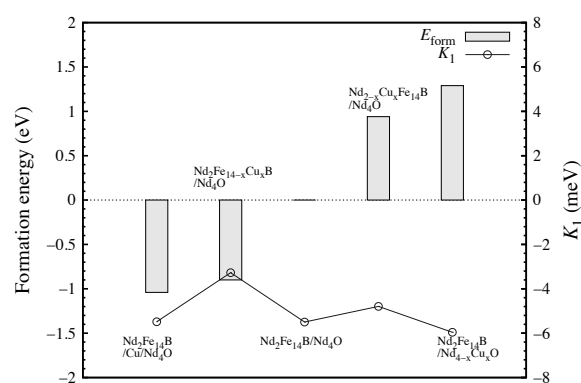


ネオジム磁石材料組織副相の第一原理計算

東工大総理工¹、東大理 ESICMM²、東大物性研³ 合田 義弘^{1,2}、立津 慶幸²、常行 真司^{2,3}
gohda.y.ab@m.titech.ac.jp

磁石材料の性能を電子論的に評価するにあたり、材料組織の効果を考慮する事は必須である。これは、構造材料と事情が非常に類似しており、構造材料において原子スケールでの剪断歪みが結晶面の一斉すべりではなく転位の移動によって起こると同様に、大抵の磁性材料では原子の磁気モーメントが一斉回転するのではなく、磁壁の移動によって磁化反転が起こる事による。ネオジム磁石の材料組織において、主相である $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の粒内は欠陥が非常に少なく磁壁のピン留めが起こりにくいため、主相と副相の界面から主相内部への磁壁の侵入の容態を明らかにする事が磁化反転挙動を理解する鍵となる。そのための基礎的知見を得るために、我々は第一原理電子状態理論により、ネオジム磁石の主相・副相界面の原子構造と局所磁気特性を明らかにする事を目指している。

本ポスターでは界面近傍における Cu 添加効果について報告する。実験では Nd-Cu の合金拡散により保磁力の向上が確認されている[1,2]。合金拡散の主要な効果の一つは Cu 添加による Nd-Cu 合金の融点降下であり、濡れ性の非常に良い良質な材料組織の形成に寄与していると考えられる。本研究では、上記にとどまらない Cu のさらなる役割を明らかにすべく、Cu 原子による局所磁気異方性への直接的な影響を考察した。副相としては、Nd が fcc 副格子を取る NdO_x 相を対象とした[2,3]。第一原理計算には局在擬原子基底による OpenMX コード[4]を用い、「京」において大規模並列計算を行った。図は界面近傍の様々な位置に Cu 原子を配置した時の界面構造に対する生成エネルギーと Cu 近傍主相 Nd サイトの局所磁気異方性定数である。この結果より、Cu は主相と副相の間の侵入型サイト、あるいは主相の界面側第一層の置換型 Fe サイトに配置されると安定である事が分かった。さらに、主相第一層 Fe サイトに Cu が配置された場合には同じ面内に存在する Cu 近傍の Nd 原子の磁気異方性が改善する事も明らかになった。Fe サイトの局所磁気異方性も摂動論に基づく手法[5]によって評価した。また、大型実験施設 Spring-8 と連携し[6]、放射光により計測された副相の特異な格子定数の温度依存性を明らかにすべく理論解析を推進している。



図：界面 Cu の生成エネルギーと Cu 近傍 Nd 原子の磁気異方性定数 K_1 。

- [1] H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, and K. Hono, *Acta Mater.* **61**, 1982 (2013).
- [2] H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, T. Shima, and K. Hono, *Acta Mater.* **60**, 819 (2012).
- [3] T. Fukagawa *et al.*, *J. Magn. Magn. Mater.* **322**, 3346 (2010).
- [4] T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **67**, 155108 (2003); <http://www.openmx-square.org/>
- [5] Z. Torbatian, T. Ozaki, S. Tsuneyuki, and Y. Gohda, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 242403 (2014).
- [6] T. Nakamura, A. Yasui, Y. Kotani, T. Fukagawa, T. Nishiuchi, H. Iwai, T. Akiya, T. Ohkubo, Y. Gohda, K. Hono, and S. Hirose, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 202404 (2014).