

氏名(本籍)	佐藤卓(栃木県)
学位の種類	博士(工学)
学位記番号	博甲第6020号
学位授与年月日	平成24年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	数理物質科学研究科
学位論文題目	ナノ結晶構造を持つ軟質および硬質磁性材料における保磁力機構の解析

主査	筑波大学教授	工学博士	喜多英治
副査	筑波大学教授	Ph.D	佐野伸行
副査	筑波大学准教授	博士(工学)	柳原英人
副査	筑波大学教授	Ph.D	宝野和博
副査	東北大学客員教授	博士(工学)	三俣千春

論文の内容の要旨

近年、エネルギーの枯渇に備えるため様々な技術的努力がなされているが、その中で磁性材料の役割が再認識されている。電力輸送におけるトランス用軟磁性材料は、長い歴史を持つが今なお改良の余地を残している。また永久磁石については、電気エネルギーの力学的変換において大きな役割を果たしており、特にハイブリッド及び電気自動車用のモーターについては、性能面だけではなく資源面からも早急な改善が求められている。これらにおいて性能向上の一つの観点、ナノテクノロジーの応用である。特にナノ構造を物質に取り入れたナノ材料において高性能材料が提案され実現されている。この論文ではナノ構造を持つ磁性材料において、その構造が材料特性にどのような影響を与えるかを数値計算によって明らかにしようとするものである。

ナノ結晶磁性材料では粒間相互作用が、保磁力発現に重要な役割を担う。しかしながら、通常計算で用いられる連続体モデルは粒界面に生じる交換エネルギーを正確に扱うことができない。本論文では、シングルスピンのモデルを用いてナノ結晶粒間で生じる交換エネルギーを取り込み、軟質及び硬質ナノ結晶における保磁力機構の解明を目的とし、以下の内容の検討を行った。

(1) ナノ結晶軟磁性材料の保磁力機構(ランダム磁気異方性モデル)の磁気シミュレーション。

ナノ結晶を粒子間相互作用がありランダムな容易軸を持つ単磁区粒子の集合体として扱う。保磁力の粒径依存性を磁気結合の次元を変化させて調べ、理論的予測の再現が再現するか調べた。保磁力状態の磁化分布を可視化し、相関長を計算して中性子散乱実験の予測を行う。

(2) ナノコンポジット永久磁石の磁気特性(粒径依存性)。

次世代永久磁石材料として有望であるナノコンポジット永久磁石の磁気特性のシミュレーションを行う。配向度を変えた場合の保磁力の粒径依存性を調べ、保磁力機構を検討した。また、 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒内の磁区構造を解析するために、粒内を分割する磁化計算モデルを拡張した。さらに磁気双極子相互作用を取り込みその影響を調べた。

まず軟磁性ナノ結晶のシミュレーションでは、1,2,3次元構造においてランダム磁気異方性モデルの予測

をほぼ再現した。様々な状況での磁化の実空間配置を可視化した。実験データを解釈するために、実空間スピン配置から相関長を求め、さらには中性子小角散乱のプロファイルを予想し、粒径の減少による交換結合長の成長を確認し、保磁力の変化との関係を議論した。

硬質磁性材料のシミュレーションでは、主に硬質磁性粒子 ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$) と磁化の大きい軟磁性粒子 (αFe を仮定) をモザイク状に配置し、磁化過程の粒径依存性を調べた。粒径が小さくなると磁気結合した性質の異なる粒子において一体で磁化反転が起こり、さらには軟磁性で見られた磁気異方性の平均化による保磁力の急激な減少が見られた。結晶主軸の配向性を議論するために配向度をガウス分布で取り込み、 30° 程度に配向度を押さえることにより十分な保磁力と BH 積が得られることを見いだした。硬質磁性粒子においては、磁区と磁壁の存在が磁化反転機構に影響が大きいと考えられたため、一つの結晶を磁氣的に多粒子に分割した。これにより磁化のねじれと磁壁移動が数値的に再現される結果を得た。さらに磁気双極子相互作用を考慮して磁化過程への影響を調べた。

審査の結果の要旨

ナノ結晶磁性材料において軟磁性に良く用いられるランダム磁気異方性モデルを数値的に検証した研究は少ない。磁化の様な空間での磁気異方性の平均化から導かれる直感的関係を現実の磁化の空間分布やそれを反映する小角散乱実験の結果に結びつけるためには、数値的な計算による以外に方法は無い。シミュレーション結果を用いて磁気小角散乱を予測したことは、この物質群の物性研究を進める上で評価できる。また 1, 2 次元ナノ結晶では実験的な検証が難しいため、計算機実験とも言えるシミュレーションでの再現は、モデルの正当性を裏付けるものである。

またナノコンポジット磁石のシミュレーションでは、粒径依存性と配向性について明確な結果を得ている。粒径の小さな領域でランダム磁気異方性モデルの示唆する結果が得られたことは当然とも言えるが、両者を同時に扱っているこの論文ではその理由がさらに明確に議論できている。シングルスピンモデルから発展させて 1 つの結晶粒子を磁氣的に分割して磁化の自由度を増やし、磁壁移動と考えられる磁化の運動をとらえた。さらに 2 つの相の磁化の大きさに違いがある事から、磁気双極子相互作用の重要性を認識し、数値的に取り込んで磁化過程における変化を確認した。これは実験データを定性的に説明できるものであり、現実の系の磁化反転機構を明らかにする上で重要な知見が得られたと考えられる。

平成 24 年 2 月 10 日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士 (工学) の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。