DV-X α クラスタ法を用いた FCC 構造を有する Fe 基合金のスピン配列

永江 勇二

核燃料サイクル開発機構大洗工学センター

J. Japan Inst. Metals, Vol. 68, No. 8 (2004), pp. 591-595
© 2004 The Japan Institute of Metals

Spin Configuration in Fe Based Alloy with FCC Structure by DV-X α Cluster Method

Yuji Nagae

Oarai Engineering Center, Japan Nuclear Cycle Development Institute, Ibaraki 311-1393

It has been found that the magnetic property changes in austenitic stainless steel subjected to creep. The change of magnetic property is mainly caused by the transform into martensite. In order to investigate the magnetism of Fe-Cr-Ni ternary alloy with face-centered cubic besides the martensite, the spin configuration is evaluated by DV-X α cluster method. The spin configurations of γ Fe, γ Fe-Cr, γ Fe-Ni and γ Fe with vacancy are calculated. The effect of lattice constant on spin configuration is also evaluated. The γ Fe with normal lattice constant has an antiferromagnetism. But the γ Fe with lattice constant of around 0.37 nm has a ferromagnetic property. The γ Fe with a vacancy has a ferromagnetic property even in the normal lattice constant of γ Fe. The magnetic property between Fe atom and Ni atom is always ferromagnetism in the range of calculated lattice constant. On the other hand, the magnetic property between Fe atom and Cr atom is always antiferromagnetism in the range of calculated lattice constant. It is possible to transform into ferromagnetism in the case of existence of many vacancies or of increase in lattice constant for face-centered cubic structure.

(Received March 19, 2004; Accepted June 23, 2004)

Keywords: discrete variational-X α method, magnetism, vacancy, lattice constant, iron, face-centered cubic

1. 緒 言

これまで著者は、耐熱材料として使用されるオーステナイト系ステンレス鋼の SUS304 鋼において、クリープ損傷の進行による磁気特性変化について調査してきた。その結果、非磁性である SUS304 鋼においてもクリープ損傷の進行により磁気特性が変化することを報告した¹⁾。また、この磁気特性変化は結晶粒界近傍での Cr 濃度の減少およびその領域を起点とした面心立方構造から体心立方構造への変態と関連していることを見出した²⁾。SUS304 鋼においては、室温やそれ以下の温度での引張損傷や疲労損傷により、いわゆる加工誘起マルテンサイト変態と呼ばれているように、マルテンサイト相が析出し磁性を生じるという報告がある³⁻⁵⁾。

このように、SUS304 鋼では強磁性体であるマルテンサイト相の生成によって磁気特性が変化するという報告はあるが、それ以外の要因については検討されていないのが現状である。そこで本研究では、マルテンサイト相以外の磁気変化の可能性を追求するために、経験値を用いない第一原理に基づいた DV-X α クラスタ法を用いて SUS304 鋼の磁性発生について検討することとした。第一原理計算の他の方法としてはバンド法があり、この方法は周期対称性を有する結晶の計算に適用されている。これら 2 つの方法は目的に応じて使い分けられている。例えば、完全結晶の電子状態計算には

バンド法が有利であり、同じ結晶でも周期性が破綻するような欠陥状態になると、クラスタ法が有利となる⁶⁾。本研究では、欠陥状態の計算も行うのでクラスタ法を用いて計算することとした。

2. 計 算 方 法

2.1 DV-X α クラスタ法

DV-X α クラスタ法についての詳細は他を参照していただくことにし⁷⁻⁹⁾、ここでは概略を示すこととする。

本計算では各分子軌道は原子軌道関数の線形結合とし、Up スピンと Down スピンについて、それぞれ計算を行う。その時の X α ポテンシャルは、

$$V_{xc\uparrow} = -3\alpha\{3\rho_{\uparrow}(r)/4\pi\}^{1/3}$$

で表される¹⁰⁾。ここで $\alpha=0.7$ である。この近似を用い、最終的に各原子軌道に振り分けられる電子数を求める。例えば、3d 軌道の Up スピン数と Down スピン数を求めることができ、さらにこの差から 3d 磁気モーメントを評価することが可能となる。

本研究では、市販されている“SCAT”プログラム⁷⁾を用いて、スピン分極を考慮して DV-X α クラスタ法による計算を行った。

2.2 計算モデル

材料が磁性を有するには、(1)磁気モーメントを有すること、(2)ある臨界原子間距離以上であることが必要となる。

ハイゼンベルクの強磁性理論では、隣り合う原子間に電子雲の重なりがあり、原子間で電子を交換し合うことによって交換相互作用というものが生ずることを示している¹¹⁾。スピン S_i と S_j を持つ i 番目の原子と j 番目の原子間には、

$$w_{ij} = -2JS_i \cdot S_j$$

のエネルギーをもつ交換相互作用が働く。ここで、 J は交換積分と呼ばれるものである。 $J > 0$ の場合にはスピンの平行な場合のエネルギーが低く安定であり、 $J < 0$ の場合にはスピンの反平行の場合が安定となる。 J は原子核の間の距離に依存し、原子間距離がある臨界距離以上で正になる¹²⁾。つまり、スピン配列は臨界値以上で強磁性的、つまり磁気モーメントが同一方向に並ぶことになる。原子間距離の変化は格子定数(以後、 a)の変化と対応しており、格子定数が大きくなると原子間距離も大きくなる。

SUS304 鋼は、格子定数が 0.35911 nm で面心立方(Face-Centered Cubic, FCC)構造を有し、常磁性材料である。しかし、疲労負荷のような局所的なすべり変形やクリープ変形、照射によって空孔が形成されたり、格子定数が増加したりすることが考えられる。そこで本研究では、このような FCC 構造を有する SUS304 鋼に対し、格子定数が変化することによる常磁性状態から強磁性状態への遷移について検討することとした。ここでは、0.359 nm、0.365 nm および 0.375 nm の格子定数を持つ以下の結晶構造モデルに対してスピン配列の変化を検討することとした。

計算を行った FCC 構造モデルを Fig. 1 に示す。すべての原子を Fe とした場合(以後、 γ Fe モデル)と、中心原子を Cr あるいは Ni に置換した(以後、 γ Fe-Cr モデルおよび γ Fe-Ni モデル)場合について計算を行った。この結晶構造モデルは、番号 1 を中心原子とし、12 個の第 1 近接原子(番号 2)と 6 個の第 2 近接原子(番号 3)を含んだモデルとなっている。中心原子に対して、12 個の第 1 近接原子の電子状態はすべて等価であり、さらに 6 個の第 2 近接原子の電子状態もすべて等価であるとして計算を行った。初期のスピン配列は、いずれのモデルにおいても中心原子を Up スピンに第 1 近接原子を Down スピンとした。

また、中心原子の格子位置の原子を取り除いた、つまり空孔を含んだ FCC 構造モデル(以後、 γ Fe-vacancy モデル)についても同様の計算を行った。この場合、第 1 近接原子および第 2 近接原子には Fe のみを配置した。さらに第 3 近接原子(番号 4)も考慮し、そこにも Fe 原子を配置した。このモデルに対しては、格子定数が 0.356 nm、0.359 nm および 0.365 nm の場合の計算を行った。 γ Fe-vacancy モデルにおいても、第 1 近接原子の 12 個の原子、第 2 近接原子の 6 個の原子および第 3 近接原子の 24 個の原子については、それぞれ等価な電子状態にあるとして計算を行った。空孔を導入したモデルでは、近接原子位置の緩和は考慮しなかった。また、初期のスピン配列はすべての原子を Up スピンとした。

さらに、体心立方(Body-Centered Cubic, BCC)構造につ

Fig. 1 The model of face-centered cubic structure.

Fig. 2 The model of body-centered cubic structure.

いても計算を行った。体心の位置を中心原子とし、第 2 近接原子までのモデルを作成した。計算を行った BCC 構造モデルを Fig. 2 に示す。中心原子の位置を Fe, Cr, Ni と入れ替えて計算を行った。なお、第 1 および第 2 近接原子はすべて Fe とした。それぞれ、 α Fe モデル、 α Fe-Cr モデル、 α Fe-Ni モデルとする。ここでは、格子定数を変化させた計算は行わず、BCC 構造の Fe の格子定数である、 $a = 0.2866$ nm のみの計算を行った。また、いずれのモデルにおいても初期のスピン配列はすべての原子を Up スピンとした。

3. 計算結果

3.1 FCC 構造モデルの計算結果

γ Fe モデル、 γ Fe-Cr モデルおよび γ Fe-Ni モデルの格子定数変化に伴うスピン配列変化の結果について、中心原子から第 2 近接原子に対する Up スピンと Down スピンの電子数を Table 1(a)~(c)にそれぞれまとめた。

まず、 γ Fe モデルの計算結果について検討する。 $a = 0.359$ nm では中心原子と第 1 近接原子の Up スピンと Down スピンの電子数の差が異符号となっている。つまり反強磁性的なスピン配列となっている。 $a = 0.365$ nm では、強磁性的スピン配列と反強磁性的スピン配列が混合した複雑な電子状態となっている。さらに格子定数が増加し、0.375 nm となると、すべての原子のスピンが同じ方向に揃う、つまり強磁性

Table 1 (a) The spin configuration of γ Fe model.

$a = 0.359 \text{ nm}$			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Fe)	11.57	14.40	- 2.83
2 (Fe)	14.54	11.53	3.01
3 (Fe)	11.33	14.55	- 3.22
$a = 0.365 \text{ nm}$			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Fe)	11.41	14.43	- 3.03
2 (Fe)	11.41	14.65	- 3.24
3 (Fe)	14.59	11.29	3.29
$a = 0.375 \text{ nm}$			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Fe)	14.54	11.50	3.04
2 (Fe)	14.65	11.39	3.27
3 (Fe)	14.77	11.15	3.63

Table 1 (b) The spin configuration of γ Fe-Cr model.

$a = 0.359 \text{ nm}$			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Cr)	13.35	10.45	2.90
2 (Fe)	11.56	14.53	- 2.97
3 (Fe)	14.50	11.38	3.12
$a = 0.365 \text{ nm}$			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Cr)	13.47	10.35	3.13
2 (Fe)	11.51	14.57	- 3.05
3 (Fe)	14.56	11.31	3.25
$a = 0.375 \text{ nm}$			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Cr)	13.70	10.19	3.51
2 (Fe)	11.45	14.61	- 3.16
3 (Fe)	11.16	14.76	- 3.60

的スピン配列が安定となる。

次に、強磁性的スピン配列における原子 1 個あたりの磁気モーメントを求めてみる。本計算はクラスター計算を行っているため、クラスターモデルでの最外郭原子は周囲との結合を切っていることになる。従って、第 2 近接原子の電子状態は、結晶のそれとは異なってくる可能性がある。そこでここでは、原子 1 個あたりの磁気モーメントを、最も内側の原子である中心原子のものとした。Table 1(c)から分かるように、強磁性的スピン配列が安定となる $a = 0.375 \text{ nm}$ における原子 1 個あたりの磁気モーメントは、 $3.04\mu_B$ (μ_B : ボア磁子)である。

γ Fe-Cr モデルにおいては、Fe-Cr 原子間のスピン配列は格子定数に依らず反強磁性的スピン配列が安定となる。格子

Table 1 (c) The spin configuration of γ Fe-Ni model.

$a = 0.359 \text{ nm}$			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Ni)	13.61	14.54	- 0.93
2 (Fe)	11.45	14.60	- 3.15
3 (Fe)	14.50	11.38	3.12
$a = 0.365 \text{ nm}$			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Ni)	14.51	13.67	0.83
2 (Fe)	14.65	11.39	3.25
3 (Fe)	11.29	14.60	- 3.31
$a = 0.375 \text{ nm}$			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Ni)	14.49	13.69	0.79
2 (Fe)	14.76	11.28	3.48
3 (Fe)	11.24	14.66	- 3.42

定数が 0.359 nm の場合、Cr と Fe の磁気モーメントの絶対値はそれぞれ $2.90\mu_B$ と $2.97\mu_B$ であり、ほぼ同じ値となっている。つまりこれは、Fe-Cr の結合による磁性の発生はなく、非磁性となることを示唆している。格子定数の増加により、Fe および Cr の磁気モーメントは共に増加する傾向にある。

γ Fe-Ni モデルにおいては、Fe-Ni 原子間のスピン配列は格子定数に依らず強磁性的スピン配列が安定となる。格子定数が 0.359 nm の場合には、Ni と Fe の磁気モーメントはそれぞれ $0.94\mu_B$ と $3.15\mu_B$ である。格子定数の増加により、Ni の磁気モーメントは減少するが、Fe のそれは増加する傾向にある。

次に、 γ Fe-vacancy モデルについての格子定数変化に伴う Up スピンと Down スピンの電子数の変化を Table 2 にまとめた。空孔を導入したモデルでは、 $a = 0.356 \text{ nm}$, 0.359 nm および 0.365 nm でも Fe-Fe 原子間のスピン配列が強磁性的となることが分かる。つまりこれは、通常の γ Fe の格子定数においても強磁性を示す可能性があることを示唆している。実際の材料において空孔をなくすることは困難であり、熱平衡においても空孔が存在している。しかし、熱平衡における空孔濃度はかなり低く、巨視的に見れば磁性を示さないと考えられる。

3.2 BCC 構造モデルの計算結果

α Fe モデル、 α Fe-Cr モデルおよび α Fe-Ni モデルのスピン配列変化の結果について、中心原子から第 2 近接原子の Up スピンと Down スピンの電子数を Table 3 にまとめた。

α Fe モデルにおいては、すべての原子のスピンが同じ方向に揃う、つまり強磁性的スピン配列が安定となっている。次に、強磁性的スピン配列における原子 1 個あたりの磁気モーメントを求めてみた。前項の FCC 構造モデルの際に示したように、ここでは、原子 1 個あたりの磁気モーメント

Table 2 The spin configuration of γ Fe-vacancy model.

(a) $a = 0.356$ nm			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (vacancy)	—	—	—
2 (Fe)	14.15	11.99	2.16
3 (Fe)	14.50	11.53	2.98
4 (Fe)	14.68	11.27	3.41
(b) $a = 0.359$ nm			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (vacancy)	—	—	—
2 (Fe)	14.36	11.70	2.66
3 (Fe)	14.52	11.55	2.97
4 (Fe)	14.69	11.27	3.43
(c) $a = 0.365$ nm			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (vacancy)	—	—	—
2 (Fe)	14.37	11.69	2.69
3 (Fe)	14.53	11.54	3.00
4 (Fe)	14.68	11.27	3.41

Table 3 The spin configuration of body-centered cubic structure.

α Fe, $a = 0.28664$ nm			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Fe)	14.52	11.61	2.92
2 (Fe)	14.62	11.41	3.21
3 (Fe)	14.59	11.36	3.23
α Fe-Cr, $a = 0.28664$ nm			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Cr)	10.67	13.27	-2.60
2 (Fe)	14.52	11.52	3.00
3 (Fe)	14.52	11.43	3.10
α Fe-Ni, $a = 0.28664$ nm			
Number	Up spin	Down spin	Up-Down
1 (Ni)	14.60	13.67	0.92
2 (Fe)	14.63	11.37	3.25
3 (Fe)	14.57	11.39	3.18

を、最も内側の原子である中心原子のものとして求めた。その結果、原子 1 個あたりの磁気モーメントは、 $2.9\mu_B$ であった。 α Fe の磁気モーメントの実験値は $2.2\mu_B^{13)}$ であり、それに比べると大きな値となっている。

α Fe-Cr モデルにおいては、Fe-Cr 原子間のスピン配列は反強磁性的スピン配列が安定となる。Cr と Fe の磁気モーメントの絶対値はそれぞれ $2.60\mu_B$ と $3.00\mu_B$ であった。その差は γ Fe-Cr モデルよりも大きく、Fe-Cr の結合によっても多少の磁化を示すと考えられる。また、 α Fe-Ni モデルにお

いては、Fe-Ni 原子間のスピン配列は強磁性的スピン配列が安定となる。Ni と Fe の磁気モーメントはそれぞれ $0.92\mu_B$ と $3.25\mu_B$ であった。

この計算結果を基に、SUS304 鋼の BCC 構造の磁性について検討した。反強磁性的スピン配列となるのは Fe-Cr 間のみであり、Fe-Ni および Fe-Fe 間は強磁性的スピンとなる。SUS304 鋼の場合、Cr 濃度は 18~20 mass% であり、Fe-Cr の原子結合の割合は少ないと考えられる。従って、巨視的に見れば SUS304 鋼の BCC 構造は強磁性を示すと考えられる。SUS304 鋼のマルテンサイト相 (BCC 構造、あるいは Body-Centered Tetragonal 構造) が強磁性体であることは実験的に示されており、ここで示した理論的な計算結果と整合する。

4. 考 察

4.1 バンド計算との比較

これまで、多くの研究者によってバンド計算を用いて γ Fe の磁気特性が議論されている。

Weiss は、 γ Fe には 2 種類のスピン状態が存在し、反強磁性状態と強磁性状態の遷移は格子定数に依存することを報告した¹⁴⁾。また、強磁性状態での 1 原子あたりの磁気モーメントを $2.8\mu_B$ と求めている。

また最近になって、Asada *et al.* は Generalized Gradient Approximation (GGA) を用い Fe の構造安定性と磁気モーメントについて求めている¹⁵⁾。その結果、BCC 構造を持つ Fe が安定構造となることを示している。さらに、FCC 構造は安定構造とならないが、Wigner-Seitz 半径 (R_{ws}) が 2.62 a.u. では反強磁性状態が安定であり、2.72 a.u. では強磁性状態が安定であることを示している。この結果は、Cu に析出した FCC 構造を有する Fe ($R_{ws} = 2.65$ a.u.) では反強磁性的となり^{16,17)}、Cu-Au 合金に析出した FCC 構造を有する Fe ($R_{ws} = 2.78$ a.u.) では強磁性的となる実験結果¹⁸⁾ と一致していると報告している。なお、a.u. は atomic unit の略で 1 a.u. = 0.0529177 nm である。また、Wigner-Seitz 半径とは、1 個の伝導電子が占める体積と等しい体積球の半径であり、

$$V/N = 4\pi R_{ws}^3/3$$

で表される。ここで V は単位胞の体積 (a^3 , a : 格子定数)、 N は単位胞中の原子数である。従って、2.72 a.u. は格子定数 $a = 0.3683$ nm に相当する。

さらに、Moruzzi *et al.* も FCC 構造を持つ Fe において Local Spin-Density Approximation (LSDA) を用いたバンド計算を行い、体積膨張をすることで反強磁性状態から強磁性状態に遷移することを示している¹⁹⁾。反強磁性状態から強磁性状態への遷移する R_{ws} は 2.71 a.u. ($a = 0.3667$ nm) であった。さらに R_{ws} の変化による磁気モーメントの変化を求めており、 $R_{ws} = 2.75$ a.u. ($a = 0.3724$ nm) の場合には約 $2.65\mu_B$ 、 $R_{ws} = 2.85$ a.u. ($a = 0.3859$ nm) の場合には約 $2.80\mu_B$ であった。また、Elsasser *et al.* は、LSDA に基づき体積変化による FCC 構造の Fe の磁気モーメントを求めている²⁰⁾。その結果、磁気モーメントは、体積が増加するにつれ僅かに増加することが示されている。求められた磁気モー

メントは $2.5\mu_B$ から $2.7\mu_B$ であった.

以上, これらこれまで報告されているバンド計算によると, FCC 構造を持つ Fe においては, 格子定数が 0.366 nm から 0.37 nm の間で, 反強磁性から強磁性に安定電子構造が変化すること, 磁気モーメントは格子定数の増加によって増加し, その値は $2.5\mu_B$ から $2.8\mu_B$ であることが示されている.

本計算の γFe モデルでは, $a=0.375\text{ nm}$ で強磁性的スピン配列が安定な電子状態であることが示されている. また, $a=0.365\text{ nm}$ では, 反強磁性的スピン配列と強磁性的スピン配列とが混合した複雑な電子構造であった. つまり, DV-X α クラスタ法による計算においても, 少なくとも 0.365 nm を超えないと強磁性的スピン配列とはならないと考えられる. また, 磁気モーメントは $a=0.375\text{ nm}$ の時で約 $3\mu_B$ であった. これらの結果は, これまでのバンド計算結果と同等であると考えられる.

4.2 オーステナイト系ステンレス鋼の磁性変化の要因

ここでは, SUS304 鋼に見られる加工誘起マルテンサイト変態以外の磁性変化について検討する. DV-X α クラスタ法を用いた計算の結果, FCC 構造においても磁性を生じる可能性がある, つまり強磁性的スピン配列となるのは, γFe モデル, $\gamma\text{Fe-Ni}$ モデルおよび $\gamma\text{Fe-vacancy}$ モデルであることが分かった. $\gamma\text{Fe-Ni}$ モデルおよび $\gamma\text{Fe-vacancy}$ においては, 通常の γFe の格子定数においても磁性を生じる可能性があることが分かった.

これらの計算結果を基に, SUS304 鋼の磁性発生要因について検討した. まず, 変形等を与えていない, 例えば溶体化した状態を考える. この場合は, 空孔量も少なく格子の伸縮もないと考えられる. 従って, 強磁性的スピン配列となるのは $\gamma\text{Fe-Ni}$ のみとなり, 巨視的に見れば強磁性を示さない非磁性となると考えられる.

次に, 負荷を与えた場合を考える. 例えば, 疲労負荷のように局所的なすべり変形により転位の堆積を生じ, 空孔の生成や格子の乱れを生じることが考えられる. また, クリープ負荷においては, 高転位密度のサブバウンダリーの形成も考えられる. これら, 多量の空孔の生成や格子の伸長により強磁性的スピン配列となり, 強磁性を示すことが考えられる. また, 照射においても空孔の形成があり, 磁気変化の可能性があると考えられる.

これまで, SUS304 鋼に代表されるオーステナイト系ステンレス鋼の磁気変化は BCC 構造を有するマルテンサイト変態に起因する報告のみであったが, 理論計算により多量の空孔を含む領域や格子定数の増加でも磁気変化を生じる可能性があることが分かった.

5. 結 言

SUS304 鋼において, マルテンサイト変態以外の磁性発生

要因について, DV-X α クラスタ法を用いて絶対零度の条件下で, FCC 構造を有する γFe モデル, $\gamma\text{Fe-Cr}$ モデル, $\gamma\text{Fe-Ni}$ モデルおよび $\gamma\text{Fe-vacancy}$ モデルのスピン状態を計算した. また, BCC 構造についても, αFe モデル, $\alpha\text{Fe-Cr}$ モデルおよび $\alpha\text{Fe-Ni}$ モデルで計算を行った. その結果, 以下の知見を得た.

(1) γFe モデルでは, 格子定数が 0.365 nm を超えると反強磁性的スピン配列から強磁性的スピン配列に遷移する. また, $\gamma\text{Fe-Ni}$ モデルでは, すべての格子定数で強磁性的スピン配列となる. 一方, $\gamma\text{Fe-Cr}$ モデルでは, すべての格子定数において反強磁性的スピン配列となる.

(2) $\gamma\text{Fe-vacancy}$ モデルにおいては, 通常の γFe の格子定数である 0.36 nm 近傍であっても強磁性的スピン配列となる.

(3) αFe モデルおよび $\alpha\text{Fe-Ni}$ モデルにおいては, Fe-Fe 間, Fe-Ni 間は強磁性的スピン配列となる. 一方, Fe-Cr 間は反強磁性的スピン配列である.

(4) 疲労負荷のような局所的なすべり変形やクリープ変形, 照射によって空孔が形成されたり, 格子定数が増加したりすることが考えられ, マルテンサイト変態以外にもこれによって磁気変化する可能性があると考えられる.

文 献

- 1) Y. Nagae and K. Aoto: International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics **15**(2001/2002) 295-300.
- 2) Y. Nagae: 13th Int. Conf. on the Strength of Materials (2003) p. 184.
- 3) T. Angel: J. Iron Steel Inst. **177**(1954) 165-174.
- 4) R. P. Reed: Acta Metall. **10**(1962) 865-877.
- 5) R. Lagneborg: Acta Metall. **12**(1964) 823-843.
- 6) H. Adachi: *Hajimete no Denshijyotai Keisan DV-X α Bunchi Kidou Keisan Nyumon*, (Sankyo Press, Tokyo, 1998) p. 3.
- 7) H. Adachi, M. Tsukada and C. Satoko: J. Phys. Soc. Jpn. **45**(1978) 875-883.
- 8) H. Adachi, M. Morinaga and S. Nasu: *Kinzokuzairyo no Ryoshi Kagaku to Ryoshi Goukin Sekkei*, (Sankyo Press, Tokyo, 1997) pp. 1-5.
- 9) H. Adachi: *Ryousi Zairyo Kagaku Nyumon*, (Sankyo Press, Tokyo, 1992) pp. 1-53.
- 10) J. C. Slater and K. H. Johnson: Phys. Rev. **B5**(1972) 844.
- 11) W. Heisenberg: Z. Phys. **49**(1928) 619.
- 12) The Japan Institute of Metals: *Zairyo no Kouzou to Bussei*, (1994) pp. 183-189.
- 13) S. Chikazumi: *The handbook of magnetism*, (Asakura, Tokyo, 1975) p. 317.
- 14) R. J. Weiss: Proc. Pys. Soc. **82**(1963) 281-288.
- 15) T. Asada and K. Terakura: Phys. Rev. **B46**(1992) 599-602.
- 16) C. Abrahams, L. Guttman and J. S. Kasper: Phys. Rev. **127**(1962) 2052-2055.
- 17) G. Johanson, M. B. McGirr and D. A. Wheeler: Phys. Rev. **B1**(1970) 3208.
- 18) U. Gonser, K. Krishel and S. Nasu: J. Magn. Magn. Mater. **15-18**(1980) 1145-1146.
- 19) V. L. Moruzzi, P. M. Marcus and J. Kubler: Phys. Rev. **B39**(1989) 6957-6961.
- 20) C. Elsasser, J. Zhu, S. G. Louie, B. Meyer, M. Fahnle and C. T. Chan: J. Phys.: Condens. Mater. **10**(1998) 5131-5146.