

第一原理計算によるホイスラー合金における立方晶歪みの制御： 磁気異方性の制御に向けて

First-Principles calculations on tetragonally distortion in Heusler compounds:

Towards large magnetocrystalline anisotropy

東大院工¹, マックスプランク研究所² ソフィア大学³ エアランゲン研究所⁴

○松下 雄一郎^{1,2}, G. Madjarova^{2,3}, J.K. Dewhurst², S. Sahlcross⁴, C. Felser², S. Sharma², and
E.K.U. Gross²

The University of Tokyo¹, Max-Planck institute², Sofia University³, Lehrstuhl für Theoretische
Festkörperphysik⁴

○Yu-ichiro Matsushita^{1,2}, G. Madjarova², J.K. Dewhurst, S. Sahlcross, C. Felser, S. Sharma,
and E.K.U. Gross

E-mail: matsushita@ap.t.u-tokyo.ac.jp

強磁石は、現代のテクノロジーにとってなくてはならない物質の一つである。現在用いられている強磁石の作製においては通常、大きな磁気異方性を実現するためにレア・アース元素が用いられているが、レア・アース元素は高価であり、また地球環境負荷の高い元素であるために、レア・アース元素を用いない磁石の開発が重要な課題となっている。近年、ホイスラー合金はその特異な磁気特性から大きな注目を集めている。特に、ホイスラー合金が示すハーフメタリシティーは多くの関心を集め、研究が盛んになされている。しかし、多くのホイスラー合金が立方晶の結晶構造をとるため、その高い対称性から大きな磁気異方性が期待されない。特に、大きな磁気モーメントを持つ鉄系やコバルト系ホイスラー合金においては、そのほとんどは立方晶を最安定構造としてとる。大きな磁気異方性を得るためには、立方晶歪みを制御し直方晶という、より対称性の低い結晶構造にするがある。

本研究は、第一原理計算に基づき、鉄系・コバルト系ホイスラー合金において立方晶歪みが起こるメカニズムを明らかにした。その結果、結晶歪みの微視的メカニズムはヤーン・テラー効果であるがわかった。つまり、立方晶においてフェルミ準位が高い density of states (DOS) を横切っている際には、ヤーン・テラー歪みが起こり、結晶が直方晶へと歪むことがわかった。さらには、このメカニズムを用いると、立方晶を最安定構造としてとっている物質において、電子ドープやホールドープを行い、フェルミレベルを制御することによって、磁気モーメントをほとんど変えずに、結晶構造を直方晶へと制御できることを示した。これにより、ホイスラー合金において、大きな磁気モーメントを維持しながらも、磁気異方性を大幅に増大させる指針を示すことができた。

Reference

Yu-ichiro Matsushita, G. Madjarova, J.K. Dewhurst, S. Sahlcross, C. Felser, S. Sharma, and E.K.U. Gross, Journal of Physics D: Applied Physics, Accepted (2017).