

報告番号

※甲第 1652 号

主論文の要旨

題名

Influence of strain on the electronic
properties in BCC transition metals

(体心立方構造の遷移金属における電子物性のひずみの影響)

氏名 太田 幸則

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名	大田 幸則
<p>この論文は、体心立方構造の遷移金属における、電子構造へのひずみの効果、並びに弾性的及び磁弾性的性質に関する理論的研究をまとめたものである。</p> <p>固体物理学における未解決の重要な問題のひとつは、電子と原子核からなる固体の、結晶構造による物性の定量的理解である。最近著しく進歩してきたいわゆる計算物理学的手法は、この研究分野の成果に重要な貢献をしてきている。たとえば、遷移金属における凝集エネルギー、格子定数及び体積弾性率は、計算物理学に基づく定量的計算によって、実験結果と良く一致する値が得られることが知られている。遷移金属における広い意味での構造物性、たとえば弾性や磁弾性に関する研究が、このような計算物理学的手法に基づいて押し進められることは、固体物理学の分野において現在最も強く求められている研究のひとつである。</p> <p>そこで、この論文の目的は、まず遷移金属内電子に対する電子構造への格子ひずみの影響を調べることに、そしてこれに基づいて遷移金属の弾性的及び磁弾性的性質に関する研究を行うことに置かれる。研究の対象としては、体心立方(BCC)構造の遷移金属であるバナジウム、クロム、モリブデンなどが選ばれる。</p>				

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名
			太田幸則
<p>これらの研究のために用いられた方法は、最近著しく進歩してきた固体内電子構造の計算方法に基づいている。この論文で用いる電子構造の計算方法は、最も精密な計算方法のひとつである増強平面波法(APW法)、及び簡単化された方法のひとつである強束縛内挿法(tight-binding parametrisation scheme)である。これらの方法は、みずみのない(又は静水圧下で体積だけが変化した)結晶中の電子の運動を記述するのに広く用いられてきた。しかし、一軸的引張りなども含む、と一般的に結晶の変形をこの論文では問題にする。そこで第2章では、このような一般的な一様みずみを取り扱う方法が開発された。この方法を用いれば、変形のないときのブリルアンゾーンを利用してより少ない計算時間で、変形した結晶中の電子の運動を計算することができる。</p> <p>遷移金属の種々の物性は、その電子構造によって強く特徴づけられることが知られている。従って、弾性や磁弾性のような結晶のみずみに関係する物性を研究するためには、何よりもまず、その電子構造のみずみの影響について調べなければならない。この論文の第3章では、3d及び4dグループの体心立</p>			

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名
			大田 幸則
<p>方構造を持つ遷移金属、特に V, Cr, Mo について、その電子構造のひずみ依存性を、エネルギー準位、フェルミ面、状態密度、及びこれらの大きさの一軸性変形による影響などを通して、詳細かつ定量的に調べた。以下にこのようにしての研究結果を順をおって述べる。</p> <p>変形ポテンシャル： 変形ポテンシャルは、電子と長波長フォノンとの結合の強さを決定する重要な量であるにもかかわらず、その計算及び実験が、特に遷移金属においては、ほとんどなされていはい。この論文では、BCC構造の遷移金属である V や Cr などに於いて、エネルギー準位のひずみ依存性（準位のシフト及び縮退準位の分裂）を計算し、変形ポテンシャルの値を求めた。残念ながら、これらの金属では今のところ直接比較すべき実験は存在してはいない。今後の実験が期待される。この量が弾性定数の大きさを考えるときには重要な役割について本章で議論される。</p> <p>フェルミ面： V のフェルミ面の圧力依存性、及び V と Cr のフェルミ面のせん断ひずみの影響についての研究が行われた。これは、V のフェルミ面のひずみ依存性に関する最初の詳細な研究である。</p> <p>V のフェルミ面の圧力依存性が自己無撞着 APW</p>			

主論文の要旨

報告番号

※甲第

号

氏名

た 田 季 則

法によつて計算された。この計算結果は Nb についての実験及び計算結果などと比較され、定性的には同様の圧力依存性を示していることが示された。しかしながら定量的には、Nb では jungle-gym arm 上の α 軌道が非常に強い圧力依存性を示すのに対して、V では非常に弱い圧力依存性を示すこと、ellipsoidal 面上の β 軌道に対しては、Nb よりもかなり大きい圧力依存性を示すことなどが示された。Anderson と Schirber による V の β 軌道に対する最近の予備的実験では、我々の計算と定性的に一致した結果が得られている。

V と Cr のフェルミ面の一軸ひずみ依存性が強束縛内挿法によつて計算された。フェルミ面断面の tetragonal 及び trigonal 変形による形状変化、及びその断面積のひずみ微分の値が計算された。この計算から、V のフェルミ面はその結合性が tetragonal 変形によつて変化する、すなわち [001] 方向に結晶を引張る 13 kbar 程度の応力に対して ellipsoidal 面が jungle-gym arm と結合するであろう予言がなされた。自己無撞着 APW 法によつてもこのことは確かめられた。

状態密度： 状態密度は金属の電子物性を考える際に重要な役割をはたすが、この論文では、V など

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名	太田幸則
<p>の遷移金属の状態密度のひずみの影響が調べられた。状態密度曲線の形状は、ひずみの方向によつて非常に異なる影響を受ける、つまり大きな異方性を示すことが示された。VとMoにおける、フェルミレベルでの状態密度の体積微分の計算結果は、電子グリユナイゼン定数の実験結果と比較して、傾向のほぼ一致を得た。同様の計算はZr-Mo-Mo-Re合金に対しても行われた。</p> <p>大きな一軸性変形の影響： BCC構造を一樣に[001]方向に膨張させることによりFCC構造が得られるが、ここではこのような大きな変形下におけるCrの電子構造(エネルギー準位, 状態密度, 電子密度分布など)が自己無撞着APW法によつて計算された。</p> <p>以上のような電子構造のひずみ依存性に関する研究をもとに、論文の4章では、BCC遷移金属の弾性的及び磁弾性的性質に関する研究について述べている。弾性定数, 常磁性体積磁歪, 異方的磁弾性結合定数, 大きな一軸性変形下における全エネルギーなどAPW法などの電子構造計算法に基づいて計算され、それぞれの実験と比較された。以下にこれらの研究内容について順をおつて述べる。</p>				

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名
			太田幸則
<p>弾性定数： 3dグループのBCC遷移金属合金におけるせん断弾性定数$\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$と$C_{44}$の電子濃度依存性について計算が行われ、電子構造のひずみ依存性という観点から議論された。せん断弾性定数の電子濃度依存性は、1次及び2次の変形ポテンシャルの特徴を強く反映しており、変形ポテンシャルで記述される電子構造のひずみ依存性と密接に關係していることが結論された。</p> <p>BCC構造を持つ遷移金属のせん断弾性定数$\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$と$C_{44}$が、剛体マフィンティン模型に基づいて計算された。計算結果は実験値の定性的傾向と大体の値を再現している。また同じ模型からせん断弾性定数の体積微分が計算され、実験値を大体説明できることが示された。</p> <p>常磁性体積磁歪： 最近、高圧下における遷移金属の磁性に興味を持たれてきている。この論文では、V, Cr, Moにおけるスピンド磁率χ_{spin}が、いくつかの格子定数に対して、局所スピンド密度近似に基づいて計算され、これを用いて、これらの物質の常磁性体積磁歪について議論された。得られた結論の重要な点は、(1) χ_{spin}の圧力変化は、そのほとんどが状態密度の圧力変化から生じており、交換相互作用積分の体積変化は無視できるほど小さいということ、(2)</p>			

主論文の要旨

報告番号	※甲第 号	氏名	太田幸則
<p>状態密度の体積変化がストーナー増進因子によって増進され、χ_{spin}の変化に寄与すること、そして(3)軌道帯磁率がその体積変化に対しdバンド幅の逆数に比例すると仮定すると、V及びM_0の常磁性体積磁歪の値が良く説明できるということ、である。</p>			
<p>異方的磁弾性結合定数：強磁性鉄の異方的磁弾性結合定数B_1及びB_2が3次摂動論(ひずみの1次とスピノ軌道相互作用の2次)に基づいて計算された。B_1は磁歪定数の実験から現象論的に求められた値と良く一致したが、B_2は一致しなかった。後者の不一致について議論した。</p>			
<p>大きな一軸性変形のもとでの全エネルギー：BCC構造を一樣に[001]方向に膨張させるとFCC構造になる。この研究では、このような大きな一軸性変形の関数としての常磁性C_rの全エネルギーが、局所密度近似に基づいて計算された。そして計算結果から、次のようなC_rの構造物性に関する量が求められた。まず、C_rの全エネルギーは、FCC構造とくらべてBCC構造の方が36 mRyd低い、つまりBCC構造がきわめて安定であるということがわかった。また、計算された全エネルギーEの圧力のひずみに対する曲率から、2次及び3次弾性定数とその体積微分の値が求められ、実験との良い一致を得た。</p>			

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名
			太田 幸則
<p>さらに、C_rの理想引張強度が全エネルギー対ひずみ曲線から求められ、またスピンド磁率がこの変形の関数として局所スピンド密度近似に基づいて計算された。</p> <p>以上のように、この論文では、第2章に記した電子構造計算法に基づいて、第3章でBとC遷移金属の電子構造へのひずみの影響が調べられ、第4章でこれらの物質の弾性的及び磁弾性的性質が計算された。このような研究のような、電子構造計算法を用いた計算物理学的手法による研究は、今後さらに色々な物質について、また色々な物理量について進められることが期待される。</p>			