



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	<a href="https://hdl.handle.net/11094/40845">https://hdl.handle.net/11094/40845</a>
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、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">＜a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"&gt;https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed</a> >大阪大学の博士論文について</a>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 1 3 9 5 9 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<sub>5</sub>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) Y(Co<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>)<sub>5</sub> の磁気モーメントのNi濃度依存性の起源解明

YCo<sub>5</sub>, YCo<sub>3</sub>Ni<sub>2</sub>およびYNi<sub>5</sub>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し、その結果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、高スピン状態と低スピン状態を持つこともみいだした。

#### (2) YCo<sub>5</sub> と YCo<sub>4</sub>B 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<sub>4</sub>B 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<sub>5</sub> と YCo<sub>4</sub>B 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 (MAE) を計算し、次の結果を得た。

YCo<sub>5</sub> : 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<sub>4</sub>B: YCo<sub>5</sub> と比べて、Co(2c) のスピンモーメントは増大し、Co(3g) に対応する 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、*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) のスピン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<sub>5</sub> と YCo<sub>3</sub>B<sub>2</sub> 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<sub>5</sub>の電子構造に与える影響を調べるためにYCo<sub>5</sub>とYCo<sub>3</sub>B<sub>2</sub>の電場勾配(EFG)を計算した結果、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<sub>5</sub>においてはCo(3g)のEFGの主軸はc-面内を向いているのに対して、YCo<sub>3</sub>B<sub>2</sub>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Co(3g)周りのc-面内に集まったことである。

## 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、Y(Co<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>)<sub>5</sub>におけるNiの置換効果、YCo<sub>5</sub>とYCo<sub>4</sub>Bの結晶磁気異方性エネルギーの第一原理計算、YCo<sub>5</sub>とYCo<sub>3</sub>B<sub>2</sub>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<sub>5</sub>、YCo<sub>3</sub>Ni<sub>2</sub>およびYNi<sub>5</sub>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<sub>5</sub>とYCo<sub>4</sub>B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<sub>5</sub>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<sub>4</sub>Bでは、YCo<sub>5</sub>と比べて、Co(2c)のスピンモーメントは増大し、Co(3g)に対応する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、Co d軌道とB p軌道の混成によっ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Co(2c)のスピン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<sub>5</sub>とYCo<sub>3</sub>B<sub>2</sub>の電場勾配(EFG)を第一原理的に計算し、YCo<sub>5</sub>ではCo(3g)のEFGの主軸がc-面内を向いているのに対し、YCo<sub>3</sub>B<sub>2</sub>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Co(3g)周りのc-面内に集まっ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多い。よって本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。