

GGA+ U 法によるSmFe₁₂における Smの軌道モーメントの理論的評価

山下祥吾^{1,2}、吉岡匠哉^{1,2}、土浦宏紀^{1,2}、Pavel Novák³

(東北大工¹、ESICMM²、チェコ科学アカデミー³)

Theoretical study for the orbital moment of the Sm ions of SmFe₁₂ with GGA+ U method.

S. Yamashita^{1,2}, T. Yoshioka^{1,2}, H. Tsuchiura^{1,2}, P. Novák³

(Department of Applied Physics, Tohoku Univ¹, ESICMM², Academy of Science of the Czech Republic³)

はじめに

Nd₂Fe₁₄Bをはじめとした、希土類永久磁石は現代のテクノロジーに欠かせない高機能材料の1つである。その中でもNd₂Fe₁₄Bに変わる材料として近年、SmFe₁₂に注目が集まっている。SmFe₁₂は単位格子内に含まれる希土類に対するFeの割合が大きくなることから、高い飽和磁化が期待でき、かつ、格子内の空隙が大きいことから、Smイオンは孤立した状態をよく保っており、磁気異方性に有利であると考えられている。しかし、この物質は熱力学的に不安定であり、バルクではSm₂Fe₁₇に変形してしまい、薄膜でしか合成できないという欠点も抱えている。本研究では、薄膜の安定相での構造を仮定し、第一原理電子状態計算を行った結果について報告する。

計算手法

Smの4*f*電子は局在性が強く、電子間相互作用の影響が強いと考えられるため、本研究においては電子相関の影響を考慮することのできるGGA+ U 法を用いた計算を行う。しかし、*f*電子系に+ U 法を適用する場合、*f*軌道占有状態に対する初期条件によっては、正しい基底状態が得られないことがある。そのため、初期条件を変化させ、最もエネルギーの低くなる状態を探索し、その状態における*f*電子相互作用を解析する。

計算結果

Fig 1.に各初期条件における軌道磁気モーメントとトータルエネルギーの*U*依存性を示す。

この図からは軌道磁気モーメントとして、どの*U*の値においても、3.0 μ_B 程度を与える初期条件が最もエネルギーが低くなり、基底状態、もしくはそれに近いエネルギーに収束していると考えられる。SmにおいてはHundの第2則から5.0 μ_B 程度の軌道磁気モーメントが期待できるが、本計算結果ではそれを下回る値が得られており、Smサイトにおける強い結晶場の効果により、部分的なクエンチングが起き、Hund第2則の破れを示唆していると考えられる。

参考文献

- 1) Y. Hirayama, Y. K. Takahashi, S. Hirose, K. Hono, Scripta Mater. **138** (2017) 62-65
- 2) Y. Harashima, K. Terakura, H. Kino, S. Ishibashi and T. Miyake, JPS Conf. Proc. **5** 011021 (2015).
- 3) P. Larson, I. I. Mazin, D. A. Papaconstantopoulos, Phys. Rev. B **67**, 214405 (2003).

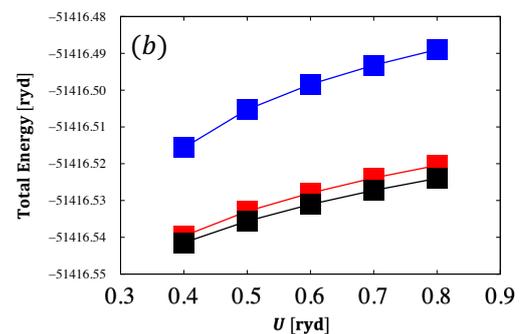
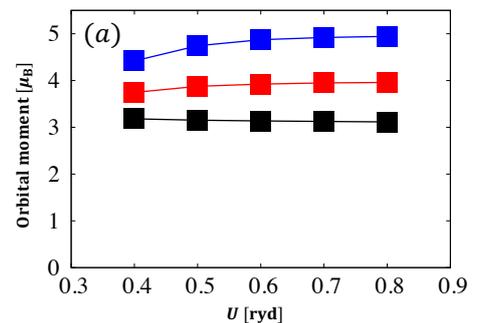


Fig. 1 各初期条件における(a)軌道磁気モーメント (b)トータルエネルギーの*U*依存性