

マイクロマグネティックシミュレーションによる Nd-Fe-B 磁石の磁化反転過程と SANS パターンの解析

塚原宙、岩野薫、井波暢人、三俣千春¹、矢野正雄²、上野哲朗、斉藤耕太郎、庄司哲也²、真鍋明²、加藤晃²、小野寛太
(高エネ研,¹ 物材機構,² トヨタ自動車)

Analysis of SANS patterns in magnetization reversal process on Nd-Fe-B magnet using micromagnetics simulation

H. Tsukahara, K. Iwano, N. Inami, C. Mitsumata¹, M. Yano², T. Ueno, K. Saito, T. Shoji², A. Manabe², A. Kato² and K. Ono
(KEK, ¹NIMS, ²TOYOTA Motor Corporation)

はじめに

永久磁石に求められる高保磁力と大きな磁化を実現するためには、保磁力機構の解明が不可欠であり、われわれは中性子小角散乱 (SANS : Small Angle Neutron Scattering) 実験により得られるバルク内部の磁区情報から Nd-Fe-B 磁石の保磁力機構を明らかにすることを目的として研究を行っている。SANS からバルク内部での磁区や組織構造の平均情報が得られるが、SANS パターンからバルク内部の磁区構造を推定することは容易ではない。そこで本研究では、マイクロマグネティックシミュレーションを用いて計算した Nd-Fe-B 内部の磁化分布から SANS パターンを求め、磁石内部の磁化分布と SANS パターンの関連を調べた。

計算手法

Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式を用いて Nd-Fe-B 磁石の磁化分布を外部磁場を変化させながら計算した。磁石のモデルは Nd-Fe-B 結晶粒を半径を変えた球として取扱い、セルに詰めて作成した。シミュレーションでは磁石内部の状態を再現するため周期的境界条件を用いて磁化分布を計算した。われわれの計算では反磁場も含め各相互作用を正確に求めている。SANS パターンを計算するためには大きな系が必要となるので KEK のスーパーコンピュータを使用した。Nd-Fe-B については飽和磁化 1.61 T、交換スチフネス定数 8.7 pJ/m および磁気異方性定数 4.3 MJ/m³ を用いた。また中性子散乱理論に基づき磁化分布に対応する SANS パターンを以下の式を用いて計算した [1]

$$\frac{d\Sigma}{d\Omega}(\mathbf{q}) = \frac{8\pi^3}{V} b_H^2 \left(\frac{|\tilde{N}|^2}{b_H^2} + |\tilde{M}_x|^2 + |\tilde{M}_y|^2 \cos^2 \theta + |\tilde{M}_z|^2 \sin^2 \theta - (\tilde{M}_y \tilde{M}_z^* + \tilde{M}_y^* \tilde{M}_z) \sin \theta \cos \theta \right). \quad (1)$$

ここで \tilde{N} , \tilde{M} は核散乱長密度および磁化のフーリエ成分であり、 V は系の体積で $b_H = 2.9 \times 10^8 \text{ A}^{-1} \text{ m}^{-1}$ である。また小角散乱の実験配置から $\mathbf{q} \simeq (0, \sin \theta, \cos \theta)$ となる。

結果

シミュレーション結果から計算された SANS パターンを Fig. 1 (a) および (b) に示す。この計算では 640³ nm³ の系を 5 nm³ の正方メッシュで分割し、結晶方位がランダムな平均半径 25 nm の Nd-Fe-B 結晶粒を 700 個充填した。消磁状態で磁化方向がランダムな場合に SANS パターンは等方的な分布を示すが、c 軸方向に完全着磁した場合には q_y 方向 (縦方向) に分布が伸びる。この傾向は実験結果と定性的に一致する。講演では実験で得られた SANS パターンとの比較について議論する予定である。

謝辞

本研究は、(独) 科学技術振興機構 (JST) による産学共創基礎基盤研究「革新的次世代高性能磁石」の支援を受けて行われたものである。スーパーコンピュータシミュレーションは、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) の大型シミュレーション研究 (課題番号 13/14-08) により行われた。

[1] D. Honecker, C. D. Dewhurst, K. Suzuki, S. Erokhin and A. Michels, PRB **88** 094428 (2013).

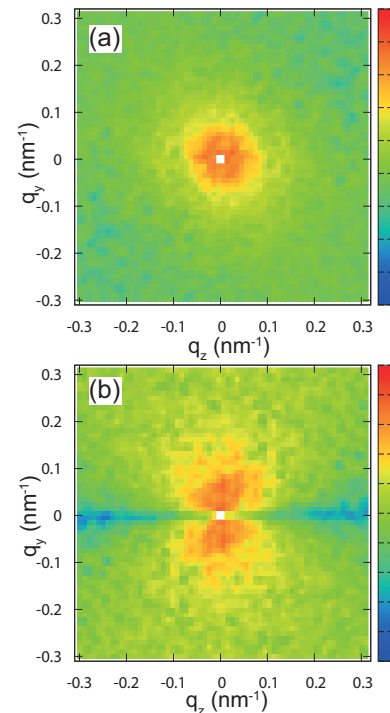


Fig 1: The Calculated SANS patterns of Nd-Fe-B magnets in (a) randomly magnetized and (b) fully magnetized state.