



筑波大学
University of Tsukuba

ネオジウム磁石の高性能化に向けたデジタルツインの開発

～微細組織の最適化による究極の保磁力への道～

配布日時：2024年3月6日14時

NIMS（国立研究開発法人物質・材料研究機構）

国立大学法人筑波大学

概要

1. NIMSは、電子顕微鏡観察から得られるネオジウム磁石の微細組織を有限要素モデルに取り込み、外部磁界の影響で磁石が減磁する過程を数値シミュレーションで再現することに成功しました。このシミュレーションを通じて、磁石の強さの指針の一つである保磁力を物理的限界に近づけるために必要な微細組織を予測することが可能になります。本研究の成果は、商用磁石の磁気特性が物理的限界に遠く及ばない原因を明らかにし、究極の性能を持つ磁石開発への指針となることが期待されます。

2. 風力発電、モビリティ用途で使用されるモーターは高性能永久磁石に大きく依存しており、中でもネオジウム（Nd-Fe-B）磁石は最も強力で需要が増大しています。しかし、ネオジウム磁石の保磁力は、そのほとんどが物理的限界をはるかに下回っています。

3. 本研究では、超微細粒Nd-Fe-B磁石の微細組織を電子顕微鏡で観察し、それを大規模モデルで再構成する新しいアプローチを提案しました。このアプローチは、走査型電子顕微鏡(SEM)と集束イオンビーム(FIB)による研磨を組み合わせて取得した多数の2次元画像データを、高品質な3次元モデルに変換するというトモグラフィーに基づくもので、磁石研究に限らず他の多結晶材料に適用して、材料科学の幅広い数値計算のモデルとして応用できます。

4. このトモグラフィーとシミュレーションの組み合わせは、現実の現象を仮想空間に構築するデジタルツインの実現であり、先進的な超微細粒Nd-Fe-B磁石の保磁力を再現し、そのメカニズムの説明を可能にするとともに、磁石の強さを支配する微細組織の特徴も明らかになりました。

5. 今回開発したネオジウム磁石のデジタルツインは、微細組織と磁気特性の両方を再現するのに十分な精度を備えており、保磁力が物理的限界を下回っている原因の解明や、高性能な永久磁石の設計・開発に利用できます。例えば、自動車用駆動モーターや可変磁束モーターなど、特定の用途に必要なとされる磁石の要求特性を入力すれば、データ駆動型の予測を通じて、その用途に最適な磁石の組成、プロセスの詳細、微細組織等を提案することができるようになり、用途に応じて必要とされる磁石の開発期間を著しく短縮することができると期待されます。

6. 本研究は、Anton Bolyachkin（NIMS 若手国際研究センター ICYS リサーチフェロー）、Hossein Sepehri-Amin（NIMS 磁性・スピントロニクス材料研究センター グリーン磁性材料グループ グループリーダー、筑波大学数理物質系 連携大学院准教授）、大久保忠勝（NIMS 磁性・スピントロニクス材料研究センター 副センター長）を中心とする研究チームによって実施されました。本研究の一部は、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業（DxMT）JPMXP1122715503、および、日本学術振興会科学研究費補助金（助成番号JP23H01674）の助成を受けたものです。

7. 本研究成果は、npj Computational Materials 誌に2024年2月12日にオンライン掲載されました。（DOI: 10.1038/s41524-024-01218-5）

* 物質・材料研究機構は、その略称をNIMS（National Institute for Materials Science）に統一しております。

研究の背景

高性能永久磁石は、電気自動車／ハイブリッド車、ロボットシステム、風力タービン、電子機器やその他の産業用モーターや発電機のエネルギー効率をあげるために重要な材料です。これらの応用では、1988年に佐川真人氏が発明したネオジム磁石が主に利用されていますが、数十年にわたる研究の結果、ネオジム磁石の最大エネルギー積はほぼ理論限界に達しています。しかし、ネオジム磁石を実用上使うもう一つの重要な特性である保磁力^①は、そのポテンシャルの20～25%に過ぎません。ブラウン・パラドックスとして知られるこの現象は、主に多数のNd₂Fe₁₄B結晶で構成される微細組織中の結晶粒界の種々の欠陥に起因しています。これを克服し、高い保磁力を得るためには、Nd₂Fe₁₄B結晶のc軸配向性を改善し、その組織を薄い非磁性粒界相によって互いに隔離させる必要があります。ネオジム磁石の微細組織を最適化して磁石特性を極限にまで引き上げる研究は現在も進行中であり、これらの研究を加速するために、微細組織と磁気特性の関係を明らかにするマイクロマグネティックシミュレーション^②がよく用いられています。しかし、これまでの単純化されたモデルを用いたシミュレーションでは、実際の磁石特性から大きくかけ離れた計算結果となり、実用的な磁石特性の予測には至っていませんでした。

研究内容と成果

NIMSの研究チームは、集束イオンビーム-走査電子顕微鏡(FIB-SEM)で観察・計測した3次元データに基づき多結晶材料の現実的な大規模有限要素モデルを構築する新しいアプローチを提案しました。このアプローチは、超微細結晶粒組織を持つNd_{13.4}Fe_{76.3}Co_{4.5}Ga_{0.5}B_{5.3}(原子パーセント)組成の熱間加工磁石に適用されました。モデルの開発はいくつかのステップから構成されています。まず、FIBで磁石表面を20 nmステップで研磨しながら撮影した一連のSEM画像データを取得し(図1a)、このSEM画像にノイズ除去、ドリフト補正、2次元セグメンテーションなどの処理を施しました(図1b)。このような処理の後、各粒子は一連の2次元画像で表現され、それらを重ね合わせて3次元の有限要素モデルを構築しました(図1c)。この際、SEM画像では分解できない薄い磁性粒界相を再構成することが課題となりました。この相の典型的な厚さは2～4 nmで、永久磁石の保磁力に大きな影響をあたえる重要な微細組織の特徴です。この粒界相を処理するために、粒に対するトリミング、押し出し、そしていくつかのブル演算を使用するアルゴリズムを開発しました。このアルゴリズムにより、粒界相を個々の領域に分割し、保磁力に大きな影響をあたえる粒界三重点を導入することにも成功しました(図1c)。最後に、このようなモデルを四面体要素の高品質メッシュで離散化するために、小さな曲線や小さくて狭い表面を排除するという形状の補正が実施されました。

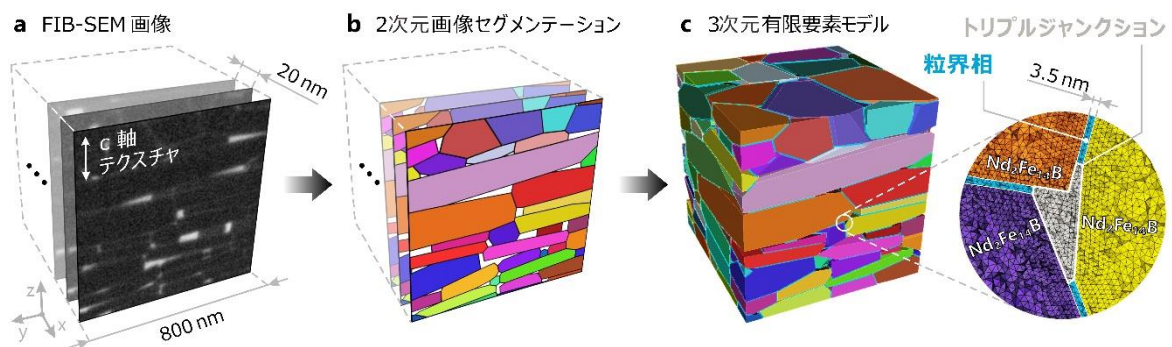


図1 FIB-SEM トモグラフィーに基づくモデルの開発。(a) 熱間加工したNd-Fe-B磁石の一連のFIB-SEM画像取得。(b) ベクトル化された2次元セグメンテーションを含む画像処理。(c)粒界相と粒界三重点によって互いに隔離され密に詰まった3次元凸粒の生成。

本研究で開発した熱間加工ネオジム磁石のFIB-SEM トモグラフィー^③に基づくモデルを用いてマイクロマグネティックシミュレーションを行いました。特に、粒界相と粒界三重点の磁化を変化させ、それによる減磁曲線の変化^④を系統的にシミュレーションしました。その結果、粒界相の磁化が0.8 Tの強磁性で、薄い粒界三重点の一部が弱磁性であると仮定した場合、シミュレーション結果は実験によく一致することが見いだされました(図2a)。実際、粒界三重点の磁性は、実験的に予測された値によく一致してしまし

た。さらに、粒界相と粒界三重点の磁気特性を調整したトモグラフィーに基づくモデルは、熱間加工 Nd-Fe-B 磁石における減磁過程で反転磁区の発生と結晶粒界におけるピン止め (図 2a の挿入図) を可視化することができました。この手法によって、実際の現象と微細組織の特徴とを関連づけることが可能となり、極限の磁石特性を達成するために必要な微細組織因子を示すことができるようになりました。

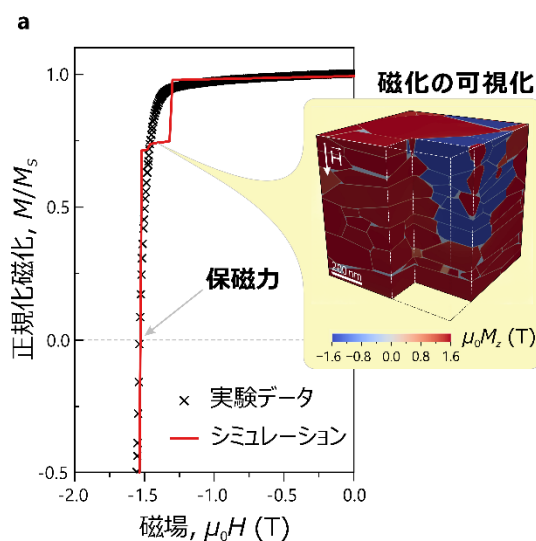


図 2 トモグラフィーに基づくモデルを用いたマイクロマグネティックシミュレーション。(a)FIB-SEM トモグラフィーを行った熱間加工ネオジウム磁石の第 2 象限における減磁曲線のシミュレーションと実験データ。減磁曲線上の 1 点における磁区分布を挿入図で示す。

今後の展開

本研究で開発した超微細粒ネオジウム磁石のデジタルツイン⁶⁾により、保磁力が微細組織によりどのように変化するのかを精度良くシミュレートすることができます。このような現実的なマイクロマグネティックモデルは、究極の保磁力を目指してネオジウム磁石の微細組織をどのように最適化すれば良いのかという指針を示してくれます。さらに、このデジタルツインは応用に応じて必要とされる特性を実現するための合金組成や微細組織を予測できるインバースデザインにも利用することができます。このコンセプトに基づく研究は、NIMS の DXMag プロジェクトで現在も進行中です。

高性能磁石は自動車の電動化や家電、携帯端末だけでなく、ロボット、ドローン、さらに将来的には航空機にも広がろうとしています。このため、特定の応用に必要とされる特性を持つ永久磁石を迅速に開発することが求められています。必要とされる特性をインプットとして、それを満たす最適な磁石の組成、詳細なプロセス条件、微細組織をインバースデザインしなければなりません。そのためには、ネオジウム磁石のために収集された膨大なデータセットと、現実的なシミュレーションモデルおよび機械学習との統合が必要になります。この研究の成果は将来の磁石のインバースデザインに向けた第一歩です。

掲載論文

題目： Tomography-based digital twin of Nd-Fe-B permanent magnets

著者： A. Bolyachkin, E. Dengina, N. Kulesh, Xin Tang, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, K. Hono

雑誌： npj Computational Materials (DOI: 10.1038/s41524-024-01218-5)

掲載日時： 2024 年 2 月 12 日

用語解説

(1) 保磁力：永久磁石の性能を表す指標の一つで、磁性体がもつ磁化の向きに反対方向の磁場を印加して、磁化がゼロになるときの外部磁場の値。外部磁場に対する抵抗力を表し、耐熱性を表す指標として使われます。

- (2) マイクロマグネティックシミュレーション：ある外部磁場印加の元での磁化の空間分布を求める数値的アプローチで、平衡状態の連続的な変化や動的変化を計算する手法。このようなシミュレーションは通常、実際の磁性材料の微細組織を模擬したモデルに対して実施します。
- (3) トモグラフィー：多数の2次元画像の情報を元に、3次元的な組織情報に変換する手法です。
- (4) 減磁曲線：磁性体を持つ磁化の向きに反対方向の磁場を印加した時の磁化の変化を表す曲線。磁気ヒステリシス曲線における第2象限に相当します。
- (5) デジタルツイン：シミュレーション、検査、モニタリング、メンテナンスなどの実用的な目的のために、物理的な物体のデジタル・モデルによって、仮想空間上において現実を再現する技術です。

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

NIMS 磁性・スピントロニクス材料研究センター

副センター長 大久保忠勝 (おおくぼただかつ)

E-mail: OHKUBO.Tadakatsu@nims.go.jp

TEL: 029-859-2716

URL: <http://www.nims.go.jp/mmu/>

(報道・広報に関すること)

NIMS 国際・広報部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

筑波大学 広報局

〒305-8577 茨城県つくば市天王台 1-1-1

E-mail: kohositu@un.tsukuba.ac.jp

TEL: 029-853-2040, FAX: 029-853-2014