



Title	コヒーレント・ポテンシャル近似とその磁性合金への応用
Author(s)	長谷川, 秀夫
Citation	大阪大学, 1973, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/30715
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、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

氏名・(本籍)	はせがわ ひでお 長谷川 秀 夫
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	第 2739 号
学位授与の日付	昭和48年3月24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	コヒーレント・ポテンシャル近似とその磁性合金への応用
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 教授 山田 安定 助教授 三輪 浩

論 文 内 容 の 要 旨

合金の電子構造を研究する方法としてSovenが提唱したコヒーレントポテンシャル近似(以下CPAと略す)は、その有用性が認められ広く用いられている。この論文では、CPAの拡張とCPAの磁性合金への応用に関して議論した。

CPAはシングルサイト近似とよばれる近似方法の中では、最良の方法であるが、いくつかの不十分な点がある。その内、次の2点についてCPAの拡張を試みた。1)CPAがシングルサイト近似であるため、合金中のクラスターの効果を取り入れることができないので、この点については、2つの原子からなるクラスターの効果を取り入れる。2)バンドの形が異なる金属間の合金にCPAを適用できないので、そのような合金も取扱えるように拡張する。以上の2点について拡張されたCPAを定式化し、同時に他の人々によって提唱されている方法とも比較している。数値計算は、最近接相互作用をもつ単純立方格子構造の合金について行った。計算結果によると、上記の2点の効果は明らかで、例えば、状態密度曲線に、2つの原子からなる分子の結合、反結合軌道に相当する2つの山がみられる。又、各原子の電子のエネルギー分布は、その原子のまわりの原子の種類によって影響されることが示される。

CPAを強磁性合金に応用するため、原子内クーロン相互作用を取り入れ、それをハートリー、フック近似で取扱う。定式化すると、自己無撞着に解かれるべき6つの量(スピンに依存するコヒーレントポテンシャル、および各原子当り、各スピン毎の平均電子数)を含む連立方程式がえられる。強磁性Ni合金(fcc)とFe合金(bcc)について数値計算を行った。これらの合金に関しては、従来から飽和磁化の測定、中性子回折およびMössbauer効果を用いた合金中の各原子の気モーメントの測定また電子比熱の測定が行なわれている。CPAによる計算結果は、これらの実験結果をよく説明し、3d鉄族強磁性合金を統一的に理解することができる。CPAを強磁性合金に応用する上での限

界についても考察した。

論文の審査結果の要旨

コヒーレントポテンシャル近似 (CPA) は、無秩序合金の電子構造、混晶の格子振動数スペクトル等の問題に対するかなり有効な近似として近年注目されている。無秩序合金の電子構造については、以前はrigid band 近似と称する近似のみが唯一つの実際的な計算方法であった。この近似は、合金の組成、構造に依存しない電子状態密度を仮定し、合金の組成はフェルミ準位の電子数の変化による移動のみによって電子構造に反映するという仮定の上になっているもので特別な場合を除いては発見的な意義しかもたないものである。これに対し CPA は無秩序合金中での電子の散乱の影響を合理的にとり入れて、合金中の組成原子の電子構造をその種類に応じて個別に議論することができるもので、無秩序合金の電子構造の定量的理論の第1歩といえる。長谷川君の論文は、第1にこの CPA の強磁性合金への応用を具体的に論じ、つぎに CPA ではとり入れることのできない最近接原子の組成のゆらぎの影響を論じる目的で CPA の一つの改良を提案している。強磁性合金への応用は、CPA と電子間相互作用のHartree Fock 近似を組み合わせるもので2重のSelf-consistent な計算を必要とするが、長谷川君はこの点を解決した上で種々の強磁性合金について、いままで説明できなかった多くの実験事実を簡単なモデルの上に立って合理的な説明と物理的意味づけを与えることに成功した。たとえば中性子線回折によって測定されている原子磁気モーメントの組成依存性をはじめてその起源を明かにした。また合金の電子比熱が純粋金属での状態密度曲線と関係があるとする従来の考え方を明快に否定した。第2の CPA の改良については、まだ具体的な応用を行なう域には達していないが、今後の理論発展の基礎を作るものといえよう。

長谷川君の論文は強磁性合金の磁性と電子構造について初めて合理的な理論解釈を与えたもので、多くの実験事実の相互関連を明かにし、新しい物性を予見するための物理像を確立したものといえる。その内容は理学博士の学位を授与するに十分なものと結論する。