

## マイクロ磁気シミュレーションによるナノ結晶磁性材料での磁歪分布およびエネルギー損失機構の解明

塚原宙<sup>1,2</sup>, 鈴木清策<sup>3</sup>, 小野寛太<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>大阪大学大学院工学研究科, <sup>2</sup>高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所, <sup>3</sup>モナッシュ大学

### Distribution of magnetostriction and energy loss mechanism in nanocrystalline soft magnetic materials elucidated by micromagnetic simulations

Hiroshi TSUKAHARA<sup>1,2</sup>, Kiyonori SUZUKI<sup>3</sup>, Kanta ONO<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Osaka University, <sup>2</sup>Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization, <sup>3</sup>Department of Materials Science and Engineering, Monash University

#### Abstract

ナノ結晶軟磁性材料は高い飽和磁化と電気抵抗を兼ね備えた優れた磁性材料である。渦電流によるエネルギー損失も抑制され高いエネルギー効率を実現するが、異常渦損と呼ばれるエネルギー損失が残ることが知られていた。本研究では磁化による材料歪みである磁歪に注目しそのエネルギー損失機構を明らかにした。マイクロ磁気シミュレーションを用いて材料内部の磁歪を計算すると磁壁移動による材料歪みの変化がエネルギー散逸を発生しエネルギー効率を減少させることが示された。

#### 1. はじめに

持続可能社会にはカーボンニュートラルの実現が不可欠である。電気自動車などの輸送部門におけるエネルギー効率はモーターが支配すると言って過言ではない。モーターでは電流のつくる磁場が軟磁性材料を磁化することで大きな磁場を発生し回転力に変えている。磁化の際にはエネルギー損失が発生し、この損失の抑制がモーターのエネルギー効率向上に不可欠でありその発生機構について研究が行われてきた [1]。

軟磁性材料におけるエネルギー損失は大きくヒステリシス損、渦電流損および過剰損に分けられる。ヒステリシス損は保磁力により発生する損失で外部磁場の周波数によらず一定である。渦電流損はジュール熱による損失である [2,3]。磁場が時間変化すると誘導起電力により磁性体内部に電流が発生し、電気抵抗によりジュール熱としてエネルギーが散逸する。そのため渦電流損は外部磁場の周波数により増加し高周波領域ではヒステリシス損より大きくなる。ナノ結晶軟磁性材料は低い保磁力と高い電気抵抗を持つためヒステリシス損および渦電流損を抑えることが可能な優れた軟磁性材料である [4-7]。しかし高周波領域では残りのエネルギー損失である過剰損が大きくなり、その発生機構の解明が重要な課題となっていた。

過剰損の周波数依存性は異常渦損と呼ばれるエネルギー損失と同じであることが実験で示されている [8]。軟磁性材料内部で磁壁が移動すると局所的に大きな渦電流が発生する。この磁壁移動による渦電流は磁壁の数に依存する異常渦損を発生する。しかしナノ結晶軟磁性材料では高

い電気抵抗のために電流が抑制されるため大きな過剰損を説明できない。この奇妙なエネルギー損失は磁歪の大きさと相関をもつことが実験により示されていたが、発生機構は明らかにされてこなかった [9,10]。

本稿ではマイクロ磁気シミュレーションを用いて磁歪とエネルギー損失との関係を紹介していく。磁歪は磁化により発生する材料歪みである。しかしナノ結晶軟磁性材料では結晶粒毎に結晶軸方向が異なり歪みは複雑に変化する。そのためナノ結晶磁性体の磁歪を取り込んだマイクロ磁気シミュレーションはこれまで実現できていなかった。我々は多結晶軟磁性材料における磁歪の計算方法を定式化して磁化運動のシミュレーションを可能にし、磁気エネルギーが散逸する機構を明らかにした [11]。

#### 2. シミュレーション手法

磁化運動への磁歪の影響をシミュレーションするにはナノ結晶軟磁性材料における歪みを正確に計算する必要がある。歪み  $\xi_{ij}$  は以下のように2つの成分に分解できる。

$$\xi_{ij} = \bar{\varepsilon}_{ij} + \eta_{ij} \quad (1)$$

ここに  $\bar{\varepsilon}_{ij}$  は場所によらない一様な歪みで  $\eta_{ij}$  は空間で変化する非一様な歪みである。一様な歪みをエネルギー安定条件から計算すると

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \bar{s}_{ijkl} (\bar{\sigma}_{kl}^m - \bar{\sigma}_{kl}^{\text{het}}) \quad (2)$$

となる。ここに  $\bar{s}_{ijkl}$  は平均の弾性コンプライアンス定数で

あり、 $\bar{\sigma}_{kl}^m$ および $\bar{\sigma}_{kl}^{\text{het}}$ は stress free strain および非一様な歪みからの平均の応力である。Stress free strain  $e_{ij}$  は

$$e_{ij} = \begin{cases} \frac{3}{2}\lambda_{100}(m_i^2 - \frac{1}{3}) & (i = j) \\ \frac{3}{2}\lambda_{111}m_i m_j & (i \neq j) \end{cases} \quad (3)$$

と定義される。ここに  $m_i$  は磁化方向の単位ベクトルであり、 $\lambda_{100}$  および  $\lambda_{111}$  は磁歪定数である。非一様な歪みは変位  $u_i$  を用いて

$$\eta_{ij} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \quad (4)$$

と表される。変位は運動方程式

$$\rho \frac{d^2 u_i}{dt^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} [\sigma_{ij}^{\text{hom}} + \sigma_{ij}^{\text{het}} - \sigma_{ij}^m] - \zeta \frac{du_i}{dt} \quad (5)$$

により求められる。ここに  $\sigma_{ij}^{\text{hom}}$ 、 $\sigma_{ij}^{\text{het}}$  および  $\sigma_{ij}^m$  はそれぞれ一様な歪み、非一様な歪みおよび stress free strain からの応力である。式 (2) および (4) から歪み  $\zeta_{ij}$  が求まり磁歪による有効磁場

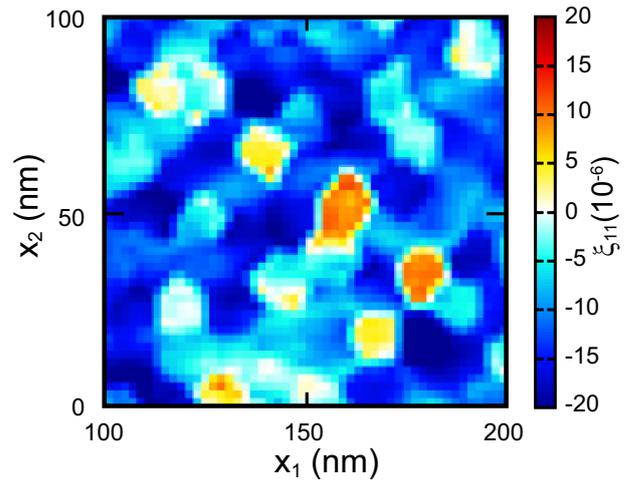
$$H_1^{\text{ms}} = \frac{3}{\mu_0 M_s} \lambda_{100} (c_{11} - c_{12}) (\xi_{11} - e_{11}) m_1 + \frac{6}{\mu_0 M_s} \lambda_{111} c_{44} [(c_{12} - e_{12}) m_2 + (\xi_{31} - e_{31}) m_3] \quad (6)$$

が計算できる。ここに有効磁場は  $x_1$  方向の成分であり  $M_s$  は飽和磁化であり  $\mu_0$  は真空の誘磁率で  $c_{11}$  と  $c_{22}$  および  $c_{44}$  は弾性定数である。この有効磁場を使用して磁化運動を Landau–Lifshitz–Gilbert 方程式

$$\frac{dm_i}{dt} = -\gamma \epsilon_{ijk} m_j H_k^{\text{eff}} + \alpha \epsilon_{ijk} m_j \frac{dm_k}{dt} \quad (7)$$

によりシミュレーションした。ここに  $\gamma$  は磁気回転比、 $\epsilon_{ijk}$  は Levi-Civita 記号、 $\alpha$  は Gilbert damping 定数であり  $H_k^{\text{eff}}$  は全有効磁場である。本稿では有効磁場は交換相互作用、磁気双極子相互作用および磁歪による寄与で構成した。

シミュレーションモデルの大きさは  $2048 \times 2048 \times 2 \text{ nm}^3$  であり、平均粒径  $12.7 \text{ nm}$  を持つ  $32,947$  個のナノ結晶粒により構成した。粒径は Gaussian 分布により標準偏差  $0.92 \text{ nm}$  で変化する。結晶粒を構成する物質は Fe を想定した。ただし磁歪による磁化運動への影響を明らかにするため結晶磁気異方性を無視し磁歪定数を変化してシミュレーションを実行した。他の物質パラメータは飽和磁化  $\mu_0 M_s = 2.15 \text{ T}$ 、交換スティフネス定数  $A = 25 \text{ pJ/m}$ 、弾性定数  $c_{11} = 2.41 \times 10^{11} \text{ N/m}^2$ 、 $c_{12} = 1.46 \times 10^{11} \text{ N/m}^2$ 、 $c_{44} = 1.12 \times 10^{11} \text{ N/m}^2$  とした。変位の運動方程式では質量密度  $\rho$  および  $\zeta$  をそれぞれ  $7.87 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$  および  $1.5 \times 10^{12} \text{ kg/m}^3 \text{ s}$  とした。これらのパラメータを用いて磁化運動を有限差分法によりシミュレーションした。計算セルの大きさは  $2 \times 2 \times 2 \text{ nm}^3$  を用いた。



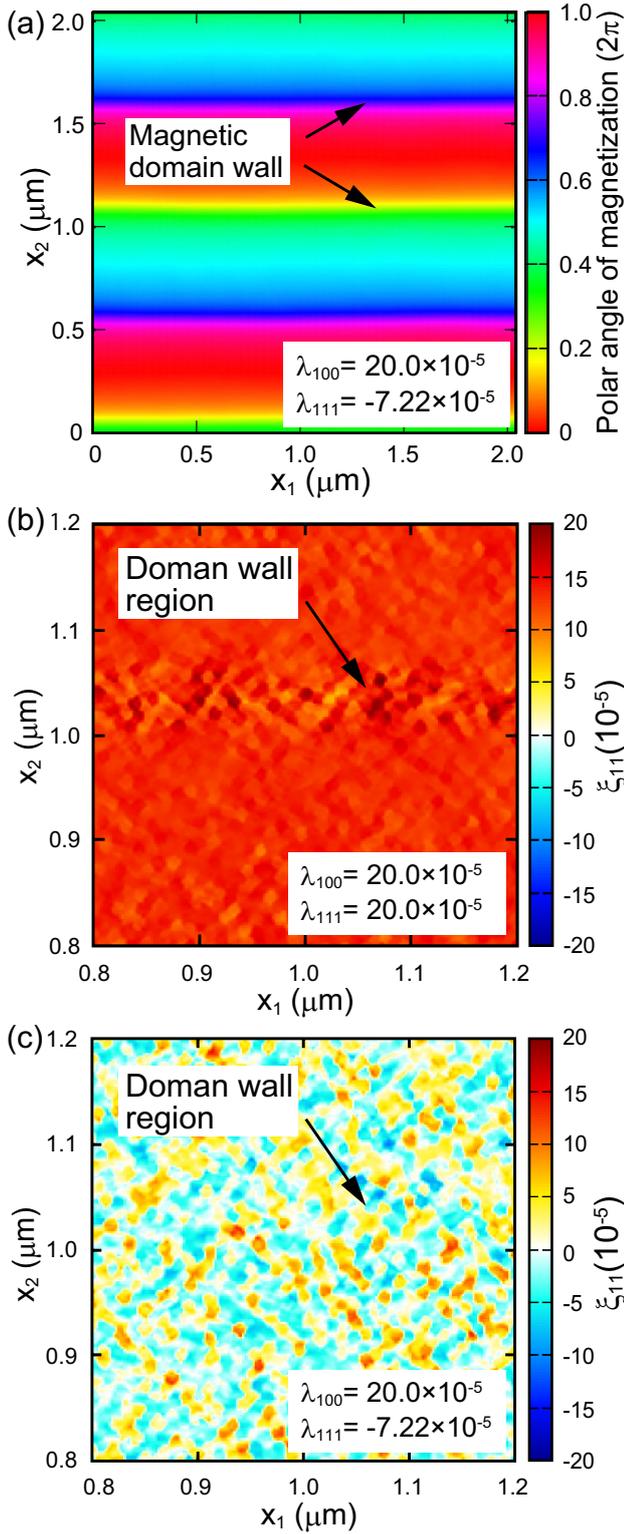
**Figure 1** Distribution of magnetostriction in nanocrystalline soft magnetic materials. Color shows strain  $\zeta_{11}$  when the magnetization is saturated in  $x_1$  direction. Originally published in NPG Asia Materials **14**, 44 © The Author(s) 2022. [11] Published by Springer Nature. Licensed under CC BY 4.0. Modified from original.

### 3. 結果と考察

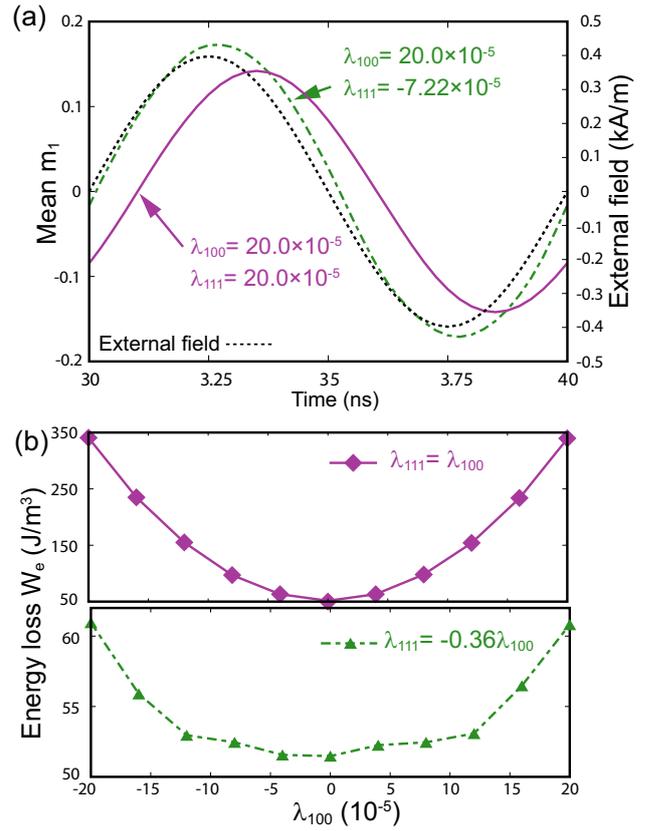
ナノ結晶磁性材料における磁歪分布を明らかにするため同じ方向に磁化した飽和状態における磁歪をシミュレーションした。Fig. 1 に得られた歪み  $\zeta_{ij}$  の分布を示す。磁歪定数は  $\lambda_{100} = 20.7 \times 10^{-6}$  および  $\lambda_{111} = -21.2 \times 10^{-6}$  であり全て  $x_1$  方向に磁化している。歪みはナノ結晶粒内部でも一様ではなく大きさが変化していることが分かる。また  $\lambda_{111}$  が負であるために多くの結晶粒において負の歪みが発生している。3次元のモデルを使用した平均歪みは  $-8.86 \times 10^{-6}$  と負の値を持つ [11]。同じ条件下において実験で観測された磁性材料全体の歪みは  $-8.9 \times 10^{-6}$  であるのでシミュレーション結果は良い一致を示している。

次に磁壁が存在したときの磁歪分布をシミュレーションした。Fig. 2(a) にシミュレーションで使用した磁区構造を示す。磁区構造は  $x_2$  方向に周期的に並ぶ4個のストライプ磁区を使用し、外部磁場を印加せず安定歪みを求めた。Fig. 2(b) に磁歪定数が  $\lambda_{100} = 20.0 \times 10^{-5}$  および  $\lambda_{111} = 20.0 \times 10^{-5}$  での磁歪分布を示す。この場合正の平均歪みが存在するため全体としてナノ結晶軟磁性体は  $x_1$  方向に伸びる。また磁壁内部では磁化の方向が変化するため磁壁が存在する領域では歪みが増加する。磁壁による歪みの変化は平均磁歪により制御が可能である。Fig. 2(c) に平均磁歪が消失した場合での磁歪分布を示す。この場合の磁歪定数は  $\lambda_{100} = 20.0 \times 10^{-5}$  および  $\lambda_{111} = -7.22 \times 10^{-5}$  であった。磁歪分布は磁壁が存在する場所でも変化せず局所的な歪みが点在する。

エネルギー損失に対する磁歪の影響を調べるためにストライプ磁区に交流外部磁場を印加して磁壁運動をシミュレーションした。Fig. 3(a) に  $x_1$  方向における平均磁化の時間変化を示す。平均歪みが存在する場合、すなわち磁歪定数が  $\lambda_{100} = 20.0 \times 10^{-5}$  および  $\lambda_{111} = 20.0 \times 10^{-5}$  では、外部磁場



**Figure 2** (a) Color map of stripe domain structure in nanocrystalline soft magnetic material. Color shows polar angle of the magnetization. (b), (c) Distribution of the magnetostriction  $\xi_{11}$  when the mean magnetostriction exists ( $\lambda_{100}=20.0\times 10^{-5}$ ,  $\lambda_{111}=20.0\times 10^{-5}$ ) and when the mean magnetostriction vanishes ( $\lambda_{100}=20.0\times 10^{-5}$ ,  $\lambda_{111}=-7.22\times 10^{-5}$ ), respectively. Originally published in NPG Asia Materials **14**, 44 © The Author(s) 2022. [11] Published by Springer Nature. Licensed under CC BY 4.0. Modified from original.



**Figure 3** (a) Oscillation of the mean magnetization in  $x_1$  direction. Solid and dot-dashed lines represent the mean magnetization when mean magnetostriction vanishes and exists, respectively. (b) Energy losses as a function of the magnetostriction constant. Solid and dot-dashed lines represent the energy losses when mean magnetostriction exists ( $\lambda_{111}=\lambda_{100}$ ) and vanishes ( $\lambda_{111}=-0.36\lambda_{100}$ ), respectively. Originally published in NPG Asia Materials **14**, 44 © The Author(s) 2022. [11] Published by Springer Nature. Licensed under CC BY 4.0. Modified from original.

に対する平均磁化の応答が顕著に遅れる。これに対して平均歪がない場合、すなわち磁歪定数が  $\lambda_{100}=20.0\times 10^{-5}$  および  $\lambda_{111}=-7.22\times 10^{-5}$  では、平均磁化の遅延は減少する。これは平均磁歪により磁壁運動が遅延する事を意味している。Fig. 3(b) に平均磁化の振動から計算されたエネルギー損失を示す。エネルギー損失  $W_e$  は

$$W_e = \int_0^T \mathbf{H}_{\text{ext}} \cdot \frac{d\mathbf{B}}{dt} dt \quad (8)$$

で求められる。ここに  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  は外部磁場であり  $\mathbf{B}=\mu_0(\mathbf{H}_{\text{ext}}+\mathbf{M}_s\mathbf{m})$  は磁束密度である。エネルギー損失は平均歪みがある場合磁歪定数と共に増加する。磁歪によるエネルギー損失機構は以下である。外部磁場が印加されると磁壁の位置が変化する。磁壁が移動した先で歪みが誘起され磁気エネルギーが弾性エネルギーに変化し、元の位置の歪みは緩和するため弾性エネルギーが熱に変換する。結果磁気エネルギーは散逸しエネルギー損失が発生する。平均磁歪が存在しない場合磁壁による歪みの変化が起こらないためエ

エネルギー損失は非常に低く抑えられる。しかし Fig. 2(c) に示されるように局所的に大きな歪みが存在するため、磁壁のピン止め効果により磁化過程の不可逆性が増し、エネルギー損失を増加させる。

#### 4. まとめ

ナノ結晶軟磁性体における磁歪の有効磁場を定式化しマイクロ磁気シミュレーションを実行した。飽和状態における平均磁歪は実験で観測された値と良く一致した。磁歪による歪みは磁壁により変化する。平均磁歪が存在する場合磁壁の領域で歪みが増加する。この歪みは磁気エネルギーにより誘起され、磁壁移動に伴い緩和する。そのため磁歪によりエネルギー損失が発生する。これに対し平均歪みが消失する場合にはエネルギー損失は低く抑えられるが、ナノ結晶軟磁性材料では局所的に強い歪みが発生するため磁歪によりエネルギー損失は僅かに上昇する。この磁歪によるエネルギー損失機構の発見は軟磁性材料のさらなる高エネルギー効率化に大きく寄与する。

#### 謝辞

本稿で紹介した成果は、今村裕志博士、三俣千春博士との共同研究によるものである。本研究はトヨタ自動車株式会社からの支援を受けて行われた。本研究は部分的に JST-Mirai Program, Grant Number JPMJMI21G2 の支援を受けて行われており、マイクロ磁気シミュレーションは東北大学金属材料研究所のスーパーコンピュータ MASAMUNE-IMR を用いて実行された。

#### 引用文献

- [1] J. M. Silveyra, E. Ferrara, D. L. Huber, and T. C. Monson, *Science* **362**, 418 (2018).
- [2] G. Bertotti, *J. Appl. Phys.* **57**, 2110 (1985).
- [3] G. Bertotti, *IEEE Trans. Magn.* **24**, 621 (1988).
- [4] Y. Yoshizawa, S. Oguma, and K. Yamauchi, *J. Appl. Phys.* **64**, 6044 (1988).
- [5] K. Suzuki, N. Kataoka, A. Inoue, A. Makino, and T. Matsumoto, *Trans. JIM* **31**, 743 (1990).
- [6] K. Suzuki, A. Makino, A. Inoue, and T. Matsumoto, *J. Appl. Phys.* **70**, 6232 (1991).
- [7] G. Herzer, *Acta Mater.* **61**, 718 (2013).
- [8] S. Flohrer, R. Schäfer, J. McCord, S. Roth, L. Schultz, and G. Herzer, *Acta Mater.* **54**, 3253 (2006).
- [9] K. Suzuki, A. Makino, A. Inoue, and T. Matsumoto, *J. Appl. Phys.* **74**, 3316 (1993).
- [10] R. Parsons, B. Zang, K. Onodera, H. Kishimoto, T. Shoji, A. Kato, and K. Suzuki, *J. Magn. Magn. Mater.* **476**, 142 (2019).
- [11] H. Tsukahara, H. Imamura, C. Mitsumata, K. Suzuki, and K. Ono, *NPG Asia Mater.* **14**, 44 (2022).

(原稿受付日：2023年3月2日)

#### 著者紹介

塚原宙 Hiroshi TSUKAHARA



大阪大学大学院工学研究科 特別研究員  
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1  
e-mail: tsukahara@ap.eng.osaka-u.ac.jp  
略歴：2022年大阪大学大学院工学研究科 特別研究員 博士(理学)。

最近の研究：マイクロ磁気シミュレーションを使用した磁性材料研究。

鈴木清策 Kiyonori SUZUKI



モナッシュ大学 教授  
Clayton, VIC 3800, Australia  
e-mail: kiyonori.suzuki@monash.edu  
略歴：2012年モナッシュ大学 教授。  
PhD。

最近の研究：ナノ結晶軟磁性材料の高Bs化と低磁歪化。

小野寛太 Kanta ONO



大阪大学大学院工学研究科 教授  
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1  
e-mail: ono@ap.eng.osaka-u.ac.jp  
略歴：2021年大阪大学大学院工学研究科 教授 博士(理学)。

最近の研究：量子ビーム計測およびマテリアルインフォマティクスを使用した材料研究。