

희토류 영구자석의 전자기적 구조

민병일 · 장영록

포항공대 물리학과
경북 포항시 790-600

(1991년 4월 10일 받음)

희토류금속과 천이금속의 화합물인 희토류 영구자석의 전기적, 자기적 성질등을 이해하고자 우리는 SmCo_5 , NdB_6 , NdFe_8 , NdFe_4B 등의 비교적 간단한 희토류 화합물에 대한 자체충족적 전자구조 이론연구를 시도하였다. 국재 밀도함수 근사 LMTO(Linearized Muffin Tin Orbital) 밴드 방법을 이용하여 SmCo_5 영구자석을 포함한 희토류 금속 화합물의 기저상태의 물리적 파라미터들, 즉 에너지 밴드, 상태밀도, Stoner 상수, 자기 모멘트 등을 구하여 이들의 전자기적 물성을 고찰하였다. Nd, Sm 등의 희토류원소와 Fe, Co 등의 천이원소, 또한 boron 등의 원소들이 서로 금속 화합물을 형성할 때 일어나는 bonding 효과, 즉 희토류금속의 f-전자와 d-전자, 천이금속의 d-전자, 또한 boron 금속의 s,p-전자와의 상호 작용, 그에 따른 전자구조, 자성의 변화에 대한 연구를 수행하였다.

I. 서론

근래 제조기술의 급속한 발전으로 보다 좋은 특성과 성능을 갖는 영구자석이 개발되어 이들이 점차 전자석의 용도를 대체하고 있는 추세이다. 이러한 경향은 1960년대 이래 개발된 희토류 영구자석으로 인해 가속화되었다 할 수 있다. 하지만 응용분야에 널리 사용되고 있는 희토류 영구자석의 자성 원리에 대한 미시적 이해와 이론, 실험적 기초물성 연구등은 현재 실제 응용적인 면에 비해 무척 뒤떨어져 있는 상태이다[1].

희토류(rare-earth) 금속과 천이금속(transition metal)의 화합물인 희토류 영구자석의 자성을 포함한 제반 물성, 즉 구조적, 전기적 성질등을 이해하고자 우리는 비교적 간단한 희토류 화합물에 대한 전자구조 이론연구를 시도하였다. 희토류 영구자석의 대표적 물질인 SmCo_5 와 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 의 물성연구를 위하여 Nd, Sm 등의 희토류원소와 Fe, Co 등의 천이원소, 또한 boron 등의 원소들이 서로 금속간 화합물을 형성할 때 일어나는 bonding 효과, 즉 희토류금속의 f-전자와 d-전자, 천이금속의 d-전자, 또한 boron 금속의 s, p-전자와의 상호 작용, 그에 따른 전자구조, 자성의 변화에 대한 연구를 수행하였다.

우리는 먼저 희토류 d, f-전자와 boron s, p-전자간의 상호작용 연구를 위하여 희토류-boron 화합물중 비교적 간단한 자성구조를 갖는 NdB_6 화합물의 전자기적 물성

구명을 시도하였다.

다음 단계로 희토류금속의 d,f-전자와 천이금속의 d-전자와의 상호작용으로 나타나는 화합물의 전자기적 물성에 대한 체계적인 연구를 위하여 각기 다른 희토류(Nd, Sm) 또는 천이원소(Fe, Co) 등으로 치환하면서 전자구조의 변화를 고찰하였다. 이를 위하여 우리는 영구자석인 SmCo_5 , 그리고 실제로는 자연계에 존재하지 않는 NdFe_8 , NdFe_4B 화합물등의 전자구조 계산을 시도하였다. 이는 보다 복잡한 구조를 갖고 있는 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 의 전자구조를 이해할 수 있는 모형(model) 계산이라 할 수 있다.

전자간 교환상관(exchange correlation) 상호작용은 국재 밀도함수근사(local density functional approximation) 방법 [2]으로 구하고 에너지밴드 구조와 상태밀도(density of states)는 LMTO(Linearized Muffin Tin Orbital) 밴드방법 [3]과 Gaussian Broadening 방법 [4]을 각각 이용하여 자체충족적(self-consistent) 방법으로 구하였다.

II. 결과 및 토의

1. NdB_6 화합물

NdB_6 는 Nd 원자와 6개의 boron으로 이루어진 정팔면체(octahedron) 구조가 각각 정육면체의 모서리와 중앙에 위치한 정방형 결정구조(CsCl type)를 갖고 저온(T_N

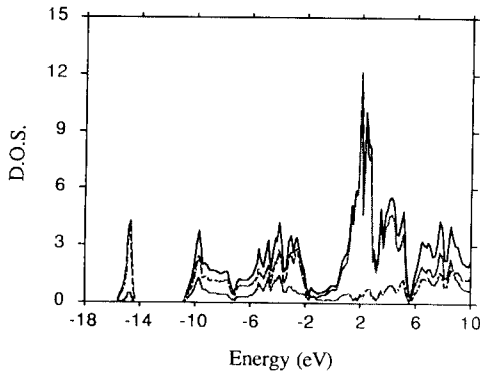


Fig. 1. Density of states(DOS in units of states/eV) of paramagnetic NdB_6 . Solid line corresponds to total DOS and the rest to the site-projected DOS of Nd and 6B, respectively(broken line: DOS of B).

=8.6K)에서 비교적 간단한 반자성 (antiferromagnetic) 구조를 갖는다.

실험치 격자상수($a=7.801$ a.u.)에서 계산된 상자성 (paramagnetic) 상태밀도(density of states: DOS)를 그림 1에 소개하였다. 그림 1은 total DOS 외에 Nd와 B 원자의 site-projected DOS도 함께 보여준다. 이 전자구조 계산에서 Nd 원자의 3개의 f 전자들은 core 전자로 가정하여 계산하였다. 따라서 그림 1에서 unoccupied sharp f-band가 Fermi level(E_F ; 그림에서 energy zero에 해당)에서 2 eV 정도 위에 위치한 것을 볼 수 있다. Main band와 분리되어 -15 eV 근처에 위치한 narrow DOS는 대부분 boron 원자의 s-band에 해당하는 것으로 boron-p band와 약간의 Nd-5d band가 hybridized된 상태로 되어 있다. 이는 octahedron 구조를 갖는 6개의 boron 원자들의 s,p 전자간의 강한 상호작용에 기인한 bonding state에 해당하는 것으로 정확히 2개의 전자를 포함하며 거의 core 전자와 같은 역할을 한다. -11eV에서부터 시작되는 main band는 Nd-5d, 4f band와 B-s,p band가 fully hybridized된 상태이다. Fermi level(E_F)에서 낮은 DOS값은 Nd-d band와 B-s,p band와의 hybridization 상호작용의 결과이다. 보통의 희토류 화합물에서 관찰되는 nonbonding f-state와는 달리 NdB_6 화합물에서는 f-band와 B-s,p band와의 hybridization도 구조적 특성으로 인하여 미약하나마 무시할 수 없는 정도로 존재하여 f-band도 bonding에 기여한다 할 수 있다. 하지만 주의할 것은 여기서 f-band는 Nd의 실제 f-전자들은 아니고 B원자에서 오는 파동함수의 tail part에 해당한다. 왜냐하면 우리는 Nd원자의 f-전자들을 core-전자로 가정하였기 때문이다. 따라서 NdB_6 화합물에서 boron 원자의

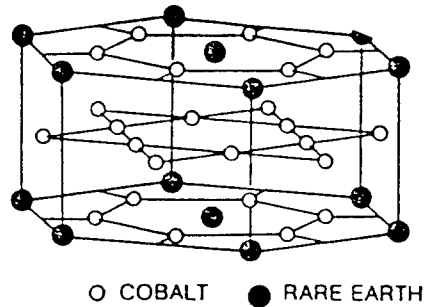


Fig. 2. Crystal structure of $SmCo_5$; $CaCu_5$ structure

역할은 Nd-d,f band와의 hybridization bonding을 통하여 Fermi level(E_F)에서 낮은 DOS값을 주고 따라서 안정된 구조를 이룸에 기여한다는 것을 예측할 수 있다.

2. $SmCo_5$ 화합물의 전자 구조

Local Density LMTO band 방법 [3]을 사용하여 영구 자석으로 중요한 $SmCo_5$ 화합물의 상자성상과 강자성상에서의 전자구조 계산을 수행하였다. $SmCo_5$ 는 hexagonal $CaCu_5$ (그림 2) 결정구조를 갖고 있어 단위 cell 당 1개의 Sm 원자와 5개의 Co 원자들을 포함하고 있다. 그중 2개의 Co 원자 (Co I)들은 Sm 원자를 포함한 평면과 같은 평면에 위치하고 있고 나머지 3개의 Co 원자 (Co II)들은 그 다음 평면에 위치하여 z-축으로 반복 구조를 갖는다. 이러한 구조로 인하여 c-축 방향이 easy-axis가 되는 자기이방성 (magnetocrystalline anisotropy)이 형성되고 따라서 $SmCo_5$ 는 매우 큰 보자력을 갖게 된다 [1].

그림 3은 $SmCo_5$ 상자성상에서의 전자구조를 보여준다. 실선으로 표시된 총 상태밀도(total density of states: DOS [in unit of states/eV])는 2개의 정점을 갖는데 그 중 왼쪽에 위치한 것은 Co 원자들의 d-band에 해당하는 것이고 오른쪽 정점은 대부분 Sm-원자의 f-band에 해당한다(이 계산에서 Sm 원자의 f-전자들은 valence 전자들로 취급하였는데 총 5.65개의 f-전자가 occupy되어 있다). Total DOS 밑에 점선으로 표시된 DOS는 왼쪽위로부터 각각 3Co II, 2Co I, Sm 원자의 site-projected DOS를 나타낸다. 상자성 상에서의 상태밀도는 보는 바와 같이 Fermi level(E_F)에서 매우 높은 DOS값을 갖는다($N(E_F)=27$ states/eV). 이는 대부분 Sm 원자의 f-band와 Co-3d band에 해당하는 상태밀도로 이러한 E_F 에서의 높은 상태밀도는 자기 상전이 내지 구조 상전이의 가능성을 예고한다. 자기 상전이 현상은 교환상관 (exchange correlation) 상호작용에 의한 Stoner 자기화 이론으로 정성적으로 이해할 수 있다. 즉 Stoner parameter $S(=N(E_F)I_{xc}; I_{xc}=\text{intra-atomic exchange correla-}$

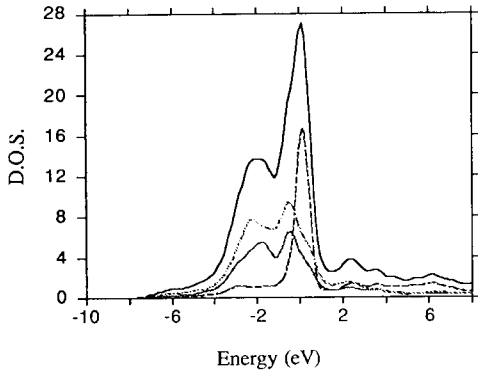


Fig. 3. Density of states(DOS) of paramagnetic SmCo_5 . Solid line corresponds to total DOS and the rest to the site-projected DOS of 3CoII , 2CoI , and Sm , respectively from the top left.

tion integral)는 E_F 에서의 높은 DOS로 인하여 1보다 큰 3.2가 되고 따라서 강자성 불안정성(ferromagnetic instability)을 갖는다[5]. 그림 4는 SmCo_5 의 각 site원자에서의 angular momentum projected DOS를 보여준다. E_F 근처에 위치한 sharp narrow band는 Sm-4f band이고 그 왼쪽으로 Co I , Co II 원자의 3d-band가 위치한다. 둘중에서 더 깊은 골을 갖고 있는 것이 Co I 의 DOS로 이는 Sm-5d band와의 hybridization이 좀 더 크다는 것을 반영한다. Sm-5d band는 -6eV 에서 8eV 이상까지 넓게 퍼져있고 Co-3d band와의 상호 hybridization 상호작용을 통하여 E_F 아래 위로 각각 bonding state와 anti-bonding state로 나누어져 있다. Sm-f band는 bonding에 크게 관여하지 않는 non-bonding state라 할 수 있다. 이는 f-전자가 없는 YCo_5 의 전자구조와 비교하면 쉽게 알 수 있다. 즉 YCo_5 의 DOS(그림 5 참조)는 f-band만 제외하면 SmCo_5 의 DOS와 서로 정확히 일치함을 알 수 있다. 이로부터 Sm-f band와 Co-3d , Sm-5d band와의 상호작용이 매우 작음을 알 수 있다.

그림 6은 SmCo_5 강자성상(ferromagnetic phase)에서의 spin-polarized DOS를 보여 준다. 상자성상에서의 높은 DOS는 앞에서 언급한 교환상관효과에 의한 띠 분리(band splitting)로 spin-up, spin-down DOS로 나뉘어져 E_F 에서의 DOS가 약 35% 정도 줄어든 것을 볼 수 있다 ($N(E_F)=20$ states/eV). E_F 에 위치한 spin-up band는 상자성 상에서와 마찬가지로 대부분 Sm 원자의 4f-band에 기인한 것이며 E_F 에서의 spin-down band는 대부분 Co 원자의 3d-band에 해당한다. Sm -band의 spin-up, down band의 에너지 차이는 약 4.5eV 정도이다.

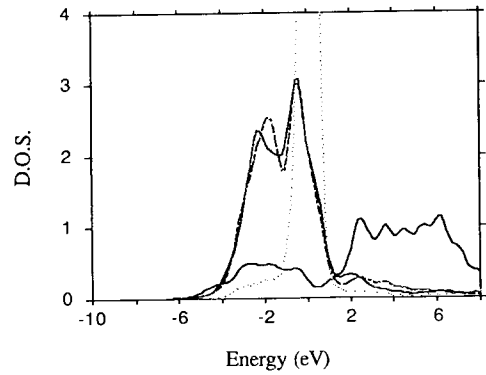


Fig. 4. Site and angular momentum projected DOS paramagnetic SmCo_5 . Solid and dotted lines correspond to DOS of Sm-d and Sm-f electrons, respectively. DOS with 2-peak structure correspond to those of Co I and Co II .

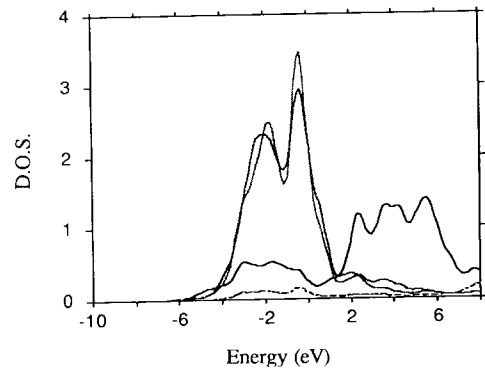


Fig. 5. Site and angular momentum projected DOS of paramagnetic YCo_5 . Solid line corresponds to DOS of Y-d electrons. DOS with 2-peak structure correspond to those of Co I and Co II .

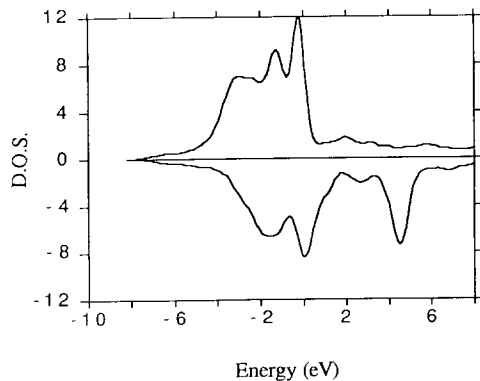


Fig. 6. Density of states of ferromagnetic SmCo_5 .

Table I. Angular momentum projected occupancies, Ql, of ferromagnetic SmCo₅. ↑ and ↓ denote spin-up and spin-down electrons.

		Qs	Qp	Qd	Qf	Qtot
Sm	↑	0.30	0.40	0.82	5.47	7.00
	↓	0.31	0.45	0.91	0.24	1.92
Co I	↑	0.32	0.30	4.40		5.02
	↓	0.32	0.33	3.13		3.77
Co II	↑	0.33	0.31	4.48		5.12
	↓	0.34	0.33	3.04		3.71

표 I은 각 원자에 occupy된 전자들의 갯수를 나타낸다. Sm원자에서 4f-전자의 spin 자기모멘트는 $5.23\mu_B$ 인데 s,p,d-전자들의 spin 자기모멘트는 4f-전자와 반대 방향으로 자기화된 $-0.15\mu_B$ 로 총 spin 자기모멘트는 $5.08\mu_B$ 이다. Co I, Co II 원자의 spin 자기모멘트는 각각 $1.25\mu_B$, $1.41\mu_B$ 로 주어져 bulk Co의 spin 자기모멘트(계산치 : $1.6\mu_B$, 실험치 : $1.7\mu_B$)에 비해 주위 원자들의 영향으로 줄어든 값을 갖는다. Co I의 자기모멘트가 Co II에 비해 작은 것은 Sm-5d band와의 hybridization 상호작용이 Co I에서 보다 큰 때문이다. 2개의 Co I 원자와 3개의 Co II 원자를 고려하면 SmCo₅ unit cell에서 총 $11.8\mu_B$ 의 spin 자기모멘트를 갖는 것으로 계산된다. 이는 실험치 $7.8\mu_B$ 에 비해 너무 큰 값이다. 우리는 이 차이를 Sm원자의 자기모멘트가 너무 크게 계산되었기 때문이라 추정한다. Sm원자와 같은 희토류 금속에서는 spin-orbit 상호작용에 의한 orbital 자기모멘트의 크기가 상당하다. 예를 들어 Sm원자의 free ion 상태일때의 자기모멘트는 L-S coupling 등에 의하여 spin 자기모멘트만의 $5\mu_B$ 보다는 매우 작은 $1.5\mu_B$ 의 실험치를 갖는다[6]. 따라서 f-전자의 강한 교환상관 상호작용과 spin-orbit 상호작용을 적절히 동시에 기술할 수 있는 전자구조 계산 방법이 도입되어야 한다. 우리는 강한 자성에 비해 spin-orbit 상호작용을 작다고 보아 근사적 방법으로 해밀토니안에 취급하는 방법을 고안하였다. 즉 spin 양자수를 spin-orbit 상호작용 하에서도 좋은 양자수(good quantum number)로 가정하여 spin 자기모멘트 외에 orbital 자기모멘트도 일관성 있게 구할 수 있는 에너지 밴드 방법을 개발하였다. SmCo₅ 화합물에서 이러한 spin-orbit 상호작용의 효과에 대하여는 다른 논문에서 논하기로 한다[7].

3. Nd-Fe-B 화합물

Tetragonal 결정구조를 갖는 강자성 영구자석인 Nd₂Fe₁₄B는 unit cell에 68개의 원자가 존재하는 무척 복잡한 구조를 갖는다. 우리는 Nd₂Fe₁₄B의 전자구조와 구성원소 전자들간의 상호작용에 대한 이해를 위하여 비교적 간단한 결정구조를 갖는 NdFe₅, NdFe₄B 화합물의 전자구조 계산을 시도하였다. 여기서 주의할 것은 NdFe₅, NdFe₄B등은 실제로는 존재하지 않는 물질로서 우리는 NdFe₅의 구조를 SmCo₅의 구조와 동일하다 가정하였다. NdFe₄B는 NdFe₅에서 한개의 Fe원자를 B원자로 치환한 형태이다. 즉 NdFe₅구조에서 한 층의 Fe를 B로 치환한 것이다. 따라서 NdFe₄B의 unit cell은 2 type Nd(Nd I, Nd II), 2 type Fe(2Fe I, 6Fe II), 1-type boron원자 2개등 총 12개의 원자로 구성되어 있다. Nd II 원자는 boron과 같은 평면상에 위치하여 있고 Fe II 원자는 boron 평면 바로 위 아래 평면에 위치하고 있다. Nd₂Fe₁₄B에서 Nd원자와 boron원자는 Fe원자의 hexagonal prism과 trigonal prism의 중심에 각각 위치하는 모양을 하고 있어 위와 같은 구조의 가정이 어느정도 타당하다고 볼 수 있다[1].

우선 NdFe₅의 상자성 전자구조를 그림 7에 그렸다. SmCo₅와 마찬가지로 E_f에 Nd-f band와 Fe-3d band로 이루어진 sharp DOS를 볼 수 있다. Band간의 상호작용을 보다 자세히 보기 위하여 그림 8에 각 원자 site의 angular momentum projected DOS를 그려보았다. SmCo₅ 경우처럼 E_f상에 narrow f-band가 존재하고 2-type Fe원자들의 3d-band와 Nd-5d band가 hybridization된 상태를 보여 단지 E_f위치만 오른쪽으로 rigid shift하면 SmCo₅의 DOS와 거의 같아짐을 볼 수 있다.

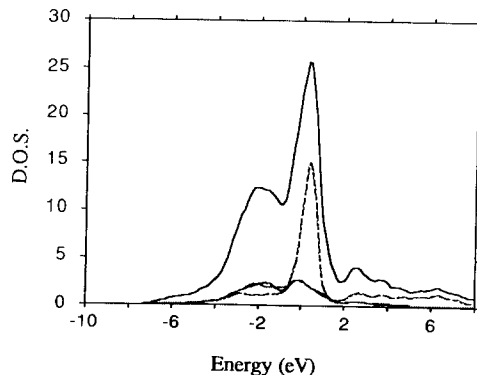


Fig. 7. Density of states of paramagnetic NdFe₅. Solid line corresponds to total DOS and the rest to the site-projected DOS of Nd, Fe I and Fe II, respectively.

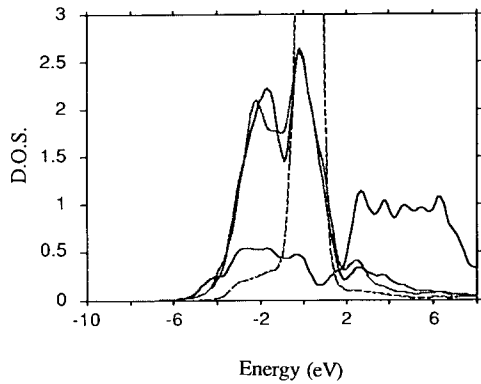


Fig. 8. Site and angular momentum projected DOS paramagnetic NdFe₅. Solid and dotted lines correspond to DOS of Nd-d and Nd-f electrons, respectively. DOS with 2-peak structure correspond to those of Fe I and Fe II.

그림 9는 NdFe₅B의 paramagnetic DOS를 보여준다. DOS모양은 NdFe₅의 것과 대체로 비슷하여 2-type Nd 원자의 f-band가 E_F 근처에 위치하고 있고 Fe-3d band에 기인한 DOS정점이 -2 eV 근처에 존재한다. NdFe₅의 DOS와 상이한 점은 band bottom이 -8 eV에서 -10eV 까지 확장된 것을 알 수 있다. 이는 boron 원자의 s,p band의 영향으로 band width가 커진 결과이다. 하지만 먼저 다룬 NdB₆와는 달리 boron 원자의 s-band가 main band에서 분리되어 있지 않고 서로 연결되어 있다. 즉 s-band의 energy position이 NdB₆에 비해 E_F에 가깝고 따라서 Nd, Fe 원자와의 hybridization도 증가함을 예측할 수 있다. Nd-5d, Fe-3d band는 boron band의 영향으로 NdFe₅의 DOS에 비해 많이 변형되어 있고 같은 평면에 위치한 Nd II-5d band가 boron 원자의 s-band부근(-7eV)에 hybrid되어 존재하고 미세하나마 Fe II-3d band도 hybrid되어 있다. E_F에서는 특히 Nd II-5d band와 boron-p band와의 hybridization 효과가 현저하여 f-band를 제외하면 매우 낮은 DOS를 가지며 boron, Fe band와의 hybridization등으로 Nd-5d band는 비교적 많은 sharp peak들이 존재함을 볼 수 있다. 따라서 f-band가 bonding에 큰 영향이 없다하면 이 경우에서도 NdB₆의 경우와 같이 boron 원자는 hybridization bonding을 통해 구조 안정성에 기여함을 예측할 수 있다.

표 II는 강자성 NdFe₅B의 각 원자에 occupy된 전자들의 갯수를 보여준다. SmCo₅의 경우에서와 같이 Nd의 f-전자와 s,p,d-전자들은 서로 반대 방향으로 자기화되어 있고 Nd I, Nd II의 spin 자기모멘트는 각각 2.69, 2.72 μ_B를 갖는다. Nd I의 자기모멘트는 NdFe₅의 경우와

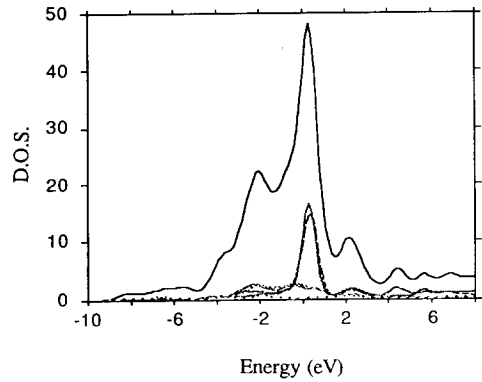


Fig 9. Density of states of paramagnetic NdFe₅B. Solid line corresponds to total DOS and the rest to the site-projected DOS of Nd, Fe, and B.

거의 같은 크기의 자기모멘트를 갖는다. Fe I, Fe II의 자기모멘트는 1.58, 2.00 μ_B로 이 경우도 Nd-5d band와의 hybridization 상호작용효과가 Fe I 원자에서 보다 크기 때문에 Fe I의 자기모멘트가 Fe II에 비해 약 20% 작아진다. Fe II의 자기모멘트는 bulk Fe의 자기모멘트, 2.2 μ_B에 가까와 주위 원자들과의 상호작용 효과가 그다지 크지 않음을 알 수 있다.

Table II. Angular momentum projected occupancies, Q_l, of ferromagnetic NdFe₅B. ↑ and ↓ denote spin-up and spin-down electrons.

		Q _s	Q _p	Q _d	Q _f	Q _{tot}
Nd I	↑	0.31	0.44	1.01	3.20	4.96
	↓	0.33	0.50	1.10	0.34	2.27
Fe I	↑	0.31	0.32	4.05		4.68
	↓	0.31	0.36	2.45		3.12
Fe II	↑	0.30	0.30	4.25		4.85
	↓	0.30	0.31	2.24		2.85
Nd II	↑	0.26	0.36	0.81	3.25	4.68
	↓	0.27	0.42	0.98	0.28	1.95
B	↑	0.60	0.87			1.47
	↓	0.63	1.06			1.69

III. 결론

비교적 간단한 희토류 화합물에 대한 전자구조연구를

토대로 하여 희토류(rare-earth) 금속과 천이금속(transition metal)의 화합물인 희토류 영구자석(특히 SmCo_5 와 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 화합물)의 자성을 포함한 미시적 제반 물성, 즉 bonding효과, 구조적, 전기적, 자기적 성질 등을 고찰하였다. 희토류-boron 화합물인 NdB_6 에서는 6-boron원자들의 s,p-전자간의 강한 상호작용으로 main band와 분리된 narrow bonding state band를 볼 수 있었고 또한 E_F 에서 Nd-d,f band와 B-s,p band와의 hybridization 상호작용이 작지 않음을 알 수 있었다. SmCo_5 화합물의 전자구조 연구로 Sm-f band의 bonding에 대한 기여는 무시할 수 있을 정도이고 Sm-d band와 Co-d band와의 상호작용의 크기가 Co원자의 위치에 의존한다는 결론을 얻었다. 또한 f-전자의 spin-orbit 상호작용이 Sm 원자의 자기모멘트를 결정함에 매우 중요하다는 사실을 알았다. NdFe_4B 와 NdFe_5 전자구조 비교를 통하여 NdFe_4B 의 Nd-5d, Fe-3d band DOS는 boron band의 영향으로 NdFe_5 의 DOS에 비해 많이 변형되어 있고 같은 평면상에 위치한 boron 원자의 s-band와 Nd II-5d band와의 hybridization 상호작용이 매우 큼을 보았다. 또한 boron s-band의 위치가 NdB_6 에 비해 E_F 에 가까와 Nd, Fe 원자와의 hybridization이 증가함을 예측할 수 있고 특히 E_F 에서는 Nd II-5d band와 boron-p band와의 hybridization 효과가 현저하여 boron 원자는 hybridization bonding을 통해 구조 안정성에 기여함을 예상할 수 있다.

감사의 글

이 논문은 1990년도 문교부 자유공모과제 학술연구 조성비에 의하여 연구 되었음. 연구에 유익한 도움말을 주신 정윤희박사, 양충진박사께 감사드립니다.

참 고 문 헌

- [1] E.P. Wohlfarth and K.H.J. Buschow, "Ferromagnetic Materials, A Handbook on the Properties of Magnetically Ordered Substances", Vol 4, North-Holland(1988); K.A. Gschneidner and L. Eyring, "Handbook on the Physics and Chemistry of Rare-earths", Vol 12, Ch82, North-Holland(1989); R.J. Parker, "Advances in Permanent Magnetism", John Wiley and Sons(1990).
- [2] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864(1964); W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133(1965).
- [3] O.K. Andersen, Phys. Rev. **B12**, 3060(1975); H.L. Skriver, "The LMTO Method", Springer Series in Solid State Sciences, Vol 41, Springer-Verlag(1984).
- [4] C. Woodward, B.I. Min, R. Benedek, and J. Garner, Phys. Rev. **B39**, 4853(1989).
- [5] S. Doniach, "Green Functions for Solid State Physics", W.A. Benjamin, (1974).
- [6] C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics", John Wiley and Sons(1986).
- [7] B.I. Min, to be published.

Electronic and Magnetic Structures of Rare-earth Permanent Magnets

B. I. Min and Y. R. Jang

Department of physics, Pohang Institute of Science and Technology

Pohang, Kyungbuk 790-600 Korea

(Received 10 April 1991)

In order to investigate electronic and magnetic properties of permanent magnets, we have performed self-consistent electronic structure calculations on compounds of rare-earth and transition metals, such as SmCo_5 , NdB_6 , NdFe_5 , NdFe_4B . Employing the local density LMTO(linearized muffin tin orbital) band method, we have obtained the ground state parameters, such as band structures, density of states, Stoner parameters, and magnetic moments. We have also investigated interactions between d,f-electrons of Nd, Sm rare-earths and d-electrons of Fe, Co transition metals, and the s,p electrons of boron and explored effects of such interactions on the bonding mechanism and the electronic and magnetic structures in these rare-earth compounds.