

s-f モデルと電子状態 X(10)

— bcc 反強磁性半導体への CPA の適用 —

高橋 正雄*・三井 和博*・梅原 雅捷**

s-f Model and Electron States X(10)

— The CPA for bcc anti-ferromagnetic semiconductors —

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

Abstract

In anti-ferromagnetic semiconductors there exist two types of sub-lattices, which begin to magnetize in opposite directions under the Neel temperature. Therefore the conduction-electron states split into two states; the spin of electron is parallel or antiparallel to localized spins. In this paper we apply the CPA to the bcc anti-ferromagnetic semiconductor by using the t -matrix elements of s-f exchange interaction. The numerical results are shown for $T=0$ and $T=\infty$, which seem to be reasonable.

1. はじめに

私達はこれまで、強磁性半導体を対象として、(a) 常磁性温度領域での f スピン系短距離秩序の伝導電子状態に与える影響、(b) 強磁性温度領域での単サイト近似、などを研究してきた。本論文では、反強磁性半導体に CPA を適用する方法について検討する。

強磁性半導体と違って、反強磁性半導体の場合には、2 種類の部分格子が存在するため、更に事情が複雑になる。そこでまず、本論文では、f スピン系を古典スピン系として扱い、問題を単純化して議論を進めることにする。

2. 基本的な考え方

2.a 強磁性半導体への CPA の適用¹⁾

反強磁性体への適用を考える前段階として、強磁性体の場合をまとめておくことは大変意義がある。

強磁性温度領域 ($T < T_c$) では、f スピン系に長距離型の秩序が発生し、ブロッホ電子状態もそれに対応して、 \uparrow 電子と \downarrow 電子とで異なる。ただし、f スピンの反転に伴い、電子スピンの反転も可能である。

CPA では、結晶中のあるサイト (以下 0-サイトと呼ぶ) を除いたすべてのサイトに共通の複素ポテンシャル (コヒーレント・ポテンシャル) を置き、その中で、0-サイトでの多重散乱の効果 (t 行列) が 0 になるという条件から self-consistent にコヒーレント・ポテンシャルを決定する。このとき、0-サイト以外では、f スピンは存在せず、s 電子のスピン反転も実現しないが、s 電子のスピン向きに応じて、各サイトには 2 種類のコヒーレント・ポテンシャル Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} が存在する。そのため、全サイトに 2 種類のコヒーレント・ポテンシャルを置いた非摂動ポテンシャル K に対するブロッホ状態は、s 電子状態の \uparrow と \downarrow で表示され、ワニエ状態もそれに対応して記述される。そのため、非摂動グリーン関数 P に対して、

$$F_{\uparrow}(\omega) \equiv \langle 0 \uparrow | P | 0 \uparrow \rangle \quad (2.1a)$$

1994 年 9 月 16 日受理

* 一般教育科

** 無機材質研究所

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N} \sum_k \langle k \uparrow | P | k \uparrow \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma_{\uparrow}} \quad (2.1b)
\end{aligned}$$

及び

$$F_{\downarrow}(\omega) \equiv \langle 0 \downarrow | P | 0 \downarrow \rangle \quad (2.2a)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N} \sum_k \langle k \downarrow | P | k \downarrow \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma_{\downarrow}} \quad (2.2b)
\end{aligned}$$

が定義される。更に、0-サイトでの t 行列の要素は \uparrow 電子に対しても \downarrow 電子に対しても 0 になるという条件から Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} が決まる。

すなわち

$$\begin{aligned}
t_{\uparrow\uparrow} &\equiv \langle 0 \uparrow | t | 0 \uparrow \rangle_{av} = 0 \quad (2.3a) \\
&= \left\langle \frac{V_{\uparrow} + F_{\downarrow}(W_{\uparrow\uparrow} - V_{\downarrow}U_{\uparrow})}{1 - F_{\downarrow}U_{\downarrow} - F_{\uparrow}V_{\uparrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W_{\uparrow\uparrow} - V_{\downarrow}U_{\uparrow})} \right\rangle_{av} \quad (2.3b)
\end{aligned}$$

及び

$$\begin{aligned}
t_{\downarrow\downarrow} &\equiv \langle 0 \downarrow | t | 0 \downarrow \rangle_{av} = 0 \quad (2.4a) \\
&= \left\langle \frac{V_{\downarrow} + F_{\uparrow}(W_{\downarrow\downarrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})}{1 - F_{\uparrow}U_{\uparrow} - F_{\downarrow}V_{\downarrow} - F_{\downarrow}F_{\uparrow}(W_{\downarrow\downarrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})} \right\rangle_{av} \quad (2.4b)
\end{aligned}$$

である。ここで、 $\langle \dots \rangle_{av}$ は、0-サイトの f スピン演算子の z 成分 S_z に対し、分子場近似で熱平均を取ることを意味する。ただし、表式を簡単にするため、次の記号が導入されている。

$$V_{\uparrow} = -IS_z - \Sigma_{\uparrow} \quad (2.5)$$

$$V_{\downarrow} = +IS_z - \Sigma_{\downarrow} \quad (2.6)$$

$$U_{\uparrow} = -I(S_z - 1) - \Sigma_{\uparrow} \quad (2.7)$$

$$U_{\downarrow} = +I(S_z + 1) - \Sigma_{\downarrow} \quad (2.8)$$

$$W_{\uparrow} = I^2[S(S+1) - S_z^2 - S_z] \quad (2.9)$$

$$W_{\downarrow} = I^2[S(S+1) - S_z^2 + S_z] \quad (2.10)$$

2.b 反強磁性半導体への CPA の適用

反強磁性体では、一般に 2 種類の部分格子が存在し、 $T < T_N$ (T_N はニール温度) では異なる部分格子にある f スピンは正反対の方向に磁化する。このため、ブロッホ状態とワニエ状態の関係は強磁性の場合ほど単純ではない。つまり、(2.1a) 式で定義された $F_{\uparrow}(\omega)$ に対して、(2.1b) 式は成り立たないことになる。

ただし、外部磁場がない限り、2 つの部分格子系 A,

B は等価で、A 格子に \uparrow 電子が存在するときに受けるポテンシャルと B 格子に \downarrow 電子が存在するときに受けるポテンシャルとは等しい。同様に、A 格子に \downarrow 電子が存在するときに受けるポテンシャルは、B 格子に \uparrow 電子が存在するときに受けるポテンシャルに等しい。このように、共通のコヒーレント・ポテンシャルは 2 種類用意すればよい (外部磁場が存在する場合には、上に述べた等価性はもはやないから、4 種類のポテンシャルが必要である)。

さて、0-サイト (仮に A 格子と考える) に局在する s 電子状態は $|0\uparrow\rangle$ と $|0\downarrow\rangle$ の 2 通りだけであるが、何らかの方法で、

$$F_{\uparrow}(\omega) \equiv \langle 0 \uparrow | P | 0 \uparrow \rangle \quad (2.11)$$

$$F_{\downarrow}(\omega) \equiv \langle 0 \downarrow | P | 0 \downarrow \rangle \quad (2.12)$$

が求められれば、0-サイトでの t -行列の行列要素を 0 とする条件 (2.3), (2.4) は、反強磁性体も強磁性体の場合と全く同じ手続きで実行できる。このように考えると、反強磁性体に CPA を適用する鍵は、非摂動ハミルトニアン K の設定と、非摂動グリーン関数 P の行列要素の求め方にあることになる。これは結晶構造が fcc か bcc かで異なるので、区別して議論する。

3. bcc 反強磁性半導体

3.1 コヒーレント・ポテンシャル

非摂動ハミルトニアンとして、次の形を仮定する。

$$K = \sum_{mn} \varepsilon_{mn} a_{m\sigma}^{\dagger} a_{n\sigma} + \sum_{m\sigma} \Sigma_{(m,\sigma)} a_{m\sigma}^{\dagger} a_{m\sigma} \quad (3.1)$$

ここで、 $a_{m\sigma}^{\dagger}$, $a_{m\sigma}$ は各々 m -サイトで電子スピン σ をもつワニエ関数の生成、消滅演算子で、 ε_{mn} は m, n サイト間の遷移エネルギーである。第 2 項は m サイトで σ スピンを持つワニエ型電子が受けるコヒーレント・ポテンシャルを記述し、 $\Sigma_{(m,\sigma)}$ は、サイト m が A 格子か B 格子か、電子スピンの \uparrow か \downarrow かの組合せによって、次の 2 通りの値をとる；

$$\Sigma_{(m,\sigma)} = \begin{cases} \Sigma_p (m=A, \text{ and } \sigma=\uparrow) \text{ or } (m=B \text{ and } \sigma=\downarrow) \\ \Sigma_a (m=A \text{ and } \sigma=\downarrow) \text{ or } (m=B \text{ and } \sigma=\uparrow) \end{cases} \quad (3.2)$$

ここで、 Σ_p は格分格子の f スピンの向きと s 電子のスピンの向きが平行結合 (parallel) な場合に受けるポテンシャル、 Σ_a は反平行結合 (anti-parallel) な場合に受けるポテンシャルを意味し、ともに複素数である。

3.2 エネルギー固有値 (電子スピンの場合)

反強磁性半導体中の伝導電子状態を記述するために、まず↑電子に着目して、波数ベクトル k のブロッホ電子状態を、

$$|k \uparrow\rangle = C_A |Ak \uparrow\rangle + C_B |Bk \uparrow\rangle \quad (3.3)$$

と表すことを考える。ただし、 $|Ak \uparrow\rangle$ と $|Bk \uparrow\rangle$ は、それぞれ、部分格子 A と B に関連したブロッホ状態で、

$$|Ak \uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_A} e^{ik \cdot R_A} |R_A \uparrow\rangle \quad (3.4a)$$

$$|Bk \uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_B} e^{ik \cdot R_B} |R_B \uparrow\rangle \quad (3.4b)$$

で定義される。ただし、右辺の和は、部分格子系 A, B の位置ベクトル R_A, R_B について、それぞれ実行されているため、部分格子の数 $N/2$ で規格化されている。

非摂動ハミルトニアン K には、s 電子のスピンを反転させる効果は入っていないから、電子スピンの向きは保存される。また↑と↓は対称であるはずである。このことに注意して固有値方程式

$$K |k \uparrow\rangle = E(k) |k \uparrow\rangle \quad (3.5)$$

を解くことを考える。式 (3.3) を代入すると、

$$\begin{aligned} K(C_A |Ak \uparrow\rangle + C_B |Bk \uparrow\rangle) \\ = E(k)(C_A |Ak \uparrow\rangle + C_B |Bk \uparrow\rangle) \end{aligned} \quad (3.6)$$

となる。規格直交化条件

$$\langle Ak \uparrow | Ak \uparrow \rangle = 1 \quad (3.7a)$$

$$\langle Ak \uparrow | Bk \uparrow \rangle = \langle Bk \uparrow | Ak \uparrow \rangle = 0 \quad (3.7b)$$

$$\langle Bk \uparrow | Bk \uparrow \rangle = 1 \quad (3.7c)$$

に注意する。式 (3.6) に左側から $\langle Ak \uparrow |$ または $\langle Bk \uparrow |$ をかけて、

$$C_A K_{AA} + C_B K_{AB} = C_A E(k) \quad (3.8a)$$

$$C_A K_{BA} + C_B K_{BB} = C_B E(k) \quad (3.8b)$$

物理的に意味をもつ係数 C_A, C_B が得られるための条件は、次の永年方程式を満たすことである。

$$\begin{vmatrix} K_{AA} - E(k) & K_{AB} \\ K_{BA} & K_{BB} - E(k) \end{vmatrix} = 0 \quad (3.9)$$

これから、エネルギー固有値 $E(k)$ が決定される。

ただし、遷移エネルギー ε_{mn} は最隣接格子だけが 0 でないという近似をすると、bcc 構造の場合は最隣接

格子は異なる部分格子だから、 K_{AA}, K_{BB} に ε_{mn} は入ってこない。すなわち、

$$K_{AA} = \langle Ak \uparrow | K | Ak \uparrow \rangle \quad (3.10a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{N} \sum_{R_A, R_A'} e^{ik(R_A - R_A')} \langle R_A' \uparrow | \\ &\quad \left(+ \sum_{m\sigma} \Sigma_{(m,\sigma)} a_{m\sigma}^+ a_{m\sigma} \right) | R_A \uparrow \rangle \end{aligned} \quad (3.10b)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_{R_A} \Sigma_p = \Sigma_p \quad (3.10c)$$

$$K_{BB} = \langle Bk \uparrow | K | Bk \uparrow \rangle \quad (3.11a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{N} \sum_{R_B, R_B'} e^{ik(R_B - R_B')} \langle R_B' \uparrow | \\ &\quad \left(+ \sum_{m\sigma} \Sigma_{(m,\sigma)} a_{m\sigma}^+ a_{m\sigma} \right) | R_B \uparrow \rangle \end{aligned} \quad (3.11b)$$

$$= + \frac{2}{N} \sum_{R_B} \Sigma_a = + \Sigma_a \quad (3.11c)$$

$$K_{AB} = \langle Ak \uparrow | K | Bk \uparrow \rangle \quad (3.12a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{N} \sum_{R_A, R_B} e^{ik(R_A - R_B)} \langle R_A \uparrow | \\ &\quad \left(- \sum_{m,n} \varepsilon_{mn} a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} \right) | R_B \uparrow \rangle \end{aligned} \quad (3.12b)$$

$$= - \sum_{\mathcal{J}} \varepsilon(\mathcal{J}) e^{ik \cdot \mathcal{J}} = - \varepsilon(k) \quad (3.12c)$$

ただし、 m と n が最隣接格子のときの遷移エネルギーを $\varepsilon(\mathcal{J})$ と表す。すなわち、最隣接格子ベクトル $\mathcal{J} = R_m - R_n$ に対して、

$$\varepsilon(\mathcal{J}) = \varepsilon_{mn} \quad (3.13)$$

とおく。

さて、このような行列要素を永年方程式 (3.9) に代入すると、

$$\begin{vmatrix} +\Sigma_p - E(k) & -\varepsilon(k) \\ -\varepsilon(k) & +\Sigma_a - E(k) \end{vmatrix} = 0 \quad (3.14)$$

を得る。これから、

$$(E(k) - \Sigma_p)(E(k) - \Sigma_a) - (\varepsilon(k))^2 = 0 \quad (3.15)$$

$$E(k)^2 - (\Sigma_p + \Sigma_a)E(k) + \Sigma_p \Sigma_a - \varepsilon(k)^2 = 0$$

$$E(k) = \frac{+(\Sigma_p + \Sigma_a) \pm \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon(k)^2}}{2} \quad (3.16)$$

式 (3.16) で現われた 2 つのエネルギー固有値をそれぞれ、 $E_p(k), E_a(k)$ と定義する。

$$E_p(k) = \frac{+(\Sigma_p + \Sigma_a) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon(k)^2}}{2} \quad (3.17)$$

$$E_a(k) = \frac{+(\Sigma_p + \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon(k)^2}}{2} \quad (3.18)$$

このとき、 Σ_p, Σ_a は複素数であるから、 $E_p(k), E_a(k)$ も一般に複素数である。

3.3 固有状態 (電子スピンの場合)

式 (3.17) と (3.18) で示されたエネルギー固有値に対応して固有状態が存在するわけだが、非摂動ハミルトニアン K は非エルミートであり、固有値は実数とは限らないため事情がやや複雑になる (エルミート演算子の固有値はすべて実数であり、異なる固有値に属する固有ベクトルは互いに直交するが²⁾、今の場合はそれが言えない)。

エネルギー固有値 E_p, E_a に対する固有状態を求めるには、(3.3) 式に出てきた C_A, C_B がわかればよい。(3.3) 式に規格直交化条件を課すると、

$$|C_A|^2 + |C_B|^2 = 1 \quad (3.19)$$

となる。更に、(3.8a) 式より

$$C_B = \frac{E(k) - K_{AA}}{K_{AB}} C_A \quad (3.20)$$

を得る。

式 (3.19) と (3.20) を組合せて、

$$|C_A|^2 = \frac{|K_{AB}|^2}{|K_{AB}|^2 + |K_{AA} - E(k)|^2} \quad (3.21a)$$

$$|C_B|^2 = \frac{|K_{AA} - E(k)|^2}{|K_{AB}|^2 + |K_{AA} - E(k)|^2} \quad (3.21b)$$

を得る。

このとき、

$$\begin{aligned} K_{AA} - E_p(k) &= +\Sigma_p - E_p(k) \\ &= +\Sigma_p - \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon(k)^2}}{2} \\ &= \frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon(k)^2}}{2} \end{aligned} \quad (3.22)$$

一方

$$\begin{aligned} K_{BB} - E_a(k) &= +\Sigma_a - E_a(k) \\ &= \Sigma_a - \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon(k)^2}}{2} \\ &= -\frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon(k)^2}}{2} \end{aligned} \quad (3.23)$$

であるから、

$$K_{AA} - E_p(k) = -(K_{BB} - E_a(k)) \quad (3.24)$$

であることがわかる。

次に、 $E(k) = E_p(k)$ のときの C_A, C_B を求めてみる

と、(3.21) 式はこのとき、

$$|C_A|^2 = \frac{|\varepsilon(k)|^2}{|\varepsilon(k)|^2 + |E_p(k) - \Sigma_p|^2} \quad (3.25)$$

$$|C_B|^2 = \frac{|E_p(k) - \Sigma_p|^2}{|\varepsilon(k)|^2 + |E_p(k) - \Sigma_p|^2} \quad (3.26)$$

となる。

さて、(3.20) と (3.21) を満たすように決められた C_A, C_B を用いれば、 $E(k) = E_p(k)$ の固有値に属する \uparrow 電子の固有状態は、

$$|pk \uparrow\rangle = C_A |Ak \uparrow\rangle + C_B |Bk \uparrow\rangle \quad (3.27)$$

である。一方、(3.26) の C_A, C_B から、

$$|ak \uparrow\rangle = C_B^* |Ak \uparrow\rangle - C_A^* |Bk \uparrow\rangle \quad (3.28)$$

をつくると、

$$\langle pk \uparrow | ak \uparrow \rangle = C_A^* C_B^* - C_A^* C_B^* = 0 \quad (3.29)$$

となつて、 $|pk \uparrow\rangle$ と直交することがわかる。

一方、

$$K |ak \uparrow\rangle = E' |ak \uparrow\rangle \quad (3.30)$$

すなわち、

$$\begin{aligned} K(C_B^* |Ak \uparrow\rangle - C_A^* |Bk \uparrow\rangle) \\ = E'(C_B^* |Ak \uparrow\rangle - C_A^* |Bk \uparrow\rangle) \end{aligned} \quad (3.31)$$

このとき $E' = E_a(k)$ (すなわち (3.18) 式の $E_a(k)$) となつて、 $|ak \uparrow\rangle$ は \uparrow 電子のもう 1 つの固有解で、 $E(k) = E_a(k)$ のエネルギー固有値に属することがわかる。

3.4 ワニエ関数 (電子スピンの場合)

さて、式 (3.27), (3.28) を並べて書くと、

$$|pk \uparrow\rangle = C_A |Ak \uparrow\rangle + C_B |Bk \uparrow\rangle \quad (3.32a)$$

$$|ak \uparrow\rangle = C_B^* |Ak \uparrow\rangle - C_A^* |Bk \uparrow\rangle \quad (3.32b)$$

これから、

$$|Ak \uparrow\rangle = C_A^* |pk \uparrow\rangle + C_B |ak \uparrow\rangle \quad (3.33a)$$

$$|Bk \uparrow\rangle = C_B^* |pk \uparrow\rangle - C_A |ak \uparrow\rangle \quad (3.33b)$$

ただし、 C_A, C_B は実数として、式 (3.19) 式を用いた。

次に、部分格子 A に属する 1 つのサイトに注目し、これを 0-サイトとする。(3.4a) 式の両辺で、 k についての和を取ると、

$$\sum_k |Ak \uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_A} \sum_k e^{ik \cdot R_A} |R_A \uparrow\rangle \quad (3.34a)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_A} \left(\frac{N}{2}\right) \delta_{R_A, 0} |R_A \uparrow\rangle \quad (3.34b)$$

$$= \sqrt{\frac{N}{2}} |0 \uparrow\rangle \quad (3.34c)$$

ただし、ブリルアンゾーンは $\left(\frac{N}{2}\right)$ 個の k 点を含むものとして、また 0 は部分格子 A として導かれている。これと (3.33a) を組合せると、0-サイトのワニエ関数のうち、 \uparrow 電子に対応するものは、

$$|0 \uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k |A k \uparrow\rangle \quad (3.35a)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k (C_A^* |p k \uparrow\rangle + C_B |a k \uparrow\rangle) \quad (3.35b)$$

3.5 非摂動グリーン関数のサイト対角要素 (電子スピン \uparrow の場合)

非摂動ハミルトニアン K に対して、非摂動グリーン関数 P を、

$$P = \frac{1}{\omega - K} \quad (3.36)$$

で定義する。 K の固有値、 $E_p(k)$, $E_a(k)$ に属する固有状態は $|p k \uparrow\rangle$, $|a k \uparrow\rangle$ で、互いに直交しているから (式 (3.29) 参照), P のサイト対角要素は、

$$F_{\uparrow}(\omega) = \langle 0 \uparrow | P | 0 \uparrow \rangle \quad (3.37a)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k (|C_A|^2 \langle p k \uparrow | P | p k \uparrow \rangle + |C_B|^2 \langle a k \uparrow | P | a k \uparrow \rangle) \quad (3.37b)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k \left(\frac{|C_A|^2}{\omega - E_p(k)} + \frac{|C_B|^2}{\omega - E_a(k)} \right) \quad (3.37c)$$

ここで、 C_A , C_B は (3.26) 式で与えられ、 $E_p(k)$, $E_a(k)$ は、(3.17), (3.18) 式で与えられているものを使う。

3.6 状態密度の計算 (電子スピン \uparrow の場合)

式 (3.37) は k についての和の形で表わされているが、実際には、適当な状態密度関数 $\rho(\varepsilon)$ を仮定して、エネルギー ε についての積分として実行するのが便利である。

ここでは、 $\rho(\varepsilon)$ として、準円型の状態密度を仮定する (Fig. 1)

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi \Delta} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \quad (3.38)$$

この関数形は、Rangette *et al.*³⁾ や K. Kubo⁴⁾ によって採用されているものと同じで、

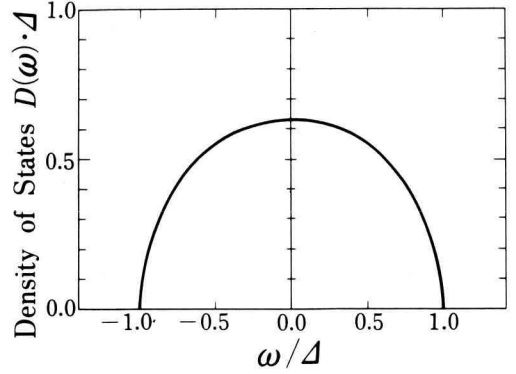


Fig. 1.

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 1, \quad (3.39)$$

と規格化されている。 2Δ がバンド幅に対応する。

さて、この状態密度関数を使うことは、第1ブリルアン・ゾーンに $(N/2)$ の状態があることに对应して

$$\varepsilon(k) \longrightarrow -\varepsilon \quad (3.40)$$

$$\frac{2}{N} \sum_k \longrightarrow \int_{-\Delta}^{\Delta} \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3.41)$$

等の変更を行うことに相当する。式 (3.37) の $F_{\uparrow}(\omega)$ は

$$F_{\uparrow}(\omega) = \int_{-\Delta}^{\Delta} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \left(\frac{|C_A|^2}{\omega - E_p} + \frac{|C_B|^2}{\omega - E_a} \right) \quad (3.42)$$

と書ける。ここで、(3.26) 式より

$$|C_A|^2 = \frac{-\varepsilon}{\varepsilon^2 + |E_p - \Sigma_p|^2} \quad (3.43a)$$

$$|C_B|^2 = \frac{|E_p - \Sigma_p|^2}{\varepsilon^2 + |E_p - \Sigma_p|^2} \quad (3.43b)$$

また、(3.17), (3.18) 式より

$$E_p = \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon^2}}{2} \quad (3.44a)$$

$$E_a = \frac{+(\Sigma_p + \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon^2}}{2} \quad (3.44b)$$

である。従って、何らかの方法で Σ_p , Σ_a が得られれば、式 (3.37)-(3.39) を用いて $F_{\uparrow}(\omega)$ が計算され、状態密度が計算される。 \uparrow 電子に対する状態密度は、

$$D_{\uparrow}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\uparrow}(\omega) \quad (3.45)$$

である。

3.7 電子スピン↓の場合

対称性からすぐわかるように、↓スピンをもつ電子のプロット状態も、エネルギー固有値 E_p と E_a を持ち、それぞれの状態は、

$$|pk\downarrow\rangle = C_B|Ak\downarrow\rangle + C_A|Bk\downarrow\rangle \quad (3.46a)$$

$$|ak\downarrow\rangle = C_A^*|Ak\downarrow\rangle - C_B^*|Bk\downarrow\rangle \quad (3.46b)$$

で表わされる。ただし、 $|Ak\downarrow\rangle$ と $|Bk\downarrow\rangle$ はそれぞれ部分格子 A と B に関連したプロット状態で↓電子スピンをもち、式 (3.4) に対して次式で定義される。

$$|Ak\downarrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_A} e^{ik \cdot R_A} |R_A\downarrow\rangle \quad (3.47a)$$

$$|Bk\downarrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_B} e^{ik \cdot R_B} |R_B\downarrow\rangle \quad (3.47b)$$

式 (3.46) の証明は Appendix に示した。

式 (3.46) より、

$$|Ak\downarrow\rangle = C_B|pk\downarrow\rangle + C_A|ak\downarrow\rangle \quad (3.48a)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_A} e^{ik \cdot R_A} |R_A\downarrow\rangle \quad (3.48b)$$

式 (3.48a) と (3.48b) において、 k についての和を取ることにより (k の総和は $N/2$)

$$\begin{aligned} & \sum_k (C_B|pk\downarrow\rangle + C_A|ak\downarrow\rangle) \\ &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_A} \sum_k e^{ik \cdot R_A} |R_A\downarrow\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_A} \left(\frac{N}{2} \delta_{R_A, 0} \right) |R_A\downarrow\rangle \\ &= \sqrt{\frac{N}{2}} |0\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (3.49)$$

ゆえに、

$$|0\downarrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k (C_B|pk\downarrow\rangle + C_A|ak\downarrow\rangle) \quad (3.50)$$

P のサイトの対角要素は、

$$F_{\downarrow}(\omega) = \langle 0\downarrow | P | 0\downarrow \rangle \quad (3.51a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{N} \sum_k (|C_B|^2 \langle pk\downarrow | P | pk\downarrow \rangle \\ &\quad + |C_A|^2 \langle ak\downarrow | P | ak\downarrow \rangle) \end{aligned} \quad (3.51b)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k \left(\frac{|C_B|^2}{\omega - E_p(k)} + \frac{|C_A|^2}{\omega - E_a(k)} \right) \quad (3.51c)$$

状態密度関数 $\rho(\epsilon)$ を用いれば、(3.42) 式に対応して、

$$F_{\downarrow}(\omega) = \int_{-d}^d d\epsilon \rho(\epsilon) \left(\frac{|C_B|^2}{\omega - E_p} + \frac{|C_A|^2}{\omega - E_a} \right) \quad (3.52)$$

と書ける。

電子スピンの ↓ の状態密度は

$$D_{\downarrow}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\downarrow}(\omega) \quad (3.53)$$

で計算される。

3.8 平行結合状態と反平行結合状態

今までの議論からわかるように、伝導電子状態は、電子スピンの局在スピンの平行か反平行かで区別した方が物理的意味がわかりやすい。

そこでまず、↑電子スピンの $F_{\uparrow}(\omega)$ を次のように書く。

$$F_{\uparrow}(\omega) = F_{A\uparrow}(\omega) + F_{B\uparrow}(\omega) \quad (3.54)$$

ただし、

$$F_{A\uparrow}(\omega) = \frac{2}{N} \sum_k |C_A|^2 \langle pk\uparrow | P | pk\uparrow \rangle \quad (3.55a)$$

$$= \int_{-d}^d \rho(\epsilon) d\epsilon \frac{|C_A|^2}{\omega - E_p} \quad (3.55b)$$

$$F_{B\uparrow}(\omega) = \frac{2}{N} \sum_k |C_B|^2 \langle ak\uparrow | P | ak\uparrow \rangle \quad (3.56a)$$

$$= \int_{-d}^d \rho(\epsilon) d\epsilon \frac{|C_B|^2}{\omega - E_a} \quad (3.56b)$$

すぐわかるように、平行成分は↑電子が部分格子 A に滞在することに由来する $F_{A\uparrow}(\omega)$ によって表され、反平行成分は↑電子が部分格子 B に滞在することに由来する $F_{B\uparrow}(\omega)$ によって表わされている。

↓スピンを持つ電子についても同様に表わされる。すなわち、

$$F_{\downarrow}(\omega) = F_{A\downarrow}(\omega) + F_{B\downarrow}(\omega) \quad (3.57)$$

ここで、

$$F_{A\downarrow}(\omega) = \frac{2}{N} \sum_k |C_A|^2 \langle ak\downarrow | P | ak\downarrow \rangle \quad (3.58a)$$

$$= \int_{-d}^d \rho(\epsilon) d\epsilon \frac{|C_A|^2}{\omega - E_a} \quad (3.58b)$$

$$F_{B\downarrow}(\omega) = \frac{2}{N} \sum_k |C_B|^2 \langle pk\downarrow | P | pk\downarrow \rangle \quad (3.59a)$$

$$= \int_{-d}^d \rho(\epsilon) d\epsilon \frac{|C_B|^2}{|C_B|^2 - E_p} \quad (3.59b)$$

ここでは、反平行状態の成分 $F_{A\downarrow}(\omega)$ は ↓ 電子が部分格子 A に滞在することに由来し、平行状態の成分

$F_{B\downarrow}(\omega)$ は↓電子が部分格子 B に滞在することに由来する。

ここで、平行成分をまとめると、

$$F_p(\omega) = F_{A\uparrow}(\omega) + F_{B\downarrow}(\omega) \quad (3.60)$$

$$= \int_{-d}^d d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\omega - E_p} \quad (3.60b)$$

となり、反平行成分は

$$F_a(\omega) = F_{A\downarrow}(\omega) + F_{B\uparrow}(\omega) \quad (3.61a)$$

$$= \int_{-d}^d d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\omega - E_a} \quad (3.61b)$$

となる。ただし、 $|C_A|^2 + |C_B|^2 = 1$ を使用して導いている。

このとき、平行・反平行状態の状態密度はそれぞれ、

$$D_p(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} F_p(\omega) \quad (3.62a)$$

$$D_a(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_a(\omega) \quad (3.62b)$$

と求まる。

3.9 高温の極限 ($T = \infty$)

電子が 0-サイト (部分格子 A に属するものとする) に局在しているとき、電子スピン↑と↓に応じて受けるコヒーレント・ポテンシャルを Σ_{\uparrow} , Σ_{\downarrow} と以下で表わすことにする。すぐわかるように、 $\Sigma_{\uparrow} = \Sigma_p$, $\Sigma_{\downarrow} = \Sigma_a$ である。

高温 (分子場近似では $T \geq T_N$) では、

$$\Sigma = \Sigma_{\uparrow} = \Sigma_{\downarrow} \quad \text{つまり} \quad (3.63a)$$

$$\Sigma = \Sigma_p = \Sigma_a \quad (3.63b)$$

であるから、これを (3.17) 式に代入すると、

$$E_p(k) = +\Sigma - |\varepsilon(k)| \quad (3.64a)$$

$$E_a(k) = +\Sigma + |\varepsilon(k)| \quad (3.64b)$$

を得る。これを (3.21) に代入すると

$$|C_A|^2 = |C_B|^2 = \frac{1}{2} \quad (3.65)$$

が導かれる。これらを (3.42) 式および (3.57)~(3.59) 式に代入すれば、

$$F(\omega) = F_{\uparrow}(\omega) = F_{\downarrow}(\omega) \quad (3.66a)$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-d}^d \rho(\varepsilon) d\varepsilon \left(\frac{1}{\omega - E_p} + \frac{1}{\omega - E_a} \right) \quad (3.66b)$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-d}^d \rho(\varepsilon) d\varepsilon \left(\frac{1}{\omega + |\varepsilon| - \Sigma} + \frac{1}{\omega - |\varepsilon| - \Sigma} \right)$$

(3.66c)

$$= \frac{1}{2} \left\{ \int_0^d \rho(\varepsilon) d\varepsilon \left(\frac{1}{\omega + \varepsilon - \Sigma} + \frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma} \right) + \int_{-d}^0 \rho(\varepsilon) d\varepsilon \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma} + \frac{1}{\omega + \varepsilon - \Sigma} \right) \right\} \quad (3.66d)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \int_{-d}^d \rho(\varepsilon) d\varepsilon \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma} \right) + \int_{-d}^d \rho(\varepsilon) d\varepsilon \left(\frac{1}{\omega + \varepsilon + \Sigma} \right) \right\} \quad (3.66e)$$

$$= \int_{-d}^d \rho(\varepsilon) d\varepsilon \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma} \right) \quad (3.66f)$$

(3.66f) を導くとき、 $\rho(\varepsilon)$ が ε について偶関数であるという性質を使用した。式 (3.38) で定義した状態密度関数 $\rho(\omega)$ に対して $F(\omega)$ を計算すると、Appendix B に示したように、

$$F(\omega) = \left(\frac{2}{d} \right) \left\{ \left(\frac{\omega - \Sigma}{d} \right) - \sqrt{\left(\frac{\omega - \Sigma}{d} \right)^2 - 1} \right\} \quad (3.67)$$

を得る。

すぐわかるように、高温の極限での結果は、従来の CPA と一致する。

3.10 $T=0$ での表式

古典スピンの極限では、 $IS = \text{一定}$ と固定してながら、 $1/S = 0$ と置くことに相当するから、式 (2.5)~(2.10) は、次のように近似的に表わされる。

$$V_{\uparrow} = U_{\uparrow} = -IS_z - \Sigma_{\uparrow} \quad (3.68)$$

$$V_{\downarrow} = U_{\downarrow} = +IS_z - \Sigma_{\downarrow} \quad (3.69)$$

$$W_{\uparrow} = W_{\downarrow} = I^2(S^2 - S_z^2) \quad (3.70)$$

$T=0$ では、 $S_z = S$ のみが実現するから、更に、

$$V_{\uparrow} = U_{\uparrow} = -IS - \Sigma_{\uparrow} \quad (3.71)$$

$$V_{\downarrow} = U_{\downarrow} = +IS - \Sigma_{\downarrow} \quad (3.72)$$

$$W_{\uparrow} = W_{\downarrow} = 0 \quad (3.73)$$

と置くことができる。このとき、条件

$$\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{\text{av}} = 0 \quad (3.74)$$

の中で、熱平均は $S_z = S$ からのみ来ることを考慮すると、(3.74) 式は、

$$V_{\uparrow} + F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow}) = 0 \quad (3.75)$$

式 (3.71)~(3.73) より、

$$V_{\uparrow}(1 - F_{\downarrow}V_{\downarrow}) = 0 \quad (3.76)$$

つまり

$$V_{\uparrow} = -IS + \Sigma_{\uparrow} = 0 \quad (3.76)$$

または,

$$1 - F_{\downarrow} V_{\downarrow} = 1 - F_{\downarrow} (IS - \Sigma_{\downarrow}) = 0 \quad (3.77)$$

である。

同様に, $\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{av} = 0$ という条件より,

$$V_{\downarrow} = +IS - \Sigma_{\downarrow} = 0 \quad (3.78)$$

$$1 - F_{\uparrow} V_{\uparrow} = 1 - F_{\uparrow} (-IS - \Sigma_{\uparrow}) = 0 \quad (3.79)$$

を得る。これらの解の中で、物理的に意味をもつのは、式 (3.76) と (3.78) の組合せ、すなわち、

$$\Sigma_{\uparrow} = IS \quad (3.80)$$

$$\Sigma_{\downarrow} = -IS \quad (3.81)$$

もう 1 つの解、例えば、(3.77) は

$$F_{\downarrow}(\omega) \equiv \int \rho(\varepsilon) d\varepsilon \frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma_{\downarrow}} \quad (3.82a)$$

$$= \frac{1}{IS - \Sigma_{\downarrow}} \quad (3.82b)$$

は、(3.82a) が ω の関数で、 ω が大きいときに $1/\omega$ の挙動を示すのに対し、(3.82b) が定数値であることから、物理的に不合理であると判定できる。

さて、(3.80), (3.81) の解を採用した場合、

$$\Sigma_p = \Sigma_{\uparrow} = -IS \quad (3.83a)$$

$$\Sigma_a = \Sigma_{\downarrow} = +IS \quad (3.83b)$$

を、式 (3.44) に代入すると

$$E_p = -\sqrt{\varepsilon^2 + (IS)^2} \quad (3.84a)$$

$$E_a = \sqrt{\varepsilon^2 + (IS)^2} \quad (3.84b)$$

を得る。また、式 (3.43) より

$$|C_A|^2 = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + (IS - \sqrt{\varepsilon^2 + (IS)^2})^2} \quad (3.85a)$$

$$|C_B|^2 = \frac{(IS - \sqrt{\varepsilon^2 + (IS)^2})^2}{\varepsilon^2 + (IS - \sqrt{\varepsilon^2 + (IS)^2})^2} \quad (3.85b)$$

を得る。更に、平行状態と反平行状態の状態密度を計算するために、 F_p と F_a を求めると、式 (3.60) と (3.84) より、

$$F_p = \int_{-d}^d d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\omega - E_p} \quad (3.86a)$$

$$= \frac{2}{\pi d} \int_{-d}^d d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{d}\right)^2} \times \frac{1}{\omega + \sqrt{\varepsilon^2 + (IS)^2}} \quad (3.86b)$$

$$= \frac{2}{\pi d} \int_{-1}^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{(\omega/d) + \sqrt{x^2 + (IS/d)^2}} \quad (3.86c)$$

および、

$$F_a = \int_{-d}^d d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\omega - E_a} \quad (3.87a)$$

$$= \frac{2}{\pi d} \int_{-d}^d d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{d}\right)^2} \times \frac{1}{\omega - \sqrt{\varepsilon^2 + (IS)^2}} \quad (3.87b)$$

$$= \frac{2}{\pi d} \int_{-1}^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{(\omega/d) - \sqrt{x^2 + (IS/d)^2}} \quad (3.87c)$$

ただし、 $x = \varepsilon/d$ とおいて (3.86c) と (3.87c) を導いた。これらの積分を解析的に実行することはできない。しかし、虚数部分から、状態密度を解析的に計算することはできる。

式 (3.86c) から、

$$F_p \cdot d = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{(\omega/d) + \sqrt{x^2 + (IS/d)^2}} \quad (3.88a)$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{x^2 + \frac{(IS)^2 - \omega^2}{d^2}} \times \left\{ \sqrt{x^2 + \left(\frac{IS}{d}\right)^2} - \frac{\omega}{d} \right\} \quad (3.88b)$$

ここで

$$c \equiv \frac{(IS)^2 - \omega^2}{d^2} \quad (3.89)$$

とおくと、

$$F_p \cdot d = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{x^2 + c} \times \left\{ \sqrt{x^2 + \left(\frac{IS}{d}\right)^2} - \frac{\omega}{d} \right\} \quad (3.90)$$

となる。次に、(3.62) より状態密度を求めることを考える。このため $\omega \rightarrow \omega + i\delta$ (δ は正の微小量) として、 $F_p \cdot d$ の虚数部分を求める必要がある。 c の値で、以下のように分類される。

(A) $c > 0$ ($IS > |\omega|$) の場合

この場合には、(3.90) 式中の分母は常に正であり、 $F_p \cdot d$ は常に実数である。このため $IS > |\omega|$ では状態密度は 0 である。

(B) $c < -1$ ($\omega < -\sqrt{d^2 + (IS)^2}$) の場合

この場合には、(3.90) 式中の分母は、変数 x が $[-1,$

1] の範囲を取る限り常に負であり, $F_p \cdot \Delta$ はやはり常に実数である。このため, $\omega < -\sqrt{\Delta^2 + (IS)^2}$ では状態密度は 0 である。

(C) $0 > c > -1$ ($-IS > \omega > -\sqrt{\Delta^2 + (IS)^2}$) の場合

この場合には, $x = \pm |c|$ で (3.90) 式中の分母が 0 になる。 $\omega \rightarrow \omega + i\delta$ としたとき (3.89) 式より $c \rightarrow c + i\delta$ ($\omega < 0$) に注意して, (3.90) 式は

$$F_p \cdot \Delta = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{x^2 - |c|^2 + i\delta} \left\{ \sqrt{x^2 + \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2} - \frac{\omega}{\Delta} \right\} \quad (3.91a)$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 dx \sqrt{1-x^2} \left\{ \sqrt{x^2 + \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2} - \frac{\omega}{\Delta} \right\} \times \frac{1}{2\sqrt{|c|}} \left(\frac{1}{x - \sqrt{|c|} + i\delta} - \frac{1}{x + \sqrt{|c|} - i\delta} \right) \quad (3.91b)$$

$$= \frac{1}{\pi\sqrt{|c|}} \int_{-1}^1 dx \sqrt{1-x^2} \left\{ \sqrt{x^2 + \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2} - \frac{\omega}{\Delta} \right\} \times \left\{ P \left(\frac{1}{x - \sqrt{|c|}} - \frac{1}{x + \sqrt{|c|}} \right) - i\pi [\delta(x - \sqrt{|c|}) + \delta(x + \sqrt{|c|})] \right\} \quad (3.91c)$$

となる。これから, 状態密度 $D_p(\omega)$ は,

$$D_p(\omega) \cdot \Delta = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_p(\omega) \cdot \Delta \quad (3.92a)$$

$$= \frac{1}{\pi\sqrt{|c|}} \int_{-1}^1 dx \sqrt{1-x^2} \times \left\{ \sqrt{x^2 + \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2} - \frac{\omega}{\Delta} \right\} \times [\delta(x - \sqrt{|c|}) + \delta(x + \sqrt{|c|})] \quad (3.92b)$$

$$= + \frac{2\sqrt{1-|c|}}{\pi\sqrt{|c|}} \left(\sqrt{|c| + \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2} - \frac{\omega}{\Delta} \right) \quad (3.92c)$$

ここで,

$$|c| = \frac{\omega^2 - (IS)^2}{\Delta^2} \quad (3.93)$$

を代入すれば ($\omega < 0$ に注意して)

$$D_p(\omega) \cdot \Delta = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{\Delta^2 + (IS)^2 - \omega^2}{\omega^2 - (IS)^2}} \times \left(\frac{|\omega| - \omega}{\Delta} \right) \quad (3.94a)$$

$$= \frac{4|\omega|}{\pi\Delta} \left\{ \frac{\Delta^2 + (IS)^2 - \omega^2}{\omega^2 - (IS)^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.94b)$$

一方, 反平行状態に関する状態密度は, (3.86) と (3.87) を比較すると $\omega \rightarrow -\omega$ としたとき, $F_p \rightarrow -F_a$ が得られることからわかるように, $\sqrt{\Delta^2 + (IS)^2} > \omega > IS$ の場合

$$D_a(\omega) \cdot \Delta = \frac{4\omega}{\pi\Delta} \left\{ \frac{\Delta^2 + (IS)^2 - \omega^2}{\omega^2 - (IS)^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.95)$$

で与えられる状態密度 (上記以外の ω では 0) を持つ

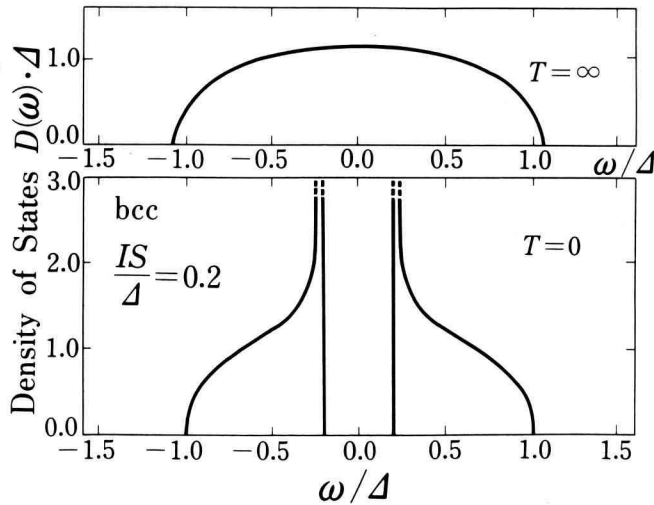


Fig. 2.

ている。

式 (3.94) と (3.95) は, $\omega = \pm IS$ で状態密度が発散することを意味している。しかし, 状態密度の総和は 1 であることは, 次のように示すことができる。

$$\int D_p(\omega) d\omega = \int D_a(\omega) d\omega \quad (3.96a)$$

$$= \int_{IS}^{\sqrt{(IS)^2 + \Delta^2}} d\omega \left(\frac{4\omega}{\pi\Delta^2} \right) \left\{ \frac{\Delta^2 + (IS)^2 - \omega^2}{\omega^2 - (IS)^2} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

簡単のため

$$a = IS \quad (3.97)$$

$$b = \sqrt{(IS)^2 + \Delta^2} \quad (3.98)$$

とおき,

$$\omega^2 - a^2 = x^2 \quad (3.99)$$

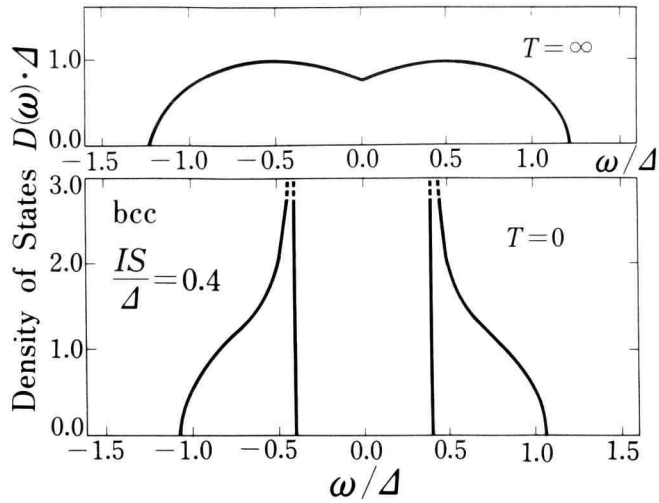


Fig. 3.

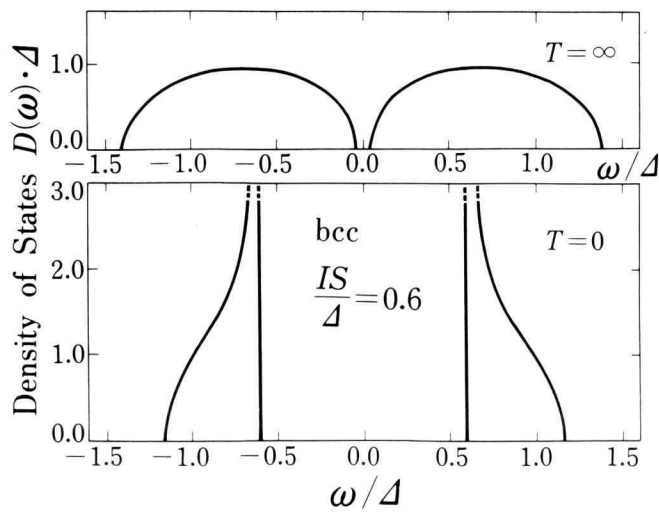


Fig. 4.

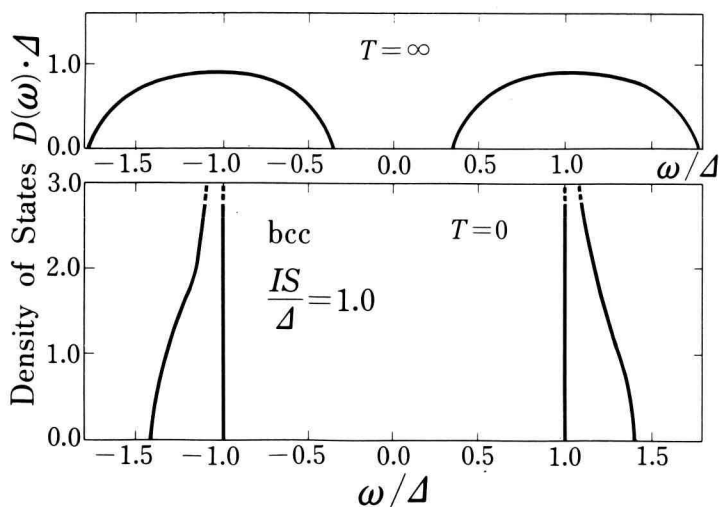


Fig. 5.

とおくと, $\omega d\omega = x dx$ だから,

$$\int D_p(\omega) d\omega = \frac{4}{\pi \Delta^2} \int_0^{\Delta} x dx \left(\frac{\Delta^2 - x^2}{x^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.100a)$$

$$= \frac{4}{\pi \Delta^2} \int_0^{\Delta} dx \sqrt{\Delta^2 - x^2} \quad (3.100b)$$

$$= \frac{4}{\pi \Delta^2} \times \frac{\pi \Delta^2}{4} = 1 \quad (3.100c)$$

である。このことは, (3.95) 式で与えられる状態密度の総和は 1 であることを示している。

4. 計算結果と検討

Fig. 2~Fig. 5 に $T = \infty$ (CPA) の結果と $T = 0$ (式 (3.94b) と (3.95)) の結果を示す。横軸はエネルギー ω/Δ で, 縦軸は状態密度 $D(\omega) \cdot \Delta$ である。

特徴的なことは, $T = \infty$ (CPA) での状態密度は弱い交換相互作用 ($IS/\Delta = 0.2, 0.4$) では単一バンドで, 強い交換相互作用 ($IS/\Delta = 0.6, 1.0$) では 2 バンドに分離するのに対して, $T = 0$ では常に 2 バンドに分離していることである。特に, (IS/Δ) の値が小さい場合, 高温の極限から次第に温度を下げていったとき, ある条件下でバンド分裂が始まると予想されるが, これは今後の研究課題である。

なお, バンドの底のエネルギーについての議論は, 紙面数の都合上, この次の論文と一緒にする。

参考文献

- 1) 高橋正雄・三井和博・梅原雅捷: 神奈川工科大学研究報告 B18 (1994) 247.
- 2) 小出昭一郎著: 量子力学 (I) p. 127 (裳華房).
- 3) Rangement *et al.*: Solid State Commun. **12**, 171 (1973).
- 4) K. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn **36**, 32 (1974).

Appendix A 式 (3.46) の証明

電子スピン \uparrow の場合は本文に詳しく示した。電子スピン \downarrow の場合について, 相違点を中心に, ここに簡単に示す。

電子スピンが \downarrow の場合は,

$$K_{AA} = \langle Ak \downarrow | K | Ak \downarrow \rangle = \Sigma_a \quad (A.1)$$

$$K_{BB} = \langle Bk \downarrow | K | Bk \downarrow \rangle = \Sigma_p \quad (A.2)$$

だから, \uparrow 電子の場合の結論で, Σ_a と Σ_p が入れかわる。

式 (3.3) のかわりに,

$$|k \downarrow \rangle = C_A' |Ak \downarrow \rangle + C_B' |Bk \downarrow \rangle \quad (A.3)$$

とおくと, 式 (3.44) の E_p のエネルギー固有値をもつ固有状態は, 式 (3.25) で $\Sigma_p \leftrightarrow \Sigma_a$ の入れ替えをすると,

$$|C_A'|^2 = \frac{\varepsilon(k)^2}{\varepsilon(k)^2 + |E_p - \Sigma_a|^2} \quad (\text{A.4a})$$

$$|C_B'|^2 = \frac{|E_p - \Sigma_a|^2}{\varepsilon(k)^2 + |E_p - \Sigma_a|^2} \quad (\text{A.4b})$$

式(3.46)を証明するには,

$$C_A' = C_B, \quad C_B' = C_A \quad (\text{A.5})$$

を示せばよい。

ここで,

$$E_p - \Sigma_a = \frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon(k)^2}}{2} \quad (\text{A.6})$$

$$E_p - \Sigma_p = -\frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon(k)^2}}{2} \quad (\text{A.7})$$

であるから

$$(E_p - \Sigma_a)(E_p - \Sigma_p) = \varepsilon(k)^2 \quad (\text{A.8})$$

これから,

$$|C_A'|^2 = \frac{\varepsilon(k)^2}{\varepsilon(k)^2 + \varepsilon(k)^4 / |E_p - \Sigma_p|^2} \quad (\text{A.9a})$$

$$= \frac{|E_p - \Sigma_p|^2}{\varepsilon(k)^2 + |E_p - \Sigma_p|^2} = |C_B|^2 \quad (\text{A.9b})$$

同様に, (A.4b) と (A.8) から,

$$|C_B'|^2 = |C_A|^2 \quad (\text{A.10})$$

式(3.20)に対応して,

$$C_B' = \frac{E_p - \Sigma_a}{-\varepsilon(k)} C_A' = \frac{-\varepsilon(k)}{E_p - \Sigma_p} C_A' \quad (\text{A.11})$$

である。このため,

$$C_A' = C_B \quad (\text{A.12a})$$

と取ったとき, 位相を考慮して,

$$C_B' = C_A \quad (\text{A.12b})$$

である。

Appendix B $F(\omega)$ の計算

次の積分を考える。

$$F(\omega) = \int_{-\Delta}^{\Delta} \rho(\varepsilon) d\varepsilon \frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma} \quad (\text{B.1})$$

$$= \left(\frac{2}{\pi \Delta} \right) \int_{-\Delta}^{\Delta} d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta} \right)^2} \frac{1}{\omega - \Sigma - \varepsilon} \quad (\text{B.2})$$

積分の中で,

$$\frac{\varepsilon}{\Delta} = x \quad \text{つまり} \quad x = \Delta \varepsilon \quad (\text{B.3})$$

$$a = \frac{\omega - \Sigma}{\Delta} \quad (\text{B.2})$$

と置き換え, 積分公式 (岩波全書: 数学公式 I, p. 226, 無理関数の定積分) を使用すると,

$$F(\omega) = \left(\frac{2}{\pi \Delta} \right) \int_{-1}^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{a-x} \quad (\text{B.3a})$$

$$= \left(\frac{2}{\pi \Delta} \right) \cdot \pi (a - \sqrt{a^2 - 1}) \quad (\text{B.3b})$$

結局

$$F(\omega) = \frac{2}{\Delta} \left\{ \left(\frac{\omega - \Sigma}{\Delta} \right) - \sqrt{\left(\frac{\omega - \Sigma}{\Delta} \right)^2 - 1} \right\} \quad (\text{B.4})$$

を得る。これから,

$$\Sigma = \omega - \frac{\Delta^2}{4} F(\omega) - \frac{1}{F(\omega)} \quad (\text{B.5})$$

となる。式(B.5)は, $F(\omega)$ が得られた場合に, Σ を計算する式である。