

Title	Intraatomic Coulomb Interaction Effects in the Time-Dependent Newns-Anderson Model
Author(s)	河合, 伸
Citation	大阪大学, 1987, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/280">https://hdl.handle.net/11094/280</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

Osaka University

氏名・(本籍)	河合伸
学位の種類	工学博士
学位記番号	第 7748 号
学位授与の日付	昭和 62 年 3 月 26 日
学位授与の要件	基礎工学研究科物理系専攻 学位規則第 5 条第 1 項該当
学位論文題目	時間に依存するニューズ・アンダーソンモデルにおける原子内 クーロン相互作用の効果
論文審査委員	(主査) 教授 吉森 昭夫 (副査) 教授 中村 傳 教授 藤田 英一 助教授 張 紀久夫

### 論文内容の要旨

金属表面とその近くを動く原子との間の電子移動についての研究を行なった。このような電荷移動の機構としてはオージェ過程と直接過程が考えられるが、直接過程のみを取り扱った。従来より多く用いられて来た時間に依存するニューズ・アンダーソンモデルを用いた。希薄磁性合金の問題にアンダーソンモデルを適用する場合には、その磁氣的性質に対して不純物局在軌道上の電子間に働くクーロン相互作用が重要な役割を果たすことが知られている。表面の問題に時間に依存するニューズ・アンダーソンモデルを用いた場合にもこのクーロン相互作用の効果が重要であることは認識されてはいたが、電荷移動の問題に於いてこれを取り入れた研究は、従来行なわれていなかった。

我々はこのクーロン相互作用が散乱原子の電荷状態に与える効果をまずハートリー・フォック近似で取り扱い詳しい研究を行なった。その結果、(1)散乱原子のスピンの分極が小さいときには、その時間変化は不安定成長を含めて速度方程式で記述できること、(2)スピンの分極が平衡値に近づく際にクーロン相互作用が大きい場合に振動を伴うことが明らかになった。そしてその振動の振る舞いについて詳しい解析を行なった。また、(3)平衡状態で散乱原子のスピンの分極が起こる場合でもスピンの分極がない初期条件であれば決して分極が起こらず磁場のようなスピン空間の対称性を破るものが必要であること(ハートリー・フォック近似のためである)がわかった。さらにイメージポテンシャル等の効果についても調べた。

クーロン相互作用の効果をハートリー・フォック近似で取り扱っても多くの興味ある結果を得ることが出来たが、よく知られているようにハートリー・フォック近似で得られた結果には正しくないものがある。そこでより研究を進めるためにクーロン相互作用を多体問題の手法を応用して取り扱った。第一に、電子-空孔対展開を用い、時間に依存するシュレディンガー方程式を解くことにより系の波動関数

をもとめた。電子移動積分 $V$ の時間 $t$ に対する依存性は $e^{-\gamma t}$ に比例する場合を考えた。その波動関数をもとに原子局在軌道のエネルギー準位 $E_a$ が正のとき（フェルミエネルギーを原点とする）観測される電荷状態を $V$ の8次までもとめた。その結果、 $\gamma/E_a \rightarrow 0$ の極限では少なくとも $V$ の8次までで、多体の効果は全電荷の値に対する条件としてのみ現われ、動的効果はクーロン相互作用がない場合つまり一体問題の時と同じであることがわかった。特に $\gamma/E_a \rightarrow 0$ では、メモリー項が一体問題と同じように多体問題の計算に於いても重要であることが明らかになった。

次に、伝導電子の状態を少数に限り、小さな系に対してこのモデルの時間に依存するシュレディンガー方程式を数値的に解くことにより、電荷移動に関する研究を行なった。金属の伝導電子に関する電子状態と運動している原子上の一電子状態を考える。全系の状態をこれらの一電子状態占有数を指定した状態で展開する。この展開の係数により原子上の電子数の各時間に於ける期待値を知ることができる。当然のことであるが電子数が多くなると展開に用いる状態の数が飛躍的に増加する。そのために電子数が8個の場合の計算を行なった。その結果負イオンとしての観測値を議論しない限りはハートリー・フォック近似は、かなり良い近似であることが明らかになった。負イオンについて議論するときは多体問題での計算が必要であることも明らかになった。

## 論文の審査結果の要旨

表面で散乱される原子のように、運動している原子と金属表面の間の電子の移動の理論に関して用いられる、時間に依存するニューンズ・アンダーソン模型では、従来原子内クーロン相互作用の効果は、その重要性は認識されていても、全く考慮されていなかった。申請者はこの問題を取り上げ、時間に依存する平均場の近似、系の波動関数を金属の電子空孔対励起の状態で展開する方法、及び少数自由度系での大規模数値計算の三つの方法で研究を進めた。平均場の近似では電子の移動に関する相互作用の基本的な効果として、スピン分極の成長が指数関数則に従うこと、スピン分極が時間の関数として振動しながら平衡値に近づくこと、時間に依存する問題としてスピン分極のある解が得られるためにはスピン空間での回転対称性の破れが必要なことなどを明らかにしている。特に平衡値の振動については漸近解の詳細な吟味を行なっている。次に電子空孔対展開の方法ではある極限で相互作用の効果は初期条件のみに含まれていることを展開の8次までで証明し、それに基づき同じ極限で一般に成立すると思われる表式を提案している。少数自由度の系の数値計算ではある程度限定されたパラメータ領域で計算を行ない、少数自由度の系に対する厳密な結果と平均場の近似の結果を比較し、平均場の近似が一定の条件下でよい近似になっていることを示している。以上この論文は時間に依存するニューンズ・アンダーソン模型を用いての、運動している原子と金属表面の間の電子の移動に対する相互作用の効果の基本的な理解に、大きな貢献をするものであり、学位論文として価値あるものと認める。