

## M型フェライトにおける一軸磁気異方性の局所歪み依存性

井上順一郎<sup>1,2</sup>、中村裕之<sup>3</sup>、柳原英人<sup>1</sup>

(筑波大学理工学域<sup>1</sup>、東北大学応用物理学専攻<sup>2</sup>、京都大学工学研究科)

Local strain dependence of uniaxial magnetic anisotropy in M-type ferrites

J. Inoue<sup>1,2</sup>, H. Nakamura<sup>3</sup>, and H. Yanagihara<sup>1</sup>

(Inst. Appl. Phys., Univ. of Tsukuba<sup>1</sup>, Dept. Appl. Phys. Tohoku Univ.<sup>2</sup>, Kyoto Univ.<sup>3</sup>)

**はじめに** 高性能永久磁石の開発は、エネルギー節約型社会実現をめざして達成すべき課題の一つである。実用的磁石として広く使用されている六方晶フェライトの一軸磁気異方性に関して、その元素置換効果が詳細に調べられている[1]。特にM型フェライトへの $\text{Co}^{2+}$ の導入が効果的であることが注目されている[2]。磁気異方性は、基本的には磁性原子(イオン)のスピン軌道相互作用、およびその周りの格子の低対称性により発現すると考えられる。M型フェライトにおいても、 $\text{Fe}^{3+}$ イオンとその周りの酸素からなる局所構造が歪んでいることが知られている[1]。

本研究の目的は電子論に基づいて、M型フェライトにおける磁気異方性発現機構の詳細、一軸磁気異方性に対する局所歪みの効果、および元素置換効果を調べることにある。

**計算モデル** 磁性イオンとその周りの再隣接酸素イオンを含むクラスターに、p-d混成とスピン軌道相互作用(SOI)を取り入れた1電子モデルを採用する。電子状態の計算には既存のtight-binding法を採用する。SOIとしては原子内SOIを採用する。クラスター内の磁性イオンのシフトおよびクラスターの変形に伴う一軸磁気異方性の変化を計算する。

**計算結果** 表1にBa-ferriteとSr-ferriteに対する計算結果を示す。Ideal構造とは、各クラスター形状が立方晶フェライトのものと同じである。Ideal構造に対する $K_u$ の計算値は実験値と比較し小さいが、 $\text{Fe}^{3+}$ から予想される値より大きい。これはp-d混成による結果である。局所的に歪んだ現実的結晶構造に対する $K_u$ の計算値は実験値にかなり近い。局所歪みの重要性を示す結果である。

図2は、 $4f_1$ サイト(4面体クラスター内のサイト)に導入された $\text{Co}^{2+}$ イオンの一軸異方性の歪依存性を示す。Sr-ferriteの $\text{Fe}^{3+}$ の位置は $dz = 0.002$ ,  $[c/a]_{\text{ratio}} = 1.07$ である。したがって、この位置に存在する $\text{Co}^{2+}$ は負の一軸異方性を与える[3]。一軸異方性の増大のためには、4面体の大きな歪または磁性イオンのシフトが必要であることがわかる。六方晶フェライトの磁気異方性の実験的検証には、高精度の歪測定が必須である。同様に第一原理計算においても高精度の計算が要求されることになる。

表1 M型フェライトの一軸異方性係数 $K_u$ の計算値と実験値。各クラスターの形状が立方晶フェライトのものと同じしている場合をideal構造としている。単位は $\text{M erg/cm}^3$

	Ideal str.	Ba	Sr
$K_u$ (cal)	0.95	2.45	2.60
$K_u$ (exp)	---	3.25	3.57

**謝辞** 本研究は産学共創基礎基盤研究

プログラムの援助で行われた。

**参考文献**

[1] 中村裕之、Mag. Jpn. **13**, 59 (2018).

[2] 小林善徳、Mag. Jpn. **13**, 68 (2018).

[3] J. Smit and H. P. J. Wijn, Philips Research Report "Ferrites" (1959).

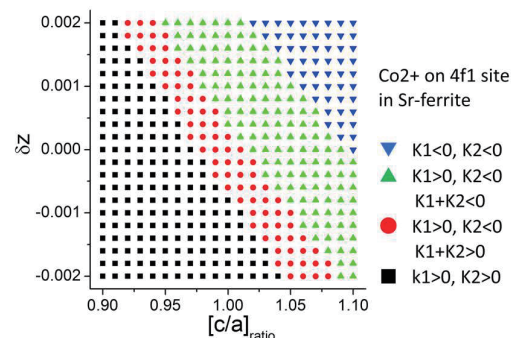


図1  $4f_1$ サイト上の $\text{Co}^{2+}$ イオンの局所磁気異方性の計算値。 $\delta z$ はクラスター内 $\text{Co}^{2+}$ イオンのz軸方向のシフト(0.001が1%に対応)、 $[c/a]_{\text{ratio}}$ はc/aの理想値で規格化された値である。