

# s-f モデルと電子状態 VIII

— 強磁性温度領域での CPA —

高橋 正雄\*, 三井 和博\*・梅原 雅捷\*\*

## s-f Model and Electron States VIII

— The CPA in Ferromagnetic Temperature Region —

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

### Abstract

By applying the coherent potential approximation (CPA) to the s-f model in ferromagnetic semiconductors, we have calculated the density of states and self-energy. The temperature dependence of the energy of the conduction band is also expressed as a function of normalized temperature,  $T/T_c$ , and the ratio of the s-f exchange interaction strength to the band width,  $IS/W$ . The calculated results are discussed concerning with the Kubo's theory.

### 1. はじめに

私達はこれまで、強磁性半導体の伝導電子状態を記述するものとして s-f モデルを採用し、どのような電子状態が実現可能なかを調べてきた。しかし、前回までの研究は、常磁性温度領域 ( $T \geq T_c$ ) に限られていた。この温度領域では、1 サイトでの多重散乱と同時に、相関関係にある異なるサイトの局在スピンの効果も重要になってくる。私達は、とくにグリーン関数法 III によって、この 2 つの効果が重要となる場合の電子状態について、バンド幅  $W$  と s-f 交換スピンの大きさ  $IS$  の比の広い範囲に対する知見を得ることができた<sup>1)</sup>。

今回は、強磁性温度領域で、とくに 1 サイトでの多重散乱の効果を扱う。s-f 交換相互作用の  $l$  行列は既に高橋<sup>2)</sup>によって求められているから、その温度平均を 0 にすることによって状態密度を求める。そして、その結果を、Rangette *et al.*<sup>3)</sup> および K. Kubo<sup>4)</sup> らの結果と比較検討する。

### 2. 基本的な考え方

#### 2.1 s-f モデルとグリーン関数法

私達は、s-f モデルを、次のハミルトニアンを用いて取り扱う；

$$H_t = H_s + H_{sf} + H_f, \quad (2.1)$$

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

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

$$H_f = -\sum_{ll'} J_{ll'} S_l \cdot S_{l'}, \quad (2.4)$$

次に、1 粒子グリーン関数  $G$  を

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

で定義する。ここで、

$$H = H_s + H_{sf}, \quad (2.6)$$

である。

次に、摂動展開をするために、非摂動ハミルトニアン  $K$  を導入する；

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

ここで、 $\Sigma_\mu$  (すなわち  $\Sigma_\uparrow$  と  $\Sigma_\downarrow$ ) は、コヒーレント・

1993 年 9 月 24 日受理

\* 一般科

\*\* 無機材質研究所

ポテンシャルで, s 電子のスピンの上または下に依じて異なる値をとる複素変数である。

摂動ハミルトニアン  $V$  は,

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

$$= -I \sum_{\mu\nu} a_{l\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} \cdot S_l a_{l\nu} - \sum_{l\mu} \sum_{\mu'} a_{l\mu}^\dagger a_{l\mu'} \quad (2.8b)$$

である。または,

$$V = \sum_l v_l \quad (2.9a)$$

$$v_l = -I \sum_{\mu\nu} a_{l\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} \cdot S_l a_{l\nu} - \sum_{\mu} \sum_{\mu'} a_{l\mu}^\dagger a_{l\mu'} \quad (2.9b)$$

とも書ける。

非摂動グリーン関数  $P$  を

$$P = \frac{1}{\omega I - K} \quad (2.10)$$

で定義する。すると, グリーン関数  $G$  は,  $P$  と  $V$  を用いて展開できて,

$$G = P + PVP + PVPVP + \dots \quad (2.11a)$$

$$= P + \sum_l P v_l P + \sum_{lm} P v_l P v_m P + \dots \quad (2.11b)$$

と書ける。ここで, f スピン演算子は,  $v_l$  には含まれるが  $P$  には含まれない。f スピンは各サイトごとに置かれているから, f スピンについての熱平均は各サイトごとに取る必要がある。そこで,  $l$  行列を

$$t_l = v_l [1 - P v_l]^{-1} \quad (2.12a)$$

$$= v_l + v_l P v_l + v_l P v_l P v_l + \dots \quad (2.12b)$$

で定義すると,  $G$  は,

$$G = P + P \sum_l t_l P + P \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P + P \sum_l t_l P \sum_{m(\neq l)} t_m P \sum_{n(\neq m)} t_n P + \dots \quad (2.13)$$

となる。式 (2.13) 中で, 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条件の下で行なわれる。

## 2.2 s-f 交換相互作用の $t$ 行列

式 (2.12) で定義された  $t$  行列の行列要素は, すてに高橋<sup>2)</sup>によって求められている。s 電子のスピン上または下に対応する  $l$  サイトでのワニエ関数を  $|l\uparrow\rangle, |l\downarrow\rangle$  で表すと,  $t$  行列の行列要素は,

$$t_l = \begin{pmatrix} \langle l\uparrow | t | l\uparrow \rangle & \langle l\uparrow | t | l\downarrow \rangle \\ \langle l\downarrow | t | l\uparrow \rangle & \langle l\downarrow | t | l\downarrow \rangle \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

以下, サイトの記号を略記して,

$$t = \begin{pmatrix} t_{\uparrow\uparrow} & t_{\uparrow\downarrow} \\ t_{\downarrow\uparrow} & t_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

と表す。

$t$  行列の表式を簡略にするために, 次の記号を導入する;

$$V_{\uparrow} = -IS_z - \Sigma_{\uparrow} \quad (2.16)$$

$$V_{\downarrow} = +IS_z - \Sigma_{\downarrow} \quad (2.17)$$

$$U_{\uparrow} = -I(S_z - 1) - \Sigma_{\uparrow} \quad (2.18)$$

$$U_{\downarrow} = +I(S_z + 1) - \Sigma_{\downarrow} \quad (2.19)$$

$$W_{\uparrow} = I^2[S(S+1) - S_z^2 - S_z] \\ = I^2 S_- S_+ \quad (2.20)$$

$$W_{\downarrow} = I^2[S(S+1) - S_z^2 + S_z] = I^2 S_+ S_- \quad (2.21)$$

また,

$$F_{\uparrow} = \langle l\uparrow | P | l\uparrow \rangle = P_{\uparrow\uparrow} \quad (2.22)$$

$$F_{\downarrow} = \langle l\downarrow | P | l\downarrow \rangle = P_{\downarrow\downarrow} \quad (2.23)$$

と定義する。

すると, s-f 交換相互作用の  $t$  行列の要素は次の通りになる。

$$t_{\uparrow\uparrow} = \frac{V_{\uparrow} + F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})}{1 - F_{\downarrow}U_{\downarrow} - F_{\uparrow}V_{\uparrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})} \quad (2.24)$$

$$t_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{1 - F_{\downarrow}U_{\downarrow} - F_{\uparrow}V_{\uparrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})} \\ \times (IS_-) \quad (2.25a)$$

$$= (-IS_-) \\ \times \frac{1}{1 - F_{\downarrow}V_{\downarrow} - F_{\uparrow}U_{\uparrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W_{\downarrow} - V_{\downarrow}U_{\uparrow})} \quad (2.25b)$$

同様に,

$$t_{\downarrow\downarrow} = \frac{V_{\downarrow} + F_{\uparrow}(W_{\downarrow} - V_{\downarrow}U_{\uparrow})}{1 - F_{\uparrow}U_{\uparrow} - F_{\downarrow}V_{\downarrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W_{\downarrow} - V_{\downarrow}U_{\uparrow})} \quad (2.26)$$

$$t_{\downarrow\uparrow} = \frac{1}{1 - F_{\uparrow}U_{\uparrow} - F_{\downarrow}V_{\downarrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W_{\downarrow} - V_{\downarrow}U_{\uparrow})} \\ \times (-IS_+) \quad (2.27a)$$

$$= (-IS_-) \\ \times \frac{1}{1 - F_{\uparrow}V_{\uparrow} - F_{\downarrow}U_{\downarrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})} \quad (2.27b)$$

### 2.3 熱平均の取り方と CPA の条件

f スピン系に対しては、通常の分子場近似を適用する<sup>5)</sup>。

例えば状態和  $Z_l$  は、

$$Z_l = \text{Tr} \rho_l = \sum_{S_z=-S}^S \exp(\beta g \mu \bar{H} S_z) \quad (2.28a)$$

$$= \frac{\sin h \left[ \beta g \mu \bar{H} \left( S + \frac{1}{2} \right) \right]}{\sin h \left[ \frac{1}{2} \beta g \mu \bar{H} \right]} \quad (2.28b)$$

ここで  $\bar{H}$  は  $i$  番目の局在スピンの、周囲のスピンのから受ける交換相互作用を磁場で近似したもので分子場といわれる。ボルツマンの定数  $k_B$ 、絶対温度  $T$  を用いて、 $\beta \equiv 1/k_B T$  と表わされる。 $g$  は  $g$  因子である。

式 (2.28) 中の  $\beta g \mu \bar{H}$  を  $x$  と置くと、分子場近似でのキューリー温度  $T_c$  との間に、次の関係がある；

$$x = \beta g \mu \bar{H} = \frac{3 \langle S_z \rangle_{\text{av}}}{S(S+1)} \left( \frac{T_c}{T} \right) \quad (2.29)$$

式 (2.29) からわかるように、任意の温度  $T$  に対して、通常の分子場近似から f スピンの熱平均値  $\langle S_z \rangle_{\text{av}}$  が求まり、f スピンが値  $S_z$  を取る時の確率は  $\exp(x S_z)/\rho_l$  で計算できることになる。

式 (2.24) および (2.26) で与えた  $t_{\uparrow}$  と  $t_{\downarrow}$  はそれぞれ  $S_z$  のみによって決まる ( $S_+$  や  $S_-$  は含まれていない) ことに注意しよう。すると、 $t_{\uparrow\uparrow}$  と  $t_{\downarrow\downarrow}$  の熱平均値は次式で与えられる。

$$\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{Z_l} \sum_{S_z=-S}^S t_{\uparrow\uparrow}(S_z) \times \exp(x S_z) \quad (2.30)$$

$$\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{Z_l} \sum_{S_z=-S}^S t_{\downarrow\downarrow}(S_z) \times \exp(x S_z) \quad (2.31)$$

ここでは、 $t_{\uparrow\uparrow}$  および  $t_{\downarrow\downarrow}$  が  $S_z$  の関数であることを示すために、 $t_{\uparrow\uparrow}(S_z)$ 、 $t_{\downarrow\downarrow}(S_z)$  と書いた。

式 (2.30)、(2.31) で求めた  $t$ -行列の熱平均値  $\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{\text{av}}$ 、 $\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{\text{av}}$  は次のような物理的意味をもっている。

各格子的には f スピンが局在し、s-f 交換相互作用を通して、s 電子に影響を与えている。この効果を、各格子点に共通のポテンシャル  $\Sigma(\omega)$  (コヒーレント・ポテンシャル) が置かれている有効媒質で近似することを考える。強磁性温度領域 ( $T < T_c$ ) では、s 電子のスピンの向きによって受けるポテンシャルが異なるから、 $\Sigma_+(\omega)$  と  $\Sigma_-(\omega)$  の 2 種類存在する。

今、格子点  $l$  以外の格子点にはすべて、コヒーレント・ポテンシャルが置かれているものと仮定しよう。この媒質の中で、格子点  $l$  には (2.9b) 式で定義されたポテンシャル  $v_l$  が存在し、s-f 交換相互作用を通じて  $l$  サイトに置かれた f スピンの影響を受ける。 $l$  サイトでの s 電子の散乱過程では、スピン反転のプロセスも当然入ってくる。そのため  $\uparrow$  の s 電子が  $l$  サイトで多重散乱される過程では、 $l$  サイトでスピン反転し、有効媒質中で  $\Sigma_-$  の影響を受け、再び  $l$  サイトに戻ってスピン反転し  $\uparrow$  スピンにもどるといった過程も含まれる。式 (2.14)–(2.27) で示された  $t$  行列要素には、そのようなプロセスが過不足なく含まれていることは、高橋<sup>2)</sup> によって示されている。

さて、 $l$  サイトに置かれた有効ポテンシャル  $v_l$  による散乱、そして、多重散乱を示す  $t$  行列  $t_l$  は、当然、 $l$  サイトに置かれた f スピン演算子  $S_l$  に依存する。先に述べたように、 $t_{\uparrow\uparrow}$  と  $t_{\downarrow\downarrow}$  にはスピン演算子  $S_z$  のみが含まれているが、その固有値は、

$$S_z = S, S-1, S-2, \dots, -S \quad (2.32)$$

である。(ここではスピン固有値と演算子の両方に同じ記号  $S_z$  を用いたが、混乱はないと思われる)。常磁性温度領域 ( $T \geq T_c$ ) では、式 (2.32) で示した固有値に対する出現確率は等しいが、強磁性温度領域 ( $T < T_c$ ) では温度  $T$  によって異なってくる。この点を考慮に入れて、 $l$  サイトでの  $S_z$  の固有値の出現確率に対応した重みを  $t_{\uparrow\uparrow}(S_z)$  と  $t_{\downarrow\downarrow}(S_z)$  にかけて平均値 (期待値) を取ったのが、式 (2.30) と (2.31) で与えた  $\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{\text{av}}$ 、 $\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{\text{av}}$  である。換言すれば、式 (2.30) と (2.31) は、 $t$  行列の熱平均に相当する。

さて、私達は CPA の精神で、

$$\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{\text{av}} = 0 \quad (2.33a)$$

$$\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{\text{av}} = 0 \quad (2.33b)$$

という 2 つの条件式より、 $\Sigma_+(\omega)$  と  $\Sigma_-(\omega)$  を定めた。式 (2.33) は、未知数  $\Sigma_+$  と  $\Sigma_-$  に対する連立方程式とみることもできる。

### 3. 数値計算の結果

#### 3.1 f スピン系に対する分子場近似

Fig. 1 に、分子場近似より求めた  $\langle S_z \rangle / S$  の値を、規格化された温度  $T/T_c$  の関数として示す。この値は、与えられた温度  $T/T_c$  に対して

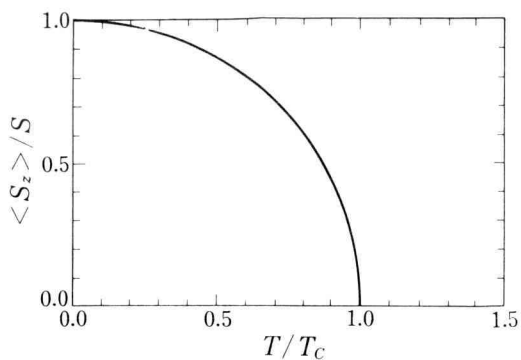


Fig. 1.

$$\frac{\langle S_z \rangle}{S} = B_s(x) \quad (3.1a)$$

$$x = \frac{2zJS\langle S_z \rangle}{k_B T} = \frac{\langle S_z \rangle}{S} \times \frac{3}{(1+1/S)} \times \left( \frac{T_c}{T} \right) \quad (3.1b)$$

の2式を self-consistent に解くことにより求まる。式(3.1a)の  $B_s(x)$  はブリルアン関数で

$$B_s(x) = \frac{2S+1}{2S} \coth \frac{(2S+1)x}{2S} - \frac{1}{2S} \coth \frac{x}{2S} \quad (3.2)$$

で与えられる。 $S=7/2$  として計算した。

### 3.2 状態密度

Fig. 2~Fig. 5 は、それぞれ、s-f 交換相互作用の大きさ ( $IS$ ) と s 電子の伝導電子のバンド幅  $W$  との比 ( $IS/W$ ) の値が、0.1, 0.2, 0.3 と 0.5 の場合の状態密度  $D(\omega)$  を、エネルギー  $\omega$  の関数として示したものである。(状態密度は  $D(\omega) \cdot W$  で、エネルギーは  $\omega/W$  でそれぞれ規格化してある)。得られた結果は、数値計算の誤差の範囲で、 $\uparrow$  電子でも  $\downarrow$  電子でも、状態密度の総和に関する条件、

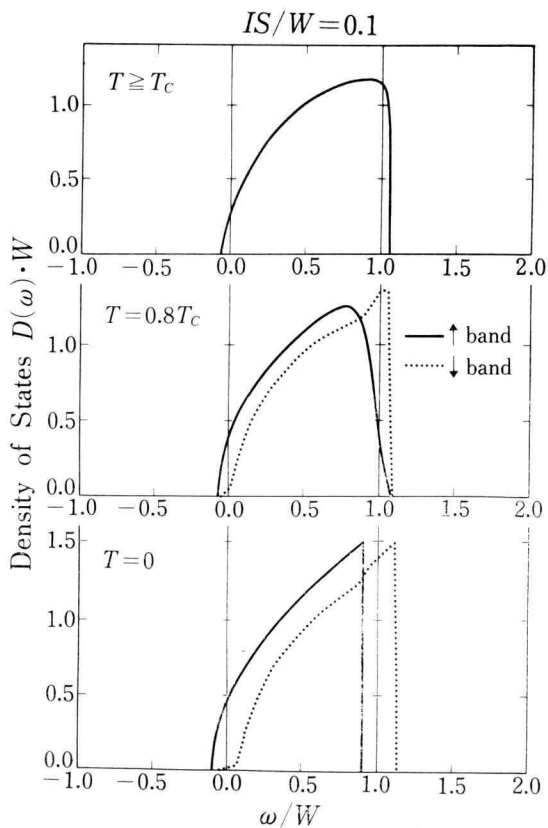


Fig. 2.

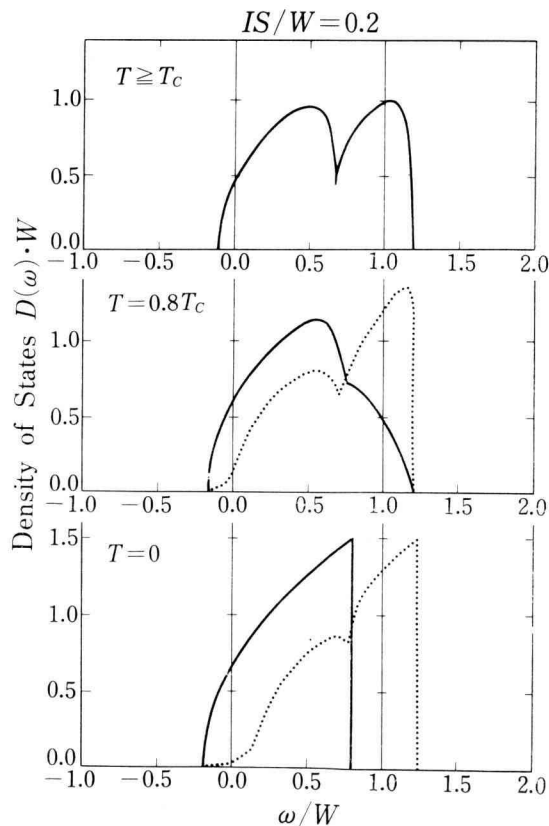


Fig. 3.

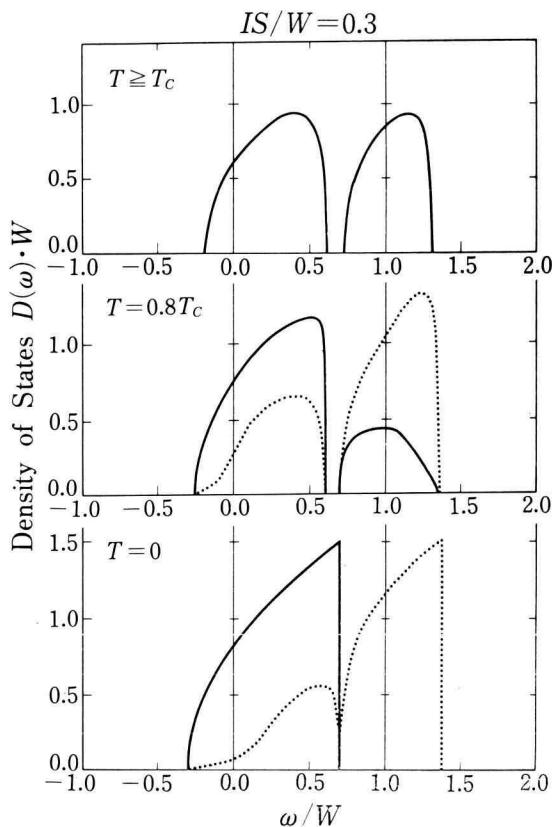


Fig. 4.

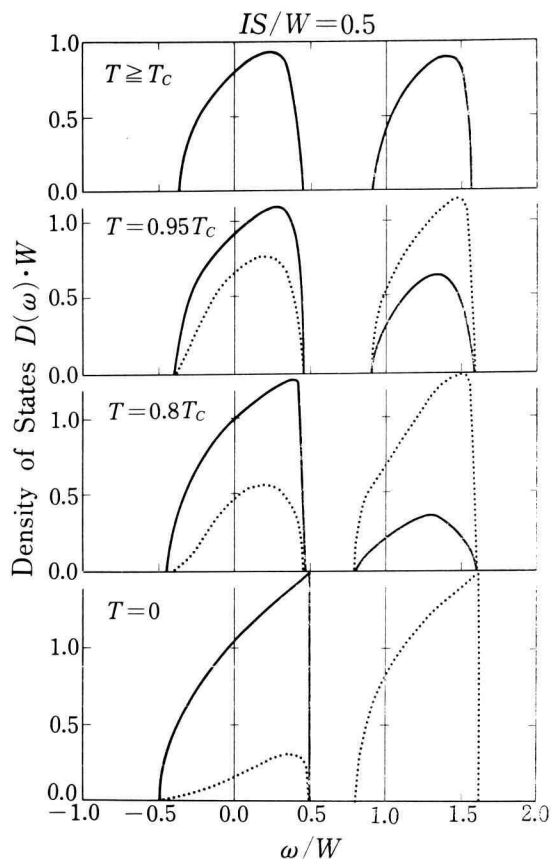


Fig. 5.

$$\int_{-\infty}^{\infty} D(\omega) d\omega = 1.0 \quad (3.3)$$

を満たしている。

### 3.3 自己エネルギー

Fig. 6-7 に  $IS/W=0.1$  の自己エネルギー  $\Sigma$  を, Fig. 8-9 に  $IS/W=0.5$  の自己エネルギー  $\Sigma$  をそれぞれ, エネルギー  $\omega$  の関数として示す。( $\Sigma/W$ ,  $\omega/W$  で規格化している。)

$IS/W=0.1$  の場合について, Fig. 6 は  $\uparrow$  電子の, Fig. 7 は  $\downarrow$  電子の自己エネルギーを示している。Fig. の a, b は実数部と虚数部に対応している。温度は  $T=\infty$ ,  $0.8 T_c$ ,  $0 K$  の 3 つの場合を示した。

$IS/W=0.5$  の場合について, Fig. 8 は  $\uparrow$  電子の, Fig. 9 は  $\downarrow$  電子の自己エネルギーを示す。Fig. の a, b はそれぞれ実部と虚部の振舞いを示す。 $IS/W=0.1$  はパン

ドが分解しない状態,  $IS/W=0.5$  は分離した状態の代表例と考えてよい。

### 3.3 低エネルギー側の状態密度

Fig. 10~13 に, 低エネルギー側の (状態密度)  $\times$  (バンド幅) ( $D(\omega) \cdot W$ ) を  $IS$  でスケールしたエネルギー ( $\omega/IS$ ) の関数として示す。Fig. 10, 11, 12, 13 はそれぞれ,  $IS/W=0.04, 0.1, 0.2, 0.5$  に対応する。 $IS/W=0.04$  は実際に実験が行われている EuO, EuS のパラメータに近いと思われる。

図中には, 1 次近似によるバンド端 ( $\omega_b/IS = -\langle S_z \rangle / S$ ) も  $\blacktriangle$  印で示してある。 $IS/W$  が小さい場合は 1 次近似でも対応するが,  $IS/W$  の値が大きくなるにつれて, ずれてくる。 $\downarrow$  電子のバンド端は 1 次近似では  $\omega_b/IS = +\langle S_z \rangle / S$  であるが (すなわち  $\uparrow$  バンドは 1 次近似では高エネルギー側に移動する) が, 今回

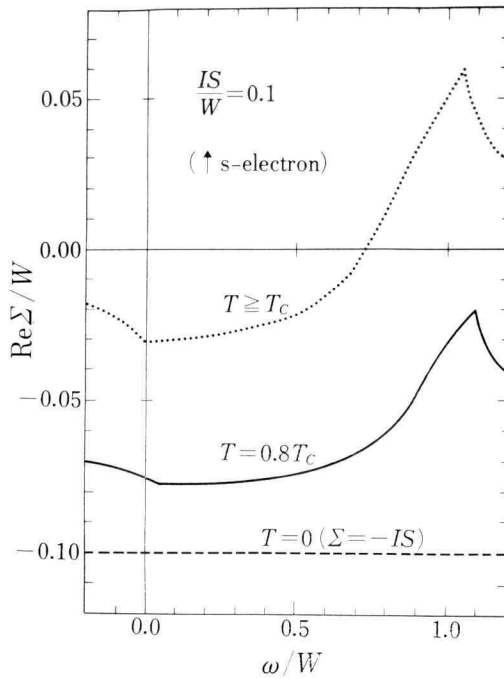


Fig. 6a.

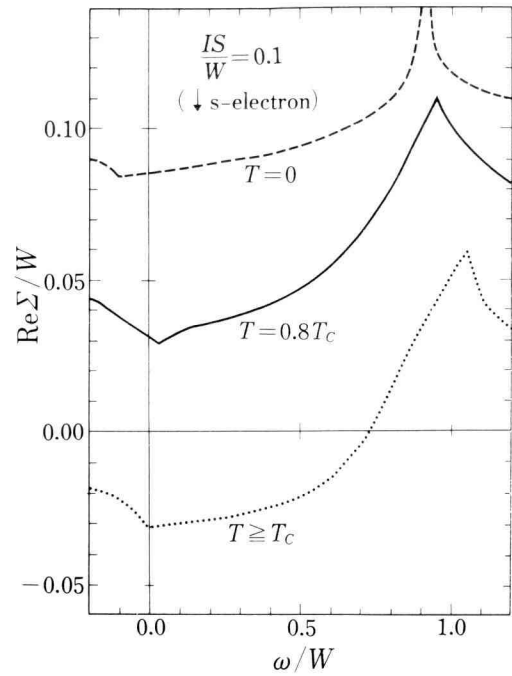


Fig. 7a.

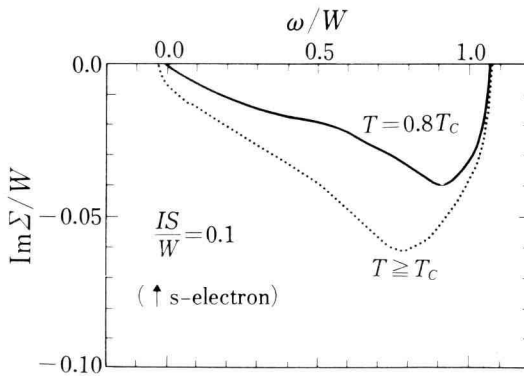


Fig. 6b.

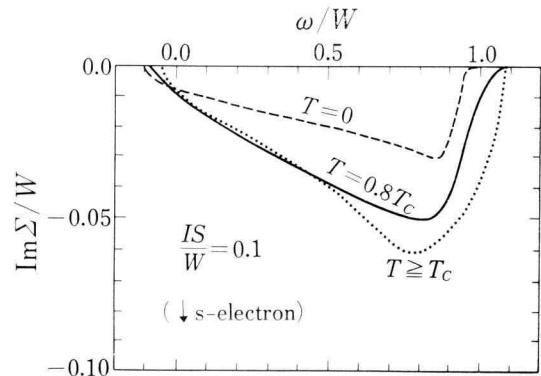


Fig. 7b.

のではむしろ下がっている点に着目したい。実際、以下に示すように、 $\downarrow$ バンドの底のエネルギーは $\uparrow$ バンドの底のエネルギー値と一致する。

### 3.4 バンド端エネルギーの温度変化

Fig. 14 に、伝導電子バンドの底のエネルギー  $\omega_b$  の温度変化を示す。 $(\omega_b/IS$  を  $T/T_c$  の関数形として示す。) 図中には  $IS/W$  の値が 0.04, 0.1, 0.2, 0.5 の場

合を示した。参考のため 1 次近似での値  $-I\langle S_z \rangle$  (図中では  $-I\langle S_z \rangle/IS = -\langle S_z \rangle/S$ ) も示した。

すぐわかるように、今回の結果は、時に  $IS/W$  が大きな場合には 1 次近似の結果とは大きく異なる。これは多重散乱の効果が取り入れられたからである。

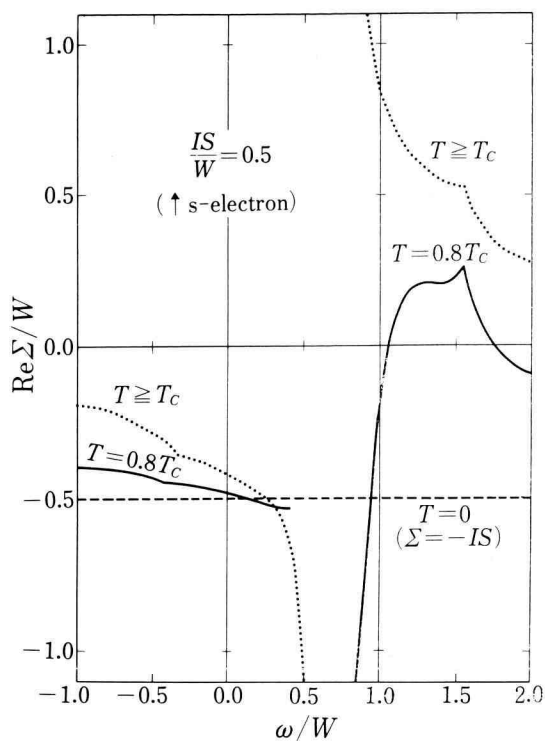


Fig. 8a.

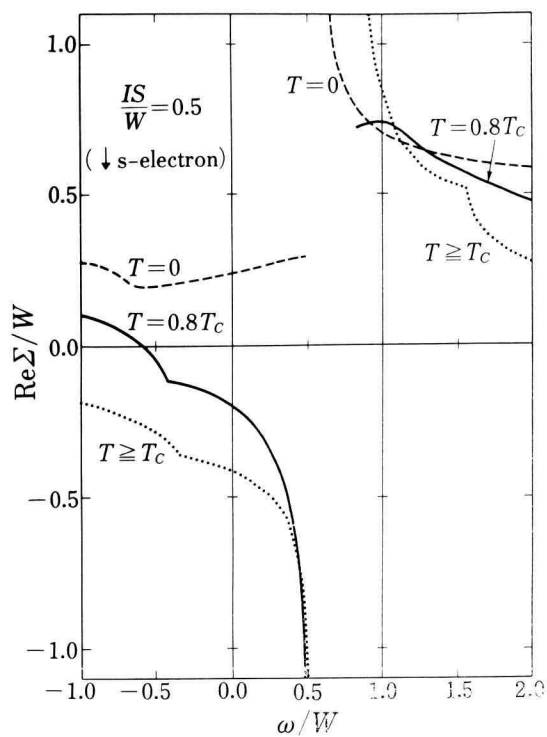


Fig. 9a.

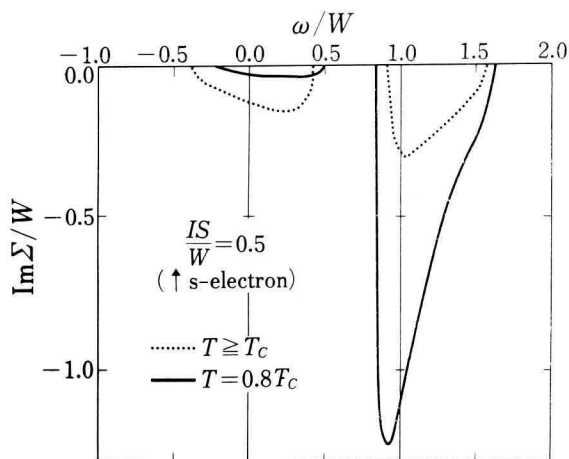


Fig. 8b.

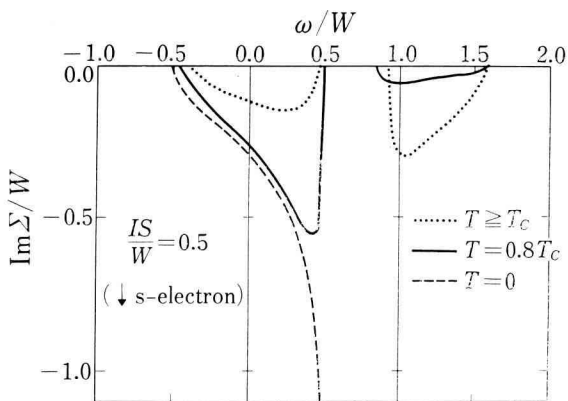


Fig. 9b.

#### 4. 結果に対する考察

前に示した結果に、ここでは幾つかの観点から検討を加える。とくに、K. Kubo の論文<sup>4)</sup>と対比させながら

議論を進めることにする。

##### (i) 弱い相互作用の場合

式 (2.16)–(2.19) より明らかなように、 $V$  と  $U$  は  $(IS/W)$  の 1 次に関与し、式 (2.20)–(2.21) からわかるように、 $W$  は  $(IS/W)^2$  に関与している。このこと

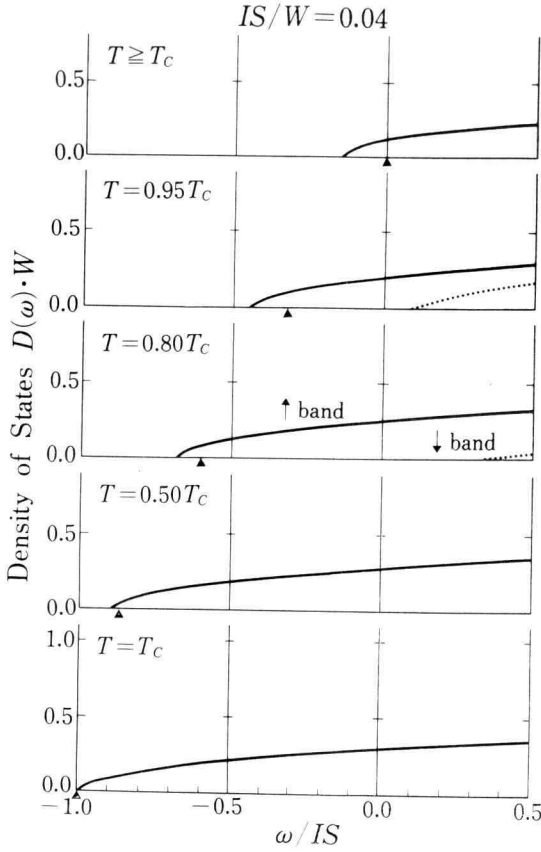


Fig. 10.

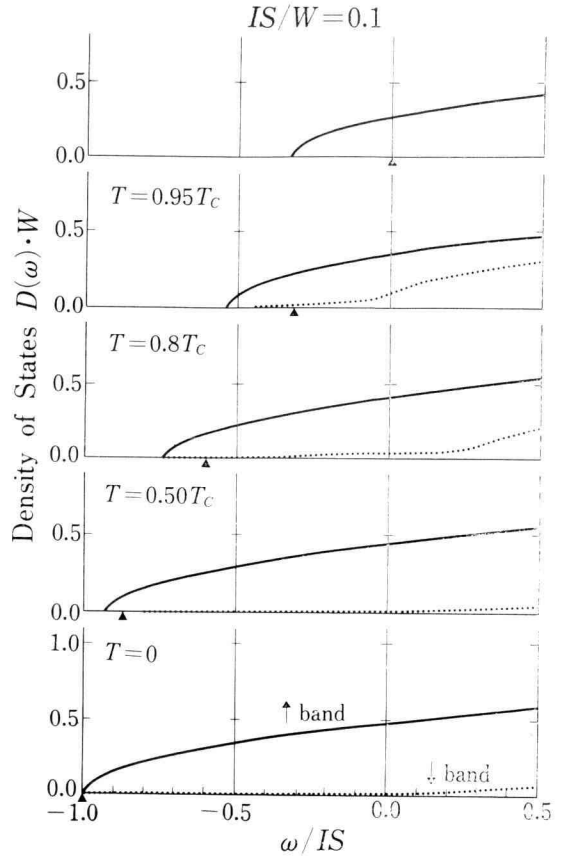


Fig. 11.

に注意すると, CPA の条件 (2.33) 式は,  $t_{\uparrow\uparrow}$  と  $t_{\downarrow\downarrow}$  の定義 (2.24) と (2.26) を,  $IS/W$  の 1 次まで展開することによって

$$\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{av} = \langle V_{\uparrow} \rangle = \langle -IS_z - \Sigma_{\uparrow} \rangle = 0 \quad (4.1a)$$

$$\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{av} = \langle V_{\downarrow} \rangle = \langle +IS_z - \Sigma_{\downarrow} \rangle = 0 \quad (4.1b)$$

を得る。

式 (4.1) は  $(IS/W) \ll 1$  の場合の自己エネルギーが, それぞれ  $\uparrow$  電子と  $\downarrow$  電子で,

$$\Sigma_{\uparrow} = -I \langle S_z \rangle \quad (4.2a)$$

$$\Sigma_{\downarrow} = +I \langle S_z \rangle \quad (4.2b)$$

と近似されることを示している。これは良く知られた 1 次近似と一致し,  $\uparrow$  と  $\downarrow$  の伝導電子バンドがそれぞれ,  $-I \langle S_z \rangle$ ,  $+I \langle S_z \rangle$  だけシフトすることを意味する。

## (ii) 完全強磁性の場合

熱平均において,  $S_z = S$  の場合だけが実現するから, 式 (2.16)–(2.21) はそれぞれ,

$$V_{\uparrow} = -IS - \Sigma_{\uparrow} \quad (4.3)$$

$$V_{\downarrow} = +IS - \Sigma_{\downarrow} \quad (4.4)$$

$$U_{\uparrow} = -I(S-1) - \Sigma_{\uparrow} \quad (4.5)$$

$$U_{\downarrow} = +I(S+1) - \Sigma_{\downarrow} \quad (4.6)$$

$$W_{\uparrow} = 0 \quad (4.7)$$

$$W_{\downarrow} = I^2 \times 2S \quad (4.8)$$

このとき,  $t_{\uparrow\uparrow} = 0$  のという条件から,

$$\Sigma_{\uparrow} = -IS \quad (4.9)$$

が導かれる。式 (4.9) を用いると,  $t_{\downarrow\downarrow} = 0$  という条件からは,



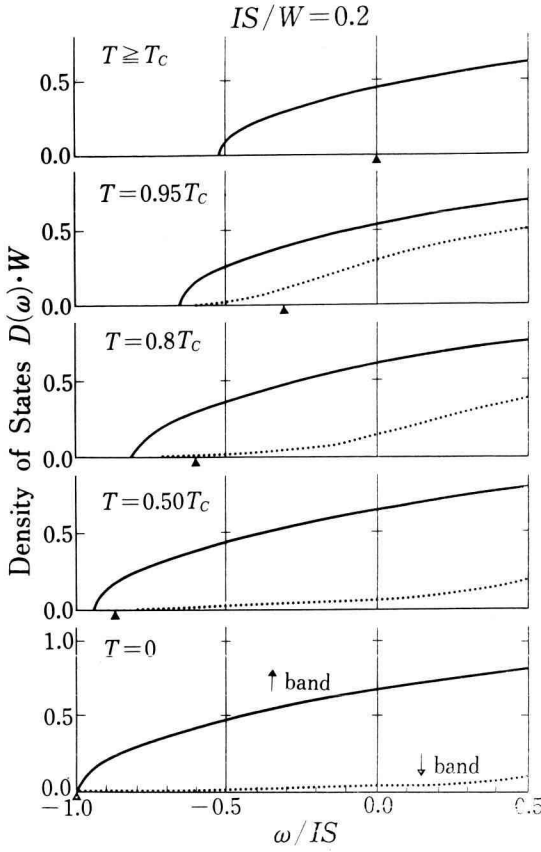


Fig. 12.

$$\Sigma_{\downarrow} = \frac{IS(1+IF_{\uparrow})}{1-IF_{\uparrow}} \quad (4.10)$$

が得られる。

これらの結果は、物理的には、次のように理解される。完全強磁性の場合には、局在 f スピンは、↑ 方向にすべて揃い、結晶は並進対称性を回復する。このため ↑ s 電子の自己エネルギーは、式 (4.9) で与えたように、 $-IS$  となる。これは、↑ の s 電子エネルギーが、一様に  $-IS$  だけ移動することを意味する（自己エネルギーの虚数部が 0 であるから、いわゆる散乱はない）。式 (4.7) の  $W_{\uparrow}=0$  は s 電子のスピンの向きが ↑ から ↓ そして ↑ へと反転する過程がないことを意味している。これは次のように理解される。スピンの和の保存性から、↑ 電子のスピンの反転する場合には、局在 f スピンは  $S_z=M$  から  $M+1$  へと、同時にスピン転換し

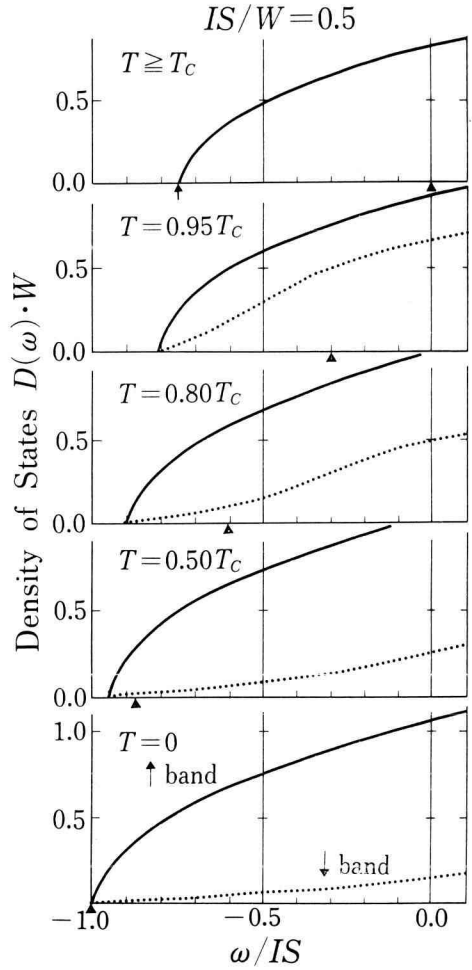


Fig. 13.

なければならないが、f スピンの値が  $S_z=S$  の場合にはこの転換は起きない。従って、完全強磁性の場合には ↑ s 電子のスピン反転を伴う散乱はない。

他方、↓ s 電子の場合には、式 (4.10) に示すように、完全強磁性のときでも、スピン反転を伴う散乱過程がある。式 (4.10) からわかることは、↓ s 電子の自己エネルギーが虚数部を持つのは、散乱の中間過程に入ってくる ↑ s 電子バンドが存在するエネルギー領域である（すなわち、 $\Sigma_{\downarrow}$  が虚数部を持つのは  $F_{\uparrow}$  が虚部をもつときである。）このことから、逆に、↑ s 電子バンドが有限の状態密度を持つエネルギー領域では、↓ s 電子バンドも有限の状態密度を持つことが示される。

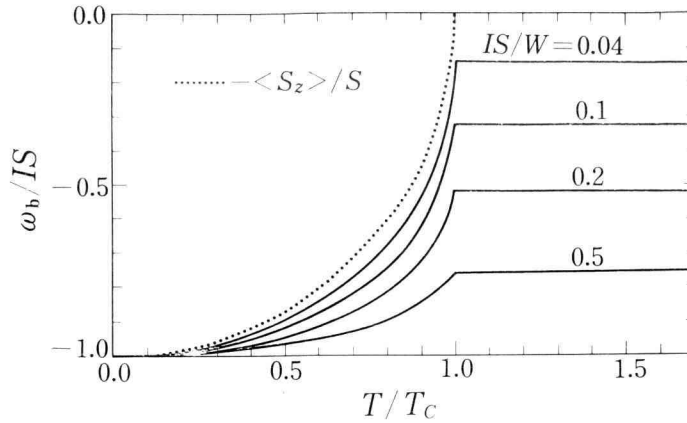


Fig. 14.

(iii) 常磁性温度領域 ( $T \geq T_c$ ) の場合

常磁性温度領域 ( $T \geq T_c$ ) では、一様な磁化はないから、

$$\Sigma = \Sigma_{\uparrow} = \Sigma_{\downarrow} \quad (4.11)$$

$$F = F_{\uparrow} = F_{\downarrow} \quad (4.12)$$

と置ける。このとき、

$$\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle = \langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle = 0 \quad (4.13)$$

という条件は、

$$\frac{F(IS + \Sigma)(I(SH) - \Sigma)}{[1 + F(IS + \Sigma)][1 - F(I(S+1) - \Sigma)]} = 0 \quad (4.14)$$

という式に帰着する。これが Rangette *et al.*<sup>3)</sup> の式と一致することは、既に高橋<sup>2)</sup> によって示されている。

## (iv) K. Kubo 理論との対応

K. Kubo<sup>4)</sup> は、ローケーター (locator)  $\mathcal{L}$  という考え方を導入し、次の CPA の表式を導いた。(Kubo 論文<sup>4)</sup> の (15) 式中で  $H_0 = F = 0$  と置く)。

$$G_{00}^*(z) = \left\langle \frac{z - J_0^*(z) - I(S_z + 1)}{z - J_0^*(z) + IS_z)(z - J_0^*(z) - I(S_z + 1)) - I^2(S - S_z)(S + S_z + 1)} \right\rangle_{av} \quad (4.15)$$

私達の論文とは、次の関係で対応づけられる。

$$z \longleftrightarrow \omega \quad (4.16)$$

$$G_{00}^*(z) \longleftrightarrow F_{\uparrow}(\omega) \quad (4.17)$$

$$\mathcal{L}(z) \longleftrightarrow \omega - \Sigma(\omega) \quad (4.18)$$

$$J_0^*(z) = \mathcal{L}_{\uparrow}(z) - (G_{00}^*)^{-1} \longleftrightarrow \omega - \Sigma_{\uparrow} - F_{\uparrow}^{-1} \quad (4.19)$$

$$J_0^*(z) = \mathcal{L}_{\downarrow}(z) - (G_{00}^*)^{-1} \longleftrightarrow \omega - \Sigma_{\downarrow} - F_{\downarrow}^{-1} \quad (4.20)$$

実際、式 (4.16)–(4.20) のような置き換えを行うと、式 (4.15) は次のように書き換えられる；

$$F_{\uparrow} = \left\langle \frac{\Sigma_{\uparrow} + F_{\uparrow}^{-1} - I(S_z + 1)}{\Sigma_{\uparrow} + F_{\uparrow}^{-1} + IS_z)(\Sigma_{\uparrow} + F_{\uparrow}^{-1} - I(S_z + 1)) - I^2(S - S_z)(S + S_z + 1)} \right\rangle_{av} \quad (4.21)$$

すなわち、

$$F_{\uparrow} = \left\langle \frac{F_{\downarrow}^{-1} - U_{\downarrow}}{(F_{\uparrow}^{-1} - V_{\uparrow})(F_{\downarrow}^{-1} - U_{\downarrow}) - W_{\uparrow}} \right\rangle_{av} \quad (4.22)$$

ただし、式 (2.16)–(2.2) で定義された記号を用いて簡略化した。(  $W_{\uparrow} = I^2(S - S_z)(S + S_z + 1)$  に注意)。

式 (4.22) を書き直すと、

$$F_{\uparrow}^{-2} \times \left\langle \frac{V_{\uparrow} + F_{\uparrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})}{1 - F_{\uparrow}V_{\uparrow} - F_{\downarrow}U_{\downarrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})} \right\rangle_{av} = 0 \quad (4.23)$$

を得るが、(4.23) 式中の  $\langle \rangle$  の内容は  $t_{\uparrow\uparrow}$  に等しく、これは私達の CPA の条件 (2.33a) 式に他ならない。

このようにして、私達の方法が K. Kubo の表式と一致することが明らかになった。  $T \leq T_c$  での短距離秩序の s 電子に与える効果を求めるとき、t-行列による方法の方が Locator を用いる Kubo の表式より応用がきくように思われる。

(v) 古典的スピンの場合 ( $S \gg 1$ )

局在 f スピン系を扱うことの困難さの 1 つは、スピン演算子の非可換性にある。この量子効果は  $S=1/2$  で最も大きな意味をもつ。 $S$  が大きい極限(ただし、 $IS$  は一定とする)では古典的スピンの場合に移るが、このときにはスピン演算子が可換となるので、取扱いが幾つかの面で簡素化される。

古典スピンの場合、式 (2.18)–(2.19) の  $U_{\uparrow}$  と  $U_{\downarrow}$  は、 $V_{\uparrow}$  と  $V_{\downarrow}$  に一致する。更に、

$$W = W_{\uparrow} = W_{\downarrow} = I^2(S^2 - S_z^2) \quad (4.24)$$

と書ける。すると、(2.24)–(2.27) で与えた  $t$  行列は次のように書ける。

$$t_{\uparrow\uparrow} = \frac{1}{B} [V_{\uparrow} + F_{\downarrow}(W - V_{\uparrow}V_{\downarrow})] \quad (4.25)$$

$$t_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{B} (-IS_{-}) \quad (4.26)$$

$$t_{\downarrow\downarrow} = \frac{1}{B} [V_{\downarrow} + F_{\uparrow}(W - V_{\uparrow}V_{\downarrow})] \quad (4.27)$$

$$t_{\downarrow\uparrow} = \frac{1}{B} (-IS_{+}) \quad (4.28)$$

ただし、式 (4.25)–(4.28) の分母に現われた  $B$  は共通で、

$$B = 1 - F_{\uparrow}V_{\uparrow} - F_{\downarrow}V_{\downarrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W - V_{\uparrow}V_{\downarrow}) \quad (4.29)$$

である。

ここで、古典的スピンの場合の特徴をまとめておこう。

## (v-a) 完全強磁性の場合

このときには、 $\Sigma_{\uparrow} = -IS$  は量子スピンの場合と同様である。完全強磁性の場合には、 $S_z = S$  で、式 (4.24) より  $W=0$ 、また  $V_{\uparrow}=0$  であることを考えると、 $\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{av}=0$  の条件は、式 (4.27) より  $V_{\downarrow}=0$  すなわち

$$\Sigma_{\downarrow} = +IS \quad (4.30)$$

である。従って、古典スピンの場合には  $\uparrow s$  電子は  $-IS$ 、 $\downarrow s$  電子は  $+IS$  だけ、元来のバンドがそれぞれエネルギー・シフトしたことになる。容易にわかるよ

うに、 $\downarrow s$  電子でもスピン反転を伴う散乱は起きない。換言すれば、式 (4.10) の解釈をめぐってしたような議論は量子スピンの場合に限られることになる。

## (v-b) 常磁性温度領域の場合

常磁性温度領域 ( $T \geq T_c$ ) では、 $\Sigma = \Sigma_{\uparrow} = \Sigma_{\downarrow}$  である。 $IS/W \gg 1$  のときには、 $\omega_c - IS$  と  $\omega_c + IS$  を中心とした 2 つの伝導電子バンドに分離するが、その 2 つのバンドの状態密度の比は 1:1 である。(量子スピンの場合には、バンドの中心は、 $\omega_c - IS$  と  $\omega_c + I(S+1)$  を中心とした 2 つのバンドに分離し、その状態密度の和の比は、 $S/(2S+1)$  と  $(S+1)/(2S+1)$  である)。

## 5. 結 び

私達は、強磁性温度領域 ( $T < T_c$ ) で、 $t$  行列を用いた CPA を、s-f モデルに適用した。その結果、1 サイト近似の範囲内ではあるが、 $IS/W$  の値の広い範囲にわたって、状態密度やバンドの底のエネルギーなどを、温度の関数として、求めることができた。

これらの結果はもちろん、1 次近似とは異なる傾向を示す。私達の計算では、コヒーレント・ポテンシャルを通して、f スピン系の長距離秩序と 1 サイトでの多重散乱の効果を取り入れた。しかし、 $T \sim T_c$  で重要となる短距離秩序の効果は全く導入されていない。これらを、どのように取り入れるかは次の課題であろう。

## 参 考 文 献

- 1) 高橋・三井・梅原; 神奈川工科大学研究報告 B17 (1993) 239.
- 2) 高橋正雄; 神奈川工科大学研究報告 B15(1991) 285.
- 3) A. Rangette, A. Yanase and J. Kübler; Solid State Commun. 12 (1973) 171.
- 4) K. Kubo; J. Phys. Soc. Jpn. 36 (1974) 32.
- 5) 小口武彦: 「磁性体の統計理論」(裳華房) pp. 33–37.