

# s-f モデルと電子状態 (15)

— fcc 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 (15)

— Numerical results of CPA for fcc  
antiferromagnetic semiconductors —

Masao TAKAHASHI, Kazuhiro MITSUI and Masakatsu UMEHARA

## Abstract

The conduction electron states in fcc antiferromagnetic semiconductors are separated into two different states. The Hamiltonian including coherent potential is not hermitian so that the eigen states do not satisfy the orthogonal condition. In this paper, we show that the condition is satisfied if the coherent potentials have same imaginary values.

## 1. はじめに

私達は先に、反強磁性半導体にコヒーレント・ポテンシャル近似 (以下 CPA) を適用する方法を提案した<sup>1,2)</sup>。そして、それらの方針のもとづいて、bcc 反強磁性半導体に実際に CPA を適用して得た数値計算の結果を示した<sup>3)</sup>。

論文 (13) で述べたように、反強磁性体に CPA を適用する場合には、2つの状態の規格直交化が重要な問題となって、立ちふさがる。この点はすでに詳しく調べた<sup>3)</sup>。

この論文では、fcc 反強磁性体に CPA を適用して得た数値計算の結果を示す。bcc 反強磁性体と同様に、 $IS/\Delta$  が大きくなると、一部分が CPA の条件を満たさなくなる。この論文では、得られた不合理性の原因を、CPA の適用方法という観点から考察する。

## 2. CPA の適用

非摂動ハミルトニアンを  $K$ , それに対する非摂動グ

リーン関数を  $P$  とする。つまり、

$$P = \frac{1}{\omega - K} \quad (2.1)$$

である。あるサイト (これを 0-サイトとする) のワニエ関数を  $|0\uparrow\rangle$  と  $|0\downarrow\rangle$  で表し、 $P$  のワニエ関数表示での対角要素を  $F_{\uparrow}$  または  $F_{\downarrow}$  とかくことにする。すなわち、

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

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

とする。

CPA では、このサイトでの  $t$  行列が 0 になるという条件を課する。

$$t_{\uparrow\uparrow} = \langle 0\uparrow | t | 0\uparrow \rangle_{\text{av}} = 0 \quad (2.3a)$$

$$= \left\langle \frac{V_{\uparrow} + F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})}{1 - F_{\downarrow}U_{\downarrow} - F_{\uparrow}V_{\uparrow} - F_{\uparrow}F_{\downarrow}(W_{\uparrow} - V_{\uparrow}U_{\downarrow})} \right\rangle_{\text{av}} \quad (2.3b)$$

$$t_{\downarrow\downarrow} = \langle 0\downarrow | t | 0\downarrow \rangle_{\text{av}} = 0 \quad (2.4a)$$

$$= \left\langle \frac{V_{\downarrow} + F_{\uparrow}(W_{\downarrow} - V_{\downarrow}U_{\uparrow})}{1 - F_{\uparrow}U_{\uparrow} - F_{\downarrow}V_{\downarrow} - F_{\downarrow}F_{\uparrow}(W_{\downarrow} - V_{\downarrow}U_{\uparrow})} \right\rangle_{\text{av}} \quad (2.4b)$$

ここで、 $\langle \cdots \rangle_{\text{av}}$  は、0-サイトの f スピン演算子の  $z$  成分

1995 年 9 月 12 日受理

\* 一般教育科

\*\* 無機材質研究所

$S_z$  に対して、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に、次の記号が導入されている。

$$V_+ = -IS_z - \Sigma_+, \quad (2.5)$$

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

$$U_+ = -I(S_z - 1) - \Sigma_+, \quad (2.7)$$

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

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

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

CPA の条件式 (2.3) と (2.4) を連立方程式とみなして、従来は変分法で解の組 ( $\Sigma_+$  と  $\Sigma_-$ ) を探していた。しかし、 $\Sigma_+$  と  $\Sigma_-$  は複素数であるため、実数部と虚数部で合計 4 つの独立変数が必要となり、計算過程で多くの労力を要した。そこで、ここでは論文 (13) で提示した、新しい計算方法を採用する。

この方法では、 $\Sigma_+$  と  $\Sigma_-$  は次式を使って self-consistent に決定される。

$$\Sigma_+ = \frac{F_+ I^2 S(S+1) - IS(1 + F_+ \Sigma_+)(A_+/B_+)}{1 + F_+(\Sigma_+ - I) - F_+ IS(A_+/B_+)} \quad (2.11a)$$

$$\Sigma_- = \frac{F_- I^2 S(S+1) + IS(1 + F_- \Sigma_-)(A_-/B_-)}{1 + F_-(\Sigma_- - I) + F_- IS(A_-/B_-)} \quad (2.11b)$$

ここで、 $A_+$ ,  $B_+$ ,  $A_-$ ,  $B_-$  は次式で与えられる。

$$A_+ = \frac{1}{S} \left\langle \frac{S_z}{1 - F_+ U_- - F_+ [V_+ + F_+ (W_+ - V_+ U_+)]} \right\rangle_{av} \quad (2.12a)$$

$$B_+ = \left\langle \frac{1}{1 - F_+ U_- - F_+ [V_+ + F_+ (W_+ - V_+ U_+)]} \right\rangle_{av} \quad (2.12b)$$

$$A_- = \frac{1}{S} \left\langle \frac{S_z}{1 - F_- U_+ - F_- [V_- + F_- (W_- - V_- U_-)]} \right\rangle_{av} \quad (2.13a)$$

$$B_- = \left\langle \frac{1}{1 - F_- U_+ - F_- [V_- + F_- (W_- - V_- U_-)]} \right\rangle_{av} \quad (2.13b)$$

古典スピンの極限 ( $S = \infty$ ) では、

$$A_+ = A_- \quad (2.14a)$$

$$B_+ = B_- \quad (2.14b)$$

という関係がある。その証明は Appendix に示した。

### 3. fcc 反強性半導体

前論文 (14) では bcc 反強磁性半導体に CPA を適用した。fcc と bcc の違いは、異なる部分格子系の間で、電子遷移が起こるかかどうかである。つまり、bcc では異なる部分格子間の遷移は無視されるのに対して、fcc では同じ部分格子間の遷移と同じくらいある。その違いについてはすでに一部述べた。この論文では、その結果を確認しながら、後半では規格直交化条件について、更に詳しく研究する。

#### 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。

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

ここで、 $a_{m\sigma}^\dagger$ ,  $a_{m\sigma}$  は各々  $m$ -サイトで電子スピン  $\sigma$  をもつワニエ関数の生成、消滅演算子で、 $\epsilon_{mn}$  は  $m, n$  サイト間の遷移エネルギーである。bcc の場合には、第 1 隣接サイトは異なる部分格子系に所属するが、fcc の場合には、異なる部分格子系に所属するものも同じ部分格子系に所属するものも、同様の役割を果たす。この点は後で詳しく述べる。

式 (3.1) の第 2 項は、 $m$  サイトで電子スピン  $\sigma$  をも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ている。具体的には、bcc と同様に、そのサイトが部分格子系の  $A$  に属するか  $B$  に属するかによって、 $\Sigma_p$  または  $\Sigma_a$  を取る。つまり

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

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

という値を取る。

#### 3.2 エネルギー固有値

まず  $\uparrow$  電子に着目し、波数ベクトル  $k$  のブロッホ状態を

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

と表わす。ただし、 $|Ak\uparrow\rangle$ ,  $|Bk\uparrow\rangle$  はそれぞれ、部分格子系  $A$  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。bcc 構造の場合と同様に、式 (3.4) の右辺に現れる格子についての和は、それぞれの部分格子に属する位置ベクトル  $R_A$  と  $R_B$  について実行される。そのため、ブロッホ状態は、部分格子の数  $N/2$  で規格化されている。

これらのブロッホ状態では、波数ベクトル  $k$  が異なる状態は当然直交しているが、同じ  $k$  の場合でも次の規格直交化条件が成り立つ。

$$\langle Ak\uparrow | Ak\uparrow \rangle = 1 \quad (3.5a)$$

$$\langle Ak\uparrow | Bk\uparrow \rangle = \langle Bk\uparrow | Ak\uparrow \rangle = 0 \quad (3.5b)$$

$$\langle Bk\uparrow | Bk\uparrow \rangle = 1 \quad (3.5c)$$

次に、固有方程式

$$K |k\uparrow\rangle = E(k) |k\uparrow\rangle \quad (3.6)$$

を解くことを考えよう。式 (3.3) を代入すると、

$$\begin{aligned} K(C_A |Ak\uparrow\rangle + C_B |Bk\uparrow\rangle) \\ = E(k)(C_A |Ak\uparrow\rangle + C_B |Bk\uparrow\rangle) \end{aligned} \quad (3.7)$$

となる。式 (3.7) の左側から、 $\langle Ak\uparrow |$  または  $\langle Bk\uparrow |$  をかける、この結果次の連立方程式を得る。

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

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

ここまでの表式は bcc と共通であるが、fcc の場合には最隣接サイトには両方の部分格子系が含まれるため、(3.8) 式に出てきた行列要素が異なる。fcc 構造の場合には、次のようになる。

$$K_{AA} = \langle Ak\uparrow | K | Ak\uparrow \rangle \quad (3.9a)$$

$$= \varepsilon_1(k) + \Sigma_p \quad (3.9b)$$

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

$$= \varepsilon_1(k) + \Sigma_a \quad (3.10b)$$

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

$$= \varepsilon_2(k) \quad (3.11b)$$

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

$$= \varepsilon_2(k) \quad (3.12b)$$

ここで、式 (3.9) と (3.10) に現われた  $\varepsilon_1(k)$  は同じ部分格子に属するサイト間の電子の遷移エネルギーを意味する。つまり、 $R_A$  と  $R'_A$  が同じく部分格子  $A$  に属する最隣接サイトであるとして、 $R = R_A - R'_A$  で  $R(A,$

$A)$  を定義すると、

$$\varepsilon_1(k) = \sum_{R(A,A)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} \quad (3.13a)$$

である。同様に、部分格子系  $B$  に属する最隣接サイトを結ぶベクトル  $R = R_B - R'_B$  に対して和を取れば、

$$\varepsilon_1(k) = \sum_{R(B,B)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} \quad (3.13b)$$

である。

一方、異なる部分格子に属する最隣接格子ベクトルを  $R = R_A - R_B$  と表わし、それに対する電子遷移エネルギーを  $\varepsilon_{mn} = \varepsilon(R)$  とかくと、

$$\varepsilon_2(k) = \sum_{R(A,B)} \varepsilon(R) e^{ik \cdot R} \quad (3.14)$$

となる。 $\varepsilon_2(k)$  は異なる部分格子間の電子の運動に対する分散関係を与える。これが式 (3.11) と (3.12) に現われた  $\varepsilon_2(k)$  である。(論文 (11) では、 $\varepsilon_1(k)$  と  $\varepsilon_2(k)$  に負を符号をつけて定義したが、以後 (3.13) と (3.14) の定義に変更する)。

さて、式 (3.9)-(3.13) を式 (3.8) に代入すると次の表現を得る。

$$C_A(\varepsilon_1(k) + \Sigma_p - E(k)) + C_B \varepsilon_2(k) = 0 \quad (3.15a)$$

$$C_A \varepsilon_2(k) + C_B(\varepsilon_1(k) + \Sigma_a - E(k)) = 0 \quad (3.15b)$$

係数  $C_A$ ,  $C_B$  が物理的な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。

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1(k) + \Sigma_p - E(k) & \varepsilon_2(k) \\ \varepsilon_2(k) & \varepsilon_1(k) + \Sigma_a - E(k) \end{vmatrix} = 0 \quad (3.16)$$

これから、

$$E(k) = \frac{\Sigma_p + \Sigma_a + 2\varepsilon_1(k) \pm \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}}{2} \quad (3.17)$$

を得る。そこで、式 (3.17) の各符号に対して、次式で  $E_p$  と  $E_a$  を定義する。

$$E_p = \frac{\Sigma_p + \Sigma_a + 2\varepsilon_1(k) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}}{2} \quad (3.18a)$$

$$E_a = \frac{\Sigma_p + \Sigma_a + 2\varepsilon_1(k) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}}{2} \quad (3.18b)$$

これらの  $E_p$ ,  $E_a$  は一般には複素数である。 $E_p$  と  $E_a$  はそれぞれ、平行総合状態の固有エネルギーと反平行結合状態の固有エネルギーに対応する。bcc 構造と違い、

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。つまり

### 3.3 固有状態 (電子スピンの場合)

式 (3.18) で求めたエネルギー固有値  $E_p$  と  $E_a$  に属する固有状態を求めるには、式 (3.3) で現われた係数の  $C_A$  と  $C_B$  がわかればよい。これらの係数は  $E_p$  と  $E_a$  に対応する 2 つの組  $\{C_A(p), C_B(p)\}$  と  $\{C_A(a), C_B(a)\}$  で表すことができる。式 (3.15) によれば

$$\frac{C_B(p)}{C_A(p)} = \frac{E_p(k) - \varepsilon_1(k) - \Sigma_p}{\varepsilon_2(k)} \quad (3.19a)$$

$$= -\frac{\Sigma_p - \Sigma_a + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}}{2\varepsilon_2(k)} \quad (3.19b)$$

同様に、

$$\frac{C_B(a)}{C_A(a)} = \frac{E_a(k) - \varepsilon_1(k) - \Sigma_p}{\varepsilon_2(k)} \quad (3.20a)$$

$$= -\frac{\Sigma_p - \Sigma_a - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}}{2\varepsilon_2(k)} \quad (3.20b)$$

となる。

すぐ気がつくように、式 (3.19b) と (3.20b) で示された係数の比  $C_B(p)/C_A(p)$  と  $C_B(a)/C_A(a)$  の中には、 $\varepsilon_2(k)$  は含まれるが  $\varepsilon_1(k)$  は含まれない。また  $\Sigma_p - \Sigma_a$  が実数ならば、それらの係数の比もまた実数である。

さらに、(3.20) 式の逆数を求めてみると、

$$\frac{C_A(a)}{C_B(a)} = \frac{2\varepsilon_2(k)}{(\Sigma_p - \Sigma_a) - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}} \quad (3.21a)$$

$$= \frac{(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2(k)^2}}{2\varepsilon_2(k)} \quad (3.21b)$$

$$= -\frac{C_B(p)}{C_A(p)} \quad (3.21c)$$

となる。

エネルギー固有値  $E_p$  と  $E_a$  に属する固有状態は、式 (3.3) からそれぞれ、

$$|pk \uparrow\rangle = C_A(p) |Bk \uparrow\rangle + C_B(p) |Bk \downarrow\rangle \quad (3.22a)$$

$$|ak \uparrow\rangle = C_A(a) |Ak \uparrow\rangle + C_B(a) |Bk \downarrow\rangle \quad (3.22b)$$

とかける。2 つの状態が直交するための条件は

$$\langle ak \uparrow | pk \uparrow \rangle = C_A(a)^* C_A(p) + C_B(a)^* C_B(p) = 0 \quad (3.23)$$

$$\frac{C_A(a)^*}{C_B(a)^*} = -\frac{C_B(p)}{C_A(p)} \quad (3.24)$$

である。式 (3.21) と (3.24) を比べれば、2 つの状態が直交するためには、係数の比  $C_A(p)/C_B(p)$  と  $C_A(a)/C_B(a)$  が実数であればよい (十分条件)。つまり、bcc と同様に、fcc の場合でも  $\Sigma_p - \Sigma_a$  が実数であれば、平行結合状態と反平行結合状態は直交する。

以下ではこの直交条件が満たされるものと ( $\Sigma_p - \Sigma_a$  が実数であるとして) 議論を進めていく。

次に、(3.22) 式で与えた平行結合状態と反平行結合状態の規格化条件を表すと

$$|C_A(p)|^2 + |C_B(p)|^2 = 1 \quad (3.25)$$

$$|C_A(a)|^2 + |C_B(a)|^2 = 1 \quad (3.26)$$

となる。

式 (3.25) と (3.19) を組合せると、

$$|C_A(p)|^2 = \frac{\varepsilon_2^2}{|E_p - \varepsilon_1 - \Sigma_p|^2 + \varepsilon_2^2} \quad (3.27a)$$

$$= \frac{4\varepsilon_2^2}{|(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2^2}|^2 + 4\varepsilon_2^2} \quad (3.27b)$$

$$|C_B(p)|^2 = \frac{|E_p - \varepsilon_1 - \Sigma_p|^2}{|E_p - \varepsilon_1 - \Sigma_p|^2 + \varepsilon_2^2} \quad (3.28a)$$

$$= \frac{|(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2^2}|^2}{|(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + 4\varepsilon_2^2}|^2 + 4\varepsilon_2^2} \quad (3.28b)$$

となる。ただし、 $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(k)$ 、 $\varepsilon_2 = \varepsilon_2(k)$  である。

式 (3.27) と (3.28) から次のことが明らかになる。もし  $\Sigma_p - \Sigma_a$  が実数ならば、 $C_A(p)$  と  $C_B(p)$  はともに実数とすることができる。さらに、 $C_A(p)$  と  $C_B(p)$  には  $\varepsilon_1$  は含まれず、 $\varepsilon_2$  だけで記述される。この点は bcc 構造と類似している。例えば、論文 (14) の式 (A.6a) は、 $\varepsilon_2$  と  $\varepsilon$  を置き換えただけに相当する。

### 3.4 状態密度の計算

さて、fcc 磁性半導体でも、状態の規格直交条件は bcc 構造と同様でよいことがわかった。以下では  $\Sigma_p - \Sigma_a$  は実数で、平行結合状態と反平行結合状態は直交しているものとする。

このとき、非摂動グリーン関数  $P$  のワニエ表示での

対角要素は, bcc 構造と同様に

$$F_{\uparrow}(\omega) = \langle 0 \uparrow | P | 0 \uparrow \rangle \quad (3.29a)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_k \left\{ \frac{|C_A(p)|^2}{\omega - E_p(k)} + \frac{|C_B(p)|^2}{\omega - E_a(k)} \right\} \quad (3.29b)$$

となる。

fcc 構造と同様に, s-f 交換相互作用がない場合の元の状態密度関数として, 準円型の次式を仮定する。

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi D} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{D}\right)^2} \quad (3.30)$$

この関数形は,  $\varepsilon$  について偶関数で,

$$\int_{-D}^D \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (3.31)$$

を満たしている。この  $\rho(\varepsilon)$  を使って, (3.29) 式の  $k$  に関する和 (積分) を  $\varepsilon_1$  に関する積分へと変換することを考える。その際, bcc の場合には  $k$  と  $\varepsilon$  とは 1 対 1 の対応がついた。ところが fcc の場合には  $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(k)$  と  $\varepsilon_2 = \varepsilon_2(k)$  とがあるため, 同様にはできない。

そこで, fcc の場合には, 論文 (11) に示したように,

$$\varepsilon_1(k) \rightarrow \frac{\varepsilon}{2}, \quad \varepsilon_2(k) \rightarrow \frac{\varepsilon}{2} \quad (3.31)$$

と変数変換を行う。このことは, 式 (3.18) を

$$E_p(\varepsilon) = \frac{\Sigma_p + \Sigma_a + \varepsilon - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + \varepsilon^2}}{2} \quad (3.32a)$$

$$E_a(\varepsilon) = \frac{\Sigma_p + \Sigma_a + \varepsilon + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + \varepsilon^2}}{2} \quad (3.32b)$$

と定義し直すことを意味する。同時に,  $C_A(p)$  と  $C_B(p)$  は, 式 (3.27) より

$$|C_A(p)|^2 = \frac{\varepsilon^2}{|(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + \varepsilon^2}|^2 + \varepsilon^2} \quad (3.33a)$$

$$|C_B(p)|^2 = \frac{|(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + \varepsilon^2}|^2}{|(\Sigma_p - \Sigma_a) + \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + \varepsilon^2}|^2 + \varepsilon^2} \quad (3.33b)$$

となる。次に, (3.29b) の第 1 項は, 平行結合バンド, 第 2 項は反平行結合バンドに対応することを考慮して,

$$F_{\uparrow}(\omega) = \int_{-D}^0 d\varepsilon \frac{2\rho(\varepsilon)}{\omega - E_p} \frac{|C_A(p)|^2}{\omega - E_p} + \int_0^D d\varepsilon \frac{2\rho(\varepsilon)}{\omega - E_a} \frac{|C_B(p)|^2}{\omega - E_a} \quad (3.34)$$

とかける。

式 (3.32)-(3.34) 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

$$D_{\uparrow}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\uparrow}(\omega) \quad (3.35)$$

となる。

同様に, 電子スピン  $\downarrow$  の場合には,  $\uparrow$  電子に対するプロセスの中で, 式 (3.9b) と (3.10b) の  $\Sigma_p$  と  $\Sigma_a$  を入れ替えたものとなる。このとき,  $E_p$  と  $E_a$  の定義は式 (3.18) の通りである。一方,  $|C_A(p)|^2$  と  $|C_B(p)|^2$  に関する表式 (3.27a) と (3.28a) は次のように変更される。ただし, この際に式 (3.27b) と (3.28b) の中で  $\Sigma_p$  と  $\Sigma_a$  を入れ替えても意味がないことに注意 (係数  $C_A(p)$  と  $C_B(p)$  はエネルギー固有値  $E_p$  に属する係数である)。まず

$$(3.27a) \rightarrow \frac{\varepsilon_2^2}{|E_p - \varepsilon_1 - \Sigma_a|^2 + \varepsilon_2^2} \quad (3.36a)$$

$$= \frac{\varepsilon^2}{|2(E_p - \Sigma_a) - \varepsilon|^2 + \varepsilon^2} \quad (3.36b)$$

とする。ここでは  $\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon/2$ ,  $\varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon/2$  の置き換えが行われている。次に

$$2(E_p - \Sigma_a) - \varepsilon = \Sigma_p - \Sigma_a - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + \varepsilon^2} \quad (3.37a)$$

$$2(E_p - \Sigma_k) - \varepsilon = -\Sigma_p - \Sigma_a - \sqrt{(\Sigma_p - \Sigma_a)^2 + \varepsilon^2} \quad (3.37b)$$

より

$$\{2(E_p - \Sigma_a) - \varepsilon\} \{2(E_p - \Sigma_p) - \varepsilon\} = \varepsilon^2 \quad (3.38)$$

を導く。これから, (3.36b) は

$$\frac{\varepsilon^2}{|2(E_p - \Sigma_a) - \varepsilon|^2 + \varepsilon^2} = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^4 / |2(E_p - \Sigma_p) - \varepsilon|^2 + \varepsilon^2} \quad (3.39a)$$

$$= \frac{|2(E_p - \Sigma_p) - \varepsilon|^2}{|2(E_p - \Sigma_p) - \varepsilon|^2 + \varepsilon^2} \quad (3.39b)$$

$$= |C_B(p)|^2 \quad (3.39c)$$

と変形できることがわかる。式 (3.39c) は, 式 (3.28a) で  $\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon/2$ ,  $\varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon/2$  と置き換えたものに等しい。同様に,

$$(3.28) \rightarrow |C_A(p)|^2 \quad (3.40)$$

となることを示すことができる。

これらの結果より,  $\downarrow$  電子に対しては

$$F_{\downarrow}(\omega) = \int_{-d}^0 d\varepsilon \frac{2\rho(\varepsilon) |C_B(p)|^2}{\omega - E_p} + \int_0^d d\omega \frac{2\rho(\varepsilon) |C_A(p)|^2}{\omega - E_a} \quad (3.41)$$

となる。 $\downarrow$  電子の状態密度は,

$$D_{\downarrow}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\downarrow}(\omega) \quad (3.42)$$

となる。

#### 4. 数値計算の結果と今後の課題

Fig. 1~3 に, 今回求めた fcc 反強磁性半導体の状態密度を示す。横軸はエネルギー  $\omega/\Delta$  で, 縦軸に状態密度  $D(\omega) \cdot \Delta$  を図示してある。計算は古典スピンに対して実行されたので,  $D(\omega) = D(-\omega)$  である。温度はネール温度  $T_c$  で規格化した  $T/T_c$  で示し, 磁化は  $M = \langle S_z \rangle_{\text{av}}/S$  の値で示す。図はそれぞれ  $T \geq T_c (M=0.0)$ ,  $T=0.9 T_c (M=0.39)$ ,  $T=0.5 T_c (M=0.79)$  および  $T=0 (M=1.0)$  に対して描いた。

Fig. 1 は,  $IS/\Delta = 0.2$  の場合である。常磁性温度 ( $T \geq T_c$ ) では, 準円型のバンドをほぼ保っているが,  $T_c$

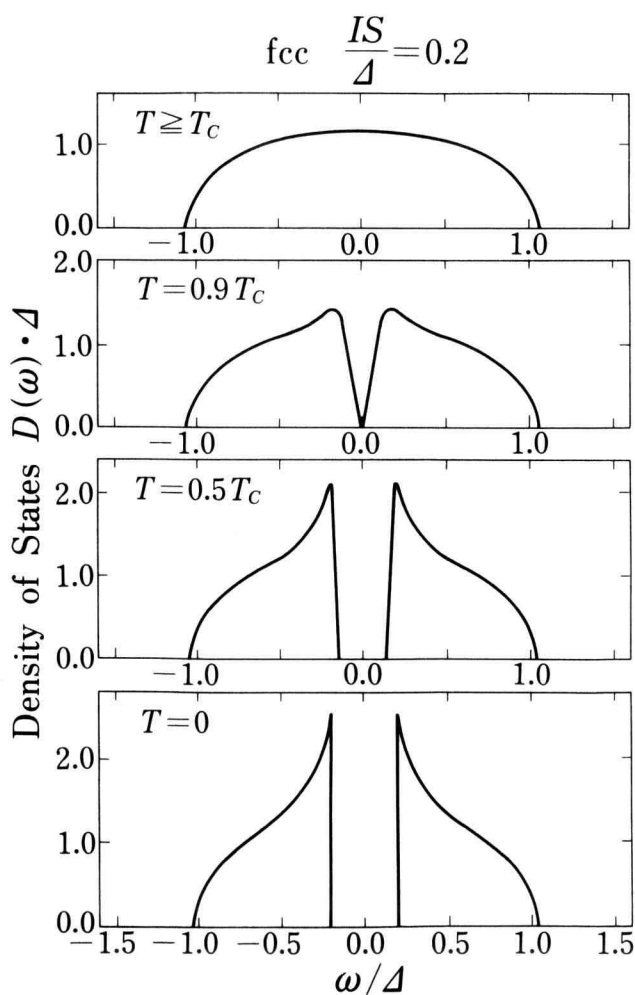


Fig. 1.

以下になると、バンド分裂が始まる。 $T=0.5T_c$  では2つのバンドが完全に離れているのがわかる。状態密度は  $\omega=0$  で対称的で、状態の和は

$$\int_{-\infty}^0 D(\omega) d\omega = \int_0^{\infty} D(\omega) d\omega = 1 \quad (4.1)$$

をほぼ満たしている。数値計算の結果は、それぞれ、 $0.996 (T=0.9T_c)$ ,  $0.987 (T=0.5T_c)$  であった。

$T=0$  ではすでに解析的な解が求められている。すなわち、平行結合状態は

$$-1 + \frac{\sqrt{1+4(IS/\Delta)^2}}{2} \leq \frac{\omega}{\Delta} \leq -\frac{IS}{\Delta} \quad (4.2a)$$

で、反平行結合状態では

$$\frac{IS}{\Delta} \leq \omega \Delta \leq \frac{1 + \sqrt{1+4(IS/\Delta)^2}}{2} \quad (4.2b)$$

でゼロでない状態密度  $D(\omega)$  を持つ。その値は、

$$D(\omega) \cdot \Delta = \frac{4}{\pi} \left( \frac{\Delta}{\omega} \right)^2 \left[ \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 + \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 \right] \times \left\{ 1 - \left( \frac{\Delta}{\omega} \right)^2 \left[ \left( \frac{IS}{\Delta} \right)^2 - \left( \frac{\omega}{\Delta} \right)^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.3)$$

である。もちろん式 (4.3) で与えられた状態密度は、式 (4.1) を満たすことは確認されている (論文 (11) 参照)。 $T=0$  のとき、bcc では  $\omega = \pm IS$  で状態密度は発

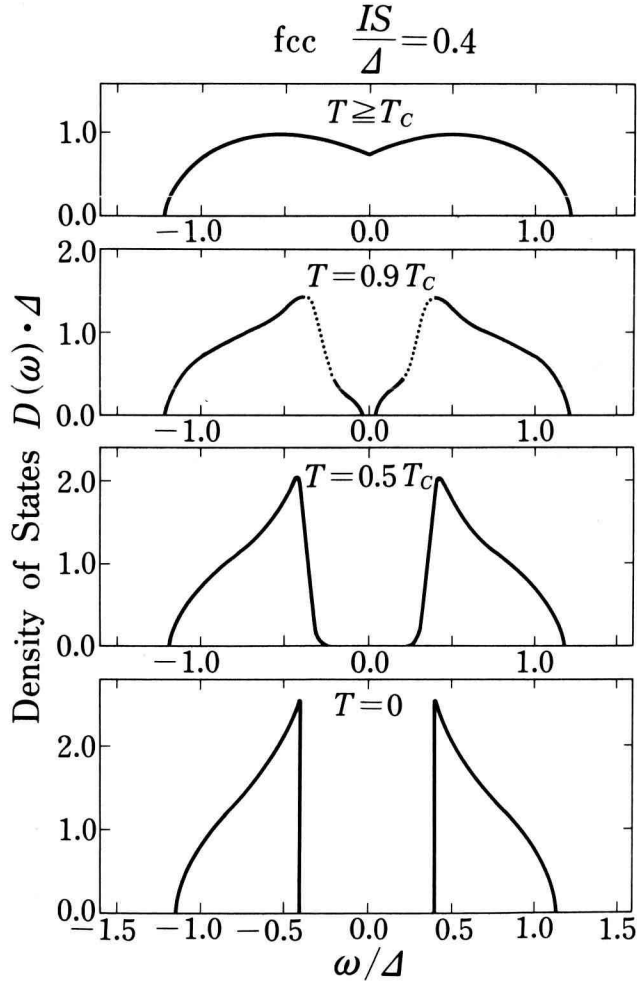


Fig. 2.

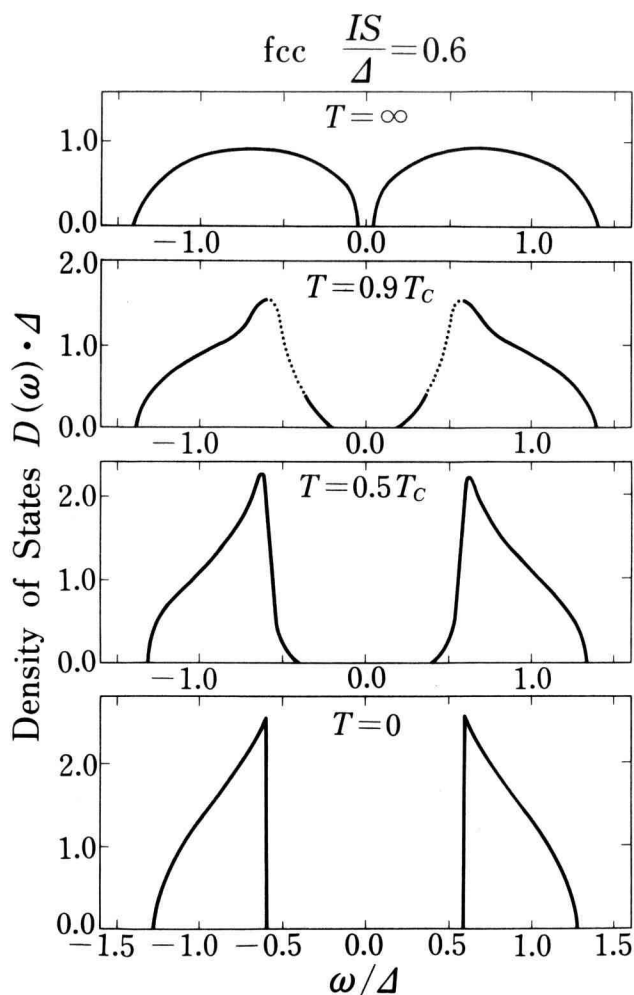


Fig. 3.

散するが、fcc では特異点での発散は起きない。

Fig. 2 は  $IS/\Delta = 0.4$  の場合である。  $T \geq T_c$  です で、平行結合状態と反平行結合状態に対応するピーク が出現している。  $T_c$  以下になると、2つのバンドに 分裂する。ただし、  $T = 0.9 T_c$  では、図中でも示したよう に、数値計算の一部が収束していない。

Fig. 3 は  $IS/\Delta = 0.6$  の場合である。この場合にはす でに  $T \geq T_c$  で2つのバンドに分裂している。  $T = 0.9 T_c$  ではやはり数値計算の一部が収束していない。

このように、  $T = 0.9 T_c$  で計算が正しい値に収束し ない原因は、本論文中でも指摘したように、平行結合 状態と反平行結合状態という2つの状態の直交性が正

しく考慮されていないことにある。つまり、通常のポ テンシャルは実数(エルミート)であるのに対して、コ ヒーレント・ポテンシャルは一般に複素数であるから、 非摂動ハミルトニアン  $K$  が非エルミートとなってし まったことにある。このため、エネルギー固有値も複 素数となり、得られた2つの固有状態は直交しないこ とになる。

不規則系の物理では、コヒーレント・ポテンシャル の虚数部分は準粒子が散乱される度合を示すもので、 一般にゼロとはできない。しかし、本論文で指摘した ように、2つのコヒーレント・ポテンシャルの虚数部が 等しいと仮定することは可能で、今回の場合には2つ



のコヒーレント・ポテンシャルの差 ( $\Sigma_p - \Sigma_a$ ) が実数であると仮定して計算を進めればよい。Fig. 1~3 に示した計算には、このことが考慮されていない。そこで、2つの状態の直交条件 ( $\Sigma_p - \Sigma_a$  が実数) を前提として、 $t$ -行列を 0 とする計算を行ない、得られた結果が前提条件とした仮定と矛盾しなければよい。この計算は是非とも行う必要がある。

### 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) 207.  
本論文では、論文 (11) として引用
- 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.  
本論文では、論文 (12) として引用。
- 3) 高橋正雄・三井和博・梅原雅捷：神奈川工科大学研究報告 B20 (1996).  
本論文では、論文 (13) として引用。

### Appendix (2.14) 式の証明

古典スピンの極限では、 $IS = \text{一定のまま } S = \infty$  (つ

まり、 $1/S=0$ ) とする。このときには、式 (2.5)~(2.10) は、次のように簡単化される。

$$V_{\uparrow} = -IS_z - \Sigma_{\uparrow} \quad (\text{A.1})$$

$$V_{\downarrow} = +IS_z - \Sigma_{\downarrow} \quad (\text{A.2})$$

$$U_{\uparrow} \cong -IS_z - \Sigma_{\uparrow} = V_{\uparrow} \quad (\text{A.3})$$

$$U_{\downarrow} \cong +IS_z - \Sigma_{\downarrow} = V_{\downarrow} \quad (\text{A.4})$$

$$W_{\uparrow} \cong I^2[S(S+1) - S_z^2] \quad (\text{A.5})$$

$$W_{\downarrow} \cong I^2[S(S+1) - S_z^2] \quad (\text{A.6})$$

$$\therefore W_{\uparrow} = W_{\downarrow} = W \quad (\text{A.7})$$

これらの関係式を使えば、(2.12) 式と (2.13) 式は次の通りになる。

$$A_{\uparrow} = A_{\downarrow} \quad (\text{A.8a})$$

$$= \frac{1}{S} \left\langle \frac{S_z}{1 - F_{\uparrow} V_{\uparrow} - F_{\downarrow} V_{\downarrow} - F_{\uparrow} F_{\downarrow} (W - V_{\uparrow} V_{\downarrow})} \right\rangle_{\text{av}} \quad (\text{A.8b})$$

$$B_{\uparrow} = B_{\downarrow} \quad (\text{A.9a})$$

$$= \left\langle \frac{1}{1 - F_{\uparrow} V_{\uparrow} - F_{\downarrow} V_{\downarrow} - F_{\uparrow} F_{\downarrow} (W - V_{\uparrow} V_{\downarrow})} \right\rangle_{\text{av}} \quad (\text{A.9b})$$

こうして、(2.14) 式は証明された。