



Title	金属における一電子グリーン関数の新しい計算方法 : 一般論とニッケル中の非遷移金属不純物の問題への応用
Author(s)	寺倉, 清之
Citation	大阪大学, 1971, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/30378
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed 大阪大学の博士論文について ご参照 ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

【27】

氏名・(本籍)	寺 倉 清 之
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	第 2 2 9 5 号
学位授与の日付	昭和 46 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 5 条第 2 項該当
学位論文題目	金属における一電子グリーン関数の新しい計算方法——一般論とニッケル中の非遷移金属不純物の問題への応用——
論文審査委員	(主査) 教授 西山 敏之
	(副査) 教授 川村 肇 教授 伊達 宗行
	教授 国富 信彦 教授 金森順次郎

論 文 内 容 の 要 旨

過完全系をなす関数の組をベースにして、一電子グリーン関数 (Greenian) を計算する方法を展開した。例えば平面波の組からなる完全系に、補助関数の組として任意個数の原子軌道関数を導入することにより、種々の計算が可能になる。補助関数と、与えられた完全系をなす関数を同等に扱う為に新しい演算子として pseudo-Greenian を定義する。この pseudo-Greenian は本物の Greenian と簡単な関係で結ばれることが示される。導入する補助関数が任意であるばかりでなく、ベースの関数の過完全性のために、いくつかの任意演算子を導入することが出来る。これらの任意性を扱う問題に応じて適当に決めることによって、純粋金属ばかりでなく、種々の合金に対しても、それらにおける電子構造を探る上での実用的な計算方法が与えられる。任意の無摂動状態からの散乱の T 行列に対して補助関数の状態を中間状態とする表式が得られる。この表式において、中間状態として最も大きい寄与をする状態だけを考慮する近似 (これを単一軌道近似と呼ぶ) が共鳴散乱に対しても、そうでない時に対しても有効であることが示される。我々の理論はごく一般的のものであって、特に共鳴散乱が重要になる遷移金属及びその合金に対しては、今迄になかった有力な方法と与えてくれる。そこで特に共鳴散乱の場合に、任意演算子を定める変分原理についての議論がなされる。以上の一般論を純粋遷移金属のバンド計算に適用すると、内挿法で用いられるモデルハミルトニアンが容易に導ける上に、このモデルハミルトニアンを用いて Greenian を求める方法が与えられる。このことによって、遷移金属における Greenian を数値的に計算する事が可能になった。T 行列の単一軌道近似と、上に与えられた純粋金属の Greenian の表式を用いて、ニッケル中の非遷移金属不純物による磁気モーメントの減少を説明した。そこでは以下のような新しい遮蔽機構が提案され、数値計算によって立証された。本質的な点は、ニッケル中の d バンドの状態と OPW 状態との干渉効果によって、深い不純物ポテンシャルの存在にも拘らず、フェルミ準位以下の状態数が増加しにくいということにある。これは光吸収スペクトルにおける反共鳴の現象と同類である。しかるに不純物サイトは電氣的に中和されるはず

であるからそこには不純物の価電子数に等しい電子が集まる。この為に周囲のニッケルの所で電子数が減少することになり、この電子数の不足をニッケルの小数スピン電子がうずめることになる。これによって実験事実がうまく説明できる。

論文の審査結果の要旨

寺倉君の論文は、金属および合金の電子構造の新しい計算方法を提案するとともに、それを具体的な問題に応用したものである。応用としては、とくにNi中の非遷移金属不純物によってもたらされる強磁性磁化の減少の機構の解明に重点をおいている。

遷移金属の電子構造は、1950年代に提案されたAPW法およびグリーン関数法(KKR法ともよばれる)等の厳密な数学的方法にもとづき、電子計算機を駆使する計算によって最近その解明が進んでいる。その結果、そのバンド構造は、自由電子のエネルギースペクトルに近い波数依存性をもつバンドと、比較的波数依存性の小さいdバンドから成っていて、両者はそのエネルギーがほぼ等しくなるような波数ベクトルについては、いわゆるs-d mixingをおこしている。dバンドは各原子の3dエネルギー準位に由来するものと考えられるが、その波動関数は物理的意味を明らかにする上からも、また実際の計算の便宜上からも、適当に定義された原子の3d軌道を可能な限り用いて表現することが望ましい。前記の計算方法は、はっきりと定義された3d軌道を用いるものではなく、またその方法自体物理的描像に頼らない反面、力づくといった面があって必ずしも能率のよい方法とはいえない。さらにつけ加えるならば不純物の問題に対してもその応用についてはまだ原理的に解決されていない面がある。

寺倉君の開発した方法は、完全系を作る基礎的な関数系たとえば平面波のほかに、任意の補助関数たとえば適当に定義された3d原子軌道を適宜導入するためのformalismを作り、それを基礎としてこれらの関数を作るovercompleteな関数系を、目的に応じて適当に使わせることにより最も能率のよい計算方法を作り上げようというものである。純粋な遷移金属の電子構造の計算については、物理的描像に対応した能率のよい計算方法を実際にうることができる。また原子による電子の散乱を記述するT行列について、任意に定義された原子軌道を中間状態とするような表式を導くことができる。これは合金の電子構造の計算に新しい手段を与えるものである。

Ni中のAl, Si, Zn等の不純物は、その価電子がすべてNiのdバンドにはいったと思われるような急激な磁化の減少をひきおこす。この機構の解明は、このような不純物の電子構造を知るための計算方法がなかったため、今迄手がつけられていなかった。寺倉君は、Niのmajority spinの状態についてそのフェルミ面以下の状態数の総数が、不純物原子が作るポテンシャルの絶対値がたとえ増大してもあまり変わらないということを仮定して、磁化の減少を定量的に説明する機構を提案した。次にその仮定の当否を調べるために、新しく開発した上記方法を応用して詳細な計算を行ない、その仮定が定量的に正しいことを確かめた。

以上の内容を総合して、寺倉君の論文は、金属合金の電子構造の研究に重要な貢献をしたものと考えられ、理学博士の学位論文として十分な内容のものと判定する。