

大規模シミュレーションによる粒界相のピンニング効果の研究

塚原宙、岩野薫、三俣千春¹、石川正、小野寛太
(高エネ研,¹ 物材機構)

Investigation for directional dependency of pinning effect of grain boundary phase using large-scale micromagnetic simulation

H. Tsukahara, K. Iwano, C. Mitsumata¹, T. Ishikawa, and K. Ono
(KEK, ¹NIMS)

はじめに

近年温室効果ガスによる温暖化が深刻し電気自動車などの低炭素社会に向けた技術が重要になっている。永久磁石はその技術の中核を担う材料であり、さらなる高性能化に向けた研究が精力的になされている。永久磁石は多数の粒子から構成され、磁気特性向上のためには粒子間の磁氣的分断による磁化反転の阻止が重要になる。永久磁石では浸透処理による粒界相の改質などの手法で磁化反転の伝搬を阻害する。しかしながら磁化反転伝搬における粒界相の役割は完全には理解されていない。我々は反磁場の効果も含め粒界相の役割について大規模シミュレーションを用いて研究した。その結果、外部磁場平行方向と比べて垂直方向に対して粒界相による磁気分断を行うことで磁化反転の伝搬が阻害される事を明らかにした。

計算手法

図1(a)に示される様に立方体の粒子を格子状に並べた異方性磁石モデルを用いてシミュレーションを行った。粒径は64nmであり異方性磁石モデル1辺の長さは1024nmである。磁化ダイナミクスは異方性磁石モデルを1辺2nmの立方体セルで分割し、Landau-Lifshitz-Gilbert方程式を周期境界条件下で解き計算した。よってこの異方性磁石モデルは4,096個の粒子から構成されており、シミュレーションでは約1億セルを用いている。今回のシミュレーションでは図1(b), (c)に示される様に xy 平面および z 軸方向のみ粒界相がある場合を考え、それぞれtype AおよびBとした。外部磁場は z 軸方向に印加される。粒子を構成する物質はNd₂Fe₁₄Bを想定し、飽和磁化1281.2 emu/cm³、磁気異方性定数 4.5×10^7 erg/cm³、交換スティフネス定数 12.5×10^{-7} erg/cm およびギルバートダンピング定数1.0を用いた。また粒界相は強磁性体を仮定し、主相粒子に比べ飽和磁化は10%、交換スティフネス定数は1%とし、磁気異方性は無いとした。シミュレーションは独自に開発したシミュレーターを使用しKEKのスーパーコンピューティングシステムBlue Gene/Qで実行した[1]。容易軸は平均で z 軸から11.6°傾いたモデルを作成した。

結果

シミュレーションから計算された磁化曲線を図1(d)に示す。磁化曲線は粒界相が存在する方向に大きく依存し、保磁力はtype Aで約36kOeでありtype Bに比べ1.28倍大きな値となった。Type Aでは磁化は徐々に減少しているのに対し、type Bでは急激に磁化が減少する。図1(e)および(f)にtype AおよびBの外部磁場が-36kOeでの磁化状態を示す。Type Aでは粒界相でのピンニング効果により磁化反転領域は z 軸方向のみに伝搬している事が分かる。これに対しType Bでは、反磁場の影響により、 z 方向に粒界相があるにも関わらず磁化反転が磁石全体に広がる。

謝辞

本研究の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16/17-25)により行われた。

[1] H. Tsukahara, K. Iwano, C. Mitsumata, T. Ishikawa, K. Ono, Comput. Phys. Commun, 207, 217 (2016).

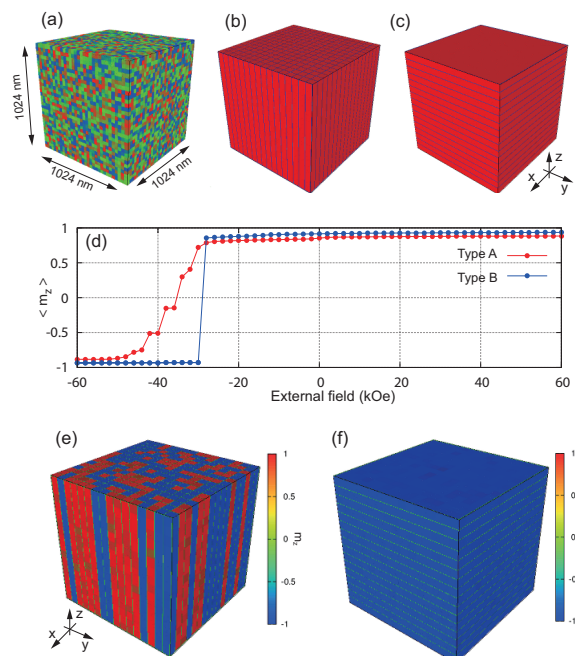


Fig 1: The simulation model (a), the grain boundary phase of type A (b) and B (c). The black lines represent the grain boundary phase. The calculated hysteresis curve (d), and the magnetization of type A (e) and B (f), when external field is -36kOe.