OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	相互作用している仮想束縛準位を用いた遷移金属及び合金の研究
Author(s)	寺岡, 義博
Citation	大阪大学, 1977, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/31713
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

【23】

氏名・(本籍)	寺岡義博
学位の種類	理学博士
学位記番号	第3834号
学位授与の日付	昭和52年3月18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	**相互作用している仮想束縛準位を用いた遷移金属及び合金の研究**
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 教授(基工) 吉森昭夫

論文内容の要旨

金属磁性の研究は，従来，ストーナー模型とハイゼンベルグ模型を用いて行なわれてきた。しかし，これら二つの模型は出発点が全く異なっており，それらを用いて金属磁性の統一的な物理的描像を把握することは非常に困難である。私の研究の究極の目的は，二つの模型を極限として含む新しい理論を作ることにある。ここでは最も簡単な場合について，一般的な定式化を行ない，その応用例を議論する。出発点として不純物の磁気的状態を議論するために導入されたアンダーソン模型を取り，これを非摂動状態にして，それらの間の電子の飛び移りを摂動として取り扱う。得られたグリーン関数から状態密度を求め，ハートリーフォック近似を用いて，電子数に対するセルフコンシステントな方程式を得る。これを解くことによって，遷移金属及び合金の磁気的状態とそれに関係した物理的性質を調べることができる。応用の一つとして，NiFeの不規則合金の格子定数と熱膨張係数を取り上げる。dバンドと自由電子バンドの間の電子の再配分が，磁気的状態の変化によってもたらされ，その結果，d電子雲のかさなりが変化し，格子定数もそれに応じて変わる。この際，単純な摂動計算は，Fe原子が最も大きく寄与することを示している。次にクロームのスピン密度波を取り上げる。これは，従来，電子と正孔のフェルミ面がネスティングすることによって生じると説明されてきたけれども，私は新しい機構をここで提案する。ネスティング模型の根本的欠陥は，磁気モーメントの大きさを説明することができないという点にある。この原因は，フェルミ面から遠く離れた状態も磁気モーメントを作るのに寄与しているにもかかわらず，それらを無視して，フェルミ面近くの状態だけで議論したことである。私は先に述べた理論を適用して，スピン密度波だけでなく，電荷密度波その他種々の物理量について定量的に満足すべき結果を得た。さらにFeRh規則合金の反強磁性状態から強磁性状態

への相転移を議論する。特にその磁化過程に焦点を当てて議論する。反強磁性状態において，磁気モーメントを持たないRh原子が，外部磁場がある値に達すると，モーメントを持つようになる。又，Fe原子の間の交換エネルギーが減少し，強磁性状態が安定になる。この場合，ハイゼング模型から期待された磁化過程とはかなり違った振舞が見られる。

論文の審査結果の要旨

遷移金属の諸性質は不完全殻であるd shellにある電子に由来する多くの特徴をもっている。このd電子は原子から原子へと遍歴するいわゆる遍歴電子の性質と原子に局在した電子としての性質の両面をもっているために，その電子状態の取扱いにはこの両面を取入れた理論が要求される。いわゆるバンド理論は純粋金属の基底状態の記述にはかなりの成功を収めたが元来電子状態を結晶全体に広がるBloch波として表現しているために各原子個々の状態を知るには不適当な場合が多い。寺岡君の論文は，各原子に局在した状態から出発して原子間移動を摂動として取入れる新しい手法を提案しそれを1．Crのスピン密度波 2．FeRh の反強磁性ー強磁性転移 3．インバー合金等の磁気体積効果の三つの問題に適用してそれぞれについて新しい理論的結果を与えたものである。

1のCrの問題では従来のバンド電子の描像に基ずく理論が定量的に極めて不満足なものであることを指摘し，新しい手法に基ずく計算によって定量的にスピン密度波を説明できることを示した。とくにスピン密度波の発生機構について全く新しい理論を与えている。2のFeRhではその磁場あるいは温度上昇による強磁性への転移について始めてミクロスコピックな物理像を与えた。3のインバー合金についてもFe-Fe原子間の相互作用が主原因であることを始めて主張し，最近それを裏づける実験事実が見出されている。

寺岡君の理論は現在のところ原子磁気モーメントの熱的ゆらぎを取入れるまでには至っていないが，将来金属物理学，磁性理論の分野でd電子の遍歴・局在両性質を同時に取入れる有力な方法になる可能性がある。また上記の三つの問題については，このような一般論的意義は別にしても，それぞれに非常に興味深い新しい理論を与えている点は高く評価することができる。したがって理学博士の学位論文として十分価値あるものと認定する。