

氏名・（本籍）	にい ぜき こま じろう 新 関 駒二郎
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	理 第 5 1 7 号
学位授与年月日	昭和52年 1月26日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当
最終学歴	昭和42年 3月 東北大学大学院理学研究科 (修士課程)原子核理学専攻修了
学位論文題目	置換型不規則系に於ける準粒子の運動に関する 理論的研究
論文審査委員	(主査) 教 授 森 田 章 教 授 糟 谷 忠 雄 助 教 授 渡 部 三 雄

論 文 目 次

第1章 序 論	1
第2章 CPAの拡張	11
第3章 一粒子励起函数	33
第4章 不規則合金の輸送係数に対する非対角的不規則性の効果, そのI	60
第5章 同じく, そのII	90
第6章 結 語	121
謝 辞	126

論文内容要旨

本論文の目的は、置換型不規則合金や混晶等のいわゆる置換型不規則系中の準粒子（電子、正孔、フォノン、励起子、マグノン等）の運動についての一般的特徴を明らかにすると共に関連する様々の物理量（状態密度、一粒子励起函数、輸送係数等）を理論的に求める方法を確立することにある。ここで展開される理論では、準粒子の運動についての扱いは、専ら一粒子近似の範囲内に限られる。すなわち、各準粒子は、他の準粒子の運動とは独立に運動するものとして扱われる。また、理論の立脚点としては、Sovenによって提唱された“辻褃の合ったポテンシャルを用いる近似法”（Coherent-Potential Approximation, 以下CPAと略）を基礎とする。すなわち、準粒子に付随する波動の多重散乱に関しては、自己無撞着的平均場近似の立場からの取り扱いがなされる。

本論文では、前述のテーマは、第2章から第5章迄の4つの章に分けて論ぜられている。次に、各章毎の内容を大まかに説明する。

先ず、第2章から始める。さて、CPAは当初準粒子の伝搬函数演算子の逆演算子（この逆演算子のことを以下では運動演算子と呼ぶ）が座標表示で非対角的不規則性（off-diagonal disorder, 以下ODDと略）を持たない場合について定式化された。CPAを運動演算子がODDを持つ場合に拡張することは、先ずShibaによってなされた。次いでBlackman達になり、Shibaの理論が一般化された。しかしこれらの拡張にも拘わらず、CPAの拡張という点では満足すべき段階に到達したとは言えない。というのは、これらの拡張では扱えない型の配置依存性を持つ運動演算子が存在し得るからである。特に、フォノンやマグノンの場合で力の定数または交換積分に不規則性がある場合にはこれ迄の拡張では扱うことができない。

ShibaやBlackman達によるCPAの拡張がいわゆるロケーター形式に基づいてなされているのに対して、本著者は、いわゆる伝搬函数形式に基づいて、これ迄とは違ったCPAの拡張が可能であることを発見した。更に、ShibaによるCPAの拡張を伝搬函数形式の立場から見直すことにより、前述の拡張がShibaの拡張を含む様に再拡張できることを見出した。著者によって拡張されたCPAがある準粒子の運動に対して適用できる為の条件は次の様になる。すなわち、運動演算子またはそれを適当に変換したものの配置依存性が加法的であることである。但し、ここで述べた変換とは、座標表示での各基底ベクトルを、対応する格子点の配置に依存する定数倍だけスケール変換することに対応する変換を指す。

ここでなされたCPAの拡張の要点は、準粒子の散乱ポテンシャルに対する個々の原子（イオン）からの寄与が長距離的ポテンシャルでも良いということである。この拡張は、Blackman達による拡張を含む程一般的な拡張ではないが、後者の拡張とは違って、ある条件のもとでは混晶の格子振動の場合で力の定数に不規則性が有る場合でも扱うことができる。ここでの条件とは、

力の定数の配置依存性が加法的であることである。

次に第3章に移る。この章では、混晶に中性子線や光を当てることによって、フォノン、マグノン、励起子等の準粒子を励起する際に問題となる一粒子励起函数を扱う。混晶の様な置換型不規則系では、中性子や光子等の外部起源量子と着目する準粒子との間の相互作用の結合定数は、通常その相互作用の起る格子点を占める原子(イオン)の種類に依存する。一粒子励起函数はエネルギー及び波数ベクトルの函数であり、次に述べる量の和の絶対値の二乗に比例する。その量とは、準粒子の注目するエネルギーを持った固有状態の注目する波数ベクトルについてのフーリエ成分に対する各々の種類の原子からの寄与のそれぞれに、対応する結合定数による重み(weight)をつけた量のことである。従って、原子の種類による結合定数の違いは、この重みをつけた量との間の干渉項を通じて、一粒子励起函数に大きな効果を及ぼすことが期待される。著者は、結合定数の格子点毎の変動とCPAの範囲で取り込んで一粒子励起函数を求める一般的方法を発見した。次にこの方法の要点について説明する。

さて、CPAでは格子点毎に変動するポテンシャルを、近似的にはそれと等価な実効ポテンシャル(いわゆるコヒーレントポテンシャル)で置換える。実効ポテンシャルは週期的で、準粒子のエネルギーに依存し、しかも虚数部分を持つ。また実効ポテンシャルは一格子点近似の範囲内で辻褃が合う様に決められる。一粒子励起函数を求める方法としてここで提案される方法では、格子点毎に変動する結合定数を、前述の方針と全く同じ方針により、実効結合定数で置換えることを行なう。

本章では、更に、簡単なモデルを用いて原子の種類による結合定数の違いが一粒子励起函数に及ぼす効果の2.3の特徴を明らかにする。

次に第4章の内容を説明する。この章では、不規則合金の電子的輸送係数(電気伝導率、熱電能、ホール係数)に対するODDの効果、特に、Shibaによって提案された掛算型の配置依存性を持つODDの場合について調べる。

ところで、Velickiy, FukuyamaあるいはLevin et al等によってこれ迄なされた不規則合金の輸送係数のCPAでの研究は、専ら強結合近似での一電子ハミルトニアンがODDを持たない場合に限られていた。この様な扱いは、合金の成分金属の伝導帯の幅がすべて等しい場合にのみ許される。従って、これ迄の理論を、成分金属の伝導帯の幅が異なるようなもっとも現実的な場合、すなわちODDが存在する場合に拡張することは重要である。著者は、Shiba型のODDの場合には、対応する運動演算子が、第2章の内容説明の所で述べた変換により、ODDを持たない運動演算子に変換できることに着目し、従来のODDが無い場合のCPAでの輸送論が、Shiba型のODDの場合に拡張できることを示した。

Shiba型のODDの場合には、変換された運動演算子で見ると、電子に対する合金中の各イオンによるポテンシャルは短距離的である。その結果、電子の個々のイオンによる散乱は等方的

となり、いわゆる頂点補正 (vertex correction) は、ODDがない場合と同様に、CPAで消える。しかし、この場合にODDが無い場合と大きく異なるのは、散乱ポテンシャルが電子のエネルギーに依存することである。この違いは合金の輸送係数、特に電気伝導率と熱電能、に大きな効果をもたらす。なお、散乱ポテンシャルがエネルギー依存性を持つことは、合金のマッフィントンポテンシャルモデルのKKR法による取り扱いとの対応を考えれば、自然に理解できる。

ここで、この章で触れられる成果の一つとして次の点も強調しなければならない。すなわち、CPAでのホール係数をゲージ不変性を保つ形で定式化する一つの方法を確立したことである。

最後に第5章の内容を説明する。この章では、準粒子の運動演算子が加法的なODDを持つ場合について、CPAでの量子輸送論を展開する。

問題を明確にするために、不規則合金の電気伝導率を強結合近似での一電子ハミルトニアンを用いて扱う場合について説明する。この場合に、加法的配置依存性を持つ一電子ハミルトニアンは、週期的な非摂動ハミルトニアンと各イオンに由来する散乱ポテンシャルとの和として表わすことができる。この場合に、各々のポテンシャルは一般に長距離的でありしかも非局所的である。散乱ポテンシャルの非局所性は一電子ハミルトニアンの持つODDに由来するが、その非局所性のためにこの場合の一電子電流演算子は配置依存性を持つ。この様な場合には、Velickiyによって展開されたCPAでの量子輸送論をそのまま適用することはできない。著者は、週期的ではあるがエネルギーに依存するような実効一電子電流演算子を導入することにより、この困難を回避することができた。ここで現われた実効一電子電流演算子は、CPAの精神に従って、一格子点近似の範囲で辻褃が合うという条件によって決めることができる。

ここでの量子輸送論の一つの特徴は、頂点補正が二つの項から成ることである。そのうちの一つは散乱ポテンシャルの非局所性に由来する項であり、他方は散乱振幅の非等方性に由来する項である。通常の意味での頂点補正は第2番目の項に対応する。この項に対する積分方程式は、その積分核が(散乱ポテンシャルの作用距離が有限であるとして)分離型であるので、比較的容易に解くことができる。この事実はここで展開された量子輸送論の応用上極めて重要なことである。

この章では、簡単なモデルハミルトニアンを用いて、この章で展開された量子輸送論の一般的特点、特に頂点補正の効果が調べられている。

以上の研究により、置換型不規則系中の準粒子の運動に関連した様々の物理量をCPAで求める方法が確立された。同時に、運動演算子の持ち得る様々の型の不規則性や、他の量(結合定数や電流演算子)の不規則性がそれらの物理量に与える効果の一般的特点が明らかにされた。今後の課題は、ここで確立された方法を様々の現実の系に応用し、その物性を理解することである。

論文審査の結果の要旨

置換型不規則系中の準粒子（電子，正孔，フォノン，励起子，マグノン等）の運動を調べる最も有力な方法として coherent potential approximation (CPA) の方法がある。本論文はこの CPA の拡張を試み，さらにその結果を用いてこれら準粒子の状態密度，一粒子励起関数，輸送係数等の理論的研究を試みたものである。本論文の第 2 章では系が非対角的不規則性を持つ場合への CPA の最も一般的な拡張であると考えられていた Blackman 等の理論がフォノンやマグノンの場合で力の定数ないしは交換積分に不規則性がある場合には適用できないことを指摘し，更に伝搬関数形式で理論を定式化することによって上記のような場合でも Hamiltonian が広い意味での加法性を満たす限り適用できるように，CPA が拡張できることを示している。

第 3 章では，置換型不規則系中での中性子線や光とうによるフォノン，マグノン，励起子等の励起に関係する一粒子励起関数について，従来の取り扱いでは無視されてきた励起源との結合定数の不規則性を考慮した取り扱いを定式化し，かつそれらの効果を調べている。

第 4 章では，著者は CPA による電気伝導の理論を非対角的不規則性（掛算型の配置依存性の場合）のある場合に拡張することと，CPA でのホール係数の取扱いをゲージ不変の形で定式化する一つの方法の確立とを行っている。

第 5 章では，加法的な非対角的不規則性のある場合の CPA の輸送理論の一般的定式化を行い，更に簡単なモデルについて具体的な計算を行なって，これらの場合の輸送現象の一般的特徴を調べている。

以上の結果は置換型不規則系中の準粒子の運動について多くの重要な知見を与えるものであり，提出者が自立して研究活動を行うに必要な高度の研究能力と学識を有することを示している。よって新関駒二郎提出の論文は理学博士の学位論文として合格と認める。