

## 局在基底波動関数を用いた結晶場計算

-Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B への適用-

吉岡匠哉, 土浦宏紀, Pavel Novák\*

(東北大学大学院工学研究科, \*Institute of Physics of ASCR)

Crystal field parameters based on Wannier functions: Application to Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B

Takuya Yoshioka, Hiroki Tsuchiura, Pavel Novák\*

(Tohoku University, \*Institute of Physics of ASCR)

## 緒言

Nd-Fe-B 焼結磁石の保磁力機構を解明する上で、主相 Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B の磁気的性質を微視的な立場から明らかにする必要がある。一方で、保磁力の評価を行うためには、電子論的計算手法は現在のところ不十分であり、マイクロ磁気学シミュレーションの手法に頼ることになる。したがって、本研究では微視的・電子論的計算から得られた情報を最大限取り入れたマイクロ磁気学シミュレーションモデルを構築し、それを用いて保磁力評価を行う。この目的のためには、各イオンのもつ磁気モーメントをはじめ、Nd サイト、Fe サイトの局所的磁気異方性、Nd-Fe 間および Fe-Fe 間の交換相互作用といった情報を第一原理計算に基づき評価する必要がある。本講演では、近年新たに開発された局在基底波動関数を用いた計算手法<sup>1)</sup>を用いて Nd の結晶場係数  $B_l^m$  を高次まで微視的に評価した結果について報告し、実験との比較を行う。

## 計算手法

希土類永久磁石の結晶磁気異方性は、主に希土類イオンの 4f 電子に働く結晶電場によってもたらされる。結晶電場を定めるのは 4f 電子の周囲にある電荷分布であり、これは第一原理計算を用いることにより正確に計算することが出来る。ここではまず、第一原理計算コード WIEN2k を用いて Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B の電子状態を解析し、4f 軌道の局在基底波動関数を用いて結晶電場ハミルトニアン  $H_{CF}$  を評価する。

$$H_{CF} = \sum_{l,m} B_l^m \hat{C}_l^m$$

ここで、 $\hat{C}_l^m$  は球面テンソル演算子である。この手法では局在波動関数を用いるため従来の手法で問題となったマフィンティン半径依存性が軽減されることが知られている。

## 結果

Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B の f サイトおよび g サイトにおける結晶場係数  $B_l^m$  の主要な寄与を下表に示す。本講演では、Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B のより高次結晶場係数について報告し、実験的に知られているこれらの物質における磁気異方性の特徴について議論する。また、低温において実現するスピン再配列の再現可能性について議論する。

TABLE: Crystal field parameters

	$B_2^0$	$B_2^{\pm 2}/i$	$B_4^0$	$B_4^{\pm 2}/i$	$B_4^{\pm 4}$
Nd (f)	1224 K	±159 K	-218 K	∓101 K	55 K
Nd (g)	950 K	∓691 K	-199 K	±49 K	-93 K

## 参考文献

- 1) P. Novák, K. Knížek, and J. Kuneš: Phys. Rev. B **87**, 205139 (2013).