

氏 名	お かね べ たく や 岡 部 拓 也
学位(専攻分野)	博 士 (理 学)
学位記番号	理 博 第 1787 号
学位授与の日付	平 成 9 年 3 月 24 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 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	Theory on the Itinerant Ferromagnetism in the 3d-Transition Metal Systems. (3d 遷移金属強磁性の理論)
論文調査委員	(主 査) 教 授 山 田 耕 作      助 教 授 大 見 哲 巨      助 教 授 池 田 隆 介

### 論 文 内 容 の 要 旨

鉄, コバルト, ニッケルを中心とする遷移金属強磁性は古くから知られた現象でありながら, その理論的解明は困難であった。その理由は, 電子間の相互作用が強磁性の出現にとって不可欠でありながら, 多体問題であるために精度のよい近似方法が存在しなかったためである。1980年代に発展した軌道放射を利用した光電子分光の実験によって, ニッケル等の金属で d 軌道にある 2 つの正孔間のクーロン相互作用の大きさが測定された。その結果, 2 つの d 正孔間のクーロン相互作用は従来考えられていた程には大きくないことが判明した。その理由は, s, p 電子が 2 個の d 正孔の電荷をスクリーンするためである。こうして, 各原子当たり 0.6 個という少数の正孔を持つニッケルにおいてさえ, 2 つの正孔が同じ原子上に存在する確率が 10% 以上あることがわかった。このようにしてフント結合と呼ばれる電子のスピンをそろえる結合力が働く。この結合力の大きさは上記のクーロン相互作用の場合と異なり, s, p 電子によるスクリーニング効果がほとんどないので, クーロン相互作用に近い大きさになり重要である。

申請論文はこのような実験事実の知見をふまえて, 金属強磁性の起源を明らかにしようとするものである。申請者は従来の Gutzwiller 近似を軌道縮退のある場合に拡張し, 強磁性の条件を研究した。この軌道縮退によって d 正孔間のフント結合が有効に働き, d 正孔のスピンをそろえる働きをする。このようにして, フント結合が現実の大きさの時には強磁性状態が基底状態であることを示し, また逆にフント結合がない時には強磁性にするのが大変難しいことを示した。さらにエネルギー状態密度の形を考慮するとニッケルでは完全強磁性となり, 鉄, コバルトでは不完全強磁性となりうることを示した。

さらに, 他の手法としてスピン波やストナー励起というスピン励起状態のエネルギーを計算し, 強磁性の安定性を検討し, フント結合を考慮することによってはじめて現実的な強磁性の安定領域を得ることができた。以上のようにフント結合とエネルギー状態密度の形が 3d 遷移金属強磁性にとって本質的な役割を果たしていることが示された。

以上の成果は学位審査の対象とするに十分な価値を有すると判断した。

## 論文審査の結果の要旨

50年以上の長期間にわたって確定していなかった遷移金属強磁性の起源に関して、最近の実験事実と合致した理論を提出した点で価値があると判断した。従来、非常に微妙で困難な課題であった原因は軌道縮退を重視せず、非現実的なモデルで強磁性を実現しようとしたことにある。申請者は現実的な軌道縮退のあるモデルを用い、その場合に Gutzwiller 近似を拡張して変分計算を行い強磁性状態の実現の条件を検討した。電子数、クーロン相互作用の強さの平面で、フント結合の強さをパラメータとして相図を求めた。この相図によってフント結合の役割の重要性を明確に示した。あわせて、エネルギー状態密度の形を表すモデルを用い、その形を表すパラメータに対する強磁性出現条件を検討した。いずれのモデルにおいても現実の 3d 遷移金属に近いパラメータの時に現実的な強磁性状態を得ることができた。

一方、全く異なるアプローチとしてスピン波とストーナー励起というスピン励起のエネルギーを計算し、強磁性が基底状態として安定である条件を求めた。この方法で得られた結論は第一の方法と同じ強磁性出現の条件を与えることがわかった。

このように 3d 遷移金属強磁性出現の条件を具体的に明らかにした点で、申請論文は博士（理学）の学位論文として十分価値があると認めた。

なお、主論文に報告されている研究業績を中心に、これに関連した研究分野について試問した結果、合格と認められたものである。