

本研究では $\text{MCl}_2\text{-GIC}$ の秩序化の詳細を機能的に明らかにする目的で、その動特性、とくに Mr の緩和過程とその温度依存性、零磁場冷却後に磁場誘起される磁化 (M_i) の緩和過程を系統的に調べることで Mr の記憶現象の新たな側面を観測し、スピンガラスとの現象的類似性をより詳しく検討することを試みた。

その結果、 Mr の緩和は Mr の温度でほぼ対数的時間変化を示すこと、その温度依存性をまとめると、 Mr が T の変数 T/T_c の関数として一定温度領域では一つの曲線上に乗ることが分った。このような関係は実は、SG 相の動特性を記述する目的で提案された二準位クラスター集合系 (TLS) モデルに基づいて導出され、 CuMn スピンガラスの実験結果を良く説明することが分っている。また M_i の緩和過程も同様である。ところで上記では T_c の近く ($\frac{2}{3}T_c < T < T_c$) では 10^{-35} sec 程度となり、素過程の時定数として短かすぎるという困難が生じた。しかし類似の事情が CuMn 等でも指摘されてきており、クラスター間相互作用を考慮に入れた別のアプローチが必要で、 T_c 以上の中間温度域での秩序相の説明とともに、今後の課題として残された。

Mn_3MC ($\text{M}=\text{Zn}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}$) の電子状態と磁性

永井秀康

Mn_3MC ($\text{M}=\text{Zn}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}$) はペロブスカイト型の磁性体である。これらには、構造相転移をともなった様々な磁気秩序があり、 Mn_3ZnC と Mn_3GaC の常磁性帯磁率は Curie-Weiss 則に従うが、 Mn_3InC と Mn_3SnC は Curie-Weiss 則からのずれを示す。そこで、これらの物質の磁性の解明を目的として、常磁性における電子状態を Self-consistent APW 法で計算した。

エネルギー分散と状態密度を計算した結果によれば、 Mn の 3d 軌道と C の 2p 軌道で作られるバンドは3つの部分からなっている。それらは低エネルギー側から順に、 Mn の 3d 軌道と C の 2p 軌道の混成バンド (bonding バンド)、ほとんど Mn の 3d 軌道からなる幅の広いバンド (non-bonding バンド)、 Mn の 3d 軌道と C の 2p 軌道の混成バンド (anti-bonding バンド) である。フェルミレベルは non-bonding バンドのほぼ中央にきている。また M の s バンドは bonding バンドの低エネルギー側にあり、 Mn_3ZnC , Mn_3GaC , Mn_3InC では bonding バンドとわずかに重なっているが、 Mn_3SnC で

は重なりはなく小さなギャップで隔たっている。さらにCの2sバンドは、Mのsバンドから0.3Rydほど下に位置している。Mのdバンドは物質で大きく異なり、 Mn_3ZnC ではZnの4sバンドと重なっていて0.05Rydほどの幅をもっているが、 Mn_3GaC と Mn_3InC ではCの2sバンドより約0.1Ryd低エネルギー側に、 Mn_3SnC のほうではさらに低エネルギー側に位置しており、それぞれエネルギー分散をほとんどもたない。

これら一連の物質のエネルギー分散と状態密度を比較すると、M原子の違いはフェルミレベル付近のバンドの形にあまり影響を及ぼさないが、価電子数の違いからフェルミレベルの位置を変化させ、フェルミ面の形を大きく変える。実際、フェルミ面の計算から価電子数が増えると電子面が大きくなりホール面が小さくなるという結果を得た。

さらに得られたバンドを用いて、常磁性帯磁率をスピンのゆらぎの理論に基づいて計算した。この計算にはクーロン相互作用Uがパラメーターとして含まれている。Uを変えて計算すると Mn_3ZnC と Mn_3GaC ではCurie-Weiss則に従う帯磁率を得られたが、 Mn_3SnC ではUが0.2Ryd付近でCurie-Weiss則からのずれを示した。

Mn_3GaC は低温で強磁性になる物質である。この強磁性相での電子状態もself-consistent APW法で計算した。upスピンバンドとdownスピンバンドの形は常磁性バンドとほとんど変わらず、とりわけMnの3dバンドがrigid band的にスプリットしている。フェルミレベルのかかっているnon-bondingバンドのスピンのスプリットは大きく、フェルミレベルから離れたバンドになるほどスプリットは小さくなっている。バンドから求めたMnの磁気モーメントは1.4 μ_B で、実験値の1.3 μ_B と良い対応が得られた。

高圧下におけるKDP及びDKDPの単結晶X線構造解析

知野 豊治

KH_2PO_4 (KDP) は、 $T_c = 123\text{K}$ の水素結合型強誘電体であり、水素を重水素で置換すると T_c が約1.7倍(223K)にもなる。KDPに圧力をかけてゆくと17 kbarで強誘電性を消失($T_c \rightarrow 0\text{K}$)する。重水素置換した KD_2PO_4 (DKDP) は、 dT_c/dP も大きく変化し、24 kbarにおいても強誘電性の消失は見いだされていない。相転移機構に関して、Slaterが統計理論を発表して以来、トンネル効果を含む水素(重水素)の秩序・無秩序転移で理解されて来たが、近年光散乱実験の精度向上に伴い、トンネル効果は疑問視され始め、相転移は PO_4 双極子の秩序・無秩序相転移である事が判ったが、相転移における水素の役割は未だにはっきりしない。

松下・松原の計算によれば、水素結合を有する酸素-酸素間のポテンシャルは、距離の減少と共に2極小から1極小に連続的に移行するが、水素