

N_i の異方性エネルギーの計算 についてのコメント

森 信 郎 (芝浦工大電子)

(4月12日受理)

N_i は立方対称の金属である。この金属の異方性エネルギーは次のように表わされる。

$$f_a = K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2$$

ここで α_1 , α_2 および α_3 は磁化の結晶軸に対しての方向余弦である。 N_i の異方性常数 K_1 および K_2 は実験的に次のように与えられている。^{1) 2)}

$$K_1 = 8 \times 10^5 \text{ ergs/c.c.}$$

$$K_2 = 3.17 \times 10^5 \text{ erg/c.c.}$$

N_i および F_e の異方性エネルギーは、結晶場の影響を受けた伝導電子のスピン軌道相互作用によるものと考えられている。³⁾ 0°K における N_i および F_e の異方性エネルギーの計算は Brooks,⁴⁾ Fletcher⁵⁾ および Asdente and Delitala⁶⁾ によってなされている。これらの計算では Fermi 面は band Hamiltonian によって定められ、スピン軌道相互作用によらないとしている。そして異方性エネルギーはスピン軌道相互作用の4次の摂動によって与えられるとして計算をおこなっている。

しかし N_i ⁷⁾ および F_e ⁸⁾ のエネルギーバンドを調べてみると縮退したエネルギー準位があって、この取扱いに疑念をもつ。

異方性エネルギーは band Hamiltonian にスピン軌道相互作用をとり入れ、磁化の方向すなわちスピン角運動量の量子化の方向を種々の方向にとったときの結晶エネルギーの差から算定されるべきものである。これまでの異方性エネルギーの計算では、はたしてこのような量を算出しているのだろうか。この点について検討しよう。

ここでは山下 et al.⁷⁾ の与えたエネルギーバンドをもとにし、スピン軌

森 信郎

道相互作用を tight binding の近似で導入し，スピン角運動量の量子化の軸を $[100]$ ， $[110]$ および $[111]$ 方向にとり，エネルギーの固有値を正しく計算し，それぞれの場合における Fermi 準位を決定し，結晶のエネルギーを計算し，異方性エネルギーを計算するというやり方を試みる。

エネルギーバンドの行列要素としては計算の便宜上山下 et al. が interpolation scheme⁹⁾ にしたがって与えたものを用いる。スピン軌道相互作用の係数は次のようにとる。¹⁰⁾

$$\lambda = 0.016767298 \text{ Ry.} \\ (1840 \text{ cm}^{-1})$$

この値は N_i^+ イオンの -335 cm^{-1} から算定される値 670 cm^{-1} (0.006106 Ry.) よりずっと大きく，このため異方性エネルギーの計算値は実験値にくらべ途方もなく大きな値になって不都合を生ずるが，Brillouin zone 中の点の固有値の計算は計算時間の関係からあまり多くおこなうことができないので，異方性エネルギー（結晶のエネルギーの差）の計算値が結晶のエネルギーの精度より大きくなるための配慮からいまの場合このようにしておく。

固有値は電子計算機を用い Jacobi の方法で 10 桁まで正しく計算される。そして第 1 Brillouin zone の $1/48$ の領域に 89 個の点をとってこの計算がおこなわれる。スピン角運動量の量子化の軸が $[100]$ ， $[110]$ および $[111]$ 方向をとったとき，それぞれ異った固有値をもつ領域は，第 1 Brillouin zone の $1/48$ の領域の 1 個を (abc) ($a \geq b \geq c \geq 0$) で表わすと $[100]$ では (abc) ， (bac) ， (cab) の 3 個， $[110]$ では (abc) ， (acb) ， (bca) ， $(a-bc)$ ， $(a-cb)$ ， $(b-ca)$ ， $(-b-ac)$ ， $(-c, -ab)$ ， $(-c-ba)$ ， $(b-ac)$ ， $(c-ab)$ ， $(c-ba)$ の 12 個， $[111]$ では (acb) ， $(-c-ab)$ ， $(b-ac)$ ， $(a-bc)$ ， $(a-cb)$ ， $(a-b-c)$ ， $(b-a-c)$ ， $(c-a-b)$ の 8 個になる。

結晶エネルギーおよび異方性エネルギーの計算結果は次のようである。この結晶のエネルギーの計算の精度は小数以下 4 桁までである。

Fermi 準位 結晶 エネルギー-ergs/c.c. 異方性 エネルギー

		R_y		
N_i	[100]	- 0.3880	- 1.12973×10^{13}	0.2×10^9
	[110]	- 0.3864	- 1.12926×10^{13}	4.9×10^9
	[111]	- 0.3866	- 1.12975×10^{13}	0

この計算の過程を検討してみると，それぞれの場合で Brillouin zone 中の電子のつまっている場所に幾分の相異があることが認められる。すなわち磁化の方向による Fermi 面の変形がおこっている。

つぎに Fermi 面は磁化の方向によらないとした場合，すなわち band Hamiltonian によって定められ，スピン軌道相互作用によらないとした場合と，Fermi 面が磁化の方向によるとした場合，すなわちスピン軌道相互作用によるとした場合で，結晶のエネルギーおよびその差の計算値にどの程度差異が生じて来るかを検討してみよう。

磁化の方向による Fermi 面の変形を考慮すると，これを考慮しない場合にくらべ結晶のエネルギーは少し低く出る。磁化の方向が [100]，[110]，および [111] 方向の場合，この原因による結晶のエネルギーの下りは次のようになる。

N_i	[100]	- 0.3×10^9	ergs/c.c.
	[110]	- 1.6×10^9	ergs/c.c.
	[111]	- 0.6×10^9	ergs/c.c.

もっともこのうち [100] および [111] に対応する量は結晶のエネルギーの精度以下の量で，このエネルギーの下りを示しているものではなく，Fermi 面の変形による寄与の目安を与えているにすぎない。

したがって結晶のエネルギーの差は次のようにその原因によって分けられる。

	固有値の差	Fermi 面の変形	合 計
[100], [110] の差	6.0×10^9	-1.3×10^9	4.7×10^9 ergs/c. c.
[111], [110] の差	6.0×10^9	-1.1×10^9	4.9×10^9 ergs/c. c.
[100], [111] の差	(0.8×10^8)	(-2.8×10^8)	(0.2×10^9) ergs/c. c.

一番下の () で囲まれた数値は計算の精度以下の量であるので、事実上 0 とおくべきであるが、上に述べた寄与がごくわずかながら存在することを示すためにつけ加えておいた。

したがっていまの場合、異方性エネルギーにはスピン軌道相互作用による固有値の変化による寄与のほかに磁化の方向による Fermi 面の変形にもとづいた寄与があり、これは前の寄与と同じ程度の大きさをもっていることがわかる。

スピン軌道相互作用の係数を小さくとした場合（実験値と同じ程度の異方性エネルギーの値が得られるような場合）に磁化の方向による Fermi 面の変形にもとづいた寄与がどのようになるかを考察しよう。

スピン軌道相互作用を摂動として取扱った場合、固有値の変化による寄与がこれまでの論文で計算された 4 次の摂動に対応するものである。つぎに Fermi 面の変形にもとづいた寄与の大きさの程度（摂動の次数）をあためてみる。Brillouin zone 中の固有値には一般にスピン軌道相互作用の二次の摂動の寄与があり、これにより Fermi 面の変形が生じる。この変化の度合は摂動の二次の程度で、また、これによる結晶のエネルギーの変化もこれと同じ程度になる。したがって Fermi 面の変形による寄与は摂動の 4 次の程度になり、固有値の変化による寄与と同じ程度（同じ次数）の寄与を与えられられる。

これ故異方性エネルギーの計算には、スピン軌道相互作用による固有値の変化にもとづいた寄与のほかに、磁化の方向による Fermi 面の変形にもとづいた寄与をつけ加えなければならない。

文 献

- 1) H.J.Williams and R.M.Bozorth : Phys. Rev. 56 (1939) 837.
R.M.Bozorth: Ferromagnetism (D.Van Nostrand Co., New York, 1951). 592.
- 2) H.Sato and B.S.Chandrasekhor: J.Phys. Chem. Solids 1 (1957) 228.
- 3) F.Bloch and G.Gentile: Z.Phys. 70 (1931) 395.
- 4) H.Brooks: Phys. Rev. 58 (1940) 909.
- 5) G.C.Fletcher: Proc. Phys. Soc. 67A (1954) 505.
- 6) M.Asdente and M.Delitala: Phys. Rev. 163 (1967) 497.
- 7) G.C.Fletcher: Proc. Phys. Soc. 65A (1952) 192.
J.Yamashita, M.Fukuchi and S.Wakoh: J.Phys. Soc. Japan 18 (1963) 999.
S.Wakoh and J.Yamashita: J.Phys. Soc. Japan 19 (1964) 1342.
J.W.D.Connolly: Phys. Rev. 159 (1967) 415.
- 8) F.Stern: Phys. Rev. 116 (1959) 1399.
J.H.Wood: Phys. Rev. 126 (1962) 517.
L.F.Mattheies: Phys. Rev. 134 (1964) A-970.
S.Wakoh and J.Yamashita: J.Phys. Soc. Japan 21 (1966) 1712.
E.Abate and M.Asdente: Phys. Rev. 140 (1965) A-1303.
- 9) J.C.Slater and G.F.Koster: Phys. Rev. 94 (1954) 1498.
- 10) O.P.Löwdin: Quantum Theory of Atoms, Molecules and the Solid State (Academic Press New York, 1966) 196.