

磁歪と磁気異方性：現象論と電子論

井上順一郎^{1,2}、吉岡匠哉¹、土浦宏紀¹

(東北大学応用物理学専攻¹、筑波大学物理工学域²)

Magnetostriction and magnetic anisotropy: phenomenology and electron theory

J. Inoue^{1,2}, T. Yoshioka¹, H. Tsuchiura¹

(Dept. Appl. Phys. Tohoku University², Inst. Appl. Phys., Univ. of Tsukuba¹)

はじめに

磁気異方性と磁歪は密接に関連した現象である。磁歪は磁気体積ないしは磁気弾性効果でもある。近年永久磁石として注目されている希土類金属間 (R-TM) 化合物においても後者の効果は大きいものとなっている。しかしながら、R-TM 化合物における磁気異方性と磁歪の関係は十分には調べられてはいない。また磁歪・磁気弾性効果に対する電子論も確立されているとは言い難い。R-TM 化合物の結晶構造は、cubic, tetragonal, hexagonal と多様である。本研究では、まずこれらの結晶構造における磁気異方性と磁歪との関係を現象論により統一的に取り扱う。続いて、電子論による磁気弾性係数の見積もり法を述べ、具体的計算例を示す。

現象論

磁歪によって生じる有効的磁気異方性は、磁性体の弾性エネルギーと磁気弾性エネルギーの和 (自由エネルギー F) を最小にする条件から求まる。形式的に $F = e^t \cdot C \cdot e / 2 + e^t \cdot B$ と表される。ここで e, C, B はそれぞれ弾性テンソル成分の 1 次元ベクトル表示、弾性テンソル、磁気弾性係数を含む 1 次元ベクトルである。 F は磁化方向に依存するため、最小条件から自発磁歪と有効的磁気異方性が求まる。

磁気弾性係数に対する電子論

現象論で用いた自由エネルギーの式を用いると、体積一定のもとで適当な格子変形 (例えば tetragonal 変形) を与えた場合のエネルギー変化を磁化方向の関数として得ることができる。他方、そのような変形を与えた時の電子系エネルギーを電子論により見積もることが可能である。両者の比較から磁気弾性定数を見積もることができる。例えば、tetragonal 格子をさらに tetragonal 変形させた場合の一軸異方性エネルギーが次のように求まる。

$$K_u = F(100) - F(001) = K_{u0} - (B_1 - 2B_2 + 2B_3)\chi / 3$$

ここで、 B_i は磁気弾性係数である。Cubic 格子では、 $B_2 = 0, B_3 = B_1$ である。また χ は歪の程度である。

計算例として L1₀-FePt と Y₂Fe₁₄B に対する結果を表 1 に示す。第一原理計算は文献値[1,2]である。数値の比較・検討については講演で述べる。

| | L1 ₀ -FePt | | | Y ₂ Fe ₁₄ B | | |
|----------------------------|-----------------------|----------------|------|-----------------------------------|----------------|------|
| | exp. | 1st.Principles | RSTB | exp. | 1st.Principles | RSTB |
| K_u | 3.2 | 7.0 - 8.1 | 58 | 1.1 | 0.06 | 0.16 |
| $\delta K_u / \delta(c/a)$ | — | 61 | 52 | — | — | 0.07 |

表 1 L1₀-FePt と Y₂Fe₁₄B に対する一軸異方性とその c/a 依存性の計算例、単位は 10⁶J/m³

参考文献 [1] A. Sakuma, J. Phys. Soc. Jpn. 63, 3053 (1994)

[2] Y. Miura et al., J. Appl. Phys. 115, 17A765 (2014)