

MedeAは原子・分子スケールのシミュレーション技術を基に各種の物性評価を行うための統合支援環境です。MedeAには、マテリアルズインフォマティクスに不可欠なシミュレーションによる大量データ生成を簡便に行うツールMedeA-High Throughput (HT)が搭載されています。本稿ではMedeA-HTを用いたSlater-Pauling曲線の作成例を示します。

■ 概要

第一原理計算が比較的容易に行える現在において、データ生成を目的とし異なるモデル構造に対して、同じ計算を繰り返し実行する場面が増えています。MedeA-HT機能を活用することで、そうした大量の繰り返し計算を簡単に自動化することができます。

本稿ではMedeA-HT機能を活用して、Half-Metal 強磁性体 (Heusler 合金) の Slater-Pauling 曲線を求めてみます。Slater-Pauling 曲線とは、合金中の組成の違いによる磁気モーメントの変化をプロットした図のことです。

■ フローチャートを用いた計算の設定

計算に用いる構造はCrystallography Open Databaseから「Co₂YZ」の組成となる結晶構造をMedeA InforMaticAを用いて検索・抽出しました。別途、図1に示すフローチャートを作成し計算を実行します。MedeA-HT Launchpadの機能であるFor Each Structureループで全構造に対してVASPによる構造最適化とエネルギー計算を実行します。結果はテーブルに収められテキストとして出力されます。

■ 計算結果

計算結果をもとにSlater-Pauling則を確認してみます。

Galanakisらの報告¹⁾によると、Heusler合金におけるSlater-Pauling則は次式です。

Slater-Pauling rule: $M = Z - 24$

ここでMは総スピン磁気モーメント、Zは総価電子

数です。

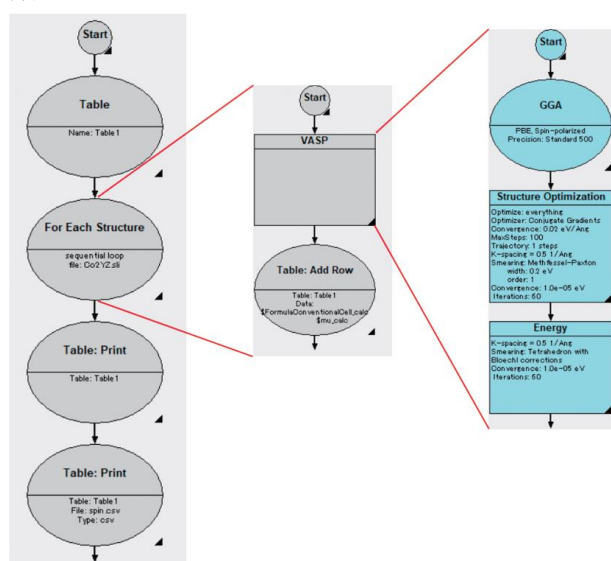


図1. MedeA-HTにおける手続きとデータの流れを図示したもの。

各元素の価電子数を基に、Slater-Pauling則によるスピン磁気モーメントと計算結果をプロットしたものを図2に示します。Slater-Pauling則と計算結果がよく一致していることが分かります。一方で、Slater-Pauling 則から外れている点(Co₂NbSn)があります。この状態密度図をみるとHalf-Metal 強磁性体になっていないことが分かります(図3)。

また、価電子数が28の組成が今回の計算では扱われていません。これは、そのような構造がデータベースに登録されておらず、「Co₂YZ」の検索結果で得られなかったためです。価電子数が28となる組成は、今回計算した一連の構造から類推すると、例えば、Co₂MnGaが挙げられます。Co₂MnGaがHalf-Metal強磁性体であるかどうかは状態密度図を確認する必要がありますが、単に磁気モーメントが

Slater-Pauling則に従っているかどうかを確認するだけでも推測できます。

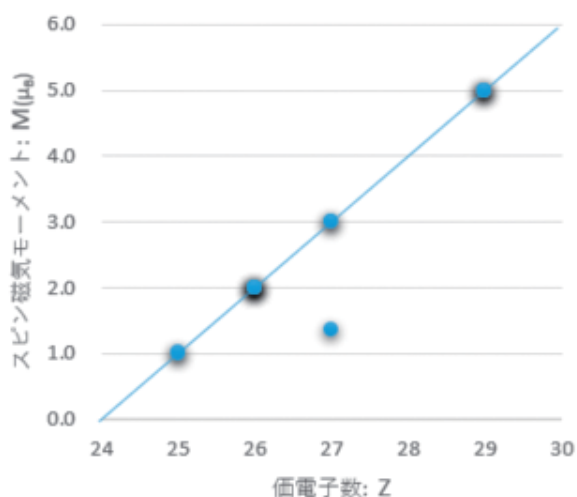


図2. 計算結果のプロット。実線はSlater-Pauling則。

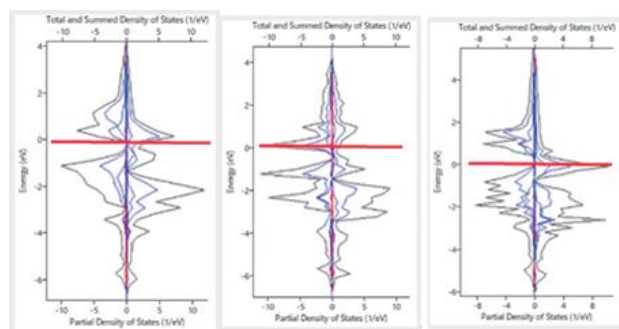


図3. 左から Co_2CrGa 、 Co_2NbSn 、 Co_2VSn 状態密度図。

多数のモデル構造を扱う場合には、状態密度図を逐一確認するのは煩雑ですが、特定の物性値(例えば、磁気モーメント)として表現できると、解析をするうえで扱いやすくなります。特にインフォマティクスを利用した研究では、このような記述子の選択が肝要です。

今回の例では、磁気モーメントはHalf-Metal強磁性体を表現する記述子として有効であることが分かります。

1) I. Galanakis, P. H. Dederichs and N. Papanikolaou, *Phys. Rev.* **2002**, B 66, 174429.