

格子拡張による高磁化 Mn 基規則合金の理論設計

三橋唯澄¹, 辻川雅人^{1,2}, 白井正文^{1,2}

(¹ 東北大学 電気通信研究所, ² 東北大学 スピントロニクス学術連携研究教育センター)

Theoretical design of Mn-based ordered alloys with high magnetization by lattice expansion

Y. Mitsuhashi¹, M. Tsujikawa^{1,2}, M. Shirai^{1,2}

(¹ RIEC, Tohoku Univ., ² CSRN, Tohoku Univ.)

はじめに

現在、自動車用モータや風力発電機には高価なネオジム磁石が使われているが、希少元素を使わない高性能磁石材料の開発が求められている。そこで、高結晶磁気異方性と 600 K を超えるキュリー温度を有する正方晶 $D0_{22}$ 型 Mn_3Ga 合金に注目した¹⁾。しかし、 Mn_3Ga はフェリ磁性を示し、磁化が小さいことが問題である。そこで本研究では、 Mn_3Ga の Mn 原子を Fe 原子への置換ならびに格子拡張による強磁性状態発現の可能性を理論的に検証した。

計算方法

正方晶 $D0_{22}$ 型 Mn_3Ga , Mn_2FeGa , Fe_2MnGa を対象として、フェリ磁性と強磁性の生成エネルギーと体積の関係を第一原理計算に基づいて調べた。計算には平面波基底と Projector Augmented Wave 法を用いた第一原理計算コード VASP²⁾ を用いた。また、交換相関エネルギーには一般化勾配近似(GGA)を用いた。

計算結果

正方晶 $D0_{22}$ 型 Mn_3Ga , Mn_2FeGa , Fe_2MnGa のフェリ協性と強磁性のエネルギー差を、常圧からの体積膨張率の関数として Fig. 1 に示す。この図から Fe 組成の増加に伴い強磁性状態が安定化することがわかる。これは最隣接 Mn(2b)-Mn(4d)原子間に比べて、Mn(2b)-Fe(4d)原子間にはたらく反強磁性相互作用が弱いためである。さらに Mn(2b)-Fe(4d)原子間距離を 8%程度広げると、強磁性相互作用に変化する。いずれの合金も体積膨張に伴いフェリ磁性が安定化していくが、ある体積を超えると逆にフェリ磁性と強磁性のエネルギー差が小さくなっていく。この体積において低磁化強磁性相から高磁化強磁性相への転移が生じるためである。特に Fe_2MnGa では体積を約 23%膨張させると強磁性状態が安定になる。このときの Fe_2MnGa の磁化は 1.7 T と $Nd_2Fe_{14}B$ 磁石に匹敵する値が得られる。一方、強磁性状態における一軸結晶磁気異方性エネルギー K_u は $0.92 MJ/m^3$ であり、フェリ磁性相 ($K_u = 1.30 MJ/m^3$) と比較して小さくなり、こちらも改善する必要がある。

実際に体積を膨張させるため、これら合金の Ga 原子を原子半径の大きい典型元素で置換した合金に対する計算結果についても報告する。

謝 辞

本研究は科学技術振興機構(JST)産学共創基礎基盤研究プログラムの助成により行われた。

参考文献

- 1) H. Niida *et al.*, J. Appl. Phys. 79, 5946 (1996).
- 2) G. Kresse and J. Furthmüller, Vienna *Ab-initio* Simulation Package, University of Wien, 2001

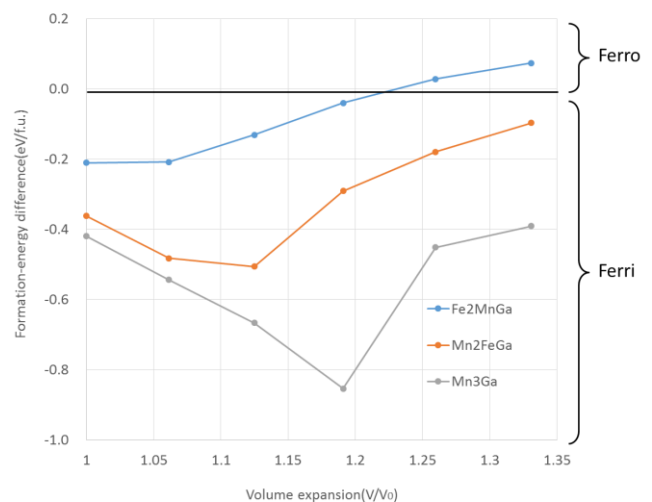


Fig. 1 The formation-energy difference between ferri- and ferromagnetic states as a function of the unit-cell volume relative to that under ambient pressure calculated for Mn_3Ga , Mn_2FeGa and $MnFe_2Ga$.