

強磁性形状記憶合金のフェルミ面の研究

對馬 可裕

強磁性形状記憶合金は強磁性と形状記憶効果の二つの性質を兼ね備えた合金である。強磁性とは磁石に付く性質であり、強磁性の物質自身も磁石になりうる。強磁性の物質は鉄やコバルトなどに代表され、モータや磁気記録媒体などに利用される。形状記憶効果は大きな力を加えて変形させても一定の温度以上に加熱すると元の形状に戻るという現象であり、この性質を持つ金属は形状記憶合金と呼ばれる。形状記憶効果は変形量が大きいため、アクチュエータとして利用されているが、温度による形状制御は冷却速度に依存するため応答速度を速くできない。しかし、強磁性形状記憶合金の中には磁場によって形状記憶効果を生じるものがあり、高速な応答が可能であるため、磁場駆動アクチュエータなどの用途が期待されている。

金属の物性について研究する際に、フェルミ面は大変重要となる。フェルミ面は逆格子空間において電子の占める軌道と占められていない軌道の境界面であり、フェルミ面の形状や大きさから電気伝導や熱伝導などの基本的な物性が決まる。フェルミ面は実験的に調べることもできるが、理論計算によっても求めることができる。バンド理論は結晶中の電子の状態を求める理論の一つで、バンド計算はこのバンド理論をもとに結晶中の電子の状態を定量的に知る手法である。バンド計算によって求められた電子の構造はバンド構造とも呼ばれ、このバンド構造からは、フェルミ面の他、あるエネルギー範囲における電子の状態の数がどれだけあるかを表す状態密度や一般化帯磁率なども求めることができる。

一般化帯磁率を求めることで、フェルミ面のネスティングが起きているかどうかを知る手がかりとなる。ネスティングとは、相対するフェルミ面の全部または一部が平行移動によって重なる状態にあることであり、形状記憶効果はこのネスティングに起因しているのではないかといわれている。しかし、そのメカニズムについては完全には解明されておらず、形状記憶合金であれば必ずネスティングが生じるのかもはっきり分かっていない。そこで本研究では、強磁性形状記憶合金を含む多くの形状記憶合金と形状記憶を持たない合金についてフェルミ面やその他の物理量を求め、ネスティングの有無や特徴的な傾向がみられないかを系統的に調べた。

バンド計算を行い、フェルミ面の描画と一般化帯磁率の計算を行った結果、フェルミ面に関しては形状記憶合金の場合はフェルミ面のネスティングは特徴的に表れていたといえるが、一般化帯磁率については、ネスティングの存在を示す高いピークは必ずしも確認できなかった。ただし、一般化帯磁率の計算は、 k 点の取り方等に非常に敏感であり、計算した k 点の数が少なかったことによる精度不足の可能性もある。そのため、今後、精度の高い一般化帯磁率の計算が必要かと考えられる。

(指導教員 松本紳)