

能である。その考察に基づき熱脱離スペクトル（温度を時間的に一定の割合で上げたときの被覆度の時間微分の大きさ $-d\theta/dt$ の変化）を計算したところ、実験結果と形状の似たスペクトルが得られた。

5. 単位胞に 2 種類の原子を含む遍歴系の磁気相図

大 西 裕 明

単位胞内にいくつかの原子を含む規則合金や遷移金属化合物では、様々な強磁性、反強磁性状態の出現が知られている。これらの物質の磁気相図に関しては、これまで主として、局在電子模型の立場から研究がなされてきたが、遍歴電子模型がよい、と考えられている物質も多い。そこで、遍歴電子模型の立場で、単位胞に 2 種類の原子がある系の $T = 0$ での磁気相図を調べた。

単位胞内に 1 個の原子がある系については、すでに Penn らによって磁気相図が調べられている。ここでは、Penn のモデルを次のように拡張した。

- (1) 軌道の異方性や縮退は無視して、2 個の原子 (A, B) は、等方的な局在軌道を 1 個ずつ持つ。局在準位の差は、A の準位から測って、B の準位が V だけ異なる。
- (2) transfer は最近接の A-B, A-A, B-B 間の 3 種類 (t_1, t_2, t_3) を取って、tight-binding 近似で扱う。

(3) 相互作用としては、A, B 原子上での原子内クーロン相互作用 (U_a, U_b) のみ考える。このようなハバード型のハミルトニアンを平均場近似で扱う。結晶構造としては、NaCl 型と CsCl 型の 2 種類を取る。まず、常磁性状態の不安定性を調べ、さらに、A, B 原子上の電子数をセルフ・コンシステントに決めて、各状態のエネルギーの比較から、 $U_a/2t_1$ を縦軸、平均の電子数を横軸とした平面内で磁気相図を作った。

その結果、transfer 積分、クーロン積分、 V 、全電子を変えると、単位胞内のモーメントの相対的な向きや大きさが変わり、観測されている様々な秩序状態が現われる。そこで、CsCl 型構造の FeRh にこのモデルを適用してみた。FeRh は、低温で反強磁性状態であり、340K で強磁性へ 1 次転移する。また、この転移温度は成分比、磁場、圧力を変えると、大きく変化する。このような FeRh の挙動を、定性的ながらも説明できることを示した。