

磁気過剰ギブスエネルギー

2109年6月24日
株式会社 材料設計技術研究所

磁気過剰ギブスエネルギーを次式に示す。

$$G_m^{mag} = RT \ln(\beta + 1) g(\tau)$$

R は気体定数、T は温度、 β は the average magnetic moment per atom であり、 $g(\tau)$ は文献 1991Din の pp320 もしくは文献 1978Hil を参照のこと。

磁気モーメントの組成依存性は、例えば A-B-C 三元合金では次式で表される。

$$\beta = x_A \beta_A + x_B \beta_B + x_C \beta_C + x_A x_B \beta_{A,B} + x_A x_C \beta_{A,C} + x_B x_C \beta_{B,C} + x_A x_B x_C \beta_{A,B,C}$$

$$\beta_{A,B} = \beta_{A,B}^{(0)} + \beta_{A,B}^{(1)}(x_A - x_B) + \beta_{A,B}^{(2)}(x_A - x_B)^2$$

さて、化合物を定義する場合に、化合物を 1 モルとして取り扱えば特に問題は起きない。
しかし例えば Fe1B1 と化合物を 2 モルとして取り扱う際には注意が必要となる。

化合物 $A_{\frac{x}{x+y}} B_{\frac{y}{x+y}}$ の磁気モーメントを β とし、

$A_x B_y$ の磁気モーメントを β' とすると、

$$G_m^{mag} = RT \ln(1 + \beta') g(\tau) = (x + y) RT \ln(1 + \beta) g(\tau)$$

$$\beta' = (1 + \beta)^{x+y} - 1$$

の関係がある。

$\beta_{Fe0.5B0.5} = 1.030$ の場合、

Fe_{0.5}B_{0.5} と化合物を 1 モルとして取り扱えばこのままであるが、

Fe₁B₁ と化合物を 2 モルとして取り扱えば、 $\beta_{FeB} = 3.12090$ と定義しなければならない。

以上