

Title	Role of Lattice Distortion in Multi-Band Ferromagnets
Author(s)	Kawamoto, Tohru
Citation	
Issue Date	
Text Version	ETD
URL	https://doi.org/10.11501/3129135
DOI	10.11501/3129135
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

氏名	かわもととおる 川本 徹
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第 13236 号
学位授与年月日	平成9月3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 基礎工学 研究科 物理系 専攻
学位論文名	Role of Lattice Distortion in Multi-Band Ferromagnets (複数バンド強磁性体における格子歪みの役割)
論文審査委員	(主査) 教授 鈴木 直 (副査) 教授 天谷 喜一 教授 三宅 和正 助教授 白井 正文

論文内容の要旨

二種類の複数バンド強磁性体における格子歪みの役割についての研究をおこなった。一つはTDAE-C₆₀であり、もう一つはK₂CuF₄を代表とした層状ペロブスカイト型軌道整列強磁性体である。

TDAE-C₆₀の強磁性発現機構は未だ明らかになっていないが、本研究ではその起源として、電荷移動誘起分子内ヤーンテラー(CTJT)歪みと、分子間協力ヤーンテラー(CJT)歪みである可能性を提案した。まず、一つのC₆₀イオンに対して半経験的分子軌道計算を用いた構造最適化をおこなった結果、C₆₀は電荷移動によってC₇₀になる際にラグビーボール状へのCTJT歪みが起こる事が明らかになった。次に、この歪んだC₇₀がある適当な配向を結晶全体で保って整列する、すなわちCJT歪みを起こすならばこの物質は強磁性になりうる事を示した。さらに、この機構の正当性を議論するためにC₇₀をモデル化した一次元複数バンドハバードモデルの磁気相図を厳密対角化の手法を用いて描いた。その結果、分子軌道法で得られたC₇₀に対するパラメータ領域においては強磁性状態が安定である事が示された。最後に、実際の結晶構造において三次元的に強磁性秩序状態が安定化するCJT歪みの構造を示し、それが実現しているか否かを確かめる実験方法を提案した。

軌道整列強磁性体は、近年圧力効果が盛んに報告されているが、その帯磁率や原子間交換相互作用の大きさの圧力依存性が物質によってかなり異なっている。特に、K₂CuF₄は反強磁性的歪みを保ったままでの高スピン-低スピン転移の可能性がある。まず、実際の系を単純化して得られる一次元複数バンドハバードモデルの磁気相図を厳密対角化の手法をもちいて描いた。その結果、反強磁性相とヘリカル相の二つの低スピン相が反強磁性的歪みの下でも、圧力をかける事によって安定化する事が確かめられた。また、実際のCuX₂面をより正確に議論するための二次元モデルを摂動論を用いて導出した。このモデルを、常圧下及び高圧下でのFLAPW(フルポテンシャルを用いた補強平面波法)バンド計算によって見積もったパラメータを用いて議論すると、K₂CuF₂においては反強磁性的歪みを保ったままでの強磁性から反強磁性への転移が起こりうる事が明らかになった。さらに、K₂CuF₄のT_cの圧力依存性もこのモデルで定性的に説明できる事が示された。

論文審査の結果の要旨

本論文では、複数バンドをもつ強相関係の磁性における格子歪みの役割について二つの課題に関する理論的研究を行い、その結果をまとめたものである。第一に有機磁性体TDAE-C₆₀の強磁性発現機構に関する研究、第二に軌道整列強磁性体に対する圧力効果に関する研究である。

有機強磁性体TDAE-C₆₀の強磁性発現機構は未だ明らかになっていないが、本研究では、電荷移動誘起分子内ヤーレンテラー (CTJT) 歪みと分子間協力ヤーレンテラー (CJT) 歪みの二種類の格子歪による発現機構を提案した。これは、C₆₀のLUMO軌道が三重に縮退しているためC₆₀ではラグビーボール状へのCTJT歪みが起こり、この歪んだC₆₀がCTJT歪みを起こしてある適当な配向を結晶全体でとることにより強磁性が発現するモデルである。具体的には、C₆₀をモデル化した一次元複数バンドハバードモデルの磁気相図を厳密対角化の手法を用いて構築すると同時に、分子軌道法で評価したC₆₀のパラメータ領域においては確かに強磁性状態が安定であることを示した。また、三次元的に強磁性秩序状態が安定化するCJT歪みの構造をいくつか示唆し、それが実現しているか否かを確認する実験方法も提案した。

K₂CuF₄に代表される軌道整列強磁性体に対する圧力効果に関する研究を行い、反強磁性的歪みを保ったままで圧力誘起高スピン-低スピン転移の起こり得ることを初めて示した。まず、実際の系を単純化した一次元複数バンドハバードモデルの磁気相図を厳密対角化の手法で構築し、反強磁性相とヘリカル相の二つの低スピン相が反強磁性的歪みの下でも圧力印加により安定化することを示した。次に、実際のCuX₂面をより正確に反映した二次元モデルに摂動論を用いて基本的に一次元モデルと同じ磁気相図を導出した。また、K₂CuF₄に対する常圧下及び高圧下でのFLAPW(フルポテンシャル補強平面波法)バンド計算に行って現実的なパラメータを評価し、K₂CuF₄においては反強磁性的歪みを保ったままで強磁性から反強磁性への転移が起こりうることを明らかにした。さらに、K₂CuF₄の強磁性転移温度T_cの圧力依存性もこのモデルで定性的に説明できることを示した。

以上のように本研究は、最近その重要性を増している複数バンド強相関係の磁性発現機構に関して新しい観点からの提案をしており、物性物理学の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。