

Nd-Fe-B 焼結磁石の二粒子粒界相に関する第一原理計算

First-principles study on grain-boundary phases of Nd-Fe-B sintered magnet

東工大¹ ○(M1C)相内 優太¹, (PC)立津 慶幸¹, 合田 義弘¹Tokyo Tech¹, °(M1C)Yuta Aina¹, (PC)Yasutomi Tatetsu¹, Yoshihiro Gohda¹

E-mail: ainai.y.aa@m.titech.ac.jp

高い保磁力と大きな磁化から工業製品における Nd-Fe-B 焼結磁石の需要は高まるばかりであるが、高温領域における Nd 磁石の低保磁力の原因は分かっていない。磁気特性を理解する鍵は、磁壁移動のピン留めの要因となる材料組織界面の電子状態である。実験結果から、*c* 軸方向の界面近傍の元素比組成は Nd リッチであることが分かっている[1]。しかしながら、その構造に関する詳細は分かっていない。そこで我々は、Nd_xFe_{1-x} 合金 (0 < x ≤ 1) に対し第一原理計算を行い、生成エネルギーから構造安定性を比較した。その結果、初期構造を dhcp, fcc, bcc としたものの中では fcc を仮定した場合が安定となった。ただし、熱力学的には二元系では合金化しないことも分かった。

この状況を踏まえ、本研究では、Nd-Fe-B 焼結磁石における粒界相の構造同定を目的として、fcc Nd_xFe_{1-x} 合金に不純物として微量 O 原子を添加した Nd-Fe-O 合金に対し第一原理計算を行った。Nd-Fe-O 合金の初期構造の作成には、合金のランダムネスを小さなユニットセルで再現できる Special Quasirandom Structure 法[2]を用いて Nd, Fe および O の初期配置を決定した。この初期配置に対して密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード OpenMX[3]を用いて構造最適化を行い、生成エネルギーから安定性を比較した(Fig.1)。生成エネルギー E_{form} は以下の式で評価した。

$$E_{\text{form}} = E_{\text{NdFeO}} - (\alpha E_{\text{fcc-Nd}} + \beta E_{\text{bcc-Fe}} + \gamma/2 E_{\text{O}_2})$$

ここで E_{NdFeO} , $E_{\text{fcc-Nd}}$, $E_{\text{bcc-Fe}}$, E_{O_2} は Nd-Fe-O, fcc Nd, bcc Fe, O₂ の基底状態の全エネルギーを表す。α, β, γ は正の定数であり、組成比によって変化する。上述した Nd_xFe_{1-x} 合金は合金化しなかったが、解析の結果 Nd-Fe-O 合金は微小の酸素を含むことによって合金化が促進される可能性があることが分かった。

参考文献

- [1] T. T Sasaki, *et al.*; Acta Mater. **115**, 269 (2016).
- [2] A. Zunger, *et al.*; Phys. Rev. Lett. **65**, 353 (1990).
- [3] T. Ozaki; Phys. Rev. B. **67**, 155108 (2003).

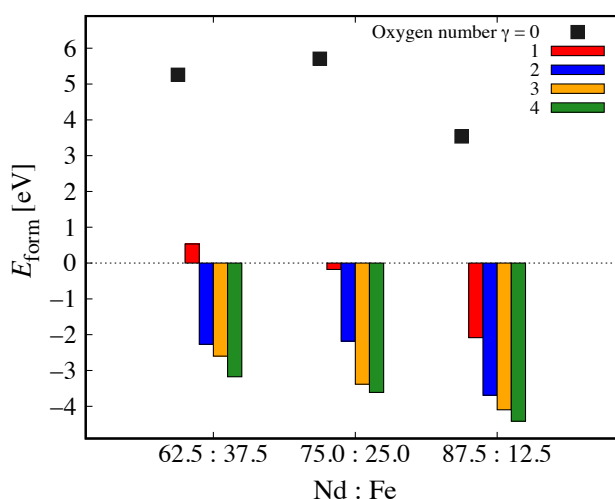


Fig.1: 各組成比に対する Nd-Fe-O 合金の生成エネルギー