

元素戦略Pj(2)「スパコン」「京」・「富岳」を用いた磁性材料研究

磁性材料研究拠点

三宅 隆 Takashi Miyake

産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター

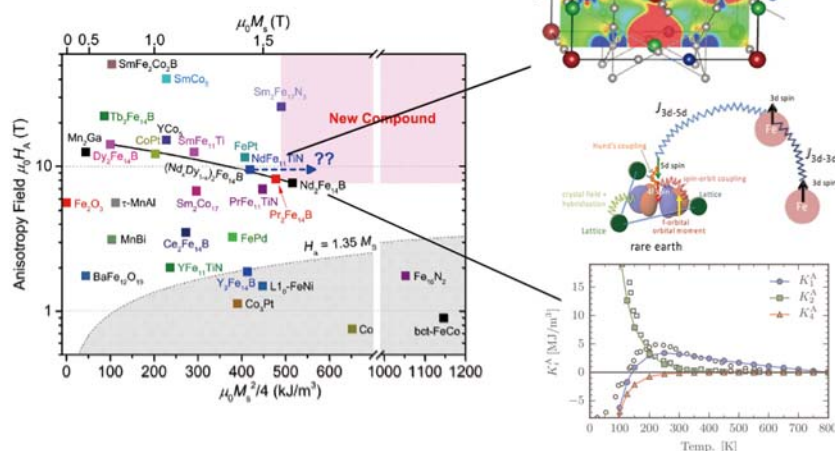


永久磁石は主相と副相からなる複相材料である。主相には、高磁化、高結晶磁気異方性、高キュリー温度が求められ、3d遷移金属(Fe, Coなど)と希土類(Nd, Smなど)を主成分とする物質探索に期待がかけられてきた。われわれは、ThMn₁₂型構造の高鉄濃度化合物(1-12系)に注目し、第一原理計算によりNdFe₂Nが優れた磁気物性値を有することを示した。これと連携してESICMM実験グループにより薄膜が合成され、Nd₂Fe₁₄B(ネオジム磁石の主相化合物)よりも高い磁化、異方性磁場、キュリー温度を持つことが報告された。NdFe₂Nは準安定で、鉄の一部を他の元素で置換することで安定相を形成することが知られている。そこで、鉄サイト、希土類サイトの置換に対する系統的な第一原理計算を実行し、安定化元素や希土類の検討を行った。さらに機械学習も活用し、複数サイトの同時置換まで考慮した組成最適化を実行した。計算データと実験データを統合的に利用する「データ同化」手法と併せて、広い組成空間に対するデー

タ科学手法について議論する。

磁石材料の最も重要な特性である保磁力の制御には、外部磁場に対する磁化反転機構の解明が欠かせない。われわれは、第一原理計算を出発点としてNd₂Fe₁₄Bに対する有効スピンモデルを導出し、モンテカルロシミュレーションにより有限温度の磁気物性値を再現することに成功した。この模型に基づいてNd₂Fe₁₄B結晶粒の保磁力の温度依存性を算出した。その結果、原子スケールの磁気モーメントの熱ゆらぎ、特に粒界近傍の磁性が保磁力に大きな影響を与えることを見いだした。現実的な磁石粒界での磁気物性値に対する大規模第一原理計算と合わせて報告する。保磁

力の発現には、最終的には、副相の微細組織の作り込みが重要になる。そこで、第一原理計算と各種実験を用いた熱力学データベースを構築した。これを用いると、磁石材料の主要な元素の組み合わせに対する計算状態図を作成することができる。また、フェーズフィールド法により組織形成のシミュレーションも可能となる。1-12系磁石の副相制御のための3元状態図の作成や、ネオジム磁石粒界相に対する微量添加元素の影響のシミュレーションなどの実例を含めてESICMM熱力学グループの成果を最後に紹介する。



参考文献

- [1] T. Miyake and H. Akai, J. Phys. Soc. Jpn. 87, 041009 (2018)
- [2] T. Miyake, Y. Harashima, T. Fukazawa and H. Akai, STAM 22, 543 (2021)

関連 WEB

<https://www.nims.go.jp/ESICMM/>