

「京」によるネオジム磁石組織界面の第一原理計算

合田 義弘、立津 慶幸：東工大物質理工、常行 真司：東大院理

永久磁石の性能を評価するにあたり、材料組織の効果を考慮する事は必須である。なぜなら、ネオジム磁石などの磁石材料の主相単結晶内部は欠陥が非常に少なく、磁壁のピン留めが起こりにくいからである。つまり、主相と副相の界面から主相内部への磁壁の侵入の起こりやすさが磁化反転挙動を支配していると考えられる。したがって我々は、「京」を用いた大規模第一原理計算により、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理論解析している。

実験的には、ネオジム磁石への Cu 添加に伴う Nd-Cu の合金拡散により保磁力の向上が確認されており、その効果の一つは Cu 添加による Nd-Cu 合金の融点降下に伴う良質な材料組織の形成である。しかしながら、Cu 原子による直接的な磁気特性への影響は明らかになっていない。そこで本研究では、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影響を考察した[1,2]。副相としては、Nd が fcc 副格子を取る NdO_x 相を対象とし、局在擬原子基底による第一原理計算コード OpenMX により「京」において大規模並列計算を行った。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を比較した結果、図 1 の様に 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。また、主相内部では不安定であり、さらに副相内部よりも界面により安定に存在する事も確かめられた。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 近傍の主相 Nd 原子の局所磁気異方性が改善する事も明らかになった (図 1)。

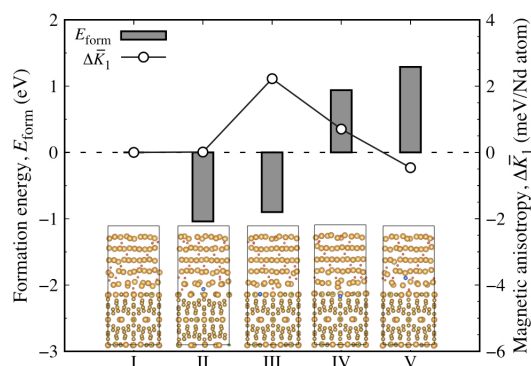


図 1：様々な界面位置に Cu を配置した際の生成エネルギーと Nd 磁気異方性定数変化。

参考文献

- [1] Y. Gohda, Y. Tatetsu, and S. Tsuneyuki, Mater. Trans., in press.
- [2] Y. Tatetsu, S. Tsuneyuki, and Y. Gohda, Phys. Rev. Appl. **6**, 064029 (2016).
- [3] Z. Torbatian, T. Ozaki, S. Tsuneyuki, and Y. Gohda, Appl. Phys. Lett. **104**, 242403 (2014).

関連 web

<http://www.cms.materia.titech.ac.jp/index.html>

<http://www.nims.go.jp/ESICMM/>