

序 文

物質の磁性の起源は電子系の量子的多体効果にあり、その記述は今日でも決して平易ではない。このため、磁性理論は一般に、極端に簡素化された模型の下で数学を駆使した抽象論あるいは定性的議論になることが多く、現実の物質、特に実用材料の磁気特性の議論にまで踏み込むことは少なかった。一方、このような多体問題とは異なるアプローチとして、密度汎関数理論の進展と計算機の発達の下で、1 電子状態から実際の物質の磁気特性を定量レベルで評価する技術（第一原理計算とよばれている）が長足の発展をなしてきた背景がある。このアプローチが磁性体の基底状態に関して一定の成功を収めてきたことは衆目の一致するところであるが、前述のような簡素な模型を用いて築き上げられてきた磁性理論との折り合いをどうつけなければよいかはそれほど明らかではなく、この点に関してわかりやすく書かれた書物はあまり見当たらない。実際、筆者もこれら二つのアプローチが示す磁性の風景にギャップを感じることもあり、混乱する学生が多いことも事実である。

そこで、電子論という共通の視点からこれら二つのアプローチが指し示す磁性を、それぞれの特徴を損なうことなく同じ土俵で論じることができれば、学生や初学者にとって今日的な意味での磁性物理学のよい見取り図になるのではないかと考えた。筆者が日本磁気学会から執筆依頼を受けた当時、本書に取り組むにあたっての“当初の”目的と志はこのようなものであった。

本書の前半では、遍歴電子系の簡単な模型から物質の磁性や磁気構造、特に交換相互作用が電子論的立場からどのように理解されるかについて概説し、後半で、有限温度におけるスピンの揺らぎの扱いや磁気異方性の起源などについて説明した。第3章の磁気秩序については金森順次郎先生の『磁性』（培風館）、芳田圭先生の『磁性』（朝倉書店）、第6章のスピンの揺らぎについては守谷亨先生の『磁性物理学』（朝倉書店）、川畑有郷先生の『電子相関』（丸善）に負うところが大きい。これらは1980年代後半までに現在の形に纏め上げられたものであるが、第4章の実効的交換相互作用については、後述する第一原理計算との関係を意識し、従来とは少し異なる視点から電子系の交換相互作用を俯瞰した（主に後半部）。ここでは、散乱理論の観点から遍歴電子系の磁気励起エネルギーを評価し、ハイゼンベルグ模型との比較から電子系の実効的な交換積分の形を導く。本章ではこの表式から磁気秩序の発現機構を考察し、その中でも特に電子濃度が磁気構造の重要な支配因子となっていることを

述べる。最後の章で 1980 年代前半から急速に発展してきた密度汎関数理論とバンド理論の概要を述べ、これらの手法を用いて得られた実際の物質の電子状態と磁気特性の計算結果を前半の理論に照らして説明を試みた。バンド理論に関する説明は藤原毅夫先生の『固体電子構造』(朝倉書店)、小口多美夫先生の『バンド理論』(内田老鶴圃)および和光信也先生の『固体の中の電子』(講談社)のテキストに基づいた。付録には、学部学生が本書を理解する上で必要となる固体電子論の基礎を記した。本書は理工系の学部 4 年次以上の学生を対象としたものであるが、充実した付録は学生が磁性以外の固体物理全般を学ぶ上でも有用となることを期待して、特に式の導出については詳述を心がけたつもりである。付録中の経路積分の説明は永長直人先生の『物性論における場の量子論』(岩波書店)、今田正俊先生の『統計物理学』(丸善)を参考にさせて頂いた。

さて、志はよかったのであるが、結果としては己の実力と時間の壁を乗り越えることができず、はなはだ不十分な内容で終わった、というのが実感である。特に、多体的描像と一体描像の関係については、狙いとは裏腹に項目の羅列に終わり、読者にクリアな形で伝わる内容にならなかったのが残念である。実際、今回の執筆によって、いまさらながら磁性物理の難解さを思い知らされた次第である。ただ、今回の作業を通じて以下に記す多くの方から有益なご助言、激励、サポートをいただき、これらが筆者自身の血肉になったことは個人的には大きな成果であった。忸怩たる思いはあるが、本書が踏み台となって何らかの展開へ繋がることがあれば筆者にとっては望外の喜びである。ついてはこの場を借りて、以下の方々に謝意を表したいと思います。

著者が学生の頃らご指導いただいている倉本義夫先生には激励と有益なコメントをいただいた。宮寄博司先生、清水幸弘先生、そして土浦宏紀先生には執筆を支えていただき、また日ごろの議論を通して物理学全般の考え方を学ばせていただいた。著者所属の研究室の学生には原稿を精読してもらい、コメントだけでなく式の間違ひまで指摘してもらった。学生のためと思って書いたつもりだったが、結果として私が一番勉強になった。共立出版編集部の石井徹也氏をはじめ松本和花子氏と山本藍子氏には執筆受諾から出版まで多大なご迷惑をおかけしたにもかかわらず、海容と忍耐の精神で激励とサポートをいただいた。

最後に私事にわたるが、今回の執筆は家族の支援、特に日々家庭を守ってくれている妻の支えなしには成しえなかったものである。深謝の念とともに筆をおく。

2010 年 7 月

佐久間 昭正