

17. Mn_3Pt の電子状態と磁気相図

谷 本 琢 磨

Mn_3Pt は、simple cubicのcornerにPt原子、面心の位置にMn原子が位置する、単位格子中に3つの磁性イオンであるMnが存在する磁性体である。

この物質は、2種類の反強磁性相を持ち、また、常磁性相での帯磁率は、ほとんど温度変化がないことが知られている。そこで、これらの性質を説明するために、常磁性での電子状態を、Self-consistent APW法で計算した。

その結果として得られたエネルギー分散と状態密度から、Mnの3d状態とPtの5d状態との間に強いmixingが認められた。このことから、Mn-Mn間に、Pt原子を仲介とした強いexchangeが期待できる。

このことをふまえ、Heisenberg model、分子場近似の範囲で、常磁性状態からの不安定性、絶対零度でのエネルギー、有限温度では自由エネルギーを計算し、磁気相図を書いた。その結果、実験でみられているような反強磁性-反強磁性相転移は十分説明しうることがわかった。また、exchangeの大きさを転移温度から決めると、温度変化の少ない帯磁率を得ることができ、その絶対値も実験と合うことがわかった。

同様な計算を、 Mn_3MC ($\text{M} = \text{Ga}, \text{Zn}$) についても行なった。

Mn_3MC は、 Mn_3Pt の体心の位置に炭素原子が存在している物質であり、そのバンド計算の結果から、Mnの3d状態とMのd状態の間にmixingがないことがわかっていて。このことは、 Mn_3Pt で考えたようなM原子を仲介としたexchangeは、あまり期待できないのに対し、C原子を仲介としたexchangeが期待される。また、強磁性相が観測されていることから、最隣接exchangeの符号は正でなければならない。

これらを入れた計算を行なうと、実験で観測されているような磁気相転移は説明しうる。

また、 Mn_4N の常磁性状態でのバンド計算も行なった。

その結果は、Mnのd状態とNのp状態の間にほとんどmixingは認められず、このことから、fccMnとよく似たバンドであることが期待される。実際、状態密度の形状、Mnのdバンド幅ともにfccMnのそれらとよい一致を示すことがわかった。

また、 Mn_4N において、フェルミレベルは状態密度のピーク近くに来ており、fccMnでは、状態密度の谷の位置に来ており、このことは、 Mn_4N では強磁性、fccMnでは反強磁性が出現するという実験結果とconsistentである。