

Nd₂Fe₁₄B の結晶磁気異方性定数の温度依存性の理論的研究

佐々木良, 三浦大介, 佐久間昭正

(東北大学)

A theoretical study on the temperature dependence of magnetic crystalline anisotropy constants in Nd₂Fe₁₄B

R. Sasaki, D. Miura, and A. Sakuma

(Tohoku Univ.)

1 はじめに

ネオジム磁石は飽和磁化が大きく優れた永久磁石であるが、高温では保磁力が著しく低下するという問題がある。保磁力には結晶磁気異方性が大きく影響するため、結晶磁気異方性の温度依存性は温度上昇に伴う保磁力低下の機構に大きく関わると考えられる。本研究は、結晶磁気異方性定数 K_1, K_2 の温度依存性の計算手法と温度依存性に影響する要因を調べることを目的とする。

Nd₂Fe₁₄B の結晶磁気異方性は Nd イオンの 4f 電子が主であると考えられている¹⁾。この考えに基づき、4f 電子に働く周囲のイオンからの結晶電場と交換磁場を取り入れた計算によって、Nd₂Fe₁₄B の磁化曲線を再現した研究²⁾がある。本研究でも同様のハミルトニアンを用い、結晶電場を摂動論で扱うことで (1) 式の自由エネルギーを求め、(2) 式の異方性エネルギーの現象論的な表式と比較することで K_1, K_2 の温度依存性を求めた。

$$F(\theta) = -k_B T \ln \text{Tr} \exp \left[-\frac{\hat{H}(\theta)}{k_B T} \right] \quad (1)$$

$$E_A(\theta) = K_0 + K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + K_3 \sin^4 \theta \cos 4\phi + K_4 \sin^6 \theta + K_5 \sin^6 \theta \cos 4\phi + \dots \quad (2)$$

このとき、周りのイオン配置を表す結晶場パラメータと、鉄イオンと希土類イオンの交換相互作用の強さをパラメータとして、実験値を再現するようにこれらの値を求めた。さらにパラメータを変化させることで温度依存性に与える影響を調べた。

2 結果および考察

図 1 に K_1, K_2 の温度依存性の変化を示す。破線が実験値³⁾で、実線が計算結果である。 K_1 に関しては実験値を比較的よく再現しているといえる。この時用いた結晶場パラメータ A_2^0, A_4^0, A_6^0 と交換相互作用の強さ H_m は、それぞれ $A_2^0 = 515[\text{K}/a_B^2]$, $A_4^0 = -48[\text{K}/a_B^4]$, $A_6^0 = -0.06[\text{K}/a_B^6]$, $H_m = 364[\text{K}]$ だった (a_B : ボーア半径)。

図 2 は、上記のパラメータのうち、交換相互作用の強さ H_m を半分の 182 にした結果である。図から交換相互作用が弱くなると K_1 が著しく低下することが分かる。逆に強くなれば、高温での K_1 が増加することが確認できた。Nd₂Fe₁₄B の (001) 表面では、結晶場パラメータ A_2^0 が大きく変化するという理論計算の結果⁴⁾が示されているが、表面において交換相互作用が弱まることも表面の結晶磁気異方性の低下に影響している可能性が考えられる。結晶場パラメータは 4f 電子の周りのイオンの位置と電荷により決まるので、構造が決まれば A_2^0, A_4^0, A_6^0 もそれぞれ決定される。したがって今後、第一原理計算によって現実的な結晶場パラメータの値が与えられれば、結晶磁気異方性定数の温度依存性について更に進んだ議論を行うことができる。講演では詳しい計算手法についても説明する予定である。

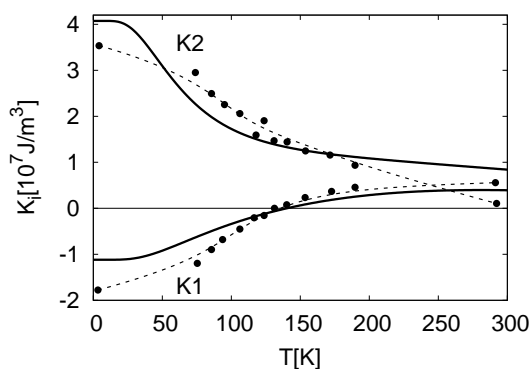


Fig. 1 The temperature dependence of magnetic crystalline anisotropy constants in Nd₂Fe₁₄B (the solid curves are theoretical results, the dashed are experimental).

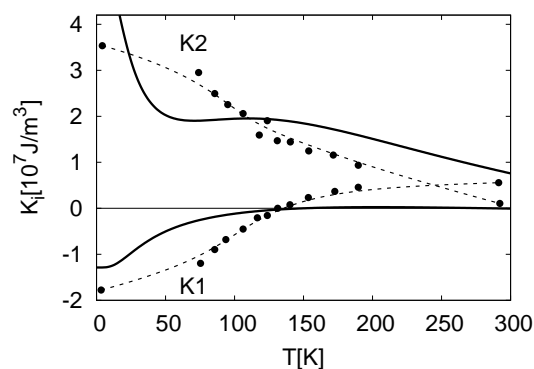


Fig. 2 The temperature dependence of magnetic crystalline anisotropy constants calculated using the same parameters as Fig.1 except $H_m=182$.

References

- 1) J.F. Herbst : *Rev. Mod. Phys.*, **63**, 819 (1991).
- 2) M. Yamada, H. Kato, H. Yamamoto, and Y. Nakagawa : *Phys. Rev. B*, **38** 620 (1988).
- 3) O. Yamada, H. Tokuhara, F. Ono, M. Sagawa : *J. Magn. Magn. Mater.*, **54-57**, 585 (1986).
- 4) H. Moriya, H. Tsuchiura, and A. Sakuma, : *J. Appl. Phys.*, **105** 07A740 (2009)