



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

Spin Density Wave の研究

山崎京子

目次

要旨

1

Introduction

3

§1 問題の所在と我々の立場

3

§2 Cr の S D W の研究

6

§3 S D W の理論的研究

17

§4 Field cooling の実験

18

§5 本論文の目的と内容

24

Part I S D W 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 無限小振りの spin density wave

44

	5	10	15	20	25
§5	$\overline{\mathcal{H}}_1$ の行列要素				52
§6	$\overline{\mathcal{H}}_1$ の固有函数				54
§7	E_{total} の計算				56
§8	U の critical value の決定				62
Chapter 1 の付表					66
Chapter 2 Method of computation					73
§1	パラメータの検討				73
§2	(1.16) の解き方				77
§3	$(1/U_{crit}) = I_{crit}$ の計算				78
§4	$J^{(4)}$ の計算				84
§5	パラメータの範囲				89
Chapter 3 Results					93
説明文					93
第1図 (q に対する I_{crit} のグラフ)					95
第1表 (α, I_{crit}, q_0, H の表)					101
第2表 (同上)					107

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 S D W 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 S D W の帯磁率

141

Chapter 1 Formulation of the theory

141

§ 1 有限振中の S D W

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

5 10 15 20 25
 $\chi_{\perp}$ の グ ラ フ

160

Chapter 4 Susceptibility tensor

166

§1 平行帯磁率計算の複雑さ

166

§2 帯磁率テンソル

169

Chapter 5 Discussion

178

References

184

要旨

この論文は Introduction と Part I, Part II よりなる。

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

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ってゐる。(立木-永宮, 永宮-望月-山崎)。これに外磁場をかける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 におい

て 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 の区別はつかない) であり, H が小さい時は k 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 S D W の帯磁率

S D W 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帯磁率 (垂直帯磁率) を求め, 常磁性のスピンの帯磁率と比較した。平行帯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* をなしていることが実験的に知られている。([1], [2] 他)

そこでこの *spin density wave* (=以後 S D W 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。S D W 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る。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 Néel 温度その他が求められている。本論文では更に S D W 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、これらにおいては[3],[4]のように詳しい計算がなされているわけではない。我々が S D W の理論的研究を行なうにあたっては次のような立場を取っている。

即ち、「モデルは（現実に対して）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り数学的に正確に解き、半定性的な評論や推測だけに頼らない」と言うことである。この立場では、例えば Wannier 函数の *well-localized* の仮定、自由電子様エネルギースペクトルの仮定などの単純化を行なっても、S D W の安定性を結論するためだけに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でもない。人はこのような立場を勞の割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いて次のように思う。

確かに Cr の磁氣的性質の説明だけなら、もつと rough な
 discussion で片がつくかも知れない。然し S D W 構造と言
 うのはもつと普遍的なものではないだろうか？ 先には、
 稀土類金属に対して局在電子による screw 構造が [] [] 次
 に Cr において伝導電子による同様の S D W が発見された。
 [このよりの周期的構造はこれら以外にもあるかも知
 れない。それは単に「S D W を示す物質が現実には Cr 以外
 にあるかどうか」と言うことではなく、S D W 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すること
 である。それ故に、例え多くの物質で S D W が見られな
 くとも、Ferro とか Para, Antiferro と並べて S D W 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 S D
 W は起らない」と結論すべきである。
 このよりの理由で S D W について理論的計算をしっかりと
 やつておくことは意味があると思う。単なる 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とも、種々な考察の際の data となり得るであろう。

従って我々の立場は *formal theory* と現象理論との中間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析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 § 5 にあかし、先ずその前に Cr についての実験及び S D W の研究についての簡単な review をしてみよう。

§ 2 Cr の S D W 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った

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は、巨視的な現象論か、簡単なモデル(自由電子ガスとかスピン格子のよ

うな)に基づいて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。

1953年にShullとWilkinson^[8]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。すなわちCrやMnでは各atomのまわりにatomic momentが存在してそれらが規則的に配列してゐるが、結晶全体としてはcancelして巨視的なmomentが現われないうわけである。

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 Néel 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 について行なわれ $T_N \sim 475^\circ\text{K}$ を得た。後に Corlis, Hastings & Weiss^[1] が Cr の単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, 例えば帯磁率^[9] 比熱^[10], 弾性係数^{[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。

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

次に S D W の発見については、矢張 Corlis, Hastings & Weiss^[1] や Bykov et. al.^[15] 及び Bacon^[16] による。彼等は中性子線回折の satellite の現われ方から、Cr の反強磁性は + スピンと - スピンが

交互に現われるような単純なものではなく、*long range* の周期性をもつてゐることを知った。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って 150°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。^[1] しゝし 1962 年には、Shirane-Takei^[17] による中性子線回折の更に精密な実験によつて一応の結論が得られた。それによるとスピノン配列は $T < T_{sf}$ では *longitudinal sine wave*, $T_{sf} < T < T_N$ では *transverse wave* (*screw or sine*) をなすと結論された。更に T_{sf} で不連続が観測されぬことゝみたら $T > T_{sf}$ でも *transverse sine* であろうと推測された。

然し、これとは別に Gomonkov, Litvin, Loshmanov & 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、はっきりきまらなかつたが、い

ずれにしても *antiphase domain* の可能性は捨て去られた。最近
 になつて Brown, Wilkinson, Forsyth & Nathans^[19] は *polarized neutron* を使って回折実験
 を行ない、 $T > T_{sf}$ で *transverse sine* であると結論してゐる。

この他に重要な発見として、Wilkinson, Wollan, Koehler, & Cable^[2] の結果
 がある。それらでは Cr のスピンの配列も、*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
 ンの周期的配列^[20,21] と考えられて来た。然し Wilkinson 等の 510°K
 706°K にかける実験結果で、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
 であることがわかった。後に Möller et al.^[22] 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* は観測されてゐないので、[2] の実験と
 矛盾するものではない。又 Beaumont, Chihara 等^[10] による T_N で比熱の
jump が小さいという結果 (*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
 のではなく)、序々に *moment* が発生するを示す。又低温領域

で Cr が *sinusoidal structure* を示し絶対零度迄続くものも、局在
スピンの *model* は許されなかつた。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のみならず、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
うな *spin density wave* の理論が始まり、S D W の機構が *band* 構
造と密接な関係を持つるになった。

§ 3 S D W の理論的研究

Cr に対してスピ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ンの周期的配列が問題にされていった。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といふモデルが立てられ、*screw structure* の安定性が理論的に導かれた。^[23,20]

従って、Cr に対してもこのモデルを適用する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ゐると考えて差支えな

い、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跳びまわる。この事情の違いのため、稀土類の結果をそのまゝ Cr に持ってきてみるのに疑問があるわけである。

Wilkinson, Wollan, Koehler & Cable^{[2][10][17]} の実験で両者の事情の違いは決定的となり、Cr のスピンの周期的構造を説明するためには、伝導電子 (d 電子) の集団に自発的に "atomic moment" が誘起され、それが周期的に並ぶような機構即ち S D W を考えねばならなくなつた。

これより先、Overhauser^[24,25] の S D W の理論が出版されてゐた。それは、「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 よりも S D W の方が安定になる。」と云う内容であつた。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、自由電子の集団に対して δ -函数型相互作用の代わりに 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 Swamoto-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、下限とも定まつた中間的な値）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 から跳び出るのは 4s 電子であり、磁気の担手たる 3d 電子は 4s より内の軌道にあつて結晶内を跳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な density をもち、その中間で稀薄な分布となるであらう。このように density 分布が well localized であるとき、交換相互作用も short range (=接近したときのみ作用し合う) になるであらう。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 δ 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ゐることになる。

Overhauser^[6]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そ観測されようと思われ、彼自身
 その期待した如く現在までアルカリ金属で SDW は見出され
 ない。

以上では格子の周期性の影響は考慮に入れずに計算して
 いる。これを考慮に入れるためには momentum space (= $\vec{k}$ 空間)
 で $\vec{k}$ と $\vec{k} + \vec{K}$ ($\vec{K}$ 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
 $\vec{k}$ の電子と $\vec{k} + \vec{q}$ の電子の間だけでなく、 $\vec{k}$ 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効かねばならぬ。
 別の言い方をすれば、 $\vec{k}$ 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
 出たら $\vec{K}$ によつて第一 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、Yasuda^[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 函数型の相互作用であつても (intra-atomic coulomb integral U 及び Fermi 半空 k_F が適当であると) S D W が安定になることがわかつた。これは現実の Cr の S D W 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 S D W の amplitude q と wave vector $\vec{q}$ を self-consistent に求める方程式の取扱ひに於て [3], [4] は異なる。即ち [3] では $q=0$ の場合 para に無限小振中の S D W が加わつた場合の local stability を摂動計算によつて論じたのに対し、[4] では有限振中の screw 型 S D W 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 と sine の比較はしてゐない) を U と k_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 としても Fermi 面は球である場合を考えた。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]によっ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、又こ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」という状況はほぼ満たされている。

Lomer^[31]は3dの他に4sを考慮したときの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^[33,34]はこれを用いて更にCrのFermi面を求めた。それによると完全につまったbandや空のbandもあるが、それどもFermi面は三つのbandにまたがっている。このうち一つのbandでの電子のFermi面は他のbandでのholeのFermi面とほぼ合同であり、LomerはこのことがSDWを安定にするためのkey pointであると考えている。

後に Loucks^[35] は 詳 しい band 計 算 (augmented plane wave の 方 法 に よ
る) を 行 っ て 、 45 まで 算 出 した とき の Fermi 面 を 出 した 。
結 果 は Lomer の 予 想 と 多 少 食 い 違 っ た が 、 「 一 つ の band で
の 電 子 の Fermi 面 は 他 の band で の hole の Fermi 面 と ほ ぼ 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 う よ う な two bands の 縮 退 の 影 響 は 入 っ て い な
い 。 (Tachiki & Nagamiya に は two bands の 場 合 が 論 じ ら れ て い る が 、
具 体 的 な 計 算 は な く formal theory に 止 ま っ て い る 。) Lomer や
Loucks の 求 め た よ う な “ ひ と び 形 ” の Fermi 面 で は 複 雑 な り づ
る に し て も 、 こ れ を 球 で お き ぬ ぎ 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 な 球 と な
っ て い る 」 と い う モ デ ル に 立 っ て S D W の 安 定 性 を 具 体
的 な 計 算 に よ っ て 検 討 す る こ と は 意 味 が あ る で あ ろ 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なるから磁気構造をで考へ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 に起つてゐたのでは、巨視的に見ると全体として立方対称性が出て来るようになる。

そこで SDW による対称性の低下を見るためには、先ず磁区ごとに異なる伝播方向を一方向に揃へ取らなければならぬ。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、磁場をかけたまゝ温度を下げて行き Neel 温度以下になつたところで外磁場を取るのである。こうすると Neel 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へられるが、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
すればおそらく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SDW構造がまだ実験的に確認されない以前に、
既にOverhauser & Airott^[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わちantiphase domain, 局在フェーズ
トのscrew構造, 伝導電子によるSDW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、SDW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っ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を行ない中性子線回折の実験を行なったが、Fieldの
影響は観測されなかった。この否定的結果は恐らく磁場
が弱すぎたため、実際後に成功した実験例では50 kG程

度の外磁場が使われてゐる。

Field coolingによる結晶の対称性の低下は、1964年になつて
 肯定的結果が出はじめた。先ず^[13] Montalvo & Marcusの実験では、
 Crの単結晶の主軸の一つ（例えばX軸）に沿つて磁場 H_c
 をかけてField coolingを行つた後、別の一樣磁場をひけて結
 晶に力らくtorqueを観測した。その結果cooling fieldの方向を
 含む面（例えばxy面）内で考へて、 $H_c=0$ 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がつけ加はるこゝがわかつた。この事
 実の説明はMontalvo & Marcusの論文には論じられてゐないが、torque
 の異方性を帯磁率の異方性から来るものとして次の結果
 を得た。

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

後にLomer & Marcus^[14]はこの結果が $T > T_{sf}$ で、transverse sine と screw のろ
 うどちらのモデルと合ふかを検討し、sineらしいと結論

してゐる。

Watts^[38] は Field cooling を行なった後、de Haas-van Alphen 効果を観測し $T < T_{sf}$ のとき結晶は $\vec{H}_c$ の方向を四回軸と有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いことを意味し、Watts は $\vec{q} \parallel \vec{H}_c$ と結論した。($\vec{q}$ は SDW の wave vector)。更に「温度を上げてても $\vec{q}$ の方向は変らぬだろう」との推測のもとに Watts は $T > T_{sf}$ でも $\vec{q} \parallel \vec{H}_c$ と考え、又正方対称性の要求に合うように transverse screw を予想してゐる。なお $H \sim 100$ kG (Field cooling ではないので添字 c を取った) 位の強い磁場をかけたら、で観測すると $T < T_{sf}$ で $\vec{q}$ は 90° 回転し $\vec{q} \perp \vec{H}$ となることを発見した。中性子線回折で $\vec{q}$ と $\vec{\sigma}$ (スピンベクトル) の向きの関係はわかってゐるので、これと合わせて上の結果は次のようにまとめられる。

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

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

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

なつて行なわれるようになつた。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
中性子回折を行ない $\vec{H}_c$ と $\vec{\sigma}$ との関係を出来るように試みた。
彼等の実験結果の解析からは $T > T_{sf}$ で S D W は transverse sine で
あることが結論され、spin polarization の方向は $\vec{\sigma} \perp \vec{H}_c$ 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
いるのだが、 $\vec{q}$ は $\vec{H}_c$ の方向に殆んど必ず常に円柱の軸
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 $\vec{\sigma} \perp \vec{H}_c$, $\vec{\sigma} \perp \vec{q}$ の条件からは $\vec{\sigma}$ の方向は定まらず、
Nathans et al. の条件「 $\vec{\sigma} \perp \vec{H}_c$ 」は spin polarization の方向を定める役に
立たぬことは注意を要する。

これらの結果をつき合わせてみると

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

は正しいうちである。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 & Brunn^[40]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いるが、Field coolingを全然し
なくとも立方対称性は破れていると言う。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
るのび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に感じるのびであろう」と考えている。

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, Wellan, Koehler & Cable^[2]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よう。

§ 5 本論文の目的と内容

本論文の目的は S D W に磁場が加わったときの挙動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それ以後の計算は出来るだけ数学的に正確に行なうことを目標とする。

S D W の起る機構のモデルとしては Tachiki & Nagamiya^[3] のものを採る。 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ことを本論文の課題とした。もっと具体的に は 次の四つの点の研究目標である。

(1) 外磁場がある場合、S D W 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 構造のいずれが安定であるかを決

めること

(3) 外磁場をかけたとき、スポンベクトル $\vec{\sigma}$ と外磁場 $\vec{H}$ の向きの関係を定めること。

(4) screw 構造にかける帯磁率の異方性を求めること。

これらの各々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な *unsaturated ferro* の状態を先が求めておき、これに無限小振中の *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* を問題にしてゐることになる。

我々は外磁場 H 及び *Wannier* 函数の *intraatomic coulomb integral* U を *parameters* とみて、*unsaturated ferro* が *locally unstable* となつて無限小 *SDW* を加えた方がエネルギーが下るような (H, U) の組の範囲を求めた。得られた結果を、横軸 U 、縦軸 H のグラフに図示すれば、*SDW* 出現 (or 消滅) のための *phase diagram* とみ分けられる。(cf. Part I. chapter 3) この *phase diagram* は k_F (=Fermi 球の半径) の値をきめるご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、外磁場がない
ときの (k_F, U) を parameter とする phase diagram が得られる。これに
は S D W の他に Ferro, U S F, Para 等の磁気構造の安定領域
も書き加えることが出来るし、実際 Part I 第4章末にはそ
のよりの phase diagram が描いてある。

(2) についての説明は次の如くである。S D W のうち、

screw 構造 について は 既に Nagamiya, Matizuki & Yamazaki 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 小く なる。 それ故 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 には
 駄目 だ、 (sine は exact に 解けぬから) もっと 別の 近似法 を
 考へ 出さねば ならぬ。 ころ いう 困難な 状況を 打解する
 ために 外磁場 H を 入れた 場合 を 考察 し $H \rightarrow 0$ の 極限 を 考へ
 るのは 一つの 有効な 方法 であらう。 $H > 0$ であると 攝動 計
 算の 範囲 でも screw と sine の 差 は 現われる と 考へられるか
 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 考へる 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 いる。 結果は η 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 が出
 来なかつた。 だから、この ような 安易な 方法 には 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がわかった。

(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 $\vec{H}$ と直角な場合、平行な場合をそれぞれ考え、それらの安定性を比較する。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] の実験結果とほぼ一致している。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 構造だけしか exact に解けていないので、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帯磁率 (= 垂直帯磁率 $\chi_{\perp}$) と、回転面に平行に磁場をかけた

ときの帯磁率 (= 平行帯磁率 $\chi_{\parallel}$) をそれぞれ計算して比較
 するのが目標であつた。ところが $\chi_{\perp}$ は比較的求めやすい
 が、 $\chi_{\parallel}$ を求めるに要する計算は非常に複雑となるので、
 本論文では $\chi_{\parallel}$ については一般式を出したただけで数値計算
 を行なつておらず、従つてその値を $\chi_{\perp}$ と比べることも出
 来ていない。なお χ の異方性をもつと一般に論ずるには
 帯磁率 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ずべく準備してゐる。(c.f. Part II Chapter 4)。我
 々は $\chi_{\perp}$ の値しか求めていないのでこの計算結果を Montalvo &
 Marcus^[1] の実験結果と比較することは出来ない。然し $\chi_{\perp}$ を spin
 常磁性の χ と比較することにより幾つもの information は得
 られるであらう。(c.f. Part II Chapter 5)

本論文は二つの Part から成る。いずれも S D W に磁場を
 かけた場合を考えるのであるが、Part I では磁場を無摂動
 Hamiltonian の中に含めて S D W を摂動項とみた取り扱ひ、又
 Part II では逆に S D W を無摂動 Hamiltonian の中に含めて磁場を

攝動項とみた取り扱ひが述べてある。

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) の帯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
てみる。このときの Hamiltonian は

$$\text{一 体 の 部 分} \quad \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 + \mu_B H \sigma_z \quad (1.1)_1$$

$$\text{二 体 の 部 分} \quad \mathcal{H}_{int} = e^2 / |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \quad (1.1)_{int}$$

ただし、外磁場 H は z 軸の正の方向にかけるものとする。

又 $\mathcal{H}_0$ は運動エネルギー + 結晶場のポテンシアルである。

電子系の状態が一体波動関数の 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
るような 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 $\mathcal{H}_0$ の固有函数とは限らな $\mathcal{H}_0$ 。然しながらこの効果を無視して先ず次のような問題を設定する。

一体波動函数はすべて $\mathcal{H}_0$ の固有函数とし、たゞスピンの電子数と一スピンの電子数とは異なつてお $\mathcal{H}_0$ と $\mathcal{H}_0$ する ($n_+ \leq n_-$)。このようなSlater行列式のみを考 $\mathcal{H}_0$ て、その範囲内での E_{total} の最小を先ず求めてみよう。(§2)

$\mathcal{H}_{int}$ 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。又交換積分が小さくと $H = 0$ のとき $n_+ = n_-$ となり、 $H \neq 0$ 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には $H = 0$ で $0 < n_- - n_+ < n$ となる。このような状態はUnsaturated Ferromagnetism (=USF)と呼ばれる。§2では適当な一体化Hamiltonian $\mathcal{H}_1$ を設定することにより、これらのことを導く。

本論文ではCr等の3d電子を対象としてお $\mathcal{H}_0$ るの $\mathcal{H}_0$ で、結晶

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、

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

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

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

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

とあらわされる。

此 $y_{\vec{R}} = \epsilon(\vec{R}) y_{\vec{R}}$ であるが、固有値 $\epsilon(\vec{R})$ 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)

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

すなわち、電子質量 m の代りに有効質量 m^* ばかりかえる以外、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つと言ふ意味ではなく次のような意味である。

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) は少なくとも $\vec{k} \approx 0$ では良い近似である。よって仮定 (1.4) の本質的な部分は $|\vec{k}|$ が大きくなつてもなお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 U S F の決定

前 § で説明したように $n_- \geq n_+$ と考えたのであるが、
そのために一体化 Hamiltonian;

$$\overline{H}_1 = H_0 + \mu_B (H + M) \sigma_z \quad (1.5)$$

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

$E^\pm(\vec{k}) \leq E_c$ をみたすような範囲の $\vec{k}$ がつまったものとする。
 $k_c^2 = 2m^* E_c / \hbar^2$, $\tilde{\mu}_B = 2m^* \mu_B / \hbar^2$ とおくとこの範囲は

$$\left. \begin{array}{l} \text{+ スピンでは} \quad \vec{k}^2 \leq k_c^2 - \tilde{\mu}_B (H + M) \equiv k_+^2 \\ \text{- スピンでは} \quad \vec{k}^2 \leq k_c^2 + \tilde{\mu}_B (H + M) \equiv k_-^2 \end{array} \right\} \quad (1.6)$$

となる。ただし $\vec{k} = 0$ を中心とし半径 k_- の球は第一 Brillouin

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

E_{total} は次のようにあらわされる。

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

たゞし

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

$$E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') = E_{coul}^{++}(\vec{k}, \vec{k}') - E_{exch}^{++}(\vec{k}, \vec{k}')$$

$$= \langle \psi_{\vec{k}}^+(1) \psi_{\vec{k}'}^+(2) | \mathcal{H}_{int} | \psi_{\vec{k}}^+(1) \psi_{\vec{k}'}^+(2) \rangle \\ - \langle \psi_{\vec{k}}^+(1) \psi_{\vec{k}'}^+(2) | \mathcal{H}_{int} | \psi_{\vec{k}'}^+(1) \psi_{\vec{k}}^+(2) \rangle \quad etc. \quad (1.9)$$

ψ の肩の土はスピンの up, down を意味する。

Well localized の仮定 (1.2) より

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

4

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

8

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

とおくことと同等である。Wannier 函数の形がきまれば U の値はきまるが、こゝでは U は一つのパラメータと見なそう。

12

(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、

16

$E_{\text{coul}}^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') = \hbar^2 U / 2m^* N$ であるが、 $\psi_{\vec{k}}^+$ と $\psi_{\vec{k}'}^-$ のスピンの状態が異なるために $E_{\text{exch}}^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') = 0$ であり、従って cancellation は起らない。よって

$$\left. \begin{aligned} E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') &= E_2^{--}(\vec{k}, \vec{k}') = 0 \\ E_2^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') &= \hbar^2 U / 2m^* N \end{aligned} \right\} \quad (1.11)$$

(1.8) と (1.11) を (1.7) に代入すると

$$E_{\text{total}} = \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} + \mu_B H \right) + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} - \mu_B H \right) + \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} n_+ n_- \quad (1.12)$$

where

$$n_{\pm} = d \frac{4\pi}{3} k_{\pm}^3 \quad (1.13)$$

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

(1.12) の Σ を積分でかきかえて計算すると

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

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

M を適当に選んで E_{total} を最小にする。 $n_+ + n_- = \text{const.}$
 = given n である

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

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

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

$n_+ > 0$ において E_{total} が極値をもつとすると、(1.6) より

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

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

従って

$$\tilde{\mu}_B M = \frac{U}{2N} (n_- - n_+) \quad (1.15)$$

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

もう少しはつきり書くと

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\mu}_B M &= \frac{U}{2V} \frac{4\pi}{3} \left[\left\{ k_c^2 + \tilde{\mu}_B (H+M) \right\}^{\frac{3}{2}} - \left\{ k_c^2 - \tilde{\mu}_B (H+M) \right\}^{\frac{3}{2}} \right] \quad (i) \\ (V; \text{第一 Brillouin zone の体積} = N/d) \\ \left\{ k_c^2 + \tilde{\mu}_B (H+M) \right\}^{\frac{3}{2}} + \left\{ k_c^2 - \tilde{\mu}_B (H+M) \right\}^{\frac{3}{2}} &= \text{given const} \equiv 2k_F^3 \quad (ii) \end{aligned} \right\} \quad (1.16)$$

を連立させて M と k_c を求めればよい。(1.16)の(i)式は(1.6)と(1.13)を(1.15)に代入して得られる。(ii)式は伝導電子の総数が一定と言う条件である。

§ 3 U S F 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よい。
本来は外磁場 H の値を一つ与えてそれに対して M と k_c を
求めるべきであるが、それでは考え難いので $H + M \equiv \alpha$ 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。つまり 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 とを (i) 式の右辺に代入して M を計算する。こ
で得られた 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のあることである。外磁
場 $H = 0$ のときでさえ自発磁化が起つていえる場合を
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 α の範囲は $\alpha \geq M_0$ と考えるべきであって、従って $0 \leq \alpha < M_0$ 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、あらみじめ M_0 を求めておかななくてはならぬが、この手続きは面倒なのでその代わ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 k_c を求める。んしてもし $\alpha - M < 0$ となるようなら、この α は意味がなかつたものとして捨てる。」

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、極値が $n_+ > 0$ 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 より大きくなれば E_{total} は $n_+ = 0$ で最小になると期待される。その critical value H_F は次のようにして求まる。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 Ferromagnetic 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。従って (1.16) において $n_+ \rightarrow 0$ と考え、つまり $k_c^2 = \tilde{\mu}_B (H + M)$ といった場合が、ちょうど *critical field* H_F を与えることになる。この方針によって以下 H_F を計算する。 $k_c^2 = \tilde{\mu}_B (H + M)$ があると (1.16) は次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\mu}_B M &= \frac{U}{2V} \frac{4\pi}{3} \{ 2 \tilde{\mu}_B (H + M) \}^{\frac{3}{2}} & (i) \\ \{ 2 \tilde{\mu}_B (H + M) \}^{\frac{3}{2}} &= 2 k_F^3 & (ii) \end{aligned} \right\}$$

この二式から M を消去する。

(ii) より

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

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

辺々引き合って H が求まる。それは H_F である。従って

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

(1.17) によって定まった H_F に対し、 $H \geq H_F$ では電子系は Ferromagnetic となり、 $H < H_F$ では U S F となる。
 もし (1.17) の右辺が負であるとき $H=0$ 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；

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

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にまとめられる。

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

(1.18) が満たされれば 磁場の有無にかかわらず、

(1.18) が満たされなければ、(1.17) で定まる H_F より大きな磁場をかけたとき」。

なお (1.17) で $U \rightarrow 0$ としてみると次のことがあまる。

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

である。 U の値の如何にあつて Ferromagnetic state となる。

§ 4 無限小振中の spin density wave

前§ 3 では Slater 行列式の要素たる一体波動函数として ψ_k の固有函数 $\psi_k(\vec{r})$ を用い、たゞ + スピンと - スピ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§ 以後では一体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より知られており、又理論的にも intra atomic Coulomb integral U の値が適当であると SDW の方

5 10 15 20 25
 が para や U S F よりもエネルギーが低くなることを示されて
 いる。そこで外磁場がある場合についても U S F と S D W との
 エネルギーを比較することの問題となる。但しこの場合 S D W は
 磁場によって変調されたものを考えるべきで、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 になつていると考えるべきである。

8 12 16
 S D W 構造を self-consistent な Slater 行列式で記述するため
 には、[3], [4] で考えたように先ず一体化 Hamiltonian $\bar{H}_1$ を適
 当に設定し $\bar{H}_1$ の固有函数で Slater 行列式を作らねばならな
 い。§ 2 で安定な U S F を決定するため未定数 M を導入して作
 った一体化 Hamiltonian (1.5) から出発して計算を進めたのも、
 S D W の場合との関連を考慮したからのことである。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 $= (n_- - n_+) / (n_- + n_+) \equiv \zeta$ をパラメータと見た方が
 自然ともあり見通しもよかつたであらう。

磁場 H で変調された SDW 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。

$$\bar{\mathcal{H}}_1 = \mathcal{H}_0 + \mu_B (H + M) \sigma_z + \mathcal{H}_{SDW} \quad (1.20)$$

すなわち磁場がないときの SDW 、磁場があるときの U SF に対応する項を共に持つような $\bar{\mathcal{H}}_1$ を考えるわけである。こゝに $\mathcal{H}_0$ は 1 と同じく運動エネルギー + 結晶ポテンシアルを意味し、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 $\mathcal{H}_{SDW}$ は screw 又は sine 構造に対する電子間 interaction の一体化であるが、(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くるので、spin polarization の方向が z 軸 (= 磁場の方向) と平行か直角かを区別せねばならない。従つて次の四通りの場合が考えられる。

① Screw A

$$\mathcal{H}_{SDW} = \sum_i q (\vec{r} - \vec{R}_i) \{ \sigma_x \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) + \sigma_y \sin(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \} \quad (1.21)_{\text{①}}$$

② Screw B

$$\mathcal{H}_{\text{SDW}} = \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \{ \sigma_z \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) + \sigma_y \sin(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \} \quad (1.21)_{\text{②}}$$

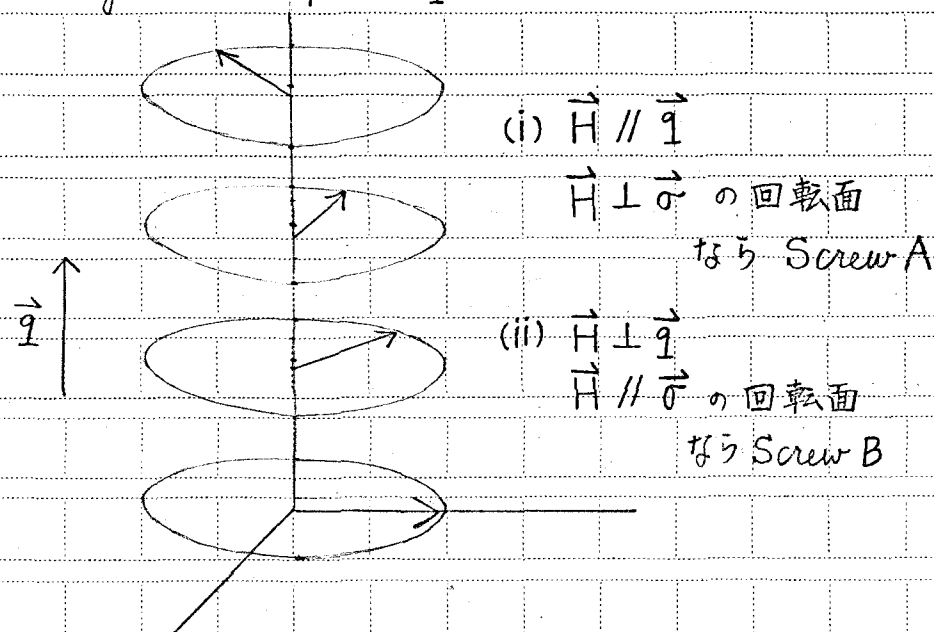
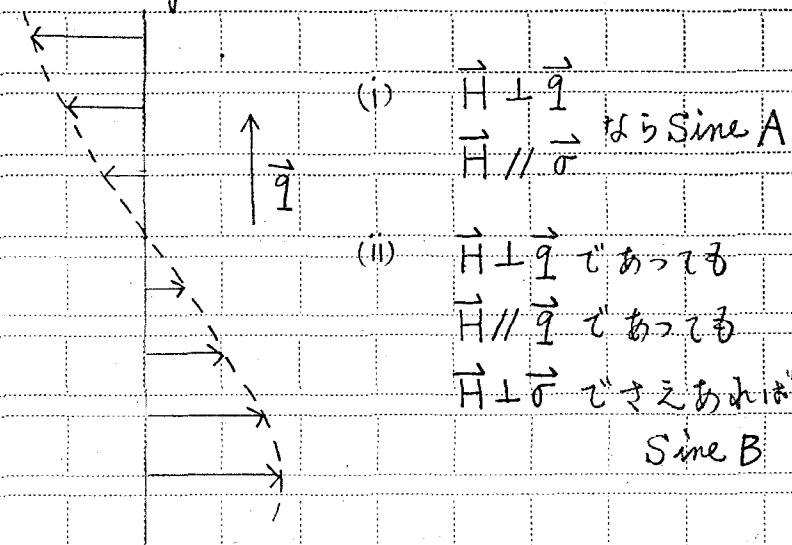
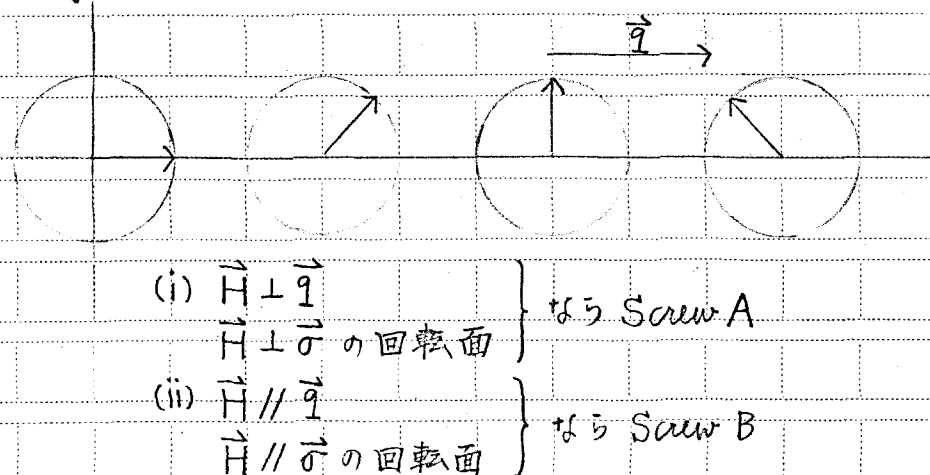
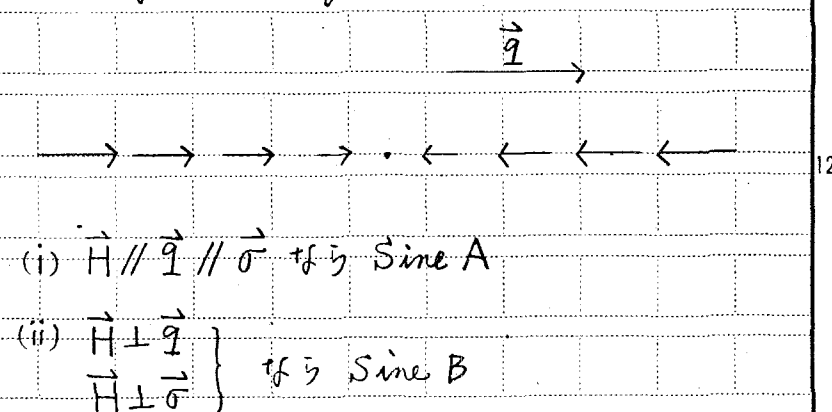
③ Sine A

$$\mathcal{H}_{\text{SDW}} = 2 \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \sigma_z \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \quad (1.21)_{\text{③}}$$

④ Sine B

$$\mathcal{H}_{\text{SDW}} = 2 \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \sigma_x \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \quad (1.21)_{\text{④}}$$

① は $\pi/2$ の 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 $\vec{\sigma}$ の方向との関係はどうであってよい。ちなみに spiral でも cycloidal でも Screw A は考えられ、両者の間に (伝導電子とイオニとの 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 $\vec{\sigma}$,

Fig. 1.1 (Spiral $\vec{q} \perp \vec{\sigma}$ の回転面)Fig. 1.3 (Transverse $\vec{q} \perp \vec{\sigma}$)Fig. 1.2 (Cycloidal $\vec{q} \parallel \vec{\sigma}$ の回転面)Fig. 1.4 (Longitudinal $\vec{q} \parallel \vec{\sigma}$)

は電子の空間座標について立方対称性を持っており、 x 軸や軸をとりかえても不変である。又 (1.20) の $\bar{\psi}_i$ で見る限り *spin-orbit coupling* は全然入っていないので、スピンの向きは変えないで空間座標の方だけ座標軸の取りかえを行なつても $\bar{\psi}_i$ は変らないわけである。なかまの方向は結晶主軸の (一つの) 方向を向くと期待される。最安定な状態は、可能な限り縮退が少ななものと思われらるである。

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 $\bar{\psi}_i$ の固有函数を *exact* に求めることは難しいので、 $\bar{\psi}_{SDW}$ が微小の場合に話を限り $\bar{\psi}_{SDW}$ を摂動項とみなして摂動計算を行なう。従つても 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、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、

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

であるとしよう。すると (1.20) の $\bar{E}_1$ にかいて M と g とが未
定定数となる。このうち M は § 2 で求めた値をそのまま
採用する。 g は微小と考えているので M の値には影響を
及ぼさないのである。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 とで差異はなまった。

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

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

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

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

$\vec{K}$ は逆格子ベクトルで、 $\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}$ は第一 Brillouin zone に属するものとする。

然し外磁場 $H > 0$ のときには、screw と line とで差が現われる。それを見るのがこの part I の主内容の一つである。

(c.f. Introduction §)

§ 5 $\mathcal{H}_1$ の行列要素

$\mathcal{H}_0$ の固有函数 $y_{\vec{k}}(\vec{r})$ を base として, (1.20) の $\mathcal{H}_1$ を Matrix であ
らわしてみよう。(以下複号同順). 先ず明らかに

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

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

次に $\mathcal{H}_{\text{SDW}}$ の行列要素について考える.

$$\begin{aligned} & \langle y_{\vec{k}}^{\pm} | \sum_j g(\vec{r} - \vec{R}_j) \sigma_z e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} | y_{\vec{k}'}^{\mp} \rangle \\ &= \langle y_{\vec{k}}^{\pm} | \sum_j g(\vec{r} - \vec{R}_j) \sigma_x e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} | y_{\vec{k}'}^{\pm} \rangle \\ &= \langle y_{\vec{k}}^{\pm} | \sum_j g(\vec{r} - \vec{R}_j) \sigma_y e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} | y_{\vec{k}'}^{\pm} \rangle = 0 \end{aligned} \quad (1.27)_1$$

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

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

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

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 $\vec{k} - \vec{q} - \vec{K}$ は第一 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 $\mathcal{H}_{\text{SDW}}$ の行列要素が求まる。それを (1.25) (1.26) の結果と加えると $\mathcal{H}_1$ 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 の終りに一覽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 $\psi_{\vec{k}}$ を摂動計算によって求める。

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 ψ_i は近似的に

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

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

によって与えられる。(一次の摂動公式)。

この公式によって $\bar{H}_1$ の固有函数を求めることが出来る。例えば Screw A について (行列要素はこの chapter 末の一覧表参照)。

$$\psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) = \sqrt{1 - \frac{1}{4} \left(\frac{g}{\chi(\vec{k}) - \mu_0(H+M)} \right)^2} \psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) - \frac{1}{2} \frac{g}{\chi(\vec{k}) - \mu_0(H+M)} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^-(\vec{r}) \quad (1.28)_+$$

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

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

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

が $\bar{H}_1$ の固有函数となる。

$\psi_{\vec{k}}^{\pm}$ の $\pm$ は、スピン状態の異なる二つの state に対応しているが、次の注意を要する。すなわち $\psi_{\vec{k}}^{\pm}$ の場合の $\pm$ は、それぞれ σ_z の固有値 ± 1 の固有状態を意味しているだけである。また、 $\psi_{\vec{k}}^{\pm}$ の場合は σ_z の固有状態ではない。 σ_x の期待値 $\langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | \sigma_x | \psi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle$ が正になるか、負になるかに従って $\pm$ をきめるにすぎない。

Screw B, Sine A, Sine B にも、いとも同様に $\bar{H}_1$ の固有函数を求め、この chapter 末に一覧表にしてある。

§ 7 E_{total} の計算

§ 2 では U S F に対して E_{total} を計算した。Slater 行列式の要素として $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ の代りに $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ でおきかえると E_{total} はどのように変化するか調べてみよう。

E_{total} は次のようにあらわされる。

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

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

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

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、その結果はこの 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) で与えられるから

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

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))

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

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

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

$\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ 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おされる。このようにして次の結果を得る。

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

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

(次ページに続く)

$$= \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \left[1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right)^2 + \left(\frac{1}{x(\vec{k}') - \mu_B(H+M)} \right)^2 - 2 \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \frac{1}{x(\vec{k}') - \mu_B(H+M)} \right\} \right] \quad (1.35)_{++}$$

同様にして

$$E_{exh}^{--}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \left[1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'(\vec{k}') + \mu_B(H+M)} \right)^2 - 2 \frac{1}{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \frac{1}{x'(\vec{k}') + \mu_B(H+M)} \right\} \right] \quad (1.35)_{--}$$

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

$$= \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} \frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'(\vec{k}') + \mu_B(H+M)} \right)^2 + 2 \frac{1}{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \frac{1}{x'(\vec{k}') + \mu_B(H+M)} \right\} \quad (1.35)_{+-}$$

(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 $\chi(\vec{k}) = \chi(-\vec{k})$ の関係が得られる。従って例えば

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

となる。 $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ の向き換えにより、和の範囲は変わらないからである。

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

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

(次ページにつづく)

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

(1.37) は 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) を代入すると幾らか簡単に成り結局次のようになる。

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

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 の終り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 かがさがる.

(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,

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

となる。(1.39) の右辺が正であるとすると, (1.39) は次式と同値である。

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

Screw B, Sine A, Sine B のいずれの場合においても E_{total} のうち g^2 の係数は $f_1(H+M) - U f_2(H+M)$ の形をしてゐる。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

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

と書かれる。(Chapter 2 § 5 で、 $H+M, k_F, \vec{q}$ 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ゐる)。

(1.40) は U_{crit} を $H+M \equiv \alpha$ の函数としてあらわしてゐるが、(1.16) によつて M は α の函数としてきまるから、(1.40) の U_{crit} は外磁場 $\alpha - M$ に対応するものであると見なせる。このようにして外磁場 H をかけたときの U_{crit} の値が (α を用いて間接的に) 求まる。この注意は § 3 の始めになした注意と同じである。

又 (1.40) は逆に U を一つ fix したときに、SDW出現のた

めの H の範囲をさめる条件式ともみなせる。このように
 みなり方が物理的には自然である。何故なら U 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っ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、
 U を fix して H の範囲を決めると言う見方に立っての題名
 である。然し計算上は $H+M \equiv \alpha$ を先づ与えて、 M と U_{crit} を
 α の函数として計算するのが最も便利だからそのように
 する。

この Chapter の終りに Screw B, Sine A, Sine B に対しても U_{crit} 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、
 (すなわち自発磁化のない物質で $H \rightarrow 0$ とするとき) いずれ
 の場合でも

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

となり、Screw と Sine とで差は起らない。然し外磁場があ

るときには U_{crit} は Screw A, Screw B, Sine A によってそれぞれ異なった
値になる。従ってこれらの SDW 構造の磁場に対する安
定性を比較することになる。たゞ Screw A と Sine B とは磁場
が異なってもなお U_{crit} の値を共通にもち、両者の安定性
の比較は少くとも $\mathcal{H}_{SDW}$ を摂動とみでの摂動計算の範囲内
では論じることが出来る。(Chapter 4 を参照のこと)。

$\overline{H}_1$ の行列要素 $\varphi_{\vec{k}}^+$ の行 $\varphi_{\vec{k}}^-$ の行S
C
R
E
W

A

 $\varphi_{\vec{k}}^+$ $\varphi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^-$ $\varphi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+$ $\varphi_{\vec{k}}^-$

$$\left(\epsilon(\vec{k}) + \mu_B(H+M), \quad g \right)$$

$$\left(g, \quad \epsilon(\vec{k}) - \mu_B(H+M) \right)$$

S
C
R
E
W

B

 $\varphi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+$ $\varphi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^-$ $\varphi_{\vec{k}}^+$ $\varphi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+$ $\varphi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^-$ $\varphi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+$ $\varphi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^-$ $\varphi_{\vec{k}}^-$ $\varphi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+$ $\varphi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^-$

$$\left(\frac{g}{2}, \quad -\frac{g}{2}, \quad \epsilon(\vec{k}) + \mu_B(H+M), \quad \frac{g}{2}, \quad \frac{g}{2} \right) \left(\frac{g}{2}, \quad -\frac{g}{2}, \quad \epsilon(\vec{k}) - \mu_B(H+M), \quad -\frac{g}{2}, \quad -\frac{g}{2} \right)$$

S
I
N
E

A

 $\varphi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+$ $\varphi_{\vec{k}}^+$ $\varphi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+$ $\varphi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^-$ $\varphi_{\vec{k}}^-$ $\varphi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^-$

$$\left(g, \quad \epsilon(\vec{k}) + \mu_B(H+M), \quad g \right) \left(-g, \quad \epsilon(\vec{k}) - \mu_B(H+M), \quad -g \right)$$

S
I
N
E

B

 $\varphi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^-$ $\varphi_{\vec{k}}^+$ $\varphi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^-$ $\varphi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+$ $\varphi_{\vec{k}}^-$ $\varphi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+$

$$\left(g, \quad \epsilon(\vec{k}) + \mu_B(H+M), \quad g \right) \left(g, \quad \epsilon(\vec{k}) - \mu_B(H+M), \quad g \right)$$

$\bar{H}$ の固有函数

($x(\vec{k})$ を x で, $x'(\vec{k})$ を x' で, $\mu_8(H+M)$ を H' であらわす)

	$\psi_{\vec{k}}^+(\vec{r})$	$\psi_{\vec{k}}^-(\vec{r})$	
SCREW A	$\sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x-H')^2}} \psi_{\vec{k}}^+ - \frac{g}{2(x-H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^-$	$\sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x'+H')^2}} \psi_{\vec{k}}^- - \frac{g}{2(x'+H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+$	4
SCREW B	$\sqrt{1 - \frac{g^2}{16} \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{x'^2} + \frac{1}{(x-H')^2} + \frac{1}{(x'-H')^2} \right)} \psi_{\vec{k}}^+$ $- \frac{g}{4x} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ - \frac{g}{4x'} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+ - \frac{g}{4(x-H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- + \frac{g}{4(x'-H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^-$	$\sqrt{1 - \frac{g^2}{16} \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{x'^2} + \frac{1}{(x+H')^2} + \frac{1}{(x'+H')^2} \right)} \psi_{\vec{k}}^-$ $+ \frac{g}{4x} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- + \frac{g}{4x'} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^- + \frac{g}{4(x+H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ - \frac{g}{4(x'+H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+$	8
SINE A	$\sqrt{1 - \frac{g^2}{4x^2} - \frac{g^2}{4x'^2}} \psi_{\vec{k}}^+ - \frac{g}{2x} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ - \frac{g}{2x'} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+$	$\sqrt{1 - \frac{g^2}{4x^2} - \frac{g^2}{4x'^2}} \psi_{\vec{k}}^- + \frac{g}{2x} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- + \frac{g}{2x'} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^-$	12
SINE B	$\sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x-H')^2} - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x'-H')^2}} \psi_{\vec{k}}^+$ $- \frac{g}{2(x-H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^- - \frac{g}{2(x'-H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^-$	$\sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x+H')^2} - \frac{1}{4} \frac{g^2}{(x'+H')^2}} \psi_{\vec{k}}^-$ $- \frac{g}{2(x+H')} \psi_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}}^+ - \frac{g}{2(x'+H')} \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+$	16

		$E_+(\vec{k})$	$E_-(\vec{k})$	
SCREW	A	$E(\vec{k}) + \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x(\vec{k}) - \mu_B H) g^2}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2}$	$E(\vec{k}) - \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x'(\vec{k}) + \mu_B H) g^2}{\{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2}$	4
SCREW	B	$E(\vec{k}) + \mu_B H + \frac{g^2}{8x(\vec{k})} + \frac{g^2}{8x'(\vec{k})} + \frac{g^2}{8} \left[\frac{x(\vec{k}) - \mu_B H}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} + \frac{x'(\vec{k}) - \mu_B H}{\{x'(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} \right]$	$E(\vec{k}) - \mu_B H + \frac{g^2}{8x(\vec{k})} + \frac{g^2}{8x'(\vec{k})} + \frac{g^2}{8} \left[\frac{x(\vec{k}) + \mu_B H}{\{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2} + \frac{x'(\vec{k}) + \mu_B H}{\{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2} \right]$	8
SINE	A	$E(\vec{k}) + \mu_B H + \frac{g^2}{2x(\vec{k})} + \frac{g^2}{2x'(\vec{k})}$	$E(\vec{k}) - \mu_B H + \frac{g^2}{2x(\vec{k})} + \frac{g^2}{2x'(\vec{k})}$	12
SINE	B	$E(\vec{k}) + \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x(\vec{k}) - \mu_B H) g^2}{\{x(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2} + \frac{1}{2} \frac{(x'(\vec{k}) - \mu_B H) g^2}{\{x'(\vec{k}) - \mu_B(H+M)\}^2}$	$E(\vec{k}) - \mu_B H + \frac{1}{2} \frac{(x(\vec{k}) + \mu_B H) g^2}{\{x(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2} + \frac{1}{2} \frac{(x'(\vec{k}) + \mu_B H) g^2}{\{x'(\vec{k}) + \mu_B(H+M)\}^2}$	16

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)

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

	$2m^*NE_{exch}^{++}(\vec{k}, \vec{k}')/\hbar^2U$	$2m^*NE_{exch}^{--}(\vec{k}, \vec{k}')/\hbar^2U$	$2m^*NE_{exch}^{+-}(\vec{k}, \vec{k}')/\hbar^2U$	
SCREW A	$1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \frac{1}{(x_1 - H')^2} + \frac{1}{(x_2 - H')^2} - 2 \frac{1}{x_1 - H'} \frac{1}{x_2 - H'} \right\}$	$1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \frac{1}{(x'_1 + H')^2} + \frac{1}{(x'_2 + H')^2} - 2 \frac{1}{x'_1 + H'} \frac{1}{x'_2 + H'} \right\}$	$\frac{g^2}{4} \left\{ \frac{1}{(x_1 - H')^2} + \frac{1}{(x'_2 + H')^2} + 2 \frac{1}{x_1 - H'} \frac{1}{x'_2 + H'} \right\}$	4
SCREW B	$1 + \frac{g^2}{8} \left\{ \frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right\} - \frac{g^2}{16} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 - H'} - \frac{1}{x_2 - H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 - H'} - \frac{1}{x'_2 - H'} \right)^2 \right\}$	$1 + \frac{g^2}{8} \left\{ \frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right\} - \frac{g^2}{16} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 + H'} - \frac{1}{x_2 + H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 + H'} - \frac{1}{x'_2 + H'} \right)^2 \right\}$	$\frac{g^2}{16} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 - H'} + \frac{1}{x'_2 + H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 - H'} + \frac{1}{x_2 + H'} \right)^2 \right\}$	8
SINE A	$1 + \frac{g^2}{2} \left\{ \frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right\}$	$1 + \frac{g^2}{2} \left\{ \frac{1}{x_1 x_2} + \frac{1}{x_1 x'_2} + \frac{1}{x'_1 x_2} + \frac{1}{x'_1 x'_2} \right\}$	0	12
SINE B	$1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 - H'} - \frac{1}{x_2 - H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 - H'} - \frac{1}{x'_2 - H'} \right)^2 \right\}$	$1 - \frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 + H'} - \frac{1}{x_2 + H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 + H'} - \frac{1}{x'_2 + H'} \right)^2 \right\}$	$\frac{g^2}{4} \left\{ \left(\frac{1}{x_1 - H'} + \frac{1}{x'_2 + H'} \right)^2 + \left(\frac{1}{x'_1 - H'} + \frac{1}{x_2 + H'} \right)^2 \right\}$	16

E_{total} のうち g^2 の係数

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

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

S C R E W A	$\frac{1}{2} \left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi - H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi + H'} \right\} - \frac{\hbar^2 U}{8m^* N} \left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi - H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi + H'} \right\}^2$	4
S C R E W B	$\frac{1}{4} \left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi} + \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi - H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi + H'} \right\}$ $- \frac{\hbar^2 U}{16m^* N} \left[\left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi - H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi + H'} \right\}^2 + 4 \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi} \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi} \right]$	8
S I N E A	$\sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi} - \frac{\hbar^2 U}{m^* N} \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi} \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi}$	12
S I N E B	$\sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi - H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi + H'} - \frac{\hbar^2 U}{4m^* N} \left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{\chi - H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{\chi + H'} \right\}^2$	16

$$\frac{1}{U_{\text{ait}}}$$
 の表

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

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

S C R E W	A	$\frac{\hbar^2}{4m^*N} \left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x-H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x+H'} \right\}$	4
S C R E W	B	$\frac{\hbar^2}{4m^*N} \frac{\left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x-H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x+H'} \right\}^2 + 4 \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x} \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x}}{\sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x} + \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x-H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x+H'}}$	8
S I N E	A	$\frac{\hbar^2}{m^*N} \frac{\sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x} \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x}}{\sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x}}$	12
S I N E	B	$\frac{\hbar^2}{4m^*N} \left\{ \sum_{ \vec{k} \leq k_+} \frac{1}{x-H'} + \sum_{ \vec{k} \leq k_-} \frac{1}{x+H'} \right\}$	16

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) によって定め、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. によって求めるというのが計算の筋書きとなる。このようにして求めた U_{crit} は $H+M \equiv \alpha$, k_F , $\vec{Q}$ の函数となつてゐる。

このうち k_F は Hamiltonian $\mathcal{H}_0$ 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。

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

ただし d は長空間の単位体積あたりの *state* の個数、 n 従つて k_F は物質によつ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* して考える。現実には外磁場 H や、

intraatomic coulomb integral U の値によつて、伝導電子数 n も幾らか変化を起すかも知れない。(すなわち core の中の電子まで引つ張り出される可能性もある), 然し以下の計算ではこの効果を無視し k_F は定数として扱う.

$\vec{q}$ は, Chap. 1, §4 の (1.21) の次に説明したよりに、結晶主軸の一つの方向を向いてゐると考えられる。以下 $\vec{q}$ の方向を z 軸の方向であるとして計算を進めるが、 $\vec{q}$ の方向と $\vec{H}$ や $\vec{\sigma}$ の方向との関係はどろびあつても、要するに $\vec{q}$ が結晶主軸の一つの方向さえ向いてゐれば E_{total} は従つて U_{crit} の値は $|\vec{q}|$ だけで定まる筈である。

どのよりの周期の SDW 構造が出て来るかをあらわじめ指定する根據は何もないから、 $|\vec{q}| \equiv q$ はいろいろ変えて E_{total} を最小にするよりに調節せねばならない。 U_{crit} を求める問題で言うと、先ず U_{crit} を α, k_F, q の函数として求めた後

$$\min_q U_{crit}(\alpha, k_F, q) \equiv U_{crit}(\alpha, k_F) \quad (2.2)$$

として、 q を消去した $U_{crit}(\alpha, k_F)$ を計算する。このとき、
 $U > U_{crit}(\alpha, k_F)$ 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、 $U \rightarrow U_{crit}(\alpha, k_F)$
 の極限において次の q_0 に tend する」。

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

最後に $\alpha \equiv H + M$ については次のように考えられる。 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 をその代用とする。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 $U_{crit}(\alpha, k_F)$ 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す
 れば良いであろう。

先ず 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. によって
 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) によって q を消去する。得られた $U_{crit}(\alpha, k_F)$ を α
 と k_c と共に (1.16) の (i) 式に代入すると M_{crit} が求まり、
 $\alpha - M_{crit} = H_{crit}$ として H_{crit} が得られる。この際 $H_{crit} < 0$ と出て
 来るようなら、最初 α 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_{crit} , H_{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。

計算を実行する際には、便宜上 U の代わりに

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

として逆数 I を用い、(I_{crit} , H_{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、 α , 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、 α , k_c , U_{crit} を代入して右辺を計算するだけのことに比較的簡単な計算である。

(ii) 式はこれを k_c に関する方程式とみてもよいが、扱いはやや複雑になる。然し k_c を与えて左辺を計算するのは簡単だから、補間によって数値的に k_c を解くといふ。

すなわち k_c を等間隔で次々と与えて行き、その都度 (1・16)(ii) の左辺を計算しては右辺の $2k_F^3$ との大きさを比較する。もし根の位置が近似的にわかったら、その附近を更にこ

ま かの 間 隔 に 分 け て 同 様 な 操 作 を 繰 り 返 す . こ の よ う に
し て 次 才 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 発 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 な
っ て , 結 局 有 効 数 字 五 桁 の 精 度 で (1.16)(ii) の 根 k を 求 め た .

な お , $H + M \equiv \alpha$ の 値 が 大 き ず ざ る と (1.16)(ii) は 根 を 持 た な
く な る . こ れ は Ferromagnetic state に 対 応 し ,

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

の と き に 起 る . (c.f. Chap.1 §3)

こ の と き は $k_c^2 = 2^{\frac{2}{3}} k_F^2 - \tilde{\mu}_B(H + M)$, $k_+ = 0$, $k_- = \sqrt[3]{2} k_F$ と き め る と 以
後 の 計 算 が U S F の 場 合 と 同 じ に 扱 わ れ る .

§ 3 $1/U_{\text{crit}} = I_{\text{crit}}$ の 計 算

Chapter 1 の 終 り の 一 覧 表 を 見 る と , $1/U_{\text{crit}} = I_{\text{crit}}$ は 結 局 次 の

ようにまとめられる。

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

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

れてゐるものとする。

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 k 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

$$\vec{K} \sim (l, m, n) \quad \left. \vphantom{\vec{K} \sim (l, m, n)} \right\} (2.9)$$

l, m, n とともに整数で $l+m+n = \text{偶数}$

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

$$\left. \begin{aligned} |k_x| + |k_y| &\leq 1 \\ |k_y| + |k_z| &\leq 1 \\ |k_z| + |k_x| &\leq 1 \end{aligned} \right\} (2.10)$$

によつて与えられる。これより第一 Brillouin zone の体積は

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

であることがわかり、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。それ故「(2.8) の和の領域が第一 Brillouin zone の中に含まれる」と言う条件は

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

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

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

の範囲でみたされる。

さて (2.8) において $\chi(\vec{k}) = \frac{1}{2} \{ \epsilon(\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}) - \epsilon(\vec{k}) \}$ であり、 $\vec{K}$ は「 $\vec{k} + \vec{q} + \vec{K}$ が第一 Brillouin zone に属する」と言う条件で定まる逆格子ベクトルである。従って $\vec{K}$ は $\vec{k}$ に depend してきまり、次のどれかになる。
(ただし $\vec{q}$ は z 軸の正の方向に向いてゐるとして)。

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

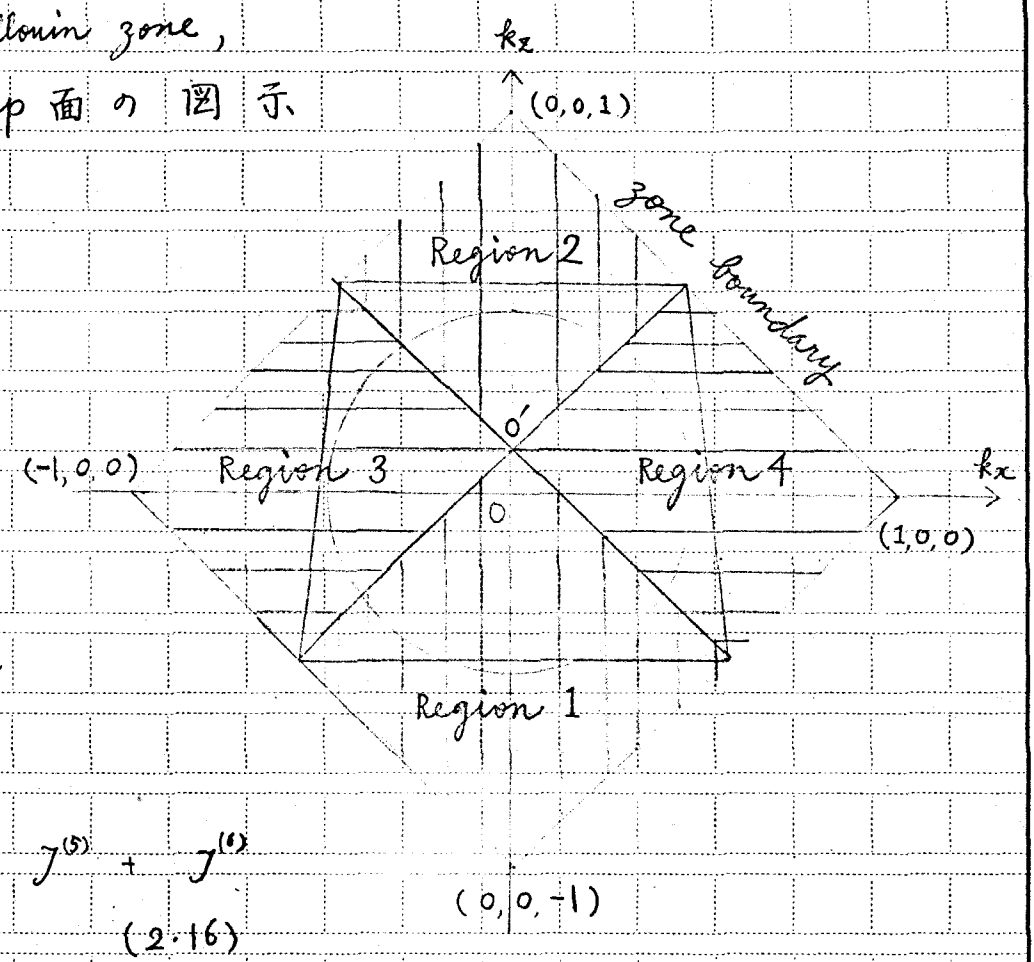
(2.14) の $\vec{K}_i$ から $\vec{K}_6$ に応じて、対応する $\vec{k}$ の範囲をそれぞれ第 1 region, ..., 第 6 region と呼ぶ。各 region において $\vec{q} + \vec{K}_i$ を $\vec{x}_i$ であらわすと、

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

従って $(0, 0, 0)$ と $-\vec{x}_i$ とを結ぶ線分の垂直二等分面の上で $\chi(\vec{k}) = 0$ となり、その面の外で $\chi(\vec{k}) < 0$, 内で $\chi(\vec{k}) > 0$ となる。

この面を gap 面と呼ぶ。SDW 出現に伴い、(1.20) の一体化 Hamiltonian $\bar{H}_1$ 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)。

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

$$\gamma = \gamma^{(1)} + \gamma^{(2)} + \gamma^{(3)} + \gamma^{(4)} + \gamma^{(5)} + \gamma^{(6)} \quad (2.16)$$

where $\gamma^{(i)} = \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_0 \\ \text{in region } i}} \frac{1}{x(\vec{k}) + c} \quad (2.17)$

とする。対称性より $\gamma^{(3)} = \gamma^{(4)} = \gamma^{(5)} = \gamma^{(6)}$ 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) の和は積分でおきみえて計算する。和(積分)の範囲は球と四角錐の共通部分となるが、それでは計算し難い(一次元の積分になおして不定積分を求めることが出来ない)ので、積分範囲を次で説明する。ように少し変えて計算する。

§ 4 $J^{(3)}$ の計算

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

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

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

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= q, & x_2 &= 2-q \\ x_3 &= x_4 = x_5 = x_6 = \sqrt{1+(1-q)^2} \end{aligned} \right\} (2.19)$$

となる。

そこでもし和(積分)の範囲が x 軸を軸とする回転体であれば $1/x(\bar{x})+c$ の和は容易に積分で計算出来る。このような積分計算にかきみえるために(2.17)の和の範囲を次のように変更する。

§5で説明するよりに、 $q=1$ の場合だけを考えることにするのび、六つの *region* への分割の様子は§3の付図に示したよりになる。*region* 同志の境界面は O' を頂点とし、 x 軸、 y 軸、 z 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かきみえる。円錐の頂角は、「立体角が $2\pi/3$ (= 全球面の $1/6$) になるよりに」との条件から定める。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) 円錐の頂角は0と考える。すなわち互いのために頂角が0にずれると言う効果を無視する。

(3) 円錐の軸の方向は各 region での軸の方向、すなわち Gap 面に垂直な方向と考える。従って第三～第六 region では本来の四角錐の軸の方向より少しずれる。

上記のような円錐は、どの region でも次の式で書かれる。

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

従って (2.17) の和の範囲を (1)～(3) のように変更すると言うことは

$$\frac{1}{d} \sum_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_0 \\ \text{all region } i}} \longrightarrow \iiint_{\substack{k_r^2 + k_z^2 \leq k_0^2 \\ k_r \leq \frac{\sqrt{5}}{2} k_3}}$$

と積分におきかえて計算することとなる。このおきかえを行なうと、(2.18) を (2.17) に代入して次式を得る。

$$\frac{\hbar^2}{2m^*d} J^{(i)} = \int_0^{k_0} \pi (k_p(z))^2 \frac{1}{-X_i(k_z - \frac{X_i}{2}) + \tilde{c}} dk_z \quad (2.22)$$

$$\text{where } k_p(z) = \begin{cases} \frac{\sqrt{5}}{2} k_z & \text{for } k_z \leq \frac{2}{3} k_0 \\ \sqrt{k_0^2 - k_z^2} & \text{for } k_z \geq \frac{2}{3} k_0 \end{cases} \quad (2.23)$$

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

あとは (2.22) の右辺の計算だけの問題である。それは

$$\frac{5\pi}{4} \int_0^{\frac{2}{3}k_0} \frac{k_z^2}{\tilde{c} - X_i(k_z - \frac{X_i}{2})} dk_z + \pi \int_{\frac{2}{3}k_0}^{k_0} \frac{k_0^2 - k_z^2}{\tilde{c} - X_i(k_z - \frac{X_i}{2})} dk_z$$

と書きなおされる。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。

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

これで I_{crit} を計算するための式は全部そろった。

最後に数値例として $k_F = 0.5$, $H + M = 0$, $q = 1$ のときの I_{crit} を出しとみよう。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

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

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 $J(0.5, 0) = 6 J^{(1)}(0.5, 0)$ となる。

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

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

従って

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

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

(2.11) より $V=2$ を代入して計算すると $I_{crit} \doteq 2.06$ 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 S D W 構造が興味の対象である。

Introduction で説明しにように、Cr の 3d-電子は S D W 構造をなしている。そのポ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 を持つている。これは wave vector で言えると

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

であることを意味している。

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

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

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らう。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 $q \doteq 1$, $k_F \doteq 0.5$ で S D W 構造が現われることは既に [3], [4] でわかっている。

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} は従って I_{crit} は q に
ついては $q=1$ のまわりに対称な形あり

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

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。

$\alpha \equiv H+M$ については次のように考える。 α を大きくする
につれて無摂動の 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 において、 μ_B
と $\mu_B(H+M)$ が same order になるまで、すなわち

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

の範囲で $H+M$ を変えることにしよう。

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

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

と書かれる。

実際に我々は、次のようなパラメータの値に対して
 I_{crit} , H_{crit} , $\gamma \equiv (n_- - n_+) / (n_- + n_+)$, k_c の数値計算を電子計算機で行なった。

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

$\tilde{u}_B(H+M) \equiv \tilde{\alpha}$; 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 きざみに 16 個

I < I_{crit}

Chap. 3. Results

VSD, W, etc.,

数値計算の結果を、数表及びグラフにして以下に掲げる。

$\alpha = \tilde{\mu}_s(H+M)$, k_F , q , を一組み与えて $I_{crit}(\alpha, k_F, q)$ を計算し、これを q の函数とみて横軸に q , 縦軸に I_{crit} を取ってグラフにしたものが第 1 図である。一枚のグラフでは k_F は一定で、 α の値の異なる幾つもの $q \sim I_{crit}$ curve が重ねて描いてある。(c.f. [] fig. 2) なお、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。

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

α を助変数とみて方眼紙上に (I_{crit} , H_{crit}) 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* になる。なおUSFとFerromagnetic stateとの境界を与える $I \sim H$ curve も Chap.1. §3の議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。それを示すために第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、 $U = 1/I$ の範囲を示すものとみなせる。

なおSDWとしてScrewA, ScrewB, SineA, SineBの四種類を考えたが、このうちScrewAとSineBは同じ結果になる。

ScrewA(SineB)を実線で、ScrewBを点線で、SineAを破線で、一枚のグラフ(軸の値ごとに一枚)に重ねて描いてある。

第1表の No.1 $k_F = 0.50375$

$$k_f = 0.50375$$

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	1.00	2.22731	0.00000	1.00	2.22731	0.00000	1.00	2.22731	0.00000
0.003	1.00	2.22670	0086	1.00	2.21752	0085	1.00	2.20828	0085
0.005	1.00	2.22554	0144	1.00	2.19637	0139	0.99	2.16958	0135
0.007	1.00	2.22415	0201	1.00	2.18119	0192	0.99	2.14371	0183
0.010	1.00	2.22091	0287	1.00	2.15961	0267	0.98	2.10798	0249
0.013	1.00	2.21640	0372	1.00	2.13751	0337	0.97	2.07155	0307
0.015	1.00	2.21292	0427	1.00	2.12242	0382	0.97	2.04735	0341
0.017	1.00	2.20876	0482	1.00	2.10675	0423	0.96	2.02211	0370
0.020	1.00	2.20138	0563	1.00	2.08227	0481	0.96	1.98425	0406
0.025	1.00	2.18589	0692	1.00	2.03891	0562	0.94	1.92059	0443
0.030	1.00	2.16599	0813	1.00	1.99230	0622	0.92	1.85768	0450
0.035	1.00	2.14044	0920	1.00	1.94195	0656	0.90	1.79432	0422
0.040	1.00	2.10666	1007	1.00	1.88655	0658	0.89	1.73080	0357
0.045	0.99	2.05738	1056	0.99	1.82243	0613	0.87	1.66748	0251
0.050	0.98	2.01865	1105	0.98	1.76435	0544	0.86	1.60433	0100
0.055	0.98	1.98389	1147	0.97	1.70845	0445			
0.060	0.97	1.95025	1177	0.96	1.65334	0311			
0.065	0.96	1.91655	1192	0.95	1.59861	0137			
0.070	0.96	1.88405	1196						
0.075	0.95	1.85121	1184						
0.080	0.95	1.81885	1159						
0.085	0.94	1.78651	1117						
0.090	0.94	1.75411	1059						
0.095	0.93	1.72261	0988						
0.100	0.92	1.69092	0898						
0.105	0.92	1.65944	0792						
0.110	0.91	1.62850	0672						
0.115	0.90	1.59780	0534						
0.120	0.90	1.56736	0379						
0.125	0.89	1.53763	0211						
0.130	0.88	1.50812	0027						

Ferro への境界

I_F	$\tilde{\mu}_B H_F$
1.329	0.00000
1.35	0.310
1.375	0.670
1.40	1.010
1.417	1.250
1.45	1.680
1.50	2.290

第1表の NO. 2

$$k_F = 0.50000$$

	Screw A			Screw B			Sine A																				
α	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{nit}$	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{nit}$	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{nit}$																		
0.000	1.00	2.05756	0.00000	1.00	2.05756	0.00000	1.00	2.05756	0.00000																		
0.003	1.00	2.05583	0070	0.99	2.05170	0070	0.99	2.04846	0069																		
0.005	1.00	2.05309	0117	0.99	2.04417	0115	0.98	2.03707	0114																		
0.007	0.99	2.05055	0163	0.98	2.03541	0159	0.98	2.02336	0156																		
0.010	0.99	2.04544	0232	0.97	2.01873	0222	0.97	1.99951	0214																		
0.013	0.99	2.03899	0298	0.97	2.00091	0279	0.96	1.97264	0265																		
0.015	0.99	2.03381	0342	0.96	1.98688	0314	0.95	1.95345	0294																		
0.017	0.99	2.02851	0384	0.96	1.97316	0347	0.94	1.93324	0319																		
0.020	0.99	2.01936	0445	0.95	1.95038	0390	0.93	1.90175	0349																		
0.025	0.98	2.00219	0541	0.94	1.90998	0447	0.92	1.84709	0377																		
0.030	0.98	1.98338	0629	0.93	1.86668	0481	0.91	1.78953	0373																		
0.035	0.98	1.96272	0708	0.92	1.82119	0491	0.89	1.73128	0334																		
0.040	0.97	1.94079	0776	0.90	1.77412	0473	0.88	1.67150	0257																		
0.045	0.97	1.91724	0833	0.89	1.72597	0427	0.86	1.61154	0137																		
0.050	0.96	1.89288	0878	0.88	1.67672	0347	Ferro との境界 <table><tr><th>I_F</th><th>$\tilde{M}_B H_F$</th></tr><tr><td>1.320</td><td>0.00000</td></tr><tr><td>1.325</td><td>0.080</td></tr><tr><td>1.35</td><td>0.440</td></tr><tr><td>1.375</td><td>0.790</td></tr><tr><td>1.40</td><td>1.130</td></tr><tr><td>1.409</td><td>1.250</td></tr><tr><td>1.45</td><td>1.780</td></tr><tr><td>1.50</td><td>2.380</td></tr></table>			I_F	$\tilde{M}_B H_F$	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
I_F	$\tilde{M}_B H_F$																										
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																										
0.055	0.96	1.86767	0912	0.87	1.62609	0230																					
0.060	0.95	1.84126	0931	0.85	1.57476	0073																					
0.065	0.95	1.81474	0938																								
0.070	0.94	1.78723	0930																								
0.075	0.94	1.75988	0909																								
0.080	0.93	1.73168	0872																								
0.085	0.93	1.70354	0820																								
0.090	0.92	1.67516	0752																								
0.095	0.92	1.64679	0669																								
0.100	0.91	1.61848	0570																								
0.105	0.90	1.58988	0454																								
0.110	0.90	1.56183	0323																								
0.115	0.89	1.53382	0176																								
0.120	0.88	1.50582	0012																								

$$k_F = 0.49625$$

Screw A				Screw B			Sine A		
α	q_0	I_{int}	$\tilde{M}_B H_{int}$	q_0	I_{int}	$\tilde{M}_B H_{int}$	q_0	I_{int}	$\tilde{M}_B H_{int}$
0.000	0.97	1.91087	000000	0.97	1.91087	000000	0.97	1.91087	000000
0.003	0.97	1.91035	000055	0.97	1.91184	000055	0.97	1.91333	000055
0.005	0.97	1.90936	000091	0.97	1.91530	00093	0.97	1.92116	00094
0.007	0.97	1.90817	0128	0.96	1.91309	0129	0.96	1.91886	0131
0.010	0.97	1.90540	0182	0.96	1.90438	0181	0.95	1.90548	0182
0.013	0.97	1.90167	000234	0.95	1.89155	000229	0.94	1.88593	000225
0.015	0.97	1.89867	000269	0.95	1.88150	000257	0.94	1.87066	000250
0.017	0.97	1.89525	0302	0.94	1.87002	0283	0.93	1.85414	0271
0.020	0.97	1.88935	0351	0.94	1.85183	0318	0.92	1.82710	0295
0.025	0.96	1.87766	0427	0.93	1.81745	0359	0.91	1.77827	0312
0.030	0.96	1.86457	0497	0.92	1.77926	0377	0.89	1.72562	0296
0.035	0.96	1.84917	0559	0.90	1.73858	0372	0.88	1.67119	0246
0.040	0.96	1.83192	0611	0.89	1.69605	0339	0.87	1.61484	0155
0.045	0.95	1.81349	0653	0.88	1.65153	0276	0.85	1.55795	0022
0.050	0.95	1.79358	0684	0.87	1.60544	0178			
0.055	0.94	1.77225	0702	0.86	1.55777	0042			
0.060	0.94	1.75036	0710						
0.065	0.94	1.72707	0702						
0.070	0.93	1.70365	0683						
0.075	0.93	1.67909	0648						
0.080	0.92	1.65449	0599						
0.085	0.92	1.62914	0535						
0.090	0.91	1.60370	0456						
0.095	0.90	1.57776	0360						
0.100	0.90	1.55216	0251						
0.105	0.89	1.52615	0124						

Ferroとの境界

I_F	$\tilde{M}_B H_F$
1.309	000000
1.325	0240
1.35	0590
1.375	0940
1.398	1250
1.40	1270
1.45	1900
1.50	2490

第 1 表 No. 4

$$k_F = 0.49250$$

Screw A				Screw B			Sine A		
$\tilde{\alpha}$	q_0	I_{init}	$\tilde{M}_B H_{init}$	q_0	I_{init}	$\tilde{M}_B H_{init}$	q_0	I_{init}	$\tilde{M}_B H_{init}$
0.000	0.95	1.80647	000000	0.95	1.80647	000000	0.95	1.80647	000000
0.003	0.95	1.80607	0043	0.95	1.80613	0043	0.95	1.80619	0043
0.005	0.95	1.80530	0071	0.95	1.80561	0071	0.95	1.80593	0071
0.007	0.95	1.80434	0099	0.95	1.80561	0100	0.95	1.80686	0100
0.010	0.95	1.80204	0141	0.95	1.80668	0143	0.94	1.81223	0146
0.013	0.95	1.79914	0182	0.94	1.79941	0182	0.93	1.80188	0184
0.015	0.95	1.79672	0209	0.94	1.79168	0205	0.93	1.79085	0204
0.017	0.95	1.79410	0235	0.93	1.78298	0225	0.92	1.77797	0221
0.020	0.95	1.78940	0272	0.93	1.76739	0251	0.91	1.75532	0239
0.025	0.95	1.77990	0330	0.92	1.73716	0277	0.90	1.71215	0244
0.030	0.95	1.76852	0382	0.90	1.70289	0281	0.88	1.66411	0217
0.035	0.94	1.75561	0426	0.89	1.66576	0260	0.87	1.61348	0155
0.040	0.94	1.74124	0461	0.88	1.62606	0211	0.86	1.56030	0051
0.045	0.94	1.72530	0487	0.87	1.58430	0130			
0.050	0.93	1.70780	0502	0.86	1.54069	0014			
0.055	0.93	1.68954	0507						
0.060	0.93	1.67013	0499						
0.065	0.92	1.64967	0478						
0.070	0.92	1.62859	0445						
0.075	0.91	1.60659	0396						
0.080	0.91	1.58441	0335						
0.085	0.90	1.56131	0257						
0.090	0.90	1.53827	0167						
0.095	0.89	1.51457	0059						

Ferro 境界	
I_F	$\tilde{M}_B H_F$
1.299	000000
1.325	0370
1.35	0720
1.375	1060
1.390	1250
1.40	1380
1.45	2000
1.50	2570

$$k_F = 0.48875$$

Screw A				Screw B			Sine A		
$\tilde{\alpha}$	q_0	I_{crit}	$\tilde{P}_B H_{crit}$	q_0	I_{crit}	$\tilde{P}_B H_{crit}$	q_0	I_{crit}	$\tilde{P}_B H_{crit}$
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	1.71725	0.0052	0.94	1.71659	0.0052	0.94	1.71584	0.0052
0.007	0.94	1.71651	0.0073	0.94	1.71509	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	1.71260	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	0.86	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						
0.075	0.90	1.54047	0.0152						
0.080	0.90	1.52006	0.0077						

Ferro への境界	
I_F	$\tilde{P}_B H_F$
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

表1 (1~6) の No. 6

$$k_F = 0.48500$$

Screw A				Screw B			Sine A		
α	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{nit}$	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{nit}$	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{nit}$
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 境界

Ferro の境界	
I_F	$\tilde{M}_F H_F$
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

$$k_F = 0.50375$$

α	Screw A			Screw B			Sine A		
	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{nit}$	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{nit}$	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{nit}$
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	0057	1.00	2.22305	0057	1.00	2.21925	0057
0.003	1.00	2.22670	0086	1.00	2.21752	0085	1.00	2.20828	0085
0.004	1.00	2.22615	0115	1.00	2.20589	0113	1.00	2.18536	0110
0.005	1.00	2.22554	0144	1.00	2.19637	0139	1.00	2.16958	0135
0.006	1.00	2.22487	0173	1.00	2.18850	0166	0.99	2.15663	0159
0.007	1.00	2.22415	0201	1.00	2.18119	0192	0.99	2.14371	0183
0.008	1.00	2.22326	0230	1.00	2.17403	0217	0.99	2.13071	0205
0.009	1.00	2.22210	0259	1.00	2.16678	0242	0.98	2.11963	0228
0.010	1.00	2.22091	0287	1.00	2.15961	0267	0.98	2.10798	0249
0.011	1.00	2.21952	0315	1.00	2.15231	0291	0.98	2.09554	0269
0.012	1.00	2.21814	0344	1.00	2.14506	0314	0.98	2.08247	0288
0.013	1.00	2.21640	0372	1.00	2.13751	0337	0.97	2.07155	0307
0.014	1.00	2.21482	0400	1.00	2.13010	0360	0.97	2.05991	0324
0.015	1.00	2.21292	0427	1.00	2.12242	0382	0.97	2.04735	0341
0.016	1.00	2.21088	0455	1.00	2.11462	0403	0.97	2.03395	0355
0.017	1.00	2.20876	0482	1.00	2.10675	0423	0.96	2.02211	0370
0.018	1.00	2.20628	0509	1.00	2.09857	0443	0.96	2.01037	0384
0.019	1.00	2.20398	0536	1.00	2.09055	0463	0.96	1.99778	0396
0.020	1.00	2.20138	0563	1.00	2.08227	0481	0.96	1.98425	0406
0.023	1.00	2.19244	0642	1.00	2.05652	0532	0.95	1.94668	0432
0.025	1.00	2.18589	0692	1.00	2.03891	0562	0.94	1.92059	0443
0.027	1.00	2.17851	0742	1.00	2.02067	0589	0.93	1.89552	0450

第 2 表の No. 2

$$k_F = 0.50000$$

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	1.00	2.05756	0.00000	1.00	2.05756	0.00000	1.00	2.05756	0.00000
0.001	1.00	2.05723	0023	1.00	2.05653	0023	1.00	2.05584	0023
0.002	1.00	2.05668	0047	1.00	2.05445	0047	0.99	2.05270	0046
0.003	1.00	2.05583	0070	0.99	2.05170	0070	0.99	2.04846	0069
0.004	1.00	2.05473	0094	0.99	2.04852	0093	0.99	2.04292	0092
0.005	1.00	2.05309	0117	0.99	2.04417	0115	0.98	2.03707	0114
0.006	0.99	2.05193	0140	0.99	2.03989	0138	0.98	2.03072	0135
0.007	0.99	2.05055	0163	0.98	2.03541	0159	0.98	2.02336	0156
0.008	0.99	2.04895	0186	0.98	2.03053	0181	0.97	2.01593	0176
0.009	0.99	2.04709	0209	0.98	2.02497	0202	0.97	2.00796	0196
0.010	0.99	2.04544	0232	0.97	2.01873	0222	0.97	1.99951	0214
0.011	0.99	2.04323	0254	0.97	2.01310	0241	0.96	1.99081	0232
0.012	0.99	2.04123	0276	0.97	2.00729	0261	0.96	1.98202	0249
0.013	0.99	2.03899	0298	0.97	2.00091	0279	0.96	1.97264	0265
0.014	0.99	2.03656	0320	0.97	1.99386	0297	0.95	1.96311	0280
0.015	0.99	2.03381	0342	0.96	1.98688	0314	0.95	1.95345	0294
0.016	0.99	2.03132	0363	0.96	1.98029	0331	0.95	1.94350	0307
0.017	0.99	2.02851	0384	0.96	1.97316	0347	0.94	1.93324	0319
0.018	0.99	2.02553	0405	0.96	1.96549	0362	0.94	1.92312	0331
0.019	0.99	2.02234	0425	0.95	1.95758	0376	0.94	1.91256	0341
0.020	0.99	2.01936	0445	0.95	1.95038	0390	0.93	1.90175	0349
0.023	0.99	2.00894	0504	0.94	1.92584	0426	0.93	1.86912	0369
0.025	0.98	2.00219	0541	0.94	1.90998	0447	0.92	1.84709	0377
0.027	0.98	1.99493	0578	0.94	1.89239	0463	0.91	1.82422	0379

第 2 表の NO. 3

$$k_F = 0.49625$$

Screw A				Screw B			Sine A		
$\tilde{\alpha}$	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{\text{nit}}$	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{\text{nit}}$	q_0	I_{nit}	$\tilde{M}_B H_{\text{nit}}$
0.000	0.97	1.91087	000000	0.97	1.91087	000000	0.97	1.91087	000000
0.001	0.97	1.91078	0018	0.97	1.91091	0018	0.97	1.91105	0018
0.002	0.97	1.91062	0036	0.97	1.91119	0036	0.97	1.91176	0036
0.003	0.97	1.91035	0055	0.97	1.91184	0055	0.97	1.91333	0055
0.004	0.97	1.90997	0073	0.97	1.91407	0074	0.97	1.91814	0074
0.005	0.97	1.90936	0091	0.97	1.91530	0093	0.97	1.92116	0094
0.006	0.97	1.90890	0110	0.96	1.91457	0111	0.96	1.92114	0113
0.007	0.97	1.90817	0128	0.96	1.91309	0129	0.96	1.91886	0131
0.008	0.97	1.90736	0146	0.96	1.91083	0147	0.96	1.91514	0148
0.009	0.97	1.90636	0164	0.96	1.90783	0164	0.95	1.91054	0165
0.010	0.97	1.90540	0182	0.96	1.90438	0181	0.95	1.90548	0182
0.011	0.97	1.90422	0199	0.96	1.90028	0197	0.95	1.89946	0197
0.012	0.97	1.90302	0217	0.95	1.89597	0213	0.95	1.89273	0211
0.013	0.97	1.90167	0234	0.95	1.89155	0229	0.94	1.88593	0225
0.014	0.97	1.90005	0251	0.95	1.88658	0243	0.94	1.87847	0238
0.015	0.97	1.89867	0269	0.95	1.88150	0257	0.94	1.87066	0250
0.016	0.97	1.89689	0285	0.95	1.87575	0271	0.93	1.86233	0261
0.017	0.97	1.89525	0302	0.94	1.87002	0283	0.93	1.85414	0271
0.018	0.97	1.89327	0319	0.94	1.86421	0296	0.93	1.84531	0280
0.019	0.97	1.89146	0335	0.94	1.85828	0307	0.93	1.83619	0288
0.020	0.97	1.88935	0351	0.94	1.85183	0318	0.92	1.82710	0295
0.023	0.96	1.88268	0398	0.93	1.83161	0345	0.91	1.79805	0308
0.025	0.96	1.87766	0427	0.93	1.81745	0359	0.91	1.77827	0312
0.027	0.96	1.87301	0457	0.92	1.80266	0369	0.90	1.75760	0369

第 2 表の NO. 4

$$k_F = 0.49250$$

Screw A				Screw B			Sine A		
$\tilde{\alpha}$	q_0	I_{crit}	$\tilde{M}_B H_{crit}$	q_0	I_{crit}	$\tilde{M}_B H_{crit}$	q_0	I_{crit}	$\tilde{M}_B H_{crit}$
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	1.80587	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 No. 5

$$k_F = 0.48875$$

	Screw A			Screw B			Sine A		
$\tilde{\alpha}$	q_0	I_{crit}	$\tilde{M}_B H_{\text{crit}}$	q_0	I_{crit}	$\tilde{M}_B H_{\text{crit}}$	q_0	I_{crit}	$\tilde{M}_B H_{\text{crit}}$
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

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

$$= \frac{k_F^2}{2\pi^2} \mu_B(H+M)$$

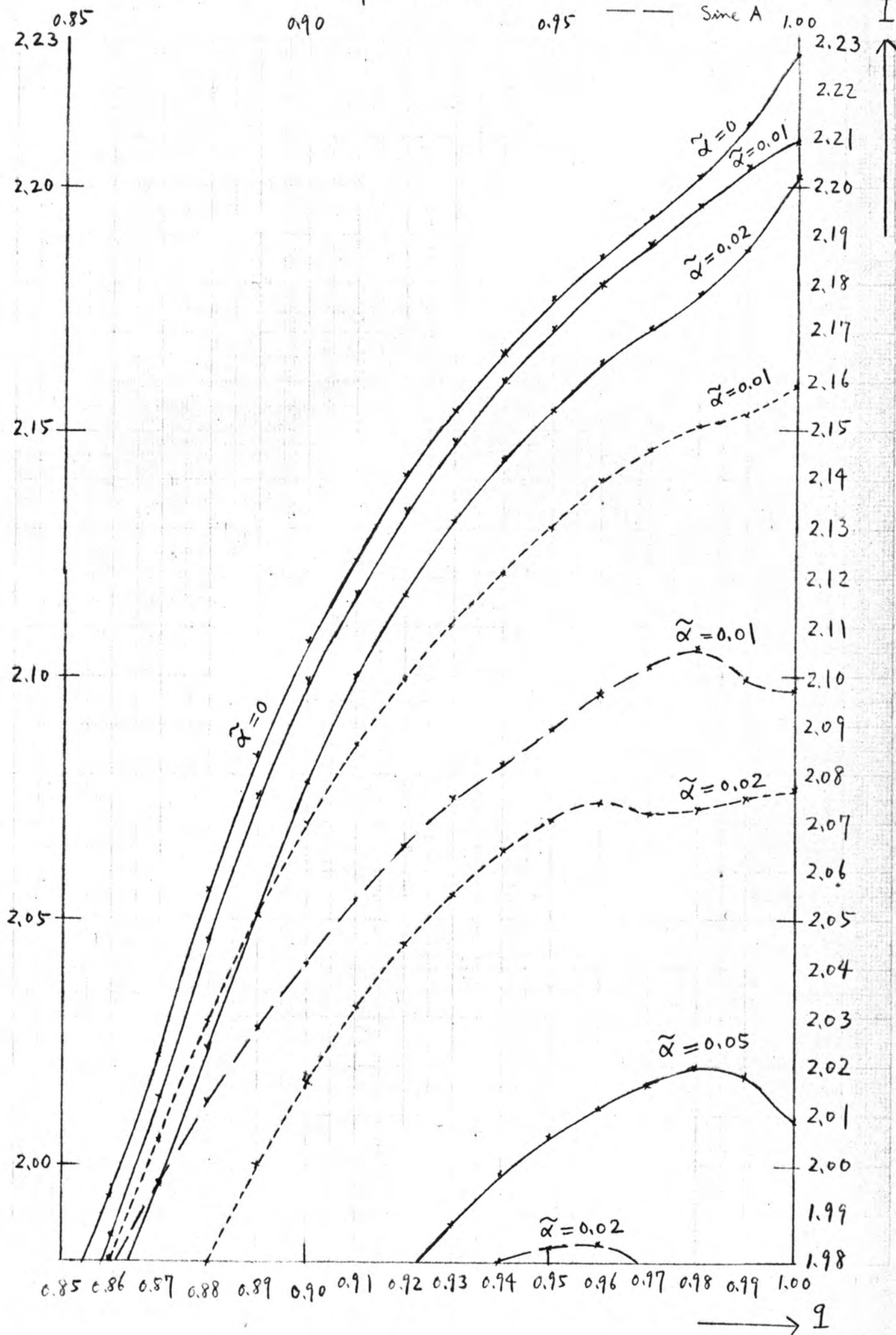
$$k_F = 0.48500$$

	Screw A			Screw B			Sine A		
α	q_0	I_{ent}	$\tilde{\mu}_B H_{ent}$	q_0	I_{ent}	$\tilde{\mu}_B H_{ent}$	q_0	I_{ent}	$\tilde{\mu}_B H_{ent}$
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

第1図のNo. 1

$$k_F = 0.50375$$

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



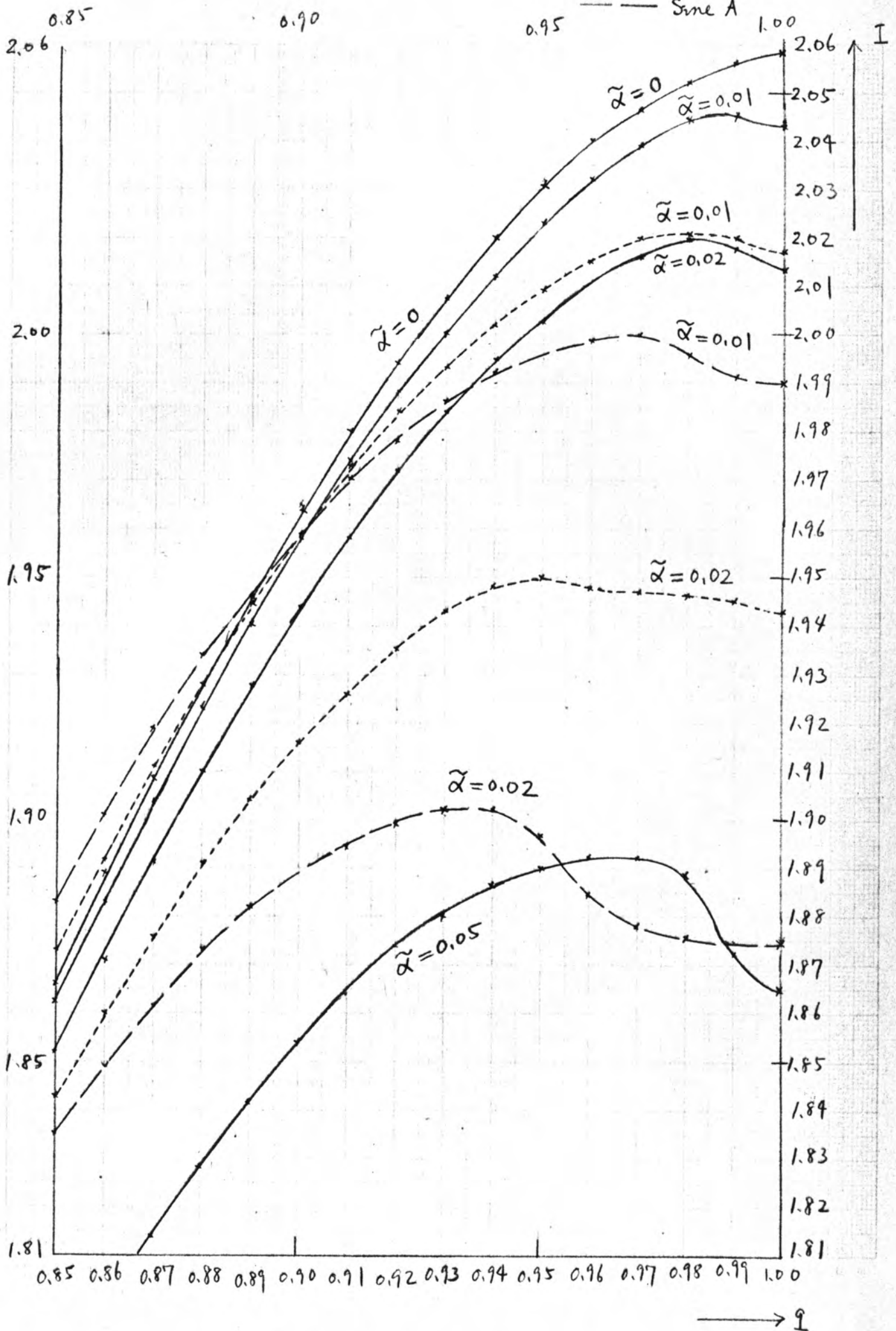
第1図の No.2

$$k_F = 0.50000$$

— Screw A, Sine B

- - - Screw B

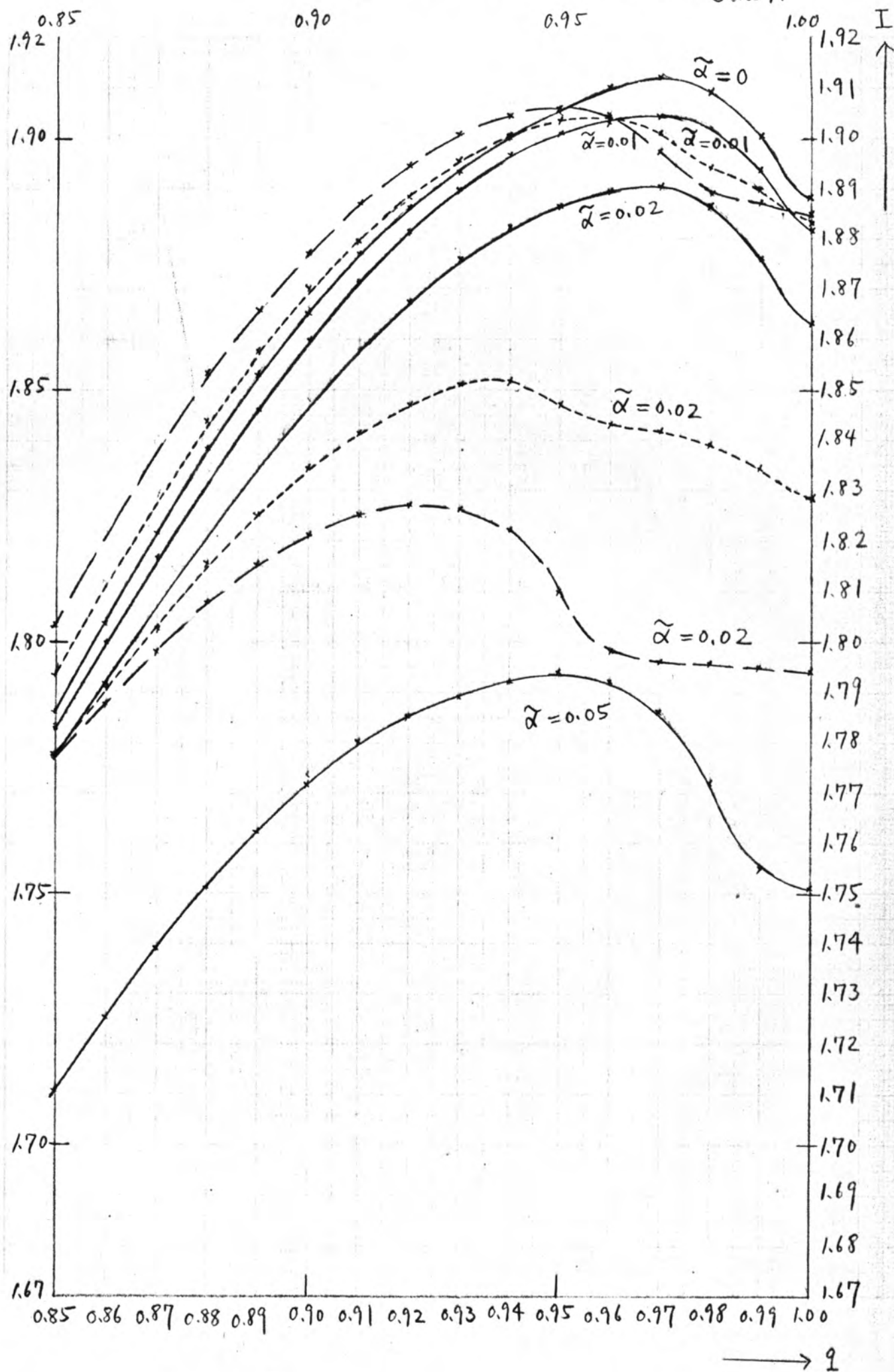
— Sine A



第1図のNo.3

$$k_F = 0.49625$$

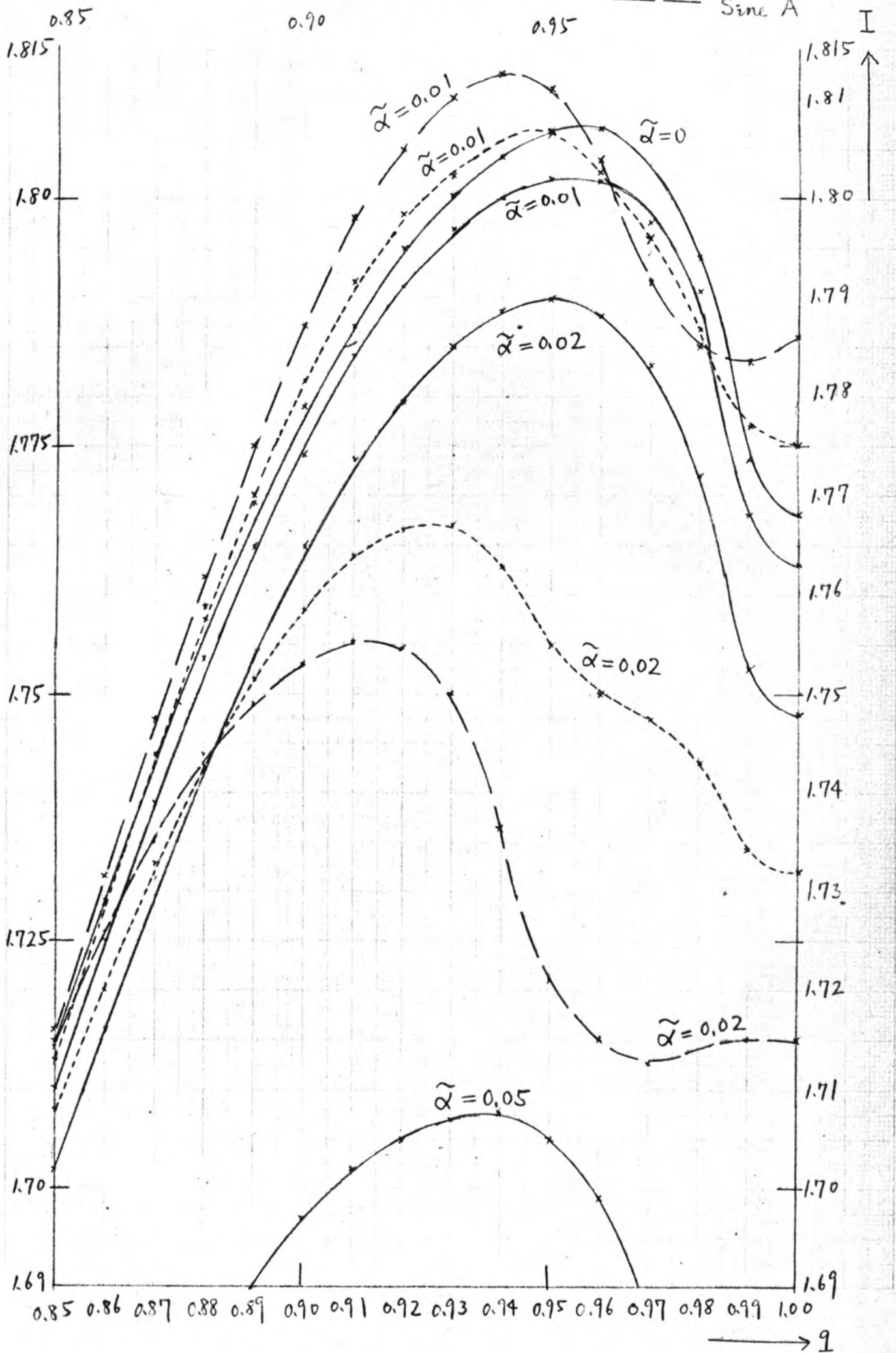
— Screw A, Sine B
 - - - Screw B
 — Sine A



第1図のNO.4

$$R_F = 0.49250$$

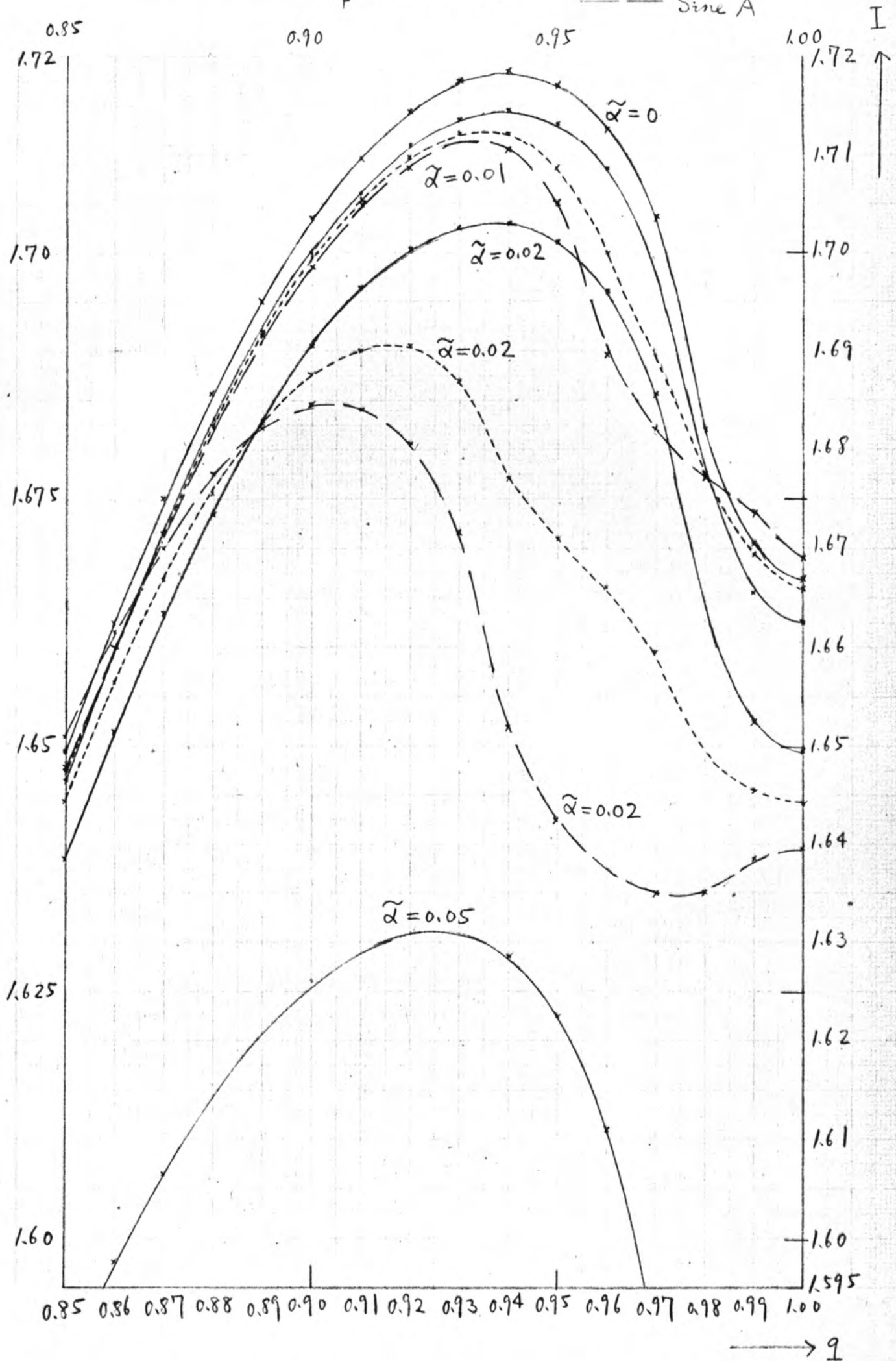
— Screw A, Sine B
 - - - Screw B
 — Sine A



第 1 図 の No. 5

$$k_F = 0.48875$$

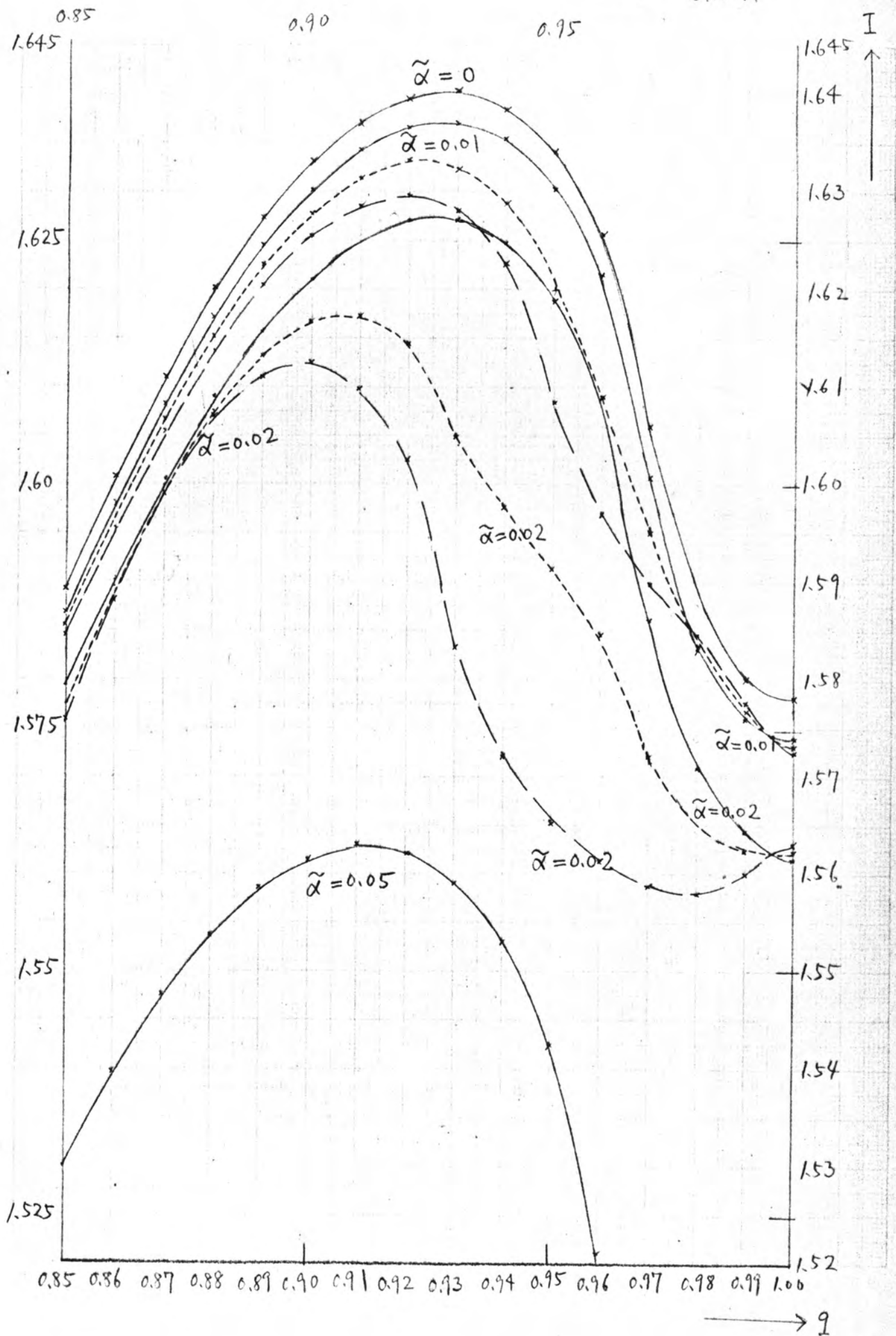
— Screw A, Sine B
 - - - Screw B
 — Sine A



第1図の N.O.6

$$k_F = 0.48500$$

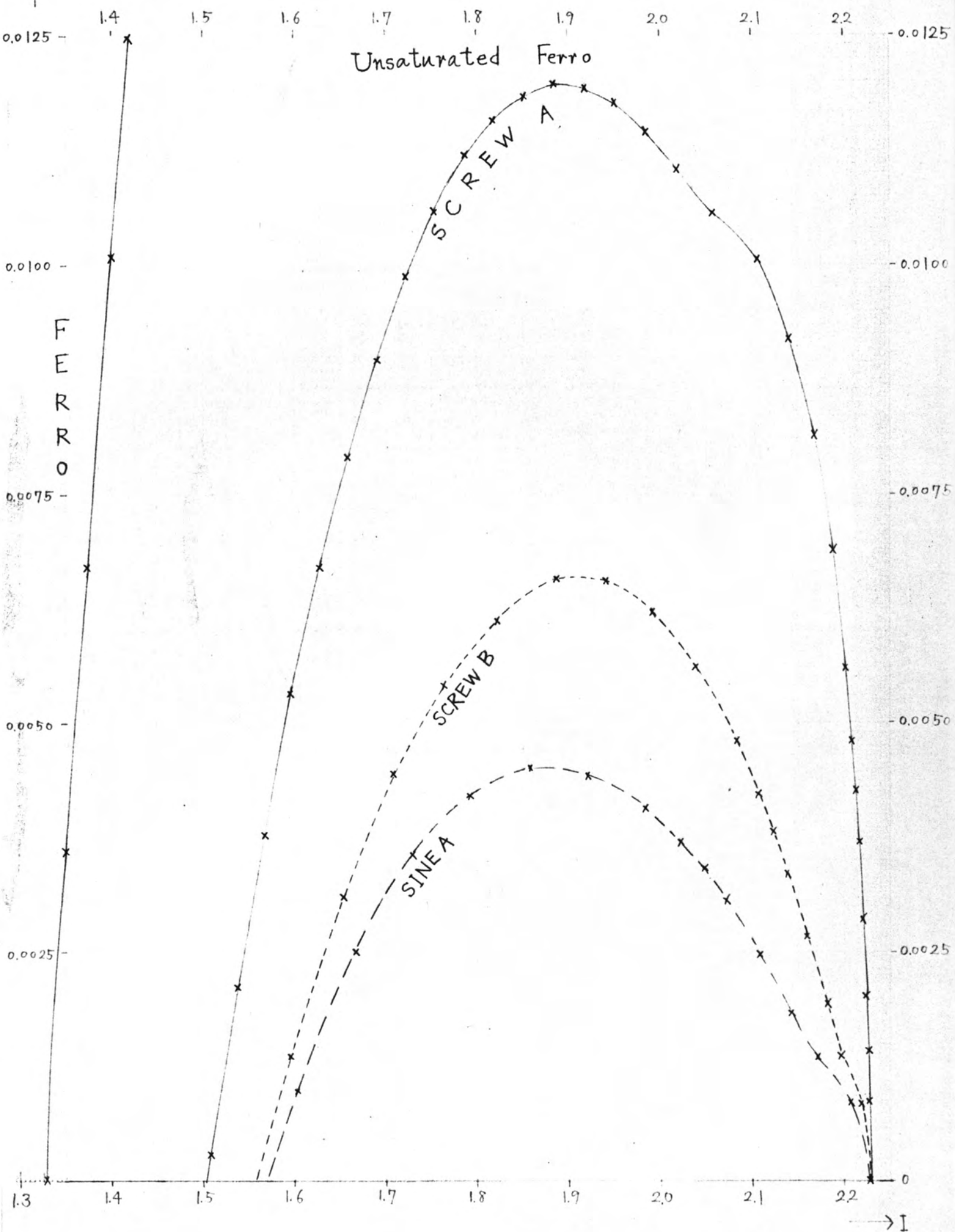
— Screw A, Sine B
 - - - Screw B
 — Sine A



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

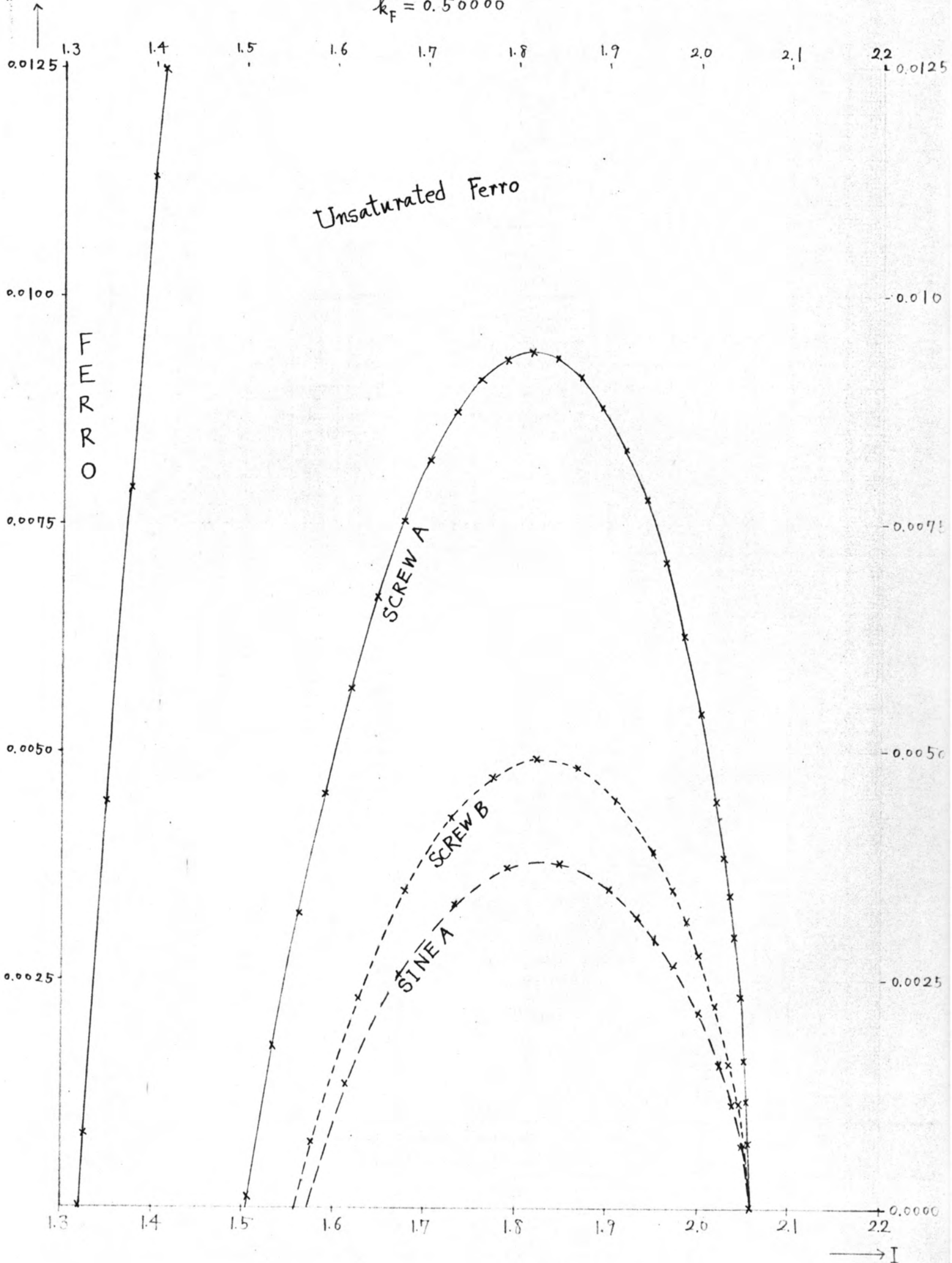
$$k_F = 0.50375$$

第2図の No. 1

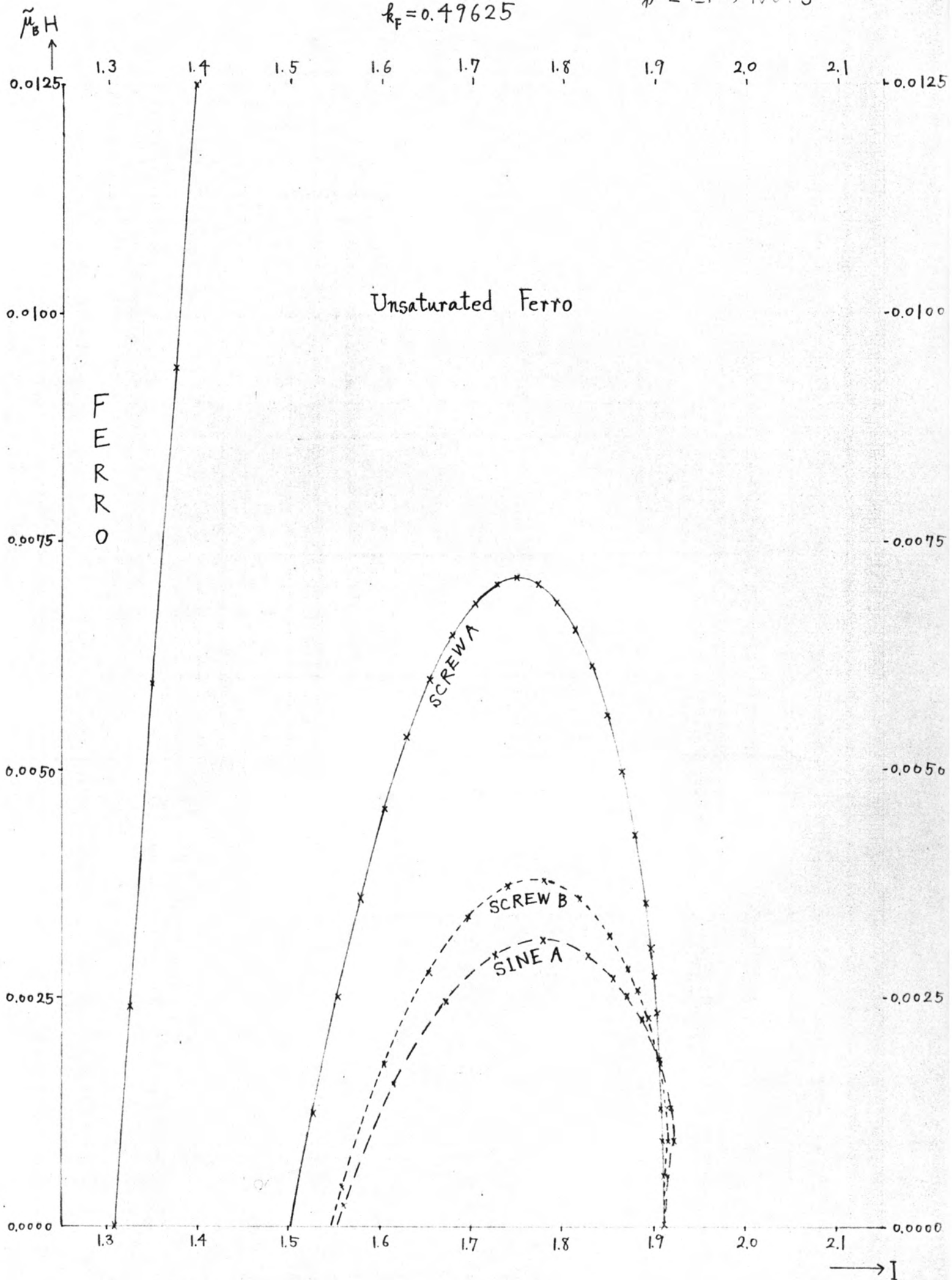


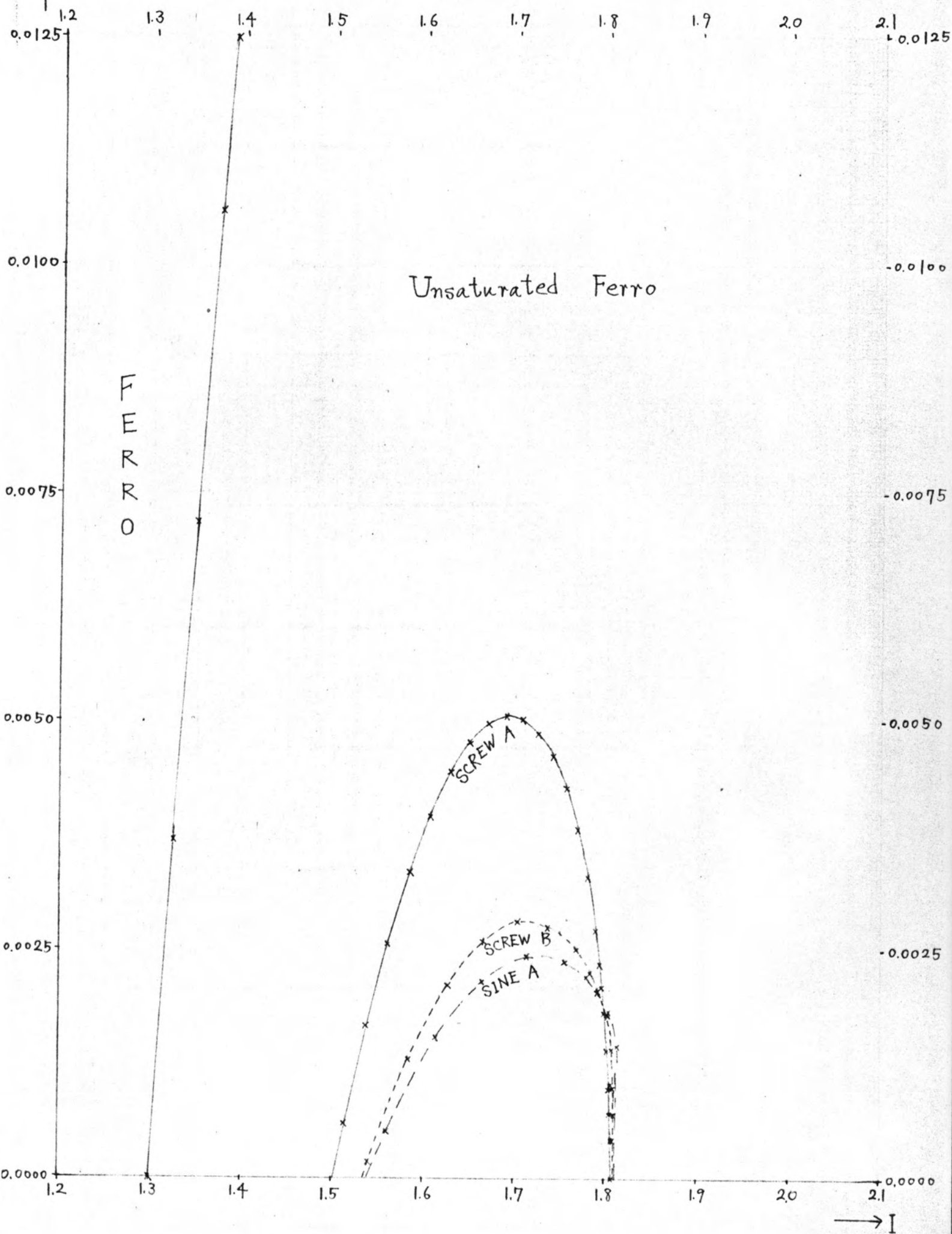
$$k_F = 0.50000$$

$\tilde{\mu}_B H$



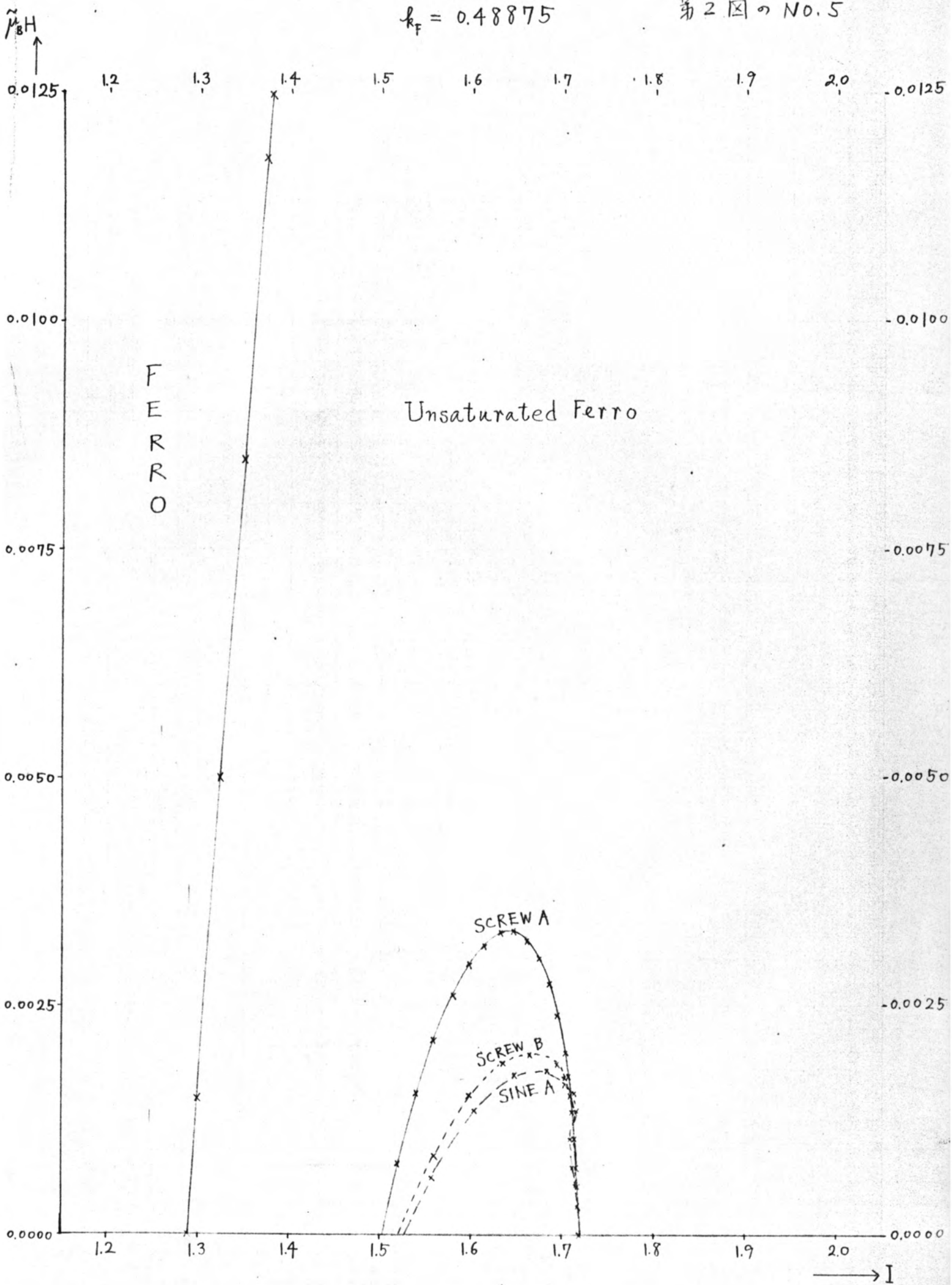
$$k_F = 0.49625$$





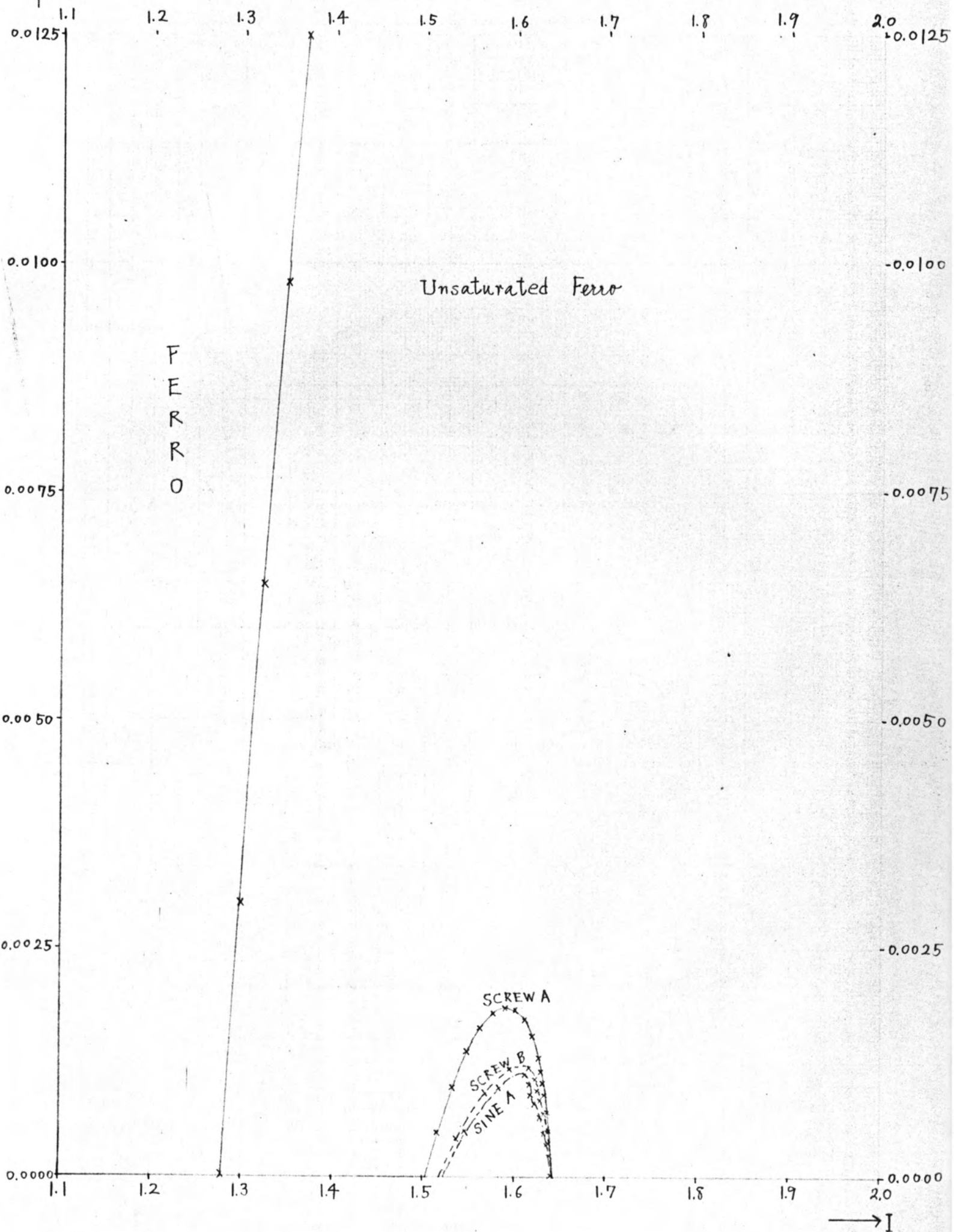
$$k_F = 0.48875$$

第2図の No.5



$$k_F = 0.48500$$

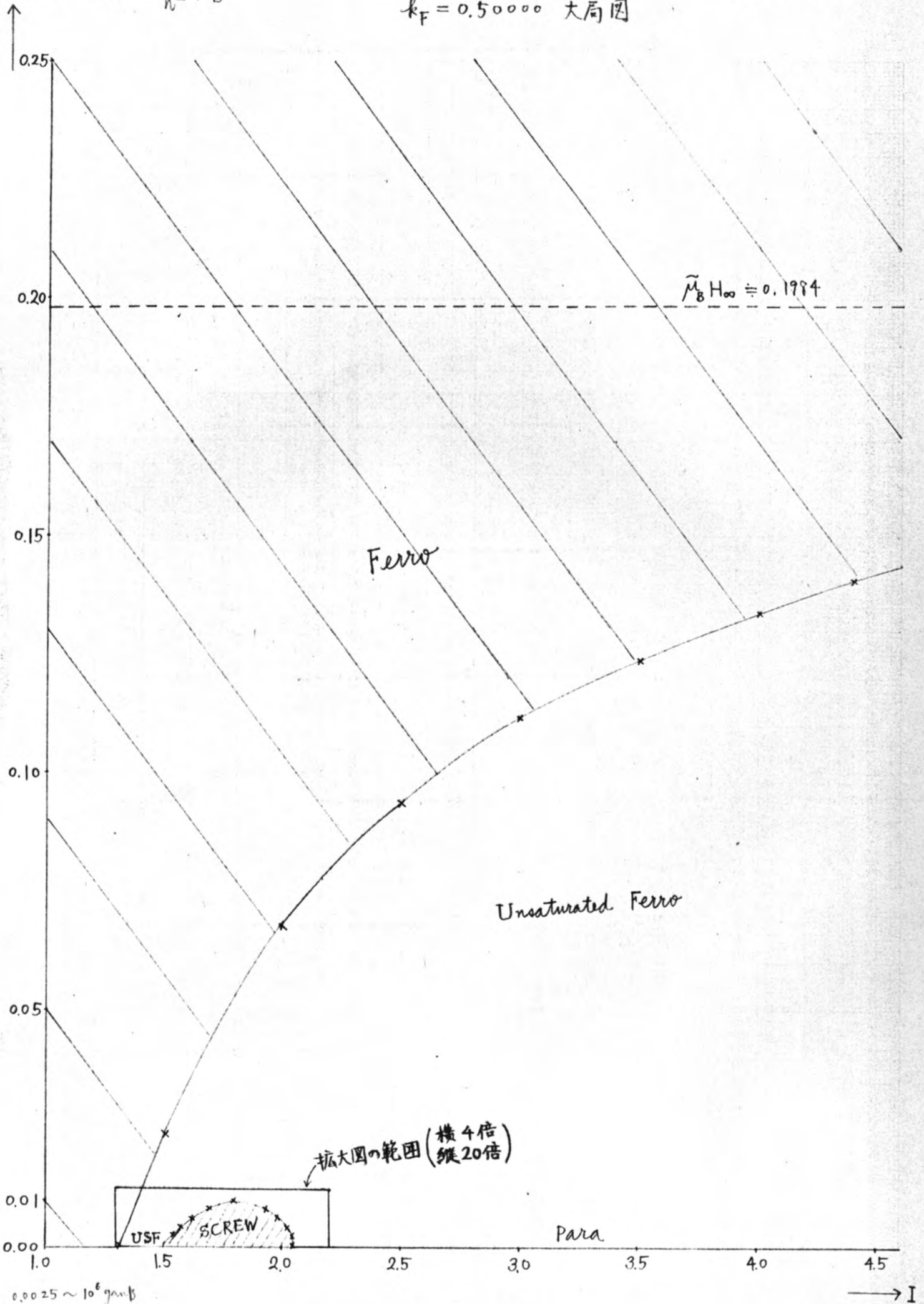
$\tilde{\mu}_0 H$



$k_F = 0.50000$ 大局図

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

$\tilde{\mu}_B H$



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変わるが、SDW が起るのは大体

$$1.5 \leq I \leq 2.0 \quad (4.1)$$

においてである。ここで $I = \frac{1}{U}$ であり

$\frac{\hbar^2}{2m^*} U$ = 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) は次と同値である。

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

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

然し我々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 でそれは 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)をみたし害がない。correlation による補正を入れた 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 S D W は消滅することになる。その critical field の大きさは U 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 U S F 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 U S F に磁場をかけて ferro に変える場合に比べると、S D W に磁場をかけて U S F に変えるのには $1/40$ 位の磁場でもよいわけである。

(1.6) の記号の約束で

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

であるから $\tilde{\mu}_B H \sim 0.005$ は

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

を意味し、 $k_F \approx 0.5$, $\epsilon_F \sim 1 \text{ e.v.} = 1.60 \times 10^{-12} \text{ erg}$, $\mu_B = 0.93 \times 10^{-20} \text{ erg/gauB}$ (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 の磁場をかけない限り S D W は消滅しない。

数百万ガウスは大きな磁場であるが、ferro と U S F との境界磁場に比べればそれども一桁小さく、第3図の大局図で見るとように S D W の安定な領域は狭いものである。

我々の計算では $\mu_B(H+M)$ の値は 0.25 あたりまで取ったのに $\mu_B H$ は 0.005 位にしかならなかった。これは $H+M$ のうちの

大部分が M によることを意味し、外磁場が ferro との境界磁場の $1/40$ 位であつても、スピンの配列から self-consistent に誘

起された M のために S D W はくずれることになる。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ゐないので S D W

は常に安定である。我々の critical field の計算値を実験結果

と比べるとはもう一桁大きい磁場を使わねばならぬ。

次に k_F については、第2図の No.1 ~ No.6 を比べてみると k_F が大きい程 S D W の安定領域は広く、 k_F が小さくなる
と S D W の安定領域は狭くなる。もつとも $k_F > 0.5$ である
と $q=1$ で最安定となるのでこれは S D W 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 S D W 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実験は報告されていない。もつ
とも $10^5 \sim 10^6$ gauss の order の外磁場をひけて観測する必要があ
るわけであるが。

本論文では、（又前の Nagamiya, Motizuki & Yamasaki^[4] 以後 [NMY] として引用する）
 k_F の値としては 0.50375 から 0.48500 までの六個の値について
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 S D W 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 S D W の安定領域は全然なくなつ

てしまふであらう。

k_F の値をもつて広範囲に変えて同様な計算を行なえば
($H=0$ のときだけでよい), 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らう。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、不連続的に変えることがある。本論文では U
 SF (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
示したもののより若干広くなる筈である。

なお第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、それ
は $\uparrow$ スピンと $\downarrow$ スピンの *population* が違うような SDW とも
みかせるし、 USF 状態が SDW のように周期的に *modu-*

late されたものともみさせる。描像としては局在π-メ
ントの cone 構造を頭に浮か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 が行っている^[43]と聞くが、筆者はその詳細を
知らない。我々は、このような phase diagram を作ることを直
接の目標にしなかったが、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。この前の NMY^[4]のよう⁴に 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
も容易な筈である。

現実の Cr では I も k_F も或る特定の数値を取っているで
あろうが、このような 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 面は数個の band にまたがっている。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 を採るべきと解さねばならぬ。

其故にこの phase diagram を現実の金属に対してそのまゝ顕面通りに適用出来るとは言えないだろう。然し仮にこの phase diagram で用いた k_F や I の parameters が不適切であつたとしても、「伝導電子の総数、exchange integral の大きさなど数個の適当な 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らう。

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に思われる。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 *antiferro* になるが、Cr では k_F が適当な
 為に S D W 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

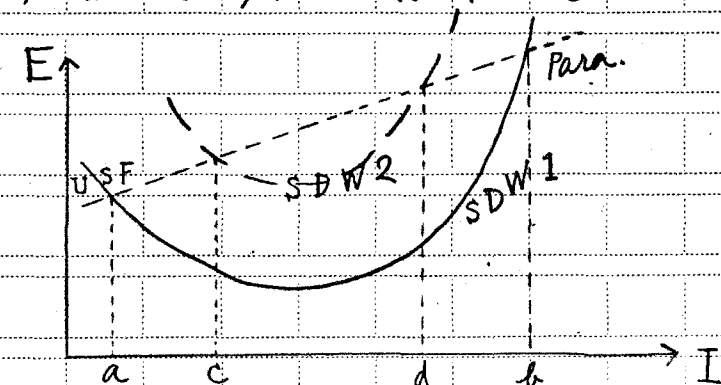
3 4 5 6 7 8 9

勿論、遷移金属の磁性の統一的理解の為には、*phase diagram*
 を作るにしても、 k_F と I とを *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うような姑
 息な手段ではなく、もつとまともに考えるべきであらう。
 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る必要があ
 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 の安定な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ない。これは摂動計算の範囲内では出来ない事であつて、エネルギー比較の爲には四種の 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、次のような方法でこれらの安定性を比較することが考えられる。それは「para や USF に対して安定な領域が広ければ広い程、その SDW は他の型の SDW に対しても安定である。」と言う推測である。例えば右図で SDW 1 の (para ~ USF に対する) 安定領域は a と b の間であり、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 $S D W 1$ の方が安定であると考えるのである。(実際には c, d の間で $S D W 2$ のエネルギー曲線の方が $S D W 1$ のそれより下側に来ることがあるかも知れないけれど、正確なエネルギーの比較が出来ない時点ではこの推測はまず妥当であろう。)

さて、この方針で第2図の No. 1 ~ No. 6 を見て、四種の $S D W$ の安定性を比較しよう。Chapter 1, Chapter 2 で述べたように、磁場が加わった時でも摂動計算の範囲内では Screw A と Sine B との差は起らず、従って (1) Screw A or Sine B (2) Screw B (3) Sine A の三つの場合が、外磁場によって分離される。

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(後述べる例外的な場合を除いて)一般的傾向として Screw A or Sine B の安定領域が最も広いことかわかる。この事は「最安定 SDW が screw or sine or はさまらないけれど、とに角外磁場に対して spin は直角になる」と言うことを意味する。これは Field cooling についての Nathans et al.^[17] の実験とも、又 Arrott et al.^[18] 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 U S F に対する) 安定領域の方が、Screw A or Sine B のそれより外にはみ出してゐる。

$$(1) \quad k_F = 0.49625 \text{ 度} \quad 0 \leq \mu_B H \leq 0.0018$$

$$(2) \quad k_F = 0.49250 \text{ 度} \quad 0 \leq \mu_B H \leq 0.0019$$

$$(3) \quad k_F = 0.48875 \text{ 度} \quad 0.0012 \leq \mu_B H \leq 0.0016$$

§ 1 で述べたように $\mu_B H \sim 0.0018$ は H が百万又は十、万ガウスの 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

較すべきであらう。Watts の実験結果は、低温ではスピンの向きは H が小さいと磁場に平行、 H が大きくなる(十萬ガウス位になる)と磁場と直角になることを *suggest* している。(スピンの向きを直接測ったのではない、*de Haas van Alfen effect* の実験からの推論である。)ところで我々の計算結果でも $k_F = 0.49625$ の 0.49250 とすると、丁度 Watts の実験結果と合うわけである。

我々の計算結果を $T > T_{sf}$ の温度にまで及ぼすのには無理があるが、*rough* に考えれば、Screw A or Sine B の (pair や 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。こゝ考えると $T > T_{sf}$ では Screw A or Sine B が出て来るものと予想され Nathans et al.^{U7)} の実験や Arrott et al.^{B7)} の実験と合う。

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

の差は出て来ない。そこで $H > 0$ 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よう。既に説明した通り、 $k_F = 0.50375, 50000, 48875, 48500$ では $H \neq 0$ で *Screw A* or *Sine B* が最安定となり、 $k_F = 0.49625, 49250$ では *Sine A* がこれに取って代る。前頁で述べたように C_F では k_F が後者の範囲にあると推測すると ^[38] *Watto* の実験結果が説明出来たが、この推測のもとでは又 ($H \rightarrow 0$ 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。」という ^[17] *Shirane, Takei* の実験等、中性子集回折の実験とよく合ふ。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* になるか、*sine* になるか」は答えられない。

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ゐる。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。

screw と sine との安定性を比較する為には、最終的には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きりした結論は出せないし、温度効果を考える為には Fermi-dirac の分布に従って excited state をも考慮して統計力学的計算を行なわねばならぬ。これらをもとに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) の方向の関係については一応の説明がついたが、 $\vec{H}$ 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) に含まれない機構で定まる。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 したらよいかには成案がない。この力は、 $\vec{q}$ が現実には結晶主軸の方向を向いてゐる事から見て、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* かは温度だけによって定
まり他の条件にはよらぬようだが、この力は *longitudinal* と
transverse のいずれか一方を はつきり 安定にする程強い力の
筈である。最終的な *formulation* のもとでは、 $\vec{H}$ と $\vec{\sigma}$ と言うよ
うに *pair* ではなく、 $\vec{H}, \vec{\sigma}, \vec{q}$ の *trio* について方向の関係を
導き出せるようにすべきである。

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えねばならない。
即ち自由電子に z 方向の磁場をかけるとラゼン運動を生
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。

このような事情は *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う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って生ずる反磁性の free energy と、SDW をつぶすに要する energy $\mu_B H_{crit}$ の大きさを比較してみると、次に説明する通りに反磁性の 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 反磁性に伴う free energy F は例えば中村“磁姓”に与えてある。この中の (3.23), (3.31), (3.34) を少し書き換えてまとめると、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu_B H_{crit}} \frac{F}{n} &\sim \frac{Na^2}{n} \frac{(2\pi m^*)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi \hbar)^3} \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \mu_B H E_F^{\frac{1}{2}} \\ &\sim \frac{N}{n} \frac{2\pi}{3} \mu_B H \cdot k_F \\ &\sim 4 \times 0.01 \times 0.5 = 0.02 \end{aligned}$$

但し、自由電子ではないので、(3.23) で m を m^* に置きかえて用いた。又振動項をあらわす (3.34) 式の大きさは、(3.31)

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

§ 3 残された問題

既に § 2 までも所々に *open question* をあげておいたが、こゝでもう一度それらをまとめ更に他の問題点を追加する。但し帯磁率に関係した事は 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* の安定性の比較はなお十分に出ていない。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って解くこと、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 D W が如何に変化するかを考察すること。M・M・N^[5]により T_N (Néel 点) は求めてあるが、もっと詳しく最安定な S D W 構造、磁場に対する挙動など温度効果を入れて計算せぬば実験結果との比較考察が出来ない。

(3) 本論文では無擾動系の 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、この仮定を取除いて実際の Cr 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* をも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 面を単純化したモデルに基づいて S D W を検討する事。これは本質的には *two bands* の縮退で一方は電子の、他方は *hole* の互いに合同な Fermi 面があつて、その間の *interaction* で S D W が生ず

るということのようである。その機構において我々の
single band theory と可成り違ふように見えるから検討を要する。

(4) 本論文では Wannier 函数に well localized の仮定をおいた (即ち二つの電子が同一の atom のまわ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ことば考えられよう。

(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ゐるが、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] のやつたようにいふゆる Bruckner 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ど、本当の U の代りにその effective value U_{eff} でおさかえるだけで話をあきらめるとする方法がある。然しこの様な U の値の補正だけで十分かどうか疑問

同だし、多体問題の一般論で扱っているような^が生の形の correlation の計算を取り入れる事も考えてみるべきだろう。

(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 であるかどうかは検討を要する。これは我々のモデル（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質をついてゐるかどうかと言う事に関連してゐる。別のモデルで別の parameters を用いて同様な phase diagram が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) を用いたのでは 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 の区別ははっきりしてゐ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 $\vec{\sigma}$ の方向の関係をきめるような力を Hamiltonian の中に含めるべきである。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なわれるであ
らう。(我々の立場から言えば、異方性の説明も現象論的
なものであつてはかゝらず、電子間の相互作用の段階迄戻
つて基本原理から導き出すべきである。)

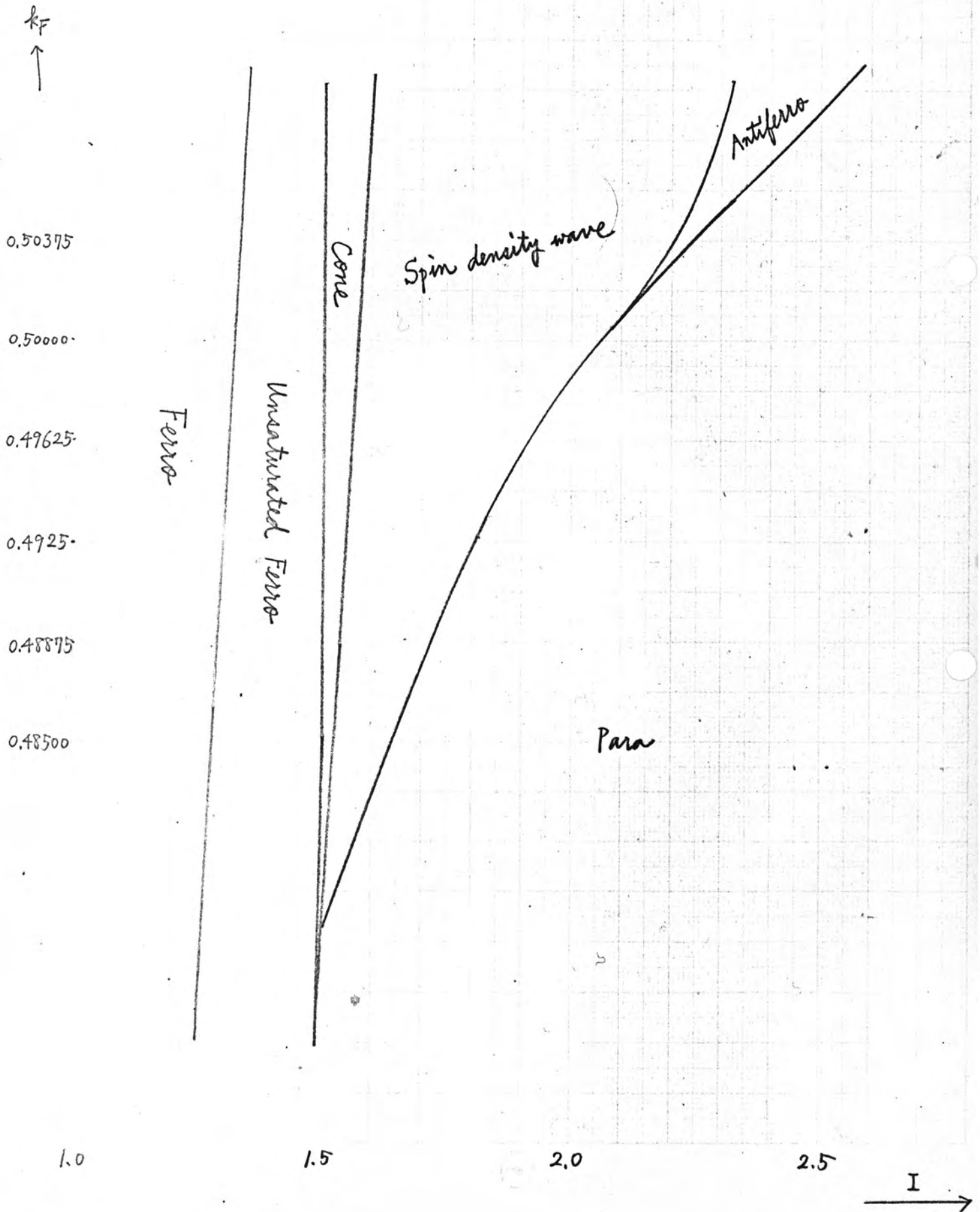
(8) §2 の最後に、Landau 反磁性の影響を order 的に検討し
、無視しても差支えないと判断したが、これは rough discus-
sion にすぎず、正確にはやはり詳しい考察が必要である。
L と H の相互作用を Hamiltonian にまともにとり入れるのは取
扱ひ困難ではあるが、将来の問題としては考えるべきで
ある。

(9) Shull & Wilkinson^[8] の Cr の powder での実験で Néel 英が高く ($\sim 475^\circ\text{K}$)
出た事、Bjerrum Møller, Blinowski, Mackintosh & Brun^[22] の実験で Néel 英以上でも
moment の或種の ordering が見出された事等は strain の存在の爲に
起つた異常かも知れない。計算によつて「適当な strain が
あれば Néel 英が上るか、又は Néel 英の上に何等かの ordering
を許すような (para でも S D W でもない) 別の type の magne-

tic phase が生ずるか」が理論的に導き出せれば興味がある。
う。(もし否定的結果に終つても、現在のようないま
の推論を許すよりはむしろましである。)

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

S D W に外磁場が加わった場合の一体化 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 に対して帯磁率 χ を計算することになる。

先ず外磁場 $H=0$ の場合を考える。一体化 Hamiltonian は、

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

であるが、 $\mathcal{H}_{SDW}$ を摂動とみなさないので 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ない。そ

の理由は $\mathcal{H}_0$ 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、無限に続くみうである。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 $\bar{\mathcal{H}}_1$ で不変であり、Matrix の対角化は結局二次の Matrix について行ないさえすればよい。($\bar{\mathcal{H}}_1$ の Matrix element については Part I, Chap. 1 の終りの一覧表を参照)

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

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

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

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

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

これより $\bar{\mathcal{H}}_1$ の固有函数と固有値は (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)

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

固有値

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

(1.5)

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

$$\text{sgn } x = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ -1 & \text{if } x < 0 \end{cases} \quad (1.6)$$

(1.5) でおみえるように $\bar{\mathcal{H}}_1$ の固有値は、 $x^{\pm}(\vec{k})=0$ 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} は g の函数となるが g について微分して 0 とおくことにより、最安定

の screw 構造が求まる。このようにして条件；

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

が得られる。これは本来は U を与えて q を定める方程式であるが、逆に q を与えて対応する I を計算する式と見た方が扱いやすい。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 q と E_c を定めるわけである。 q を先ず与えたときみたと (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う条件をあらわす。

以上のようにして最安定な screw 構造を (摂動によらず) exact に求めることが出来る。この方針で数値計算を行なった結果は [] に記してある。

§ 2 垂直帯磁率の計算方法

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 になると思われる。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。

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

ただし $\mathcal{H}_{\text{SDW}}$ は (1.2) で与えられる。

この $\bar{\mathcal{H}}_1$ に対しても、§ 1 (= 磁場がないとき) と全く同様な手順で、固有函数と固有値が exact に求められる。

固有函数

$$\phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) = \cos \vartheta_{\vec{k}}^{\pm} \varphi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) + \sin \vartheta_{\vec{k}}^{\pm} \varphi_{\vec{k} \pm (\vec{q} + \vec{k})}^{\mp}(\vec{r}) \quad (1.10)$$

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

固有値

$$\left. \begin{aligned} E^{\pm}(\vec{k}) &= E(\vec{k}) + x^{\pm}(\vec{k}) - \text{sgn}(y^{\pm}(\vec{k})) \sqrt{\{y^{\pm}(\vec{k})\}^2 + g^2} \\ y^{\pm}(\vec{k}) &= x^{\pm}(\vec{k}) \mp \mu_B(H+M) \end{aligned} \right\} \quad (1.11)$$

$E^{\pm}(\vec{k})$ 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

$$\left. \begin{aligned} E_{total} &= \sum_{E^+(\vec{k}) \leq E_c} E_1^+(\vec{k}) + \sum_{E^-(\vec{k}) \leq E_c} E_1^-(\vec{k}) \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\substack{E^+(\vec{k}) \leq E_c \\ E^+(\vec{k}') \leq E_c}} E_2^{++}(\vec{k}, \vec{k}') + \sum_{\substack{E^-(\vec{k}) \leq E_c \\ E^-(\vec{k}') \leq E_c}} E_2^{--}(\vec{k}, \vec{k}') + 2 \sum_{\substack{E^+(\vec{k}) \leq E_c \\ E^-(\vec{k}') \leq E_c}} E_2^{+-}(\vec{k}, \vec{k}') \right\} \end{aligned} \right\} \quad (1.12)$$

の形に書かれる。ただし

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

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

q は (1.7) で定まる値 (=外磁場がないときの値) に fix
して $H+M \equiv \alpha$ 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;

$$\tilde{\mu}_B M = \frac{U}{2N} \left\{ \sum_{\epsilon(\vec{k}) \leq E_c} \frac{|y^-(\vec{k})|}{\sqrt{(y^-(\vec{k}))^2 + q^2}} - \sum_{\epsilon^+(\vec{k}) \leq E_c} \frac{|y^+(\vec{k})|}{\sqrt{(y^+(\vec{k}))^2 + q^2}} \right\} \quad (1.13)$$

$\equiv J$ とおく。

が得られる。

(1.13) は本来は、 H を与えて M を求める方程式であるが
Part I で考えたと同じように $\alpha \equiv H+M$ を与えにと考える方が
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) で定まる値を代入) ので M が求まるが、この M は
外磁場 $\alpha-M$ に対応する値である。

このような手続で (α を用いて間接的に) M を H の函
数として計算出来る。

ところでこの電子集団は、 z 軸の負の方向を向く $\vec{H}$ の方向に次の式で与えられる磁化をもつ。

$$\mu_{total} = \mu_B \left\{ \sum_{\vec{k}^+ \in E_c} \langle \phi_{\vec{k}}^+ | -\sigma_z | \phi_{\vec{k}}^+ \rangle + \sum_{\vec{k}^- \in E_c} \langle \phi_{\vec{k}}^- | -\sigma_z | \phi_{\vec{k}}^- \rangle \right\} \quad (1.14)$$

(1.10), (1.11) を代入して、この中括弧の中を計算してみると、それは (1.13) の中括弧の中と同じ式になることがわかる。

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

$$\mu_{total} = \frac{2N}{U} \mu_B J(\alpha) \quad (1.15)$$

(1.13) 自身も

$$\tilde{\mu}_B M = J(\alpha) \quad (1.16)$$

と書きなおされる。

(1.15) より

$$\frac{d\mu_{total}}{dH} = \frac{2N}{U} \mu_B \frac{dJ}{d\alpha} \frac{d\alpha}{dH} \quad (1.15)'$$

(1.16) より

$$\tilde{\mu}_B \frac{dM}{dH} = \frac{dJ}{d\alpha} \frac{d\alpha}{dH} \quad (1.16)'$$

(1.16)' 式の左辺に $M = \alpha - H$ を代入して

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

これを (1.15)' に代入して

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

(1.17) が垂直帯磁率を求める式となる。

かくて単位質量あたりの垂直帯磁率 $\chi_{\perp}$ は

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

とあらわされる。こゝに m_0 はイオンの質量である。そこであとは $J'(0)$ の計算だけが残ったことになる。

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。

そのために先ず (1.13) の $J(\alpha)$ の計算で、和を積分にかきかえたものを考える。

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

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

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

れる。それらを $J_1'(\alpha)$ 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、

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

(2.2) で $\alpha = 0$ において積分すると

$$J_1'(0) = \frac{U}{V} \mu_B q^2 \iiint_{E^+(\vec{k}) \leq E_c} \frac{\operatorname{sgn}(x^+(\vec{k}))}{\{(x^+(\vec{k}))^2 + q^2\}^{3/2}} d^3 \vec{k} \quad (2.3)$$

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

$$J_2'(0) = \frac{U}{V} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} \left(\iiint_{E^+(\vec{k}) \leq E_c} - \iiint_{E^+(\vec{k}) \leq E_c} \right) \frac{|x^+(\vec{k})|}{\sqrt{(x^+(\vec{k}))^2 + q^2}} d^3 \vec{k} \quad (2.4)$$

となる。

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

同じように第一 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なおす。

§ 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

$$J_1'(0) = \frac{U}{V} \mu_B g^2 \iiint_{\substack{E^+(\vec{k}) \leq E_c \\ \text{region 1}}} \frac{\text{sgn}(x^+(\vec{k}))}{\{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2\}^{3/2}} d^3 \vec{k} \quad (2.5)$$

$$J_2'(0) = \frac{U}{V} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} \left(\iiint_{\substack{E^+(\vec{k}) \leq E_c \\ \text{region 1}}} - \iiint_{\substack{E^+(\vec{k}) \leq E_c \\ \text{region 1}}} \right) \frac{|x^+(\vec{k})|}{\sqrt{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2}} d^3 \vec{k} \quad (2.6)$$

を計算することとなる。これらを計算した後、 $J_1'(0) + J_2'(0) \equiv J'(0)$ 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 と同じように $-(\vec{q} + \vec{K})$ の方向を z 軸とするように座標変換を行なうと

$$\left. \begin{aligned} \chi^+(\vec{k}) &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \kappa \left(k_z - \frac{\kappa}{2} \right) \\ \text{where } \kappa &= |\vec{q} + \vec{K}| \end{aligned} \right\} \quad (2.7)$$

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

$$E^+(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \vec{k}^2 - \kappa \left(k_z - \frac{\kappa}{2} \right) + \text{sgn} \left(k_z - \frac{\kappa}{2} \right) \sqrt{\kappa^2 \left(k_z - \frac{\kappa}{2} \right)^2 + \tilde{q}^2} \right\} \quad (2.8)$$

$$E^-(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \vec{k}^2 - \kappa \left(k_z - \frac{\kappa}{2} \right) + \text{sgn} \left(k_z - \frac{\kappa}{2} + \frac{\tilde{\mu}_B \alpha}{\kappa} \right) \sqrt{\kappa^2 \left(k_z - \frac{\kappa}{2} + \frac{\tilde{\mu}_B \alpha}{\kappa} \right)^2 + \tilde{q}^2} \right\} \quad (2.9)$$

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

となる。これより (2.5) や (2.6) の積分領域は z 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，円錐でおきかえる．例えば (2.5) の積分領域「 $E^+(\vec{k}) \leq E_c$ ，かつ region 1」は

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

$$\text{where } (k_p(k_z))^2 = \text{Min} \left\{ \frac{5}{4} k_z^2, \frac{2m^*}{\hbar^2} E_c - k_z^2 + \kappa(k_z - \frac{\kappa}{2}) - \text{sgn}(k_z - \frac{\kappa}{2}) \sqrt{\kappa^2(k_z - \frac{\kappa}{2})^2 + \tilde{g}^2} \right\} \quad (2.12)$$

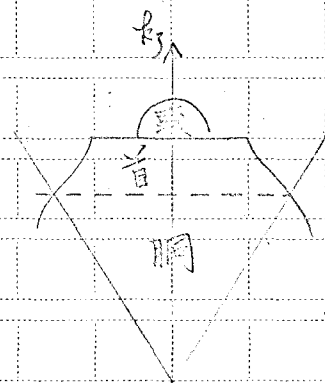
となる．上式 $\{ \}$ の中の二項が等しくなるように $k_z (> 0)$ の値を k_z^0 として， $0 \leq k_z \leq k_z^0$ の範囲を胴部， $k_z^0 \leq k_z \leq \frac{\kappa}{2}$ の部分を首部， $k_z \geq \frac{\kappa}{2}$ の部分を頭部と呼ぶことにしよう．

(2.5) の積分は，胴首部頭の各々において一重積分にがおされる．この際

被積分函数は (k_z の分数式) $\div$ (k_z 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，

$$k_r \leq k_p(k_z, \alpha) \quad (2.13)$$



$$\text{where } (k_p(k_3, \alpha))^2 = \text{Min} \left\{ \frac{5}{4} k_3^2, \frac{2m^*}{\hbar^2} E_c - k_3^2 + \kappa \left(k_3 - \frac{\kappa}{2} \right) - \text{sgn} \left(k_3 - \frac{\kappa}{2} + \frac{\tilde{\mu}_B \alpha}{\kappa} \right) \sqrt{\kappa^2 \left(k_3 - \frac{\kappa}{2} + \frac{\tilde{\mu}_B \alpha}{\kappa} \right)^2 + \tilde{g}^2} \right\} \quad (2.14)$$

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 のみ depend するものとみら

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

を得る。ただし $\hbar$ は積分領域の頭部の先端から円錐の頂尖までの距離である。

(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 $g_2'(0)$ が求まる。なお α 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、これらの影響は $J(\alpha)$ には α について高次の無限小び入って来るので $J'(0)$ には寄与しない。

以上で $g_1'(0)$ 及び $g_2'(0)$ 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く。

$$J'(0) \equiv g_1'(0) + g_2'(0)$$

$$= \frac{U}{V} \tilde{\mu}_B \left\{ \pi(\delta + \varepsilon) - \frac{\pi}{2\beta} \left\{ (k_c^2 + \gamma^2 - \beta^2) \left(\frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 + \gamma^2}} - \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} \right) + \gamma^2 \log_e \frac{\delta + \sqrt{\delta^2 + \gamma^2}}{|\varepsilon| + \sqrt{\varepsilon^2 + \gamma^2}} \right\} \right. \\ \left. + \frac{5\pi}{8\beta} \left\{ \beta \sqrt{\beta^2 + \gamma^2} - \frac{2\beta\gamma^2}{\sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} - (\beta^2 - \gamma^2) \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} + \gamma^2 \log_e \frac{\beta + \sqrt{\beta^2 + \gamma^2}}{\delta + \sqrt{\delta^2 + \gamma^2}} \right\} \right\} \quad (2.17)$$

(2.17) 右辺にあらわれた記号の意味は下記の如くである。

$$\beta = \frac{\kappa}{2} = \frac{|\vec{q} + \vec{k}|}{2}, \quad \gamma = \frac{\tilde{q}}{\kappa} \quad (2.18)$$

$$E_c = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_c^2 \quad \text{すなわち} \quad k_c = \sqrt{\frac{2m^* E_c}{\hbar^2}} \quad (2.18)$$

$$\delta = \frac{\kappa}{2} - k_j = \text{首部の高さ}$$

$$\varepsilon = k - \frac{\kappa}{2} = \text{頭部の高さ}$$

δ と ε は次の式で定まる。

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

$$\text{where } \delta^{(0)} = \beta - \frac{2}{3} k_c, \quad \delta^{(1)} = \frac{\kappa}{9 \delta^{(0)} (\delta^{(0)} - \beta)}, \quad \delta^{(2)} = -\frac{9}{64} \frac{\delta^{(1)3}}{\beta^2} (3 \delta^{(0)} - \beta)^2 \quad (2.20)$$

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

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

Chapter 3 Results

(1.18) において $\tilde{\mu}_B = (2m^*/\hbar^2)\mu_B$ であるが、有効質量 m^* を消去するため $(\hbar^2/2m^*)k_F^2 = \epsilon_F$ (ϵ_F は Fermi energy) の関係を代入すると (1.18) は次のように書きなおされる。

$$\chi_{\perp} = \frac{2k_F^2 \mu_B^2}{m_0 \epsilon_F U} \frac{J'(0)}{\tilde{\mu}_B - J'(0)} \quad (3.1)$$

(2.17) 式で見えてわかるように $J'(0)$ は $\tilde{\mu}_B$ に比例するから $J'(0)/\{\tilde{\mu}_B - J'(0)\}$ は $\tilde{\mu}_B$ を含まず従って m^* を含まない。だから (3.1) は m^* を消去した $\chi_{\perp}$ の表式になっている。

我々は Chapter 2 で説明した方法で $J'(0)$ を電子計算機によって数値計算し、これを (3.1) に代入して $\chi_{\perp}$ を求めた。

数値計算に際して必要な長及び $I = 1/U$ の数値は、[4]の結果を用いた。従ってパラメータを動かす範囲も[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_g は (k_F の値に よって異なるが) 大体 0 から 0.20 位までの間
を動かしてゐる. ($q = (\hbar^2/2m^*)k_g^2$)

k_F をきめておくと, $I = 1/U$ さえ与えれば最安定 screw 構
造として k_g も q も定まる筈で従つて $\chi_\perp$ 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
用いて, $\chi_\perp \sim I$ curve を作った. graph は k_F ごとに一枚で, 横
軸に I を, 縦軸には

$$\frac{m_0 E_F}{2\mu_B^2} \chi_\perp = \frac{k_F^2}{U} \frac{J'(0)}{\mu_B - J'(0)} \quad (3.2)$$

を取った.

グラフのうち実線は準安定 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 $\chi_\perp$, 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え
た.

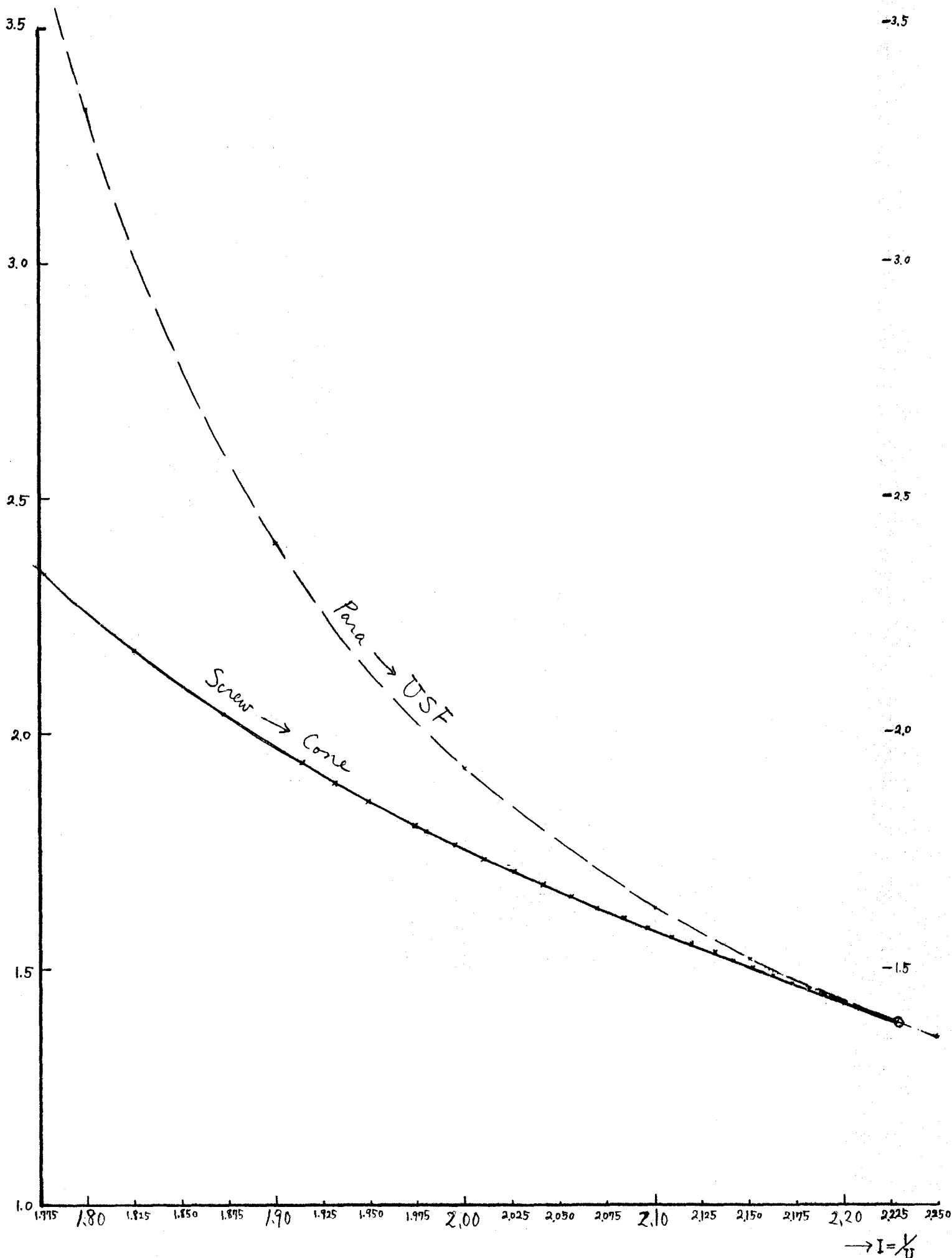
$$\chi_L \times \frac{m_0 \epsilon_F}{2\mu_B^2}$$

χ -I curve

$$k_F = 0.50375$$

—— 最安定 Screw

—— Spin para

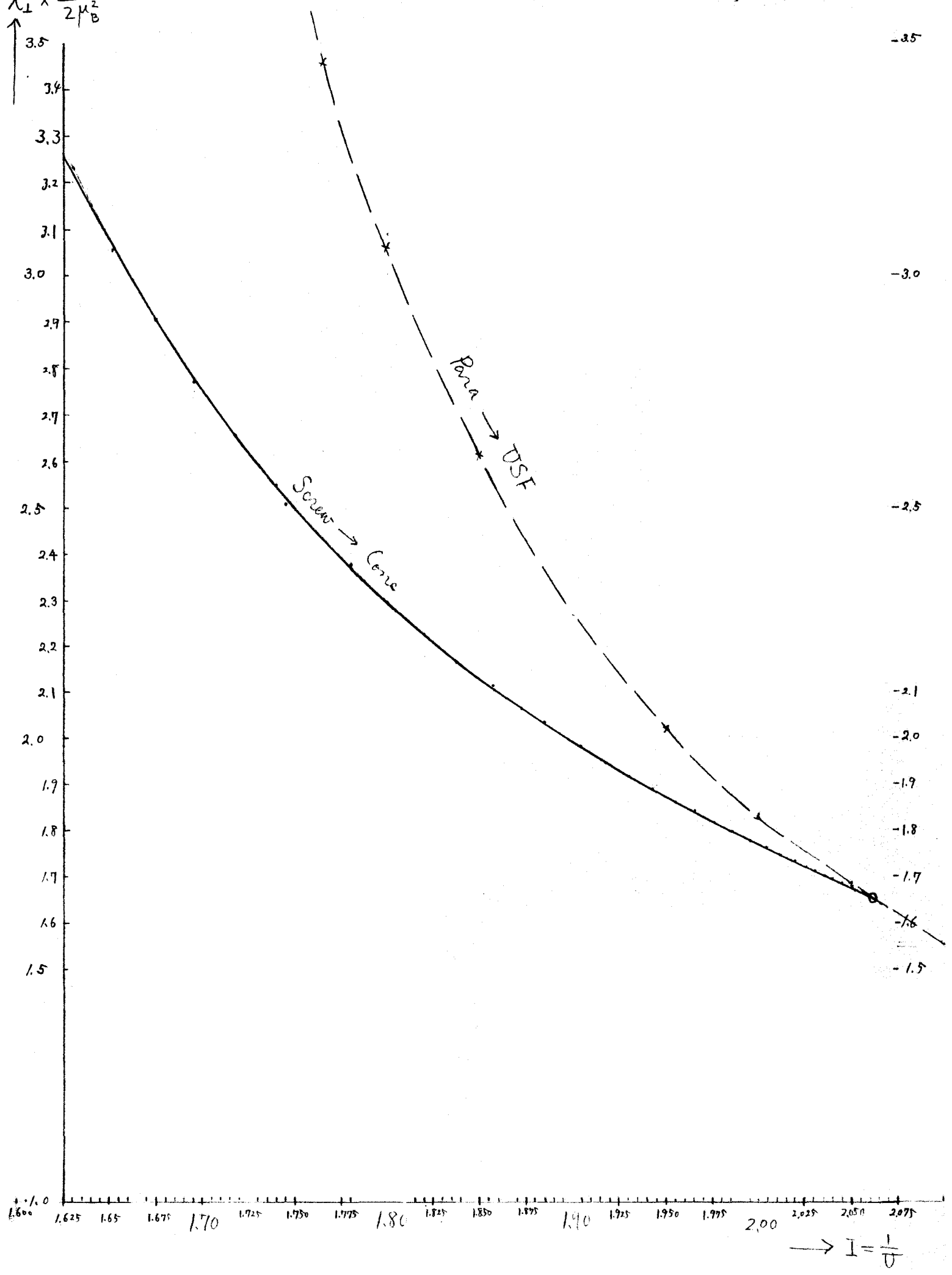


$\chi_1 \times \frac{m_0 c_F}{2 \mu_B^2}$

χ -I curve

$k_F = 0.50000$

—— 最安定 Screw
 —— Spin para

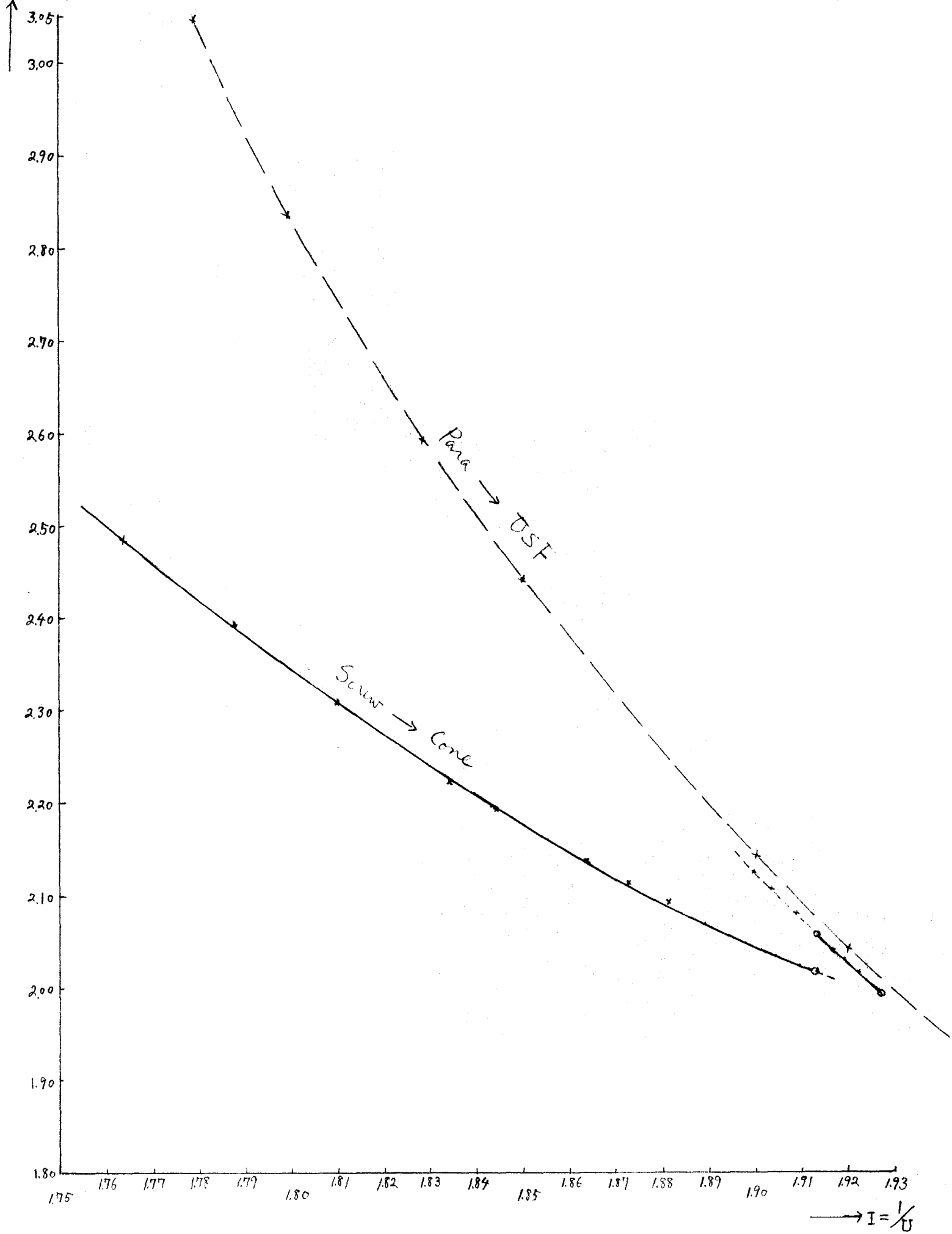


χ -I curve

$$k_F = 0.49625$$

- 最安定 Screw
- - - 半安定 Screw
- Spin para

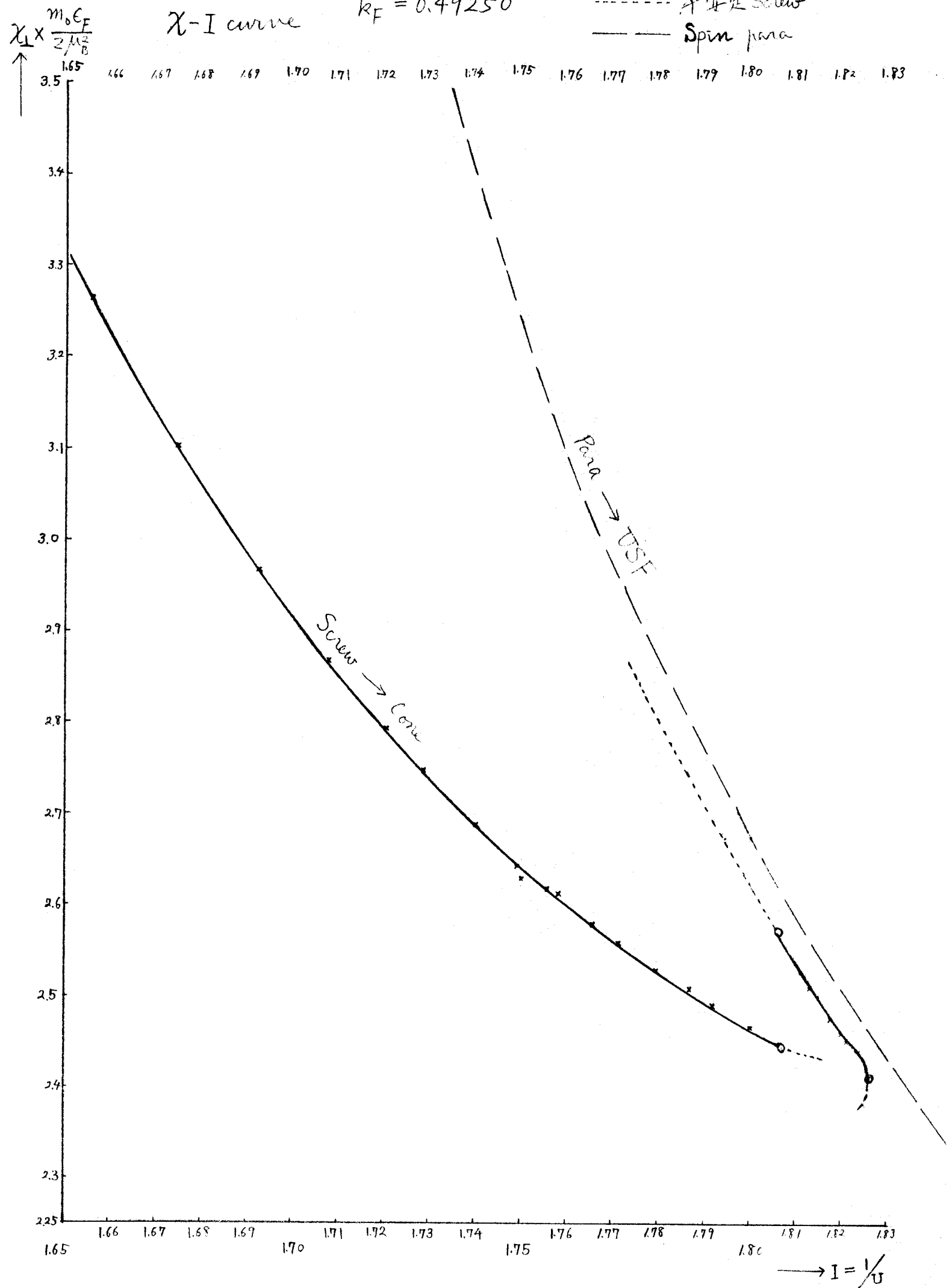
$$\chi_{\perp} \times \frac{m_0 e_F}{2\mu_B^2}$$



χ -I curve

$$k_F = 0.49250$$

- 最安定 Screw
- 準安定 Screw
- Spin para

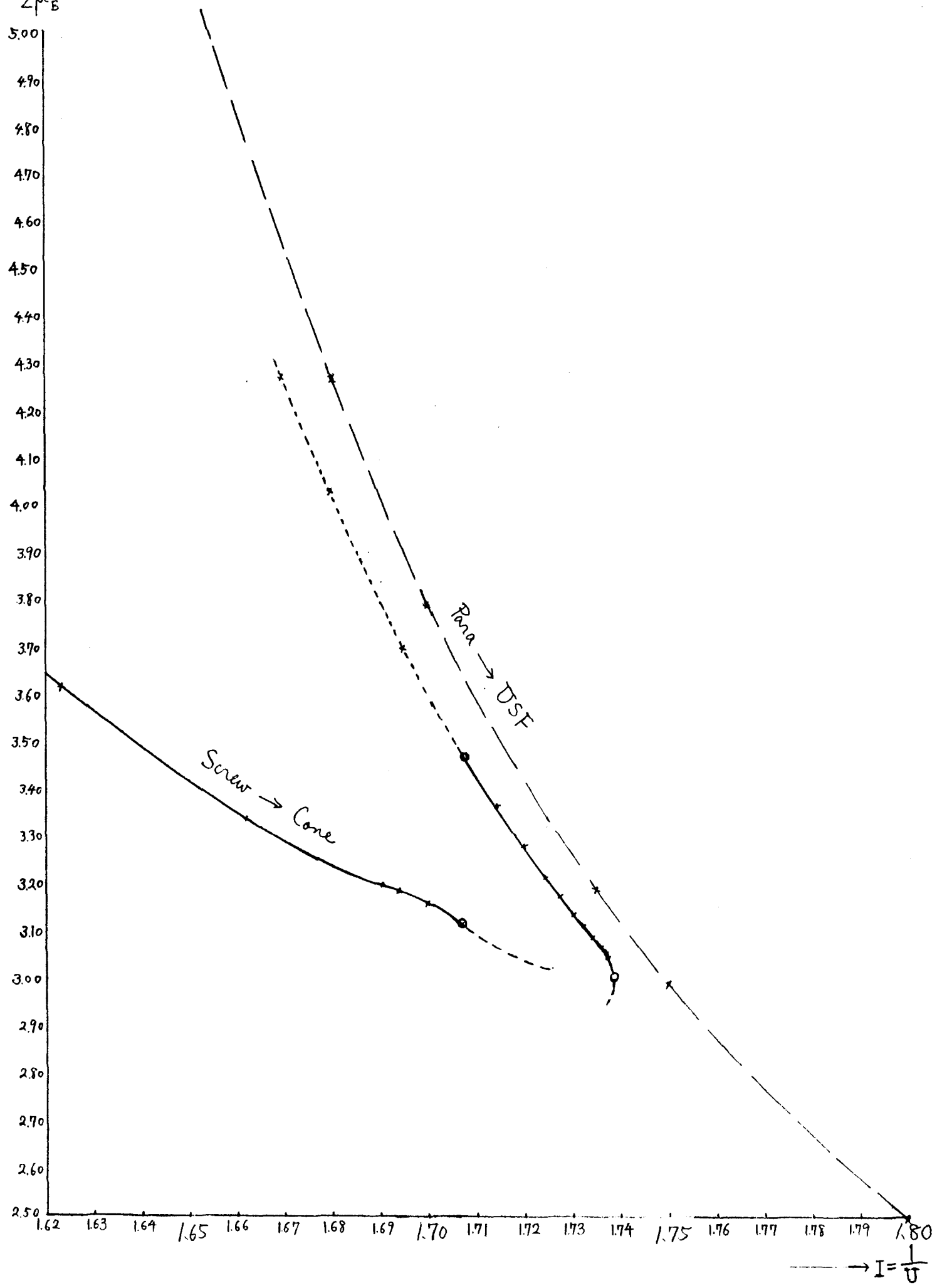


$\chi_1 \times \frac{m_0 c_F}{2\mu_B^2}$
↑

$\chi-I$ curve

$k_F = 0.48875$

- 最安定 Screw
- - - 準安定 Screw
- Spin para

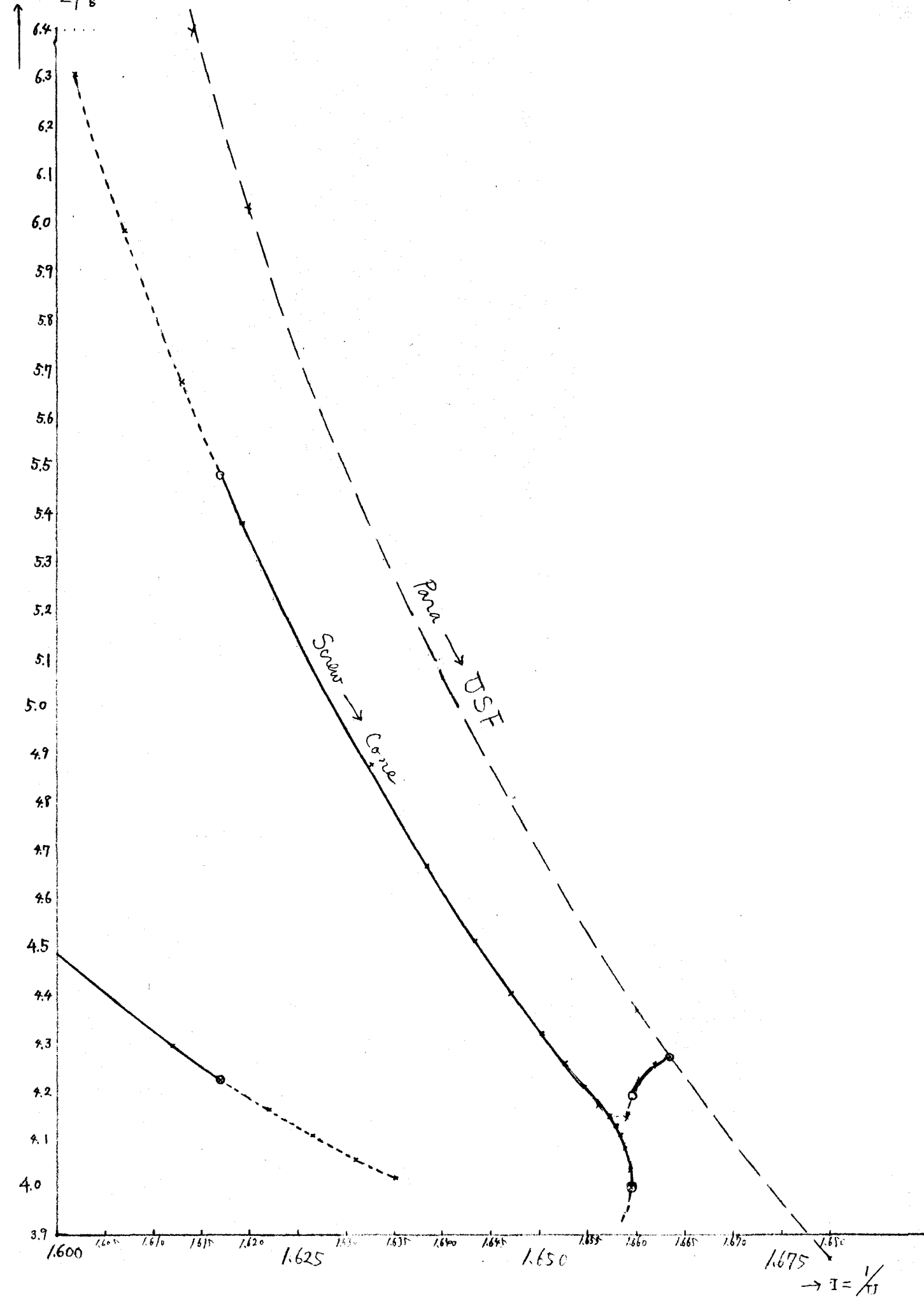


$$k_F = 0.48500$$

$\chi-I$ curve

$$\chi_{\perp} \times \frac{m_0 \epsilon_F}{2 \mu_B^2}$$

- 最安定 Screw
- 準安定 Screw
- Spin para



Chapter 4 Susceptibility Tensor

§ 1 平行帯磁率計算の複雑さ

Chapter 3 までは、外磁場を Screw の回転面に直角にかけたときの帯磁率 $\chi_{\perp}$ を計算した。これと同様な原理で平行帯磁率 $\chi_{\parallel}$ を計算するのには、以下に説明するよりの困難さ（と言うより複雑さ）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ない。

$$\bar{\mathcal{H}}_1 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{SDW}} + \mu_B (H + M) \sigma_x \quad (4.1)$$

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

$$\begin{array}{c} y_{\vec{k}}^+(\vec{r}) \text{ の行} \end{array} \left(\begin{array}{ccc} y_{\vec{k}}^+ & y_{\vec{k}}^+ & y_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{k}}^+ \\ \epsilon(\vec{k}), & \mu_B (H + M), & q \end{array} \right) \quad (4.2)$$

$$\left. \begin{array}{ccc} \psi_{\vec{k}}^- \text{ の行} & \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{k}}^- & \psi_{\vec{k}}^+ \\ & \left(q, \mu_B(H+M), \epsilon(\vec{k}) \right) & \end{array} \right\} (4.2)$$

これより見てわかるように $\bar{\epsilon}_1$ 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出来る。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。

然し帯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もよく、従って (4.1) の第三項を摂動項とみて摂動計算をすれば充分であろう。この際、無摂動 Hamiltonian は $\epsilon_0 + \epsilon_{SDW}$ であり、これについては Chapter 1 で既に解けているので、これを基準にして $\mu_B(H+M)$ の影響を摂動として取り入れればよい。そのために先ず $\bar{\epsilon}_1$ を (1.4) の $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\bar{\epsilon}_1)$ ($= \epsilon_0 + \epsilon_{SDW}$ の固有函数) を base として Matrix であらわす

う。 亦る ψ_k^+ の行では non-zero element は ψ_k^+ , $\psi_{k-2\vec{K}}^+$, $\psi_{k+2\vec{K}}^+$, ψ_k^- , $\psi_{k+2\vec{K}}^-$, $\psi_{k+2\vec{K}}^-$, の六つの列に現われる。 ψ_k^+ の行についてと同様である。 是れ故に摂動計算によって $\bar{H}_1$ の固有函数 $\phi_k^{\pm}(\vec{r})$ を求めるにしても、 $\phi_k^{\pm}(\vec{r})$ は六個の $\psi_k^{\pm}$ の一次結合となる。

この $\phi_k^{\pm}(\vec{r})$ 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 $\langle \phi_k^+ | H_0 + \mu_B H_z | \phi_k^+ \rangle$ は $6^2 = 36$ 項の和に、 二体部分 $\langle \phi_k^{+(1)} \phi_k^{+(2)} | H_{int} | \phi_k^{+(1)} \phi_k^{+(2)} \rangle$ etc. は $6^4 = 1296$ 項の和に分れることとなり、 計算は垂直帯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 $\alpha \equiv H + M$ について微分して最安定状態に対応する M を求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。

筆者はこれらの計算を実行したが、 結果は数式だけで数ページにわたる程複雑となり充分整理されておか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。 其の際問題

の設定自身をも次で述べるように一般化しておく。

§ 2 帯磁率テンソル

垂直帯磁率 $\chi_{\perp}$ や平行帯磁率 $\chi_{\parallel}$ を計算する際には、 $\vec{H}$ を結晶主軸の方向にかけたら $\vec{M}$ もそれに平行に現われるものと仮定してつた。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」で出発して、むしろ結論として導き出すことが望ましい。

仮定なしで一般的に論じるためには、帯磁率テンソルの概念を用いねばならぬ。すなわち外磁場を $\vec{H} \sim (H_1, H_2, H_3)$ 、単位質量あたりの磁化を $\vec{\mu} \sim (\mu_1, \mu_2, \mu_3)$ として

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

を考えるわけである。「垂直帯磁率 $\chi_{\perp}$ と平行帯磁率 $\chi_{\parallel}$ とを求めると言う立場はあらむじめ $\chi_{ij} = 0$ for $i \neq j$, $\chi_{11} = \chi_{22} (= \chi_{\parallel})$,

$\chi_{33} = \chi_{\perp}$ と仮定してゐることにする。

さて一般に外磁場 $\vec{H} \sim (H_1, H_2, H_3)$ を S D W にかけるとき、一
体化 Hamiltonian は次のように設定される。

$$\bar{\mathcal{H}}_1 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SDW} - \mu_B \{ (H_1 + M_1) \sigma_x + (H_2 + M_2) \sigma_y + (H_3 + M_3) \sigma_z \} \quad (4.4)$$

ただし $\vec{M} \sim (M_1, M_2, M_3)$ は E_{total} が最小になるように、後から定
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
動項とみなす。 $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SDW}$ の固有函数は (1.4) の $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ び、固有
値は (1.5) の $E^{\pm}(\vec{k})$ び与えらる。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

$$\left. \begin{aligned} \langle \psi_{\vec{k}}^+ | \bar{\mathcal{H}}_1 | \psi_{\vec{k}}^+ \rangle &= E^+(\vec{k}) - \mu_B \alpha_3 \frac{|x^+(\vec{k})|}{\sqrt{(x^+(\vec{k}))^2 + q^2}} \\ \langle \psi_{\vec{k}}^+ | \bar{\mathcal{H}}_1 | \psi_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+ \rangle &= -\cos \theta_{\vec{k}}^+ \sin \theta_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{K}}^+ \mu_B (\alpha_1 - i\alpha_2) \end{aligned} \right\} \quad (4.5)$$

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

$$\langle \psi_{\vec{k}}^+ | \bar{\mathcal{H}}_1 | \psi_{\vec{k}}^- \rangle = -\cos \theta_{\vec{k}}^+ \cos \theta_{\vec{k}}^- \mu_B (\alpha_1 - i\alpha_2)$$

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

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

これ以外の列では 0

こゝに $\theta_{\vec{k}}^\pm$, $x^\pm(\vec{k})$ はそれぞれ (1.4), (1.5) で与えられるものである。管の行の 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。

$\bar{\mathcal{H}}_1$ の固有函数は摂動計算によれば次のように求まる。

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

係数は例えば

$$a_{\vec{k}}^{(1)+} = \frac{\mu_B(\alpha_1 + i\alpha_2)}{E^+(\vec{k}-\vec{q}-\vec{k}) - E^+(\vec{k})} \cos \theta_{\vec{k}}^+ \sin \theta_{\vec{k}-\vec{q}-\vec{k}}^+ \text{ etc.} \quad (4.7)$$

又、固有値は

$$E^+(\vec{k}) = E^+(\vec{k}) - \mu_B \alpha_3 \frac{|x^+(\vec{k})|}{\sqrt{(x^+(\vec{k}))^2 + g^2}} \quad (4.8)$$

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

次に $\phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ を一体波動函数として、 $E^{\pm}(\vec{k})$ の小さい順につめて行つて Slater 行列式を作り、これについて E_{total} を計算する。その結果は §1 で説明したように非常に複雑となるので、もう具体的な数式はこれ以上書かず、以下では簡書きのみを述べよう。

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 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ の函数であるとも言つてもよい。(g は [] で定めた値、あるいは外磁場がなごとの値に 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数式であらわすことは、繁雑さをいとわなければ可能である。こゝでは具体的な数式は書かず、たゞそれを

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

と書いておこう。

最安定状態を与えるには、(4.9) を α_i で微分して 0 とおくことにより定まる。すなわち条件；

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

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 の函数として定める方程式」とみなすことが出来る。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 $\vec{\mu}$ は Chapter 1 § 2

末に見たように、total magnetization $\vec{\mu}_{total}$ との間に

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

の関係がある。従って例えば x 成分 μ_1 は

$$\mu_1 = \frac{1}{m_0 N} \mu_B \left\{ \sum_{\epsilon^+(\vec{k}) \leq E_c} \langle \phi_{\vec{k}}^+ | \sigma_x | \phi_{\vec{k}}^+ \rangle + \sum_{\epsilon^-(\vec{k}) \leq E_c} \langle \phi_{\vec{k}}^- | \sigma_x | \phi_{\vec{k}}^- \rangle \right\} \quad (4.13)$$

と書かれる。

(4.13) にかいて $\phi_{\vec{k}}^{\pm}$ も $\epsilon^{\pm}(\vec{k})$ も $\vec{\alpha}$ に depend して定まるから、中括弧の中は $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ の函数となり、これも繁雑な式にはなるが繁雑ささえいとあきらめれば具体的に $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ の数式としてあらわすことが出来る。こゝではたゞそれを

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

と書いておく。

さてこれだけの準備が出来ると帯磁率テンソル χ_{ij} は次

のよう計算される。

$$\chi_{ij} = \left. \frac{\partial \mu_i}{\partial H_j} \right|_{H=0} = \left(\sum_{l=1}^3 \frac{\partial \mu_i}{\partial \alpha_l} \frac{\partial \alpha_l}{\partial H_j} \right) \bigg|_{\substack{\alpha=0 \\ H=0}} \quad (4.15)$$

(4.11) は方程式 (4.10) の解だから、陰函数の微分公式により、

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

where

$$\Delta = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_1^2} & \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2} & \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_3} \\ \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2} & \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_2^2} & \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_2 \partial \alpha_3} \\ \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_3} & \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_2 \partial \alpha_3} & \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_3^2} \end{vmatrix} \quad (4.17)$$

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

例 え ば

$$D_{11} = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_2^2} & \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_2 \partial \alpha_3} \\ \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_2 \partial \alpha_3} & \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial \alpha_3^2} \end{vmatrix}$$

(4.18)₁₁

である。

(4.16) を (4.15) に 代 入 す る と

$$\chi_{ij} = - \left(\frac{1}{\Delta} \sum_{l=1}^3 \sum_{l'=1}^3 \frac{\partial \mu_i}{\partial \alpha_l} \frac{\partial^2 E_{total}}{\partial H_j \partial \alpha_{l'}} D_{ll'} \right) \bigg|_{\substack{\alpha=0 \\ H=0}} \quad (4.19)$$

を得る。従って (4.9) 及び (4.14) の 函 数 形 が 具 体 的 に 求 ま り
さえすれば、(4.19) に よ っ て χ_{ij} が 計 算 さ れ る わ け で あ る。

そこで計算の筋書きは、先ず (4.9) と (4.14) の 函 数 形 を 定
め (4.17), (4.18) に よ っ て Δ と $D_{ll'}$ を 計 算 し、こ れ ら を (4.19) に 代
入 すればよい。数値計算は (4.19) の 右 辺 を 具 体 的 に 数 式 と
してあらわしてゐる後の段階のことになる。もっとも事
情によつては行列式や微分の計算を数値的にやつてもよ

い)が、それにしても(4.9)の $E_{total}(\vec{r}, \vec{H})$, (4.14)の $\vec{u}(\vec{r})$ の具体的函数形の知識は必要である。

筆者の数式上の計算では(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でいるので、まだ数値計算の段階に達してない。

Chapter 5 discussion

1° Part II の結果は, screw 構造に対する $\chi_{\perp}$ 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 ~ $\chi_{\perp}$ curve に不連続があるのは、最安定 screw 構造自身が一不連続的に変化するかうである。(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 $I = 1/\mu$ が減るときに) 常に $\chi_{\perp}$ をより低くするよりに jump してゐる。従つて「最安定 screw 構造は幾つもの energy 極小の状態のうち $\chi_{\perp}$ を最小にするものである」と言う主張が成り立ちうるである。

2° 本論文では $\chi_{\parallel}$ の値は求めてゐないから 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 $\chi \sim I$ curve の特徴は大体保たれるものと予想すれば、本

論文の結果から結晶が Néel 点を過ぎて para から S D W 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、Néel 点での転移が $k_F \geq 0.5$ の時は二次であるが $k_F < 0.5$ の時は一次のものであることに対応する。 $k_F < 0.5$ で一次にたまることは理論的には Nagamiya, Motizuki and Yamasaki^[4] 及び Mitendo, Motizuki and Nagamiya^[5] によって示されている。

ところが帯磁率^[9]を始め比熱^[10]や弾性係数^[11]の実験では T_N での転移は一次らしくない。例えば、Collings, Hedgcock and Siddiqui^[9] の帯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っと詳しく解析するためには T_N 以下で $\chi_{\perp}$ と $\chi_{\parallel}$ の温度変化を別々に測ること盼望しい。

又理論の方では S D W に外磁場の他に温度効果も入れ

て計算し、SDWの帯磁率の温度変化を出してかくこ
が望ましい。(然し現在は絶対零度での $\chi_{||}$ さえ値を出して
いがないので筆者にはおぐには手をつづらぬない。)

Paraの方のスピソ帯磁率の温度変化の計算は Shimizu et al.^[45]
によって行なわれてゐる。彼等の場合は Tachiki and Nagamiya^[3]のよ
うに自由電子様エネルギースペクトルの仮定をおかず、
現実のCrのstate density(比熱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 χ の影響)は考えに入れていない。T&Nのモデル
でParaの帯磁率の温度変化を計算することはSDWの帯
磁率の温度変化よりはずっと簡単な筈だから、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。

3° Montalvo and Marcus^[13]の実験と比較するためには $\chi_{||}$ を計算す
れば十分である。Part II §4で考えたように帯磁率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
の対称性により、帯磁率tensorの主軸方向は多分結晶主軸

の方向と一致してゐるものと予期されるが、これを仮定
 があることばかり、むしろ計算の結論としたわけである。

もちろん帯磁率 tensor χ_{ij} の計算の方が一層複雑になるが、
 χ_{ij} を計算するだけでも簡単に手には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_{ij} だけを比較的簡単に計算出来る
 方法が見つかつたなら、 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
 るで避けられるものか、まだよくわからないう。我々はたゞ
 がむしやらに数値計算に移すと言ふ面だけになく、formulation
 の仕方によつて計算式自体を簡単にすることをも考へ、
 これら両面から攻めてみた。

今思ひつくのは「結晶の対稱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ともわ
 かるような簡単な relation (例へば total moment μ_{total} と、 E_{total} を最

小に与るような α の値との間の簡単な *relation*) はない。
と言ふこと位で、はっきりした成果はない。
なお計算式を最終段階まで出さずに、最初から数値計算に移してしまふのも一方法であらうが、この場合数値計算の規模は膨大なものになる。例えば E_{total} を最小にするような α の値をきめるのに、 α を *parameter* として E_{total} を計算しその結果を比較して α をきめるといふ方法をとるなら、その α の値が数式として与えられてゐる場合に比べて数値計算の労は遙かに大きくなる。又相空間での積分を数値的に行なうとしたら、これは三重積分なので計算の精度を保つためには随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単に代入するだけで定積分の値を求めるとは、その労は比較にならない。(本論文のように不定積分を数式上で求めておいてさへ、*parameters* をいろいろ取りかえて何度も計算するのび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って励まして下さり、いろいろ討論していただい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) 1437
- [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. Hedgcock 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. Bolif and J. de Klerk ; *Phys. Rev.* 129 (1963) 1063

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

- [29] M. Asdente and J. Friedel ; Phys. Rev. 124 (1961) 384
- [30] M. Asdente ; 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) A1181
- [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. Kunitomi ; J. Phys. Soc. Japan 20 (1965) 103
- [43] 志永正男 ; 物性研究 1 (1965) 360
- [44] 例三 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