

ThMn₁₂型希土類磁石の磁気異方性

Magnetocrystalline Anisotropy of ThMn₁₂-type Rare-Earth Magnets

三宅隆¹、原嶋庸介^{1,2}、木野日織³、石橋章司¹、寺倉清之¹

T. Miyake¹, Y. Harashima^{1,2}, H. Kino³, S. Isihibashi¹ and K. Terakura¹

¹産総研ナノシステム、²NIMS-ESICMM、³NIMS-MANA

¹Nanosystem Research Institute, AIST, ²NIMS-ESICMM, ³NIMS-MANA

1966年のSmCo₅の出現以来、これまでに数々の希土類磁石が発明されてきた。なかでもネオジム磁石(Nd₂Fe₁₄B)は最高の性能指数を誇り、様々な工業製品に実用化されている。ネオジム磁石の欠点は耐熱性で、高温(~200°C)で使用するにはNdの一部をDyに置換して保磁力を増強する。しかしDy置換により磁化が減少して性能が劣化する。希少金属であるため元素戦略上の問題も抱える。そのためDyを用いない高性能磁石の開発、新規磁石の提案が強い関心を集めている。

希土類磁石の磁気異方性では希土類元素の4f電子が重要な役割を担う。4f電子の軌道磁気モーメントは結晶場により最適な方向が決定される。これがスピン軌道相互作用、フント結合、軌道混成を経て、遷移金属の磁気モーメントの方向に影響を与える。したがって、希土類サイトにおけるポテンシャルの非球対称成分から磁気異方性の強さを見積もることができる。われわれは新磁石化合物探索の第一歩としてThMn₁₂型のネオジム化合物の磁気特性を調べた。QMASコード[1]を用いたDFT-GGA計算によりKohn-Shamの有効ポテンシャルを求め、結晶場係数を算出した。希土類の4f状態はオープンコアとして扱い、軌道混成効果は無視した。NdFe₁₁Tiに対してNをドーブすると、結晶場係数A₂₀が大幅に増加した。この結果は強い一軸異方性を示唆し、実験と一致する。これは、NドーブによりNdの5d電子がNに引き寄せられ、有効ポテンシャルの形状が変化するためと考えられる。またNdFe₁₂とNdFe₁₁Tiを比較すると、Feの8iサイトをTi原子で置換することによりA₂₀の符号が逆転することを見いだした。これは8iサイトへのTi置換によりNdの磁気モーメントの方向が容易面から容易軸に変化することを意味し、Ti置換が複雑な磁気構造を誘起することを示唆する。

[1] <http://qmas.jp/>