

Nd-Fe-B 磁石の保磁力に対する表面 Nd の磁気異方性の効果

西野正理¹, Ismail Enes Uysal¹, 宮下精二^{2,1}

(¹ 物材機構、² 東大物性研)

The effect of the surface magnetic anisotropy of Nd atoms on the coercivity in Nd-Fe-B magnets

Masamichi Nishino¹, Ismail Enes Uysal¹, and Seiji Miyashita^{2,1}

(¹NIMS, ²ISSP, Univ. of Tokyo)

イントロダクション

ネオジウム磁石 Nd-Fe-B は高い保磁力を持ち、モーターや発電機などに利用されている。新規磁石材料設計には保磁力の機構解明が重要であるが、依然として未解明の部分が多い[1]。保磁力機構の微視的なスケールからの解明には、原子論に基づくモデル化とそのダイナミクスの解析が必要である。我々は、連続体モデルによるマイクロマグネティクス計算とは異なる方法論、すなわち、結晶格子を反映した原子論的スピンモデルを用いた方法論によるネオジウム磁石の磁化反転解析を行ってきた[2]。保磁力制御のためには、磁気グレインの表面、界面の性質を知ることが重要である[1,3]。第一原理計算の研究において、(001)表面の Nd 原子の異方性はバルクにおける c 軸の容易軸とは異なり、c 面が容易面となることで保磁力の低下の原因となり得るという報告がなされた[4]。我々は、表面の Nd 原子の磁気異方性に注目して、ゼロ温度と有限温度において、表面の異方性が保磁力にどのような影響を与えるかについて調べた[5]。

磁化反転における表面の効果

磁化ダイナミクスを記述する基礎方程式である Landau-Lifshitz-Gilbert(LLG)方程式に熱揺らぎの効果を取り込んだ方法論 (Stochastic LLG 法[2]) をこの系に適用して解析を行った。原子論的モデルのマイクロなパラメータは、主として第一原理計から見積もった値を用いている。図1のように(001)面の表面 Nd 層の n 層目までの Nd 原子に対する異方性を修飾して、その効果が反転磁場に与える効果を調べた。表面 Nd 原子の異方性の修飾の仕方として、(1) 磁気異方性が無い、(2) 容易面を持つ、(3) 強化した容易軸異方性を持つ、それぞれの場合について調べた。ゼロ温度では表面一層(n=1)のみ修飾しても反転磁場は大きく変化するが、室温付近では殆ど効かず、効果が現れるには数層の修飾が必要であることが分かった。同様に(100)面における表面効果についても調べ、比較した。本公演では、3つの修飾の仕方に対して、表面の種類、温度、修飾層の深さといった因子が保磁力に及ぼす影響について議論する。

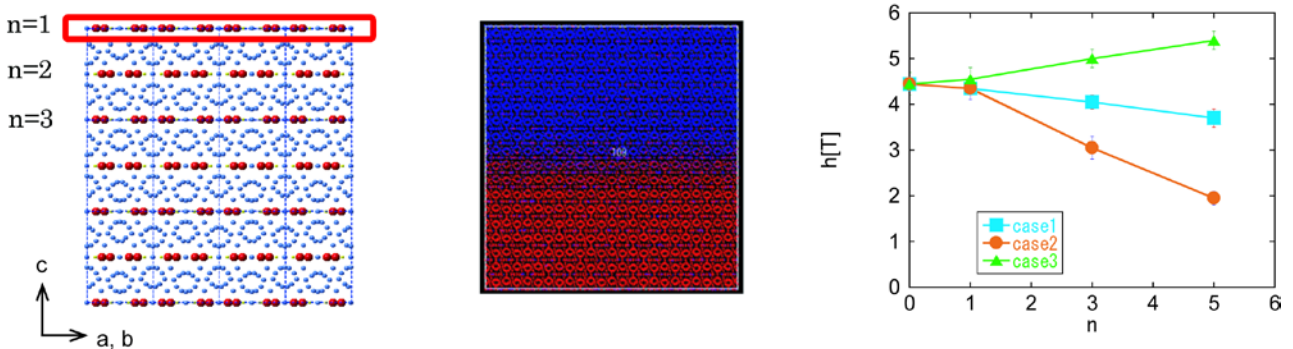


図1 (左) (001)面におけるnの定義、(中) 磁化反転の様子、(右) 室温付近でのnに対する保磁力の変化。

参考文献

- 1) S. Hirose, M. Nishino and S. Miyashita, Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol. 8, 013002 (2017).
- 2) M. Nishino, I. E. Uysal, T. Hinokihara, and S. Miyashita, Phys. Rev. B 102, 020413(R) (2020).
- 3) I. E. Uysal, M. Nishino, and S. Miyashita, Phys. Rev. B 101, 094421 (2020).
- 4) H. Moriya, H. Tsuchiura, and A. Sakuma, J. Appl. Phys. 105, 07A740 (2009).
- 5) M. Nishino, I. E. Uysal, and S. Miyashita, submitted. arXiv:2009.08572.