

理学博士金森順次郎氏の「遷移金属合金の強磁性理論」
に対する授賞審査要旨

金森順次郎氏の初期の研究には、 $3d$ 遷移元素の化合物（酸化物等）の反強磁性、結晶変形、などに関する優れた理論研究がある。この中には、化合物結晶の遷移元素イオンの間に働く超交換相互作用に関する Goodenough-Kanamori Rules と呼ばれる一連の法則の発見（一九五九）が含まれる。次に、遷移金属における強磁性発現の理論が挙げられる。 $3d$ 遍歴電子の反平行スピン電子間の、クーロン反発に基づく電子運動の相関の重要性は、古い時代から指摘されていたことであるが、これを理論の枠内に取り入れたのは金森氏が最初である（一九六三）。金森氏はこの理論によって、鉄、コバルト、ニッケルにおける強磁性の起源を明らかにした。

それにつづいて、最近にいたる迄の間になされた金森氏の研究の中から、特に、遷移金属相互間の合金の強磁性状態の電子構造の研究、および鉄またはニッケルに他のさまざまな元素（HからはじまってB、C、N等の軽い元素をへて、重いBaにいたるまで）を溶かした希薄合金の電子構造の研究を挙げたい。これらの研究の基本は金森氏にあるが、実際の計算に当っては、数名の門下生の協力がなされた。また、これらの合金の実験的研究は長い年月にわたって世界の各所でなされたが、理論的研究は金森氏とその門下生がユニークである。金森氏は、一九六五年に、強磁性

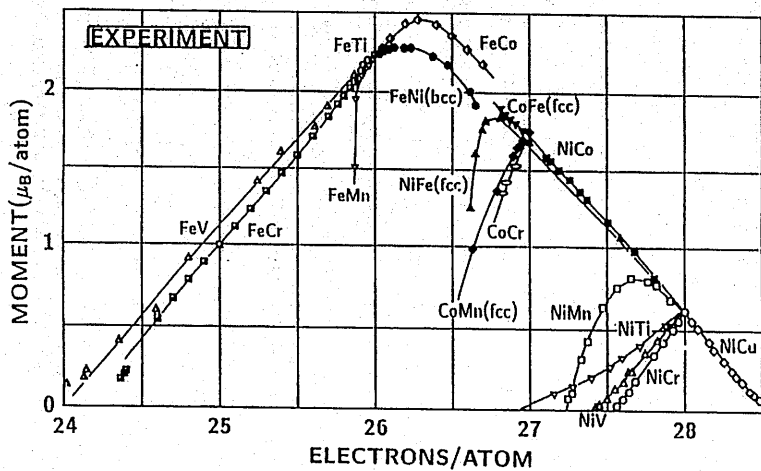
希薄合金の電子構造理論を提出した。これを出発点として、当初は、 $3d$ バンドについてタイトバインディング近似を用いて遷移金属相互合金を研究した。後には、局所密度汎関数法によってすべての電子状態をセルフコンシステントに決定する計算を行った。いずれの場合も、高濃度合金には、CPA (coherent potential approximation) が使われた。

遷移金属相互合金の磁気モーメントの測定値は Slater-Pauling 曲線群と称せられるものによって表される (附図 A)。金森氏らの計算結果 (附図 B) は測定値と極めてよく対応している。軽い遷移元素 (Sc, Ti, V, Cr) が Fe, Co, Ni に溶け込んだ場合は、軽い元素の磁気モーメントが逆向きになるという傾向が表れている。特に興味があるのは FeCo 合金の場合、Co 濃度とともに磁気モーメントが上昇し、最大値に達して、それから減少するということである。この上昇は、理論的に次のように説明された。

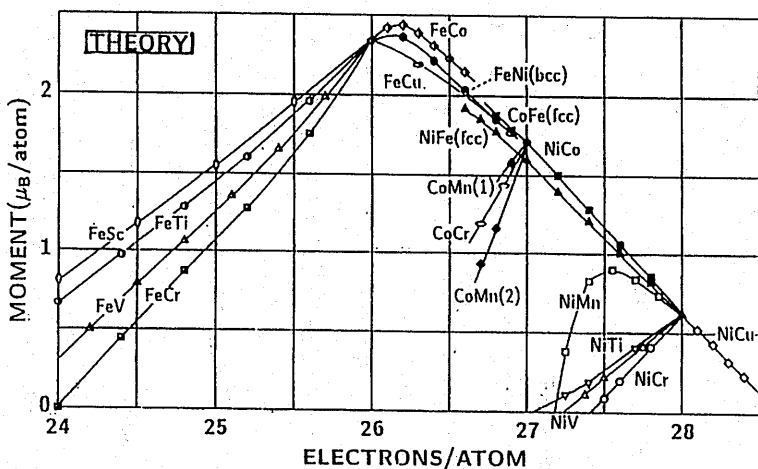
鉄の中にコバルト原子が入ると、そのコバルト原子の d 軌道と周囲の鉄原子の d 軌道に混合がおきる。高いエネルギー準位の鉄 d 軌道が、それよりも低いエネルギー準位にあるコバルト d 軌道と反結合型の混合を起こして、そのレベルはフェルミ準位よりも高い所に押し上げられる。その結果、その鉄 d 軌道に存在していた電子 (強磁性磁化と逆向き磁化を与える少数派のスピン電子) は、スピンを逆転させて、低いエネルギーの鉄 d 軌道へ落ち込み、その d 軌道に存在していた多数派のスピン電子に加わる。このようにして、コバルト原子の周囲の鉄原子の磁気モーメントが増大する。

鉄またはニッケルに他の元素が入った希薄合金については、強磁性磁化の変化の他、その不純物原子の原子核に働

☒ A



☒ B



く超微細場およびスピン・格子緩和時間の計算がなされ、実験と比較された。B、C、Nのような s^p 価電子をもつ原子が鉄の格子間隙に入る場合には、その sp 軌道と周囲の鉄の d 軌道の混合がおきる。その結果、この鉄 d 軌道のエネルギーは低下し、さらに第二隣接の鉄の d 軌道と混合をおこす。この d 軌道・ d 軌道混合は、FeO合金におけるコバルト d 軌道・鉄 d 軌道の混合に類似している。その結果として、第二隣接鉄の磁気モーメントは増大する。

現在知られている最強の永久磁石材料は、鉄に希土類元素とボロンを加えた物質である。この物質で、ボロンが鉄の磁気モーメントを増大させていることは、上述の理由によって疑いないことである。

金森氏の研究は他にも多々あって、いずれも国際的評価の高いものであるが、上述の合金研究は、最もよくまとめられていて、新分野をひらいた研究である。

主要論文

一．イオン結晶についての主要業績

ア．酸化物、ハロゲン化合物の磁性、結晶変形等

- 1) J. Kanamori, Prog. Theoret. Phys. 17 (1957) 177-196, 197-222; Theory of the Magnetic Properties of Ferrous and Cobaltous Oxides I & II.
- 2) J. Kanamori, Prog. Theoret. Phys. 20 (1958) 890-908; Magnetic Properties of Iron-Group Anhydrous Chlorides.

- イ. 超交換相互作用 (Goodenough-Kanamori rules)
- 3) J. Kanamori, J. Phys. Chem. Solids 10 (1959) 87-98: Superexchange Interaction and Symmetry Properties of Electron Orbitals.
- ウ. 協力的ヤーンテラー効果による結晶変形、音速変化、相転移
- 4) J. Kanamori, J. Appl. Phys. 31 Supplement (1960) 14S-23S: Crystal Distortion in Magnetic Compounds.
- 5) M. Kataoka and J. Kanamori, J. Phys. Soc. Jpn. 32 (1972) 113-134: A Theory of the Cooperative Jahn-Teller Effect—Crystal Distortions in $\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Cr}_2\text{O}_4$ and $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Cr}_2\text{O}_4$.
- エ. 化合物磁性体の磁気異方性と磁歪のオリジナルな研究を含む総合報告
- 6) J. Kanamori, Magnetism I, Academic Press (1963) 127-203: Anisotropy and Magnetostriiction of Ferromagnetic and Antiferromagnetic Materials.
- 二. 遷移金属の電子相関と強磁性
 - 1) J. Kanamori, Prog. Theoret. Phys. 30 (1963) 275-289: Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals.
- 三. 遷移金属相互の強磁性合金
 - ア. d 軌道のみに着目したタイトバインディングモデルによる取扱いの提案と計算
 - 1) J. Kanamori, J. Appl. Phys. 36 (1965) 929-935: Ferromagnetic Dilute Alloys.
 - イ. タイトバインディングモデルへの CPA およびその拡張の応用
 - 2) J. Kanamori and H. Hasegawa, J. de Physique Suppl. 32 (1971) C1-280-281: Electronic Structure of Ferro-

- magnetic Alloys in the Coherent Potential Approximation.
- 3) H. Hasegawa and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **33** (1972) 1599–1606: Calculation of Electronic Structure of Ni base fcc Ferromagnetic Alloys in the Coherent Potential Approximation.
 - 4) H. Hasegawa and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **33** (1972) 1607–1614: Calculation of Electronic Structure of Fe base bcc Ferromagnetic Alloys in the Coherent Potential Approximation.
 - 5) T. Jo, H. Hasegawa and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **35** (1973) 57–62: An Application of the Coherent Potential Approximation to Ferromagnetic Ternary Alloys.
 - 6) J. Kanamori, *J. de Physique Suppl.* **35** (1974) C4-131–139: The Coherent Potential Approximation and Ferromagnetism.
 - 7) J. Kanamori, H. Akai, N. Hamada and H. Miwa, *Physica* **91B** (1977) 153–161: The Application of CPA and its Extension to Ferromagnetic Transition Metal Alloys.
 - 8) H. Akai and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. JPN* **51** (1982) 1176–1184: CPA Calculation of the Electronic Structure of Transition Metal Alloys with Muffin-Tin Potential Model.
 - 9) J. Kanamori and H. Akai, *Electronic Structure and Lattice Defects in Alloys*, edited by R. W. Siegel and F. E. Fujita, *Trans Tech Publications* (1989) 1–24: Bulk and Defect Electronic Structure of Magnetic Alloys.
 - 10) H. Akai, P. H. Dederichs and J. Kanamori, *J. de Physique*, **C8** (1989) 23–24: Magnetic Properties of Ni- and Co- alloys Calculated by KKR-CPA-LSD Method.

電子軌道中核子間相互作用の計算法とその応用

三 b. 遷移金属と s, p 価電子をもつ元素との合金

ア. 電子構造計算の一般理論

- 1) J. Kanamori, K. Terakura and K. Yamada, Prog. Theoret. Phys. 41 (1969) 1426-1437: The Approximate Expression of Green's Function for the Calculation of Electronic Structure of Metals and Alloys.
- 2) J. Kanamori, K. Terakura and K. Yamada, Prog. Theoret. Phys. Supplement 46 (1970) 221-243: Resonance Orbital, Off-Resonance Orbital and Pseudo-Greenian.

イ. 典型元素不純物のニッケルの強磁性への影響の理論と具体的計算

- 3) K. Terakura and J. Kanamori, Prog. Theoret. Phys. 46 (1971) 1007-1027: A Calculation of the Electronic Structure of an Impurity Atom of Non-Transition Element in Nickel.

ウ. 典型元素不純物原子核スピンの遷移金属中で長い緩和時間をもつものの理論

- 4) K. Terakura and J. Kanamori, J. Phys. Soc. Jpn. 34 (1973) 1520-1529: A Calculation of the Electronic Structure of an Impurity Atom of Non-Transition Element in Transition Metals—The Nuclear Spin Lattice Relaxation Time of an Impurity Atom (Al and Cu) in Pd—.

エ. 強磁性金属中の不純物原子核の超微細磁場と緩和時間の規則変化、温度変化等の理論

(計算ではボテンシャルはセルフロンシステントには決定されていなく)

- 5) H. Katayama, K. Terakura and J. Kanamori, J. Phys. Soc. Jpn. 46 (1979) 822-830: A Calculation of the Electronic Structure of an Interstitial and a Substitutional Impurity Atom of Boron in Ferromagnetic Metals.

- 6) H. Katayama-Yoshida, K. Terakura and J. Kanamori, J. Phys. Soc. Jpn. 48 (1980) 1504-1512; *ibid.* 49

四. その他の主要業績

ア. 反強磁性スピン系の帯磁率のスピン波理論 (スピン波相互作用の正しい取扱)

- 1) Y. Itoh and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **33** (1972) 315-326: Spin Wave Theory of Principal Susceptibilities of the Heisenberg Antiferromagnet.

イ. 競合する相互作用をもつイジングスピン系、二元合金の基底状態の理論
(厳密解と合金系の新しい分類、新しい配列の発見等)

- 2) J. Kanamori, *Prog. Theoret. Phys.* **35** (1966) 16-35: Magnetization Process in an Ising Spin System.
 - 3) M. Kaburagi and J. Kanamori, *Prog. Theoret. Phys.* **54** (1975) 30-44: A Method of Determining the Ground State of the Extended Range Classical Lattice Gas Model.
 - 4) J. Kanamori and Y. Kakehashi, *J. de Physique* **38** (1977) C7-274-279: Condition for the Existence of Ordered Structure in Binary Alloy Systems.
 - 5) J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53** (1984) 250-260: Infinite Series of Ground States of the Ising Model on the Honeycomb Lattice.
- ウ. 遷移金属のいくつかの補遺: クロムの格子歪み波の予言と発見、ロバートについての一般論
- 6) Y. Tsunoda, M. Mori, N. Kunitomi, Y. Teraoka and J. Kanamori, *Solid State Commun.* **14** (1974) 287-289: Strain Wave in Pure Chromium.
 - 7) K. Hirai and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **50** (1981) 2265-2273: Real Space Approach to the Electronic Structure of Transition Metals.

エ. ダイヤモンド型半導体 (111) 表面再構成と相転移の理論

8) Y. Sakamoto and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58** (1989) 1512-1515: Lattice Gas Model of the (111) Surface of Ge.

9) Y. Sakamoto and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58** (1989) 2083-2091: Phase Diagram of the Lattice Gas Model for the Surface of Si and Ge.

論文総数 一一九、日本語の解説、総合報告 約四〇