The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	パイライト型化合物NiS2-xSex並にNi1-xCox(Cux)S2の電子状態に関する理論的研究 : 常磁性反強磁性転移と金属非金属転移
Author(s)	高野, 弘
Citation	大阪大学, 1982, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/776
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

【24】

氏名	高野弘（たかの ひろし）
学位の種類	工学博士
学位記番号	第 5659 号
学位授与の日付	昭和57年3月25日
学位授与の要件	工学研究科 応用物理学専攻 学位規則第5条第1項該当
学位論文題目	**パイライト型化合物$NiS_{2-x}Se_x$並に$Ni_{1-x}Co_x(Cu_x)S_2$の電子状態に関する理論的研究** **——常磁性反強磁性転移と金属非金属転移——**
論文審査委員	(主査) 教授 庄司 一郎 教授 池田 和義 教授 橋本初次郎

論文内容の要旨

本論文はパイライト型結晶構造をもつ化合物$NiS_{2-x}Se_x$並に$Ni_{1-x}Co_x(Cu_x)S_2$の電子状態を理論的に研究した結果をまとめたものであり，次の5章から成っている。

第1章序論では，本論文の位置づけおよび目的を述べており，上述のパイライト型化合物が「比較的単純な電子構造をもちながら常磁性反強磁性転移並に金属非金属転移を示す」点で電子相関効果の研究における一つの典型物質であることを述べている。また，上述の化合物の電子系を記述するために二重縮退バンドをもつハバード・ハミルトニアンを用いることを提案している。

第2章では，ハバード・ハミルトニアンに関する理論的研究の現状について述べた後，本論文で用いた近似の基礎となるグッツビラー近似について述べている。

第3章では，グッツビラー近似を以下の2点で改良して，バンド縮退のないハバード・ハミルトニアンの基底状態における磁気相図を描いている。第1点は確率の取り扱いをペア・サイト近似へ拡張したことであり，この拡張により反強磁性体への近似の適用を可能にしている。更に，第2点として電子相関の強い極限における考察をもとにして磁気秩序形成における結晶構造の影響の取り扱いを改良している。

第4章では，上述のパイライト型化合物を取り扱うために第3章で改良したグッツビラー近似を二重縮退バンド系へ拡張している。そして，二重縮退バンドをもつハバード・ハミルトニアンを用いてこれらの化合物の相図における反強磁性転移温度（ネール温度）の固溶体濃度依存性および金属非金属境界線をよく再現できることを具体的計算にもとづいて示している。その結果，ネール温度の固溶体濃度依存性および金属非金属転移において原子内交換相互作用が重要な役割を果たしていることを

指摘している。

第5章では，以上の研究成果をまとめている。

論文の審査結果の要旨

電子相関効果の研究は遷移金属およびその合金の磁性並に遷移金属化合物（酸化物，カルコゲン化物等）の金属非金属転移および磁性の理解において重要である。

本論文は比較的簡単な電子構造をもちながら常磁性反強磁性転移並に金属非金属転移を起こす固溶体$NiS_{2-x}Se_x$並に$Ni_{1-x}Co_x(Cu_x)S_2$における電子相関効果を理論的に研究したもので，主な成果を要約すると次の通りである。

(1) 電子相関効果を取り扱うための近似法の一つであるグッツビラー変分法をペア・サイト近似へ拡張することにより反強磁性体への適用を可能にしている。更に，電子相関の強い極限における考察をもとにした改良を加えることにより，一次元系および電子相関の強い極限において知られている正確な結果と定性的に一致する結果が再現できることを確かめている。

(2) 二重縮退バンドをもつハバード・ハミルトニアンに上述の改良された近似法を適用することにより，$NiS_{2-x}Se_x$並に$Ni_{1-x}Co_x(Cu_x)S_2$の相図におけるネール温度の固溶体濃度依存性および金属非金属境界線をよく再現できることを具体的計算にもとづいて示している。その結果，原子内交換相互作用が重要な役割を果たしていることを明らかにしている。

以上のように本論文は工学上応用範囲の広い遷移金属合金および化合物の物性理解において重要である電子相関効果に関して新しい知見を得るとともに，電子相関効果を取り扱うための改良された近似理論を提示しており，学術面のみならず応用面においても重要な貢献をなすものである。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。