



| | |
|--------------|---|
| Title | Spin Density Waveの研究 |
| Author(s) | 山崎, 京子 |
| Citation | 大阪大学, 1966, 博士論文 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/1038 |
| rights | |
| Note | |

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

5 10 15 20 25

Spin Density Wave の 研究

山崎京子

4

8

12

16



| 5 | 10 | 15 | 20 | (|) | 25 | | | | | | | | | | |
|---|----|----|----|---|---|----|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
| 目次 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 要旨 1 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Introduction 3 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §1 問題の所在と我々の立場 3 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §2 Cr の SDW の研究 6 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §3 SDW の理論的研究 11 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §4 Field cooling の実験 18 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §5 本論文の目的と内容 24 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Part I SDW 消滅に対する critical field 30 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Chapter 1 Formulation of the theory 30 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §1 Introduction 30 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §2 E_{total} を最小にする USF の決定 34 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §3 USF と Ferro との境界 40 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §4 無限小振中の spin density wave 44 | | | | | | | | | | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-----------|---|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
| §5 | \bar{H}_1 の 行列要素 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §6 | \bar{H}_1 の 固有函数 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §7 | E_{total} の 計算 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §8 | U の critical value の 決定 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Chapter 1 | の 付 表 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Chapter 2 | Method of computation | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §1 | パラメータの 評討 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §2 | (1.16) の 解き方 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §3 | $(1/U_{\text{out}}) = I_{\text{out}}$ の 計算 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §4 | $J^{(i)}$ の 計算 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| §5 | パラメータの 範囲 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Chapter 3 | Results | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 説明文 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 第 1 図 | (2 に対する I_{out} の グラフ) | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 第 1 表 | (\bar{Z} , I_{out} , q_0 , H の 表) | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 第 2 表 | (同上) | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

52

54

56

62

66

73

73

77

78

84

89

93

93

95

101

107

4

8

12

16

| | |
|--|-----|
| 第 2 図 ((I, H) 面 で の phase diagram) | 113 |
| 第 3 図 (同上 大局図) | 119 |
| Chapter 4 Discussion | 120 |
| § 1 Phase diagram | 120 |
| § 2 四種の SDW の 安定性 の 比較 | 129 |
| § 3 残された問題 | 135 |
| 第 4 図 ((I, k_F) 面 で の phase diagram) | 140 |
| Part II Screw 型 SDW の 帯磁率 | 141 |
| Chapter 1 Formulation of the theory | 141 |
| § 1 有 限 振 中 の SDW | 141 |
| § 2 垂 直 帯 磁 率 の 計 算 方 法 | 145 |
| Chapter 2 Method of computation | 150 |
| § 1 $J'(0)$ の 計 算 方 法 | 150 |
| § 2 各 region で の 積 分 の 計 算 | 152 |
| Chapter 3 Results | 158 |
| 説 明 文 | 158 |

| | | |
|----|---------------------------------|-----|
| | χ_{\perp} のグラフ | 160 |
| 4 | Chapter 4 Susceptibility tensor | 166 |
| 5 | §1 平行帶磁率計算の繁雑さ | 166 |
| 6 | §2 帯磁率テンソル | 169 |
| 7 | Chapter 5 Discussion | 178 |
| 8 | References | 184 |
| 9 | | |
| 10 | | |
| 11 | | |
| 12 | | |
| 13 | | |
| 14 | | |
| 15 | | |
| 16 | | |
| 17 | | |
| 18 | | |
| 19 | | |
| 20 | | |
| 21 | | |
| 22 | | |
| 23 | | |
| 24 | | |
| 25 | | |

要旨

この論文は Introduction と Part I, Part II による。

Introduction ; この論文の目標, 立場の説明, 内容の概説の他に、クローバーの磁性及び Spin Density Wave の研究について簡単な review としてある。

Part I ; Spin Density Wave 消滅に対する Critical Field Exchange Integral U の大きさが適当であると、Cr の 3d 電子が Spin Density Wave (SDW) を安定にする事は理論的にわかつている。(立木-永宮, 永宮-望月-山崎). これに外磁場を加けると磁場の大きさが或る臨界値を越えると SDW は消滅し unsaturated Ferro に移行する。その際の Critical Field の大きさ H を計算して (H, U) をパラメータとした時の phase diagram を描いた。又 $H=0$ の時, (k_F, U) を parameters として種々の磁気構造の間の phase diagram (の概形) も描いた: (k_F は Fermi 球の半径)。次にこの SDW にかゝ

で sine 型と screw 型の双方について、Spin の向き \vec{s} と 磁場の向き \vec{H} が互いに直角の場合と平行の場合とを比較し、 H が大きい時は直角の方が常に安定 (Screw と Sine の区別はつづり) であり、 H が小さい時は \vec{s} の値によつて平行な sine の方が安定な場合がある事を示した。

Part II ; Screw 型 SDW の帶磁率

SDW のうち Screw 構造について、磁場を Screw の回転面に垂直にかけた時の帶磁率 (垂直帶磁率) を求め、常磁性のスピン帶磁率と比較した。平行帶磁率についても計算の方針を与えた。

Introduction

§ 1 問題の所在と我々の立場

金属 Cr の結晶において、その磁気構造は 3d 電子のスピンが周期的に配列したいわゆる spin density wave を持つことなどが実験的に知られていく。([1], [2]他)

そこでこの spin density wave (= 以後 SDW と書く) の安定性及び外磁場に対する挙動を理論的に考察することは重要であろう。SDW がエネルギー的に安定であることは既に [3], [4] 等で肯定的に解決されていく。これらは絶対零度における計算であるが、有限温度での統計力学的計算も [5] で行なわれ Neel 渦度その他が求められていく。本論文では更に SDW に外磁場をかけたときの状況の理論的研究を目標とする。

Cr の S D W の 理 論 的 説 明 に は [6], [7] 等 も あ る が、 こ れ
う に か つ て は [3], [4] の よ う に 詳 し い 計 算 が な され て い る
わ け じ は な い。 我々 が S D W の 理 論 的 研 究 を 行 な う に あ
に つ て は 次 の よ う な 立 場 を 取 つ て い る。

即ち、「モ デ ル は (現 実 に 比 べ て) 簡 単 な モ デ ル で も
よ い が、 一 た ん モ デ ル を 設 定 し た 後 は 可 能 な 限 里 数 学 的
に 正 確 に 解 き、 半 定 性 的 な 評 論 や 推 测 だ け に は 頼 ら な い
」と 言 う こ と で あ る。 この 立 場 で は、 例 え ば Wannier 函 数
の well-localized の 假 定、 自 由 電 子 様 工 能 ル ギ 一 ス ペ ク ツ ル
の 假 定 な ど の 单 純 化 を 行 な つ て も、 S D W の 安 定 性 を 結
論 す る た め だ け で も 可 成 り 面 倒 な 計 算 を 必 要 と す る。

我々 の 立 場 は、 単 に 理 論 の 数 学 的 枠組み だ け を 示 す よ
う な formal theory で も な く、 又 実 験 結 果 の 説 明 だ け を 目 標 と
す る 現 象 理 論 じ も な い。 人 は この よ う な 立 場 を 尋 の 刻 に
効 の 少 な い や り 方 と 思 う か も 知 れ な い。 然 し 我々 は こ れ
に つ て 次 の よ う に 思 う。

確かに Cr の磁気的性質の説明だけなら、もつと rough な discussion で片づくとも知れまい。然し SDW 構造と言ふのはもつと普遍的なものではまいだろか? 先には、
稀土類金属に対して局在電子による screw 構造が、
は Cr について伝導電子による同様な SDW が発見された。

[このよろず周期的構造はこれら以外にもあるかも知
れまい。それは單に「SDW を示す物質が現実に Cr 以外
にあるかどうか」と言ふことではなく、SDW の起り得
る機構がもつと普遍的に(多くの物質ではエネルギーの
高い状態として潜在的に)あるのではないかと言ふこと
である。元故に、例え多くの物質で SDW が見られない
くとも、Ferro とか Para, Antiferro と並べて SDW に同等の資
格を与えて、これらを比較した上で「この物質には SD
W は起らまい」と結論すべきである。

このよろず理由で SDW について理論的計算をしつかり
やつておくことは意味があると思う。单なる formal theory

ではなく、更に進んで簡単なモデルからでも具体的な結果を導出しておけば、それが現実の複雑な物質の観測と直接照合は出来なくても、種々な考察の際の data となり得るであろう。

従つて我々の立場は formal theory と現象理論との中间にあつて両者をつなぐものであり、その目標は根本原理から出発して現実の現象を解説するための基礎的資料を提供するところにある。

以上に述べた事は我々の立場の一般的な説明である。特に本論文についてその目標を説明することはさう簡単にありし、先ずその前に Cr についての実験及び SDW の研究についての簡単な review をしてみよう。

§ 2 Cr の SDW の発見

物質の磁性の研究が体系的に行なわれるようになつた

のは 19 世紀末の P. Curie 以来であるが、第二次大戦後中性子

線の磁気散乱の技術が開発されるまでの間、巨視的が現象論か、簡単なモデル（自由電子ガスとかスピノン格子のよ
うな）に基づく理論のみで実験との比較を可能にした。

このような状況において、長い間 Fe, Co, Ni 以外の遷移金属はすべて常磁性であると信じられて来た。ところが中性子線回折の実験が行なわれるようになると、結晶内の磁気能率の分布が直接実験的にわかるようになり、多くの新しい知見がもたらされた。

[8] 1953 年に Shull と Wilkinson は遷移金属一般について中性子線の磁気散乱の実験を行ない、低温において Cr と Mn は常磁性ではなく反強磁性であることを発見した。一方、うち Cr や Mn では各 atom のまわりに atomic moment が存在してこれらが規則的に配列しているが、結晶全体としては cancel して巨視的の moment が現われないわけである。

Cr についての Shull-Wilkinson の結果はその後二つの点で修正

された。一つは Neel 温度 T_N (= 常磁性 \rightarrow 反強磁性の転移温度) についてであり、もう一つは S D W の発見についてである。

Shull-Wilkinson の実験は powder について行われたが $T_N \sim 475^\circ\text{K}$ を得た。⁴ 後に Corlis, Hastings & Weiss^[1] が Cr の单結晶についての中性子線回折で $T_N \sim 310^\circ\text{K}$ を得たが、この値はその後更に精密化されて $T_N = 311.5^\circ\text{K}$ と定められた。これは他の data, 例えば帶磁率^[9], 比熱^[10], 弹性係数^{[11][12]} の異常から推定される値 $T_N \sim 310^\circ\text{K}$ と一致する。⁸

Powder で T_N が高く出て来るのは、Strain の存在のためにあるかも知れない。^[2] 実際 Cr の磁気構造に strain が可成り sensitive に影響しているらしいことは、後で説明する他の実験からも推測される。^{[13][14][40]}¹²

次に S D W の発見について、矢張 Corlis, Hastings & Weiss^[1] や Bykov et. al.^[15] 及び Bacon^[16] による。彼らは中性子線回折の satellite の現われ方から、Cr の反強磁性は十スパンと一スパンが

交互に現われるようすを单纯なものではなく、long range の周期性をもつていることを知った。その周期は T_N 直下で格子定数の約 28 倍であり、温度が下ると短くなり $T_{sf} \sim 150^\circ\text{K}$ で約 21 倍となり、こゝでもう一度転移 (spin-flip transition) を起して別の type のスピノン配列に変るが、 $T_{sf} \sim 150^\circ\text{K}$ 以下でもやはり周期 21 枚の周期的構造を示す。

この周期的構造としては、(1) antiphase domain, (2) Screw structure, (3) sinusoidal structure の三種類の可能性が考えられた。^[7] しかし 1962 年には、Shirane-Takei ^[7] による中性子線回折の更に精密な実験によって一応の結論が得られた。これによるスピノン配列は $T < T_{sf}$ では longitudinal sine wave, $T_{sf} < T < T_N$ では transverse wave (screw or sine) をもつと結論された。更に T_{sf} で不連続が観測されぬことから $T > T_{sf}$ では transverse sine であると推測された。然し、これを別に Gomankov, Litvin, Zoshmanov & Lyashchenko ^[18] の実験では $T > T_{sf}$ では transverse screw らしいと主張された。このようにして $T > T_{sf}$ のスピノン構造は、はつきりきらめかなかったが、^[17]

すれにしても antiphase domain の可能性は捨て去られた。最近

[19] にがつて Brown, Wilkinson, Forsyth & Nathans は polarized neutron を使って回折実験を行ひ $T > T_{sf}$ で transverse sine であると結論している。

[20] この他に重要な発見として、Wilkinson, Wollan, Koehler, & Cable の結果がある。これまでは Cr のスピン配列も、screw にしても sine にしても、稀土類金属に見られると同じように局在スピン

[20,21] の周期的配列と考えられて来た。然し Wilkinson 等の 510°K

706°K における実験結果で、Cr は atomic moment を持たないこと、従つて $T < T_N$ での atomic moment は ordering の際に誘起されたもの

[22] であることがわかつた。後に Möller et al. は T_N の上約 10°K の範囲には除々に消失して行く moment の存在を示したが、 320°K

以上では atomic moment は観測されていながらので、[2] の実験と

[10] 矛盾するものではない。又 Beaumont, chihara 等による T_N での比熱の jump が小さいところの結果 (Entropy の変化が小さい) は連続的な変化を意味し、(一定の大きさの moment が急に方向を変えるのでなく)、序々に moment が発生する事を示す。又低温領域

で Cr が sinusoidal structure を示し 絶対零度 近従 から も、局在スピンの model は 許されねば。これら の 実験結果 は 局在スピンの考えを無効にした。即ち、磁気能率は各 atom に局在した電子のスピンから来るものではなく、伝導電子のスピンから来るものと見るべきである。こゝから現在のよろび spin density wave の理論が 始まり、SDW の 機構が band 構造と 密接な関係を持つ事になつた。

§ 3 SDW の理論的研究

Cr に対してスピノンの周期的配列が発見された頃、 MnO_2 のような rutile type lattice や、Er, Dy のような稀土類金属に対してもスピノンの周期的配列が問題にされていた。これらを説明するものとして、局在モーメントの間の交換相互作用に依るヒークモデルが立てられ、screw structure の安定性が理論的に導かれた。^[23, 20]

従つて、Cr に対してもこのモデルを適用する二ことが最初に考えられた。^[20, 21] 然し例えば稀土類金属では磁気の担い手は f 電子であるから局在してないと考えて差支えな

いが、Cr のような遷移金属の場合には磁気の担い手は d 電子であり、それ自身結晶の中を飛びまわる。この事情の違ひのため、稀土類の結果をそのまま Cr に持つて来るのに疑問があるわけである。

Wilkinson, Wallan, Kochler & Cable^{[2][10][17]} の実験で両者の事情の違ひは決定的となり、Cr のスペクトラムの周期的構造を説明するためには、伝導電子 (d 電子) の集團に自発的に "atomic moment" が誘起され、それと周期的に並ぶような機構即ち SDW を考えねばならなくなってしまった。

これより先、Overhauser^[24, 25] の SDW の理論が示されていた。これは、「一次元の自由電子気体を考えると、交換相互作用の結果 para たりも SDW の方が安定になる。」と言う内容であった。ところが Yoshimori^[26] によると、三次元の電子気体で同様なことを考え、又交換相互作用は short range だとして理想的に δ 函数型のものを採ると、overhauser の結果とは反対に ferro 又は para の方が常にエネルギーが低く、S

DW は現われ得ない。これに対して Overhauser^[6] は、自由電子の集團に対して δ -函数型相互作用の代りに unscreened coulomb interaction を考えれば、三次元であつてもやはり SDW の方が安定であることを示した。一方 Iwamoto-Sawada^[27] は finite range をもつ相互作用を一般に考え、電子密度が適当（上限、下限とも定めた中間的な値）であると para 状態は不安定になることを示した。

ところで Cr の場合、先ず atom から飛び出すのは 4s 電子であり、磁気の担い手たる 3d 電子は 4s より内側の軌道にあって結晶内を飛びまわる傾向はさして強くない。従つてこれを伝導電子とみなしても殆んどイオンの周辺をうろつくにすぎず、イオンの近くで大きめ density をもち、その中間に稀薄な分布となるであろう。この下に density 分布が well localized であると、交換相互作用も short range (= 接近したときのみ作用し合ふ) になるであろう。こう考へてみると Cr の 3d 電子の交換相互作用は自由電子様ではなく、

むしろ S 函数型であると考えられる。其故 SDW に対する
吉森の否定的結果は実験と反してつることになる。

[6] overhauser によると、SDW は S 電子が磁気の担い手たるアルカリ金属でこれを観測されてよさを了に思われ、彼自身を期待したが現在までアルカリ金属で SDW は見出されていな。

以上では格子の周期性の影響は考慮に入れず計算している。これを考慮に入れるためには momentum space (= 空間) で \vec{q} と $\vec{k} + \vec{q}$ (\vec{k} は逆格子ベクトル) とを同一視せねばならぬ。従つて SDW の wave vector を \vec{q} として、wave vector が \vec{q} の電子と $\vec{k} + \vec{q}$ の電子の間だけではなく、 \vec{q} の電子と $\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}$ の電子との間にも同じだけの相互作用が働くねばならぬ。
別の言い方をすれば、 \vec{q} として第一 Brillouin zone に属するもののみを採り、もし $\vec{k} + \vec{q}$ が第一 Brillouin zone の外に付み出したら \vec{K} によって第一 Brillouin zone 内に引き戻して考えることを要する。このようないわゆる umklapp effect を入れての計算

は、Yosida^[28]による formal theory の後、Tachiki-Nagamiya^[3] 及び Nagamiya, Motizuki & Yamasaki^[4] によつて実行され、それによると 8 面数型の相互作用であつても (intra-atomic coulomb integral U 及び Fermi 半径 R_F が適當であると) SDW が安定にがるることがわかつた。これは現

実の Cr の SDW の機構を説明するにふさわしいモデルとして最初のものと言えよう。Nagamiya, Motizuki & Yamasaki^[4] は [3] の拡張であるが SDW の amplitude g 及 wave vector \vec{q} を self-consistent に求める方程式の取扱いに於て [3], [4] は異なる。即ち [3] では $g=0$ の場合 para に無限小振中の SDW が加わった場合の local stability を構動計算によつて論じたのに対し、[4] では有限振中の screw 型 SDW の Total energy を精密な計算によつて求め para 及び Ferro のそれと比較することによつて安定性を示した。そして最安定 screw 構造 (=screw の中で最安定のもの。screw 及 sine の比較はしてない) を U 及 R_F の函数として求めた。本論文もやはりこのモデルに基づいて研究を進めてゐる。(その内容は § 5 に説明する。)

こゝまで来ると S D W の機構は band 構造、とりわけ、
Fermi 面の様子に密接な関係があると予想される。Tachiki-
Nagamiya では単純化して single band でしかも Fermi 面は球である場合を考元た。次には S D W の機構の本質的な部分は
この単純化をしてもあらわし盡してゐるか否かを検討す

る必要があろう。3d電子だけを考慮したときのCrのband

構造は tight-binding 近似を用いることにより Asdente & Friedel^[29] に下つて詳しく計算された。

その結果によると band は五重に縮退し、又それに基づいて求めた Fermi 面^[30]も非常に複雑であるが、

Tachiki-Nagamiya の論文で SDW の出現のために本質的と思われる「Gap面に Fermi 面が接する」という状況はほど満たされていいる。

Lomer^[31] は 3d の他に 4s をまぜたときの Cr の band 構造を求めるために、

Asdente & Friedel の結果と Fe の band に対する Wood^[32] の結果とを比較参照して band の大体の様子を推測した。Lomer

はこれを用いて更に Cr の Fermi 面を求めた。これによると

完全につまつた band や空の band もあるが、それでも Fermi 面は三つの band にまたがつていい。このうち一つの band

での電子の Fermi 面は他の band での hole の Fermi 面とは△合同であり、Lomer はこのことが SDW を安定にするための key point であると考えていい。

後に Loucks^[35] は詳しい band 計算 (augmented plane wave の方法による) を行ひつて、 4S 子でまぜたときの Fermi 面を出した。結果は Lomer の予想と多少食ひ違つたが、「一つの band での電子の Fermi 面は他の band での hole の Fermi 面とは△合同」という状況は Loucks の結果でも保たれている。

Tachiki-Nagamiya^[33] や Nagamiya, Motizuki & Yamazaki^[4] の理論では single band theory であり、 Lomer の言ふよすが two bands の縮退の影響は入つてないが、 (Tachiki & Nagamiya には two bands の場合が論じられてゐるが、具体的な計算はすぐ formal theory に止まつてゐる。) Lomer や Loucks の求めたよすが “ひとび形” の Fermi 面では複雑すぎるので、これを球で書きえみて、「two bands が縮退し、一方は電子、他方は hole の Fermi 面が互いに合同が球となつてゐる」といふモデルに立つて S D W の安定性を具体的な計算によつて検討することは意味があるであらう。

§ 4 Field cooling の実験

Cr の結晶格子は体心立方であるが、SDW の伝播方向が特別の方向と異なるから磁気構造まで考えに入れると対称性は下る筈である。とは言つても Cr の結晶の中が幾つもの磁区に分れ、磁区ごとに伝播方向の異なる SDW が at random に起つていてのことは、巨視的に見ると全體として立方対称性が出て来るようになる。

ここで SDW による対称性の低下を見るためには、まず磁区ごとに異なる伝播方向を一方向に揃えねばならぬ。そのための手段としていわゆる Field cooling の方法がある。すなわち Cr を熱してこれに外磁場をかけ、磁場をかけてまず温度を下げて行き Néel 温度以下に達したところで外磁場を取り去るのである。こうすると Néel 点を過ぎたときに生ずる SDW は、外磁場のために伝播方向を揃えられるが、磁場を取り去った後でも伝播方向はそのまゝに

なつてゐると考えられる。(外磁場をかけたまゝの観測もすればよさそうに思われるが中性子線回折の実験は磁場の中では出来ないのか?)

Cr の S DW 構造がまだ実験的に確認されず以前に、既に Overhauser & Arrott^[36] は Field cooling の実験の重要性を指摘し、これによつて三つの可能性すなむち antiphase domain, 局在モーメントの screw 構造、伝導電子による S DW 構造のいずれであるかを決定出来ると考えた。

その後中性子回折の技術が進み、この三つの可能性の区別は Field cooling なしで解決され、S DW であると決定した。*(c.f. §2)*。むしろ Field cooling の実験が行なわれるようになつたのはこれ以後である。

1962 年、Shirane & Takei^[17] は 10 kG (= kilo gauss) の外磁場をかけて Field cooling を行なう中性子線回折の実験を行なつたが、Field の影響は観測されなかつた。この否定的結果は恐らく磁場が弱すぎたためで、実際に後に成功した実験例では 50 kG 程

度の外磁場が使われている。

Field coolingによる結晶の対称性の低下は、1964年に^[13]つて
貴定的結果が示はじめた。先ず Montalvo & Marcus の実験では、
Cr の単結晶の主軸の一つ（例えば X 軸）に沿って磁場 H_c
をかけて Field coolingを行なつた後、別の一樣磁場をかけて結
晶に幼らく torque を観測した。その結果 cooling field の方向を
含む面（例えば xy 面）内で考えて、 $H_c=0$ のときは torque は
four-fold symmetry を示すが、 $H_c=12 \text{ kG}$ や 32 kG のときは two-fold symmetry
をもつ additional torque がつけ加わることがわかつた。この事
実の説明は Montalvo & Marcus の論文には論じられていないが、torque
の異方性を帶磁率の異方性からくるものとして次の結果
を得た。

「 $T > T_{sf}$ (= spin-flip transition temperature) では \vec{H}_c に平行な帶磁率が大き
く、 $T < T_{sf}$ では \vec{H}_c に垂直な帶磁率が大きい。」

後に Lomer & Marcus^[37]はこの結果が $T > T_{sf}$ で、transverse sine と screw の 3
うちどちらのモデルと合うかを検討し、sine らしいと結論

してい

Watts^[38] は Field cooling を行なつた後、de Haas-van Alphen 効果を観測し $T < T_{sf}$ のとき結晶は \vec{H}_c の方向を四回軸とある正方対称性を示すことを知った。これは \vec{H}_c に直角な面内で特別の方向がなることを意味し、Watts は $\vec{\vartheta} \parallel \vec{H}_c$ と結論した。($\vec{\vartheta}$ は $S D W$ の wave vector)。更に「温度を上げても $\vec{\vartheta}$ の方向は変わらない」との推測のもとに Watts は $T > T_{sf}$ でも $\vec{\vartheta} \parallel \vec{H}_c$ と考え、又正方対称性の要求に合ひよるに transverse screw を予想している。
 また $H \sim 100$ kG (Field coolingではないので添字Cを取つた)位の強い磁場をかけた $T > T_{sf}$ で観測すると $T < T_{sf}$ で $\vec{\vartheta}$ は 90° 回転し $\vec{\vartheta} \perp \vec{H}$ となることをも発見した。中性子線回折で $\vec{\vartheta}$ (スペクトル)の向きの関係はわかつてゐるので、これと合わせて上の結果は次の二つによるとめられる。

$T < T_{sf}$ では、 $\vec{\vartheta} \parallel \vec{\vartheta} \parallel \vec{H}$ (for H 小), $\vec{\vartheta} \parallel \vec{\vartheta} \perp \vec{H}$ (for H 大)

$T_N > T > T_{sf}$ では、 $\vec{\vartheta} \perp \vec{\vartheta} \parallel \vec{H}$ と推定

Field cooling して後中性子線回折を行なう実験も、1965 年に

がつて行かれるよろにがつた。Arrott, Werner & Kendrick^[39]は中性子線回折でWattsの推測「 $T > T_{sf}$ で $\vec{q} \parallel \vec{H}_c$ 」が正しいことを確認出来た。又Brown, Wilkinson, Forsyth & Nathans^[19]は polarized neutron を使って中性子回折を行ひ \vec{H}_c と \vec{s} との関係を出るを試みた。
 彼等の実験結果の解析から $T > T_{sf}$ で S D W は transverse sine であることが結論され、spin polarization の方向は $\vec{s} \perp \vec{H}_c$ であると定められた。又彼等の実験では円柱形の sample crystal を使ってみるとのだが、 \vec{q} は \vec{H}_c の方向に殆んどよらす常に円柱の軸に近いと報告されている。これは Watts や Arrott et al の結果、「 $\vec{q} \parallel \vec{H}_c$ 」と矛盾するが、恐らくは Nathans et al の場合には結晶の strain のために \vec{q} が動き難いのであろう。もし $\vec{q} \parallel \vec{H}_c$ であると $\vec{s} \perp \vec{H}_c$ 、 $\vec{s} \perp \vec{q}$ の条件から \vec{s} の方向は定まらず、Nathans et al の条件「 $\vec{s} \perp \vec{H}_c$ 」は spin polarization の方向を定める役に立たぬことは注意を要する。

これららの結果をつき合ふやてみると

「 $T_N > T > T_{sf}$ では、 $\vec{s} \perp \vec{q} \parallel \vec{H}_c$ で transverse sine 」

は正しいようである。screw を主張しているのは Watts だけだが、Watts の実験は $T < T_{sf}$ だけであり、 $T > T_{sf}$ は推測にすぎない。

もう一つ興味ある実験として Møller, Blinowski, Mackintosh & Brun のものがある。彼等は strain-annealing して作った結晶を使って中性子線の磁気散乱の実験をしておりが、Field cooling を全然しなくても立方対称性は破れていたと言った。彼等はこの結果を解釈して、「strainのために格子も歪み、電子分布が変るので内部磁場に異方性を生じ、あたかも外部磁場をかけたときと同じよう感じるのであろう」と考へている。又この sample では T_N 以上でも magnetic moment の short range ordering の存在が観測されている。これは Wilkinson, Wallan, Koehler & Cable の結果と矛盾しているように見えるが、これも又 strainのために short range order が生じたと考えられる。

§ 5 本論文の目的と内容

本論文の目的は S DW に 磁場が あつたときの 動きを
理論的に 定めることである。 § 1 で述べたように、 モデ
ルは 単純化して 考えても 先に 以後の 計算は 出来るだけ 教
学的に 正確に行ひうることを 目標とする。

S DW の 起る 機構の モデルとしては Tachiki & Nagamiya^[3] の もの
を 構る。 Tachiki & Nagamiya 及び Nagamiya, Motizuki & Yamasaki^[4] の 研究により 少く
とも screw 構造の 起る 機構は (この モデルの 範囲内で) 完
全に 解明されたと言える。 これらの 研究から 一步を 進め
て、 同じ モデルのもとに 外磁場の 影響を 論ずる二点を 本
論文の 課題とした。 もつと 具体的には 次の 四つの 真が 研
究目標である。

(1) 外磁場がある場合、 S DW が 安定となるための 条
件を求め phase diagram を 描くこと。

(2) sine 構造と screw 構造の いすれか 安定であるかを 決

めること

(3) 外磁場をかけたとき、スペクトル ω と外磁場 H の向きの関係を定めること。

(4) screw 構造にかかる帶磁率の異方性を求めるこ⁴と。

これらのことについてもう少し詳しく説明する。

(1) については、外磁場をかけた場合の最安定が unsaturated ferro の状態を先ず求めたとき、これに無限小振幅の SDW を加えたときエネルギーが上るか下るかを見る。従つて unsaturated ferro の local stability を問題にしていることになる。

我々は外磁場 H 及び Wannier 関数の intraatomic coulomb integral U を parameters として、unsaturated ferro が locally unstable すむうち無限小 SDW を加えた方がエネルギーが下るようなら (H, U) の組の範囲 ⁸を求めた。得られた結果を、横軸 U 、縦軸 H のグラフに ¹² 図示すれば、SDW 出現(or 消滅)のための phase diagram とみせらる。 (cf. Part I. chapter 3) この phase diagram は k_F (=Fermi 球の半径) の値をきめることに一枚ずつ描かれる。種々の k_F に対する結果

を比較して $H=0$ の特別の場合を考えると、外磁場が k_F と U の parameter とすると phase diagram が得られる。これには SDW の他に Ferro, USF, Para 等の磁気構造の安定領域も書き加えること出来るし、実際 Part I 第 4 章末には元のようすの phase diagram を描いてある。

(2)についての説明は次の如くである。SDW のうち、

screw 構造については既に Nagamiya, Matzuki & Yamasaki によつて解かれ
 ているが、 sine 構造については（攝動によらず） exact に
 解くことは不可能である。又、攝動計算によつて解いた
 のでは screw と sine との差はすぐなる。これ故 screw と sine
 のうちどちらが安定であるかを調べるには攝動計算では
 驚目で、(sine は exact に解けぬから) もつと別の近似法を
 考えなればならない。こういう困難な状況を打解する
 ために外磁場 H をかけた場合を考察し $H \rightarrow 0$ の極限を考え
 るのは一つの有効な方法であろう。 $H > 0$ であると攝動計
 算の範囲でも screw と sine の差は現われると考えられる
 ら、こゝで両者のうちどちらが安定かを定めて $H \rightarrow 0$ の極
 限を考えることにより、 $H = 0$ での安定性の比較を論じよ
 うと言うのである。この原理によつて我々の導き出した
 結果は Part I, Chapter 4, § に述べてある。結果は μ の値によつ
 て異なるが sine と screw との差は必ずしもつけることを示
 せられた。だまう、このより安易な方法とは sine と

screw は区別出来ず、可能な限り正確に sine 構造を解く以外、両者の ($H=0$ の) 安定性を比較出来ないと言ふことを知った。

(3)についての説明は次の如くである。 $H > 0$ において sine と screw の双方について \bar{H} が H と直角な場合、平行な場合をそれぞれ考え、これらを安定性を比較する。計算はすべて絶対零度のものだから、得られた結果は $T < T_{sf}$ の温度領域に対応しているであろう。我々の導き出した結

果は Part I, Chapter 4, § に述べてあるが、Watts^[38] の実験結果とは一致している。又我々の結果を $T > T_{sf}$ にまで適用して考えると、Arrott et al.^[39] の実験とも一致し Nathans et al.^[40] の実験とも consistent である。最後に

(4)については次の如くである。S.D.W のうち screw 構造だけしあ exact に解けていながら、screw 構造についてだけ考える。screw の回転軸に平行に磁場をかけたときの帶磁率 (= 垂直帶磁率 χ_+) と、回転面に平行に磁場をかけた

ときの帶磁率 (= 平行帶磁率 χ_{\parallel}) をそれぞれ計算して比較するのが目標であった。ところが χ_{\perp} は比較的求めやすいが、 χ_{\parallel} を求めるとに要する計算は非常に複雑となるので、本論文では χ_{\parallel} については一般式を出しただけで数值計算を行っておらず、従ってその値を χ_{\perp} と比べることも出来ない。なお χ の異方性をもつと一般に論ずるには帶磁率 tensor χ_{ij} の概念が必要となるが、我々はこの一般化のもとで異方性を論すべく準備している。(c.f. Part II Chapter 4)。我々は χ_{\perp} の値しか求めていながらのでの計算結果を Montalvo & Marcus^[1] の実験結果と比較することは出来ない。然し χ_{\perp} を spin 常磁性での χ と比較することにより幾つかの information は得られるであろう。(c.f. Part II Chapter 5)

本論文は二つの Part から成る。いすれも SDW に磁場をかけた場合を考えるのであるが、Part I では磁場を無攝動 Hamiltonian の中に含めて SDW を攝動項とみた取り扱い、又 Part II では逆に SDW を無攝動 Hamiltonian の中に含めて磁場を

攝動項とみなして取り扱いが述べてある。

Part I では前期四目標のうち (1) の phase diagram の問題が主目標となり (2) と (3) の結果が副産物として得られる。Part II では (4) の帶磁率の問題が目標となる。

又本論文の結果の検討のみに留まらず、関連のある事柄についての discussion はすべて Part I の最後 (Part I, Chapter 4) で行なつた。これに対し Part II の discussion (Part II, Chapter 5) は Part II での計算結果に関する注意だけに留めた。

Chap. 1. Formulation of the theory

§ 1. Introduction

結晶内の伝導電子の集団に外磁場をかけた場合を考える。このときの Hamiltonian は、

$$\text{一體の部分 } \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 + \mu_B H \sigma_z \quad (1.1)_1$$

$$\text{二体の部分 } \mathcal{H}_{\text{int}} = e^2 / |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \quad (1.1)_{\text{int.}}$$

ただし外磁場 H は又軸の正の方向にかけるものとする。
又 σ_z は運動エネルギー十結晶場のポテンシャルである。

電子系の状態が一體波動函数の Slater 行列式で記述されるとすれば、上記の Hamiltonian に対して E_{total} を最小にするようすの Slater 行列式を求めることが問題になる。その

際、要素たる一体波動函数自身も一般には λ の固有函数とは限らない。然しながらこの効果を無視して先づ次のような問題を設定する。

一体波動函数はすべて λ の固有函数とし、たゞ \pm パスの電子数と一スピンの電子数とは異なつてよいとする ($n_+ \neq n_-$)。このような Slater 行列式のみを考えて、その範囲内での E_{total} の最小を先づ求めよう。(§2)

λ_{int} の交換積分が充分大であると、外磁場 $H = 0$ であつても $n_+ = 0$, $n_- = n$ となる。これが Stoner model による強磁性の説明である。又交換積分が小さいと $H = 0$ のとき $n_+ = n_-$ となり、 $H = 0$ では $n_- - n_+$ は H に比例する。これが Pauli 常磁性である。交換積分が中間的な値のときは $H = 0$ で $0 < n_- - n_+ < n$ となる。このよろずな状態は Unsatuated Ferro (= USF) と呼ばれる。§.2 で不適當な一体化 Hamiltonian \mathcal{H}_1 を設定することにより、これらのことと導く。

本論文では Cr 等の 3d 電子を対象としているので、結晶

5 10 15 20
内の電子は自由電子様ではなく、むしろ各イオンによく
局在しているものと考えねばならぬ。この状況を理想化
して次の仮定をおく。(Well-localizedの仮定)

「Wannier函数を $w(\vec{r})$ であらわすとき、

$$\int w^*(\vec{r}_1 - \vec{R}_i) w^*(\vec{r}_2 - \vec{R}_j) \mathcal{E}_{\text{int}} w(\vec{r}_1 - \vec{R}_k) w(\vec{r}_2 - \vec{R}_l) d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 = \delta_{ik} \delta_{jl} \delta_{ij} V$$

ただし下は電子の位置を表す変数、 \vec{R}_i 、 \vec{R}_j はイオンの位置をあらわす定ベクトル」。

此の固有函数 $y_{\vec{k}}(\vec{r})$ は上記の $w(\vec{r})$ を用いて

$$y_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}_j} w(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (N \text{ はイオンの総数}) \quad (1.3)$$

とあらわされる。

此 $y_{\vec{k}} = \epsilon(\vec{k}) y_{\vec{k}}$ であるが、固有値 $\epsilon(\vec{k})$ に対して次の仮定をおく。(自由電子様エネルギースペクトル)

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{k}^2 \quad (\text{第一 Brillouin zone 内で}) \quad (1.4)$$

すなはち、電子質量 m の代りに有効質量 m^* で書きかえれば
以外は、自由電子のときと同じである。

この仮定は波動函数に対する仮定(1.2)と矛盾はしない。
(少し気持は悪いけれど)。仮定(1.4)は電子が自由電子に近
いと言ふ意味ではなく次のよろくな意味である。

一般に $\epsilon(\vec{k})$ は $\vec{k}=0$ で極値を取ることと結晶の立方対称性
により、 $\vec{k}=0$ のまわりに Taylor 展開して \vec{k} の二次の項
まで取ると(1.4)の右辺の形をもつ。従って(1.4)は少くとも
 $\vec{k}=0$ では良い近似である。よって仮定(1.4)の本質的な部分
は \vec{k} が大きくなつてもそれが成立すると考えるところにあ
る。これは全く計算の便宜上の仮定である。

§ 2 E_{total} を最小にする USF の決定

前々で説明したよろしく $n_- \geq n_+$ と考えたいのであるが、
そのためには一体化 Hamiltonian;

$$\bar{\mathcal{H}}_1 = \mathcal{H}_0 + \mu_B (H + M) \sigma_z \quad (1.5)$$

を考え、その固有値 $E^\pm(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}) \pm \mu_B (H + M)$ の小さな順番
に state をつめて行くと考えよう。こゝに M は後から定め
るべき未定定数である。

$E^\pm(\vec{k}) \leq E_c$ をみたすよろしく範囲の \vec{k} がつまつたものとす
る。 $k_c^2 = 2m^* E_c / \hbar^2$, $\tilde{\mu}_B = 2m^* \mu_B / \hbar^2$ とするとこの範囲は

$$\begin{aligned} \text{プラスベーンでは } \vec{k}^2 &\leq k_c^2 - \tilde{\mu}_B (H + M) \equiv k_+^2 \\ \text{マイナスベーンでは } \vec{k}^2 &\leq k_c^2 + \tilde{\mu}_B (H + M) \equiv k_-^2 \end{aligned} \quad \} \quad (1.6)$$

となる。たゞし $\vec{k} = 0$ を中心とし半径 k_c の球の第一 Brillouin

zone の中に含まれるものと仮定し、又 $k_c^2 \leq \mu_B(H+M)$ のとき
且 $k_+ = 0$ と考える。

E_{total} は次のようであらわされる。

$$E_{\text{total}} = \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} E_1^+(\vec{k}) + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} E_1^-(\vec{k}) \\ + \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_+ \\ |\vec{k}'| \leq k_+}} E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') + \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_- \\ |\vec{k}'| \leq k_-}} E_2^{--}(\vec{k}, \vec{k}') + 2 \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_+ \\ |\vec{k}'| \leq k_-}} E_2^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') \right\} \quad (1.7)$$

$T = 0$

$$E_1^\pm(\vec{k}) = \langle \Psi_{\vec{k}}^\pm | \mathcal{H}_0 + \mu_B H \sigma_z | \Psi_{\vec{k}}^\pm \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} \pm \mu_B H \quad (1.8)$$

$$E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') = E_{\text{coupl.}}^{++}(\vec{k}, \vec{k}') - E_{\text{exch}}^{++}(\vec{k}, \vec{k}') \\ = \langle \Psi_{\vec{k}}^+(1) \Psi_{\vec{k}'}^+(2) | \mathcal{H}_{\text{int}} | \Psi_{\vec{k}}^+(1) \Psi_{\vec{k}'}^+(2) \rangle \\ - \langle \Psi_{\vec{k}}^+(1) \Psi_{\vec{k}'}^+(2) | \mathcal{H}_{\text{int}} | \Psi_{\vec{k}'}^+(1) \Psi_{\vec{k}}^+(2) \rangle \quad \text{etc.} \quad (1.9)$$

の肩の土はスペンの up, down を意味する。

Well localized の仮定 (1.2) より

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \Psi_{\vec{k}}(1) \Psi_{\vec{k}}(2) | \mathcal{H}_{\text{int}} | \Psi_{\vec{k}}(1) \Psi_{\vec{k}}(2) \rangle = 0 \quad \text{if } \vec{k}_1 + \vec{k}_2 \neq \vec{k}_3 + \vec{k}_4 \\ = \text{const. for } \vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4 \end{array} \right\} \quad (1.10)$$

の関係が導かれる。この const. の値を $\frac{\hbar^2 U}{2m^* N}$ とおく。これは (1.2) で与えた Wannier 関数の intraatomic-Coulomb integral V と次式の関係にある。

$$V = \frac{\hbar^2}{2m^*} U \quad (1.10)$$

とおくことと同等である。Wannier 関数の形をきすれば U の値はきるが、こゝでは U は一つのパラメータと見なす。

(1.10) を (1.9) に代入すると $E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') = 0$ となり、同様に $E_2^{--}(\vec{k}, \vec{k}) = 0$ となる。然し $E_2^{+-}(\vec{k}, \vec{k}')$ については、

$E_{\text{coul}}^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\hbar^2 U}{2m^* N}$ であるが、 $\psi_{\vec{k}}^+$ と $\psi_{\vec{k}'}^-$ のスピン状態が異なるため $E_{\text{exch}}^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') = 0$ であり、従って cancellation が起らぬ。<

$$\left. \begin{aligned} E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') &= E_2^{--}(\vec{k}, \vec{k}') = 0 \\ E_2^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') &= \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \end{aligned} \right\} (1 \cdot 11)$$

(1.8) と (1.11) を (1.7) に代入すると

$$E_{\text{total}} = \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} + \mu_B H \right) + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} - \mu_B H \right) + \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} n_+ n_- \quad (1 \cdot 12)$$

where

$$n_{\pm} = d \frac{4\pi}{3} k_{\pm}^3 \quad (1 \cdot 13)$$

d は \vec{k} -space の単位体積あたりの state の個数。

(1.12) の \sum を積分で計算すれば

$$E_{\text{total}} = \left(\int_0^{k_+} + \int_0^{k_-} \right) \frac{\hbar^2 d}{2m^*} \vec{k}^2 4\pi k^2 dk + \mu_B H \left(\sum_{|\vec{k}| \leq k_+} 1 + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} 1 \right) + \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} 1 \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} 1$$

$$\frac{2m^*}{\hbar^2} E_{\text{total}} = \frac{4\pi}{5} d(k_+^5 + k_-^5) + \tilde{\mu}_B H (n_+ - n_-) + \frac{U}{N} n_+ n_- \quad (1.14)$$

M を適当に選んで E_{total} を最小にすると、 $n_+ + n_- = \text{const.}$
 = given n だから

$$\frac{dn_-}{dM} = - \frac{dn_+}{dM}$$

又 (1.13) より

$$\frac{dn_{\pm}}{dM} = 4\pi d k_{\pm}^2 \frac{dk_{\pm}}{dM}$$

従って (1.14) を M で微分すると

$$\frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{d}{dM} E_{\text{total}} = \left\{ k_+^2 - k_-^2 + 2\tilde{\mu}_B H + \frac{U}{N} (n_- - n_+) \right\} \frac{dn_+}{dM}$$

$n_+ > 0$ にすると E_{total} の極値をもつとすると、(1.6) より

$$k_+^2 - k_-^2 = -2\tilde{\mu}_B (H + M) \text{ を上式に代入して}$$

$$-2\tilde{\mu}_B M + \frac{U}{N} (n_- - n_+) = 0$$

従つて

$$\tilde{\mu}_B M = \frac{U}{2N} (n_- - n_+) \quad (1 \cdot 15)$$

の関係を得る。これが E_{total} を最小にするよう M の値を求める方程式である。

もう少し詳しく書きり書きと

$$\tilde{\mu}_B M = \frac{U}{2V} \frac{4\pi}{3} \left[\left\{ k_c^2 + \tilde{\mu}_B (H + M) \right\}^{\frac{3}{2}} - \left\{ k_c^2 - \tilde{\mu}_B (H + M) \right\}^{\frac{3}{2}} \right] \quad (i)$$

(V ; オー Brillonin zone の体積 = N/d) } (1.16)

$$\left\{ k_c^2 + \tilde{\mu}_B (H + M) \right\}^{\frac{3}{2}} + \left\{ k_c^2 - \tilde{\mu}_B (H + M) \right\}^{\frac{3}{2}} = \text{given const} \equiv 2k_F^3 \quad (ii)$$

を連立させて M と k_c を求めればよい。 $(1 \cdot 16)$ の (i) 式は $(1 \cdot 6)$ と $(1 \cdot 13)$ を $(1 \cdot 15)$ に代入して得られる。(ii) 式は伝導電子の総数が一定と言ふ条件である。

§ 3 USF と Ferro との境界

連立方程式 (1.16) を解くには次のようにするとする。
 本来は外磁場 H の値を一つ与えてそれに対する M と k_c を求めるべきであるが、それで下考を難いので $H+M=\alpha$ を独立なパラメータと考え、 α の値を与える。このとき (1.16) は容易に解ける。つぎに α の値を一つきめると (ii) 式は k_c を求める方程式となる。こうして求めた k_c と与えられた α を (i) 式の右辺に代入して M を計算する。こうして得られた M と k_c は、明らかに外磁場 $\alpha - M$ に対応する値である。

このように α の値を先ず与える立場に立つと計算しやすいのであるが、その際一つの注意を必要とする。それは α の値の取り得る範囲に制限があることである。外磁場 $H=0$ のときは自発磁化が起つていると言ふ場合を想定してみよう。これは $H=0$ に対する M の値を M_0 とする

とき $M_0 > 0$ であることを意味する。外磁場 $H \geq 0$ に対応する ¹
 エの範囲は $\alpha \geq M_0$ と考えるべきであつて、従つて $0 \leq \alpha < M_0$ 。
 なる α の値は取り得ない。そこで α の変域を定めるため
 には、あらかじめ M_0 を求めてしまひなくてはならぬが、こ
 の手続きは面倒なのでその代りに次の方法を取ることに
 する。「 α の値を任意に与えて(1.16)より M と E_C を求める。
 もし $\alpha - M < 0$ となるようなら、二の α は意味がない
 ためのとして捨てる。」

連立方程式(1.16)にはもう一つ注意すべき点がある。
 それは方程式(1.15)を立てる前に、極値 $n_+ > 0$ の範囲で起
 ると仮定したところである。 $n_+ = 0$ は Ferromagnetic state に対応
 するから、外磁場 H が或る critical value H_F 大きくすれば
²
 E_{total} は $n_+ = 0$ で最小になると期待される。この critical value
 H_F は次のよろしくて求まる。外磁場 H が 0 から次第に増
 加するとき、spin polarization は連続的に増加して遂に Ferro-
 magnetic state に達するであろう。このことは E_{total} を最小に

ある n_+ の値が、 H の増加につれて連続的に $n_+ \rightarrow 0$ と tend することを意味する。従つて (1.16) において $n_+ \rightarrow 0$ を考え、さうむち $k_c^2 = \tilde{\mu}_B(H + M)$ とおいた場合が、3.3 と critical field H_F を与えることになる。この方針によつて以下 H_F を計算する。 $k_c^2 = \tilde{\mu}_B(H + M)$ とおると (1.16) は次のようになつる。

$$\tilde{\mu}_B M = \frac{U}{2V} \frac{4\pi}{3} \left\{ 2 \tilde{\mu}_B (H + M) \right\}^{3/2} \quad (i)$$

$$\left\{ 2 \tilde{\mu}_B (H + M) \right\}^{3/2} = 2 k_F^3 \quad (ii)$$

この二式から M を消去する。

(ii) より

$$\tilde{\mu}_B (H + M) = \frac{1}{3\sqrt{2}} k_F^2$$

$$(ii) を (i) に代入して \tilde{\mu}_B M = \frac{U}{V} \frac{4\pi}{3} k_F^3$$

辺々引き合つて H が求まる。これが H_F である。従つて

$$\tilde{\mu}_B H_F = \frac{1}{3\sqrt{2}} k_F^2 - \frac{U}{V} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \quad (1.17)$$

(1.17) によって定まつた H_F に対し、 $H \geq H_F$ では電子系は Ferromagnetic となり、 $H < H_F$ では USF となる。
 もし (1.17) の右辺が負であると $H=0$ でも Ferromagnetic state となるがこれは磁場なしで既に飽和磁化が起ることを意味しこの物質は強磁性を示すことになる。そのための条件は (1.17) の右辺 ≤ 0 を解いて；

$$U \geq \frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{3V}{4\pi} \frac{1}{k_F} \quad (1.18)$$

すなわち intraatomic Coulomb integral が充分大であると強磁性になる。

外磁場のために Ferromagnetic state が誘起される場合も含めて、以上の結果は次のようまとめられる。

「Ferromagnetic state が実現される条件は次の如くである。

(1.18) がみたされれば 磁場の有無にかかわらず、

(1.18) がみたされなければ、(1.17) できまる H_F より大きな磁場をかけたとき」。

が (1.17) で $U \rightarrow 0$ と見てみると次のことがわかる。

$$\tilde{\mu}_B H \geq \frac{1}{\sqrt[3]{2}} k_F^2 \quad (1.19)$$

であると、 U の値の如何にかからず Ferromagnetic state となる。

§ 4 無限小振中の spin density wave

前々では Slater 行列式の要素たる一體波動函数と 1 つめの固有函数 $\varphi_1(\vec{r})$ を用い、たゞ \pm パスパンと一スパンの電子数の差だけをいろいろ変えて E_{total} を最小にした。

この後では一體波動函数を変えることを考えよう。先づ外磁場 $H=0$ の場合について考える。Introduction で述べたように Cr について spin density wave (= SDW, screw 又は sine) の存在が中性子線回折の実験から知られており、又理論的にも intraatomic Coulomb integral U の値が適当であると SDW の方

が para や U S F よりもエネルギーが低くなることが示されつつある。そこで外磁場がある場合についても U S F と S D W のエネルギーを比較することが問題となる。但しこの場合 S D W は磁場によつて変調されたものを考へるべきで、例えば磁場が screw の回転面に直角の場合には S D W は磁場の方向を軸とした cone に付つてゐると考へべきである。

S D W 構造を self-consistent な Slater 行列式で記述するためには、[3], [4] で考へたよろに先ず一體化 Hamiltonian \bar{H} を適当に設定し \bar{H} の固有函数で Slater 行列式を作らねばならぬ。§ 2 で安定な U S F を決定するためには未定定数 M を導入して作った一體化 Hamiltonian (1.5) から出发して計算を進めめたのも、S D W の場合との関連を考慮したからか二とびである。U S F の決定のためだけの目的なら M をパラメータと見るより、分極率 $= (n_- - n_+) / (n_- + n_+) \equiv \chi$ をパラメータと見方に方べ自然であると見通してもよかつたであろう。

磁場 H で変調された S D W のためには、一体化 Hamiltonian として次の形のものを設定する方が自然であろう。

$$\bar{H}_i = H_0 + \mu_B (H + M) \sigma_z + H_{SDW} \quad (1 \cdot 20)$$

すなはち磁場がなしときの S D W, 磁場があるときの U SF に対応する項を共に持つよろず \bar{H}_i を考えるやりである。こゝに H_0 は $\S 1$ と同じく運動エネルギー + 結晶ポテンシナルを意味し、その固有値と固有函数についての仮定 (1.2), (1.4) も引き続き仮定する。

又 H_{SDW} は screw 又は sine 構造に対する電子間 interaction の一體化であるが、(1.20) の右辺第二項により Z 軸が特別の意味を持ち立方対称性が破れているので、spin polarization の方向が Z 軸 (= 磁場の方向) と平行な直角 α を区別せねばならぬ。従つて次の四通りの場合が考えられる。

① Screw A

$$H_{SDW} = \sum_i q (\vec{r} - \vec{R}_i) \left\{ \sigma_x \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) + \sigma_y \sin(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \right\} \quad (1 \cdot 21)_1$$

② Screw B

$$\mathcal{H}_{SDW} = \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \left\{ \sigma_x \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) + \sigma_y \sin(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \right\} \quad (1 \cdot 21)_{(2)}$$

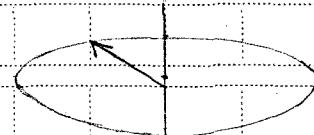
③ Sine A

$$\mathcal{H}_{SDW} = 2 \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \sigma_z \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \quad (1 \cdot 21)_{(3)}$$

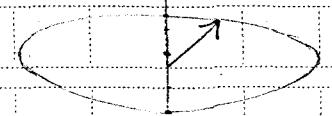
④ Sine B

$$\mathcal{H}_{SDW} = 2 \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \sigma_x \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \quad (1 \cdot 21)_{(4)}$$

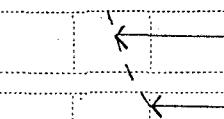
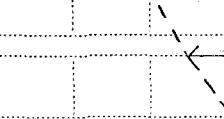
① は 人ビンが XY 面内で回転する Screw, ② は YZ 面内で回転する Screw, ③ は Z 軸方向に振動する sine, ④ は X 軸方向に振動する sine である。然し \vec{q} の方向と \vec{r} の方向との関係はどうであつてもよい。ちなみに spiral でも cycloidal でも Screw A は考えられ、兩者の間に（伝導電子とイオニの spin-orbit coupling を考えぬ限り）エネルギーの差はない。（参考図 Fig. 1.1 ~ Fig. 1.4 を参照のこと）。何故なら (1.20) の \vec{x}_1

Fig. 1.1 (Spiral $\vec{q} \perp \vec{\sigma}$ の回転面)(i) $\vec{H} \parallel \vec{q}$ $\vec{H} \perp \vec{\sigma}$ の回転面

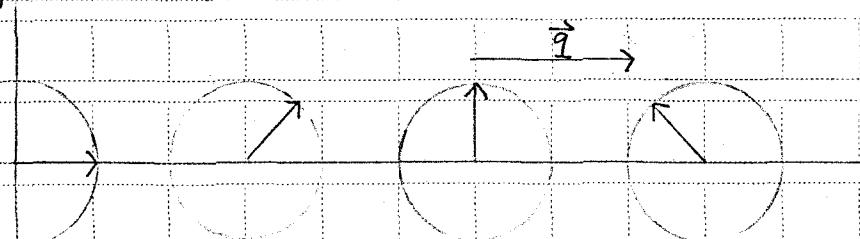
なら Screw A

(ii) $\vec{H} \perp \vec{q}$ $\vec{H} \parallel \vec{\sigma}$ の回転面

なら Screw B

Fig. 1.3 (Transverse $\vec{q} \perp \vec{\sigma}$)(i) $\vec{H} \parallel \vec{q}$ $\vec{H} \perp \vec{\sigma}$ なら Sine A(ii) $\vec{H} \perp \vec{q}$ $\vec{H} \parallel \vec{\sigma}$ であっても $\vec{H} \perp \vec{q}$ であっても $\vec{H} \perp \vec{\sigma}$ さえあれば

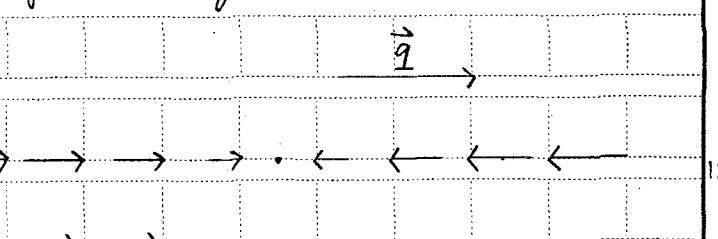
Sine B

Fig. 1.2 (Cycloidal $\vec{q} \parallel \vec{\sigma}$ の回転面)(i) $\vec{H} \perp \vec{q}$ $\vec{H} \perp \vec{\sigma}$ の回転面

なら Screw A

(ii) $\vec{H} \parallel \vec{q}$ $\vec{H} \parallel \vec{\sigma}$ の回転面

なら Screw B

Fig. 1.4 (Longitudinal $\vec{q} \parallel \vec{\sigma}$)(i) $\vec{H} \parallel \vec{q} \parallel \vec{\sigma}$ なら Sine A(ii) $\vec{H} \perp \vec{q}$ } なら Sine B $\vec{H} \perp \vec{\sigma}$ }

は電子の空間座標について立方対称性を持つており、 x 軸 y 軸 z 軸を取りかえても不变である。又(1.20)の $\bar{\chi}_c$ で見る限り spin-orbit coupling は全然入っていなければ、スピンの向きは変えながら空間座標の方だけ座標軸の取りかえを行ひても $\bar{\chi}_c$ は変わらなければである。 $\bar{\chi}_c$ の方向は結晶主軸の(一つの)方向を向くと期待される。最安定状態は、可能な限り縮退が少なければと思われるからである。

Screw 又は Sine 構造の方が USF よりもエネルギーが低くなるようなる範囲 (intraatomic Coulomb integral U の値の範囲) を求めることが以後の目的である。(1.20)の $\bar{\chi}_c$ の固有函数を exact に求めることは難いので、 χ_{SDW} が微小の場合に話を限り χ_{SDW} を攝動項とみなして攝動計算を行なう。従つて § 2 で求めた USF に無限小振中の SDW を加えた場合にエネルギーが増加するか減少するかを調べるわけである。結局 USF の local stability を問題にしてゐることになる。

Wannier 函数の well localized の仮定 (1.2) に対応して、

$g(\vec{r})$ も又充分 short range なものであると仮定して、

$$\int g(\vec{r} - \vec{R}_i) |w(\vec{r} - \vec{R}_j)|^2 d^3 r = g \delta_{ij} \quad (1.22)$$

であるとしよう。すると (1.20) の $\bar{\ell}_i$ について M を g と未定定数とする。このうち M は §2 で求めた値をそのまま採用する。 g は微小と考えていいので M の値には影響を及ぼさないと思われるからである。残った不定性は g だけであるが、 E_{total} を g の函数として g の二次の項まで計算し、 $g=0$ が E_{total} の極小値を与えるかどうかを調べよう。これが以後の方針である。

$H=0, g \rightarrow 0$ のとき、SDW 出現のための U の critical value は次の式で与えられ、screw と sine との差異はなかった。

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{N} \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} \frac{1}{x(\vec{k})} \quad (1.23)$$

where $x(\vec{k}) = \frac{1}{2} \{ \epsilon(\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}) - \epsilon(\vec{k}) \}$ (1.24)

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{N} \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} \frac{1}{\epsilon(\vec{k})} \quad (1.23)$$

$$\text{where } \chi(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left\{ \epsilon(\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}) - \epsilon(\vec{k}) \right\} \quad (1.24)$$

\vec{K} は 遊 極 子 ベ ク ト ル で、 $\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}$ は 第 一 Brillouin zone に 属 す る
も の と す る。

然し 外 磁 场 $H > 0$ の と き に は、 screw と sine と て 差 が 現 め
れ る。 それ を 見 る り が この part I の 主 内 容 り 一 つ で あ る。

(c.f. Introduction §)

§ 5 \bar{H}_0 の行列要素

\mathcal{H}_0 の固有函数 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ を base として、(1.20) の \bar{H}_0 を Matrix であらわしてみよう。(以下複号同順)。先ず明らかに

$$\left. \begin{aligned} \langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | \mathcal{H}_0 | \psi_{\vec{k}'}^{\pm} \rangle &= E(k) \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \\ \langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | \mathcal{H}_0 | \psi_{\vec{k}'}^{\mp} \rangle &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1.25)$$

$$\left. \begin{aligned} \langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | \mu_B(H+M) \sigma_z | \psi_{\vec{k}'}^{\pm} \rangle &= \pm \mu_B(H+M) \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \\ \langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | \mu_B(H+M) \sigma_z | \psi_{\vec{k}'}^{\mp} \rangle &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1.26)$$

次に \mathcal{H}_{SDW} の行列要素について考える。

$$\begin{aligned} &\langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | \sum_j g(\vec{r} - \vec{R}_j) \sigma_z e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} | \psi_{\vec{k}'}^{\mp} \rangle \\ &= \langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | \sum_j g(\vec{r} - \vec{R}_j) \sigma_x e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} | \psi_{\vec{k}'}^{\pm} \rangle \\ &= \langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | \sum_j g(\vec{r} - \vec{R}_j) \sigma_y e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} | \psi_{\vec{k}'}^{\pm} \rangle = 0 \end{aligned} \quad (1.27)$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} \mid \sum_j g(\vec{r} - \vec{R}_j) \sigma_x e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} \mid \psi_{\vec{k}'}^{\pm} \right\rangle \\ &= \pm \frac{g}{N} \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{R}_j} = \pm g \delta_{\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}-\vec{K}} \quad (1.27)_2 \end{aligned}$$

$$\left\langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} \mid \sum_j g(\vec{r} - \vec{R}_j) \sigma_y e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} \mid \psi_{\vec{k}'}^{\mp} \right\rangle = g \delta_{\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}-\vec{K}} \quad (1.27)_3$$

$$\left\langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} \mid \sum_j g(\vec{r} - \vec{R}_j) \sigma_z e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} \mid \psi_{\vec{k}'}^{\mp} \right\rangle = \mp i g \delta_{\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}-\vec{K}} \quad (1.27)_4$$

この計算には well localized の仮定 (1.2) 及び (1.22) を用いた。

\vec{K} は逆格子ベクトルで $\vec{k} - \vec{q} - \vec{K}$ が第一 Brillouin zone に属するものとする。(勿論 \vec{K} は \vec{k}, \vec{q} に depend してきまる)。

(1.27) の結果より \mathcal{H}_{SDW} の行列要素が求まる。これを (1.25) (1.26) の結果を加えると \mathcal{H}_1 の行列要素が得られる。途中の計算はこゝには書かぬが、最終結果はこの chapter の終りに一覧表として掲げてある。

§ 6 \bar{H}_1 の 固 有 函 数

この § では H_{SDW} を 摂動 項 とみなし て、 \bar{H}_1 の 固 有 函 数 $\psi_{\vec{k}}$ を 摂動 計算 によつて 求める。

一般に 無 摂動 Hamiltonian の 固 有 函 数 を y_i 、固 有 値 を E_i 、 $\{y_i\}$ を base と して 摂動 項 の 行 列 要 素 を h_{ij} と す る と き、全 Hamiltonian の 固 有 函 数 $\psi_{\vec{k}}$ は 近似 的 に

$$\psi_{\vec{k}} = \sqrt{1 - \sum_{j \neq i} |a_{ij}|^2} y_i + \sum_{j \neq i} a_{ij} y_j$$

where $a_{ij} = \frac{h_{ij}}{E_i - E_j}$

によつて 与えられる。(一次の 摂動 公式)。

この 公 式 によつて \bar{H}_1 の 固 有 函 数 を 求める こ と が 本 来る。例 之 ば Screw A につい て は (行 列 要 素 は この chapter 末 の 一 覧 表 参照)、

$$\psi_{\vec{k}}^+ (\vec{r}) = \sqrt{1 - \frac{1}{4} \left(\frac{g}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right)^2} \psi_{\vec{k}}^+ (\vec{r}) - \frac{1}{2} \frac{g}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- (\vec{r}) \quad (1.28)_+$$

$$\psi_{\vec{k}}^-(\vec{r}) = \sqrt{1 - \frac{1}{4} \left(\frac{g}{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right)^2} \psi_{\vec{k}}^-(\vec{r}) - \frac{1}{2} \frac{g}{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+(\vec{r}) \quad (1.28)$$

where $x(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left\{ \epsilon(\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}) - \epsilon(\vec{k}) \right\}$ (1.29)₊

$$x'(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left\{ \epsilon(\vec{k} - \vec{q} - \vec{K}) - \epsilon(\vec{k}) \right\} \quad (1.29)_{-}$$

が $\vec{\psi}_k$ の固有函数となる。

γ_k^{\pm} の値は、スピノ状態の異なる二つの state に対するものであるが、次の注意を要する。すなわち γ_k^{\pm} の場合の土体、それを $\vec{\psi}_k$ の固有值土の固有状態を意味しているため、 γ_k^{\pm} の場合は $\vec{\psi}_k$ の 固有状態ではない。 $\vec{\psi}_k$ の期待値 $\langle \gamma_k^{\pm} | \vec{\psi}_k | \gamma_k^{\pm} \rangle$ が正になるか負になるかに従って土をきめるに方ぎない。

Screw B, Sine A, Sine B についても同様に $\vec{\psi}_k$ の固有函数を求める。この chapter 末に一覧表にしてある。

§ 7 E_{total} の計算

§ 2 では USF に対して E_{total} を計算したが、Slater 行列式の要素として $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(r)$ の代りに $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ がさへえると E_{total} はどうに変化するか調べてみよう。

E_{total} は次のようにならわれれる。

$$E_{\text{total}} = \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} E_1^+(\vec{k}) + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} E_1^-(\vec{k}) \\ + \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_+ \\ |\vec{k}'| \leq k_+}} E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') + \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_- \\ |\vec{k}'| \leq k_-}} E_2^{--}(\vec{k}, \vec{k}') + 2 \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_+ \\ |\vec{k}'| \leq k_-}} E_2^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') \right\} \quad (1.30)$$

$$E_1^{\pm}(\vec{k}) = \langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | \mathcal{H}_0 + \mu_B H \sigma_z | \psi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle \quad (1.31)$$

$$E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') = E_{\text{coul}}^{++}(\vec{k}, \vec{k}') - E_{\text{exch}}^{++}(\vec{k}, \vec{k}') \\ = \langle \psi_{\vec{k}}^+(1) \psi_{\vec{k}'}^+(2) | \mathcal{H}_{\text{int}} | \psi_{\vec{k}}^+(1) \psi_{\vec{k}'}^+(2) \rangle \\ - \langle \psi_{\vec{k}}^+(1) \psi_{\vec{k}'}^+(2) | \mathcal{H}_{\text{int}} | \psi_{\vec{k}'}^+(1) \psi_{\vec{k}}^+(2) \rangle \quad \text{etc.} \quad (1.32)$$

E_{total} を q について二次の項まで計算しよう。例として Screw A の場合の計算を以下に記す。Screw B, Sine A, Sine B についても同様に計算され、その結果は二の chapter の終りに一覧表にしてある。

Screw A では $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ は (1.28) 式とえられるから

$$\begin{aligned} E_1^+(\vec{k}) &= \left\{ 1 - \frac{1}{4} \left(\frac{q}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right)^2 \right\} (\epsilon(\vec{k}) + \mu_B H) \\ &\quad + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right)^2 (\epsilon(\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}) - \mu_B H) \\ &= \epsilon(\vec{k}) + \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x(\vec{k}) - \mu_B H) q^2}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} \end{aligned} \quad (1.33)_+$$

同様に

$$E_1^-(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}) - \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x'(\vec{k}) + \mu_B H) q^2}{\{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2} \quad (1.33)_-$$

$E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}')$ の計算には、§ 2 のときと同じく次の関係を用いる。(c.f. (1.10))

$$\langle \varphi_{\vec{k}_1}(1) \varphi_{\vec{k}_2}(2) | \mathcal{H}_{int} | \varphi_{\vec{k}_3}(1) \varphi_{\vec{k}_4}(2) \rangle$$

$= \frac{\hbar^2 U}{2m^* N}$ if $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4$, 且 $\varphi_{\vec{k}_1}$ 及び $\varphi_{\vec{k}_2}$ と $\varphi_{\vec{k}_3}$ 及び $\varphi_{\vec{k}_4}$ でそれぞれスピン状態
が同じとき。

$$= 0 \quad \text{otherwise}$$

$\gamma_{\vec{k}}^\pm(\vec{r})$ は (1.28) で与えられるので、 $E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}')$ の計算は結局
上式の形の幾つかの項の和に書きなすられる。このよう
にして次の結果を得る。

$$E_{coul}^{++}(\vec{k}, \vec{k}') = E_{coul}^{--}(\vec{k}, \vec{k}') = E_{coul}^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \quad (1.34)$$

$$E_{exch}^{++}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \left\{ \sqrt{1 - \frac{1}{4} \left(\frac{g}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right)^2} \sqrt{1 - \frac{1}{4} \left(\frac{g}{x(\vec{k}') - \mu_B(H+M)} \right)^2} \right.$$

$$\left. + \frac{1}{4} \frac{g}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \frac{g}{x(\vec{k}') - \mu_B(H+M)} \right\}^2$$

(次ページに続く)

$$\begin{aligned} & \doteq \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \left[1 - \frac{g^2}{4} \left(\frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right)^2 + \left(\frac{1}{x(\vec{k}') - \mu_B(H+M)} \right)^2 \right. \\ & \quad \left. - 2 \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \frac{1}{x(\vec{k}') - \mu_B(H+M)} \right] \end{aligned} \quad (1 \cdot 35)_{++}$$

同様に

$$\begin{aligned} E_{exch}^{--}(\vec{k}, \vec{k}') & \doteq \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \left[1 - \frac{g^2}{4} \left(\frac{1}{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right)^2 \right. \\ & \quad \left. - 2 \frac{1}{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \frac{1}{x'(\vec{k}') + \mu_B(H+M)} \right] \end{aligned} \quad (1 \cdot 35)_{--}$$

$$\begin{aligned} E_{exch}^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') & = \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \left\{ -\sqrt{1 - \frac{1}{4} \left(\frac{g}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right)^2} \frac{g}{2} \frac{1}{x'(\vec{k}') + \mu_B(H+M)} \right. \\ & \quad \left. - \sqrt{1 - \frac{1}{4} \left(\frac{g}{x'(\vec{k}') + \mu_B(H+M)} \right)^2} \frac{1}{2} \frac{g}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right\}^2 \\ & \doteq \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'(\vec{k}') + \mu_B(H+M)} \right)^2 \right. \\ & \quad \left. + 2 \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \frac{1}{x'(\vec{k}') + \mu_B(H+M)} \right\} \end{aligned} \quad (1 \cdot 35)_{+-}$$

(1.33)～(1.35) を (1.30) に代入すると E_{total} が求まる。

$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon(-\vec{k})$ であるから (1.29) より $x(\vec{k}) = x'(-\vec{k})$ の関係が得られる。従つて例えば

$$\sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x'(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} = \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \quad (1.36)$$

となる。 $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ の書き換えにより、和の範囲は変わらずからである。

このことを考慮しがら式を整理すると、Screw A の場合 E_{total} は次の形に書みれる。

$$E_{\text{total}} = \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \epsilon(\vec{k}) + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \epsilon(\vec{k}) + \mu_B H (n_+ - n_-)$$

$$+ \frac{g^2}{2} \left\{ \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{x(\vec{k}) - \mu_B H}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{x(\vec{k}) + \mu_B H}{\{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2} \right\}$$

$$+ \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \frac{g^2}{4} \left[n_+ \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} - \left(\sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} \right)^2 \right]$$

(次ページにつづく)

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \frac{g^2}{4} \left[n_- \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{\{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2} - \left(\sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right)^2 \right] \\
 & + \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} n_+ n_- - \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \frac{g^2}{4} \left[n_- \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} + n_+ \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{\{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2} \right. \\
 & \quad \left. + 2 \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right]. \tag{1.37}
 \end{aligned}$$

(1.37) 式 g に depend せぬ項と g^2 に 比例する項とから成る。

このうち g に depend せぬ項は $U S F$ の E_{total} に等しい。(c.f. (1.12)).

g^2 に 比例する項は、 M を定める式 (1.15) を代入すると 簡単に やり結局 次のようになる。

$$\begin{aligned}
 & \frac{g^2}{2} \left[\sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\hbar^2 U}{4m^* N} \left\{ \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right\}^2 \right] \tag{1.38}
 \end{aligned}$$

Screw B, Sine A, Sine B についても E_{total} のうち g^2 の係数がこの chapter の後ろに一覧表に してある。

§ 8 U の critical value の決定

(1.38) で g^2 の係数の正負に従って、USF が locally に stable か unstable かがさきまる。

(1.38) の [] の中が正であると E_{total} は $g=0$ で極小となり USF は安定となる。[] の中が負であると E_{total} は $g=0$ で極大で、SDW の方が安定となる。従って SDW 出現のための条件は、

$$U > \frac{4m^*N}{\hbar^2} \left\{ \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right\}^{-1} \quad (1.39)$$

となる。 (1.39) の左边が正であるとき、 (1.39) は次式と同値である。

$$0 < \frac{1}{U} < \frac{\hbar^2}{4m^*N} \left\{ \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right\} \quad (1.39')$$

5 10 15 20
 Screw B, Sine A, Sine B のうちの場合においても E_{total} のうち g^2 の係数は $f_1(H+M) - U f_2(H+M)$ の形をしている。従つて f_1, f_2 とも正であるとすると、SDW 出現のための条件は

$$U > U_{\text{crit}} \quad \text{where} \quad \frac{1}{U_{\text{crit}}} = \frac{f_2(H+M)}{f_1(H+M)} \quad (1.40)$$

と書かれる。(Chapter 2 § 5 で, $H+M, k_F, \bar{q}$ をパラメータとして U の critical value を数値計算する計画が述べてあるが、このときのパラメータの動く範囲では、 f_1, f_2 とも正と云う仮定は常にみたされてくる)。

(1.40) は U_{crit} を $H+M=\infty$ の函数としてあらわしてあるが、

(1.16) によつて M は χ の函数としてきまるから、(1.40) の U_{crit} は外磁場 $H-M$ に応するものであると見なせる。このよろしくして外磁場 H をかけたときの U_{crit} の値を (χ を用いて間接的に) 求める。この注意は § 3 の始めに示した注意と同じである。

又 (1.40) は逆に U を一つ fixed したときに、SDW 出現のた

めの H の範囲をきめる条件式ともみがせる。このように
 みがく方が物理的には自然である。何故なら H は Wannier 函数
 の形だけから決まる量だから物質に固有なものである
 が、 H は外部から与える量であつて自由に調節出来るか
 らである。この part I の表題を "critical Field ..." としたのも、
 J を fix して H の範囲を決めると言ふ見方に立つての題名
 である。然し計算上は $H+M \neq \infty$ を先づ与えて、 M と U_{cut} を
 ∞ の函数として計算するのが最も便利だからそのように
 ある。

この Chapter の終りに Screw B, Sine A, Sine B に対しても U_{cut} を
 表わす式を一覧表にしてある。 $H+M \rightarrow 0$ の極限においては、
 (さむいち自発磁化のない物質で $H \rightarrow 0$ とするとき) 必ず
 の場合でも

$$\lim_{H+M \rightarrow 0} \frac{1}{U_{\text{cut}}} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{N} \sum_{|k| \leq k_F} \frac{1}{x} \quad (1.41)$$

となり、Screw と Sine とで差は起らぬ。然し外磁場があ

るときには U_{crit} は Screw A, Screw B, Sine A でそれぞれ異なった値になる。従つてこれらの SDW 構造の磁場に対する安定性を比較することが出来る。たゞ Screw A と Sine B とは磁場がかかるても U_{crit} の値を共通にもち、両者の安定性の比較は μ_0 とともに H_{SDW} を摂動とみての摂動計算の範囲内では論じることが出来ない。(Chapter 4 を参照のこと)。

\bar{H}_1 の 行列要素 $\psi_{\vec{k}}^+$ の 行 $\psi_{\vec{k}}^-$ の 行

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & \psi_{\vec{k}}^+ & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+ & \psi_{\vec{k}}^- \\ \hline \text{SCREW A} & \left(\epsilon(\vec{k}) + \mu_B(H+M), g \right) & & \left(g, \epsilon(\vec{k}) - \mu_B(H+M) \right) & \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+ & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^- & \psi_{\vec{k}}^+ & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+ & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^- & \psi_{\vec{k}}^+ & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- \\ \hline \text{SCREW B} & \left(\frac{g}{2}, -\frac{g}{2}, \epsilon(\vec{k}) + \mu_B(H+M), \frac{g}{2}, \frac{g}{2} \right) & & \left(\frac{g}{2}, -\frac{g}{2}, \epsilon(\vec{k}) - \mu_B(H+M), -\frac{g}{2}, -\frac{g}{2} \right) & \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+ & \psi_{\vec{k}}^+ & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^- & \psi_{\vec{k}}^- & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- \\ \hline \text{SINE A} & \left(g, \epsilon(\vec{k}) + \mu_B(H+M), g \right) & & \left(-g, \epsilon(\vec{k}) - \mu_B(H+M), -g \right) & \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^- & \psi_{\vec{k}}^+ & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+ & \psi_{\vec{k}}^- & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ \\ \hline \text{SINE B} & \left(g, \epsilon(\vec{k}) + \mu_B(H+M), g \right) & & \left(g, \epsilon(\vec{k}) - \mu_B(H+M), g \right) & \\ \hline \end{array}$$

\vec{R} の 固有函数.($x(\vec{k})$ を x で, $x'(\vec{k})$ を x' で, $M_B(H+M)$ を H' であらわす)

$\psi_{\vec{k}}^+(\vec{r})$

$\psi_{\vec{k}}^-(\vec{r})$

SCREW A

$$\sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x-H')^2}} \psi_{\vec{k}}^+ = \frac{g}{2(x-H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+R}^-$$

$$\sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x'+H')^2}} \psi_{\vec{k}}^- = \frac{g}{2(x'+H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-R}^+$$

SCREW B

$$\sqrt{1 - \frac{g^2}{16} \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{x'^2} + \frac{1}{(x-H')^2} + \frac{1}{(x'-H')^2} \right)} \psi_{\vec{k}}^+$$

$$\sqrt{1 - \frac{g^2}{16} \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{x'^2} + \frac{1}{(x+H')^2} + \frac{1}{(x'+H')^2} \right)} \psi_{\vec{k}}^-$$

SCREW

$$-\frac{g}{4x} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+R}^+ - \frac{g}{4x'} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-R}^+ - \frac{g}{4(x-H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+R}^- + \frac{g}{4(x'-H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-R}^- + \frac{g}{4x} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+R}^- + \frac{g}{4x'} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-R}^- + \frac{g}{4(x+H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+R}^+ - \frac{g}{4(x'+H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-R}^+$$

SINE A

$$\sqrt{1 - \frac{g^2}{4x^2} - \frac{g^2}{4x'^2}} \psi_{\vec{k}}^+ - \frac{g}{2x} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+R}^+ - \frac{g}{2x'} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-R}^+$$

$$\sqrt{1 - \frac{g^2}{4x^2} - \frac{g^2}{4x'^2}} \psi_{\vec{k}}^- + \frac{g}{2x} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+R}^- + \frac{g}{2x'} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-R}^-$$

SINE B

$$\sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x-H')^2} - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x'-H')^2}} \psi_{\vec{k}}^+$$

$$-\frac{g}{2(x-H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+R}^- - \frac{g}{2(x'-H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-R}^-$$

$$\sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x+H')^2} - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x'+H')^2}} \psi_{\vec{k}}^-$$

$$-\frac{g}{2(x+H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+R}^+ - \frac{g}{2(x'+H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-R}^+$$

$E_+(\vec{k})$

$E_-(\vec{k})$

S
C
R
E
W

$$\epsilon(\vec{k}) + \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x(\vec{k}) - \mu_B H) g^2}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2}$$

$$\epsilon(\vec{k}) - \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x'(\vec{k}) + \mu_B H) g^2}{\{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2}$$

S
C
R
B

$$\epsilon(\vec{k}) + \mu_B H + \frac{g^2}{8x(\vec{k})} + \frac{g^2}{8x'(\vec{k})}$$

$$\epsilon(\vec{k}) - \mu_B H + \frac{g^2}{8x(\vec{k})} + \frac{g^2}{8x'(\vec{k})}$$

E
W

$$+ \frac{g^2}{8} \left[\frac{x(\vec{k}) - \mu_B H}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} + \frac{x'(\vec{k}) - \mu_B H}{\{x'(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} \right]$$

$$+ \frac{g^2}{8} \left[\frac{x(\vec{k}) + \mu_B H}{\{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2} + \frac{x'(\vec{k}) + \mu_B H}{\{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2} \right]$$

S
I
N
E

$$\epsilon(\vec{k}) + \mu_B H + \frac{g^2}{2x(\vec{k})} + \frac{g^2}{2x'(\vec{k})}$$

$$\epsilon(\vec{k}) - \mu_B H + \frac{g^2}{2x(\vec{k})} + \frac{g^2}{2x'(\vec{k})}$$

S
I
B

$$\epsilon(\vec{k}) + \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x(\vec{k}) - \mu_B H) g^2}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2}$$

$$\epsilon(\vec{k}) - \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x(\vec{k}) + \mu_B H) g^2}{\{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2}$$

N
E

$$+ \frac{1}{2} \frac{(x'(\vec{k}) - \mu_B H) g^2}{\{x'(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{(x'(\vec{k}) + \mu_B H) g^2}{\{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2}$$

Coulomb Integral

($x(\vec{k})$ を x_1 , $x(\vec{k}')$ を x_2 , $x'(\vec{k})$ を x'_1 , $x'(\vec{k}')$ を x'_2 , $\mu_b(H+M)$ を H' と書く)

$$2m^*NE_{\text{coul}}^{++}(\vec{k}, \vec{k}) / \hbar^2 U$$

$$2m^*NE_{\text{coul}}^{-+}(\vec{k}, \vec{k}') / \hbar^2 U$$

$$2m^*NE_{\text{coul}}^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') / \hbar^2 U$$

S
C
R
E
W

A

1

1

1

S
C
R
E
W

B

$$1 + \frac{g^2}{8} \left(\frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right)$$

$$1 + \frac{g^2}{8} \left(\frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right)$$

$$1 - \frac{g^2}{8} \left(\frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right)$$

S
I
N
E

A

$$1 + \frac{g^2}{2} \left(\frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right)$$

$$1 + \frac{g^2}{2} \left(\frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right)$$

$$1 - \frac{g^2}{2} \left(\frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right)$$

S
I
N
E

B

1

1

1

Exchange Integral

($x(\vec{k})$ を x_1 , $x(\vec{k}')$ を x_2 , $x'(\vec{k})$ を x'_1 , $x'(\vec{k}')$ を x'_2 , $\mu_B(H+M)$ を H' と書く)

| | $2m^*NE_{\text{exch}}^{++}(\vec{k}, \vec{k}')/\hbar^2 U$ | $2m^*NE_{\text{exch}}^{--}(\vec{k}, \vec{k}')/\hbar^2 U$ | $2m^*NE_{\text{exch}}^{+-}(\vec{k}, \vec{k}')/\hbar^2 U$ |
|-----------------------|--|--|---|
| S C R E W | $1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \frac{1}{(x_1 - H')^2} + \frac{1}{(x_2 - H')^2} - 2 \frac{1}{x_1 - H'} \frac{1}{x_2 - H'} \right\}$ | $1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \frac{1}{(x'_1 + H')^2} + \frac{1}{(x'_2 + H')^2} - 2 \frac{1}{x'_1 + H'} \frac{1}{x'_2 + H'} \right\}$ | $\frac{g^2}{4} \left\{ \frac{1}{(x_1 - H')^2} + \frac{1}{(x'_2 + H')^2} + 2 \frac{1}{x_1 - H'} \frac{1}{x'_2 + H'} \right\}$ |
| S C R E W | $1 + \frac{g^2}{8} \left\{ \frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} - \frac{g^2}{16} \left(\left(\frac{1}{x_1 - H'} - \frac{1}{x_2 - H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 - H'} - \frac{1}{x'_2 - H'} \right)^2 \right) \right\}$ | $1 + \frac{g^2}{8} \left\{ \frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} - \frac{g^2}{16} \left(\left(\frac{1}{x_1 + H'} - \frac{1}{x_2 + H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 + H'} - \frac{1}{x'_2 + H'} \right)^2 \right) \right\}$ | $\frac{g^2}{16} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 - H'} + \frac{1}{x'_2 + H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 - H'} + \frac{1}{x_2 + H'} \right)^2 \right\}$ |
| S I N E | $1 + \frac{g^2}{2} \left\{ \frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right\}$ | $1 + \frac{g^2}{2} \left\{ \frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right\}$ | 0 |
| S I N E | $1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 - H'} - \frac{1}{x_2 - H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 - H'} - \frac{1}{x'_2 - H'} \right)^2 \right\}$ | $1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 + H'} - \frac{1}{x_2 + H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 + H'} - \frac{1}{x'_2 + H'} \right)^2 \right\}$ | $\frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 - H'} + \frac{1}{x'_2 + H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 - H'} + \frac{1}{x_2 + H'} \right)^2 \right\}$ |

E_{total} のうち g^2 の係数

($x'(\vec{k}) = x(-\vec{k})$ 及び (1.15) を代入して整理)

($x(\vec{k})$ を x , $\mu_B(H+M)$ を H' と書く。)

$$\begin{array}{|c|c|} \hline S & \frac{1}{2} \left\{ \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x - H'} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x + H'} \right\} - \frac{\hbar^2 U}{8m^* N} \left\{ \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x - H'} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x + H'} \right\}^2 \\ \hline C & A \\ R & \\ E & \\ W & \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline S & \frac{1}{4} \left(\sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x - H'} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x + H'} \right) \\ \hline C & B \\ R & \\ E & \\ W & - \frac{\hbar^2 U}{16m^* N} \left[\left(\sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x - H'} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x + H'} \right)^2 + 4 \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x} \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x} \right] \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline S & \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x} - \frac{\hbar^2 U}{m^* N} \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x} \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x} \\ \hline I & A \\ N & \\ E & \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline S & \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x - H'} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x + H'} - \frac{\hbar^2 U}{4m^* N} \left[\sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x - H'} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x + H'} \right]^2 \\ \hline I & B \\ N & \\ E & \\ \hline \end{array}$$

1
 $\overline{U}_{\text{cut}}$ の表

($x(\vec{k}) \neq x, \mu_B(H+M) \neq H'$ を書く)

$H \rightarrow 0$
 $M \rightarrow 0$ の極限

| | | | |
|-----------------------|---|---|---|
| S C R E W | A | $\frac{\hbar^2}{4m^*N} \left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x-H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x+H'} \right\}$ | $\frac{\hbar^2}{2m^*N} \sum_{ \vec{k} \leq k_F} \frac{1}{x}$ |
| S C R E W | B | $\frac{\hbar^2}{4m^*N} \left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x-H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x+H'} \right\}^2 + 4 \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x} \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x}$ $\sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x} + \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x-H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x+H'}$ | $\frac{\hbar^2}{2m^*N} \sum_{ \vec{k} \leq k_F} \frac{1}{x}$ |
| S I N E | A | $\frac{\hbar^2}{m^*N} \frac{\sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x} \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x}}{\sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x}}$ | $\frac{\hbar^2}{2m^*N} \sum_{ \vec{k} \leq k_F} \frac{1}{x}$ |
| S I N E | B | $\frac{\hbar^2}{4m^*N} \left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x-H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x+H'} \right\}$ | $\frac{\hbar^2}{2m^*N} \sum_{ \vec{k} \leq k_F} \frac{1}{x}$ |

Chap. 2. Method of computation

§ 1 パラメータの検討

先ず E_{total} 最小の USF の状態を (1.16) によつて定め、次に無限小振中の SDW をこれに加えて local stability を論じ SDW 出現のための U の critical value を (1.39)' etc. によつて求めると言ふのが計算の筋書きとなる。このよろにして求めていた U_{crit} は $H+M=\alpha$, k_F , α の函数となつてゐる。

このうち k_F は Hamiltonian \mathcal{H} の Fermi 半径であり、伝導電子の総数をあらわすパラメータである。

$$n = n_- + n_+ = 2d \frac{4\pi}{3} k_F^3 \quad (2.1)$$

ただし d は実空間の単位体積あたりの state の個数、 n 従つて k_F は物質によって定まつた定数と考えられるから、数値計算の際 k_F は fix して考へる。現実には外磁場 H や

intraatomic coulomb integral U の値によって、伝導電子数が幾らか変化を起すかも知れまい。(すなはち core の中の電子まで引っ張り去される可能性がある)。然しこの計算ではこの効果を無視し k_F は定数として扱う。

まことに、chap. 1, §4 の (1.21) の次に説明したように、結晶主軸の一つの方向を向いていると考えられる。以下この方向を \vec{z} 軸の方向であるとして計算を進めよう。この方向と \vec{x} や \vec{y} の方向との関係はどうであつても、要するに \vec{z} が結晶主軸の一つの方向を向いていれば E_{total} は従つて U_{cut} の値は $|q|$ だけで定まる筈である。

この下ろす周期の SDW 構造が出て来るかをあらえじめ指定する根據は何もないから、 $|q| \equiv q$ はいろいろ変え E_{total} を最小にする下ろすに調節せねばならない。 U_{cut} を求める問題で言うと、先ず U_{cut} を d , k_F , q の函数として求めた後

$$\min_q U_{\text{cut}}(d, k_F, q) = U_{\text{cut}}(d, k_F) \quad (2.2)$$

として、 q を消去した $U_{\text{cut}}(\alpha, k_F)$ を計算する。このとき、

「 $U > U_{\text{crit}}(\alpha, k_F)$ であると SDW 構造が出現する。そして
対応する SDW 構造の波数ベクトル q は、 $U \rightarrow U_{\text{cut}}(\alpha, k_F)$
の極限において次の q_0 に tend する」。

$$U_{\text{crit}}(\alpha, k_F) = U_{\text{cut}}(\alpha, k_F, q_0) = \min_q U_{\text{cut}}(\alpha, k_F, q) \quad (2.3)$$

最後に $\alpha \equiv H + M$ については次のよう考えられる。 α は
外磁場 H の代りに採用するパラメータで、 H を独立変数
とみると chap. 1, §2 で説明したように計算が難しくなるの
で便宜上 α を元の代用とする。従って先ず α を fix して (2.2)
の $U(\alpha, k_F)$ を計算し、次に α をいろいろ変えて類似の計算
を繰返すことにより $U_{\text{crit}}(\alpha, k_F)$ を α の函数としてみるのが
妥当である。これは U_{crit} を外磁場 H の函数として求めること
に相当している。

以上の検討から考えて、計算の手続きは次のようになれば良いであろう。

5 10 15 20

先づ α , k_F , q の値を一組み与える。(1.16)の(ii)式を, k_c を求める方程式とみなして k_c を解く。これを(1.6)に代入すると k_+ , k_- が求まる。これらを代入すると (1.39)' etc. によつて U_{crit} の値が計算出来る。 q をいろいろ変えては U_{crit} を計算し (2.2) によつて q を消去する。得られた $U_{\text{crit}}(\alpha, k_F)$ を α や k_c と共に (1.16) の(i)式に代入すると M_{crit} が求まり、 $\alpha - M_{\text{crit}} = H_{\text{crit}}$ として H_{crit} が得られる。この際 $H_{\text{crit}} < 0$ となつて来るようなら、最初の選び方が不適当であつたとして捨てる。 H_{crit} も又 α と k_F の函数となるが、 α をいろいろ変えて (k_F は一定にして) 方眼紙に $(U_{\text{crit}}, H_{\text{crit}})$ の点を plot して行けば、これが SDW 出現の範囲を示すための phase diagram となる。

8 12

計算を実行する際には、便宜上 U の代りに

$$\frac{1}{U} = I, \quad \frac{1}{U_{\text{crit}}} = I_{\text{crit}} \quad (2.4)$$

として逆数 I を用い、 $(I_{\text{crit}}, H_{\text{crit}})$ の点を plot して (I, H) 面上

に phase diagram を描く。

数値計算に際して、 λ , k_F , q の値を具体的にどのように選ぶかは § 5 で説明する。

§ 2 (1.16) の解き方

§ 1 末に計画した計算手続きのうち、(1.16) に関連した部分を取り出す。

(1.16) の (i) 式は、 λ , k_c , T_{crit} を代入して左辺を計算するだけのことじ比較的簡単な計算である。

(ii) 式は二式を k_c に関する方程式とみなすので、扱いはやゝ複雑になる。然しこれを与えて左辺を計算するのは簡単だから、補間によつて数値的に k_c を解くといつ。

すなわち k_c を等間隔び次々と与えて行き、その都度 (1.16)(ii) の左辺を計算しては右辺の $2k_F^3$ との大小を比較する。

もし根の位置が近似的にわかつたら、その附近を更にこ

まかい間隔に分けて同様な操作を繰り返す。このようにして次第に根の近似の精度を高めることが出来る。

我々の数値計算では $k_c = k_F$ から出发して等間隔に k の値を減じて行き、上述の方法で間隔の再分割を何度か行つて、結局有効数字五桁の精度で (1.16)(ii) の根をを求めた。

がく $H+M \equiv \infty$ の値が大きすぎると (1.16)(ii) は根を持たなくななる。これは Ferromagnetic state に対応し、

$$\tilde{\mu}_B(H+M) \geq \frac{1}{3\sqrt{2}} k_F^2 \quad (2.5)$$

のときに起る。 (c.f. Chap. 1 §3)

このときは $k_c^2 = 2^{\frac{2}{3}} k_F^2 - \tilde{\mu}_B(H+M)$, $k_+ = 0$, $k_- = 3\sqrt{2} k_F$ ときめると以後の計算が USF の場合と同じに扱われる。

§ 3 $1/U_{\text{cut}} = I_{\text{cut}}$ の計算

Chapter 1 の終りの一覧表を見ると、 $1/U_{\text{cut}} = I_{\text{cut}}$ は結局次の

ようによとめられる。

$$I_{\text{cut}} = \frac{\hbar^2}{4m^*N} \times \begin{cases} J_1 + J_2 & (\text{for Screw A, Sine B}) \\ \frac{(J_1 + J_2)^2 + 4J_3J_4}{J_1 + J_2 + J_3 + J_4} & (\text{for Screw B}) \\ \frac{4J_3J_4}{J_3 + J_4} & (\text{for Sine A}) \end{cases} \quad (2.6)_1, (2.6)_2, (2.6)_3$$

where

$$J_1 = \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)}, \quad J_2 = \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)}$$

$$J_3 = \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x(\vec{k})}, \quad J_4 = \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x(\vec{k})} \quad (2.7)$$

(2.7) の各々を計算するためには、これらを一般化して

$$J(k_0, c) = \sum_{|\vec{k}| \leq k_0} \frac{1}{x(\vec{k}) + c} \quad (2.8)$$

について、和を計算する方法を考えればよい。たゞし

$\vec{k} = 0$ を中心とし半径 k_0 の球は、第一 Brillouin zone の中に含まれる。

れているものとある。

正格子(体心立方格子)の格子定数を a とすると、逆格子は格子定数 $4\pi/a$ の面心立方格子となる。以後簡単のために実空間では $2\pi/a$ を長さの単位に取る。この単位で書いて、逆格子点の座標は

$$\vec{k} \sim (l, m, n) \quad l, m, n \text{ とも整数で } l+m+n = \text{偶数} \quad \left. \right\} (2.9)$$

となる。これらと $(0, 0, 0)$ とを結ぶ線分の垂直二等分面が第一 Brillouin zone の zone boundary となり、従つて第一 Brillouin zone は

$$\begin{aligned} |k_x| + |k_y| &\leqslant \\ |k_y| + |k_z| &\leqslant \\ |k_z| + |k_x| &\leqslant \end{aligned} \quad \left. \right\} (2.10)$$

によつて与えられる。これより第一 Brillouin zone の体積は

$$V = 2 \quad (2.11)$$

であることがあり、又 zone の中心 $\vec{k} = 0$ から zone boundary への最短距離は $1/\sqrt{2}$ である。これ故「(2.8) の和の領域が第一 Brillouin zone の中に含まれる」と言ふ条件は

$$k_0 \leq \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (2.12)$$

と書かれる。 (2.7) と (2.8) を比較すると $k_0 = k_+$ or k_- である。 $0 \leq k_+ \leq k_- \leq \sqrt[3]{2} k_F$ であるから、 (2.12) は k_F については $\sqrt[3]{2} k_F \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$ すなはち

$$k_F \leq 2^{-\frac{5}{6}} \doteq 0.561 \quad (2.13)$$

の範囲でみたされる。

さて (2.8) において $X(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left\{ E(\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}) - E(\vec{k}) \right\}$ があり、 \vec{K} は「 $\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}$ が第一 Brillouin zone に属する」と言ふ条件でさるる逆格子ベクトルである。従つて \vec{K} は \vec{k} に depend します
り、次のどれかになります。
(ただし \vec{q} は z 軸の正の方向に向いていふとして)。

$$\left. \begin{array}{l} \vec{K}_1 \sim (0, 0, 0) \\ \vec{K}_2 \sim (0, 0, -2) \\ \vec{K}_3 \sim (1, 0, -1) \\ \vec{K}_4 \sim (-1, 0, -1) \\ \vec{K}_5 \sim (0, 1, -1) \\ \vec{K}_6 \sim (0, -1, -1) \end{array} \right\} \quad (2.14)$$

(2.14) の \vec{K}_1 から \vec{K}_6 に応じて、対応する \vec{k} の範囲をえれどれ
第 1 region, ..., 第 6 region と呼ぼう。各 region について $\vec{q} + \vec{K}_i$ を
 \vec{x}_i であらわすと。

$$\begin{aligned} x(\vec{k}) &= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ (\vec{k} + \vec{K}_i)^2 - \vec{k}^2 \right\} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{x}_i \cdot \left(\vec{k} + \frac{\vec{K}_i}{2} \right) \end{aligned} \quad (2.15)$$

従つて $(0, 0, 0)$ と $-\vec{K}_i$ を結ぶ線分の垂直二等分面上で
 $x(\vec{k}) = 0$ となり、その面の外で $x(\vec{k}) < 0$ 、内で $x(\vec{k}) > 0$ となる。
この面を gap 面と呼ぶ。SDW 出現に伴ひ、(1.20) の一体
化 Hamiltonian \vec{H}_1 の固有値がこの面のところで gap を起すから
である。(Part II の (1.5) 式を参照のこと)。

$q \equiv |\vec{q}| = 1$ として、第一 Brillouin zone,

k_z

六つの region への分割及び Gap 面の図示

((k_x, k_z)-面での切口の図)

を右に与える。真中に描い

てある円は (2.8) の和の範囲

をあらわしている。

(第 5, 第 6 region はこの

図には現われない)。

(2.8) の和を、六つの region

ごとに分けて

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}^{(1)} + \mathcal{J}^{(2)} + \mathcal{J}^{(3)} + \mathcal{J}^{(4)} + \mathcal{J}^{(5)} + \mathcal{J}^{(6)}$$

(2.16)

$(0, 0, -1)$

where

$$\mathcal{J}^{(i)} = \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_0 \\ \text{in region } i}} \frac{1}{\chi(\vec{k}) + C} \quad (2.17)$$

とする。対称性より $\mathcal{J}^{(3)} = \mathcal{J}^{(4)} = \mathcal{J}^{(5)} = \mathcal{J}^{(6)}$ であるから (2.16) は

$$J = J^{(1)} + J^{(2)} + 4 J^{(3)} \quad (2.16)$$

とも書かれる。

(2.17) の和は積分でかきみ立て計算する。和(積分)の範囲
は球と四角錐の共通部分とするべく、これまで計算し難い
(一次元の積分に拡張して不定積分を求めることが出来
ない) ので、積分範囲を次のように説明するよう、に少し変えて計算する。

§ 4 $J^{(i)}$ の計算

各 region において $x(\vec{k})$ は (2.15) で与えられるから、座標変換を行なつて $-\vec{k}_i$ の方向を 3 軸に選べば

$$x(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} k_i \left(k_j - \frac{k_i}{2} \right) \quad (2.18)$$

となる。こゝに $k_i = |\vec{k}_i| = |\vec{q} + \vec{k}_i|$ であり

5

10

15

20

$$k_1 = q, \quad k_2 = 2 - q$$

$$k_3 = k_4 = k_5 = k_6 = \sqrt{1 + (1-q)^2}$$

(2.19)

とする。

ここでもし和(積分)の範囲を3軸を軸とする回転体であれば $1/x(\vec{k}) + C$ の和は容易に積分で計算出来る。こうよるが積分計算に付き込みるために(2.17)の和の範囲を次のよう変更する。

5で説明するよるに、 $q=1$ の場合だけを考えることにするので、六つのregionへの分割の様子は3の付圖に示したよるに見る。region同志の境界面は0'を頂点とし、 x 軸、 y 軸の又軸に平行な軸を持つ四角錐である。

(1) この四角錐を円錐に書き換る。円錐の頂角は、立體角が $2\pi/3$ (=全表面の $1/6$) になるよるにこの条件から定める。すなわち $2\pi(1 - \cos\theta) = 2\pi/3$ より

$$\cos\theta = 2/3, \quad \sin\theta = \sqrt{5}/3, \quad \tan\theta = \sqrt{5}/2 \quad (2.20)$$

(2) 円錐の頂点は 0 と考える。方角を \vec{v} のために頂点が $0'$ にずれると言ふ効果を無視する。

(3) 円錐の軸の方向は各 region での \vec{v} 軸の方向、すなはち Gap 面に垂直な方向と考える。従つて第三～第六 region では本来の四角錐の軸の方向より少しずれる。

上記のように円錐は、どの region でも次の式で書かれる。

$$k_r \equiv \sqrt{k_3^2 + k_2^2} \leq \frac{\sqrt{5}}{2} k_3 \quad (2.21)$$

従つて (2.17) の和の範囲を (1)～(3) のように変更すると言ふことは

$$\frac{1}{d} \sum_{\text{各 region } i} \rightarrow \begin{cases} |k| \leq k_0 \\ k_r^2 + k_3^2 \leq k_0^2 \\ -k_r \leq \frac{\sqrt{5}}{2} k_3 \end{cases}$$

と積分にかけさせて計算することとする。このかけ算を行なうと、(2.18) を (2.17) に代入して次式を得る。

$$\frac{\hbar^2}{2m^*d} \gamma^{(i)} = \int_0^{k_0} \pi (k_p(i))^2 \frac{1}{-\chi_i(k_3 - \frac{\chi_i}{2}) + \tilde{C}} dk_3. \quad (2.22)$$

where $k_p(i) = \begin{cases} \frac{\sqrt{5}}{2} k_3 & \text{for } k_3 \leq \frac{2}{3} k_0 \\ \sqrt{k_0^2 - k_3^2} & \text{for } k_3 \geq \frac{2}{3} k_0 \end{cases}$

$$\text{for } k_3 \geq \frac{2}{3} k_0. \quad (2.23)$$

$$\tilde{C} = \frac{2m^*}{\hbar^2} C \quad (2.24)$$

あとは (2.22) の右辺の計算だけが問題である。それは

$$\frac{5\pi}{4} \int_0^{\frac{2}{3}k_0} \frac{k_3^2}{\tilde{C} - \chi_i(k_3 - \frac{\chi_i}{2})} dk_3 + \pi \int_{\frac{2}{3}k_0}^{k_0} \frac{k_3^2 - k_0^2}{\tilde{C} - \chi_i(k_3 - \frac{\chi_i}{2})} dk_3$$

と書きかかれれる。これは分数式の積分だから、不定積分を求めることが出来て、計算の結果結局次のようになる。

$$\frac{\hbar^2}{2m^*d} J^{(i)} = -\frac{\pi}{4} \frac{2\tilde{C} + K_i^2}{K_i^2} k_0$$

$$\begin{aligned} & \frac{5\pi}{16} \frac{(2\tilde{C} + K_i^2)^2}{K_i^3} \log_e \frac{\left| \frac{4}{3}k_0 K_i - 2\tilde{C} - K_i^2 \right|}{\left| 2\tilde{C} + K_i^2 \right|} \\ & + \frac{\pi}{4} \frac{(2\tilde{C} + K_i^2)^2 - 4k_0^2 K_i^2}{K_i^3} \log_e \frac{\left| 2k_0 K_i + 2\tilde{C} - K_i^2 \right|}{\left| \frac{4}{3}k_0 K_i - 2\tilde{C} - K_i^2 \right|} \quad (2.25) \end{aligned}$$

これで I_{cut} を計算するための式は全部そろつた。

最後に数値例として $k_F = 0.5$, $H+M=0$, $q=1$ のときの I_{cut} を出してみよう。この場合 (2.7) で $J_1 = J_2 = J_3 = J_4$ でありこれを (2.6) に代入して

$$I_{\text{cut}} = \frac{\hbar^2}{2m^*N} J_1$$

となる。 (2.8) と比べて $J_1 = J(k_F, 0) = J(0.5, 0)$ である。又 (2.19) より $K_1 = K_2 = K_3 = 1$ となり、 (2.16) で $J^{(1)} = J^{(2)} = J^{(3)}$ だから

$J(0.5, 0) = 6J^{(1)}(0.5, 0)$ となる。

(2.25) で $k_0 = 0.5$, $\tilde{C} = 0$, $\chi_1 = 1$ とおくと

$$\frac{\hbar^2}{2m^*d} \mathcal{J}^{(1)} = -\frac{\pi}{8} + \frac{5\pi}{16} \log_e 3$$

従つて

$$I_{\text{cut}} = \frac{\hbar^2}{2m^*N} \cdot \frac{2m^*d}{\hbar^2} \left(-\frac{\pi}{8} + \frac{5\pi}{16} \log_e 3 \right)$$

$$= \frac{1}{V} \left(-\frac{3\pi}{4} + \frac{15\pi}{8} \log_e 3 \right)$$

(2.11) より $V=2$ を代入して計算すると $I_{\text{cut}} \approx 2.06$ を得る。

§ 5 パラメータの範囲

今まで一般的に論じて来たが、具体的には特にCrのSDW構造が興味の対象である。

Introduction で説明したように、Crの3d-電子はSDW構造をなしている。そのピッチは二十数枚程度であり、又正

格子の頂点と体心とでは殆んど反平行な spin polarization を持つてゐる。これは wave vector で言ふと

$$q = 1 \quad 1 - q = \frac{1}{20} \quad (2.26)$$

であることを意味してゐる。

一方計算上からも I_{crit} の値が大きければ S D W は安定と考えられるが、 $H + M = 0$ のとき

$$I_{\text{crit}} \propto \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} \frac{1}{x(\vec{k})}$$

であるから、rough に言つて Fermi 球が gap 面に接するときに I_{crit} は最も大きくなるであろう。Fermi 球が六つの gap 面に同時に接するためには

$$q = 1, \quad k_F = 0.5 \quad (2.27)$$

が条件となる。事実 $q = 1, k_F = 0.5$ で S D W 構造が現われることは既に [3], [4] でわかつてゐる。

そこで今回も数値計算に際しては、 q, k_F は (2.27) の値の付近のもののみを考えよう。 E_{total} は従つて I_{crit} は q については $q=1$ のあたりに対称ながらも

$$I_{\text{crit}}(\alpha, k_F, q) = I_{\text{crit}}(\alpha, k_F, 2-q) \quad (2.28)$$

だから、 $q \leq 1$ の範囲だけで数値計算をすれば充分である。

$\alpha \equiv H+M$ については次のよろに考える。 α を大きくなるにつれて無摶動の USF の polarization は次第に増加し、遂に Ferromagnetic state となるが、そのあたりまで追跡すれば充分であろう。そこで (1.20) の一体化 Hamiltonian について、 H_0 と $\mu_B(H+M)$ が same order になるまで、ながらも

$$0 \leq \mu_B(H+M) \leq \frac{\hbar^2}{2m^*} k_F^2 \quad (2.29)$$

の範囲で $H+M$ を変えることにしてよう。

$$\tilde{\mu}_B(H+M) \equiv \tilde{\alpha} \text{ とおくと (2.29) は}$$

$$0 \leq \tilde{\alpha} \leq k_F^2 \doteq 0.25 \quad (2.29)'$$

と書かれる。

実際に我々は、次のよろびなパラメータの値に対して
 I_{crit} , H_{crit} , $\beta = (n_- - n_+)/ (n_- + n_+)$, k_c の数値計算を電子計算機で行なつた。

k_F ; 0.48500, 0.48875, 0.49250, 0.49625, 0.50000,
 0.50375 以上六通り

$\tilde{\mu}_B (H+M) \equiv \tilde{\omega}$; 0.000 から 0.020 まで 0.001 刻みに 21 個, 0.023,
 0.025, 0.027, 0.030 から 0.130 まで 0.005 刻みに 21 個,
 0.150, 0.170, 0.200, 0.250 以上合計 49 個

q ; 1.00 から 0.85 まで 0.01 きずみに 16 個

I < I_{cut}

Chap. 3. Results

v.s. H and T

数値計算の結果を、数表及びグラフにして以下に掲げ
る。

$\tilde{\chi} = \tilde{\mu}_B(H+M)$, k_F , q , を一組み与えて $I_{\text{cut}}(\tilde{\chi}, k_F, q)$ を計算し、
これを q の函数とみて横軸に q , 縦軸に I_{cut} を取つてグラ
フにしたもののが第1図である。一枚のグラフでは k_F は
一定で、 $\tilde{\chi}$ の値の異なる幾つかの $q \sim I_{\text{cut}}$ curve が重ねて描
かれてある。(c.f. [] fig. 2) せむか、No.1～No.3 と No.4～No.6 とで
 I の scale が異なることに注意のこと。

$\tilde{\chi}$ を k_F を与えたとき、 $I_{\text{cut}}(\tilde{\chi}, k_F, q)$ の q に関する最大値
 $I_{\text{cut}}(\tilde{\chi}, k_F)$ とそのときの q の値 q_0 , 及びこれに対応する H_{cut}
の値を、 $\tilde{\chi}$ の函数とみて数表にしたもののが第1表、第2
表である。

$\tilde{\chi}$ を助変数とみて方眼紙上に ($I_{\text{cut}}, H_{\text{cut}}$) を plot して

グラフを作ったものが第2図である。これは SDW 出現の為の (I, H) の範囲を示す phase diagram に \pm ある。また USF と Ferromagnetic state との境界を与える $I \sim H$ curve も Chap. 1. §3 の詳論より計算して描いた。

USF から Ferro への移行の phase diagram に比べて、SDW 出現の (I, H) の範囲は非常に狭い。これを示すために第3図を添えた。第2図はこれの拡大図であると言える。

第2図、第3図は、 U を与えたときに SDW 出現のための H の限界 (critical field) を示すものとみなせる。逆に H を与えたとき、 $U = 1/J$ の範囲を示すものともみなせる。

私が SDW として Screw A, Screw B, Sine A, Sine B の四種類を考えたが、このうち Screw A と Sine B は同じ結果になる。Screw A (Sine B) を実線で、Screw B を実線で、Sine A を破線で、一枚のグラフ (各の値ごとに一枚) に重ねて描いてある。

| | Screw A | | | Screw B | | | Sine A | | |
|------------------|---------|------------------|--------------------------------|---------|------------------|--------------------------------|--------|------------------|--------------------------------|
| $\tilde{\alpha}$ | I_0 | I_{cut} | $\tilde{\mu}_B H_{\text{cut}}$ | I_0 | I_{cut} | $\tilde{\mu}_B H_{\text{cut}}$ | I_0 | I_{cut} | $\tilde{\mu}_B H_{\text{cut}}$ |
| 0.000 | 1.00 | 2.2273 | 1000000 | 1.00 | 2.2273 | 1000000 | 1.00 | 2.2273 | 1000000 |
| 0.003 | 1.00 | 2.2267 | 0086 | 1.00 | 2.2175 | 20085 | 1.00 | 2.2082 | 80085 |
| 0.005 | 1.00 | 2.2255 | 40144 | 1.00 | 2.1963 | 70139 | 0.99 | 2.1695 | 80135 |
| 0.007 | 1.00 | 2.2241 | 50201 | 1.00 | 2.1811 | 90192 | 0.99 | 2.1437 | 10183 |
| 0.010 | 1.00 | 2.2209 | 10287 | 1.00 | 2.1596 | 10267 | 0.98 | 2.1079 | 80249 |
| 0.013 | 1.00 | 2.2164 | 00372 | 1.00 | 2.1375 | 10337 | 0.97 | 2.0715 | 50307 |
| 0.015 | 1.00 | 2.2129 | 20427 | 1.00 | 2.1224 | 20382 | 0.97 | 2.0473 | 50341 |
| 0.017 | 1.00 | 2.2087 | 60482 | 1.00 | 2.1067 | 50423 | 0.96 | 2.0221 | 10370 |
| 0.020 | 1.00 | 2.2013 | 80563 | 1.00 | 2.0822 | 70481 | 0.96 | 1.9842 | 50406 |
| 0.025 | 1.00 | 2.1858 | 90692 | 1.00 | 2.0389 | 10562 | 0.94 | 1.9205 | 90443 |
| 0.030 | 1.00 | 2.1659 | 90813 | 1.00 | 1.9923 | 00622 | 0.92 | 1.8576 | 80450 |
| 0.035 | 1.00 | 2.1404 | 40920 | 1.00 | 1.9419 | 50656 | 0.90 | 1.7943 | 20422 |
| 0.040 | 1.00 | 2.1066 | 60007 | 1.00 | 1.8865 | 50658 | 0.89 | 1.7308 | 00357 |
| 0.045 | 0.99 | 2.0573 | 80056 | 0.99 | 1.8224 | 30613 | 0.87 | 1.6674 | 80251 |
| 0.050 | 0.98 | 2.0186 | 501105 | 0.98 | 1.7643 | 50544 | 0.86 | 1.6043 | 30100 |
| 0.055 | 0.98 | 1.9838 | 901147 | 0.97 | 1.7084 | 50445 | | | |
| 0.060 | 0.97 | 1.9502 | 501177 | 0.96 | 1.6533 | 40311 | | | |
| 0.065 | 0.96 | 1.9165 | 501192 | 0.95 | 1.5986 | 10137 | | | |
| 0.070 | 0.96 | 1.8840 | 501196 | | | | | | |
| 0.075 | 0.95 | 1.8512 | 101184 | | | | | | |
| 0.080 | 0.95 | 1.8188 | 501159 | | | | | | |
| 0.085 | 0.94 | 1.7865 | 101117 | | | | | | |
| 0.090 | 0.94 | 1.7541 | 10059 | | | | | | |
| 0.095 | 0.93 | 1.7226 | 100988 | | | | | | |
| 0.100 | 0.92 | 1.6909 | 200898 | | | | | | |
| 0.105 | 0.92 | 1.6594 | 400792 | | | | | | |
| 0.110 | 0.91 | 1.6285 | 0672 | | | | | | |
| 0.115 | 0.90 | 1.5978 | 0534 | | | | | | |
| 0.120 | 0.90 | 1.5673 | 60379 | | | | | | |
| 0.125 | 0.89 | 1.5376 | 30211 | | | | | | |
| 0.130 | 0.88 | 1.5081 | 20027 | | | | | | |

| Ferro k_F の境界 | |
|-----------------|---------------------|
| I_F | $\tilde{\mu}_B H_F$ |
| 1.329 | 000000 |
| 1.35 | 0310 |
| 1.375 | 0670 |
| 1.40 | 1010 |
| 1.417 | 1250 |
| 1.45 | 1680 |
| 1.50 | 2290 |

$$k_F = 0.50000$$

| | Screw A | | | | Screw B | | | | Sine A | | | |
|------------------|---------|-----------|---------------|-----------|---------------|---------|-----------|---------------|---------|-----------|---------------|--|
| $\tilde{\alpha}$ | I_0 | I_{out} | \tilde{B}_H | I_{out} | \tilde{B}_H | I_0 | I_{out} | \tilde{B}_H | I_0 | I_{out} | \tilde{B}_H | |
| 0.000 | 1.00 | 2.05756 | 0.00000 | 1.00 | 2.05756 | 0.00000 | 1.00 | 2.05756 | 0.00000 | 2.05756 | 0.00000 | |
| 0.003 | 1.00 | 2.05583 | 0.070 | 0.99 | 2.05170 | 0.070 | 0.99 | 2.04846 | 0.069 | | | |
| 0.005 | 1.00 | 2.05309 | 0.117 | 0.99 | 2.04417 | 0.115 | 0.98 | 2.03707 | 0.114 | | | |
| 0.007 | 0.99 | 2.05055 | 0.163 | 0.98 | 2.03541 | 0.159 | 0.98 | 2.02336 | 0.156 | | | |
| 0.010 | 0.99 | 2.04544 | 0.232 | 0.97 | 2.01873 | 0.222 | 0.97 | 1.99951 | 0.214 | | | |
| 0.013 | 0.99 | 2.03899 | 0.298 | 0.97 | 2.00091 | 0.279 | 0.96 | 1.97264 | 0.265 | | | |
| 0.015 | 0.99 | 2.03381 | 0.342 | 0.96 | 1.98688 | 0.314 | 0.95 | 1.95345 | 0.294 | | | |
| 0.017 | 0.99 | 2.02851 | 0.384 | 0.96 | 1.97316 | 0.347 | 0.94 | 1.93324 | 0.319 | | | |
| 0.020 | 0.99 | 2.01936 | 0.445 | 0.95 | 1.95038 | 0.390 | 0.93 | 1.90175 | 0.349 | | | |
| 0.025 | 0.98 | 2.00219 | 0.541 | 0.94 | 1.90998 | 0.447 | 0.92 | 1.84709 | 0.377 | | | |
| 0.030 | 0.98 | 1.98338 | 0.629 | 0.93 | 1.86668 | 0.481 | 0.91 | 1.78953 | 0.373 | | | |
| 0.035 | 0.98 | 1.96272 | 0.708 | 0.92 | 1.82119 | 0.491 | 0.89 | 1.73128 | 0.334 | | | |
| 0.040 | 0.97 | 1.94079 | 0.776 | 0.90 | 1.77412 | 0.473 | 0.88 | 1.67150 | 0.257 | | | |
| 0.045 | 0.97 | 1.91724 | 0.833 | 0.89 | 1.72597 | 0.427 | 0.86 | 1.61154 | 0.137 | | | |
| 0.050 | 0.96 | 1.89288 | 0.878 | 0.88 | 1.67672 | 0.347 | | | | | | |
| 0.055 | 0.96 | 1.86767 | 0.912 | 0.87 | 1.62609 | 0.230 | | | | | | |
| 0.060 | 0.95 | 1.84126 | 0.931 | 0.85 | 1.57476 | 0.073 | | | | | | |
| 0.065 | 0.95 | 1.81474 | 0.938 | | | | | | | | | |
| 0.070 | 0.94 | 1.78723 | 0.930 | | | | | | | | | |
| 0.075 | 0.94 | 1.75988 | 0.909 | | | | | | | | | |
| 0.080 | 0.93 | 1.73168 | 0.872 | | | | | | | | | |
| 0.085 | 0.93 | 1.70354 | 0.820 | | | | | | | | | |
| 0.090 | 0.92 | 1.67516 | 0.752 | | | | | | | | | |
| 0.095 | 0.92 | 1.64679 | 0.669 | | | | | | | | | |
| 0.100 | 0.91 | 1.61848 | 0.570 | | | | | | | | | |
| 0.105 | 0.90 | 1.58988 | 0.454 | | | | | | | | | |
| 0.110 | 0.90 | 1.56183 | 0.323 | | | | | | | | | |
| 0.115 | 0.89 | 1.53382 | 0.176 | | | | | | | | | |
| 0.120 | 0.88 | 1.50582 | 0.012 | | | | | | | | | |

| Ferro との境界 | |
|------------|---------------|
| I_F | \tilde{B}_H |
| 1.320 | 0.00000 |
| 1.325 | 0.080 |
| 1.35 | 0.440 |
| 1.375 | 0.790 |
| 1.40 | 1.130 |
| 1.409 | 1.250 |
| 1.45 | 1.780 |
| 1.50 | 2.380 |

第1表のNO.3

$$k_F = 0.49625$$

| | Screw A | | | Screw B | | | Sine A | | |
|------------------|---------|------------------|--------------------------------|---------|------------------|--------------------------------|--------|------------------|--------------------------------|
| $\tilde{\alpha}$ | q_0 | I_{out} | $\tilde{\mu}_B H_{\text{out}}$ | q_0 | I_{out} | $\tilde{\mu}_B H_{\text{out}}$ | q_0 | I_{out} | $\tilde{\mu}_B H_{\text{out}}$ |
| 0.000 | 0.97 | 1.91087 | 0.00000 | 0.97 | 1.91087 | 0.00000 | 0.97 | 1.91087 | 0.00000 |
| 0.003 | 0.97 | 1.91035 | 0.00055 | 0.97 | 1.91184 | 0.00055 | 0.97 | 1.91333 | 0.00055 |
| 0.005 | 0.97 | 1.90936 | 0.00091 | 0.97 | 1.91530 | 0.0093 | 0.97 | 1.92116 | 0.0094 |
| 0.007 | 0.97 | 1.90817 | 0.128 | 0.96 | 1.91309 | 0.129 | 0.96 | 1.91886 | 0.131 |
| 0.010 | 0.97 | 1.90540 | 0.182 | 0.96 | 1.90438 | 0.181 | 0.95 | 1.90548 | 0.182 |
| 0.013 | 0.97 | 1.90167 | 0.00234 | 0.95 | 1.89155 | 0.00229 | 0.94 | 1.88593 | 0.00225 |
| 0.015 | 0.97 | 1.89867 | 0.00269 | 0.95 | 1.88150 | 0.00257 | 0.94 | 1.87066 | 0.00250 |
| 0.017 | 0.97 | 1.89525 | 0.302 | 0.94 | 1.87002 | 0.283 | 0.93 | 1.85414 | 0.271 |
| 0.020 | 0.97 | 1.88935 | 0.351 | 0.94 | 1.85183 | 0.318 | 0.92 | 1.82710 | 0.295 |
| 0.025 | 0.96 | 1.87766 | 0.427 | 0.93 | 1.81745 | 0.359 | 0.91 | 1.77827 | 0.312 |
| 0.030 | 0.96 | 1.86457 | 0.497 | 0.92 | 1.77926 | 0.377 | 0.89 | 1.72562 | 0.296 |
| 0.035 | 0.96 | 1.84917 | 0.559 | 0.90 | 1.73858 | 0.372 | 0.88 | 1.67119 | 0.246 |
| 0.040 | 0.96 | 1.83192 | 0.611 | 0.89 | 1.69605 | 0.339 | 0.87 | 1.61484 | 0.155 |
| 0.045 | 0.95 | 1.81349 | 0.653 | 0.88 | 1.65153 | 0.276 | 0.85 | 1.55795 | 0.022 |
| 0.050 | 0.95 | 1.79358 | 0.684 | 0.87 | 1.60544 | 0.178 | | | |
| 0.055 | 0.94 | 1.77225 | 0.702 | 0.86 | 1.55777 | 0.042 | | | |
| 0.060 | 0.94 | 1.75036 | 0.710 | | | | | | |
| 0.065 | 0.94 | 1.72707 | 0.702 | | | | | | |
| 0.070 | 0.93 | 1.70365 | 0.683 | | | | | | |
| 0.075 | 0.93 | 1.67909 | 0.648 | | | | | | |
| 0.080 | 0.92 | 1.65449 | 0.599 | | | | | | |
| 0.085 | 0.92 | 1.62914 | 0.535 | | | | | | |
| 0.090 | 0.91 | 1.60370 | 0.456 | | | | | | |
| 0.095 | 0.90 | 1.57776 | 0.360 | | | | | | |
| 0.100 | 0.90 | 1.55216 | 0.251 | | | | | | |
| 0.105 | 0.89 | 1.52615 | 0.124 | | | | | | |

| Ferro k の境界 | |
|-------------|---------------------|
| I_F | $\tilde{\mu}_B H_F$ |
| 1.309 | 0.00000 |
| 1.325 | 0.240 |
| 1.35 | 0.590 |
| 1.375 | 0.940 |
| 1.398 | 1.250 |
| 1.40 | 1.270 |
| 1.45 | 1.900 |
| 1.50 | 2.490 |

第1表 No.4

$$k_F = 0.49250$$

| Screw A | | | | Screw B | | | | Sine A | | | |
|------------------|-------|------------|--------------------------|---------|------------|--------------------------|-------|------------|--------------------------|-------|------------|
| $\tilde{\alpha}$ | g_0 | I_{unit} | $\tilde{\mu}_B H_{unit}$ | g_0 | I_{unit} | $\tilde{\mu}_B H_{unit}$ | g_0 | I_{unit} | $\tilde{\mu}_B H_{unit}$ | g_0 | I_{unit} |
| 0.000 | 0.95 | 1.80647 | 0.00000 | 0.95 | 1.80647 | 0.00000 | 0.95 | 1.80647 | 0.00000 | 0.95 | 1.80647 |
| 0.003 | 0.95 | 1.80607 | 0.043 | 0.95 | 1.80613 | 0.043 | 0.95 | 1.80619 | 0.043 | 0.95 | 1.80619 |
| 0.005 | 0.95 | 1.80530 | 0.071 | 0.95 | 1.80561 | 0.071 | 0.95 | 1.80593 | 0.071 | 0.95 | 1.80593 |
| 0.007 | 0.95 | 1.80434 | 0.099 | 0.95 | 1.80561 | 0.100 | 0.95 | 1.80686 | 0.100 | 0.95 | 1.80686 |
| 0.010 | 0.95 | 1.80204 | 0.141 | 0.95 | 1.80668 | 0.143 | 0.94 | 1.81223 | 0.146 | 0.94 | 1.81223 |
| 0.013 | 0.95 | 1.79914 | 0.182 | 0.94 | 1.79941 | 0.182 | 0.93 | 1.80188 | 0.184 | 0.93 | 1.80188 |
| 0.015 | 0.95 | 1.79672 | 0.209 | 0.94 | 1.79168 | 0.205 | 0.93 | 1.79085 | 0.204 | 0.93 | 1.79085 |
| 0.017 | 0.95 | 1.79410 | 0.235 | 0.93 | 1.78298 | 0.225 | 0.92 | 1.77797 | 0.221 | 0.92 | 1.77797 |
| 0.020 | 0.95 | 1.78940 | 0.272 | 0.93 | 1.76739 | 0.251 | 0.91 | 1.75532 | 0.239 | 0.91 | 1.75532 |
| 0.025 | 0.95 | 1.77990 | 0.330 | 0.92 | 1.73716 | 0.277 | 0.90 | 1.71215 | 0.244 | 0.90 | 1.71215 |
| 0.030 | 0.95 | 1.76852 | 0.382 | 0.90 | 1.70289 | 0.281 | 0.88 | 1.66411 | 0.217 | 0.88 | 1.66411 |
| 0.035 | 0.94 | 1.75561 | 0.426 | 0.89 | 1.66576 | 0.260 | 0.87 | 1.61348 | 0.155 | 0.87 | 1.61348 |
| 0.040 | 0.94 | 1.74124 | 0.461 | 0.88 | 1.62606 | 0.211 | 0.86 | 1.56030 | 0.051 | 0.86 | 1.56030 |
| 0.045 | 0.94 | 1.72530 | 0.487 | 0.87 | 1.58430 | 0.130 | | | | | |
| 0.050 | 0.93 | 1.70780 | 0.502 | 0.86 | 1.54069 | 0.014 | | | | | |
| 0.055 | 0.93 | 1.68954 | 0.507 | | | | | | | | |
| 0.060 | 0.93 | 1.67013 | 0.499 | | | | | | | | |
| 0.065 | 0.92 | 1.64967 | 0.478 | | | | | | | | |
| 0.070 | 0.92 | 1.62859 | 0.445 | | | | | | | | |
| 0.075 | 0.91 | 1.60659 | 0.396 | | | | | | | | |
| 0.080 | 0.91 | 1.58441 | 0.335 | | | | | | | | |
| 0.085 | 0.90 | 1.56131 | 0.257 | | | | | | | | |
| 0.090 | 0.90 | 1.53827 | 0.167 | | | | | | | | |
| 0.095 | 0.89 | 1.51457 | 0.059 | | | | | | | | |

| Ferro & 鉄境界 | |
|-------------|---------------------|
| I_F | $\tilde{\mu}_B H_F$ |
| 1.299 | 0.00000 |
| 1.325 | 0.370 |
| 1.35 | 0.720 |
| 1.375 | 1.060 |
| 1.390 | 1.250 |
| 1.40 | 1.380 |
| 1.45 | 2.000 |
| 1.50 | 2.570 |

第1表 NO.5

$$k_F = 0.48875$$

Screw A

Screw B

Sine A

| $\tilde{\alpha}$ | q_0 | I_{out} | $\tilde{P}_B H_{out}$ | q_0 | I_{out} | $\tilde{P}_B H_{out}$ | q_0 | I_{out} | $\tilde{P}_B H_{out}$ |
|------------------|-------|-----------|-----------------------|-------|-----------|-----------------------|-------|-----------|-----------------------|
| 0.000 | 0.94 | 1.71836 | 0.00000 | 0.94 | 1.71836 | 0.00000 | 0.94 | 1.71836 | 0.00000 |
| 0.003 | 0.94 | 1.71801 | 0.0031 | 0.94 | 1.71774 | 0.0031 | 0.94 | 1.71746 | 0.0031 |
| 0.005 | 0.94 | 1.71735 | 0.0052 | 0.94 | 1.71659 | 0.0052 | 0.94 | 1.71584 | 0.0052 |
| 0.007 | 0.94 | 1.71551 | 0.0073 | 0.94 | 1.71503 | 0.0073 | 0.94 | 1.71369 | 0.0072 |
| 0.010 | 0.94 | 1.71454 | 0.0104 | 0.93 | 1.71220 | 0.0103 | 0.93 | 1.71075 | 0.0102 |
| 0.013 | 0.94 | 1.71200 | 0.0134 | 0.93 | 1.71235 | 0.0134 | 0.93 | 1.71344 | 0.0135 |
| 0.015 | 0.94 | 1.70991 | 0.0153 | 0.93 | 1.70885 | 0.0153 | 0.92 | 1.71020 | 0.0154 |
| 0.017 | 0.94 | 1.70752 | 0.0172 | 0.92 | 1.70278 | 0.0168 | 0.91 | 1.70179 | 0.0167 |
| 0.020 | 0.94 | 1.70341 | 0.0199 | 0.92 | 1.69032 | 0.0185 | 0.90 | 1.68441 | 0.0179 |
| 0.025 | 0.94 | 1.69513 | 0.0239 | 0.91 | 1.66420 | 0.0197 | 0.89 | 1.64777 | 0.0174 |
| 0.030 | 0.93 | 1.68537 | 0.0274 | 0.89 | 1.63328 | 0.0187 | 0.88 | 1.60424 | 0.0136 |
| 0.035 | 0.93 | 1.67421 | 0.0301 | 0.88 | 1.59896 | 0.0151 | 0.76 | 1.55740 | 0.0061 |
| 0.040 | 0.93 | 1.66137 | 0.0320 | 0.87 | 1.56173 | 0.0085 | | | |
| 0.045 | 0.93 | 1.64715 | 0.0330 | | | | | | |
| 0.050 | 0.92 | 1.63177 | 0.0330 | | | | | | |
| 0.055 | 0.92 | 1.61549 | 0.0319 | | | | | | |
| 0.060 | 0.92 | 1.59784 | 0.0296 | | | | | | |
| 0.065 | 0.91 | 1.57959 | 0.0261 | | | | | | |
| 0.070 | 0.91 | 1.56042 | 0.0213 | | | | | 1.289 | 0.00000 |
| 0.075 | 0.90 | 1.54047 | 0.0152 | | | | | 1.30 | 0.00150 |
| 0.080 | 0.90 | 1.52006 | 0.0077 | | | | | 1.325 | 0.00500 |

Ferro & の境界

$$I_F \quad \tilde{P}_B H_F$$

- 1.289 0.00000
- 1.30 0.00150
- 1.325 0.00500
- 1.35 0.00850
- 1.375 0.01180
- 1.381 0.01250
- 1.40 0.01490
- 1.45 0.02100
- 1.50 0.02660

才1表(1~6) の No. 6

$$k_F = 0.48500$$

| $\tilde{\alpha}$ | Screw A | | | Screw B | | | Sine A | | |
|------------------|---------|-----------|-----------------------|---------|-----------|-----------------------|--------|-----------|-----------------------|
| | I_0 | I_{out} | $\tilde{M}_B H_{out}$ | I_0 | I_{out} | $\tilde{M}_B H_{out}$ | I_0 | I_{out} | $\tilde{M}_B H_{out}$ |
| 0.000 | 0.93 | 1.64042 | 0.00000 | 0.93 | 1.64042 | 0.00000 | 0.93 | 1.64042 | 0.00000 |
| 0.003 | 0.93 | 1.64011 | 0.00021 | 0.93 | 1.63971 | 0.00021 | 0.93 | 1.63930 | 0.00021 |
| 0.005 | 0.93 | 1.63953 | 0.00035 | 0.93 | 1.63839 | 0.00035 | 0.93 | 1.63726 | 0.00034 |
| 0.007 | 0.93 | 1.63865 | 0.00049 | 0.93 | 1.63642 | 0.00048 | 0.92 | 1.63465 | 0.00047 |
| 0.010 | 0.93 | 1.63705 | 0.00069 | 0.92 | 1.63310 | 0.00067 | 0.92 | 1.62959 | 0.00065 |
| 0.013 | 0.93 | 1.63465 | 0.00088 | 0.92 | 1.62858 | 0.00084 | 0.91 | 1.62299 | 0.00080 |
| 0.015 | 0.93 | 1.63281 | 0.00101 | 0.92 | 1.62539 | 0.00094 | 0.91 | 1.61928 | 0.00089 |
| 0.017 | 0.93 | 1.63068 | 0.00112 | 0.92 | 1.62386 | 0.00106 | 0.91 | 1.61779 | 0.00100 |
| 0.020 | 0.92 | 1.62703 | 0.00129 | 0.91 | 1.61726 | 0.00118 | 0.90 | 1.61217 | 0.00112 |
| 0.025 | 0.92 | 1.61986 | 0.00152 | 0.90 | 1.59584 | 0.00117 | 0.88 | 1.58348 | 0.00098 |
| 0.030 | 0.92 | 1.61124 | 0.00170 | 0.88 | 1.56821 | 0.00093 | 0.87 | 1.54556 | 0.00050 |
| 0.035 | 0.92 | 1.60112 | 0.00181 | 0.87 | 1.53658 | 0.00042 | | | |
| 0.040 | 0.92 | 1.58953 | 0.00184 | | | | | | |
| 0.045 | 0.91 | 1.57658 | 0.00177 | | | | | | |
| 0.050 | 0.91 | 1.56297 | 0.00163 | | | | | | |
| 0.055 | 0.91 | 1.54804 | 0.00136 | | | | | | |
| 0.060 | 0.90 | 1.53188 | 0.00098 | | | | | | |
| 0.065 | 0.90 | 1.51526 | 0.00049 | | | | | | |

| Ferro 領域境界 | |
|------------|-------------------|
| I_F | $\tilde{M}_B H_F$ |
| 1.279 | 0.00000 |
| 1.30 | 0.00300 |
| 1.325 | 0.00650 |
| 1.35 | 0.00980 |
| 1.371 | 0.01250 |
| 1.40 | 0.01610 |
| 1.45 | 0.02200 |
| 1.50 | 0.02750 |

表2表(1~6) 9 No. 1

$$k_F = 0.50375$$

| $\tilde{\alpha}$ | Screw A | | | Screw B | | | Sine A | | |
|------------------|---------|-------------------|---------------------------------|---------|-------------------|---------------------------------|--------|-------------------|---------------------------------|
| | q_0 | I_{init} | $\tilde{\mu}_B H_{\text{init}}$ | q_0 | I_{init} | $\tilde{\mu}_B H_{\text{init}}$ | q_0 | I_{init} | $\tilde{\mu}_B H_{\text{init}}$ |
| 0.000 | 1.00 | 2.22731 | 0.00000 | 1.00 | 2.22731 | 0.00000 | 1.00 | 2.22731 | 0.00000 |
| 0.001 | 1.00 | 2.22724 | 0.00028 | 1.00 | 2.22633 | 0.00028 | 1.00 | 2.22541 | 0.00028 |
| 0.002 | 1.00 | 2.22684 | 0.057 | 1.00 | 2.22305 | 0.057 | 1.00 | 2.21925 | 0.057 |
| 0.003 | 1.00 | 2.22670 | 0.086 | 1.00 | 2.21752 | 0.085 | 1.00 | 2.20828 | 0.085 |
| 0.004 | 1.00 | 2.22615 | 0.115 | 1.00 | 2.20589 | 0.113 | 1.00 | 2.18536 | 0.110 |
| 0.005 | 1.00 | 2.22554 | 0.144 | 1.00 | 2.19637 | 0.139 | 1.00 | 2.16958 | 0.135 |
| 0.006 | 1.00 | 2.22487 | 0.173 | 1.00 | 2.18850 | 0.166 | 0.99 | 2.15663 | 0.159 |
| 0.007 | 1.00 | 2.22415 | 0.201 | 1.00 | 2.18119 | 0.192 | 0.99 | 2.14371 | 0.183 |
| 0.008 | 1.00 | 2.22326 | 0.230 | 1.00 | 2.17403 | 0.217 | 0.99 | 2.13071 | 0.205 |
| 0.009 | 1.00 | 2.22210 | 0.259 | 1.00 | 2.16678 | 0.242 | 0.98 | 2.11963 | 0.228 |
| 0.010 | 1.00 | 2.22091 | 0.287 | 1.00 | 2.15961 | 0.267 | 0.98 | 2.10798 | 0.249 |
| 0.011 | 1.00 | 2.21952 | 0.315 | 1.00 | 2.15231 | 0.291 | 0.98 | 2.09554 | 0.269 |
| 0.012 | 1.00 | 2.21814 | 0.344 | 1.00 | 2.14506 | 0.314 | 0.98 | 2.08247 | 0.288 |
| 0.013 | 1.00 | 2.21640 | 0.372 | 1.00 | 2.13751 | 0.337 | 0.97 | 2.07155 | 0.307 |
| 0.014 | 1.00 | 2.21482 | 0.400 | 1.00 | 2.13010 | 0.360 | 0.97 | 2.05991 | 0.324 |
| 0.015 | 1.00 | 2.21292 | 0.427 | 1.00 | 2.12242 | 0.382 | 0.97 | 2.04735 | 0.341 |
| 0.016 | 1.00 | 2.21088 | 0.455 | 1.00 | 2.11462 | 0.403 | 0.97 | 2.03395 | 0.355 |
| 0.017 | 1.00 | 2.20876 | 0.482 | 1.00 | 2.10675 | 0.423 | 0.96 | 2.02211 | 0.370 |
| 0.018 | 1.00 | 2.20628 | 0.509 | 1.00 | 2.09857 | 0.443 | 0.96 | 2.01037 | 0.384 |
| 0.019 | 1.00 | 2.20398 | 0.536 | 1.00 | 2.09055 | 0.463 | 0.96 | 1.99778 | 0.396 |
| 0.020 | 1.00 | 2.20138 | 0.563 | 1.00 | 2.08227 | 0.481 | 0.96 | 1.98425 | 0.406 |
| 0.023 | 1.00 | 2.19244 | 0.642 | 1.00 | 2.05652 | 0.532 | 0.95 | 1.94668 | 0.432 |
| 0.025 | 1.00 | 2.18589 | 0.692 | 1.00 | 2.03891 | 0.562 | 0.94 | 1.92059 | 0.443 |
| 0.027 | 1.00 | 2.17851 | 0.742 | 1.00 | 2.02067 | 0.589 | 0.93 | 1.89552 | 0.450 |

第2表のNo.2

$$k_F = 0.50000$$

| Screw A | | | | Screw B | | | | Sine A | | | | |
|------------------|-------|------------|--------------------------|---------|------------|--------------------------|-------|------------|--------------------------|-------|------------|--------------------------|
| $\tilde{\alpha}$ | q_0 | I_{unit} | $\tilde{\mu}_B H_{unit}$ | q_0 | I_{unit} | $\tilde{\mu}_B H_{unit}$ | q_0 | I_{unit} | $\tilde{\mu}_B H_{unit}$ | q_0 | I_{unit} | $\tilde{\mu}_B H_{unit}$ |
| 0.000 | 1.00 | 2.05756 | 0.00000 | 1.00 | 2.05756 | 0.00000 | 1.00 | 2.05756 | 0.00000 | 1.00 | 2.05756 | 0.00000 |
| 0.001 | 1.00 | 2.05723 | 0.023 | 1.00 | 2.05653 | 0.023 | 1.00 | 2.05584 | 0.023 | | | |
| 0.002 | 1.00 | 2.05668 | 0.047 | 1.00 | 2.05445 | 0.047 | 0.99 | 2.05270 | 0.046 | | | |
| 0.003 | 1.00 | 2.05583 | 0.070 | 0.99 | 2.05170 | 0.070 | 0.99 | 2.04846 | 0.069 | | | |
| 0.004 | 1.00 | 2.05473 | 0.094 | 0.99 | 2.04852 | 0.093 | 0.99 | 2.04292 | 0.092 | | | |
| 0.005 | 1.00 | 2.05309 | 0.117 | 0.99 | 2.04417 | 0.115 | 0.98 | 2.03707 | 0.114 | | | |
| 0.006 | 0.99 | 2.05193 | 0.140 | 0.99 | 2.03989 | 0.138 | 0.98 | 2.03072 | 0.135 | | | |
| 0.007 | 0.99 | 2.05055 | 0.163 | 0.98 | 2.03541 | 0.159 | 0.98 | 2.02336 | 0.156 | | | |
| 0.008 | 0.99 | 2.04895 | 0.186 | 0.98 | 2.03053 | 0.181 | 0.97 | 2.01593 | 0.176 | | | |
| 0.009 | 0.99 | 2.04709 | 0.209 | 0.98 | 2.02497 | 0.202 | 0.97 | 2.00796 | 0.196 | | | |
| 0.010 | 0.99 | 2.04544 | 0.232 | 0.97 | 2.01873 | 0.222 | 0.97 | 1.99951 | 0.214 | | | |
| 0.011 | 0.99 | 2.04323 | 0.254 | 0.97 | 2.01310 | 0.241 | 0.96 | 1.99081 | 0.232 | | | |
| 0.012 | 0.99 | 2.04123 | 0.276 | 0.97 | 2.00729 | 0.261 | 0.96 | 1.98202 | 0.249 | | | |
| 0.013 | 0.99 | 2.03899 | 0.298 | 0.97 | 2.00091 | 0.279 | 0.96 | 1.97264 | 0.265 | | | |
| 0.014 | 0.99 | 2.03656 | 0.320 | 0.97 | 1.99386 | 0.297 | 0.95 | 1.96311 | 0.280 | | | |
| 0.015 | 0.99 | 2.03381 | 0.342 | 0.96 | 1.98688 | 0.314 | 0.95 | 1.95345 | 0.294 | | | |
| 0.016 | 0.99 | 2.03132 | 0.363 | 0.96 | 1.98029 | 0.331 | 0.95 | 1.94350 | 0.307 | | | |
| 0.017 | 0.99 | 2.02851 | 0.384 | 0.96 | 1.97316 | 0.347 | 0.94 | 1.93324 | 0.319 | | | |
| 0.018 | 0.99 | 2.02553 | 0.405 | 0.96 | 1.96549 | 0.362 | 0.94 | 1.92312 | 0.331 | | | |
| 0.019 | 0.99 | 2.02234 | 0.425 | 0.95 | 1.95758 | 0.376 | 0.94 | 1.91256 | 0.341 | | | |
| 0.020 | 0.99 | 2.01936 | 0.445 | 0.95 | 1.95038 | 0.390 | 0.93 | 1.90175 | 0.349 | | | |
| 0.023 | 0.99 | 2.00894 | 0.504 | 0.94 | 1.92584 | 0.426 | 0.93 | 1.86912 | 0.369 | | | |
| 0.025 | 0.98 | 2.00219 | 0.541 | 0.94 | 1.90998 | 0.447 | 0.92 | 1.84709 | 0.377 | | | |
| 0.027 | 0.98 | 1.99493 | 0.578 | 0.94 | 1.89239 | 0.463 | 0.91 | 1.82422 | 0.379 | | | |

第2表のNO.3

$$k_F = 0.49625$$

| $\tilde{\alpha}$ | q_0 | Screw A | | Screw B | | Sine A | |
|------------------|-------|------------|------------------------|---------|------------|------------------------|-------|
| | | I_{init} | $\tilde{P}_B H_{init}$ | q_0 | I_{init} | $\tilde{P}_B H_{init}$ | q_0 |
| 0.000 | 0.97 | 1.91087 | 0.00000 | 0.97 | 1.91087 | 0.00000 | 0.97 |
| 0.001 | 0.97 | 1.91078 | 0.018 | 0.97 | 1.91091 | 0.018 | 0.97 |
| 0.002 | 0.97 | 1.91062 | 0.036 | 0.97 | 1.91119 | 0.036 | 0.97 |
| 0.003 | 0.97 | 1.91035 | 0.055 | 0.97 | 1.91184 | 0.055 | 0.97 |
| 0.004 | 0.97 | 1.90997 | 0.073 | 0.97 | 1.91407 | 0.074 | 0.97 |
| 0.005 | 0.97 | 1.90936 | 0.091 | 0.97 | 1.91530 | 0.093 | 0.97 |
| 0.006 | 0.97 | 1.90890 | 0.110 | 0.96 | 1.91457 | 0.111 | 0.96 |
| 0.007 | 0.97 | 1.90817 | 0.128 | 0.96 | 1.91309 | 0.129 | 0.96 |
| 0.008 | 0.97 | 1.90736 | 0.146 | 0.96 | 1.91083 | 0.147 | 0.96 |
| 0.009 | 0.97 | 1.90636 | 0.164 | 0.96 | 1.90783 | 0.164 | 0.95 |
| 0.010 | 0.97 | 1.90540 | 0.182 | 0.96 | 1.90438 | 0.181 | 0.95 |
| 0.011 | 0.97 | 1.90422 | 0.199 | 0.96 | 1.90028 | 0.197 | 0.95 |
| 0.012 | 0.97 | 1.90302 | 0.217 | 0.95 | 1.89597 | 0.213 | 0.95 |
| 0.013 | 0.97 | 1.90167 | 0.234 | 0.95 | 1.89155 | 0.229 | 0.94 |
| 0.014 | 0.97 | 1.90005 | 0.251 | 0.95 | 1.88658 | 0.243 | 0.94 |
| 0.015 | 0.97 | 1.89867 | 0.269 | 0.95 | 1.88150 | 0.257 | 0.94 |
| 0.016 | 0.97 | 1.89689 | 0.285 | 0.95 | 1.87575 | 0.271 | 0.93 |
| 0.017 | 0.97 | 1.89525 | 0.302 | 0.94 | 1.87002 | 0.283 | 0.93 |
| 0.018 | 0.97 | 1.89327 | 0.319 | 0.94 | 1.86421 | 0.296 | 0.93 |
| 0.019 | 0.97 | 1.89146 | 0.335 | 0.94 | 1.85828 | 0.307 | 0.93 |
| 0.020 | 0.97 | 1.88935 | 0.351 | 0.94 | 1.85183 | 0.318 | 0.92 |
| 0.023 | 0.96 | 1.88268 | 0.398 | 0.93 | 1.83161 | 0.345 | 0.91 |
| 0.025 | 0.96 | 1.87766 | 0.427 | 0.93 | 1.81745 | 0.359 | 0.91 |
| 0.027 | 0.96 | 1.87301 | 0.457 | 0.92 | 1.80266 | 0.369 | 0.90 |

第2表のNO.4

$$k_F = 0.49250$$

Screw A

Screw B

Sine A

| $\tilde{\alpha}$ | q_0 | I_{crit} | $\tilde{\mu}_B H_{crit}$ | q_0 | I_{crit} | $\tilde{\mu}_B H_{crit}$ | q_0 | I_{crit} | $\tilde{\mu}_B H_{crit}$ |
|------------------|-------|------------|--------------------------|-------|------------|--------------------------|-------|------------|--------------------------|
| 0.000 | 0.95 | 1.80647 | 0.00000 | 0.95 | 1.80647 | 0.00000 | 0.95 | 1.80647 | 0.00000 |
| 0.001 | 0.95 | 1.80640 | 0014 | 0.95 | 1.80641 | 0014 | 0.95 | 1.80641 | 0014 |
| 0.002 | 0.95 | 1.80613 | 0028 | 0.95 | 1.80615 | 0028 | 0.95 | 1.80617 | 0028 |
| 0.003 | 0.95 | 1.80607 | 0043 | 0.95 | 1.80613 | 0043 | 0.95 | 1.80619 | 0043 |
| 0.004 | 0.95 | 1.80567 | 0057 | 0.95 | 1.80582 | 0057 | 0.95 | 1.80597 | 0057 |
| 0.005 | 0.95 | 1.80530 | 0071 | 0.95 | 1.80561 | 0071 | 0.95 | 1.80593 | 0071 |
| 0.006 | 0.95 | 1.80483 | 0085 | 0.95 | 1.80547 | 0085 | 0.95 | 1.80610 | 0086 |
| 0.007 | 0.95 | 1.80434 | 0099 | 0.95 | 1.80561 | 0100 | 0.95 | 1.80686 | 0100 |
| 0.008 | 0.95 | 1.80361 | 0113 | 0.95 | 1.80644 | 0114 | 0.95 | 1.80923 | 0115 |
| 0.009 | 0.95 | 1.80283 | 0127 | 0.95 | 1.80777 | 0129 | 0.95 | 1.81259 | 0131 |
| 0.010 | 0.95 | 1.80204 | 0141 | 0.95 | 1.80668 | 0143 | 0.94 | 1.81223 | 0146 |
| 0.011 | 0.95 | 1.80116 | 0155 | 0.94 | 1.80481 | 0157 | 0.94 | 1.80993 | 0159 |
| 0.012 | 0.95 | 1.80028 | 0169 | 0.94 | 1.80251 | 0170 | 0.94 | 1.80621 | 0172 |
| 0.013 | 0.95 | 1.79914 | 0182 | 0.94 | 1.79941 | 0182 | 0.93 | 1.80188 | 0184 |
| 0.014 | 0.95 | 1.79792 | 0195 | 0.94 | 1.79575 | 0194 | 0.93 | 1.79675 | 0195 |
| 0.015 | 0.95 | 1.79672 | 0209 | 0.94 | 1.79168 | 0205 | 0.93 | 1.79085 | 0204 |
| 0.016 | 0.95 | 1.79544 | 0222 | 0.93 | 1.78734 | 0215 | 0.92 | 1.78449 | 0213 |
| 0.017 | 0.95 | 1.79410 | 0235 | 0.93 | 1.78298 | 0225 | 0.92 | 1.77777 | 0221 |
| 0.018 | 0.95 | 1.79259 | 0247 | 0.93 | 1.77814 | 0235 | 0.92 | 1.77075 | 0228 |
| 0.019 | 0.95 | 1.79100 | 0260 | 0.93 | 1.77292 | 0243 | 0.92 | 1.76295 | 0234 |
| 0.020 | 0.95 | 1.78940 | 0272 | 0.93 | 1.76739 | 0251 | 0.91 | 1.75532 | 0239 |
| 0.023 | 0.95 | 1.78385 | 0308 | 0.92 | 1.75001 | 0269 | 0.90 | 1.72988 | 0245 |
| 0.025 | 0.95 | 1.77990 | 0330 | 0.92 | 1.73716 | 0277 | 0.90 | 1.71215 | 0244 |
| 0.027 | 0.95 | 1.77555 | 0352 | 0.91 | 1.72416 | 0282 | 0.89 | 1.69338 | 0238 |

第2表のN.O.5

$$k_F = 0.48875$$

| $\tilde{\alpha}$ | Screw A | | | Screw B | | | Sine A | | |
|------------------|---------|------------|--------------------------|---------|------------|--------------------------|--------|------------|--------------------------|
| | q_0 | I_{init} | $\tilde{\mu}_B H_{init}$ | q_0 | I_{init} | $\tilde{\mu}_B H_{init}$ | q_0 | I_{init} | $\tilde{\mu}_B H_{init}$ |
| 0.000 | 0.94 | 1.71836 | 0.00000 | 0.94 | 1.71836 | 0.00000 | 0.94 | 1.71836 | 0.00000 |
| 0.001 | 0.94 | 1.71830 | 0.00010 | 0.94 | 1.71827 | 0.00010 | 0.94 | 1.71824 | 0.00010 |
| 0.002 | 0.94 | 1.71806 | 0.00021 | 0.94 | 1.71794 | 0.00021 | 0.94 | 1.71781 | 0.00021 |
| 0.003 | 0.94 | 1.71801 | 0.00031 | 0.94 | 1.71774 | 0.00031 | 0.94 | 1.71746 | 0.00031 |
| 0.004 | 0.94 | 1.71767 | 0.00042 | 0.94 | 1.71718 | 0.00042 | 0.94 | 1.71669 | 0.00042 |
| 0.005 | 0.94 | 1.71735 | 0.00052 | 0.94 | 1.71659 | 0.00052 | 0.94 | 1.71584 | 0.00052 |
| 0.006 | 0.94 | 1.71695 | 0.00063 | 0.94 | 1.71589 | 0.00063 | 0.94 | 1.71482 | 0.00062 |
| 0.007 | 0.94 | 1.71651 | 0.00073 | 0.94 | 1.71509 | 0.00073 | 0.94 | 1.71369 | 0.00072 |
| 0.008 | 0.94 | 1.71590 | 0.00084 | 0.94 | 1.71412 | 0.00083 | 0.93 | 1.71263 | 0.00082 |
| 0.009 | 0.94 | 1.71522 | 0.00094 | 0.94 | 1.71309 | 0.00093 | 0.93 | 1.71161 | 0.00092 |
| 0.010 | 0.94 | 1.71454 | 0.00104 | 0.93 | 1.71220 | 0.00103 | 0.93 | 1.71075 | 0.00102 |
| 0.011 | 0.94 | 1.71379 | 0.00114 | 0.93 | 1.71156 | 0.00113 | 0.93 | 1.71020 | 0.00112 |
| 0.012 | 0.94 | 1.71281 | 0.00124 | 0.93 | 1.71116 | 0.00123 | 0.93 | 1.71034 | 0.00123 |
| 0.013 | 0.94 | 1.71200 | 0.00134 | 0.93 | 1.71235 | 0.00134 | 0.93 | 1.71344 | 0.00135 |
| 0.014 | 0.94 | 1.71099 | 0.00144 | 0.93 | 1.71118 | 0.00144 | 0.92 | 1.71248 | 0.00145 |
| 0.015 | 0.94 | 1.70991 | 0.00153 | 0.93 | 1.70885 | 0.00153 | 0.92 | 1.71020 | 0.00154 |
| 0.016 | 0.94 | 1.70863 | 0.00163 | 0.92 | 1.70580 | 0.00160 | 0.92 | 1.70622 | 0.00161 |
| 0.017 | 0.94 | 1.70752 | 0.00172 | 0.92 | 1.70278 | 0.00168 | 0.91 | 1.70179 | 0.00167 |
| 0.018 | 0.94 | 1.70617 | 0.00181 | 0.92 | 1.69906 | 0.00174 | 0.91 | 1.69669 | 0.00172 |
| 0.019 | 0.94 | 1.70479 | 0.00190 | 0.92 | 1.69489 | 0.00180 | 0.91 | 1.69079 | 0.00176 |
| 0.020 | 0.94 | 1.70341 | 0.00199 | 0.92 | 1.69032 | 0.00185 | 0.90 | 1.68441 | 0.00179 |
| 0.023 | 0.94 | 1.69860 | 0.00224 | 0.91 | 1.67559 | 0.00195 | 0.90 | 1.66314 | 0.00179 |
| 0.025 | 0.94 | 1.69513 | 0.00239 | 0.91 | 1.66420 | 0.00197 | 0.89 | 1.64777 | 0.00174 |
| 0.027 | 0.93 | 1.69140 | 0.00254 | 0.90 | 1.65266 | 0.00196 | 0.88 | 1.63089 | 0.00163 |

第2表のNo.6

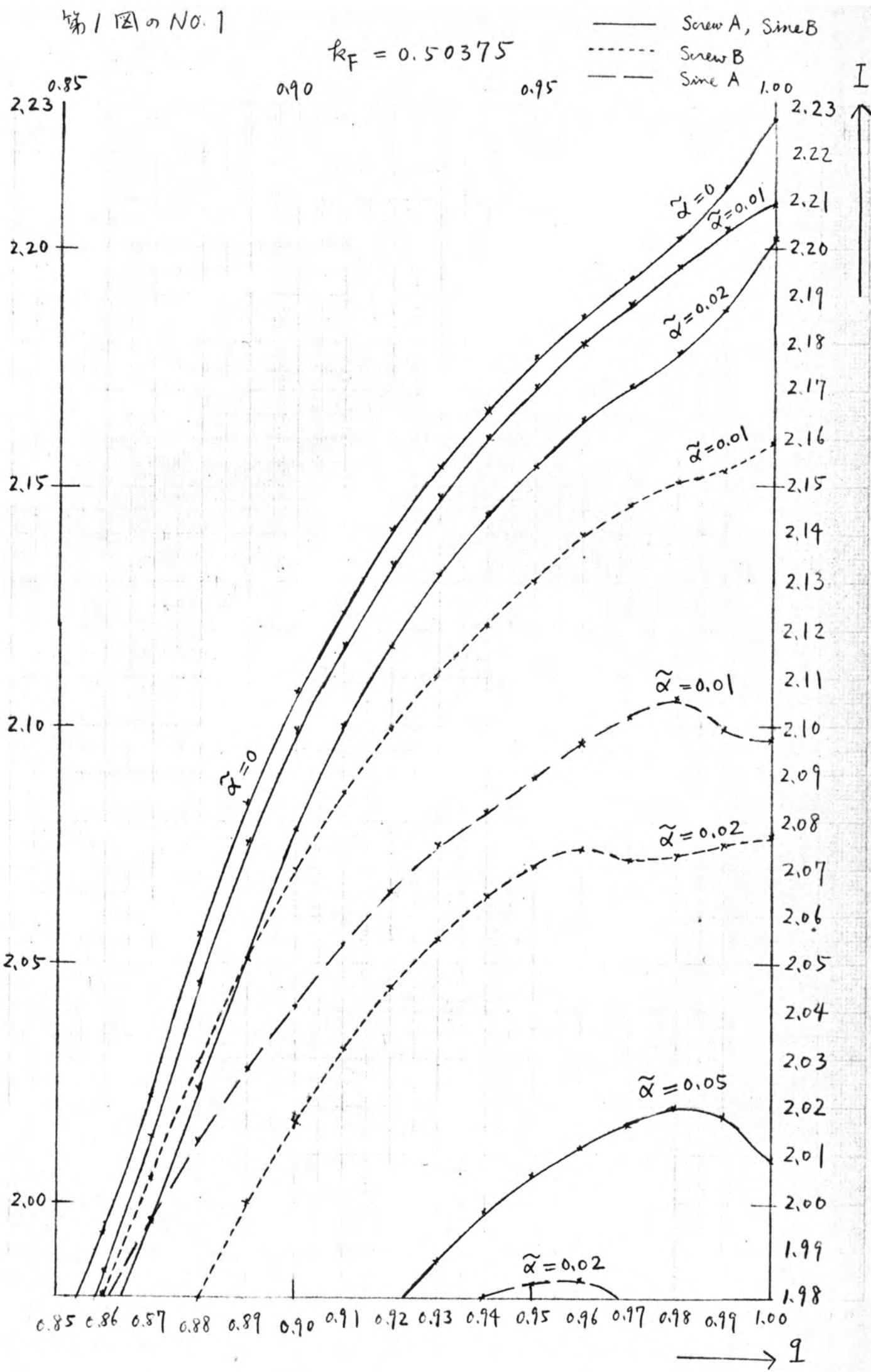
$$\tilde{\alpha} = \tilde{\mu}_B(H+M)$$

$$= \frac{e^2}{2m^2} \mu_B(H+M)$$

$$k_F = 0.48500$$

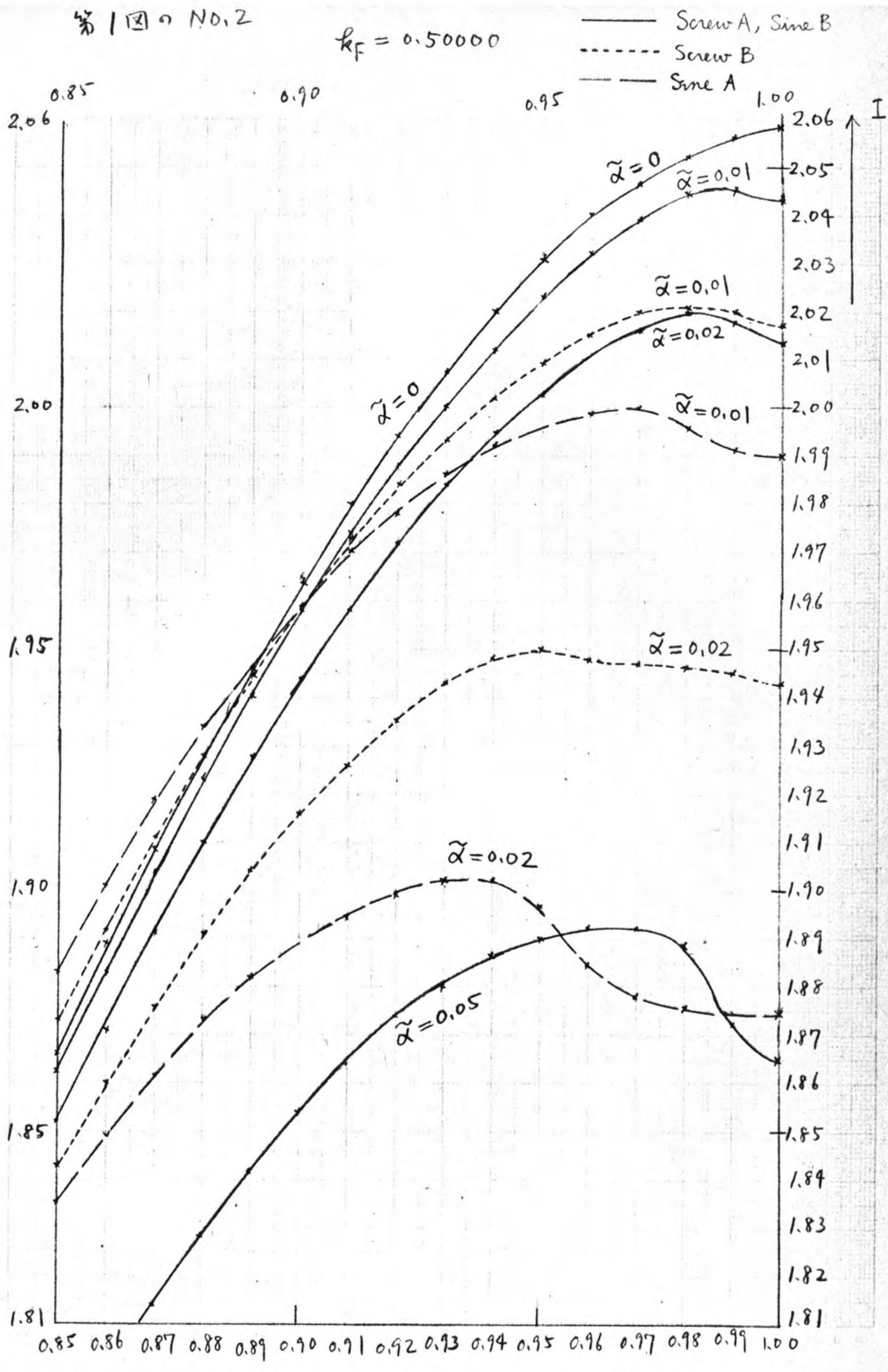
| | Screw A | | | | Screw B | | | | Sine A | | | |
|------------------|---------|-----------|-------------------------|--|---------|-----------|-------------------------|--|--------|-----------|-------------------------|--|
| $\tilde{\alpha}$ | q_0 | I_{cut} | $\tilde{\mu}_B H_{cut}$ | | q_0 | I_{cut} | $\tilde{\mu}_B H_{cut}$ | | q_0 | I_{cut} | $\tilde{\mu}_B H_{cut}$ | |
| 0.000 | 0.93 | 1.64042 | 0.00000 | | 0.93 | 1.64042 | 0.00000 | | 0.93 | 1.64042 | 0.00000 | |
| 0.001 | 0.93 | 1.64037 | 0.00007 | | 0.93 | 1.64032 | 0.00007 | | 0.93 | 1.64028 | 0.00007 | |
| 0.002 | 0.93 | 1.64015 | 0.00014 | | 0.93 | 1.63997 | 0.00014 | | 0.93 | 1.63979 | 0.00014 | |
| 0.003 | 0.93 | 1.64011 | 0.00021 | | 0.93 | 1.63971 | 0.00021 | | 0.93 | 1.63930 | 0.00021 | |
| 0.004 | 0.93 | 1.63981 | 0.00028 | | 0.93 | 1.63909 | 0.00028 | | 0.93 | 1.63837 | 0.00028 | |
| 0.005 | 0.93 | 1.63953 | 0.00035 | | 0.93 | 1.63839 | 0.00035 | | 0.93 | 1.63726 | 0.00034 | |
| 0.006 | 0.93 | 1.63918 | 0.00042 | | 0.93 | 1.63755 | 0.00041 | | 0.92 | 1.63609 | 0.00041 | |
| 0.007 | 0.93 | 1.63865 | 0.00049 | | 0.93 | 1.63642 | 0.00048 | | 0.92 | 1.63465 | 0.00047 | |
| 0.008 | 0.93 | 1.63825 | 0.00056 | | 0.92 | 1.63550 | 0.00054 | | 0.92 | 1.63322 | 0.00053 | |
| 0.009 | 0.93 | 1.63765 | 0.00062 | | 0.92 | 1.63433 | 0.00061 | | 0.92 | 1.63147 | 0.00059 | |
| 0.010 | 0.93 | 1.63705 | 0.00069 | | 0.92 | 1.63310 | 0.00067 | | 0.92 | 1.62959 | 0.00065 | |
| 0.011 | 0.93 | 1.63634 | 0.00076 | | 0.92 | 1.63172 | 0.00073 | | 0.92 | 1.62752 | 0.00070 | |
| 0.012 | 0.93 | 1.63550 | 0.00082 | | 0.92 | 1.63016 | 0.00078 | | 0.92 | 1.62524 | 0.00075 | |
| 0.013 | 0.93 | 1.63465 | 0.00088 | | 0.92 | 1.62858 | 0.00084 | | 0.91 | 1.62299 | 0.00080 | |
| 0.014 | 0.93 | 1.63370 | 0.00095 | | 0.92 | 1.62691 | 0.00089 | | 0.91 | 1.62101 | 0.00084 | |
| 0.015 | 0.93 | 1.63281 | 0.00101 | | 0.92 | 1.62539 | 0.00094 | | 0.91 | 1.61928 | 0.00089 | |
| 0.016 | 0.93 | 1.63181 | 0.00107 | | 0.92 | 1.62407 | 0.00100 | | 0.91 | 1.61788 | 0.00094 | |
| 0.017 | 0.93 | 1.63068 | 0.00112 | | 0.92 | 1.62386 | 0.00106 | | 0.91 | 1.61779 | 0.00100 | |
| 0.018 | 0.93 | 1.62944 | 0.00118 | | 0.91 | 1.62260 | 0.00111 | | 0.91 | 1.61814 | 0.00106 | |
| 0.019 | 0.93 | 1.62822 | 0.00123 | | 0.91 | 1.62033 | 0.00115 | | 0.90 | 1.61572 | 0.00110 | |
| 0.020 | 0.92 | 1.62703 | 0.00129 | | 0.91 | 1.61726 | 0.00118 | | 0.90 | 1.61217 | 0.00112 | |
| 0.023 | 0.92 | 1.62293 | 0.00144 | | 0.90 | 1.60557 | 0.00120 | | 0.89 | 1.59650 | 0.00108 | |
| 0.025 | 0.92 | 1.61986 | 0.00152 | | 0.90 | 1.59584 | 0.00117 | | 0.88 | 1.58348 | 0.00098 | |
| 0.027 | 0.92 | 1.61661 | 0.00160 | | 0.89 | 1.58566 | 0.00111 | | 0.88 | 1.56902 | 0.00083 | |

$$k_F = 0.50375$$



第1回 N.O.2

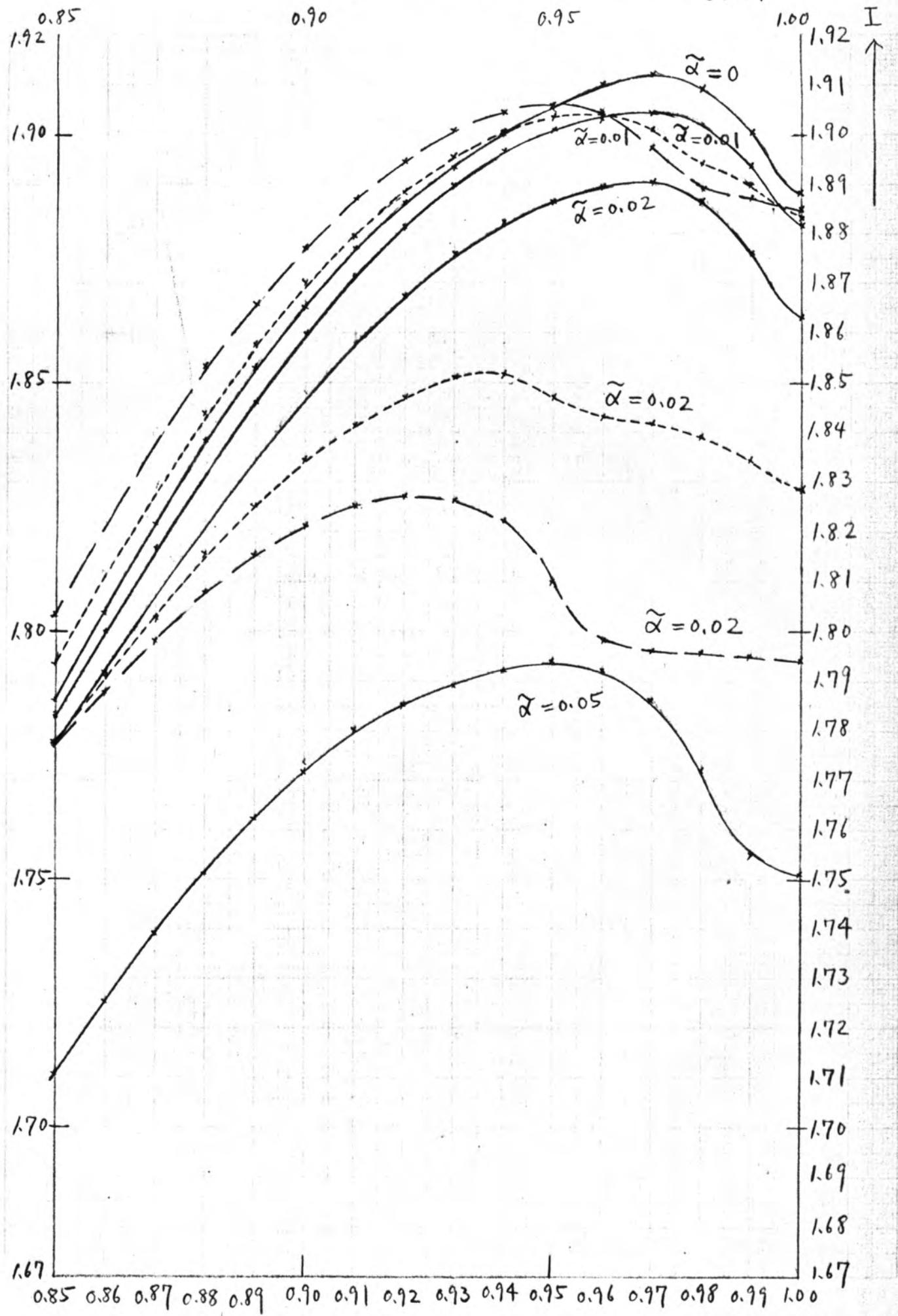
$$k_F = 0.50000$$



第1図 n. No. 3

$$k_F = 0.49625$$

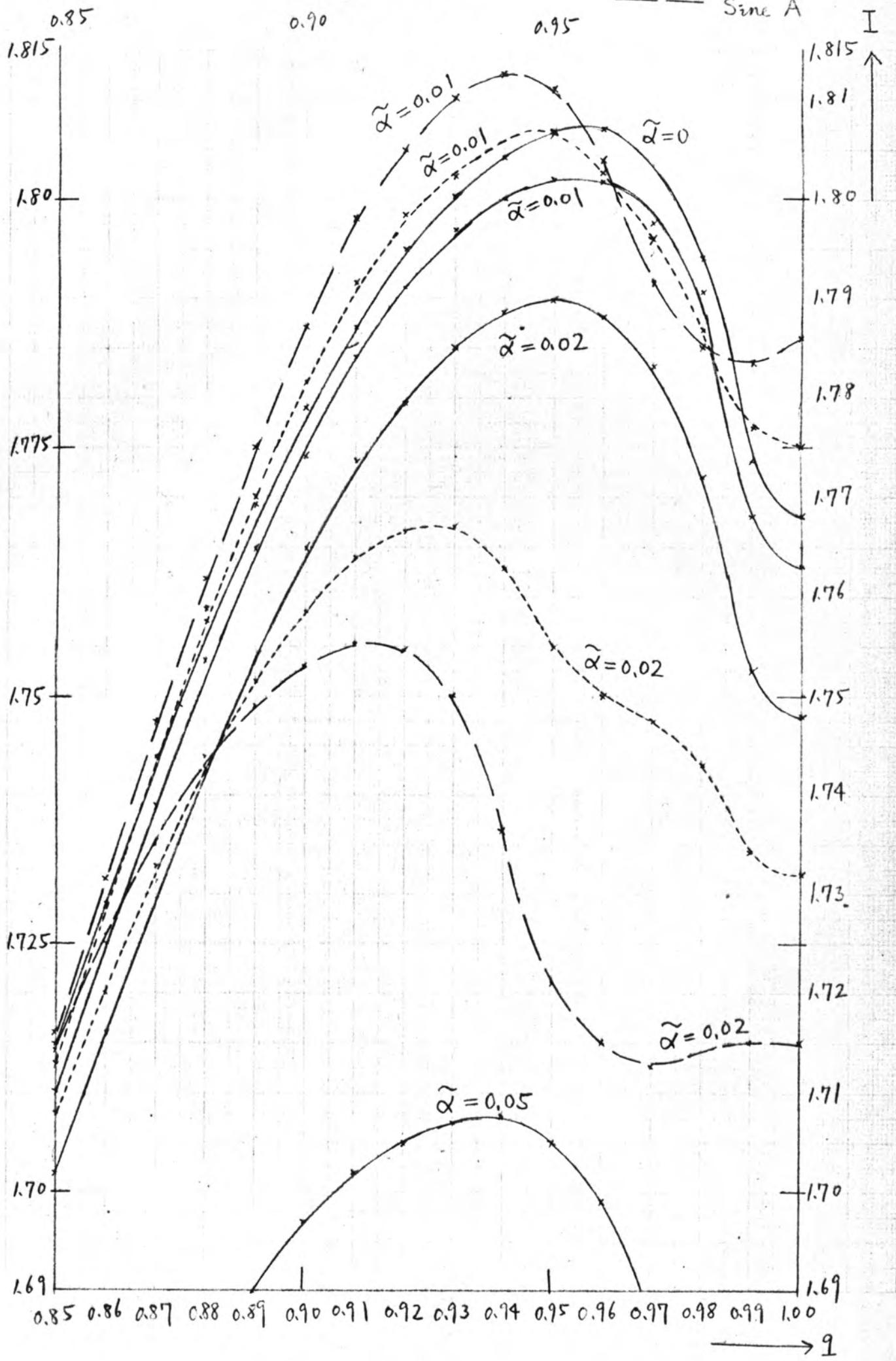
Screw A, Sine B
Screw B
Sine A



第1図のNo.4

$$k_F = 0.49250$$

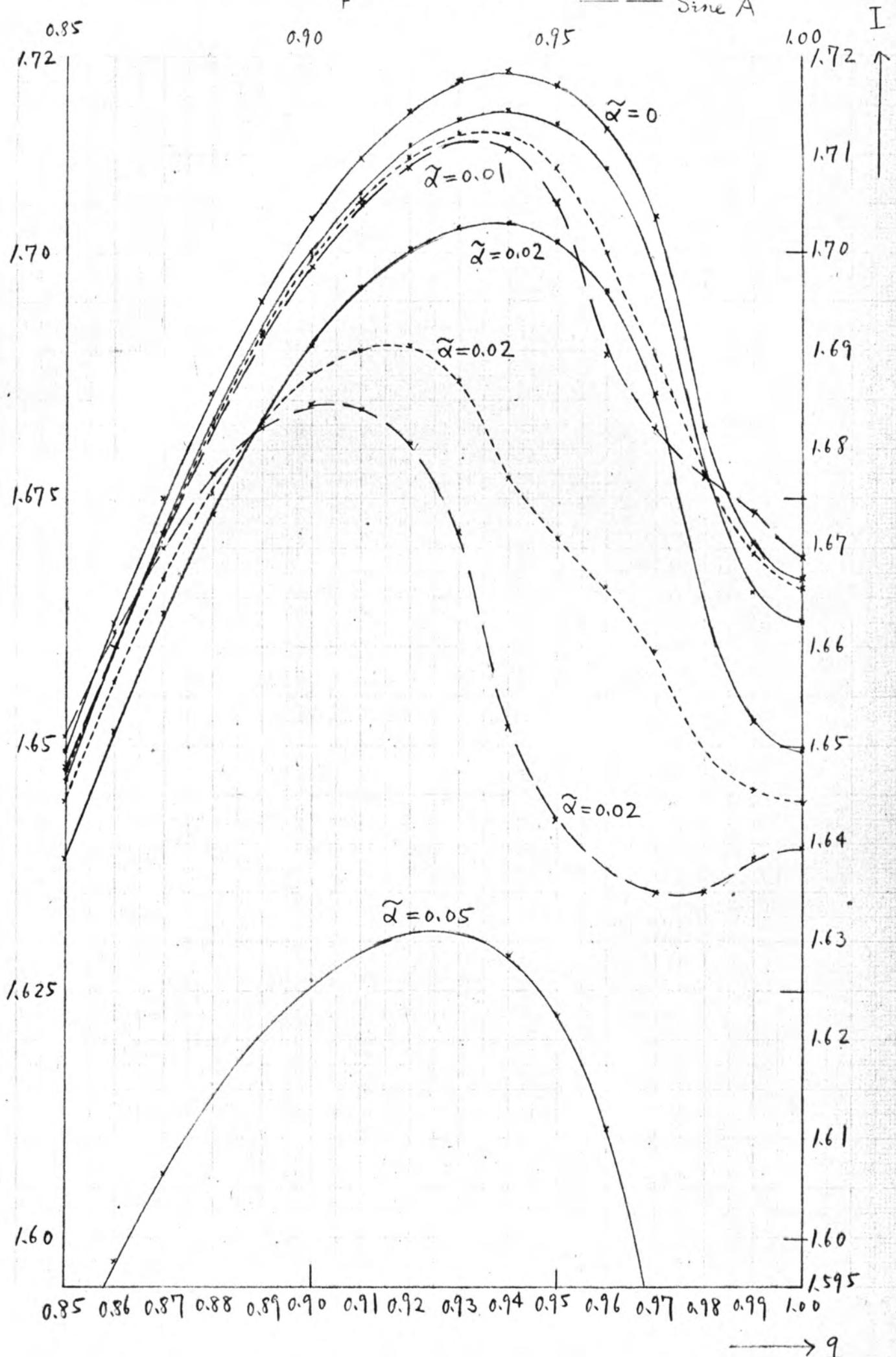
——— Screw A, Sine B
 - - - - Screw B
 - - - Sine A



第1図 N.O.5

$$k_F = 0.48875$$

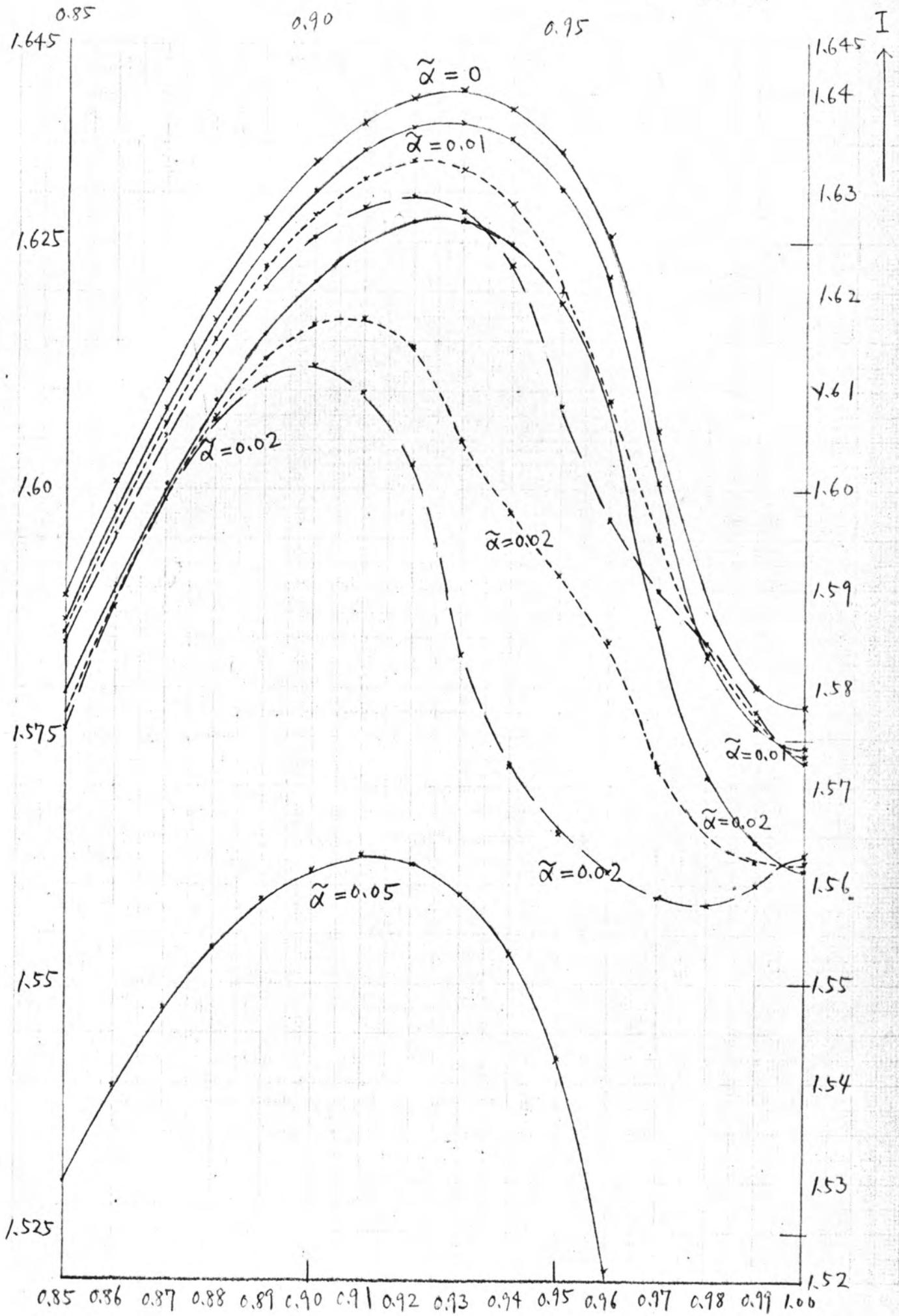
Screw A, Sine B
Screw B
Sine A



第1圖 N.O.6

$$k_F = 0.48500$$

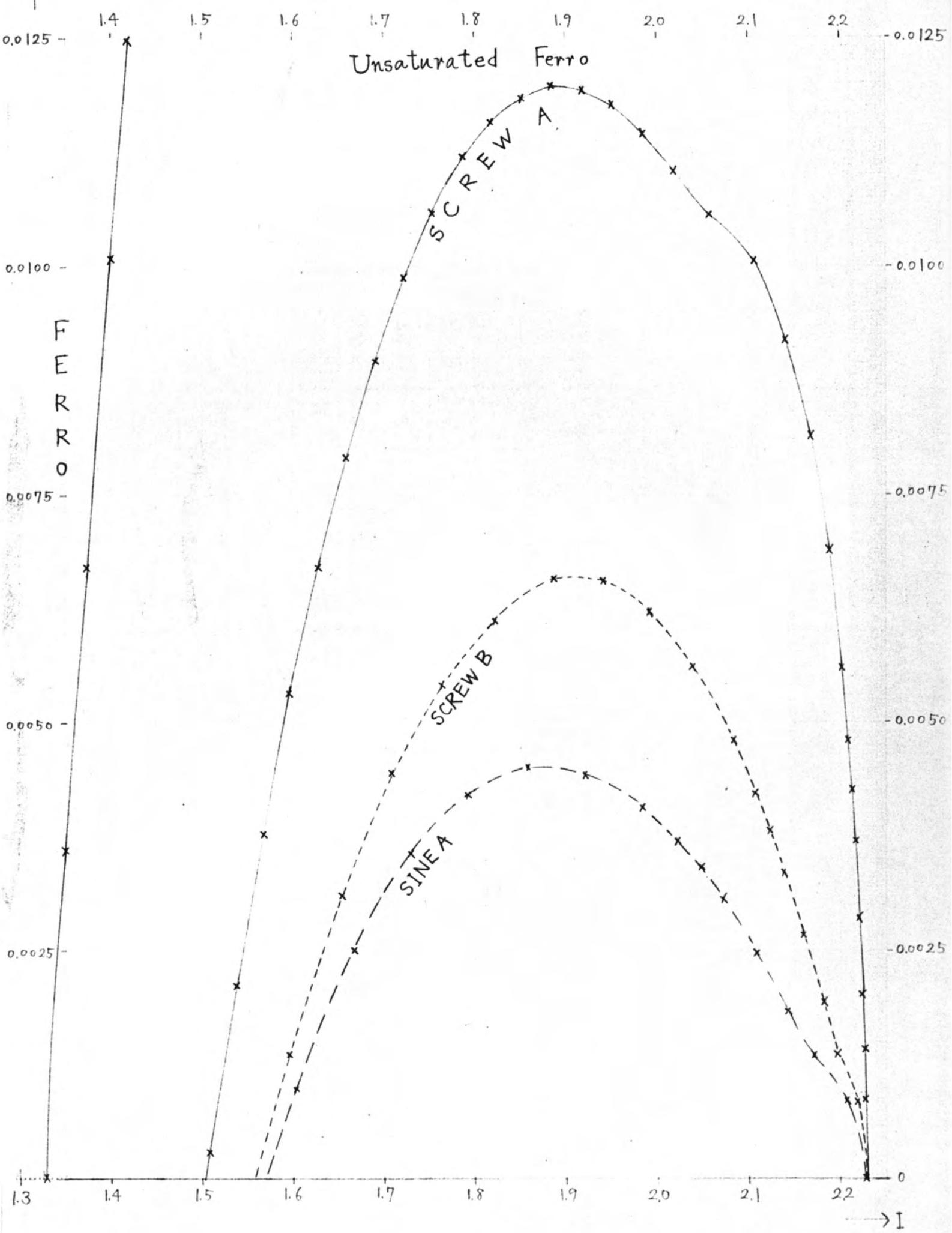
Screw A, Sine B
Screw B
Sine A



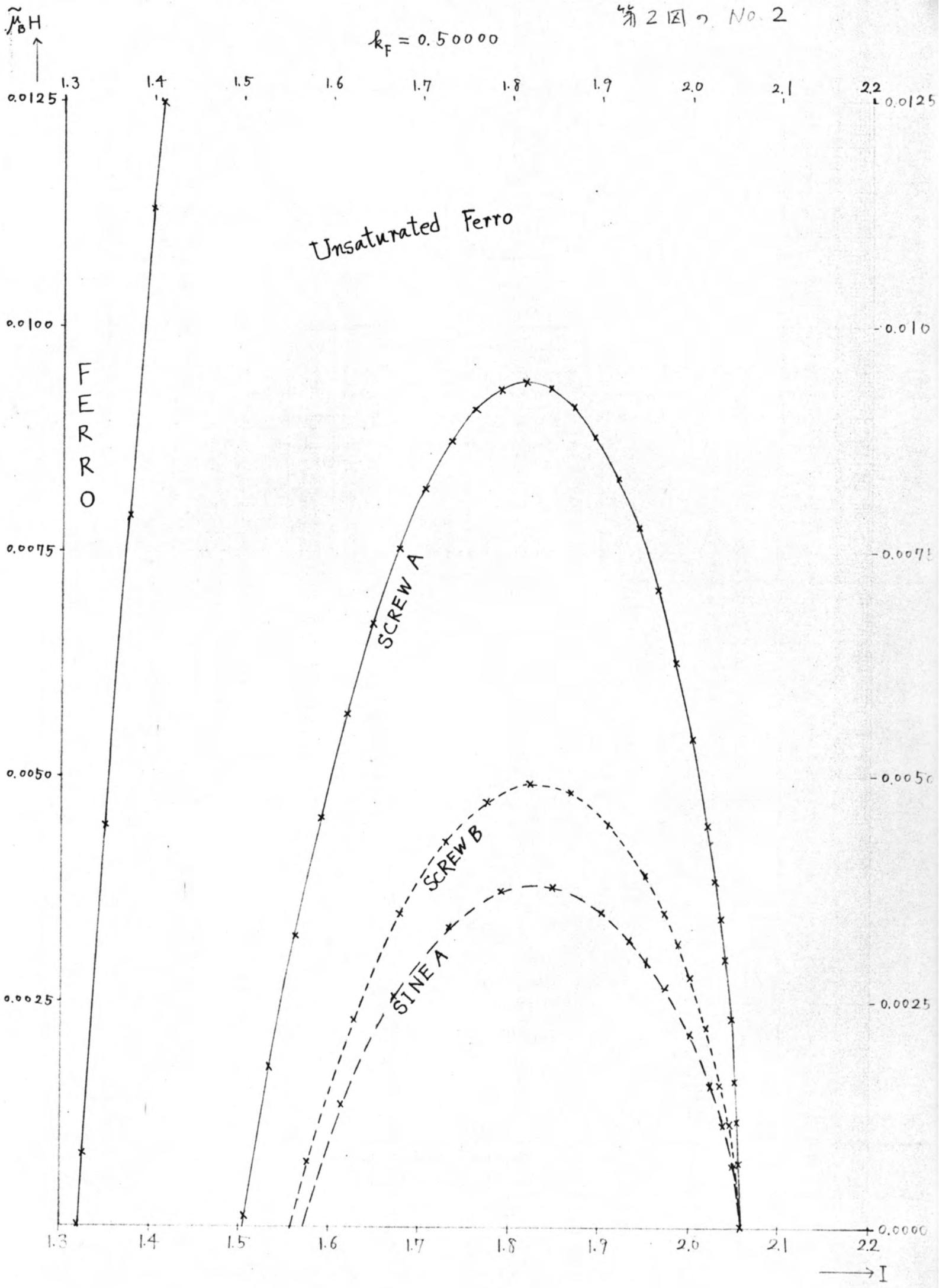
$$\tilde{\mu}_B H, \quad \tilde{\mu}_B = \frac{2m^*}{\hbar^2} \mu_B$$

$$k_F = 0.50375$$

第2図のNo.1

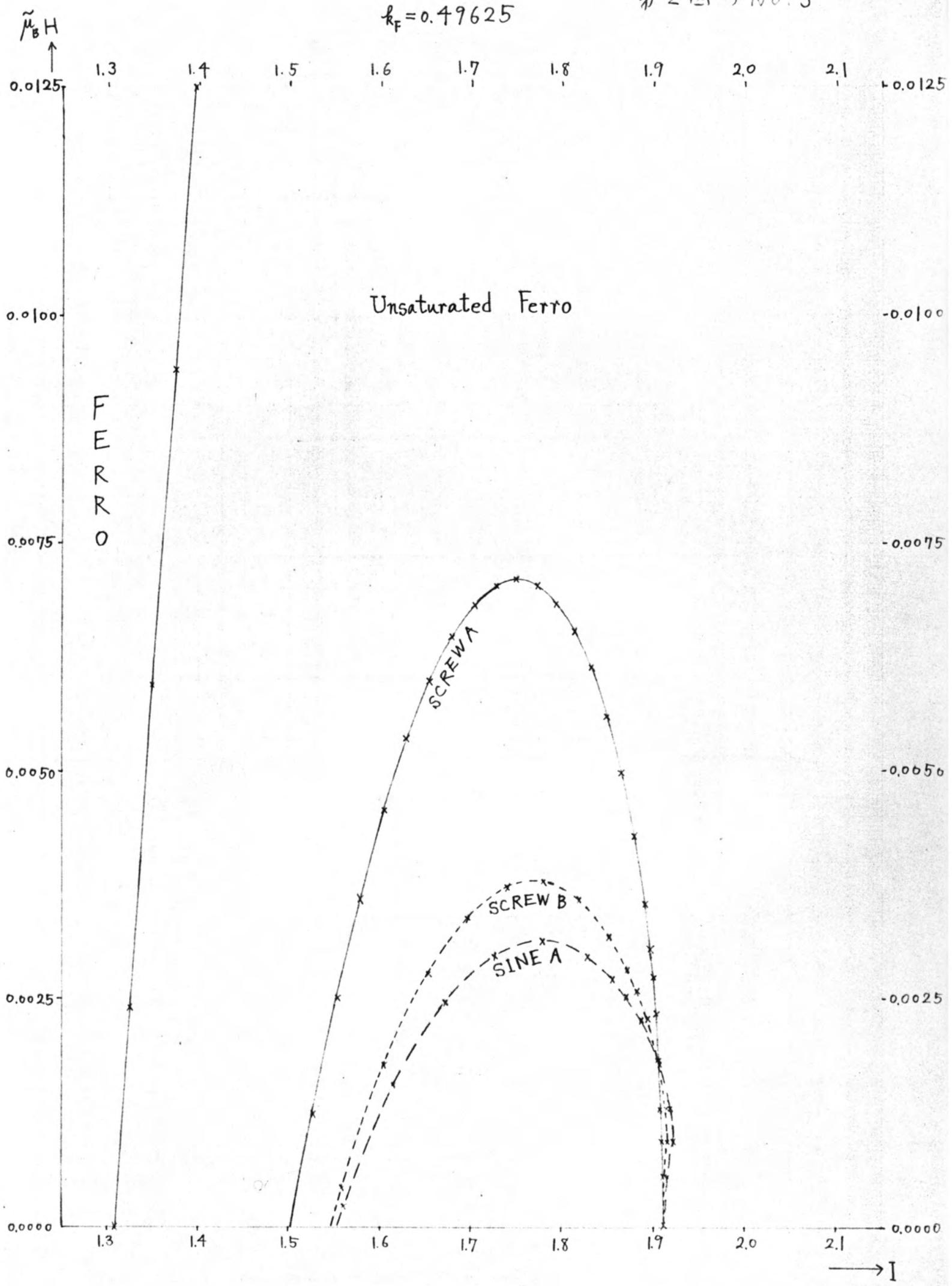


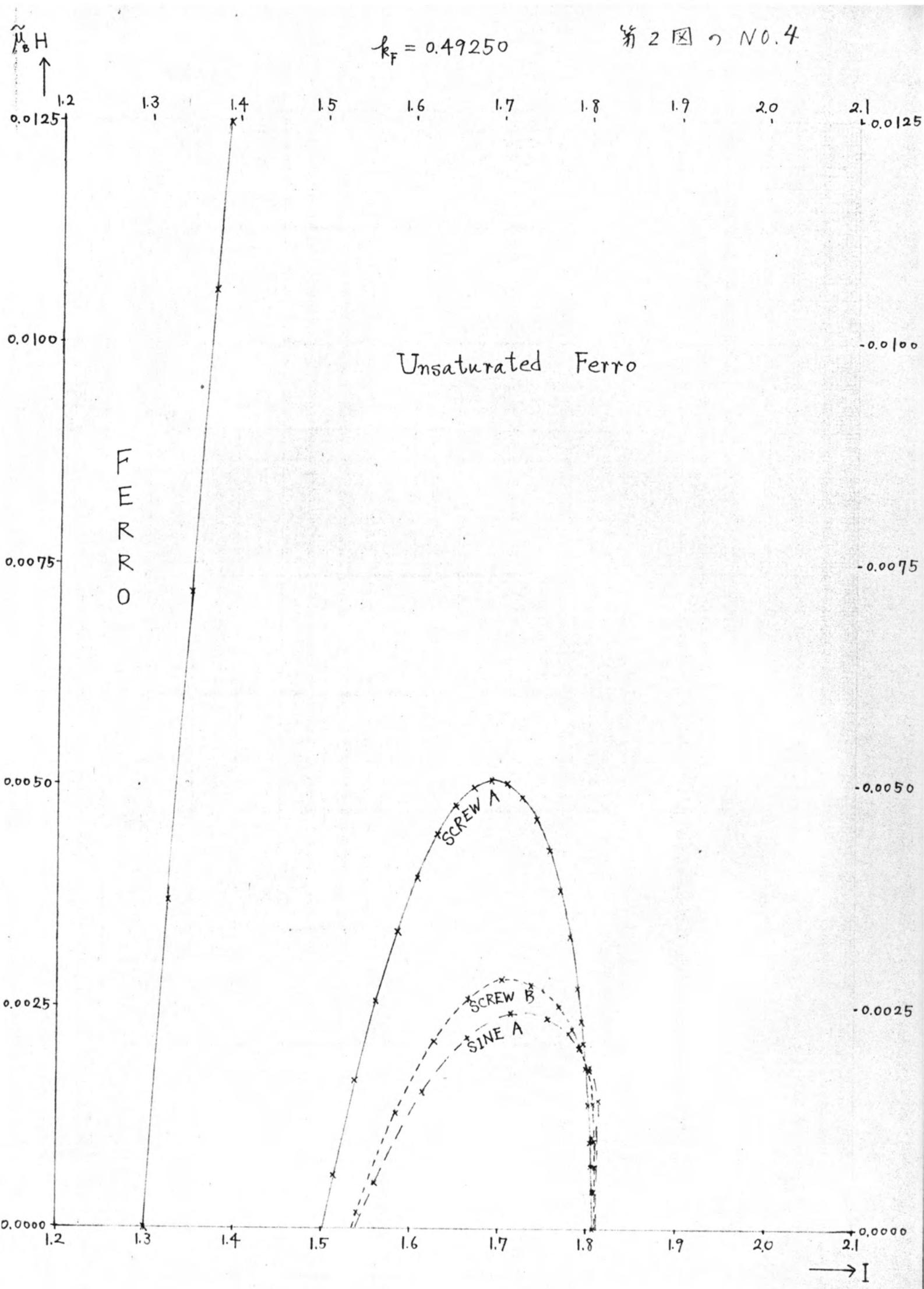
$$k_F = 0.50000$$



第2回のNo.3

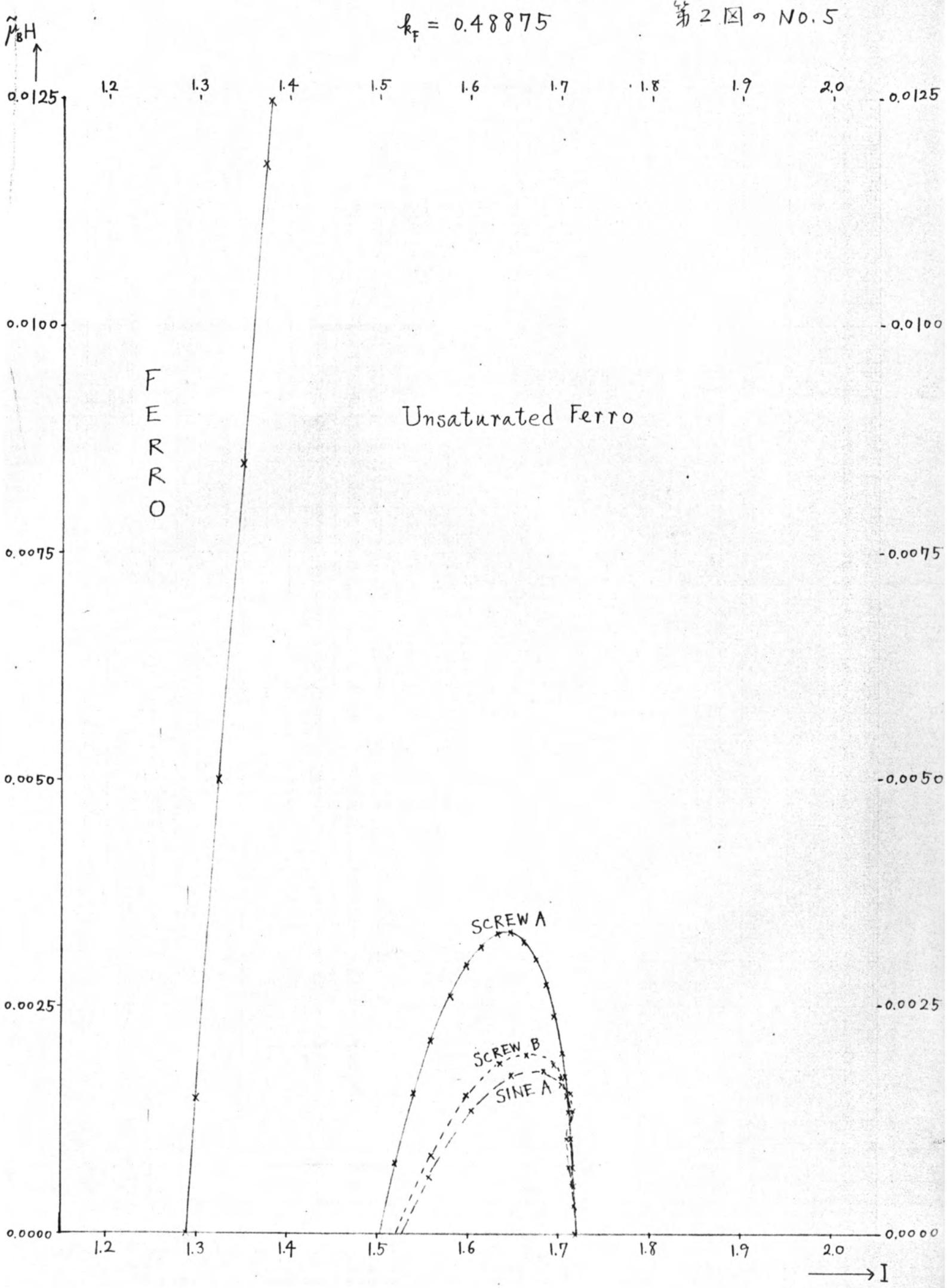
$$k_F = 0.49625$$





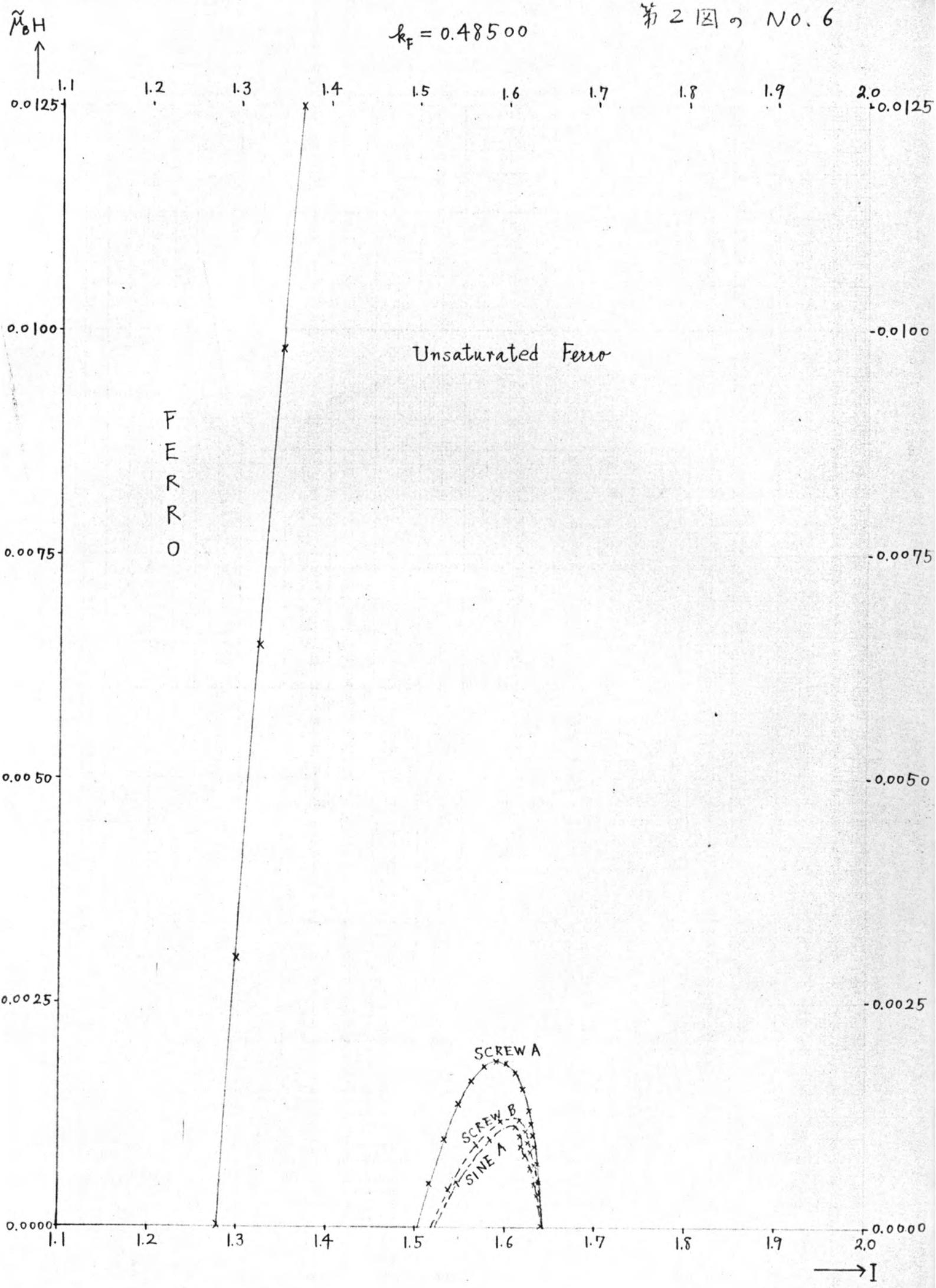
$$k_F = 0.48875$$

第2回のNo.5



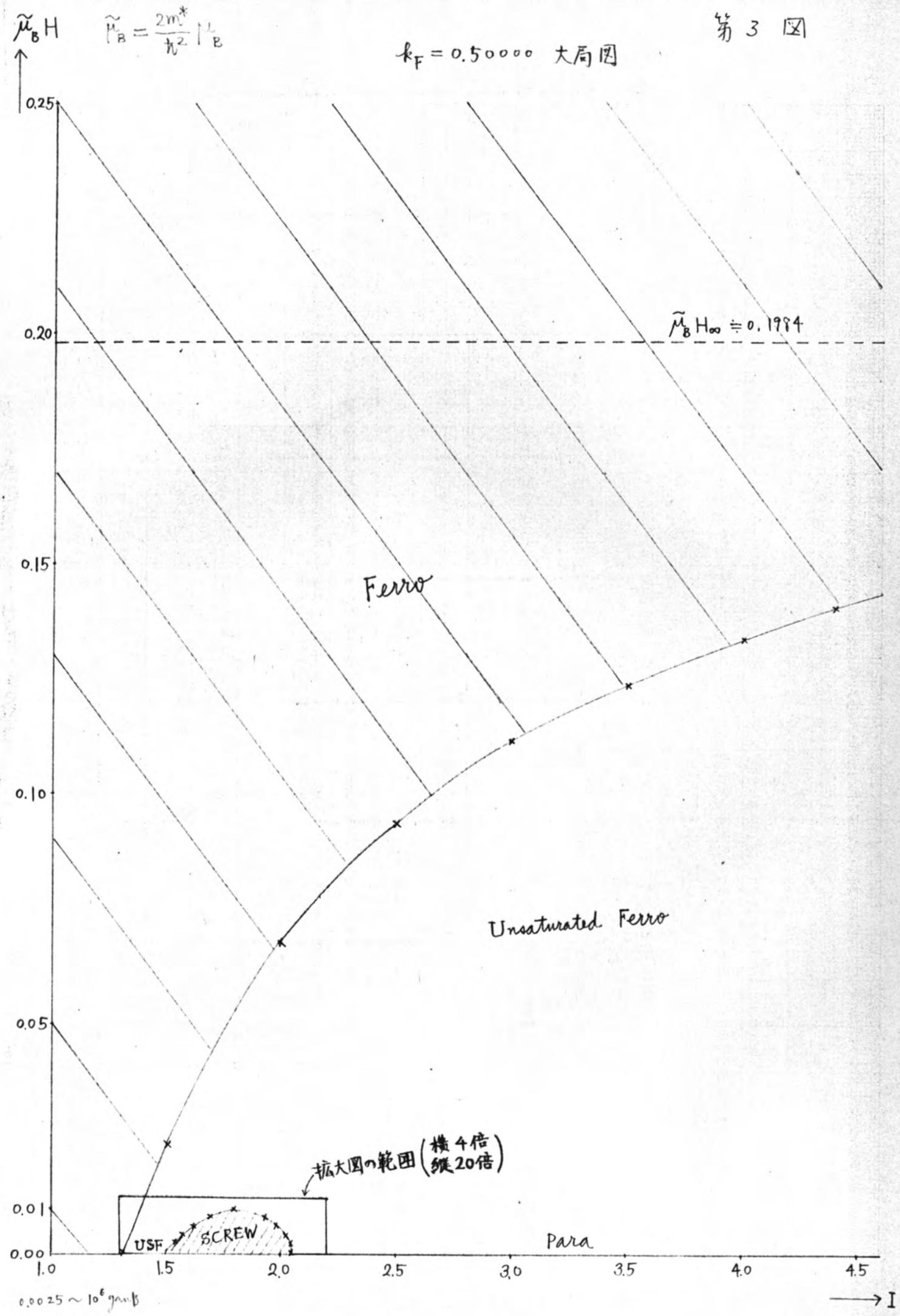
第2圖の NO. 6

$$k_F = 0.48500$$



第3 図

$k_F = 0.50000$ 大局図



Chapter 4 discussion

§ 1 Phase diagram

USF が SDW に 対して locally unstable になるような パラメータ (I, H) の範囲を 図示したのが 第 2 図である。

又、 USF と Ferro との 境界をも併せ 図示したのが 第 3 図である。これを見ると、 SDW 出現の 範囲は 可成り狭いことがわかる。

I については、 k_F の 値によつて 多少 範囲は 变るが、 SDW が 起るのは 大体

$$1.5 \leq I \leq 20 \quad (4.1)$$

に おいて である。ここで $I = \frac{1}{U}$ であり。

$\frac{\hbar^2}{2m^*} U = \text{Wannier 函数の intraatomic integral}$ (c.f. (1.10))

$$\frac{\hbar^2}{2m^*k_F^2} = \text{Fermi energy } E_F \quad (\text{cf. (1.4)})$$

だから、 $k_F \sim 0.5$ と合わせて (4.1) の次と同値である。

$$2.0 E_F \leq \text{intraatomic coulomb integral} \leq 2.7 E_F \quad (4.2)$$

すなわち intraatomic coulomb integral が E_F の二倍強の場合に限つて SDW が生じ得る。

然しこれの計算では伝導電子間の correlation の影響を全然考慮に入れていない。一つの簡便法として correlation の影響を正確に考慮に入れる代りに、形式的にそれを U の中に取り入れることが考えられる。^[4] そこで不等式 (4.2) の条件は、文字通りの intraatomic coulomb integral に関するものではなく、correlation の影響を取り入れた U の effective value に対する条件であるとみなすべきである。

実際、無修正の intraatomic coulomb integral は e^2/r_0 (r_0 は原子半径) の order でこれは 10 e.v. の程度となる。一方 Fermi energy は 1 e.v.

の程度だから、条件(4.2)をみたす筈がない。correlation に下る補正を入れた U_{eff} について、現実の Cr で(4.2)が満たされるかどうかは本論文では問題としていないが、興味ある問題であろう。

次に H については、外磁場が強くなりすぎると SDW は消滅することがわかる。その critical field の大きさは H にも k_F にもよるが、大体 $\tilde{\mu}_B H \sim 0.005$ 位である。この値は Ferro と USF との境界磁場 $\tilde{\mu}_B H_\infty = 0.1984$ ($I = \infty$, $k_F = 0.5$ のときの値) に比べると $1/40$ 位しかない。すなわち USF に磁場をかけて ferro に変える場合に比べると、SDW に磁場をかけて USF に変えるのには $1/40$ 位の磁場でよいかである。

(1.6) の記号の約束で

$$\tilde{\mu}_B H = \frac{2m^*}{\hbar^2} \mu_B H = \left(\frac{E_F}{k_F^2} \right)^{-1} \mu_B H \quad (4.3)$$

であるから $\tilde{\mu}_B H \sim 0.005$ は

$$H \sim \left\{ E_F / (k_F^2 \mu_B) \right\} \times 0.005 \quad (4.4)$$

を意味し、 $k_F = 0.5$, $\epsilon_F \sim 1 \text{ e.v.} = 1.60 \times 10^{-12} \text{ erg}$, $\mu_B = 0.93 \times 10^{-20} \text{ erg/gauB}$ (以上

理科年表より) を代入すると $H \sim 3.7 \times 10^6 \text{ gauB}$ を得る。

すなわち数百万ガウスの order の磁場をかけば、い限り SDW は消滅しない。

数百万ガウスは大きな磁場であるが、ferro と USF との境界磁場に比べればそれでも一桁小さく、第 3 図の大

局図で見ると、SDW の安定な領域は狭いものである。

我々の計算では $\tilde{\mu}_B(H+M)$ の値は 0.25 あたりまで取ったのに

$\tilde{\mu}_B H$ は 0.005 位にしかならないかった。これは $H+M$ のうちの大

部分が M から来るこことを意味し、外磁場が ferro との境

界磁場の $1/40$ 位であつても、スピノ配列から self-consistent に誘

起された M のために SDW はくずれることとなる。然し

現在行なわれてゐる field cooling などの実験では、せいぜい

$100 \text{ kg} = 10^5 \text{ gauB}$ の order の磁場しか使われてないのでも SDW

は常に安定である。我々の critical field の計算値を実験結果

と比べるにはもう一桁大きい磁場を使わねばならぬ。

次に k_F についてでは、第2図の No.1～No.6 を比べてみると
 k_F が大きい程 SDW の安定領域は広く； k_F が小さくなる
 と SDW の安定領域は狭くなる。かつとも $k_F > 0.5$ であると
 $q=1$ で最安定となるのでこれは SDW とは言えず antiferro
 である。第1図又は第1表を見ると、 q は k_F が小さい程
 又 H が大きい程小さくなる（すなわち SDW の周期が短
 くなる）ことは実験的に観測出来る筈であるが、 $H=0$ の
 場合以外にはこのようないくつかの実験は報告されていない。
 とも $10^5 \sim 10^6$ gaub の order の外磁場をかけて観測する必要がある
 やうである。

本論文では、(又前の Nagamiya, Motizuki & Yamazaki ^[4] —以後[NMY]として用いる)
 k_F の値としては 0.50375 から 0.48500 まで六個の値について
 計算している。この間の傾向からみてこれ以外の範囲では
 次のように推測される。 $k_F > 0.50375$ では $q=1$ の SDW 即
 ち antiferro の安定領域はますます広くなると思われ、又
 $k_F < 0.48500$ では間もなく SDW の安定領域は全然なくなつ

てしまふであろう。

k_F の値をもつと広範囲に変えて同様な計算を行なえば ($H=0$ のときだけでは), SDW の安定領域を (I, k_F) 面内で phase diagram として表わすことが出来るであろう。我々の $0.48500 \leq k_F \leq 0.50375$ での結果を、もう少し広い範囲まで外挿して試みに (I, k_F) 面内に phase diagram を描いてみたのが第4図である。

前回の NMY^[4] の結果によると、para や USF から SDW へ移る際に、不連続的に変ることがある。本論文では USF (や para) の local stability のみを考えたので、この不連続変化をも考慮すれば、SDW や cone の安定領域は第4図に示したものより若干広くなる筈である。

がが第4図で antiferro とは $q=1$ の SDW である。又 cone とは self-consistency の式で $M \neq 0, q \neq 0$ となる状態であり、これはナスバーンヒースバーンの population が違うようなら SDW ともみなせられし、USF 状態が SDW のよろに周期的に modu-

late されたもののともみがせる。描像としては局在モーメントの cone 構造を頭に浮べればよいであろう。

このように exchange integral の大きさと、Fermi 半径の大きさを parameters にして種々の磁気構造の間の phase diagram を描くことは、M.H.Cohen が行つてゐると聞くが、筆者はその詳細を知りない。我々は、このよろず phase diagram を作ることを直接の目標にしがかつたら、計算データは幾分不足ではあるが、我々の結果を整理しても第4図を描く事が出来た。^[4] この前の NMY のよろず para(や USF) から SDW への不連続変化も考慮して計算し、このグラフを補正することは容易な筈である。

現実の CT では I もしくも或る特定の数値を取つてゐるであろうが、このよろず phase diagram を作ることは物質を特定のものに限らず、例えば遷移金属一般についてその磁気構造を統一的に理解しようとするのに役立つ。

勿論現実の金属では Fermi 面は球でもないし、又 band は

縮退して Fermi 面下数個の band にまたがつてゐる。intraatomic coulomb integral についても、前述の通り correlation の影響を取り入れた effective value を採るべきと解すべきはならぬ。

其故にこの phase diagram を現実の金属に対してそのまま適用通りに適用出来るとは言えまいだろう。然しこれにこの phase diagram で用いた k_F や I の parameters が不適切であつたとしても、「伝導電子の总数、exchange integral の大きさなど数個の適當な parameter を用いて種々の磁気構造の間の phase diagram を作ること」は、統一的理解のために重要であろう。

第4図の phase diagram によつても、遷移金属の磁性は統一的に理解されるようと思われる。3d以外の遷移金属は、
 d -orbital の半径が大きいので intraatomic coulomb integral U は小さくなり、従つて $I (= 1/U)$ が大きいので para になる。3dの遷移金属は d 電子の個数が多いほど intraatomic coulomb integral は大きくなり (I は小さくなり), Fe, Co, Ni では Ferro になるに十分な程である。Cr や Mn では I は稍大きく、Mn では k_F が大きい(伝)

導電子数が多い)ので antiferro にかかるが、Cr では k_F が適當な
為に SDW になる。Ti と V では I が大きすぎるか又は k_F
が小さすぎる為に para になる。

参考

Ti V Cr Mn Fe Co Ni

d電子数 3 4 5 6 7 8 9

勿論、遷移金属の磁性の統一的理解の為には、phase diagram
を作ることにしても、 k_F と I を parameters に選ぶ事には問題が
あるかも知れない。特に correlation の影響については、intra-
atomic coulomb integral を effective value として補正すると言ふことが
姑息な手段ではなく、もつとまことに考えるべきであろう。
又、well localized の仮定を置いて、「二つの電子が同一の atom
のまわりに来たときのみ交換相互作用を行なう」とする
のも極端すぎるので、この仮定も幾分ゆるめられ必要があ
る。

§ 2 四種の SDW の 安定性の 比較

本論文では para や USF に対して SDW の 安定性領域を出しただけで、四種の SDW 相互のエネルギーを比較してはいられない。これは擾動計算の範囲内では出来ない事であつて、エネルギー比較の為には四種の SDW の夫々について（有限振中の）最安定構造を求めた後それらのエネルギーを比べねばならない。

然しエネルギー比較に代用して、次のよび方法でこれら の 安定性を比較する事が考えられる。それは「para や USF に対して 安定性領域が広ければ広い程、その

SDW は他の型の SDW に対して

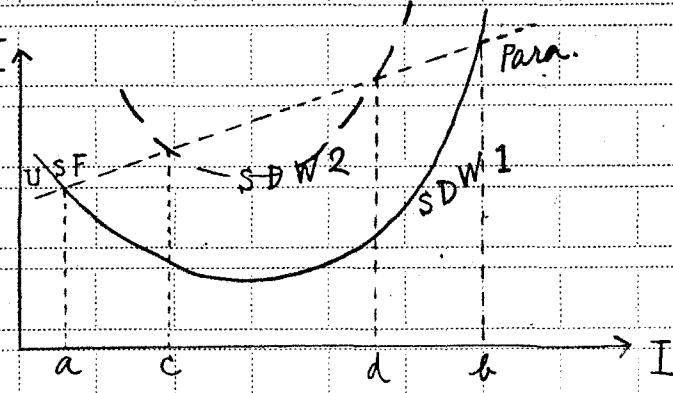
$E \uparrow$

ても 安定である。」と言ふ推測で

ある。例えば右図で SDW 1 の

(para～USF に対する) 安定領域は a

b 間であり、SDW 2 のそれは



c d 間である。

このとき区間 (a, b) が区間 (c, d) を含むことから SDW1 の方が安定であると考えるのである。(実際には c d の中间で SDW2 のエネルギー曲線の方が SDW1 のそれより下側に来ることがあるかも知れなければ、正確なエネルギーの比較が出来ない時矣ではこの推測はますます妥当であろう。)

さて、この方針で第2図の No. 1 ~ No. 6 を見て、四種の SDW の安定性を比較しよう。Chapter 1, Chapter 2 で述べたように、磁場がかかった時でも揺動計算の範囲内では Screw A と Sine B との差は起らず、従つて (1) Screw A or Sine B (2) Screw B (3) Sine A の三つの場合が、外磁場によつて分離される。Chapter 1 で説明したように Screw A, Sine B では spin の方向は外磁場に直角であり、Sine A では spin は常に外磁場に平行、Screw B では spin は外磁場に平行な面内で回転する。

さて第2図の No. 1 ~ No. 6 を見ると、 k_F のどの値に対して

も(後で述べる例外的な場合を除いて)一般的な傾向として
 Screw A or Sine B の安定領域が最も広いことがあつた。この事
 件、「最安定 SDW が screw & sine かはまらないけれど、
 とにかく外磁場に対して spin が直角に立てる」と言ふことを
 意味する。これは Field cooling についての Nathans et al.^[19] の実験と
 も、又 Arrott et al.^[20] の実験とも一致する。

然しこの一般的傾向に反して、次の場合には Sine A の (para
 や USF に対する) 安定領域の方が、Screw A or Sine B のそれ
 より外に伸び出している。

$$(1) \quad k_F = 0.49625 \text{ で } 0 \leq \tilde{\mu}_B H \leq 0.0018$$

$$(2) \quad k_F = 0.49250 \text{ で } 0 \leq \tilde{\mu}_B H \leq 0.0019$$

$$(3) \quad k_F = 0.48875 \text{ で } 0.0012 \leq \tilde{\mu}_B H \leq 0.0016$$

§ 1 で述べたように $\tilde{\mu}_B H \sim 0.0018$ は H が百万又は十萬ガウス
 の order であることに相当する。

我々の計算結果は絶対零度でのものであるから、実験
 と比較するときには spin flip temperature T_{sf} 以下の低温構造と比

較すべきであろう。Watts の実験結果は、低温ではスパンの向きは H が小さくと磁場に平行、 H が大きくなる（十万ガウス位になる）と磁場と直角になることを suggest している。（スパンの向きを直接測ったのではない、de Haas van Alphen effect の実験からの推論である。）ところが我々の計算結果でも $k_F = 0.49625$ or 0.49250 とすると、丁度 Watts の実験結果を合ふわけである。

我々の計算結果を $T > T_{sf}$ の温度にまで及ぼすには無理があるが、rough に考えれば、Screw A or Sine B の (para \rightarrow USF に対する) 安定領域が一般に最も広いと言ふことは entropy が大きいことを suggest し、温度が上る時 free energy の得をし易い事を suggest している。こゝ考へると $T > T_{sf}$ では Screw A or Sine B が出て来るものと予想され Nathans et al.^[13] の実験や Arrott et al.^[13] の実験と合ふ。

次に $H \rightarrow 0$ の極限を考へる。Introduction §5 で説明したように、外磁場の無い時撮動計算の範囲内では screw と sine と

の差は出て来ない。そこで $H \rightarrow 0$ として screw と sine との安定性を比較した後、 $H \rightarrow 0$ の極限を考える事にした。既に説明した通り、 $k_f = 0.50375, 50000, 48875, 48500$ では $H=0$ で Screw A or Sine B が最安定となり、 $k_f = 0.49625, 49250$ では Sine A がこれに取つて代る。前頁で述べたように Cr では k_f が後者の範囲にあると推測すると Watt^[3] の実験結果が説明出来たが、この推測のあとでは又 ($H \rightarrow 0$ として) 「外磁場のないとき sine が安定である」との結論が導ける。この結果も又「 $T < T_{sf}$ 」では longitudinal sine になつてゐる。」といふ了 Shirane, Takei^[17] の実験等、中性子線回折の実験とよく合つ。然し $T > T_{sf}$ では、磁場のあるとき Screw A or Sine B が最安定であるとしても、Screw A と Sine B は分離出来ないから、「磁場のないとき screw にはなるか、sine にはなるか」は答えられね。

以上我々の計算結果を最大限にひろげて rough discussion を行なつたが、その限りでは実験結果とよく一致している。勿論以上の議論がどこまで妥当であるかには疑問がある。

5 10 15 20
screw と sine との安定性を比較する為には、最終的にはそれをそれぞれの最安定構造についてエネルギーを比較する以外はつまりした結論は出せないし、温度効果を考える為には Fermi-dirac の分布に従つて excited state をも考慮して統計力学的計算を行なわねばならぬ。これらをまとめて計算するのはもつと面倒であり、将来の問題である。

なお、Field cooling の実験のうち、我々の計算結果によつて \vec{H} (外磁場) と $\vec{\sigma}$ (スピン) の方向の関係については一心の説明がついたが、 \vec{H} と \vec{q} (SDW の wave vector) 及び $\vec{\sigma}$ と \vec{q} の関係については我々のモデルは全然無力である。実際 total Hamiltonian (1.1) に含まれるが、機構で定まる。それはスピン座標と空間座標を結びつけるような力であり、いわゆる spin-orbit coupling 等が考えられるが、これをどのように formulate したうといかには成案がない。この力は、 \vec{q} が現実に結晶主軸の方向を向いている事から見て、結晶の対称性にも密接に関係したものである筈である。又中性子線

回折の結果から longitudinal か transverse かは 温度だけによつて定まり他の条件にはよらぬようだから、この力は longitudinal と transverse のいずれか一方を ほつきり 安定にする程強い力の筈である。最終的⁴に formulation のもとでは、 \vec{H} と $\vec{\sigma}$ と言うように pair ではなく、 $\vec{H}, \vec{\sigma}, \vec{\tau}$ の trio について方向の関係を導き出せるとすべきである。

更に、SDW に対する強い磁場の影響を詳しく考える為には Landau 反磁性の影響についても考慮ねばならぬ。即ち自由電子に又 方向の磁場をかけるとらせん運動を生じ、磁場に垂直な 方向の orbital motion は量子化される。その為、XY 面内の運動の energy spectrum は discrete になる。

このトコ¹²の事情は band electron に対しても起るであろうが、軌道角運動量の影響を正確に解く事は自由電子以外の時は非常に難しい。

SDW に対する軌道角運動量 L の影響を Hamiltonian の中に正確にとり入れて解くといふ事は今の段階では難し過ぎて

出来ない。

そこで近似的に磁場内電子のらせん運動によつて生ずる反磁性の free energy と、SDWをつぶすに要する energy $\mu_B H_{cut}$ の大きさとを比較してみると、次に説明するよろに反磁性の energy は $\frac{1}{100}$ 位になる。
故に近似的には軌道角運動量の影響は無視してもよいと考えられる。

Landau 反磁性に伴ひ $\frac{1}{n}$ free energy F は例えば中村“磁性”に与えてある。この本の(3.23), (3.31), (3.34)を少し書き換えてまとめる

$$\frac{F}{\mu_B H_{cut}} \sim \frac{N e^2 (2\pi m^*)^{3/2}}{n (2\pi h)^3} \frac{2}{3\pi} \mu_B H E_F^{1/2}$$

$$\sim \frac{N}{n} \frac{2\pi}{3} \mu_B H k_F$$

$$\sim 4 \times 0.01 \times 0.5 = 0.02$$

但し、自由電子ではないので、(3.23)で m を m^* に書き込みて用いた。又振動項をあらわす(3.34)式の大きさは、(3.31)

の $\frac{1}{2}$ 以下がので、上の estimation では (3.31) のみを用いた。

§ 3 残された問題

既に § 2 まででも所々に open question をあげておいた。こゝでもう一度それらをまとめて更に他の問題点を追加する。但し帶磁率に關係した事は part II で述べるので、こゝには触れない。

(1) 本論文では screw と sine の安定性の比較は十分に出来ていらない。そこで簡単な近似によることはあきらめて、screw と sine のエネルギーの相違をかなり精密な近似によつて解くこと、特に有限振中の sine 構造を解く有効

な方法を考え出すこと。

(2) 温度が有限である場合、温度が変化すると共に S DW が如何に変化するかを考察すること。^[5] M·M·N により T_N (Neel 点) は求めてあるが、もつと詳しく最安定な S DW 構造、磁場に対する挙動など温度効果を入れて計算せねば実験結果との比較考察が出来ない。

(3) 本論文では無攝動系の Fermi 面の形を球形と仮定した (自由電子様エネルギースペクトル) が、この仮定を取り除いて実際の CT の状態をよく表現し得るように Fermi 面の形を変えて考える事。又本論文では single band を仮定したが degenerate band で interband interaction を考慮した場合について研究する事。

特に Introduction § 3 で説明した Lomer^[6] の Fermi 面を单纯化したモデルに基づいて S DW を検討する事。これは本質的に two bands の縮退び一方は電子の、他方は hole の互いに合同な Fermi 面があつて、その間の interaction で S DW が生ずる。

ると言ふことのようである。その機構にかけて我々の single band theory と可成り違ふところに見えるから検討を要する。

(4) 本論文では Wannier 函数に well localized の仮定をかけた (即ち二つの電子が同一の atom の周りに来た時のみ相互作用を及ぼし合うとした)が、この仮定を取除いて考える事。差当つて最近接八原子からの影響を取り入れる二点を考慮されよう。

(5) 本論文では Hartree-Fock 近似を用い、従つて多体の波動函数としては常に一体波動函数の Slater 行列式の形のもののみを考えているが、それで十分か否かを検討し、correlation の影響について考慮する事。correlation の影響を取り入れる一つの方法として Kanamori^[4] のやつたところにいみゆる Brueckner 近似を用いる事、即ち intraatomic coulomb integral U の値に correlation の影響をすべて追込んで、本当の U の代りにその effective value U_{eff} で書きかえるだけで話を古まると考る方法がある。然しこの様な U の値の補正だけで十分みどろみも疑

同じにし、多体問題の一般論で扱つてあるよ^うるが生^きの形の correlation の計算を取り入れる事も考えてみるべきだろ^うう。

(6) 我々の第4図では、 I と k_F を parameter として種々の磁気構造の phase diagram を描いた。然し遷移金属の磁性を統一的に理解する為に I と k_F が best parameter であるなどと言は検討を要する。これには我々のモデル（特に Fermi 面の形及び well localized の仮定）が、現実の金属の磁性の機構の本領をつづつとみどろみと言ふ事に関連している。別のモデルで別の parameters を用いて同様の phase diagram を描けたら興味がある。

(7) § 2 末で述べたように、total Hamiltonian として (1.1) を用いたのは SDW の wave vector \vec{q} の方向を決める事が出来ない。実験では longitudinal と transverse の区別ははつきりしていけるのでこの両者の間にはエネルギーの差がある筈で、従つて \vec{q} と $\vec{\omega}$ の方向の関係をきめるよ^うるが力を Hamiltonian の中に含めねばならない。そのような Hamiltonian を用いての

み、Field cooling の実験結果との対比も満足に行はれることはあ
ろう。(我々の立場から言えば、異方性の説明も現象論的
なものであつてはがうず、電子間の相互作用の段階迄底
つて基本原理から導き出すべきである。)

(8) ②の最後で、Landau 反磁性の影響を order 的に検討し
、無視しても差支えがないと判断したが、これは rough discuss-
ion にすぎず、正確にはやはり詳しい考察が必要である。
L と H の相互作用を Hamiltonian にまとめてとり入れるのは取
扱い困難ではあるが、将来の問題としては考えるべきで
ある。

(9) Shull & Wilkinson^[8] の Cr の powder での実験で Néel 点が高々 ($\sim 475^{\circ}\text{K}$)
云ふ事、Bjerrum Møller, Blinowski, Mackintosh & Brun^[22] の実験で Néel 点以上でも
moment の或種の ordering が見出された事等は strain の存在の場合に
起つた異常かも知れない。計算によつて「適當な strain が
あれば Néel 点が上るか、又は Néel 点の上に何等かの ordering
を許すようか (para でも SDW でもない) 別の type の magne-

I. 4. 20'

5

10

15

20

(139)

25

tic phase が生ずるか」が理論的に導き出せれば興味がある
。もし否定的結果に終つても、現在のようならいふ
か推論を許すよりはづつとよしである。)

4

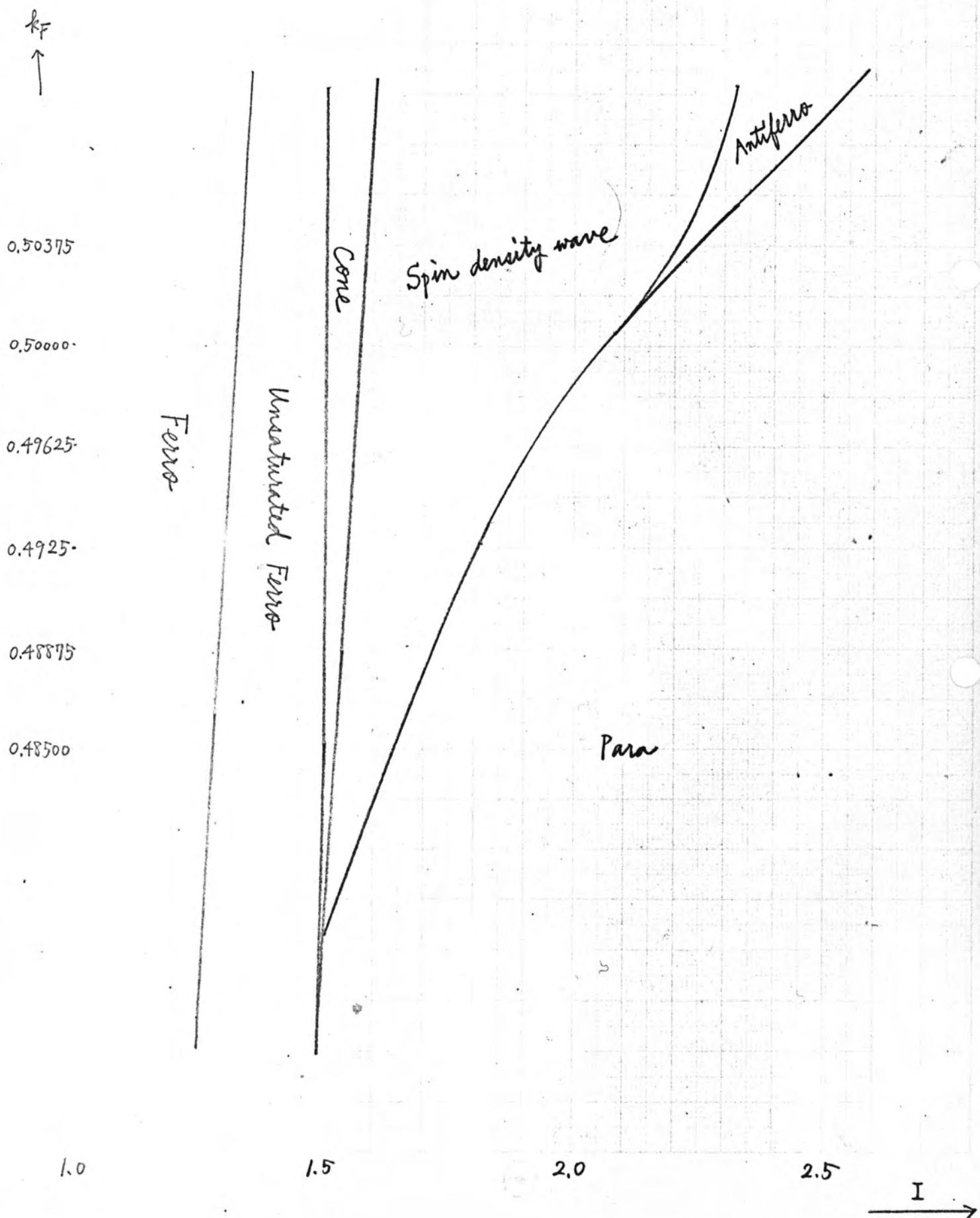
8

12

16

第4図

(I , k_F)面での種々の磁気構造のphase diagram



Chapter 1. Formulation of the theory

§ 1 有限振中の S D W

4

S D W に外磁場がかかる場合の一體化 Hamiltonian は

Part I, Chap.1 の (1.20) で与えられる。然し Part II では見方を変えて S D W の方を無摂動状態、外磁場の方を摂動項とみなすことにしよう。このようにして有限振中の S D W に対して帶磁率 χ を計算することが出来る。

8

先ず外磁場 $H=0$ の場合を考える。一體化 Hamiltonian は

$$\bar{\mathcal{H}}_1 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SDW} \quad (1.1)$$

12

であるが、 \mathcal{H}_{SDW} を摂動とみなし $\bar{\mathcal{H}}_1$ で exact に解くことを考えねばならぬ。これは screw の場合には可能であるが、sine の場合には極めて困難で未だ解決されていない。元

16

の理由は φ の固有函数 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ を base にして Matrix element を計算すると、 sine の場合には non-zero element が対角線に平行に現われて無限に続くからである。これに反して screw の場合には $\psi_{\vec{k}}^+(\vec{r})$ と $\psi_{\vec{k}+\vec{q}}^-(\vec{r})$ の二つだけで張られる二次元空間は \mathcal{H}_1 で不变であり、Matrix の対角化は結局二次の Matrix について行なうべきである。(\mathcal{H}_1 の Matrix element については Part I, Chap. 1 の終りの一覧表を参照) 4

そこで以下では screw の場合についてのみ考えることに 8 ある。 screw の場合

$$\mathcal{H}_{SDW} = - \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \left\{ \sigma_x \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) + \sigma_y \sin(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \right\} \quad (1.2)$$

となる。 Part I で仮定したように、こゝでも well localized の仮定と、自由電子様エネルギーースペクトルの仮定をおく。 12

(1.1) の \mathcal{H}_1 の Matrix element は次のよう 16 に書ける。

$$\psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) \text{ の 行 } \cdots \cdots \left(\begin{array}{cc} \epsilon(\vec{k}) & g \\ \end{array} \right) \quad (1.3)$$

$$\psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{k}}^-(\vec{r}) \text{ の 行 } \cdots \cdots \left(\begin{array}{cc} g & \epsilon(\vec{k}+\vec{q}+\vec{k}) \\ \end{array} \right)$$

これより \vec{p}_1 の固有函数と固有值は (exact に) 次のように求まる。(複号同順)。

固有函数

$$\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) = \cos \theta_{\vec{k}}^{\pm} \psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) + \sin \theta_{\vec{k}}^{\pm} \psi_{\vec{k} \pm (\vec{q} + \vec{k})}^{\mp}(\vec{r})$$

(1.4)

$$\text{where } \tan \theta_{\vec{k}}^{\pm} = \frac{E^{\pm}(\vec{k}) - E(\vec{k})}{g}, \quad \cos \theta_{\vec{k}}^{\pm} > 0$$

固有值

$$E^{\pm}(\vec{k}) = E(\vec{k}) + x^{\pm}(\vec{k}) - \operatorname{sgn}(x^{\pm}(\vec{k})) \sqrt{x^{\pm}(\vec{k})^2 + g^2}$$

(1.5)

$$\text{where } x^{\pm}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \{ E(\vec{k} \pm (\vec{q} + \vec{k})) - E(\vec{k}) \}$$

$$\operatorname{sgn} x = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ -1 & \text{if } x < 0 \end{cases}$$

(1.6)

(1.5) でみたるように \vec{p}_1 の固有值は、 $x^{\pm}(\vec{k})=0$ の面 (=gap面)のところで $2g$ だけの gap を起す。

$E^{\pm}(\vec{k})$ の小さい順番に $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ をつめて行つて Slater 行列式を作り、これについて E_{total} を計算する。 E_{total} が g の函数となるが g について微分して 0 とかくことにより、最安定

screw 構造が求まる。このよろにして条件；

$$I \equiv \frac{1}{U} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{2N} \left\{ \sum_{E^+(\vec{k}) \leq E_c} \frac{\operatorname{sgn}(x^+(\vec{k}))}{\sqrt{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2}} + \sum_{E^-(\vec{k}) \leq E_c} \frac{\operatorname{sgn}(x^-(\vec{k}))}{\sqrt{(x^-(\vec{k}))^2 + g^2}} \right\} \quad (1.7)$$

が得られる。これは本来は U を与えて g を定める方程式であるが、逆に g を与えて対応する I を計算する式と見方があるやうい。又 E_c は

$$\sum_{E^+(\vec{k}) \leq E_c} 1 + \sum_{E^-(\vec{k}) \leq E_c} 1 = 2 \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} 1 = \text{given const.} \quad (1.8)$$

の条件からきめる。(実は (1.7) と (1.8) を連立させて g と E_c を定めるわけである。 g を先ず与えたとみれば (1.8) は E_c を定める方程式、(1.7) は I を計算する式となる)。

(1.8) は伝導電子の総数一定と言ふ条件をあらわす。

以上のよろにして最も安定な screw 構造を(揺動によらず)
exact に求めることが出来る。この方針で数值計算を行な
つた結果は〔〕に記してある。

§ 2 垂直帶磁率の計算方法

Screw の回転面に垂直に微小な外磁場をかけた場合を考えてみよう。このとき screw は磁場の方向に立ち上り、cone に変るとと思われる。この状態をあらわす一体化 Hamiltonian として Part I の (1.20) で与えたと同じものを再び設定する。

$$\bar{\mathcal{H}}_1 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SDW} + \mu_B(H+M)\sigma_z \quad (1.9)$$

ただし \mathcal{H}_{SDW} は (1.2) で与えられる。

この $\bar{\mathcal{H}}_1$ に対しても、§ 1 (= 磁場なしのとき) と全く同様が手順で、固有函数と固有値が exact に求められる。

固有函数 $\phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) = \cos \vartheta_{\vec{k}}^{\pm} \psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) + \sin \vartheta_{\vec{k}}^{\pm} \psi_{\vec{k} \pm (\vec{q} + \vec{k})}^{\pm}(\vec{r})$

} (1.10)

where $\tan \vartheta_{\vec{k}}^{\pm} = \frac{\epsilon^{\pm}(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k}) + \mu_B(H+M)}{g}$, $\cos \vartheta_{\vec{k}}^{\pm} > 0$

固有値

$$\epsilon^{\pm}(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}) + x^{\pm}(\vec{k}) - \operatorname{sgn}(y^{\pm}(\vec{k})) \sqrt{\{y^{\pm}(\vec{k})\}^2 + q^2} \quad \} \quad (1.11)$$

$$y^{\pm}(\vec{k}) = x^{\pm}(\vec{k}) \mp \mu_B(H + M)$$

$\epsilon^{\pm}(\vec{k})$ の小さい順番に $\phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ をつめて行つて Slater 行列式を作る。このとき E_{total} は

$$E_{\text{total}} = \sum_{\epsilon^+(\vec{k}) \leq E_c} E_1^+(\vec{k}) + \sum_{\epsilon(\vec{k}) \leq E_c} E_1^-(\vec{k}) + \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\substack{\epsilon^+(\vec{k}) \leq E_c \\ \epsilon^+(\vec{k}') \leq E_c}} E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') + \sum_{\substack{\epsilon(\vec{k}) \leq E_c \\ \epsilon(\vec{k}') \leq E_c}} E_2^{--}(\vec{k}, \vec{k}') + 2 \sum_{\substack{\epsilon^+(\vec{k}) \leq E_c \\ \epsilon^-(\vec{k}') \leq E_c}} E_2^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') \right\} \quad (1.12)$$

の形に書かれる。たゞし

$$E_1^{\pm}(\vec{k}) = \langle \phi_{\vec{k}}^{\pm} | \mathcal{H}_0 + \mu_B H \sigma_z | \phi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle = \epsilon(\vec{k}) + 2x^{\pm}(\vec{k}) \sin^2 \vartheta_{\vec{k}}^{\pm} \pm \mu_B H \cos 2\vartheta_{\vec{k}}^{\pm}$$

$$E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') = \langle \phi_{\vec{k}}^+(1) \phi_{\vec{k}'}^+(2) | \mathcal{H}_{\text{int}} | \phi_{\vec{k}}^+(1) \phi_{\vec{k}'}^+(2) \rangle - \langle \phi_{\vec{k}}^+(1) \phi_{\vec{k}'}^+(2) | \mathcal{H}_{\text{int}} | \phi_{\vec{k}'}^+(1) \phi_{\vec{k}}^+(2) \rangle \\ = (\hbar^2/2m^*) (U/N) \{ 1 - \cos^2(\vartheta_{\vec{k}}^{\pm} - \vartheta_{\vec{k}'}^{\pm}) \} \quad \text{etc.}$$

g は (1.7) で定まる値 (= 外磁場がないときの値) に fix して $H+M=\alpha$ だけを変えると E_{total} は α の函数とみなせる。そこで E_{total} を α で微分して 0 とおくと外磁場があるときの最安定状態が求まる。このようにして条件;

$$\widetilde{\mu_B} M = \frac{U}{2N} \left\{ \sum_{E^-(\vec{k}) \leq E_c} \frac{|y^-(\vec{k})|}{\sqrt{(y^-(\vec{k}))^2 + g^2}} - \sum_{E^+(\vec{k}) \leq E_c} \frac{|y^+(\vec{k})|}{\sqrt{(y^+(\vec{k}))^2 + g^2}} \right\} \quad (1.13)$$

$\equiv J$ とかく。

が得られる。

(1.13) は本来は、 H を与えて M を求めの方程式であるが Part I で考えたと同じように $\alpha \equiv H+M$ を与えないと考える方が扱いやすい。 α を与えると (1.13) の右辺は計算出来る (U は (1.7) できまる値を代入) ので M が求まるが、二の M は外磁場 $\alpha-M$ に対応する値である。

このように手続き (α を用いて間接的に) M を H の函数として計算出来る。

ところびこの電子集団は、 \vec{z} 軸の負の方向すなむち \vec{H} の方向に次の式で与えられる磁化をもつ。

$$\mu_{\text{total}} = \mu_B \left\{ \sum_{E^+(\vec{k}) \leq E_c} \langle \phi_{\vec{k}}^+ | -\sigma_z | \phi_{\vec{k}}^+ \rangle + \sum_{E^-(\vec{k}) \leq E_c} \langle \phi_{\vec{k}}^- | -\sigma_z | \phi_{\vec{k}}^- \rangle \right\} \quad (1 \cdot 14)$$

(1・10), (1・11) を代入して、この中括弧の中を計算してみると、これは (1・13) の中括弧の中と同じ式にならうことがあらわくなる。

(1・13) の右辺を $\alpha \equiv H + M$ の函数とみて $J(\alpha)$ とあらわすと、

$$\mu_{\text{total}} = \frac{2N}{U} \mu_B J(\alpha) \quad (1 \cdot 15)$$

(1・13) 自身も

$$\widetilde{\mu}_B M = J(\alpha) \quad (1 \cdot 16)$$

と書きながされる。

(1・15) より

$$\frac{d\mu_{\text{total}}}{dH} = \frac{2N}{U} \mu_B \frac{dJ}{d\alpha} \frac{d\alpha}{dH} \quad (1 \cdot 15')$$

(1・16) より

$$\widetilde{\mu}_B \frac{dM}{dH} = \frac{dJ}{d\alpha} \frac{d\alpha}{dH} \quad (1 \cdot 16')$$

(1.16)' 式の左辺に $M = \alpha - H$ を代入して

$$\tilde{\mu}_B \left(\frac{d\alpha}{dH} - 1 \right) = \frac{dJ}{d\alpha} \frac{d\alpha}{dH} \quad \frac{d\alpha}{dH} = \frac{\tilde{\mu}_B}{\tilde{\mu}_B - J'(\alpha)}$$

これを (1.15)' に代入して

$$\frac{dM_{\text{total}}}{dH} = \frac{2N}{U} \mu_B \frac{\tilde{\mu}_B J'(\alpha)}{\tilde{\mu}_B - J'(\alpha)} \quad (1.17)$$

(1.17) が 垂直帶磁率を求める式となる。

かくて 単位質量あたりの 垂直帶磁率 χ_{\perp} は

$$\chi_{\perp} = \frac{1}{m_0 N} \left. \frac{dM_{\text{total}}}{dH} \right|_{H=0} = \frac{2\mu_B \tilde{\mu}_B}{m_0 U} \frac{J'(0)}{\tilde{\mu}_B - J'(0)} \quad (1.18)$$

とあらわされる。こゝに m_0 は イオンの 質量である。元で
あと $J'(0)$ の計算だけが残つたことに なる。

Chapter 2 Method of Computation

§ 1. $J(0)$ の計算方針

この Chapter では (1.18) の $J(0)$ を計算する方法を書く。

そのためには先ず (1.13) の $J(\alpha)$ の計算で、和を積分にかえてるものを考える。

$$J(\alpha) = \frac{U}{2V} \left[\iiint_{\substack{\epsilon^-(\vec{k}) \leq E_c \\ d^3\vec{k}}} \frac{|Y^-(\vec{k})|}{\sqrt{(Y^-(\vec{k}))^2 + g^2}} d^3\vec{k} - \iiint_{\substack{\epsilon^+(\vec{k}) \leq E_c \\ d^3\vec{k}}} \frac{|Y^+(\vec{k})|}{\sqrt{(Y^+(\vec{k}))^2 + g^2}} d^3\vec{k} \right] \quad (2.1)$$

V は第一 Brillouin zone の体積で Part I, Chapter 2 のよろに単位を取ると $V=2$ である。

α が変ると $J(\alpha)$ は二つの理由で変化する。一つは被積分函数が変ることであり、もう一つは積分領域が変ることである。従つて $J(\alpha)$ にはこの二つの寄与が加え合わさ

れる。これらを $J'_1(\alpha)$ 及び $J'_2(\alpha)$ とする。

(1.11) より $y^\pm(\vec{k}) = x^\pm(\vec{k}) \mp \mu_B \alpha$ であるから、

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{|y^\pm(\vec{k})|}{\sqrt{(y^\pm(\vec{k}))^2 + g^2}} \right) = \mp \mu_B \operatorname{sgn}(y^\pm(\vec{k})) \frac{g^2}{\{(y^\pm(\vec{k}))^2 + g^2\}^{3/2}} \quad (2.2)$$

(2.2) で $\alpha = 0$ とおいて積分すると

$$J'_1(0) = \frac{U}{V} \mu_B g^2 \left| \int_{E^+(\vec{k}) \leq E_C} \frac{\operatorname{sgn}(x^+(\vec{k}))}{\{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2\}^{3/2}} d^3 \vec{k} \right| \quad (2.3)$$

を得る。たゞし (2.1) の [] の中の二つの項は同じだけの寄与を有るので、第二項だけを考慮して2倍した。一方、

$$J'_2(0) = \frac{U}{V} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} \left(\left| \int_{E^+(\vec{k}) \leq E_C} - \int_{E^+(\vec{k}) \leq E_C} \right| \frac{|x^+(\vec{k})|}{\{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2\}} d^3 \vec{k} \right) \quad (2.4)$$

となる。

(2.3) や (2.4) の積分を計算するには Part I, Chapter 2 で考えたと

同じよろに第一 Brillouin zone を六つの region に分け、各 region に
おいて積分領域を回転体とみなすことにより一重積分に
書きかかす。

§ 2 各 region での積分の計算

この § では六つの region のうちの一つについて (2.3) や
(2.4) の積分を実行しよう。例えば第一 region については

$$\mathcal{J}_1'(0) = \frac{U}{V} \mu_B g^2 \left| \int_{\substack{E^+(\vec{k}) \leq E_c \\ \rightarrow \text{region 1}}} \frac{\operatorname{sgn}(x^+(\vec{k}))}{\sqrt{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2}} d^3 \vec{k} \right| \quad (2.5)$$

$$\mathcal{J}_2'(0) = \frac{U}{V} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} \left(\left| \int_{\substack{E^+(\vec{k}) \leq E_c \\ \rightarrow \text{region 1}}} - \int_{\substack{E^+(\vec{k}) \leq E_c \\ \rightarrow \text{region 1}}} \right| \frac{|x^+(\vec{k})|}{\sqrt{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2}} d^3 \vec{k} \right) \quad (2.6)$$

を計算することとする。これらを計算した後、 $\mathcal{J}_1'(0) + \mathcal{J}_2'(0) \equiv \mathcal{J}'(0)$ を作り、これを更に六つの region について加えると

$J'(0)$ が求まるわけである。

Part I と同じよろに $-(\vec{q} + \vec{K})$ の方向を \vec{k} 軸とするよろに座標変換を行ふと

$$\chi^+(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \chi \left(k_3 - \frac{\chi}{2} \right) \quad \left. \right\} \quad (2.7)$$

$$\text{where } \chi = |\vec{q} + \vec{K}|$$

となるから、(2.5) 及び (2.6) の被積分函数は k_3 にのみ depend する。一方 (1.5) 及び (1.11) に (2.7) を代入すると

$$E^+(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \vec{k}^2 - \chi \left(k_3 - \frac{\chi}{2} \right) + \operatorname{sgn} \left(k_3 - \frac{\chi}{2} \right) \sqrt{\chi^2 \left(k_3 - \frac{\chi}{2} \right)^2 + \tilde{g}^2} \right\} \quad (2.8)$$

$$E^+(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \vec{k}^2 - \chi \left(k_3 - \frac{\chi}{2} \right) + \operatorname{sgn} \left(k_3 - \frac{\chi}{2} + \frac{\tilde{\mu}_B d}{\chi} \right) \sqrt{\chi^2 \left(k_3 - \frac{\chi}{2} + \frac{\tilde{\mu}_B d}{\chi} \right)^2 + \tilde{g}^2} \right\} \quad (2.9)$$

$$\text{where } \tilde{\mu}_B = \frac{2m^*}{\hbar^2} \mu_B, \quad \tilde{g} = \frac{2m^*}{\hbar^2} g \quad (2.10)$$

となる。これより (2.5) 及び (2.6) の積分領域は \vec{k} 軸を軸とする回転体であることがわかる。ただし region 同志の境界面

は Part I と同様、円錐で書きかえる。例えば (2.5) の積分領域
域「 $E^+(\vec{k}) \leq E_c$, かつ region 1」は

$$k_r = \sqrt{k_3^2 + k_\perp^2} \leq k_p(k_3) \quad (2.11)$$

where $(k_p(k_3))^2 = \min \left\{ \frac{5}{4} k_3^2, \frac{2m^*}{\hbar^2} E_c - k_3^2 + \chi(k_3 - \frac{\chi}{2}) - \text{sgn}(k_3 - \frac{\chi}{2}) \sqrt{\chi^2 (k_3 - \frac{\chi}{2})^2 + \tilde{q}^2} \right\}$

$$(2.12)$$

となる。上式{}の中の二項が等しくなるよし $k_3^0 > 0$ の値を k_3^0 として、 $0 \leq k_3 \leq k_3^0$ の範囲を胴部、 $k_3^0 \leq k_3 \leq \frac{\chi}{2}$ の部分を首部、 $k_3 \geq \frac{\chi}{2}$ の部分を頭部と呼ぶことにしよう。

(2.5) の積分は、胴首頭の各々について k_3
一重積分に書きかれる。この際、

被積分函数は (k_3 の分数式) ÷ (k_3 の二次式の平方根) の形となり不足積分の計算は可能である。

次に (2.6) の積分領域「 $E^+(\vec{k}) \leq E_c$ かつ region 1」は、

$$k_r \leq k_p(k_3, d) \quad (2.13)$$

$$\text{where } (k_p(k_3, \alpha))^2 = \min \left\{ \frac{5}{4} k_3^2, \frac{2m^* E_c - k_3^2 + \kappa (k_3 - \frac{\kappa}{2}) - \operatorname{sgn}(k_3 - \frac{\kappa}{2} + \frac{\tilde{\mu}_B \alpha}{\kappa}) \sqrt{\kappa^2 (k_3 - \frac{\kappa}{2} + \frac{\tilde{\mu}_B \alpha}{\kappa})^2 + \tilde{g}^2}}{\hbar} \right\}$$

(2.14)

と書かれる。 k_3 を一つ与えたとき、この回転体の断面積
は $\pi (k_p(k_3, \alpha))^2$ である。このことと (2.6) の被積分函数が k_3 に
のみ depend することから

$$J'_2(0) = -\frac{U}{V} \pi \int_0^{k_3} \frac{\partial}{\partial \alpha} (k_p(k_3, \alpha))^2 \Big|_{\alpha=0} \frac{\kappa |k_3 - \frac{\kappa}{2}|}{\sqrt{\kappa^2 (k_3 - \frac{\kappa}{2})^2 + \tilde{g}^2}} dk_3 \quad (2.15)$$

を得る。たゞしこれは積分領域の頭部の先端から円錐の頂
までの距離である。

(2.14) より

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha} k_p^2 \right|_{\alpha=0} = \begin{cases} 0 & (\text{胴部}) \\ -\frac{\tilde{\mu}_B \kappa |k_3 - \frac{\kappa}{2}|}{\sqrt{\kappa^2 (k_3 - \frac{\kappa}{2})^2 + \tilde{g}^2}} & (\text{首及び頭部}) \end{cases} \quad (2.16)$$

を得るが、これを(2.15)に代入すると $\mathcal{J}'_2(0)$ が求まる。しかし
μが変ると頭部の先端の位置や、gap面の位置も変って来る
わけだが、これら影響は J(μ) には μ について高次の
無限小で入って来るのを J'(0) には寄与しない。

以上で $\mathcal{J}'_1(0)$ 及び $\mathcal{J}'_2(0)$ を共に一重積分で計算する方法を
述べた。この積分計算の詳細はこゝには書かず、ただ結
果として得られた式のみを書きく。

$$\mathcal{J}'(0) = \mathcal{J}'_1(0) + \mathcal{J}'_2(0)$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{U}{V} \widetilde{\mu}_B \left[\pi(\delta + \varepsilon) - \frac{\pi}{2\beta} \left\{ (\beta^2 + \gamma^2 - \beta^2) \left(\frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 + \gamma^2}} - \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} \right) + \gamma^2 \log_e \frac{\delta + \sqrt{\delta^2 + \gamma^2}}{|\varepsilon| + \sqrt{\varepsilon^2 + \gamma^2}} \right\} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{5\pi}{8\beta} \left\{ \beta \sqrt{\beta^2 + \gamma^2} - \frac{2\beta\gamma^2}{\sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} - (\beta^2 - \gamma^2) \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} + \gamma^2 \log_e \frac{\beta + \sqrt{\beta^2 + \gamma^2}}{\delta + \sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} \right\} \right] \tag{2.17}
 \end{aligned}$$

(2.17) 右辺にあらわされた記号の意味は下記の如くである。

$$\beta = \frac{x}{2} = \frac{|\vec{q} + \vec{k}|}{2}, \quad \gamma = \frac{\tilde{q}}{x}$$

| (2.18)

$$E_c = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_c^2 \quad \text{ナガラウチ} \quad k_c = \sqrt{\frac{2m^* E_c}{\hbar^2}}$$

(2.18)

$$\delta = \frac{x}{2} - k_3^0 = \text{首部の高さ}$$

$$\epsilon = h - \frac{x}{2} = \text{頭部の高さ}$$

δ と ϵ は次の式で定まる。

$$\delta = \delta^{(0)} + \delta^{(1)} \gamma^2 + \delta^{(2)} \gamma^4 \quad (2.19)$$

where

$$\delta^{(0)} = \beta - \frac{2}{3} k_c, \quad \delta^{(1)} = \frac{x}{9\delta^{(0)}(\delta^{(0)} - \beta)}$$

$$\delta^{(2)} = -\frac{9}{64} \frac{\delta^{(1)3}}{\beta^2} (3\delta^{(0)} - \beta)^2$$

(2.20)

$$\epsilon = \text{sgn}(k_c - \beta) \sqrt{k_c^2 + \beta^2 - 2\beta \sqrt{k_c^2 + \gamma^2}} \quad (2.21)$$

ただし $\sqrt{\cdot}$ の中が負なら $\epsilon = 0$ とする。

Chapter 3 Results

(1.18) に か い て $\tilde{\mu}_B = (2m^*/\hbar^2)\mu_B$ で あ る が、 有 効 質 量 m^* を 消 去 す る た め に $(\hbar^2/2m^*)k_F^2 = E_F$ (E_F は Fermi energy) の 関 係 を 代 入 す る と (1.18) は 次 の よ う に 書 き な が さ れ る。

$$\chi_{\perp} = \frac{2k_F^2 m^2}{m_0 E_F \cup} \frac{J'(0)}{\tilde{\mu}_B - J'(0)} \quad (3.1)$$

(2.17) 式 で 見 て わ か る よ う に $J'(0)$ は $\tilde{\mu}_B$ に 比 例 す る から $J'(0)/\{\tilde{\mu}_B - J'(0)\}$ は $\tilde{\mu}_B$ を 含 ま ず 従 つ て m^* を 含 ま せ い。 だ か ら (3.1) は m^* を 消 去 し た χ_{\perp} の 表 式 に な つ て い る。

我 々 は Chapter 2 で 説 明 し た 方 法 で $J'(0)$ を 電 子 計 算 机 に よ つ て 数 値 計 算 し、 こ れ を (3.1) に 代 入 し て χ_{\perp} を 求 め た。
数 値 計 算 に 際 し て 必 要 な k_F 及 び $I = -1/\cup$ の 数 値 は、 [4] の 結 果 を 用 い た。 従 つ て パ ラ メ ー タ を 動 か す 範 囲 を [4] と 合 わ せ た。 す な わ ち k_F は 0.50375, 0.50000, 0.49625, 0.49250, 0.48875, 0.48500 の 六 通 り、 I は 1.00 か ら 0.85 ま で 0.01 き ざ み に 16 通 り、 又

k_F は (k_F の 値 に よ つて 異 なる が) 大 体 0 か ら 0.20 位 ま で の 間

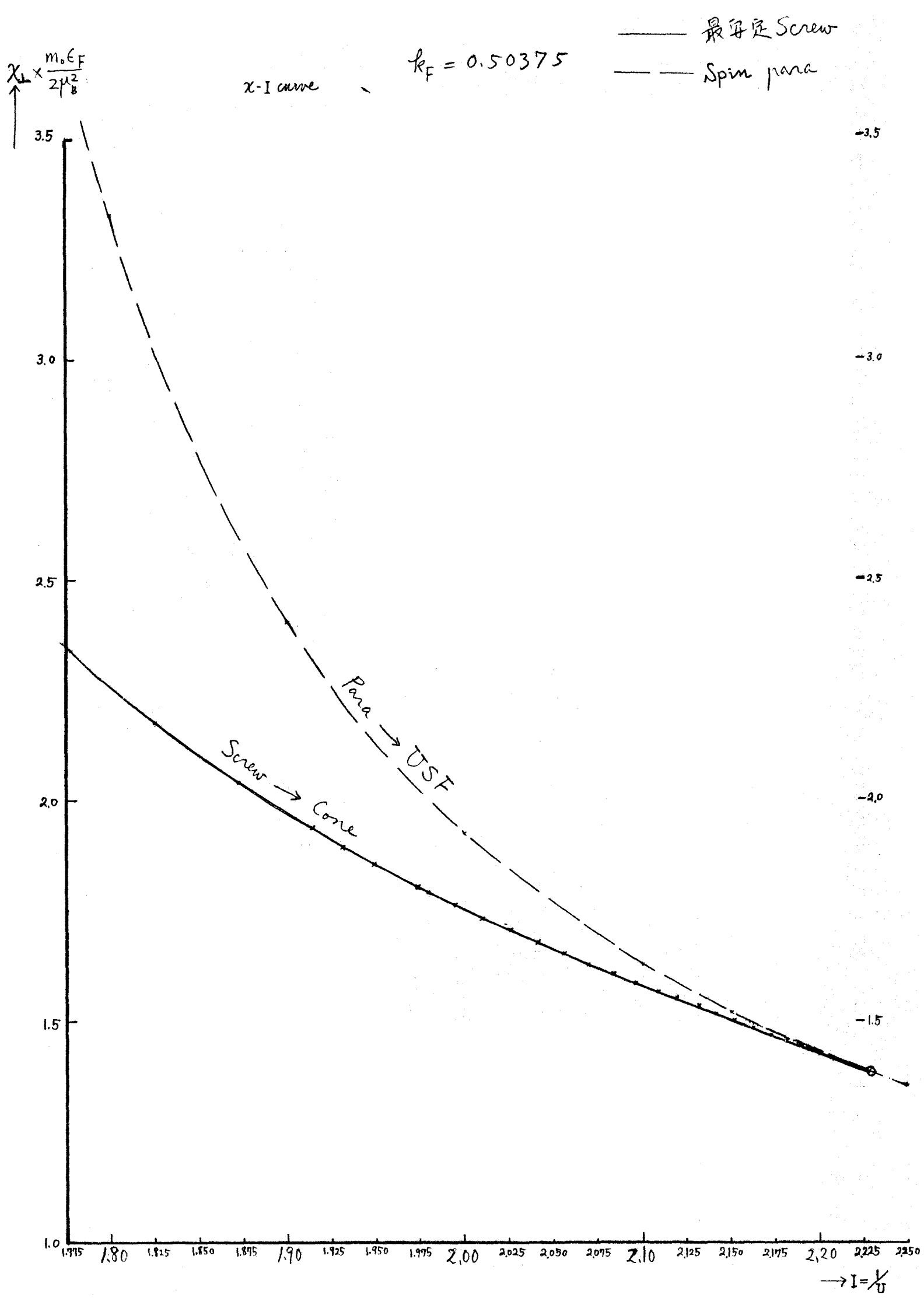
を 動 か し て い る。 ($g = (\hbar^2 / 2m^*) k_F^2$)

k_F を き め て か く と、 $I = 1/U$ さ え 与 え ば 最 安 定 screw 構
造 と し て k_F も 1 も 定 ま る 答 で 従 つ て χ_{\perp} は I の 函 数 と 考 え
ら れ る。 最 安 定 screw 構 造 の 決 定 に は、 や は り [4] の 結 果 を
用 ひ て、 $\chi_{\perp} \sim I$ curve を 作 つ た。 graph は k_F ご と に 一 枚 で、 横
軸 に I を、 縦 軸 に は

$$\frac{m_e \epsilon_F}{2 \mu_B^2} \chi_{\perp} = \frac{k_F^2}{U} \frac{J'(0)}{\mu_B - J'(0)} \quad (3.2)$$

を 取 つ た。

グ ラ フ の うち 矢 線 は 準 安 定 Screw 構 造 (エネルギー 極 小
で あ る が 最 小 で な い も の) に 対 応 す る χ_{\perp} 、 又 破 線 は Pauli
常 磁 性 の χ を 意 味 す る。 こ れ ら は 比 較 の た め に 書 き 添 之
た。



最安定 Screw

χ -I curve

$$k_F = 0.50000$$

Spin para

-2.5

-3.0

-2.5

-2.1

-2.0

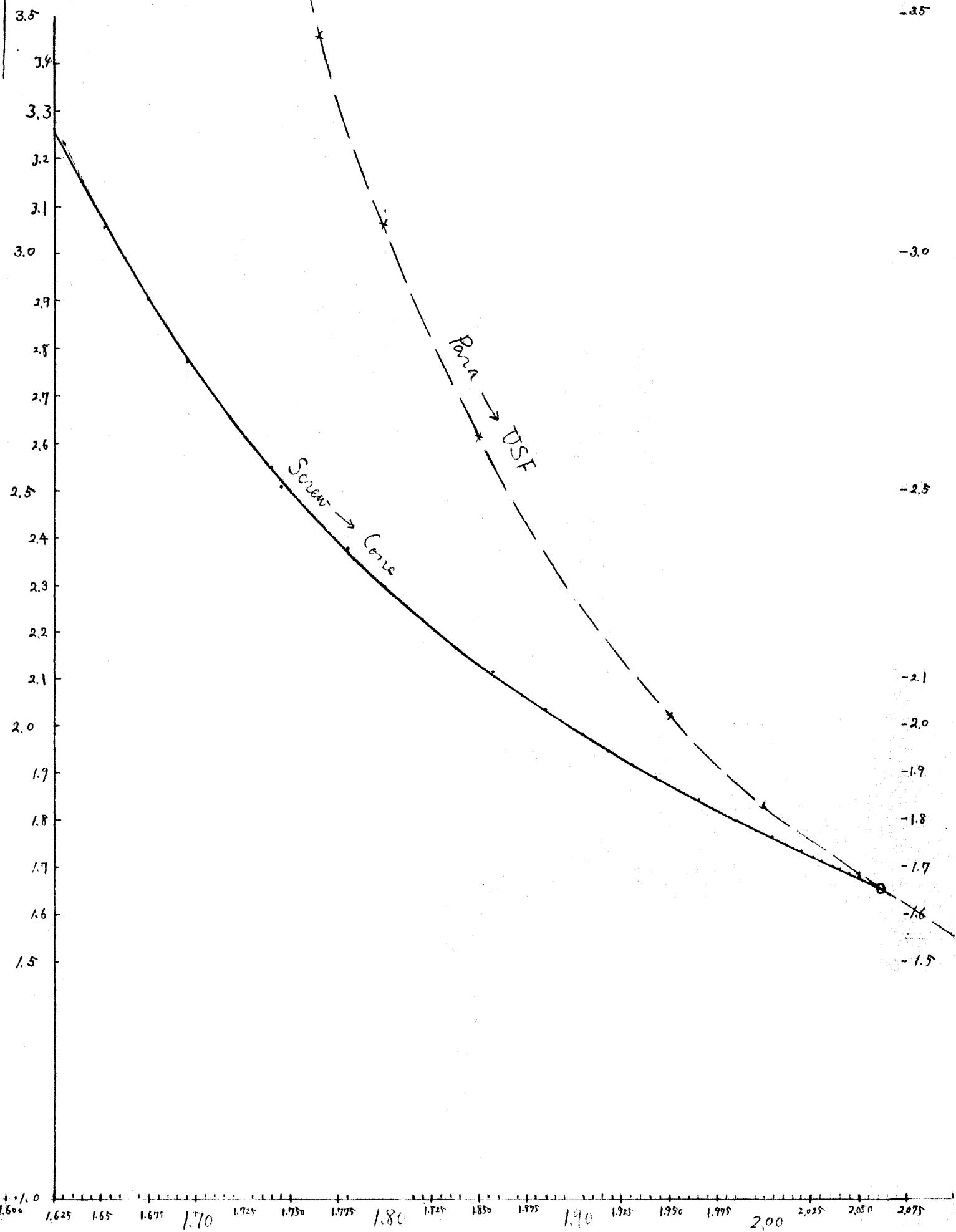
-1.9

-1.8

-1.7

-1.5

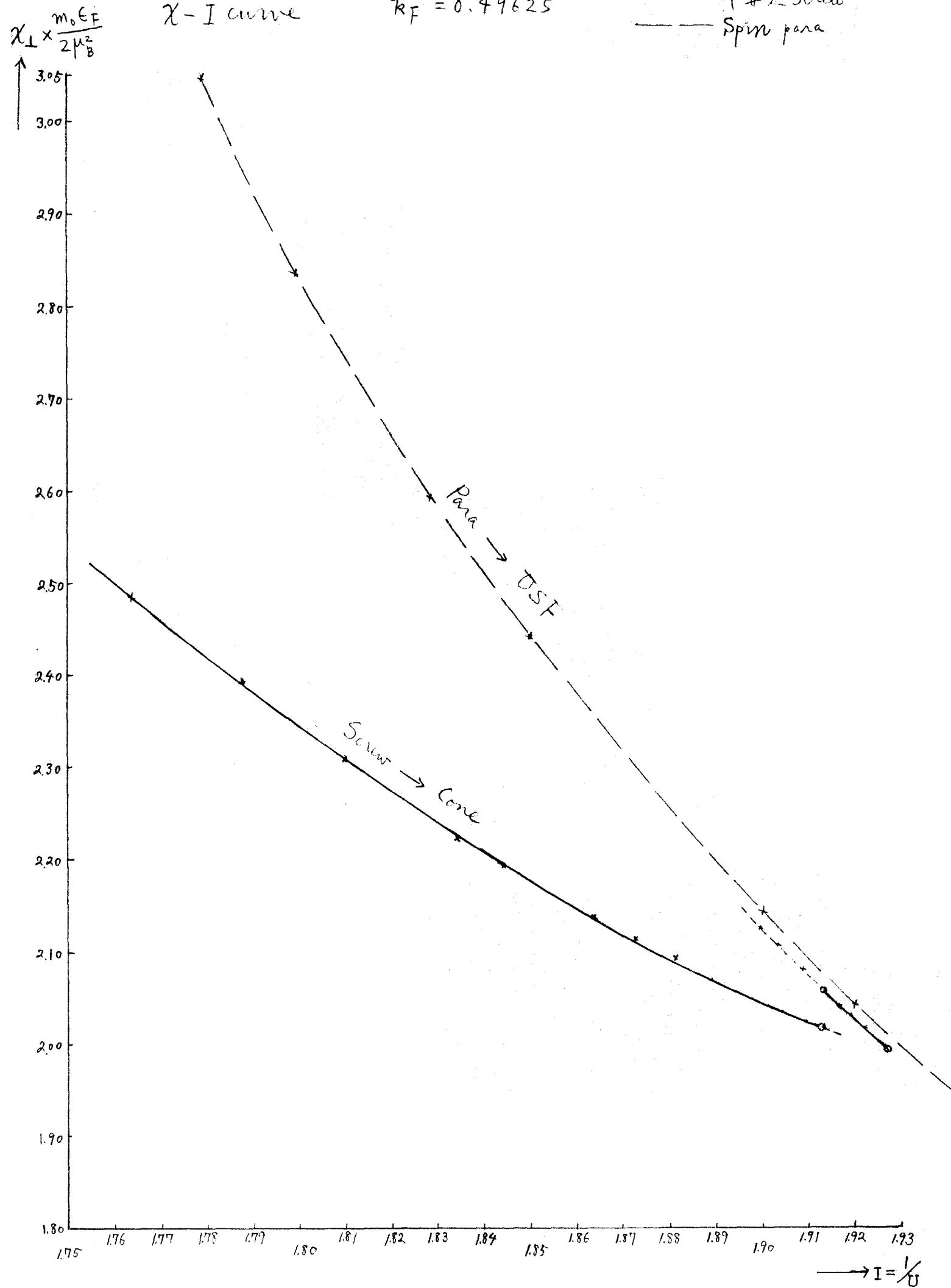
$$\chi_1 \times \frac{m_0 e_F}{2\mu_B^2}$$

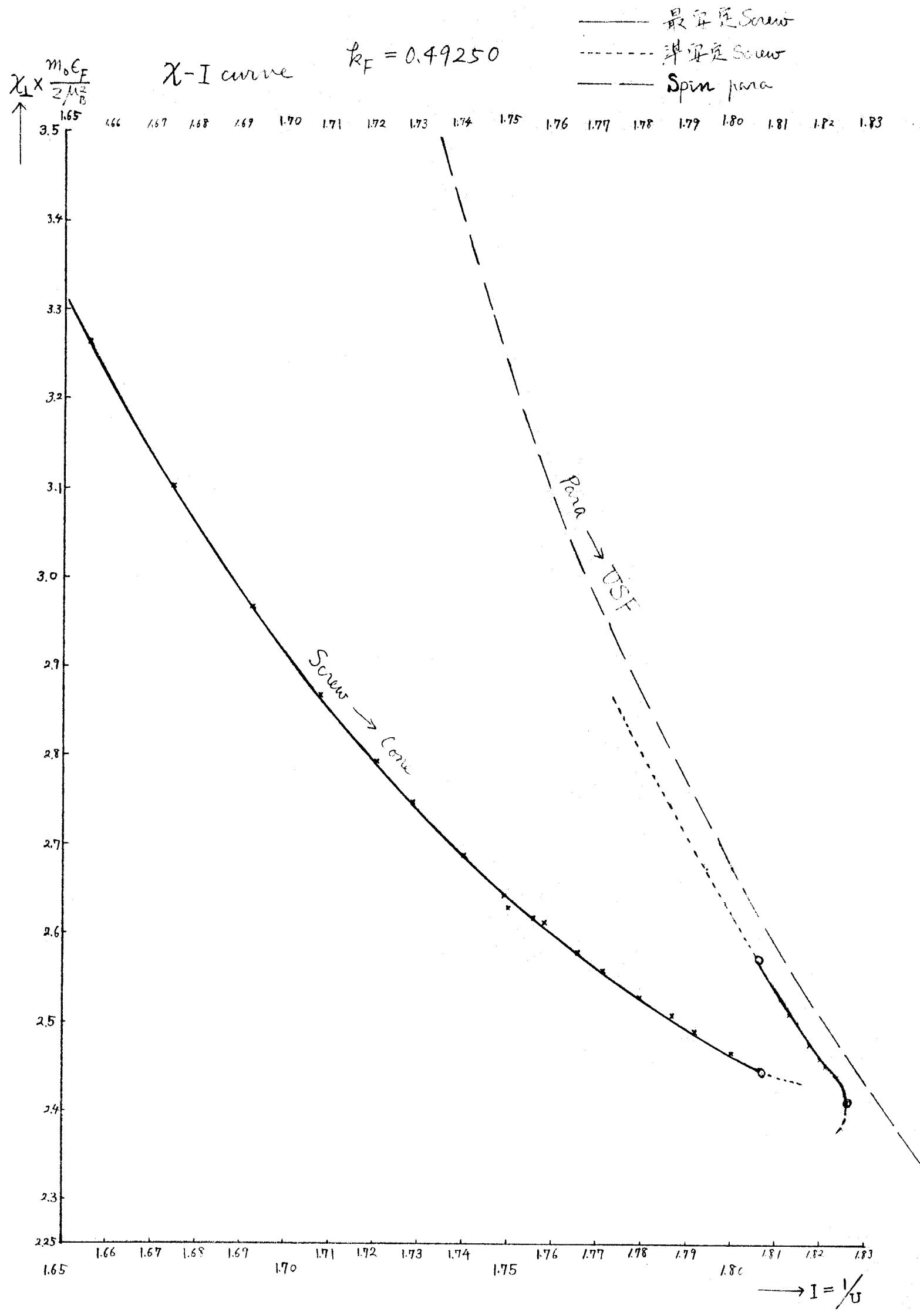


————— 最安定 Screw
 - - - - - 洋海庭 Screw
 ———— Spin para

χ -I curve

$$k_F = 0.49625$$

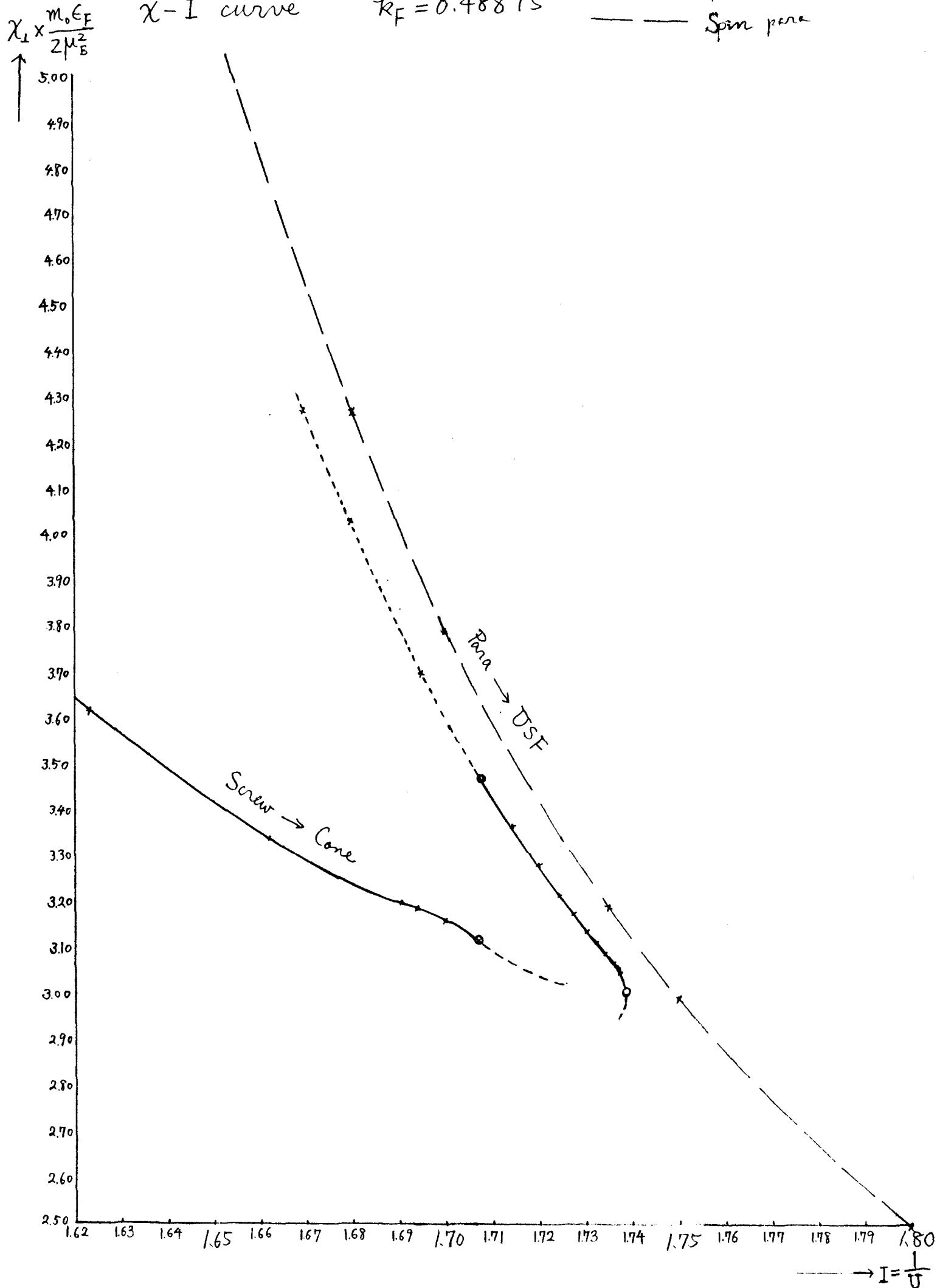




χ -I curve

$$k_F = 0.48875$$

最安定 Screw
準安定 Screw
Spin para



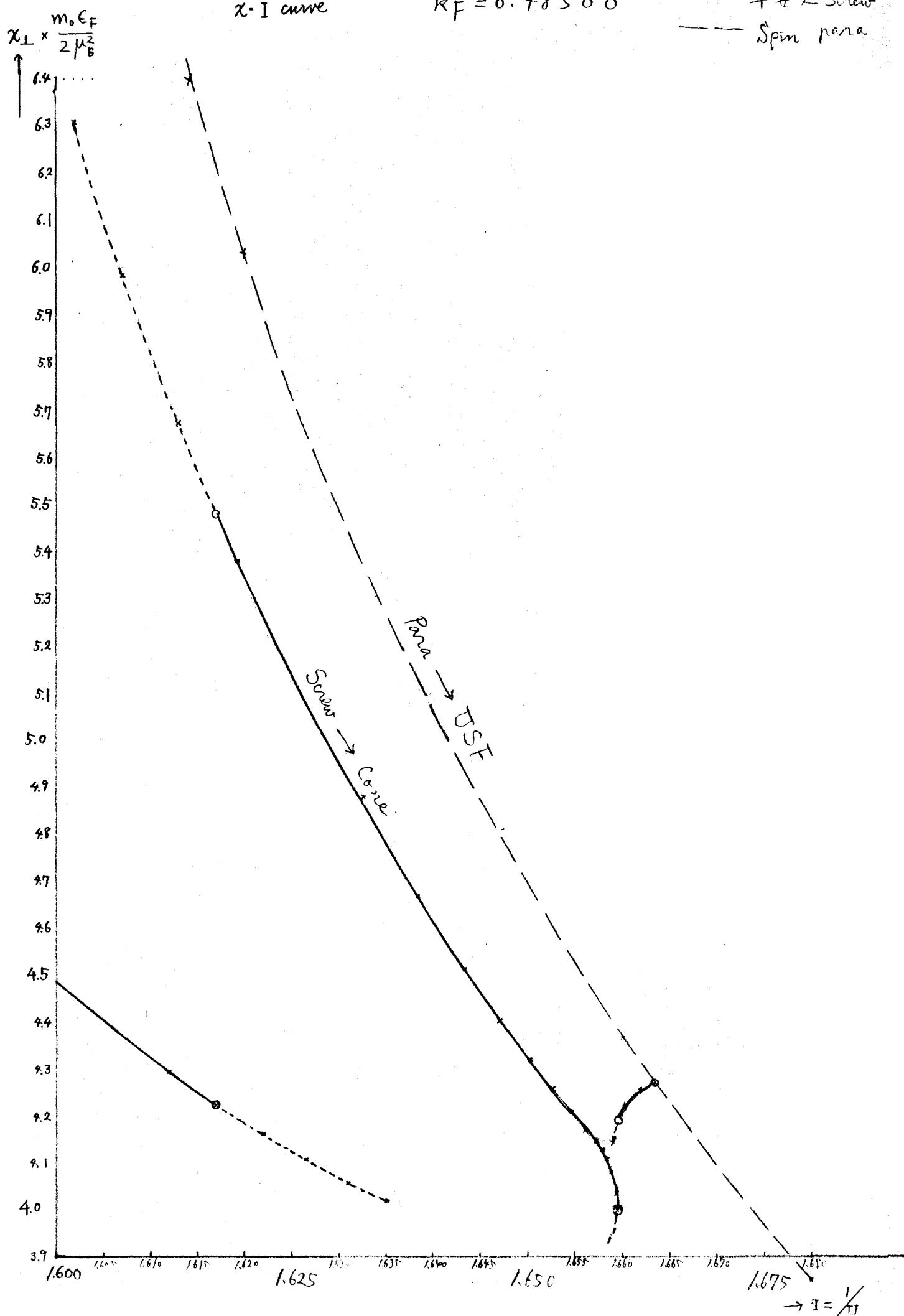
χ -I curve

$$k_F = 0.48500$$

最安定 Screw

準安定 Screw

Spin para



Chapter 4 Susceptibility Tensor

§ 1 平行帶磁率計算の繁雑さ

Chapter 3 まででは、外磁場を Screw の回転面に直角にかけたときの帶磁率 χ_{\perp} を計算した。これと同様な原理で平行帶磁率 χ_{\parallel} を計算するには、以下に説明するよろづ困難さ（と言ふより繁雑さ）がある。

外磁場を Screw の回転面にかけると、一体化 Hamiltonian として次のものを設定せねばならぬ。

$$\bar{\mathcal{H}}_1 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SDW} + \mu_B(H+M)\sigma_x \quad (4 \cdot 1)$$

\mathcal{H}_1 の行列要素を、 \mathcal{H}_0 の固有函数 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ を base としてあらわすと次のようになる。

$$\begin{array}{c|c|c|c|c} \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) \text{ の行} & \psi_{\vec{k}}^+ & \psi_{\vec{k}}^- & \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- \\ \hline (\epsilon(\vec{k}), \mu_B(H+M), g) & & & \end{array} \quad (4 \cdot 2)$$

$\psi_{\vec{q}}^-$ の行 $\psi_{\vec{q}-\vec{k}}$ $\psi_{\vec{q}}$ $\psi_{\vec{k}}$

(4.2)

 $(q, \mu_B(H+M), \epsilon(\vec{k})) .$

これから見てわかるように $\bar{\rho}_1$ の non-zero element は対角線に沿って無限に続いて現われる。そこで（外磁場を直角にかけた場合と異なり）Matrix の対角化を、有限次の小行列にだけ制限して考えることが必要ない。この困難さは、Chapter 1 で説明した sine 構造を解くことの困難さと同じ事情にある。

然し帶磁率を求めることが目標であれば外磁場 H は微小であると考えてよく、従つて (4.1) の第三項を揺動項とみて揺動計算をすれば充分であろう。この際、無揺動 Hamiltonian は $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SDW}$ であり、これについては Chapter 1 で既に解けてるので、これを基準にして $\mu_B(H+M)$ の影響を揺動として取り入れればよい。そのためには先ず $\bar{\rho}_1$ を (1.4) の $\psi_{\vec{q}}^{\pm}(\vec{r})$ ($= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SDW}$ の固有函数) を base として Matrix であらわす

う。すると $\psi_{\vec{R}}$ の行で \pm non-zero element は $\psi_{\vec{R}}^+$, $\psi_{\vec{R}-\vec{q}-\vec{K}}^+$, $\psi_{\vec{R}+\vec{q}+\vec{K}}^+$, $\psi_{\vec{R}}^-$, $\psi_{\vec{R}+\vec{q}+\vec{K}}^-$, $\psi_{\vec{R}+2\vec{q}+\vec{K}}^-$, の六つの列に現われる。 $\psi_{\vec{R}}$ の行についても同様である。され故に擾動計算によつて \vec{R} の固有函数 $\phi_{\vec{R}}^{\pm}(\vec{r})$ を求めることにしても、 $\phi_{\vec{R}}^{\pm}(\vec{r})$ は六個の $\psi_{\vec{R}}$ の一次結合となる。

この $\phi_{\vec{R}}^{\pm}(\vec{r})$ を一体波動函数として Slater 行列式を作り E_{total} を計算するわけだが、一体部分 $\langle \phi_{\vec{R}}^{\pm} | \hat{H}_0 + \mu_B H_0 | \phi_{\vec{R}}^{\pm} \rangle$ は $6^2 = 36$ 項の和に、二体部分 $\langle \phi_{\vec{R}}^{\pm}(1) \phi_{\vec{R}}^{\pm}(2) | \hat{H}_{\text{int}} | \phi_{\vec{R}}^{\pm}(1) \phi_{\vec{R}}^{\pm}(2) \rangle$ etc. は $6^4 = 1296$ 項の和に分れることがとなり、計算は垂直帶磁率の場合に比べて飛躍的に繁雑になる。このあと E_{total} を $\propto \equiv H + M$ について微分して最安定状態に対応する M をきめる方程式を導くわけだが、上記の事情を反映して、この方程式が又複雑なものとなる。

筆者はこれら計算を実行したが、結果は数式だけじ数ページにわたる程複雑となり充分整理されていないのでこゝには書かない。又その数値計算は実行していない。以下にはたゞ計算方針だけを記して行く。その際問題

の設定自身をも次々と述べるよう一般化していく。

§ 2 帯磁率テンソル

垂直帶磁率 χ_{\perp} や平行帶磁率 χ_{\parallel} を計算する際には、 H を
結晶主軸の方向にかけたら M もそれに平行に現われるも
のと仮定してつに。この仮定は多分正しいと思われるが
理論的には「仮定なし」で出发して、むしろ結論として尊さ
れることは望ましい。

仮定なしで一般的に論じるためには、帶磁率テンソル
の概念を用ひねばせらぬ。すなむち外磁場を $H \sim (H_1, H_2, H_3)$
単位質量あたりの磁化を $M \sim (M_1, M_2, M_3)$ として

$$\left. \frac{\partial M_i}{\partial H_j} \right|_{H=0} = \chi_{ij} \quad (4.3)$$

を考えるわけである。「垂直帶磁率 χ_{\perp} と平行帶磁率 χ_{\parallel} を
求めると」立場はあらかじめ $\chi_{ij} = 0$ for $i \neq j$, $\chi_{11} = \chi_{22} (= \chi_{\parallel})$,

$x_{33} = x_+$ と仮定していることにする。

さて一般に外磁場 $\vec{H} \sim (H_1, H_2, H_3)$ を SDW にかけたとき、一体化 Hamiltonian は次のようく設定される。

$$\bar{\mathcal{H}}_1 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SDW} - \mu_B \left\{ (H_1 + M_1) \sigma_x + (H_2 + M_2) \sigma_y + (H_3 + M_3) \sigma_z \right\} \quad (4 \cdot 4)$$

ただし $\vec{M} \sim (M_1, M_2, M_3)$ は E_{total} が最小になるように、後述で定めるべきベクトルである。

(4・4)において始めの二項を無摂動 Hamiltonian、残りの項を摂動項とみなし。 $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SDW}$ の固有函数は (1・4) の $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ で、固有値は (1・5) の $E^{\pm}(\vec{k})$ で与えられる。この $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ を base にして $\bar{\mathcal{H}}_1$ の Matrix element を計算すると次のようになる。(ただし $\alpha_i \equiv H_i + M_i$ とかく)。

$\psi_{\vec{k}}$ の行の Matrix element は

$$\langle \psi_{\vec{k}}^+ | \bar{\mathcal{H}}_1 | \psi_{\vec{k}}^+ \rangle = E^+(\vec{k}) - \mu_B \alpha_3 \frac{|x^+(\vec{k})|}{\sqrt{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2}}$$

$$\langle \psi_{\vec{k}}^+ | \bar{\mathcal{H}}_1 | \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{R}}^+ \rangle = - \cos \theta_{\vec{k}}^+ \sin \theta_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{R}}^+ \mu_B (\alpha_1 - i \alpha_2) \quad \} \quad (4 \cdot 5)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\vec{k}}^+ | \bar{\epsilon}_1 | \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ \rangle &= - \sin \theta_{\vec{k}}^+ \cos \theta_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ \mu_B (\alpha_1 + i \alpha_2) \\ \langle \psi_{\vec{k}}^+ | \bar{\epsilon}_1 | \psi_{\vec{k}}^- \rangle &= - \cos \theta_{\vec{k}}^+ \cos \theta_{\vec{k}}^- \mu_B (\alpha_1 - i \alpha_2) \end{aligned} \quad \left. \right\} (4.5)$$

$$\langle \psi_{\vec{k}}^+ | \bar{\epsilon}_1 | \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- \rangle = \mu_B \alpha_3 \frac{q \operatorname{sgn}(x_{(\vec{k})}^+)}{\sqrt{(x_{(\vec{k})}^+)^2 + q^2}}$$

$$\langle \psi_{\vec{k}}^+ | \bar{\epsilon}_1 | \psi_{\vec{k}+2\vec{q}+\vec{K}'}^- \rangle = - \sin \theta_{\vec{k}}^+ \sin \theta_{\vec{k}+2\vec{q}+\vec{K}'}^- \mu_B (\alpha_1 + i \alpha_2)$$

これ以外の列では 0

こゝに $\theta_{\vec{k}}^\pm$, $x_{(\vec{k})}^\pm$ はそれぞれ (1.4), (1.5) で与えられるものである。最後の行の Matrix element も (4.5) と類似の形であらわされるがこゝには書かない。

$\bar{\epsilon}_1$ の固有価は擾動計算によれば次のようになる。

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{k}}^+ &= \sqrt{1 - \sum_{i=1}^5 |a_{\vec{k}}^{(i)+}|^2} \psi_{\vec{k}}^+ + a_{\vec{k}}^{(1)+} \psi_{\vec{k}-\vec{q}+\vec{K}}^+ + a_{\vec{k}}^{(2)+} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ \\ &\quad + a_{\vec{k}}^{(3)+} \psi_{\vec{k}}^- + a_{\vec{k}}^{(4)+} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- + a_{\vec{k}}^{(5)+} \psi_{\vec{k}+2\vec{q}+\vec{K}'}^- \end{aligned} \quad (4.6)$$

係数は例えば

$$\alpha_{\vec{k}}^{(1)+} = \frac{\mu_B(\alpha_1 + i\alpha_2)}{E^+(\vec{k}-\vec{q}-\vec{k}) - E^+(\vec{k})} \cos \theta_{\vec{k}}^+ \sin \theta_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{k}}^+ \text{ etc. } (4 \cdot 7)$$

又、固有値は

$$E^+(\vec{k}) = E^+(\vec{k}) - \mu_B \alpha_3 \frac{|x^+(\vec{k})|}{\sqrt{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2}} \quad (4 \cdot 8)$$

$\phi_{\vec{k}}$, $E^-(\vec{k})$ も、類似の式であらわされる。

次に $\phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ を一體波動函数として、 $E^{\pm}(\vec{k})$ の小さ~順について行つて Slater 行列式を作り、これにつけて E_{total} を計算する。その結果は § 1 で説明したよろに非常に複雑となるので、もう具体的な教式はこれ以上書かず、以下では筋書きのみを述べよ。

E_{total} は複雑な式ではあるが、 H_1, H_2, H_3 及び M_1, M_2, M_3 の函数である。或いは H_1, H_2, H_3 及び $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ の函数であると言つてもよい。(g は [] で定めた値、すなわち外磁場が -1 と 1 の値に fix しておく)。

E_{total} を計算してそれを H_1, H_2, H_3 及び $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ の函数として具体的に式を書くことは、繁雑さをいとわなければ可能である。こゝでは具体的な式は書かず、たゞこれを

$$E_{\text{total}} = E_{\text{total}}(H_1, H_2, H_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \quad (4.9)$$

と書いておこう。

最安定状態を求めるには、(4.9) を又で微分して 0 とかくここにより定まる。すなまち条件；

$$\frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial \alpha_1} = \frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial \alpha_2} = \frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial \alpha_3} = 0 \quad (4.10)$$

により $H_1, H_2, H_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ のうち三個が消去出来るから、(4.10) を「 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ を H_1, H_2, H_3 の函数として定めろ方程式」とみなすこヒが出来る。その解を

$$\alpha_i = \alpha_i(H_1, H_2, H_3) \quad i=1, 2, 3 \quad (4.11)$$

とする。

ところび一方、単位質量あたりの磁化率は Chapter 1 § 2

まで見たように、total magnetization \vec{m}_{total} との間に

$$\vec{\mu} = \frac{1}{m_0 N} \vec{m}_{\text{total}} \quad (4.12)$$

の関係がある。従つて例えば x 成分 μ_x は

$$\mu_x = \frac{1}{m_0 N} \mu_B \left\{ \sum_{E^+(\vec{k}) < E_c} \langle \phi_{\vec{k}}^+ | \sigma_x | \phi_{\vec{k}}^+ \rangle + \sum_{E^-(\vec{k}) < E_c} \langle \phi_{\vec{k}}^- | \sigma_x | \phi_{\vec{k}}^- \rangle \right\} \quad (4.13)$$

と書かれる。

(4.13) にかけて $\phi_{\vec{k}}^\pm$ も $E(\vec{k})$ も又に depend して定まるから、中括弧の中には $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ の函数となり、これも繁雑な式にはなるが繁雑さをそりとあけければ具体的に $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ の式としてあらわすことが出来る。こゝでいたゞくこれを

$$\mu_i = \mu_i (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \quad i=1, 2, 3 \quad (4.14)$$

と書いておく。

さてこれだけの準備が出来ると帶磁率テソル χ_{ij} は次

のよろに計算される。

$$\chi_{ij} = \left. \frac{\partial M_i}{\partial H_j} \right|_{H=0} = \left(\sum_{l=1}^3 \frac{\partial M_i}{\partial d_l} \frac{\partial d_l}{\partial H_j} \right) \Big|_{d=0} \quad (4.15)$$

(4.11) は方程式 (4.10) の解だから、陰函数の微分公式により、

$$\frac{\partial d_l}{\partial H_j} = -\frac{1}{\Delta} \sum_{l'=1}^3 \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial H_j \partial d_{l'}} D_{ll'} \quad (4.16)$$

where

$$\Delta = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial d_1^2} & \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial d_1 \partial d_2} & \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial d_1 \partial d_3} \\ \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial d_2 \partial d_1} & \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial d_2^2} & \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial d_2 \partial d_3} \\ \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial d_3 \partial d_1} & \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial d_3 \partial d_2} & \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial d_3^2} \end{vmatrix} \quad (4.17)$$

$$D_{ll'} = \Delta \text{ の } (l, l') \text{ 要素の余因数} \quad (4.18)$$

例えば

$$D_{11} = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial x_2^2} & \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial x_2 \partial x_3} \\ \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial x_2 \partial x_3} & \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial x_3^2} \end{vmatrix} \quad (4.18)_{11}$$

である。

(4.16) を (4.15) に代入すると

$$\chi_{ij} = - \left(\frac{1}{\Delta} \sum_{l=1}^3 \sum_{l'=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_l} \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial H_j \partial x_l} D_{ll'} \right) \Big|_{\substack{x=0 \\ H=0}} \quad (4.19)$$

を得る。従つて (4.9) 及び (4.14) の函数形が具体的に求められれば、(4.19) によつて χ_{ij} が計算されるわけである。

ここで計算の筋書きは、先ず (4.9) 及び (4.14) の函数形を定め (4.17), (4.18) によつて Δ と $D_{ll'}$ を計算し、これらを (4.19) に代入すればよい。数值計算は (4.19) の右辺を具体的に数式としてあらわしてから後の段階のことになる。もつとも事情によつては行列式や微分の計算を数值的にやつてもよ

～) が、それにして (4.9) の $E_{total}(\vec{z}, \vec{H})$, (4.14) の $\bar{\mu}(\vec{z})$ の具体的な函数形の知識は必要である。

筆者の教式上の計算では (4.9) や (4.14) の函数形はきわめて複雑になり、それを少しでも簡単に整理することが出来ないのが、まだ数值計算の段階に達していなし。

Chapter 5 discussion

1° Part II の結果は、screw 構造に対する χ_{\perp} と spin 常磁性の χ との比較として Chap. 3 のグラフに示してある。I ~ χ_{\perp} curve に不連続があるのは、最安定 screw 構造自身が不連続的に変化するからである。(c.f. Nagamiya, Motizuki and Yamasaki^[3])

グラフを見ると不連続が起るたびに (U が増し I = 1% が減るときに) 常に χ_{\perp} をより低くするように jump している。従って「最安定 screw 構造は幾つかの energy 極小の状態のうち χ_{\perp} を最小にするものである」と言ふ主張が成り立つと言ひである。

2° 本論文では χ_{\parallel} の値は求めていづれから Montalvo and Marcus^[12] の実験と比較することは出来ない。

又計算はすべて絶対零度のものであるが、有限温度でも χ ~ I curve の特徴は大体保たれるものと予想すれば、本

論文の結果から χ は結晶及び Neel 点を過ぎて para から SDW

に移るとき、 $k_F \geq 0.5$ の時は χ は連続的に減少するが、 $k_F < 0.5$

ならば χ は不連続的に減少すると考えられる。これは、

Neel 点での転移が $k_F \geq 0.5$ の時は二次じあるが $k_F < 0.5$ の時は一
次のもじあることに対応する。 $k_F < 0.5$ で一次に移ること

は理論的には Nagamiya, Motizuki and Yamazaki^[4] 及び Mitsudo, Motizuki and Nagamiya^[5] に
よつて示されてい。

ところが帶磁率^[9]を始め比熱、や弾性係数の実験では T_N で
の転移は一次らしくない。例えば、Collings, Hedges and Siddiqi^[9] の帶
磁率の温度変化の測定では T_N のところに局所的な peak は

あるが不連続はみられない。この実験では χ の異方性は
考えられておらず方向に関するして平均的な χ の測定のみが

なされているから、 T_N での転移の様子をもつと詳しく解
析するためには T_N 以下で χ_{\perp} と χ_{\parallel} の温度変化を別々に測る
ことが望ましい。

又理論の方では SDW に外磁場の他に温度効果も入れ

て計算し、SDW の帶磁率の温度変化を出しておくこと
が望ましい。(然し現在は絶対零度での χ_{\parallel} さえ値を出して
いなければ筆者には手に手には手をつげられない。)

[45] Para の方のスパン帶磁率の温度変化の計算は Shimizu et al.
によつて行なわれてゐる。彼等の場合には Tachiki and Nagamiya^[3] のよ
うに自由電子様工不ルギースペクトルの仮定をかかず、
現実の Cr の state density (此處の実験結果から推定したもの)
を用いて計算してゐる。然し交換効果 (Tachiki, Nagamiya のモデ
ルでの U の影響) は考えに入れていない。T&N のモデル
で Para の帶磁率の温度変化を計算することは SDW の帶
磁率の温度変化よりはずつと簡単なる筈だから、これを実
行して Shimizu et al. の結果と比較するのは興味があるだろう。¹²

^[3] Montalvo and Marcus の実験と比較するためには χ_{\parallel} を計算す
れば十分である。Part II 94 で考えたように帶磁率 tensor の
計算にまで一般化したのは主に理論的興味による。結晶
の対稱性により、帶磁率 tensor の主軸方向は多分結晶主軸

の方向と一致しているものと予期されるが、これを仮定するところなく、むしろ計算の結論としないわけである。

もちろん帶磁率 tensor χ_{ij} の計算の方が一戸複雑にならぬ χ_{ii} を計算するに至りても簡単に手に負えぬ程複雑なので、どうせ複雑になりついでに理論的正確さを期したのである。もし今後の考察で χ_{ii} だけを比較的簡単に計算出来る方法が見つかつたならば、 χ_{ij} の計算にこだわるものではない。

4. χ_{ij} の計算の複雑さは整理の仕方によつてどの程度まで避けられるものかまだよくみえぬ。我々はたゞむしゃらに数値計算に移すと言ふ面にけてなく、formulation の仕方によつて計算式自体を簡単にすることも考え、これら両面から攻めてみたり。

今思いつくのは「結晶の対称性を取り入れて計算式が簡単にならぬか」、「計算結果を具体的に出さなくて最もかるようすに簡単な relation (例えば total moment M_{total} と, E_{total} を最

小に す る よ う な み の 値 と の 間 の 簡 単 な relation) は な い た
と 言 う こ と 位 で、 な つ き り し た 成 果 は な い。

な か 計 算 式 を 最 終 段 階 ま で な さ ず に、 最 初 か ら 数 値 計
算 に 移 し て し ま う の も 一 方 法 で あ ろ う が、 この 場 合 数 値
計 算 の 規 模 は 膨 大 な も り に な る。 例 え ば E_{total} を 最 小 に す
る よ う な み の 値 を き め る の に も、 α を parameter と し て E_{total}
を 計 算 し て そ の 結 果 を 比 較 し て α を き め る と い う 方 法 を と
る が ら、 そ の α の 値 が 数 式 と し て 与 え ら れ て い る 場 合 に
比 べ て 数 値 計 算 の 労 は 遠 も に 大 き く な る。 又 空 積 び の
積 分 を 数 値 的 に 行 な う と し た ら、 こ れ は 三 重 積 分 な り で
計 算 の 精 度 を 保 つ た め に は 隨 分 膨 大 な 計 算 を 要 し、 本 論
文 で や つ た よ う に 不 定 積 分 を 数 式 と し て 求 め て お き た ら
代 入 す る た め に て 定 積 分 の 値 を 求 め る の と は、 そ の 労 は 比
較 に な う な い。(本 論 文 の よ う に 不 定 積 分 を 数 式 上 で 求 め
て お い て さ え、 parameters を い ろ い ろ 取 り 又 之 て 何 度 も 計 算
す る の で 全 計 算 の 規 模 は 電 子 計 算 機 を 使 う 程 で あ つ た。)

Acknowledgment

終りにこの研究に興味を持つて勵まして下さり、いろ
いろ討論していただけた永宮教授に深く感謝致します。

References

- [1] L.M. Corliss, J.M. Hastings and R.J. Weiss ; Phys. Rev. Letters 3 (1959) 211
- [2] M.K. Wilkinson, E.O. Wollan, W.C. Koehler and J.W. Cable ; Phys. Rev. 127 (1962) 2080
- [3] M. Tachiki and T. Nagamiya ; Phys. Letters 3 (1963) 214
- [4] T. Nagamiya, K. Motizuki and K. Yamasaki ; Proceedings of the International Conference on Magnetism, Nottingham Sept. 1964 [Published in association with Proc. Phys. Soc. (London)] (1965) 195
- [5] R. Mitsudo, K. Motizuki and T. Nagamiya ; J. Phys. Soc. Japan 20 (1965) 710
- [6] A.W. Overhauser ; Phys. Rev. 128 (1962) 437
- [7] W.M. Lomer ; Proc. International Conference on Magnetism, Nottingham, Sept. 1964 (1965) 127
- [8] C.G. Shull and M.K. Wilkinson ; Rev. Modern Phys. 25 (1953) 100
- [9] E.W. Collings, F.T. Hedgecock and A. Siddiqi ; Phil. Mag. 6 (1961) 155
- [10] R.H. Beaumont, H. Chihara and J.A. Morrison ; Phil. Mag. 5 (1960) 188
- [11] H. Pursey ; J. Inst. Met. 8 (1958) 362
- [12] D.J. Bolef and J. de Klerk ; Phys. Rev. 129 (1963) 1063

- | | | 5 | 10 | 15 | 20 | 25 |
|------|--|---|----|---|----|----|
| [13] | R.A. Montalvo and J.A. Marcus ; Phys. Letters <u>8</u> (1964) 151 | | | | | |
| [14] | B.C. Munday, A.R. Pepper and R. Street ; Proc. International Conference on Magnetism, Nottingham, Sept. 1964 (1965) 201 | | | | | |
| [15] | V.N. Bykov, V.S. Golovkin, V.Ageev, V.A. Levdk and S.I. Vinogradov ; Dokl. Akad. Nauk SSSR, <u>128</u> (1959) 1153 | | | | | |
| [16] | G.E. Bacon ; Acta Cryst. <u>14</u> (1961) 823 | | | [Soviet Phys. Doklady <u>4</u> (1960) 1070] | | |
| [17] | G. Shirane and W.J. Takei ; J. Phys. Soc. Japan <u>17</u> Suppl. B-III (1962) 35 | | | | | |
| [18] | V.I. Goman'kor, D.F. Litvin, A.A. Loshmanov and B.G. Lyashchenko ; Kristallografiya <u>7</u> (1962) 790 [Soviet Phys. Crystallography <u>7</u> (1963) 639] | | | | | |
| [19] | R.J. Brown, C. Wilkinson, J.B. Foryth and R. Nathans ; Proc. Phys. Soc. (London) <u>85</u> (1965) 1185 | | | | | |
| [20] | T.A. Kaplan ; Phys. Rev. <u>116</u> (1959) 888 | | | | | |
| [21] | B.R. Cooper ; Phys. Rev. <u>118</u> (1959) 135 | | | | | |
| [22] | H. Bjerrum Møller, K. Blinowski, A.R. Mackintosh and T. Brun ; Solid State Communications <u>2</u> (1964) 109 | | | | | |
| [23] | A. Yoshimori ; J. Phys. Soc. Japan <u>14</u> (1959) 807 | | | | | |
| [24] | A.W. Overhauser ; Phys. Rev. Letters <u>3</u> (1959) 414 | | | | | |
| [25] | A.W. Overhauser ; Phys. Rev. Letters <u>4</u> (1960) 462 | | | | | |
| [26] | A. Yoshimori ; Phys. Rev. <u>124</u> (1961) 326 | | | | | |
| [27] | F. Iwamoto and K. Sawada ; Phys. Rev. <u>126</u> (1962) 887 | | | | | |
| [28] | K. Yosida ; Progr. Theor. Phys. <u>28</u> (1962) 759 | | | | | |

- [29] M. Ardente and J. Friedel ; Phys. Rev. 124 (1961) 384
- [30] M. Ardente ; Phys. Rev. 127 (1962) 1949
- [31] W. M. Lomer ; Proc. Phys. Soc. (London) 80 (1962) 489
- [32] J. H. Wood ; - Phys. Rev. 126 (1962) 517
- [33] W. M. Lomer ; Proc. Phys. Soc. (London) 84 (1964) 327
- [34] W. M. Lomer ; Proc. International Conference on Magnetism, Nottingham, Sept. 1964 (1965) 127
- [35] T. L. Loucks ; Phys. Rev. 139 (1965) A 1181
- [36] A. W. Overhauser & A. Arrott ; Phys. Rev. Letters 4 (1960) 226
- [37] W. M. Lomer and J.A. Marcus ; Proc. International Conference on Magnetism, Nottingham, Sept. 1964 (1965) 208
- [38] B.R. Watts ; Phys. Letters 10 (1964) 275
- [39] A. Arrott, S.A. Werner and H. Kendrick ; Phys. Rev. Letters 14 (1965) 1022
- [40] H. Bjerrum Møller, K. Blinowski, A.R. Mackintosh, T. Brun and P. Nielsen ; Proc. International Conf. Magnetism, Nottingham, Sept. 1964 (1965) 101
- [41] J. Kanamori ; Progr. Theor. Phys. 30 (1963) 275
- [42] S. Komura and N. Kunimori ; J. Phys. Soc. Japan 20 (1965) 103
- [43] 志水正男 ; 物性研究 1 (1965) 360
- [44] 例) 三木・高木貞治 ; 解析概論 p.342
- [45] M. Shimizu, T. Takahashi and A. Katsuki ; J. Phys. Soc. Japan 17 (1962) 1740