

$L1_0$ -FeNi 規則合金への軽元素添加効果の第一原理計算

辻川 雅人^{1,2}, 三浦良雄³, 白井 正文^{1,2}
(東北大通研¹, 東北大 CSIS², 京都工繊大³)

First principles study of light-element doping effects on $L1_0$ -order FeNi

Masahito Tsujikawa^{1,2}, Yoshio Miura³, Masafumi Shirai^{1,2}

(¹RIEC, Tohoku Univ., ²CSIS, Tohoku Univ., ³Kyoto Inst. of Technol.)

はじめに

$L1_0$ 型 FeNi 規則合金は高い保磁力を有することから貴金属フリーな磁石材料として注目されている。永久磁石の材料には大きな飽和磁化と保磁力が必要とされる。 $L1_0$ -FeNi は十分な飽和磁化を持つ反面、保磁力の向上が重要な課題であり、規則度の向上や c 軸歪み、第三元素の添加等により十分な保磁力を得るための研究が進められている[1,2]。本研究では軽元素添加が $L1_0$ -FeNi の磁性へ与える影響に着目し、第一原理計算により第三元素添加の効果を調べた。

方法

電子状態計算には、平面波基底と Projector Augmented Wave 法を用いた第一原理計算コード vasp を用いた[3]。結晶磁気異方性の起源であるスピン軌道相互作用は摂動形式で取り入れられており、結晶磁気異方性エネルギー(MAE)の見積りは force-theorem を用いて行った。MAE は値が正のときに垂直磁気異方性を意味するように定義した。

結果

初めに添加軽元素 B, C, N, O, F の最安定位置の決定を行った。B は Ni 層の八面体の中心位置、C, N, F, O は Fe 層の八面体中心位置が最安定サイトであった。形成エネルギーおよび結合エネルギーの計算から、C, N 添加が B, O, F 添加に比べ安定であることが示された。図 1 に示すように MAE の増大は B, C, N, F 添加にて確認された。特に効果の大きな C, N 添加では、2.8%の軽元素添加により完全規則 $L1_0$ -FeNi に比べ MAE がそれぞれ 75%, 40%増大する結果が得られ、軽元素添加が垂直磁気異方性の向上へ有効であることが明らかとなった。MAE 増大の起源としては、格子変形の効果や化学結合による FeNi の電子状態変化等が考えられる。構造および電子状態の解析から、格子変形と MAE の間に相関は無く、隣接 Fe と Ni サイトの価電子数増大と MAE の間に相関がみられた。リジッドバンドモデルからも FeNi の価電子数増大に伴う MAE 増大が予想され、C, N 添加による Fe および Ni の価電子数増大が MAE 増大の一因であると考察される。

謝辞

本研究の一部は、文部科学省元素戦略プロジェクト<拠点形成型>元素戦略磁性材料研究拠点(ESICMM)、ならびに科学研究費補助金基盤研究(S)(No.2522091)により助成を受けて実施した。

参考文献

- 1) T. Kojima et al., J. J. Appl. Phys. 51, 010204 (2012).
- 2) T. Kojima et al., J. Phys.: Condens. Matter 26, 064207 (2014).
- 3) G. Kresse and J. Furthmuller, Vienna Ab-initio Simulation Package University of Wien, 2001.

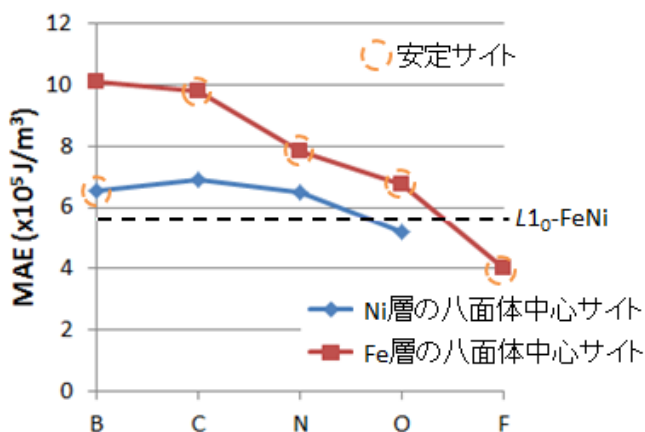


図 1 : 軽元素添加 $L1_0$ -FeNi の結晶磁気異方性エネルギー(MAE)