

金属磁性体における2サイト型磁気異方性の第一原理的評価

小田 洋平¹・榊 裕太²・三浦 大介³・佐久間 昭正³

(¹福島高専・²東大・³東北大)

First-principles evaluation of 2-site-type magnetic anisotropy in metal magnetic materials

Y. Kota¹, Y. Toga², D. Miura³, and A. Sakuma³

(¹Fukushima KOSEN, ²The Univ. of Tokyo, ³Tohoku Univ.)

1 はじめに

原子スピン模型を用いた磁化ダイナミクスや有限温度磁性のシミュレーションは磁性材料の性能を理論的に解析するための有力な手段となっている。古典ハイゼンベルグ模型のハミルトニアンは通常 $\mathcal{H}_0 = \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_i K_i (S_i^z)^2$ と記述され、第1項は交換相互作用、第2項は1イオン異方性をそれぞれ表す。ここで i, j はサイトインデックス、 \vec{S} はローカルスピンであり、物質パラメータである交換相互作用定数 J と磁気異方性定数 K は第一原理計算によってその物質固有の値を得ることが可能である。しかしながら磁気異方性を記述する際に、酸化物のような電子の局在性が強い磁性体の場合は1イオン異方性の形でも問題ないと思われるが、金属のような遍歴性の強い磁性体の場合は（仮に古典ハイゼンベルグモデルへのマッピングが認められるとしても）1イオン異方性のみでは不十分な可能性がある。現に種々の $L1_0$ 型合金について副格子間の磁気異方性エネルギーの第一原理計算の報告例¹⁾があり、これは例えば $\mathcal{H}_2 = \sum_{i \neq j} K_{ij} S_i^z S_j^z$ のような形で記述される2サイト型の磁気異方性を導入する必要性があることを示唆している。そこで本研究では電子のスピン軌道相互作用に由来する金属磁性体の2サイト型の磁気異方性エネルギー K_{ij} を第一原理計算によって評価したので、その結果を報告する。

2 結果および考察

Fig. 1(a) は $L1_0$ 型規則構造の FeNi 合金の結晶構造の模式図である。ここで 1, 2 を Fe サイト、3, 4 を Ni サイトとして、Fe と Ni の1サイト型の磁気異方性エネルギーをそれぞれ K_1, K_3 、最隣接 Fe-Fe 間、Ni-Ni 間の2サイト型の磁気異方性エネルギーをそれぞれ K_{12}, K_{34} 、最隣接 Fe-Ni 間の異方性エネルギーをボンドの方向で区別して K_{13}, K_{14} とおく。Fig. 1(b) は磁化方向を変化させたときのエネルギー変化から求めた $K_1, K_3, K_{12}, K_{34}, K_{13}, K_{14}$ の計算結果である。磁化を (A) [001] 方向と [100] 方向に向けた場合のエネルギー差から求めた場合、および、(B) [001] 方向と [010] 方向に向けた場合のエネルギー差から求めた場合の結果が示されている。この結果から全体の磁気異方性に大きく寄与するのは Fe と Ni それぞれの1サイト型の磁気異方性であることが分かる。しかしながら2サイト型の磁気異方性も定量的には無視できず、実際のボンドの本数を考慮すれば1サイト型の磁気異方性に匹敵する寄与をもたらす。また K_{13}, K_{14} に着目すると、等価なボンドでも磁化の回転面によってエネルギー変化の挙動が異なることに加えて、 $K_{13}^A = K_{14}^B, K_{13}^B = K_{14}^A$ となっていることが確認される。講演では2サイトのボンドの方向と磁化回転によるエネルギー変化の関係を考察した結果について議論する予定である。

References

- 1) L. Ke, Phys. Rev. B **99**, 054418 (2019).

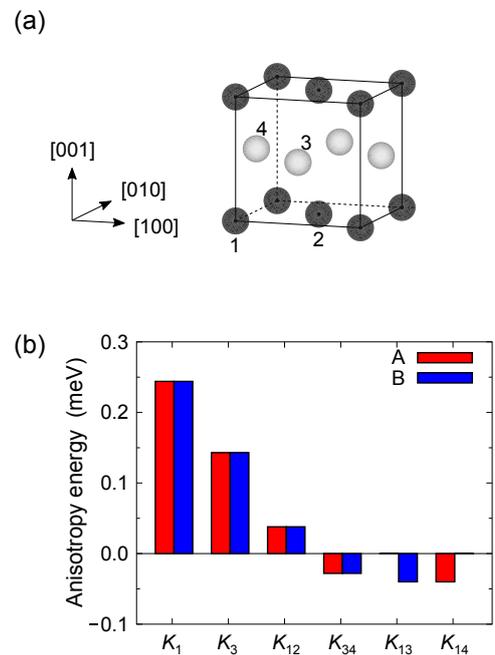


Fig. 1 (a) Crystal structure of $L1_0$ -type ordered alloy and (b) calculation result of 1-site- and 2-site-type magnetic anisotropy energy.