

元素戦略磁性材料拠点が創出した永久磁石の材料科学とその応用

広沢 哲：物質・材料研究機構

元素戦略磁性材料拠点 ESICMM が目指す学理とは、物質本来の究極的な磁気特性を実現するための永久磁石の材料科学であり、真の意味での材料組織制御に基づく高保磁力化を可能にするための、保磁力を原子尺度で材料組織に関連付けて記述する原子描像の保磁力理論、および、物質本来の高磁化を損なうことなく理論から導かれる材料組織を無理なく実現するための、熱力学的基盤情報の体系である。材料組織の多階層的解析がこれらに指針を与える重要要素であり、また、高い磁化を持つ新規化合物の理論および実験的探索も継続して実施される重要課題である。

原子描像の保磁力理論は、第一原理計算に基づき割り当てた磁石化合物の構成各原子の磁気モーメント、サイト間磁気結合、磁気異方性により古典スピンモデルを構築し、有限温度における磁性、確率的マイクロマグネティックスシミュレーションによる磁化反転臨界磁界の時間依存性、磁化反転のエネルギー障壁、表面および界面での原子配列と磁性の乱れが磁化反転に及ぼす効果、等を取り扱うことができるようになった¹⁾。一方、従来の連続体描像有限要素法によるマイクロマグネティックス・シミュレーションにおいても、交換長サイズのメッシュ分割で数百 nm から 1 μm サイズのモデルに対し磁石材料の磁区構造計算が可能になり、原子描像理論との接続への準備が進んでいる。

材料熱力学では、ほとんどデータが存在しなかった希土類磁石材料について、CALPHAD 用データベースの構築を、実験計測と第一原理計算を併用して進め、特に重要な微量元素 Cu と不純物 O を含む Nd-Fe-Cu-B-O などでの相平衡およびギブスエネルギー変化の計算が可能になり、組織形成過程でのこれらの元素の役割を把握できるようになった。また、材料組織の動的形成過程をモデル化し、フェーズフィールド法を用いて実際の材料組織が現出するための拡散係数や界面エネルギーなどの物性パラメータを推定することが可能になった。

材料組織と磁気特性との関係の解明では、高分解能 STEM-EDS などによる粒界相構造の解明²⁾、FORC 解析の永久磁石への適用、新規に開発した走査型 XMCD 顕微鏡や中性子小角散乱による材料内の磁化過程の解析などの手法開発により、材料組織と磁化過程との関連が明確に議論できるようになり、熱間加工 Nd-Fe-B 磁石のピニング支配型保磁力機構を結論付けた。これらの解析から Dy フリー磁石の高保磁力化に使用する粒界拡散合金の組成開発が進んだ。

物質探査を非希土類系と高鉄濃度軽希土類系について実施し、Sm(Fe-Co)₁₂ が Nd-Fe-B を超える飽和磁化、異方性磁界、キュリー温度を有する新物質であることを単結晶薄膜の作製と磁化測定により示し³⁾、究極高性能磁石を目指す材料化研究の対象に加えた。

以上の成果は阿部太一、大久保忠勝、岡本聡、小野寛太、合田義弘、小山敏幸、杉本諭、高橋有紀子、土浦宏紀、常行真司、寺西利治、中村哲也、宝野和博、三宅隆、宮下精二ら ESICMM 主査研究員(敬称略、五十音順)と多数の研究業務参加者の業績である。元素戦略磁性材料拠点は文部科学省「元素戦略プロジェクト〈拠点形成型〉」による委託事業である。

参考文献

[1] S. Miyashita *et al.* *Scr. Mat. in press*, <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2017.11.012>

[2] T.T. Sasaki, T. Ohkubo, K. Hono, *Acta Mater.* **115**, 269 (2016).

[3] Y. Hirayama, Y.K. Takahashi, *et al.* *Scripta Mater.* **138**, 62 (2017).

関連 Web: <http://www.nims.go.jp/ESICMM/research/index.html>