

20. NiAs 型遷移金属プニクタイトの電子帯構造 と磁性および構造相転移

森 藤 正 人

様々な性質を持つ一連の遷移金属プニクタイトの性質を電子状態をもとにして統一的に説明しようとの試みにより self-consistent APW 法を用いて FeAs, CoAs, NiAs のエネルギーバンド構造を求め、それをもとにこれら 3 つの物質の常磁性帯磁率と構造相転移について調べた。

NiAs の帯磁率はほとんど温度変化がなく Pauli para でうまく説明がつくのに対して、FeAs, CoAs では帯磁率は 200–300 (K) で幅広いピークを持ちピークより上では Curie-Weiss 則に従うという特異な温度変化を示す。また帯磁率の値も NiAs に比べて一桁近く大きい。求めた状態密度の特徴を取り入れてスピンのゆらぎの理論により FeAs, CoAs の帯磁率を計算したところ 300 (K) 付近に幅広いピークが得られた。これはゆらぎのモード間の coupling を取り入れたために得られた結果である。一方 NiAs ではゆらぎの効果がほとんど現れないのは、その状態密度の形の違いによるものであると考えられる。

CoAs は低温の MnP 型、高温の NiAs 型のふたつの結晶構造を持ち 1250 (K) で構造相転移を起こす。それに対して FeAs は MnP 型、NiAs は NiAs 型構造を全温度領域で取る。バンドより描いたフェルミ面を見ると CoAs は NiAs よりネスティングがよく、低温で MnP 型となりやすいことがわかった。また格子変形による電子系のエネルギーの変化をあらわす Bare electronic susceptibility をバンドから考察すると、NiAs が最も小さく従って最も MnP 型になりやすく、次いで CoAs, FeAs の順であろうと予測される。バンドから得られたこれらのことは実験事実に対応している。これは主に電子数の違いによるフェルミレベルの位置の変化によるものである。また電子格子相互作用についても現在計算中であり議論する予定である。