

第一原理計算によるメタ磁性 $L1_0$ -MnAl の磁気構造の解析

First-principle study of the magnetic structure of metamagnetic $L1_0$ -MnAl

TDK 株式会社¹ ○宮崎 貴史¹, 佐藤 卓¹, 梅田 裕二¹

TDK Corporation¹, Takashi Miyazaki¹, Suguru Sato¹, Yuji Umeda¹

E-mail: tmiyazaki@jp.tdk.com

MnAl の強磁性相は、Mn 比率が 55~60% の Mn リッチ組成で $L1_0$ 型の結晶構造であることが知られている[1]。最近、我々は熔融塩電析法により作製した MnAl 合金に熱処理を施すことで、ある磁場で急激に磁化が増加するメタ磁性的挙動を示すことを報告した[2]。そこで本発表では、 $L1_0$ -MnAl におけるメタ磁性発現メカニズムについて、第一原理計算を用いた解析結果を報告する。

本研究では、メタ磁性発現のメカニズムに関して $L1_0$ -MnAl の反強磁性化の可能性を検討するために、完全規則化状態の $L1_0$ -MnAl における強磁性と反強磁性の解析を行った。ここで、第一原理計算のソフトウェアとしては VASP を使用した。交換相関ポテンシャルは GGA-PBEsol を用いた。

$L1_0$ 型結晶構造を持つ MnAl の $2 \times 2 \times 2$ スーパーセルを作成し、スーパーセル中の各 Mn の磁気モーメントの向きを変えることにより、図 1 に示す通り強磁性、及び磁気モーメントの向きが異なる Mn の配置がそれぞれ異なる 3 種の反強磁性の磁気構造を示す計算モデルを作成した。

$L1_0$ -MnAl の磁気構造ごとの全エネルギー計算結果を図 2 に示す。縦軸は強磁性における全エネルギー計算結果をゼロとした相対値で示している。図 2 より、 $L1_0$ -MnAl は反強磁性、特に c 軸方向に並んだ Mn の磁気モーメントが反平行な A 型反強磁性が最も安定であることがわかった。これは我々の実験結果と整合する計算結果である。当日は、全エネルギーの格子定数、Mn 濃度や規則度の依存性の計算結果から $L1_0$ -MnAl は反強磁性が安定となるメカニズムについても議論する。

[1] H. Kono, J. Phys. Soc. Jpn. **13**, 1444 (1958).

[2] S. Sato, and S. Irie, AIP Adv. **9**, 035015 (2019).

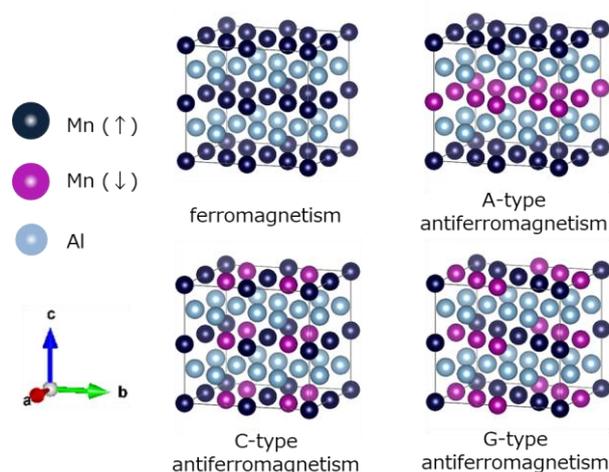


Fig.1 Magnetic structure of $L1_0$ -MnAl

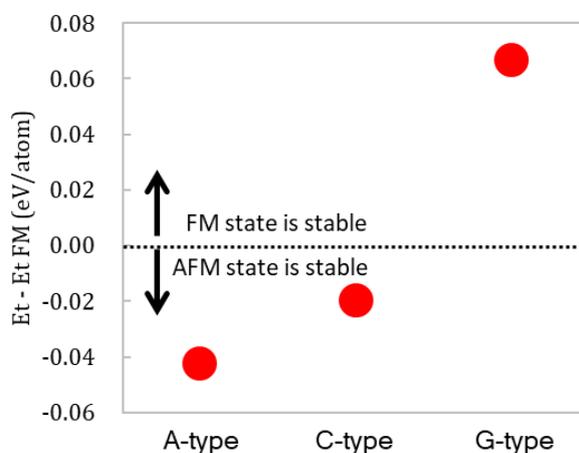


Fig.2 Calculation result for total energy of $L1_0$ -MnAl