

Title	粒子の規則配列と対相互作用
Author(s)	金森, 順次郎
Citation	大阪大学低温センターだより. 12 P.6-P.8
Issue Date	1975-10
Text Version	publisher
URL	<a href="http://hdl.handle.net/11094/6798">http://hdl.handle.net/11094/6798</a>
DOI	
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

Osaka University

# 粒子の規則配列と対相互作用

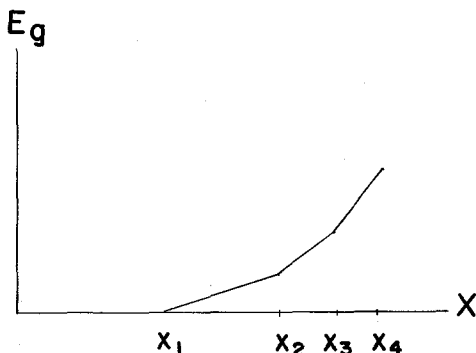
理学部 金森 順次郎 (豊中 2451)

「低温」と必ずしも関係があるとはいえないので気が引けるが、少し毛色の変わった話を書かせていただく。いわゆる「格子気体」は気体分子が与えられた空間格子の格子点だけに存在するとして、ある格子点にある分子とその近傍の格子点にある分子との間に相互作用を考えるモデルである。運動エネルギーを無視して、その基底状態を考えると、相互作用の大きさとその及ぶ範囲に応じて、特定の濃度(濃度の定義は気体分子の総数と格子点の総数の比で、以下 $x$ という文字であらわす。 $x$ は $0 \leq x \leq 1$ の変域をもつ)で、分子の規則正しい配列が出現することが期待される。このことは、小林・長谷田両氏によって発見された $C_0Cl_2 \cdot 2H_2O$ の磁化過程で出現するスピン配列、固体表面に吸着された分子(または原子、たとえばHe原子の場合は「低温物理」の話題の一つである。)の規則配列、2元合金での規則格子の生成と関係づけられる。 $C_0Cl_2 \cdot 2H_2O$ の場合、低温で強い磁場をb軸方向に掛けるとすべてのモーメントは磁場方向に揃う。この状態から磁場を減少させると、ある磁場で磁場と逆向きのモーメントが出現し、その総数は $C_0^{2+}$ の総数の $1/3$ で、規則正しく配列した状態に移る。さらに磁場を減少させると、つぎに反強磁性状態に相当するスピン配列をとる。この逆向きのモーメントが格子気体の分子に対応し、磁場は化学ポテンシャルに相当する。以下気体分子を一般的に粒子と呼ぶことにする。

$C_0Cl_2 \cdot 2H_2O$  では濃度  $x = 1/3$  と  $1/2$  (反強磁性状態) で規則配列が実現するわけである。

体心立方格子の場合、もし第1近接格子点間の相互作用だけを考え、それが反発的、すなわち第1近接格子点の対を同時に粒子が占めるとエネルギーが高くなるとすると、粒子濃度 $x$ が0から $1/2$ までは、第1近接の粒子対を作らないように粒子を配置して行くことができる。しかし $x > 1/2$ では、どうしても

もそのような原子対を作らざるを得ないことは、ほとんど自明のことである。このとき系の基底状態のエネルギーは $x$ の関係として、 $0 \leq x \leq 1/2$ の間は零、 $x > 1/2$ である傾きで上昇することになる。 $x = 1/2$ では体心立方格子を構成する二つの単純立方格子のどちらか一方が粒子によって占められたいわゆるCuZn型とよばれる規則格子が出現する。ここで第2、第3、……とある有限の範囲まで相互作用のrangeを広げると、一般に基底



第1図

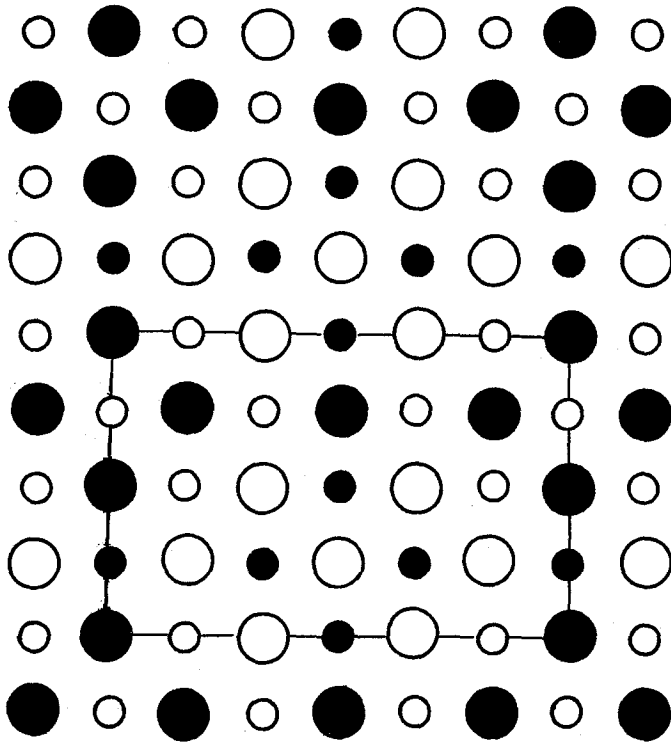
第1図 基底状態のエネルギー $E_g$ と粒子濃度 $x$ の関係。二つの折れ目の間は、両端に出現する規則配列の2相混合の状態が基底状態となり、 $E_g$  vs.  $x$ は必ず直線となる。

状態のエネルギー  $E_g$  は、 $\chi$  の関数として第1図に示すような折れ線となる筈である。

(以下に述べるように、このような  $E_g$  vs.  $\chi$  の関係は、個々の実例では厳密に証明することができるが、一般的な証明は未だ与えられていないことはお断りしておきたい。) 折れ線の折れ目  $\chi_1, \chi_2, \dots$  で規則配列が出現することが期待される。体心立方格子の例では、第2近接格子点の相互作用が反撥的なとき、 $\chi = 1/4$  が新しい折れ目となりいわゆる  $Fe_3Al$  型の規則配列が出現する。

どのような濃度で  $E_g$  vs.  $\chi$  の曲線に折れ目が出現し、どのような規則配列が出現するかということは、相互作用の及ぶ範囲と符号を含めた相対的な大きさと格子の幾何学的条件で決まる。筆者は約10年前に、濃度  $\chi$  を与えたときの第1, 第2... 近接原子対の総数の適当な1次結合の下限あるいは上限を与える不等式が存在することを利用した「不等式の方法」を提案した。この方法は最近鏡木によって大いに改良され、かなり遠くまでの相互作用を考える場合にも使えるようになった。これが解析的に上記の条件を求める唯一の方法であるが、まだまだ不満足なところも多い。その詳細を述べることは目的でないので、例をあげるに止める。たとえば面心立方格子では、第2近接点相互作用までであれば、厳密に相互作用定数のすべての範囲で  $E_g$  vs.  $\chi$  曲線と規則配列を決定することができる。現実の合金の問題と比べると、この範囲では有名な構造が折れ目として現われないものもあるので、第4近接点までの相互作用を取入れた解析を行った。この場合、特定の規則配列が基底状態であるための充分条件を求めることは比較的容易であるが、それが  $E_g$  vs.  $\chi$  曲線の折れ目になることを証明するのは困難な場合があって、相互作用定数のすべての値について厳密な解析はまだできていない。しかし推測を交えて得た一応の結論からいくつかの興味ある事実を見出した。その詳細は省くがたとえば、 $Mn-Au$  系で  $Au$  rich の領域では、 $Ni_4M_0$  型 ( $\chi = 1/5$ ),  $TiAl_3$  型,  $Mn_2Au_5$  型,  $Si_2M_0$  型 (これは体心立方格子に基礎をおいたものであるが、面心立方での  $Pt_2M_0$  型に非常に近い) の規則合金が見出されているが、筆者の解析はこれらの構造は、相互作用定数について大体共通の条件で出現し、もしこの他の構造 (たとえば  $\chi = 1/6$  である構造) が存在しないことが確立すれば、 $V_1 > |V_2| + |V_3| + |V_4|$   
 $V_4 > 0, V_2 + V_3 < 0, V_2 - V_3 > 0, -V_4/2 < V_2 < V_4$  で囲まれた領域に相互作用定数  $V_i$  ( $i$  は  $i$  番目の近接点  $V > 0$  は反撥力) があることになる。

紙数が限られているので、このような解析の意義を論じて結びとしたい。合金ないし吸着原子の規則配列 (たとえば  $W$  の (110) 面上の  $Na$  は  $\chi = 1/6, 1/4, 1/3$  で規則配列をとる) を考えるとき、対相互作用モデルがどこまで成り立つかということが第一の問題であろう。逆の方向からのアプローチとしては、たとえば長週期構造や  $Cr$  の  $SDW$  について、電子状態を逆格子空間から眺めて  $Fermi$  面の nesting という考えが有力である。一方対相互作用という考え方は実空間からのアプローチで (多体力の問題には立入らないとしても)、現象論的な便利さあるいは有用性があっても、その相互作用の実際の大きさについては漠然としたものと考えられている場合が多い。現実にはいくつかのアプローチの総合 (弁証法が好きならば、弁証法的展開と取られるかも知れないが、紙数の関係で話を単純化していることをお断りしておく) が必要であるが、上記のような解析で規則配列の出現から対相互作用についての情報を引き出すのがこのような解析の目的の一つであろう。一方  $Mn-Au$  系の例で見られるように、相互作用の相対的な関係が粒子濃度によって大きな変化がないように見える。このようなことは一つには、新しい規則合金の発見法の一つになる可能性があるとともに前にふれたように電子論的に相互作用を考察す



第 2 図

第 2 図 面心立方格子での規則配列の例  $\chi = 5/12$  に相当する。図は (001) 面への投影で、大きい円は (001) 面の格子点、小さい円はそれから Z 方向に  $\pm 1/2$  ずれた面の格子点である。黒丸は粒子によって占められる格子点を意味する。線は単位胞を示す。

る手掛りを与える。筆者の研究室ではインパー合金のインパー特性出現条件や、Cr の SDW について、局在電子状態から出発するアプローチが有用であるという結論を得ている。吸着原子や規則合金についての本研究はいずれそのような研究と結びつけたいと思っている。なお本研究の「不等式の方法」については、M. Kaburagi and J. Kanamori, Prog. theoret. Phys. (1975) 7月号を見られたい。

なお、面心立方格子でこの解析から基底状態になる可能性が証明されている複雑な構造の例として、第 2 図に象徴的に  $\chi = 5/12$  で  $V_2, V_3, V_4$  が正で Comparable のときに出現する配列を示した。