

永久磁石研究における元素戦略課題と大型研究施設活用研究の現状

物質・材料研究機構 元素戦略磁性材料研究拠点 広沢 哲

元素戦略磁石材料研究拠点(Elements Strategy Initiative Center for Magnetic Materials; ESICMM)は、希少元素を用いない永久磁石材料の研究開発を遂行し、磁性材料研究の工学的基盤となる材料科学の深耕と人材育成を目指している。現在の人員構成と個別の研究内容は拠点 URL(1)に掲載されている。

ハイブリッド自動車などに大量に用いられる磁石材料の元素戦略を考える場合、第一になすべきことは、Nd-Dy-Fe-B 系磁石材料の Dy 使用量をゼロにすることである。第二には、Nd 以外の軽・中希土類元素 La, Ce, Pr, Sm などを使用した磁石材料を適度な規模で使用し適正な資源バランスを実現できるよう、新規材料として開発すること、第三には Nd-Fe-B を凌駕する磁気物性値を備え、かつ、希少元素使用を避けた新規材料の存在可能性を理論的に見極め、可能な限り実現することである。これらを推進するには、材料系を問わない多階層のサイズ領域で組織解析や磁性計測ができるマルチスケール・マルチアスペクト解析、および、理論計算により保磁力などの材料特性を十分な精度で予測できる手法の開発が必要であり、それぞれを種々の研究課題のレイヤで利用できる研究プラットフォームとして確立することが有効であると考えられる。

ESICMM では「先端解析・計測プラットフォーム」、および、材料組織予測を含む保磁力理論研究プラットフォームとしての「磁石シミュレータ」の構築を掲げ、理論、計測解析、材料創製の各グループ間の連携研究を推進している。前者には、量子ビームを用いた結晶及び磁気構造解析 (JASRI/SPring-8, KEK/PF, J-PARC) が含まれ、XMCD 計測による元素選択的磁化測定と磁区解析、高温環境下での in-situ 構造解析とプロセス解析、中性子散乱および回折による磁気物性値ならびに構造の解析などを遂行している。これらの研究は、磁性電子論、保磁力理論、材料組織制御に必須の生成自由エネルギーや状態図等のデータ基盤整備、フェーズフィールド・シミュレーションなどの基盤的研究とも連携している。また、磁石シミュレータには、大規模マイクロマグネティックス・シミュレーションによる組織と保磁力の関係の計算実験的解析、および、界面などの複雑構造における電子状態の第一原理計算に基づく磁気異方性やキュリー温度などの磁気物性値の予測や粗視化に伴う原子スケールから連続体のシミュレーションとの連結手法の研究などが含まれ、その一部を理研「京」等のスーパーコンピュータを用いて実行している。

ESICMM が緊急の課題として注力している Dy フリーNd-Fe-B 磁石の開発テーマでは、NIMS の宝野らの解析チームが 3DAP で組成解析した結果等に基づき強磁性と予測した Nd-Fe-B 焼結磁石中の厚さ約 2nm のアモルファス粒界相に対して、JASRI の中村らのチームがその磁性を軟 X 線 MCD により粒界破断させた試料を用いて計測し、キュリー温度および Fe 当たりの磁気モーメントが主相よりも低い強磁性相であることを解明し、さらに宝野チームがこの粒界相を非磁性化することがさらなる高保磁力化の決め手となることを示す、などの成果が得られているほか、粒界部に極微量生成する副相の生成量の温度変化、スピン波分散による主相の交換スティフネス、など、従来の手法では得られなかった情報が大型研究施設の活用により得られてきている。

[1] <http://www.nims.go.jp/ESICMM/>.