

論文審査の結果の要旨

氏名 見澤 英樹

本論文は7章からなる。第1章はイントロダクションであり、Nd-Fe-B 焼結磁石における保磁力向上を目指した過去の取り組みを紹介するとともに、保持力に関係する結晶場パラメータや結晶磁気異方性などの基本的事項について解説している。また $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の表面に面心立方構造を持つ Nd 酸化物が接触した時に保磁力が向上するという実験報告を紹介し、保磁力向上のメカニズムを第一原理的な評価により解明するという目的が述べられている。第2章は本研究で用いた密度汎関数法や Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式などの計算手法の説明である。第3章ではバルクの $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 及び Nd が面心立方構造を持つ Nd 酸化物に対して、安定な原子配置を第一原理計算で求めている。保磁力向上に寄与すると見られる Nd 酸化物の組成比が実験的に確立していないことを踏まえ、Nd 酸化物に関してはいくつかの酸素濃度に対する結果を示している。第4章では、第3章で求めた構造を持つ Nd 酸化物を $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶の(001)表面に接触させた条件下で構造の最適化を行い、界面における酸素原子の準安定位置を求めている。第5章では、この界面で安定な原子配列における電荷分布を第一原理計算で求め、その電荷分布を用いて結晶場パラメータを計算した。同様の計算を $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ と真空との界面に対しても行い、真空との界面で負となっていた磁気異方性が、酸化物との界面では界面酸素原子の影響で正となることを示している。第6章では界面における磁気異方性がバルクと異なる状況を設定し、その状況下で起こる磁気モーメントの反転過程を調べるため、原子レベルでの Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式によるシミュレーションを行っている。その過程から磁化反転の起こる磁場の値を求め、界面における磁気異方性が負から正に変わることによって磁化反転に必要な磁場が40%程度増大することを示している。また現実の状況に近い、界面の磁気異方性が不均一に変化した場合についてもシミュレーションを行い、正の異方性を持つ領域の増大に伴って保持力が増大する様子を確認している。以上の結論を第7章でまとめている。

Nd-Fe-B 焼結磁石における保磁力向上は、電気自動車などへの応用の観点から多くの研究者が力を注いでいる問題である。特に天然存在度の低い重希土類を用いない手法による保磁力向上は、元素戦略の観点からも期待されている。この保磁力向上には結晶界面の影響が大きいことが広く認識されているが、そ

の起源についてはほとんど分かっていない。原子レベルの問題であるため、実験で解決できない問題も多く残されている。論文提出者はこの問題に対する微視的理解を与えるため、第一原理計算を用いた研究を行った。Nd-Fe-B 焼結磁石の界面が磁気異方性に与える影響に関する第一原理計算はこれまでに例がなく、本研究のオリジナリティーが認められる。また $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ と Nd 酸化物との界面における安定構造を計算し、その結果を用いた磁気異方性の評価とスピン反転過程のシミュレーションは、一つの論文として完結した研究になっている。

本論文における計算は $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶の(001)表面に Nd 酸化物が接合した場合に限定されており、計算された保磁力の値が実験値と定量的に一致するわけではない。そのため実験的に観測された保磁力の増大を直接解明したとまでは言えないが、ある条件下で界面形成による磁気異方性の増大とそれに伴う保持力の向上を説明した本論文は、今後この分野の研究に一つの指針を与えるものであり、学位論文としてふさわしい重要な意義を持つと評価できる。

なお本論文の内容は常行真司氏、土浦宏紀氏、合田義弘氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって計算及び考察を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。