

## Ni<sub>2</sub>MnSnのフェルミ面

著者	石田 尚治, 岩島 栄市, 久保 康則, 石田 潤治
雑誌名	鹿児島大学理学部紀要. 数学・物理学・化学
巻	13
ページ	55-62
別言語のタイトル	Fermi Surface of Ni <sub>2</sub> MnSn
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10232/00007010">http://hdl.handle.net/10232/00007010</a>

## $\text{Ni}_2\text{MnSn}$ の フェ ル ミ 面

石田 尚治\*・岩島 栄市\*  
久保 康則\*・石田 潤治\*

(1980年9月30日受理)

### Fermi Surface of $\text{Ni}_2\text{MnSn}$

Shoji ISHIDA\*, Eiichi IWASHIMA\*, Yasunori KUBO\*  
and Junji ISHIDA\*

#### Abstract

For  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$ , energy values have been calculated by Mueller's interpolation scheme so as to reproduce ones obtained by SAPW method. The Fermi surfaces of  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  have been determined by the use of these energy values and are compared with the Fermi surfaces of  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  and  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$ . The Fermi surfaces of majority spin states are very similar each other for these three alloys but those of minority-spin states are different. The charge distribution of conduction electrons and d-electrons of Mn and Ni has been estimated on these Fermi surfaces. The component of d-electrons of Mn and Ni is about 50% at each k-point on these Fermi surfaces.

#### § 1. 序 論

多くのホイスラー合金に関して、核磁気共鳴やメスバウアー効果による内部磁場の測定がなされ、その磁氣的性質に関する実験結果が蓄積されて来た。Ishikawa 等は磁氣的性質の動的振舞いを調べるために、 $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ 、 $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  と  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$ <sup>1-3)</sup> を取り上げ中性子散乱によりスピン分極やスピン波の分散関係を求めた。これらの実験結果は *s-d* 相互作用を基にして解析されているが、うまく説明できている訳ではない。

著者らはバンド理論に基づきホイスラー合金の磁氣的振舞いを調べるために、 $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ <sup>4)</sup>、 $\text{Pd}_2\text{MnSn}$ <sup>5)</sup> と  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$ <sup>5)</sup> の電子構造を SAPW 法を用いて求めた。その結果、実測値と一致するスピン分極の値を得た。また、上記三個のホイスラー合金に共通の特性を示してきた。更に物理量を計算する際に便利である内挿法をホイスラー合金に適用出来るように拡張し、実際に  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  と  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  に適用して SAPW 法から得られるエネルギーを再現出来ることが分かった<sup>6)</sup>。この内挿法から得られたエネルギーの固有値と固有関数を用いて、 $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ <sup>7)</sup> と  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$ <sup>8)</sup> の動的帯磁率を計算し spin 波の分散関係を求めた。その結果は Ishikawa 等が実験的に求めたものと非常に良く一致している。また同時に磁気相互作用の機構をバンド理論に基づき議論した。

この論文では、SAPW 法より求めた  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  のエネルギーを内挿法で再現し、諸物理量が計算出来るようにする。さらにフェルミ面を決定し  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  と  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  のものと比較

\* 鹿児島大学物理学教室 (Department of Physics, Faculty of Science, Kagoshima University)

する。以前に,  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ,  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  と  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  に対して SAPW 法より得られた  $E(\mathbf{k})$  曲線を比較して, これら三個の合金の *majority-spin* 電子のフェルミ面は互いに似ているが, *minority-spin* 電子のフェルミ面は異なることを予想したが, このことを確かめホイスラー合金のフェルミ面の特徴を調べる。しかしホイスラー合金に対し, galvanomagnetic な実験がなされていないため, 求められたフェルミ面を実測されたものと直接比較できないが, これらのフェルミ面がこれからなされるであろう実験の重要な目安になるであろう。

## § 2. 計算方法と状態密度

Mueller は combined interpolation scheme<sup>9)</sup> を提案し, *fcc* Ni に適用してその方法が適切であることを示した。Ishida はこの方法を *hcp* 構造の遷移金属に適用できるように拡張し *hcp* Co に適用した<sup>10)</sup>。更に  $\text{L}_{21}$  結晶構造をもつホイスラー合金に対しても拡張し, 実際にこの方法を用いて  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ <sup>6)</sup> の電子構造を求めた。

化学式  $\text{X}_2\text{YZ}$  で表わされるホイスラー合金では, X 原子と Y 原子が *d*-電子を含んでいる。until cell 内でのこれら 15 個の *d*-軌道を原子軌道関数の一次結合で表わし, X 原子, Y 原子と Z 原子に含まれる伝導電子を orthogonalized plane wave (OPW) で表わす。これらの波動関数を用いてハミルトニアンを数式化すると 39 個のパラメーターが現われる。(ハミルトニアンの行列要素の具体的な形は文献 6 に与えられているのでここでは表示しない。)  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  に対して SPAW 法により得られたエネルギーを再現するように決定した 39 個のパラメーターが表 I に与えられている。これらのパラメーターを用いて得られたエネルギー値の誤差の root mean square の値は, 対称性の良い  $20k$  点で *majority-spin states* に対し 0.012Ry, *minority-spin states* に対し 0.011Ry である。

SAPW 法と内挿法から得られた全電子の状態密度曲線が *majority-spin states* に対しては図 1 に, *minority-spin states* に対しては図 2 に比較されている。破線で示されている内挿法に

表 I  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  のエネルギーを計算する際に用いられた 39 個のパラメーターの値

	Min.	Maj.		Min.	Maj.
$d\epsilon_{\text{Mn}}$	-0.38	-0.723	$V_4$	0.0175	0.021
$d\gamma_{\text{Mn}}$	-0.39	-0.685	$V_5$	0.013	0.055
$d\epsilon_{\text{Ni}}$	-0.74	-0.73	$V_6$	0.05	-0.05
$d\gamma_{\text{Ni}}$	-0.745	-0.748	$A_{\text{Mn}}$	0.38	0.38
$dd\sigma_1$	-0.00776	-0.01976	$A_{\text{Ni}}$	0.764	0.65
$dd\pi_1$	0.00321	0.01021	$R_{0\text{Mn}}$	3.3	3.3
$dd\delta_1$	0.0085	-0.0175	$R_{0\text{Ni}}$	3.4	3.0
$dd\sigma_2$	-0.01726	-0.00826	$L_{1\text{Mn}}$	0.91	1.01
$dd\pi_2$	0.007	0.007	$L_{1\text{Ni}}$	0.96	1.26
$dd\delta_2$	0.00254	-0.01904	$L_{2\text{Mn}}$	1.56	1.56
$dd\sigma_{31}$	0.00207	0.00107	$L_{2\text{Ni}}$	1.65	1.65
$dd\pi_{31}$	0.00219	0.00569	$B_{\text{Mn}}$	-0.6	-0.58
$dd\delta_{31}$	-0.001	-0.00154	$B_{\text{Ni}}$	-0.492	-0.52
$dd\sigma_{32}$	0.0015	0.00207	$R_{1\text{Mn}}$	3.78	3.58
$dd\pi_{32}$	0.001	-0.00069	$R_{1\text{Ni}}$	3.68	3.48
$dd\delta_{32}$	-0.002	-0.00104	$L_{3\text{Mn}}$	0.915	1.015
$V_0$	-1.265	-1.29	$L_{3\text{Ni}}$	0.985	1.065
$V_1$	-0.075	-0.074	$L_{4\text{Mn}}$	1.38	1.38
$V_2$	-0.04	-0.038	$L_{4\text{Ni}}$	1.18	1.48
$V_3$	0.065	0.048			

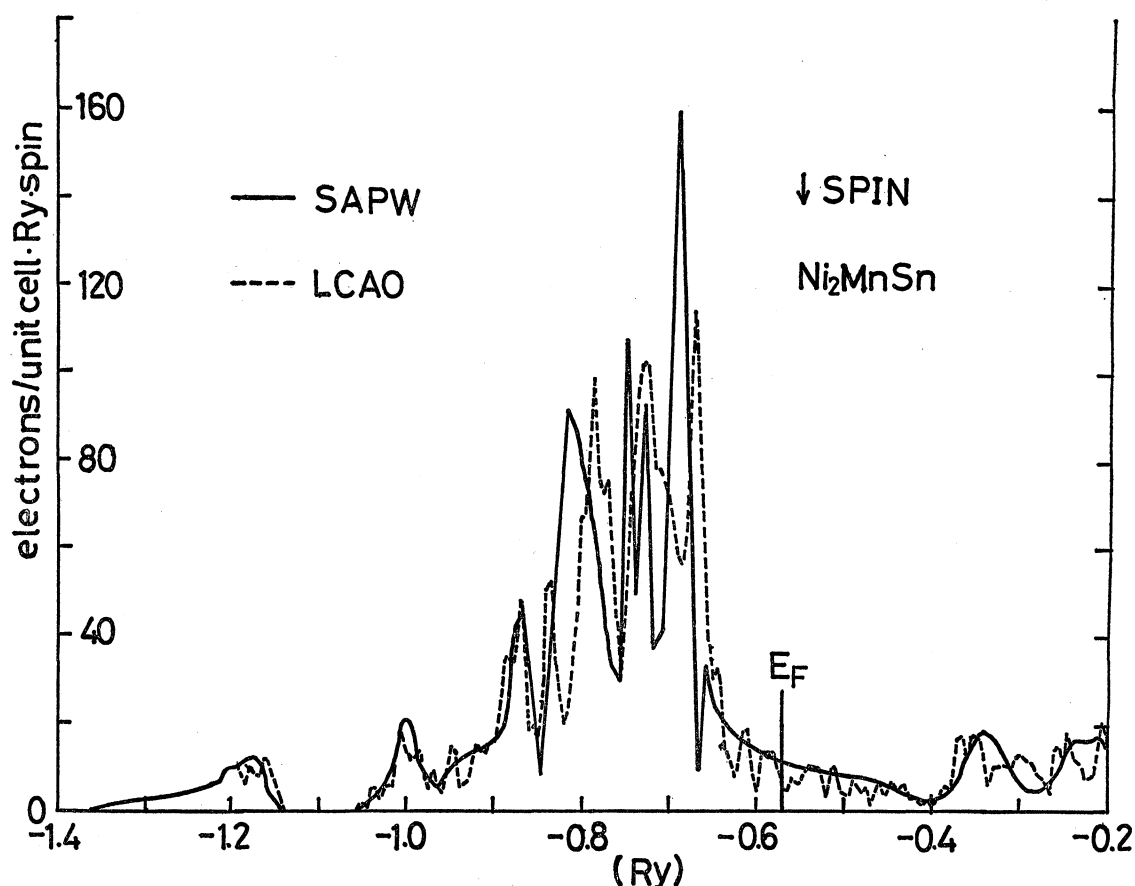


図1 Ni<sub>2</sub>MnSn の *majority*(↓) *spin* に対する状態密度曲線の比較。実線が SAPW 法によるもので破線が内挿法 (LCAO) によるものである。

よる結果が実線で示されている SAPW 法による結果を良く再現していることが分かる。これらの状態密度曲線を詳細に見るために、Ni と Mn の *d*-電子の状態密度曲線への寄与が図3に示されている。*majority-spin* に対しては、図1の高い山は Ni と Mn の *d* バンドによるものであり、Ni と Mn の *d* バンドは互に重り合っていることが分かる。*minority-spin states* に対しては、Ni と Mn の *d* バンドが分離しており、Mn の *d* バンドは電子により占有されていない。そのために Mn が大きな磁気モーメントを持つことが分かる。

### § 3. フェルミ面

§2 で与えられたパラメーターを用いて、Ni<sub>2</sub>MnSn のフェルミ面を決定したので、これらを Cu<sub>2</sub>MnAl と Pd<sub>2</sub>MnSn のものと比較する。先づ *majority-spin states* に対するものから比較する。各合金に対し三種類のフェルミ面があるが似ているものを並べて図示している。左から順に Cu<sub>2</sub>MnAl, Pd<sub>2</sub>MnSn と Ni<sub>2</sub>MnSn に対するものである。図4に示されているものはいずれも *hole-like* なフェルミ面ではほぼ球形をしている。図5に示されている面は 〈111〉 方向に枝を持ち、L 点の回りで Brillouin zone に接触している。これらもいずれも *hole-like* な面である。図6に示されているものが *majority-spin* に対する最も大きいもので、図5に示されたものと同じく L 点の回りで Brillouin zone に接触している。これらもやはり *hole-like* な面

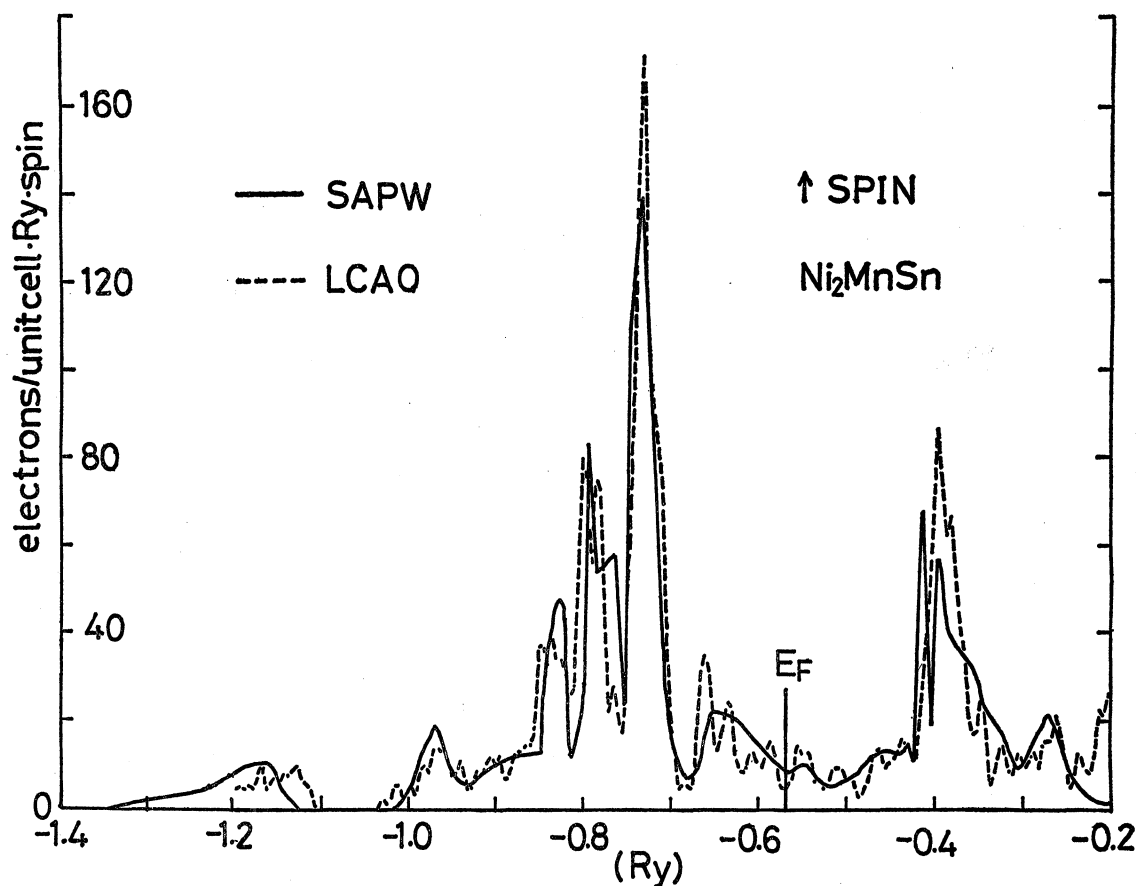


図2  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  の *minority*( $\uparrow$ )*spin* に対する状態密度曲線の比較。

である。 $E(k)$  曲線とフェルミレベルの位置から予想されたように、 $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ,  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  と  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  の *majority-spin* 電子の3個の *hole-like* なフェルミ面は互に非常に良く似ていることが分かる。

次に3個の合金の *minority-spin* 電子のフェルミ面を比較する。図7の面は  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  に対するもので二種類の面がある。それらのうちの一種の面は  $\Gamma$  点と K 点を結ぶ  $\Sigma$  軸上にある *hole-like* な面で first Brillouin zone 内に12個ある。他方の面は X 点の回りで Brillouin zone に接する *electron-like* な面である。これは extended zone scheme で画くと四角柱になる。

$\text{Pd}_2\text{MnSn}$  の *minority-spin* 電子のものは図8に示されている。中央に図示されているものは  $\Gamma$  点の回りの *hole-like* な面であるが、フェルミレベルが少し高くなると *electron-like* なものになる。どちらのものであるか実験的に確かめることは興味あることである。図8の左側に示されているものは  $\langle 111 \rangle$  方向に延びた8個の円錐形が  $\Gamma$  点の回りでいっしょになったもので *hole-like* な面である。図8の右側に示されたものは *minority-spin* 電子の最も大きい面に似た形をしており、やはり *hole-like* な面である。

最後に  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  の *minority-spin* 電子の3個のフェルミ面が図9に示されている。いずれも *hole-like* な面である。中央の八面体のものは  $\Gamma$  点の回りで閉じている。左側のものは  $\langle 111 \rangle$  方向に延びた8個の枝を持ち、L 点の回りで Brillouin zone に接触している。 $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  のものとは逆に、 $\Gamma$  点から L 点に向うにつれて細くなっている。右側の面も *hole-like* な

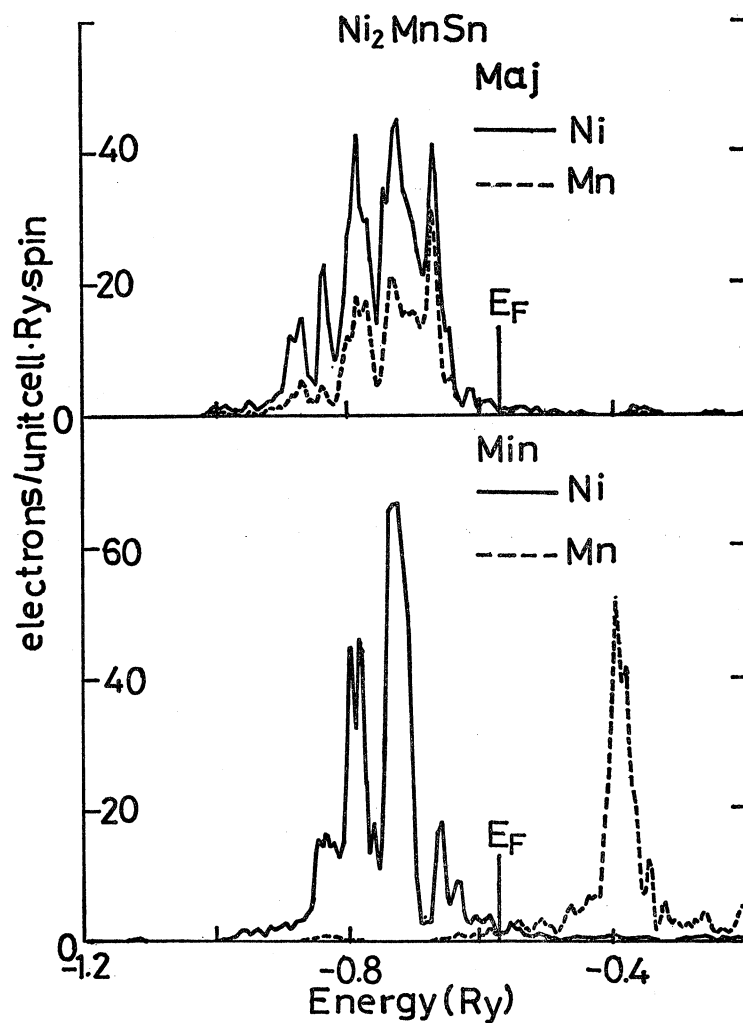


図3 Ni と Mn の *d*- 電子の状態密度曲線。  
上側に *majority-spin states*, 下側に *minority-spin states* に対するものが画示されている。  
実線と破線が夫々 Ni と Mn の *d*-sfates によるものである。

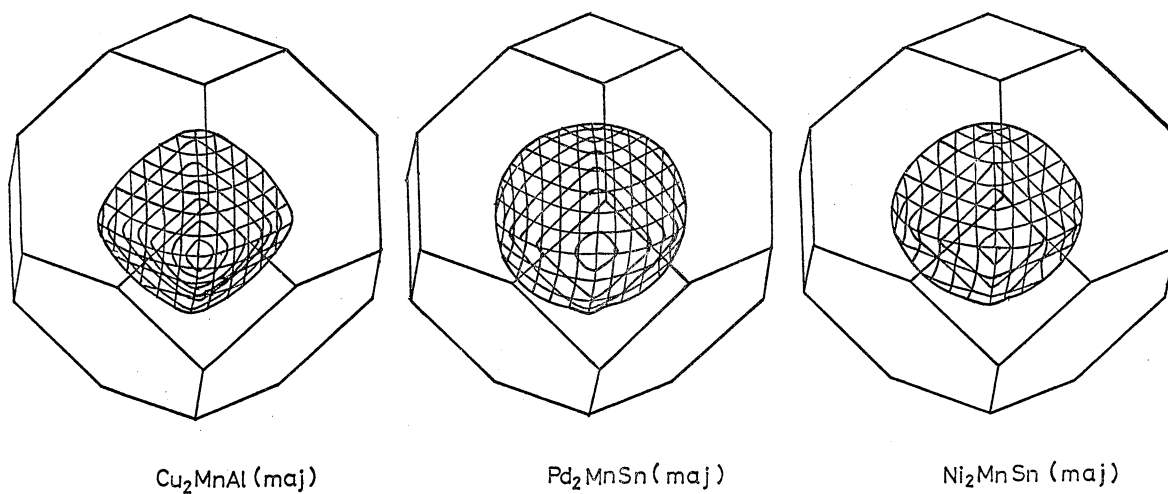


図4 *majority-spin* 電子に対する最小のフェルミ面。左から順に Cu<sub>2</sub>MnAl, Pd<sub>2</sub>MnSn と Ni<sub>2</sub>MnSn の面である。

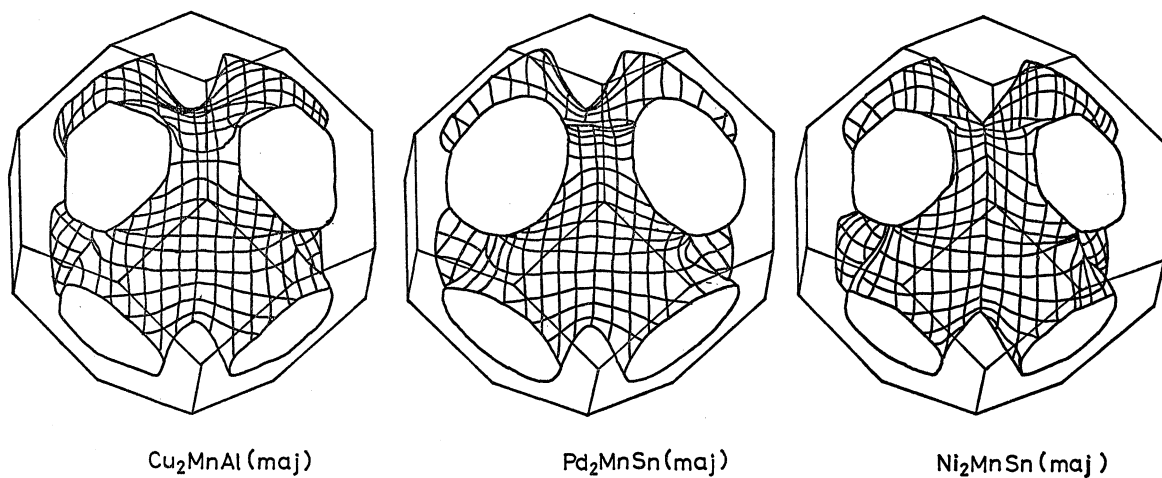


図5 *majority-spin* 電子に対する2番目のフェルミ面。左から順に  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ,  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  と  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  の面である。

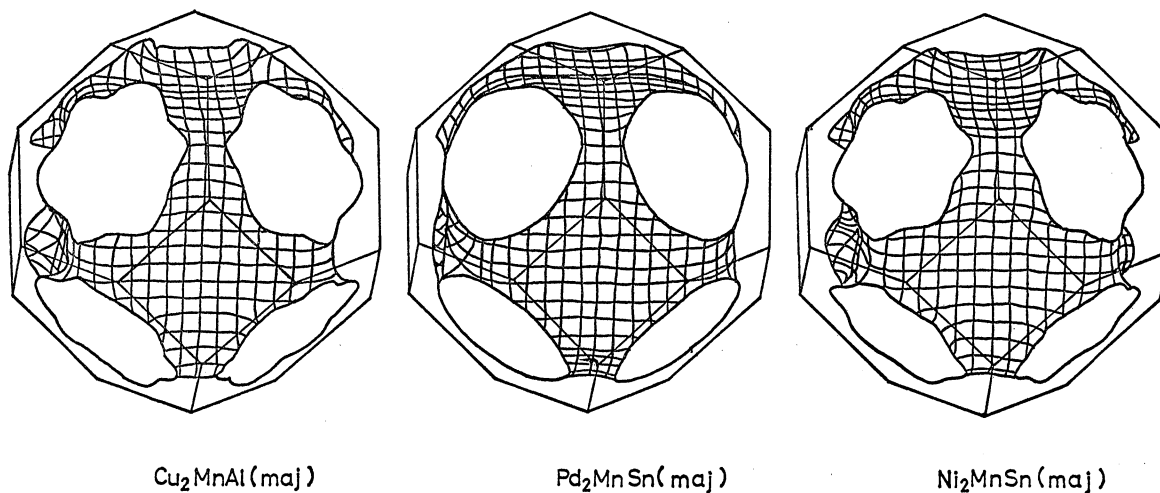


図6 *majority-spin* 電子に対する最も大きいフェルミ面。左から順に  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ,  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  と  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  の面である。

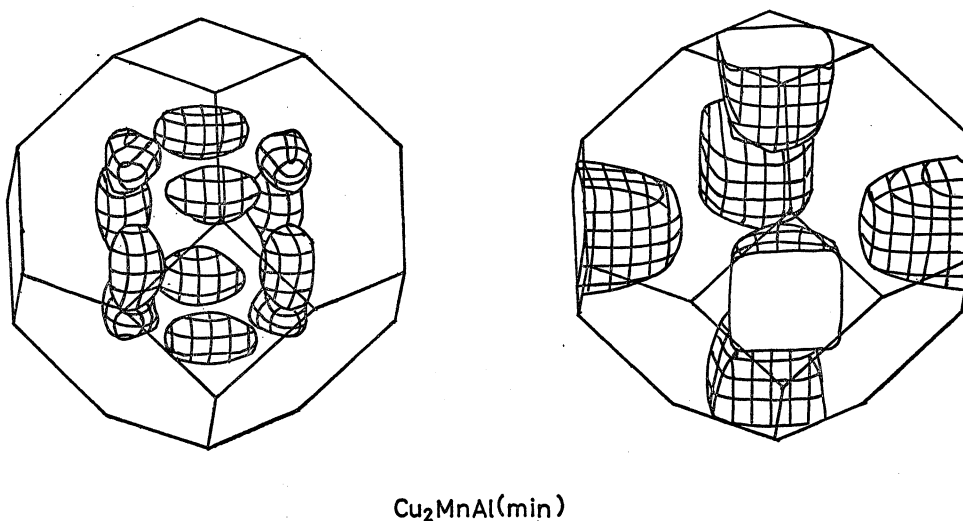


図7  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  の *minority-spin* 電子に対するフェルミ面。左側の面は *hole-like*, 右側は *electron-like* な面である。

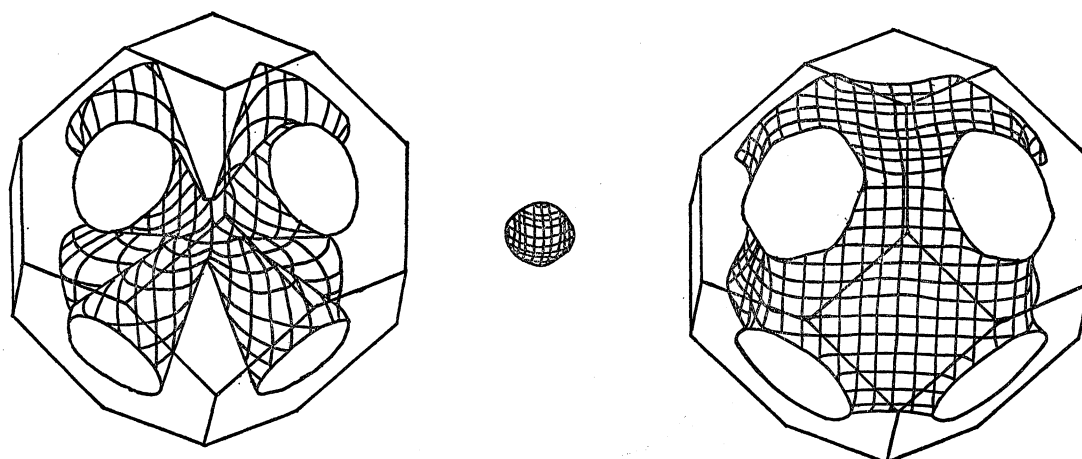
Pd<sub>2</sub>MnSn(min)

図8 Pd<sub>2</sub>MnSn の *minority-spin* 電子に対するフェルミ面。中央の面は  $\Gamma$  点の回りに閉じている。

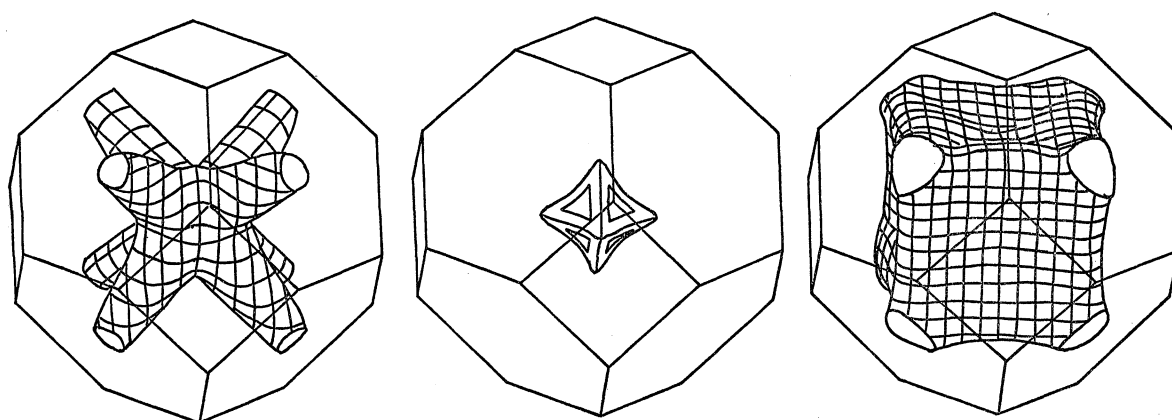
Ni<sub>2</sub>MnSn(min)

図9 Ni<sub>2</sub>MnSn の *minority-spin* 電子に対するフェルミ面。

面で立方体の角がとれた形をしている。

以上を示したフェルミ面上の電子の電荷の成分がどのようになっているかを、Ni<sub>2</sub>MnSn を例として表Ⅱに示している。*majority-spin* 電子に対し図4, 5, 6に示された面を夫々1, 2, 3番目の面であると番号付けする。1番目と3番目の面上ではNiの*d*-成分, Mnの*d*-成分とOPWの成分が大体夫々20%, 30%と50%であり, 同一フェルミ面上では, この成分の割合に大きな変化はみられない。2番目のフェルミ面上では成分の割合が幾分変化するが, 大体20%, 30%と50%の割合になっている。図4に示されている1番目のフェルミ面は球形に近いからOPWの成分がほとんどであろうと思われるが, NiとMnの*d*-成分が約50%である。

*minority-spin* 電子に対しては, 図9の中央に示された(1番目)のフェルミ面上では, 表ⅡにみられるようにOPWの成分が最も大きく約60%で, Niの*d*-成分は少なく10%程



表 II フェルミ面での電荷成分

Surface	Majority			Minority		
	Ni	Mn	OPW	Ni	Mn	OPW
1	20%	30%	50%	10%	30%	60%
2	20-30%	30%	50%	20-30%	20-30%	40-60%
3	20%	30%	50%	20-30%	30%	40-50%

記号 Ni, Mn と OPW は夫々 Ni の d- 成分, Mn の d- 成分, OPW の成分を表わす。

度である。図9の左側に示された(2番目)の面上では, OPW の成分は枝の根元から端の Brillouin zone に接する方向に 60% から 40% まで減少するが, Ni の d- 成分が 20% から 30% まで増加する。図9の右側に示された(3番目)の面上では中央部と Brillouin zone による切口附近を比べると, Ni の d- 成分は 20% から 50% へと増加し, OPW の成分が 50% から 40% へ減少している。

以上にみてきたように,  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ,  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  と  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  のフェルミ面の形状を比較すると, *majority-spin* 電子に対しては非常に似ており, *minority-spin* 電子に対しては個々の合金の特徴を示す互に異った形をしていることが分かる。また  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  を例としてフェルミ面上の電子の成分を調べると, いずれのフェルミ面上でも OPW の成分は約 50% で, 残りの 50% は Ni と Mn の d- 成分が寄与している。それ故, 電気伝導等, フェルミ面に関係してくる物理量は Ni と Mn の d 電子の寄与を無視出来ないことが分かる。フェルミ面は  $E(\mathbf{k})$  曲線のわずかなずれで, その形が異ったものになる。それ故ここで示したフェルミ面が実測でされるものと非常に良く一致するとは思えないが, これからなされるであろう実験の解析の重要な目安になるであろう。フェルミ面を反映する galvanomagnetic な実験がなされることが大いに期待される。

**謝辞** この研究を遂行するにあたって, 手助けして下さいった大塚祐二理学士に感謝致します。また, この研究は科学研究費の援助の下に遂行されました。

### References

- 1) Y. Noda and Y. Ishikawa: J. Phys. Soc. Jpn. **40** (1976) 690.
- 2) Y. Noda and Y. Ishikawa: J. Phys. Soc. Jpn. **40** (1976) 699.
- 3) K. Tajima *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **43** (1977) 483.
- 4) S. Ishida, J. Ishida, S. Asano and J. Yamashita: J. Phys. Soc. Jpn. **45** (1978) 1239.
- 5) S. Ishida, Y. Kubo, J. Ishida and S. Asano: J. Phys. Soc. Jpn. **48** (1980) 814.
- 6) S. Ishida, H. Asato, Y. Kubo and J. Ishida: Rep. Fac. Sci., Kagoshima Univ. (Math. Phys. & Chem.), No. 12 (1979) 47.
- 7) Y. Kubo, S. Ishida, J. Ishida and S. Asano: J. Phys. Soc. Jpn. **48** (1980) 407.
- 8) Y. Kuob, S. Ishida and J. Ishida: J. Phys. Soc. Jpn. submitted.
- 9) F.M. Mueller: Phys. Rev. **153** (1967) 569.
- 10) S. Ishida: J. Phys. Soc. Jpn. **33** (1972) 369.