

Mn 基ホイスラー合金 Mn_2CoGa の磁氣的性質と原子配列

梅津理恵^{1,2,3}、斉藤耕太郎⁴、小野寛太⁵、石垣徹⁶、辻川雅人^{2,3,7} 白井正文^{2,3,7}

(¹ 東北大金研、² 東北大 CSRN、³ 東北大 CSIS、⁴ ポール・シェラー研、
⁵ 高エネ研、⁶ 茨城大、⁷ 東北大通研)

Magnetic properties and atomic configuration of Mn_2CoGa in Mn-based Heusler alloy

R.Y. Umetsu^{1,2,3}, K. Saito⁴, K. Ono⁵, T. Ishigaki⁶, M. Tsujikawa^{2,3,7}, M. Shirai^{2,3,7}

(¹IMR, Tohoku Univ., ²CSRN, Tohoku Univ., ³CSIS, Tohoku Univ.,

⁴Paul Scherrer Institut, ⁵KEK, ⁶Ibaraki Univ., ⁷RIEC, Tohoku Univ.)

はじめに

Mn_2CoAl ホイスラー合金が Hg_2CuTi 型構造の原子配列をしている場合に、スピングャップレス半導体型 (SGS-type) の特異な電子状態を有することが第一原理計算より示唆され^{1,2)}、注目されている。しかしながら、Mn-Co-Al 三元系状態図によると、1273 K 以下では Mn_2CoAl は 2 相領域にあり³⁾、相分離のため单相を得にくいことが想定される。そこで、本研究では関連物質として Mn_2CoGa ホイスラー合金の試料を作製して相状態を確認し、中性子粉末回折測定より原子配列を決定し、それをもとに電子状態の計算を行った。

実験方法

Mn_2CoGa の多結晶試料は高周波溶解にて作製し、1173 K にて 1 日間の溶体化熱処理を施した後水中に焼入れし、773 K にて規則化のための熱処理を行った。規則-不規則相変態温度を調べるために示差走査熱量 (DSC) 測定を行い、磁化測定は試料振動型磁力計 (VSM) 及び SQUID 磁力計を用いて行った。粉碎した粉末試料は歪除去の熱処理を施し、J-PARC に設置してある茨城県材料構造解析装置 (iMATERIA) を用いて飛行時間法 (TOF) により行い、解析には FullProf を用いた⁴⁾。

実験結果

VSM より得た熱磁化曲線より Mn_2CoGa 合金のキュリー温度は約 740 K であることが分かり、DSC 曲線において規則-不規則変態に伴うとみられる反応が約 1050 K において観測された。5 K における磁化曲線のアロットプロットから算出した自発磁化の値は $2.0 \mu_B/\text{f.u.}$ である。

図に、 Mn_2CoGa の室温で測定を行った粉末中性子回折パターンを示す⁵⁾。 $I_{\text{cal.}}$ は FullProf を用いて得た回折パターンを示し^[3]、 $I_{\text{cal.}} - I_{\text{exp.}}$ は実験で得たパターンとの差を示す。 Hg_2CuTi 型原子配列を仮定した場合より、Mn と Co 原子がランダムに配列した $L2_{1b}$ 型構造とした場合のほうが R-値は低く、解析より得られた磁気モーメントの値も、理論計算値や磁化測定で得られた自発磁化の値に近いことが判明した。この原子配列は、HAADF-STEM 像観察による結果と対応している⁶⁾。 $L2_{1b}$ 型原子配列の Mn_2CoGa に対してコヒーレントポテンシャル近似を用いて第一原理計算を行ったところ、SGS-type 電子状態は有しないものの、ダウンスピンサイドのフェルミ面近傍に擬ギャップが形成され、比較的スピン分極率の高い電子状態であることが分かった。

参考文献

- 1) G. D. Liu *et al.*, Phys. Rev. B **77**, 014424 (2008).
- 2) S. Ouardi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **110**, 100401 (2013).
- 3) R. Kainuma *et al.*, J. Alloys Compd. **269**, 173 (1998).
- 4) R. Carvajal, Physica B **192**, 55 (1993).
- 5) R.Y. Umetsu *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **31**, 065801 (2019).
- 6) K. Minakuchi *et al.*, J. Alloys Compd. **645**, 577 (2015).

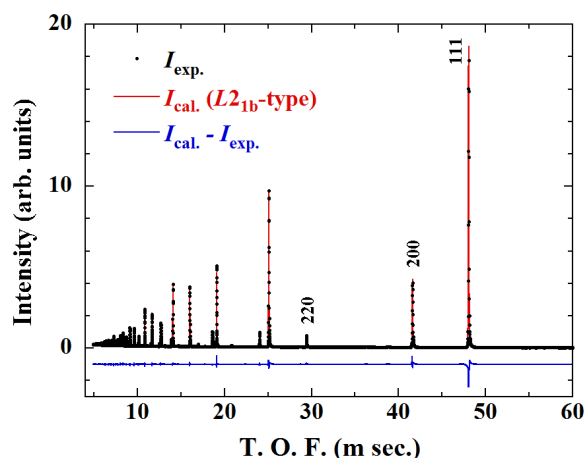


Figure Powder neutron diffraction pattern of Mn_2CoGa Heusler alloy obtained at room temperature, together with the calculated pattern as the $L2_{1b}$ -type structure.