

Title	ATOMIC MAGNETIC MOMENTS AND ELECTRONIC STRUCTURE OF FERROMAGNETIC TRANSITION METAL ALLOYS
Author(s)	Jo, Takeo
Citation	
Issue Date	
Text Version	none
URL	<a href="http://hdl.handle.net/11094/2854">http://hdl.handle.net/11094/2854</a>
DOI	
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

[ 8 ]

氏名・(本籍)	城 健 男
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	第 3 2 9 7 号
学位授与の日付	昭 和 50 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 5 条第 1 項該当
学位論文題目	強磁性遷移金属合金の原子磁気モーメントと電子構造
論文審査委員	(主査) 教 授 金森順次郎 (副査) 教 授 国富 信彦 教 授 伊達 宗行 助教授 三輪 浩 助教授 朝山 邦輔 講 師 中井 裕

### 論 文 内 容 の 要 旨

強磁性遷移金属合金の原子磁気モーメントと電子構造を以前長谷川と金森により為された方法を拡張して調べた。まず最初にコヒーレントポテンシャル近似と電子間相互作用に対するハートリーフォック近似を組み合わせる事により、強磁性三元合金の電子構造を調べ、その原子磁気モーメントの組成依存性が実験結果とよく合う事を示した。さらに三輪により提案されたコヒーレントポテンシャル近似を拡張した方法を強磁性合金に応用し、合金中の局所的原子環境のゆらぎが原子磁気モーメントに及ぼす影響を調べた。原子の磁気状態に対するハートリーフォック方程式の解は一般に複数個存在する。それらの間のエネルギーを比較する事により、NiCo 合金中に不純物としてはいった Mn の磁気状態が最近接格子点或いはさらに遠くの格子点に存在する Ni や Co 原子の組成のゆらぎによって受ける影響を調べた。さらにまた、NiFe 合金や NiMn 合金において見られる磁化の濃度依存性がスレーターポーリング曲線からずれる現象を、Fe 原子や Mn 原子が磁化に平行或いは反平行な磁気モーメントを持つ可能性を示す事によって説明した。

### 論 文 の 審 査 結 果 の 要 旨

城君の論文は、近年合金の電子状態を解明する有力な手段として開発された coherent potential approximation (CPA と略記) の改良および適用対象の拡大を主題とし、従来の CPA では取扱えなかった問題を取上げていくつかの重要な結論を得ている。まず第一に従来は理論の対象とならな

った遷移金属の強磁性 3 元合金 Ni-Co-Fe, Ni-Co-Mn 等に電子-電子相互作用についての Hartree-Fock 近似と上記 CPA を組み合わせたいわゆる HF-CPA を適用した, 3 元合金はその組成比の自由度が 2 元合金よりも多いために, 物理的性質の組成依存性についての実験と理論の比較による CPA の有効性の検証に便利であるのがこの問題を取上げた一つの理由である。結果は個々の原子の磁気モーメントについて中性子線散乱による実験結果とよく一致することが示された, つぎに CPA では取入れられていない最近接原子の組成の中心原子の電子状態に及ぼす影響が重要である例として Ni-Co 合金中の Mn 不純物原子の磁氣的状態を取上げる, さきに Miwa によって提案された CPA に最近接原子の組成の影響を取入れる理論にもとずき, Mn 原子の状態の Hartree-Fock 解には全体の磁化に平行な磁気モーメントをもつ解と反平行な磁気モーメントをもつ解の 2 種類が同時に現われることに注意して, 最近接原子の組成が Co rich のときには後者の解がまた逆に Ni rich では前者の解がエネルギー的に安定であることを示した, このとき平均濃度によって後者の解を実現させるに必要な Co 最近接原子の数がことなる, 最後に Ni-Fe, Ni-Mn fcc 合金での飽和磁化の Slater-Pauling 曲線からの外れが全体の磁化に反平行な磁気モーメントをもつ Fe あるいは Mn 原子の出現によるものであることを HF-CPA の一つの拡張を通じて明かにした。

城君の論文は遷移金属合金の強磁性状態の解明に大きい寄与をしたものでその内容は理学博士の学位論文として十分価値あるものと認められる。