

2 価のユウロピウムを含むペロブスカイト型酸化物の磁氣的性質

Magnetic Properties of Perovskite-type Oxides Containing Divalent Europium

○田中 勝久、藤田 晃司 (京大院工)

°Katsuhisa Tanaka, Koji Fujita (Kyoto Univ.)

E-mail: tanaka@dipole7.kuic.kyoto-u.ac.jp, fujita@dipole7.kuic.kyoto-u.ac.jp

Eu^{2+} を A サイトに持つペロブスカイト型酸化物 EuMO_3 (M は金属あるいはメタロイド元素) では、 $S=J=7/2$ に相当する磁気モーメントが Eu^{2+} サイトに局在し、不対電子が存在する 4f 軌道と他のイオンの原子軌道との重なりや、4f 電子と伝導電子の相互作用などに起因してさまざまな磁気秩序が形成される。本講演では、演者らがこれまで対象としてきたペロブスカイト型 EuMO_3 (M は Ti, Zr, Hf, Si, Nb) を中心に、結晶構造、電子構造と磁氣的性質について報告する。

EuTiO_3 、 EuZrO_3 、 EuHfO_3 はいずれも安定相が低温で反強磁性秩序を持つことが知られている。特に EuTiO_3 と EuZrO_3 では電気磁気効果が観察され、スピンと電気双極子がカップリングした系としても興味深い。 EuTiO_3 では格子歪みや格子体積の変化にともなう磁性と誘電性の顕著な変化が理論計算によって示され、実験的には EuTiO_3 薄膜を対象とした演者らの先駆的研究¹⁾によって、格子体積の準安定的な膨張が EuTiO_3 に強磁性秩序をもたらすことが明らかにされている。特に格子定数の異なる基板を用いることで EuTiO_3 薄膜の格子体積を系統的に変化させ、格子体積の増加にともない強磁性状態での磁化が単調に増加することを見いだした。 EuTiO_3 では最近接の Eu^{2+} の磁気モーメント間の相互作用として 5d 軌道を介した強磁性的相互作用と Ti^{4+} の 3d 軌道を介した反強磁性的相互作用が競合し、格子体積が増えると Eu^{2+} の 4f 軌道と Ti^{4+} の 3d 軌道の重なりが減少するため後者の超交換相互作用が抑制され、結果として強磁性秩序が安定化することが理論計算 (交換エネルギーにハートリー・フォック理論を加味したハイブリッド密度汎関数法) により示唆された²⁾。同様の計算を準安定相である立方晶 EuZrO_3 に対して行った結果を Fig.1 に示す。これは格子体積に対して交換結合定数をプロットしたものであり、最近接の交換結合定数 (J_1) が正であることから、安定相 (斜方晶) では反強磁性秩序が見られる EuZrO_3 において、準安定相 (立方晶) では強磁性秩序が期待できることがわかる。同様の結果が EuHfO_3 でも得られている。講演では、 $\text{Eu}(\text{Ti}, \text{Nb})\text{O}_3$ と EuNbO_3 における伝導電子誘起強磁性についてもふれる。

【謝辞】第一原理計算に関してお世話いただいた京都大学の田中功教授と研究グループの皆様、ならびに Pennsylvania State University の赤松寛文博士に感謝します。

【文献】1) K. Fujita et al., *Appl. Phys. Lett.* **94**, 062512 (2009). 2) H. Akamatsu et al., *Phys. Rev. B* **83**, 214421 (2011).

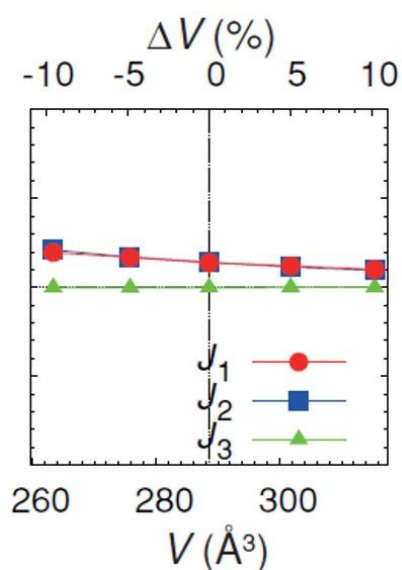


Fig. 1. Dependence of exchange constants on lattice volume of "cubic" EuZrO_3 .