体心立方晶 FeRh 系合金の磁性

Magnetic Properties of bcc FeRh_{1-x}M_x Systems

湯浅新治・大谷義近・宮島英紀・佐久間昭正*

慶應義塾大学工学部, 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1 (〒223)

*日立金属(株)磁性材料研究所, 埼玉県熊谷市三ヶ尻 5200 (〒360)

S. Yuasa, Y. Otani, H. Miyajima and A. Sakuma*

Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku, Yokohama 223

*Magnetic and Electronic Materials Research Laboratory, Hitachi Metals, Ltd.,

Mikajiri 5200, Kumagaya, Saitama 360

The magnetic properties of ordered bcc FeRh_{1-x}M_x alloys (M=Fe, Co, Ni, Pd, Ir and Pt) were studied, and the correlations among the antiferromagnetic-ferromagnetic transition temperature T_0 , the Curie temperature, magnetization, and lattice constant were investigated. Substitution of the 3d element M for Rh diminishes the transition temperature T_0 , since the large magnetic moment of the M atom stabilizes the ferromagnetism. Moreover, first-order antiferromagnetic-paramagnetic transition was observed in an FeRh_{1-x}Ir_x system. The mechanism of those first-order phase transitions can be explained phenomenologically by introducing magneto-volume coupling into the model based on the SCR theory. The ground state properties of FeRh and FeRh_{1-x}Pd_x are well explained by first-principle band calculations based on the linearized muffin-tin orbital method.

Key words: FeRh_{1-x}M_x (M=Fe, Co, Ni, Pd, Ir, Pt), antiferromagnetic-ferromagnetic transition, SCR theory, magneto-volume effect

1. はじめに

体心立方晶 (bcc) FeRh 合金は CsCl 型規則構造をとり、温度の上昇に伴って約 400 K で反強磁性から強磁性に一次相転移を示す特異な遍歴電子磁性体である¹⁾。この反強磁性-強磁性 (AF-FM) 相転移に伴い bcc 規則構造は維持されるが、約 1% の等方的な体積増加が起こる。この bcc FeRh 合金の AF-FM 一次相転移は, Moriya らが提唱する SCR 理論に立脚した磁気相転移のモデル²⁾によって現象論的に説明される。

一方, bcc FeRh 合金に他の元素を添加することによる AF-FM 相転移点の変化は, Walter³⁾, Kouvel⁴⁾ らによって調べられているが, 添加元素がどの原子位置に入るか調べられておらず, また, 元素添加の磁性に及ぼす

影響についての系統的な研究は行われていない。

筆者らはこれまでに, FeRh 合金において準安定な体心正方晶 (bct) 相が得られること⁵⁾, Rh を Pt で置換した bct 相が温度の上昇に伴い反強磁性-常磁性 (AF-PM) 一次相転移を示すことなどを報告した⁶⁾。

本研究では, Rh を Co, Ni 族の 3d, 4d, 5d 元素 M (= Co, Ni, Pd, Ir, Pt) および Fe で置換した bcc FeRh_{1-x}M_x 合金を作成し, 元素置換と AF-FM 相転移点, 強磁性キュリー点及び格子定数の相関を系統的に調べた。また, bcc FeRh_{1-x}Ir_x 合金系において, 体積増加を伴った AF-PM 一次相転移が起こることが分かった。これらの結果について現象論的モデルおよび第一原理に基づくバンド計算によって解析を行った。

2. 試料作成および実験方法

bcc FeRh_{1-x}M_x (Fe, Co, Ni, Pd, Ir, Pt) 規則合金試料の作成法を以下に示す。それぞれ純度 4N-Fe, 3N-Rh 粉末, 4N-Co, 4N-Ni, 3N-Pd, 4N-Ir, 5N-Pt をプラズマ・ジェット炉を用いてアルゴン雰囲気中で溶解し, 合金試料を作成した。溶解時の試料の質量損失は 0.2% 以下であった。これを真空中で 1100°C で 24 時間, 900°C で 24 時間焼鈍後, 2°C/min で室温まで徐冷し, 規則合金を得た。

X 線回折測定 (室温) により, 合金試料の結晶構造を調べた。また, FeRh_{1-x}Ir_x 系について, 相転移に伴う結晶構造変化を調べるために室温から 650 K の温度範囲で X 線回折測定を行った。

磁化測定は, 振り子型磁力計を用いて温度 $T=77\sim 800$ K, 磁場 $H\sim 7.6$ kOe の範囲で行った。

また, ⁵⁷Co 線源を用いて室温でメスバウアー効果を測定し, 置換元素 M の原子位置の同定を行った。

Fig. 1 Compositional variation of the lattice constant a in bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{M}_x$ at room temperature.

3. 実験結果

3.1 結晶構造と格子定数

bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{M}_x$ 規則合金の格子定数 (室温) の組成依存性を Fig. 1 に示す。ここで $M = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$ の格子定数の値が $x = 0 \sim 0.02$ 間で不連続に増加しているのは、室温における合金の磁性が反強磁性から強磁性に変わるのに伴うものである。各合金系の格子定数の組成 x 依存性 $(\partial a / \partial x)_{x=0}$ を Table 1(a) に示す。

粉末試料の X 線回折ピークの面積強度測定により、Rh と置換した元素 M は規則格子の Rh 原子位置に入っていることが分かった。このことはメスbauer効果測定の結果によっても、以下に述べるように示される。Shirane ら⁷⁾により、Rh 位置に入った Fe 原子は、Fe 位置の Fe 原子よりも約 100 kOe 程大きな内部磁場を持つことが報告されている。本研究では、Fe 位置に入った Fe のスペクトルのみが観測され、Rh 位置に Fe は入っていない。このことから、 M 原子はすべて Rh 位置に入っていることが分かった。

3.2 磁化測定

bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{M}_x$ 系の相図を Fig. 2 に示す。ここで、破線は一次相転移、実線は二次相転移を示す。また、bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{M}_x$ の AF-FM 一次転移点 T_0 の組成 x 依存性 $(\partial T_0 / \partial x)_{x=0}$ 、強磁性キュリー点 Θ_f の組成 x 依存性 $(\partial \Theta_f / \partial x)_{x=0}$ を、それぞれ Table 1(b), (c) に示す。

一方、強磁性相が出現する温度領域 $T_0 < T < \Theta_f$ における磁化を絶対零度以外挿し、絶対零度における強磁性相の一原子当たりの平均磁気モーメント μ を求めた。 μ

Fig. 2 Composition dependence of the AF-FM transition temperature T_0 (open symbols) and ferromagnetic Curie temperature Θ_f (solid symbols) in bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{M}_x$.

Fig. 3 Composition variation of the average magnetic moment μ at 0 K in bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{M}_x$.

の組成 x 依存性を Fig. 3 に示す。ただし、 $M = \text{Ir}, \text{Pt}$ 系については、強磁性相が出現する温度領域が狭いために絶対零度における磁化の値を見積もることはできなかった。次に、Fig. 3 から置換元素 M の磁気モーメントを見積もる。まず Co 置換について考える。bcc FeRh および FeCo 規則合金中の Fe 位置に入った Fe は、絶対零度とともに $3.3 \mu_B$ のモーメントを持つ。したがって、bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{Co}_x$ 規則合金中でも Fe 位置に入った Fe 原子も $3.3 \mu_B$ のモーメントを持つと考えられる。したがって、Fig. 3 の一原子当たりの磁気モーメントの組成依存性より、Co 原子のモーメント $\mu_{\text{Co}} = 1.7 \mu_B$ となる。同様に、 $M = \text{Ni}$ について磁気モーメントを見積もると、 $\mu_{\text{Ni}} = 1.4 \mu_B$ となった。

次に、bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{Ir}_x$ 系において観測された AF-PM

Table 1 Composition dependence of (a) the lattice constant a , (b) the AF-FM transition temperature T_0 , (c) the ferromagnetic Curie temperature θ_f in bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{M}_x$ ($\text{M}=\text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Rh}, \text{Pd}, \text{Ir}, \text{Pt}$)

	(a) $\left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)_{x=0} [\times 10^3 \text{ \AA}]$			(b) $\left(\frac{\partial T_0}{\partial x}\right)_{x=0} [\times 10^3 \text{ K}]$			(c) $\left(\frac{\partial \theta_f}{\partial x}\right)_{x=0} [\times 10^3 \text{ K}]$		
3d	Fe	Co	Ni	Fe	Co	Ni	Fe	Co	Ni
	-0.5	-1.0	-0.9	-8.5	-6.1	-5.3	1.25	0.1	0
4d		Rh	Pd		Rh	Pd		Rh	Pd
		0	0.3		0	-0.3		0	-0.7
5d		Ir	Pt		Ir	Pt		Ir	Pt
		0.1	0.15		3.1	0.7		-0.6	-0.7

一次相転移の結果を示す。bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{Ir}_x$ ($x=0, 0.05, 0.10, 0.15$) の磁化の温度依存性を、それぞれ Fig. 4(a), (b) に示す。Fig. 4(a) から分かるように、 x の増加とともに AF-FM 一次転移点 T_0 が上昇し強磁性キュリー点 θ_f は減少する。そして、 $x=0.15$ の合金 (Fig. 4(b)) では、 θ_f が T_0 よりも大きくなる。その結果、反強磁性相から常磁性相 (PM) に直接相転移し、強磁性相は出現しなくなる。ここで、この AF-PM 相転移点を T_1 と定義する。高温下 X 線回折測定により、この $x=0.15$ の合金の AF-PM 相転移は $0.003 \text{ \AA}$ の格子定数増加を伴うことが分かった。したがって、この AF-PM 相転移は、ネール点における通常の二次相転移とは異なり、0.3% の体積増加を伴った一次相転移であることが分かった。また、Fig. 4(b) のように、常磁性相ではキュリー・ワイス則が成り立つ。ここで、 $1/\chi$ の外挿点を θ_a と定義すると、この合金の θ_a は正の値をとる。FeRh_{1-x}Ir_x 系の以上の結果をまとめた磁気相図を Fig. 5 に示す。ここで、破線および実線はそれぞれ一次および二次相転移を示す。 $x=0.15$ の合金の常磁性 (外挿) キュリー点 θ_a は、 $x=0 \sim 0.1$ の合金の常磁性キュリー点の延長線上に乗る。このことから、 $x=0.15$ の常磁性相は、この組成において準安定である強磁性相がキュリー点以上で常磁性になったキュリー常磁性相であると考えられる。

4. 考 察

4.1 現象論的解析

まず初めに、現象論的な解析を行う。遍歴電子磁性体の AF-FM 一次相転移を、Moriya-Usami が提唱するモデル²⁾によって現象論的に説明する。このモデルでは、磁気異方性のない系の磁気的自由エネルギー F_M を、一様磁化 M_0 および交番磁化 M_Q (Q は反強磁性体の波数ベクトル) で次のように展開する。

Fig. 4 (a) Temperature dependence of the magnetization in bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{Ir}_x$: (a) $x=0 \sim 0.10$ (b) $x=0.15$.

$$\begin{aligned}
 F_M(M_0, M_Q, T) = & \frac{1}{2\chi_0} M_0^2 + \frac{1}{2\chi_Q} M_Q^2 + \frac{\gamma_u}{4} M_0^4 \\
 & + \frac{\gamma_s}{4} M_Q^4 + \frac{\gamma_{us}}{2} M_0^2 M_Q^2 \\
 & + \frac{\tilde{\gamma}_{us}}{2} (M_0 \cdot M_Q)^2 - H_0 \cdot M_Q \quad (1)
 \end{aligned}$$

ここで、 χ_0, χ_Q はそれぞれ一様磁化率および交番磁化率、 γ は 4 次の展開係数、 H_0 は一様磁場である。このモデルによると、 $\gamma_{us}^2 > \gamma_u \gamma_s$ および $T_C > T_N$ の条件が成り立つとき、温度の上昇に伴い AF-FM 一次相転移が起こり得る。しかし、このモデルをそのまま適用すると AF-PM 相転移は二次相転移となってしまう、本研究で観測され

Fig. 5 Magnetic phase diagram of the bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{Ir}_x$ system. The broken and solid lines represent first-order and second-order phase transitions, respectively.

た AF-PM 一次相転移を説明することはできない。また、このモデルでは AF-FM および AF-PM 一次相転移に伴う体積変化を説明することもできない。

これは、このモデルが磁気的自由エネルギーのみを考慮していることに起因すると考えられる。相転移に伴う体積変化を説明するためには磁気-体積結合を考慮する必要がある。そこで本研究では、以下のように (1) 式に磁気-体積結合エネルギーおよび弾性エネルギーを導入し、立方晶系について計算を行った。

遍歴電子系の磁気-体積結合エネルギー F_{MV} は、磁化の波数 q 成分 M_q を用いて次のように表される⁸⁾。

$$F_{MV} = \omega \sum_q D_q M_q^2, \quad M_q = |M_q| \quad (2)$$

ここで、 $\omega = \Delta V/V$ は体積歪、 ΔV は秩序磁性の発現に伴う体積変化、 D_q は磁気-体積結合係数である。

一方、立方晶系における弾性エネルギー F_{EL} は、

$$F_{EL} = \frac{1}{2} B \omega^2 \quad (3)$$

与えられる。ここで、 B は体積弾性率である。

全自由エネルギー F を、磁気的自由エネルギー F_M 、磁気-体積結合エネルギー F_{MV} および弾性エネルギー F_{EL} の和として表す。以下、議論を反強磁性-強磁性間で一次相転移が生じ得る場合、すなわち $\gamma_{us}^2 > \gamma_u \gamma_s$ の場合に限る。SCR 理論を用いて計算すると、強磁性相 ($T > T_c$ も含む) が実現する場合の全自由エネルギー F_{FM} は次のようになる。

Fig. 6 Schematic phase diagram in a $1/\chi_0 \sim 1/\chi_Q$ plane. The solid lines (1~3) represent the expected temperature variations for bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{Ir}_x$, where lines 1 and 2 are for $x=0\sim 0.1$ and line 3 is for $x \geq 0.15$.

$$F_{FM} = -\frac{1}{4\gamma_u \chi_0(0)^2} - \frac{D_0^2}{2B} \left(-\frac{3}{5} \frac{1}{\gamma_u \chi_0(0)} - \frac{2}{5} \frac{1}{\gamma_u \chi_0(T)} \right)^2, \quad T < T_c$$

$$- \frac{D_0^2}{2B} \left(-\frac{3}{5} \frac{1}{\gamma_u \chi_0(0)} + \frac{3}{5} \frac{1}{\gamma_u \chi_0(T)} \right)^2, \quad T > T_c \quad (4)$$

一方、反強磁性相 ($T > T_N$ も含む) が実現する場合の全自由エネルギー F_{AF} は次のようになる。

$$F_{AF} = -\frac{1}{4\gamma_s \chi_Q(0)^2} - \frac{D_Q^2}{2B} \left(-\frac{3}{5} \frac{1}{\gamma_s \chi_Q(0)} - \frac{2}{5} \frac{1}{\gamma_s \chi_Q(T)} \right)^2, \quad T < T_N$$

$$- \frac{D_Q^2}{2B} \left(-\frac{3}{5} \frac{1}{\gamma_s \chi_Q(0)} + \frac{3}{5} \frac{1}{\gamma_s \chi_Q(T)} \right)^2, \quad T > T_N \quad (5)$$

式 (4) (5) を用いて、 $1/\chi_0 - 1/\chi_Q$ 平面上に描いた相図 ($\{D_0/\gamma_u \chi_0(0)\}^2 > \{D_Q/\gamma_s \chi_Q(0)\}^2$ の場合) を Fig. 6 に示す。この図中で、PM1 はキュリー常磁性相 (スピン揺らぎが波数空間の原点付近に局在している常磁性相) であり、PM2 は反強磁性相がネール点以上で常磁性になった相 (スピン揺らぎが波数空間の $q=Q$ 付近に局在した常磁性相) である。また、太破線は一次相転移、太実線は二次相転移を表す。図中の実線 (①~③) は、bcc $\text{FeRh}_{1-x}\text{Ir}_x$ 合金系で予想される、温度上昇に伴う $(\chi_0^{-1}, \chi_Q^{-1})$ の描く軌跡である。組成 x の増加に伴いキュリー点が減少するため、 $(\chi_0^{-1}, \chi_Q^{-1})$ の軌跡の線は Fig. 6 のように、 $1/\chi_0 - 1/\chi_Q$ 平面上の右方向に移動する。 $x=0\sim 0.1$ 合金 (Fig. 6 の

①, ②) は絶対零度で反強磁性であり, 温度の上昇に伴い AF-FM 一次相転移を示し, さらにキュリー点で常磁性 (PMI) になる. 一方, $x \geq 0.15$ の合金 (Fig. 6 の③) は絶対零度で反強磁性であり, 温度の上昇に伴って AF-PM 一次相転移を示す. ここで, この常磁性相は PMI, つまりキュリー常磁性相であり, 実験結果と一致している.

さらにこのモデルによると, D_0 が正の場合, AF-FM および AF-PM 一次相転移に伴い体積増加が起こることが示される. 通常, 磁気一体積結合係数の符号は正であるため, このモデルによって相転移に伴う体積増加を説明できる.

以上のように, Moriya-Usami の相転移のモデルに磁気体積効果を導入することによって, bcc FeRh 系合金の AF-FM および AF-PM 一次相転移を定性的に説明することができた.

4.2 bcc FeRh_{1-x}M_x 合金の元素置換効果

次に, bcc FeRh_{1-x}M_x の元素置換の磁気相転移に及ぼす効果を議論する. Table 1 に示したように, AF-FM 相転移点 T_0 は, Rh を 3d 元素で置換すると急激に減少し, 4d 元素で置換すると余り変化せず, 5d 元素で置換すると逆に増加する. これとは逆に強磁性キュリー点 θ_f は, 置換元素 M が 3d, 4d, 5d 元素になるに従って減少する.

特に M が 3d 元素の場合, T_0 は x とともに急減し, その減少率 $(\partial T_0 / \partial x)_{x=0}$ は $M = \text{Fe, Co, Ni}$ の順に大きい. 一方, 強磁性相の基底状態の磁気モーメントは $M = \text{Fe}^{91}$, Co, Ni の順に大きくなる. このように, 置換元素 M の強磁性相における磁気モーメントが大きくなるほど相転移点 T_0 の減少が大きいことから, M 原子の大きなモーメントが強磁性相を安定化すると考えられる. このことは, $M = \text{Fe}$ の場合についてバンド計算によって示されている. Hasegawa¹⁰⁾ の計算によると, Rh 位置に入った Fe 原子が反強磁性相においてはモーメントを持たず, 強磁性相において $2.5 \mu_B$ という大きなモーメントを持つことによって強磁性相が安定化され, 相転移点 T_0 が減少する. $M = \text{Co, Ni}$ については, 本研究により強磁性相において置換元素 M 原子が Rh 原子より大きな磁気モーメントを持つという結果が得られており, $M = \text{Fe}$ の場合と同様に M 原子の大きなモーメントが強磁性相を安定化すると考えられる.

次に, 格子定数変化の相転移に及ぼす影響について考える. 高圧下実験¹¹⁾ より求められた T_0 および θ_f の格子定数依存性と Fig. 1 に示した格子定数の組成 x 依存性から格子定数変化に伴う相転移点の変化を見積もると, Table 1 に示した $(\partial T_0 / \partial x)_{x=0}$, $(\partial \theta_f / \partial x)_{x=0}$ よりも 1 桁小

さな値となる. したがって, 格子定数の変化が相転移点に及ぼす影響は小さいことが分かる.

4.3 バンド計算

次に, バンド計算により FeRh 系合金の基底状態について議論する. bcc FeRh のバンド計算は, これまでに Kahn¹²⁾, Koenig¹³⁾, Hasegawa¹⁰⁾, Moruzzi-Marcus¹⁴⁾ によって行われている. 特に Moruzzi ら¹⁴⁾ は, 格子定数を変化させて反強磁性相および強磁性相の全エネルギー, 各相の局在モーメントを ASW 法により第一原理的に計算している.

本研究所では bcc FeRh, FeRh_{1-x}Pd_x について各相の全エネルギー, 局在モーメントを第一原理的に計算した. 計算は, 線形化マフィンティン軌道 (LMTO 法)^{15), 16)} を用い, 多体効果を反映する電子間の相互作用としては局所密度汎関数近似のもとで Barth-Hedin¹⁷⁾ による交換相関ポテンシャルを採用した.

まず, bcc FeRh 合金についての計算結果を示す. ウィグナー-ザイツ半径 r_{ws} を変化させたときの反強磁性相 (○) および強磁性相 (●) の局在モーメント, 全エネルギーを, それぞれ Fig. 7(a), (b) に示す. Fig. 7(b) のように, 基底状態において反強磁性相は強磁性相より安定である. この両相の全エネルギー差が 1.9 mRy/f.u. と小さいため, 有限温度におけるスピン揺らぎの効果によって両相の全エネルギーの大小関係が反転して, AF-FM 相転移が起こり得ると考えられる. また, 安定な r_{ws} は, 2.801 Å (反強磁性相), 2.826 Å (強磁性相) という値が得られ, AF-FM 相転移に伴い体積増加が生じる

Fig. 7 r_{ws} dependence of (a) the local magnetic moment, and (b) the total energy in bcc FeRh. The open and solid circles represent the anti-ferro-magnetic and ferromagnetic phases, respectively.

Fig. 8 Composition dependence of (a) the local magnetic moment, and (b) $E_{FM} - E_{AF}$ in bcc $FeRh_{1-x}Pd_x$. The open and solid circles are for antiferromagnetic and ferromagnetic phases, respectively.

ことが示された。一方, Fig. 7(a) より局在モーメントは, 強磁性相では $\mu_{Fe} = 3.3 \mu_B$, $\mu_{Rh} = 1.0 \mu_B$, 反強磁性相では $\mu_{Fe} = 3.3 \mu_B$, $\mu_{Rh} = 0 \mu_B$ となった。Shirane ら⁹⁾の室温における実験値から見積もった絶対零度における局在モーメントは, 強磁性相では $\mu_{Fe} = 3.3 \mu_B$, $\mu_{Rh} = 1.1 \mu_B$, 反強磁性相では $\mu_{Fe} = 3.5 \mu_B$, $\mu_{Rh} = 0 \mu_B$ であり, 本研究の計算結果は, これまでに行われたバンド計算^{12)~14)}の結果よりも実験値と良く一致している。

次に bcc $FeRh_{1-x}Pd_x$ 合金についての計算結果を示す。各相の局在モーメント, 反強磁性相と強磁性相の全エネルギー差 $E_{FM} - E_{AF}$ の組成 x 依存性を, それぞれ Fig. 8(a), (b) に示す。Fig. 8(b) から分かるように, x が増加すると強磁性相が反強磁性相よりもエネルギー的に安定になる。このことは, x の増加に伴う T_0 の減少 (Fig. 2) と一致している。一方, Fig. 8(a) のように, Rh と置換した Pd 原子は強磁性相において $0.2 \mu_B$ の磁気モーメントを持つ。この結果, Rh を Pd で置換した強磁性相における一原子当たり平均の磁気モーメント減少率は $(d\mu/dx) = -0.35 \mu_B/\text{atom}$ となり, 実験値 $-0.4 \mu_B/\text{atom}$ とほぼ一致している。

4. ま と め

bcc $FeRh_{1-x}M_x$ 規則合金 ($M = Fe, Co, Ni, Pd, Ir, Pt$) を

作成し, その磁性を調べた結果, 以下のことが明らかになった。

1. 3d 元素 M で Rh を置換すると AF-FM 相転移温度 T_0 は減少する。これは Rh 原子位置に入った M 原子が強磁性相において大きなモーメントを持つため, 強磁性相が安定化されるためである。
2. 元素置換に伴う格子定数の変化が相転移温度に及ぼす影響は小さい。
3. $M = Ir$ 系において, 体積増加を伴った AF-PM 一次相転移が観測された。
4. Moriya-Usami の相転移のモデルに磁気体積効果を導入し, 体積増加を伴う AF-FM および AF-PM 一次相転移が起こることを定性的に示した。
5. bcc $FeRh$ および $FeRh_{1-x}Pd_x$ 規則合金について, LMTO 法を用いて第一原理的にバンド計算を行い, 強磁性相および反強磁性相の安定性, 体積および局在モーメントを求めた。この結果は実験と良く一致している。

文 献

- 1) M. Fallot: *Ann. Phys.*, **10**, 291 (1938).
- 2) T. Moriya and K. Usami: *Solid State Commun.*, **23**, 935 (1977).
- 3) Paul H. L. Walter: *J. Appl. Phys.*, **35**, 938 (1964).
- 4) J. S. Kouvel: *J. Appl. Phys.*, **37**, 1257 (1966).
- 5) H. Miyajima and S. Yuasa: *J. Magn. Magn. Mat.*, **104-107**, 2025 (1992).
- 6) S. Yuasa and H. Miyajima: *Nucl. Instrum. & Methods, B*, **76**, 71 (1993).
- 7) G. Shirane, C. W. Chen, P. A. Flinn and R. Nathans: *Phys. Rev.*, **131**, 183 (1963).
- 8) T. Moriya and K. Usami: *Solid State Commun.*, **34**, 95 (1980).
- 9) G. Shirane, R. Nathans and C. W. Chen: *Phys. Rev.*, **134**, A1547 (1964).
- 10) H. Hasegawa: *J. Magn. Magn. Mat.*, **66**, 175 (1987).
- 11) L. I. Vinokurova, A. V. Vlasov and M. Pardavi-Horvath: *Phys. Stat. Sol. (b)*, **78**, 353 (1976).
- 12) M. A. Kahn: *J. Phys. F*, **9**, 457 (1979).
- 13) C. Koenig: *J. Phys. F*, **19**, 1123 (1982).
- 14) V. L. Moruzzi and P. M. Marcus: *Phys. Rev. B*, **46**, 2864 (1992).
- 15) O. K. Anderson: *Phys. Rev. B*, **12**, 3060 (1975).
- 16) H. L. Skriver: *The LMTO Method*, ed. by M. Cardona, P. Fulde and H. J. Queisser (Springer, Berlin, 1984).
- 17) U. von Barth and L. Hedin: *J. Phys. C*, **5**, 1629 (1972).

1993 年 10 月 12 日受理, 1994 年 1 月 28 日採録