

学 位 論 文 題 名

On the Curie-Weiss law for nearly-localized
itinerant-electron ferromagnets

(局在寸前の遍歴電子強磁性体におけるキュリー・ワイス則について)

学位論文内容の要旨

金属強磁性理論においては常に、局在モーメントモデルと遍歴電子モデルとの間で論争が繰り返されてきた。遷移金属の磁性を担う d 電子が遍歴電子であることが明かになってからは、この 2 つのモデルの性質を両立させることに研究の主眼が置かれてきた。これは物理的には従来の平均場近似で省略されていたスピン揺動を理論に正しく取り入れる問題であった。その 1 つの方向性として Moriya らの SCR 理論がある。これは RPA (動的平均場近似) をこえ、異なる波数 (モード) の揺らぎの間の相互作用 (モード・モード結合) を取り入れる理論であり、ストナー理論では説明できなかった金属の強磁性転移点以上でのキュリー・ワイス則をよく説明する。即ちモード・モード結合が帯磁率の逆数の温度依存性を担い、キュリー・ワイス則に寄与する。そしてこの理論は、局在モーメントモデルと対極にある ZrZn_2 や Sc_3In 等の弱い強磁性金属に適用され、大きな成功を治めている。しかしながら、SCR 理論は RPA を修正したものであり、本質的には弱相関理論である。Ni、Co、Fe 等の金属は飽和磁気モーメントが大きく、強い強磁性を示す。これらの金属では同一軌道の電子間の斥力が強いために電子がほとんど局在している。そのような系は、局在電子系と遍歴電子系との中間領域であり、強相関電子系とみなされる。スピン揺動を正しく取り入れ、強相関遍歴電子系に適用できる理論が望まれる。そのような理論の候補として $1/d$ 展開法が挙げられる。

$1/d$ 展開法は、空間次元 d 、ボルツマン定数 k_B 、近藤温度 T_K 、オンサイト斥力 U 、として、 $1/d$ と $k_B T_K / U$ の 2 つの小さい展開パラメータを用いる摂動論的理論枠組みである。強相関電子系を記述する典型的なモデルとしてハバードモデルを考える。このモデルの自己エネルギーは $1/d$ の最低次のシングルサイト部分と $1/d$ の高次のマルチサイト部分に分けられる。シングルサイト部分のダイアグラムは 1 不純物アンダーソンモデルの自己エネルギーと同じ構造をもっているので、射影条件を与えることにより、ハバードモデルを解くことは 1 不純物アンダーソンモデルを解くことに帰着される。このアンダーソンモデルは今日よく理解されているモデルであり、厳密解も求められている。空間次元無限大の極限ではマルチサイト部分を無視することができるので、ハバードモデルを厳密に解くことができる。 $1/d$ 展開法とは、自己エネルギー等のシングルサイト部分をとる近似 (SSA) から出発し、 $1/d$ の高次項を順次取り込む摂動論的手法であるといえる。1 不純物アンダーソンモデルは近藤効果の有効ハミルトニアンである。 $1/d$ 展開法の最大の利点は、局所スピン揺動が磁気モーメントを抑制するという近藤効果の知識を利用できることにある。アンダーソンモデルへの射影により局所スピン揺動がきちんと取り込まれ、サイ

ト間効果は $1/d$ の摂動として取り込まれる。以上のような方法論を用いると、強相関の極限、即ち $k_B T_K/U$ の最低次までで、ハバードモデルの帯磁率の逆数の表式は $1/d$ の最低次部分と高次部分とに分けられる。この高次の寄与が SCR 理論におけるモード・モード結合に相当する。空間次元無限大の極限では最低次部分のみが残り、高次部分即ちモード・モード結合は無視できる。最低次の寄与は準粒子のバンド構造によって決まり、強磁性体では大きな温度依存性をもつと考えられる。即ちモード・モード結合以外の寄与から温度依存性が現れることが SCR 理論と本質的に異なる点である。

ここで、 $1/d$ の最低次と高次の2つの寄与のうち、どちらがキュリー・ワイス則に対して本質的な役割を果たしているかという問題が生じる。この問題を調べるためにこれら2つの寄与を同時に取り入れて、静的近似の枠内で帯磁率を自己無撞着に計算する。求められた自己無撞着方程式は Murata-Doniach 理論で求められたものと類似している。局在寸前の遍歴電子系の典型的な例としてニッケルの強磁性を考える。バンド構造は単一バンドとし、強磁性の条件として、フェルミ準位で準粒子状態密度がすどいピークをもつと仮定する。バンド構造が決まればモード・モード結合および逆帯磁率を自己無撞着に計算することができる。以上のような方法で計算を行った結果、SCR 理論、あるいはその静的極限としての Murata-Doniach 理論とは異なり、モード・モード結合がキュリー・ワイス則に対して否定的な役割を果たしていることが分かった。モード・モード結合がそのようなふるまいを示す原因として、 $1/d$ の最低次の寄与の温度依存性、および、モード・モード結合の結合定数の温度依存性が考えられる。 $1/d$ の最低次の寄与は温度の上昇とともに増加し、キュリー・ワイス則と矛盾しない。しかし同時にモード・モード結合を減少させる役割を果たす。またモード・モード結合定数も温度の上昇とともに減少し、キュリー・ワイス則に反するふるまいを示す。これらの量の温度依存性はいずれも準粒子状態密度の特殊な構造に起因するものである。もしこれらの量が温度に依存しない場合には、モード・モード結合の寄与は温度の上昇とともに増大し、Murata-Doniach 理論の結果と定性的に一致する。

モード・モード結合の否定的なふるまいにもかかわらず、 $1/d$ の最低次の寄与からキュリー・ワイス則が定性的に導かれる。このことは、強相関電子系においてはモード・モード結合よりもむしろ、バンド構造が重要であることを示唆している。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 大 川 房 義

副 査 教 授 熊 谷 健 一

副 査 教 授 榊 原 俊 郎

副 査 助 教 授 北 孝 文

学 位 論 文 題 名

On the Curie-Weiss law for nearly-localized itinerant-electron ferromagnets

(局在寸前の遍歴電子強磁性体におけるキュリー・ワイス則について)

局在モーメント磁性体のキュリーワイス則については、既に良く理解されている。一方、遍歴電子磁性体のキュリーワイス則については、ハートリーフォック近似から出発してスピン揺動を自己無撞着に繰込んだ理論、self-consistent renormalization 理論、略して SCR 理論、が提案され幅広く受け容れられている。SCR 理論ではスピン揺動のモード・モード結合効果がキュリーワイス則を与えている。近年、強相関電子系を扱う理論として無限次元からの展開理論、空間次元数を d として、 $1/d$ 展開理論が開発された。この理論枠組みからモード・モード結合効果は $1/d$ の高次効果であり無限次元では消える事が示されている。無限次元でも磁気秩序は可能で転移温度に向かって帯磁率は、ほぼキュリーワイス則に従い発散する。この事は $1/d$ の最低次の効果としてキュリーワイス則を与える機構が存在する事を意味する。準粒子の状態密度の特異な形、あるいは特異な分散関係に由来する磁氣的分子場の温度依存性が $1/d$ の零次の効果である。本論文は $1/d$ 展開法を用いて、遍歴電子強磁性のキュリーワイス則の二つの機構うち、いずれの機構が現実の 3 次元 ($d=3$) でより有効であるかを調べることを目的にしている。

本論文は、 $1/d$ の零次効果である磁氣的分子場の温度依存性がキュリーワイス則を与え、モード・モード結合効果はむしろキュリーワイス則を抑える、と結論している。強磁性金属特有の電子状態密度のため強い温度依存性を持つ部分がある。SCR 理論では、この部分の温度依存性を無視している。この温度依存性がモード・モード結合効果に影響を与え、その結果、モード・モード結合効果はキュリーワイス則を抑える方向に役割を変える。SCR 理論と同じく上記の温度依存性を無視すると、本論文の理論枠組みでも従来の SCR 理論の結果を再現できる事は確認されているので、本論文で得られた結果は正しいと判断できる。この全く意外な結果は、強磁性か反強磁性かを問わずキュリーワイス則の機構について、個々の遍歴電子磁性体で再検討が必要であることも示している。本論文は以上の新しく重要な知見を示し、今後の研究に対する示唆も与えている。

著者は、遍歴電子磁性体でのキュリーワイス則の機構についての新しく重要な理論結果を報告しいると判断でき、高く評価できる。審査員一同は博士（理学）の資格が十分にあると判定した。