

Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 희토류영구자석의 전자기적 물성 연구

포항공대 물리학과 민병일\*  
산업과학기술연구원 양충진

Electronic and Magnetic structures of Rare-earth Permanent Magnet, Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B

POSTECH B. I. Min\*  
RIST C.J. Yang

희토류(rare-earth)금속과 천이금속(transition metal)의 화합물인 희토류 영구자석, Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 화합물의 전자구조 이론연구를 통하여 자성을 포함한 제반 물성, 즉 전기적, 자기적 성질등을 고찰하였다.

전자구조의 연구 방법으로는 전자 간 상호작용을 국재 밀도함수이론으로 구하고 에너지 밴드 구조는 LMTO (Linearized Muffin Tin Orbital) 밴드 방법을 사용하여 에너지 밴드, density of states, magnetic moment, cohesive energy 등의 제반 물성을 구하였다.

그림 (1)은 실험치 격자 상수 (a=8.80 Å, c=12.19 Å) 에서 계산된 Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 상자성상에서의 전자구조를 보여준다. 총 상태밀도 (total density of states: DOS) 는 2개의 눈에 띄는 peak을 갖는데 그중 왼쪽에 위치한 것은 대부분 Fe 원자들의 d-band에 해당하는 것이고 오른쪽 peak은 Fe 원자들의 d-band와 Nd-원자의 f-band에 의한 DOS에 해당한다. 상자성상에서의 상태밀도는 보는 바와 같이 Fermi level (E<sub>F</sub>)에서 매우 높은 DOS값을 갖는다 (N(E<sub>F</sub>)=201.4 states/eV). 이는 대부분 Nd 원자의 f-band와 Fe-3d band에 해당하는 상태밀도로 이러한 E<sub>F</sub>에서의 높은 상태밀도는 자기 상전이 내지 구조 상전이의 가능성을 예고한다.

그림 (2)는 Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 강자성상 (ferromagnetic phase)에서의 spin-polarized DOS를 보여준다. 상자성상에서의 높은 DOS는 앞에서 언급한 교환상관 효과에 의한 띠분리 (band splitting)로 spin-up, spin-down DOS로 나뉘어져 E<sub>F</sub>에서의 DOS가 약 27% 정도 줄어든 것을 볼 수 있다 (N(E<sub>F</sub>)=147.7 states/eV). E<sub>F</sub>에 위치한 spin-up band는 상자성상에서와 마찬가지로 대부분 Nd 원자의 4f-band에 기인한 것이며 E<sub>F</sub>에서의 spin-down band는 대부분 Fe 원자들의 3d-band에 해당한다. Nd-f band의 spin-up, down band의 에너지 차이는 약 2.3 eV 정도이다.

계산된 자기 모멘트 값 (Table I참조)은 실험치와 정성적으로는 대체로 일치함을 보여준다. 즉 Neutron diffraction과 Mossbauer effect등을 이용한 자기 모멘트의 측정치도 FeIV에서 가장 크고 FeV에서 가장 작은 자기 모멘트의 결과를 준다. 하지만 polarized neutron을 이용한 실험에서 Fe원자당 평균 자기 모멘트는 2.56μ<sub>B</sub>로 관측되고 반면 Mossbauer effect는 2.28μ<sub>B</sub>로 관측되어 이론값과 근사한 값을 주는 등 정량적으로는 아직 이론값과의 비교가 완전하지 않은 상황이다.

Table I. Magnetic moments of  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  [ $\mu_B$ ]

	NdI	NdII	FeI	FeII	FeIII	FeIV	FeV	FeVI	B
Theory	2.6	2.7	2.0	2.1	2.0	2.7	1.9	2.4	-0.2
Exp. (Min)			2.08	2.16	2.06	2.43	2.00	1.97	
(Max)			2.60	2.60	2.30	2.85	2.28	2.75	

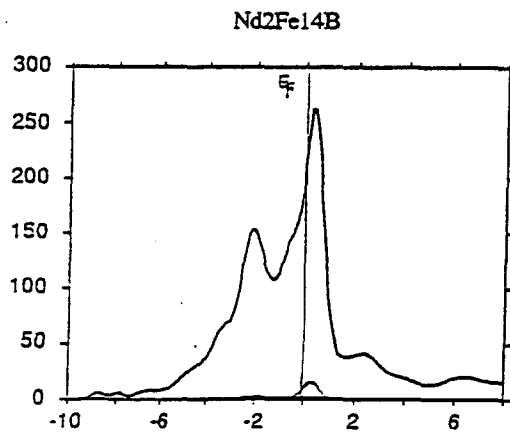


Fig. 1. Density of states of paramagnetic  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ .

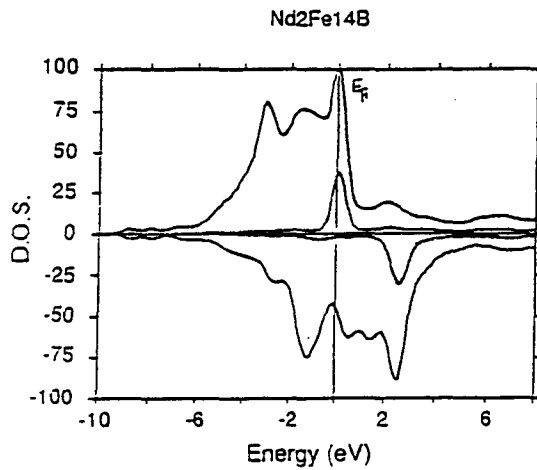


Fig. 2. Density of states of ferromagnetic  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ .