

τ -MnAl의 자기적 특성과 MCA에 관한 제일원리 계산

박진식*, 임성현[†], 홍순철[†]

울산대학교 물리학과, 에너지 하베스트-스토리지 연구센터 울산 680-749 대한민국

교신저자 : [†]sonny@ulsan.ac.kr , [†]schong@ulsan.ac.kr

최근 희토류 금속 자석 대체 물질에 대한 관심이 증가되고 있는 가운데 MnAl이 희토류 대체 자석 물질로써 최근 주목 받고 있다. MnAl은 단위 날칸당 망간 원자 2개와 실리콘 원자2개로 이루어져 있으며 정방정계 구조를 가지고 있다. 실험에서의 MnAl은 덩치일때 격자상수가 $a=2.77 \text{ \AA}$, $c=3.56 \text{ \AA}$ 일때 망간당 자기모멘트는 $1.94 \mu_B$ 으로 알려져 있다. 그러나 본 계산에서는 격자상수는 $a=3.45 \text{ \AA}$, $c=3.89 \text{ \AA}$ 일때 Mn당 자기모멘트는 $2.254 \mu_B$ 을 갖는 것으로 계산 되었다. 이에 응력에 따른 변화에 따라 각각의 자기모멘트와 MCA의 변화에 대해 고찰하여 보았다. 본 연구에서의 응력은 a, b 방향으로 계산에서 얻은 총 에너지 최소의 격자상수를 중심으로 -3% (압축응력)에서 +3% (인장인력)까지 고려하였다.

키워드 : 자성물질, MnAl, 희토류금속, 영구자석