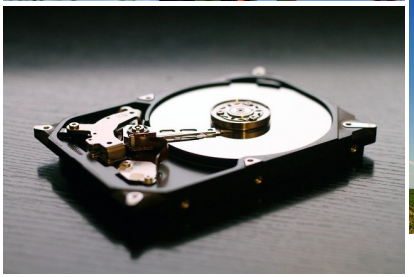
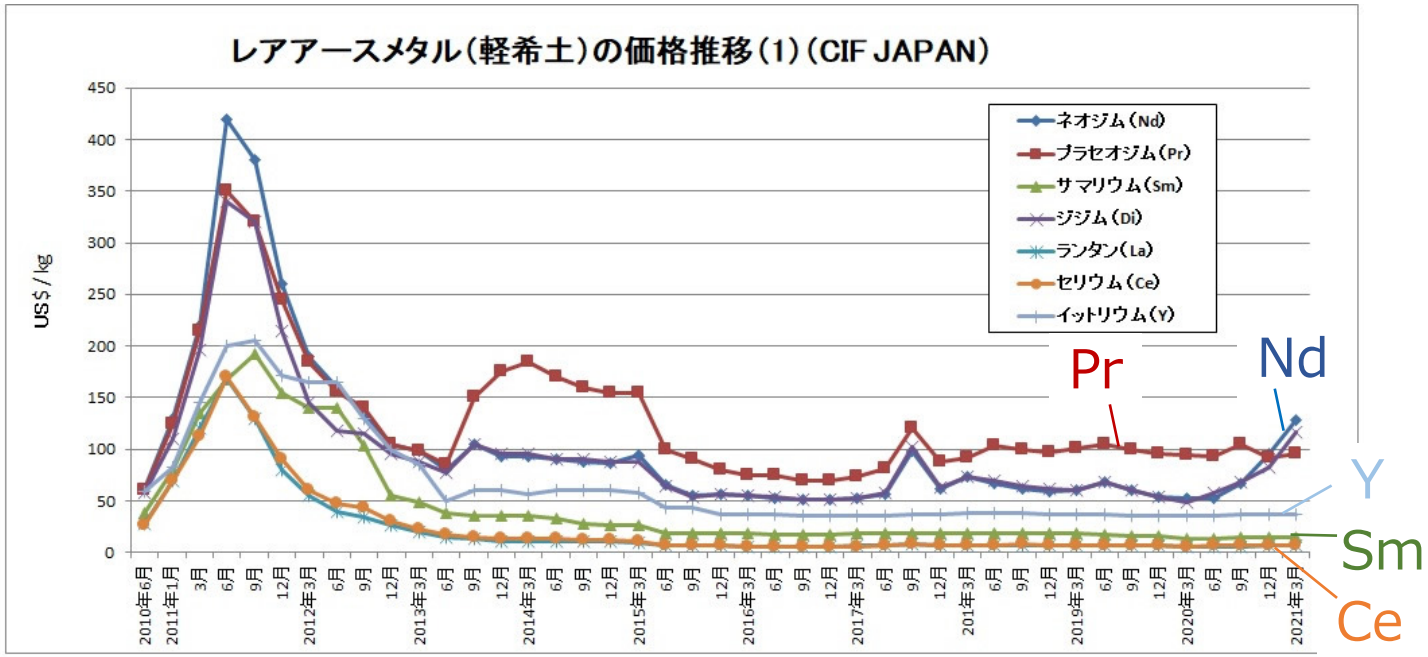
希土類永久磁石材料における磁気異方性エネルギーの第一原理計算

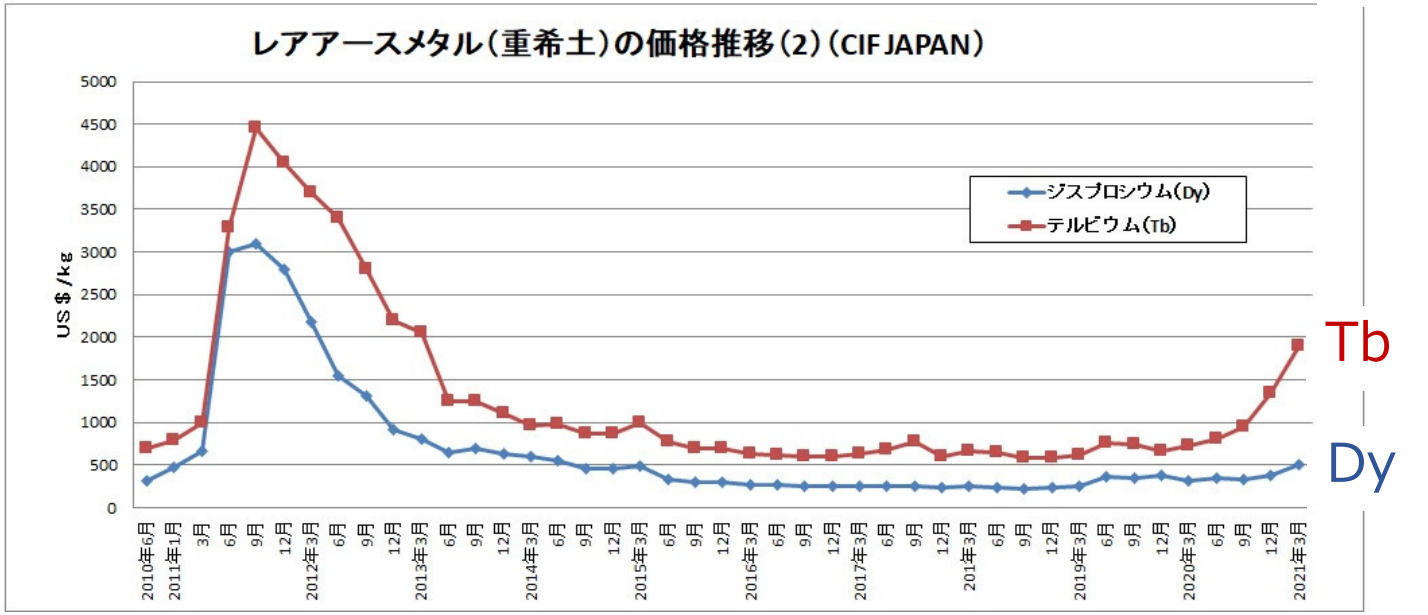
東京大学物性研究所
計算物質科学研究センター　CCMS
特任研究員　奥村晴紀

レアアース価格推移 (2021/03)

https://www.neomag.jp/mag_navi/statistics/rare_earth_newprice2.html







希土類永久磁石の例：

- $SmCo_5$
- $Nd_2Fe_{14}B$ (Dy添加)

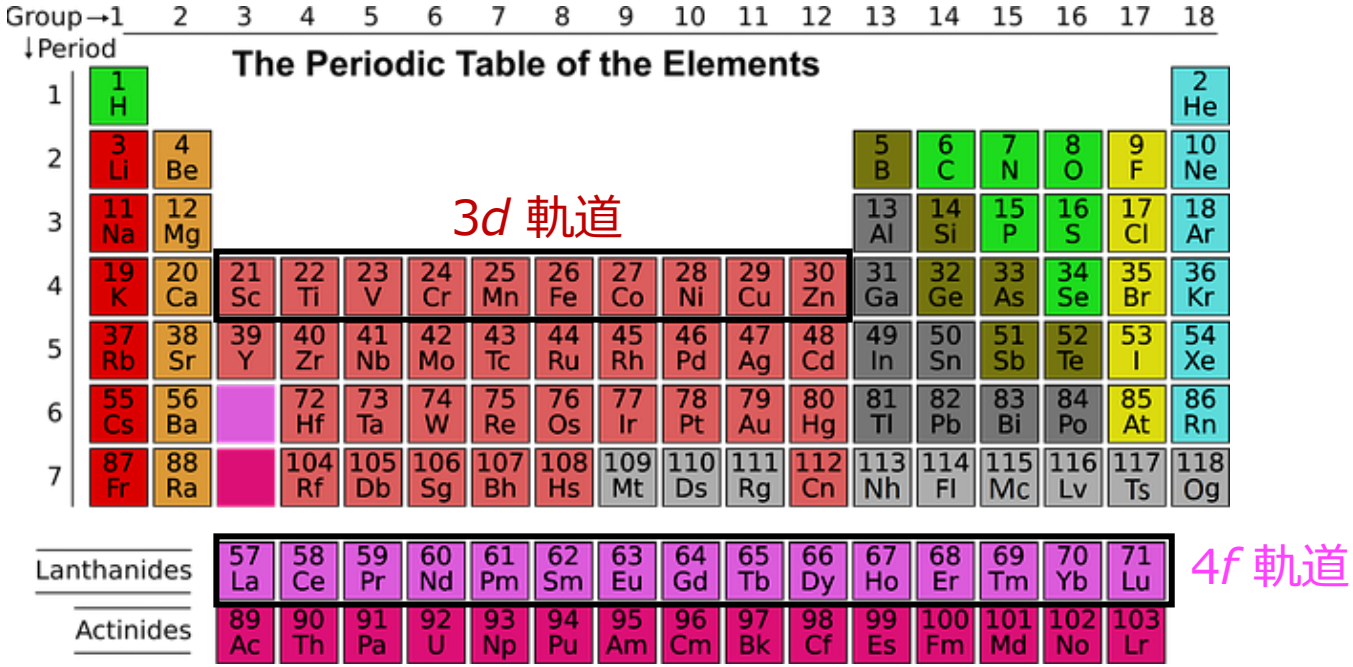
価格高騰に伴い、
安価な永久磁石材料が
求められる

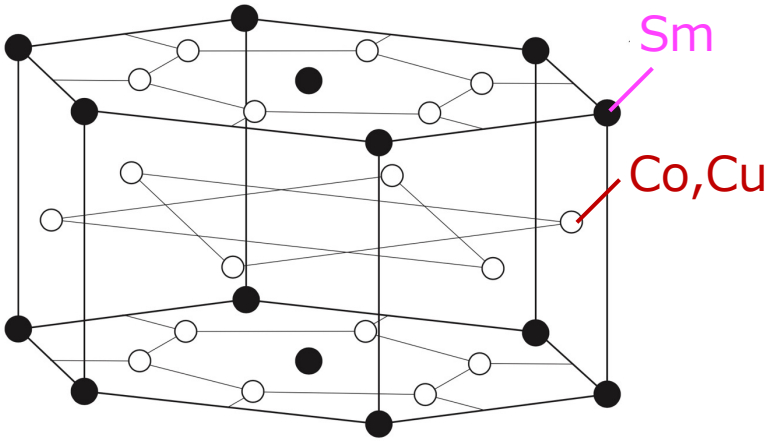
第一原理計算による物性予測

永久磁石に必要な物性

- **飽和磁化**が大きい
- **キュリー温度**が高い
- **磁気異方性**が大きい

第一原理計算による
物性予測





例：$Sm(Co_{1-x}Cu_x)_5$

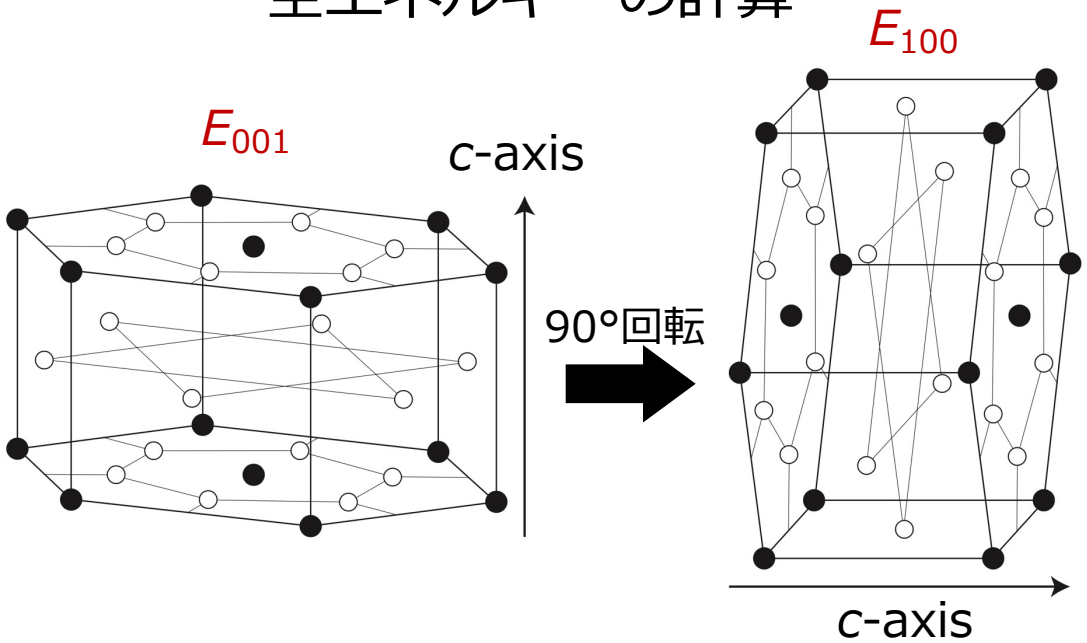
不規則系の第一原理計算では
グリーン関数法(KKR法)が有用

<u>材料探索</u>

組成・濃度の組み合わせは膨大
→ 富岳を用いた大規模計算

フルポテンシャルKKR (FPKKR)法

全エネルギーの計算

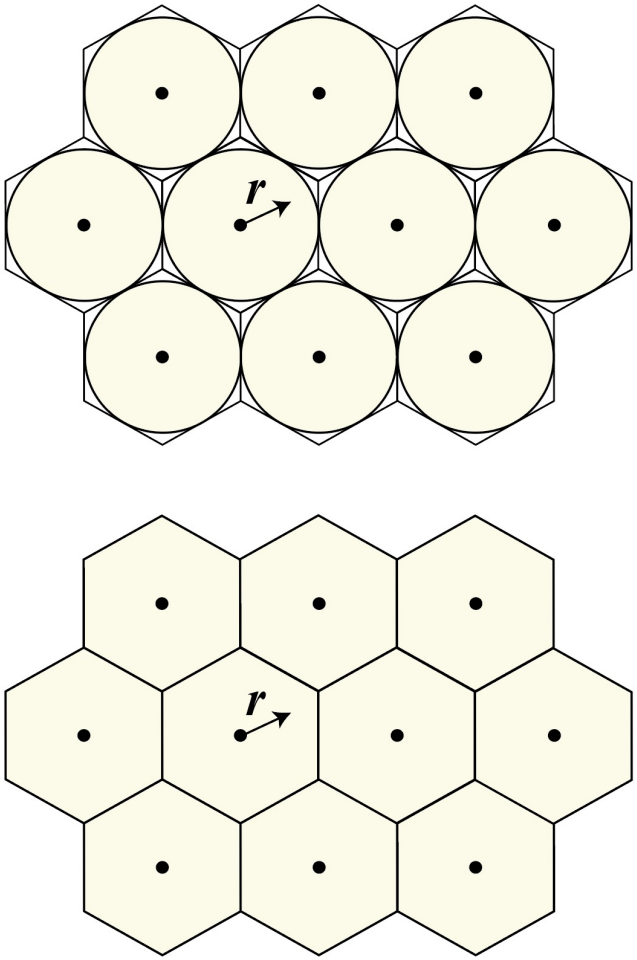


- 希土類永久磁石の
  磁気異方性エネルギー(MAE)

$E_{001} - E_{100}$ ~10^{-3} eV/cell

高精度の電子状態計算が求められる

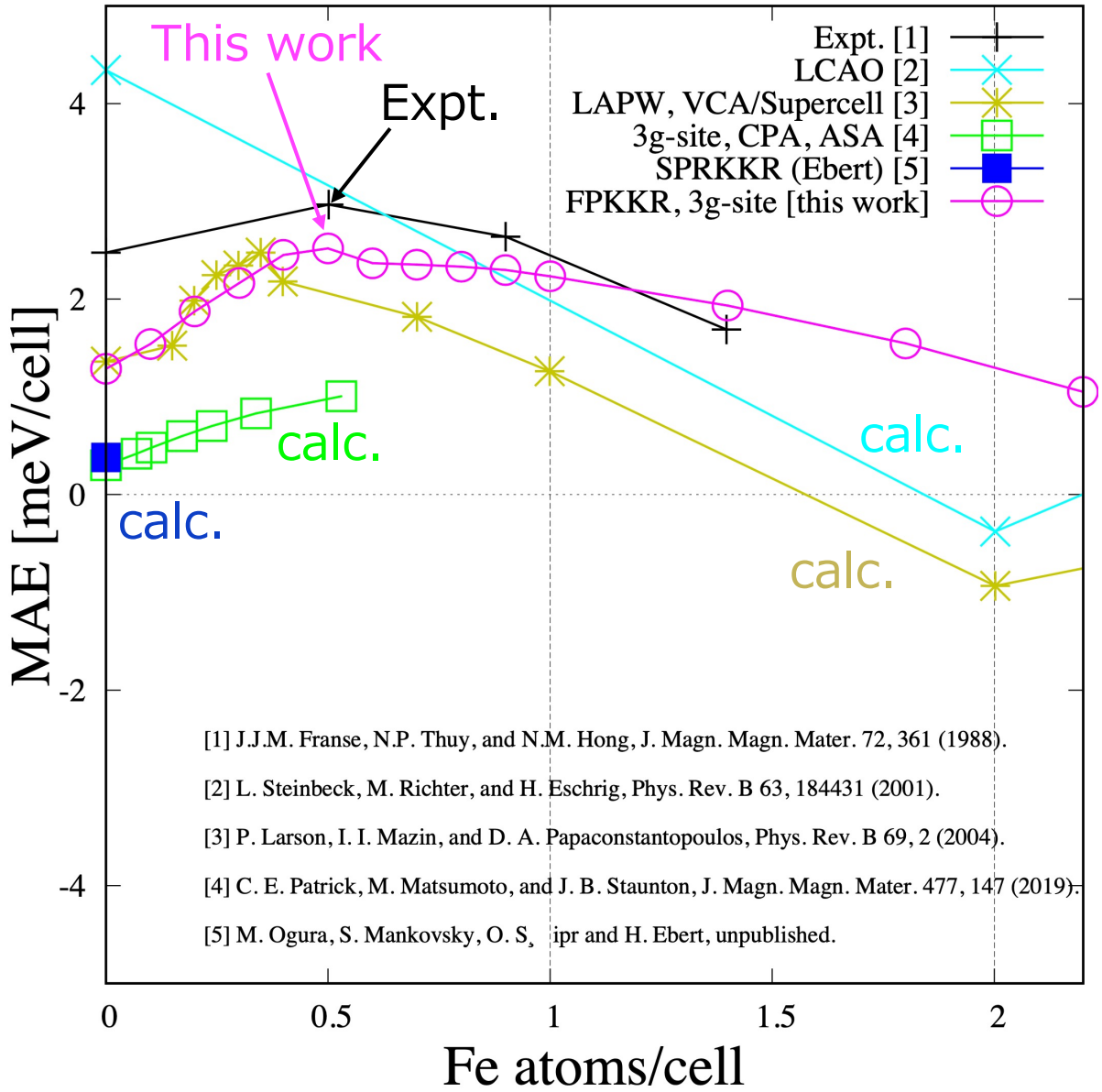
マフィンティンポテンシャル



フルポテンシャル

- ✓ Voronoi cellで分割
- ✓ 精度の高い結晶ポテンシャル

結果①：$YCo_{5-x}Fe_x$ の磁気異方性エネルギー

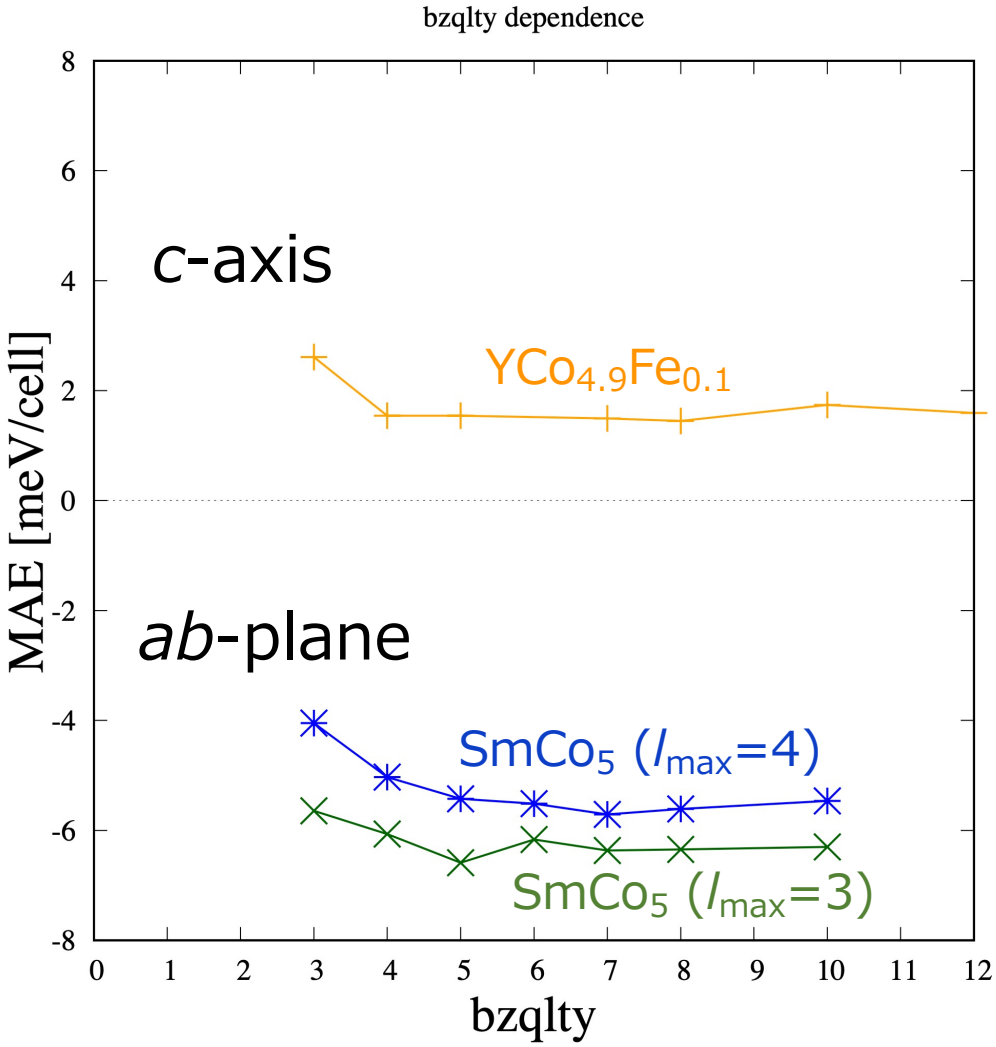


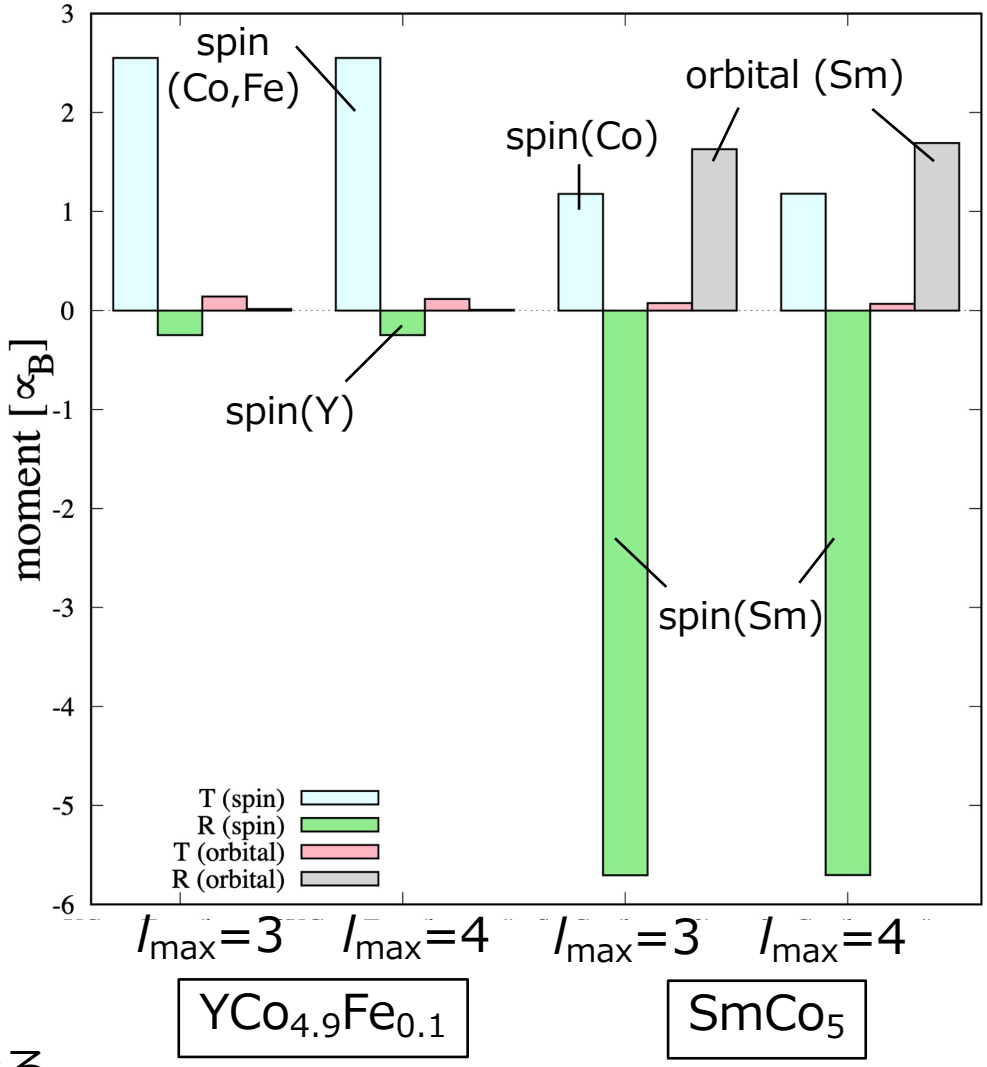
- ✓ $SmCo_5$と同じ結晶構造の$YCo_{5-x}Fe_x$で計算
- ✓ 磁気異方性エネルギー(MAE)

$$E_{100\rightarrow001}=E_{100}-E_{001}$$

- ✓ フルポテンシャルのMAEは実験値を再現できる

結果②：$SmCo_5$の磁気異方性エネルギーと磁気モーメント



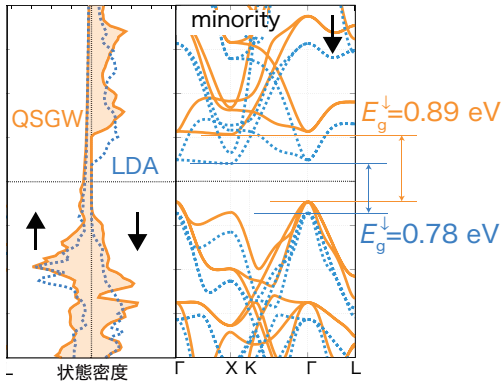


LDA: Sm(f 電子系)で異方性の符号が逆になる

スキル

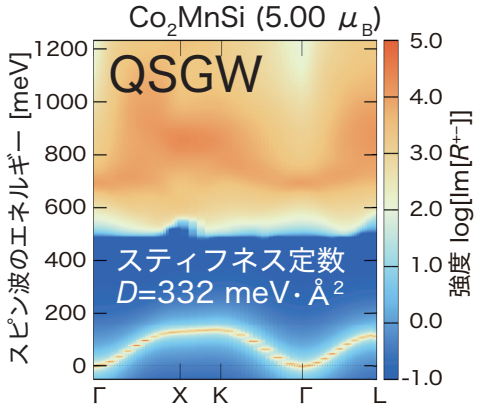
過去の研究(おもに磁性材料)：

- 太陽電池材料のバンドギャップと変換効率の予測
- ホイスラー合金の磁気特性と電子状態計算
- スピン波の分散関係の計算



プログラミング：

- Fortran: 数値計算(第一原理計算)
- Python: ファイルハンドリング, ポスト処理, etc.



コード開発 (Fortran)：

- 第一原理計算パッケージ*ecalj*に、
  スピン波を計算するプログラムを導入

東京大学物性研究所
計算物質科学研究センター　CCMS
特任研究員　奥村晴紀