

Fe ベース永久磁石材料のマテリアルデザインに向けて  
Towards computational design of Fe-based permanent magnet materials

小倉昌子、赤井久純

M. Ogura and H. Akai

大阪大学大学院理学研究科物理学専攻

Department of Physics, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-0043

現在実用とされている永久磁石材料の多くは Fe をベースとしたものである。Fe ベースの永久磁石材料の設計では第 2、第 3 の元素を加えて Fe の性能を高めるという戦略がよく取られる。例えば、有名な Nd-Fe-B 磁石[1]では希土類元素である Nd が磁気異方性を高め、典型元素である B はキュリー温度と磁気異方性を高める効果がある。このような磁石として重要な性能、磁気モーメント・キュリー温度・磁気異方性の増加について、その起源はきちんと理解されておらず、これまでの永久磁石材料開発は実験で経験的な推量に基づくものばかりであった。磁石材料の探索を効率的に行うためには、まず、磁気モーメント・キュリー温度・磁気異方性増加の起源を微視的視点から理解することが重要である。本講演では以下の Fe ベース永久磁石材料のマテリアルデザインに向けた 2 件の研究について紹介する。

Fe に少量の Cr や V を添加すると磁化は減少するもののキュリー温度が高くなることは古くから実験的によく知られている。本研究では bcc Fe に Cr を不純物として導入した場合の電子状態の変化を計算し、キュリー温度増大の起源について議論した[2]。Cr の d 状態は Fe の d 状態に比べて高いエネルギーに位置しているため、最近接の Fe の d 状態は Cr の d 状態との混成によってエネルギーの低い方へ押し下げられる。その結果、最近接の Fe は Co に近い電子構造を持つ。この「Co 化した Fe」の影響で他の Fe サイトの磁気モーメントや交換相互作用が増大し、キュリー温度も高くなる (Cr は Fe と逆向きの磁気モーメントを持つので全体としての磁化は減少する)。この効果を利用した永久磁石の磁気異方性を増加させるための、ネール温度の高い反強磁性体の設計についても紹介する。

Sm-Fe-N 磁石[3]も Nd-Fe-B 磁石と同様、Fe に希土類元素と典型元素を加えた系である。以前は典型元素の添加による磁気異方性の増加は、典型元素を添加したことによって体積が膨張するためと考えられてきたが、現在では Fe の 3d 状態と典型元素の 2p 状態の混成が磁性の増大に重要な役割を果たしていることが指摘されており[4]、磁気異方性の増大にも関わっていることが予想される。本研究では  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  の電子状態を計算し、N を加えると体積によらず磁気異方性が増大することを確認した。得られた磁気異方性の増大について N の添加による電子状態の変化から議論する。

[1] M. Sagawa et al., J. Appl. Phys. **55**, 2083 (1984).

[2] M. Ogura, H. Akai and J. Kanamori, J. Phys. Soc. Jpn **80**, 104711 (2011).

[3] J. M. D. Coey and H. Sun, J. Magn. Magn. Matter. **87**, L251 (1990).

[4] J. Kanamori, Hyperfine Interact. **21**, 159 (1985); J. Alloys and Compounds **408-412**, 2 (2006).