

## Nd-Fe-B 磁石における磁化反転機構の解析

吉岡匠哉, 土浦宏紀

(東北大学大学院工学研究科, ESICMM)

Analysis of Magnetization Reversal Mechanism in Nd-Fe-B Magnets

Takuya Yoshioka, Hiroki Tsuchiura

(Tohoku University, ESICMM)

### 緒言

希土類磁石, 特に Nd-Fe-B 磁石の保磁力機構を解明することは, 工業的応用のみならず学術的見地からも極めて重要である. そのためには, 主相と粒界相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, 応用上もっとも興味深い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, 現時点でとりうる最前の理論的アプローチは, 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とである. そこで我々は, 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し, Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相を表現する有効スピンモデルを構築した. 本講演では, このモデルを用いて Nd-Fe-B 磁石の有限温度における磁気異方性や保磁力を計算した結果について報告する.

### 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. 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, 結晶電場ハミルトニアン  $H_{CEF}$  を構築する. 次に, ハミルトニアンに基づく自由エネルギーから有限温度の磁気異方性定数を見積もる. 最後に原子スケールの LLG 方程式に従って保磁力を計算する. ここで各イオン磁気モーメント, Fe 副格子の磁気異方性, 交換相互作用に関しては実験値を援用する.

### 結果

Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B における磁化反転プロセスを下図に示す. ここでは(001)表面に Nd イオンが露出している状況を想定している. 本講演では, 実験に対応した界面をもつ微視的スピンモデルを構築し, マイクロ磁気学シミュレーションの結果から保磁力低下の原因について議論する.

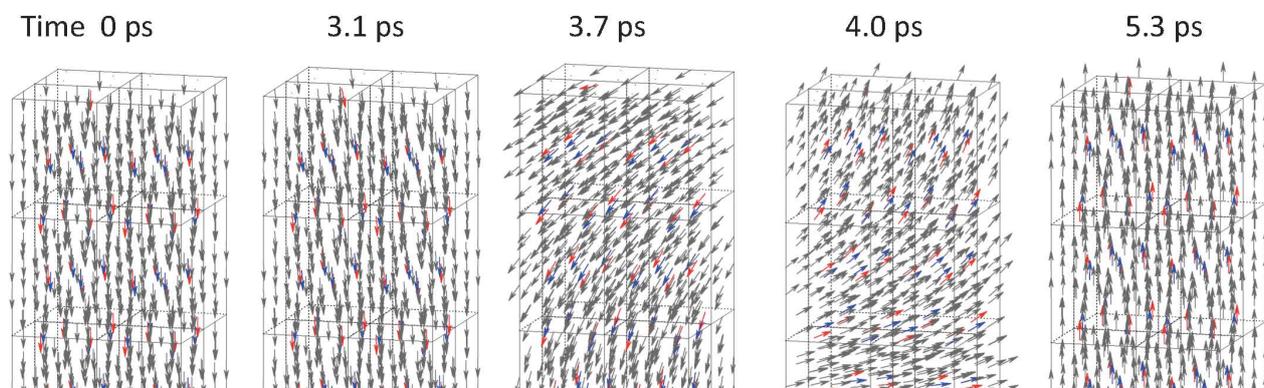


図 磁化反転プロセス