

## Y と Ni, Co, Fe, Mn との金属間化合物における電子構造と磁性

名古屋大学工学部 志水正男、井上順一郎

Y と Ni, Co, Fe, Mn とのいろいろな成分比の金属間化合物は多くの興味ある磁性を示す。<sup>1)</sup>  $YMn_{14}$  と  $YMn_2$  は反強磁性を  $Y_6Mn_{23}$  はフェリ磁性を示している。Y-Ni と Y-Co 金属間化合物では Y の成分の増加と共に強磁性が弱くなり、 $YNi_5$  と  $YCo_2$  で常磁性になるが、 $YNi_3$ ,  $Y_2Ni_7$  と  $Y_9Co_7$  では強磁性が再出現する。 $YCo_2$  と  $Y_2Ni_{16}$  はメタ磁性を示し、 $YCo_2$  と  $YMn_2$  は帯磁率の温度変化に極大を示し、 $Y_2Ni_7$  は有限温度区間で強磁性(熱自発強磁性)を示している。また  $Y_9Co_7$  は低温で強磁性から超伝導への転移を示す。他方、Y-Fe では、( $Y_2Fe_{14}B$ を除き) Y の成分が増加するとキュリー温度  $T_c$  は高くなるが Fe 原子あたりの平均の磁気モーメントは減少している。 $Y_2Fe_{17}$  はインバー異常を示す。これらの興味ある性質は Ni, Co, Fe, Mn の 3d バンドと Y の 4d バンド間の混ざりによる全体及び局所的な状態密度の特有の形とフェルミレベル  $\epsilon_F$  の位置によって説明される。

我々は複雑なユニットセルを持っている  $Y_2M_{17}$ ,  $YM_3$  (M=Ni, Co, Fe)  $YM_5$ ,  $Y_2M_7$  (M=Ni, Co),  $Y_6M_{23}$  (M=Fe, Mn),  $Y_9Co_7$  などの金属間化合物について局所的及び全体の状態密度を、リカーゾン法を用いて計算し、その計算結果に基づいてこれらの金属間化合物の磁性を説明した。<sup>1)</sup> 計算された状態密度の主な特徴は次のようである。エネルギーの低いバンドは主に Ni, Co, Fe, Mn の 3d バンドによるものであり、高いエネルギーのバンドは主に Y の 4d バンドによるものである。低温電子比熱の係数  $\gamma$  の計算値は実験値より小さくこの差は電子格子相互作用によるものと考えられる。 $Y_2Ni_7$  と  $YNi_3$  の弱い強磁性の再出現は比較的大きな  $\gamma$  の値と対応している。Ni, Co, Fe, Mn 原子上の平均の磁気モーメントは実験値に近い値がえられる。同等でない格子点上における Ni, Co, Fe 原子の局所的磁気モーメントも計算され、中性子線回折による実験値とよい一致を示している。 $\epsilon_F$  での状態密度の値が大きい場合にはスピンゆらぎの効果を考慮し、またかなり大きい軌道常磁性帯磁率の寄与も考慮して、帯磁率  $\chi$  の温度変化を説明することができる。高磁場帯磁率  $\chi_H$  や自発体積磁歪  $\omega_s$  も計算され、 $Y_2Fe_{17}$  と  $Y_6Fe_{23}$  については大きな値がえられている。 $Y_2Fe_{17}$  のインバー異常はこれらの結果によって説明できる。 $Y_2Ni_{16}$  のメタ磁性転移も計算された状態密度から容易に説明することができる。結局、これらの特徴的な磁性は遍歴電子模型で説明される。特に Y-Ni では  $\epsilon_F$  における状態密度の型が微妙であり、いろいろな磁性を示す原因になっている。 $Y_2Ni_{17}$  の弱い強磁性は  $\epsilon_F$  における状態密度のピークによって、 $YNi_5$  の常磁性は  $\epsilon_F$  における低い状態密度によって、 $Y_2Ni_7$  の熱自発強磁性は  $\epsilon_F$  が状態密度のピークの肩の所にくることによって、 $YNi_3$  の非常に弱い強磁性は  $\epsilon_F$  におけるすどいピークによって説明される。Y-Co系では、Y の増加と共に高い状態密度による強い強磁性から弱い強磁性に変化している。Y-Fe系では  $\epsilon_F$  における高い状態密度によって強磁性を示し、また  $T_c$  以上ではキュリー、ワイス則を示している。 $Y_2Fe_{17}$  のインバー異常は多数スピンの  $\epsilon_F$  における高い状態密度によって説明される。

$Y_2Ni_7$  については計算された状態密度を用い、ストーナー模型によって  $\chi$  の温度変化を計算すると、 $\chi$  は極大を示し、適当な分子場係数の値によって二つの温度  $T_s$  と  $T_c$  において安定なストーナーの強磁性条件を満足する。この  $T_s$  と  $T_c$  の間で強磁性を示し、磁気モーメント M の温度変化も求められ、大体実験結果と

似た結果がえられた。常磁性のときの  $\varepsilon_F$  は状態密度の小さなピークのすぐ左肩のふくらんだ所にあり、この特殊な状態密度の形が  $Y_2Ni_7$  の熱自発強磁性出現の重要な条件になっている。exchange splitting を  $M$  で展開したときの  $M$  の係数  $a_1 = 1/\chi_0(T)$  は極小を示すにもかかわらず  $M^3$  の係数  $a_3$  は小さな正の値になっている。 $Y_2Ni_7$  では  $a_3$  の値が小さいのと  $T_s$  と  $T_c$  が低いためにスピンゆらぎの効果は熱自発強磁性出現にはあまり重要ではない。 $Y_9Co_7$  では、 $Y$  のサイトに入った余分の  $Co$  原子上及び  $c$  軸上の一部の  $2b$  サイト上にある  $Co$  原子上の局所状態密度は  $\varepsilon_F$  においてかなり大きくなり、強く enhance された常磁性あるいは局在磁気モーメントも出現しうると考えられる。完全な結晶では強磁性を示すことは困難のように思われる。出来るだけ完全な試料で帯磁率、NMR 等の測定がなされることが望まれる。

- 1) J. Phys. F14 (1984) 2673, F15 (1985) 1511, F16 (1986) 1263, F17 (1987) to be published.