

QSGW 計算による強磁性形状記憶合金 Ni_2MnGa の電子状態

Electronic structure of ferromagnetic shape memory alloy Ni_2MnGa by QSGW calculation

金沢大理工¹, 鳥取大工², [○]小幡 正雄¹, 小谷 岳生², 小田 竜樹¹

Kanazawa Univ.¹, Tottori Univ.², [○]Masao Obata¹, Takao Kotani², Tatsuki Oda¹

E-mail: obata@cphys.s.kanazawa-u.ac.jp

強磁性と形状記憶性を併せもつ強磁性形状記憶合金は、温度変化による形状記憶性だけでなく、外部磁場による大きな磁気歪みが発現し、高速応答するアクチュエータなどの機能性材料として期待されている。その形状記憶性にはマルテンサイト変態に伴う界面歪みを緩和させる双晶面の形成が必要であり、また大きな磁気歪み効果の発現には、その双晶面の外部磁場による高い移動度や双晶面での高い磁気異方性が必要と考えられている。特にホイスラー合金の Ni_2MnGa はそれらの性質に富んでおり、機能性材料応用への有望な候補である。高温で対称性の高い立方晶(オーステナイト)相から低温で正方晶(マルテンサイト)相へ変化する際に、変調されたマルテンサイト相が出現し、それらの双晶面は特に高い移動度を持つ。マルテンサイト変態や変調されたマルテンサイト相の発現機構は、その電子状態に起因しており、特に構造安定性に寄与するフェルミ準位近傍の正確な電子状態を知ることが重要である。 Ni や Mn といった 3d 遷移金属の中でも比較的電子相関効果が強く働く元素が含まれているため、これまでは密度汎関数理論(DFT) にオンサイトクーロン効果(U)を経験的なパラメータにより取り入れる DFT+U などの方法で電子状態解析が行われてきた[1,2]。しかしながら、 U の値によって異なるオーステナイト相とマルテンサイト相の安定性が示唆されるなど[3]、十分に理解できたとはいえない。

そこで、我々は経験的なパラメータを含まない信頼性が高い手法である GW 計算手法を発展させ、自己エネルギーから有効一体ハミルトニアンを構築する準粒子自己無撞着 GW(QSGW)計算[4]により、 Ni_2MnGa のオーステナイト相とマルテンサイト相の電子状態と磁気構造を評価した。オーステナイト相において、フェルミ準位下に存在する Ni の少数スピン軌道(e_g)が、Jahn-Teller 効果を引き起こし、構造変化を誘起することが指摘されているが、QSGW 計算では従来の一般化勾配近似や DFT+U で予想されるエネルギー準位よりもはるかに、フェルミ準位近くに e_g 準位が表わることが判明した。これは、オーステナイト相が従来考えられていたより、さらに不安定であり Jahn-Teller 効果の発現を強く示唆する。本講演では、得られた電子状態の詳細について、その特徴を従来計算手法の結果や光電子分光測定の結果と比較しながら議論する。

- [1] T. Koubský, P. Sedlák, H. Seiner, J. Fojtíková, M. Obata, T. Oda, L. Kalvoda, ACTA PHYSICA POLONICA A, Vol. **134**, 3 (2018)
- [2] M. Zelený, P. Sedlák, O. Heczko, H. Seiner, P. Veřtát, M. Obata, T. Kotani, T. Oda, L. Straka, Materials & Design, inpress.
- [3] B. Himmetoglu, V. M Katukuri¹, Matteo Cococcioni, J. Phys.: Condens. Matter, **24**, 185501(2012)
- [4] M. van Schilfgaarde, Takao Kotani, S. Faleev, Phys. Rev. Lett., **96**, 226402 (2006)