

## 「金属合金中の原子の電子状態と原子対相互作用」

講師 阪大理 金森順次郎

金属合金中の d 軌道は、原子の中心近くでは自由な原子の波動函数に近く、離れた所では s-d mixing の効果が重要になる。そのため金属合金中の d 軌道 (virtual bound state) は原子軌道と平面波 (尾の方を表現するため) を必要とする。そこで Kanamori, Terakura and Yamada は単純金属で利用されている pseudo potential を遷移金属に拡張し pseudo-Greenian method を考え出した。これは平面波にさらに補助函数をつけ加えた overcomplete な set を基底として作られた formalism である。もし補助函数と平面波の間に resonance がなければ普通の pseudo-potential の理論となる。pseudo-Greenian を使って単純金属中に遷移金属が入った時の系をあらわす。

Anderson-model の実証もしている。応用の 1 例として Ni 中に不純物 (Al) が入った時の飽和磁化の減少を論じている。この実験結果は Ni の minority spin band に不純物原子 (Al) の価電子が流れこむことを示しているように思えるが、そうではない。

Terakura and Kanamori は「不純物原子 (Al) の電気的中性」，ということを考えて、pseudo-Greenian method を用いて実験結果を説明した。更に Fe 中の Al (強磁性の消滅)，Ni 中の Ge (弱強磁性) について研究中である。次に Teraoka and Kanamori による Invar 問題の研究を論じられた、これは Fe-Fe 原子対相互作用の重要性から出発する理論で、磁気モーメントと d, s 電子の数との関係を論じている。又 Cr の S.D.W も原子対相互作用の観点から研究されている、又 CPA について簡単に講義をされた。これは A, B 2 種の原子が格子の上に完全に無秩序に分布しているとして、原子から原子へと渡り歩く電子の状態を計算するための近似理論である。CPA は rigid band 近似に比べて有用で、その理論的基礎もかなりはっきりしている。しかしその応用には限界がある。絶対零度に話を限っても、もし与えられた原子の電子状態が、非常に敏感にその原子の最近接原子の組成に依存する場合には役に立たない恐れがある。この点について CPA の拡張が Miwa によってなされている。これは環境効果を取り入れた理論であり、計算が現在、進行中である。又今までの計算は d 部分に純粹に関係した量のみを扱って

いるが、s部分の効果を考えた計算がなされつつある。最後にHeineのグループによる最近の研究を紹介された。これは(表面, 不純物 Amorphous に応用されるもので) tight binding 近似に基づいて、最初から局所的な量を求めようとする理論である。ある特定の原子での状態密度を、その周囲の局所的な原子の配列から求めるものであって、ブロッホの定理は一切顔を出さない、昼からKanamoriによる規則合金の研究をスライドを用いて紹介された。

いろいろと、幅広く講義をされたが、一貫して金属、合金での問題での原子軌道の意味、バンド的アプローチに対する原子論的アプローチ等を具体的な問題に即して論じられた

文責 阪大理 星野敏春