

Title	核プローブのみる強磁性ニッケルの電子構造の理論的研究
Author(s)	片山, 博
Citation	
Issue Date	
Text Version	none
URL	http://hdl.handle.net/11094/32177
DOI	
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

【 4 】

氏名・(本籍)	片 山 博		
学位の種類	理 学 博 士		
学位記番号	第 4 5 2 6 号		
学位授与の日付	昭 和 54 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	核プローブのみる強磁性ニッケルの電子構造の理論的研究		
論文審査委員	(主査) 教授 金森順次郎 教授 国富 信彦 教授 伊達 宗行 助教授 三輪 浩 講師 南園 忠則		

論 文 内 容 の 要 旨

マフィンティンポテンシャルモデルを用いて、第一原理に立脚した計算に基づき、強磁性ニッケル中の核プローブおよび s, p 価電子を持つ不純物原子の格子間位置および、置換位置での電子構造を解明した。本研究の主たる目的は、絶対零度のみならず、有限温度での不純物核のみる内部磁場と、核スピン格子緩和時間の機構を解明する事である。また不純物による飽和磁化の変化と電子比熱の変化についても議論した。

大阪大学の原子核実験グループの、核反応による偏極した反跳核(^{12}B , ^{12}N 等) をニッケルに植え込んだ時の非対称 β 崩壊を利用した NMR によって、 ^{12}B の場合に、二種類の内部磁場と、核スピン格子緩和時間の信号が与えられているが、これを典型的な例としてとりあげ、これらの実験事実、理論的立場から統一的説明を与えた。理論計算に基づいて、観測された二種類の信号のうち、一方は置換位置からのもので、もう一方は、八面体格子間位置からのものであるという事が解明された。二種類の内部磁場は、有限温度において、まったく異なる温度変化をする事が観測されているが、電子構造の計算からは、スピン波励起の寄与に加えて、電子の一粒子励起を考慮する事で、その相異なる温度変化を、矛盾なく説明することができた。この解析から、内部磁場の符号と核スピン格子緩和時間の長さの間に存在する一般的な相関を演繹する事ができた。この一般的な相関関係は、他の核プローブの場合の解析にも適用されて確かめられている。たとえば、ニッケル中にたたき込んだ正中間子(μ^+)のみる絶対零度での内部磁場を計算し、実験値との一致が得られている。またこの計算によって、 ^{12}B の時と同様に、 μ^+ の見る内部磁場の温度変化についても実験結果を定量的に説明する事ができる。

この解析を他の不純物原子の場合にも拡張して、周期律表での各々の周期での不純物による内部磁

場の値とその符号の系統的な変化を矛盾なく説明できる物理的描像を確立した。それによって、第二周期と第三～第六周期の不純物原子による内部磁場の実験結果の違いを説明すると共に、同周期の不純物でも、置換位置に入る場合と、格子間位置に入る場合では、内部磁場に大きな違いが生じる事を示し、実験で得られている ^{19}F の二種類の内部磁場については実験値との良い一致が得られ、他の実験の未だおこなわれていない不純物原子の内部磁場についても位置による急激な違いを予言した。内部磁場の不純物原子の種類に対する系統的な変化は、不純物核周辺の電子構造が、逐次変化する事から生じているが、その電子構造は、 \uparrow スピンバンドと \downarrow スピンバンドの反共鳴エネルギー E_a の位置と与えられた不純物とその周辺のニッケル原子との反結合状態の中心位置とで表現する事ができるが、後者は、不純物原子のポテンシャルの深さに支配されている。

BとCの不純物原子によって生じる強磁性ニッケルの飽和磁化の減少についても、この解析を拡張して定量的に議論することができた。またをこれらの不純物原子に伴う電子比熱の急激な増加についても理論的解釈が与えられた。

論文の審査結果の要旨

片山君の論文は金属ニッケル中にimplantされたB, N, C, F, μ^+ , Cu, ……等の原子核が受ける hyperfine 相互作用による内部磁場およびその核・格子緩和時間等についてのデータを解析する目的で、これらの不純物原子核の周辺の電子構造をできるだけ正確に計算したものである。最近阪大理学部杉本研究室を始めとしていくつかの研究グループによって、これらの不純物原子核が只1コ存在すると考えてよいような状況での上記のデータが得られるようになった。従来の物的手段（通常のNMR）による測定も含めてこれらの原子核についてのデータを理解するためには、母体のニッケルおよび不純物周辺の電子状態を安易な原子軌道的モデルではなく、ポテンシャルエネルギーから出発して、1電子近似の範囲内で波動方程式をできるだけ正確に解くことが必要である。片山君の論文は格子間位置にある不純物原子核についての計算方法を確立した点で高く評価することができるが、それよりも計算結果から核プローブの与えるデータの物理的な意味を明らかにしたことが大きな意義をもつ。すなわち hyperfine 相互作用による内部磁場 H_{hf} には、フェルミ準位よりかなり低いエネルギーをもつ電子状態は負の符号をもつ寄与を、フェルミ準位附近の状態は正の寄与をすること、後者が核格子緩和および H_{hf} の温度変化に関係することから、 H_{hf} の全体としての符号と大きさ、その温度変化および緩和時間 T_1 の間に興味深い一般的な関係があることを結論した。また計算された H_{hf} , T_1 , H_{hf} の温度変化が定量的に実験データと一致することを示した。上記の一般的な関係は H_{hf} の正のものは T_1 が短く H_{hf} の温度変化が飽和磁化の温度変化よりも大きい、また H_{hf} が負のものはそれと逆の傾向を示すということで、現在迄の実験結果をよく説明している。さらに核プローブの種類によって H_{hf} の値が変化するが、周期律表の位置によってその変化の様子が異なること、また不純物核の位置が格子間位置か置換位置かによる相違等全般的傾向について定量的に実験データを説明する物理像を作り上げている。

片山君の論文は以上のような内容であって、核物性の分野および金属磁性の分野の両面について大きな進歩をもたらしたものであるから、理学博士の学位論文として十分な価値をもつものと判定する。