



Title	マフィンティンポтенシャルモデルに基づく遷移金属合金の電子状態の研究
Author(s)	赤井, 久純
Citation	大阪大学, 1977, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/31603
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)	赤井 久 純
学位の種類	理学博士
学位記番号	第 3852 号
学位授与の日付	昭和 52 年 3 月 25 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	マフィンティンポテンシャルモデルに基づく遷移金属合金の電子状態の研究
論文審査委員	(主査) 教授 金森順次郎 (副査) 教授 西山 敏之 教授 国富 信彦 教授 伊達 宗行 助教授 鈴木 勝久

論文内容の要旨

種々の現実的なハミルトニアンを基礎としたバンド構造の計算にコヒーレントポテンシャル近似を組合せて、合金の電子状態を計算する事を可能にする新しい方法を提案し、それを用いて強結合モデルが不適当である様な問題を議論する。この方法は系を平均的に記述する為の仮想的な原子(effective atom)を自己無撞着に決定する為の遂次近似と \vec{k} 空間に於いて effective atom の示すエネルギースペクトラムを求めるバンド計算とを平行して進めるものであり、十分多数の \vec{k} 点についてエネルギースペクトラムが得られた時点では同時に effective atom も決定されている。この方法を用いて、第一に、強磁性 Ni-Fe 及び Ni-Cr 不規則合金の残留電気抵抗とその異方性を計算した。Ni-Crについては Cr の \uparrow スピン(majority スピン) バンドが d バンドの上に殆んど局在した状態を作り、フェルミ面がちょうどこの付近にある為強い散乱を生じ大きな電気抵抗を示す事、一方 Ni-Fe ではこの様な状態を作らず、結果として、Ni-Cr では大きな残留抵抗と小さな異方性、Ni-Fe では小さな残留抵抗と大きな異方性が観測される事を定量的に導いた。更に Ni-Fe について Fe 濃度が 25% 以上で、Fe 濃度の增加と共に異方性が急激に減少する事が知られているが、これは \downarrow スピンバンドでフェルミ面が、d バンドの上端付近に見られるピークより徐々にずれだす結果生じる事を示した。次に遷移金属と非遷移金属の合金の例として Fe-Al, Pd-Al 不規則合金の電子状態の計算を行なった。Fe_{1-x}Al_x については、Al 濃度を増やしていくと共に d バンドが狭くなってくる事、同時に bcc バンドに特有の中央付近の深い谷間が持ち上がりてくる事が分かった。その結果 \uparrow スピンバンドではフェルミ面での状態密度が減少し逆に \downarrow スpin バンドでは増加し、それによって $x \leq 0.2$ の範囲で Fe サイトの磁気モーメント及び電子比熱係数が殆んど変化しないにもかかわらず強磁場帶磁率は急激に増加すると云う実験結

果の特徴が合理的に説明された。 $Pd_{1-x}Al_x$ については、 $x \rightarrow 0$ で Al サイトの核スピン格子緩和時間 T_1T が純アルミのそれにくらべて10倍以上大きな値をもつ事が知られており、その原因が Pd の d バンドの存在によってフェルミ面付近で Al サイトの s 状態密度が深い谷をもつ事にある事は以前より知られていたが、 Al 濃度を増やした時観測される T_1T が減少していく事の説明は得られていなかった。計算によると、 Al 濃度を増やしていくと共に Fe-Al 同様バンドが峠くなる効果が見られ、その為 d バンドによって押さえられていた Al サイトの s バンド状態密度がフェルミ面付近で回復していく、従がって T_1T が減少する事が確かめられた。この論文で提案された方法は応用段階に於いてまだ解決されるべき問題を含んでいるが、一般の合金を定量的に議論する上できわめて有力であると考えられる。

論文の審査結果の要旨

遷移金属の無秩序合金の電子状態は近年コヒーレントポテンシャル近似(CPA)の開発によってかなり進歩した。しかし現在までの CPA 理論は d バンドのみを対象とし、いわゆる tight binding 模型についての計算しか行われていない。遷移金属合金の電気抵抗等の輸送現象、遷移金属と非遷移金属の合金たとえば Fe-Al などについては、d 電子状態のみならず s, p 等の電子状態を考える必要がある。そのためには原子ポテンシャルから出発して波動関数のエネルギー依存性をも取入れた一般的な理論が望まれる。マフィンテインポテンシャル模型は金属中のポテンシャルを原子ポテンシャルから作り上げる有力な方法で純粋金属でのバンド計算の基礎となっている。これについて CPA を適用することは原理的には可能であるが、実際には実行不可能なものと考えられていた。赤井君は、新しい計算方法を考案し、この従来不可能とされていた計算を可能にするとともに、それを遷移金属間の合金の電気抵抗、Fe-Al, Pd-Al 等の合金の磁性、電子比熱等の問題に応用して成果を収めた。

赤井君は Monte Carlo 法による積分計算がかなり早い時期から積分の近似値を与えることに着目し、コヒーレントポテンシャルを決定する計算のさいに、波動ベクトル \vec{k} の空間についての積分をくりかえし行うことが計算を実行不可能にしていた点を次のように改良した。すなわちコヒーレントポテンシャルを self-consistent に決定する手続きと \vec{k} 空間の積分を同時に進行させ、 \vec{k} 空間の点を増やしつつコヒーレントポテンシャルの試みの値を改良して行き終局的には self-consistent equation を完全に満たす解に到達する方法である。これによって計算が始めて可能となり上記の問題について、それぞれ従来その機構が不明であった現象について、定量的裏づけを伴った新しい理論を与えることに成功した。

赤井君の新しい計算方法は今後なおいくつかのテストを経る必要があるが斬新なアイデアで新しい面を切り開いた点は高く評価される。また、上記の具体的な問題についての理論はそれ自身で十分に意義をもつものである。したがって理学博士の学位論文として十分に価値あるものと認める。