

# s-f モデルと電子状態 (14)

— bcc 反強磁性半導体と CPA の結果 —

高橋 正雄\*・三井 和博\*・梅原 雅捷\*\*

s-f Model and Electron States (14)

— Numerical results of the CPA for bcc  
antiferromagnetic semiconductors —

Masao TAKAHASHI, Kazuhiro MITSUI and Masakatsu UMEHARA

## Abstract

The coherent potential approximation (CPA) is applied to the conduction electron states in bcc antiferromagnetic semiconductors. Under the Neel temperature two types of sub-lattice begins to magnetize in the opposite direction. In result the conduction electron states are separated into two different states, parallel-bonding states and anti-parallel-bonding states. The results of numerical calculation are shown for finite temperature region.

## 1. はじめに

私達はコヒーレント・ポテンシャル近似(以下 CPA)を反強磁性半導体に適用する方法を先に提案した<sup>1,2)</sup>。そのときは、温度が  $T=0$  と  $T=\infty$  についてのみ結果を示し、実験的にもよく知られている、反強磁性体の光吸収端のブルー・シフトが CPA (つまり、s 電子の多重散乱の効果)によって説明できることを示した。しかもそれだけではなく、EuO, EuS, EuSe, EuTe とつづく Eu カルコゲナイドの光吸収端のエネルギー傾向を、s-f 交換相互作用の大きさ  $IS$  と伝導電子バンドの幅  $2\Delta$  の比 ( $IS/2\Delta$ ) の関係において、統一的に説明することに成功した<sup>2)</sup>。

温度が  $T=\infty$  のときは、従来の CPA そのままだから、何ら問題はない。f スピンを古典スピンとして扱う限り、 $T=0$  (絶対零度) では f スピン系のゆらぎはないから、この場合には単なる量子力学の問題に帰着する。(f スピンの大きさが有限の場合には零点振動によるゆらぎがある)。そこで、 $0 < T < T_c$  を考えると、古

典スピンの極限においても、f スピン系のゆらぎが存在するから、熱平均を何の物理量に対してどのように取るかということが問題となる。そこで、これから述べるように、ハミルトニアン<sup>3)</sup>の非エルミート性が重要な意味を持つてくる。

強磁性半導体の場合には、 $0 < T < T_c$  では、s 電子のもつスピンの向きに対応させて、2つのコヒーレント・ポテンシャル  $\Sigma_{\uparrow}$  と  $\Sigma_{\downarrow}$  を仮定すればよかった。着目した1つのサイト以外はすべてコヒーレント・ポテンシャルが存在すると仮定できるのだから、そこでは s 電子のスピン反転はない。そして、着目したサイトで、 $t$  行列が 0 になるという条件

$$\langle t_{ii} \rangle_{av} = 0 \quad (1.1a)$$

$$\langle t_{ij} \rangle_{av} = 0 \quad (1.1b)$$

を課すれば、コヒーレント・ポテンシャルが決まる。

ところが、反強磁性半導体の場合には、事情はそれほど簡単ではない。その一番の原因は、s 電子の固有状態とあるサイトのワニエ関数 ( $|l\uparrow\rangle$  または  $|l\downarrow\rangle$ ) とが 1 対 1 に対応していないところにある。本論の中でも詳しく述べるように、このことが反強磁性体の扱いを大変複雑にする。

1995 年 9 月 12 日受理

\* 一般教育科

\*\* 無機材質研究所

反強磁性体に CPA を適用する場合には、結晶構造が fcc や bcc かで扱いが異なる。そこで、この論文では bcc 構造の反強磁性体を扱い、この次に続く論文で fcc 構造の反強磁性体を扱う。

## 2. 反強磁性半導体への CPA の適用

bcc 半強磁性半導体に CPA を適用する方法の基本的な考え方については、すでに発表している<sup>1)</sup>。重複を避けるため、ここでは式の定義と近似の意味および結論を簡潔に記す。そして、近似の問題点を指摘する。数値計算による結果は次節で示す。

### 2.1 コヒーレント・ポテンシャル

反強磁性半導体では、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。そこで、 $T < T_N$  で  $+z$  方向に磁化する格子系を A、 $-z$  方向に磁化する格子系を B の添字で表すことにすると、外部磁場がない限り、2つの格子系の磁化は等しい。そのため、A 格子に  $\uparrow$  電子が局在するときに受けるポテンシャルと、B 格子に  $\downarrow$  電子が局在するときに受けるポテンシャルは等しい。つまり、s 電子のスピンの向きと f スピンの向きが平行 (parallel) に結合している。このときのポテンシャルを  $\Sigma_p$  と記すことにする。同様に、A 格子に  $\downarrow$  電子が局在している場合と、B 格子に  $\uparrow$  電子が局在している場合には、s 電子のスピンの向きと f スピンの向きが反平行 (anti-parallel) に結合しているので、共通のポテンシャル  $\Sigma_a$  を用いることができる。

以上のことを考慮して、非摂動ハミルトニアンとして、次の形を仮定する。

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

ここで、 $a_{m\sigma}^\dagger$ 、 $a_{m\sigma}$  は各々  $m$ -サイトで電子スピン  $\sigma$  をもつフニエ関数の生成、消滅演算子で、 $\varepsilon_{mn}$  は  $m, n$  サイト間の遷移エネルギーである。第2項は、 $m$  サイトで電子スピン  $\sigma$  をもつフ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ている。具体的には、先に述べた通り、 $\Sigma_p$  または  $\Sigma_a$  を取る。つまり、

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

$$\Sigma_{(m, \sigma)} = \Sigma_a \begin{cases} m=A \text{ and } \sigma=\downarrow \\ m=B \text{ and } \sigma=\uparrow \end{cases} \quad (2.26b)$$

という値を取る。

### 2.2 エネルギー固有値

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  $\downarrow$  は対称的であるべきである。このことを考慮に入れて、まず  $\uparrow$  電子に着目し、波数ベクトル  $k$  のブロッホ状態を

$$|k\uparrow\rangle = c_A |Ak\uparrow\rangle + c_B |Bk\uparrow\rangle \quad (2.3)$$

と表わそう。

ただし、 $|Ak\uparrow\rangle$ 、 $|Bk\uparrow\rangle$  はそれぞれ、部分格子 A と B に関連したブロッホ状態で、

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

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

で定義される。(2.4) 式中の右辺の和は、部分格子系 A、B に属する位置ベクトル  $R_A$ 、 $R_B$  について実行されるため、部分格子の数  $N/2$  で規格化されている。

次に、固有値方程式

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

を解くことを考えよう。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。

ここで、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 (2.6) の左側から、 $\langle Ak\uparrow |$  または  $\langle Bk\uparrow |$  をかけると、次の連立方程式が得られる。

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

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

式 (2.8) に出てきた行列要素は次式で与えられる。

$$K_{AA} = \langle Ak\uparrow | K | Ak\uparrow \rangle = \Sigma_p \quad (2.9a)$$

$$K_{BB} = \langle Bk\uparrow | K | Bk\uparrow \rangle = \Sigma_a \quad (2.9b)$$

$$K_{AB} = \langle Ak\uparrow | K | Bk\uparrow \rangle = \sum_d \varepsilon(d) e^{ik \cdot d} = \varepsilon(k) \quad (2.9c)$$

$$K_{BA} = \langle Bk \uparrow | K | Ak \uparrow \rangle = \sum_{\Delta} \epsilon(\Delta) e^{-ik \cdot \Delta} = \epsilon(k) \quad (2.9d)$$

ただし、 $m$  と  $n$  とが最隣接格子のときの遷移エネルギーを  $\epsilon(\Delta)$  と記す。つまり、最隣接格子ベクトル  $\Delta = R_m - R_n$  に対して、

$$\epsilon(\Delta) = \epsilon_{mn} \quad (2.10)$$

とおくことにする ((2.9c) と (2.9d) の  $\epsilon(k)$  のかわりに Ref. 1) では  $-\epsilon(k)$  と書いているが本論文のように統一する)。bcc 構造では、最隣接格子は異なる部分格子系に属するので、 $K_{AA}$  や  $K_{AB}$  には  $\epsilon_{mn}$  は入ってこない。

さて、(2.9) 式の行列要素を (2.8) 式に代入すると、係数  $c_A$ ,  $c_B$  を満たすべき連立方程式として、次の表現を得る。

$$c_A(\Sigma_p - E(k)) + c_B \epsilon(k) = 0 \quad (2.11a)$$

$$c_A \epsilon(k) + c_B(\Sigma_a - E(k)) = 0 \quad (2.11b)$$

係数  $c_A$ ,  $c_B$  が物理的に意味をもつためには、次の永年方程式を満たす必要がある。

$$\begin{vmatrix} \Sigma_p - E(k) & \epsilon(k) \\ \epsilon(k) & \Sigma_a - E(k) \end{vmatrix} = 0 \quad (2.12)$$

これから、

$$(E(k) - \Sigma_p)(E(k) - \Sigma_a) - (\epsilon(k))^2 = 0 \quad (2.13a)$$

すなわち、

$$\therefore E(k) = \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) \pm \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon(k)^2}}{2} \quad (2.13b)$$

ここで現われた 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。

$$E_p(k) = \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon(k)^2}}{2} \quad (2.14a)$$

$$E_a(k) = \frac{(\Sigma_p + \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon(k)^2}}{2} \quad (2.14b)$$

### 2.3 固有状態 (電子スピン $\uparrow$ の場合)

さて、前回の論文 (Ref. 1) で、再考を要する問題が、ここに示す固有状態の問題である。通常の量子力学の問題であれば、ハミルトニアンはエルミートであり、固有エネルギーは実数値をとる。そして、式 (2.14) に示すように、2 つのエネルギー固有値をもつ場合には、そ

の固有状態は直交する。

ところが、式 (2.1) で与えたコヒーレント・ポテンシャルは一般に実数とは限らないから、式 (2.14) で表わされた固有エネルギーもまた実数とは限らない。そのために、2 つの固有値に属する固有状態は直交するとは限らない。このことをもう少し検討してみよう (強磁性半導体の場合には、固有状態は電子スピンの  $\uparrow$  と  $\downarrow$  で表現でき、電子スピンの固有値によってすでに直交しているため、固有エネルギーが複素数でも問題とならなかったのである)。

コヒーレント・ポテンシャル  $\Sigma_p$  と  $\Sigma_a$  が複素数であるときのような困難を生じるかを、もう少し詳しく検討してみよう。エネルギー固有値  $E_p$ ,  $E_a$  に属する固有状態を求めるには、式 (2.3) に出てきた係数の  $c_A$ ,  $c_B$  がわかればよい。これらの係数は当然、 $E_p$  と  $E_a$  に依存するから、 $\{c_A(p), c_B(p)\}$ ,  $\{c_A(a), c_B(a)\}$  と表すことにすると、式 (2.11) より

$$\frac{c_B(p)}{c_A(p)} = \frac{E_p(k) - \Sigma_p}{\epsilon(k)} \quad (2.15a)$$

$$= -\frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon(k)^2}}{2\epsilon(k)} \quad (2.15b)$$

同様に、

$$\frac{c_B(a)}{c_A(a)} = \frac{E_a(k) - \Sigma_p}{\epsilon(k)} \quad (2.16a)$$

$$= -\frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon(k)^2}}{2\epsilon(k)} \quad (2.16b)$$

である。

さて、このような性質をもつ  $c_A$ ,  $c_B$  の組に対して、 $E(k) = E_p(k)$  の固有値に属する  $\uparrow$  電子の固有状態は

$$|pk \uparrow\rangle = c_A(k) |Ak \uparrow\rangle + c_B(p) |Bk \uparrow\rangle \quad (2.17)$$

同様に、 $E(k) = E_a(k)$  の固有値に属する  $\uparrow$  電子の固有状態は

$$|ak \uparrow\rangle = c_A(a) |Ak \uparrow\rangle + c_B(a) |Bk \uparrow\rangle \quad (2.18)$$

となる。 $E_p$ ,  $E_a$  が複素数の場合には、これらの 2 つの状態は一般に直交しない。この問題は、状態の規格条件にも関係するので、後に詳しく議論する。

式 (2.17) と (2.18) から、

$$|Ak \uparrow\rangle = \frac{1}{D} [c_B(a) |pk \uparrow\rangle - c_B(p) |ak \uparrow\rangle] \quad (2.19)$$

$$|Bk \uparrow\rangle = -\frac{1}{D}[c_A(a)|pk \uparrow\rangle - c_A(p)|ak \uparrow\rangle] \quad (2.20)$$

ただし,

$$D = c_A(p)c_B(a) - c_A(a)c_B(p) \quad (2.21)$$

を得る。式(2.19)-(2.21)は、式(2.17)と(2.18)を逆に解いた結果である。

次に、ワニエ関数を記述しよう。いま、部分格子系Aに属する1つのサイトに着目し、これを0-サイトとする。すると、0-サイトに局在する↑電子のワニエ関数は、

$$|0 \uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k |Ak \uparrow\rangle \quad (2.22a)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k \frac{1}{D}[c_B(a)|pk \uparrow\rangle - c_B(p)|ak \uparrow\rangle] \quad (2.22b)$$

となる。ただし、(2.19)を使った。

#### 2.4 固有状態の直交化の問題

式(2.7)で示したように、状態 $|Ak \uparrow\rangle$ と $|Bk \uparrow\rangle$ は規格直交化されている。一方、平行結合状態 $|pk \uparrow\rangle$ と反平行結合状態 $|ak \uparrow\rangle$ とは、固有エネルギー $E_p$ と $E_a$ が複素数の場合には直交しない。ただし、ブロッホ状態であるから、 $k$ の異なる2つの状態は直交するとしてよい。

そこで次に、 $|ak \uparrow\rangle$ と $|pk \uparrow\rangle$ との重なり積分 $L(k)$ を求めると次のようになる。

$$L(k) = \langle ak \uparrow | pk \uparrow \rangle \quad (2.23a)$$

$$= c_A(a)^*c_A(p) + c_B(a)^*c_B(p) \quad (2.23b)$$

もしも $|ak \uparrow\rangle$ と $|pk \uparrow\rangle$ が直交化するのならば、 $L(k) = 0$ となるべきである。しかし、一般にはそうではない。

次に、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) $P$ を次式で定義する。

$$P = \frac{1}{\omega - K} \quad (2.24)$$

$K$ の固有値は $E_p$ と $E_a$ で、その固有状態は $|pk \uparrow\rangle$ と $|ak \uparrow\rangle$ であることを考慮して、 $P$ のワニエ表示での対角成分を求めてみると、

$$F_+(\omega) = \langle 0 \uparrow | P | 0 \uparrow \rangle \quad (2.25a)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{|D|^2} [c_B(a)^* \langle pk \uparrow | - c_B(p)^* \langle ak \uparrow | ] \times P [c_B(a) | pk \uparrow \rangle - c_B(p) | ak \uparrow \rangle] \quad (2.25b)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{|D|^2} \left\{ \frac{|c_B(a)|^2}{\omega - E_p(k)} + \frac{|c_B(p)|^2}{\omega - E_a(k)} - \frac{c_B(p)^*c_B(a)}{\omega - E_p(k)} L(k) - \frac{c_B(a)^*c_B(p)}{\omega - E_a(k)} L(k)^* \right\} \quad (2.25c)$$

式(2.25c)の後半に出てきた $L(k)$ に関する係数は、 $|pk \uparrow\rangle$ と $|ak \uparrow\rangle$ とが直交しないことから生じている。もし直交すると仮定できるとするならば、それはどのような条件が必要であろうか。それを調べるために、(2.23)式で $L(k) = 0$ と置いてみる。すると

$$c_A(a)^*c_A(p) + c_B(a)^*c_B(p) = 0 \quad (2.26)$$

より、

$$\frac{c_B(p)}{c_A(p)} = -\frac{c_A(a)^*}{c_B(a)^*} \quad (2.27)$$

を得る。ところが、(2.15)式より

$$\frac{c_B(p)}{c_A(p)} = -\frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon(k)^2}}{2\epsilon(k)} \quad (2.28)$$

他方、(2.16)式の逆数を考えることより、

$$\frac{c_A(a)}{c_B(a)} = -\frac{2\epsilon(k)}{(\Sigma_p - \Sigma_a) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon(k)^2}} \quad (2.29a)$$

$$= +\frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon(k)^2}}{2\epsilon(k)} \quad (2.29b)$$

ここで与えた(2.28)式と(2.29b)式が、(2.27)式を満足させるための必要十分条件は、 $\Sigma_p - \Sigma_a$ が実数であることである。換言すれば、 $|pk \uparrow\rangle$ と $|ak \uparrow\rangle$ とが直交する必要十分条件は、 $\Sigma_p$ と $\Sigma_a$ の虚数部が等しいことである。このとき、係数の比 $c_B(p)/c_A(p)$ と $c_A(a)/c_B(a)$ と実数となる。

次に、 $|pk \uparrow\rangle$ と $|ak \uparrow\rangle$ が規格化されていることを仮定しよう。このための条件は、式(2.17)と(2.18)より、

$$|c_A(p)|^2 + |c_B(p)|^2 = 1 \quad (2.30a)$$

$$|c_A(a)|^2 + |c_B(a)|^2 = 1 \quad (2.30b)$$

である。

さらにこのとき、 $|Ak \uparrow\rangle$ と $|Bk \uparrow\rangle$ の規格化条件

は, (2.19) 式と (2.20) 式から

$$|D|^2 = |c_B(p)|^2 + |c_B(a)|^2 \quad (2.31)$$

および

$$|D|^2 = |c_A(p)|^2 + |c_A(a)|^2 \quad (2.32)$$

となる。(2.31) 式と (2.32) 式の両辺を加えて (2.30) 式と比較すると,  $|D|^2=1$  つまり

$$|D|^2 = |c_A(p)c_B(a) - c_A(a)c_B(p)|^2 = 1 \quad (2.33)$$

が得られる。

次に, 式 (2.15) と (2.30) を組み合わせることにより,

$$|c_A(p)|^2 = \frac{\varepsilon^2}{|E_p - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.34a)$$

$$|c_B(p)|^2 = \frac{|E_p - \Sigma_p|^2}{|E_p - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.34b)$$

同様に,

$$|c_A(a)|^2 = \frac{\varepsilon^2}{|E_a - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.35a)$$

$$|c_B(a)|^2 = \frac{|E_a - \Sigma_p|^2}{|E_a - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.35b)$$

を得る。ただし,  $\varepsilon(k)$  を  $\varepsilon$ ,  $E_p(k)$ ,  $E_a(k)$  をそれぞれ  $E_p$ ,  $E_a$  と書いた。

式 (2.34) または (2.35) で与えた係数が, 式 (2.30) を満足するのはすぐわかる。式 (2.31) と (2.32) からは次の式が導かれる。

$$|c_A(p)|^2 + |c_A(a)|^2 = 1 \quad (2.36a)$$

$$|c_B(p)|^2 + |c_B(a)|^2 = 1 \quad (2.36b)$$

この証明は Appendix に示す。

式 (2.30) と (2.36) を並べて比較することにより

$$|c_A(p)|^2 = |c_B(a)|^2 \quad (3.37a)$$

$$|c_A(a)|^2 = |c_B(p)|^2 \quad (3.37b)$$

がただちに導かれる。

さらに,  $|pk \uparrow\rangle$  と  $|ak \uparrow\rangle$  とが規格直交化しているのならば, 式 (2.25) と (2.37a) から,

$$F_+(\omega) = \frac{2}{N} \sum_k \left\{ \frac{|c_A(p)|^2}{\omega - E_p(k)} + \frac{|c_B(p)|^2}{\omega - E_a(k)} \right\} \quad (2.38)$$

となる。

このように,  $|pk \uparrow\rangle$  と  $|ak \uparrow\rangle$  の規格直交化を仮定することは, 定式化を非常に簡単にする。このような仮定がどのような結果を生じるかは, 数値計算によって示すことになる。

## 2.5 状態密度の計算

これまでの表式は, 波数ベクトル  $k$  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  $\varepsilon$  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)。

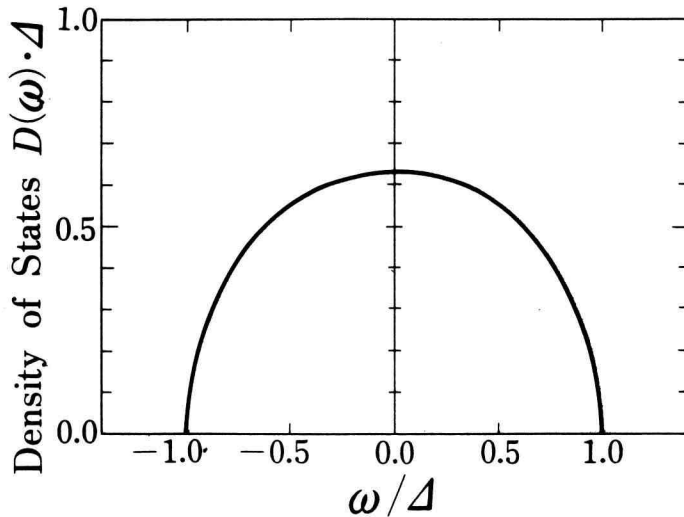


Fig. 1.

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi \Delta} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \quad (2.39)$$

この関数数は Ref. 1 でも採用したもので、

$$\int_{-d}^d \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (2.40)$$

と規格化されている。この場合のバンド幅に相当するのは  $2\Delta$  である。

この状態密度関数を利用するために、これまでの表式において、

$$\varepsilon(k) \longrightarrow \varepsilon \quad (2.41)$$

$$\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \longrightarrow \int_{-d}^d d\varepsilon \rho(\varepsilon) \quad (2.42)$$

等の置き換えを行なう。もちろん、(2.42) 式においては、第 1 ブリルアン・ゾーンにある状態の数が  $(N/2)$  であることが考慮されている。

このとき、(2.38) 式は

$$F_{\uparrow}(\omega) = \int_{-d}^d d\varepsilon \rho(\varepsilon) \left( \frac{|c_A(\mathbf{p})|^2}{\omega - E_p} + \frac{|c_B(\mathbf{p})|^2}{\omega - E_a} \right) \quad (2.43)$$

となる。ただし、(2.34) 式より

$$|c_A(\mathbf{p})|^2 = \frac{\varepsilon^2}{|E_p - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.44a)$$

$$|c_B(\mathbf{p})|^2 = \frac{|E_p - \Sigma_p|^2}{|E_p - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.44b)$$

である。また、

$$E_p = \frac{\Sigma_p + \Sigma_a - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon^2}}{2} \quad (2.45a)$$

$$E_a = \frac{\Sigma_p + \Sigma_a + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon^2}}{2} \quad (2.45b)$$

である。

このとき、 $\uparrow$  電子に対する状態密度は、

$$D_{\uparrow}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\uparrow}(\omega) \quad (2.46)$$

で計算される。

電子スピン  $\downarrow$  の場合には、 $\uparrow$  電子の結論で、 $\Sigma_a$  と  $\Sigma_p$  を入れかえたものとなる。エネルギー固有値  $E_p$  と  $E_a$  は変わらない。そのため、

$$E_p - \Sigma_a = \frac{\Sigma_p - \Sigma_a + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon^2}}{2} \quad (2.47a)$$

$$E_p - \Sigma_p = -\frac{\Sigma_p - \Sigma_a + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon^2}}{2} \quad (2.47b)$$

であり、

$$(E_p - \Sigma_a)(E_p - \Sigma_p) = \varepsilon^2 \quad (2.48)$$

という関係がある。式 (2.44) で、 $\Sigma_p$  を  $\Sigma_a$  を入れ替えた後に、(2.48) の関係式を使うと、

$$(2.44a) \rightarrow \frac{\varepsilon^2}{|E_p - \Sigma_a|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.49a)$$

$$= \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^4 / |E_p - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.49b)$$

$$= \frac{|E_p - \Sigma_p|^2}{|E_p - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.49c)$$

$$= |c_B(\mathbf{p})|^2 \quad (2.49d)$$

同様に、

$$(2.44b) \rightarrow \frac{|E_p - \Sigma_a|^2}{|E_p - \Sigma_a|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.50a)$$

$$= \frac{\varepsilon^4 / |E_p - \Sigma_p|^2}{\varepsilon^4 / |E_p - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.50b)$$

$$= \frac{\varepsilon^2}{|E_p - \Sigma_p|^2 + \varepsilon^2} \quad (2.50c)$$

$$= |c_A(\mathbf{p})|^2 \quad (2.50d)$$

となる。これらの結果より、 $\downarrow$  電子に対しては、

$$F_{\downarrow}(\omega) = \int_{-d}^d d\varepsilon \rho(\varepsilon) \left( \frac{|c_B(\mathbf{p})|^2}{\omega - E_p} + \frac{|c_A(\mathbf{p})|^2}{\omega - E_a} \right) \quad (2.51)$$

となることがわかる。

## 2.6 CPA の適用

これまで述べてきたことは、f スピンが古典スピンであっても量子スピンであってもそのまま成立することに注意しよう。ただし、実際の数値計算は古典スピンに対して実行した。これは  $IS = (\text{一定})$  としたまま、 $S \rightarrow \infty$  の極限をとることを意味する。

CPA の取扱いは、前論文 (13) で扱った方法を使った。つまり、0-サイトでの  $t$  行列を

$$\langle 0 \uparrow | t | 0 \uparrow \rangle_{\text{av}} = \langle 0 \downarrow | t | 0 \downarrow \rangle_{\text{av}} = 0 \quad (2.52)$$

とする条件から、コヒーレント・ポテンシャルを決めた。このとき、 $F_{\uparrow}(\omega) = \langle 0 \uparrow | P | 0 \uparrow \rangle_{\text{av}}$  と  $F_{\downarrow}(\omega) = \langle 0 \downarrow | P | 0 \downarrow \rangle_{\text{av}}$  として、式 (2.43) と (2.51) で与えたものを使うほかは、強磁性半導体に対する扱いと全く同じである。論文 (13) で開発した新しい計算方法は、CPA の計算時間を大幅に短縮した。

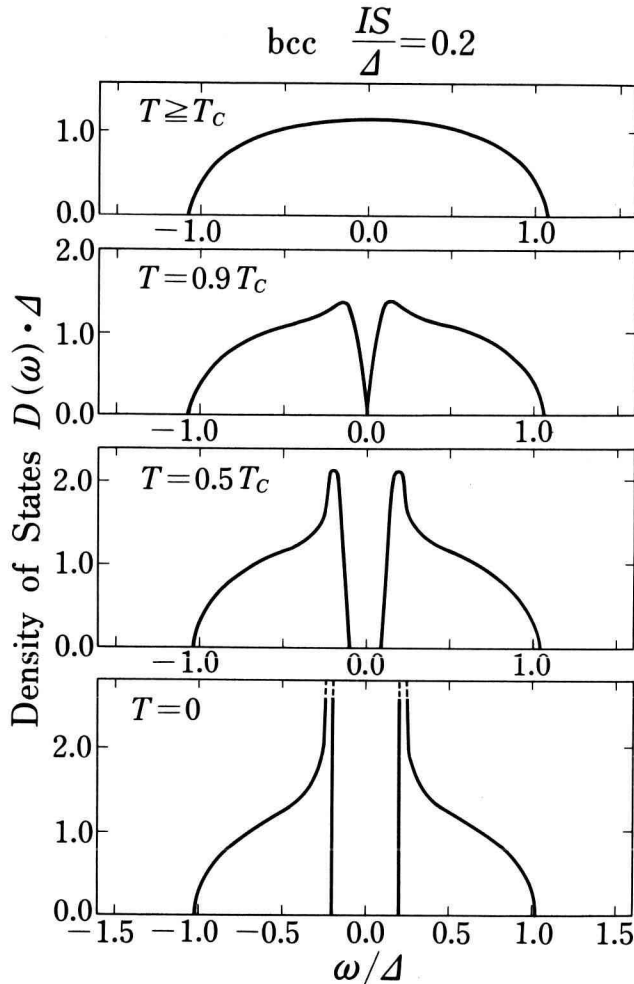


Fig. 2.

### 3. 数値計算の結果と問題点

Fig. 2~Fig. 4 に、この研究で求めた状態密度を示す。横軸はエネルギー  $\omega/\Delta$  で、縦軸に状態密度  $D(\omega) \cdot \Delta$  をプロットしてある。古典スピンの場合には  $D(\omega) = D(-\omega)$ 、つまりエネルギーの原点に対して対称になる。温度は  $T \geq T_N$  (このとき  $M = \langle S_z \rangle_{\text{av}}/S = 0.0$ )、 $T = 0.9 T_N$  ( $M = 0.39$ )、 $T = 0.5 T_N$  ( $M = 0.79$ ) および  $T = 0$  ( $M = 1.0$ ) に対して示した (図中では  $T_N$  を  $T_c$  とかいてある)。

Fig. 2 に示した  $IS/\Delta = 0.2$  は、 $T \geq T_N$  で、バンドがまだ円型を維持している場合である。温度が  $T_N$  (ニール

温度) 以上では、f スピンの向きは完全にランダムであるとして扱われるので、通常の CPA に一致する (戦磁性の  $T \geq T_c$  と同じである)。温度が  $T_N$  以下になると、部分格子 A と B で反対方向に磁化を生じる。その磁化の熱平均値が  $M$  である。Fig. 2 を見ると、温度  $T_N$  以下で磁化が始まるとすぐに、バンド分裂が始まることがわかる。 $T = 0.9 T_N$  では分裂したバンドの間隔は非常に小さいが、 $T = 0.5 T_N$  では有限の大きさになることがはっきりとわかる。このように、 $IS/\Delta$  が小さい場合でも、磁化が生じるとすぐにバンド分裂を生じることを明らかにしたのは、今回の研究の大きな成果である。Fig. 2 では、状態密度の和は ( $\uparrow$  電子と  $\downarrow$

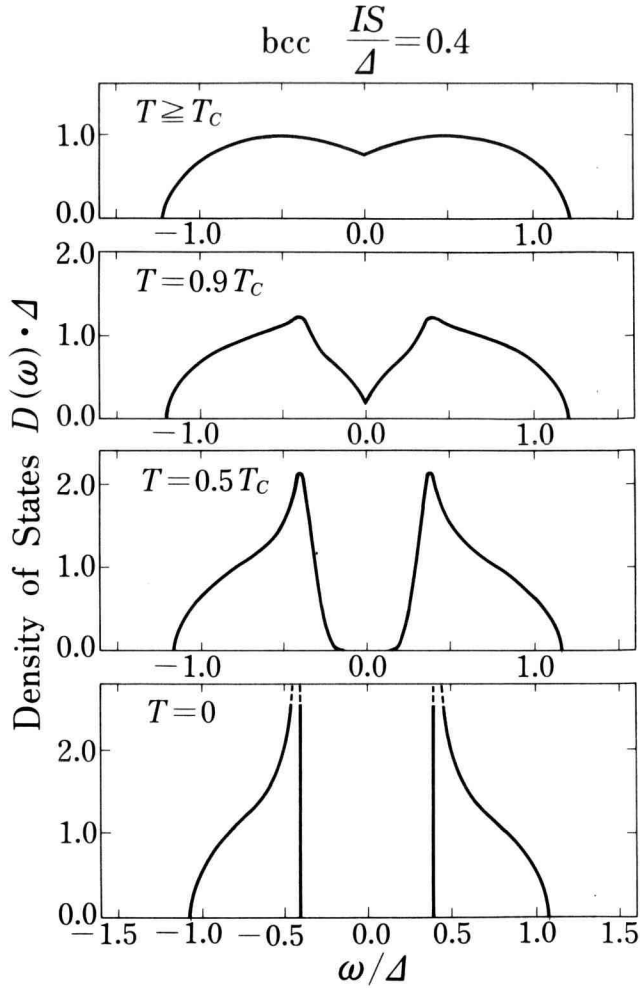


Fig. 3.

電子の合計で示してある)

$$\int_{-\infty}^{\infty} D(\omega) \cdot d\omega = 2 \quad (3.1)$$

を満たすことが数値計算で確かめられている。とくに、 $T=0$  では、

$$\text{平行状態は } -\sqrt{\Delta^2 + (IS)^2} \leq \omega \leq -IS$$

$$\text{反平行状態は } IS \leq \omega \leq \sqrt{\Delta^2 + (IS)^2}$$

のエネルギー領域で、状態密度が0でない値をもつ。そして、それらの状態密度は

$$D(\omega) \cdot \Delta = \frac{4}{\pi \Delta} \frac{|\omega|}{\left\{ \frac{\Delta^2 + (IS)^2 - \omega^2}{\omega^2 - (IS)^2} \right\}^{\frac{1}{2}}} \quad (3.2)$$

となることは Ref. 1 に示した。式 (3.2) で与えた状態密度は  $\omega = \pm IS$  で発散するが、状態密度の和は条件 (3.1) 式を満たす。

Fig. 3 は  $IS/\Delta = 0.4$  の場合である。この場合には  $T \geq T_N$  で、連続したバンドではあるが、平行結合状態と反平行結合状態とに対応したピークがある。温度が  $T_N$  以下になるとそのピークは鋭くなり、ピークとなるエネルギー値は  $\omega = \pm IS$  に近づく傾向をもつ。

Fig. 4 は  $IS/\Delta = 0.6$  の場合である。この場合には  $T$



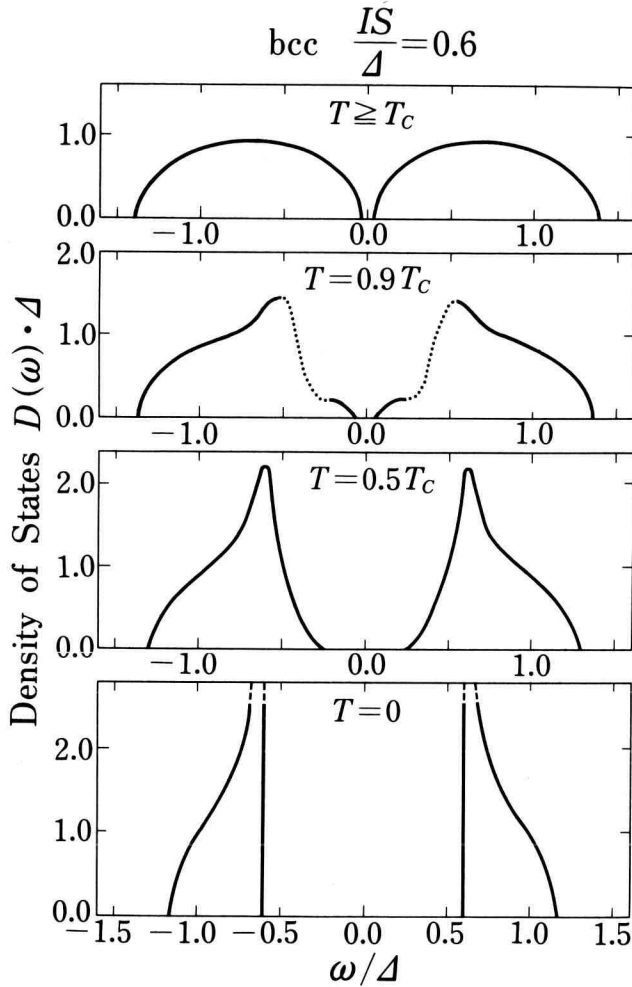


Fig. 4.

$\geq T_N$  で、平行結合状態と反平行結合状態にすでに分離している。従って、全温度領域で、バンドの分離が生じているものと考えられる。しかし、数値計算の結果は、 $T=0.9T_N$  のとき、あるエネルギー領域では計算結果が収束しないということになる（図中では破線で示した）。CPA の計算方法に原因があるかと思つて、新しい計算方法（論文（13）参照）だけではなく、旧来の変分法でも詳しく調べたが、 $t$ -行列の値は最小値はとるが

$$\langle t \rangle_{av} = 0 \quad (3.3)$$

という条件を満足するとはみなすことができなかつ

た。一方、 $T=0.5T_N$  のときは収束し、状態密度の和は約  $0.953(\times 2)$  となった。つまり、小さい磁化が生じる温度領域で、収束がうまくいかなかった。

この原因は、平行結合状態と反平行結合状態の直交を仮定したことにある。もう少し説明を加えると、式 (2.27) のところに述べたように、 $\Sigma_p - \Sigma_a$  が実数であると仮定したことにある。このような仮定にもとづいて、2つの状態は直交するとしたが、得られた結果は  $\Sigma_p - \Sigma_a$  が実数とはなっていない。すなわち、つじつまが合う仮定とはなっていない。この不合理性は、fcc 構造でも同様なので、これに続く論文の中で詳しく議論す

ることとする。

### 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 B19 (1995) 208.
- 2) 高橋正雄・三井和博・梅原雅捷；神奈川工科大学研究報告 B19 (1995) 219.

### Appendix 式 (2.36) の証明

ここでは、本文中に示した式 (2.36) を証明する。  
まず、式 (2.34a) と (2.35a) より

$$|c_A(p)|^2 = \frac{\epsilon^2}{|E_p - \Sigma_p|^2 + \epsilon^2} \quad (\text{A.1})$$

$$|c_A(a)|^2 = \frac{\epsilon^2}{|E_a - \Sigma_p|^2 + \epsilon^2} \quad (\text{A.2})$$

である。ここで、(2.14) 式より、

$$E_p = \frac{\Sigma_p - \Sigma_a - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon^2}}{2} \quad (\text{A.3})$$

$$E_a = \frac{\Sigma_p + \Sigma_a + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon^2}}{2} \quad (\text{A.4})$$

である。これから、

$$E_p - \Sigma_p = -\frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon^2}}{2} \quad (\text{K.5})$$

これを、(A.1) 式に代入すると、

$$|c_A(p)|^2 = \frac{4\epsilon^2}{|(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon^2}|^2 + 4\epsilon^2} \quad (\text{A.6a})$$

つまり

$$|c_A(p)|^2 = \frac{\sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon^2} - (\Sigma_p - \Sigma_a)}{2\sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon^2}} \quad (\text{A.6b})$$

同様に、(A.2) 式に

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

を代入して

$$|c_A(a)|^2 = \frac{\sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon^2} + (\Sigma_p - \Sigma_a)}{2\sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\epsilon^2}} \quad (\text{A.8})$$

を得る。式 (A.6) と (A.8) から、

$$|c_A(p)|^2 + |c_A(a)|^2 = 1 \quad (\text{A.9})$$

を得る。

式 (A.9) は、A サイトに平行結合状態 (p) の電子が存在する確率と反結合状態 (a) の電子が存在する確率の和は 1 であることを意味する。つまり、A サイトでは、結合しないし反結合状態の数が、合計 1 だけである。