

第一原理計算による宇宙環境下での利用を想定した 希土類永久磁石の電子・スピン状態の評価

Electron and spin states of rare earth permanent magnets for use in space
environments by first-principles calculation

工学院大, °(M2)鈴木 涼馬, 屋山 巴, 赤城 文子

Kogakuin Univ, Ryoma Suzuki, Tomoe Yayama, Fumiko Akagi

E-mail:cm20031@ns.kogakuin.ac.jp

1. 背景と目的

Nd₂Fe₁₄B, Sm₂Co₁₇ 系永久磁石は近年人工衛星など宇宙利用への活用が進められている。しかし、宇宙環境における放射線による減磁が問題となっている[1]。具体的な減磁の要因として、放射線粒子と磁石原子の衝突による原子の弾き出し(欠陥の生成)及び局所的な熱の発生が実験的に明らかにされている。本研究では、これらの希土類永久磁石の基本的な性質を明らかにし、欠陥の影響を調べるため第一原理計算によって電子・スピン状態を計算した。

2. 計算方法及び計算モデルの構築

計算には密度汎関数理論に基づく第一原理計算 VASP[2]を用いた。交換相関汎関数にはGGA PBEポテンシャルを用いた。カットオフエネルギーを 700 eV, k 点数は4×4×4, 格子定数は実験値[3]を基に決定した。スピン軌道相互作用を考慮, さらに GGA+U の方法を用いた。U 値を 6 eV とした。本研究では放射線による結晶中の原子の散乱による点欠陥生成をモデル化した(図 1)。散乱された原子は孤立原子になると仮定した。完全結晶を始状態, 点欠陥を含む結晶と弾き出し原子を終状態とし, これらのエネルギー差を点欠陥生成エネルギーと定義して式(1)で与える。式(1)の各項はそれぞれ完全結晶 E_{per} , 欠陥を含む結晶 E_{def} , 孤立原子モデル E_{iso} における電子の全エネルギーを示す。

$$E_{formation} = (E_{def} + E_{iso}) - E_{per} \quad (1)$$

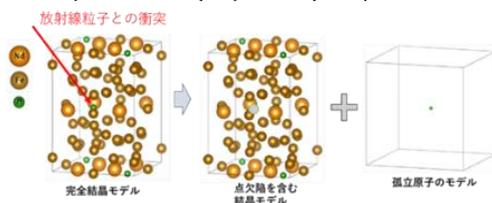


図 1. 点欠陥生成エネルギーの計算モデル

3. 計算結果

表 1, 2 に B, Fe, Nd 欠陥モデルの磁気モーメントと点欠陥生成エネルギーを示す。

表 1. 完全結晶と点欠陥モデルの磁気モーメント

	Magnetic moment (μ_B)			
	Perfect model	Defect model		
		B	Fe	Nd
VASP	148.6	150.5	148.0	147.7
Exp.[4]	149.2	-	-	-

表 1 より完全結晶の計算結果は実験値をよく再現している。B 欠陥を有する結晶では、磁気モーメントが大きくなった。これは、B の磁気モーメントの向きが他の原子と逆であるためと考えられる。

表 2. 各原子を抜いた際の点欠陥生成エネルギー

	Formation energy (eV)		
	B	Fe	Nd
VASP	9.2	-	9.3

表 2 より点欠陥生成エネルギーは B と Nd について同程度であるので、B に比べて組成比の大きい Nd 欠陥が多くなると考えられる。

4. 結論

本研究では放射線による永久磁石への欠陥生成の影響を調べるため、点欠陥を有する Nd₂Fe₁₄B について磁気モーメントと点欠陥生成エネルギーの計算を行った。Fe については今後の検討が必要だが、組成比の高い Nd 欠陥が多数となると考えられることから、欠陥の生成は全体の磁気モーメントを低下させる要因となることが示唆された。

[1] T. Bizen Dr. thesis, Kyoto University, (2009).

[2] G. Kresse and J. Futhmuller, Comp. Mater. Sci. **6**, 15, (1996).

[3] Hong-Shuo Li, R.C. Mohanty and C.G. Grenier, J. Magn. Magn. Mater. **162**, p.301-306, (1996).

[4] M. Yan, L. Q. Yu, J. M. Wu, X. G. Cui, J. Magn. Magn. Mater. **306**, p.176-180, (2006).