

IV-5-3. 液体遷移金属の帯磁率について

名大工 安達 健 五

前研究会⁽¹⁾で遷移金属およびその合金の融点における帯磁率の変化 $\Delta \chi = \chi_\ell - \chi_s$ は、原子当りの電子数 n の関数としてプロットすると、fcc および bcc の固体遷移金属の状態密度曲線の形状と密接な関連があることを示した。つまり液体の状態密度曲線 $D_\ell(E)$ は固体の $D_s(E)$ を滑らかにした形状をもつものと考え、 $g(E)$ を分布関数として $D_\ell(E)$ を

$$D_\ell(E) = \int_{-\infty}^{\infty} D_s(x) g(E-x) dx \quad (1)$$

から求め、バンドから生ずるスピン常磁性について

$$\Delta \chi(n) \propto D_\ell - D_s \quad (2)$$

が成り立つことを示した。

液体遷移金属の電子エネルギー状態の知見から $g(E)$ の正体をしらべることが正攻法と考えられるが、tightly binding を適用しなければならない遷移金属液体の d-band のあり方は、d-波動関数の形状や3-体以上の効果も取り入れる必要があり⁽²⁾、その詳細は殆んどわかっていない。

それで我々は再び以前の立場から、実験的に得られた $\Delta \chi(n)$ や融点近傍の $\chi_s(T)$ および $\chi_\ell(T)$ の性質から、遷移金属液体の d-band の性質をもっと定量的にしらべることにする。

固体および液体遷移金属の帯磁率はつぎの諸項からなる。

$$\chi(T) = \frac{\chi_p(T)}{1 - JD(E_F)} + \chi_{orb}(T) + \chi_{so}(T) + \chi_d^{band}(T) + \chi_d^{ion} \quad (3)$$

第一項は exchange enhancement をもったスピン常磁性で、 $JD(E_F)$ が

1 に近くないときは

$$\chi_p(T) = 2\mu_B^2 D(E_F) \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{d^2 \ln D(E_F)}{dE^2} + \dots \right\} \quad (4)$$

で与えられる。 χ_{orb} および χ_{so} はそれぞれ軌道およびスピン-軌道の常磁性(2), χ_d^{band} および χ_d^{ion} は Landau-Peierls および ion 設の反磁性である。融解によって最も甚しく変るものは第一項であり, つぎに重要な項は第二項である。融解による第一項の変化分 $\Delta\chi_p$ はつぎで与えられる(簡単のため 0 °K の差をとる)。

$$\Delta\chi_p = \frac{2\mu_B [(D_f - D_s) - D_s D_f (T_s - T_f)]}{(1 - J_f D_f)(1 - J_s D_s)} \geq 0 \quad (5)$$

融点における $\Delta\chi_p(T_m)$ は $D_f(E)$ が(1)で与えられるものとする(5)よりも更に小さくなる(20%~50%減)。

$\Delta\chi_{orb}$ は融解によって結晶の対称性が乱れるものと考えたと $\Delta\chi_{orb} < 0$ の寄与を与える(液体において $\Delta\chi_{orb}$ は消失しないものと考えられる)。また $\Delta\chi_d^{band}$ の項は, 状態密度曲線が滑らかになることによって, S-電子的な振舞いが増し $\Delta\chi_d^{band} < 0$ を与える。 $|\Delta\chi_{so}|$ は小さい。 $\Delta\chi_d^{ion}$ は不変である。

以上の考察から実験データ⁽¹⁾を当ててみるとつぎの事柄が予測される。ここで $D_s(E)$ に対してはバンド計算の結果ならびに電子比熱の測定結果を参照した。

- (1) $\Delta\chi$ の主要な項は $\Delta\chi_p$ で, exchange enhancement の項が大きく利いていて特に fcc の J_s はそれほど変らない。 $(1 - D J)^{-1}$ は 5~8 程度の数値を与える。特に fcc $n=9\sim 10$ では D_f, J_f は大きい。
- (2) fcc $n=8\sim 7$ (Fe~Mn), bcc $n=8\sim 6$ (Fe-Cr) では $\Delta\chi_{orb}$ の項も重要になってくる。bcc の液体では J_f はあまり大きくない。
- (3) fcc $n=8$ (r-Fe や $Co_{0.5}Mn_{0.5}$) で $D_s(E)$ に深い谷があるものと推定される。bcc $n=6$ (Cr) の測定があれば ($D_s(E)$ に谷がある)。

$4x_{orb}$ の寄与がつきとめられるであろう。

- (4) 分布関数 $g(E)$ の拡がりは一可成り大きい。固体の一つの d -band の巾が液体では倍位に拡がるものと予想される。

なお詳細は検討中である。

参 考 文 献

- (1) 物性研短期研究会「液体金属の構造と物性の問題点研究会報告」p. 77
~84 昭和 45. 6. 17.
- (2) F. Cyrot-Lackmann, Adv. in Physics 16 ('67) 401
- (3) R. Kubo and Y. Obata, J. Phys. Soc. Japan 11 ('56) 547
- (4) K. Adachi et al. J. Phys. Soc. Japan 30 ('71) 1201