



Title	Electron Correlation and Metal-Insulator Transition in Ni Compounds
Author(s)	高橋, 学
Citation	大阪大学, 1993, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/38095
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">https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed >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	たか はし まなぶ 高 橋 学
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	第 10587 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 5 年 3 月 25 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 理学研究科物理学専攻
学 位 論 文 名	Electron Correlation and Metal-Insulator Transition in Ni Compounds (ニッケル化合物における電子相関と金属絶縁体転移)
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 吉川 圭二 (副査) 教 授 興地 斐男 教 授 大坪 久夫 大阪大学総長 金森順次郎 助教授 阿久津泰弘 助教授 城 健男

論 文 内 容 の 要 旨

遷移金属化合物の電子構造と多体効果の研究を Ni 化合物を中心に行なった。これらの化合物に関しては絶縁体－金属転移と磁性との関連はまだそれほど明らかにはされていない。Ni-S 系の圧力または温度による絶縁体－金属転移では光電子分光の結果は転移の前後で大きな変化がないことが知られているが、バンド計算の立場では説明できない。このことは転移前後での電子相関の働きが重要であることを示唆している。そこで NiO, NiS を想定した 1 次元モデルをつくり、大規模行列の対角化を武器に、基底状態の性質を調べた。電荷移動エネルギーを反強磁性絶縁体が実現している大きな値から下げていくと、基底状態がある電荷移動エネルギーの値で突然、変ることがわかった。反強磁性の絶縁体相のとなりには、磁気モーメントの大きさが絶縁体相とそれほど違わないが、隣どうしの Ni 間の反強磁性的な相関はかなり小さくなる相が存在することがわかった。この相では、Ni と配位子間のスピン相関が反強磁性的に増加していて、高密度近藤状態になっていると考えられる。また、この相との絶縁体相との、転移の前後では spectral density のピーク位置が、ほとんど変化しないことが確かめられた。この結果は、バンド計算では説明のつかなかった、NiS における光電子分光の実験結果と矛盾しない。この中間的な相が NiS の金属相に対応していると考えられる。この中間的な金属相では、まだ電子相関の影響が強く局所的な電子構造が、絶縁体のときと、ほとんど異ならないために、光電子分光のスペクトルが、変化しないと考えられる。

この中間状態をさらに追求するには、少数原子系の厳密対角化の方法では限界があるので、近似理論として Local Ansatz Approach を用いることを次に試みた。この手法にモンテカルロ法を用いることを考案した。この計算から、charge transfer energy の小さい領域で Ni 磁気モーメントが $1 \mu_B$ 以上あるが反強磁性秩序はない状態が反強磁性 Hartree-Fock よりもエネルギー的に低くなることがわかった。この状態は、単なる非磁性 Hartree-Fock 解とは異なり電子相関の影響を強く受けている。またこの状態が、少数原子系での厳密対角化で得られた金属相に対応していると思われる。この手法自体はまだ改良を加える余地があると考えている。

また Ni 化合物に関連して La_2MO_4 ($M = \text{Cu}, \text{Ni}$) の La サイトの内部磁場に関する研究をおこなった。 $M = \text{Ni}$ の場合 Cu と比べて、La サイトの内部磁場がかなり大きく、単純に M のダイポールモーメントでは説明できないことが実験から報告されているが、この事実を説明するためにクラスターモデルを用いて、電子相関と内部磁場生成の機構を、各種の原子対の間の電子移動を禁止した計算も行なって、丹念に調べた。その結果 La_2MO_4 の場合には、頂点酸素を介した、 $\text{Ni } 3d \ 3z^2-r^2$ のホールと、 $\text{La } 6s$ のホールとのスピン相関のために、 $\text{La } 6s$ の up-spin ホール down-

spin ホールの分布に差が生じ、超微細相互作用により、大きな内部磁場を生じることがわかり、また定量的にも満足
のいく結果が得ることができた。

論文審査の結果の要旨

ニッケル化合物には、外的条件を変える事により、金属絶縁体転移を起こすものが存在する。高橋君の研究は、有限個数のニッケルイオンと陰イオンよりなる模型の電子状態についての大規模数値計算及びそれと相補的な近似計算により、金属絶縁体転移が起こり得る事を示し、電子相関の果す役割について新しい知見を与えたものである。その内容は、博士（理学）の学位論文として十分なものであると認める。