

結果、有限温度 T での結合電子密度分布のフーリエ成分 $\tilde{\rho}_T(\mathbf{G})$ ($\mathbf{G}$ は逆格子ベクトル) が下式のように求まった。

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_T(\mathbf{G}) &= \tilde{\rho}_0(\mathbf{G}) \cdot \exp(-D(\mathbf{G}, T)) \\ D(\mathbf{G}, T) &= t_1(\mathbf{G}) \cdot B_1(T) + t_2(\mathbf{G}) \cdot B_2(T)\end{aligned}$$

通常のイオンコアによる電子密度分布の場合は温度因子が $\exp(-\frac{G^2}{2}B_1(T))$ となるので、この結果は $\frac{G^2}{2}B_1(T) \Rightarrow t_1(\mathbf{G}) \cdot B_1(T) + t_2(\mathbf{G}) \cdot B_2(T)$ と置き換えたことに相当している。イオンコアによ

る場合は温度依存性は自己相関のみで決まり、隣接のイオンとどう相関をもって運動するかによらない。ところが結合電子の場合はそもそも隣接するイオンの間にかなり局在するためにその2つのイオンがどう相関をもって運動するかに依存することになる。実験的には、X線で禁制反射と呼ばれる反射について精密に測ることで、それに対応するフーリエ成分の温度依存性を知ることができる。本研究で得られたSi(222)反射に対する常温以上での結合電子に対するDebye-Waller因子の計算値はコアに対する値のおよそ88%である。過去の実験とは、誤差の範囲内で一致してるといえる。

さらに上述の計算を利用して、適当な仮定のもとで、イオン配置の関数としての結合電子密度を、イオンコアの中心座標とともに動く部分からの寄与と隣接イオン間の中心座標とともに動く部分からの寄与に分けてみた。

現在、高エネ研放射光施設を用いての、Si(222)についての従来より高い精度での実験を計画している。

1. D. Mills and B. W. Batterman, Phys. Rev. B22, 2887 (1980)
2. J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett. 33, 1339 (1974)

●その他、1. fcc希薄合金における転位の運動のシミュレーション(Ref. 転位のダイナミクスと塑性, 鈴木平, 裳華房), 2. LDAに基づくThomas-Fermi近似の拡張(物性研究1990-12月号に投稿), 3. 表面間力が有限のレンジをもつときのCrack形状, 4. 非線形弾性体へのGriffith理論の適用、などについて研究した。特に1, 2については時間がなく、ひとりでやれそうでないのでもし興味を持たれた方があればぜひ連絡ください。

12. Cu_2Sb 型遷移金属化合物 MnAlGe , MnGaGe の電子状態と磁性

是 成 貴 弘

Cu_2Sb 型遷移金属化合物は unit cellに二種の金属イオンsite[$M(1), M(2)\text{site}$]と一種の陰イオンsiteを持つ。この結晶構造に属す物質には Mn_2As , Mn_2Sb , Cr_2As , Fe_2As , また CrMnAs , FeMnAs 等がある。これらの化合物の興味ある点の一つは金属イオンsiteを占める原子が変わることで多彩な磁気配列を示す事であり、Momentの大きさは $M(1)\text{site}$ に比べて $M(2)\text{site}$ がかなり大きい。我々の研究室ではこれまでにこれらの化合物の磁性を議論する出発点として電子帯構造の計算を行ってきた。

今回、これらと同じ結晶構造を持つ MnAlGe と MnGaGe の電子帯構造を Self-Consistent APW 法により計算し、 Mn_2Sb 等との比較を行なった。

これらは $M(2)\text{site}$ を非磁性イオンである Al あるいは Ga で置換されているため磁性を担う原子は $M(1)\text{site}$ の Mn のみで、Moment はすべてC軸方向を向く強磁性体である。

非磁性状態に対するバンド計算の結果、Mn-3d 状態は Al(Ga)-4p Ge-4p とよく混成しバンド幅は約 0.3Ryd. で遍歴性を特徴付けていることが分かった。

Mn-3d と Al(Ga)-4p, Ge-4p の混成バンドは大きく三つの領域に分けることができ、低エネルギー側から

(1) BONDING BAND (2) NON-BONDING BAND (3) ANTI-BONDING BAND

という描像になっており、フェルミエネルギーは (2) の領域にある。

Mn₂Sb等においては (2) の領域は M(1)site の Mn-d と M(2)site の Mn-d がよく混成しているという結果が得られているのに対して MnAlGe や MnGaGe においてはこの領域で Mn-3d バンドは M(2)site の Al(Ga) とあまり混成していないことから面内にバンドを形成しておりより強い二次元性があることが分かった。これはC軸方向のエネルギー分散が顕著に小さいことによるもので、フェルミ面の形もこれを示唆している。一方また (1) や (3) の領域では、Mn-3d と Al(Ga)-4p, Ge-4p のよく混成した領域である。

強磁性状態に対する計算の結果から得られた Moment は MnAlGe, MnGaGe でそれぞれ $1.81 \mu_B$, $2.22 \mu_B$ であり実験で飽和磁化の測定から得られている $1.69 \mu_B$, $1.66 \mu_B$ とオーダー的にはよい対応が見られる。また見積もった電子比熱係数は それぞれ $8.57 \text{ (mJ/mol} \cdot \text{K}^2)$, $2.83 \text{ (mJ/mol} \cdot \text{K}^2)$ である。

13. NiAs 型構造の高圧下での安定性

坂 本 和 生

NiAs 型 (B8) 構造をとる化合物は、常温常圧下においておよそ 50 種類ほど知られている。構成元素の一方 (M) は遷移金属で、他方 (X) は V 属 (P, As, Sb 等) もしくは VI 属 (S, Se, Te 等) の元素である。その結晶構造の基本格子は六方晶であり、一単位格子中に二分子を含む。そこでは、金属原子 M が単純六方格子をとり、非金属原子 X が稠密六方格子をとる。M 原子は、X 原子のつくる 8 面体格子間位置にあり、一方 X 原子は M 原子のつくる三角柱によって囲まれている。

この構造では、構成される元素の種類によって、六方晶の軸比 c/a が大きく変わり、その値は 1.2 から 2.0 程度までおよぶ。一方、同じ六方晶でもウルツ鉱型 (B4) 構造の場合、 c/a の値は構成元素の種類が変化しても 3% 程度しか変わらない。これは、NiAs 型構造では M 原子と X 原子との層状構造となっているために、原子の種類によるイオン半径や磁氣的性質の違いが敏感に軸比 c/a に反映されることによるものと考えられる。このような性質をもつ NiAs 型構造の高圧下での安定性を知ることは、物質の構造と圧力の関係を議論する上で必要である。一方、第一原理に基づく計算では、III-V 化合物の高圧相に