

遷移金属における強磁性発現の機構

発表者 筒井 城治

担当教官 梯 祥郎

物質の磁性は主として、物質内電子のスピン磁気モーメントによって生じている。磁性の発現をミクロに説明するモデルとしてハイゼンベルグモデルが良く知られているが、このモデルでは、電子は各イオンに束縛されて、原子磁気モーメントを形成し、それらの原子磁気モーメントの間の磁気相互作用によって磁性を説明する。

一方、金属の伝導電子のように一つ一つの電子が結晶中を動き回って、全体として磁化を発生する場合も考えられる。3d 遷移金属の磁性はこのタイプであり、不完全殻を形成する 3d 電子によって担われている。3d 電子は原子のまわりに局在した軌道をまわっているが、原子の外側に近いために、金属状態を形成して、原子の間を巡回している。3d 遷移金属の中でも Fe, Co, Ni は強磁性を示すが、これは各原子の 3d 軌道を占める電子のスピンが一つの方に揃うためだと考えられる。

本研究では、簡単化された遍歴電子モデル、即ち、第二量子化されたハバードモデルに簡単なハートレーフォック近似を適用し、強磁性発現の機構を、明らかにする。

この目的のために、本発表では、

1. 絶対零度における強磁性発現の条件を求め、原子内クーロン相互作用が大きく、かつフェルミレベルでの状態密度が大きければ、遍歴電子系においても強磁性が発現することを示す。
2. 磁化—電子数の関係を求め、磁化—電子濃度依存性（スレーターポーリング曲線）を定性的に説明できることを示す。

発表はⅠ～Ⅲの流れで行う。

Ⅰ 磁性の量子論

Ⅱ 金属結晶のモデル化

Ⅲ 強磁性発現の条件と、磁化—電子濃度依存性