

Sm₂Fe₁₇N₃ の Zn による置換効果

Effect of Zn Addition in Sm₂Fe₁₇N₃ Crystal by First-principle Calculation

○ 柏谷 裕美¹、乙川光平^{1,2}、田中真人¹、小川博嗣¹、池浦広美¹、豊川弘之¹

(1.産総研, 2. 早稲田大学)

○ Hiromi Kashiwaya¹, Kohei Otagawa^{1,2}, Masahito Tanaka¹, Hiroshi Ogawa¹, Hiromi Ikeura¹,

Hiroyuki Toyokawa¹ (1.AIST, 2. Waseda University)

E-mail: h.kashiwaya@aist.go.jp

Sm₂Fe₁₇N₃ は、1990 年に磁気特性が報告された強磁性体であり[1]、Nd₂Fe₁₄B より高いキュリー温度と磁気異方性を有し、磁石材料として大変期待されている。しかし、その磁気特性は印加磁場や温度、作製時における窒素や不純物等の影響を強く受けると考えられる。そのため、磁気特性の最適化には、作製プロセスとともに、電子状態の最適化が重要である。近年高品質な Sm₂Fe₁₇N₃ 磁石を作製するために結晶粒の微細化が進み、さらに構成元素とは別の元素でコーティングする試みがなされている。本研究ではコーティングに用いた元素が磁石中に拡散することを念頭に、Sm₂Fe₁₇N₃ 磁石の置換効果を評価する。不純物の一例として Zn を選び、Fe のサイトに Zn が入った場合のエネルギーの計算を行った。結晶構造の Fe2, Fe7, Fe18, Fe41 は、それぞれ 6c, 18h, 18f, 9d サイトに対応している。k 点50までの計算では、最もエネルギーが低いサイトは 18f サイトであることが判明した。

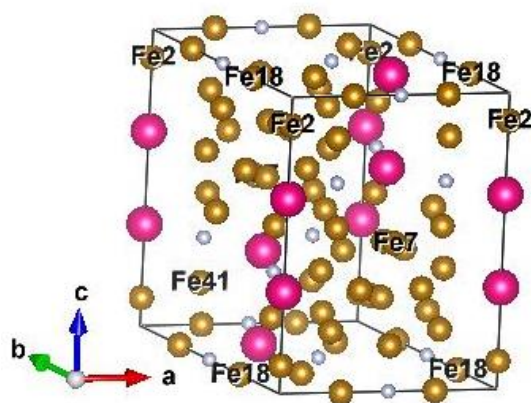


図1 Sm₂Fe₁₇N₃ の結晶構造

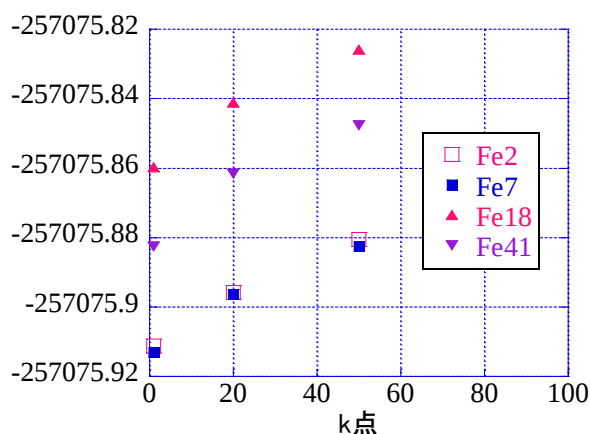


図2 Sm₂Fe₁₇N₃ の各サイトに Zn を置換した場合の全エネルギー

[1] J. M. D. Coey and H. Sun, J. Magn. Magn. Mater., 87, L251 (1990)