

ESIC MM

ELEMENTS STRATEGY INITIATIVE CENTER
FOR MAGNETIC MATERIALS



文部科学省 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>磁石材料領域

元素戦略磁性材料研究拠点



Independent Administrative Institution

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

元素戦略磁性材料研究拠点

〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1

TEL: 029-859-2000 (機構代表)

E-mail: info-esicmm@ml.nims.go.jp

<http://www.nims.go.jp/ESICMM/>

アクセス

■ つくばエクスプレスをご利用の場合:「つくば駅」下車

【徒歩】A3出口より約15分。

【NIMS定期便】A3出口を直進した「企業バスのりばB」よりNIMSの定期便バスがご利用いただけます。

詳しくは、NIMS公式HPの交通アクセスより「NIMS定期便について」をご覧ください。

【路線バス】バスターミナル4番のりばから関東鉄道バス「荒川沖駅西口行」乗車、「千現一丁目」下車徒歩5分。

■ 高速バス

【東京駅から】東京駅八重洲南口ハイウェイバス2番のりばから高速バス「特急つくば号」乗車後、「千現一丁目」下車徒歩5分。

【羽田空港から】第1・2旅客ターミナル共に13番のりばから「つくばセンター行」乗車後、「千現一丁目」下車徒歩5分。

【成田空港から】8番のりば(第1ターミナル)もしくは(NATT'S)10番のりば(第2ターミナル)から乗車後、「つくばセンター」下車、つくばバスターミナル4番のりばから関東鉄道バス「荒川沖駅西口行」乗車、「千現一丁目」下車徒歩5分。



元素戦略磁性材料研究拠点

Elements Strategy Initiative Center for Magnetic Materials

代表研究者挨拶

元素戦略磁性材料研究拠点(ESICMM)は、理論・計測解析・材料創製の3分野を融合させて、新規磁石材料の理論探索を進めると同時に、既存磁石材料の高性能化技術进行研究し、希少元素に依らない大量生産可能な次世代磁石材料を実験室規模で創製し、産業界での開発研究に必要とされる基礎学理と技術基盤を構築することを目的としています。同時に、将来の磁性材料研究開発の継続的な発展に寄与する人材の育成も目指します。

高性能永久磁石材料は、ハイブリッド自動車・電気自動車のモーターや、風力発電機の発電機をはじめ、エアコン・冷蔵庫等の電気製品の心臓部に使われており、磁石特性の向上は省エネルギーに大きく貢献します。

現在、最高性能を有する希土類磁石は、日本の佐川真人博士により発明され、鉄を主成分としてネオジム・ジスプロシウムと硼素を使った合金(ネオジム磁石)が高性能用途で使用されています。しかし、希土類(レアアース)資源を海外に依存する我が国にとって、資源輸出国の政策やレアアース価格の高騰が近年では問題となっており、ジスプロシウムのような希少資源を使わずに高性能な永久磁石を創出することが強く求められるようになりました。

永久磁石材料は、ナノメートル領域の組織制御によって特性が発現する材料ですが、そのような微細領域の磁気物性値や特性を決めるメカニズムについての学問的な解明はなされていません。最近の理論研究や、ナノテクノロジーの急伸により、ようやく磁石特性メカニズムの解明研究に手がかりが得られてきた状況です。

本研究拠点では、メカニズム解明に根差した新規高性能磁石材料の創出を目指し、代表研究者の下に、新規物質探索の決め手となる理論や計算科学の分野を担当する「電子論グループ」、特性発現機構解明に欠かせない微細領域の組織解析の分野を担当する「解析評価グループ」、高度な組織制御技術を駆使し研究成果の工業化に不可欠な材料創製分野を担当する「材料創製グループ」の3グループを設置し、東北大学、産業技術総合研究機構、高エネルギー加速器研究機構、東京大学、東京大学物性研究所、名古屋工業大学、京都大学、高輝度光科学研究センターの8機関と連携して、共同研究を推進していきます。



代表研究者 **広沢 哲**
物質・材料研究機構

永久磁石と社会とのつながり



© Wind Power by mason bryant

永久磁石は生活のあらゆるシーンで活躍していますが、その存在は意外と知られておらず、縁の下の力持ちといった存在です。モーター用磁石は自動車、エアコン、冷蔵庫など生活用品から産業機器まで幅広く利用されています。また大型磁石はMRIなどの医療分野や、風力発電器などエネルギー分野でも活躍しており、永久磁石なしでは我々の生活は成り立ちません。

このような背景において、高性能永久磁石には希土類元素が多量に用いられており、これを含む希少元素の確保は社会基盤を維持する上で重要な施策となります。しかし、循環型社会のコンセプトにあるように、元素の存在量は有限であり希少元素の使用量を削減する試みも必要となっています。元素戦略は希少元素使用量の削減、代替元素探索など社会基盤、産業基盤を支える国家戦略であり、ESICMMは磁石材料分野における元素戦略の具現化を目指しています。



© #7 Toyota TS030 by simonw92

元素戦略拠点と関係機関の連携スキーム



- *1 元素戦略磁性材料研究拠点(磁石材料領域、物質・材料研究機構)
- *2 実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点(触媒・電池領域、京都大学)
- *3 東工大元素戦略拠点(電子材料領域、東京工業大学)
- *4 構造材料元素戦略研究拠点(構造材料領域、京都大学)

元素戦略プロジェクト(研究拠点形成型)は、平成24年度より開始された文部科学省の委託研究事業であり、様々な工業材料において希少元素利用の削減を目的とした新しい材料研究を行うために、磁石材料、触媒・電池材料、電子材料および構造材料の4分野において研究拠点が形成されました。このうち、磁石材料分野の拠点として、重希土類などの希少元素を用いない高性能磁石材料の開発を主目的とする、元素戦略磁性材料研究拠点(ESICMM)が物質・材料研究機構に平成24年度より設置されました。これら拠点は文部科学省に設置された運営統括会議の下、学協会や民間企業等と連携して研究を進めていきます。また、スーパーコンピュータ「京」や大型研究施設J-PARCやSPRING-8などの共同利用を通じて拠点間の連携も図り、さらに、経済効率的産業に産業界に還元できるよう努め省による未来開拓プロジェクトとも協力し、研究成果をていきます。

電子論グループ

Electronic Theory and Computation Group

電子論グループは結晶磁気異方性などの磁気物性値の高精度計算、界面や表面を含むより大規模な系での物性値予測、保磁力の微視的理論解析、磁化反転と伝搬にかかわる理論の整備、第一原理計算による高性能磁石化合物の探索などのテーマに取り組みます。また、計算物質科学イニシアチブ（CMSI）を軸に拠点間で連携して理論共通基盤を開発整備し、計算主導の材料開発手法の構築を目指します。

参画機関：産業技術総合研究所、東北大学、東京大学、東京大学物性研究所、物質・材料研究機構



グループリーダー
ESICMM主任研究者
三宅 隆
産業技術総合研究所



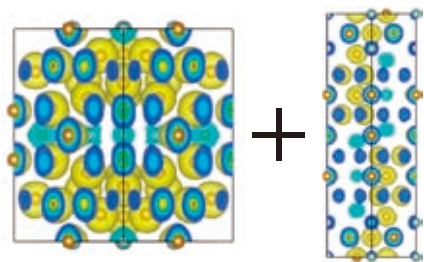
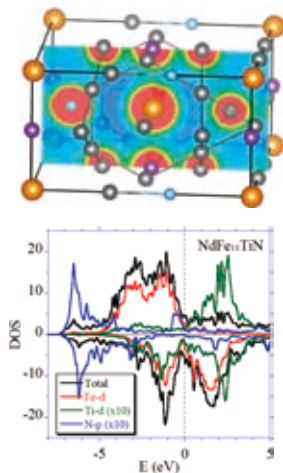
ESICMM主任研究者
合田 義弘
東京大学

磁氣的性質の電子論計算手法創出

第一原理計算による結晶磁気異方性或磁気モーメントの定量的記述に基づいて磁石性能を解析します。また構成元素、組成、結晶構造などを変えた計算により磁性の物質依存性を調べ、その支配要因を特定します。これらの系統的計算を通して新磁石化合物を探索します。この目的のため、第一原理有効模型解析やマテリアルズ・インフォマティクスなどの新技術もとりこみながら、磁性、電子状態、構造、相安定性を記述する第一原理計算手法を開発し、新物質・材料のための計算科学的アプローチの確立を目指します。

磁石材料微細組織界面の第一原理電子論

焼結磁石における磁気特性発現のメカニズム解明のためには保磁力発現に多大な影響を及ぼしている微細組織界面の磁気状態を微視的な第一原理電子論により議論する必要があります。そのために必要な大規模第一原理計算をスーパーコンピュータ「京」を用いて行っており、磁気モーメントや磁気異方性などの磁気特性を微細構造により制御する指針を見いだす事を目指しています。また、既存の磁石と根本的に異なる新磁石材料の創成指針を見いだすため、様々な磁性化合物の磁気特性とその発現機構を電子論により明らかにしていきます。



ESICMM主任研究者
土浦 宏紀
東北大学



ESICMM主任研究者
常行 真司
東京大学



ESICMM主任研究者
宮下 精二
東京大学

保磁力の微視的解析

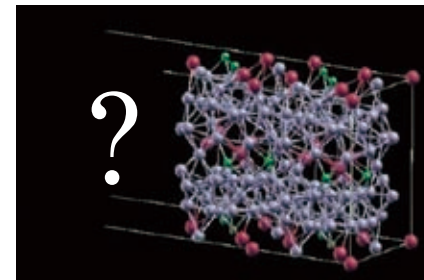
現在最強の永久磁石である、Nd-Fe-Bの性能向上を目指して、理論的な側面から研究を行っています。この材料は、希土類元素であるNdのもつ大きな磁気異方性により、Feの磁気モーメントが固定されることで磁石となります。しかし、Ndの磁気異方性は、結晶粒界面にける原子スケールの乱れ等によって容易に減少しうることが分かってきました。また、粒界面で磁気異方性が弱まることにより、系の保磁力まで半減しうることが明らかになっています。本プロジェクトでは、Nd-Fe-B潜在能力を最大限引き出すべく、主相であるNd₂Fe₁₄Bのシミュレータを構築し、その上で理想的な界面構造の探索等に挑戦していきます。

電子論共通基盤

永久磁石開発に必要な基盤的計算機シミュレーション手法の検討・開発と、それらを用いた磁石材料の計算機マテリアルデザインを実施するとともに、電子論グループと計算物質科学研究者のコミュニティである計算物質科学イニシアティブ（CMSI）の連絡会開催、分野横断型の検討会の開催、若手研究者が滞在して交流できる場の提供等を行うことによって、永久磁石開発を電子論の側面から推進することを目的としています。また物質科学シミュレーションのポータルサイト"MateriApps"を通じて、国内外で開発されたソフトウェアの機能・特徴をわかりやすく伝え、ソフトウェアの普及を推進します。

保磁力の統計力学機構解明

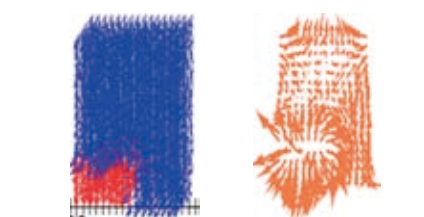
宮下チームは相転移の統計力学や、相転移に伴う秩序状態のスイッチ現象について研究を進めてきている。組織は、東京大学理学系研究科の宮下研究室と、物質材料研究機構の西野正理博士、原研の大西弘明博士を中心に構成し、グルノーブル、ルイネール研究所のBernard Barbara博士らと共同して、保磁力の統計力学機構やその基礎となる電子構造機構について研究を進めている。特に、分子動力学を用いて、磁場反転の核生成、ドメイン壁の運動などについて調べ、保磁力の温度依存性や、反磁場の結晶形状やドメイン構造への依存性などをミクロな立場から研究を進めている。



高保磁力を与える界面構造の探索



物質科学シミュレーションのポータルサイト"MateriApps"



Spin configuration during magnetization reversal (left: red up spin, blue down spin), and the demagnetizing field (right)

解析評価グループ

Structural and Property Characterization Group

解析評価グループは、既存の磁石材料および材料創製グループが創出する種々の材料の組織および磁性を最先端の解析技術を駆使して、多面的マルチスケール解析で徹底的に解明し、理論との対比、材料創製グループへの提言を行います。電子顕微鏡およびアトムプローブを駆使した解析に加えて、SPring-8 や J-PARC などの先端大型研究施設での構造解析及び磁気分光とイメージング、熱力学および速度論的側面からの磁石材料の基盤研究、単一粒子の磁化反転挙動解析、マイクロマグネティックシミュレーションによる複雑構造を持つ磁石の磁化回転挙動の解析などの研究を行うことにより、保磁力と微細構造の因果関係を解明し、高保磁力磁石開発の指針を示します。

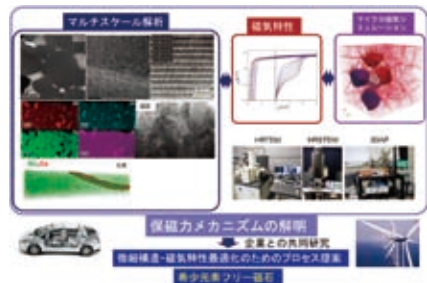
参画機関：物質・材料研究機構、東北大学、高エネルギー加速器研究機構、高輝度光科学研究センター、名古屋工業大学



グループリーダー
ESICMM主任研究者
宝野 和博
物質・材料研究機構

マルチスケール組織・界面構造解析

収束イオンビーム走査電子顕微鏡(FIB/SEM)、収差補正電子顕微鏡および3次元アトムプローブを用いて、ミクロ～ナノ～原子レベルのマルチスケールでの磁石材料の精緻な微細構造解析を行い、永久磁石の微細構造と保磁力の関係の本質的な理解に迫ります。また、有限要素マイクロマグネティックシミュレーションによる複雑構造を持つ磁石の磁化回転挙動の解析を通じて、現実的な磁石の微細構造が保磁力に及ぼす影響を理解します。この知見を基に、希少元素を用いずに高い保磁力、エネルギー積をもつ永久磁石材料を開発のために指導原理の確立を目的としています。当初は、実用化の急がれるDyフリーNd-Fe-B系磁石の微細構造と保磁力の因果関係の解明に注力し、微細構造の最適化による高保磁力化に取り組み、現在はSm-Fe-N、Nd-Fe-N系化合物の永久磁石化にも取り組んでいます。



ESICMM主任研究者
小野 寛太
高エネルギー加速器研究機構

中性子・X線in-situ解析

永久磁石の高保磁力化のためには、保磁力機構の解明が不可欠です。さらに、材料創製プロセスの最適化も重要な課題です。これらの目的を達成するため、J-PARC/MLFでの中性子実験およびKEK Photon Factoryでの放射光実験を行っています。中性子・放射光実験により、磁石材料の構造(磁気構造、微細構造)が明らかになり、保磁力機構の解明や新磁石の実現に役立つと考えています。また、高温化や高压下でのその場解析実験により、材料創製プロセスで何が起きているか明らかになり、高性能磁石の開発に役立つ基礎的な知見が得られます。



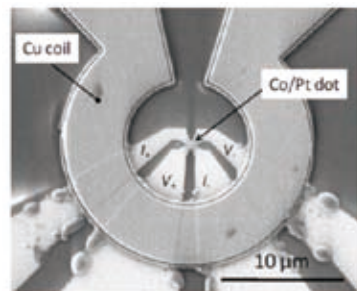
KEK-PFおよびJ-PARC外観



ESICMM主任研究者
岡本 聡
東北大学

ナノ粒子磁化反転挙動解明

永久磁石の磁化反転機構の解明ならびに高保磁力化の指針を得ることを目的とし、モデル試料として薄膜および微細加工を施した試料を用いて準静的ならびに動的な磁化反転挙動の解析を進めています。具体的には反転核生成における反転核生成磁場の決定要因、臨界核サイズ、反転核生成時間などを研究します。一方、磁壁ピンニングにおいてはピンニング磁場の決定要因、ピンニングにおけるエネルギー障壁の分布などに関する情報を得るための解析手法を整備し、かつ実験手法の開発を行い、NdFeB磁石薄膜に対して適用を進めています。また理論グループならびに構造解析グループとの連携を積極的に進め、物理的背景の解明や微細組織との相間について明らかにします。



異常Hall効果を用いた超高感度ナノ磁性粒子計測のための素子



ESICMM主任研究者
中村 哲也
高輝度光科学研究センター

放射光ナノビーム解析

大型放射光施設SPring-8では、希少元素問題を解決する高性能磁石の創製に向け、X線ビーム径を100ナノメートルに絞ったナノビームによる磁気解析を行います。永久磁石材料の保磁力性能を向上させるためには、磁石組織のなかでミクロンオーダーの磁石結晶粒とその間を埋める粒界物質の磁気分布が特に重要となります。SPring-8ではこの磁気分布をナノビーム磁気計測によって高空間分解能で可視化し、保磁力機構の解明を進めるとともに、保磁力を増大する粒界物質の磁性と相形成過程を解析し、高性能永久磁石の製造プロセスについて提案することを目指しています。



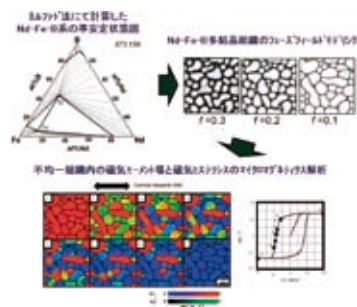
SPring-8外観



ESICMM主任研究者
小山 敏幸
名古屋工業大学

材料組織制御プロセス技術構築のための材料科学的基盤の創製 ー Nd-Fe-B磁石の組織形成・特性発現に対する計算工学的解析 ー

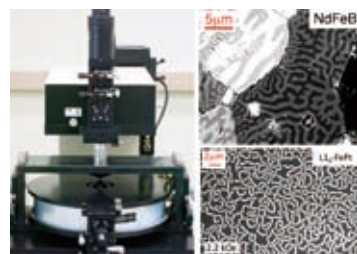
Nd-Fe-B系を中心とした磁性材料の平衡状態図と熱力学的データ集積を通じて、構成相の安定性(準安定状態の解析も含む)とプロセス設計の基礎データの整備を進めています。また上記の平衡状態図と熱力学的データを活用し、フェーズフィールド法にて、磁性材料の不均一内部組織形成の計算を行うとともに、計算から得られる種々の組織形態情報を境界条件としたマイクロマグネティクス解析を通じて、不均一組織形態と磁気特性の関連性を明確化し、磁気特性最適化を実現する組織・プロセス条件を明らかにします。



ESICMM主任研究者
三谷 誠司
物質・材料研究機構

粒界磁化挙動評価

NdFeB系永久磁石の保磁力メカニズムの理解や、新規磁石材料の開発には、粒界における逆磁区生成や磁壁のピン止めといった粒界磁化挙動を定量性に解明することが不可欠です。本研究では、NdFeBをはじめとする磁石材料の粒界およびその近傍における局所磁化過程を磁気光学カー効果、磁気共鳴、および異常ホール効果によって明らかにします。試料にはバルクから切り出した微小薄片や、構造を単純化したモデル系(薄膜)を用います。ナノ構造解析によって得られたバルク磁石材料の粒界構造を部分的に再現した微細加工試料や、より構造を簡素化した磁性細線などについても研究を行います。



磁区観察装置と高磁気異方性材料の磁区模様

材料創製グループ

Materials Synthesis and Processing Group

材料創製グループは、既存磁石材料の高性能化と新規磁石材料の創製のため、バルク材料における組織最適化プロセス、薄膜プロセス、ナノ・メゾ粒子によるビルドアッププロセスなど、種々の手法による材料開発を行うとともに、電子論および解析評価グループとの連携により、理論と解析に基づく材料設計指針の確立を目指します。

参画機関：東北大学、物質・材料研究機構、京都大学



グループリーダー
ESICMM主任研究者
杉本 諭
東北大学



ESICMM主任研究者
大久保 忠勝
物質・材料研究機構

材料作製プロセス条件適正化のための組織形成原理の解明

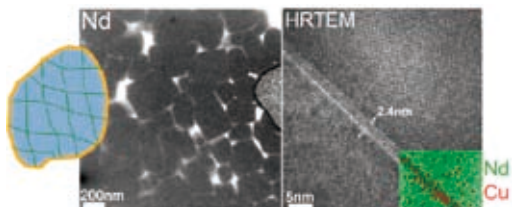
現在の永久磁石材料の高性能化を目指し、各種作製法を駆使して作製した遷移金属系ならびにナノコンポジット系試料、省DyのNd-Fe-B系磁石やSm-Fe-N系磁石、などから選抜した試料について、組織と磁気特性の関係を調べます。また、現有最強磁石であるNd-Fe-B系磁石のさらなる高保磁力化のため、計算科学と熱力学的解析から、液相となって重要な役割を担うNd-rich相について、組成、酸素含有量、固液平衡などと保磁力の関係を調査します。これらの結果から、永久磁石材料の高性能化に向けた作製プロセスの適正化を図ります。

希土類バルク磁石材料創製

希少資源に依らず高性能を発現できる次世代永久磁石材料の創製を目指し、電子論に基づく磁石理論と磁石組織と特性に関する研究に基づいて、HDDR法、液体急冷法等で得られる微結晶組織を有する磁粉を基材とし、保磁力向上に効果的な粒界改質法、添加元素および異方化、バルク化に向けたプロセス条件等の検討を行い、鉄系軽希土類化合物を用いたバルク磁石試料を創製する技術を構築し、磁石材料のナノ組織およびその生成機構に関する研究に供する試料を創製します。



材料作製プロセス条件適正化のための組織形成原理の解明



ESICMM主任研究者
高梨 弘毅
東北大学



ESICMM主任研究者
高橋 有紀子
物質・材料研究機構

遷移金属基磁石材料創製

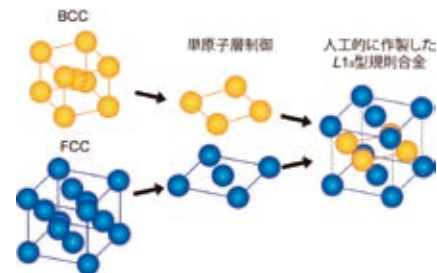
Fe、Co、Ni等の3d遷移金属をベースとした規則合金を作製し、希土類金属や貴金属等の希少元素を用いない高性能磁石材料としての可能性を探究します。そのために、原子配列を制御する薄膜作製技術を用いて、L10型、L11型、Bh型、B81型、D022型など、さまざまな規則合金の薄膜を人工的に作製し、飽和磁化や磁気異方性などの基本的磁気特性を明らかにします。また、規則合金のナノ構造体を作製して保磁力とナノ構造との関係を明らかにするとともに、巨大ひずみ加工によるバルク形態試料の作製にも取り組みます。放射光を用いた構造・磁性の高精度評価と第一原理計算による最適物質設計による支援のもとで、新磁石創製のための基礎研究を推進します。

希土類磁石材料創製(薄膜)

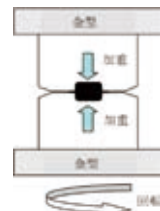
私たちは次世代の高性能磁石の実現に向けて、組織・構造・組成を制御した薄膜を作製し、その組織と特性の相関を調べることにより高特性実現のための材料科学的指針を示すことを目的に研究を行っています。これまでに、非磁性スペーサをはさんだナノコンポジット磁石薄膜において保磁力が維持されるメカニズムを薄膜モデル実験と計算を併用することにより解明しました。この知見をもとに、ナノコンポジット磁石で得られる最大エネルギー積の改善について検討を進めています。このように、作製した薄膜を、解析グループと協力して磁気的および微細組織・構造的な解析を行うことにより特性の発現メカニズムを明らかにしていきます。そこで得られた知見を薄膜作製プロセスにフィードバックすることにより高性能な薄膜磁石を作製し、高特性焼結磁石実現のための指針を明らかにします。さらに、理論グループで提案される新規磁石についても積極的に創生していきます。

磁性ナノ・メゾ粒子合成

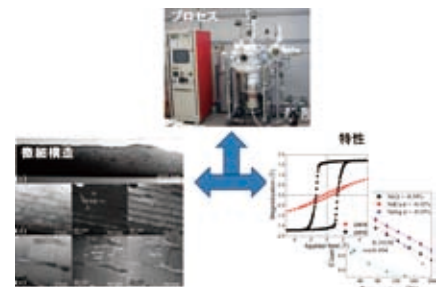
高磁気異方性を有する軽希土類系メゾサイズ結晶粒子、および、高磁化遷移金属系ナノサイズ結晶粒子の液相合成プロセスを確立するとともに、両者のナノコンポジット化により、高い最大エネルギー積を有する異方性ナノコンポジット磁石を創製します。具体的には、高保磁力ナノ粒子として粒径50-100nmのSmFe合金をベースとする異方性ナノ粒子、高磁化ナノ粒子として粒径10nm程度のFeCo合金ナノ粒子を液相合成します。異方性ナノコンポジット磁石創製のため、高保磁力SmFe合金ナノ粒子は磁化容易軸が整列しやすい立方体あるいは六角柱形状とし、窒化あるいは炭化によるキュリー温度・磁気異方性の向上を図ります。



単原子積層制御によって人工的に規則合金を作製する概念図



巨大ひずみ加工によって人工的に規則合金を作製する概念図



薄膜磁石のプロセス・特性・微細構造の相関を明らかにすることにより、特性発現メカニズムを解明し、高特性磁石実現につながる指針を示す。



ナノ複合粒子とそれらの自己組織化複合磁性材料のイメージ図