

Title	スピンのゆらぎ, 格子のゆらぎが層状結晶における相転移に及ぼす効果
Author(s)	吉山, 秀樹
Citation	大阪大学, 1986, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/35172
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、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

氏名・（本籍）	よし 吉	やま 山	ひで 秀	き 樹
学位の種類	工	学	博	士
学位記番号	第	7299	号	
学位授与の日付	昭和61年3月25日			
学位授与の要件	基礎工学研究科 物理系専攻 学位規則第5条第1項該当			
学位論文題目	スピンのゆらぎ、格子のゆらぎが層状結晶における相転移に及ぼす効果			
論文審査委員	(主査) 教授 望月 和子 (副査) 教授 吉森 昭夫 教授 藤田 英一			

論文内容の要旨

種々の相転移現象において転移温度の近傍では、スピンあるいは、フォノンの相互作用の非調和項（多体効果によって生じた有効相互作用の非調和項）から生じるゆらぎのモード間結合が重要である。本論文では、第一部でスピンのゆらぎに関係した問題を、第二部で格子のゆらぎに関係した問題を扱う。

第一部では、層状結晶磁性体のらせん磁性（helix）-反強磁性（antiferro）転移におけるスピンのゆらぎの効果を明らかにする。この目的のために、温度に依らないスピンハミルトニアンを出発点とし、自己無撞着調和近似に基づいて、スピンの熱的ゆらぎをとり入れて、らせん構造におけるピッチの温度変化を計算した。その結果、らせん磁性-反強磁性転移が温度によって誘起されることを示した。さらに、この理論をらせん磁性-反強磁性転移を起こす典型的な物質、 NiBr_2 に適用し、観測されている NiBr_2 のピッチの温度変化およびらせん磁性-反強磁性転移温度を定量的に説明することに成功した。また、 NiBr_2 は、磁場によってもらせん磁性-反強磁性転移を起こすが、この磁場誘起らせん磁性-反強磁性転移は、温度誘起らせん磁性-反強磁性転移とは、異なる原因で起こることを明らかにした。さらに、 NiBr_2 は磁場を強くすると、反強磁性から扇型磁性（fan）へ転移することを理論的に予言し、のちに実験によって確認された。

第二部では、層状遷移金属化合物の電荷密度波（CDW）の形成を伴う構造相転移に対して格子のゆらぎをとり入れた理論を展開し、CDW転移点（ T_c ）および T_c 以上での種々の物理的性質に及ぼす格子のゆらぎの効果を明らかにする。具体的には、電子と正孔の二つのバンドからなるフレールリッヒのハミルトニアンを出発点とし、温度グリーン関数法を用いた。まずフォノンの分極関数に電子を媒介として生じるフォノンモード間の結合をとり入れて、格子のゆらぎとフォノン振動数を自己無撞着に求めた。

この方法は、格子変位による自由エネルギー展開の4次の非調和項を自己無撞着に決めることに対応している。その結果、ソフトフォノンモード ($q=Q$) を中心にしてCDWのコヒーレンスの長さの逆数程度の広がりをもつ波数の格子のゆらぎが、 T_c の低下に重要な役割を果たすことを明らかにした。3次元系に対して求めた T_c は、ゆらぎを無視した時の転移温度の半分程度になることを示した。また、逆格子空間における格子のゆらぎは、 $T \lesssim 2 T_c$ では、 $q=Q$ のまわりのせまい領域に限られ、 $T \gtrsim 2 T_c$ では、逆格子空間全体に広がることを示した。次に、電子の自己エネルギーに格子のゆらぎをとり入れて、 T_c 以上での状態密度、スピン磁化率および電気抵抗を計算した。その結果、スピン磁化率と電気抵抗は、先に述べた逆格子空間における格子のゆらぎの性質の温度変化を反映して、 $2 T_c$ 近くで特徴的な温度変化をすることを明らかにした。さらに、このゆらぎの理論を層状遷移金属化合物 $1 T - TiSe_2$ に適用し、CDW転移温度以上で観測されているスピン磁化率と電気抵抗の異常な温度変化を半定量的に説明することに成功した。

論文の審査結果の要旨

種々の相転移現象において転移点近傍ではスピンや格子のゆらぎが重要な役割を果たす。

本論文は二部から構成されていて、第一部では「温度によって誘起されたヘリックス・反強磁性転移におけるスピンのゆらぎの効果」を調べている。この転移は、スピン間交換相互作用を分子場近似(ゆらぎを無視)で扱う理論では説明困難で、その解決が望まれていた。本研究ではスピンの熱的ゆらぎの効果自己無撞着調和近似で取り入れた理論を展開している。ヘリカル磁性体 $NiBr_2$ について、転移温度、ヘリカル構造の周期の温度変化、スピンモーメントの熱平均値を計算し、測定結果を定量的にもよく説明できることを示した。なお磁場下での逐次相転移を分子場理論で調べて、扇型構造の存在を理論的に予言し、これは後に実験で確認された。

第二部は「電荷密度波(CDW)転移における格子のゆらぎの効果」に関する研究である。電子格子相互作用を媒介として生じる原子間力の格子変位の四次に比例する非調和項の効果(格子のゆらぎの効果)を取り入れた理論をダイヤグラム法を用いて展開している。まず、ゆらぎの効果はCDW転移温度を下げるが、その下りは乱雑位相近似で見積った値の高々半分程度であることを明らかにした。さらに、波数空間におけるゆらぎの性質を詳細に調べ、転移点近傍ではCDWを特徴づける波数のモードのゆらぎが支配的であるが、温度上昇と共にこのゆらぎは抑えられて色々な波数のモードのゆらぎが一斉に成長することを示し、このようなゆらぎの性質がスピン磁化率と電気抵抗の転移点直上の温度変化に顕著に反映されることを明確にした。計算結果はCDW転移をおこす $1 T$ 型 $TiSe_2$ の測定結果と定性的のみならず定量的にもよい一致を示している、これまで異常な温度変化として注目されてきた現象を格子のゆらぎによって初めて解明した。

以上のように、本研究はゆらぎが果たす役割について、数々の重要な知見を与えるものであり、学位論文として十分の価値があると認める。