

s-f モデルと電子状態 (13)

— CPA の新しい計算方法 —

高橋 正雄*・三井 和博*・梅原 雅捷**

s-f Model and Electron States (13)

— New Calculation Method for the CPA —

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

Abstract

For the s-f model in ferromagnetic semiconductors, it is necessary to treat simultaneously multiple scattering on the same site and scattering due to f spin correlation between different sites.

In order to investigate the effect of multiple scattering, the CPA (Coherent Potential Approximation) using t -matrix formula is very useful. So far, the variation method by using computer calculation, however, needs a lot of time.

In this paper, we propose a new calculation method for the CPA using t -matrix formula and show that this method shortens the computer calculation time considerably.

1. はじめに

私達は s-f モデルにもとづいて、磁性半導体で観測される磁性と伝導の諸現象を説明しようと試みてきた。特に強磁性半導体の場合には、同サイトでの多重散乱と、異なるサイトに置かれた f スピン間での相関による散乱とが、同時に両方とも重要な役割を果たすことも指摘してきた^{1,2)}。

ところで、温度がキュリー温度 (T_c) 以下では、強磁性ではある方向 (z 方向とする) に一様な磁化が生じる。つまり、f スピンの熱平均値はゼロでない ($\langle S_{iz} \rangle_{av} \neq 0$)。このような場合でも CPA は同じサイトでの多重散乱を取り入れることができる。

現在までのところ、一様な磁化が発生した場合の CPA には 2 つの方法がある。1 つは Kubo によって提案された Locator を使う方法である³⁾。もう 1 つは高橋が導出した t -行列による方法である⁴⁾。これらの 2 つの方法は等価であることはすでに証明されている⁵⁾。

これら 2 つの CPA は、多重散乱を取り込むという

点では同等であるが、異なるサイト間での f スピン相関による散乱を取り扱うには t -行列による方法の方が便利である。しかしながら、 t -行列による方法は、自己エネルギー Σ を決定するのに従来変分法を使っていたため大変計算時間がかかった。具体的にいうと、 $T < T_c$ では、 Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} の各々に対して、実部と虚部をパラメータ (変数) とするため、合計 4 つの独立変数にして、 $\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle = 0$ と $\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle = 0$ という条件を満たすようにしていた訳である⁴⁾。このため、CPA の計算だけで多くの手間がかかり、もう 1 つの要件である f スピン相関による散乱にまで着手できなかった。

この論文では、CPA の新しい数値計算法を提案し、それにもとづいて、だ円型バンドをもつ強磁性半導体の伝導バンドの温度変化を調べる。そして、この計算方法が従来の変分法に比較して、著しく計算時間を短縮した方法であることを報告する。

2. グリーン関数法

2.1 s-f モデルとグリーン関数法

従来同様に s-f モデルを、次のハミルトニアンで定義する。

1995 年 9 月 12 日受理

* 一般教育科

** 無機材質研究所

$$\mathbf{H}_t = \mathbf{H}_s + \mathbf{H}_{sf} + \mathbf{H}_f \quad (2.1)$$

$$\mathbf{H}_s = \sum_{k\mu} \varepsilon_k a_{k\mu}^\dagger a_{k\mu} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{H}_{sf} = -I \sum_{l\nu} a_{l\nu}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}_l a_{l\nu} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{H}_f = -\sum_{l\nu} J_{l\nu} S_l \cdot S_{l\nu} \quad (2.4)$$

次に、1粒子グリーン関数 G を

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

と定義する。ここで

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_s + \mathbf{H}_{sf} \quad (2.6)$$

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 \mathbf{K} を導入する。

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

ここで Σ_μ (すなわち Σ_\uparrow と Σ_\downarrow) は、コヒーレント・ポテンシャルで、s 電子のスピンの μ が \uparrow か \downarrow かによって異なる値をとる複素変数である。

この \mathbf{K} に対応した摂動ポテンシャル \mathbf{V} は、

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

$$= \sum_{l\nu} a_{l\nu}^\dagger (-I \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S} - \Sigma_\mu \delta_{\mu\nu}) a_{l\nu} \quad (2.8b)$$

である。このことを、各サイトからの寄与分の \mathbf{v}_l を用いて、

$$\mathbf{V} = \sum_l \mathbf{v}_l \quad (2.9a)$$

$$\mathbf{v}_l = -I \sum_{\mu\nu} a_{l\nu}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}_l a_{l\nu} - \sum_\mu \Sigma_\mu a_{l\mu}^\dagger a_{l\mu} \quad (2.9b)$$

と書くこともできる。

非摂動グリーン関数 \mathbf{P} を、非摂動ハミルトニアン \mathbf{K} を用いて、

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

と定義する。すると、グリーン関数 \mathbf{G} は、 \mathbf{P} と \mathbf{V} を用いて展開することができ、

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \mathbf{P} + \mathbf{PVP} + \mathbf{PVPVP} + \cdots \\ &= \mathbf{P} + \mathbf{P} \sum_l \mathbf{Pv}_l \mathbf{P} + \mathbf{P} \sum_{lm} \mathbf{v}_l \mathbf{Pv}_m \mathbf{P} \end{aligned} \quad (2.11)$$

と表せる。ここで、f スピン演算子は、 \mathbf{v}_l には含まれるが \mathbf{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、サイト l での多重散

乱を表す t 行列を

$$t_l = \mathbf{v}_l [1 - \mathbf{Pv}_l]^{-1} \quad (2.12a)$$

$$= \mathbf{v}_l + \mathbf{v}_l \mathbf{Pv}_l + \mathbf{v}_l \mathbf{Pv}_l \mathbf{Pv}_l + \cdots \quad (2.12b)$$

と定義する。この t 行列を使えば、グリーン関数 \mathbf{G} は、

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \mathbf{P} + \mathbf{P} \sum_l t_l \mathbf{P} + \mathbf{P} \sum_l t_l \mathbf{P} \sum_{m(\neq l)} t_m \mathbf{P} \\ &\quad + \mathbf{P} \sum_l t_l \mathbf{P} \sum_{m(\neq l)} t_m \mathbf{P} \sum_{n(\neq m)} t_n \mathbf{P} + \cdots \end{aligned} \quad (2.13)$$

となる。式 (2.13) の中で、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、次のような 2×2 の行列である。

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

$$= \begin{pmatrix} t_{l\uparrow} & t_{l\downarrow} \\ t_{l\uparrow} & t_{l\downarrow} \end{pmatrix} \quad (2.14b)$$

ここでは、S 電子のスピンの \uparrow または \downarrow に対応する l サイトでのワニエ関数を $|l\uparrow\rangle, |l\downarrow\rangle$ で表わしている。 $t_{l\uparrow}$ は $\langle l\uparrow | t | l\uparrow \rangle$ のサイトの記号を略記したものである (行列要素は l によらない)。

前回までの研究と同様に、表式を簡明にするために次の記号を導入する。

$$\mathbf{V}_\uparrow = -I S_z - \Sigma_\uparrow \quad (2.15)$$

$$\mathbf{V}_\downarrow = +I S_z - \Sigma_\downarrow \quad (2.16)$$

$$\mathbf{U}_\uparrow = -I(S_z - 1) - \Sigma_\uparrow \quad (2.17)$$

$$\mathbf{U}_\downarrow = +I(S_z + 1) - \Sigma_\downarrow \quad (2.18)$$

$$\mathbf{W}_\uparrow = I^2[S(S+1) - S_z^2 - S_z] \quad (2.19a)$$

$$= I^2 S_- S_+ \quad (2.19b)$$

$$\mathbf{W}_\downarrow = I^2[S(S+1) - S_z^2 + S_z] \quad (2.20a)$$

$$= I^2 S_+ S_- \quad (2.20b)$$

また、非摂動グリーン関数 \mathbf{P} のワニエ表示の対角要素 F_\uparrow と F_\downarrow を次式で定義する。

$$F_\uparrow = \langle l\uparrow | \mathbf{P} | l\uparrow \rangle = P_{\uparrow\uparrow} \quad (2.21a)$$

$$F_\downarrow = \langle l\downarrow | \mathbf{P} | l\downarrow \rangle = P_{\downarrow\downarrow} \quad (2.21b)$$

これらの記号を用いて、s-f 交換相互作用の t 行列の要素は最終的に次のようになる。

$$t_{\uparrow\uparrow} = \frac{V_{\downarrow} + F_{\downarrow}(V_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})}{1 - F_{\downarrow}U_{\downarrow} - F_{\uparrow}[V_{\uparrow} + F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})]} \quad (2.22)$$

$$t_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{1 - F_{\downarrow}U_{\downarrow} - F_{\uparrow}[V_{\uparrow} + F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})]} \times (-IS_{-}) \quad (2.23a)$$

$$= (-IS_{-})$$

$$\times \frac{1}{1 - F_{\uparrow}U_{\uparrow} - F_{\downarrow}[V_{\downarrow} + F_{\uparrow}(W_{\downarrow} - V_{\downarrow}U_{\uparrow})]} \quad (2.23b)$$

同様に,

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

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

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

3. CPA の新しい計算法

3.1 f スピン系に対する熱平均の取り方

f スピン系に対しては、通常分子場近似を適用する。この近似では、状態と Z は

$$Z = \text{Tr} \rho = \sum_{S_z = -S}^S \exp(\beta g \mu \bar{H} S_z) \quad (3.1a)$$

$$= \frac{\sinh \left[\beta g \mu \bar{H} \left(S + \frac{1}{2} \right) \right]}{\sinh \left[\frac{1}{2} \beta g \mu \bar{H} \right]} \quad (3.1b)$$

と求められる。ここで \bar{H} は、あるサイトでの f スピンが、周囲のサイトから受ける交換相互作用を平均磁場で近似したもので、分子場とよばれる。ボルツマン定数 k_B 、絶対温度 T を用いて、 $\beta \equiv 1/k_B T$ と定義される。 g は g 因子である。

式(3.1)中の $\beta g \mu \bar{H}$ を x とかくと、分子場近似でのキュリー温度 T_C との間に、次の関係がある。

$$x = \beta g \mu \bar{H} = \frac{3 \langle S_z \rangle_{\text{av}}}{S(S+1)} \left(\frac{T_C}{T} \right) \quad (3.2)$$

任意の温度 T に対して、通常分子場近似から f スピンの熱平均値 $\langle S_z \rangle_{\text{av}}$ が求まると、あるサイトの f ス

ピンが固有値 S_z を取る時の確率は

$$\rho(S_z) = \exp(x S_z) / Z \quad (3.3)$$

と求まる。

3.2 CPA の新しい数値計算法

式(2.22)と(2.24)と与えられた $t_{\uparrow\uparrow}$ と $t_{\downarrow\downarrow}$ は、それぞれ S_z だけによって決まる (S_{+} 、 S_{-} は含まれていない)ことに注意しよう。そのため、 $t_{\uparrow\uparrow}$ と $t_{\downarrow\downarrow}$ の熱平均値は、

$$\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{Z} \sum_{S_z = -S}^S t_{\uparrow\uparrow}(S_z) \times \exp(x S_z) \quad (3.4)$$

$$\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{Z} \sum_{S_z = -S}^S t_{\downarrow\downarrow}(S_z) \times \exp(x S_z) \quad (3.5)$$

で求められる。

CPA では、特定の格子点以外にはすべてコヒーレント・ポテンシャル Σ_{μ} が置かれているものと仮定する。そして、その有効ポテンシャル中に置かれた f スピンによる s 電子の多重散乱の効果が 0 になるように、そのコヒーレント・ポテンシャルを決定する。その条件は、次の 2 式である。

$$\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{\text{av}} = 0 \quad (3.6a)$$

$$\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{\text{av}} = 0 \quad (3.6b)$$

(3.6) の条件から、未知数 Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} を求める訳だが、これらは複素数であるため、実数部と虚数部をあわせて独立変数は 4 つあることになる。前回までは、この 4 つの独立変数に対して変分を行ない、未知数 Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} に対する連立方程式でもある (3.6) 式を満たすように Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} を決定していた。しかしこの方法の欠点は、計算時間がかかりすぎることである。そこで、この論文では、(3.6) 式を変分によって満たす条件とするのではなく、 Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} を求める式として変形する。

具体的には次のようにする。 $t_{\uparrow\uparrow}$ 表式の分子を次のように書き直す。

$$V_{\uparrow} + F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow}) = -\Sigma_{\uparrow} [1 + F_{\downarrow}(\Sigma_{\downarrow} - I) - F_{\downarrow}IS_2] + F_{\downarrow}I^2 S(S+1) - I(1 + F_{\downarrow}\Sigma_{\downarrow})S_2 \quad (3.7)$$

次に、 $t_{\uparrow\uparrow}$ の分母にも S_z が含まれるので、それに対する熱平均をとるために、次式で A_{\uparrow} と B_{\uparrow} を定義する。

$$A_{\uparrow} = \frac{1}{S} \left\langle \frac{S_z}{1 - F_{\uparrow} U_{\uparrow} - F_{\uparrow} [V_{\uparrow} + F_{\uparrow} (W_{\uparrow} - V_{\uparrow} U_{\uparrow})]} \right\rangle_{\text{av}} \quad (3.8)$$

$$B_{\uparrow} = \left\langle \frac{1}{1 - F_{\uparrow} U_{\uparrow} - F_{\uparrow} [V_{\uparrow} + F_{\uparrow} (W_{\uparrow} - V_{\uparrow} U_{\uparrow})]} \right\rangle_{\text{av}} \quad (3.9)$$

すぐわかるように、 A_{\uparrow} と B_{\uparrow} の分母は $t_{\uparrow\uparrow}$ の分母に等しい。これを使うと、 $\langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{\text{av}} = 0$ という条件は、

$$\begin{aligned} \langle t_{\uparrow\uparrow} \rangle_{\text{av}} = & -\Sigma_{\uparrow} \{ [1 + F_{\uparrow} (\Sigma_{\uparrow} - I)] B_{\uparrow} - F_{\uparrow} I S A_{\uparrow} \} \\ & + F_{\uparrow} I^2 S (S+1) B_{\uparrow} - I S (1 + F_{\uparrow} \Sigma_{\uparrow}) A_{\uparrow} \\ = & 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

となる。これから、

$$\Sigma_{\uparrow} = \frac{F_{\uparrow} I^2 S (S+1) - I S (1 + F_{\uparrow} \Sigma_{\uparrow}) (A_{\uparrow} / B_{\uparrow})}{1 + F_{\uparrow} (\Sigma_{\uparrow} - I) - F_{\uparrow} I S (A_{\uparrow} / B_{\uparrow})} \quad (3.11)$$

が導かれる。

同様に、 A_{\downarrow} と B_{\downarrow} を

$$A_{\downarrow} = \frac{1}{S} \left\langle \frac{S_z}{1 - F_{\downarrow} U_{\downarrow} - F_{\downarrow} [V_{\downarrow} + F_{\downarrow} (W_{\downarrow} - V_{\downarrow} U_{\downarrow})]} \right\rangle_{\text{av}} \quad (3.12)$$

$$B_{\downarrow} = \left\langle \frac{1}{1 - F_{\downarrow} U_{\downarrow} - F_{\downarrow} [V_{\downarrow} + F_{\downarrow} (W_{\downarrow} - V_{\downarrow} U_{\downarrow})]} \right\rangle_{\text{av}} \quad (3.13)$$

と定義する。 A_{\downarrow} と B_{\downarrow} を使って $\langle t_{\downarrow\downarrow} \rangle_{\text{av}} = 0$ という条件から、 Σ_{\downarrow} を求める次式が導かれる。

$$\Sigma_{\downarrow} = \frac{F_{\downarrow} I^2 S (S+1) + I S (1 + F_{\downarrow} \Sigma_{\downarrow}) (A_{\downarrow} / B_{\downarrow})}{1 + F_{\downarrow} (\Sigma_{\downarrow} - I) + F_{\downarrow} I S (A_{\downarrow} / B_{\downarrow})} \quad (3.14)$$

従って、 Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} が得られれば、

$$F_{\uparrow} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma_{\uparrow}} \quad ((3.15))$$

$$F_{\downarrow} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma_{\downarrow}} \quad (3.16)$$

の2式によって F_{\uparrow} と F_{\downarrow} が計算できる。次に、式(3.8)と(3.9)より A_{\uparrow} と B_{\uparrow} を求め、(3.11)式より Σ_{\uparrow} を計算する。同様に式(3.12)と(3.13)より A_{\downarrow} と B_{\downarrow} を求め、(3.14)式から Σ_{\downarrow} を計算する。式(3.15)と(3.16)より、新しい Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} に対する F_{\uparrow} と F_{\downarrow} が計算されるから、この手順を繰り返すことにより、self-consistentな解が得られる。

この解法の利点は、ともかく Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} が式(3.11)と(3.14)によって直接的に計算できることである。そのため、 Σ_{\uparrow} と Σ_{\downarrow} を複素数のパラメータとして変分法を実行するよりも、はるかに短い計算時間で済むこ

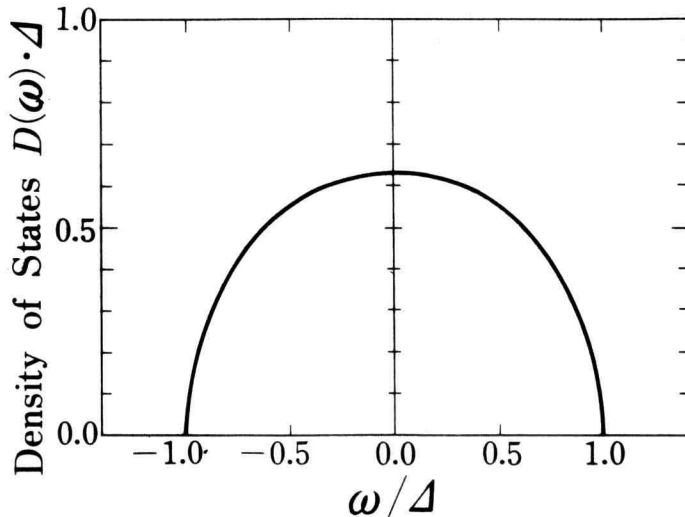


Fig. 1.

となる。さらに、温度に関する平均の操作は A_μ と B_μ ($\mu = \uparrow$ or \downarrow) の計算に帰着し、 Σ_\uparrow と Σ_\downarrow の計算と別に行なわれることも計算時間の短縮化につながっている。

4. だ円型バンドに対する計算結果

今回の方法で新しく状態密度を計算するために、もとの状態密度関数として、次のだ円型関数を仮定する。

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Delta} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)^2} \quad (4.1)$$

この関数は、次の様に規格化されている。

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (4.2)$$

式(4.1)で定義された $\rho(\varepsilon)$ に対して、 $F_\uparrow(\omega)$ と $F_\downarrow(\omega)$ は

$$F_\uparrow(\omega) = \int_{-\Delta}^{\Delta} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma_\uparrow(\omega)} \quad (4.3a)$$

$$F_\downarrow(\omega) = \int_{-\Delta}^{\Delta} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma_\downarrow(\omega)} \quad (4.3b)$$

と計算される。

数値計算はすべて、f スピンの大きさ $S=7/2$ として

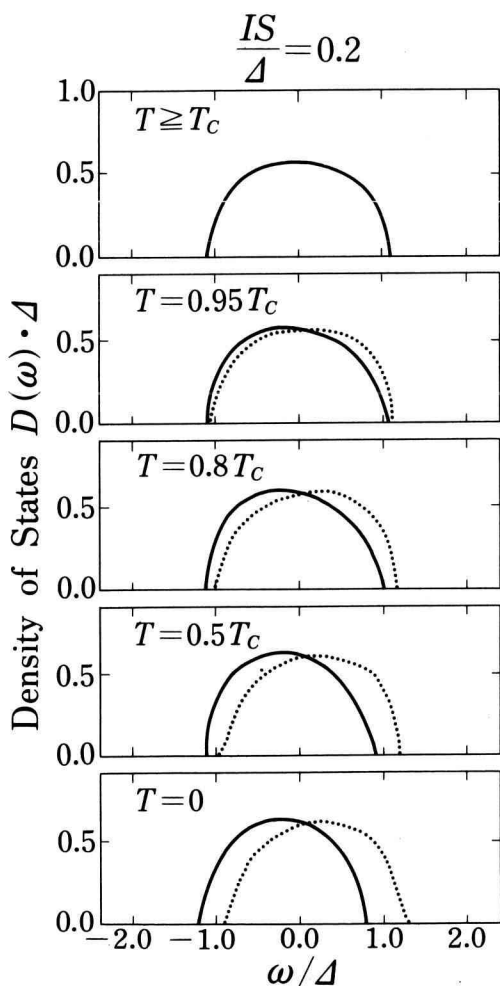


Fig. 2.

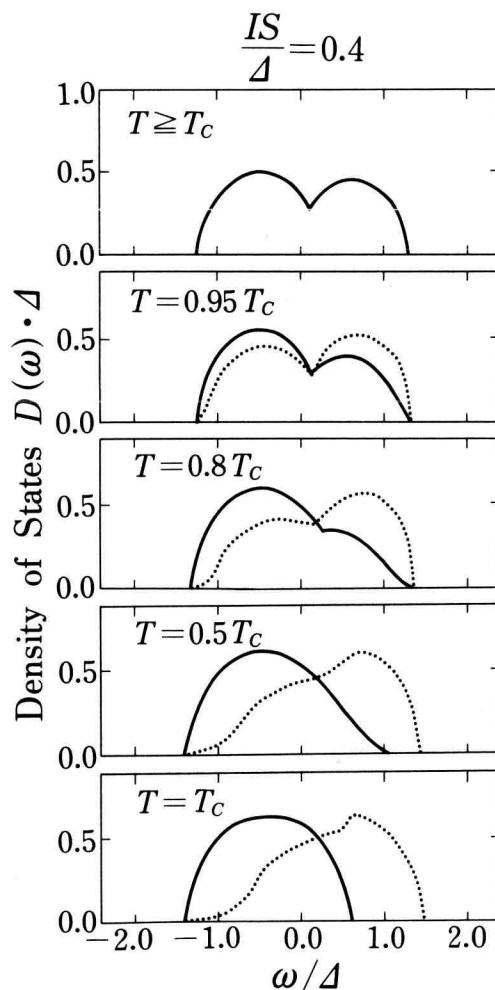


Fig. 3.

実施した。Fig. 1-Fig. 5 に、エネルギー ω/Δ の関数として、状態密度 $D(\omega) \cdot \Delta$ を示す。磁化の方向を z 方向として、その正の方向を s 電子スピンの \uparrow 方向、負の方向を \downarrow 方向と規定する。このとき、計算された状態密度はすべて

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} D_{\uparrow}(\omega) d\omega = 1 \quad (4.4a)$$

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} D_{\downarrow}(\omega) d\omega = 1 \quad (4.4b)$$

を満たす。図中の実線は s 電子スピン \uparrow に対する状態密度、点線は \downarrow に対する状態密度を表わす。

強磁性温度領域 ($T < T_c$) では、一様な磁化が始まる。 $S=7/2$ に対する磁化の値(つまり $M = \langle S_z \rangle_{av}/S$ の値)は、図に示した温度に対して各々次の値を取る。すなわち、 $T \geq T_c$ では $M=0.0$ 、 $T=0.95T_c$ では $M=0.32$ 、 $T=0.80T_c$ では $M=0.61$ 、 $T=0.50T_c$ では $M=0.87$ 、 $T=0.0$ では $M=1.0$ である。

Fig. 2 は $IS/\Delta=0.2$ の場合である。 $T \geq T_c$ では \uparrow バンドも \downarrow バンドも重なり合っているが、温度が低下するにつれ、 \uparrow バンドは低エネルギー側へ、 \downarrow バンドは高エネルギー側へとシフトする。

Fig. 3 は $IS=0.4$ の場合である。 f スピンの向きが完全にランダムな温度領域 ($T \geq T_c$) においてすでに、 s

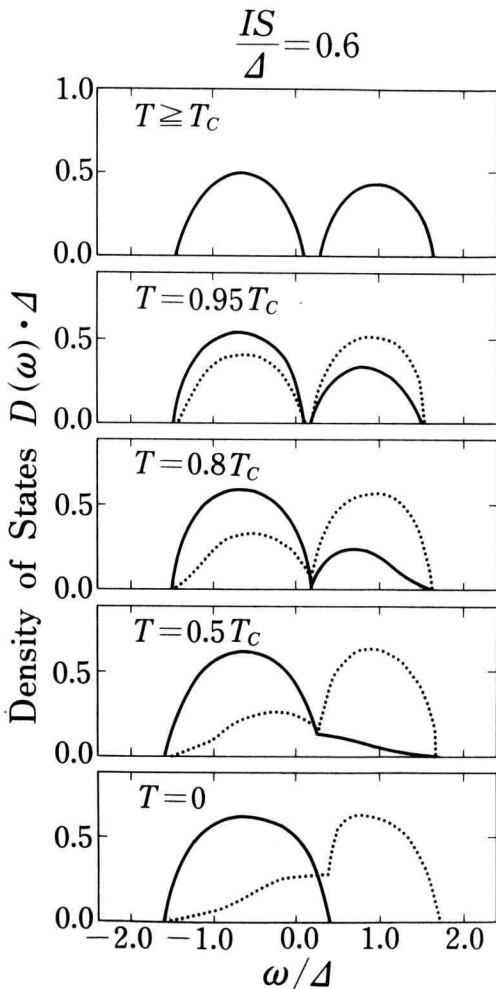


Fig. 4.

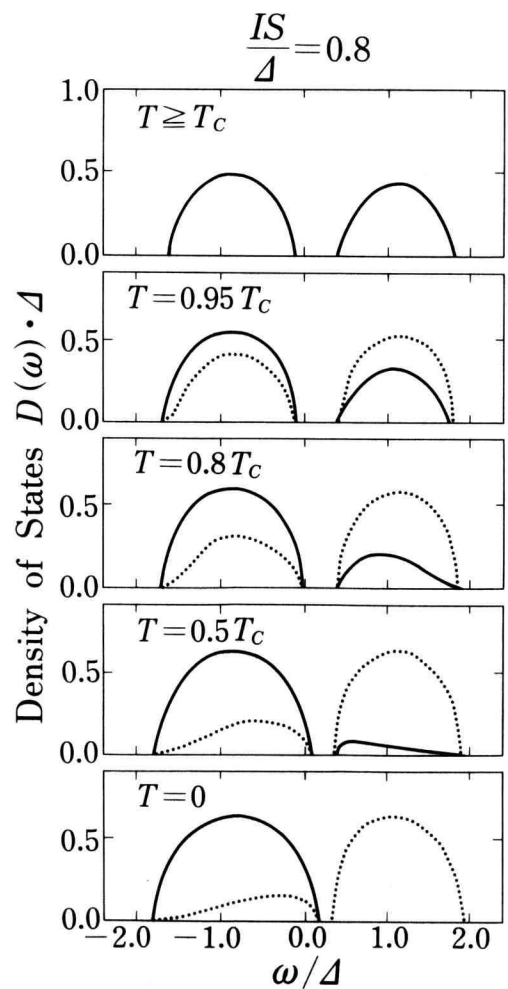


Fig. 5.

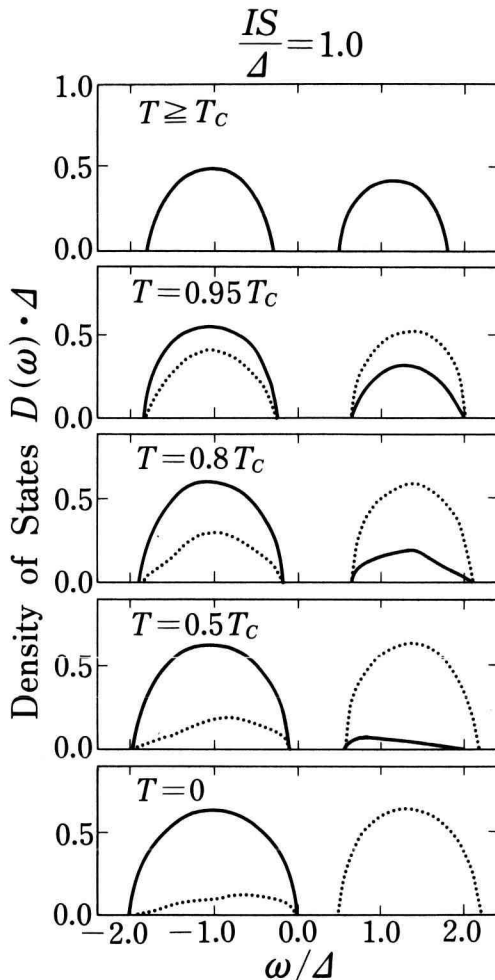


Fig. 6.

電子スピンの向きに対して、平行または反平行に対応して2つの状態密度のピークが存在する。 \uparrow 電子バンドと \downarrow 電子バンドは、常磁性温度領域($T \geq T_c$)では重なり合うが、強磁性温度領域($T < T_c$)では一様な磁化が生じるので、かなり異なった振舞いを示す。すなわち、温度が低下し $T=0$ へと近づくにつれて、 \uparrow 電子バンドは低エネルギー側へと移行し、主として平行結合バンドを形成する。一方、 \downarrow 電子バンドは高エネルギー側へと移行し、主として反平行結合バンドを形成するが、低エネルギー部分(平行結合バンドと重なる部分)は消滅しない。 $T=0$ ではfスピンの向きは完全に一方向に揃うから、 \uparrow 電子はfスピ

ンの方向を向いたまま結晶中を運動する。これは平行結合状態であり、 \uparrow 電子に対しては、これが $T=0$ で実現する唯一の固有状態である。ところが、 \downarrow 電子にとってはfスピンの向きと反対の向きをもち結晶中を運動する状態(反平行結合状態)は必ずしも固有状態ではない。fスピンの大きさが有限の場合にはスピン反転を起こす可能性があり、s電子の散乱過程で、 \downarrow スピンの向きが反転して途中で \uparrow スピンとなり、再び反転して \downarrow スピンにもどるといふプロセスが存在する。これが \downarrow 電子の低エネルギー部分(平行結合バンドと重なる部分)を形成する。電子スピンの反転を伴うこのプロセスは、fスピンの大きさが有限であることからくる量子効果であり、実際古典スピン近似($S=\infty$ とする)を使えばなくなる。

Fig. 4は $IS/\Delta=0.6$ の場合である。この場合には、 $T=\infty$ では平行結合状態と反平行結合状態にはっきり分離しているが、温度が低下してくると(図では $T \leq 0.8 T_c$)、2つのバンドが連続して1つのバンドとなることを示している。これは $T \approx T_c$ での短距離秩序によるs電子の散乱を考える上でも示唆的である。

Fig. 5とFig. 6はそれぞれ $IS/\Delta=0.8$ と 1.0 の場合である。 IS/Δ の値がこの程度まで大きくなると、全温度領域を通して、平行結合バンドと反平行結合バンドに分離したままである。 $T=\infty$ での状態密度の和の比は、平行結合バンドと反平行結合バンドとで、 $(S+1)/(2S+1)=9/16=0.5625$ 対 $S/(2S+1)=7/16=0.4375$ であり、数値計算の結果と一致する。

このように、得られた結果には合理性がある。

5. まとめと今後の展望

今回私達が開発したCPAの新しい計算方法は、今まで得られた結論を再現するだけで、新しく物理的な知見を生んだということではない。しかし、計算時間(収束時間)を大幅に短縮したという点で、初めて、 t 行列によるCPAの有用性に道を拓いたといえる。

序論でも述べたが、今まで開拓されたCPAのうち、Locatorを使うKuboの方法では、 $T \approx T_c$ で重要となるfスピンの短距離秩序の影響を取り込むことはできない。 t -行列を使うTakahashiの方法は、理論形式上は取り込むことができて、実際数値計算を実行するのは今まで不可能だった。今回の新しいCPAの計算方法によって、 t 行列を使った方法によって短距離秩

序を取り込むことが、ようやく可能になったと言える。

私達は、この方法が強磁性だけでなく、反強磁性でも有効であることを、これに続く論文で示すことにする。

参 考 文 献

- 1) M. Takahashi, K. Mitsui and M. Umehara ;
Phys. Rev. **B48**, 17053 (1993).
- 2) M. Takahashi, K. Mitsui and M. Umehara ;
Phys. Rev **B52**, 16313 (1995).
- 3) K. Kubo ; J. Phys. Soc. Jpn. **36**, 32 (1974).
- 4) 高橋正雄 ; 神奈川工科大学研究報告 **B15**, 285 (1991).
- 5) 高橋正雄・三井和博・梅原雅捷 ; 神奈川工科大学研究報告 **B18**, 249 (1994).