



Title	Theoretical Study on Electronic Structures and Magnetic Properties of Hexagonal Y-Co Based Binary and Ternary Compounds
Author(s)	北川, 功
Citation	大阪大学, 1998, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/40845
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名	北川 功
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第13959号
学位授与年月日	平成10年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科物理系専攻
学位論文名	Theoretical Study on Electronic Structures and Magnetic Properties of Hexagonal Y-Co Based Binary and Ternary Compounds (六方晶Y-Co系2元及び3元化合物の電子状態と磁性に関する理論的研究)
論文審査委員	(主査) 教授 鈴木 直 (副査) 教授 那須 三郎 教授 吉田 博 助教授 白井 正文

論文内容の要旨

六方晶 CaCu_5 構造を基本とするY-Co系2元及び3元化合物の電子構造と磁性に関する第一原理バンド計算に基づいた研究を行い、次の成果を得た。

(1) $\text{Y}(\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x)_5$ の磁気モーメントのNi濃度依存性の起源解明

YCo_5 , YCo_3Ni_2 および YNi_5 の電子構造を原子球近似に基づく線形化マフィンティン法(LMTO-ASA法)で計算し、その磁気モーメントを体積の関数として求めた結果、ある臨界体積 V_0 以下で磁気モーメントが急激に減少することをみいだした。この臨界体積 V_0 はNi濃度が増加するにつれて増加するのに対し、観測されている体積 V_{obs} はNi濃度が増加するにつれて減少し、その結果Ni濃度が40%を超えた辺りで臨界体積以下になり、磁気モーメントが急激に減少することが明らかとなった。また、六方対称性をもつ3gサイト上のCo原子は2つの磁性状態、高スピンド状態と低スピンド状態を持つこともみいだした。

(2) YCo_5 と YCo_4B のスピンおよび軌道モーメントと結晶磁気異方性エネルギー

YCo_4B のCoとBの間の強いd-p混成の効果を調べるために、スピン軌道相互作用を取り込んだLMTO-ASA法を用いて YCo_5 と YCo_4B のスpinおよび軌道モーメントと結晶磁気異方性エネルギー(MAE)を計算し、次の結果を得た。

YCo_5 :二つのCoサイト、Co(2c)とCo(3g)の軌道モーメントはほぼ同じであり、軌道分極を取り入れた計算で得られた磁気モーメントとMAEは実験値とよい一致を示す。また、Co(2c)からのMAEへの寄与は正、Co(3g)からの寄与は負という結果を得たが、これはNMR測定の結果と一致している。

YCo_4B : YCo_5 と比べて、Co(2c)のスpinモーメントは増大し、Co(3g)に対応するCo(6i)のスpinモーメントは著しく減少したが、この結果は、d-p混成の影響による各バンドの重心の変化と各バンドの電子数の変化を考慮することにより説明される。計算されたMAEの符号は実験値と反対であり、この不一致はLMTO-ASA計算ではCo(2c)のスpinモーメントが過大評価されているためであることを明らかにした。

(3) YCo_5 と YCo_3B_2 におけるCoサイトの電場勾配

Co をB で置換する効果が YCo_5 の電子構造に与える影響を調べるために YCo_5 と YCo_3B_2 の電場勾配 (EFG) を計算した結果、 $\text{Co}(3g)$ でのEFG に大きな違いがあることが明らかとなった。すなわち、 YCo_5 においては $\text{Co}(3g)$ のEFG の主軸は c -面内を向いているのに対して、 YCo_3B_2 では c -軸に平行である。この違いの起源はB 置換によって生じた電荷分布のずれが強く $\text{Co}(3g)$ 周りの c -面内に集まつたことである。

論文審査の結果の要旨

本論文では、磁性材料として応用的にも注目されているY-Co系化合物の電子状態と磁性に関する理論的研究を行い、その結果をまとめたものである。研究内容は、 $\text{Y}(\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x)_5$ におけるNiの置換効果、 YCo_5 と YCo_3B の結晶磁気異方性エネルギーの第一原理計算、 YCo_5 と YCo_3B_2 におけるCo サイトの電場勾配計算の3項目にわたっており、それぞれの項目について次に挙げる重要な成果を得ている。

YCo_5 、 YCo_3Ni_2 および YNi_5 の磁気モーメントを第一原理的に体積の関数として計算し、ある臨界体積 V_0 以下で磁気モーメントが急激に減少することを初めてみいだした。また、この臨界体積 V_0 はNi濃度が増加するにつれて増加するのに対して、観測されている体積 V_{obs} はNi濃度が増加するにつれて減少する結果Ni濃度が40%を越えた辺りで臨界体積以下になり、磁気モーメントが急激に減少することを示した。この結果は、観測されている磁気モーメントのNi濃度依存性をよく説明する。

軌道分極の効果も考慮したスピン軌道相互作用を含む第一原理電子状態計算のプログラムを開発して、 YCo_5 と YCo_3B のスピンおよび軌道モーメント並びに結晶磁気異方性エネルギー(MAE) を計算した。まず、 YCo_5 では、計算で得られた全磁気モーメントとMAE は実験値とよい一致を示す。次に、 YCo_3B では、 YCo_5 と比べて、 $\text{Co}(2c)$ のスピンモーメントは増大し、 $\text{Co}(3g)$ に対応する $\text{Co}(6i)$ のスピンモーメントは著しく減少したが、この結果は、 $\text{Co } d$ 軌道とB p 軌道の混成によつてもたらされることを示した。なお、計算されたMAE の符号は実験値と反対であるが、この不一致は $\text{Co}(2c)$ のスpinモーメントが過大評価されたためであることを明らかにした。

YCo_5 と YCo_3B_2 の電場勾配 (EFG) を第一原理的に計算し、 YCo_5 では $\text{Co}(3g)$ のEFG の主軸が c -面内を向いているのに対し、 YCo_3B_2 では c -軸に平行である結果を得た。また、この両者の違いはB 置換によって生じた電荷分布のずれが強く $\text{Co}(3g)$ 周りの c -面内に集まつたことによるものであることを明らかにした。

以上のように本研究は、最近応用的にも注目されているY-Co系2元及び3元化合物の電子状態と磁性に関し、第一原理電子状態の計算に基づいて重要な知見を得ており、物性物理学の発展に寄与するところが大きい。よつて本論文は博士（理学）の学位論文として価値あるものと認める。