

論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博 士 （ 理 学 ）	氏名	Dipendra Bahadur Hamal
学位授与の要件	学位規則第4条第①・2項該当		
論 文 題 目 Development of the Magnetic-Field-Containing Relativistic Tight-Binding Approximation Method: Revisiting the de Haas-van Alphen Effect (磁場を含んだ相対論的強束縛近似法の開発：ド・ハースーフアン・アルフェン効果の再考)			
論文審査担当者 主 査 准 教 授 樋 口 克 彦 審査委員 教 授 鈴 木 孝 至 審査委員 教 授 世 良 正 文 審査委員 教 授 高 根 美 武 審査委員 教 授 嶋 原 浩			
〔論文審査の要旨〕 ド・ハースーフアン・アルフェン効果（以下、dHvA 効果）の測定は、金属のフェルミ面の形状、サイクロトロン有効質量、散乱緩和時間などを実験的に調べる有効な手段として広く用いられている。dHvA 効果を説明する理論としては、リフシッツとコセビッチによる理論（以下、LK 理論）が広く用いられている。LK 理論では半古典的な運動方程式と前期量子論のボーア・ゾンマーフェルト量子化条件が用いられ、シュレディンガー方程式またはディラック方程式に基づく記述はされていなかった。 著者は、磁場が印加された固体の電子状態を計算する第一原理的な計算手法、「磁場を含んだ相対論的強束縛近似法(以下、MFRTB 法)」を開発した。本手法は一様磁場下固体中の電子に対するディラック方程式を近似的に解く手法である。著者は MFRTB 法を様々な系に適用し、その有効性を示した。特に、MFRTB 法により dHvA 効果を定量的に説明することに成功し、従来の LK 理論の検証も行った。 第一章では、研究背景および磁場下固体の電子構造計算に関する先行研究を紹介し、本研究の意義と概要を説明している。第二章では、磁場が印加されていない系に対する相対論的強束縛近似の定式化を与えている。ここでは、非相対論的とび移り積分を計算するときによく用いられている所謂スレーター・コスターの表を、相対論的とび移り積分に適用可能な形に拡張している。 第三章では、本研究で開発した MFRTB 法の詳細を説明している。定式化の際に表れる磁場下相対論的とび移り積分は、相対論的とび移り積分にパイエルズ位相と呼ばれる磁場に依存した位相因子をかけた形で近似できることを示している。定式化は様々な物質に適用可能な一般的な形で行われている。			

第四章では、MFRTB 法の有効性を確認するために、磁場中に置かれた二次元正方格子上の電子系に本手法を適用している。ホフスタッターによる先行研究では、この系のエネルギーの磁場依存性は所謂バタフライダイアグラムと呼ばれる繰り返し構造を有することが示されている。MFRTB 法では、バタフライダイアグラムにスピンゼーマン効果による修正が加わったエネルギーの磁場依存性が得られることを明らかにしている。

第五章では、MFRTB 法の現実物質への適用可能性を示す為に、磁場下結晶シリコンの電子構造計算を実行している。磁場によって収縮した磁氣的ブリルアンゾーン内の電子構造をはじめ明らかにし、バンド幅の磁場依存性など電子構造の詳細を説明している。また、磁場と垂直な平面内の波数ベクトルに対するエネルギーの磁場依存性が、バタフライダイアグラムと似た繰り返し構造を有することも明らかにしている。

第六章では、単純立方格子上に s 電子が 1 つ配置された磁場下金属に MFRTB 法を適用し、dHvA 効果を再考した結果について述べている。まず、第一原理的計算手法である MFRTB 法により、dHvA 効果が説明できることを明らかにしている。次に、従来の LK 理論は実験室レベルの磁場強度 (9.8T-45.7T) では良い近似になっているが、超強磁場領域 (500T 以上) では振動周期に数%の誤差が生じる可能性があることを明らかにしている。さらに、LK 理論では予見できない振動が超強磁場領域で生じることを明らかにし、この振動の原因が MFRTB 法で明らかにされたエネルギーバンドの微細構造であることを説明している。最後に第七章では、本研究での結論を述べている。

著者は、磁場下固体の電子構造を計算する第一原理的手法である MFRTB 法を提案した。そして有効性を実証するために計算プログラムを作成し、それにより dHvA 効果を第一原理的手法により再考した。本研究は磁場下固体で観測される種々の現象に対する第一原理的記述への道を拓き、物性物理学の分野における重要な貢献であると高く評価される。

以上のことから、審査の結果、本論文の著者は、博士 (理学) の学位を受ける資格が十分あるものと認める。