
修士論文 (1998年度)

NiAs 型遷移金属化合物の電子状態と物性

岡山理科大学大学院 理学研究科

応用物理学専攻 量子物理研究室 川上 卓也

目次

§ 1. はじめに

§ 2. 結晶構造

§ 3. CrTe、CrSe、CrS の電子状態と圧力効果

3.1 CrTe の電子状態と圧力効果

3.1.1 分散曲線と状態密度

3.1.2 全エネルギー

3.1.3 磁気モーメントと圧力効果

3.2 CrSe、CrS の電子状態と圧力効果

§ 4. NiAs の電子状態とフェルミ面及び de Haas-van Alphen 効果

4.1 バンド計算

4.2 NiAs の分散曲線と状態密度

4.3 フェルミ面と dHvA 振動、サイクロトロン質量

§ 5. まとめ

参考文献、論文リスト

謝辞

§ 1.はじめに

3d 遷移金属元素と VI 族の S、Se、Te あるいは V 族の As、Sb から作られる 1 対 1 の化合物 (MX) の多くは高温で NiAs 型結晶構造をとる。種々の M と X の組み合わせの違いにより、各物質が示す強磁性、反強磁性、非磁性などの多彩な磁気配列と、Mn、Co、Fe-アルセナイドの常磁性帯磁率の温度変化にみられる異常な振舞いに古くから関心をもたれてきた。従来は、これらの物質の磁性は局在スピンモデルに基づいた分子場理論で議論されてきた。しかし望月等¹⁾は、これらの物質の磁性に重要な役割を担う d 電子を電子相関のかなり強い遍歴電子として捉えなければならないと考え、特に NiAs 型プニクタイトをとりあげ、一連の化合物の電子状態を APW(augmented plane wave)法による第一原理バンド計算によって求めた。さらに、異なる磁気配列、常磁性帯磁率の温度変化の異常、NiAs 型から MnP 型への構造変化の起因が、物質によって異なる電子帯構造の特徴を考慮した理論によって説明できることを明らかにした。有限温度の扱いではスピンのゆらぎの効果の重要性も取り入れられている。さらに NiAs についてはバンド計算の結果から Λ 軸の周りに cylindrical なタイプの二つのホール面と、やや複雑な一つの電子面の存在を予想している²⁾。また、C.Haas³⁾のグループでも NiAs 型化合物のバンド計算を ASW(augmented spherical wave)法を用いて行い、とりわけ Cr カルコゲナイドについてバンド計算に基づいた磁性と輸送現象の研究が行われた。

Cr-カルコゲナイドの磁性に関する実験的研究は金子等⁴⁾のグループによって精力的に進められてきた。CrTe、CrSe、CrS の中では CrTe だけが唯一強磁性体でそのキュリー温度は $T_C=343\text{K}$ である。CrSe、CrS は $T_N=320\text{K}$ 、 500K の反強磁性体であると報告されている。最近、磁性体の圧力効果に関する実験が盛んになってきたが、鹿又等⁵⁾は CrTe に圧力をかけることにより T_C の減少と磁気モーメントの急激な減少を見出した。また、旧ソ連の V.A.Shanditsev 等⁶⁾は ESR の線幅の変化から 28kbar の圧力下で強磁性が消滅して他の磁気構造が実現しているのではないかと指摘している。我々は圧力効果の実験に刺激されて以前に LAPW(linearized APW)法を用いたバンド計算を行い、格子定数の変化によるバンド構造の違いから圧力効果を議論して、CrTe では圧力誘起強磁性→反強磁性転移の可能性のあることを指摘した⁷⁾。最近、大阪大学の石塚等の測定によって CrTe は 16GPa の圧力下で磁化が消失していることが観測された⁸⁾。一方、NiAs は NiAs 型遷移金属化合物の中で低温まで磁性を示さない唯一の物質である。NiAs の電子状態に関する測定は J.W.Allen 等⁹⁾が光電子分光法の測定で Ni-3d のスペクトルを観測している。そして近年東北大学上村グループの野末氏により良質の単結晶を用いて de Haas-van Alphen (dHvA) 効果の測定¹⁰⁾が行われ、外部磁場の方向の関数として多くのブランチの dHvA 振動が観測された。

本研究では self-consistent full potential LAPW(以下 FLAPW という)法を用いて CrTe、CrSe、CrS のバンド構造を非磁性、強磁性、反強磁性状態のそれぞれに対して行い、圧力効果を調べた。格子定数を変化させて、それぞれの格子定数のもとでバンド計算を行うことで圧力効果を考慮した。また NiAs は非磁性状態のバンド計算を行い、その結果を

もちいてフェルミ面を描いた。さらにそのフェルミ面から予測される dHvA 振動の角度依存性を計算して測定結果との比較を行った。

§ 2. 結晶構造

NiAs 型遷移金属化合物の結晶構造を図 1 に示す。三角格子を作る遷移金属元素の層の間に三角格子を作るカルコゲンやプニコゲン元素(X)の層が入りこんでいて、それらの層は c 軸方向に ABCABC... と積み重なっている。単位胞には Cr 元素が 2 個(1,2)、X 元素が 2 個(3,4)が含まれる。空間群は D_{6h}^4 (又は $P6_3/mmc$)である。格子定数を以下に示す。

CrTe: $a=3.981\text{\AA}$	$c=6.211\text{\AA}$	$c/a=1.56$
CrSe: $a=3.684\text{\AA}$	$c=6.019\text{\AA}$	$c/a=1.63$
CrS: $a=3.348\text{\AA}$	$c=5.590\text{\AA}$	$c/a=1.67$
NiAs: $a=3.60\text{\AA}$	$c=5.01\text{\AA}$	$c/a=1.39$

§ 3. CrTe, CrSe, CrS の電子状態と圧力効果

バンド計算

バンド計算は FLAPW 法を用いて行う。交換項と相関項に対しては局所密度汎関数近似(LDA)を用い、O.Gunnarsson と B.I.Lundqvist¹¹⁾により定式化されたものを用いる。軌道量子数は $l_{\max}=7$ までとり、逆格子ベクトル $\mathbf{G}$ は $|\mathbf{k}+\mathbf{G}|_{\max}=(2\pi/a)\times 3.199$ までとった ($\mathbf{k}$ はブリルアンゾーンの波数ベクトル)。以上のパラメーターのもとでは補強する平面波の数は約 300 となる。

出発点の電子配置としては以下に示すものをとった。

非磁性 $\text{Cr}(3d)^5(4s)^1 \text{Te}(5s)^2(5p)^4$			
$\text{Se}(4s)^2(4p)^4$			
$\text{S}(3s)^2(3p)^4$			
強磁性	$\text{Cr}_{\uparrow}(3d)^{3.8}(4s)^{0.5}$	$\text{Te}_{\uparrow}(5s)^1(5p)^2$	
	$\text{Cr}_{\downarrow}(3d)^{1.2}(4s)^{0.5}$	$\text{Te}_{\downarrow}(5s)^1(5p)^2$	
		$\text{Se}_{\uparrow}(4s)^1(4p)^2$	
		$\text{Se}_{\downarrow}(4s)^1(4p)^2$	
		$\text{S}_{\uparrow}(3s)^1(3p)^2$	
		$\text{S}_{\downarrow}(3s)^1(3p)^2$	
反強磁性	$\text{Cr}(1)_{\uparrow}(3d)^{3.8}(4s)^{0.5}$	$\text{Cr}(2)_{\uparrow}(3d)^{1.2}(4s)^{0.5}$	$\text{Te}_{\uparrow}(5s)^{1.0}(5p)^{2.0}$
	$\text{Cr}(1)_{\downarrow}(3d)^{1.2}(4s)^{0.5}$	$\text{Cr}(2)_{\downarrow}(3d)^{3.8}(4s)^{0.5}$	$\text{Te}_{\downarrow}(5s)^{1.0}(5p)^{2.0}$
			$\text{Se}_{\uparrow}(4s)^{1.0}(4p)^{2.0}$
			$\text{Se}_{\downarrow}(4s)^{1.0}(4p)^{2.0}$
			$\text{S}_{\uparrow}(3s)^{1.0}(3p)^{2.0}$
			$\text{S}_{\downarrow}(3s)^{1.0}(3p)^{2.0}$

川上 卓也

Muffin-Tin 半径は

$$\text{CrTe: } r_{\text{Cr}}=0.328a, r_{\text{Te}}=0.362a$$

$$\text{CrSe: } r_{\text{Cr}}=0.341a, r_{\text{Te}}=0.349a$$

$$\text{CrS: } r_{\text{Cr}}=0.34a, r_{\text{S}}=0.34a$$

計算の精度は 10^{-4}Ryd である。

各物質に対し、非磁性(N)、強磁性(F)、反強磁性(AF)状態のバンド計算を格子定数 a を変化させて行う。ただし、 c/a は一定としその値には測定値を用いた。バンド計算の結果から、それぞれの状態での全エネルギーを格子定数 a の関数として求めれば、どの状態が最もエネルギー的に安定であるかを議論することができる。なお、反強磁性状態としては、 c 面内ではモーメントが平行で、となり合う c 面間でモーメントが反平行という構造を仮定した。

3.1 CrTe の電子状態と圧力効果

3.1.1 分散曲線と状態密度

CrTe の非磁性状態に対するバンドの分散曲線と状態密度を図 2(a)、(b)に示す。格子定数としては次の値を用いた。 $a=3.981\text{\AA}$ 、 $c/a=1.56$ (いずれも測定値。ただし、この値は 3.2 で示すように強磁性状態で a の平衡値 $a_0=3.981\text{\AA}$ に非常に近い)。分散曲線はエネルギーの低い方から Te の s バンド、gap を隔てて Te の $5p$ と Cr の $3d$ の混成バンドである。この混成バンドは 2(b)図から分るように 3 つの部分に分れているとみることができる。即ち、低エネルギー側($0.0\text{Ryd}\sim 0.25\text{Ryd}$)の p - d bonding band、高エネルギー側($0.53\text{Ryd}\sim 0.64\text{Ryd}$)の antibonding band、中間領域($0.25\text{Ryd}\sim 0.53\text{Ryd}$)の主として Cr の d 軌道からなる non-bonding band である。フェルミ・レベルは non-bonding band の peak の辺りに位置していて、 $\rho(E_F)=107.9(\text{states/Ryd. unit cell. spin})$ である。この値は CrSe、CrS の $\rho(E_F)$ に比べて大きく、このことは CrTe が強磁性になりやすいことを示している。図 2(a)の分散曲線で、 Γ 点における波動関数の性質を下から順に示すと次のようになる。

1 番目	Te-5s	(Γ_1^+)
2 番目	Te-5s	(Γ_4)
3 番目	Te-5 p_z	(Γ_3^+)
4 番目	Cr-3d、Te-5 p の面内での bonding state	(Γ_5^+)
5 番目	Cr-3 $d_{3z^2-r^2}$	(Γ_1^+)
6 番目	c 面内に広がりを持つ Cr-3d 軌道	(Γ_5^+)
7 番目	c 面内に広がりを持つ Te-5 p 軌道	(Γ_6)
8 番目	c 面内に広がりを持つ Cr-3d 軌道	(Γ_6^+)
9 番目	Te-5 p_z	(Γ_2)
10 番目	c 面内に広がりを持つ Cr-3d 軌道	(Γ_6^+)

- | | | |
|-------|---------------------------------------|------------------|
| 11 番目 | Cr-3d _{3z2-r2} | (Γ_3^+) |
| 12 番目 | Cr-3d, Te-5p の面内での anti-bonding state | (Γ_5^+) |
| 13 番目 | Te-s | (Γ_4) |
| 14 番目 | Cr-s, Te-s | (Γ_1^+) |

縮退度は、 Γ_1^+ 、 Γ_2^+ 、 Γ_3^+ 、 Γ_4 が一重縮退、 Γ_5^+ 、 Γ_6^+ 、 Γ_6 が二重縮退となっている。

強磁性状態の状態密度を図3に示す。図2(b)との比較から明らかなように、強磁性状態のバンドは非磁性状態のスピンの縮退したバンドの単なる rigid な分裂では記述できない。部分状態密度に示されたように、Crのdバンドが大きな exchange splittingを示し、Teのp,s-バンドの exchange splittingは僅かである。磁気モーメントは主としてCr-siteから生じ、Te-siteにはCrのモーメントと逆向きに僅かなモーメントが誘起されている。

Cr-3d up-spin のピーク位置はフェルミ・レベル以下 1.3eV にあり、光電子分光の測定では $\sim 1\text{eV}$ と報告されている¹²⁾。したがってピークの位置は良く一致している。しかし計算によるモーメントが測定値のものよりも大きくなっている。

3.1.2 全エネルギー

第4図にF、AF、N状態の全エネルギーの計算結果を示す。この図から明らかなように、3つの状態の中で強磁性状態が格子定数 a の広い範囲にわたって最も安定であることが分る。F状態での最小エネルギーを与える a の値は $a_0=3.97\text{\AA}$ で、これがCrTeの低温における格子定数の実測値 $a=3.981\text{\AA}$ と非常に良い一致を示している。今回の計算結果は、以前のLAPW法によるバンド計算⁷⁾で得られた $a_0=4.181\text{\AA}$ と比べると、かなり改善されている。F状態とAF状態のエネルギー差は a が a_0 より小さくなるにつれ次第に減少して、 $a\sim 3.581\text{\AA}$ で両エネルギー曲線は交差し、 $a<3.581\text{\AA}$ ではAF状態の方がF状態より僅かにエネルギーが低くなっている。このことから、CrTeでは a の減少(体積の減少)に伴って強磁性状態から反強磁性状態に転移することが期待される。即ち、圧力誘起磁気相転移の可能性がある。

強磁性状態のエネルギー曲線は格子定数 a の関数として次のような四次の多項式でフィットできる： $E=E_0+a_2(a-a_0)^2+a_3(a-a_0)^3+a_4(a-a_0)^4$ 、ここで $a_0=3.97$ 、 $E_0=-31357.17$ 、 $a_2=0.471$ 、 $a_3=-0.575$ 、 $a_4=1.686$ である。Electronic pressure P は体積を V とすると $P=-\partial E/\partial V=-0.247a^{-2}\partial E/\partial a$ の関係から a の関数として見積もることができる。 P と a の関係を第5図の挿入図に示す。この結果から強磁性から反強磁性への転移をおこす P は約 40GPa と見積もられる。

3.1.3 磁気モーメントの圧力効果

バンド計算から得られた強磁性状態の磁気モーメントを格子定数 a の関数として図5に示す。全磁気モーメント、Cr-siteのモーメント、Te-siteのモーメントがそれぞれ示されている。磁気モーメントは主としてCr-siteから生じているが、Te-siteにも僅かなモーメ

ントが Cr のものと逆向きに誘起されていて、これは Cr の $3d$ 軌道と Te の p 軌道間の混成によるものである。図に示されたように、磁気モーメントの大きさは a の減少即ち圧力の増加と共に急激に減少している。 $a=a_0$ でのモーメントの値は $3.16 \mu_B$ で、実測値の飽和値 $2.5 \mu_B$ ¹²⁾ より少し大きめであるが、LAPW 法で得られた磁気モーメント $3.59 \mu_B$ に比べてかなり実測値に近くなっている。

Bulk Modulus は $B=-dP/d\ln V$ で定義され、compressibility κ は $\kappa=1/B$ 、magnetic moment の reduction rate は $k_M=-\partial \ln M/\partial P$ で定義される。これらの諸量は計算により $B=405.4 \text{ kbar}$ 、 $\kappa=2.43 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$ 、 $k_M=-4.21 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$ と得られた。鹿又等の測定¹³⁾では $k_M=-12 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$ である。

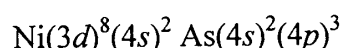
3.2 CrSe、CrS の電子状態と圧力効果

CrSe、CrS についても非磁性状態、強磁性状態、反強磁性状態に対するバンド計算を格子定数 a を変えて行った。各状態に対する全エネルギーを格子定数 a の関数として示したものが図 6(a)、図 7(a)である。図 6(b)、図 7(b)にバンド計算から得られた磁気モーメントを格子定数 a の関数として示す。CrSe では反強磁性状態における平衡の格子定数は $a_0=3.584 \text{ \AA}$ で、三つの状態の中で反強磁性状態が最低のエネルギーを示す。従って CrSe は CrTe と異なって反強磁性状態が最も安定で、このことは実験結果³⁾と一致している。 $a < a_0$ に対しても常に反強磁性状態のエネルギーが他の状態のエネルギーより低く、圧力誘起相転移はおこらない。しかし、 a を a_0 より増加させると強磁性状態の方が反強磁性状態より安定になることを示している。CrS も CrSe と同様の傾向を示している。CrSe、CrS では格子定数が平衡値 a_0 より大きく反強磁性状態の方がエネルギーが低くなっている。このことは負の圧力により反強磁性から強磁性へうつる可能性を示していると思われる。

§ 4. NiAs の電子状態とフェルミ面及び de Haas-van Alphen 効果

4.1 バンド計算

バンド計算の手法は § 3 と同様の FLAPW 法で行った。軌道量子数は $l_{\max}=7$ までとり、逆格子ベクトル $\mathbf{G}$ は $|\mathbf{k}+\mathbf{G}|_{\max}=(2\pi/a)\times 3.268$ までとった ($\mathbf{k}$ はブリルアンゾーンの波数ベクトル)。以上のパラメーターのもとでは補強する平面波の数は約 300 となる。出発点の電子配置としては以下に示すものをとった。



非磁性状態のバンド計算を格子定数 a を変化させて行い格子定数 a の関数としてトータルエネルギーのプロットを図 8 に示す。ただし c/a は測定値に固定している。トータルエネルギーが最少となる a は $a=3.60 \text{ \AA}$ で測定結果の格子定数と大変良く一致している。そこで、以下はこの格子定数での計算結果をしめす。

4.2 NiAs の分散曲線と状態密度

NiAs の非磁性状態の分散曲線と状態密度を図 9(a)、9(b)に示す。分散曲線はエネルギーの低い方から As の s バンド、gap を隔てて As の $4p$ と Ni の $3d$ の混成バンドである。分散曲線で Γ 点における波動関数の性質を示すと次のようになっている。

1 番目	As-4s	(Γ_1^+)
2 番目	As-4s	(Γ_4^-)
3 番目	As-4 p_z	(Γ_3^+)
4 番目	Ni-3d, As-4 p の bonding band	(Γ_5^+)
5 番目	Ni-3 $d_{3z^2-r^2}$	(Γ_1^+)
6 番目	Ni-3d	(Γ_5^+)
7 番目	Ni-3d	(Γ_6^+)
8 番目	Ni-3d	(Γ_6^+)
9 番目	Ni-3 $d_{3z^2-r^2}$	(Γ_3^+)
10 番目	As-4 $p_{x,y}$	(Γ_6^-)
11 番目	Ni-3d, As-4 p の antibonding band	(Γ_5^+)
12 番目	As-4 p_z	(Γ_2^-)
13 番目	As-4s	(Γ_1^+)

p - d 混成バンドは図 9(b)から分かるように 3 つの部分から成っている。低エネルギー側 (0.07~0.38Ryd) の p - d bonding band、高エネルギー側 (0.65~0.85Ryd) の p - d antibonding band、中間領域 (0.38~0.65Ryd) の主として Ni の d 軌道からなる non-bonding band である。フェルミ・レベルは Ni- d のピークを越えた所に位置していて、フェルミ・レベルでの状態密度は $\rho(E_F)=14.45(\text{states/Ryd.unit cell.spin})$ である。この値は非磁性状態の CrTe のそれに比べてかなり小さい。したがって、NiAs は磁性秩序を示しにくいことを示唆している。野末等¹⁰⁾の行った電子比熱係数 γ 及び帯磁率の測定結果から見積もった状態密度はそれぞれ 17.27(states/Ryd.unit cell.spin)、22.29(states/Ryd.unit cell. spin) である。これらの値はバンド計算から得られたフェルミ・レベルでの状態密度より若干大きくなっている。この違いは電子-格子相互作用や電子-電子相互作用の効果によるものと考えられる。Ni- d の部分状態密度からフェルミ・レベル以下 2eV の所のピークがあり、6eV の所まで裾を引いていることがわかる。この様子は J.W.Allen 等⁹⁾が行った光電子分光の測定と大変良く対応している。

4.3 フェルミ面と dHvA 振動、サイクロトロン質量

バンド計算の結果からフェルミ面を計算した。NiAs のフェルミ面は 14 番目のバンドと 15 番目のバンドが構成する二つのホール面と、16 番目のバンドが構成する電子面の

川上 卓也

計三つのフェルミ面から成っている。それぞれのフェルミ面を図 10(a)、10(b)、10(c)に示す。また磁場を c^* から c^*b^* 、 b^*a^* 、 a^*c^* の各面内で回転させていったときの、極値断面積に対応する dHvA 振動をプロットしたものを図 11(a)、11(b)、11(c)に示す。14 番目のバンドが作るホール面は c^* 軸の周りに cylindrical な形をしている。磁場 $\vec{H}$ が c^* 軸 (ΓA 方向) と平行な場合は極値断面積として a_1, a_2 が存在する。 $\vec{H}$ を c^*b^* 面内で b^* 軸 (ΓK 方向) の方向に回転させていくと a_1 の断面積は大きくなり、 a_2 のそれは小さくなっていく。そして c^* 軸と $\vec{H}$ のなす角度が 52° のところで a_1, a_2 の断面積が等しくなり一つのブランチ a に縮退する。図 11(a)の dHvA 振動数は左右対照になっており、cylindrical なフェルミ面の対称性を反映している。15 番目のバンドが作るホール面は、 $\vec{H}$ を c^* の方向から b^* の方向へ回転させていくと b' の断面積は増加する。 $\vec{H}$ が c^*b^* 面内を向いているときは b_2, b_3 の断面積は等しく一つのブランチ $b_{2,3}$ に縮退している。 $\vec{H}$ が b^*a^* 面内にあるときは b_1, b_2, b_3 の断面積はそれぞれ異なり三つのブランチに分れる。そして $\vec{H}$ が a^* 軸方向を向いている場合は b_1, b_3 の断面積が等しくなりブランチ $b_{1,3}$ に縮退する。このようなブランチの分離や縮退は結晶の対称性によるものである。16 番目のバンドが作る電子面、及びそれから期待されるブランチの分離や縮退についても結晶の対称性から考察できる。

バンド計算から得られた dHvA 振動の角度依存を野末等¹⁰⁾が測定した dHvA の結果(図 12)と比較すると、まず b' と μ 、 b_1, b_2, b_3 が δ, β と良く対応している。そして、 c_1, c_2, c_3 と $\lambda, \phi, \varepsilon$ が大変良く一致している。高い振動数領域のブランチに関して計算結果と測定結果は良く一致している。しかし低振動数の α ブランチは計算では得られなかった。このことは精密な X-線回折¹⁰⁾で測定されている微少な格子ずれによるものと考えられる。

計算から得られたサイクロトロン質量と実験¹⁰⁾によるものを比較したものを表 I に示す。実験結果は計算値よりも大きくでている。この違いは電子-格子相互作用、電子-電子相互作用によって enhance されていると考えられる。

実験 (m^*/m_0)	計算 (m^*/m_0)
α 0.49 (65°)	
ε 0.91 (77.5° , 1480T)	0.53 (77.5°) (c_2) 0.8 (77.5°) ($c_{1,3}$)
ϕ 1.2 (0°) 1.3 (65°)	0.67 (0°) 1.13 (65°) ($c_{1,3}$)
μ 1.2 (0°)	0.64 (0°) (b')
γ 1.3 (65°)	

表 I. サイクロトロン質量

§ 5. まとめ

本研究では NiAs 型遷移金属化合物のうちクロムカルコゲナイド、及び NiAs の電子状態について研究を行った。クロムカルコゲナイドの非磁性、強磁性、反強磁性状態の各状態に対して格子定数 a を変化させて、それぞれの a で FLAPW 法を用いてバンド計算を行った。その結果、CrTe でエネルギーの最小を与える状態は強磁性状態で、 $a=3.97\text{\AA}$ と得られた。この値は、格子定数の測定値 $a=3.981\text{\AA}$ と大変良く一致している。さらに、格子定数を小さくしてゆくと強磁性と反強磁性のエネルギー曲線が交差する。このことから圧力誘起磁気相転移が期待され、その転移圧力は $\sim 40\text{GPa}$ と見積もられた。CrSe、CrS は共にエネルギー最小を与える状態は反強磁性状態であり、格子定数を小さくしてもエネルギー曲線の交差は起こらない。したがってこれらの物質では圧力誘起磁気相転移は期待できない。

NiAs については非磁性状態を格子定数 a を変化させて、それぞれの a で FLAPW 法でバンド計算を行った。NiAs のエネルギーの最少を与える a は $3.60\text{\AA}$ と得られた。この値は測定による格子定数 $3.61\text{\AA}$ と大変良く一致した。Ni-3d の部分状態密度と光電子分光の測定結果の間には、フェルミ・レベル以下 2eV にピークがあり、 6eV のあたりまで裾を引いているなどの対応が見られる。また三種類のフェルミ面を描き、それぞれのフェルミ面から予想される dHvA 振動数を計算した。それを dHvA 効果の測定結果と比較したところ、高振動数領域では良い一致がみられた。

参考文献

- [1] K.Motizuki: J. Magn. Magn. Matter. **70**(1987)1.
- [2] M.Morifuji, K.Motizuki: J.Phys.Soc.Jpn. **57**(1988)3411.
- [3] J.Dijkstra, H.H.Weiering, C.F. van Bruggen, C.Haas and R.A. de Groot: J. Phys. Condens. Matter **1**(1989)9141.
- [4] T.Kaneko et al.: private communication.
- [5] S.Ohta, T.Kanomata, T.Kaneko and H.Yoshida: J.Phys.C. **5**(1993)2759.
- [6] V.A.Shanditsev, L.F.Vereshchagin, E.N.Yakovlev, N.P.Grazhdankina and T.I.Alaeva: Sov. Phys.-SolidState **15**(1973)146.
- [7] M.Takagaki, T.Kawakami, N.Tanaka and K.Motizuki: J. Phys. Soc. Jpn. **67**(1998)1014.
- [8] 加藤 博秋、石塚 守、遠藤 将一、鹿又 武: 日本物理学会 1998 秋の分科会、27a-YS-10.
- [9] W.P.Ellis, R.C.Albers, J.W.Allen, Y.Laissailly, and J.-S. Kang: Solid State Commun. **62**(1987)591.
- [10] 野末 竜弘、物性研究、811(1997-9)
- [11] O.Gunnarsson, B.I.Lundqvist: Phys. Rev. B **13**(1976)4274.
- [12] K.Shimada, T.Saitoh, H.Namatame, and A.Fujimori: Phys.Rev.B **53**(1996)7673.
- [13] 鹿又 武、私信
- [14] 中山 正敏、「ランダウ準位」固体物理 **4**No.6(1969)335.

川上 卓也

[15] C.Kittel 著、固体物理学入門 (上) (第 6 版)

[16] R.B.Diggle: Proc. Roy. Soc. **A211**(1952)500.

論文リスト

[1] Magnetic anisotropy energy of antiferromagnetic Bi_2CuO_4 .

N.Tanaka, Y.Hirota, T.Kawakami, K.Motizuki: J. Magn. Magn. Matter. 177-181(1998)1387.

[2] Pressure effect on electronic band structure of NiAs-type chromium chalcogenides.

M.Takagaki, T.Kawakami, M.Shirai, K.Motizuki:

J.Magn. Magn. Matter. 177-181(1998)1385.

[3] Pressure Effect on Electronic Band Structure of NiAs-type CrTe.

M.Takagaki, T.Kawakami, N.Tanaka, M.Shirai, K.Motizuki: J.Phys.Soc.Jpn. 67(1998)1014.

[4] Pressure effect on electronic band structure of NiAs-type CrTe, CrSe and CrS.

T.Kawakami, N.Tanaka, K.Motizuki: to be published in J. Magn. Magn. Matter.

[5] NiAs 型 Cr-カルコゲナイドの電子状態と圧力効果

川上 卓也、田中 憲和、望月 和子: 岡山理科大学紀要 近刊。

[6] de Haas-van Alphen Effect and Electronic Band Structure of NiAs.

T.Nozone, H.Kobayashi, T.Kamimura, T.Kawakami, H.Harima, K.Motizuki:

to be published in J. Phys. Soc. Jpn.

謝辞

本研究を行うにあたり、大変多くの方々に御協力をいただきました。

望月和子教授には研究生活全般にわたり熱心な御指導を頂きました。また様々な経験をさせていただき、大変充実した研究生活を送ることができました。感謝申し上げます。

大阪大学の白井正文助教授、播磨尚朝助教授、松下電器産業の鈴木政勝博士ならびに電子技術総合研究所の川本徹博士にはバンド計算等の技術的な御指導、御協力を頂きました。感謝いたします。

東北学院大学の鹿又武教授、大阪大学の石塚守博士、東北大学の上村孝教授には貴重な実験結果を頂きました。感謝いたします。

田中憲和氏には物理についてのことにとどまらず、その他いろいろなアドバイスをいただきました。ありがとうございました。

最後に学生生活を終えるにあたり、今まで辛抱強く見守ってくれた両親に感謝いたします。

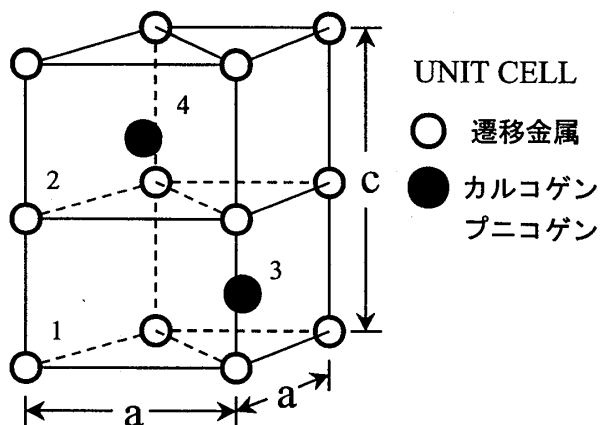


図1 NiAs型結晶構造

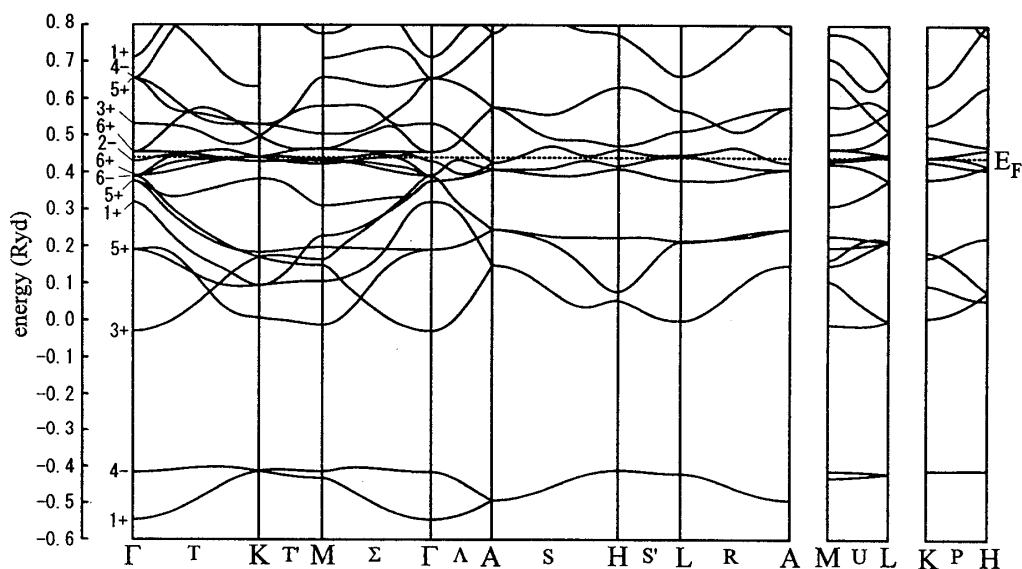


図2(a) 非磁性状態CrTeの分散曲線

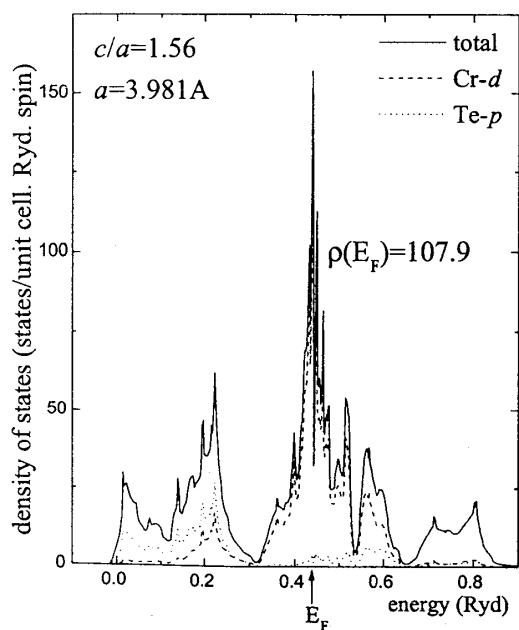


図2(b) 非磁性状態CrTeの状態密度

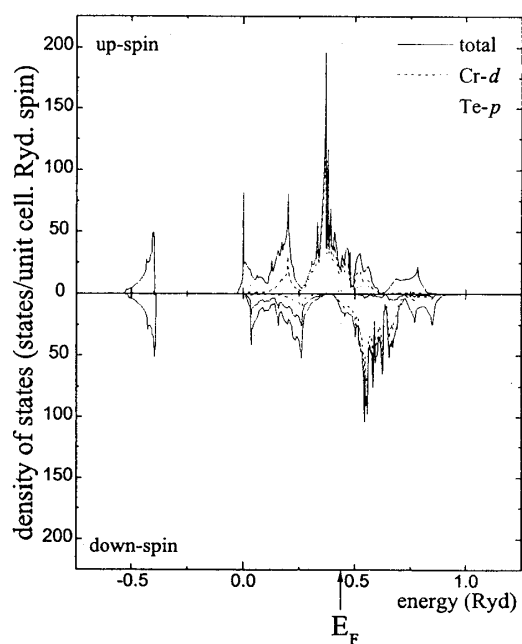


図3 強磁性状態CrTeの状態密度

川上 卓也

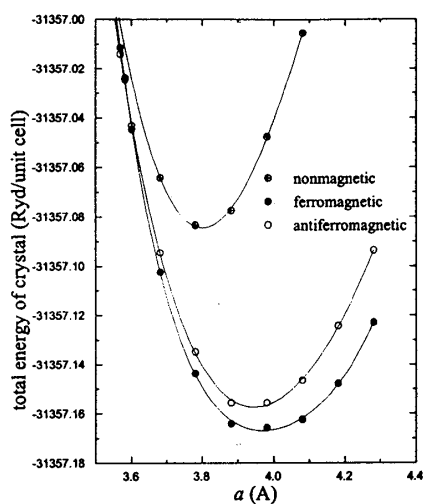


図4 非磁性、強磁性、反強磁性状態CrTeの全エネルギーのaによる変化

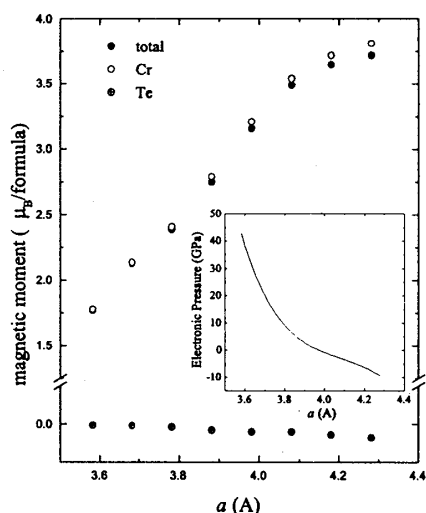


図5 強磁性状態CrTeの磁気モーメントのaによる変化

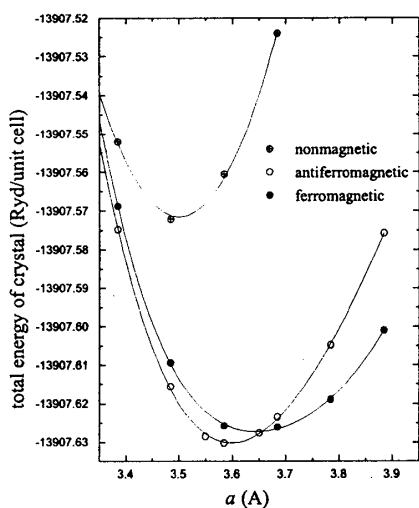


図6(a) 非磁性、強磁性、反強磁性状態CrSeの全エネルギーのaによる変化

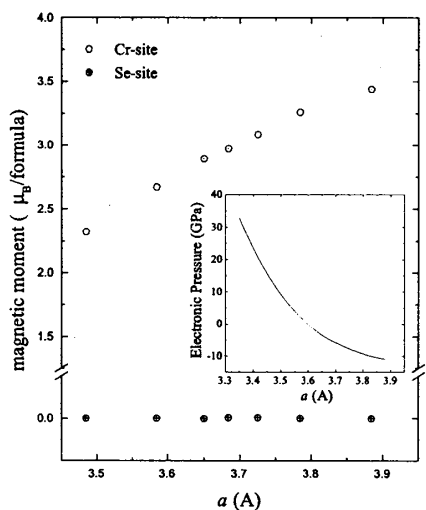


図6(b) 反強磁性状態CrSeの磁気モーメントのaによる変化

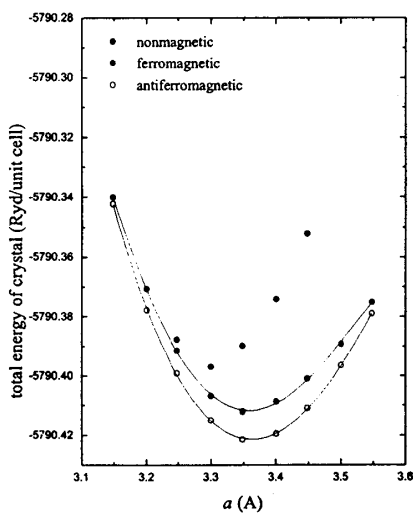


図7(a) 非磁性、強磁性、反強磁性状態CrSの全エネルギーのaによる変化

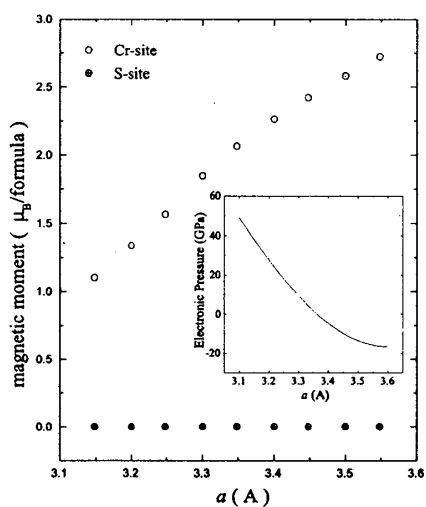


図7(b) 反強磁性状態CrSの磁気モーメントのaによる変化

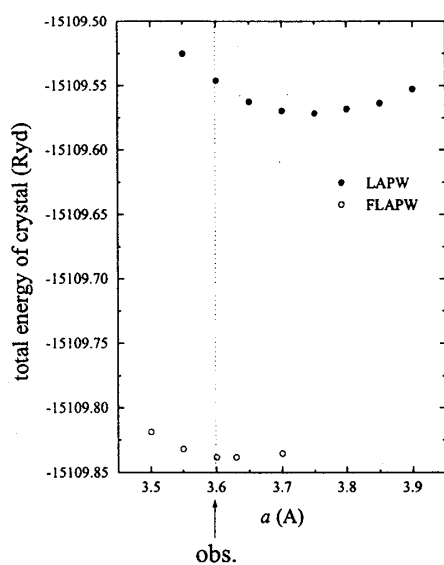


図8 非磁性状態NiAsの全エネルギーの
aによる変化

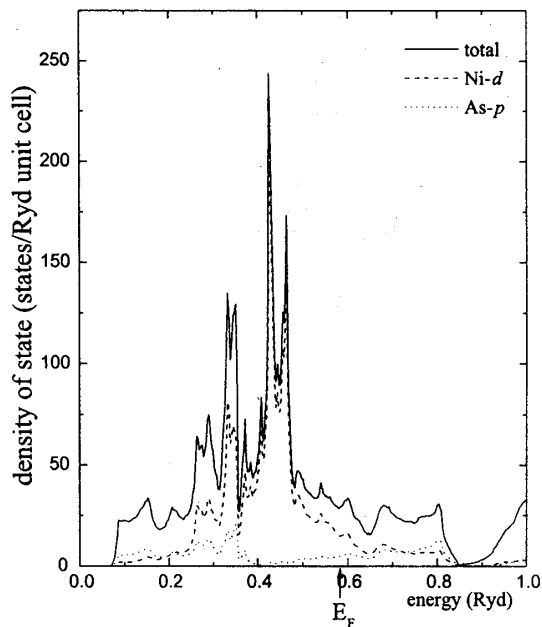


図9(b) 非磁性状態NiAsの状態密度

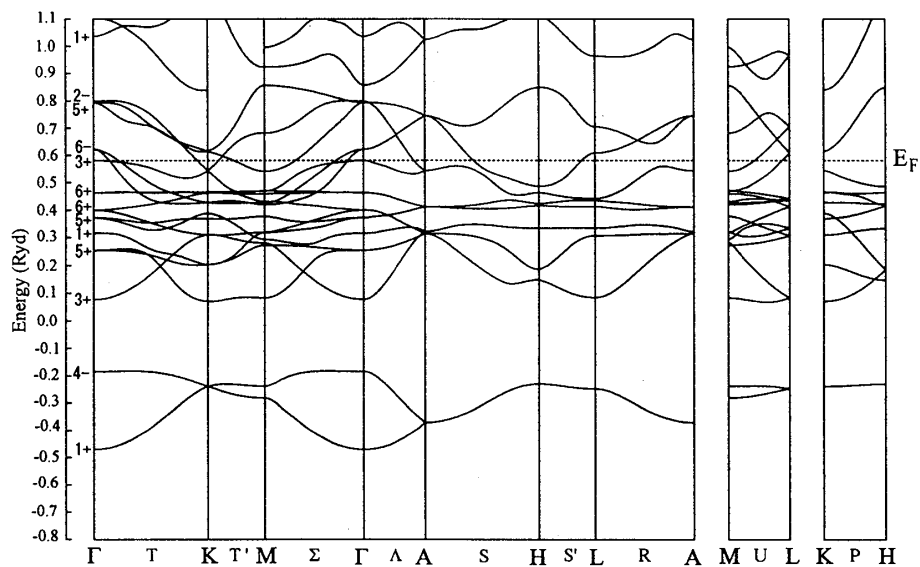


図9(a) 非磁性状態NiAsの分散曲線

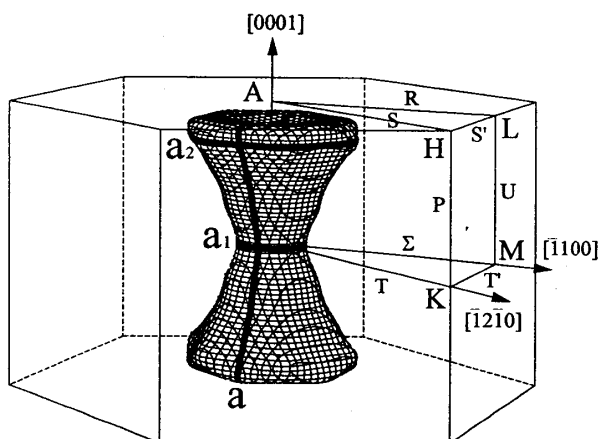


図10(a) 14番目のバンドが構成する
NiAsのフェルミ面

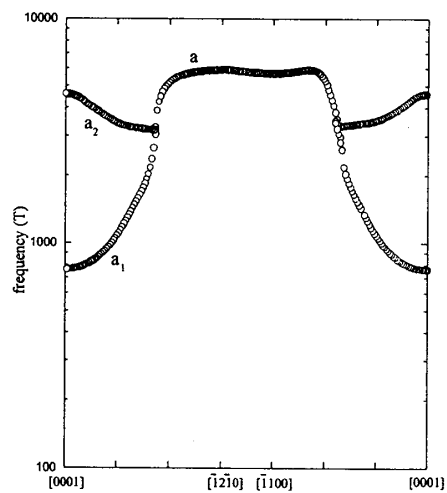


図11(a) 図10(a)のフェルミ面から
計算したdHvA振動数

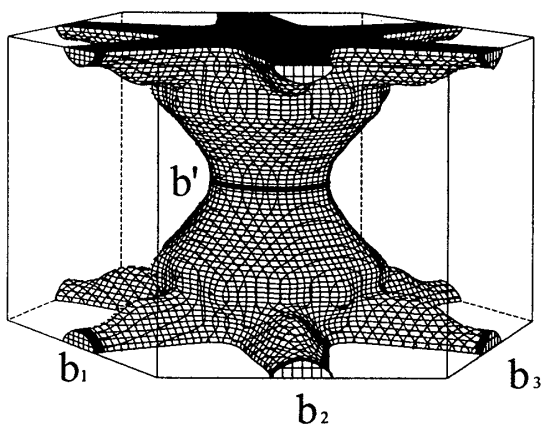


図10(b) 15番目のバンドが構成する
NiAsのフェルミ面

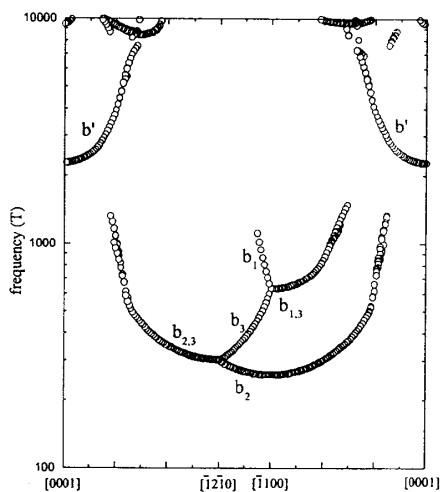


図11(b) 図10(b)のフェルミ面から
計算したdHvA振動数

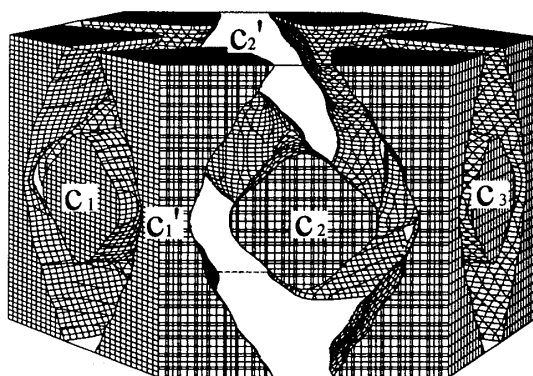


図10(c) 16番目のバンドが構成する
NiAsのフェルミ面

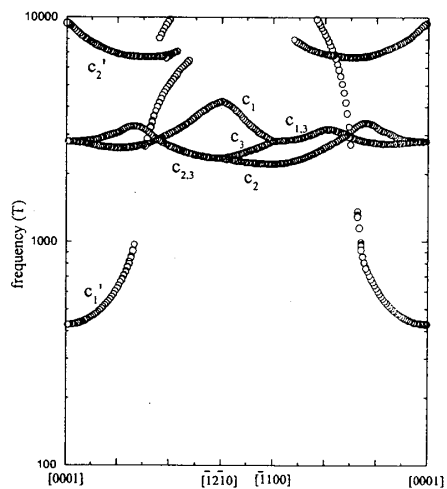


図11(c) 図10(c)のフェルミ面から
計算したdHvA振動数

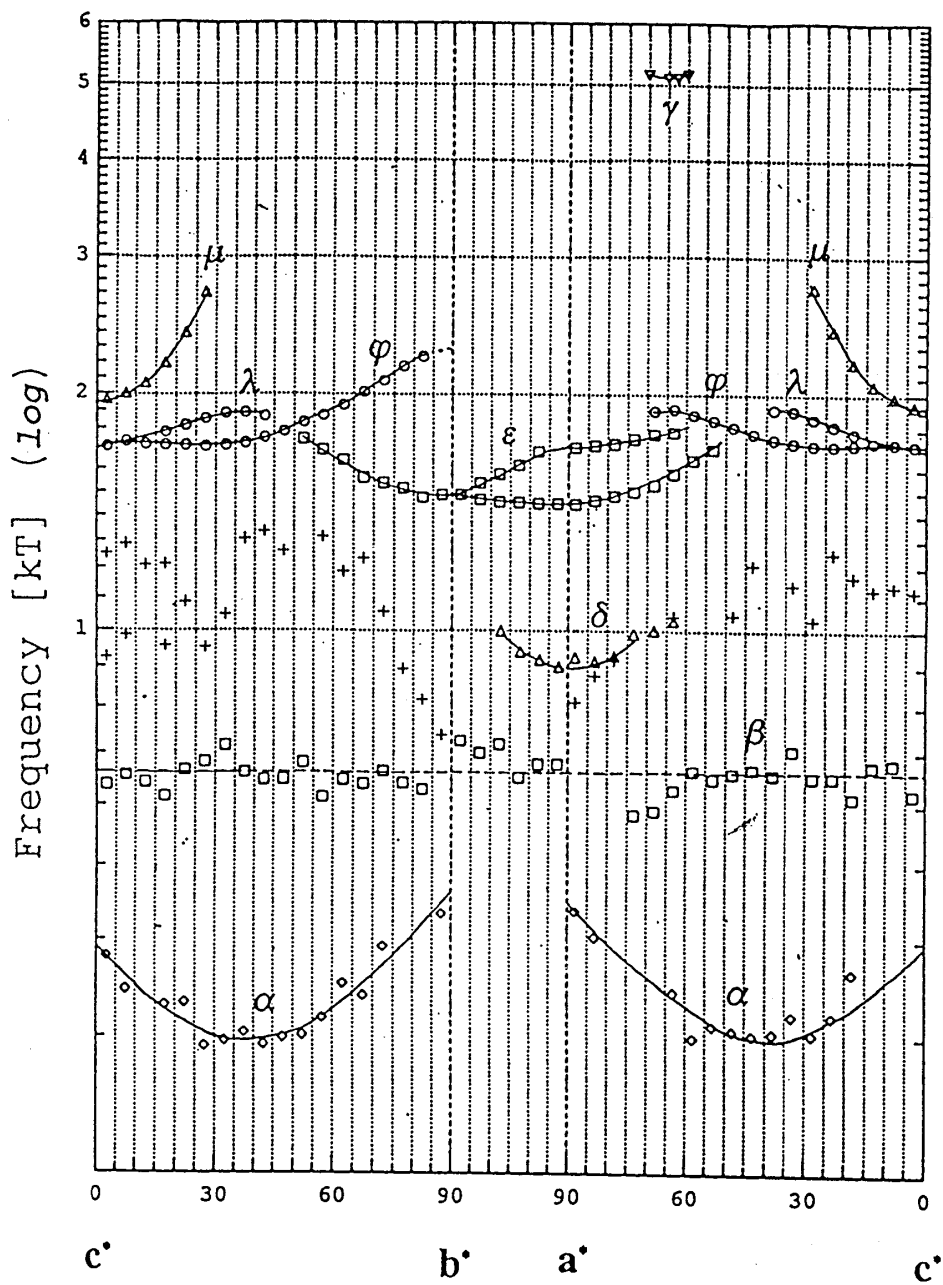


図 12 NiAs の dHvA 効果の角度依存性