

18. 1T型遷移金属ダイカルコゲナイド層間化合物の電子状態 と磁氣的相互作用

手 嶋 達 也

層状物質 TiS_2 は、1T- CdI_2 型構造を持ち層間に様々な原子を取込むことが出来る。こうしてできた層間化合物 M_xTiS_2 (M: ゲスト原子) は M の種類、濃度 x により母体にはない様々な物性を示す。特に M が 3d 遷移金属の場合には多彩な磁性を示し、M の種類及び濃度の違いにより強磁性、反強磁性、スピングラス転移等が観測されている。

M の d 電子がよく局在しており、かつ x が小さいときには RKKY 相互作用が主要な磁氣的相互作用になると考えられるが、母体の現実的な電子帯構造に基づいた RKKY 相互作用の評価は、今までになされていない。

講演では

- (1) 母体 TiS_2 の実際の電子帯構造及び波動関数を用いて計算した、層間化合物 M_xTiS_2 における RKKY 相互作用
- (2) 層状物質の電子帯構造を求める計算方法の改良の試みについて報告する。

RKKY 相互作用の具体的計算は、以下に与えるモデル及び仮定に基づいて行なった。

- (1) s-d 交換相互作用は $J \delta(r-R) s(r) \cdot S(R)$ のように空間について δ -関数的である
- (2) M イオンは母体の電子帯構造を変化させず、単に母体に電子を供給して Fermi レベルを変化させるだけである (Rigid-Band Model)
- (3) 母体の電子帯構造は APW 法によって求めたものを用い、同時に求まる波動関数によって s-d 交換相互作用の行列要素を評価する

実際の数値計算はインターカラントの濃度 x が小さい場合、 $x=1/3$ で M が +2価の場合及び $x=1/4$ で +2価、+3価の場合について行なった。得られた RKKY 相互作用は強磁性的、反強磁性的な相互作用が繰返し振動する距離依存性を示す。 $x=1/3, 1/4$ のとき相互作用は $1/R^n$ で比較的緩やかに減衰し、 x が小さいときはより急激に減衰することが確かめられた。また、s-d 交換相互作用の行列要素の k (Bloch 状態の波数) 依存性を考慮した場合としない場合の両方について RKKY 相互作用を求め、その比較を行なった。その結果相互作用に対する行列要素の k 依存性の効果は大きく、それを考慮するのとしないのとでは相互作用の振動の様子が大きく違ってくる事が明らかにされた。

層状物質遷移金属ダイカルコゲナイドのように広い層間部分を持つ物質に対しては通常の APW 法によるバンド計算がはたしてどれだけ有効であるのか不明な点も多い。上のように電子帯構造に基づいた計算を行なうにあたっては、その点を明らかにする必要がある。そこで 1T- TiSe_2 に対して通常の APW 法でのバンド計算と、それを改良するため層間部分に Empty Sphere という仮想的原子を置いた計算を行ない、結果を比較検討した。