

s-f モデルと電子状態 V

—— グリーン関数法 III と状態密度 ——

高橋 正雄*・三井 和博*・梅原 雅捷**

s-f Model and Electron States V

—— Green's Function Method III and Density of States ——

Masao TAKAHASHI* Kazuhiro MITSUI and Masakatsu UMEHARA**

Abstract

Theoretical studies have been made on the conduction electron state in ferromagnetic semiconductor by s-f model. In this model localized magnetic moments are placed at each lattice site regularly and a conduction electron moves in such a crystal interacting with the localized moments by s-f exchange interaction. The directions of localized moments are completely random at high temperature limit and are strongly correlated around the Curie temperatures in ferromagnetic semiconductor. The conduction electron state is strongly affected by the order of localized moments.

We formulate a Green's function method with t -matrix of s-f exchange interaction and perturbation theory. Higher order terms are taken into account by the decoupling of t -matrix. Using a normalized two spin correlation function and a parameter which is calculated by coherent potential approximation (CPA), the density of states is calculated. The numerical results agree with CPA at high temperature limit and coincide with the results reported by Takahashi-Mitsui-Umebara in the case of small IS/W , where IS is the strength of s-f exchange interaction and W is conduction band width. Small peak which appears near the bottom of conduction band at around Curie temperature is interpreted as pseudo-magnetic polaron state.

1. はじめに

強磁性半導体の伝導電子状態を記述するためのモデルとして、s-f モデルが広く使われ、大きな役割を果たしてきたことは、すでに何度か指摘してきた。

完全結晶をなす強磁性半導体では、各格子点に局在した f スピンが規則正しく配置されている。この f スピンの向きは、高温の極限では完全にランダムであるが、温度が下がってきてキュリー温度 T_c 近くになると局所的に揃い始め、短距離秩序(short range order)を生じる。

磁性半導体中に導入された伝導電子(以下 s 電子)は、強い s-f 交換相互作用を通して f スピン系秩序の

影響を受ける。相互作用であるからもちろん s 電子の存在が f スピン系自身にも影響を与え、マグネティック・ポーロンを形成したり、あるいは f スピン間の間接相互作用を強めキュリー温度の増大へと導く可能性もある。事実キュリー温度近くでの伝導電子数の減少やキュリー温度そのものの増大は、広く実験的にも観察されている。しかし、本研究では当面、s 電子の存在が f スピン系に与える影響は全く無視することにし、s 電子状態が f スピン系の秩序状態とともにどのように変わるかということを研究の対象とする。

このように研究対象を限定した場合でも、s 電子状態は、伝導帯のバンド幅 W と s-f 交換相互作用の大きさ IS との比によって様相が異なるであろうということは予想できる。 $IS/W=0$ で自由電子型のバンドを仮定しても、 IS/W の値が大きくなると、s 電子のスピンの向きが f スピンの向きと平行か反平行かに対応し

1992 年 9 月 28 日受理

* 一般教育科

** 無機材質研究所

て、エネルギー値の $-IS$ と $+I(S+1)$ に対応した 2 つのバンドに分裂する。

f スピン系がランダムの場合にはコヒーレント・ポテンシャル近似 (CPA) が上に述べた状況をかなりよく説明する。実際計算してみると $IS/W \sim 0.22$ の値の近くで、バンドの分裂が起こり、それぞれの状態密度の和は平行・反平行状態の縮退度 $2S+2$ と $2S$ とに比例する。

しかし、CPA は f スピン系が短距離秩序を生ずるキュリー温度近くを扱うのには全く適していない。それは CPA が本質的に単サイト近似だからである。

キュリー温度 T_c 近くで重要となる f スピン系の短距離秩序の s 電子状態への影響を取り込もうとした論文は既に幾つかあり、いずれも IS/W の 2 次まで展開して、f スピン対相関を取り込んだものである。私達が求めたグリーン関数法 I は、自己エネルギー $\Sigma(k, \omega)$ が k 依存性も含めて self-consistent に求められている点、 IS/W の展開でその適用範囲が明示されている点など、それ以前の方法に比べて幾つかの改良点がある。その適用範囲について言えば、強磁性半導体の典型である EuO, EuS などは $IS/W \sim 0.04$ 程度であるから適用可能な範囲に入るだろう。しかし、グリーン関数法 I は、論文 IV でも示したように、 $IS/W \leq 0.1$ の範囲でしか有効でない。 $IS/W \geq 0.1$ の場合については、f スピン系の短距離秩序がどのような効果をもたらすのかについてさへ明らかでない。

このように問題が複雑な理由は、この問題が典型的な多体問題であり、単サイトでの多重散乱と同時に、異なるサイトの相関による散乱という、2 つの面を持っているからである。

グリーン関数法 II では、グリーン関数を t 行列で展開して、まず多重散乱を取り込んだ後、 T 行列の第 2 項が f スピン対相関を示していることに着目した。しかし、グリーン関数法 II では、3 次以上の項が全く考慮されなかったこと、パラメータ Σ の決定方法に問題があったこと、などの欠点があった。その結果、計算された状態密度の総和が温度によって変わってしまうなどの物理的にみて矛盾している結果に陥った。

この欠点を克服するため、私達はまずグリーン関数法 II の方法では必ずしも T 行列の熱平均値が 0 となっていないことを指摘し、論文 III でその改善の方法について議論した。

本論文では、論文 III での改善方法を発展させたグリーン関数法 III について述べ、計算された状態密度、

自己エネルギーについて議論する。また非摂動ハミルトニアンを取り方などについても述べる予定である。

2. グリーン関数法 III

私達は強磁性半導体中の電子の運動を記述するものとして、次の s-f モデルから出発する。

$$H = H_s + H_{sf} \quad (2.1)$$

$$H_s = \sum_{k\mu} \varepsilon_k a_{k\mu}^+ a_{k\mu} \quad (2.2)$$

$$H_{sf} = -I \sum_{l\mu\nu} a_{l\mu}^+ \sigma \cdot S_l a_{l\nu} \quad (2.3)$$

すなわち s 電子のハミルトニアン H は、s 電子の並進運動を記述する H_s と s-f 交換相互作用を記述する H_{sf} とからなる。系全体のハミルトニアン H_t にはこの他に f スピン系の相互作用を表す H_f も加わり、

$$H_t = H + H_f \quad (2.4)$$

で表される。

私達は H_f としては、強磁性を示すハイゼンベルグ型のハミルトニアンを仮定する。

さて 1 粒子グリーン関数

$$G = \frac{1}{\omega I - H} \quad (2.5)$$

の熱平均をとった

$$G_{av} \equiv \langle G \rangle_{av} = \left\langle \frac{1}{\omega I - H} \right\rangle_{av} \quad (2.6)$$

を求めたい。しかし、 G_{av} を求めるときに熱平均を取るべき f スピン演算子が (2.6) 式の分母の H の中に含まれているため、このままでは熱平均を取るのは困難である。そこで私達は、f スピンを含まない非摂動ハミルトニアン K を未知のパラメータ Σ_μ を含む、

$$K = \sum_{k\mu} (\varepsilon_k + \Sigma_\mu) a_{k\mu}^+ a_{k\mu} \quad (2.7)$$

の形で導入し、f スピンを含む摂動ハミルトニアン

$$V = H - K = \sum_l v_l \quad (2.8a)$$

$$= \sum_l \sum_{\mu\nu} (-I\sigma \cdot S_l - \Sigma_\mu \delta_{\mu\nu}) a_{l\mu}^+ a_{l\nu} \quad (2.8b)$$

で摂動展開することを考える。そのために、非摂動グリーン関数 P を

$$P = \frac{1}{\omega I - K} \quad (2.9)$$

で定義する。式 (2.9) で定義された P は、f スピン演

算子を含んでいないから、もはや熱平均をとる必要がない。式 (2.8) と (2.9) を使えば、グリーン関数 G は、

$$G = P + P \sum_l v_l P + P \sum_l v_l P \sum_m v_m P + P \sum_l v_l P \sum_m v_m P \sum_n v_n P + \dots \quad (2.10)$$

と展開できる。f スピン演算子はすべて v に含まれている。

式 (2.10) で展開された各項で熱平均をとる場合、各サイトに置かれた摂動ポテンシャル v の積の熱平均の取り方は、同じサイトの積の場合と異なるサイトの積の場合とで、違う。そこで同じサイトでの多重散乱を明確にするために、 t 行列を

$$t_l = v_l + v_l P v_l + v_l P v_l P v_l + \dots \quad (2.11a)$$

$$= v_l (I - P v_l)^{-1} \quad (2.11b)$$

で導入する。この t 行列を用いると G は、

$$G = P + P \sum_l t_l P + P \sum_l t_l P \sum_{m(l)} t_m P + P \sum_l P \sum_{m(+l)} t_m P \sum_{n(+m)} t_n P + \dots \quad (2.12)$$

と書ける。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われる。

さて、私達は (2.11) 式または (2.12) 式で展開された各項の熱平均をとり、その和をまとめ上げることを考えるのであるが、f スピンについては対の形でしか熱平均の解析的な解が得られていない。そのために、3 個以上の f スピンの積の熱平均については、何らかの近似的な操作が必要である。

グリーン関数 G に対する T 行列を

$$G = P + PTP \quad (2.13)$$

の形で定義すると、 T は

$$T = \sum_l t_l + \sum_l t_l P \sum_{m(+l)} t_m + \sum_l t_l P \sum_{m(+l)} t_m P \sum_{n(+m)} t_n + \dots \quad (2.14)$$

で表される。

論文 III で証明したように、

$$T = \sum_l t_l + \sum_l t_l P \sum_{m(+l)} v_m + \sum_l t_l P \sum_{m(+l)} v_m P \times T \quad (2.15)$$

とも書ける。 T の定義式の中に再び T が現われていること、右辺第 2 項と第 3 項は $t_l P v_m$ の形となって t と v の両方が出現していることなどに注意して欲しい。

い。

式 (2.15) は厳密な表式であるが、(2.15) の両辺の熱平均を取るとき、右辺第 3 項を 2 つの熱平均の項の積で近似する。すなわち、 T の熱平均 $T_{av} \equiv \langle T \rangle_{av}$ に対して、

$$T_{av} = \sum_l \langle t_l \rangle_{av} + \sum_l \sum_{m(+l)} \langle t_l P v_m \rangle_{av} + \sum_l \sum_{m(+l)} \langle t_l P v_m \rangle_{av} P \times T_{av} \quad (2.16)$$

と近似する。

ここで、 Q_{av} を

$$Q_{av} = \sum_l \sum_{m(+l)} \langle t_l P v_m \rangle_{av} \quad (2.17)$$

で定義すれば (論文 III の Q_{av} をこの論文では $Q_{av}P$ と定義し直しているので注意)、式 (2.16) は、

$$T_{av} = \sum_l \langle t_l \rangle_{av} + Q_{av} + Q_{av} P T_{av} \quad (2.18)$$

となり、

$$T_{av} = (I - Q_{av}P)^{-1} \times (\sum_l \langle t_l \rangle_{av} + Q_{av}) \quad (2.19)$$

となる。

従って、 Q_{av} を求めれば T_{av} を求めることができ、(2.13) 式の熱平均

$$G_{av} = P + P T_{av} P \quad (2.20)$$

によって、 G_{av} が計算できる。

式 (2.20) より

$$P^{-1} - G_{av}^{-1} = \frac{T_{av}}{1 + T_{av}P} \quad (2.21)$$

である。式 (2.19) の T_{av} を (2.21) 式に代入すると、

$$P^{-1} - G_{av}^{-1} = \frac{\sum_l \langle t_l \rangle_{av} + Q_{av}}{1 + \sum_l \langle t_l \rangle_{av} P} \quad (2.22)$$

さて、熱平均をとったあとの G_{av} , Q_{av} などは、並進対称性を回復しているから、 $G_{av}(\mathbf{k}, \omega) \equiv \langle \mathbf{k} | G_{av} | \mathbf{k} \rangle$, $Q_{av}(\mathbf{k}, \omega) \equiv \langle \mathbf{k} | Q_{av} | \mathbf{k} \rangle$ などと記すことにする。もちろん

$$P(\mathbf{k}, \omega) = \langle \mathbf{k} | P | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma} \quad (2.23)$$

である。

次に自己エネルギー $\Sigma_i(\mathbf{k}, \omega)$ を

$$G_{av}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_i(\mathbf{k}, \omega)} \quad (2.24)$$

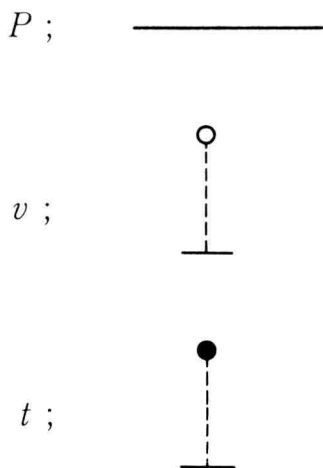


Fig. 1a.

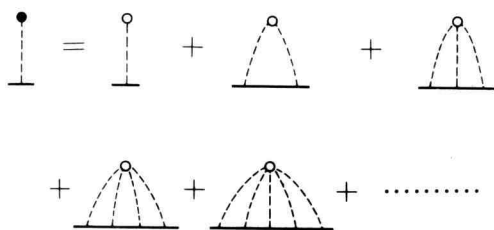


Fig. 1b.

で定義すると、波数ベクトル \mathbf{k} の電子が f スピン系から受ける s-f 交換相互作用の効果はすべて $\Sigma_t(\mathbf{k}, \omega)$ に取り込まれる。

式(2.23)と(2.24)からすぐわかるように、式(2.22)の左辺 $\mathbf{P}^{-1} - \mathbf{G}_{av}^{-1}$ の \mathbf{k} 成分は $\Sigma_t(\mathbf{k}, \omega) - \Sigma$ である。

特に未知のパラメータとして CPA の条件

$$\langle t_i \rangle_{av} = 0 \quad (2.25)$$

を用いると、(2.22)式の右辺は \mathbf{Q}_{av} である。このときには、(2.22)式から

$$\Sigma_t(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma + \mathbf{Q}_{av}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.26)$$

となる。

\mathbf{Q}_{av} は定義式(2.17)からも明らかなように、 t サイトでの多重散乱を表す t_l と m サイトでの 1 回の散乱を表す v_m との間での相関を取り込んでいる。

式(2.26)の意味を示すために、Fig.1 に \mathbf{P} と v および t の定義を示した。式(2.26)中の自己エネルギー

$$\Sigma_t = \Sigma + \text{diagram with a loop between sites } m \text{ and } n (\neq m)$$

Fig. 2.

Σ_t は、Fig. 2 で示したように、CPA の Σ と、 \mathbf{Q}_{av} との和で表わされる。

この方法を以下ではグリーン関数法 III と呼ぶことにする。

3. 常磁性温度領域での表式

常磁性温度領域 ($T \geq T_c$) では特定方向への一様な磁化は存在しないから、パラメータ Σ_μ は S 電子のスピンの方向によらず、 Σ と記してよい。

Σ として CPA での自己エネルギー値を用いた場合は、

$$\langle t_i \rangle_{av} = 0 \quad (3.1)$$

であるから、(2.19) 式の \mathbf{T} 行列の熱平均 \mathbf{T}_{av} は

$$\mathbf{T}_{av} = \frac{\mathbf{Q}_{av}}{1 - \mathbf{Q}_{av}\mathbf{P}} \quad (3.2)$$

である。ここで、 \mathbf{P} と \mathbf{Q}_{av} はそれぞれ \mathbf{k} 空間での表示で対角的である。 $\mathbf{P}(\mathbf{k})$ は

$$\mathbf{P}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k} | \mathbf{P} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma} \quad (3.3)$$

で与えられる。一方、任意のパラメータ Σ に対して、論文 III の Appendix C の (c.11) 式に示したように、

$$\mathbf{Q}_{av}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k} | \mathbf{Q}_{av} | \mathbf{k} \rangle \quad (3.4a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)]} \\ &\times \left\{ \frac{I^2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{P}(\mathbf{k}') \sum_{m(\neq l)} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{m})} \right. \\ &\quad \left. - \Sigma [-\Sigma + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma)] \right. \\ &\quad \left. \times \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{P}(\mathbf{k}') \sum_{m(\neq l)} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{m})} \right\} \quad (3.4b) \end{aligned}$$

ただし先に断わったように、論文 III の \mathbf{Q}_{av} を本論文では $\mathbf{Q}_{av}\mathbf{P}$ と定義を変更しているので注意されたい。

式(3.4b)中の F は

$$F = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k}) \quad (3.5a) \quad (3.5b)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma} \quad (3.5c)$$

$$= \frac{3}{W} \int_0^1 dx \frac{x^2}{\left(\frac{\omega - \Sigma}{W}\right) - x^2}$$

である。

CPA での Σ の条件は

$$-\Sigma + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma) = 0 \quad (3.6)$$

であるから、(3.4b)式のカッコの中の第2項は0となり、 $Q_{av}(\mathbf{k})$ は

$$Q_{av}(\mathbf{k}) = \frac{1}{[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(SH) - \Sigma)]} \quad (3.7)$$

$$\times \frac{I^2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}') \sum_{m(\neq l)} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{m})}$$

と簡単化される。

$$\frac{Q_{av}(x)}{W} = \frac{1}{[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)]}$$

$$\times \left(\frac{IS}{W}\right)^2 \left(1 + \frac{1}{S}\right) \left\{ C(\varepsilon) \times (\varepsilon + 1) \right.$$

$$\times \frac{3}{4Ax} \int_0^1 dy \frac{y}{\left(\frac{\omega - \Sigma}{W}\right) - y^2}$$

$$\left. \times \ln \left| \frac{\varepsilon + A(x+y)^2}{\varepsilon + A(x-y)^2} \right| - F \right\} \quad (3.8)$$

を得る。

ただし、デバ依半径を q_D として、

$$x = k/q_D \quad (3.9a)$$

$$y = k'/q_D \quad (3.9b)$$

である。また温度は

$$\varepsilon = (T - T_c)/T_c \quad (3.10)$$

であり、定数 A と $C(\varepsilon)$ はそれぞれ

$$A = \frac{(24\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{12} = \pi \left(\frac{\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}} = 3.19 \quad (3.11)$$

$$C(\varepsilon) = \frac{1}{2(\varepsilon + 1)} \left(\frac{\pi}{3}\right)^{\frac{4}{3}} \quad (3.12)$$

$$\times \frac{1}{1 - \left(\frac{24}{\pi^4}\right)^{\frac{1}{6}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \tan^{-1} \left[\left(\frac{\pi^4}{24}\right) \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \right]}$$

である。

CPA で求めた自己エネルギー Σ をパラメータ Σ として採用することにするとき、この Σ の虚数部が0でない箇所では、(2.26)式によって計算された自己エネルギー $\Sigma_i(\mathbf{k}, \omega)$ の虚数部も0ではない。その場合には、状態密度 $D(\omega)$ は、

$$W \times D(\omega) = \frac{W}{\pi N} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k} | \mathbf{G} | \mathbf{k} \rangle_{av} \quad (3.13a)$$

$$= -\frac{W}{\pi N} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_i(\mathbf{k}, \omega)} \quad (3.12b)$$

で計算される。

もし Σ が虚数部を持たない場合には、(3.13)式の分母が0となる $\Sigma_i(\mathbf{k}, \omega)$ が存在しなければ状態密度は0である。もしある ω の値に対して、 $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$ のときに

$$\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \Sigma_i(\mathbf{k}_1, \omega) = 0 \quad (3.14)$$

となるとすれば、このときの $\Sigma_i(\mathbf{k}_1, \omega)$ は実数であることに注意して $\Sigma_R \equiv \Sigma_i(\mathbf{k}_1, \omega)$ と置くと、状態密度の計算は論文 II の (12) 式から (13) 式を導くのと全く同様にできる。すなわち、

$$W \times D(\omega) \cong -\frac{W}{\pi N} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_R + i\delta} \quad (3.15a)$$

$$= \begin{cases} \frac{3}{2} \sqrt{\frac{\omega - \Sigma_R}{W}} & (0 < \frac{\omega - \Sigma_R}{W} < 1 \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{上記以外のとき}) \end{cases}$$

$$(3.15b)$$

$$(3.15c)$$

となる。ここで δ は正の微小量である。

4. 数値計算の結果と検討

以下にグリーン関数法 III の数値計算によって求められた状態密度、バンドの底、自己エネルギーを示し、検討を加える。

4.1 状態密度

グリーン関数法 III によって計算された状態密度 $D(\omega) \times W$ をエネルギー値 ω/W の関数として Fig. 3 に示す。Fig. 3a には $IS/W = 0.0, 0.1, 0.2$ の場合を、Fig. 3b には $IS/W = 0.3, 0.5$ の場合を、Fig. 3c には $IS/W = 1.0$ の場合をそれぞれ示す。各図において、点線は $T = \infty$ (CPA)、鎖線は $T = 2T_c$ 、実線は $T = T_c$ の状態密度をそれぞれ表している。

Fig. 3a は IS/W の小さい場合で、伝導バンドは1

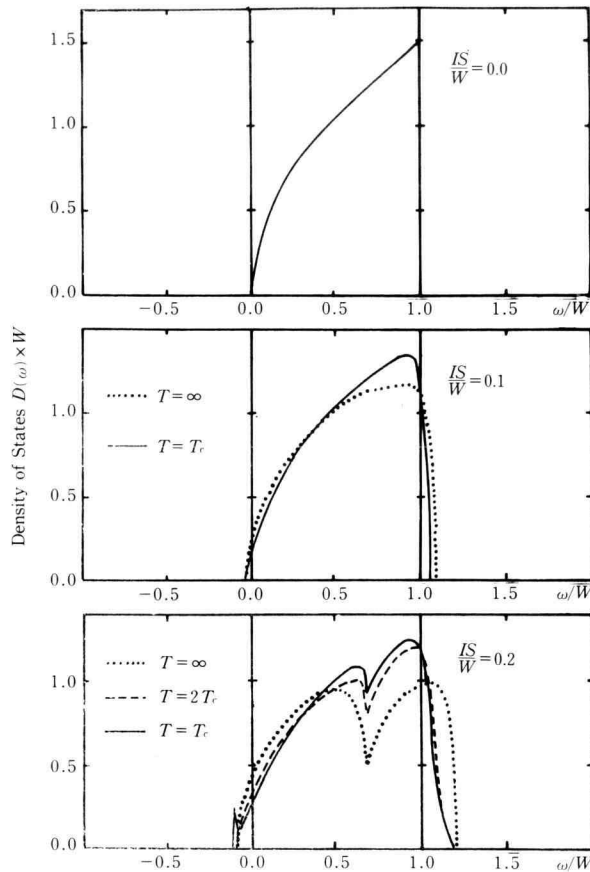


Fig. 3a Density of States

つに保たれている。 $IS/W=0.1$ の場合には、 $T=\infty$ (fスピン系が完全にランダム) から $T=T_c$ (短距離秩序の影響が最も強い) へと温度が下がるにつれて、高エネルギー側の状態密度が低エネルギー側にシフトする、中間エネルギー部分は高エネルギー側にシフトする、バンドの底はわずかに下がるなど、グリーン関数法 I の $IS/W=0.1$ の場合とよく一致する傾向を見せる。

$IS/W=0.2$ の場合では、 $T=\infty$ (CPA) ですでに状態密度の 2 つの山が出現するが、これはグリーン関数法 I の方法ではなかったものである。温度が $T=\infty$ から $T=T_c$ へと移行するにつれて、高エネルギー部分で低エネルギー側へのシフトが起き、中間エネルギー部分では高エネルギー側へとシフトする。一方 $T=T_c$ ではバンドの底に新たな状態密度の山が出現する

(このバンドの底の山については後でまとめて述べる)。

Fig. 3b には $IS/W=0.3, 0.5$ の場合の状態密度を示した。この図からわかるように、 IS/W が大きい場合には伝導バンドは 2 つのバンドの分裂する。低エネルギー部分は電子スピンの向きと f スピンの向きが平行な状態に対応し、低エネルギー部分は反平行な状態に対応する。CPA の計算によれば、 $T=\infty$ でそれぞれの状態密度の和は $(S+1)/(2S+1)$ と $S/(2S+1)$ つまり 0.5625 と 0.4375 である。温度が $T=\infty$ から T_c に近づき f スピン間相関が強まるにつれて、反平行バンド (高エネルギー部分) の状態密度は低エネルギー側へとシフトし、平行バンド (低エネルギー部分) は全体的に高エネルギー側へとシフトするものの、バンドの底には $T=T_c$ で新しく状態密度の山が出現する。 $IS/$

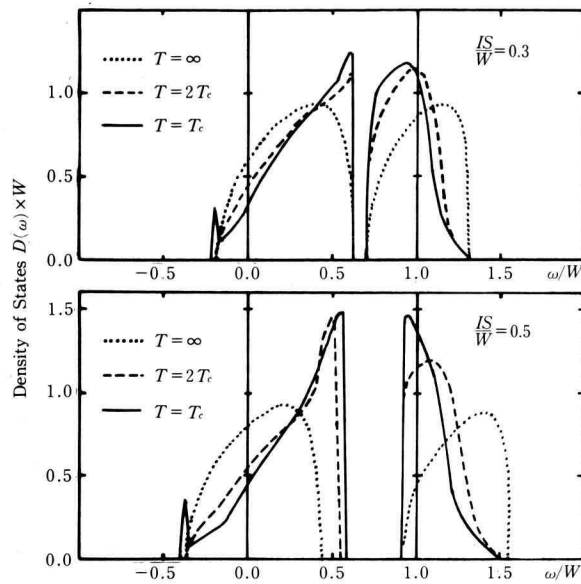


Fig. 3b Density of States

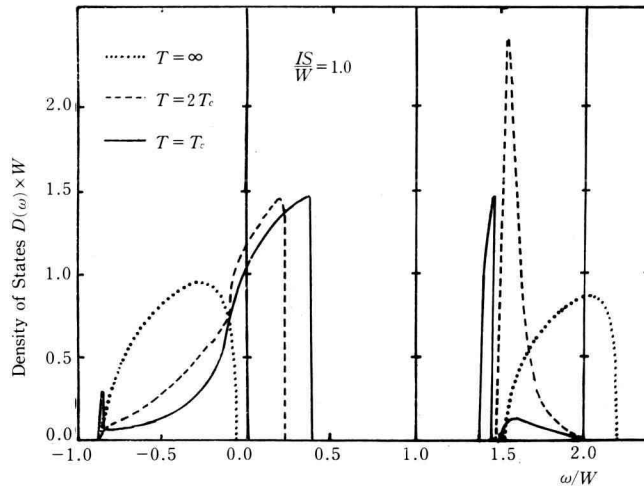


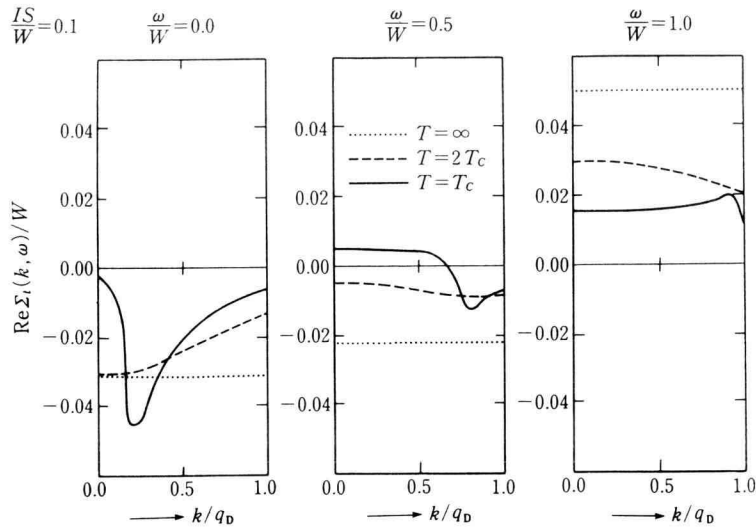
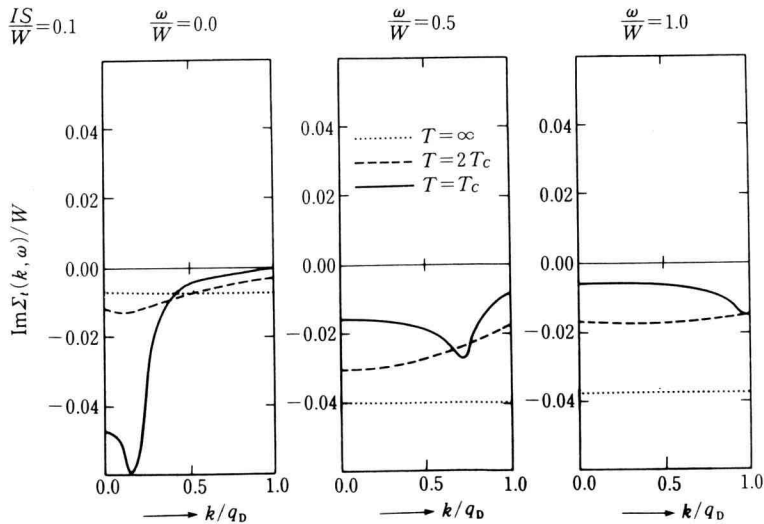
Fig. 3c Density of states

$W=0.5$ で特に顕著であるが, CPA ($T=\infty$) で状態密度がない (パラメータ Σ の虚数部分がない) エネルギー領域で $T=2T_c$ または T_c で有限の状態密度をもつのは (3.15) 式に基づいて状態密度を求めたことによる。

Fig. 3c には $IS/W=1.0$ の場合の状態密度も示す。Fig. 3b ($IS/W=0.3$ または 0.5) の場合と似た傾向を

示す。ただ $T=T_c$ で反平行バンドが更に2つのバンドに分裂するのは正しい振舞いなのかどうかについては疑問が残る。尚, この計算のすべてにおいて状態密度の和は1に保たれている。すなわち,

$$\int D(\omega) d\omega = 1.0 \quad (4.1)$$

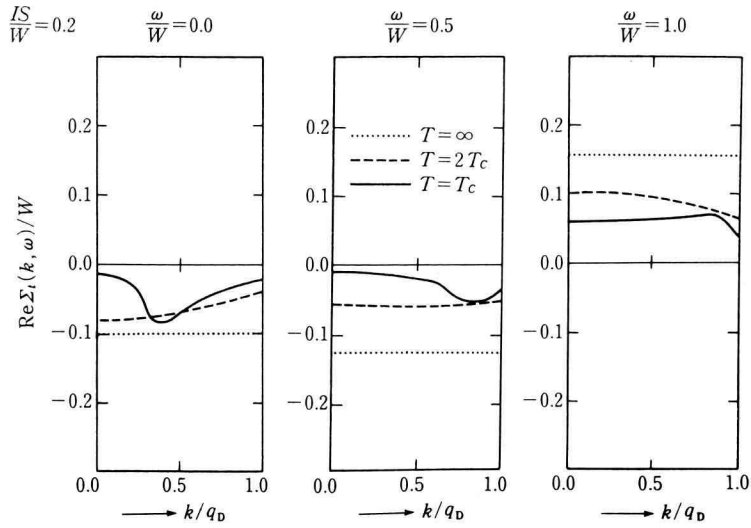
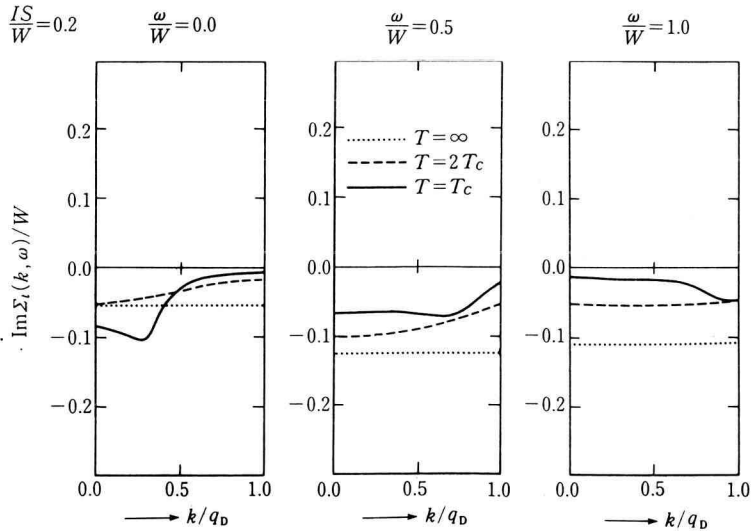
Fig. 4a $\text{Re}\Sigma_i(k, \omega)/W$ for $IS/W = 0.1$ Fig. 4b $\text{Im}\Sigma_i(k, \omega)/W$ for $IS/W = 0.1$

である。

4.2 自己エネルギー

Fig. 4, 5, 6, 7 にそれぞれ $IS/W = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5$ の場合の $\Sigma_i(k, \omega)/W$ を k/q_D の関数として示す。Fig. の a は実数部分 $\text{Re}\Sigma_i/W$ を b は虚数部分 $\text{Im}\Sigma_i/W$ を表している。各図の中の 3 つのグラフは、エネルギー値の $\omega/W = 0.0, 0.5, 1.0$ にそれぞれ対応している。

Fig. 4 は $IS/W = 0.1$ の場合であるが、その自己エネルギーは実数部・虚数部ともグリーン関数法 I の自己エネルギーによく一致している。グリーン関数法 I は self-consistent に自己エネルギーを決定しているのに対し、今回のやり方はそうではない。にもかかわらずかなりよく一致している。このような場合の自己エネルギーの物理的意味は必ずしも単純ではないが、大ざっぱに言って、実数部は散乱を受けた s 電子のエネ

Fig. 5a $\text{Re}\Sigma_t(k, \omega)/W$ for $IS/W=0.2$ Fig. 5b $\text{Im}\Sigma_t(k, \omega)/W$ for $IS/W=0.2$

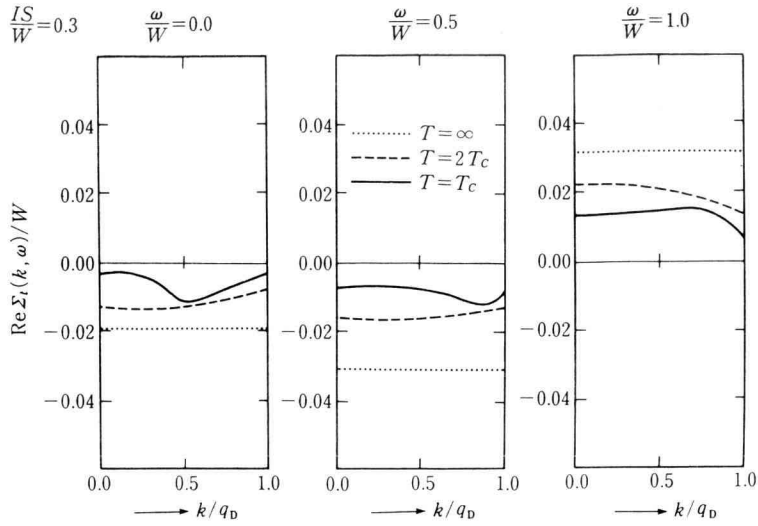
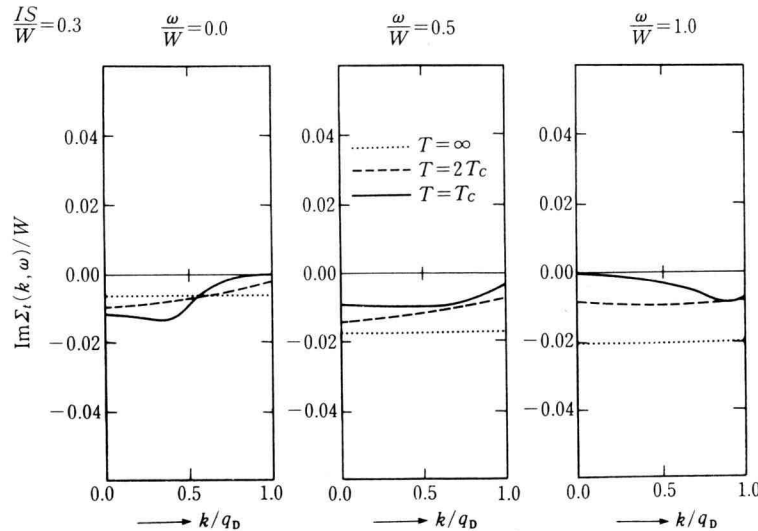
ルギー値を意味し、虚数部は受けた散乱の強さを表す。
例えば、 $IS=0$ の場合を考えると、エネルギー値 ω の
状態密度を生じるのは、

$$\omega = \frac{k^2}{2m} = \frac{q_0^2}{2m} \left(\frac{k}{q_0} \right)^2 = W \left(\frac{k}{q_0} \right)^2 \quad (4.2)$$

から k 空間でみると、

$$\frac{k}{q_0} = \sqrt{\frac{\omega}{W}} \quad (4.3)$$

の箇所である。これは $\omega/W=0.0, 0.5, 1.0$ のエネルギー値に対して $k/q_0=0.0, 0.71, 1.0$ の箇所である。
Fig. 4b で $T=T_c$ で負の大きな振れをもつ箇所（状態密度に大きく寄与するであろう箇所）が、 $\omega/W=0.0, 0.5, 1.0$ と大きくなるにつれて k/q_0 で 0.0 近くから

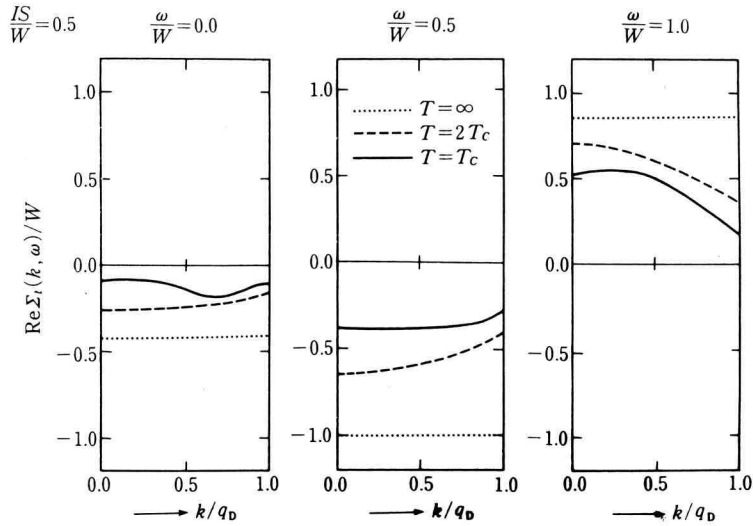
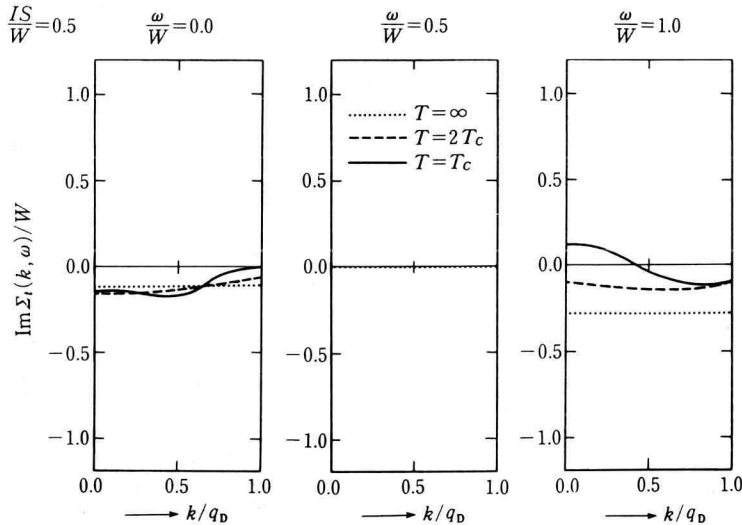
Fig. 6a $\text{Re}\Sigma_i(k, \omega)/W$ for $IS/W = 0.3$ Fig. 6b $\text{Im}\Sigma_i(k, \omega)/W$ for $IS/W = 0.3$

1.0の方へと移動しているのは(これは $IS/W = 0.1$ の場合であるが)このことを反映していると考えられる。一方自己エネルギーの実数部分 $\text{Re}\Sigma_i$ は散乱されたs電子のエネルギー値を反映しているとすれば、

$$\omega = \frac{k^2}{2m} + \text{Re}\Sigma_i(k, \omega) \quad (4.4)$$

と書けるだろう。Fig. 4aではまず高エネルギー部分

($\omega/W = 1.0$)では $T = \infty$ より $T = T_c$ へと温度変化し、fスピン間の短距離秩序がきいてくると、 $\text{Re}\Sigma_i$ が全体的に($k/q_D = 1.0$ で最大)低下してくることがわかる。これは高エネルギー部分で、温度の低下とともに、状態密度が低エネルギー側へとシフトしていることに対応している。一方低エネルギー部分($\omega/W = 0.0$)では $\text{Re}\Sigma_i$ が最小値を取るのとは $k = 0$ 付近ではなく、 $k/q_D \sim 0.2$ 付近であり、同時にこの箇所は $\text{Im}\Sigma_i$ が最小値を

Fig. 7a $\text{Re}\Sigma_t(k, \omega)/W$ for $IS/W=0.5$ Fig. 7b $\text{Im}\Sigma_t(k, \omega)/W$ for $IS/W=0.5$

との付近でもある。エネルギー値 ω がバンド端に更に近づくにつれて、 Σ の実部と虚部がどのように振舞うかをもう少しきちんと押える必要がある。

同様な傾向は Fig. 5, 6, 7 でも読み取れるが、グラフで示した $\omega/W = 0.0, 0.5, 1.0$ のエネルギー値は IS/W が大きくなるにつれて、必ずしも低エネルギー、中間、高エネルギー部分のバンド端の性格をよく表さなくなっているのかもしれない。

ただし、Fig. 7b($IS/W=0.5$)で $\omega/W=1.0$ の一部が $T=T_c$ のとき $\text{Im}\Sigma_t > 0$ を示しているのは見逃せない。状態密度が正を取るの、自己エネルギーの虚数部が負であるのと同値である。従って、自己エネルギーの虚数部は一般に負であるべき物理量である。自己エネルギーの一部が正となっていることはグリーン関数法 III の適用限界を示唆している。

4.3 伝導帯の底の振舞い

状態密度を示した Fig. 3 の $IS/W = 0.2, 0.3, 0.5, 1.0$ の図には、バンドの底にいずれも状態密度の小さなピークが示されている。この部分を拡大して示したのが Fig. 8 で、とくにキュリー温度近くの振舞いが示されている。点線は CPA ($T = \infty$) である。

このバンドの底で出現するピークは $T = T_c$ で最大で、キュリー温度から離れるにつれて、急速に減少する。図には $T = T_c, 1.02 T_c, 1.05 T_c, 1.10 T_c$ を示した。

このバンドの底で出現した状態密度は、パラメータ Σ (CPA で算出した Σ) が虚数を持たないエネルギー領域に存在する。すなわち (3.13) 式で説明したような方法で計算されている。

Q_{av} は 2 つの異なるサイトでの s 電子の散乱に対応するが、 Σ が実数の場合には Q_{av} は虚数部を持たない。従って (2.26) 式から $\Sigma_t(\mathbf{k}, \omega)$ も虚数部を持たない。グリーン関数 G の虚数部は (3.15) 式から求められ、 δ -関数形を持っている。一般に固有状態が \mathbf{k} 空間

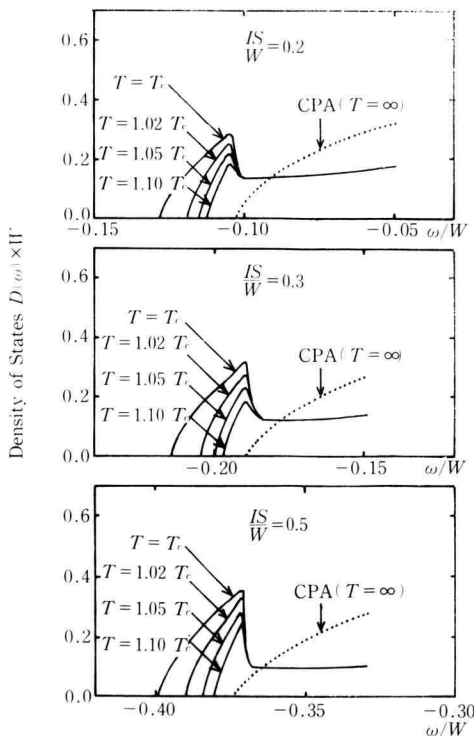


Fig. 8. バンドの底での状態密度

で対角化される場合に限り、このように δ -関数形を持つものと思われるが、今の場合は f スピン系の短距離秩序があるから、この効果を正しく取り込めば δ -関数形にはならないだろう。今後の課題ではあるが、 $\Sigma_t(\mathbf{k}, \omega)$ を何らかの形で self-consistent に決める必要がある。

しかし、Fig. 8 で出現したバンドの底の状態密度のピークは、 $T = T_c$ 近くでの s 電子状態について、一定の知見を与えてくれる。

マグネティック・ポーラロンとの比較において、このバンドの底の状態を考えてみよう。マグネティック・ポーラロンとは磁性半導体中の局在状態として存在するものとして広く研究されてきたもので、Fig. 9 にその概念図を示す。強磁性半導体中を運動する s 電子は強い s-f 交換相互作用を通して周囲の f スピンを揃え、自身自身が揃えた f スピンのポテンシャルに束縛されてその場所に局在化する。これがいわゆる自縄自縛型のマグネティック・ポーラロンで、Takahashi-Kasuya によれば、強磁性半導体では、 T_c のごく近傍で、広い格子点にまたがる large polaron の形で存在しうる。

今回の私達の研究では、s 電子が f スピン系から受ける効果は考慮に入れても、f スピン系が s 電子から受ける変化は一切無視している。それは、ごく少数の s 電子の存在のみを仮定し、結晶全体に広がったでの

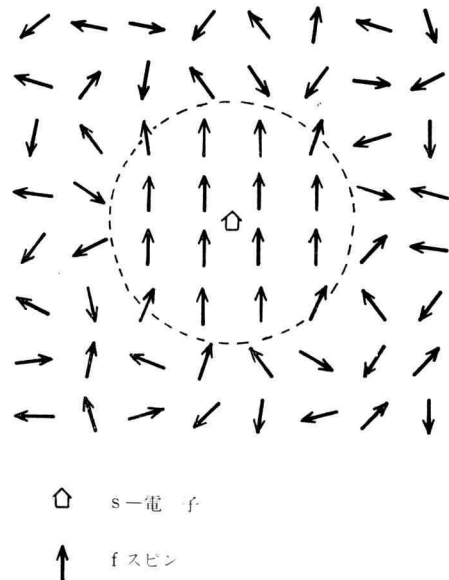


Fig. 9. マグネティックポーラロンの概念図

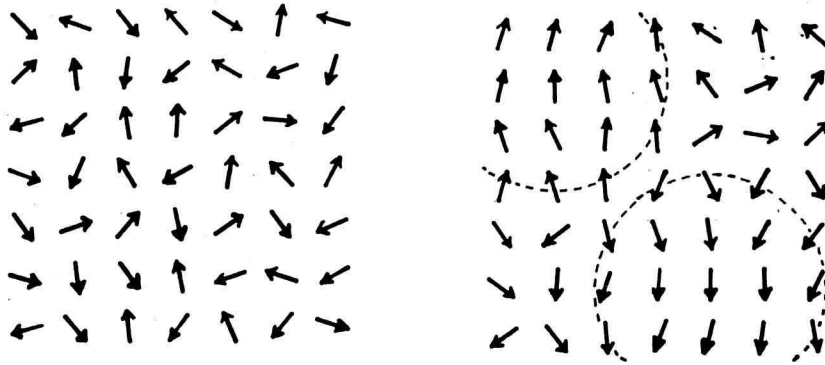


Fig. 10. 結晶中の f スピンの秩序状態

- (a) $T = \infty$ では f スピンの向きは完全にランダムである
 (b) $T \sim T_c$ では局所的に f スピンが揃い始める

伝導状態のみを考えているため、s 電子の局在化の過程は一切入っていない。

しかし、s 電子が存在しなくても、 T_c 近くで f スピン系は局所的に揃い始め short range order を形成することはよく知られている。このような short range order は、 $T \gtrsim T_c$ であっても（結晶全体の磁化は 0 であっても）、結晶中に幾つも存在しうる。結晶を運動中の s 電子は当然 f スピンが局所的に揃ったこのようなポテンシャルの引力に引き込まれて、その領域で高い存在確率を示すようになり、準局在状態をつくるだろう。結晶中の各所に同じような準局在状態をつくるとすれば、当然それらのエネルギー準位はほぼ同じ値を

示すだろうから、それぞれ共鳴状態となり、有限の状態密度を持つようになる。このような状態は f スピンが揃った場所に準局所化しているという点で、先に述べたマグネティック・ポーラロンと共通の性格を持っている。この状態を私達は擬似マグネティック・ポーロン (pseudo-magnetic polaron) と呼ぶことにする。実際この状態は Takahashi-Kasuya¹⁾ によって示されたマグネティック・ポーロンの安定条件とよく似た温度領域でのみ存在する。

擬似マグネティック・ポーロン状態が前馳段階となって自縄自縛型のマグネティック・ポーロンを形成するのか、それともこの状態のまま安定状態なのか

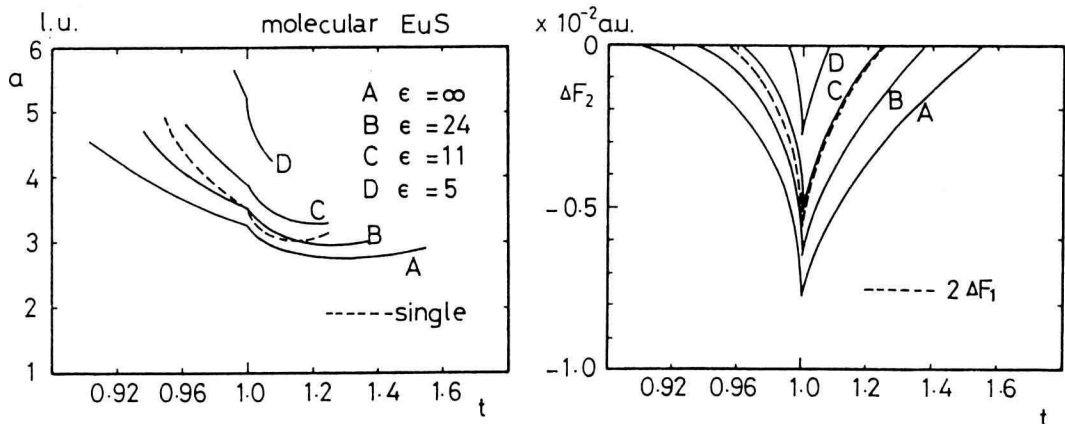


Fig. 11. マグネティックポーロンの安定状態：左図はポーロンの半径、右図は自由エネルギーを示す図中で実線は分子型ポーロン点線は単一型ポーロンである。高橋・糟谷による。

等の議論は今後の興味ある研究課題である。

4.4 パラメータ Σ の決定法

グリーン関数法 III では, CPA で求めた自己エネルギー Σ をパラメータとして使い, f スピン間の短距離秩序が発生する温度領域での自己エネルギー $\Sigma_t(\mathbf{k}, \omega)$ を計算した。この方法は self-consistent な方法ではなく, 状態密度が有限の場合でも Σ_t の虚数部が 0 であるなどの結果を生じている。

私達は, Σ_t を self-consistent に決定する試みの一つとして, 式 (2.20) の \mathbf{k} 成分

$$\mathbf{G}_{av}(\mathbf{k}) = \mathbf{P}(\mathbf{k}) + \mathbf{P}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_{av}(\mathbf{k}) \mathbf{P}(\mathbf{k}) \quad (4.5)$$

を計算し, ある ω に対して

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{P}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_{av}(\mathbf{k}) \mathbf{P}(\mathbf{k}) = 0 \quad (4.6)$$

という条件から Σ を求めた。このようにして求めた Σ では

$$D(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} G_{av}(\mathbf{k}) \quad (4.7a)$$

$$= -\frac{1}{\pi N} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k}) \quad (4.7b)$$

となる。この方法では, (4.6) 式の条件からわかるように, 非摂動の項を含む $\mathbf{T}_{av}(\mathbf{k})$ の \mathbf{k} 平均が小さくなるように Σ を決められる。

しかし計算された状態密度の和は, グリーン関数法 II と同様

$$\int_{-\infty}^{\infty} D(\omega) d\omega = 1.0 \quad (4.8)$$

という条件を満たさなかった。この原因は未だはっきりしない。ただ, (4.6) 式が \mathbf{k} 空間全体での \mathbf{T}_{av} の平均が 0 になるという条件から Σ を決めているのに対して, 特定の \mathbf{k} , 例えば $\mathbf{k}=0$ で $\mathbf{T}_{av}(\mathbf{k})=0$ という条件から Σ を決めたらどうなるかということは今後の課題として残されている。

参 考 文 献

- 1) M. Takahashi and T. Kasuya: J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 3127: 3137