

## 学位申請論文公開講演会

日時：1月24日(水) 15:00 ~

申請者：内藤 聖之

場所：理学館大講義室 ( B 0 7 )

題目：「鉄の強磁性相における準粒子状態の研究」

### (主論文の要旨)

近年、光電子分光の分解能が改善され、固体中の電子状態(準粒子状態)に対する多体効果(自己エネルギー補正)を直接かつ定量的に観測することが可能となった。最近、角度分解型光電子分光(ARPES)を用いた鉄の強磁性相における準粒子状態の研究が行われた。Schäfer 達による Fe(110) 表面での ARPES の実験から、フェルミ面近傍で準粒子とスピン波励起の結合による自己エネルギー補正が報告されている。また Schäfer 達による Fe(bulk) での実験から、 $\Gamma$ -H 方向における準粒子バンド(以下、バンド I)に対して、準粒子の有効質量が第一原理計算から得られる結果と比べて3倍程度増大することが報告されている。ごく最近の Cui 達による Fe(bulk) での実験では、バンド I の準粒子バンドに対して結合エネルギー  $\omega \sim 340\text{meV}$  でわずかなキック構造が得られているが、低エネルギー領域では Schäfer 達が報告している程の有効質量の増大は得られなかった。これらの実験結果から、強磁性相鉄におけるフェルミ面近傍の電子状態に対して電子相関によると思われる自己エネルギー補正が存在するのは確かであるが、低エネルギー領域でスピン波励起がどの程度特徴的な寄与を果たすかについては明確ではない。本研究の目的は強磁性相鉄の電子に対するスピン波揺らぎの寄与、特に横スピン揺らぎの寄与を含む自己エネルギー補正を求め、フェルミ面近傍の準粒子状態を明らかにすることである。本研究では強磁性相鉄の準粒子状態に対するスピン波励起の寄与を調べるため、第一原理計算をよく再現する Naval Research Laboratory tight binding (NRL-TB) モデルに基づく多軌道ハバードモデルを用いて、フェルミ面近傍の電子に対する横スピン揺らぎの寄与を計算した。

はじめに、このモデルによって得られる強磁性相鉄のバンド構造と第一原理計算による結果との比較、特に交換分裂の定量的な比較、から NRL-TB 理論によるバンド構造が第一原理計算結果をよく再現することが確認された。さらに、NRL-TB モデルに基づく多軌道ハバードモデルに対して乱雑位相近似(RPA)を適用して得られた長波長、低エネルギー領域におけるスピン波励起の分散が中性子非弾性散乱から得られた分散とよく一致することが確かめられた。また、RPA によって得られた短波長、高エネルギー領域における横スピン揺らぎスペクトルが中性子非弾性散乱から得られる微分断面積の特徴を再現できることが確かめられた。これらの結果から、NRL-TB 理論に基づく多軌道ハバードモデルによって、スピン波励起を含む強磁性相鉄の電子状態の特徴が適切に記述されることが結論される。

このモデルの有効性を確かめた上で、フェルミ面近傍の電子に対する横スピン揺らぎの寄与が計算された。その結果、横スピン揺らぎの寄与によってバンド幅の様な減少が生じること、低エネルギー領域の準粒子分散においてスピン波励起による明瞭なキック構造のような特異的な構造は現れないことが明らかにされた。低エネルギー領域ではスピン波励起による顕著な構造はなく、スピン波励起による有効質量の増大は小さいという点で、本研究の結果は Cui 達の実験結果を支持する。