

## 遷移金属における強磁性発現

発表者 片山 佳文

指導教員 梯 祥郎

Fe,Co,Ni は代表的な強磁性体としてよく知られている．これらの強磁性は各原子の 3d 軌道を占める電子のスピンが一つの方に揃う事によって発生していると考えられる．しかし，金属であるために 3d 電子は原子間を運動しながらスピン分極を生じているので，これらの磁性体は，電子の遍歴性を記述するバンドモデルに基いて説明されなければならない．その最も簡単なモデルがハバードモデルである．このモデルでは，原子の単一軌道間を電子が飛び回る．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て，3d 遷移金属の強磁性を考えた場合，磁化-電子数依存性を定量的に説明する事が出来ない．

本研究の目的は，ハバードモデルで無視された 3d 軌道の軌道間相互作用や 3d,4s,4p 軌道間の電子の飛び移りを考慮した現実的なハミルトニアンに基いてハートレー・フォック近似を適用し，現実の遷移金属合金における強磁性の発生と磁化-電子数依存性（スレーター・ポーリング曲線）を説明する事である．現実的な電子状態と妥当なクーロン相互作用エネルギーパラメーターを用いれば，下図に示すように，スレーター・ポーリング曲線の電子数依存性をよく説明する事が出来る．

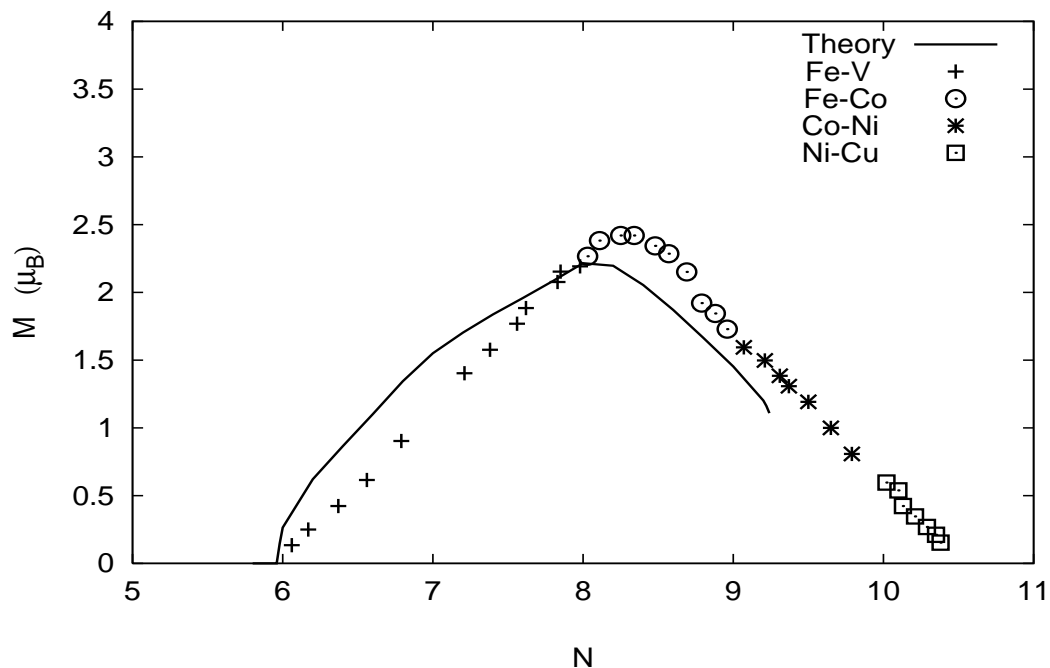


Fig.1 スレーター・ポーリング曲線