

## Cu<sub>2</sub>MnAlのフェルミ面

著者	石田 尚治, 安里 肇, 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	12
ページ	47-58
別言語のタイトル	Fermi Surface of Cu <sub>2</sub> MnAl
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10232/00003972">http://hdl.handle.net/10232/00003972</a>

## Cu<sub>2</sub>MnAl の フェルミ面

石田 尚治\*・安里 肇\*  
久保 康則\*・石田 潤治\*

(1979年9月28日受理)

### Fermi Surface of Cu<sub>2</sub>MnAl

Shoji ISHIDA, Hajime ASATO, Yasunori KUBO and Junji ISHIDA

#### Abstract

An interpolation scheme which is applicable to Heusler alloys is developed as an extension of Mueller's method. The electronic structures of Cu<sub>2</sub>MnAl are calculated by the interpolation scheme. The parameters in the interpolation scheme are determined so as to reproduce the energy values calculated by SAPW method. The topology of the Fermi surface is determined.

#### § 1. 序 論

遷移金属を含む規則合金の磁氣的振舞いに関して多くの研究がなされて来た。規則合金の1つである Heusler 合金も、ここ 10 年間に内部磁場の測定や中性子回折によるスピン波の分散関係等が実験により求められ<sup>1-8)</sup>、その磁氣的に興味ある性質が詳細に調べられている。それらの実験結果はほとんど *s-d* 相互作用に基いて解析されているが、完全に説明できている訳ではない。それ故、バンド理論に基く電子構造の研究が望まれる。

著者らは、Heusler 合金の例として Cu<sub>2</sub>MnAl<sup>9)</sup> を取りあげ、その電子構造を SAPW 法より求めた。その際に得られた状態密度曲線から、1 分子当りの磁気モーメント  $3.8\mu_B$  のほとんどを Mn が担っていることを確めた。更に、Ni<sub>2</sub>MnSn<sup>10)</sup> と Pd<sub>2</sub>MnSn<sup>10)</sup> の2つの Heusler 合金についても同様の計算を行い、強磁性 Heusler 合金に共通な特徴を説明している。

一般に物理量を計算するときには、Brillouin zone (B-Z) 内の多くの点でエネルギーを計算する必要がある。このような場合、APW 法や KKR 法のような第一原理に基くバンド計算には多くの労力を必要とするから、Interpolation scheme が便利である。Mueller<sup>11)</sup> は combined interpolation scheme を提案し、fcc Ni に適用して、この方法が適切であることを示した。また、Ishida<sup>12)</sup> は hcp Co にこの方法を適用し、hcp 遷移金属に適用できるように拡張した。

この論文では更に結晶構造 L2<sub>1</sub> をもつ Heusler 合金に適用できるように Interpolation scheme を拡張する。そして実際に Cu<sub>2</sub>MnAl に適用し、SAPW 法より求めた  $E(\mathbf{k})$  曲線を再現出来ることを確める。一旦  $E(\mathbf{k})$  曲線を再現出来るように、Interpolation scheme のパラメーターを決定すると一般の  $\mathbf{k}$  点でのエネルギーは容易に計算できる。このようにして求められるエネルギーの固有値と固有関数から諸物理量が計算できる。Cu<sub>2</sub>MnAl の動的帯磁率  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ <sup>13)</sup> が、

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

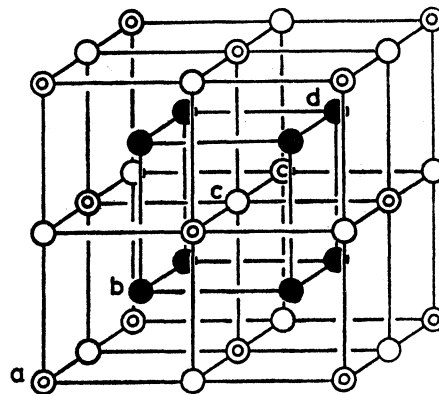
そのエネルギーの固有値と固有関数から計算され、Ishikawa 等<sup>7)</sup>の実測値とよい一致を示している。

著者等は  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ,  $\text{Ni}_2\text{MnSn}$  と  $\text{Pd}_2\text{MnSn}$  の3つの Heusler 合金の電子構造の計算の際に得られた  $E(k)$  曲線を比較し、これら3つの合金に対し、majority-spin states のフェルミ面は互いに似ているが minority-spin states のフェルミ面は可成り異っているであろうことを指摘した。いろいろな Heusler 合金でのフェルミ面の違いが、どのように個々の合金に反映されるかは興味あることである。手始めに、 $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  のフェルミ面がここで拡張される Interpolation scheme を使って求められ、それらが報告される。しかし、著者等の知る限りでは Heusler 合金のフェルミ面を直接反映するような実験結果がないために実験との比較ができない。この方面の実験が今後なされることが大いに望まれる。

## § 2. Formulation

この節では Mueller's combined interpolation scheme を化学式  $\text{X}_2\text{MnY}$  で与えられる Heusler 合金に拡張する。その結晶構造  $L2_1$  は Fig. 1 に図示されている。その直接格子の基本ベクトル  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$  は次式により与えられる。

$$\mathbf{a} = \frac{a}{2} (\mathbf{i} + \mathbf{j}), \quad \mathbf{b} = \frac{a}{2} (\mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{c} = \frac{a}{2} (\mathbf{k} + \mathbf{i}) \quad (1)$$



$L2_1$   $\text{X}_2\text{MnY}$

● X    ○ Mn    ⊙ Y

Fig. 1 Heusler 合金の結晶構造 ( $L2_1$ )

但し  $\mathbf{i}$ ,  $\mathbf{j}$ ,  $\mathbf{k}$  は単位直交ベクトルで、 $a$  は格子定数である。結晶中の各原子は、次式の位置  $\mathbf{R}_n^j$  にある。

$$\mathbf{R}_n^j = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c} + \boldsymbol{\tau}_j \quad (j = 0, 1, 2, 3) \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\tau}_j = \frac{ja}{4} (\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}). \quad (3)$$

ここで、 $n$  は整数で、 $\boldsymbol{\tau}$  は unit cell 内の4原子の位置を表わすベクトルであり、 $\boldsymbol{\tau}_0$  は Y 原子、 $\boldsymbol{\tau}_1$  と  $\boldsymbol{\tau}_3$  は X 原子、そして  $\boldsymbol{\tau}_2$  は Mn の位置を表わす。また、式 (1) より逆格子空間における

primitive vector  $\mathbf{b}$ , 及び逆格子ベクトル  $\mathbf{K}$  は次のように定義される。

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} (\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k})$$

$$\mathbf{K}_n = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3 \quad (n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (4)$$

ここで用いられる波動関数は次のように表わされる。X 原子と Mn の d-band を原子軌道関数の一次結合で表わし, X 原子と Mn 原子, 及び Y 原子による conduction band を orthogonalized plane wave (OPW's) で表わす。固有値方程式を

$$H\Phi_{nk}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\Phi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (5)$$

と表示し, 固有関数  $\Phi_{nk}(\mathbf{r})$  は LCAO's  $\Psi_{\mu k}(\mathbf{r})$  と, OPW's  $\phi_{\mathbf{K}k}(\mathbf{r})$  との一次結合で次式のよりに書き表わされる。

$$\Phi_{nk}(\mathbf{r}) = \sum_{j,\mu} a_{n\mu}(\mathbf{k}) \Psi_{\mu k}^j(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{K}} a_{n\mathbf{K}}(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{K}k}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

最初に X 原子と Mn の d- 軌道を表わす 15 個の LCAO's は次のように与えられる。

$$\Psi_{\mu k}^j(\mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_l e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l^j} \varphi_{\mu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^j) \quad (\mu = 1, 2, \dots, 5; j = 1, 2, 3) \quad (7)$$

ここで N は固体中の unit cell の数であり,  $\varphi_{\mu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^j)$  は位置  $\mathbf{R}_l^j$  に中心を持つ atomic orbital で動径波動関数  $g(\mathbf{r})$  を用いて次式で表示される。

$$\begin{aligned} \varphi_1(\mathbf{r}) &= (15/4\pi)^{1/2} xyg(\mathbf{r})/r^2 \\ \varphi_2(\mathbf{r}) &= (15/4\pi)^{1/2} yzg(\mathbf{r})/r^2 \\ \varphi_3(\mathbf{r}) &= (15/4\pi)^{1/2} zyg(\mathbf{r})/r^2 \\ \varphi_4(\mathbf{r}) &= (15/16\pi)^{1/2} (x^2 - y^2)g(\mathbf{r})/r^2 \\ \varphi_5(\mathbf{r}) &= (5/16\pi)^{1/2} (3z^2 - r^2)g(\mathbf{r})/r^2 \end{aligned} \quad (8)$$

ハミルトニアン of 行列要素を実数化するために, (7) 式を変換した次の 15 個の LCAO's を d-band の basis function として用いる。

$$\begin{aligned} \Psi_{\mu k}(\mathbf{r}) &= \Psi_{\mu k}^2(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\mu+5k}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_{\mu k}^1(\mathbf{r}) + \Psi_{\mu k}^3(\mathbf{r}) \} \\ \Psi_{\mu+10k}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2}i} \{ \Psi_{\mu k}^1(\mathbf{r}) - \Psi_{\mu k}^3(\mathbf{r}) \} \\ &(\mu = 1, 2, \dots, 5) \end{aligned} \quad (9)$$

即ち, 最初の 5 個が Mn の d- 軌道, 残りの 10 個が X 原子の d- 軌道を表わす。

次に conduction band を表わす OPW's は次の形を持つ。

$$\phi_{\mathbf{K}k}(\mathbf{r}) = [N^{-1/2} \exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{K})\mathbf{r}\} - \sum_n M_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \Psi_{nk}(\mathbf{r})] C_{\mathbf{K}k}^{-1} \quad (10)$$

ここで, 規格化定数  $C_{\mathbf{K}k}$  は

$$C_{\mathbf{K}k}^2 = 1 - \sum_n |M_n(\mathbf{k} + \mathbf{K})|^2$$

で与えられ,  $M_n(\mathbf{k} + \mathbf{K})$  は LCAO's と OPW's との直交条件から次のように与えられる。

$$M_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = \begin{cases} e^{i\mathbf{K}\tau_2} F_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) f(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) & 1 \leq n \leq 5 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\mathbf{K}\tau_1} + e^{i\mathbf{K}\tau_3}) F_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) f(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) & 6 \leq n \leq 10 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} (e^{i\mathbf{K}\tau_1} - e^{i\mathbf{K}\tau_3}) F_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) f(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) & 11 \leq n \leq 15 \end{cases} \quad (11)$$

ここで,  $F_n$  は cubic harmonics で,  $f(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|)$  は 2 次の spherical Bessel function  $j_2$  で与えられる。

$$\begin{aligned} F_\mu(\mathbf{k} + \mathbf{K}) &= F_{\mu+5}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = F_{\mu+10}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \\ &= (15/4\pi)^{1/2} (\mathbf{k} + \mathbf{K})_i (\mathbf{k} + \mathbf{K})_j / |\mathbf{k} + \mathbf{K}|^2 \\ F_4(\mathbf{k} + \mathbf{K}) &= F_9(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = F_{14}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \\ &= (15/16\pi)^{1/2} \{ (\mathbf{k} + \mathbf{K})_x^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{K})_y^2 \} / |\mathbf{k} + \mathbf{K}|^2 \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} F_5(\mathbf{k} + \mathbf{K}) &= F_{10}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = F_{15}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \\ &= (5/16\pi)^{1/2} \{ 3(\mathbf{k} + \mathbf{K})_z^2 - |\mathbf{k} + \mathbf{K}|^2 \} / |\mathbf{k} + \mathbf{K}|^2 \\ (\mu, i, j) &= (1, x, y), (2, y, z), (3, z, x) \\ f(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) &= A j_2(|\mathbf{k} + \mathbf{K}| R_0) \end{aligned} \quad (13)$$

また (10) に現われる平面波は次の 31 個の逆格子ベクトルで規定されるものを用いた。

$$\begin{aligned} &(000), (\bar{1}\bar{1}\bar{1}), (111), (11\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}1), (\bar{1}\bar{1}\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}1), \\ &(11\bar{1}), (200), (\bar{2}00), (020), (0\bar{2}0), (002), (00\bar{2}), (\bar{2}20), (\bar{2}02), \\ &(\bar{2}\bar{2}0), (\bar{2}02), (0\bar{2}\bar{2}), (02\bar{2}), (022), (0\bar{2}2), (202), (20\bar{2}), (\bar{2}20), \\ &(220), (\bar{1}\bar{1}\bar{3}), (11\bar{3}), (\bar{1}\bar{1}\bar{3}), (\bar{1}\bar{1}\bar{3}). \end{aligned} \quad (14)$$

(9), (10) に与えられた basis functions を用いると,  $46 \times 46$  行列のハミルトニアンは次の様なブロック形になる。

$$\begin{pmatrix} d-d & d-c \\ c-d & c-c \end{pmatrix} \quad (15)$$

ここで  $d$  と  $c$  はそれぞれ  $d$ -band と conduction band を意味する。 $d-d$  ブロックの行列要素は, Slater and Koster の tight binding approximation<sup>14)</sup> の方法に従って求められる。third nearest neighbors までの原子間の相互作用を考慮すると  $d-d$  ブロックは, 次のような  $15 \times 15$  の行列になる。

$$\begin{pmatrix} A' & \sqrt{2}B & \sqrt{2}C \\ \sqrt{2}B & A+D & 0 \\ \sqrt{2}C & 0 & A-D \end{pmatrix} \quad (16)$$

ここで  $A, A', B, C, D$  は  $5 \times 5$  行列で Table I. に与えられている。

Table I.  $d$ - $d$  ブロック行列要素。5×5 行列は全て対称行列である。 $\sigma, \pi, \delta$  は Slater and Koster<sup>14)</sup> の  $(dd\sigma)$ ,  $(dd\pi)$ ,  $(dd\delta)$  を表わす。添字 31, 32 は第3隣接原子間の相互作用パラメーターの Mn-Mn 間, X-X 原子間を区別する。

$$\begin{aligned}
(A \pm D)_{11} &= d\varepsilon_{Cu} + E_1 \cos \xi/2 \cos \eta/2 + E_2 (\cos \eta/2 \cos \zeta/2 + \cos \zeta/2 \cos \xi/2) \\
&\quad \pm \{2\pi_2 (\cos \xi/2 + \cos \eta/2) + 2\delta_2 \cos \zeta/2\} \\
(A \pm D)_{12} &= E_6 \sin \zeta/2 \sin \xi/2 \\
(A \pm D)_{13} &= E_6 \sin \eta/2 \sin \zeta/2 \\
(A \pm D)_{14} &= 0 \\
(A \pm D)_{15} &= 2E_7 \sin \xi/2 \sin \eta/2 \\
(A \pm D)_{22} &= d\varepsilon_{Cu} + E_1 \cos \eta/2 \cos \zeta/2 + E_2 (\cos \xi/2 \cos \eta/2 + \cos \zeta/2 \cos \xi/2) \\
&\quad \pm \{2\pi_2 (\cos \eta/2 + \cos \zeta/2) + 2\delta_2 \cos \xi/2\} \\
(A \pm D)_{23} &= E_6 \sin \xi/2 \sin \eta/2 \\
(A \pm D)_{24} &= \sqrt{3} E_7 \sin \eta/2 \sin \zeta/2 \\
(A \pm D)_{25} &= -E_7 \sin \eta/2 \sin \zeta/2 \\
(A \pm D)_{33} &= d\varepsilon_{Cu} + E_1 \cos \xi/2 \cos \zeta/2 + E_2 (\cos \eta/2 \cos \zeta/2 + \cos \xi/2 \cos \eta/2) \\
&\quad \pm \{2\pi_2 (\cos \xi/2 + \cos \zeta/2) + 2\delta_2 \cos \eta/2\} \\
(A \pm D)_{34} &= -3E_7 \sin \xi/2 \sin \zeta/2 \\
(A \pm D)_{35} &= -E_7 \sin \xi/2 \sin \zeta/2 \\
(A \pm D)_{44} &= d\gamma_{Cu} + 4\pi_{32} \cos \xi/2 \cos \eta/2 + E_3 (\cos \xi/2 \cos \zeta/2 + \cos \eta/2 \cos \zeta/2) \\
&\quad \pm \{3/2\sigma_2 (\cos \xi/2 + \cos \eta/2) + 1/2\delta_2 (\cos \xi/2 + \cos \eta/2 + 4 \cos \zeta/2)\} \\
(A \pm D)_{45} &= E_4 (\cos \xi/2 \cos \eta/2 - \cos \eta/2 \cos \zeta/2) \pm \{-E_7 (\cos \xi/2 - \cos \eta/2)\} \\
(A \pm D)_{55} &= d\gamma_{Cu} + E_5 (4 \cos \xi/2 \cos \eta/2 + \cos \eta/2 \cos \zeta/2 + \cos \zeta/2 \cos \xi/2) \\
&\quad + 3\pi_{32} (\cos \eta/2 \cos \zeta/2 + \cos \zeta/2 \cos \xi/2) \pm \{\sigma_2 (1/2 \cos \xi/2 \\
&\quad + 1/2 \cos \eta/2 + 2 \cos \zeta/2) + 3/2\delta_2 (\cos \xi/2 + \cos \eta/2)\} \\
\\
A'_{11} &= d\varepsilon_{Mn} + F_1 \cos \xi/2 \cos \eta/2 + F_2 (\cos \eta/2 \cos \zeta/2 + \cos \zeta/2 \cos \xi/2) \\
A'_{12} &= F_6 \sin \zeta/2 \sin \xi/2 \\
A'_{13} &= F_6 \sin \eta/2 \sin \zeta/2 \\
A'_{14} &= 0 \\
A'_{15} &= F_7 \sin \xi/2 \sin \eta/2 \\
A'_{22} &= d\varepsilon_{Mn} + F_1 \cos \eta/2 \cos \zeta/2 + F_2 (\cos \xi/2 \cos \eta/2 + \cos \zeta/2 \cos \xi/2) \\
A'_{23} &= F_6 \sin \xi/2 \sin \eta/2 \\
A'_{24} &= 3F_7 \sin \eta/2 \sin \zeta/2 \\
A'_{25} &= -F_7 \sin \eta/2 \sin \zeta/2 \\
A'_{33} &= d\varepsilon_{Mn} + F_1 \cos \xi/2 \cos \zeta/2 + F_2 (\cos \eta/2 \cos \zeta/2 + \cos \xi/2 \cos \eta/2) \\
A'_{34} &= -3F_7 \sin \xi/2 \sin \zeta/2 \\
A'_{35} &= -F_7 \sin \xi/2 \sin \zeta/2 \\
A'_{44} &= d\gamma_{Mn} + 4\pi_{31} \cos \xi/2 \cos \eta/2 + F_3 (\cos \xi/2 \cos \zeta/2 + \cos \eta/2 \cos \zeta/2) \\
A'_{45} &= F_4 (\cos \xi/2 \cos \zeta/2 - \cos \eta/2 \cos \zeta/2) \\
A'_{55} &= d\gamma_{Mn} + F_5 (4 \cos \xi/2 \cos \eta/2 + \cos \eta/2 \cos \zeta/2 + \cos \xi/2 \cos \zeta/2) \\
&\quad + 3\pi_{31} (\cos \eta/2 \cos \zeta/2 + \cos \xi/2 \cos \zeta/2) \\
\\
B_{11} &= G_1 \cos \xi/4 \cos \eta/4 \cos \zeta/4 & B_{25} &= -\sqrt{3} G_3 \cos \xi/4 \sin \eta/4 \sin \zeta/4 \\
B_{12} &= -G_2 \sin \xi/4 \cos \eta/4 \sin \zeta/4 & B_{33} &= G_1 \cos \xi/4 \cos \eta/4 \cos \zeta/4 \\
B_{13} &= -G_3 \cos \xi/4 \sin \eta/4 \sin \zeta/4 & B_{34} &= -3 G_3 \sin \xi/4 \cos \eta/4 \sin \zeta/4 \\
B_{14} &= 0 & B_{35} &= -\sqrt{3} G_3 \sin \xi/4 \cos \eta/4 \sin \zeta/4 \\
B_{15} &= 2\sqrt{3} G_3 \sin \xi/4 \sin \eta/4 \cos \zeta/4 & B_{44} &= G_4 \cos \xi/4 \cos \eta/4 \cos \zeta/4 \\
B_{22} &= G_1 \cos \xi/4 \cos \eta/4 \cos \zeta/4 & B_{45} &= 0 \\
B_{23} &= -G_2 \sin \xi/4 \sin \eta/4 \cos \zeta/4 & B_{55} &= G_4 \cos \xi/4 \cos \eta/4 \cos \zeta/4 \\
B_{24} &= G_3 \cos \xi/4 \sin \eta/4 \sin \zeta/4 \\
\\
C_{11} &= G_1 \sin \xi/4 \sin \eta/4 \sin \zeta/4 & C_{22} &= G_1 \sin \xi/4 \sin \eta/4 \sin \zeta/4 \\
C_{12} &= -G_1 \cos \xi/4 \sin \eta/4 \cos \zeta/4 & C_{23} &= -G_2 \cos \xi/4 \cos \eta/4 \sin \zeta/4
\end{aligned}$$

Table I. (Continued)

$C_{13} = -G_2 \sin \xi/4 \cos \eta/4 \cos \zeta/4$	$C_{24} = 3G_3 \sin \xi/4 \cos \eta/4 \cos \zeta/4$
$C_{14} = 0$	$C_{25} = -\sqrt{3} G_3 \sin \xi/4 \cos \eta/4 \cos \zeta/4$
$C_{15} = 2\sqrt{3} G_3 \cos \xi/4 \cos \eta/4 \sin \zeta/4$	$C_{33} = G_1 \sin \xi/4 \sin \eta/4 \sin \zeta/4$
$C_{34} = -3G_3 \cos \xi/4 \sin \eta/4 \cos \zeta/4$	$C_{45} = 0$
$C_{35} = -\sqrt{3} G_3 \cos \xi/4 \sin \eta/4 \cos \zeta/4$	$C_{55} = G_4 \sin \xi/4 \sin \eta/4 \sin \zeta/4$
$C_{44} = G_4 \sin \xi/4 \sin \eta/4 \sin \zeta/4$	
$E_1 = 3\sigma_{32} + \delta_{32}$	$E_2 = 2(\pi_{32} + \delta_{32})$
$E_3 = 1/4(3\sigma_{32} + 4\pi_{32} + 9\delta_{32})$	$E_4 = \sqrt{3}/4(\sigma_{32} - 4\pi_{32} + 3\delta_{32})$
$E_5 = 1/4(\sigma_{32} + 3\delta_{32})$	$E_6 = 2(-\pi_{32} + \delta_{32})$
$E_7 = \sqrt{3}/2(\sigma_{32} - \delta_{32})$	
$F_1 = 3\sigma_{31} + \delta_{31}$	$F_2 = 2(\pi_{31} + \delta_{31})$
$F_3 = 1/4(3\sigma_{31} + 4\pi_{31} + 9\delta_{31})$	$F_4 = \sqrt{3}/4(\sigma_{31} - 4\pi_{31} + 3\delta_{31})$
$F_5 = 1/4(\sigma_{31} + 3\delta_{31})$	$F_6 = 2(-\pi_{31} + \delta_{31})$
$F_7 = \sqrt{3}/2(\sigma_{31} - \delta_{31})$	
$G_1 = 4/9(3\sigma_1 + 2\pi_1 + 4\delta_1)$	$G_2 = 4/9(3\sigma_1 - \pi_1 - 2\delta_1)$
$G_3 = 4/9(\pi_1 - \delta_1)$	$G_4 = 4/3(2\pi_1 + \delta_1)$
$\xi = k_x a, \quad \eta = k_y a, \quad \zeta = k_z a$	

C-C ブロックの行列要素は,

$$\langle \phi_{\mathbf{K}k}(\mathbf{r}) | H | \phi_{\mathbf{K}'k'}(\mathbf{r}) \rangle = C_{\mathbf{K}k}^{-1} C_{\mathbf{K}'k'}^{-1} [H_1 + H_2 + H_3] \quad (17)$$

となり,  $\hbar^2/2m = 1$  と単位をとると,

$$H_1 = \{(\mathbf{k} + \mathbf{K})^2 + V_0\} \delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} + V_{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}(1 - \delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}), \quad (18)$$

$$H_2 = \sum_{nn'}^{15} M_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) M_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{K}') H_{nn'} \quad (19)$$

$$H_3 = - \sum_n^{15} \{C_{\mathbf{K}k} P_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) M_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}') + C_{\mathbf{K}'k'} P_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}') M_n(\mathbf{k} + \mathbf{K})\} \quad (20)$$

$$P_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = \begin{cases} e^{i\mathbf{K}\tau_3} F_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) g(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) & 1 \leq n \leq 5 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\mathbf{K}\tau_1} + e^{i\mathbf{K}\tau_3}) F_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) g(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) & 6 \leq n \leq 10 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} (e^{i\mathbf{K}\tau_1} - e^{i\mathbf{K}\tau_3}) F_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) g(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) & 11 \leq n \leq 15 \end{cases} \quad (21)$$

$$g(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) = B j_2(|\mathbf{k} + \mathbf{K}| R_1) \quad (22)$$

と表わされる。ここで, (18) の  $V_{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}$  は Pseudo potential parameters で (14) で与えられた  $|\mathbf{K}|$  よりも大きい  $|\mathbf{K}-\mathbf{K}'|$  に対しては  $V_{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}=0$  としている。ポテンシャルの対称性から, これらは次の7つのもので表示される。

$$V_0 = V_{000}, \quad V_1 = V_{111}, \quad V_2 = V_{200}, \quad V_3 = V_{220}, \quad V_4 = V_{311}, \\ V_5 = V_{222}, \quad V_6 = V_{400}.$$

(19) の  $H_{nn'}$  は  $d-d$  ブロックの行列要素である。  $c-d$  と  $d-c$  ブロックの行列要素は

$$\langle \phi_{\mathbf{K}k}(r) | H | \Psi_{n\mathbf{k}}(r) \rangle = P_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \quad (23)$$

で与えられ、  $P_n$  は (21) に与えられているものである。 (13) と (22) の  $f(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|)$  と  $g(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|)$  は大きい  $|\mathbf{k} + \mathbf{K}|$  に対しては Mueller 流に次のように近似される。

$$f(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) = \begin{cases} Aj_2(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|R_0) & 0 \leq |\mathbf{k} + \mathbf{K}| \leq L_1 \\ -Aj_2(L_1R_0) \frac{|\mathbf{k} + \mathbf{K}| - L_2}{L_2 - L_1} & L_1 \leq |\mathbf{k} + \mathbf{K}| \leq L_2 \\ 0 & L_2 \leq |\mathbf{k} + \mathbf{K}| \end{cases} \quad (24)$$

$$g(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|) = \begin{cases} Bj_2(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|R_1) & 0 \leq |\mathbf{k} + \mathbf{K}| \leq L_3 \\ -Bj_2(L_3R_1) \frac{|\mathbf{k} + \mathbf{K}| - L_4}{L_4 - L_3} & L_3 \leq |\mathbf{k} + \mathbf{K}| \leq L_4 \\ 0 & L_4 \leq |\mathbf{k} + \mathbf{K}| \end{cases} \quad (25)$$

ここに表われる  $A, B, R_0, R_1, L_1, L_2, L_3, L_4$  は  $Mn$  と  $X$  原子に対しては異った値を用いた。

### § 3. Results

第2節で数式化した様に、結晶構造  $L2_1$  を持つ Heusler 合金に対する interpolation scheme には 39 個のパラメーターがある。SAPW 法より求めた Cu<sub>2</sub>MnAl の  $\mathbf{E}(\mathbf{k})$  曲線を再現するようにこれらのパラメーターを決定した値が Table II に与えられている。この Interpolation

Table II. 用いたパラメータの値。↓印は majority-spin, ↑印は minority-spin 電子を区別する。

Parameter	↑	↓	Parameter	↑	↓
$d\epsilon_{Mn}$	-0.306	-0.51	$V_4$	0.018	0.018
$d\gamma_{Mn}$	-0.3233	-0.5258	$V_5$	-0.058	-0.042
$d\epsilon_{Cu}$	-0.6394	-0.6565	$V_6$	-0.044	-0.04
$d\gamma_{Cu}$	-0.6190	-0.6	$A_{Mn}$	0.38	0.301
$dd\sigma_1$	-0.0188	-0.022	$A_{Cu}$	0.934	0.574
$dd\pi_1$	0.0072	0.0122	$R_{0Mn}$	3.3	3.3
$dd\delta_1$	0.0025	0.0025	$R_{0Cu}$	3.4	3.4
$dd\sigma_2$	-0.0173	-0.0173	$L_{1Mn}$	0.91	0.91
$dd\pi_2$	0.01	0.01	$L_{1Cu}$	1.06	1.16
$dd\delta_2$	-0.0025	-0.0025	$L_{2Mn}$	1.56	1.61
$dd\sigma_{31}$	-0.0020	-0.0020	$L_{2Cu}$	1.65	1.7
$dd\pi_{31}$	-0.0022	-0.0022	$B_{Mn}$	-0.56	-0.7
$dd\delta_{31}$	0.0025	0.0025	$B_{Cu}$	-0.478	-0.438
$dd\sigma_{32}$	-0.0021	-0.0021	$R_{1Mn}$	3.78	3.48
$dd\pi_{32}$	-0.0022	-0.0022	$R_{1Cu}$	3.68	3.38
$dd\delta_{32}$	0.0025	0.0025	$L_{3Mn}$	1.015	1.015
$V_0$	-1.19	-1.198	$L_{3Cu}$	1.085	1.045
$V_1$	-0.0571	-0.0601	$L_{4Mn}$	1.38	1.43
$V_2$	0.0268	0.0205	$L_{4Cu}$	1.38	1.43
$V_3$	0.048	0.043			



scheme を用いて得られたエネルギー値の誤差の root mean square は、対称性の良い 20 個の  $k$  点において majority-spin に対しては 0.013 Ry, minority-spin に対しては 0.011 Ry である。unit cell 内に 4 原子含む物質に対してはこの程度の一致で十分である。SAPW 法により得られた状態密度曲線と interpolation scheme によるものとの比較が Fig. 2 と Fig. 3 になされている。majority-spin と minority-spin 共に SAPW 法による結果を良く再現していることが分る。Fig. 4~Fig. 14 に Fermi Surface を示す。Fig. 4 は majority-spin の最小のもので  $\Gamma$  点を中心

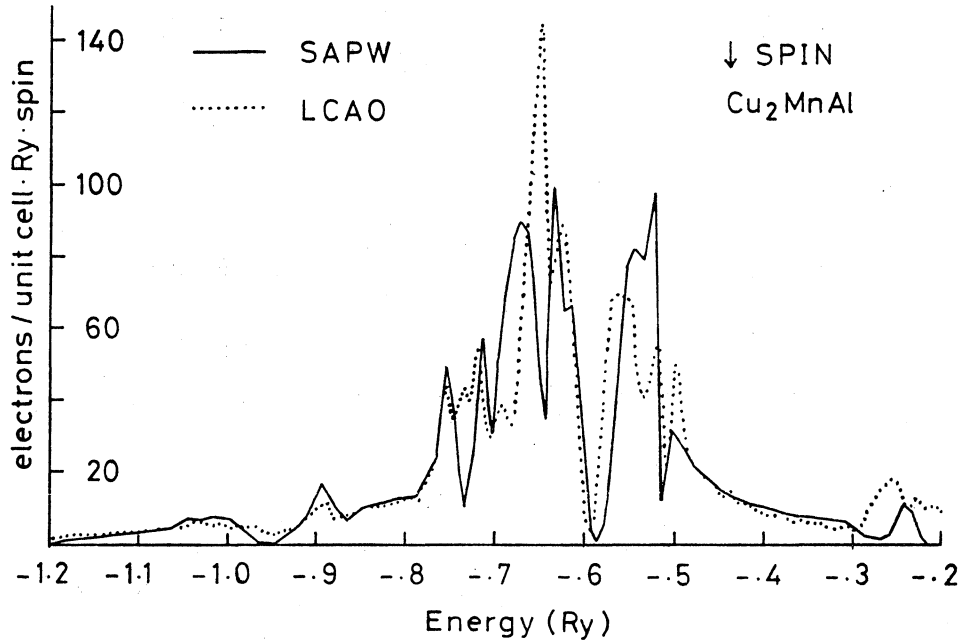


Fig. 2 SAPW 法と Interpolation scheme により求められた状態密度曲線の比較 (majority-spin states)

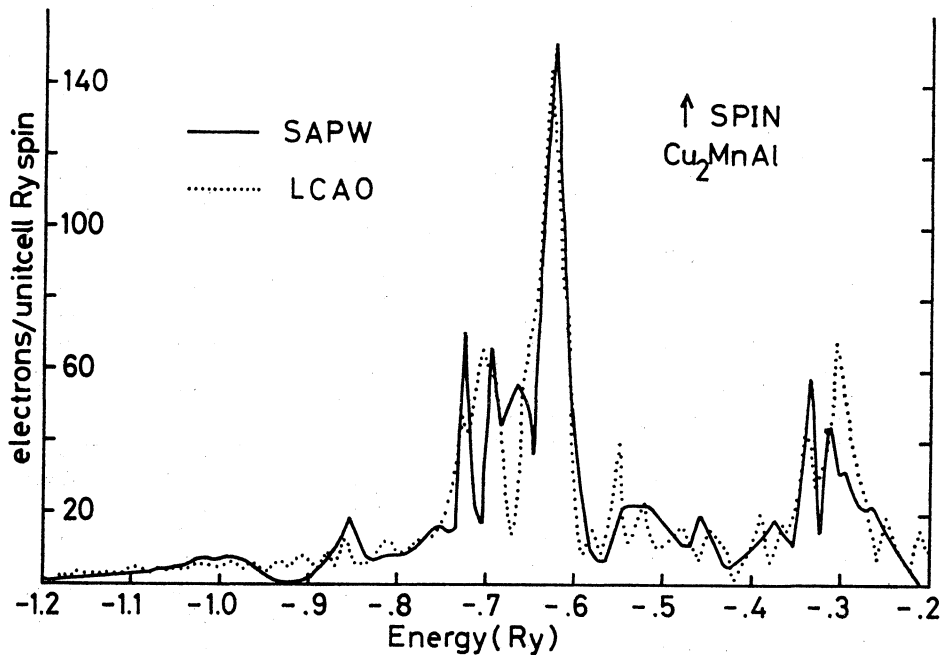


Fig. 3 状態密度曲線の比較 (minority-spin states)

にして、まるみを帯びた2つの四角錐を重ねた形をし、hole like なフェルミ面である。Fig. 5 は2番目に小さいもので、銅のフェルミ面に以て8個の  $L$  点の方向、即ち  $\langle 111 \rangle$  方向に枝を持った形をし、そこで B-Z の境界に接している。やはり hole like な面である。Fig. 6 には、Fig. 5 の曲面の (100) 面での断面図を明示しており、まるみを帯びた四角形をし、closed hole orbit が出来る。Fig. 7 は同じく Fig. 5 の (110) 面での断面図で、断面は X 字形をしており、extended zone scheme で書くと、electron like な closed orbit ができる。それを Fig. 8 に示

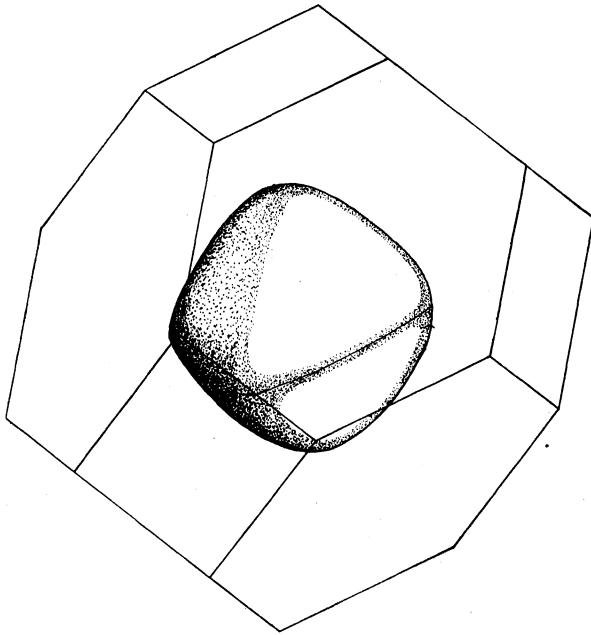


Fig. 4 majority-spin 電子の最小のフェルミ面

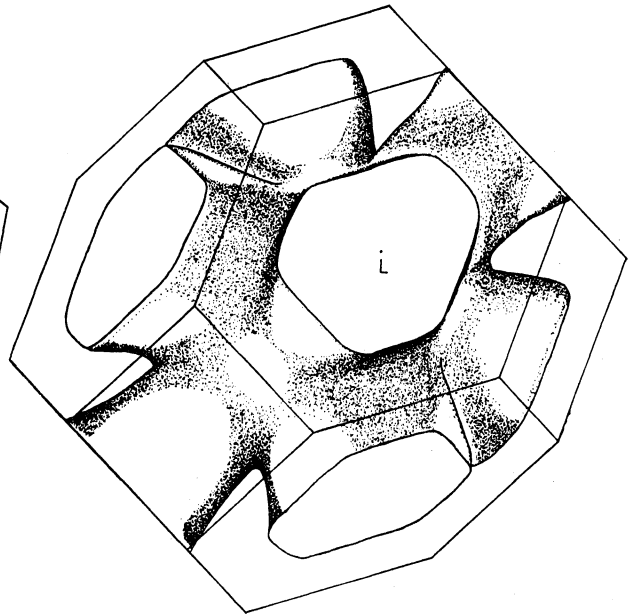


Fig. 5 majority-spin 電子の二番目のフェルミ面

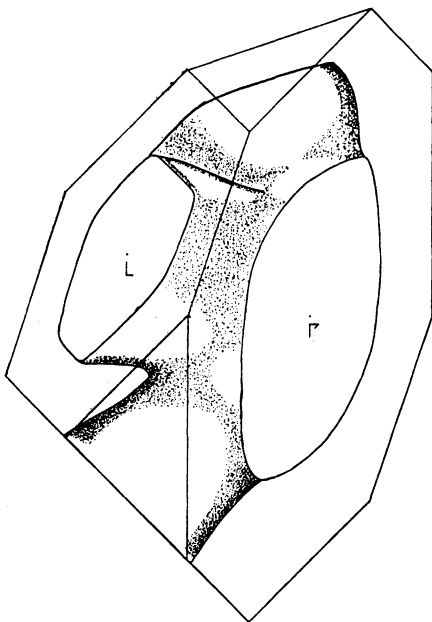


Fig. 6 Fig. 5 の (100) 面での断面図

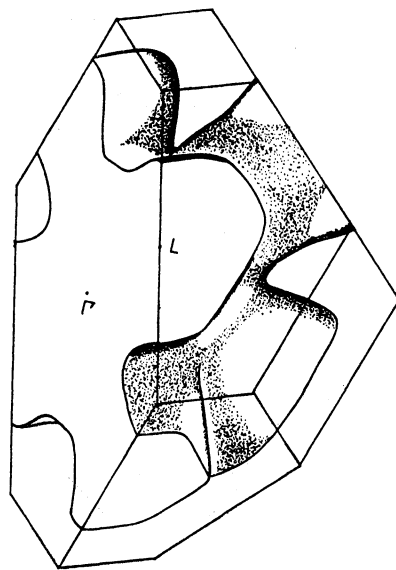


Fig. 7 Fig. 5 の (110) 面での断面図

している。Fig. 9 が majority-spin の最も大きいフェルミ面で、Fig. 5 と同じ様に  $L$  点で  $B-Z$  に接触しており、やはり hole like な面である。Fig. 10, Fig. 11 は共に Fig. 9 の断面図でそれぞれ (100), (110) 面での断面図である。Fig. 10 では四角形の各辺の中心が少しへこんだ様な形をしており、hole like の closed orbit が出来る。Fig. 11 を extended zone scheme で書くと、electron like の closed orbit が出来る。それを Fig. 12 に示す。次に minority-spin electrons の2つのフェルミ面を見てみる。Fig. 13 がそのうちの1つで、 $X$  点の回りで  $B-Z$  と接触して

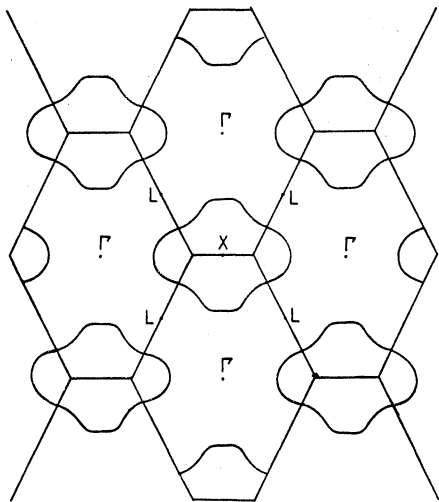


Fig. 8 Fig. 7 の断面図を extended zone scheme で書いた図。

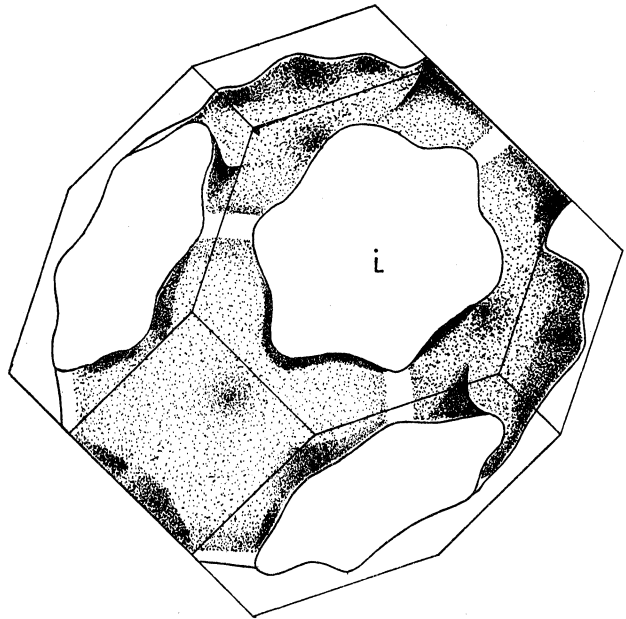


Fig. 9 majority-spin 電子の最大のフェルミ面

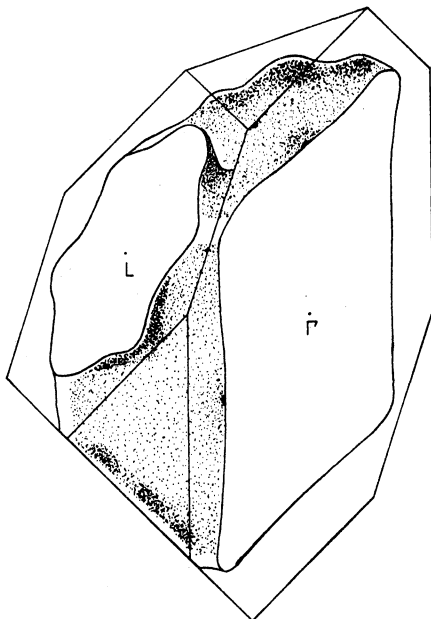


Fig. 10 Fig. 9 の (100) 面での断面図

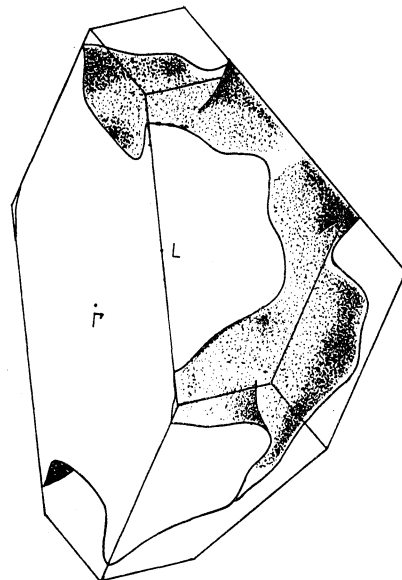


Fig. 11 Fig. 10 の (110) 面での断面図

いる。extended zone scheme で画くと、四角柱のフェルミ面が出来る。これは、electron like な面である。Fig. 14 が 2 番目のもので、 $\Gamma$  と  $K$  点を結ぶ  $\Sigma$  軸上にあり UFO の様な形をしており、1st B-Z 内に 12 個ある。これは hole like な closed 面である。

Cu<sub>2</sub>MnAl には、unit cell 内に  $d$ -電子と伝導電子が合計 32 個あり、このうち majority-spin states に 16 個の full zones と 3 個の hole zones, minority-spin states に 13 個の full zones と 1 個の electron zone と 1 個の hole zone がある。これらのことから carrier の net number

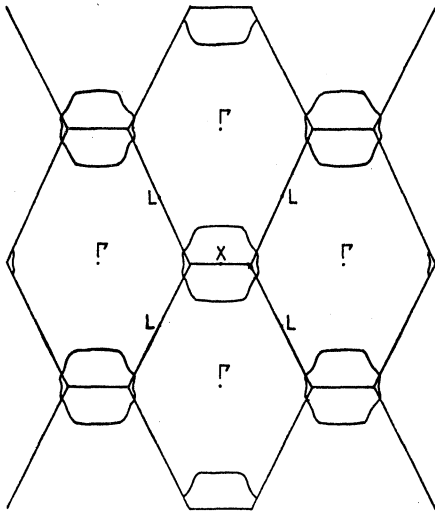


Fig. 12 Fig. 11 の断面図を extended zone scheme で書いた図

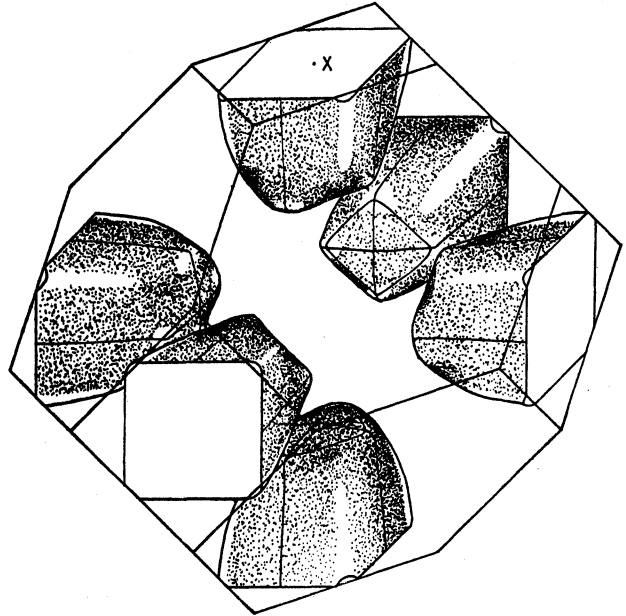


Fig. 13 minority-spin 電子の electron like なフェルミ面

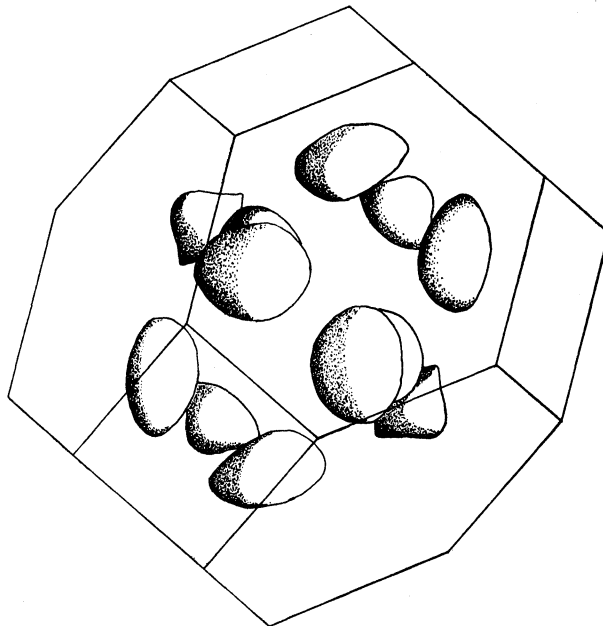


Fig. 14 minority-spin 電子の hole like なフェルミ面

は1であり,  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  の電子と hole は un-compensate であることが分る。それ故, 磁場方向により closed orbit しか出来ない場合には磁気抵抗は磁場に対し飽和し, 磁場を回転すると open orbit が出来る方向に対しては極値が表われる筈である。しかし, 現在のところ De Haas-van Alphen effect や磁気抵抗効果のようなフェルミ面を検証する galvanomagnetic experiments がないので, フェルミ面のトポロジーを実験と比較することは出来ない。フェルミ面のトポロジーは, conduction-band と  $d$ -band の間のエネルギー差に強く依存しており, このエネルギー差は用いるポテンシャルに非常に敏感である。それ故ここで求めたフェルミ面が今後観測されるであろうものと非常に良い一致を示すことは期待できない。しかし, それらがこれからなされる実験データの解析の重要な目安となるであろう。

### References

- 1) S. Ogawa and J. Smit: J. Phys. Chem. Solids **30** (1969) 657.
- 2) L.D. Kohi *et al.*: Phys. Lett. **33A** (1970) 435.
- 3) W. Leiper, D.J.W. Geldart and P.J. Pothier: Phys. Rev. **B3** (1971) 1637.
- 4) T. Shinohara: J. Phys. Soc. Jpn. **27** (1969) 1127.
- 5) T. Shinohara: J. Phys. Soc. Jpn. **28** (1970) 313.
- 6) Y. Ishikawa, K. Tajima and P. Radhakrishna: J. Phys. Soc. Jpn. **50** (1976), 1597.
- 7) Y. Noda and Y. Ishikawa: J. Phys. Soc. Jpn. **40** (1976) 690.
- 8) Y. Noda and Y. Ishikawa: J. Phys. Soc. Jpn. **40** (1976) 699.
- 9) S. Ishida, J. Ishida, S. Asano and J. Yamashita: J. Phys. Soc. Jpn. **45** (1978) 1239.
- 10) S. Ishida, Y. Kubo, J. Ishida and S. Asano: to be published.
- 11) F.M. Mueller: Phys. Rev. **153** (1967) 569.
- 12) S. Ishida: J. Phys. Soc. Jpn. **33** (1972) 369.
- 13) Y. Kubo, S. Ishida, J. Ishida and S. Asano: to be published.
- 14) J.C. Slater and C.F. Koster: Phys. Rev. **94** (1954), 1111.