

19. Cu_2Sb 型遷移金属化合物の電子状態と磁性

長 南 徹

Cu_2Sb 型遷移金属化合物はtetragonalの結晶構造を持ち(Space Group D_{2d})、unit cellには4つの金属イオン(1,2,3,4)と2つの陰イオンが含まれている。金属イオン1および2のsiteと3および4のsiteは対称性が異なるためにM(1)-site、M(2)-siteと区別される。この金属イオンsiteをCr, Mn, Fe, Cuが、陰イオンsiteをAs, Sbが占めることによりさまざまな磁気配列を示すことが知られている。また、これらの物質のNeel点以下での磁気モーメントの大きさはM(1)-siteとM(2)-siteで一般に異なり、どちらのsiteの値も局在イオンと考えた場合期待される値よりもかなり小さい。このように、これらの物質の磁性は局在モデルでは説明できず、遷移電子の立場に立つ必要がある。したがってその電子状態を調べるのが議論の出発点となろう。

本研究では、self-consistent APW法により、 Cr_2As , CrMnAs , Mn_2As , Mn_2Sb の4物質について、その常磁性層での電子帯構造(エネルギー分散、状態密度、フェルミ面)を計算し、さらに各siteでの電子軌道がどのような結合によりバンドを形成しているかを示す物理量bond orderを計算してその電子状態をより詳しく調べた。その結果、いずれの物質の伝導帯についてもM(1)-d軌道とM(2)-d軌道が非常によく混じったバンド幅0.3 Ryd程度の混成バンドを形成していることがわかった。そしてそのバンドは大きく3つの領域に分けることができる。低エネルギー側と高エネルギー側はおもにM(1)-d軌道と陰イオンp軌道との結合、反結合バンド、またフェルミレベルにかかった中間の領域は、陰イオンとの結合に関与しないM(1)-dと、M(2)-d軌道からなる非結合バンドであると理解できる。またフェルミレベルでの状態密度の大きさはM(2)-siteの方が大きくなっており、これは4物質の磁気モーメントの値がM(2)-siteの方が大きいこととconsistentである。フェルミ面はc軸方向に柱状で、電子状態の2次元性を反映しているといえる。