

# s-f モデルと電子状態 IX

—— 電気伝導度の計算 ——

高橋 正雄\*・三井 和博\*・梅原 雅捷\*\*

s-f Model and Electron States IX

—— Calculation of Electric Conductivity ——

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

## Abstract

By applying Velicky's theory to the s-f exchange model, we have calculated the electronic conductivity for ferromagnetic semiconductors.

The conductivity is zero for  $T=0\text{K}$ , and increases rapidly as  $T$  approaches  $T_c$  (Curie temperature). The results have been discussed comparing with the experimental data of EuO and EuS ( $IS/W=0.04$ ) and of LaMnO<sub>3</sub> ( $IS/W \approx 1.0$ )

## 1. はじめに

私達は、強磁性半導体中の伝導電子に対して、s-f モデルを適用し、どのような電子状態が出現可能なのかを、理論的に研究してきた。ただし、これまでの研究対象は、主として状態密度に限られてきた。この論文では、電気伝導度（電気抵抗）を、研究対象とする。

強磁性半導体における電気伝導度の計算は、s-f 交換相互作用を摂動とする2次摂動の計算が既にC. Haas<sup>1)</sup>によって実行されている。この近似方法は、s-f 交換相互作用の大きさ  $IS$  と伝導電子帯の幅  $W$  との比、 $IS/W$  の値が小さいとき、温度  $T$  がキュリー温度  $T_c$  近くでない場合に限って有効である。

従って、 $IS/W$  の値が大きい場合や  $T_c$  近くでは、Haas 理論を越えた扱いが必要となる。

幸い、私達はグリーン関数法 III によって、常磁性温度 ( $T \geq T_c$ ) では、 $IS/W$  の値の広い範囲にわたって、物理的にもっともらしい状態密度を得ることができた。

この論文では、前論文に引き続き、強磁性温度 ( $T <$

$T_c$ ) での CPA と、それに基づく電気伝導度の計算を実行する。

CPA での電気伝導度の表式は、B. Velicky<sup>2)</sup>によって、求められた。この理論は、もともとは、置換型不規則性を用する不規則合金の電子状態を扱うものとして展開された。私達はまず、Velicky 理論をたどりながら、この理論がそのまま、局在スピン系による伝導電子の散乱を記述する s-f モデルに適用できることを示す。次に、実際に、Velicky 理論を強磁性半導体に適用して、温度  $T/T_c$  および伝導電子の濃度とともに、電気伝導度がどのように変化するかを、 $IS/W$  のいろいろな値についての数値計算の結果として示す。最後に、Haas 理論と対比させて、私達の結果を議論する。

## 2. CPA と電気伝導度

ここでは、Velicky 理論<sup>2)</sup> についてまず理解を深め、s-f 交換相互作用の中のスピン演算子のように非可換な演算子を含む場合でも Velicky 理論が適用できるかどうかを議論する。

### 2.1 Kubo-Greenwood の公式

電気伝導度  $\sigma$  (テンソル) は、Kubo-Greenwood の

1993年9月30日受理

\* 一般科

\*\* 無機材質研究所

公式によって、( $\hbar=1$  の単位系で)

$$\sigma^{ab} = \frac{\pi e^2}{m^2 \Omega} \int d\eta \left( -\frac{df}{d\eta} \right) \times \text{Tr} \langle p^a \delta(\eta - H) p^b \delta(\eta - H) \rangle \quad (2.1)$$

で与えられる。ここで、 $e$  と  $m$  は電子の電荷と質量を表し、 $\Omega$  は結晶積体積である。ギリシャ文字  $\alpha, \beta$  は直交座標の  $x, y, z$  を示す。また、 $\langle \dots \rangle$  は母集団による統計平均 (置換型不規則系の場合は異なる原子配置すべての統計平均、s-f モデルの場合には局在 f スピン系についての統計平均) を意味する。一方、伝導電子 (s 電子) 系については、

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\beta(E - \mu)}} \quad (2.2)$$

の形で、熱分布を取ることにする。ここで、 $\beta = 1/k_B T$  で ( $k_B$  はボルツマン定数)、 $\mu$  は化学ポテンシャルである。私達は実際の計算では、縮退した電子系を対称とし、 $\eta$  に対する積分への寄与は、 $\eta = \epsilon_F$  (フェルミ・エケルギー) だけが (デルタ関数的に) 寄与するものとする。すなわち、

$$\sigma^{ab} = \frac{\pi e^2}{m^2 \Omega} \text{Tr} \langle p^a \delta(\eta - H) p^b \delta(\eta - H) \rangle \quad (2.2a)$$

$$\eta = \epsilon_F \quad (2.2b)$$

である。

式 (2.1) と (2.2) の  $\text{Tr}$  は、 $k$  空間 (ブロッホ関数) またはサイト  $n$  (ワエ関数) について和を取ることを意味する。その結果、電子スピン  $\uparrow$  と  $\downarrow$  についてそれぞれ、 $\sigma^{ab}$  が存在することになる。つまり、 $\text{Tr}$  は  $|k \uparrow\rangle$  または  $|k \downarrow\rangle$  について、 $k$  の和を取るという意味に理解してよい。

さて、グリーン関数 (resolvent; 逆核) を、

$$G(z) = (z - H)^{-1} \quad (2.3)$$

で導入すると、

$$\delta(\eta - H) = \frac{1}{2\pi i} [G(\eta - i0) - G(\eta + i0)] \quad (2.4)$$

である。簡単のため、 $\eta^+ = \eta + i0$ 、 $\eta^- = \eta - i0$  と以下で表すことがある。

式 (2.2) 中に、式 (2.4) を代入することを考える。すると、以下のような変形が可能である；

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \langle p^a \delta(\eta - H) p^b \delta(\eta - H) \rangle \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \text{Tr} \langle p^a [G(\eta^-) - G(\eta^+)] p^b [G(\eta^-) - G(\eta^+)] \rangle \end{aligned}$$

(2.5a)

$$\begin{aligned} &= +\frac{1}{4\pi^2} \text{Tr} \langle p^a [G(\eta^+) p^b G(\eta^-) + G(\eta^-) p^b G(\eta^+) \\ &\quad - G(\eta^+) p^b G(\eta^+) - G(\eta^-) p^b G(\eta^-)] \rangle \end{aligned} \quad (2.5b)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{4\pi^2} \text{Tr} [p^a \langle G(\eta^+) p^b G(\eta^-) \rangle + \langle G(\eta^-) p^b G(\eta^+) \rangle \\ &\quad - \langle G(\eta^+) p^b G(\eta^+) \rangle - \langle G(\eta^-) p^b G(\eta^-) \rangle] \end{aligned} \quad (2.5c)$$

ただし、運動量  $p^a$  ( $a = x, y, z$ ) は、f スピン系の熱平均とは何も関係ないから、 $\langle \dots \rangle$  の外に出した。

次に  $K$  を次式で定義する；

$$K(z_1, p^b, z_2) = \langle G(z_1) p^b G(z_2) \rangle \quad (2.6)$$

すると結局、式 (2.2) は、

$$\begin{aligned} \sigma^{ab} &= \frac{e^2}{4\pi m^2 \Omega} \text{Tr} p^a [K(\eta^+, p^b, \eta^-) + K(\eta^-, p^b, \eta^+) \\ &\quad - K(\eta^+, p^b, \eta^+) - K(\eta^-, p^b, \eta^-)] \end{aligned} \quad (2.7)$$

と書けるようになる。従って、以下の展開は、式 (2.6) で定義した  $K$  をどのような近似で求めるかということが中心となる。

論文の構成をわかりやすくするために、結論を先にすると、Velicky 理論は (2.6) 式の  $K$  を

$$K(z_1, p^b, z_2) = \langle G(z_1) p^b G(z_2) \rangle \quad (2.8a)$$

$$\cong G_{av}(z_1) p^b G_{av}(z_2) \quad (2.8b)$$

と近似することに相当する。式 (2.8) 中での、 $G_{av}(z)$  は CPA で求められる。

近似式 (2.8b) を使うと、電気伝導度  $\sigma$  は、式 (2.7) から、

$$\begin{aligned} \sigma^{ab} &\cong \frac{e^2}{4\pi m^2 \Omega} \text{Tr} p^a [G_{av}(\eta^+) p^b (G_{av}(\eta^-) \\ &\quad + G_{av}(\eta^-) p^b G_{av}(\eta^+) - G_{av}(\eta^+) p^b G_{av}(\eta^+) \\ &\quad - G_{av}(\eta^-) p^b G_{av}(\eta^-)] \end{aligned} \quad (2.9a)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{e^2}{4\pi m^2 \Omega} \text{Tr} p^a p^b [G_{av}(\eta^+) - G_{av}(\eta^-)] \\ &\quad \times [G_{av}(\eta^+) - G_{av}(\eta^-)] \end{aligned} \quad (2.9b)$$

となる。式の変形の途中では、 $p$  と  $G_{av}$  の可換性を利用した。また、 $p$  も  $G_{av}$  も  $k$  表示では対角的である。

$$\langle k | p^a | k' \rangle = m \left( \frac{\partial}{\partial k^a} \right) \epsilon(k) \delta_{kk'} \equiv m v^a(k) \delta_{kk'} \quad (2.10)$$

$$\langle k | G_{av}(z) | k' \rangle = G_{av}(k, z) \delta_{kk'} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \text{また, } G_{\text{av}}(n^-) &= G_{\text{av}}^*(\eta^+) \text{ であり,} \\ \langle k | [G_{\text{av}}(\eta^+) - G_{\text{av}}(\eta^-)] | k \rangle &= 2i \times \text{Im } G_{\text{av}}(k, \eta^+) \end{aligned} \quad (2.12)$$

である。

式 (2.9)–(2.12) より, Tr を  $k$  の和で置き換えて,

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{e^2 \hbar}{\pi Q} \sum_k v^\alpha(k) v^\beta(k) \cdot [\text{Im } G_{\text{av}}(k, \eta^+)]^2 \quad (2.13)$$

と書ける。ここで  $\eta^+ = \epsilon_F + i0$  であることはもう一度記しておこう。また, 式 (2.13) は s 電子のスピンのいずれか一方 (↑ または ↓) に対するものであって, 実際はそれぞれのスピンの向きとの和で電気伝導度が定義される。

以上の式の展開の中で, s-f 交換相互作用の特殊性 (スピン非可換性など) が問題となる点はない。Velicky 理論は, (2.8) 式の近似に特長がある。次にこの近似の正当性について, もう少し検討を加えてみよう。

[注] 本論文で使用されている文字と Velicky 論文での文字との対比は次の通りである;

本論文 ( $\leftrightarrow$  Velicky 論文);  $K$  ( $\leftrightarrow K$ ),  $G_{\text{av}}$  ( $\leftrightarrow \bar{G}$ ),  $H_{\text{sf}}$  ( $\leftrightarrow U$ ),  $H_{\text{s}}$  ( $\leftrightarrow W$ ),  $\Sigma_t$  ( $\leftrightarrow \Sigma$ ),  $K = H_{\text{s}} + \Sigma_t$  ( $\leftrightarrow W + \Sigma$ )

## 2.2 $K$ に対する Velicky の理論

### 2.2.1 $P$ と $K$ についての基本方程式

系を記述するハミルトニアン  $H$  を, 周期性有効ポテンシャル  $H_0$  と摂動ポテンシャル  $V$  とに分解する。

$$H = H_0 + V \quad (2.14)$$

このとき,  $H_0$  で記述される系は一種の仮想結晶 (近似) に相当し,

$$H_0 = H_{\text{s}} + \Sigma_t \quad (2.15)$$

$$V = H_{\text{sf}} - \Sigma_t \quad (2.16)$$

と書ける。 $\Sigma_t$  は仮想結晶のポテンシャルである仮想結晶に対するグリーン関数  $P$  を,

$$P = \frac{1}{z_1 - H_0} \quad (2.17)$$

で定義する。すると, 式 (2.3) で定義した  $G$  は,

$$G^{-1} = z_1 - H \quad (2.18a)$$

$$= z_1 - H_0 + H_0 - H \quad (2.18b)$$

$$= P^{-1} - V \quad (2.18c)$$

$$= P^{-1} + (\Sigma_t - H_{\text{sf}}) \quad (2.18d)$$

式 (2.18) を書き直すと,

$$G = P + PVG, \quad (2.19a)$$

$$= P + P(H_{\text{sf}} - \Sigma_t)G, \quad (2.19b)$$

$$= P + G(H_{\text{sf}} - \Sigma_t)P \quad (2.19c)$$

これらの式の熱平均を取り,

$$\langle G \rangle = P \quad (2.20)$$

という条件から,  $\Sigma_t$  を決定することになるとその条件は,

$$\langle (H_{\text{sf}} - \Sigma_t)G \rangle = \langle G(H_{\text{sf}} - \Sigma_t) \rangle = 0 \quad (2.21)$$

となる。また,  $t$  行列  $T$  を,

$$G = P + PTP \quad (2.22)$$

で定義すると, 条件式 (2.20) は,

$$\langle T \rangle = 0 \quad (2.23)$$

ということに等しい。これが CPA である。

ところで, 式 (2.6) で定義された  $K$  に, 式 (2.22) を用い, CPA の条件式 (2.23) を適用しよう。 $p$  と  $P$  の記号の混同を防ぐため, Velicky 論文にならって, 以下では

$$C \equiv p^{\beta} \quad (2.24)$$

と書くことにしよう (もっと一般性を持たせたと解釈してもよい)。

すると, 式 (2.6) で定義された  $K$  は, (2.22) 式を用い, CPA の条件式 (2.2) を適用することにより,

$$K = \langle GCG \rangle \quad (2.25a)$$

$$= \langle (P + PTP)C(P + PTP) \rangle \quad (2.25b)$$

$$= PCP + P \langle TPCPT \rangle P \quad (2.25c)$$

式 (2.25c) の第 1 項は, 式 (2.25a) に入っている 2 つのグリーン関数  $G$  を, それぞれ独立に熱平均を取ったことに相当する。第 2 項は, 式 (2.25a) の  $G$  が同時に同じ配列に所属したことから来る。このことから, 演算子  $C$  に対するパーテックス補正  $\Gamma$ , すなわち,

$$\Gamma = \langle TPCPT \rangle \quad (2.26)$$

を生じる。式 (2.25) に戻れば, パーテックス補正は二体グリーン関数法において (式 (2.25) において), 2 つの電子の運動に相関性があることのためであるといえる。

さて、 $K$  を求めるためには、(i) まず最初に  $P$  と  $\Sigma$  を求めなければならない、(ii) 次に、(i) と矛盾しない (整合性) のある近似を  $\Gamma$  に対して行わなければならない。CPA では、この (i) の問題はすでに解決済みであるから、(ii) の問題が Velicky 理論の主眼となる。

### 2.2.2 CPA の見直し

ここで CPA とはどのような近似であったかをもう一度見直してみよう。

CPA が有効であるための条件は、ポテンシャルが短距離型であることである (s-f 交換相互作用はこの条件を満たしている)。

そこで、

$$V = \sum_m v_m \quad (2.27)$$

と書く。すると、 $m$ -サイトでの  $t$  行列は、

$$t_m = v_m [1 - P v_m]^{-1} \quad (2.28)$$

で定義される。この  $t_m$  を用いれば、(2.22) 式で定義された  $T$  は、

$$T = \sum_m t_m + \sum_m t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n + \sum_m t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n P \sum_{j(\neq n)} t_j + \dots \quad (2.29)$$

と書ける。ここで、格子の和は相続くもの同士は等しくないという条件の下で行われる。これは、(2.28) 式で定義した  $t_m$  が、 $m$  サイトでの多重散乱を意味することから生じる。

これらの式は、私達にとって見慣れた式である。

式 (2.29) を次のように書き換えよう。

$$T = \sum_m Q_m \quad (2.30)$$

$$Q_m = t_m (1 + P \sum_{n(\neq m)} Q_n) \quad (2.31)$$

式 (2.30) と (2.31) は、次のように解釈されよう。式 (2.30) からわかるように、全体の散乱波は、各サイトからくる寄与分  $Q_m$  の和である。式 (2.31) よりわかるように、それぞれの寄与分というのは、有効波 (an effective wave) にかげられたサイトごとの  $t$  行列によって与えられる。この有効波は、入射波と他のサイトからの散乱波への寄与分とからなる。

式 (2.30) と (2.31) で定義された量は、原子配置 (f スピンの状態) に依存する。これらの物理量の平均を厳密に取って、 $\langle T \rangle = 0$  という条件を課することは容易ではない。

CPA は次の 2 つの仮定 (近似) からなる。(i) 有効

ポテンシャルを (2.27) 式のように書くことができ、それに対して式 (2.28) で定義される  $t_m$  と、そのサイトに対応する有効波との統計平均が無視できるものとする。つまり、式 (2.30) と (2.31) は、

$$\langle T \rangle = \sum_m \langle Q_m \rangle \quad (2.32)$$

$$\langle Q_m \rangle \cong \langle t_m \rangle (1 + \sum_{n(\neq m)} \langle Q_n \rangle) \quad (2.33)$$

と近似される。

(ii) この条件の下では  $\langle T \rangle = 0$  という条件は、

$$\langle t_m \rangle = 0 \quad (2.34)$$

に帰着する。

### 2.2.3 $K$ に対する CPA の適用

式 (2.26) で定義したパーテックス補正をもう少し詳しく考察しよう。式 (2.30) と (2.31) を代入して、

$$\Gamma = \langle TPCPT \rangle \quad (2.35a)$$

$$= \sum_m \sum_n \langle Q_m PCP \tilde{Q}_n \rangle \quad (2.35b)$$

$$= \sum_m \sum_n \langle t_m (1 + P \sum_{i(\neq m)} Q_i) PCP (1 + \sum_{j(\neq n)} \tilde{Q}_j P) t_n \rangle \quad (2.35c)$$

式 (2.35c) の導出の過程で、

$$T(z^*) = T^*(z) \quad (2.36)$$

$$\tilde{Q}_n(z^*) = Q_n^*(z) \quad (2.37)$$

を考慮した。また、 $j \neq n$  という制限があるから、f スピン演算子を含んでいても、式 (2.35) では、 $t_n$  と  $Q_j$  は可換である。

CPA は、式 (2.32) と (2.33) の導出で述べたように、あるサイトでの  $t$  行列とその有効波因子との間の統計的相関を無視する近似である。従って、CPA を式 (2.35) に適用すると、

$$\Gamma = \sum_m \sum_n \langle t_m \langle (1 + P \sum_{i(\neq m)} Q_i) PCP (1 + \sum_{j(\neq n)} \tilde{Q}_j P) \rangle t_n \rangle \quad (2.38a)$$

$$\cong \sum_m \langle t_m \langle (1 + P \sum_{i(\neq m)} Q_i) PCP (1 + \sum_{j(\neq m)} \tilde{Q}_j P) \rangle t_m \rangle \quad (2.38b)$$

ここで、 $m \neq n$  ならば  $t_m$  と  $t_n$  の統計平均は独立にとられ、CPA の条件  $\langle t_m \rangle = 0$  より 0 となることを利用した。同様に、 $Q_i$  と  $Q_j$  も  $i \neq j$  ならば 0 になることは、式 (2.33) と式 (2.44) を組み合わせると、CPA では

$$\langle Q_m \rangle = 0 \quad (2.39)$$

となることからわかる。結局, (2.38) 式は, (2.35a) 式と (2.39) 式も考慮して, CPA では次のように書ける。

$$\Gamma = \sum_m \Gamma_m \quad (2.40a)$$

$$\text{ただし} \quad \langle Q_m P C P \tilde{Q}_n \rangle = \Gamma_m \delta_{mn} \quad (2.40b)$$

式 (2.40b) と (2.38b) とを比較して, 異なるサイトの平均は独立にとれること, 及び, 式 (2.39) を用いると,

$$\Gamma_r \cong \langle t_m \langle (1+P \sum_{i(\neq m)} Q_i) P C P (1+P \sum_{j(\neq m)} \tilde{Q}_j P) \rangle t_m \rangle \quad (2.41a)$$

$$= \langle t_m P C P t_m \rangle + \langle t_m P \sum_{j(\neq m)} \langle Q_j P C P \tilde{Q}_j \rangle P t_m \rangle \quad (2.41b)$$

$$= \langle t_m P C P t_m \rangle + \langle t_m P \sum_{j(\neq m)} \Gamma_j P t_m \rangle \quad (2.41c)$$

と書ける。

式 (2.26), (2.35) および (2.40) をまとめると,  $K$  に対する方程式として

$$K = P C P + P \sum_m \Gamma_m P \quad (2.41)$$

$$\Gamma_m = \langle t_m K t_m \rangle - \langle t_m P \Gamma_m P t_m \rangle \quad (2.42)$$

を得る。式 (2.42) は, 次のようにして, (2.41) より導かれる。すなわち,

$$\langle t_m K t_m \rangle = \langle t_m P C P t_m \rangle + \langle t_m P \sum_j \Gamma_j P t_m \rangle \quad (2.43a)$$

$$= \langle t_m P (C + \sum_{j(\neq m)} \Gamma_j) P t_m \rangle + \langle t_m P \Gamma_m P t_m \rangle \quad (2.43b)$$

$$= \Gamma_m + \langle t_m P \Gamma_m P t_m \rangle \quad (2.43c)$$

ここで, 式 (2.41c) を用いた。式 (2.43c) から式 (2.42) は直ぐ導かれる。

式 (2.40) は, バーテックス補正は, CPA では単一サイトから来る寄与分の和として表されることを教えてくれる。その直接の理由は, 式 (2.40b) からわかるように, 二つの散乱波に, 異なるサイトから来る寄与は, 統計平均をとるときに独立であるとみなされるからである。

## 2.2.4 Velicky 理論の拡張

これまでの議論は, 電子スピンの向きを明らかに扱ってこなかった。Velicky 理論は, 不規則合金を念頭に展開されているが, s-f モデルの場合には, 電子スピンの扱いは避けられない。Velicky 理論は, 結局のとこ

ろ, (2.8) 式の近似, 換言すれば, CPA では  $\Gamma_m = 0$  であるというのが結論である。

s-f モデルで, しかも強磁性温度領域 ( $T \leq T_c$ ) で, Velicky 理論が適用可能かどうかをもう少し詳しく検討する必要がある。今までの式の展開で,  $t_m$  は  $2 \times 2$  の行列とみなせる。 $P$  は  $2 \times 2$  の対角行列であり (つまり  $\langle \uparrow | P | \uparrow \rangle$  と  $\langle \downarrow | P | \downarrow \rangle$  の要素だけが 0 でない),  $\Gamma_m$  や  $K$  も同様に  $2 \times 2$  の対角行列であることは, 式 (2.41) と (2.42) からわかる (統計平均  $\langle \dots \rangle$  を取った後は対角的である)。

以上のことを考慮に入れて, s-f モデルへの適用を考える。(Velicky 論文の (94)–(106) 式は s-f モデルの場合には, そのままでは成り立たない。)

そこで,  $P, \Gamma$  および  $K$  がスピン表示で対角的であることを考慮して,

$$\langle m \uparrow | \Gamma_m | m \uparrow \rangle = \mathcal{L} \uparrow \uparrow \langle m \uparrow | K | m \uparrow \rangle + \mathcal{L} \uparrow \downarrow \langle m \uparrow | K | m \downarrow \rangle \quad (2.44a)$$

$$\langle m \uparrow | \Gamma_m | m \uparrow \rangle = \mathcal{L} \downarrow \uparrow \langle m \uparrow | K | m \uparrow \rangle + \mathcal{L} \downarrow \downarrow \langle m \downarrow | K | m \downarrow \rangle \quad (2.44b)$$

で, 係数  $\mathcal{L}$  を定義する。以下では, サイトの添字  $m$  を特に混同を生じない限り, 省略する。 ( $\langle m \uparrow | \Gamma_m | m \uparrow \rangle = \Gamma \uparrow$ ,  $\langle m \downarrow | K | m \downarrow \rangle = K \downarrow$ , etc.)。つまり,

$$\Gamma \uparrow = \mathcal{L} \uparrow \uparrow K \uparrow + \mathcal{L} \uparrow \downarrow K \downarrow \quad (2.45a)$$

$$\Gamma \downarrow = \mathcal{L} \downarrow \uparrow K \uparrow + \mathcal{L} \downarrow \downarrow K \downarrow \quad (2.45b)$$

とおく。このときの  $\mathcal{L}$  は  $2 \times 2$  の行列とみなすことができる。 $\mathcal{L}$  は次の様にすれば, 求めることができる。

式 (2.42) より

$$\begin{aligned} \Gamma \uparrow &= \langle t \uparrow \uparrow t \uparrow \uparrow \rangle K \uparrow + \langle t \uparrow \downarrow t \uparrow \uparrow \rangle K \downarrow \\ &\quad - \langle t \uparrow \uparrow t \uparrow \uparrow \rangle F \uparrow F \uparrow \Gamma \uparrow \\ &\quad - \langle t \uparrow \downarrow t \uparrow \uparrow \rangle F \downarrow F \downarrow \Gamma \downarrow \end{aligned} \quad (2.46)$$

この式に (2.45) 式を代入すると,

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \uparrow \uparrow K \uparrow + \mathcal{L} \uparrow \downarrow K \downarrow &= \langle t \uparrow \uparrow t \uparrow \uparrow \rangle K \uparrow + \langle t \uparrow \downarrow t \uparrow \uparrow \rangle K \downarrow \\ &\quad - \langle t \uparrow \uparrow t \uparrow \uparrow \rangle F \uparrow F \uparrow (\mathcal{L} \uparrow \uparrow K \uparrow + \mathcal{L} \uparrow \downarrow K \downarrow) \\ &\quad - \langle t \uparrow \downarrow t \uparrow \uparrow \rangle F \downarrow F \downarrow (\mathcal{L} \uparrow \uparrow K \uparrow + \mathcal{L} \uparrow \downarrow K \downarrow) \end{aligned} \quad (2.47)$$

を得る。式 (2.47) 中で,  $K \uparrow$  と  $K \downarrow$  の各々の係数をそれぞれ等しいとおくと,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{\uparrow\uparrow}(1+\langle t^{\uparrow\uparrow}t^{\uparrow\uparrow} \rangle F^{\uparrow}F^{\uparrow}+\langle t^{\uparrow\downarrow}t^{\downarrow\uparrow} \rangle F^{\downarrow}F^{\downarrow}) \\ =\langle t^{\uparrow\uparrow}t^{\uparrow\uparrow} \rangle \end{aligned} \quad (2.48a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{\uparrow\downarrow}(1+\langle t^{\uparrow\uparrow}t^{\uparrow\uparrow} \rangle F^{\uparrow\uparrow} \\ +\langle t^{\uparrow\downarrow}t^{\downarrow\uparrow} \rangle F^{\downarrow}F^{\downarrow} \\ =\langle t^{\uparrow\downarrow}t^{\downarrow\uparrow} \rangle \end{aligned} \quad (2.48b)$$

となって係数  $\mathcal{L}^{\uparrow\uparrow}$ ,  $\mathcal{L}^{\uparrow\downarrow}$  を求めることができる。以下で重要なのは、係数  $\mathcal{L}$  の値ではなく、式 (2.45) が成立することである。

$K$  はスピン対角要素のみをもつことを考慮して、式 (2.41) の行列要素を書き下し、式 (2.45) を代入してみる。

$$\begin{aligned} \langle n\uparrow | K | n\uparrow \rangle &= \langle n\uparrow | PCP | n\uparrow \rangle \\ &= \sum_m \langle n\uparrow | P | m\uparrow \rangle \langle m\uparrow | \Gamma_m | m\uparrow \rangle \\ &\quad \langle m\uparrow | P | n\uparrow \rangle \end{aligned} \quad (2.49a)$$

$$\begin{aligned} &= \langle n\uparrow | PCP | n\uparrow \rangle \\ &+ \sum_m F^{\uparrow}_{n-1} F^{\uparrow}_{m-n} (\mathcal{L}^{\uparrow\uparrow} \langle m\uparrow | K | m\uparrow \rangle \\ &+ \mathcal{L}^{\uparrow\downarrow} \langle m\downarrow | K | m\downarrow \rangle) \end{aligned} \quad (2.49b)$$

同様に、

$$\begin{aligned} \langle n\downarrow | K | n\downarrow \rangle &= \langle n\downarrow | PCP | n\downarrow \rangle \\ &+ \sum_m F^{\downarrow}_{n-m} F^{\downarrow}_{m-n} (\mathcal{L}^{\downarrow\downarrow} \langle m\downarrow | K | m\downarrow \rangle \\ &+ \mathcal{L}^{\downarrow\uparrow} \langle m\uparrow | K | m\uparrow \rangle) \end{aligned} \quad (2.50)$$

を得る。ただし、

$$F^{\uparrow}_{m-n} = \langle n\uparrow | P | m\uparrow \rangle \quad (2.51)$$

である。式 (2.49) と (2.50) は、 $K$  の対角要素  $\langle m\uparrow | K | m\uparrow \rangle$  と  $\langle m\downarrow | K | m\downarrow \rangle$  に対する一連の線形方程式とみなすことができる。この方程式はフーリエ変換によって、解くことができる。

$b_{k\uparrow}$  と  $B_{k\uparrow}$  を次式で定義する。(↓スピンについても同様に定義される。)

$$b_{k\uparrow} = \sum_n e^{-ik\cdot n} \langle n\uparrow | PCP | n\uparrow \rangle \quad (2.52)$$

$$B_{k\uparrow} = \sum_n e^{-ik\cdot n} F_{n\uparrow} F_{-n\uparrow} \quad (2.53)$$

式 (2.49) と (2.50) に、式 (2.52) と (2.53) を代入することにより、

$$\begin{aligned} \sum_n e^{-ik\cdot n} \langle n\uparrow | K | n\uparrow \rangle \\ = b_{k\uparrow} + B_{k\uparrow} [\mathcal{L}^{\uparrow\uparrow} \sum_n e^{-ik\cdot n} \langle n\uparrow | K | n\uparrow \rangle \\ + \mathcal{L}^{\uparrow\downarrow} \sum_n e^{-ik\cdot n} \langle n\downarrow | K | n\downarrow \rangle] \end{aligned} \quad (2.54a)$$

$$\begin{aligned} \sum_n e^{-ik\cdot n} \langle n\downarrow | K | n\downarrow \rangle \\ = b_{k\downarrow} + B_{k\downarrow} [\mathcal{L}^{\downarrow\downarrow} \sum_n e^{-ik\cdot n} \langle n\downarrow | K | n\downarrow \rangle \\ + \mathcal{L}^{\downarrow\uparrow} \sum_n e^{-ik\cdot n} \langle n\uparrow | K | n\uparrow \rangle] \end{aligned} \quad (2.54b)$$

を得る。これから、

$$\begin{aligned} \sum_n e^{-ik\cdot n} \langle n\uparrow | K | n\uparrow \rangle \\ = \frac{b_{k\uparrow}(1-B_{k\downarrow}\mathcal{L}^{\downarrow\downarrow}) + b_{k\downarrow}B_{k\uparrow}\mathcal{L}^{\uparrow\downarrow}}{1-C_{k\uparrow}\mathcal{L}^{\uparrow\uparrow} - C_{k\downarrow}\mathcal{L}^{\downarrow\downarrow}} \end{aligned} \quad (2.55)$$

を得る。また、式 (2.55) を逆変換して、

$$\begin{aligned} \langle n\uparrow | K | n\uparrow \rangle \\ = \sum_k e^{ik\cdot n} \times \frac{b_{k\uparrow}(1-B_{k\downarrow}\mathcal{L}^{\downarrow\downarrow}) + b_{k\downarrow}B_{k\uparrow}\mathcal{L}^{\uparrow\downarrow}}{1-B_{k\uparrow}\mathcal{L}^{\uparrow\uparrow} - B_{k\downarrow}\mathcal{L}^{\downarrow\downarrow}} \end{aligned} \quad (2.56)$$

が導かれる。↓スピンについても同様である。

さて、これまでは、一般の演算子  $C$  について式を導いてきた。電気伝導度の計算で必要となるのは  $C = p^{\alpha}$  ( $\alpha = x, y, z$ ) の場合である。

定義式 (2.52) より、 $b_{k\uparrow}$  の値を求めよう。まず、 $p^{\alpha} = mv_{\alpha}(k)$  を用いて

$$\begin{aligned} \langle n\uparrow | PCP | n\uparrow \rangle \\ = \frac{1}{N} \sum_k \langle k\uparrow | \left| \frac{1}{z_1 - \epsilon(k) - \Sigma(z_1)} \times mv^{\alpha}(k) | k\uparrow \right\rangle \\ \times \frac{1}{z_2 - \epsilon(k) - \Sigma(z_2)} \end{aligned} \quad (2.57)$$

と書ける。ところで、 $k$  についての対称性から、

$$\epsilon(k) = \epsilon(-k), \quad v^{\alpha}(k) = -v^{\alpha}(-k) \quad (2.58)$$

であるから、式 (2.57) の  $k$  についての和を取ると、右辺は 0 になる。従って、 $C = p^{\alpha}$  の場合

$$\langle n\uparrow | PCP | n\uparrow \rangle = 0 \quad (2.58)$$

であり、式 (2.52) より

$$b_{k\uparrow} = 0 \quad (2.59a)$$

同様に

$$b_{k\downarrow} = 0 \quad (2.59b)$$

これを式 (2.56) に代入することにより,

$$\langle n \uparrow | K | n \uparrow \rangle = 0 \quad (2.60a)$$

同様に,

$$\langle n \downarrow | K | n \downarrow \rangle = 0 \quad (2.60b)$$

が示される。式 (2.44) の定義から,

$$\langle m \uparrow | \Gamma_m | m \uparrow \rangle = 0 \quad (2.61a)$$

$$\langle m \downarrow | \Gamma_m | m \downarrow \rangle = 0 \quad (2.61b)$$

となる。 $\Gamma_m$  はワニエ表示で対角要素しか持たなかった (式 (2.40) の導出の過程を参照)。その対角要素も (2.61) で 0 であることが示された訳だから, 結局

$$\Gamma_m = 0 \quad (2.62)$$

を得る。

CPA では,  $G_{av} = P$  である。式 (2.62) と式 (2.41) より, CPA で

$$K \cong PCP = G_{av} C G_{av} \quad (2.63)$$

このことは, 式 (2.8) の近似式が導かれたことを意味する。

このように, s-f モデルのように, 電子のスピンに相互作用が依存する場合でも, Velicky 理論が拡張して適用できることが示された。

### 3. 数値計算の結果

#### 3.1 電気伝導度の電気抵抗

前節までの結果は, s-f モデルにも Velicky 理論が適用できて, (2.13) 式で電気伝導度が与えられる, ということである。つまり,

$$\sigma_{\mu}^{\alpha\beta} = \frac{e^3 \hbar}{\pi \Omega} \sum_k v^{\alpha}(k) v^{\beta}(k) \{ \text{Im} G_{av}^{\mu}(k, \eta^+) \}^2 \quad (3.1)$$

である。ただし  $\mu = \uparrow$  または  $\downarrow$  である。

等方性を仮定すると  $\alpha = \beta$  の場合のみが値をもち, 従って,

$$v_{\alpha}(k) = \frac{\hbar k^{\alpha}}{2m^*} \quad (3.1)$$

$$v^{\alpha}(k) v^{\alpha}(k) = \frac{(\hbar k^{\alpha})^2}{4m^{*2}} = \frac{\hbar^2}{4m^*} \times \frac{k^2}{3} \quad (3.3)$$

である。 $\eta^+ = \epsilon_F$  として  $G_{av}^{\mu}$  は CPA で,

$$G_{av}^{\mu} = \frac{1}{\epsilon_F - \frac{k^2}{2m} - \Sigma_{\mu}} \quad (3.4)$$

で与えられる。

式 (3.4) を式 (3.1) に代入して, 式 (3.2)–(3.3) を用いると,  $\uparrow$  s 電子に対して,

$$\sigma_{\uparrow}^{\alpha\alpha} = \frac{e^2 q_D}{6\pi^3 \hbar} \int_0^1 dx \cdot x^4 \left[ \text{Im} \left( \frac{1}{\left( \frac{\epsilon_F}{W} - x^2 \right) - \frac{\Sigma_{\uparrow}}{W}} \right) \right]^2 \quad (3.5)$$

を得る。 $\downarrow$  s 電子に対しても同様の表式が得られる。

フェルミ・エネルギー  $\epsilon_F$  は, s 電子系が縮退しているとして,

$$n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow} \quad (3.6a)$$

$$= \int_{-\infty}^{\epsilon_F} D_{\uparrow}(\epsilon) d\epsilon + \int_{-\infty}^{\epsilon_F} D_{\downarrow}(\epsilon) d\epsilon \quad (3.6b)$$

という条件から求めた。ここで  $n, n_{\uparrow}, n_{\downarrow}$  は, s 電子全体,  $\uparrow$  s 電子,  $\downarrow$  s 電子のそれぞれの濃度を表す。従って, 各温度に対して CPA で  $D_{\uparrow}(\epsilon)$  と  $D_{\downarrow}(\epsilon)$  を求めておけば, 与えられた s 電子濃度  $n$  の関数として, フェルミ・エネルギー  $\epsilon_F$  が一義的に定まる。その  $\epsilon_F$  に対して, 式 (3.5) の数値計算を実行した。

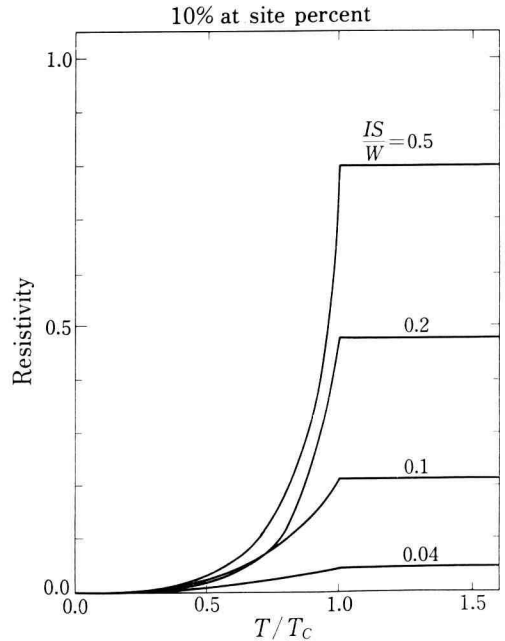


Fig. 1.

実際は、電気抵抗を示した方が、実験と比較検討しやすい場合が多い。そのため、s電子全体の電気伝導度 $\sigma$ を、

$$\sigma = \sigma^+ + \sigma^- \quad (3.7)$$

で求め、電気抵抗 $\rho$ は、

$$\rho = 1/\sigma \quad (3.8)$$

で計算した。

### 3.2 数値計算の結果と検討

Fig. 1に、 $IS/W$ が、0.04, 0.1, 0.2, 0.5の場合の電気抵抗-温度( $\rho-T$ )曲線を示す。ただし、抵抗値として示したのは、式(3.5)の係数( $e^2 q_D / 6\pi^3 \hbar$ )を取り除いた $\sigma^+$ から計算した値である。つまり、

$$\text{Resistivity} = \rho \times \left( \frac{e^2 q_D}{6\pi^3 \hbar} \right) \quad (3.9)$$

である。

Fig. 1からわかるように、一般に、温度が低い場合には電気抵抗は小さい。これは、fスピン系がほぼ強磁性的に揃っているため、s-f交換相互作用を通してのs電子の散乱が小さいためである。温度が上昇し、キュリー温度 $T_c$ 近くになるにつれて、電気抵抗は急速に上昇する。常磁性温度領域( $T \geq T_c$ )では、fスピン系は完全にランダムであるとして扱われているため、一定値となる。これは、1サイト近似で、fスピン間の短距離秩序を無視したことからくる結果である。このような傾向は $IS/W$ の値によらない。

一方、 $IS/W$ の値が大きくなるにつれて、電気抵抗の値は全般に大きくなる。これも、s-f交換相互作用が大きくなるにつれ散乱が強くなることを考えれば、容易に理解される。 $(IS/W)$ の値が0.22のときに、s電子の伝導電子帯は、s電子とfスピン系のスピンの相対的な向きに対応して、平行・反平行に分裂するが、その場合でも $\rho-T$ 曲線はほぼ似たような形状をしている。

尚、 $T \geq T_c$ での電気抵抗 $\rho_\infty$ と $IS/W$ の値との間に、

$$\rho_\infty \propto (IS/W)^\delta \quad (3.10)$$

の様な指数関係があるかと思ひ調べたが、数値計算で求めた点のサンプルが少なく、また数値誤差も含まれてくるため、確定できない。この数値計算の誤差には、(3.6)式からフェルミ・エネルギー $\epsilon_F$ を決定するとき

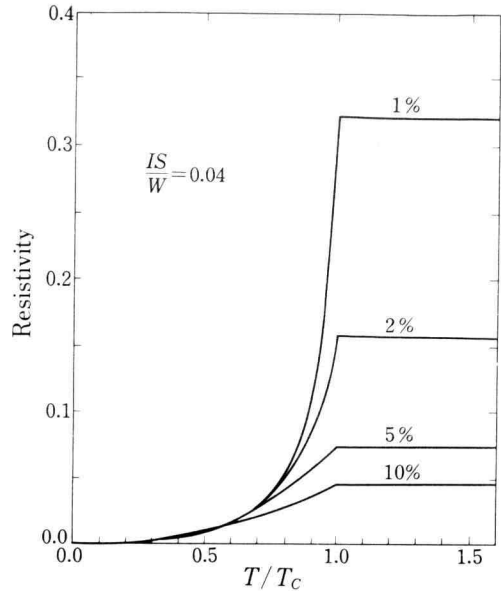


Fig. 2.

に入ってくる誤差も入ってくることは指摘しておきたい。

Fig. 2には、 $IS/W = 0.04$ の場合について、s電子の濃度をいろいろ変えて調べた。この値 $IS/W = 0.04$ は、強磁性半導体EuO, EuSに対応する。ただし、これらの磁性半導体では、伝導電子帯を形成するのはsではなく、d電子であるから、バンドの底には3つの谷がある。このため、実験と比較する場合には、s電子濃度をd電子濃度に換算して(3つのdの谷には各3分の1ずつ入る訳だから)、1% s電子濃度(s-fモデル)は3% d電子濃度(EuO, EuSの実験)と対応するものとし、電気抵抗は計算値の1/3と比較する。

Fig. 2からs電子濃度が大きくなると、急速に電気抵抗が小さくなることがわかる。ただし、 $T \geq T_c$ での電気抵抗 $\rho_\infty$ とs電子濃度 $n$ との間に、何か

$$\rho_\infty \propto n^\delta \quad (3.11)$$

のような関数があるかと調べたが、係数 $\delta$ は特定できなかった。

### 3.3 EuO, EuSの実験結果との比較

EuO, EuSは $IS/W = 0.04$ に対応する。

式(3.9)で定義したResitivityは無次元量であるから、これと実験とを比較するためには、右辺に出て



きた係数の逆数を求めておくことに便利である。

fcc では

$$q_D = \frac{(24\pi^2)^{\frac{1}{3}}}{a} \quad (3.12)$$

である。ここで  $a$  は格子定数で<sup>4)</sup>

$$\text{EuS は } a = 5.97 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (3.13a)$$

$$\text{EuO は } a = 5.14 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (3.16b)$$

である。これらの値を代入すると、

$$\frac{6\pi^3 h}{e^2} q_D = 7.374 \times 10^{-5} \Omega \cdot \text{m} \text{ (for EuS)} \quad (3.14a)$$

$$= 6.349 \times 10^{-5} \Omega \cdot \text{m} \text{ (for EuO)} \quad (3.14b)$$

を得る。

実験によると  $T \geq T_c$  で、1% Gd-doped EuS の電気抵抗 (キャリア濃度 1.16%) は、およそ  $1 \times 10^{-5} \Omega \cdot \text{m}$  ( $= 1 \times 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ )、1% Gd-doped EuO の電気抵抗 (キャリア濃度 1.69%) でもおよそ  $1 \times 10^{-5} \Omega \cdot \text{m}$  である。式 (3.14) を用いて、式 (3.9) で定義した Resistivity をそれぞれ見積ると、これらのデータは、EuS で 0.1356, EuO で 0.1575 に対応する。これらは d 電子の電気伝導による抵抗である。従って s-f モデルと対応させるには、s 電子濃度 0.3~0.5% とし、Resistivity は上の値を 3 倍して、0.4068 (EuS) または 0.4725 (EuO) であればよい。比較の結果は良いように思われる。

ただし、 $\rho - T$  曲線を見ると、EuO, EuS は、 $T \sim T_c$  で f スピン系の短距離秩序による散乱のものと思われる電気抵抗のピークがある。しかし、単サイト近似にもとづく今回の計算結果にはその効果は入っていない。実験と計算とのずれは、 $IS/W$  の値が小さい場合には、f スピン系の短距離秩序の散乱の効果が大きいことを意味する。

### 3.4 Ca-doped LaMnO<sub>3</sub> の実験との比較

まず最初に、LaMnO<sub>3</sub> の物理的性質を簡単にまとめておこう<sup>5)</sup>。周期表によれば、各原子は、La<sup>57</sup>(5d 6s<sup>2</sup>)、Mn<sup>25</sup>(3d<sup>5</sup> 4s<sup>2</sup>)、O<sup>8</sup>(2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup>) という電子配置を持っているが、結晶中では La<sup>3+</sup>Mn<sup>3+</sup>(O<sup>2-</sup>)<sub>3</sub> という傾向を持つ。純粋な結晶は絶縁体であり、 $T_N = 141 \text{ K}$  のニール温度で特徴づけられる反強磁性体的性格に加えて、弱い強磁性モーメントも持つ寄生反強磁性体であるらしい<sup>6)</sup>。

この結晶に Ca<sup>2+</sup> を少量 dope すると、Ca<sup>2+</sup> は La<sup>3+</sup> と置き換わり、d ホールができ、この d ホールは Ca<sup>2+</sup>

イオンのまわりの等価な Mn の位置を動きまわる。Ca 濃度が小さい ( $x < 0.1$ ) ときは、ホールは Ca<sup>2+</sup> イオンのまわりのサイトに強く束縛されていて、低温では、他の La のまわりのサイトまで行くことはない。 $x$  が大きくなるにつれて、Ca に隣り合うサイトを経て、結晶全体を動きまわり始めるため、強磁性的分子は相互作用を持つようになる。更に Ca 濃度が多くなり  $x \geq 0.3$  となると、強磁性と金属的福気伝導を示すようになる。

Mn<sup>3+</sup> は、4 つの外殻電子 (d 電子) を持っているが、そのうち 3 個は結晶場によって分裂した 3 重縮退の d $\epsilon$  軌道に入り、残りの 1 つは 2 重縮退の d $\gamma$  軌道に入る (d $\epsilon$  は d $\gamma$  より低エネルギー側に位置する。Ca を dope することによりできるホールは、Mn<sup>4+</sup> の d $\gamma$  軌道が空になることによってできる。強いフント結合によって、d $\epsilon$  に入った 3 つの電子は  $S = 3/2$  の局在スピンを形成する。一方、Mn<sup>3+</sup> により供給される d $\gamma$  電子は d $\gamma$  バンド中を遍歴するものと考えられる。この d $\gamma$  電子は原子内フント結合を通して局在スピ人と相互作用をする。このようにして、d $\gamma$  電子は局在スピンをつくる傾向をもつが、同時に、d $\gamma$  軌道の遷移積分によって、1 つのイオンから他のイオンへと飛びまわることができる。

さて、Ca-doped LaMnO<sub>3</sub> にみられる実験事実 (とくに二重交換作用) を説明するために、Kubo<sup>5)</sup> らは次のような仮定を導入した。

- (i) 原子内の交換積分は遷移積分よりはるかに大きい。つまり  $I \gg W$
- (ii) イオンは格子点に固定されている (格子振動は考えない)
- (iii) d $\gamma$  電子間のクーロン相互作用は無視する。
- (iv) 電荷された不純物によるポテンシャルのゆらぎは平均化する。
- (v) d $\gamma$  電子の数  $N_e$  は局在スピンの数  $N$  より、わずかに小さいとする (つまり  $N_e \leq N$ )。

これらの仮定の中で、吟味を要するのは、(i) である。Mn<sup>3+</sup> の原子内交換作用の大きさは、<sup>3</sup>E 準位 ( $S_0 = S - \frac{1}{2} = 1$ ) と <sup>5</sup>E 基底状態 ( $S_0 = S + \frac{1}{2} = 2$ ) とのエネルギー差  $(2S+1)I = 4I$  が約 2.6 eV であるとして評価した。これは  $IS \approx 0.975 \text{ eV}$  に相当する。一方遷移積分  $t$  は Anderson と Hasegawa によれば 0.1 eV のオーダーであるが、Kubo らはむしろ 0.5 eV ぐらいであるとしている。バンド幅  $W \approx 2t$  であるから、Kubo らは  $IS/W \sim 1.0$  と評価したことになる。

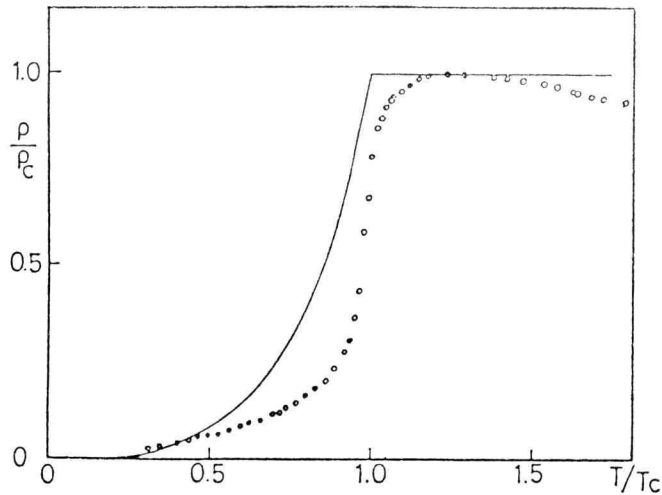


Fig. 3.

$IS/W \gg 1$  という仮定の下で、Kubo らは、s-d モデル・ハミルトニアンから有効ハミルトニアンを導き、仮想結晶近似とブラウン運動の公式から電気抵抗を計算した。その結果を  $\text{La}_{1-x}\text{Pd}_x\text{O}_3$  の電気抵抗と比較した図を Fig. 3 に示す。Ca( $4s^2$ ) を dope した場合と、Pd( $4d^{10}$ ) を dope した場合の違いも当然考察すべきと考えるが、Kubo らはただ単純に La( $5d\ 6s^2$ ) と置き換わるだけだと考えているようである。また  $x=0.31$  のような場合には、彼らの仮定の (iii) と (v) は前提条件として成立しなくなるが、この点についてもあまり議論していない。(不純物濃度のこの領域では、ホール運動として扱うよりも、電子の運動としてそのまま扱ってもよいのではないかと思う)。

私達の結果は、 $IS/W \geq 1$  での Kubo の計算結果とは、よく対応しているようである。

### 5. まとめと今後の課題

論文 VIII において私達は、強磁性温度領域での CPA を研究し、本論文においては、s-f モデルのように、スピンの依存した相互作用の場合に Velicky 理論を拡張して適用した。この結果、s-f 交換相互作用による伝導電子の散乱の中、単サイトでの多重散乱の効果は一応、電気伝導度の計算の中に取り入れることができ、EuO, EuS のように  $IS/W$  の値が小さい場合と、 $\text{LaMnO}_3$  のように  $IS/W$  の大きい場合とを統一的に

理解できるようになってきた。

しかし、実験データと合わせて議論するためには、実際の伝導電子が (s 電子ではなく) d 電子であることを考慮して谷の効果を入れる必要がある。その上で、単サイトでの散乱と、局在スピン間の相関(短距離秩序)による散乱との効果を分離して議論を進めていくべきである。その上で、今回の理論で、実験データの中で、どの部分が説明でき、どの部分が説明できないのかの議論を進めていかなければならない。

また Haas 理論は、s-f 交換相互作用を 2 次摂動として扱ったものであるが、これとの比較検討も今後の課題である。

### 参考文献

- 1) C. Haas; Phys. Rev. **168** (1968) 531.
- 2) B. Velicky; Phys. Rev. **184** (1969) 614.
- 3) S.F. Edwards; Phil. Mag. **3** (1958) 1020; **4** (1959) 1171.
- 4) 高橋・三井・梅原; 神奈川工科大学研究報告 **B16** (1992) 369.
- 5) K. Kubo and N. Ohata; J. Phys. Soc. Jpn **33** (1972) 21.  
K. Kubo; J. Phys. Soc. Jpn **36** (1974) 32.
- 6) G. Matsumoto; J. Phys. Soc. Jpn **29** (1970) 606; 615.