

## 遍歴電子磁性体における最近の問題

名古屋大学工学部

志水正男

遍歴電子強磁性における最近の興味ある二三の問題を、われわれの取扱いを中心にして紹介する。第1に金属磁性体におけるスピンゆらぎの効果を議論する。第2に稀土類金属と遷移金属の金属間化合物の電子構造とその磁性について述べる。第3には各種の金属磁性体が示すメタ磁性転移あるいは第1次転移について議論する。

### 1. 金属磁性体におけるスピンゆらぎの効果

最近、電子相関の効果を取り入れた局在スピン密度近似によって多くの遷移金属の電子構造がかなり正確に計算されるようになった。また状態密度及びOKにおける磁気モーメント、スピン帯磁率 $\chi$ なども計算された。OKにおけるこれらの計算値はそれらの実験値によく一致している。<sup>1)</sup>しかしキュリー温度 $T_c$ は非常に高く見積られている。一方常磁性状態におけるFe, Co, Niの電子比熱の温度変化のバンド模型による計算結果は実験結果と一致しており、また帯磁率の温度変化のバンド模型による計算結果は、分子場係数の値をOKの理論値よりも小さく定めさえすれば、実験結果と大体一致している。<sup>2)</sup>他方、遍歴電子系について有限温度で重要になるスピンゆらぎの効果についていろいろな理論が出されている。<sup>3)</sup>これらのいろいろな理論の優劣についての客観的なレビューはまだ残念ながらない。しかし共通の結論として、スピンゆらぎの効果によって $T_c$ はさがり、 $\chi$ が $T_c$ 以上で近似的にキュリー-ワイス則を示すことが結論されている。しかし遍歴電子模型が最も妥当と考えられる遷移金属のほとんどすべてが高温においてハイゼンベルグ磁性体を示すが如くにはキュリー-ワイス則をきっぱりと示していない。たいていの理論では、ストナー励起によるスピン帯磁率の温度変化が無視されており、またゆらぎの磁気モーメントが小さい場合のみとしか取り扱っていない。また具体的な電子構造を使ったスピンゆらぎの効果の定量的な算定や実験結果との定量的な比較はほとんど行われていない。

我々は遷移金属、合金、化合物について求められた電子構造を用い、定量的にスピンゆらぎの効果を求め、実験結果と具体的に比較することを試みた。以下にその結果について述べる。具体的に計算された電子構造に基づいてまず体積 $V$ の磁気モーメント $\vec{M}(\vec{r})$ をもった遍歴電子系についてLandau-Grinzburgの自由エネルギーを次のように書く。

$$f = \int d^3r \left\{ \frac{1}{2} (a_1 - \alpha) M(\vec{r})^2 + \frac{1}{4} a_3 M(\vec{r})^4 + \frac{1}{6} a_5 M(\vec{r})^6 + \dots \right. \\ \left. + \frac{1}{2} A \vec{\nabla} \cdot \vec{M}(\vec{r})^2 + \dots \right\},$$

ここで $a_1, a_3, a_5$ の係数は状態密度で書きあらわされ温度の関数である。<sup>2)</sup> $\alpha$ は分子場係数、 $A$ はexchange-stiffness定数である。 $M_i(\vec{r})$ を一様な磁気モーメントの成分 $M_i$

とゆらぎの部分  $m_{i\gamma}(\vec{r})$  に次のように,  $M_i(\vec{r}) = M_i + m_{i\gamma}(\vec{r}) = M_i + \sum_{\gamma \neq 0} m_{i\gamma} e^{i\vec{r} \cdot \vec{\gamma}}$ ,  
 分ける。次に  $f$  の分配関数  $e^{-\beta f}$  を  $m_{i\gamma}$  について古典的な平均を取る。ガウス分布  
 $e^{-\beta \varphi} / Z_\varphi$ , ここで  $\varphi = \frac{1}{2} \sum_{i,\gamma} m_{i\gamma} m_{i-\gamma} / \langle m_{i\gamma} m_{i-\gamma} \rangle$ ,  $Z_\varphi = \int \prod_{i,\gamma} d\bar{m}_{i\gamma} e^{-\beta \varphi}$ ,  $\bar{m}_{i\gamma} = \sqrt{m_{i\gamma}} / \mu_B$   
 とした, を基準にとり,  $M_i(\vec{r})$  の高次の項を計算するため Feynman の不等式を次のよう  
 に用いる。

$$e^{-\beta f} \equiv \int \prod_{i,\gamma} d\bar{m}_{i\gamma} e^{-\beta f} = \langle e^{-\beta(f-\varphi)} \rangle_\varphi Z_\varphi > e^{-\beta \langle f-\varphi \rangle_\varphi} Z_\varphi.$$

ゆらぎのガウス分布で平均された自由エネルギー  $-\bar{f}$  は, スピンゆらぎの縦成分 ( $z$  方向) と  
 横成分の 2 乗の平均,  $\xi_{e\gamma}^2 = \langle m_{z\gamma} m_{z-\gamma} \rangle_\rho$  と  $\xi_{t\gamma}^2 = \langle m_{x\gamma} m_{x-\gamma} \rangle_\rho$  を区別して,  
 次のようにかかれる。

$$\begin{aligned} \bar{f} = & -\frac{1}{2} k_B T \sum_\gamma \{ \ln(2\pi V^2 \mu_B^{-2} \xi_{e\gamma}^2) + 2 \ln(2\pi V^2 \mu_B^{-2} \xi_{t\gamma}^2) + 3 \} + V [ \frac{1}{2} A \sum_\gamma \gamma^2 (\xi_{e\gamma}^2 + 2 \xi_{t\gamma}^2) \\ & + \{ \frac{1}{2} (a_1 + \alpha) (\xi_e^2 + 2 \xi_t^2) + \frac{1}{4} a_3 (3 \xi_e^4 + 4 \xi_e^2 \xi_t^2 + 8 \xi_t^4) + \frac{1}{2} a_5 (5 \xi_e^6 + 6 \xi_e^4 \xi_t^2 + 8 \xi_e^2 \xi_t^4 + 16 \xi_t^6) \} \\ & + \frac{1}{2} \{ a_1 - \alpha + a_3 (3 \xi_e^2 + 2 \xi_t^2) + a_5 (15 \xi_e^4 + 12 \xi_e^2 \xi_t^2 + 8 \xi_t^4) \} M^2 \\ & + \frac{1}{4} \{ a_3 + 2 a_5 (5 \xi_e^2 + 2 \xi_t^2) \} M^4 + \frac{1}{8} a_5 M^6 + \dots \end{aligned}$$

この  $\bar{f}$  の平衡条件より外部磁場  $H$  と  $M$  の関係および縦と横のスピンゆらぎの 2 乗の平均  $\xi_e^2$   
 $= \sum_\gamma \xi_{e\gamma}^2$  と  $\xi_t^2 = \sum_\gamma \xi_{t\gamma}^2$  が次のように与えられる。

$$H/M = \bar{a}_1 - \alpha + \bar{a}_3 M^2 + \bar{a}_5 M^4 + \dots,$$

$$\xi_{e\gamma}^2 = k_B T / (X_e + A \gamma^2),$$

$$\xi_{t\gamma}^2 = k_B T / (X_t + A \gamma^2),$$

ここで

$$\bar{a}_1 = a_1 + a_3 (3 \xi_e^2 + 2 \xi_t^2) + a_5 (15 \xi_e^4 + 12 \xi_e^2 \xi_t^2 + 8 \xi_t^4) + \dots,$$

$$\bar{a}_3 = a_3 + 2 a_5 (5 \xi_e^2 + 2 \xi_t^2) + \dots,$$

$$\bar{a}_5 = a_5 + \dots,$$

$$X_e^{-1} = \bar{a}_1 - \alpha + 3 \bar{a}_3 M^2 + 5 \bar{a}_5 M^4 + \dots,$$

$$\begin{aligned} X_t^{-1} = & a_1 - \alpha + a_3 (\xi_e^2 + 4 \xi_t^2) + a_5 (3 \xi_e^4 + 8 \xi_e^2 \xi_t^2 + 24 \xi_t^4) \\ & + \{ a_3 + 2 a_5 (3 \xi_e^2 + 4 \xi_t^2) \} M^2 + a_5 M^4 + \dots \end{aligned}$$

$$\xi_{e,t}^2 = \frac{1}{2\pi} k_B T g_m A^{-1} \{ 1 - (g_m^2 A X_{e,t})^{-1/2} \tan^{-1} ((g_m^2 A X_{e,t})^{1/2}) \},$$

であり,  $g_m$  は cut-off 波数である。

$T_c$  以上の温度では  $M = 0$  で  $\xi_e^2 = \xi_t^2 = \xi^2/3$  となり, スピン帯磁率  $\chi$  と  $\xi^2$  は次式で与  
 えられる。

$$1/\chi = a_1 - \alpha + \frac{5}{3} a_3 \xi^2 + \frac{25}{9} a_5 \xi^4 + \dots, \quad (1)$$

$$\xi^2 = \frac{3}{2\pi} k_B T A^{-1} g_m \{ 1 - (g_m^2 A \chi)^{1/2} \tan^{-1} ((g_m^2 A \chi)^{1/2}) \} \quad (2)$$

この両式によつて  $\chi$  と  $\xi^2$  の温度変化を求めることができる。この結果は Murata-Doniach  
 の理論の拡張に相当している。具体的な計算結果を紹介する前に  $\chi$  と  $\xi$  の温度変化の概要  
 を示す。まず低温の常磁性状態では  $\xi^2 \propto T$  より  $d\chi/dT \neq 0$  になり古典的近似がよくない  
 ことを示している。  $T \geq T_c$  では  $\chi \propto (T - T_c)^{-2}$  で臨界指数は分子場近似のものより  
 悪い。高温で,  $\chi$  の値が小さくその温度変化がゆるやかなときには (2) より  $\xi^2 \propto T \chi$  と  
 なり,  $1/\chi \propto \sqrt{T}$  になる。しかし高温で  $\chi \propto 1/T$  のときは  $\xi^2$  は一定となり,  $\chi$  の温度変化は

$a_1 = 1/\chi_0(T)$ によって決まっている。我々のスピンゆらぎの取扱いはとにかく高温ではあまり悪くないものと思われる。また実際に $a_3$ が負になる遷移金属、合金、化合物が沢山あり、この場合には安定な解をうるためにはどうしても $a_3$ 以上を含む高次の項を考慮に入れなければならない。したがって $\chi$ の温度変化も Curie-Weiss 則のような単純なものではないことが明らかである。モード-モード結合の強さを一つのパラメータで表している弱結合の理論ではこの場合を取扱うことはできない。高温における $\chi$ の実験値との比較を次に行う。

状態密度 $\rho$ ,  $\chi(\xi)$ の計算結果などを利用して、 $a_1 = 1/\chi_0(T)$ の温度変化および温度変化しないと仮定した $a_3$ ,  $a_5$ ,  $A$ の値を決める。 $\xi_m$ はパラメータとして最も高温で $\chi$ の計算値と実験値が一致するように決める。<sup>2)</sup>その際理論的に求められている軌道帯磁率 $\chi_{orb}$ の寄与も考慮する。第1-3図に常磁性状態におけるV, Cr, Nb, Mo, Rh, Pd, Fe, Co, Ni, ZrZn<sub>2</sub>, TiBe<sub>2</sub>について求められた $\chi$ と $\xi$ の温度変化を示した。強磁性を示すFe, Co, Niの場合には $T_c$ 近くでも $\chi$ の計算値が実験値に近くなるように $A$ の値を選ぶ。この $A$ の値はスピン波分散係数の実験値より求めたものに近い値になっている。Fe, Co, Niの $\xi$ の値はほとんど温度変化せず、1.47, 1.06, 0.88  $\mu_B/atom$ と求められる。Feのとき偏極中性子の常磁性散乱から求められた $\xi$ の値は1.3  $\mu_B/atom$ で温度変化していない。<sup>4)</sup>Crのときの実験値は367-687Kで0.1  $\mu_B/atom$ である。<sup>5)</sup>

$\chi$ の温度変化の計算値と実験値はRhの場合を除きよく一致している。Rhのときは状態密度の計算値が改良されればよい一致がえられると思われる。低温での矛盾を取り除くためにはdynamical効果を取り入れる必要があり、強磁性のときの $\chi$ の臨界指数の値を改善するためには臨界現象のくりこみ群理論のようにより高次のゆらぎの効果を取り入れるよう我々の理論を拡張することが必要である。

## 2. 稀土類金属と遷移金属の金属間化合物の電子構造と磁性

最近各種の金属間化合物の磁性が調べられいろいろと興味ある結果がえられている。<sup>6)</sup>ここでは主にYとMn, Fe, Co, Niの金属間化合物について議論する。YとNiおよびCoはいろいろな成分比で化合物を作る。第4図に示したようにNiの濃い方で強磁性を示し、YNi<sub>2</sub>で常磁性になるがYがさらに増加したY<sub>2</sub>Ni<sub>3</sub>, YNi<sub>3</sub>は再び強磁性を示し、YNi<sub>3</sub>は常磁性になる。<sup>7)</sup> Y-Co系では第5図に示したようにYCo<sub>2</sub>で常磁性になるがY<sub>2</sub>Co<sub>3</sub>は強磁性を示す。さらに非晶質状態においては常磁性であったものも強磁性になり、非晶質状態の方が大きい磁気モーメントを示している。<sup>8)</sup>これらの金属間化合物のバンド構造は一般的にいうとNiあるいはCoのdバンドの上にYの4dバンドがあり、互いに混り合っている。unit cellの中にはNiあるいはCoのサイトと同等でないものを含んでいる。

結晶構造が少し複雑であるのでd電子についてrecursion法<sup>9)</sup>を用いた局所的な状態密度と全体の状態密度を計算する。この方法は非晶質状態の状態密度を計算するのに役立っている。Slater-Kosterの方法<sup>10)</sup>によれば、d軌道についての独立な3つのtransfer integral  $dd\sigma$ ,  $dd\pi$ ,  $dd\delta$ によっていろいろな方位の原子間のtransfer integralをかきあわすことができる。この $dd\sigma$ ,  $dd\pi$ ,  $dd\delta$ の値を決めるにはPettifor<sup>11)</sup>の求めた

$ddX = \lambda \times (m_d S^2)^{-1} (S/R)^6$  を用いる。ここで  $\lambda_\sigma = -60, \lambda_\pi = 40, \lambda_\delta = -10, m_d$  は  $d$  電子の有効質量、 $S$  は Wigner-Seitz 半径、 $R$  は原子間距離である。同種原子間の  $ddX$  のときは純金属の時の  $m_d$  と  $S$  の値を用い、異種原子間のときはそれぞれの純金属のものとの相乗平均をとる。純金属の  $m_d$  および  $S$  の値は Andersen と Jepsen<sup>(2)</sup> によって求められたものを用いる。最隣接原子間の transfer integral だけを取り入れる。それぞれのサイトにおけるポテンシャルエネルギーは局所的な状態密度を積分して求めた  $d$  電子数が純金属の時の  $d$  電子数と等しくなるように self-consistent に決められる。以下に  $YNi_2, YNi_3, Y_2Ni_7, YNi_5$  についてえられた結果を示す。<sup>(3)</sup> 以上のようにして計算されたこれらの  $Y-Ni$  金属間化合物の状態密度を第6-9図に示す。参考のため  $YNi_3$  について2種類の  $Ni$  サイトと1種類の  $Y$  サイトの全体の状態密度を第10図に示した。これらの状態密度から求められた低温電子比熱の温度係数  $\gamma$  の値とその実験値は純粋な  $Ni$  金属と  $YNi_2$  を含めて第11図に示されている。計算値と実験値は大体一致しており、強磁性出現の成分変化の様子とも一致している。

計算された状態密度を使い、バンド模型によってスピン帯磁率  $\chi_0(T)$  を計算し、分子場  $\alpha M$  による enhancement と軌道帯磁率  $\chi_{orb}$  を考慮した  $\chi = \frac{\chi_0(T)}{1 - \alpha \chi_0(T)} + \chi_{orb}$  によって求めた  $\chi$  とその実験値を第12-15図に示した。  $YNi_3$  を除き大体  $\chi$  の計算値と実験値は一致している。特に  $Y_2Ni_7$  の時は  $T_C = 58$  K 以下で強磁性になりました  $T_S = 7$  K 以下で常磁性に戻る計算によって示されている。この現象は thermal magnetism と名付けられているが理論的にこの可能性は以前に指摘された。<sup>(2)</sup>

$YNi_2, YCo_2, YFe_2, YMn_2$  については立方的な Lavers 相の結晶構造をもっているため tight-binding 法に基づいた interpolation 法を用いるバンド計算によって recursion 法よりもより正確に状態密度を求めることができる。  $YCo_2$  について求められたこの結果と recursion 法によって求められたものとを第16図に比較した。<sup>(4)</sup> recursion 法によって求められた状態密度はバンド計算のものとは定性的に一致しているが細かい構造や若干のピークについては異なっていることは明らかである。特にこのちがいが  $\chi_0(T)$  の温度変化に現れる。バンド計算より求めた状態密度を用いるときには、  $YCo_2$  の  $250$  K 附近に極大を示す  $\chi$  の温度変化を  $\chi = \frac{\chi_0(T)}{1 - \alpha \chi_0(T)} + \chi_{orb}$  によって第17図に示したように説明することが出来るけれども、recursion によるものは出来ない。  $YCo_2$  についてはスピンの軌道の効果も考慮すれば  $\chi$  の理論値と実験値の一致はよりよくなることと示される。  $YNi_2, YFe_2, YMn_2$  の  $\chi$  も大体同様に説明される。  $YMn_2$  は低温で反強磁性になり、 $T_N$  において大きな体積の膨張を示すことが見い出されている。<sup>(5)</sup>

### 3. $M$ の磁性転移

スピンゆらぎの効果を考慮に入れても平均の自由エネルギー  $f$  は一様な磁気モーメント  $M$  の偶関数として与えられることは明らかである。この  $f$  の  $M$  依存性が転移の次数を決めるのに重要である。 Wohlfarth と Rhodes<sup>(6)</sup> は外部磁場により常磁性状態から強磁性状態への転移、すなわち  $M$  の磁性転移を始め適歴電子模型に基づいて議論した。彼等は磁気エネルギー  $E$  を磁気モーメント  $M$  で  $E = \frac{1}{2} a_1 M^2 + a_3 M^4 - MH$  と展開し、  $M^4$  の係数  $a_3$  が負のと

メタ磁性転移がocこりうることを示し、 $H$ の関数として $E$ を $M$ に対して画いたとき変曲点が見れるときの $H$ をメタ磁性転移の臨界磁場 $H_c$ と定義した。この結果に基づいて Wohlfarth は最近、Pd, YCo<sub>2</sub>, TiBe<sub>2</sub>の $H_c$ を推定したが、実験ではメタ磁性転移はまだ見い出されてない。

もし $E$ の展開で $M$ の項よりも高次の項が正で大きく寄与する時にはたとえ $a_3 < 0$ でもメタ磁性転移はocこらない。従って $a_3 < 0$ の条件だけではメタ磁性転移の条件としては不十分であり、また $H_c$ を正しく推定することは出来ない。

熱力学によつて $M$ の関数として与えられる任意の温度任意の体積の磁性体の自由エネルギー $f$ より $M$ の関数として表わされる $H(M) = \partial f / \partial M$ は外部磁場 $H$ に等しい。遍歴電子模型、局在 $d$ -メントと遍歴電子の複合模型、ハイゼンベルグ模型についてこの $H(M)$ を具体的にかくことが出来る<sup>17)</sup>メタ磁性転移としてはいろいろなものがあり、常磁性状態と強磁性状態間のもつと弱い強磁性状態と強い強磁性状態間のもつなどがある。ここでは前者だけについておべる。簡単のため $H(M) = a_1 M + a_3 M^3 + a_5 M^5$ と展開できる場合だけについておべる。第18図に $a_1 \geq 0, a_3 < 0, a_5 > 0$ の場合について $H(M)$ の $M$ 依存性の概略を示した。Xは変曲点を小さい縦棒は極小、極大を示している。 $H(M) = H$ であるので $M$ と外場 $H$ の関係もこの図に示されたものと全く同じである。外場 $H$ がかかっている時の $f$ は $\int_0^M H(M) dM - HM$ で与えられこれから $f$ の $M$ 依存性がわかる。常磁性状態と強磁性状態の $f$ が等しい時にこの両相間の転移を与える臨界磁場は $H_c$ 、外場下降のときの臨界磁場は $H_c'$ 、外場上昇のときの臨界磁場は $H_c''$ で示されている。曲線2の場合の臨界条件は $\partial H(M) / \partial M = \partial^2 H(M) / \partial M^2 = 0$ によつて与えられ $a_1 a_5 / a_3^2 = \frac{3}{20}$ と求められる。この時の $M$ と $H$ の値 $M_0$ と $H_0$ も容易に求められる。

一方 $H = 0$ のとき強磁性状態と常磁性状態の $f$ が等しくなる時の条件は既に求められており<sup>2)</sup> $a_1 a_5 / a_3^2 = \frac{3}{20}$ となる。この場合は $H_c = 0$ に相当し普通の第1種の転移の時に相当している。故にメタ磁性転移のocこる条件は、 $a_1 > 0, a_3 < 0, a_5 > 0$ のとき

$$\frac{3}{20} < a_1 a_5 / a_3^2 < \frac{3}{10} \quad (3)$$

とかけられる。 $H_c, H_c', H_c''$ も容易に求めることができる<sup>17)</sup>

$M$ の $H$ 依存性の実験結果より $a_1, a_3, a_5$ の値を推定することができる。YCo<sub>2</sub>とPdでは $a_5$ の値を決めるためには測定磁場の強さがまだ不十分である。TiBe<sub>2</sub>の $a_1, a_3, a_5$ の値より $a_1 a_5 / a_3^2 = 0.88$ となり、TiBe<sub>2</sub>は明らかにメタ磁性転移の(3)の条件を満足していない。YCo<sub>2</sub>とPdでは $a_5$ の値が実験的にはきまらないのでメタ磁性転移がより高磁場でocこるかどうかははっきりしない。計算された状態密度の結果から $a_5$ の値を求めることが出来るが、それによるとやはりメタ磁性転移はocこりそうにない。

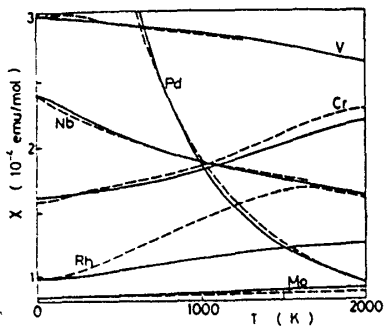
単純なHeisenberg模型について分子場近似で求められたHelmholtzの自由エネルギーを $M^2$ について展開すると $M^2$ の係数を $a$ とすれば $a$ の係数は $T$ に比例し常に正になる。この事実から単純なHeisenberg模型ではメタ磁性転移はocこりえないことが明らかである。Coの $d$ -メントが局在しているHeisenberg模型が適当と思われるCo(S-Se)<sub>2</sub>系はメタ磁性転移を示す<sup>18)</sup>Co原子のまわりのSとSeの配置によつてCoの $d$ -メント

に分布が存在し、そのためにメタ磁性転移を示すものと思われる。

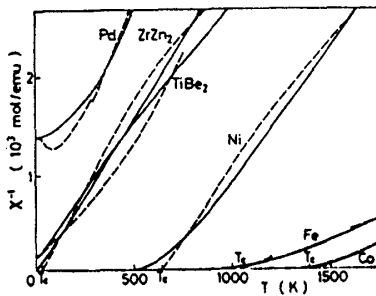
$\text{ErCo}_2$ 、 $\text{HoCo}_2$ 、 $\text{DyCo}_2$  は第1次転移をせまい温度範囲だけで示しその転移温度は磁場によって高温へ移動する。<sup>19)</sup> 中性子線回折などによって $\text{Co}$ のモーメントは遍歴電子によるものであり稀土類金属原子の磁気モーメントは局在していることが確かめられている。 $\text{Co}$ 原子上の遍歴電子は稀土類原子から $s-d$ 相互作用による強い内部磁場をうけており、ほんの少しの外部磁場によってそのスピンの強い強磁性に転移するものと考えられている。 $\text{Co}$ のバンド構造がまだよくわかっていないので、 $\text{ThCo}_5$ の弱い強磁性から強い強磁性へのメタ磁性転移と同様に<sup>20)</sup>  $\text{RCo}_2$ のメタ磁性転移の定量的な説明は行われていない。

#### References

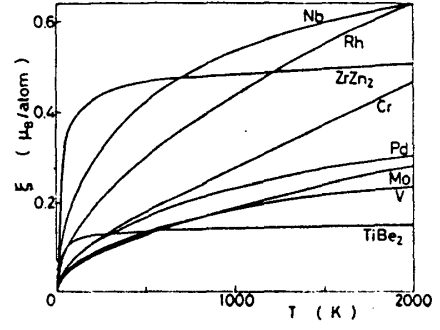
- 1) V. L. Moruzzi et al., Calculated electronic properties of metals (Pergamon, New York, 1978).
- 2) M. Shimizu, Rep. Prog. Phys. 44 (1981) 329, Proc. ICM-82, Kyoto (1982).
- 3) K. K. Murata and S. Doniach, Phys. Rev. Lett. 29 (1972) 285; M. Cyrot, J. de Phys. 33 (1972) 125; T. Moriya and A. Kawabata, J. Phys. Soc. Japan 34 (1973) 639; J. A. Hertz and M. A. Klenin, Phys. Rev. B10 (1974) 1084; H. Capellman, J. Phys. F4 (1974) 1466; R. E. V. Korenman et al., Phys. Rev. B16 (1977) 4032; J. Hubbard, Phys. Rev. B19 (1979) 2626; H. Hasegawa, J. Phys. Soc. Japan 49 (1980) 963.
- 4) P. J. Brown et al., J. Magn. Magn. Mat., to be published.
- 5) J. G. Booth et al., J. de Phys., to be published.
- 6) 総合報告として H. R. Kirchmayr and C. A. Poldy, Handbook on the physics and chemistry of rare earths, edited by Gschneidner and Eyring, North-Holland (1979) p. 55; K. H. J. Buschow, Rep. Prog. Phys. 40 (1977) 1179.
- 7) D. Gignoux et al., Inst. Phys. Conf. No. 55 (1981) 287.
- 8) A. Lienard, Thesis, Grenoble Univ. (1981).
- 9) R. Haydock, Solid State Physics Vol. 35 (1980) 215.
- 10) J. C. Slater and G. F. Koster, Phys. Rev. 94 (1954) 1498.
- 11) D. G. Pettifor, J. Phys. F7 (1977) 613.
- 12) O. K. Andersen and O. Jepsen, Physica 91B (1977) 317.
- 13) S. Nagasawa, Thesis for master's degree, Nagoya Univ. (1983).
- 14) H. Yamada et al., to be published.
- 15) Y. Nakamura, Proc. ICM-82, Kyoto (1982).
- 16) E. P. Wohlfarth and P. Rhodes, Phil. Mag. 7 (1962) 1817.
- 17) M. Shimizu, J. de Phys. 43 (1982) 155, 681.
- 18) K. Adachi et al., J. Phys. Soc. Japan 29 (1970) 323; G. Krill et al., J. Phys. C12 (1979) 4269.
- 19) F. Givord and J. S. Shah, C. R. 274B (1972) 923.
- 20) D. Givord et al., J. Appl. Phys. 50 (1979) 7489.



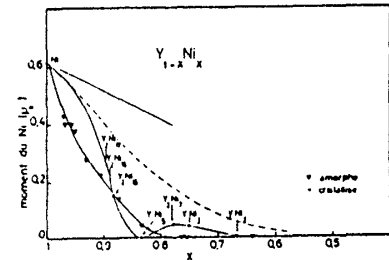
第1図 帯磁率の温度変化(実線計算値, 破線実験値)



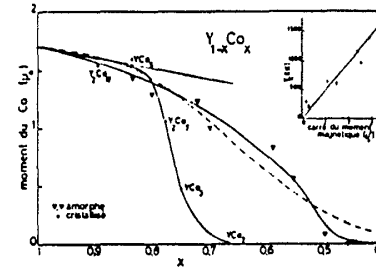
第2図  $\chi'$ の温度変化(実線計算値, 破線実験値)



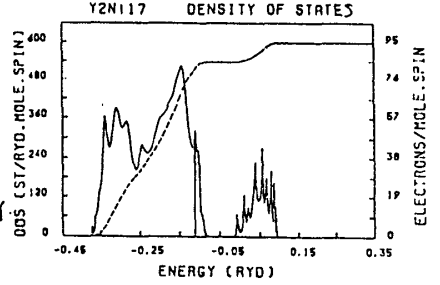
第3図  $\chi'$ の温度変化



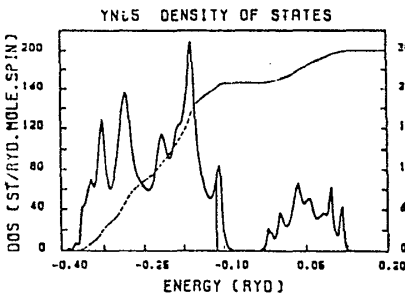
第4図 Y-Niの結晶と非晶質のE-メント



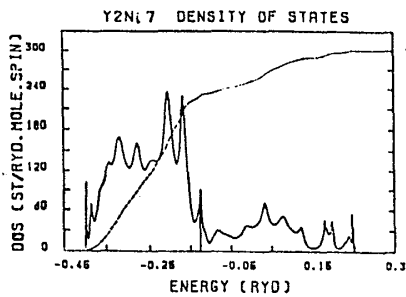
第5図 Y-Coの結晶と非晶質のE-メント



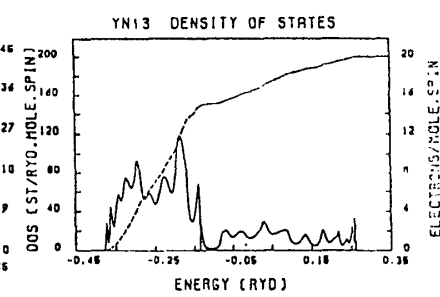
第6図 Y<sub>2</sub>Ni<sub>17</sub>の状態密度



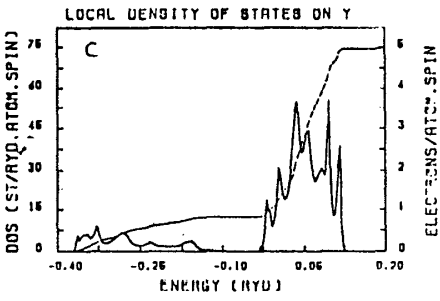
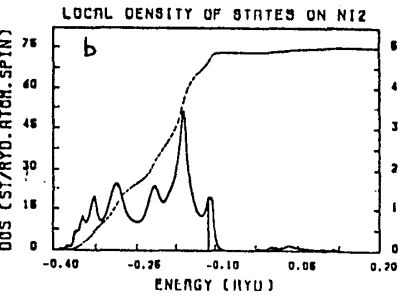
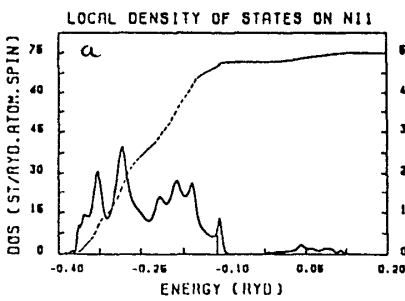
第7図 YNi<sub>5</sub>の状態密度



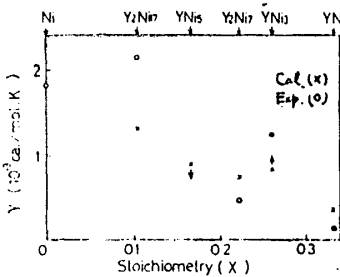
第8図 Y<sub>5</sub>Ni<sub>2</sub>の状態密度



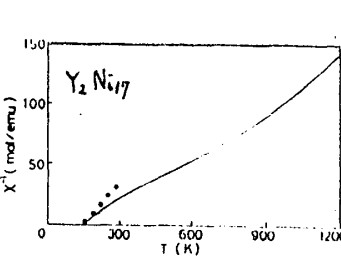
第9図 YNi<sub>3</sub>の状態密度



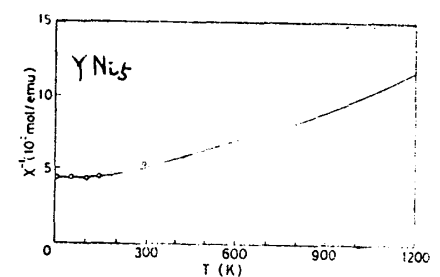
第10図 YNi<sub>5</sub> (a) Ni 1上 (b) Ni 2上 (c) Y上の局所状態密度



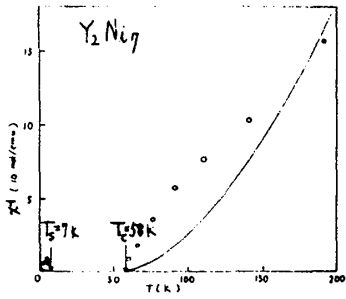
第11図 Y-Ni系の低温比熱温度係数



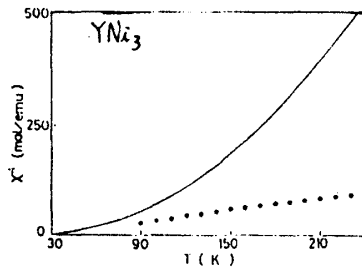
第12図 Y<sub>2</sub>Ni<sub>17</sub>の $\chi'$ の温度変化(0実験値)



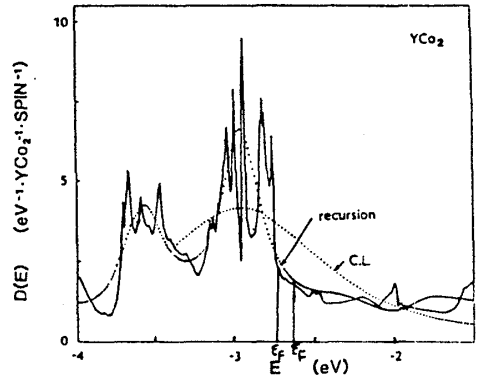
第13図 YNi<sub>5</sub>の $\chi'$ の温度変化



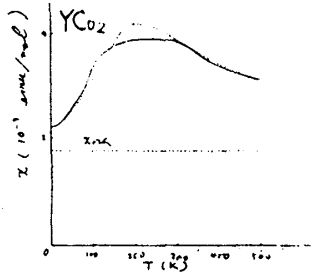
第14图  $Y_2Ni_7$  的  $\chi^T$  随温度变化



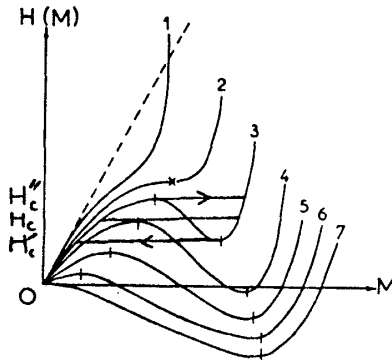
第15图  $YNi_3$  的  $\chi^T$  随温度变化



第16图  $YCo_2$  的状态密度



第17图  $YCo_2$  的  $\chi$  随温度变化  
(破线计算值实线实验值)



第18图 磁场  $H(M)$  的  $M$  依存性