

氏名	奈 良 重 俊
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	理 博 第 464 号
学位授与の日付	昭 和 52 年 5 月 23 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 1 項 該 当
研究科・専攻	理 学 研 究 科 物 理 学 第 一 専 攻
学位論文題目	格 子 模 型 に よ る 液 体 金 属 の 研 究

論文調査委員 (主査) 教授 松原武生 教授 富田和久 教授 恒藤敏彦

論 文 内 容 の 要 旨

液体金属は通常の液体の特性の他に、電気伝導をおこなう比較的自由的な電子が存在することによる特性がつけ加わっていると考えられる。その特性の中で、最近注目を集めている現象として液体金属の臨界点以上の状態で現われる金属非金属転移がある。臨界点以上では液体と気体の構造上の区別がなくなるのに対して、電気伝導性に関しては、高密度液体側は金属的であり、低密度気体側は絶縁体とみなされるから、どこかでこの両極端の状態の間の転移がおこななければならない。最近の実験によれば、現実に臨界点以上の液体金属でこの金属非金属転移がおこなっているが、まだその全貌、特に臨界点近傍の振舞についてよくわからないことが多い。

主論文はこの問題を理論的に解明するために簡単な模型を提案している。数学的困難をさけるために、液体中の乱れた原子分布を三次元格子の格子点に原子と空孔をばらまいた配置で代表する。これは液体の格子模型として従来しばしば用いられてきたものである。これにつけ加えて、原子あたり1箇の電子を考え、電子は原子が隣接格子点に存在するときだけ、量子力学的トンネル効果でとび移ることができ、また同一原子にスピンの向き異なる2箇の電子が共存したときはUだけクローン反撥によるエネルギーがつけ加わると考える。結晶内の電子に対しては、これはHubbard模型と呼ばれて電子相関が重要な役割を果す金属の物性を議論するときしばしば用いられているものである。つまり液体の格子模型と電子系のHubbard模型を組合せたものを考え、液体金属の特性の本質的なところを記述しようとしている。

この複合模型で与えられる系の状態和あるいは自由エネルギーが計算できれば、臨界点を含むすべての状態の熱力学的性質がわかる。主論文では、自由エネルギーを近似的に求めるために、格子模型に対して有効であった高木 Bethe-Peierls 近似を、また Hubbard 模型に対して有効であった Gutzwiller 近似を導入し、両者を組合せた近似によって状態和を導き、圧力その他を求め圧力-温度平面あるいは密度-温度平面上に状態図を画くことができるようにしている。その際、系の電気伝導性については、

直接電気伝導度を計算することの困難さをさげ、Gutzwiller 近似に基づいて電子が格子内を遍歴してまわる状態にあるか、原子に局在した状態にあるかを判定する条件を見出し、前者の状態を金属性、後者の状態を絶縁性とみなして、金属・非金属転移がおこる境界点を決定している。

主論文で扱われた模型には、電子の動きやすさを代表するエネルギーバンドの幅 W 、電子間の相関の大きさを表わすクーロンエネルギー U 、および自由電子以外の自由度からくる電子間の引力のパラメータ J の3つのパラメータが含まれているが、申請者はこの3つの量の組合せを色々と変えて、状態図および金属・非金属転移の境界線を描き、多種多様な状態がおこりうることを示している。そして液体金属において自由電子が果たす役割の特徴的な点をいくつか示し、また多くの可能な状態図の中で、現在までに観測されている型のものだけが何故特に多く現われるかその理由を明らかにしている。

参考論文1は、2次元 Ising 模型の中で磁場が存在しても厳密に解ける一つの反強磁性模型と、厳密に解きうる乱れた分布をもつスピン系の模型を組合せることによって、乱れた分布を持つ反強磁性のスピン系の磁場下の厳密解の一例を示したものであり、参考論文3はその速報である。参考論文2は金属半導体の熱起電力を Kubo 公式による厳密な方法で導出し、従来の Boltzman 方程式による結果と比較したものである。

論文審査の結果の要旨

臨界点近傍の液体金属の性質、特にその金属・非金属転移については、ランダム系の問題としても電子相関の著しい系の問題としても、極めて興味があり、かつ重要な問題として、多くの実験がくり返されてきた。しかし実験上の困難さもあって今なお詳細な点で何がおこっているか不明な点が多く残されている。このような現状では、理論的に簡単な模型でもよいから現象の本質を簡明に示し、どんな現象がおこりうるかを分析して見せることは実験の今後の発展に大いに役立つであろうと思われる。

申請者の主論文はこの要望に応えたものである。数学的困難はできるだけさげ、臨界点近傍の液体金属の特性の本質的な部分だけを具えた簡単な模型を提案し、それを近似的ではあるが本質を見失わない範囲で解いて、今まで気付かれなかった新しい可能性を指摘している。申請者が考えた模型は液体の格子模型と電子系の Hubbard 模型を組合せたものであるが、これは現在の問題に適切なものである。それは気体液体の臨界点附近の振舞について、格子模型は定性的にその主要な点を教えることは既によく知られており、また金属・非金属転移の存在をもっとも簡単な形で示せるのが Hubbard 模型であったからである。申請者はこの複合模型の熱力学的性質を調べるのに、状態和を従来よく用いられた近似を援用しながら、実に要領よく解いて見せ、予想通り臨界点以上で液体金属の格子模型が金属・非金属転移をおこすこと、しかも詳細に見ると、模型を特徴づけるパラメータによって、臨界点近傍で金属・非金属転移のおこり方に大きく分けて3通りの異なる型があることを指摘している。この指摘が現実の液体金属について実現されるか否かは興味ある問題であり、今後の実験に大きな刺激を与えたと言えることができる。

また申請者は液体金属と非金属液体の凝集機構の差を、模型の中で明快に示している。自由電子が存在し、それが遍歴状態にあるときは余分の金属的凝集力を与え、それは局在状態で消失すること、その

ために金属の方がより広い範囲で液体として存在しうることを示しているが、これは興味ある指摘である。

以上のように主論文は、現在実験上不明な点が多い臨界点近傍の液体金属の振舞について、簡単な模型を用いて新しい示唆を与えたものとして、この方面の研究の発展に寄与するところが少なくない。なお参考論文は、申請者が統計物理学と固体論の諸分野において豊富な知識とすぐれた研究能力を持っていることを示している。

よって、本論文は理学博士の学位論文として価値あるものと認める。