OUKA
Osaka University Knowledge Archive

Title	強磁性鉄中の不純物の電子状態
Author(s)	赤井, 昌子
Citation	大阪大学, 1982, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/33344
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。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

【6】

氏名・(本籍)	赤井昌子
学位の種類	理学博士
学位記番号	第5845号
学位授与の日付	昭和57年12月13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	**強磁性鉄中の不純物の電子状態**
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 助教授 鈴木勝久 助教授 南園忠則

論文内容の要旨

強磁性鉄中の不純物原子（原子番号1～56）の電子状態を自己無撞着なグリーン関数法に局所近似を用いて計算した。この論文の目的は二つに大別される。まず第一に，重い不純物原子（原子番号10以上）にかんしては，超微細相互作用有効磁場及び，核スピン格子緩和時間の原子番号の変化によるシステマティックな変化の機構を明らかにした。特に，不純物原子が遷移金属原子に属し，局所磁気モーメントを持つ場合は，自己無撞着な取り扱いが不可欠である。これらの不純物においても，超微細相互作用有効磁場及び核スピン格子緩和時間の実験との良い一致を得た。局所磁気モーメントについても，個々の実験との一致はもちろんのこと，有効磁場等との強い関連性が明らかとなった。第二の目的は，軽い不純物について，母体鉄中で占める位置を明らかにする事である。ミューオン(μ_+)，ホウ素等において近年実験が進み，低温領域での超微細相互作用有効磁場の値が，いくつか報告されているが，各々の不純物の位置は明らかにされていない。これら軽くかつ小さい不純物に関しては，鉄原子と置換して入る格子点位置以外に格子間位置も考えなければならない。これまでにも，現象論的立場から色々な議論がなされているが，ここでは，各位置での超微細相互作用有効磁場の値のみならず，各位置からの不純物原子の変化に対するエネルギーの変化も先と同様の第一原理に基づいた計算を行なった。その結果，ミューオンは四面体位置がエネルギー的に安定であり，かつその位置での超微細相互作用有効磁場の値もかなり良い実験との一致を見ることが出来，ミューオンは四面体位置を占めていると結論された。ホウ素に関しては，やはり四面体位置がもっとも安定であるが，八面体位置とのエネルギー差が小さいので，この二位置間の中間的な位置を占めている可能性が考えられる。

論文の審査結果の要旨

純金属の電子構造については，局所密度汎関数の理論と呼ばれる基礎理論に基づいて，電子相関のエネルギーを考慮した全く経験的なパラメーターを含まないセルフ・コンシステントな計算が定量的に信頼できる結果を与えることが確立しつつある。赤井君の論文は，この方法を不純物原子を1コ含む系に応用して，広汎な計算を行ったものである。今日迄の同様な計算は2，3の特定の不純物原子が特定の母体金属中にある場合について行われただけで，赤井君の今回の計算（原子番号Z＝1～56のすべての不純物原子を対象とする）が最初の系統的な研究である。

赤井君は母体金属として強磁性状態の鉄を考え1）置換位置の不純物原子核の超微細磁場，緩和時間2）磁性不純物原子の場合の磁気モーメント3）軽い不純物原子(μ^+，HからFまで）の場合の格子間位置（四面体位置および八面体位置）での同様な計算4）同じく軽い不純物原子（Al等も含む）の見る断熱ポテンシャルの各位置の中心からのズレに対する依存性，を中心として計算した。1）については，多くの実験データの示す原子番号Zについての規則変化をよく再現する結果を得た。規則変化の機構については吉田・寺倉・金森の理論があるが，赤井君の今回の計算は大筋においてこの理論を支持する結果を与えた。ただし前記3者の非セルフ・コンレステントな計算について2，3の不合理な点を指摘している。3d，4d電子を含む磁性不純物については，赤井君の計算によって始めて超微細磁場等の規則変化の機構が明らかにされた。3），4）での軽い不純物原子核についての計算は，核物性の分野および非晶体生成の機構等の見地から興味深いものである。注目すべき結果として，μ^+, H, B, C, F等は置換位置の中心が断熱ポテンシャルの極大点であってその位置に留まることが出来ないこと，また四面体位置から八面体位置への方向ではポテンシャルの変化が小さくその中間位置がポテンシャルの極小点となる可能性があること等を示したことが挙げられる。

赤井君の研究は，広汎かつ詳細な計算によって，経験的パラメーターを導入しないで電子状態を定量的に構築することから新しい機構・物性を発見しようとする最近の一つの研究方向の一典型である。その内容は理学博士の学位論文として充分なものと認める。

昭和57年11月29日理学部物理第1談話室において，関係教官出席のもとに公開研究業績発表会を開き，ひきつづき試問を行なった結果，合格と判定した。