

## Cr や V による Fe の磁性増大

永久磁石はハードディスクドライブをはじめとするエレクトロニクス機器や、ハイブリッドカーの駆動モータなど様々な場面で活躍している。Fe ベース永久磁石材料では、強磁性体である Fe に第 2、第 3 の成分を添加することで磁石としての性能が向上している。例えば『世界最強の磁石』と呼ばれる NdFeB 磁石では、Fe に添加された Nd が磁気異方性を高める役割を果たしており、さらに B を加えると磁化、キュリー温度、磁気異方性ともに向上している。このように、永久磁石材料の開発には強磁性体である Fe に他の成分を添加した際の磁性の変化とその起源について理解することが重要である。大阪大学大学院理学研究科物理学専攻の研究グループは、Fe に少量の Cr もしくは V を添加すると飽和磁化は下がるもののキュリー温度が増加するという実験事実に着目し、この Fe の磁性増大のメカニズムを第一原理電子状態計算によって理論的に明らかにするとともに永久磁石材料への応用を提案した。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の 2011 年 10 月号に掲載された。

Cr や V の d 状態は Fe の d 状態よりも高いエネルギー領域に位置している。そのため、Cr や V の原子の隣の Fe 原子の d 状態は Cr、V の d 状態との混成を通じて低エネルギー側に押し下げられ、多数スピン d 状態が完全に占有された Co の電子状態に近い状態になる。この不純物原子の隣の Fe 原子の磁気モーメントは純粋な Fe と比較して変わらないか、むしろ減少する。しかし、この『Co 化』した Fe 原子がさらに隣の Fe 原子の磁気モーメントを増加させる。(FeCo 合金は唯一 Fe の磁化とキュリー温度を増加させる合金として知られているが、この増加は Co の隣の Fe の磁気モーメントが増加するためであると理解されている。) このことは Fe に B や N などの典型元素を添加した際に磁性が増大するメカニズムによく似ている。Cr、V 原子は Fe 原子と反対向きの磁気モーメントを持つため、系全体の磁化は減少するが、キュリー温度を上昇させることができる。

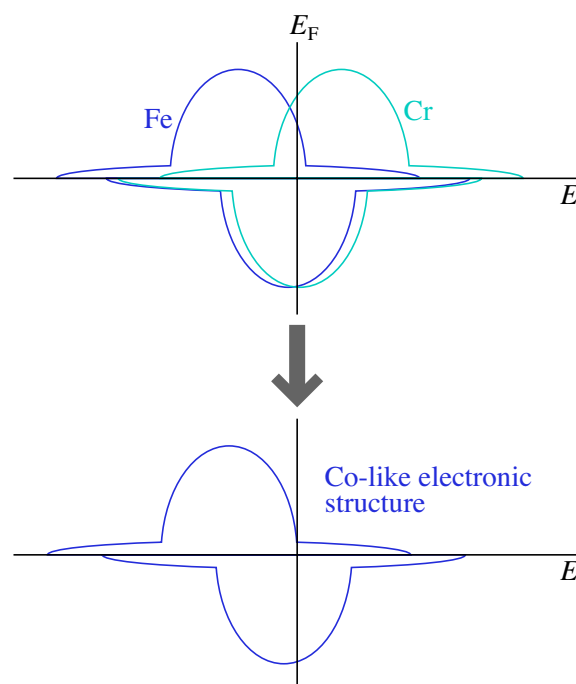


図 1. Cr を添加したときの Fe の電子状態の変化

この磁性の増大は Fe/Cr ヘテロ構造でも発現する。Fe-Cr, Cr-Cr 間の交換相互作用が反強磁性的であることから、偶数の Cr 層をはさむことで Fe 層-Fe 層同士が反対向きの磁化を持つ反強磁性ヘテロ構造をつくるのが可能である。反強磁性構造の磁化方向を変化させる外部磁場は、異方性エネルギーを磁場に換算した異方性磁場と同様に反強磁性交換相互作用を換算した有効磁場の幾何平均で与えられるため、かなり大きくなる。したがってこのような反強磁性構造を部分的に導入することにより、Fe-Cr の交換相互作用を通じて強磁性 Fe 層の磁化方向を固定する異方性エネルギーを作り出すことができ、高温で高い保磁力を維持するレアメタルフリーな永久磁石材料開発への応用が期待される。今後は磁気モーメントやキュリー温度だけでなく、磁気異方性の定量的理論評価が課題となるであろう。

論文掲載誌 J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) No.10, p.104711

電子版 <http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/80/104711> (9月27日公開済)

<情報提供：小倉昌子（大阪大学大学院理学研究科 助教）  
赤井久純（大阪大学大学院理学研究科 教授）>