

# s-f モデルと電子状態 XI(11)

— fcc 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 XI(11)

— The CPA for fcc antiferromagnetic semiconductor —

Masao TAKAHASHI Kazuhiro MITSUI  
and Masakatsu UMEHARA

## Abstract

The electron transfer between different sublattice is negligible in the case of bcc-structure semiconductor, on the other hand, it is important for fcc semiconductors. Therefore, the treatment of the conduction electron states for fcc semiconductors becomes complicated. In this paper we apply the CPA to the fcc magnetic semiconductor. Numerical results show magnetic blue shift, which can be compared reasonably with the optical experiments for EuTe.

## 1. はじめに

私達は前論文で, bcc 反強磁性半導体に対する CPA を議論した。fcc 反強磁性半導体でも前の手法はほとんどそのまま使用できる。ただ大きく異なるのは, bcc 構造の場合は最隣接格子が異なる部分格子だけであるのに対して, fcc 構造の場合には同じ部分格子と異なる部分格子の両方が存在する点である。このため遷移エネルギーも  $\varepsilon_1(k)$  と  $\varepsilon_2(k)$  の両方が必要である。私達はこれらのエネルギーを等しいとして計算を進めた。

伝導電子状態のバンドの底は, 伝導現象にも光吸収・放出にも重要な役割をもっている。この論文の後半は, bcc 構造の場合も含めて, バンド端の振舞いを議論する。

## 2. fcc 反強磁性半導体

### 2.1 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。

$$K = - \sum_{mn} \varepsilon_{mn} a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} + \sum_{m\sigma} \Sigma_{(m,\sigma)} a_{m\sigma}^+ a_{m\sigma} \quad (2.1)$$

ここで,  $a_{m\sigma}^+, a_{m\sigma}$  は,  $m$  サイトで電子スピン  $\sigma$  をもつワニエ関数の生成, 消滅演算子で,  $\varepsilon_{mn}$  は  $m, n$  サイト間での遷移エネルギーである。式 (2.1) の第 2 項は,  $m$  サイトで  $\sigma$  スピンを持つワニエ型電子が受けるコヒーレント・ポテンシャルを表し,  $\Sigma_{(m,\sigma)}$  はサイト  $m$  が A 格子か B 格子か, 電子スピンの  $\uparrow$  か  $\downarrow$  の組合せによって, 次の 2 通りの値をとる。

$$\Sigma_{(m,\sigma)} = \begin{cases} \Sigma_p (m=A \text{ and } \sigma=\uparrow) \text{ or } (m=B \text{ and } \sigma=\downarrow) \\ \Sigma_a (m=A \text{ and } \sigma=\downarrow) \text{ or } (m=B \text{ and } \sigma=\uparrow) \end{cases} \quad (2.2)$$

ここで,  $\Sigma_p$  は部分格子の  $f$  スピンの向きと,  $s$  電子のスピンの向きが平行結合 (parallel bonding) な場合に受けるポテンシャル,  $\Sigma_a$  は反平行結合 (anti-parallel bonding) な場合に受けるポテンシャルである。 $\Sigma_p$  も  $\Sigma_a$  も一般に複素数である。

### 2.2 エネルギー固有値 (電子スピン $\uparrow$ の場合)

fcc 反強磁性半導体中の伝導電子を記述するためにまず  $\uparrow$  電子に着目して, 波数ベクトル  $k$  のブロッホ電

1994 年 9 月 16 日受理

\* 一般教育科

\*\* 無機材質研究所

子状態を

$$|k \uparrow\rangle = C_A |Ak \uparrow\rangle + C_B |Bk \uparrow\rangle \quad (2.3)$$

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

$$|Ak \uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_A} e^{ik \cdot R_A} |R_A \uparrow\rangle \quad (2.4a)$$

$$|Bk \uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{R_B} e^{ik \cdot R_B} |R_B \uparrow\rangle \quad (2.4b)$$

で定義される。ただ右辺の格子の和は、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。また  $k$  空間での状態の数も  $N/2$  である。

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  $\uparrow$  と  $\downarrow$  は対称的であるはずである。このことに注意して、固有値方程式

$$K|k \uparrow\rangle = E(k)|k \uparrow\rangle \quad (2.5)$$

を解くことを考える。式 (2.3) を代入すると、

$$\begin{aligned} K(C_A |Ak \uparrow\rangle + C_B |Bk \uparrow\rangle) \\ = E(k)(C_A |Ak \uparrow\rangle + C_B |Bk \uparrow\rangle) \end{aligned} \quad (2.6)$$

となる。規格直交化条件

$$\langle Ak \uparrow | Ak \uparrow \rangle = 1 \quad (2.7a)$$

$$\langle Ak \uparrow | Bk \uparrow \rangle = \langle Bk \uparrow | Ak \uparrow \rangle = 0 \quad (2.7b)$$

$$\langle Bk \uparrow | Bk \uparrow \rangle = 1 \quad (2.7c)$$

に注意する。

式 (2.7) に左側から  $\langle Ak \uparrow |$  または  $\langle Bk \uparrow |$  をかけると、

$$C_A K_{AA} + C_B K_{AB} = C_A E(k) \quad (2.8a)$$

$$C_A K_{BA} + C_B K_{BB} = C_B E(k) \quad (2.8b)$$

を得る。ここで  $K_{AA}, K_{AB}, K_{BB}$  は後に示すように  $K$  の行列要素である。

式 (2.8) の  $C_A, C_B$  が物理的意味をもつための条件は、次の永年方程式を満たすことである。

$$\begin{vmatrix} K_{AA} - E(k) & K_{AB} \\ K_{BA} & K_{BB} - E(k) \end{vmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

式 (2.9) から、エネルギー固有値  $E(k)$  が決定される。

bcc 構造の場合と大きく違うのは、遷移エネルギー  $\varepsilon_{mn}$  は最隣接格子だけが 0 でないという近似をして、fcc 構造の場合には  $K_{AA}, K_{AB}$  に  $\varepsilon_{mn}$  が入ってく

る。

ここで

$$K_{AA} = \langle Ak \uparrow | K | Ak \uparrow \rangle \quad (2.10a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{N} \sum_{R_A, R_A'} e^{ik(R_A - R_A')} \\ &\times \langle R_A' \uparrow | \left\{ - \sum_{\frac{m}{n}} \varepsilon_{mn} a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} + \sum_{\frac{m}{n}} \sum_{\sigma} \varepsilon_{(m,\sigma)} a_{m\sigma}^+ a_{m\sigma} \right\} | R_A \uparrow \rangle \end{aligned} \quad (2.10b)$$

$$= - \sum_{R(A,A)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} + \sum_p \quad (2.10c)$$

$$= -\varepsilon_1(k) + \sum_p \quad (2.10d)$$

ただし、式 (2.10c) 中の和は、同じ部分格子に属する最隣接サイトについての和を意味する。つまり  $R = R_A - R_A'$  は、同じ部分格子に属する最隣接格子ベクトルである。この和は、A の部分格子でも B の部分格子でも同じであり、それ故に、同じ部分格子に属する遷移エネルギーは、 $\varepsilon(R) = \varepsilon_{mn}$  に注意して、

$$\varepsilon_1(k) = \sum_{R(A,A)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} = \sum_{R(B,B)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} \quad (2.11)$$

と定義される。

同様に、

$$K_{BB} = \langle Bk \uparrow | K | Bk \uparrow \rangle \quad (2.12a)$$

$$= - \sum_{R(B,B)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} + \sum_a \quad (2.12b)$$

$$= -\varepsilon_1(k) + \sum_a \quad (2.12c)$$

を得る。一方

$$K_{AB} = \langle Ak \uparrow | K | Bk \uparrow \rangle \quad (2.13a)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{N} \sum_{R_A, R_B} e^{ik(R_A - R_B)} \\ &\times \langle R_A \uparrow | \left( - \sum_{\frac{m}{n}} \varepsilon_{mn} a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} \right) | R_B \uparrow \rangle \end{aligned} \quad (2.13b)$$

$$= - \sum_{R(A,B)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} \quad (2.13c)$$

$$= -\varepsilon_2(k) \quad (2.13d)$$

ここで、式 (2.13) 中の格子の和は、異なる部分格子に属する最隣接サイト間の和で、その遷移エネルギーは、 $\varepsilon_{mn} = \varepsilon(R)$  と書くと、

$$\varepsilon_2(k) = \sum_{R(A,B)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} \quad (2.14)$$

で定義される。

このような行列要素を永年方程式 (2.9) に代入すると、

$$\begin{vmatrix} -\varepsilon_1(k) + \Sigma_p - E(k) & -\varepsilon_2(k) \\ -\varepsilon_2(k) & -\varepsilon_1(k) + \Sigma_a - E(k) \end{vmatrix} = 0 \quad (2.15)$$

これから,

$$\{E(k) + \varepsilon_1(k) - \Sigma_p\} \{E(k) + \varepsilon_1(k) - \Sigma_a\} - \varepsilon_2(k)^2 = 0 \quad (2.16)$$

$$E(k)^2 + E(k) \{2\varepsilon_1(k) - (\Sigma_p + \Sigma_a)\} + (\varepsilon_1(k) - \Sigma_p)(\varepsilon_1(k) - \Sigma_a) - \varepsilon_2(k)^2 = 0 \quad (2.17)$$

この 2 次方程式を解いて, エネルギー固有値として, 次の解を得る.

$$E(k) = \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) - 2\varepsilon_1(k) \pm \sqrt{D}}{2} \quad (2.18)$$

ただし,

$$D = \{2\varepsilon_1(k) - (\Sigma_p + \Sigma_a)\}^2 - 4\{(\varepsilon_1(k) - \Sigma_p)(\varepsilon_1(k) - \Sigma_a) - \varepsilon_2(k)^2\} \quad (2.19a)$$

$$= (\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2 \quad (2.19b)$$

そこで,  $E_p, E_a$  を次式で定義する.

$$E_p(k) = \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) - 2\varepsilon_1(k) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}}{2} \quad (2.20a)$$

$$E_a(k) = \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) - 2\varepsilon_1(k) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}}{2} \quad (2.20b)$$

このとき,  $\Sigma_p, \Sigma_a$  は一般に複素数であるから,  $E_p(k), E_a(k)$  も一般に複素数である. bcc 構造の場合と違い, fcc 構造の場合には  $\varepsilon_1(k)$  が入ってくることが大きな特徴である.

### 2.3 固有状態 (電子スピンの場合)

式 (2.20) で定義した  $E_p, E_a$  に対する固有状態を求めるには, 式 (2.3) の係数を知る必要がある.

規格直交条件は

$$|C_A|^2 + |C_B|^2 = 1 \quad (2.21)$$

である. 式 (2.8a) から

$$C_B = \frac{E(k) - K_{AA}}{K_{AB}} C_A \quad (2.22)$$

を得る. 式 (2.21) と (2.22) を組合わせて,

$$|C_A|^2 = \frac{|K_{AB}|^2}{|K_{AB}|^2 + |K_{AA} - E(k)|^2} \quad (2.23a)$$

$$|C_B|^2 = \frac{|K_{AA} - E(k)|^2}{|K_{AB}|^2 + |K_{AA} - E(k)|^2} \quad (2.23b)$$

を得る.

次に  $E(k) = E_p(k)$  の場合 (平行結合状態の場合) について,  $C_A, C_B$  を求めてみると,

$$|C_A|^2 = \frac{\varepsilon_2(k)^2}{\varepsilon_2(k)^2 + |-\varepsilon_1(k) + \Sigma_p - E_p(k)|^2} \quad (2.24a)$$

$$|C_B|^2 = \frac{|-\varepsilon_1(k) + \Sigma_p - E_p(k)|^2}{\varepsilon_2(k)^2 + |-\varepsilon_1(k) + \Sigma_p - E_p(k)|^2} \quad (2.24b)$$

式 (2.22) を考慮して,

$$C_A = \frac{-\varepsilon_2(k)}{\sqrt{\varepsilon_2(k)^2 + |E_p(k) - \Sigma_p + \varepsilon_1(k)|^2}} \quad (2.25a)$$

$$C_B = \frac{E_p - \Sigma_p + \varepsilon_1(k)}{\sqrt{\varepsilon_2(k)^2 + |E_p(k) - \Sigma_p + \varepsilon_1(k)|^2}} \quad (2.25b)$$

と求まる.

式 (2.25) で定義された  $C_A, C_B$  を使用して,  $E(k) = E_p(k)$  のエネルギー固有値をもつ ↑ 電子の固有状態 (平行結合状態) は,

$$|pk \uparrow\rangle = C_A |Ak \uparrow\rangle + C_B |Bk \uparrow\rangle \quad (2.26)$$

である. 一方, 直交する状態は

$$|ak \uparrow\rangle = C_B |Ak \uparrow\rangle - C_A |Bk \uparrow\rangle \quad (2.27)$$

である. これに対して

$$K |ak \uparrow\rangle = E' |ak \uparrow\rangle \quad (2.28)$$

つまり

$$\begin{aligned} K(C_B |Ak \uparrow\rangle - C_A |Bk \uparrow\rangle) \\ = E'(C_B |Ak \uparrow\rangle - C_A |Bk \uparrow\rangle) \end{aligned} \quad (2.29)$$

をつくると,

$$E' = (C_B K_{AA} - C_A K_{AB}) / C_B \quad (2.30a)$$

$$= K_{AA} - \frac{C_A}{C_B} K_{AB} \quad (2.30b)$$

$$= -\varepsilon_1(k) + \Sigma_p - \frac{\varepsilon_2(k)^2}{E_p - \Sigma_p + \varepsilon_1(k)} \quad (2.30c)$$

$$= \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) - 2\varepsilon_1(k) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}}{2} \quad (2.30d)$$

$$= E_a(k) \quad (2.30e)$$

となって, 式 (2.27) は  $E' = E_a(k)$  の固有状態であることがわかる.

## 2.4 ワニエ関数 (電子スピン↑の場合)

bcc 構造の結果がそのまま使用できる。つまり、部分格子  $A$  に属する 0 サイトのワニエ関数のうち、↑電子に対応するものは、

$$|0\uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k |Ak\uparrow\rangle \quad (2.31a)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k (C_A |pk\uparrow\rangle + C_B |ak\uparrow\rangle) \quad (2.31b)$$

である。

## 2.5 非摂動グリーン関数のサイト対角要素 (電子スピン↑の場合)

非摂動ハミルトニアン  $K$  に対するグリーン関数 (非摂動グリーン関数)  $P$  を

$$P = \frac{1}{\omega - K} \quad (2.32)$$

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  $|pk\uparrow\rangle$ ,  $|ak\uparrow\rangle$  で、互いに直交しているから、 $P$  の対角要素は次のように求まる。

$$F_1(\omega) = \langle 0\uparrow | P | 0\uparrow \rangle \quad (2.33a)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k \left\{ \frac{|C_A|^2}{\omega - E_p(k)} + \frac{|C_B|^2}{\omega - E_a(k)} \right\} \quad (2.33b)$$

ここで、 $C_A$ ,  $C_B$  は (2.25) 式で、 $E_p(k)$ ,  $E_a(k)$  は (2.20) 式で与えられている。

## 2.6 状態密度の計算 (電子スピン↑の場合)

式 (2.33) は  $k$  についての和の形で書かれているが、実際の計算では、適当な状態密度関数  $\rho(\varepsilon)$  を仮定して、エネルギー  $\varepsilon$  についての積分として実行するのが便利である。

前論文 (bcc 構造) の場合と同様に、ここでも、準だ円型の状態密度関数を考える。

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Delta} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \quad (2.34)$$

この関数は、次の様に規格化されている。

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (2.35)$$

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対応して、

$$\frac{2}{N} \sum_k \rightarrow \int_{-\Delta}^{\Delta} \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.36)$$

と置き換えることに対応する。bcc 構造との大きな違いは、遷移エネルギーの中に、異なる部分格子間の遷移による  $\varepsilon_2(k)$  だけでなく、同じ部分格子間の遷移による  $\varepsilon_1(k)$  が存在することである。ここで  $\varepsilon_1(k)$  と  $\varepsilon_2(k)$  は (2.11) 式と (2.14) 式で定義されている。fcc 構造の場合、あるサイトのまわりに 12 個の最隣接サイトが存在し、そのうち 6 個は同じ部分格子に、残り 6 個は異なる部分格子に属する。

fcc 構造の場合に、実際に求めてみると、 $\varepsilon(R) = \varepsilon_{mn}(R = R_m - R_n)$  は最隣接格子ベクトルを用いて、

$$\varepsilon_1(k) = \sum_{R(A,A)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} = \sum_{R(B,B)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} \quad (2.37a)$$

$$= 2\varepsilon(R) \left\{ \cos \frac{a}{2}(k_x - k_y) + \cos \frac{a}{2}(k_y - k_z) + \cos \frac{a}{2}(k_z - k_x) \right\} \quad (2.37b)$$

$$\varepsilon_2(k) = \sum_{R(A,B)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} \quad (2.38a)$$

$$= 2\varepsilon(R) \left\{ \cos \frac{a}{2}(k_x - k_y) + \cos \frac{a}{2}(k_y + k_z) + \cos \frac{a}{2}(k_z + k_x) \right\} \quad (2.38b)$$

と書ける。もし、伝導バンドのエネルギー領域が、バンド半値幅  $\Delta$  を用いて  $-\Delta \leq \varepsilon \leq \Delta$  と表せるなら、 $\varepsilon_1(k)$ ,  $\varepsilon_2(k)$  はそれぞれ、

$$-\frac{1}{2} \leq \varepsilon_1(k) \leq \frac{1}{2} \Delta \quad (2.39a)$$

$$-\frac{1}{2} \Delta \leq \varepsilon_2(k) \leq \frac{1}{2} \Delta \quad (2.39b)$$

であるはずである。

以上のことを念頭において、 $\varepsilon_1(k)$ ,  $\varepsilon_2(k)$  をエネルギー  $\varepsilon$  で置き換えることを考える。そのため、式 (2.20a) 中で、 $\Sigma_p = \Sigma_a = 0$  とおいた場合 (s-f 交換相互作用がない場合に相当) を調べてみると、

$$E_p(k) = -\varepsilon_1(k) - |\varepsilon_2(k)| \quad (2.40a)$$

$$E_a(k) = -\varepsilon_1(k) + |\varepsilon_2(k)| \quad (2.40b)$$

を得る。式 (2.39) を代入してみると、

$$-\Delta \leq E_p \leq \frac{1}{2} \Delta \quad (2.41a)$$

$$-\frac{1}{2} \Delta \leq E_a \leq \Delta \quad (2.41b)$$

となる。従って、 $E_p$  はエネルギーが負 ( $\varepsilon < 0$ ) の固有状

態を主として対応し、 $E_a$  はエネルギーが正 ( $\varepsilon > 0$ ) の固有状態に主として対応している。

$E_p, E_a$  はそれぞれ異なる固有状態 (バンド) を表すのだから、状態密度関数をそれぞれ定義するのが自然である。そこで、式 (2.36) を、平行 (para) と反平行 (anti-para) の場合で、次のように別にとる。つまり (2.36) 式のかわりに、

$$\frac{2}{N} \sum_k (\text{para}) \rightarrow 2 \int_{-d}^0 \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.42a)$$

$$\frac{2}{N} \sum_k (\text{anti-para}) \rightarrow 2 \int_0^d \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.42b)$$

もちろん、(2.34) 式の  $\rho(\varepsilon)$  を使えば、各バンドは

$$2 \int_0^d \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 2 \int_{-d}^0 \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (2.43)$$

と規格化されている。

更に、式 (2.39) を考慮して、

$$\varepsilon_1(k) \rightarrow -\frac{\varepsilon}{2}, \quad \varepsilon_2(k) \rightarrow -\frac{\varepsilon}{2} \quad (2.45)$$

と変数変換を行なう。

このことは、式 (2.20) において、

$$E_p(\varepsilon) = \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) + \varepsilon - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + \varepsilon^2}}{2} \quad (2.46a)$$

$$E_a(\varepsilon) = \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) + \varepsilon + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + \varepsilon^2}}{2} \quad (2.46b)$$

とおくことに対応する。更に、 $C_A, C_B$  は、(2.24) 式より

$$|C_A|^2 = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + |2(E_p - \Sigma_p) - \varepsilon|^2} \quad (2.47a)$$

$$|C_B|^2 = \frac{|2(E_p - \Sigma_p) - \varepsilon|^2}{\varepsilon^2 + |2(E_p - \Sigma_p) - \varepsilon|^2} \quad (2.47b)$$

とおける。

従って、何らかの方法で、 $\Sigma_p, \Sigma_a$  が得られれば、 $F_{\uparrow}(\omega)$  は、式 (2.33) から、次式のように求まる。

$$F_{\uparrow}(\omega) = \frac{2}{N} \sum_k \left\{ \frac{|C_A|^2}{\omega - E_p(k)} + \frac{|C_B|^2}{\omega - E_a(k)} \right\} \quad (2.48a)$$

$$= \int_{-d}^0 d\varepsilon \frac{2\rho(\varepsilon)|C_A|^2}{\omega - E_p(\varepsilon)} + \int_0^d d\varepsilon \frac{2\rho(\varepsilon)|C_B|^2}{\omega - E_a(\varepsilon)} \quad (2.48b)$$

平行状態は、 $-d \leq \varepsilon \leq 0$  の範囲で (反平行状態は  $0 \leq \varepsilon \leq d$  の範囲で) 積分を実行していることに注意。式 (2.46) - (2.48) を用いて  $F_{\uparrow}(\omega)$  が求まれば、 $\uparrow$  電子に対する状態密度  $D_{\uparrow}(\omega)$  は

$$D_{\uparrow}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\uparrow}(\omega) \quad (2.49)$$

である。

## 2.7 電子スピン↓の場合

電子スピン↓の場合の表式の導出は、bcc 構造の場合と同様である。重複を避け、結論のみを書くことにする。

$P$  のサイト対角要素は

$$F_{\downarrow}(\omega) = \langle 0 \downarrow | P | 0 \downarrow \rangle \quad (2.50a)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k (|C_B|^2 \langle pk \downarrow | P | pk \downarrow \rangle + |C_A|^2 \langle ak \downarrow | P | ak \downarrow \rangle) \quad (2.50b)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k \left( \frac{|C_B|^2}{\omega - E_p} + \frac{|C_A|^2}{\omega - E_a} \right) \quad (2.50c)$$

$$= \int_{-d}^0 d\varepsilon \frac{2\rho(\varepsilon)|C_B|^2}{\omega - E_p} + \int_0^d d\varepsilon \frac{2\rho(\varepsilon)|C_A|^2}{\omega - E_a} \quad (2.50d)$$

一方、電子スピン↓の状態密度は、

$$D_{\downarrow}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\downarrow}(\omega) \quad (2.51)$$

で計算される。

## 2.8 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、fcc 反強磁性半導体中の伝導電子状態は、2 つのエネルギー固有値に対応した固有状態で表した方がよい。

すなわち、平行結合状態は、

$$F_p(\omega) = \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - E_p(k)} \quad (2.52a)$$

$$= \int_{-d}^0 d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{2}{\omega - E_p(\varepsilon)} \quad (2.52b)$$

反平行結合状態は、

$$F_a(\omega) = \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - E_a(k)} \quad (2.53a)$$

$$= \int_0^d d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{2}{\omega - E_a(\varepsilon)} \quad (2.53b)$$

となる。このとき、平行・反平行の状態密度はそれぞれ、

$$D_p(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_p(\omega) \quad (2.54a)$$

$$D_a(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_a(\omega) \quad (2.54b)$$

と求まる。

## 2.9 高温の極限 ( $T = \infty$ )

高温の極限 (分子場近似では  $T \geq T_N$ ) では

$$\Sigma = \Sigma_{\uparrow} = \Sigma_{\downarrow} \quad (2.55)$$

すなわち

$$\Sigma = \Sigma_p = \Sigma_a \quad (2.56)$$

とおける。これを (2.46) に代入すると、

$$E_p(\varepsilon) = \frac{2\Sigma + \varepsilon - |\varepsilon|}{2} \quad (2.57a)$$

$$E_a(\varepsilon) = \frac{2\Sigma + \varepsilon + |\varepsilon|}{2} \quad (2.57b)$$

を得る。(2.47) 式に代入すると

$$|C_A|^2 = |C_B|^2 = \frac{1}{2} \quad (2.58)$$

がわかる。

式 (2.57) を式 (2.52), (2.53) に代入すると、

$$F_p(\omega) = \frac{4}{\pi\Delta} \int_{-\Delta}^0 d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \times \frac{1}{\omega - \Sigma - (\varepsilon - |\varepsilon|)/2} \quad (2.59a)$$

$$= \frac{4}{\pi\Delta} \int_{-\Delta}^0 d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \times \frac{1}{\omega - \Sigma - \varepsilon} \quad (2.59b)$$

$$F_a(\omega) = \frac{4}{\pi\Delta} \int_0^{\Delta} d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \times \frac{1}{\omega - \Sigma - (\varepsilon + |\varepsilon|)/2} \quad (2.60a)$$

$$= \frac{4}{\pi\Delta} \int_0^{\Delta} d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \times \frac{1}{\omega - \Sigma - \varepsilon} \quad (2.60b)$$

式 (2.48) と (2.58), (2.59), (2.60) を利用すると、 $T \geq T_N$  で

$$F_{\uparrow}(\omega) = \frac{1}{2} (F_p(\omega) + F_a(\omega)) \quad (2.61a)$$

$$= \frac{2}{\pi\Delta} \int_0^{\Delta} d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \times \frac{1}{\omega - \Sigma - \varepsilon} \quad (2.61b)$$

であることがわかる。

従って、 $T \leq T_N$  で通常の CPA と一致する。

[補注] (2.58) 式を (2.48) に代入すると、

$$\begin{aligned} F_{\uparrow}(\omega) &= \int_{-\Delta}^0 d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\omega - E_p(\varepsilon)} + \int_0^{\Delta} d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\omega - E_a(\varepsilon)} \\ &= \int_{-\Delta}^{\Delta} d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\omega - \Sigma - \varepsilon} = F_{\downarrow}(\omega) = F(\omega) \end{aligned}$$

を得る。

## 2.10 $T=0$ での表式

$T=0$  の場合、bcc 構造でも考察したように、古典スピンの極限で、

$$\Sigma_p = \Sigma_{\uparrow} = -IS \quad (2.62a)$$

$$\Sigma_a = \Sigma_{\downarrow} = +IS \quad (2.62b)$$

となる。このとき、式 (2.46) より、

$$E_p(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \sqrt{\varepsilon^2 + 4(IS)^2}}{2} \quad (2.63a)$$

$$E_a(\varepsilon) = \frac{\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 4(IS)^2}}{2} \quad (2.63b)$$

式 (2.47) より、

$$|C_A|^2 = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + |2(IS) - \sqrt{\varepsilon^2 + 4(IS)^2}|^2} \quad (2.64a)$$

$$= \frac{(\varepsilon/\Delta)^2}{(\varepsilon/\Delta)^2 + |2(IS/\Delta) - \sqrt{(\varepsilon/\Delta)^2 + 4(IS/\Delta)^2}|^2} \quad (2.65a)$$

$$|C_B|^2 = \frac{|\sqrt{(\varepsilon/\Delta)^2 + 4(IS/\Delta)^2} - 2(IS/\Delta)|^2}{(\varepsilon/\Delta)^2 + |\sqrt{(\varepsilon/\Delta)^2 + 4(IS/\Delta)^2} - 2(IS/\Delta)|^2} \quad (2.65b)$$

平行結合状態は、式 (2.52), (2.63) より、

$$F_p(\omega) = \int_{-\Delta}^0 d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{2}{\omega - E_p} \quad (2.66a)$$

$$= \int_{-\Delta}^0 d\varepsilon \frac{4}{\pi\Delta} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \times \frac{1}{\omega - \left(\frac{\varepsilon}{2}\right) + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^2 + (IS)^2}} \quad (2.66b)$$

$$= \frac{4}{\pi\Delta} \int_0^{\Delta} d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \times \frac{1}{\omega + \left(\frac{\varepsilon}{2}\right) + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^2 + (IS)^2}} \quad (2.66c)$$

積分を簡単にするために、 $x = \varepsilon/\Delta$  において整理すると

$$F_p(\omega) \cdot \Delta = \frac{4}{\pi} \int_0^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{\left(\frac{\omega}{\Delta}\right) + \frac{x}{2} + \sqrt{\left(\frac{x}{2}\right)^2 + \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2}} \quad (2.67)$$

同様に, 反平行結合状態は,

$$F_a(\omega) \cdot \Delta = \frac{4}{\pi} \int_0^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{\left(\frac{\omega}{\Delta}\right) + \frac{x}{2} + \sqrt{\left(\frac{x}{2}\right)^2 + \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2}} \quad (2.68)$$

式 (2.67), (2.68) 中の積分を解析的に実行することはできない。ただし, 状態密度は, 次の様に実行できる。すなわち,  $\delta$  を正の微小量として,

$$D_p(\omega) \cdot \Delta = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_p(\omega + i\delta) \quad (2.69a)$$

$$= -\frac{4}{\pi^2} \text{Im} \int_0^1 dx \frac{\sqrt{1-x^2}}{\left(\frac{\omega}{\Delta}\right) + \frac{x}{2} + \sqrt{\left(\frac{x}{2}\right)^2 + \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2}} \quad (2.69b)$$

$$= -\frac{4}{\pi^2} \text{Im} \left( \frac{\Delta}{\omega} \right) \int_0^1 dx \times \frac{\sqrt{1-x^2} \left\{ \left( \frac{\omega}{\Delta} \right) + \left( \frac{x}{2} \right) - \sqrt{\left( \frac{x}{2} \right)^2 + \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2} \right\}}{x - \left( \frac{\Delta}{\omega} \right) \left[ \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 - \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 \right] + i\delta} \quad (2.69c)$$

$$= \frac{4}{\pi} \left( \frac{\Delta}{\omega} \right) \int_0^1 dx \sqrt{1-x^2} \left\{ \left( \frac{\omega}{\Delta} \right) + \left( \frac{x}{2} \right) - \sqrt{\left( \frac{x}{2} \right)^2 + \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2} \right\} \times \delta \left( x - \left( \frac{\Delta}{\omega} \right) \left[ \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 - \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 \right] \right) \quad (2.69d)$$

さて, 式 (2.69d) が 0 でない値をもつのは, 積分中にある  $\delta$  関数が 0 になるとき, すなわち,

$$x = \left( \frac{\Delta}{\omega} \right) \left[ \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 - \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 \right] \quad (2.70)$$

のときである。このとき, 次の値を得る。

$$D_p(\omega) \cdot \Delta = \frac{4}{\pi} \left( \frac{\Delta}{\omega} \right)^2 \left[ \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 + \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 \right] \times \left\{ 1 - \left( \frac{\Delta}{\omega} \right)^2 \left[ \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 - \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.71)$$

さて, 上の  $D_p(\omega)$  が 0 でない (有限の) 値を持つエネルギー領域を検討しよう。式 (2.71) の中で, 平方根の中が正である条件は,

$$1 \geq \left( \frac{\Delta}{\omega} \right)^2 \left[ \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 - \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 \right]^2 \quad (2.72)$$

式 (2.67) の分母が  $0 \leq x \leq 1$  に対して 0 であるためには,  $\omega \leq 0$  でなければならないことに注意する。 $a = (IS/\Delta)$ ,  $x = (\omega/\Delta)$  と略記すると, (2.72) の条件は,

$$\frac{-1 - \sqrt{1+4a^2}}{2} \leq \frac{\omega}{\Delta} \leq \frac{1 - \sqrt{1+4a^2}}{2} \quad (2.73)$$

である。

一方 (2.70) 式で定義した  $x$  は, 積分区間内にあるはずだから,

$$0 \leq \frac{\Delta}{\omega} \left[ a^2 - \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 \right] \leq 1 \quad (2.74)$$

これから

$$\left( \frac{\omega}{\Delta} \right) \leq -a \quad \text{または} \quad \left( \frac{\omega}{\Delta} \right) \geq a \quad (2.75)$$

および

$$\frac{-1 - \sqrt{1+4a^2}}{2} \leq \frac{\omega}{\Delta} \leq \frac{-1 + \sqrt{1+4a^2}}{2} \quad (2.76)$$

を得る。(2.76) 式は (2.73) 式に含まれる。(2.73) 式の右辺と, (2.75) の  $-a$  を比べると,

$$-a < \frac{-1 - \sqrt{1+4a^2}}{2} \quad (2.77)$$

であるから, 結局, 状態密度が 0 でないエネルギー領域は,

$$\frac{-1 - \sqrt{1+4a^2}}{2} \leq \frac{\omega}{\Delta} \leq -a \quad (2.78)$$

すなわち

$$\frac{-1 - \sqrt{1+4(IS/\Delta)^2}}{2} \leq \frac{\omega}{\Delta} \leq -\left( \frac{IS}{\Delta} \right) \quad (2.79)$$

である。まとめると, エネルギー  $\omega$  が

$$\frac{-1 - \sqrt{1+4(IS/\Delta)^2}}{2} \leq \frac{\omega}{\Delta} \leq -\left( \frac{IS}{\Delta} \right) \quad (2.80)$$

の領域では, 0 でない状態密度をもち,

$$D_p(\omega) \cdot \Delta = \frac{4}{\pi} \left( \frac{\Delta}{\omega} \right)^2 \left[ \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 + \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 \right] \times \left\{ 1 - \left( \frac{\Delta}{\omega} \right)^2 \left[ \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 - \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.81)$$

である。式 (2.81) の状態密度の和が規格化されていることは, 次の様に示される。簡単のため  $x = \omega/\Delta$ ,  $a$

$=IS/\Delta$  と書く。すると、状態密度の総和は、

$$u = \frac{x^2 - a^2}{x} \quad (2.83)$$

$$\int D_p(\omega) d\omega = \int_a^{\frac{1+\sqrt{1+4a^2}}{2}} dx \left( \frac{4}{\pi} \right)$$

とおくと

$$\times \left( \frac{x^2 + a^2}{x^2} \right) \left\{ 1 - \frac{(a^2 - x^2)^2}{x^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.82)$$

$$\frac{du}{dx} = \frac{2x \cdot x - (x^2 - a^2)}{x^2} = \frac{x^2 + a^2}{x^2}$$

式の中で

ゆえに

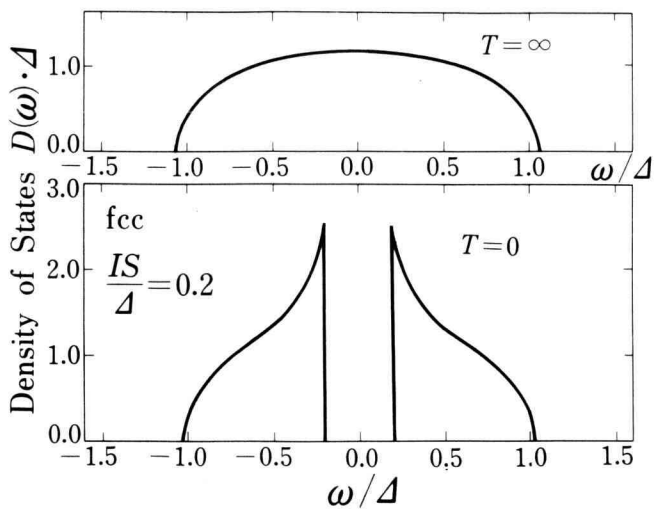


Fig. 1.

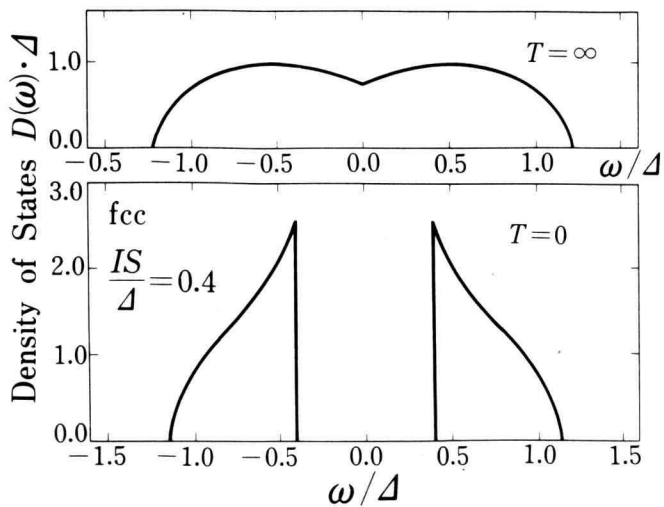


Fig. 2.



$$\left(\frac{x^2+a^2}{x^2}\right)dx=du \quad (2.84)$$

一方, (2.83) 式の変数変換で積分範囲は,

$$\begin{aligned} x=a &\longleftrightarrow u=0 \\ x=\frac{1+\sqrt{1+4a^2}}{2} &\longleftrightarrow u=1 \end{aligned} \quad (2.85)$$

である。結局, (2.82) 式は,

$$\begin{aligned} \int D_p(\omega)d\omega &= \frac{4}{\pi} \int_0^1 du \cdot \sqrt{1-u^2} \\ &= \frac{4}{\pi} \times \frac{\pi}{4} = 1 \end{aligned} \quad (2.86)$$

となる。つまり, 平行結合状態の総和は 1 になるように規格化されている。

反平行結合状態のときは, (2.68) 式で,  $\omega \rightarrow -\omega$  とおくとわかるように,

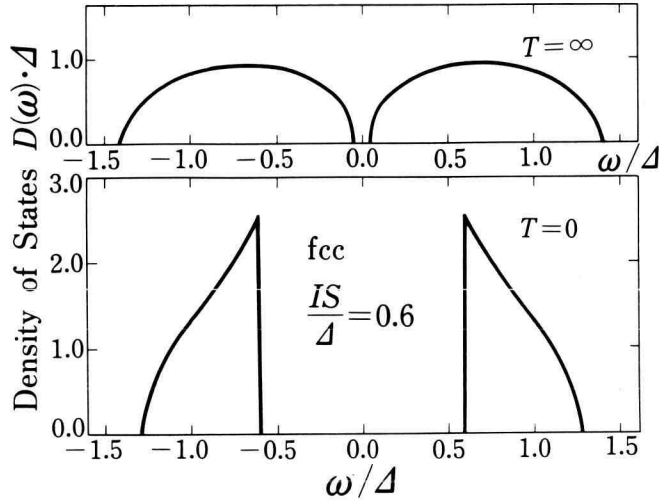


Fig. 3.

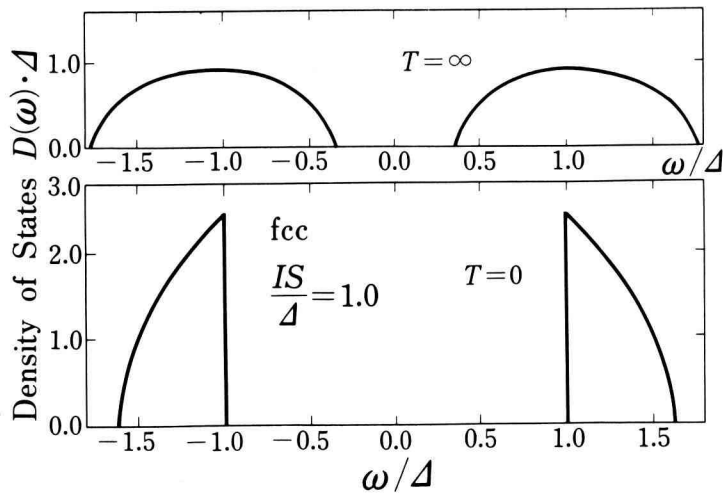


Fig. 4.

$$F_a(\omega + i\delta) = -F_p(-\omega - i\delta) \quad (2.87)$$

である。従って

$$D_a(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_a(\omega + i\delta) \quad (2.88a)$$

$$= +\frac{1}{\pi} \text{Im} F_p(-\omega - i\delta) \quad (2.88b)$$

$$= D_p(-\omega) \quad (2.88c)$$

となって、 $\omega=0$  で  $D_a(\omega)$  と  $D_p(\omega)$  は対称となることがわかる。

### 3. 状態密度の計算結果

Fig. 1~Fig. 4 に、 $T=\infty$  の場合と  $T=0$  の場合の状態密度を、 $(IS/\Delta)=0.2, 0.4, 0.6, 1.0$  のそれぞれの値について、エネルギー  $\omega$  (横軸は  $\omega/\Delta$ ) として示す。状態密度は  $D(\omega) \cdot \Delta$  の値として表され、状態密度の総和 (平行・反結合状態の和) は 2 となるように規格化されている。

特徴は、bcc 構造の場合と同様、 $T=0$  で  $\omega=\pm\Delta$  のところでギャップを生じること、ただし、bcc と異なり状態密度の発散は起きないこと、である。また  $IS/\Delta$  の値が大きくなるとギャップが大きくなる点など、bcc 構造と似ている。

### 4. バンド端についての考察

#### 4.1 $T=\infty$ の場合

式 (2.61) からわかるように、 $T=\infty$  では、

$$F_{\uparrow}(\omega) = \frac{2}{\pi\Delta} \int_{-\Delta}^{\Delta} d\varepsilon \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \times \frac{1}{\omega - \Sigma - \varepsilon} \quad (4.1)$$

である。式の分母で  $\varepsilon = -\Delta$  のとき、すなわち、

$$\omega = \omega_b \equiv \Sigma - \Delta \quad (4.2)$$

がバンド端である。式 (4.2) を (4.1) に代入して、 $x = \varepsilon/\Delta$  とおくと、

$$F_{\uparrow}(\omega) \cdot \Delta = -\frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{1-x^2}{x+1} \quad (4.3a)$$

$$= -\frac{2}{\pi} \times \pi = -2 \quad (4.3b)$$

を得る。ただし、数学公式 I (岩波全書) p. 226 の積分公式を使用した。

さて、 $T=\infty$  での CPA の条件は、古典スピン ( $1/S \rightarrow 0$ ) の近似で、

$$-\Sigma + F[(IS)^2 - \Sigma^2] = 0 \quad (4.4)$$

式 (4.3) を利用すると、(4.4) 式の解は、

$$\left(\frac{\Sigma}{\Delta}\right) = \frac{1 + \sqrt{1 + 16(IS/\Delta)^2}}{4} \quad (4.5)$$

である。式 (4.2) より、バンド端エネルギーは、

$$\frac{\omega_b}{\Delta} = -\frac{1}{4} \left\{ \sqrt{1 + 16 \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2} + 3 \right\} \quad (4.6)$$

で与えられる。ところで、s-f 交換相互作用がない場合 ( $IS=0$ ) でのバンド端は、 $\omega_b = -\Delta$  である。すると、s-f 交換相互作用によるエネルギーの下がり  $\delta\omega_b$  は、( $\delta\omega_b = \omega_b + \Delta = \Sigma$ )、

$$\frac{\delta\omega_b}{\Delta} = \frac{\omega_b}{\Delta} + 1 \quad (4.7a)$$

$$= -\frac{1}{4} \left\{ \sqrt{1 + 16 \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2} - 1 \right\} \quad (4.7b)$$

である。 $x = IS/2\Delta$  とおくと、

$$\frac{\delta\omega_b}{IS} = -\frac{\sqrt{1 + 64x^2} - 1}{8x} \quad (4.8)$$

を得る。

#### 4.2 bcc 反強磁性半導体 ( $T=0$ )

bcc 反強磁性半導体のバンド端は、前論文 X の (3.94) 式から、

$$\omega_b = -\sqrt{\Delta^2 + (IS)^2} \quad (4.9)$$

である。すなわち、

$$\frac{\omega_b}{\Delta} = -\sqrt{\left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2 + 1} \quad (4.10)$$

である。s-f 交換相互作用によるエネルギーの下がり  $\delta\omega_b$  は、

$$\frac{\delta\omega_b}{\Delta} = \frac{\omega_b}{\Delta} + 1 \quad (4.11a)$$

$$= 1 - \sqrt{1 + \left(\frac{IS}{\Delta}\right)^2} \quad (4.11b)$$

である。 $x = IS/2\Delta$  とおくと、

$$\frac{\delta\omega_b}{IS} = -\frac{\sqrt{1 + 4x^2} - 1}{2x} \quad (4.12)$$

を得る。

### 4.3 fcc 反強磁性半導体 ( $T=0$ )

fcc 反強磁性半導体のバンド端は、式 (2.80) の下端のエネルギーだから、

$$\frac{\omega_b}{\Delta} - \frac{1}{2} \left\{ 1 + \sqrt{1 + 4 \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2} \right\} \quad (4.13)$$

である。s-f 交換相互作用によるエネルギーの下がり  $\delta\omega_b$  は

$$\frac{\delta\omega_b}{\Delta} = \frac{\omega_b}{\Delta} + 1 \quad (4.14a)$$

$$= -\frac{1}{2} \left\{ \sqrt{1 + 4 \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2} - 1 \right\} \quad (4.14b)$$

である。 $x = IS/2\Delta$  とおくと、

$$\frac{\delta\omega_b}{IS} = -\frac{1}{4x} (\sqrt{1 + 16x^2} - 1) \quad (4.15)$$

を得る。

### 4.4 $T=\infty$ における量子効果

私達は古典スピンの極限において議論してきたが、ここで  $T=\infty$  における量子効果を見積ってみる。(4.3) 式は、そのまま使える。ただし、(4.4) 式のかわりに、

$$\Sigma = [IS + \Sigma][I(S+1) - \Sigma]F \quad (4.16)$$

を使う。これに、(4.3) 式を代入して、

$$2 \left( \frac{\Sigma}{\Delta} \right)^2 - \left[ 2 \left( \frac{I}{\Delta} \right) + 1 \right] \left( \frac{\Sigma}{\Delta} \right) - 2 \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 \left( 1 + \frac{I}{S} \right) = 0 \quad (4.17)$$

これを解いて、

$$\left( \frac{\Sigma}{\Delta} \right) = \frac{1}{4} \left\{ \left[ 2 \left( \frac{I}{\Delta} \right) + 1 \right] \pm \sqrt{\left[ 2 \left( \frac{I}{\Delta} \right) + 1 \right]^2 + 16 \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 \left( 1 + \frac{I}{S} \right)} \right\} \quad (4.18)$$

式 (4.2) より

$$\frac{\omega_b}{\Delta} = \frac{1}{4} \left\{ \left[ 2 \left( \frac{I}{\Delta} \right) - 3 \right] - \sqrt{\left[ 2 \left( \frac{I}{\Delta} \right) + 1 \right]^2 + 16 \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 \left( 1 + \frac{I}{S} \right)} \right\} \quad (4.19)$$

である。バンドの下がり  $\delta\omega_b$  は、 $\Sigma$  に等しく

$$\frac{\delta\omega_b}{\Delta} = -\frac{1}{4} \left\{ \sqrt{\left[ 2 \left( \frac{I}{\Delta} \right) + 1 \right]^2 + 16 \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 \left( 1 + \frac{I}{S} \right)} - \left[ 2 \left( \frac{I}{\Delta} \right) + 1 \right] \right\} \quad (4.20)$$

次に  $x = IS/2\Delta$  とおくと

$$\frac{IS}{\Delta} = 2x, \quad \frac{I}{\Delta} = \frac{2x}{S}$$

であることに注意して、

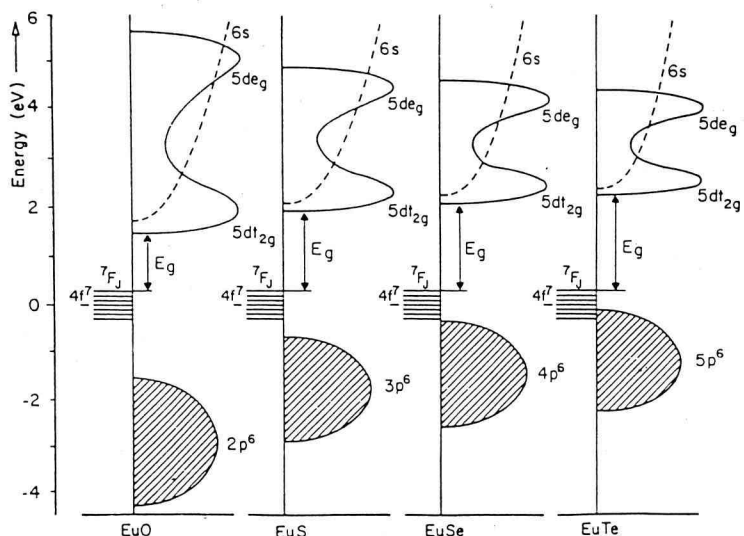


Fig. 5.

$$\frac{\delta\omega_b}{IS} = -\frac{1}{8x} \left\{ \sqrt{\left(1 + \frac{4x}{S}\right)^2 + 64x^2 \left(1 + \frac{1}{S}\right)} - \left(1 + \frac{4x}{S}\right) \right\} \quad (4.21)$$

を得る。式(4.21)は、 $S \rightarrow \infty$  (古典スピン) の極限で、式(4.8)と一致する。

#### 4.5 計算結果と実験の比較

##### (a) 使用した物理定数

実験と比較するために、次の定数を使用した。まず Eu-カルコゲナイドに共通の s-f 交換相互作用の大きさとして、

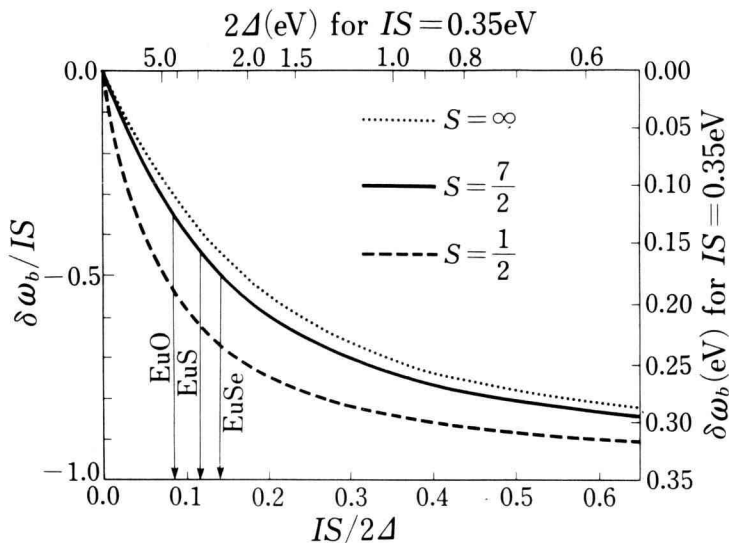


Fig. 6.

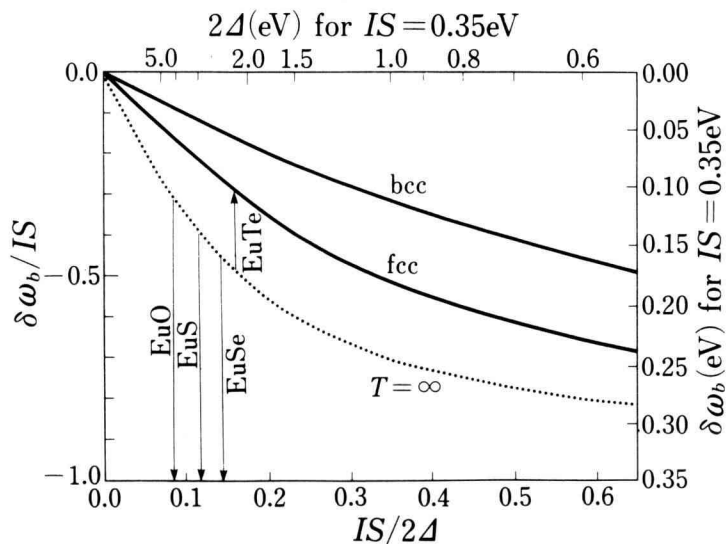


Fig. 7.

表 1.

	$2\Delta(\text{eV})$	$IS/2\Delta$
EuO	4.2	0.083
EuS	3.0	0.117
EuSe	2.5	0.140
EuTe	2.2	0.159

(IS=0.35 eV)

表 2.

	$\delta\omega_b/IS$	$\delta\omega_b(\text{eV})$	実験(eV)
EuO	0.64	0.224	0.27
EuS	0.55	0.193	0.18
EuSe	0.50	0.175	0.13

表 3.

	$\delta\omega_b/IS$	$\delta\omega_b(\text{eV})$	実験(eV)
EuO	0.69	0.24	0.27
EuS	0.61	0.21	0.18
EuSe	0.55	0.19	0.13
EuTe	0.19	-0.067	-0.03

IS=0.35eV

を用いる。バンド幅  $2\Delta$  は Wachter の図 (Fig. 5) より求めた表 1 の値を用いる。

### (b) 強磁性半導体の光吸収の説明

強磁性半導体の光吸収では、高温から温度が低下するにつれて吸収端が下がる現象 (red shift) が観察されている。

Fig. 6 は、 $IS/2\Delta$  の関数として、エネルギーの下がりを示したものである。図中には、(4.21) 式で計算した高温の極限でのバンド端を、 $S=\infty$  (古典スピン)、 $7/2$ 、 $1/2$  の 3 つの場合について示している。 $T=0$  の場合は  $-IS$  だけ下がるので、温度に依存するエネルギーの下がり、結局、図中に示した矢印のようになる。図より求めたエネルギーの下がりを実験結果との比較は、表 2 に示す通りである。ただし EuSe は、そのままだと複雑な磁性を示すので、強磁場をかけたデータを用いた。

### (c) 反強磁性半導体の光吸収の説明

古典スピンの極限での計算結果を、Fig. 7 に示す。 $T$

$=0$  での bcc, fcc のバンド端はそれぞれ、(4.12) 式と (4.15) 式で計算している。反強磁性半導体 EuTe は、温度が低下するにつれてバンド端が上がる (blue shift) を示すことが知られている。これは Fig. 7 の EuTe (fcc) の矢印で示されている。古典スピンの場合の強磁性の結果もまとめると表 3 のようになる。定性的には満足できる結果である。

## 5. まとめと今後の課題

私達は、反強磁性半導体に CPA を適用する方法について今まで考察してきた。反強磁性半導体では  $T < T_N$  で電子状態が 2 通りにわかれる。しかも、bcc 構造は異なる部分格子間の電子遷移だけであるのに対して、fcc 構造の場合には、同じ部分格子間と異なる部分格子間の 2 通りの電子遷移があるためやや複雑である。私達は、この論文で、2 つの電子状態 (平行・反平行) に対して ( $\varepsilon > 0$  と  $\varepsilon < 0$  とで) 異なる状態密度関数を導入して、 $T=\infty$  では従来の CPA と一致する方法を見出した。この方法は bcc 構造の場合にもすぐ適用できる。私達はこの論文で  $T=\infty$  と  $T=0$  の場合を調べたが、今後の課題として、 $0 < T < T_N$  の温度領域についての状態密度を実行する必要がある。

本研究の最大の成果は、何といたっても光吸収バンド端が、強磁性ではレッド・シフト、反強磁性ではブルー・シフトという実験事実を定性的に説明したことである。しかも、Wachter により示されたバンド幅  $2\Delta$  を使えば EuO, EuS, EuSe, EuTe の光吸収エネルギーの傾向も無理なく説明できる。ただし、問題点はこのバンド幅  $2\Delta$  で果してよいかということである。Eu-カルコゲナイドの d バンドは結晶場の効果により、3 重の  $t_{2g}$  バンドと 2 重の  $e_g$  バンドに分裂することはよく知られている。この論文で用いた Wachter のバンド幅は、 $t_{2g}$  と  $e_g$  が重なり合っているとしたときの両方のバンドの幅である。もし、 $t_{2g}$  バンドだけの幅で説明しようとする、バンド幅 ( $2\Delta$ ) の値は約半分となり ( $IS/2\Delta$ ) の値は約 2 倍となる。これでは説明がつかない。

逆に、実験データを満足すべくためにバンド幅はいくらあればよいかを Fig. 6 ( $S=7/2$ ) から見積ると、

EuO ( $\delta\omega_b/IS=0.77$ ;  $IS/2\Delta=0.075$ )  $2\Delta=4.67\text{eV}$ EuS ( $\delta\omega_b/IS=0.51$ ;  $IS/2\Delta=0.13$ )  $2\Delta=2.69\text{eV}$ EuSe ( $\delta\omega_b/IS=0.371$ ;  $IS/2\Delta=0.22$ )  $2\Delta=1.59\text{eV}$

となる。EuTe の場合は, Fig. 7 の中では,

$$\text{EuTe}(\delta\omega_b/IS=0.857, IS/2\Delta=0.05) \quad 2\Delta=7\text{eV}$$

を得るが, これでは Eu カルコゲナイドのバンド幅の傾向が不自然なように思われる。これらの検討は, 今後の重要な課題である。

#### 参 考 文 献

- 1) W. von der Linden and W. Nolting; Z. Phys. B-Condensed Matter **48**, 191-199 (1982).
- 2) P. Wachter; Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths, edited by K.A. Gschneidner, Jr. and L. Eyring, North-Holland Publishing Company, 1979, Chap. 19 p. 507.