

## 第8回 遷移電子の強磁性 (ストーナーモデル)

II

Goal 分子場やバンドを使って強磁性を理解する

おさらい

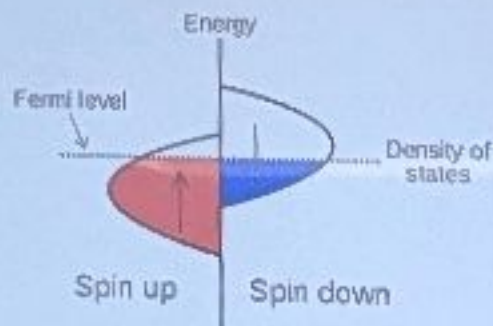
帯磁率  $\chi = \frac{M}{H}$  (定義)

$$\chi = \frac{\chi_p}{1 - \alpha \chi_0}$$

$$\chi = \frac{\chi_p}{1 - \underbrace{2\alpha\mu_B^2}_{\text{分子場係数}} \cdot \underbrace{D(\epsilon_F)}_{\epsilon_F \text{ の状態密度}}}$$

分子場係数  $\epsilon_F$  の状態密度  $\rightarrow$  大きいと強磁性

$$2\alpha\mu_B^2 \cdot D(\epsilon_F) > 1 \cdots \text{ストーナー条件}$$



磁気

モーメント

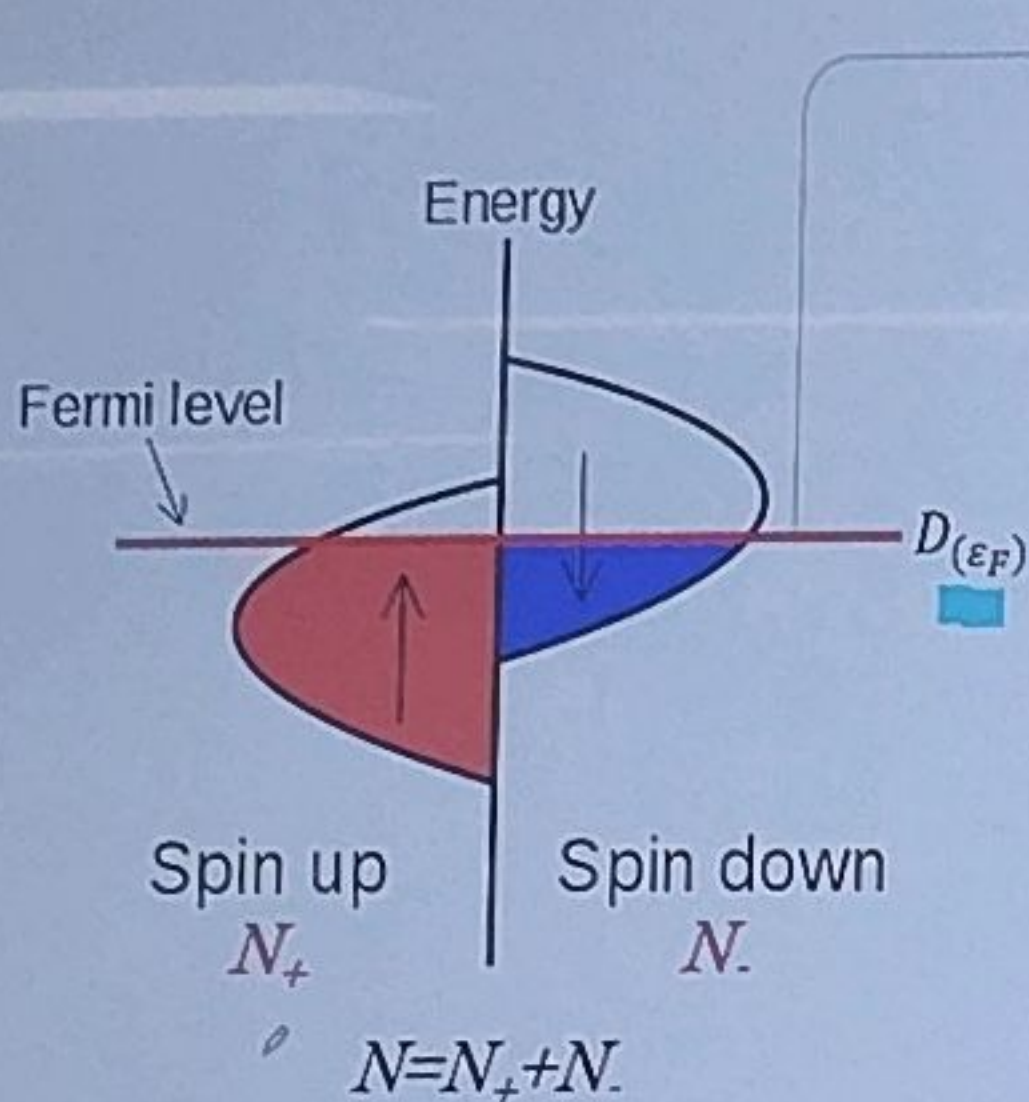
外場

分子場

$$M = \chi_p (H + \alpha H)$$

分子場係数

■ 強磁性とバンド構造 ( $D(\epsilon_F)$ に注目)



→ 磁気モーメント

$$M = \mu_B (N_+ - N_-)$$

状態密度(電子数)の差

$$N_{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{D(\epsilon)}_{\text{状態密度}} \cdot \underbrace{\frac{1}{e^{\{(\epsilon \mp \alpha M \mu_B - \epsilon_F)/k_B T\}} + 1}}_{\text{フェルミ・ディラック分布}} d\epsilon$$

❗ 価電子帯の電子状態  
= 強磁性の担い手



■ 強磁性と分子場

各バンドの最大エネルギー  
(どこまで電子を詰められるか)

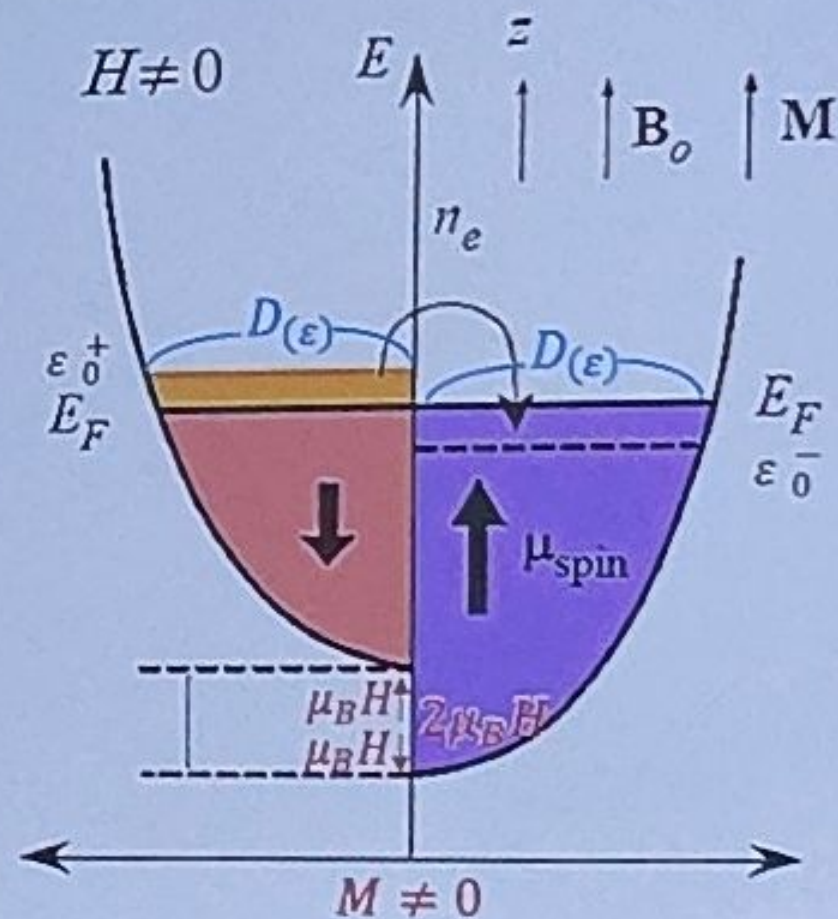
$$M = \mu_B \left\{ \int_{-\infty}^{\varepsilon_0^+} D(\varepsilon) d\varepsilon - \int_{-\infty}^{\varepsilon_0^-} D(\varepsilon) d\varepsilon \right\}$$

$$N = \int_{-\infty}^{\varepsilon_0^+} D(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{-\infty}^{\varepsilon_0^-} D(\varepsilon) d\varepsilon$$

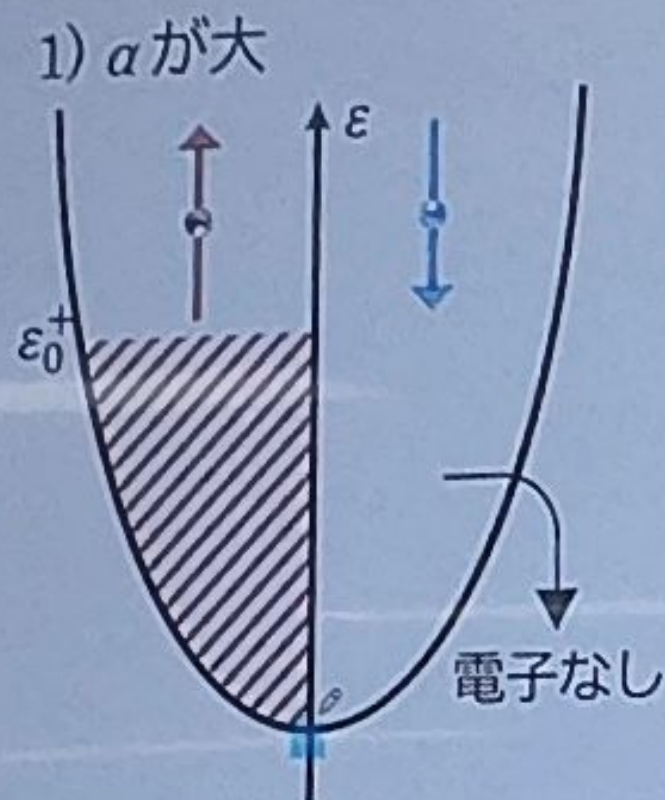
$$\begin{aligned} \varepsilon_0^+ &= \varepsilon_F + \alpha M \mu_B \\ \varepsilon_0^- &= \varepsilon_F - \alpha M \mu_B \end{aligned}$$

ゼーマン分裂

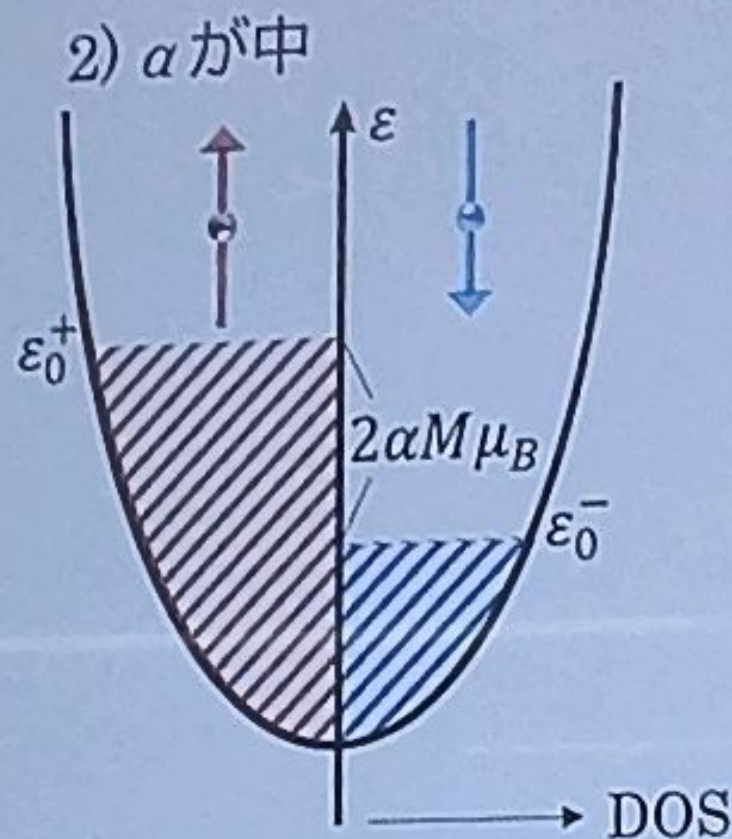
分子場の大小で  $M$  が決まる



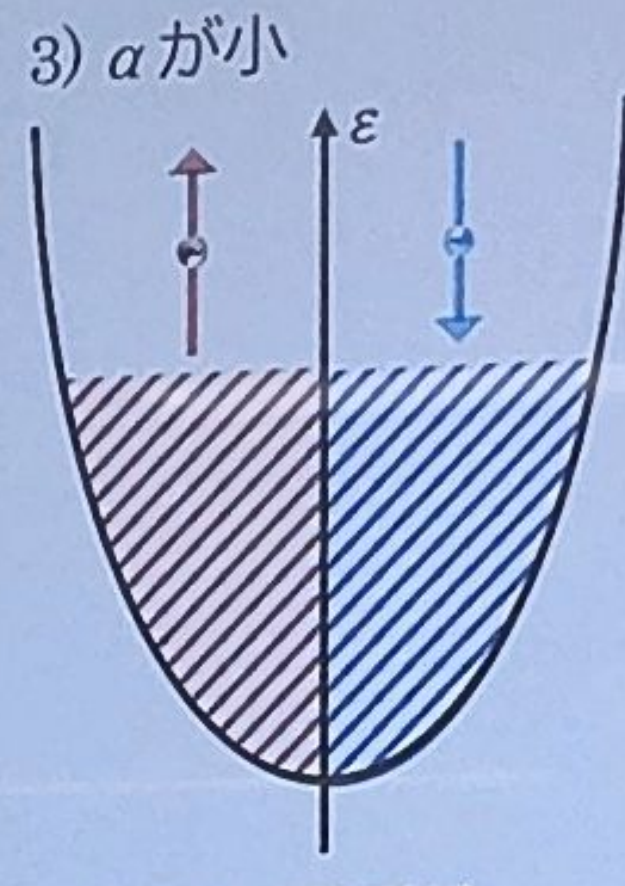




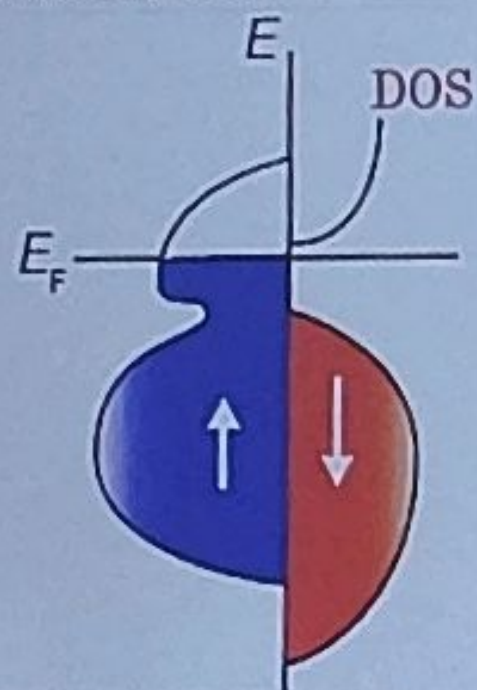
「強い強磁性」  
ex) half-metal



「弱い強磁性」  
ex) Fe, Ni



パウリ常磁性  
ex) Ti, Cu



実際の材料では

- ・ 状態密度(DOS)に大きく依存する
- ・ フェルミレベル

(どこまで電子を  
詰められるか?)

第一原理計算

放射光解析

が重要



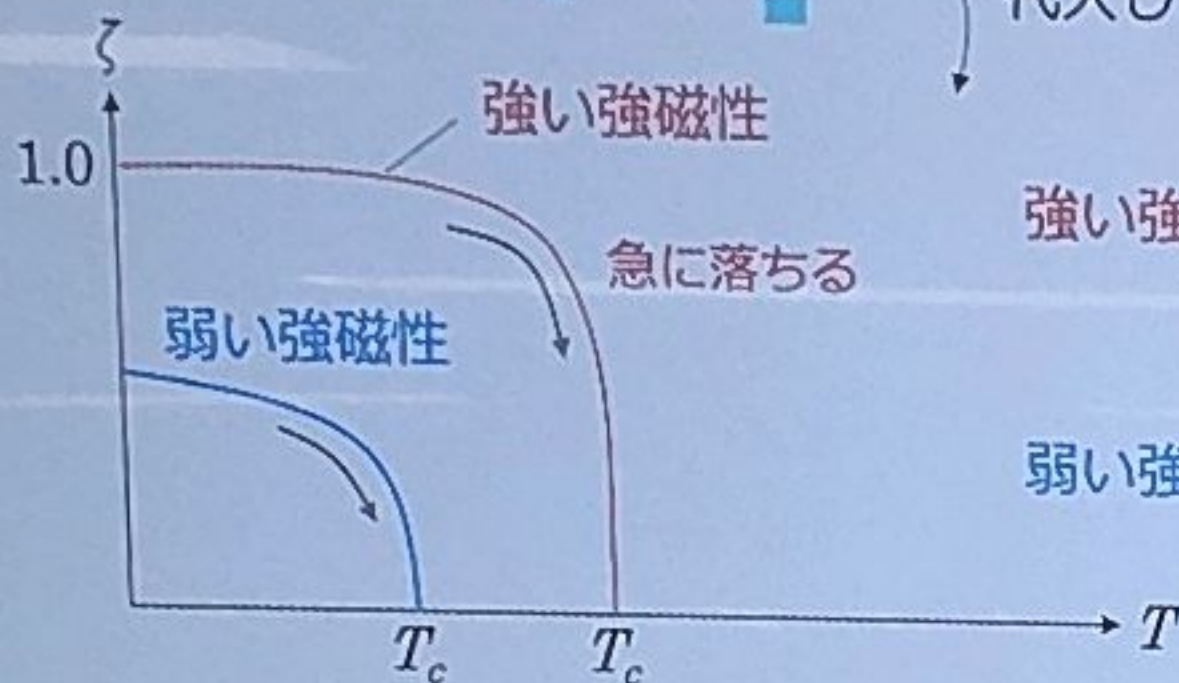
# スピン分極率の温度依存性

$$N_{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon) \cdot \frac{1}{e^{\left\{ \frac{(\epsilon \mp \alpha M \mu_B - \epsilon_F)}{k_B T} \right\}} + 1} d\epsilon$$

スピン分極率  $\zeta = \frac{N_+ - N_-}{N}$

代入して解く

DOSを積分



強い強磁性  $\Delta M \propto e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$

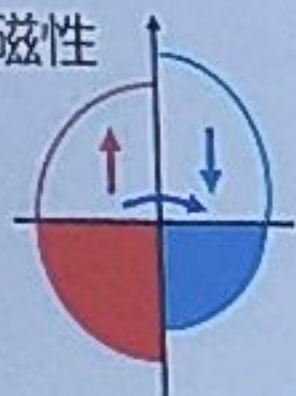
アレニウス型, ボルツマン分布

弱い強磁性  $\Delta M = T^2 (T^{3/2})$

キュリーワイス則型

「弱い」強磁性

熱励起不要



「強い」強磁性

熱励起必要



DOSの違いと電子励起に依存



■ 電子状態の計算

APW法 (Argumented Plane Wave法)

1. ポテンシャルの設定
2. 変分関数
3. 変分計算
4. iteration  $V(r)$ を求める
5. 分散を出力
6. DOSを出力



## Kohn-Sham方程式の解法

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{eff}(r) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i$$

$v_{eff}(r)$ と $\psi_i$ は互いの関数  
片方を決定しなければ、もう一方も決定できない

## Self-Consistent-Field (SCF計算)

### 原子軌道関数の決定

仮の電荷密度 $\rho(r)$ を決定  
対応する $v_{eff}(r)$ を決定

1

2

### 波動方程式を解く

新たな波動関数が決定される  
 $\psi_i$ が決まると電荷密度を得られる

3

### 収束条件の確認

初期電荷密度と算出された電荷密度との比較  
 $\rho(n-1, r) \cong \rho(n, r)$   
差が $10^{-7}$ 以内になるまで繰り返し

4

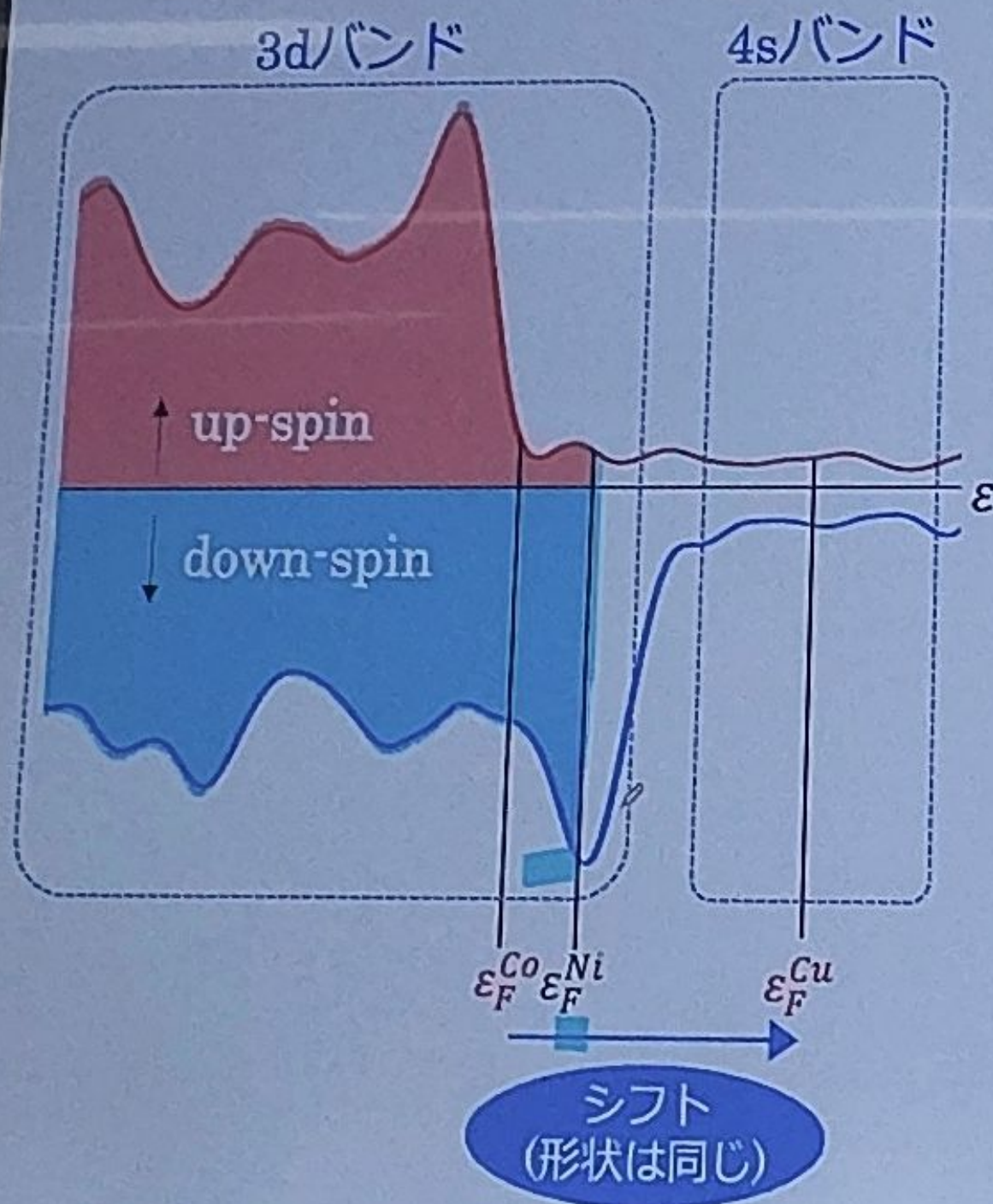
### 電荷密度の決定

DFT法から $\rho(r)$ が決まると  
エネルギーを得る事が可能



3d遷移金属のDOSと磁化

NiのDOS・・・結晶構造，電子数に依存



DOSの形状はCo, Ni, Cuで同じ  
(= rigid band model)

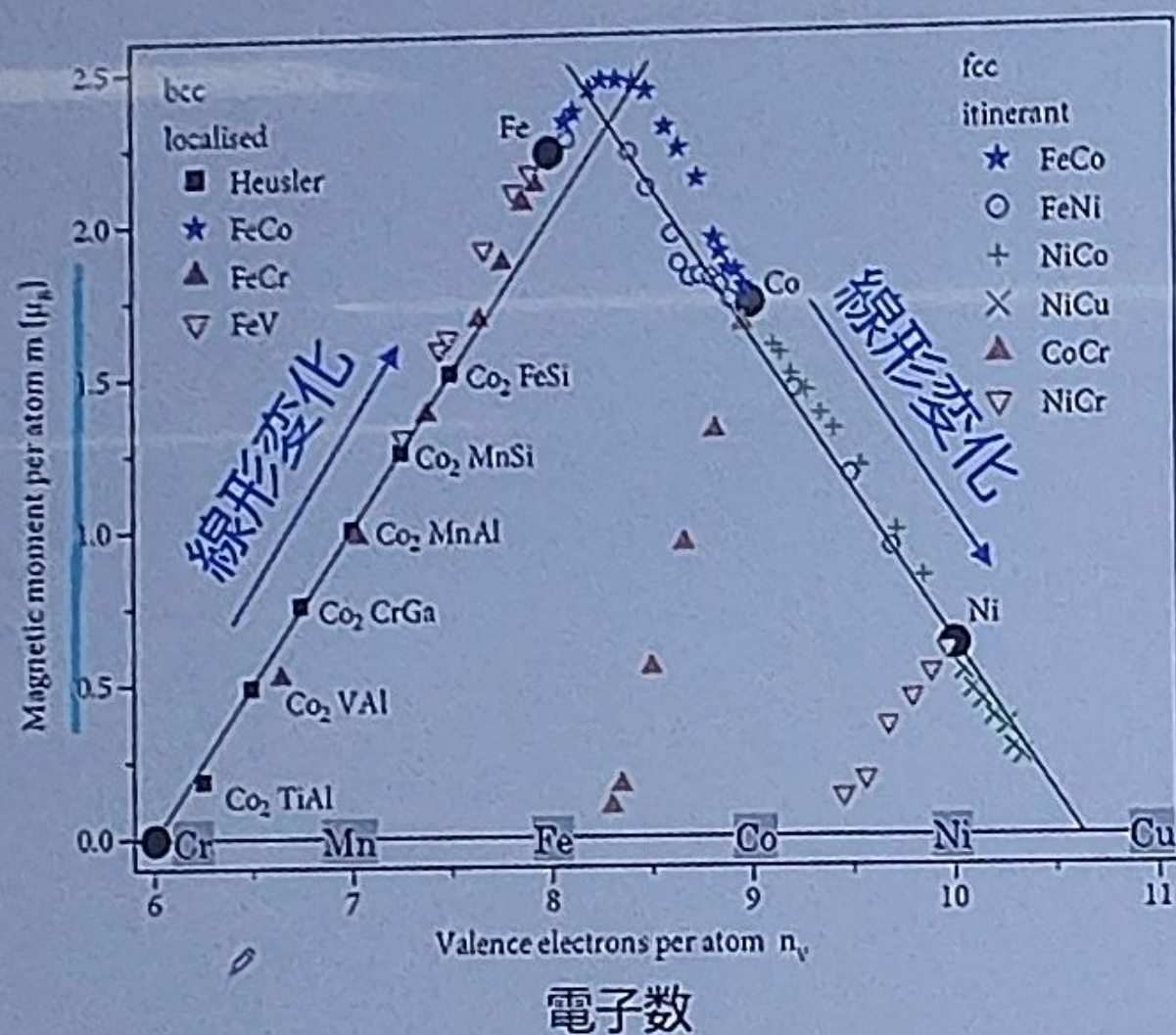
ただし，電子数が異なる

Co  $\rightarrow \epsilon_F$  がDOSのくびれに来る  
 $\rightarrow M$ が増加

Cu  $\rightarrow$  バンドがほぼ埋まる  
 $\rightarrow M$ はゼロ(非磁性)



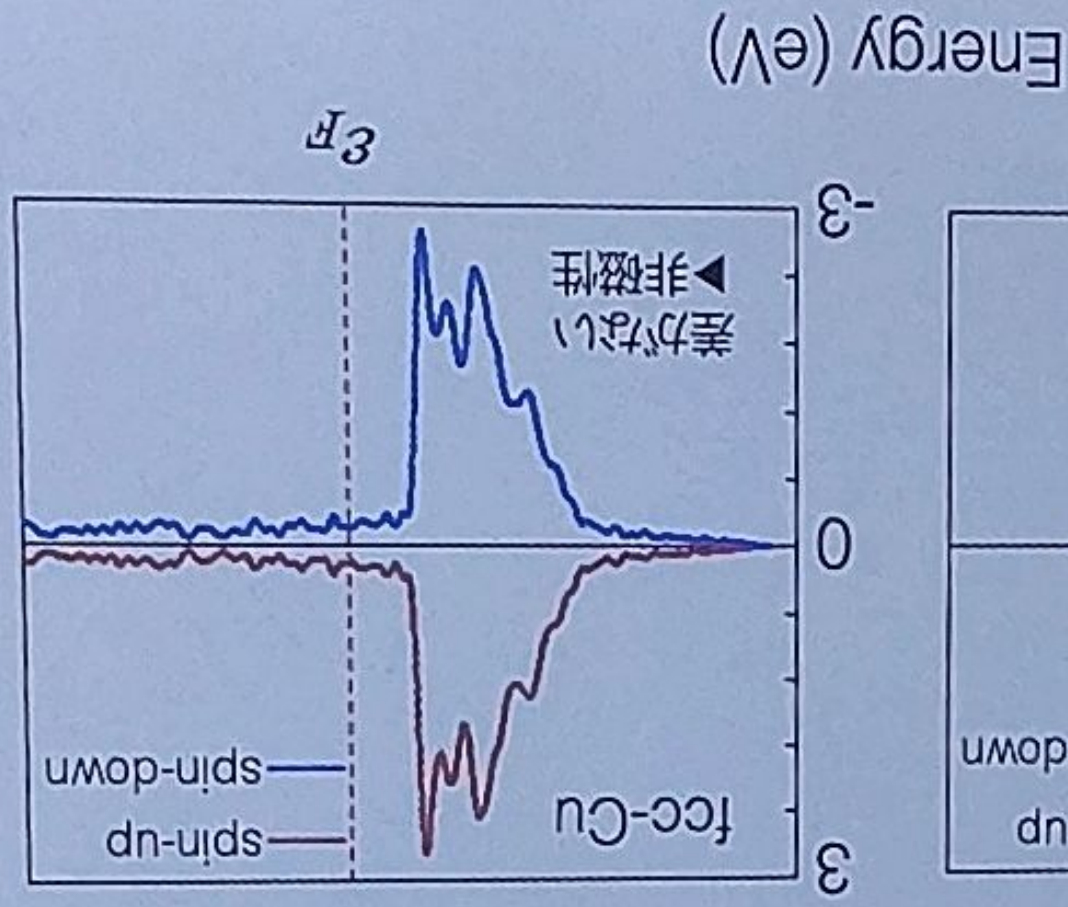
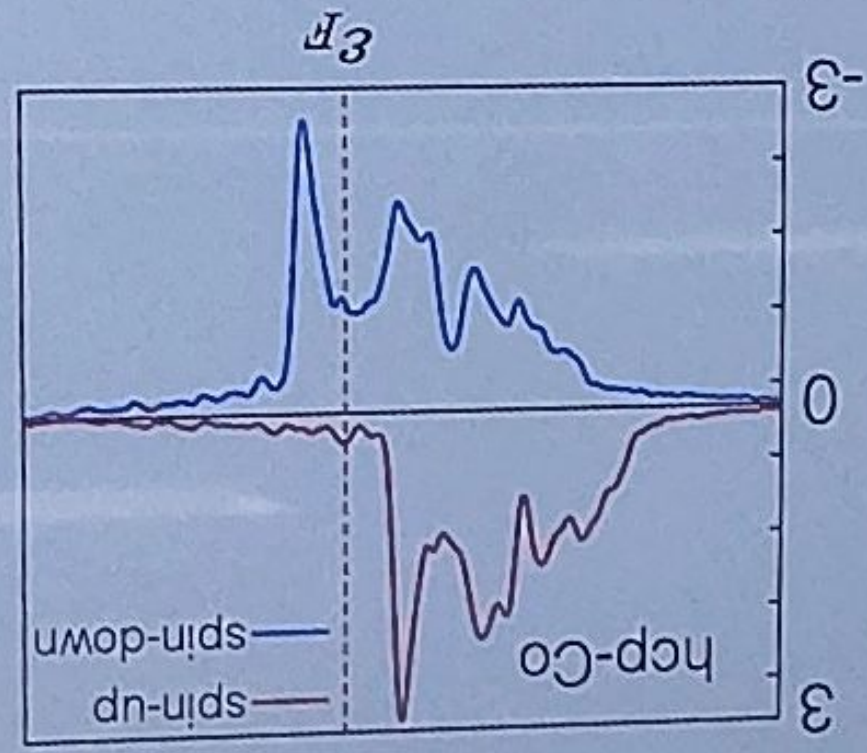
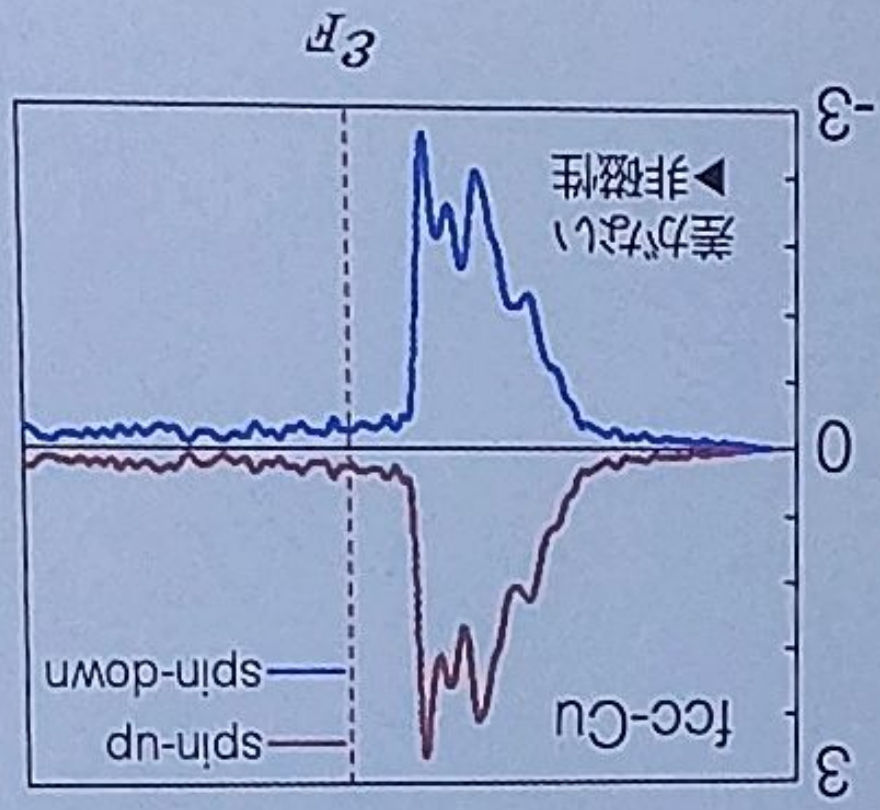
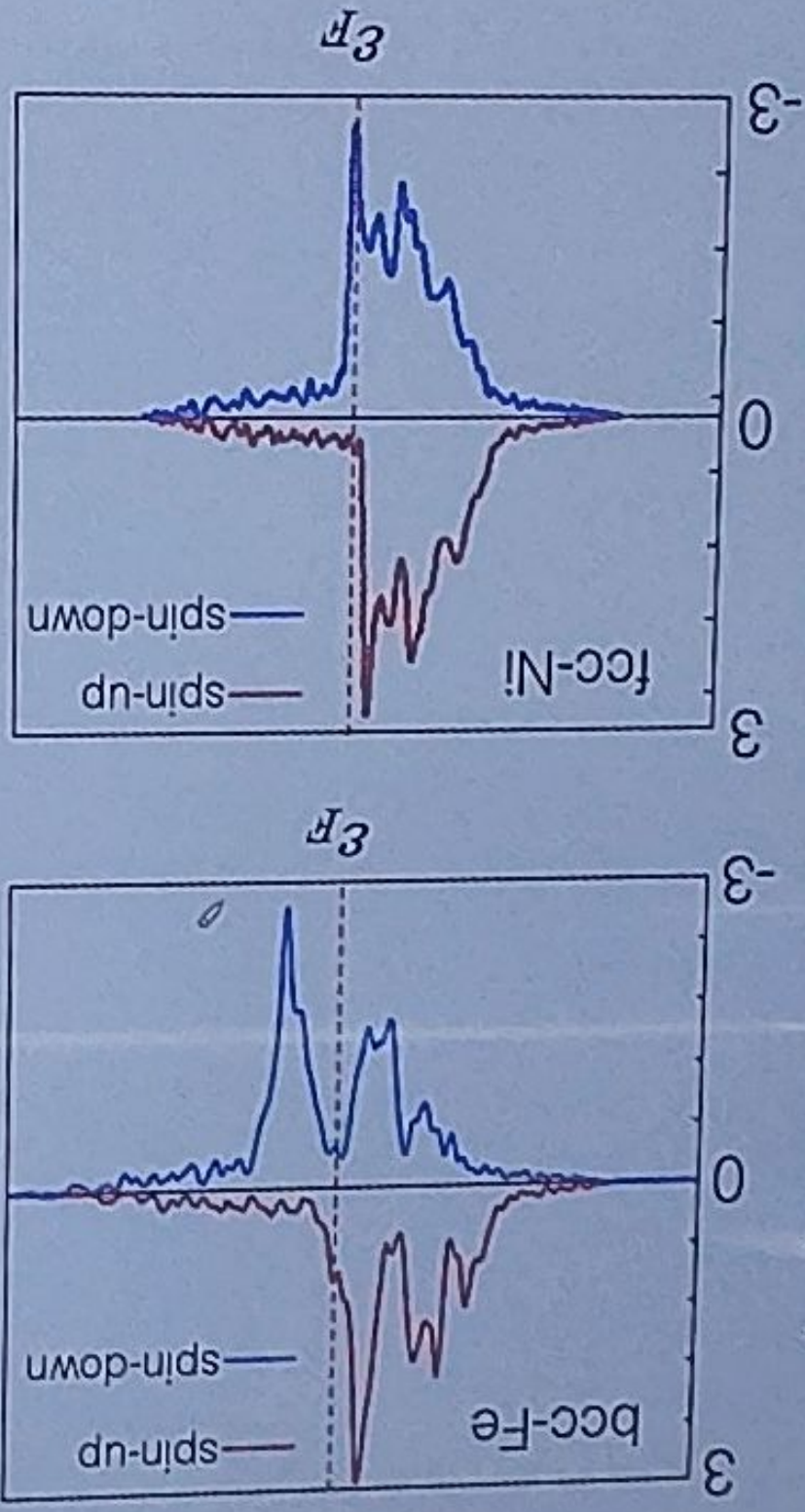
## スレーターポールリング曲線



3d遷移金属の磁気モーメントは  
電子数に対して、直線的に変化する



Density of state (states/eV.atom.spin)





## 課題

① 3d遷移金属合金における磁気モーメントの起源を説明せよ。

✓ ② FeのDOSをAkai-KKRで計算してみてください。(探索的課題=ムズい)

<http://kkr.issp.u-tokyo.ac.jp/jp/>

- ・ DOSのグラフ
- ・ input ファイル
- ・ Fortranのmakefile
- ・ ログ

を添えてLETUSに提出してください。

研究室メンバーによるセミナーを6/10の6限に開催予定。

(研究室LINEに登録するとスムーズ)。

正解者の先着10名に特別加点します。

※こちらはやりたい人だけでOKです。