

とをもとにして、粒成長の機構について次の2つの可能性を考えた。

- (1) 非晶質自体の不均一性により、粒成長が複合過程でおこる。
- (2) 原子の移動に要するポテンシャルの山が、温度に対して可逆的に変化する。

これらの解釈について詳細に検討した。

4. スピンのゆらぎと金属間化合物MnAs の磁性・構造転移

加 藤 敬 子

金属間化合物MnAsは、低温相ではNiAs型構造をもち強磁性を示すが、中間相ではMnP型に歪み、 χ^{-1} がやまをもつという異常な振舞をする。高温相では再びNiAs型構造にもどり、常磁性となる。NiAs型の低、高温相はhigh spin state, MnP型の中間相はlow spin stateといわれ、Goodenoughは、C面内にひろがる軌道がa軸の伸縮に伴い、局在的になったり狭いバンドをつくったりすると仮定してこのhigh spin $\leftrightarrow$ low spin 転移を説明した。しかし、我々が高温相におけるMnAsのバンド構造を調べた結果では、C面内にひろがる軌道からなる狭いバンドは存在していなかった。

そこで我々は、バンド構造を考慮して、遍歴電子モデルの立場で理論を展開した。高温相の χ^{-1} の傾きから見積ったモーメントが飽和モーメントよりもわずかに大きいこと、高温相の χ^{-1} がCurie-Weiss的ではあるが湾曲していることより、この物質では、最近守谷らによって明らかにされたスピンのゆらぎの効果が重要であると考えた。計算の手法としてはUsami-Moriyaの方法に従った。原子内クーロン積分Uのreasonableな値のもとで、飽和モーメント、Curie温度、高温相での χ^{-1} の温度変化に対して実験結果とよい対応を示す結果が得られた。MnP型の中間相では、歪みのためにバンドが変形を受け、Fermi levelにおける状態密度の値がNiAs型相でのそれに比べて減少する。その結果、飽和モーメント、local momentの値は、共に歪んでいない相での値に比べて小さなものが得られた。さらに、状態密度の歪みによる変化を調べ、それを取り入れて χ^{-1} の温度変化を計算した。その結果は、実験結果と同様、やまをもつ振舞を示した。このようにして我々は、high spin $\leftrightarrow$ low spin 転移、MnP型をとる中間相での χ^{-1} の異常な振舞を定性的に説明した。