



Title	REAL SPACE APPROACH TO THE CALCULATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF TRANSITION METALS
Author(s)	Hirai, Kunitomo
Citation	大阪大学, 1981, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/24348">https://hdl.handle.net/11094/24348</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

【7】

氏名・(本籍)	平井國友
学位の種類	理学博士
学位記番号	第 5434 号
学位授与の日付	昭和 56 年 9 月 30 日
学位授与の要件	理学研究科 物理学専攻 学位規則第 5 条第 1 項該当
学位論文題目	遷移金属の電子構造に対する実空間計算法
論文審査委員	(主査) 教授 金森順次郎 教授 國富 信彦 教授 伊達 宗行 助教授 小谷 章雄 教授 吉森 昭夫 (基礎工)

### 論 文 内 容 の 要 旨

遷移金属の諸性質を説明するのに、その電子構造は不可欠な情報であり、通常 Bloch の定理に基づくバンド計算によって求められる。ところが一方において、局所的な原子間相互作用に基づく議論によってそれらの性質を定性的に説明する試みも成功している。バンド理論と原子間相互作用模型という一見かけ離れた二つの概念を結びつけているのは、遷移金属中の  $d$  電子の性格であると推測される。本論文の目的は、原子間相互作用模型をバンド理論の立場で正当化することであり、更にその結果として、電子構造に対する新しい計算方法を考え出すことである。

遷移金属の電子構造に対して  $d$  軌道の対称性が果たす役割について、Green 関数の実空間展開を用いて議論を行なった。その議論に基づき、展開を二つの部分に分けることにした。一方は結晶構造にあまり依存しない Bethe 格子型の項から成る部分であり、他方は結晶構造に敏感な項から成る。Bethe 格子型の項は無次元の展開項まで近似的に計算でき、単一原子の項 (locator) に繰り込むことができる。そして、残りの結晶構造に敏感な項は、繰り込まれた locator 間の相互作用として表わされる。この結果、bcc 及び fcc 遷移金属の状態密度が近接する原子間の相互作用の情報によって良く再現されること、更に bcc と fcc の違いが 3 原子間及び 4 原子間の相互作用から生じていることが判明した。この様にして、原子間相互作用模型をバンド理論の立場で正当化することができた。

本論文の後半では、この方法を強磁性状態、反強磁性状態、helical スピン密度波状態及び常磁性状態に適用し、遷移金属の磁性を議論した。この方法を用いて計算した unenhanced 帯磁率はバンド計算によるものを良く再現しており、この方法の信頼性を示すことができる。それぞれの状態の電子構造を自己無撞着に求め、最も安定な状態を調べた。その結果、 $d$  電子数に関する磁気相図が得られ

た。 $d$  電子数を 5 から 10 まで変化させると、最も安定な状態は反強磁性状態から helical スピン密度波状態を経て強磁性状態に変化する。得られた磁気相図は 3d 遷移金属の基底状態の磁性だけでなく有限温度の磁性に関しても良く実験事実を説明している。

## 論文の審査結果の要旨

遷移金属の電子構造は、原子における  $d$  状態に起因する  $d$  バンドの存在が特徴である。一電子ポテンシャルを適当に決定して  $d$  バンドのエネルギースペクトルおよび波動関数を計算することは、遷移金属の特性を理解するための基礎知識となっている。ポテンシャルが格子の周期性をもつ場合には、Bloch の定理に基づいて電子の座標をフーリエ変換した波動ベクトルの空間で計算を進めることができるが、この計算を非周期系たとえば helical 構造をもつ磁気的秩序状態、磁気モーメントの方向がランダムな常磁性状態、無秩序合金、非晶体へ拡張することは困難である。これを補うために、一電子グリーン関数を atomic locator と原子間の電子移動積分<sup>べき</sup>の形で展開する実空間計算法が以前から議論され、グリーン関数を連分数の形で求める二つの方法が有力な手段として用いられて来た。しかしこれ等の方法は数学的には或程度整備されているが、非常に多数の原子についての和を機械的に実行するために、実空間における原子配置の電子構造に及ぼす影響等について見通しをたてることができない。また現象論的にはかなり成功を収めている原子間相互作用のモデルとこれ等電子構造の計算との関係は不明のままであったのが従来の研究過程である。

平井君の論文は、グリーン関数の実空間展開について、全く新しい角度からのユニークな理論を与えたもので、同時に電子構造の計算に見通しのよい新しい方法を展開し、またそれによって原子間相互作用の意味づけを行うことにも成功した。実空間展開の各項は原子配置上の一つの閉経路についての積に対応するが、平井君は一つの原子から出発してある原子に到達し、また同じ経路を辿って戻ってくる頃と多角形を形成して戻る頃に分け、前者は原子配置の対称性等にあまり依存しないこと、また  $d$  バンドでは後者は 4 原子程度まで考えれば充分であることを示した。前者については近似的に Bethe 格子上の展開と考えて無限次まで取入れることができ、その結果は atomic locator を re-normalize することで取入れる。後者はこの renormalize された locator 間の相互作用として考えることができる。平井君はこのような方法で fcc 構造と bcc 構造の相違の起源、従来計算できなかった非周期的磁気秩序のエネルギー等を明かにした。また従来のバンド計算と比較してこの方法が充分に信頼のおけるものであることを空間的に変動する磁場に対する磁化率の計算で実証した。

平井君の論文は、遷移金属の電子構造について従来明かでなかった概念上の問題を解決しただけではなく、今後の応用が期待される新しい計算方法を確立したもので、理学博士の学位論文として十分な価値をもつものであると結論する。