

s-f モデルと電子状態 VII

—— グリーン関数法 V と VI ——

高橋 正雄*・三井 和博*・梅原 雅捷**

s-f Model and Electron States VII

—— Green's Function Method V and VI ——

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

Abstract

In order to obtain a self-consistent solution for the s-f model we have tried two approaches, Green's Function method V and VI. In the Green's function V, the self-energy and the density of states have been calculated by just replacing the free propagator by the dressed propagator in the diagram which was used in the Green's Function III. However, the numerical results have not satisfied physical condition for the total density. The caution of the failure may come from the lack of accurate lattice-summation for the higher order. In Green's Function VI, we have also tried some improvements for this point by taking into account the higher order diagram and by introducing some approximation for spin-spin correlation. The results have failed to obtain physical result, again. The reason of such failure comes from the difficulty of the lattice-summation. The way to improve is also discussed.

1. はじめに

強磁性半導体中の伝導電子状態を記述するモデルとして、s-f モデルは広く使われ、大きな役割を果たしてきたのは、よく知られている通りである。私達は、この s-f モデルからどのような電子状態が実現可能かを、理論的に解明しようと試みてきた。その結果、今後解決すべき幾つかの問題点もはっきりしてきた。

まず、伝導電子状態は、伝導電子のバンド幅 W と、s-f 交換相互作用の大きさ IS との比によって大きく異なる。つまり、 (IS/W) の値が小さいときは、電子状態は比較的ブロッホ状態を保ち、 (IS/W) の値が大きいときは、まず s 電子のスピンの局在 f スピンに平行か反平行かによって、固有エネルギーの $-IS$ と $+I(S+1)$ とに対応した 2 つのバンドに分裂する。

伝導電子状態はまた、s-f 交換相互作用を通して、f

スピン系の磁気秩序の影響を強く受ける。強磁性半導体中の f スピンは高温の極限では完全にランダムであるが、キュリー温度 T_c 近くでは、常磁性温度領域でも局所的には f スピンが揃う、いわゆる短距離秩序 (short-range order) を生ずる。このため、伝導電子状態を記述するには、個々のサイトでの散乱だけではなく、相関関係にある異なるサイトによる散乱を正しく扱うことが大切になってくる。

私達は先に、f スピン対相関関数を用いて s-f 交換相互作用の 2 次ダイアグラムを取り込んだグリーン関数法 I を提唱し、CPA と比較した。f スピン系が完全にランダムである高温の極限では、1 サイトでの多重散乱をきちんと取り込んでいる CPA は、 (IS/W) の値の広い範囲で良い近似だと考えられるからである。CPA との比較の結果、グリーン関数法 I は、 $(IS/W) \leq 0.1$ の範囲内で有効であると結論づけられた。

反面、 $(IS/W) \geq 0.1$ の領域では、グリーン関数法 I は有効ではない。これは、グリーン関数法 I では、1 サイトでの多重散乱を正しく取り込んでいないからであ

1993 年 9 月 24 日受理

* 一般科

** 無機材質研究所

る。そのため私達は、グリーン関数法Ⅱを提案し、多重散乱を t 行列で取り入れた。グリーン関数法Ⅲでは、 f スピン系の高次の項を、切断 (decoupling) により、取り込んだ。

グリーン関数法Ⅲは、 (IS/W) の値の広い範囲で、ある程度満足すべき結果を得た。具体的にいうと、グリーン関数法Ⅲは、

- (i) 高温の極限で CPA と一致する。そのため、高温では (IS/W) の値の広い範囲でよい近似とみなされる。
- (ii) (IS/W) の小さい範囲では、常磁性温度の全領域でグリーン関数法Ⅰと対応できる (後で述べるように一致はしない)。
- (iii) (IS/W) の値の広い範囲で、バンド端は物理的に合理的な値を示す。すなわち、バンド端エネルギー $\omega_b \geq -IS$ という条件を、 (IS/W) の大きい領域でも、 $T = \infty$ はもちろん $T = T_c$ でも満たす。
- (iv) 状態密度の総数は、 (IS/W) の全領域および $T \geq T_c$ の全温度領域で一定に保たれている。

しかし、

- (v) グリーン関数法Ⅲは一種の摂動であり、自己エネルギー Σ が self-consistent に求められていない。そのため、一部のエネルギー領域で、 Σ の (とくに虚数部の) 挙動が正しくない。

次に私達は、特に (v) で述べた欠点を克服する方向に進むわけだが、この問題は、1 サイトでの多重散乱と、異なるサイトにある相関性の強い f スピン対による散乱とが、両方とも関連してくる問題であり、典型的な多体問題である。

この論文では、self-consistent な解を求めるために実行した、グリーン関数法ⅤとⅥについて、その考え方と結果をまとめる。次に、CPA を越える理論としてこれまで発表されている理論について簡単にまとめ、私達の理論との比較検討を行なう。

2. 基本的な展開

私達は強磁性半導体中の伝導電子を記述するものとして s - f モデルを仮定し、次のハミルトニアンから出発する；

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

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

$$H_{sf} = -I \sum_{l\mu\nu} a_{l\mu}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}_l \cdot a_{l\nu} \quad (2.3)$$

系全体のハミルトニアン H_t には、 H の他に f スピン系の相互作用 H_f が加わる；

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

さて私達は、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、

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

を求めたい。しかし、(2.6) 式の中で分母の H の f スピン演算子が含まれているので、このままでは熱平均を取るのには困難である。そこで私達は、未知のパラメータ Σ_μ (μ は s 電子のスピン \uparrow 又は \downarrow に対応) を含む非摂動ハミルトニアン K を次式で導入する；

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

非摂動ハミルトニアン K は、 f スピン演算子を含んでいない。

一方、 f スピン演算子を含む摂動ハミルトニアン V は、

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

$$= \sum_l \sum_{\mu\nu} (-I \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}_l - \Sigma_\mu \delta_{\mu\nu}) a_{l\mu}^\dagger a_{l\nu} \quad (2.8b)$$

で定義する。

非摂動グリーン関数 P は、 K を用いて、

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

と定義される。

式 (2.9) で定義される P は、 f スピン演算子を含まず、もはや熱平均をとる必要がない。式 (2.8) と式 (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、明らかに違う。そこで、同じサイトでの多重散乱を明確に取り込むために、 t 行列を次式で導入する：

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

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

この t 行列を用いると G は、

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

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、式 (2.10) または (2.12) 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。グリーン関数法Ⅲはその必要性から提案されたものであった。

3. グリーン関数法Ⅲ

グリーン関数 G に対する T 行列を、

$$G = P + P T P \quad (3.1)$$

で定義する。 T は

$$T = \sum_l t_l + \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m \\ = \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n + \dots \quad (3.2)$$

で表わされる。

さて、すでに証明したように (論文 III), 式 (3.2) は、厳密な表式として、

$$T = \sum_l t_l + \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} v_m \\ + \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} v_m P \times T \quad (3.3)$$

と書ける。式 (3.3) の T の定義式の中で再び T が現われていること、右辺第 2 項と第 3 項は $t_l P v_m$ の形になって、 t と v とが両方出現していることは注意を要する。(t のかわりに v を用いることの重要性は論文 VI で指摘してある)。

式 (3.3) は厳密な表式であるが、 T の熱平均をとる

ときに、右辺の第 3 項の熱平均を 3 つの熱平均の項の積で近似することを考える。すなわち、 T の熱平均 $T_{av} = \langle T \rangle_{av}$ に対して、

$$T_{av} = \sum_l \langle t_l \rangle_{av} + \sum_l \sum_{m(\neq l)} \langle t_l P v_m \rangle_{av} \\ + \sum_l \sum_{m(\neq l)} \langle t_l P v_m \rangle_{av} P \times T_{av} \quad (3.4)$$

と近似する。

ここで、 Q_{av} を、

$$Q_{av} = \sum_l \sum_{m(\neq l)} \langle t_l P v_m \rangle_{av} \quad (3.5)$$

で定義すれば、式 (3.4) は、

$$T_{av} = \sum_l \langle t_l \rangle_{av} + Q_{av} + Q_{av} P T_{av} \quad (3.6)$$

となり、

$$T_{av} = (1 - Q_{av} P)^{-1} \times (\sum_l \langle t_l \rangle_{av} + Q_{av}) \quad (3.7)$$

が導かれる。

従って、 Q_{av} を求めれば T_{av} を求めることができ、式 (3.1) の熱平均

$$G_{av} = P + P T_{av} P \quad (3.8)$$

によって、 G_{av} が計算できる。

式 (3.8) より、

$$P^{-1} - G_{av}^{-1} = T_{av} (1 + T_{av} P)^{-1} \quad (3.9)$$

である。式 (3.6) の T_{av} を式 (3.9) に代入すると、

$$P^{-1} - G_{av}^{-1} = (\sum_l \langle t_l \rangle_{av} + Q_{av}) (1 + \sum_l \langle t_l \rangle_{av} P)^{-1} \quad (3.10)$$

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、 k 空間で対角的であり、 $G_{av}(k, \omega) \equiv \langle k | G_{av} | k \rangle$, $Q_{av}(k, \omega) \equiv \langle k | Q_{av} | k \rangle$ などと表記することができる。もちろん、

$$P(k, \omega) = \langle k | P | k \rangle = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma} \quad (3.11)$$

である。自己エネルギー $\Sigma_i(k, \omega)$ を

$$G_{av}(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma_i(k, \omega)} \quad (3.12)$$

と定義すると、(3.10) の左辺の k 成分は、

$$P^{-1}(k, \omega) - G_{av}^{-1}(k, \omega) = \Sigma_i(k, \omega) - \Sigma \quad (3.13)$$

である。

未知のパラメータ Σ として、CAP の条件

$$\langle t_l \rangle_{av} = 0 \quad (3.14)$$

から求まる Σ_{CPA} を用いると, (3.10) 式と (3.13), (3.14) を用いて,

$$\Sigma_t(k, \omega) = \Sigma_{CPA} + Q_{av}(k, \omega) \quad (3.15)$$

となる。f スピン間の相関の s 電子への効果はすべて, $Q_{av}(k, \omega)$ に入ってしまったことになる。

4. 常磁性温度領域でのグリーン関数法 III の表式

常磁性温度領域 ($T \geq T_c$) では特定の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 電子のスピン向きを表す μ には関係せず, Σ と書いてよい。

このとき, t 行列は, 次の表式で与えられる;

$$t_l = \begin{pmatrix} \langle l \uparrow | t_l | l \uparrow \rangle & \langle l \uparrow | t_l | l \downarrow \rangle \\ \langle l \downarrow | t_l | l \uparrow \rangle & \langle l \downarrow | t_l | l \downarrow \rangle \end{pmatrix} \quad (4.1a)$$

$$= \frac{1}{B} \begin{pmatrix} -IS_{lz} + \{-\Sigma + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma)\} & -IS_{l-} \\ -IS_{l+} & IS_{lz} + \{-\Sigma + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma)\} \end{pmatrix} \quad (4.1b)$$

ただし, (4.1b) 式中の分母 B は,

$$B = [1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)] \quad (4.2)$$

である。また式 (4.1), (4.2) にでてきた F は

$$F \equiv F(\omega) = \langle l \uparrow | \mathbf{P} | l \uparrow \rangle = \langle l \downarrow | \mathbf{P} | l \downarrow \rangle \quad (4.3a)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_k \langle k | \mathbf{P} | k \rangle = \frac{1}{N} \sum_k P(k, \omega) \quad (4.3b)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - \epsilon_k - \Sigma} \quad (4.3c)$$

で定義される。

さて, CPA の条件は,

$$\langle t_l \rangle_{av} = 0 \quad (4.4a)$$

つまり

$$\langle l \uparrow | t_l | l \uparrow \rangle = \langle l \downarrow | t_l | l \downarrow \rangle = 0 \quad (4.4b)$$

である。 $T \geq T_c$ では

$$\langle S_{iz} \rangle_{av} = 0 \quad (4.5)$$

であることを考えると, (4.1b) と (4.4b) より, CPA の条件の具体的表式は,

$$-\Sigma + F(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma) = 0 \quad (4.6)$$

である。簡単な変形で, 式 (4.6) は,

$$\Sigma = \frac{1}{1 + F(\Sigma - I)} \times I^2 S(S+1)F \quad (4.7)$$

と書ける。一方, CPA の条件式 (4.6) を満足するような Σ に対して, 式 (4.2) の B は,

$$B = 1 + F(\Sigma - I) \quad (4.8)$$

と簡単化する。これは式 (4.7) の分母である。

また CPA の Σ に対しては, t 行列の成分の表式 (4.1b) も式 (4.8) の B を用いて,

$$t_l = \frac{1}{B} \begin{pmatrix} -IS_{lz} & -IS_{l-} \\ -IS_{l+} & IS_{lz} \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

と簡単化する。

CPA の条件から求まる Σ を用いて, G_{av} を書くと, 式 (2.8), (3.5) および式 (4.9) より,

$$Q_{av}(k, \omega) = \sum_l \sum_{m(\neq l)} \langle k \uparrow | t_l P_{vm} | k \uparrow \rangle_{av} \quad (4.10a)$$

$$= \sum_l \sum_{m(\neq l)} \sum_\mu \langle k | l \rangle \langle l \uparrow | t_l | l \mu \rangle$$

$$\times \langle l | P | m \rangle \langle m \mu | v_m | m \uparrow \rangle \langle m | k \rangle \quad (4.10b)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_l \sum_{m(\neq l)} e^{ik(l-m)} \langle l | P | m \rangle$$

$$\times \sum_\mu \langle l \uparrow | t_l | l \mu \rangle \langle m \mu | v_m | m \uparrow \rangle \quad (4.11b)$$

ここで,

$$\sum_\mu \langle l \uparrow | t_l | l \mu \rangle \langle m \mu | v_m | m \uparrow \rangle$$

$$= \langle l \uparrow | t_l | l \uparrow \rangle \langle m \uparrow | l_m | m \uparrow \rangle$$

$$+ \langle l \uparrow | t_l | l \downarrow \rangle \langle m \downarrow | v_m | m \uparrow \rangle \quad (4.12a)$$

$$= \frac{1}{B} \{ (-IS_{lz})(-IS_{mz} - \Sigma) + (-IS_{l-})(-IS_{m+}) \}$$

$$\quad (4.12b)$$

$$= \frac{1}{B} \{ +I^2 S_{lz} S_{mz} + I^2 S_{l-} S_{m-} + IS_{lz} \Sigma \} \quad (4.12c)$$

である。 $T \geq T_c$ で

$$\langle S_{lx} \rangle_{av} = \langle S_{ly} \rangle_{av} = \langle S_{lz} \rangle_{av} = 0 \quad (4.13)$$

であることを使えば, 式 (4.12) の平均値は,

$$\sum_\mu \langle \langle l \uparrow | t_l | l \mu \rangle \langle m \mu | v_m | m \uparrow \rangle \rangle_{av}$$

$$= \frac{I^2}{B} \langle S_l \cdot S_m \rangle_{av} \quad (4.14)$$

式 (4.10) に式 (4.14) を代入して,

$$Q_{av}(k, \omega) = \frac{I^2}{NB} \sum_l \sum_{m(l)} e^{ik(l-m)} \langle l | \mathbf{P} | m \rangle \times \langle \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_m \rangle_{av} \quad (4.15)$$

となる。

ところで、式 (4.15) の右辺の中で $m=l$ が除かれているが、これが CPA の Σ に対応することを次に示す。 $m=l$ の場合には、

$$\langle \mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_m \rangle = S(S+1) \quad (4.16)$$

$$\langle m | \mathbf{P} | m \rangle = F(\omega) \quad (4.17)$$

であるから、式 (4.15) の右辺の中で $m=l$ に対応するのは、

$$\begin{aligned} \frac{I^2}{NB} \sum_l \langle l | \mathbf{P} | l \rangle \langle \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_l \rangle \\ = \frac{I^2 S(S+1)}{B} \cdot F(\omega) \end{aligned} \quad (4.18a)$$

$$= \Sigma_{CPA} \quad (4.18b)$$

ここで (4.18a) から (4.18b) への変形には、(4.7) 式を利用した。

以上をまとめると、グリーン関数法 III の自己エネルギー Σ_l は、式 (3.15), (4.15) で与えられるが、式 (4.18) を利用すれば、

$$\Sigma_l(k, \omega) = \frac{I^2}{NB} \sum_l \sum_m e^{ik(l-m)} \times \langle l | \mathbf{P} | m \rangle \langle \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_m \rangle_{av}$$

と書くことができる。あるいは、同じことだが

$$\Sigma_l = \sum_l \sum_m \langle t_l \mathbf{P} v_m \rangle_{av} \quad (4.20)$$

と書いた方が、取り込んだ散乱の効果がわかりやすいかもしれない。

すぐわかるように、式 (4.20) は Rys *et al.*²⁾ が求めた自己エネルギーの表式の中、 v_l (v の片方) を多重散乱を組み込んだ t_l で置き換えたものに他ならない。あるいは式 (4.19) でみれば、右辺は Rys *et al.* の式を CPA の Σ を使用した分母 $B=1+F(\Sigma-I)$ でわったものになっている。

Shinkkonen³⁾ は、自己エネルギーの表式中で、 \mathbf{G}_0 を \mathbf{G} で置き換えることによって、self-consistent な表式を得た。私達の場合も、self-consistent な解を求めるために、 \mathbf{P} を \mathbf{G}_{av} で換えようとするのは当然の方向であろう。

5. グリーン関数法 V

私達は s-f モデルに対する self-consistent な解を得る試みとして、次の 2 つの方法を実行した；

(a) グリーン関数法 Va

式 (4.19) で、 \mathbf{P} を \mathbf{G}_{av} に置きかえた。ただしこのとき、分母 B の Σ は CPA の条件から決まる Σ をそのまま使用した。この方法を、GF. Va と略す。

(b) グリーン関数法 Vb

上と同様に、式 (1.19) 中で、 \mathbf{P} を \mathbf{G}_{av} で置きかえた。ただしこのとき、分母 B の Σ は、CPA の条件つまり (4.6) 式から求めたものではなく、

$$-\Sigma + \mathcal{F}(IS + \Sigma)(I(S+1) - \Sigma) = 0 \quad (5.1)$$

という条件から決まる Σ を用いた。式 (5.1) 中の \mathcal{F} は $F = \langle n | \mathbf{P} | n \rangle$ のかわりに用いたもので

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(\omega) = \langle n | \mathbf{G}_{av} | n \rangle \quad (5.2)$$

で定義する。 l 行列の定義式 (2.11) では \mathbf{P} を用いているが、そのかわりに \mathbf{G}_{av} を使用したことに対応する。この方法を GF. Vb と略すことにする。

この 2 つの方法は、

- (i) 高温 ($T=\infty$) では CPA と一致する、
- (ii) 式 (4.19) の分母中の $B=1+F(\Sigma-I)$ で、 (IS/W) の小さいとき Σ が $(IS/W)^2$ に比例することを考慮すると、 $(IS/W) \ll 1$ で $B=1$ となり、グリーン関数法 I と一致する、

という特徴をもっている。

私達は、 $(IS/W)=0.5$ の場合について、上の 2 つの方法を実行した。結果はしかし、両方の方法とも、物理的に合理性のある結果は得られなかった。すなわち、数値計算が収束しないで発散（振動）したり、負の状態密度になったり、という不満足な結果に終わった。

グリーン関数法 V が、不首尾に終わった原因を次に考察してみる。例によって、ダイアグラムを使うとわかりやすい。

ダイアグラムで使用する記号の定義を Fig. 1 に示す。これらの定義を用いれば、式 (4.20) で与えられるグリーン関数法 III のダイアグラムは、Fig. 2 で書けるだろう。グリーン関数法 V は、Fig. 2 において、 \mathbf{P} を表す実線を、 \mathbf{G}_{av} を表する二重線で置きかえたものとして、Fig. 3 で表されるであろう。


P ;  G ;  v ;  t ; 

Fig. 1.

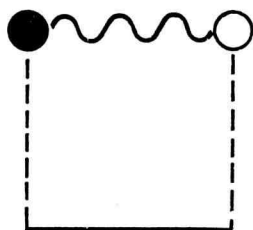


Fig. 2.

ところで、Fig. 3で表される自己エネルギーの形を具体的に展開してみると、Fig. 4のようになる。Fig. 4 (a) は、スピン対相関の1次のみを含み、グリーン関数法Ⅲに対応する。Fig. 4(b), (c)はスピン対相関の2次の項である。この中で、Fig. 4(b)に注目すると、このダイアグラムは、相関するスピン対 m と n で散乱される途中で、相関するスピン対 i と j とで散乱され

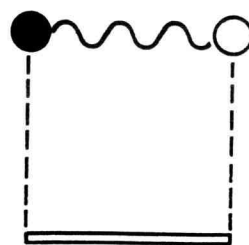
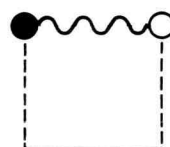
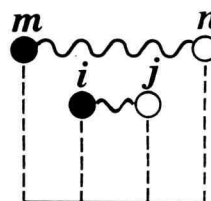


Fig. 3.

(a)



(b)



(c)

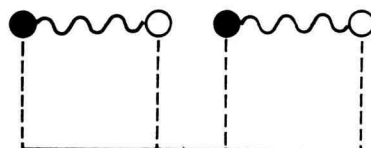


Fig. 4.

るという過程を含んでいる。ところが、サイト m での多重散乱はすでに i 行列によって含まれているから、サイト i での散乱の条件には $i \neq m$ という条件を課すべきであるということに気がつく。この効果は当然 (IS/W) の値が大きいところで重要になってくる。この効果をどのように扱ったらよいかを、次に考えてみることにする。

6. グリーン関数法 VI

私達はグリーン関数法 V が、散乱過程での P が G_{av} に置き換わったことが原因で、再びサイトの和の取り方が正しくなっていないことを知った。ここでは、サイトの和の制限の取り除き方について考える。

今、サイトの和を正しく取ってある自己エネルギーの既約ダイアグラムを Σ^c と記し、Fig. 5(a)のように、斜線をひいて表す。ワニエ関数表示による Σ^c を、2つのサイト m, n について、

$$\Sigma_{m,n}^c = \langle m \uparrow | \Sigma^c | n \uparrow \rangle = \langle m \downarrow | \Sigma^c | n \downarrow \rangle \quad (6.1)$$

と表す。

さて、 $\Sigma_{m,n}^c$ の表式は、Fig. 5(b) で表す自己エネルギーから、散乱過程で $\Sigma_{m,n}^c$ を含む Fig. 5(c) の形の自己エネルギーを差し引いたものである。ただし、そのままでは引きすぎであるから、Fig. 5(d) の $m=n$ の場合を付け加えておく。そうすると、式 (5.2) の \mathcal{F} の定義を考慮して、 $\Sigma_{m,n}^c$ は次式で表される。

$$\Sigma_{mn}^c = \langle t_m v_n \rangle_{av} G_{mn} - \langle t_m v_n \rangle_{av} \mathcal{F}^2 \Sigma_{mn}^c + \delta_{mn} \langle t_m v_m \rangle_{av} \mathcal{F}^2 \Sigma_{mn}^c \quad (6.1)$$

ただし G_{mn} はワニエ表示でのグリーン関数で、

$$G_{mn} = \langle m \uparrow | G_{av} | n \uparrow \rangle = \langle m \downarrow | G_{av} | n \downarrow \rangle \quad (6.2)$$

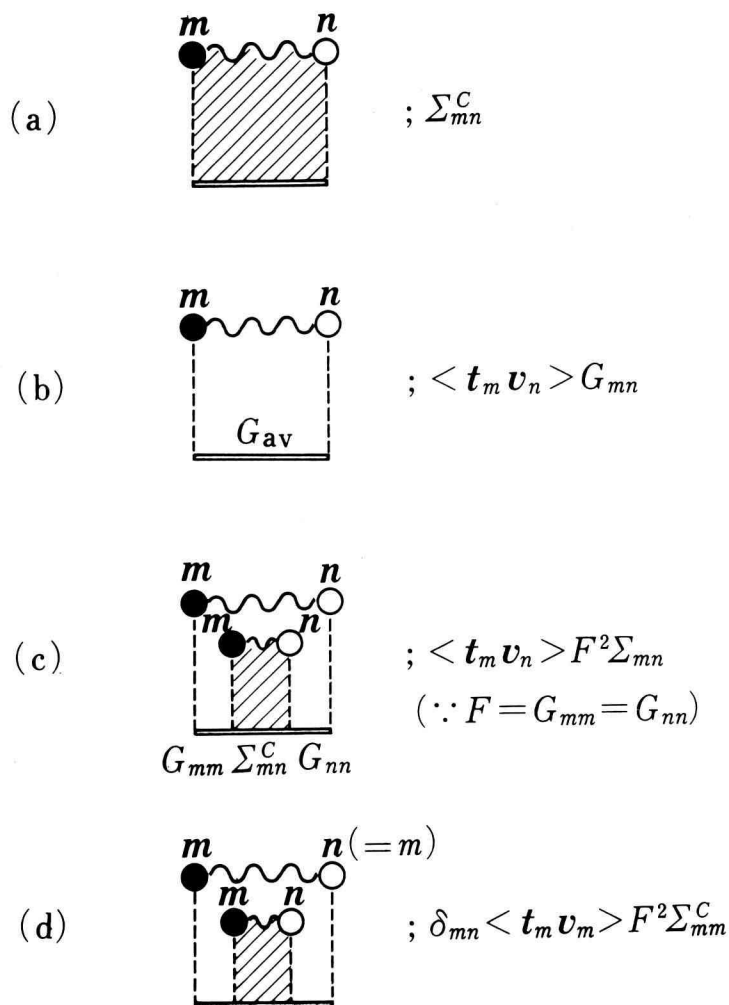


Fig. 5.

である。

式 (6.1) より,

$$\Sigma_{m,n}^c = \frac{\langle t_m \cdot v_n \rangle_{av} G_{mn}}{1 + \{\langle t_m \cdot v_n \rangle_{av} - \delta_{mn} \langle t_m v_m \rangle_{av}\} \mathcal{T}^2} \quad (6.3)$$

と書ける。次に式 (6.3) の k 空間での表示を求めると,

$$\Sigma(k, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{mn} e^{ik(m-n)} \Sigma_{mn}^c \quad (6.4a)$$

$$= \langle t_m \cdot v_m \rangle_{av} G_{mn} \sum_{m(n)} \frac{\langle t_m \cdot v_n \rangle_{av} G_{mn} e^{ik(m-n)}}{1 + \langle t_m \cdot v_n \rangle_{av} \mathcal{T}^2} \quad (6.4b)$$

すぐわかるように, 式 (6.4) 中の右辺の第1項は, 式 (4.18) に相当し, 高温の極限で CPA 近似と一致することを保証する。他方 $m \neq n$ では, グリーン関数法 V からくる項に, 散乱過程での和の制限からくる効果を, 分母 $\{1 + \langle t_m \cdot v_n \rangle_{av} \mathcal{T}^2\}$ の形で取り入れたことになっている。

式 (6.4) はそのままの形で数値計算を実行することは難しい。そのため, 式 (6.4b) 中の第2項の分母を何らかの形で近似することを考えた。私達は, 次の2つの方法を試みた。

(a) グリーン関数法 VIa

式 (6.4) の第2項の分母に含まれる $\langle t_m \cdot v_n \rangle_{av}$ は $r = m - n$ の関数である。Appendix に示すように, $\langle S_m \cdot S_n \rangle_{av}$ は大きな $r(m \neq n)$ に対して,

$$\langle S_m \cdot S_n \rangle_{av} = \frac{3\pi D}{2A} \times \frac{1}{q_D r} \exp \left[-(q_D r) \sqrt{\frac{\epsilon}{A}} \right]$$

$$(6.5)$$

という関数形をもっている。ただし,

$$\epsilon = (T - T_c) / T_c \quad (6.6a)$$

$$D = C(\epsilon)(\epsilon + 1)S(S + 1) \quad (6.6b)$$

である。また, CPA の条件式 (4.6) を満たす Σ を用いれば,

$$\langle t_m \cdot v_n \rangle_{av} = \frac{1}{B} \langle S_m \cdot S_n \rangle_{av} \quad (6.7)$$

とできる。ただし, Σ は式 (4.6) 中の F を \mathcal{T} で置きかえて, self-consistent に決めた。そのような Σ に対して, 式 (4.8) と同様

$$B = 1 + \mathcal{T}(\Sigma - I) \quad (6.8)$$

である。

式 (6.4) 中の分母の $\langle t_m \cdot v_n \rangle_{av}$ は $r = |m - n|$ の関数であるが, ここでは $r = \text{一定}$ と近似した。つまり, (6.4) 式中の分母は, $r = |m - n|$ の大きいところで急速に1に近づくはずであるが, それを r の大きいところまで一定値であるとした。 r の値としては, 格子定数 a や, 実空間での1サイトあたりの有効半径などを試みた。この方法を GF.VIa と称する。

結果はしかし, 物理的に意味のある解をもたらさなかった。つまり, 数値計算は, 収束しなかったり, 負の状態密度になるという結果に陥った。

その原因の1つは明らかに, 式 (6.4) 中の分母の $\langle t_m \cdot v_n \rangle$ の $r = |m - n|$ 依存性を無視したことにあ

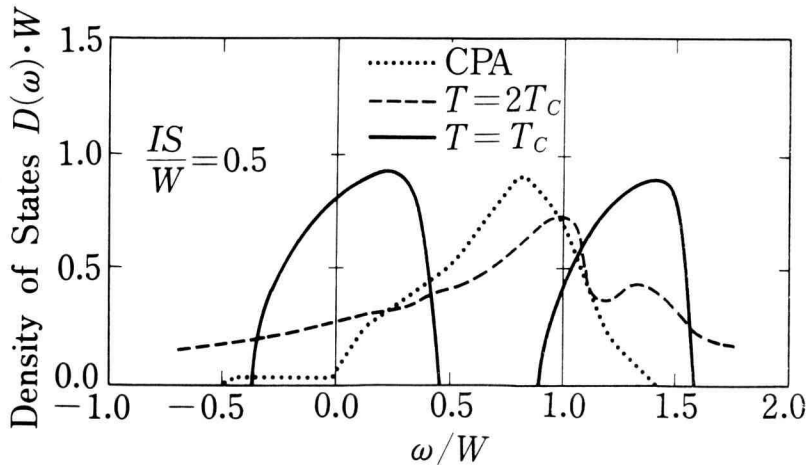


Fig. 6.

る。そこで、私達は、次の方法で r 依存性 (k 依存性) を導入した。

(b) グリーン関数法 VIb

GF. 法 VIa でみたように、式 (6.4b) の中での r 依存性を無視することはできない。そこで私達は、式 (6.4b) の第 2 項を次の形で近似した。

$$\begin{aligned} \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle t_m \cdot v_n \rangle G_{mn} e^{ik(m-n)}}{1 + \langle t_m \cdot v_n \rangle_{\text{av}} \mathcal{F}^2} \\ \simeq \frac{\sum_{m(\neq n)} \langle t_m \cdot v_n \rangle G_{mn} e^{ik(m-n)}}{1 + \Gamma(k) \mathcal{F}^2} \end{aligned} \quad (6.9)$$

ここで

$$\Gamma(k) = \sum_m \langle t_m \cdot v_n \rangle_{\text{av}} e^{ik(m-n)} \quad (6.10a)$$

$$= \frac{I^2}{B} \sum_m \langle S_m \cdot S_n \rangle_{\text{av}} e^{ik(m-n)} \quad (6.10b)$$

$$= \frac{I^2}{B} \times \frac{C(\epsilon)(\epsilon+1)S(S+1)}{\epsilon + A(k/q_D)^2} \quad (6.10c)$$

である。式 (6.9) の分子は GF. 法 V での形と同じだから、計算できる。

私達は、この方法で $(IS/W)=0.5$ のときの状態密度を計算した。Fig. 6 にその結果を示す。 $T=2T_c$ のときは $(\omega/W) \sim 1.1$ 付近で収束していない。エネルギー値が下限 $(\omega/W) = -(IS/W) = -0.5$ より下にまで状態密度をもつのは明らかにおかしい。 $T=T_c$ のときは、バンドの両端近くをのぞいてほぼ収束したが、状態密度の総和を求めると、条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} D(\omega) d\omega = 1.0 \quad (6.11)$$

を満たさない。総和の概算は 0.621 であった。この方法を、GF. 法 VIb と呼ぶことにする。

7. 議論とまとめ

私達は、s-f モデルに対する self-consistent な解を求めるため、いろいろなダイアグラムを考察した。このうち、GF. 法 Va と Vb は繰り返し法で実行して、収束に向かわなかった。GF. 法 VIa も収束しなかった。唯一収束に向かったのは、GF. 法 VIb であったが、これも状態密度の総和が 1.0 とならないため、物理的に適正な解ではない。

以上のことから考えると、私達が考察したように、

Fig. 4(b) で $m=i$ としたときのダイアグラムが、発散の原因の 1 つであることはほぼ間違いない。これを補正するために、私達は Fig. 4 のようなダイアグラムを考え、式 (6.4) の形で自己エネルギーを取り出した。

もちろん、式 (6.4) をそのまま数値計算できればよいのだが、そのままでは困難なため、GF. 法 VIa と VIb という 2 つの近似法を試みた。その結果は、式 (6.4) に対する近似の方法の悪さ(とくに、分母の $\langle t_m \cdot v_m \rangle$ の r 依存性の取扱い)を示唆していた。ただし、このことは必ずしも式 (6.4) の近似式が適正であると断定するものではない。

CPA は単一サイトでの多重散乱を取り込んだ一種の平均場近似で、広くその有用性が認められている。

1 サイト近似である CPA を拡張して、サイト間の相関を導入することを試みた論文はいくつかあるが、ここでは簡単にそれらをまとめて今後の研究の足がかりとする。

比較的成功していると思われるのは、クラスター・コヒーレント・ポテンシャル近似 (CCPA) と呼ばれるものである。基本的な考え方は次の通りである。クラスターとよばれる一群の原子 (イオン) 群が、有効媒質中に存在するものと考え、その有効媒質は、クラスター中の原子のすべての配位 (状態) についての散乱の平均が、その有効媒質による散乱の性質に等しくなるように self-consistent に決める。この方法は、何人かの研究者によって発展させられ^{4,5)}、CuPd 合金の状態密度の計算などに使われている⁶⁾。しかし、この方法で実際に計算を行なう場合には、クラスターの中の原子 (イオン) の数は有限個に限られる。実例 CuPd 合金に対して Tanaka *et al.*⁶⁾ の計算は、2 サイト・クラスター CPA (2CPA) で行なわれている。一方、私達が問題としている強磁性半導体では、f スピン間の相関距離は $T=T_c$ で無限大となる。従って、有限個の原子のみの相関を問題とする CCPA は、私達の場合には適用できそうもない。

一方、対相関まで厳密に入れて、2 サイト近似へと拡張する試みは、Yonezawa and Homma⁷⁾ と S.N. Aiyer *et al.*⁸⁾ によって行なわれた。とくに、Aiyer らのダイアグラムによる考え方は私達の研究にも参考になる点が多い。ただ Aiyer の方法は、二元合金を念頭に入れて議論しているので、s-f モデルのように、f スピンのベクトル的な相関が問題となる場合にはそのまま拡張するのは難しい。

Freed and Cohen⁹⁾の方法では、コヒーレント・ポテンシャル σ_n はクラスターに対する相対的な位置に応じて、サイトごとに異なり、しかも、クラスター内の原子配置にも依存する。そのため数値計算を実行するのは困難に思われる。

ところで、CPA を越えようと試みた理論の多くは、計算が破綻的に複雑になったり、グリーン関数の解析性が保証されていない場合が多い。私達の場合でも、そのことは何度か指摘されている。Nickel and Bulter¹⁰⁾ は、そのようなことは、一般的に起こると述べている。その指摘は示唆に富むが、しかし、それが現在までのところ、解決法へと結びつかない。

Appendix スピン対相関関数

スピン対相関関数の k 表示を、次のような形で定義する；

$$\sigma(k) \equiv \sum_m \langle S_m \cdot S_n \rangle_{av} e^{i k \cdot (m-n)} \quad (A.1a)$$

$$= \frac{C(\epsilon)(\epsilon+1)S(S+1)}{\epsilon + A(k/q_D)^2} \quad (A.1b)$$

$$= \frac{D}{\epsilon + Fk^2} \quad (A.1c)$$

ただし、ここで、

$$D = C(\epsilon)(\epsilon+1)S(S+1) \quad (A.2)$$

$$F = A/q_D^2 \quad (A.3)$$

である。

スピン対相関関数の r 表示は、(A.1) 式をフーリエ変換して得られる；

$$\sigma(r) = \frac{1}{N} \sum_k \sigma(k) e^{-i k \cdot r} \quad (A.4a)$$

$$= \frac{Q}{(2\pi)^3} \times 2\pi \int_0^{q_D} k^2 dk \sigma(k) \int_{-1}^1 dx e^{-i k r x} \quad (A.4b)$$

$$= \frac{Q}{2\pi^2 r} \int_0^{q_D} dk \sigma(k) k \sin kr \quad (A.4c)$$

$$= \frac{DQ}{2\pi^2 r} \int_0^{q_D} dk \frac{k \sin kr}{\epsilon + Fk^2} \quad (A.4d)$$

ここで Q は 1 サイトあたりの体積である。式 (A.4d) 中で、積分範囲を $[0, q_D]$ から、 $[0, \infty]$ へと変更する。

$$\sigma(r) = \frac{DQ}{2\pi^2 r} \int_0^\infty dk \frac{k \sin kr}{\epsilon + Fk^2} \quad (A.5a)$$

$$= \frac{D}{4\pi r} \times \frac{Q}{F} \exp[-r\sqrt{(\epsilon/F)}] \quad (A.5b)$$

ただし、fcc では $q_D^3 Q = 6\pi^2$ であるから、

$$\frac{Q}{F} = \frac{q_D^2 Q}{A} = \frac{q_D^3 Q}{A q_D} = \frac{6\pi^2}{A q_D} \quad (A.6)$$

従って係数は

$$\frac{D}{4\pi r} \times \frac{Q}{F} = \frac{3\pi D}{2A(q_D r)} \quad (A.7)$$

他方、指数部分は、

$$\frac{r}{\sqrt{F}} = \frac{q_D r}{\sqrt{q_D^2 F}} = \frac{(q_D r)}{\sqrt{A}} \quad (A.8)$$

以上をまとめると、 $\sigma(r)$ として次式を得る；

ただし

$$\sigma(r) = \frac{3\pi D}{2A} \times \frac{1}{(q_D r)} \exp(-q_D r \sqrt{\epsilon/A}) \quad (A.9)$$

$$D = C(\epsilon)(\epsilon+1)S(S+1) \quad (A.10)$$

参考文献

- 1) 高橋・三井・梅原；神奈川工科大学研究報告 **16** (1993).
- 2) F. Rys, J.S. Helman and W. Baltemberger: Phys. Kondens. Mater. **6** (1967) 105.
- 3) J. Shinkkonen: Phys. Rev. **B16** (1979) 6407.
- 4) M. Tsukada; J. Phys. Soc. Jpn **32** (1972) 1475.
- 5) A. Mookerjee; J. Phys. **F17** (1987) 1511.
- 6) N. Takano, S. Imai and M. Fukuchi: J. Phys. Soc. Jpn **60** (1991) 1647.
- 7) F. Yonezawa and S. Homma: Proc. Intern. Conf. Statistical Mechanics, Kyoto 1968: J. Phys. Soc. Jpn. **26** (1969) Suppl. 68.
- 8) R.N. Aiyer, R.J. Elliott, J.A. Krumhansl and P.L. Leath; Phys. Rev. **181** (1969) 1006.
- 9) K.F. Freed and M.H. Cohen: Phys. Rev. **B15** (1971) 3400.
- 10) B.G. Nickel and W. Bulter: Phys. Rev. Lett. **30** (1973) 373.