.a}$$

$$= C(2)T(j-2) - \sum_{i=0}^{j-3} (-1)^i C(i+3)T(j-i-3) \tag{A.14.b}$$

$$= C(2)T(j-2) + \sum_{i=3}^j (-1)^i C(i)T(n-i) \tag{A.14.c}$$

$$= \sum_{i=2}^j (-1)^i C(i) \times T(j-i) \tag{A.14.d}$$

ただし, (A.14.b) から (A.14.c) を導くとき, $i+3 \rightarrow i$ と置き換えて和を取った。また, (A.14.c) から (A.14.d) を導く途中で, 第1項を第2項の和の中に組み込んだ。

(A.14) の両辺の熱平均を取り,

$$\langle C(i)T(j-1) \rangle_{av} \simeq C_{av}(i)T_{av}(j-i) \tag{A.15}$$

とおくと

$$T_{av}(j) = \sum_{i=2}^j (-1)^i C_{av}(i)T_{av}(j-i) \tag{A.16}$$

が得られる。これが本文の (30) 式である。

(30) 式を導く過程のいくつかは, ダイアグラムで見た方が理解しやすい。Fig. 4a に $D(i, j)$ の定義を, Fig. 4b に (A.3) 式の右辺

$$C(j)T(i-j) - D(i, j+1) \tag{A.17}$$

を示す。Fig. 4a と Fig. 4b とで, (A.3) 式の意味がわかる。また Fig. 5 に (A.11) 式をダイアグラムで示す。

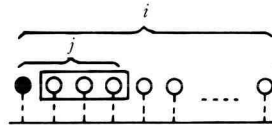


Fig. 4a. $D(i, j)$

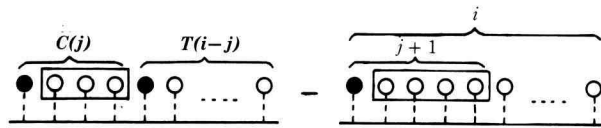


Fig. 4b. $C(j)T(i-j) - D(i, j+1)$

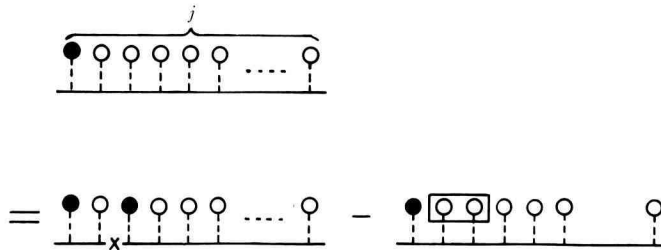


Fig. 5. $T(j) = C(2)T(j-2) - D(j-3)$

Appendix B 式(38)の証明

式(13.b)の定義より,

$$t_m = v_m(1 - P v_m)^{-1} \quad (\text{B.1})$$

式(B.1)の右から $(1 - P v_m)P$ を演算させると,

$$t_m(1 - P v_m)P = v_m P \quad (\text{B.2})$$

$$\therefore t_m P - t_m P v_m P = v_m P \quad (\text{B.3})$$

$v_m P$ でくくって,

$$t_m P = (1 + t_m P) v_m P \quad (\text{B.4})$$

$$v_m P = (1 + t_m P)^{-1} t_m P \quad (\text{B.5.a})$$

$$= t_m P (1 + t_m P)^{-1} \quad (\text{B.5.b})$$

よって式(38)は証明された。

Appendix C Q_{av} の表式 ($T \geq T_c$)

Q_{av} は本文中の(39)式, すなわち,

$$Q_{av} = \langle \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} v_l P \rangle_{av} \quad (\text{C.1})$$

で定義されている。ここでは, 常磁性温度領域 ($T > T_c$) での具体的な表式を導くことにする。

Q_{av} は \mathbf{k} 空間で対角化されていることに注意して,

$$\langle \mathbf{k}\mu | Q_{av} | \mathbf{k}\mu \rangle = \sum_{\mathbf{k}'\sigma} \sum_l \langle \langle \mathbf{k}\mu | t_l | \mathbf{k}'\sigma \rangle P(\mathbf{k}'\sigma) \sum_{m(\neq l)} \langle \mathbf{k}'\sigma | v_m | \mathbf{k}\mu \rangle P(\mathbf{k}\mu) \rangle_{av} \quad (\text{C.2})$$

と書ける。ここで, ブロッセ関数 $|\mathbf{k}\mu\rangle = |\mathbf{k}\rangle |\mu\rangle$ と, ワニエ関数 $|\mathbf{l}\mu\rangle = |\mathbf{l}\rangle |\mu\rangle$ との関係式

$$|\mathbf{k}\mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} |\mathbf{l}\mu\rangle \quad (\text{C.3})$$

および, $T > T_c$ では,

$$P(\mathbf{k}) = P(\mathbf{k}\mu) = \langle \mathbf{k}\mu | P | \mathbf{k}\mu \rangle = \langle \mathbf{k}\uparrow | P | \mathbf{k}\uparrow \rangle = \langle \mathbf{k}\downarrow | P | \mathbf{k}\downarrow \rangle \quad (\text{C.4})$$

であることを用いると

$$Q_{av}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k}\mu | Q_{av} | \mathbf{k}\mu \rangle = \langle \mathbf{k}\uparrow | Q_{av} | \mathbf{k}\uparrow \rangle = \langle \mathbf{k}\downarrow | Q_{av} | \mathbf{k}\downarrow \rangle \quad (\text{C.5.a})$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}'\sigma} \sum_l \langle \langle \mathbf{l}\mu | t_l | \mathbf{l}\sigma \rangle P(\mathbf{k}') \sum_{m(\neq l)} \langle m\sigma | v_m | \mathbf{m}\mu \rangle P(\mathbf{k}) \times e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})(\mathbf{l} - \mathbf{m})} \rangle_{av} \quad (\text{C.5.b})$$

$$= \frac{P(\mathbf{k})}{N^2} \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_l \sum_{m(\neq l)} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})(\mathbf{l} - \mathbf{m})} \sum_{\sigma} \langle \langle \mathbf{l}\mu | t_l | \mathbf{l}\sigma \rangle \langle m\sigma | v_m | \mathbf{m}\mu \rangle \rangle_{av} \quad (\text{C.5.c})$$

となる。ここで(C.5.c)式の末尾に出てきた因子を $\mu = \uparrow$ に対して具体的に計算してみると,

$$\langle \sum_{\sigma} \langle \mathbf{l}\uparrow | t_l | \mathbf{l}\sigma \rangle \langle m\sigma | v_m | \mathbf{m}\uparrow \rangle \rangle_{av} = \langle \mathbf{l}\uparrow | t_l | \mathbf{l}\uparrow \rangle \langle \mathbf{m}\uparrow | v_m | \mathbf{m}\uparrow \rangle + \langle \mathbf{l}\uparrow | t_l | \mathbf{l}\downarrow \rangle \langle \mathbf{m}\downarrow | v_m | \mathbf{m}\uparrow \rangle \rangle_{av} \quad (\text{C.6.a})$$

$$= \frac{1}{[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)]} \times \langle \{(-IS_{\mathbf{l}z} - \Sigma) + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma)\} (-IS_{\mathbf{m}z} - \Sigma) + (-IS_{\mathbf{l}})(-IS_{\mathbf{m}+}) \rangle_{av} \quad (\text{C.6.b})$$

ここで,

$$(-IS_{l-})(-IS_{m+})=I^2(S_{lx}-iS_{ly})(S_{mx}+iS_{my}) \quad (\text{C.7.a})$$

$$=I^2\{(S_{lx}S_{mx}+S_{ly}S_{my})+i(S_{lx}S_{my}-S_{ly}S_{mx})\} \quad (\text{C.7.b})$$

である。熱平均をとると、 $T > T_c$ では、

$$\langle S_{lx}S_{my}-S_{ly}S_{mx} \rangle_{\text{av}}=0 \quad (\text{C.8})$$

$$\langle S_{lz} \rangle_{\text{av}}=\langle S_{mz} \rangle_{\text{av}}=0 \quad (\text{C.9})$$

であるから、結局

$$\begin{aligned} & \langle \sum_{\sigma} \langle l \uparrow | \mathbf{t}_l | l \sigma \rangle \langle m \sigma | \mathbf{v}_m | m \uparrow \rangle \rangle_{\text{av}} \\ &= \frac{1}{[1+F(IS+\Sigma)][1-F(I(S+1)-\Sigma)]} \\ & \quad \times \{I^2 \langle S_{lx}S_{mx}+S_{ly}S_{my}+S_{mz}S_{lz} \rangle_{\text{av}} - \Sigma[-\Sigma+F(IS+\Sigma)(I(S+1)-\Sigma)]\} \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

すなわち、 Q の表式として、

$$\begin{aligned} Q_{\text{av}}(\mathbf{k}) &= \frac{P(\mathbf{k})}{N^2} \frac{1}{[1+F(IS+\Sigma)][1-F(I(S+1)-\Sigma)]} \\ & \quad \times \{I^2 \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_{l, m(\neq l)} \langle \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_m \rangle_{\text{av}} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)} \\ & \quad - \Sigma[-\Sigma+F(IS+\Sigma)(I(S+1)-\Sigma)] \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_{l, m(\neq l)} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)}\} \end{aligned} \quad (\text{C.11.a})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{P(\mathbf{k})}{[1+F(IS+\Sigma)][1-F(I(S+1)-\Sigma)]} \\ & \quad \times \left\{ \frac{I^2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_{m(\neq l)} \langle \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_m \rangle_{\text{av}} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)} \right. \\ & \quad \left. - \Sigma[-\Sigma+F(IS+\Sigma)(I(S+1)-\Sigma)] \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_{m(\neq l)} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})(l-m)} \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.11.b})$$

を得る。

参 考 文 献

1) 高橋正雄：神奈川工科大学研究報告 **B-15** (1991) 279-284.

高橋正雄：日本物理学会 1991 年春の分科会講演 26a-M-8 予稿集第 2 分冊 p.160.

2) 高橋正雄・三井和博・梅原雅捷：神奈川工科大学研究報告 **B-16** (1992), 331-341.