

氏 名 (本 籍)	なが い けん たろう 長 井 健太郎 (山 口 県)
学 位 の 種 類	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	博 甲 第 2303 号
学位授与年月日	平成12年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審 査 研 究 科	物理学研究科
学 位 論 文 題 目	Study of the Double Exchange Interaction in Infinite Dimensions (無限大次元における二重交換相互作用の研究)
主 査	筑波大学教授 理学博士 高 田 慧
副 査	筑波大学教授 理学博士 押 山 淳
副 査	筑波大学助教授 理学博士 平 島 大
副 査	青山学院大学教授 理学博士 久 保 健

論 文 の 内 容 の 要 旨

近年 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ で代表されるペロブスカイト型マンガン酸化物の研究が世界的に活発に行われている。これらの物質は3価の希土類金属イオンを2価のアルカリ土類イオンに置換することにより、興味深い物性を示す。例えば $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ では、 $x=0$ で系は低温で反強磁性絶縁体であるが、 $x>0.15$ では強磁性金属である。また $x\sim 0.15$ では強磁性転移温度付近で磁場により抵抗が大きく減少する、いわゆる巨大磁気抵抗効果が起こることが知られている。これらの現象は Mn^{3+} と Mn^{4+} が共存し、その結果 Mn の 3d 電子が結晶中を遍歴することにより引き起こされる。この系を記述する最も簡単な理論的模型が二重交換模型である。この模型では Mn イオンの t_{2g} 軌道を占める3個の電子を大きさ $S=3/2$ の局在スピン、イオン間を飛び移る e_g 電子を伝導電子とみなしている。局在スピンの伝導電子のスピンの間にはそれらを平行に揃えようとするフント結合が働く。フント結合が強い場合、局在スピンの向きが揃っている方が運動エネルギーが低くなるため、電子密度 n が0と1の間で強磁性状態が出現することが期待される。一方 $n=1$ の場合は運動交換による反強磁性が現れる事が予想される。

この模型が1955年に Zener によって提唱されて以来、この模型に基づく多くの理論的研究が行われてきた。特に近年1次元および2次元系における基底状態相図、無限大次元における輸送現象等の研究がおこなわれ、反強磁性および強磁性の出現や磁気抵抗効果が確認された。しかし、これらの研究は主として局在スピンを古典的ベクトルとして扱う $S=\infty$ の極限におけるものである。実際の Mn 系では局在スピンは $S=3/2$ の量子スピンであり、量子性がどのように物性に影響を与えるか理論的に研究する必要がある。

本論文の目的は二重交換模型を量子局在スピンの場合に考察し、強磁性に対する量子ゆらぎの影響を調べることである。また著者はガウス分布型と半円型の2種類の伝導電子の状態密度を用いて基底状態を計算し、状態密度の磁性への影響も調べている。具体的には、著者は無限大次元において $S=1/2$ と $3/2$ の系の基底状態を求め、それらを $S=\infty$ の場合の結果と比較している。一般に無限大次元では物理量の空間的ゆらぎが無視でき、系の振舞は時間的にゆらぐ平均的場中の1格子点の振舞によって記述できる事が知られており、その理論的枠組は動的平均場理論と呼ばれている。この理論では着目する格子点での物理量と動的平均場を自己無撞着に決定しなければならない。有限な S の場合これは量子多体問題であり、正確解を求めることは一般に困難である。著者は、この際あらわれる1格子強磁性近藤模型を有限 (N_s 個の軌道をもつ模型で近似し、それを数値的に対角化し、基底状態相図、基底状態における磁化、運動エネルギーおよび1粒子状態密度を得た。この研究では $N_s=6$ および8の

近似が用いられた。 $S=\infty$ の場合は基底状態を求めるのが困難なため、低温における計算を行った。 Ns に関する収束はまだ十分ではないが、各 Ns において異なる S に対する計算結果を比較することにより、量子揺らぎの影響を議論することができる。これらの結果から得られた主な結果は以下の通りである。

- (1) $S=\infty$ から $3/2$, $1/2$ と S を小さくしてゆくにつれ、強磁性相が縮小し、常磁性相が拡大する。この事は局在スピンの量子的揺らぎが強磁性を不安定にする事を示している。特にフント結合の弱い領域でのこの傾向が著しい。
- (2) $S=\infty$, $3/2$ の場合反強磁性は $n\approx 1$ の領域に限られているのに対し、 $S=2/1$ の弱結合領域では反強磁性相が $n\approx 0.7$ のあたりまで広がっている。電子状態の計算結果は、反強磁性状態での状態密度が S の増加とともに急速に狭くなる事を示しており、局在スピンの量子揺らぎによって引き起こされた電子の飛び移りによる運動エネルギーの下がり方が、反強磁性を安定化している事が明らかになった。
- (3) $S=2/1$ の場合には、強結合領域でも自発磁化の値が完全強磁性の場合に比べかなり(20~40%)減少している。それに対して $S=3/2$ と $S=\infty$ の強磁性状態ではほぼ完全強磁性に近い。

これらの結果は、本研究によって初めて明らかになったものである。これら以外に、相分離、非整合相への相転移($S=\infty$)強磁性状態における状態密度、伝導電子の状態密度の強磁性に対する影響等について、多くの新しい知見が得られた。

審 査 の 結 果 の 要 旨

本論文は二重交換相互作用における局在スピンの量子性の影響を調べたものである。これはMn系の実験結果の理解を目指した研究であるが、また強磁性に対する量子ゆらぎの影響を理解する上で理論的に興味深い研究である。本論文は、1次元以外でこの困難な問題を数値的手法を用いて正面から研究した最初のものである。得られた結果の中で、量子揺らぎが強磁性を不安定化することは、定量的な結果が初めて得られた事の意義は大きい。また揺らぎが反強磁性を安定化する事は予想外の結果であり、興味深い。その他にも興味深い結果が得られており、本論文の成果はこの分野の研究に大きな貢献を与えたものと認められる。

よって、著者は博士(理学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。