

は短波長の平面波の効果摂動として扱うことで、少数の平面波で、無限数の平面波を使用したのと同様の効果を得る方法を定式化した。我々はこの方法の有効性と共に、0 Kの様々なHe濃度の系に対し、マードルングエネルギーの低い複数の結晶構造について、全エネルギーを計算した。

(この研究は、方法自体は前年度の牧野氏の研究を引継いだものであるが、再定式化を行い、収斂性および計算コストを改良した。)

18. Laves 相化合物 RMn_2 ($\text{R}=\text{Tb}, \text{Gd}$) における圧力誘起強磁性

田 中 立

ラーベス相化合物 RMn_2 (R : 希土類元素) 系では、 R と Mn がともに磁気モーメントを持つ場合、複雑な磁性を示すことが知られている。これは $\text{R}-\text{R}$ 間に強磁性的な、 $\text{R}-\text{Mn}$ 間に (反) 強磁性的な、 $\text{Mn}-\text{Mn}$ 間に反強磁性的な相互作用が働き、それらが互いに競合するためであると考えられている。 TbMn_2 , GdMn_2 は、 R 、 Mn の両方がモーメントをもつため複雑なヘリカル構造磁性体であることが中性子回折によって確かめられている。これらの RMn_2 系で Mn がモーメントを持つための条件として、格子定数が重要な因子であると考えられている。すなわち DyMn_2 を境に、それよりも格子定数の大きな化合物では Mn がモーメントを持ち、小さい化合物ではモーメントを持たない。 TbMn_2 , GdMn_2 は格子定数がこの臨界値に近い大きさであるため、格子定数を縮めてやれば Mn モーメントが消失すると予想される。これまでこのようなラーベス相化合物 RMn_2 系において、格子定数と磁性との関係を調べるために、 R をより原子半径が小さく非磁性の Sc 等で置換した”化学的な圧力”を用いた実験しかなされていなかった。今回 TbMn_2 及び GdMn_2 の磁化を一定磁場下で直接静水圧を加えることにより測定したので報告する。

TbMn_2

常圧での磁化-温度曲線では、50K付近で Mn モーメント発生によるヘリカルオーダーを示す鋭いピークが確認され、50K以上では強磁性的な振る舞いを示す。この50Kでのピークは加圧によって低温側へシフトし、5.3kbarで完全に消失し、 M-T 曲線は強磁性的になった。また低温での磁化も加圧により急激に増大した。これらの結果は化学的圧力を用いた $\text{Tb}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Mn}_2$ 系と定性的に同じである。

GdMn_2

常圧では Mn モーメント発生に伴い110K付近で小さなクニックを示す。このクニックは加圧に伴い低温側へシフトしたが $\text{Gd}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Mn}_2$ 系と様相が異なり、シフトに伴い大きくはっきりとしてきた。また低温での磁化は増大した。今回の圧力範囲では Mn モーメントの消失は確認されなかったが、約15kbarで

消失すると予想できる。

以上の結果は加圧に伴う格子定数の縮みによってMnのモーメントが消失し、系全体の磁性がRモーメントにのみ依存し、強磁性的になったためと考えられる。これは圧力による強磁性発生すなわち”圧力誘起強磁性”といえる。

19. FeRh 合金における反強磁性-強磁性相転移の 電子顕微鏡による研究

谷 山 明

FeRh合金のB2規則相は従来、磁化測定、中性子回折、メスバウアー分光などによって研究され、室温付近で一次の反強磁性-強磁性相転移することが報告されている。またX線回折によってその際に約1%程度の体積変化を伴うことが明らかにされている。さらに、熱処理によって相転移の進行する温度領域が異なることも報告されている。しかし、この合金系の平衡状態図は未だに確立されておらず、またこの合金は耐食性に非常に優れているために、電子顕微鏡観察用薄膜試料の作製が困難で、電子顕微鏡による相転移その場観察や磁区構造、内部組織などについての研究は全く報告されていない。

本研究において、その薄膜試料作製法を確立し電子顕微鏡による反強磁性-強磁性相転移のその場観察に初めて成功した。さらに、熱処理の効果について詳しく調べるために、873K~1373Kの温度で熱処理した試料について電気抵抗測定、磁化測定、電子顕微鏡観察を行った。また、応力効果についても調べた。

相転移のその場観察の結果、磁気相転移時には反強磁性相(AF)と強磁性相(F)との相境界が結晶粒界や試料端から生じ、温度変化に伴ってそれが移動することが観察され、この合金の磁気相転移は相境界の移動によって進行することが確認された。相境界には転位は存在せず、AFとFは整合界面で微少な傾きを持って接合していることがわかった。

熱処理温度の異なる試料について電気抵抗-温度曲線を調べると、1173K~1373Kの温度で熱処理したときは相転移に伴う抵抗変化の始まりから終了までの温度幅は10Kでその変化も急激であるが、873K~1073Kの温度で熱処理した場合、温度幅は約60K程度まで広がった。1373Kで熱処理した試料を873K~1073Kで熱処理すると熱処理時間の増加に伴って温度幅は広がるがその温度幅が飽和に達する時間は温度が高いほど短かった。磁化測定からこれらの電気抵抗変化は磁気相転移の進行の変化と対応していることがわかった。また、反強磁性領域の比抵抗は熱処理にともなって減少した。873Kでは熱処理時間の増加に伴って相転移温度が上昇した。電子顕微鏡観察では熱処理によって内部組織には殆ど変化はなかったにもかかわらず、873K~1073Kで熱処理した場合と1173K以上の温度で熱処理した場合とでは相境界の移動度に顕著な違いがみられた。これらの結果は、現象が熱活性化過程によって説明され、1073K以下の温度でのなんらかの相の不均一が生ずることを示唆しており、従来提案されている平衡状態図の高温部の相境界線は誤っている可能性がある。