

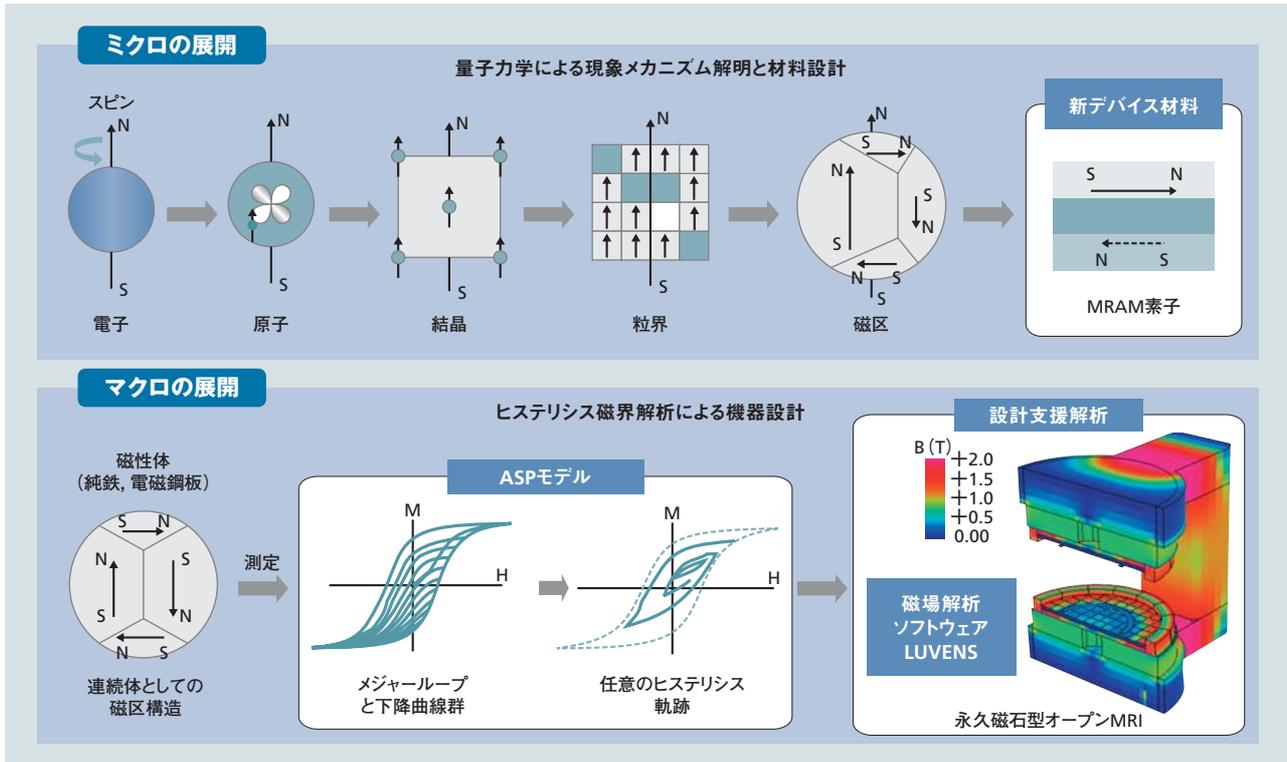
デバイス材料から機器設計までに貢献する 磁性シミュレーション

Simulations of Magnetism from Device Material to Instrument Design

李 燦 Chahn Lee

宮田 健治 Kenji Miyata

濱田 智之 Tomoyuki Hamada



注:略語説明 MRAM (Magnetoresistive Random Access Memory), ASP (Asymmetric Distribution Probability), LUVENS (Large-scale Universal Vector Electromagnetic-field Numerical Simulator), MRI (Magnetic Resonance Imaging)

図1 磁性におけるミクロからマクロの展開

最小の磁性体は電子であり、ある条件を満たすと原子で磁性が現れる。また結晶、粒界などを介して磁区構造が磁性体として出現する。このような現象のメカニズムを量子力学から究明して新たな磁性体材料を設計する。一方、マクロ的にはヒステリシスモデルを構築し、電磁場解析に組み込むことによって機器設計支援シミュレーションを提供する。

磁性体は、ハードディスクドライブ、モータ、MRI (磁気共鳴撮像装置)、リニアモーターレインまで幅広い製品群で使用されている。日立グループでも、磁性体および磁性体を利用した多種の製品を提供している。

どのような磁性体においても磁荷は単極で存在せず、N極とS極とが共存するため、磁性体特有のヒステリシス現象が現れる。日立製作所は、このヒステリシス現象が、電子から原子、結晶、粒界でどのように出現するかメカニズムを、量子力学を用いてミクロスケールの立場から解明するシミュレーション技術を開発し、デバイス材料設計に適用している。

一方、マクロ的には、計算機に適したマクロ的現象論からのアプローチによる高精度で消費メモリが少ないヒステリシスモデルを開発し、このモデルを日立開発の汎用磁場解析ソフトウェア「LUVENS」に組み込み、MRIの解析などに適用し

ている。

磁性にかかわる現象は複雑であり、実際の現象に近づけるためのモデル化の問題など、まだ課題は山積しているが、その解決に向けた研究開発に取り組んでいる。

1. はじめに

古典力学から量子力学への物理的描像と実用的な材料および機器の設計のためのシミュレーションに関しては、本特集の別論文で述べられている。物理には力学に並ぶ大きな領域として、J.C.マクスウェルによって統一表現された雄大な電気・磁気の世界を記述する電磁気学がある。その対象は力学系のように目に見えるボールや天体の星ではなく、電場と磁場であり、目には見えないため、とらえがたい面がある。電場の場合とはちがく、磁場の場合は8個の連立偏微分方程

式であるマクスウェル方程式や磁気ベクトルポテンシャル、ゲージなどが登場し、難しくなる。しかし、電磁気学の主役がほかでもなく電子であることに気づくと、理解しやすくなる。電子は、**図1**のようにスピンを持つために最小の磁石である。電子のスピンの理論は量子力学と特殊相対論の統合により生まれた¹⁾。これは、特殊相対論とマクスウェル方程式が互いに相性がよいことを意味している。実際に、マクスウェル方程式から光が電磁波であることが予言され、特殊相対論では光速が一定が基本原理である。マクスウェル方程式も特殊相対論と統合すると、簡単な一つの式で表現できる。そして、式の対称性から、電荷が+と-の2種類で存在するように、磁石もN極やS極の単極(Monopole)で存在することを期待したくなる。しかし、単極はいまだに発見されていない。N極とS極が共存するしかない磁気の世界では、この共存により、磁気ヒステリシス現象が起こる²⁾。磁気ヒステリシス現象が見つかったのは、約100年前のことである。ヒステリシスとは、ある往復の動作過程において、行きと帰りのルートが異なる現象を指す。磁気に限らず、形状記憶合金や超電導、誘電体など広い分野でヒステリシス現象が起こる。磁気ヒステリシス現象を利用した機器として、磁気カード、磁気テープ、ハードディスクドライブなどがあるが、最も身近なものは永久磁石である。

ここでは、磁気ヒステリシス現象を簡単に説明し、日立製作所が取り組んでいる磁性解析に関してヒステリシスを中心に、電子レベルから始まる量子力学解析、マクロからのアプローチによるヒステリシスモデル解析、またそのモデルを用いた動磁場解析によるMRI(Magnetic Resonance Imaging)機器の設計支援シミュレーションについて述べる。

2. ヒステリシス現象

磁石はN極とS極で構成され、N極とS極からそれぞれ正と負の磁界が発生する。ここで、磁石どうしを近づけると同一の極どうしでは斥力が、異なる極どうしでは引力が生じる。このような力は磁石間だけではなく、鉄などの物質と磁石の間でも起こる。そのような物質を、磁石も含めて磁性体と呼ぶ。磁性体には鉄のような常に磁石の極に関係なく強い引力が働く強磁性体と、銅のように力は弱い斥力が働く反磁性体がある。強磁性体の代表である鉄を例に、ヒステリシス現象²⁾を以下に説明する。

鉄が磁界を感じると、マクロな磁化Mが発生して磁石に変わる。その機構は**図1**に示した磁区の構造変化で説明できる。鉄の内部にはミクロな磁石の集まりである磁区が、磁界を加える前では統計的にランダムに配列されており、マクロ的には磁化M=0である。これを消磁状態と呼ぶ。しかし、磁界H内に入ると磁区内の磁化が磁界の方向にそろい始め、最終的に鉄は磁石になる。このときの磁界Hの増減で磁化Mは、**図2**の

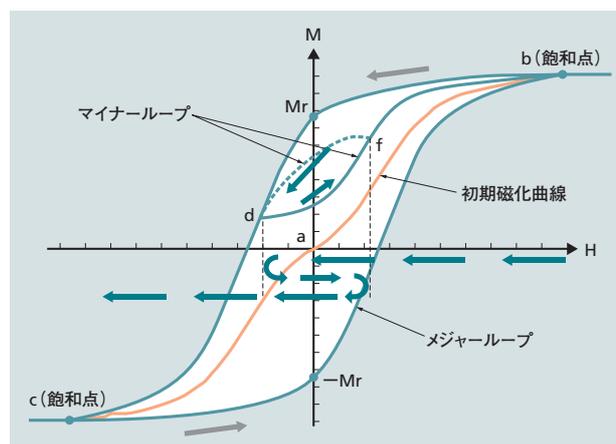


図2 磁界Hに対する磁化Mの関係

磁界を変化させた場合の磁化の強さの変化を示す。

初期磁化曲線上を移動する。ここで消磁状態の点aから磁界の大きさを増加させると、磁化Mが上昇する。ここで、磁化の正負は磁石の向きに対応する。さらに、**図2**の点bや点c以上に磁界を大きくしても磁化は変化しない。これは磁区内の磁化がすべて一方向にそろうためであり、その状態を磁気飽和と呼ぶ。

実際の鉄においては、**図2**の点aの消磁状態から磁界を正の方向に増やすと、橙線をたどって点bに到達する。磁界を減少させると、橙線に沿って戻るのではなく、灰色矢印の軌道に沿ってMr点に達する。このとき、磁界H=0でも磁化は残り、このMrを残留磁化と呼ぶ。飽和点cに到達して正の方向に向かう場合も、-Mr点を通して点bに達する。ここで、b→Mr→c→-Mr→bの最大のループをメジャーループと呼ぶ²⁾。**図2**のH軸下の青緑の矢印に沿うように磁界を増減させると、磁化Mは点bから減少し、点dで増加に転じ、実線をたどって点bに向かう。点fで磁界を減少させると、磁化Mは点線をたどって点dに戻る。このようなd→f→dのループをマイナーループと呼ぶ。点d、fのような磁界の増減により、磁化の軌道が変化する点を分岐点と呼ぶ²⁾。ここで、メジャーループの飽和点b、cも分岐点になる。

ヒステリシスでは、どこをたどったかを記憶する履歴を持つことが特徴である。古典力学や量子力学では、粒子に関する現在のすべての情報がそろうことで未来の予測が可能である。しかし、ヒステリシスのように、過去の情報が与えられないと未来を予測できない運動は、非マルコフ過程と呼ばれ、非平衡統計力学の範疇(ちゅう)に入る。幸い、磁界Hと磁化Mが平行なスカラー型ヒステリシスモデルで未来を予測するためには、過去の軌道ではなく、分岐点の情報のみ記憶すればよいことが知られている。

3. 電子スピンからヒステリシス

磁気ヒステリシス現象の要因である磁性体のスピン構造

(電子のスピン分極状態)において、量子力学に基づいた、(1)磁気モーメントと、(2)ヒステリシス曲線(磁界下でのスピンの熱運動計算)の解析に関して、希土類磁石を例にして以下に述べる。

3.1 磁気モーメントの量子力学計算

磁性体の磁気特性は、前述したように電子のスピンに由来する。電子のスピンは上向き(図1参照)、または下向きの2種類存在する。磁性体のスピン構造は、各原子における上向きの電子密度と下向きの電子密度の差、およびスピンの向きで決まる。物質内の電子密度は、量子論的な電子間相互作用を近似的に取り込んだ計算法で計算できる。この場合、電子のスピンの向きを考慮した計算が必要である。さらには、希土類原子は原子核の電荷が大きく、原子核に近い電子の速度が光速に近い場合、特殊相対性理論の考慮が必須である。このような計算では、通常の計算と比較して計算時間が膨大で、これまで希土類磁石に適用することは困難であった。しかし最近、上記効果を高精度かつ高速に考慮できる擬ポテンシャル法が開発され³⁾、希土類磁石のスピン構造の実用的な解析が可能になりつつある。

日立製作所は、現在、製品への適用が大幅に拡大している希土類永久磁石Nd₂Fe₁₄B(Nd:ネオジウム, Fe:鉄, B:ボロン)を解析対象として、その磁気モーメントを擬ポテンシャル法を用いた計算で求めた³⁾。解析における結晶単位胞は68個の原子を含み(図3参照)、c軸方向に長い正方晶であり、Nd原子とB原子からなる面とFe原子で構成された面がc軸方向に交互に重なった構造である。

結晶内の各Fe原子上の磁気モーメントの計算値を中性子回折実験値と比較して図4に示す。電子スピンと軌道角運動の相互作用(SOI:Spin Orbital Interaction)を取り入れることで、実験値に近い値が得られることが読み取れる。

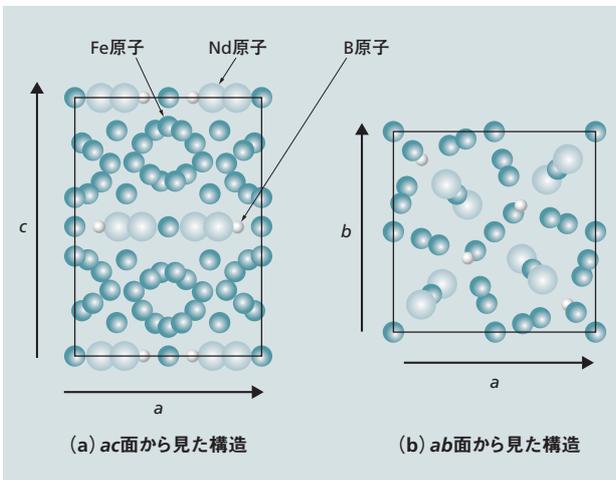
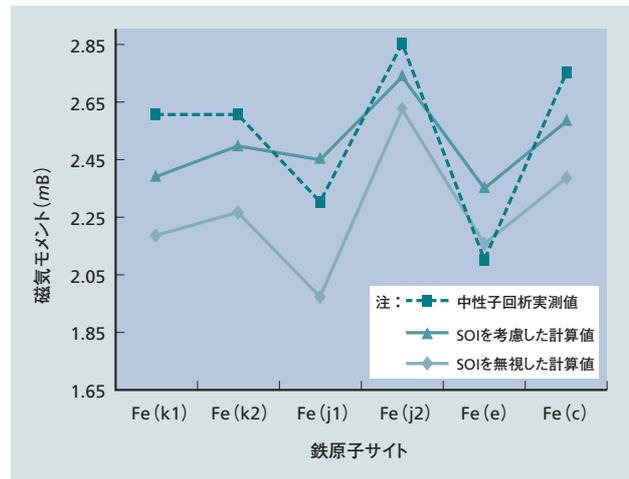


図3 Nd₂Fe₁₄B磁石モデル構造
磁石内の原子配置を示す。



注:略語説明 SOI(Spin Orbital Interaction)

図4 各Feサイトの磁気モーメント

左からFe(k1), Fe(k2), Fe(j1), Fe(j2), Fe(e), Fe(c)サイトの値を示す。

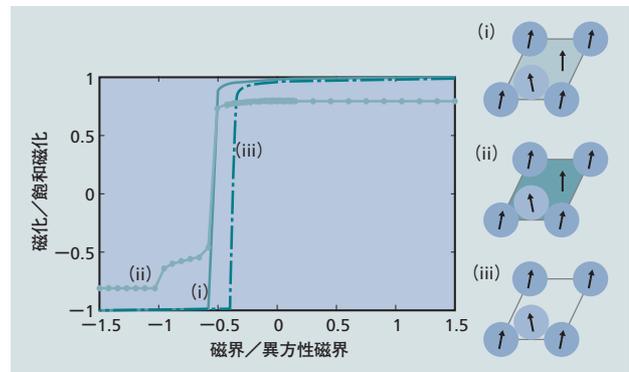


図5 希土類永久磁石Nd₂Fe₁₄Bモデル構造の磁化曲線

LLG(Landau-Lifshitz-Gilbert)法によって計算した例として、(i)粒界がNd₂Fe₁₄B、(ii)粒界がDy₂Fe₁₄B、(iii)粒界が空隙(げき)であることをそれぞれ示す。

3.2 ヒステリシス曲線のLLG計算

磁性体のヒステリシス曲線は、磁性体スピン集団の運動を動力学的に計算するLLG(Landau-Lifshitz-Gilbert)法により計算される⁴⁾。動力学計算では、スピンと磁場との相互作用、スピン間の磁気および交換相互作用、ならびにスピン運動の熱ゆらぎが考慮される。スピン集団においては、各スピンの配向が周囲のスピン配向に依存することに起因して、ヒステリシス性が生じる。外部磁界をかけたときのスピン集団の配向を計算することで、ヒステリシス磁化曲線を得ることができる。

Nd₂Fe₁₄B磁石モデル構造の室温(27℃)におけるヒステリシス磁化曲線をLLG法により計算した例を図5に示す。ヒステリシス曲線は、粒界の磁気異方性に敏感であり、磁気異方性が高いDy₂Fe₁₄Bが粒界にあると曲線の形状が大きく変化することがわかる。

4. マクロなヒステリシスモデルと履歴

4.1 ミクロからマクロのヒステリシス

マクロなヒステリシス現象を扱ううえで、前節のような手法によるマイナーループの計算は、今のところ計算時間の観点か

ら困難である。

マクロなヒステリシス現象を発現する磁性体、例えば電磁鋼板、永久磁石、一般冷間圧延鋼板などでは、微量な添加元素、生産工程などによって磁気特性が変わる。このような添加元素、生産工程の影響を計算に取り入れることはさらに難しい課題である。このため、最小限の測定データによって磁性体のヒステリシスを予測する手法の開発が重要になる。マクロな現象論的立場から開発した手法について以下に述べる。

4.2 ASPモデル

磁性体を用いる製品設計では、[図2](#)のメジャーループのみならずマイナーループが重要である。マイナーループの種類は無数にあるため、実験のみで同定するのは困難であり、シミュレーションによる予測が強く望まれている。このため、ここでは、まずマイナーループに関する簡易ルール²⁾を説明し、続いて、最小限の実験データからマイナーループを高精度に予測可能なASP (Asymmetric Distribution Probability) モデル⁵⁾を紹介する。なお、ここでは磁界Hと磁化Mが平行なスカラ型ヒステリシスモデルに焦点を絞る。

マイナーループの簡易ルールは以下のとおりである。

- (1) マイナーループは磁界増減の転換点である2個の分岐点をつなぐ閉ループとなる。
- (2) ループを離脱する場合、分岐点を通過後、ループの履歴は消える。

メジャーループの上昇および下降曲線関数 $f(H)$ 、 $f(H)$ とそれらを磁界で微分した $P_+(H)$ 、 $P_-(H)$ の結果を[図6](#)に示す。このとき、[図6](#)(a)の飽和点(I)は磁区([図1](#)参照)内のすべての磁化が下向き状態であり、その反対側の飽和点(IV)は磁区内のすべての磁化が上向きの状態なので、 $P_+(H)$ は磁区の磁化が下向きから上向きへ反転する確率分布と解釈できる。これとは逆に $P_-(H)$ は磁区の磁化が上向きから下向きへの確率分布になる。このように解釈すると[図6](#)(a)と(b)の関

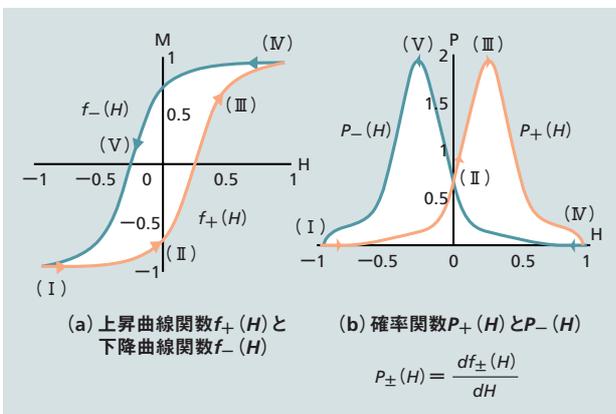


図6 メジャーループと確率分布
確率関数 $P_+(H)$ 、 $P_-(H)$ は、それぞれ上昇下降曲線関数 $f_+(H)$ 、 $f_-(H)$ の微分関数を示す。

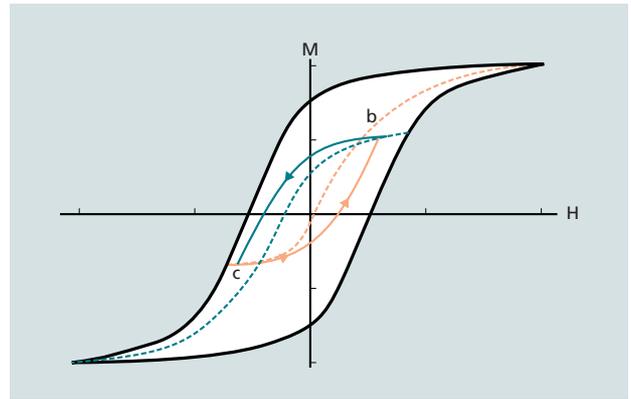


図7 メジャーループからの下降曲線と上昇曲線とマイナーループ
下降曲線と上昇曲線を用いてマイナーループを形成する。

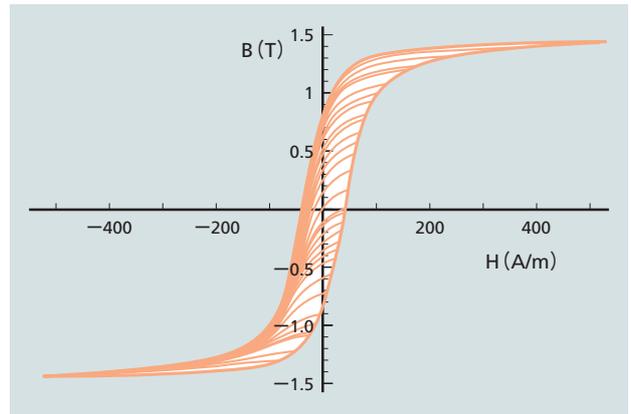


図8 電磁鋼板35A300のメジャーループと下降曲線の測定結果
Epstein測定器によって測定された結果を示す(測定データ提供:新日本製鐵株式会社)。

係が明らかになる。最初、[図6](#)(a)の点(I)で、磁区内の磁化のすべてが下向き状態にあり、磁界Hを増加させると $P_+(H)$ に従い、磁区内の磁化は下向きから上向きに反転し、やがてはすべて上向きになり、[図6](#)(a)の飽和点(IV)に達する。逆に点(IV)から負の方向では $P_-(H)$ を用いることにより[図6](#)(a)の青緑線をたどって下向きの飽和点まで行く。このように磁界が増加する場合は $P_+(H)$ の確率分布を、減少する場合は $P_-(H)$ の確率分布を使い分けることから、このモデルをASPモデルと名付けた⁵⁾。

マイナーループの生成法を[図7](#)を用いて説明する。ASPモデルでマイナーループを予測する場合、メジャーループからの確率 $P_{\pm}(H)$ を用いる代わりに、[図7](#)の点線で示すメジャーループからの下降曲線または上昇曲線における確率 $P_{\pm}(H)$ を用いる。[図7](#)のマイナーループ**b**→**c**→**b**において、点**b**から点**c**への青緑色実線の下降曲線を計算する場合、点**b**を通過するメジャーループからの下降曲線である青緑色点線から $P_-(H)$ を求め、マイナーループの青緑色実線を得る。橙色実線のマイナーループの上昇曲線においても同一の方法で、点**c**を通過するメジャーループからの上昇曲線である[図7](#)の橙色点線から求める⁵⁾。また下降曲線と上昇曲線の間には点対称の関係

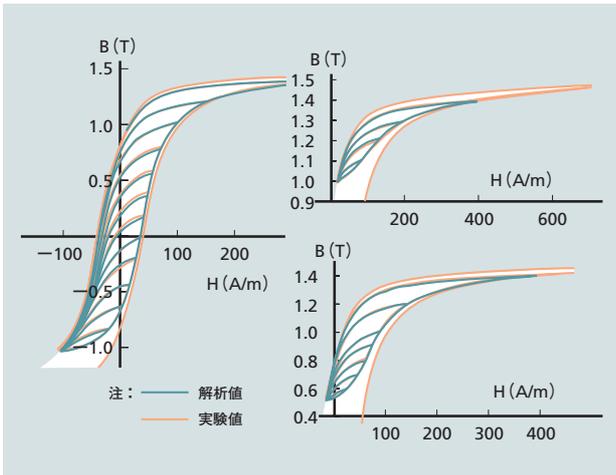


図9 電磁鋼板35A300のマイナーループの測定値と解析値との比較結果

Epstein測定器によるマイナーループの測定結果と解析値の比較を示す(測定データ提供:新日本製鐵株式会社)。

があるため、いずれかを求めればよい。ここで、メジャーープからの下降曲線群は、測定された複数の曲線とその補間によって求める。

電磁鋼板35A300のメジャーープからの下降曲線群を測定した結果を図8に示す。図中Bは磁束密度を表す。この測定結果からメジャーープ内のすべての下降曲線の補間関数を求め、マイナーループを同定した解析結果と実験結果を図9に示す。解析結果と実験結果はよく一致し、従来困難であった多数の非対称マイナーループの高精度予測を実現できた⁵⁾。

5. 医療用MRIにおけるヒステリシス解析

5.1 永久磁石型オープンMRI装置

MRI装置は生体内を撮像できる画像診断装置の一つであり、近年、医療分野に広く普及してきた。MRI装置では生体内の水素原子核が発生する核磁気共鳴信号を測定することにより、生体内の三次元構造を撮像することができる⁶⁾。一般的なMRI装置では、磁石(永久磁石、超電導磁石など)に

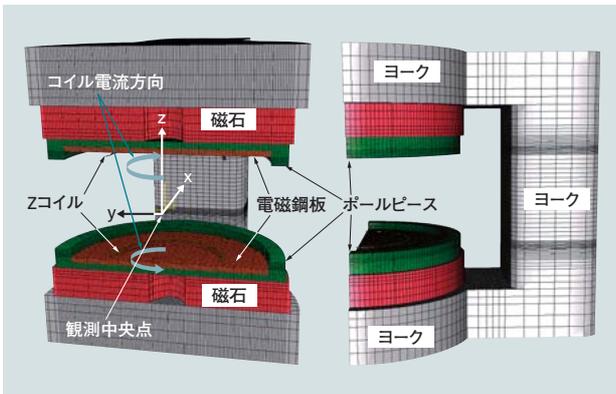


図10 永久磁石型オープンMRIの解析モデル

対称性を考慮した $\frac{1}{2}$ カットモデル(要素数733,788)を示す。

よって発生する一様磁場に、3方向の傾斜磁場コイル(X, Y, Zコイル)によって発生する微弱な傾斜磁場を重畳する。核磁気共鳴信号の周波数は磁場の強度に比例することを利用し、この傾斜磁場により、生体内の任意の場所に特定の核磁気共鳴信号を発生させ、この信号を基にコンピュータで画像を再構成する。このため、磁石が発生する磁場の一様性や変動が、MRIの画質に大きく影響する。

永久磁石型オープンMRI装置の解析モデルを図10に示す。モデルは対称性を考慮した $\frac{1}{2}$ カットモデルである。磁場を集束させるためのポールピース、磁束を導くためのヨークならびに電磁鋼板、磁場勾(こう)配を形成するためのZコイルから構成されており、生体には0.35 T(テスラ)程度の一様磁場が印加される。

傾斜磁場コイルの電流変化により、コイルに最も近い電磁鋼板内で磁気ヒステリシス現象が起き、これが、生体内の磁場の一様性を低下させる要因となっている。そこで、ASPモデルを、汎用磁場解析ソフトウェアLUVENS (Large-scale Universal Vector Electromagnetic-field Numerical Simulator)⁷⁾に組み込み、磁気ヒステリシス現象であるマイナーループに起因したMRI装置の磁場の乱れを解析した。

5.2 解析モデルおよび解析結果

図10に示した解析モデルは、総要素数約73万個(空気領域を含む)、この内磁性体の要素数は約25万個である。このような大規模なヒステリシス解析を行うには、従来の標準的モデル⁸⁾を用いると、現状の標準的PC環境では数か月を要すると推定される。これに対して、ASPモデルによる解析では、数時間程度で計算し、かつ従来よりも格段に高い精度で解析が可能となった⁸⁾。

解析に用いた傾斜磁場コイルの電流波形を図11に示す。この波形における傾斜磁場コイルの最大起磁力は ± 300 AT(アンペアターン)である。

図10の観測中央点における磁束密度Bの時間変化の計算結果を図12に示す。観測中央点是对称に配置された上下の

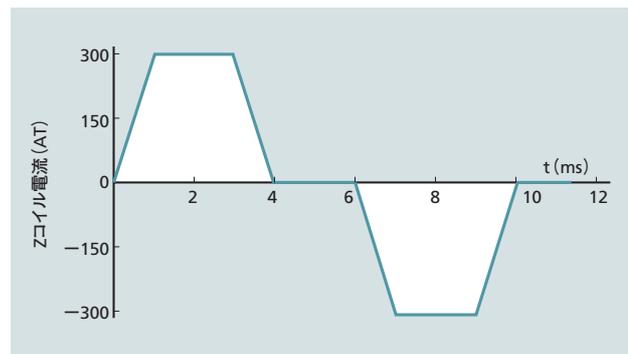


図11 Zコイル電流波形

Z方向に傾斜磁場をつくるためのZコイルの電流波形を示す。

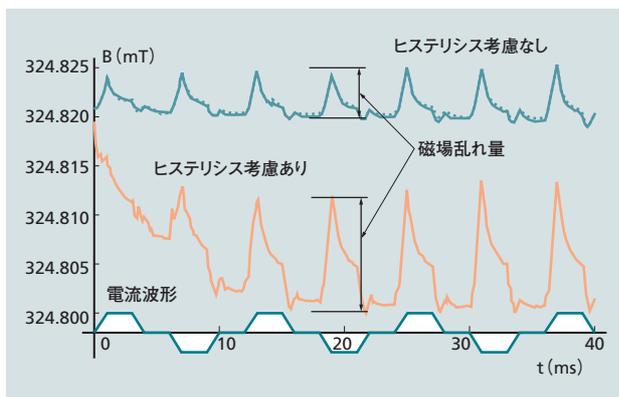


図12 観測点中央における磁場変化の計算結果
渦電流とヒステリシス効果によって励起される磁場乱れの結果を示す。

コイルの中央であり、基本的には磁場の変化はゼロである。しかし、実際には電磁鋼板で生じる渦電流の影響により、図12に示した波形のように観測中央点での磁場は脈動する。さらに磁気ヒステリシス現象を考慮した場合、観測中央点の磁場は脈動に加えて大きな変動を受ける。磁気ヒステリシス起因の磁場変動は0.02 mTであり、地磁気0.05 mTと同程度の磁場の影響を受け、MRI装置の分解能に影響を与えることがわかった。

コイル直下にある電磁鋼板の要素に対する磁束密度Bの時間変化と、(H, B)空間におけるマイナーループを図13に示す。ヒステリシス考慮なしの条件では、初期磁化曲線上で変化するが、ヒステリシスを考慮すると上半面で大きいマイナーループを描く。この解析により、MRIにおける磁場乱れは電磁鋼板のヒステリシスが深くかかわっていることが判明し、磁場乱れの量が画像データから推測される磁場乱れ量とほぼ一致する結果が導き出された。

このような大規模なヒステリシス解析は世界でも類を見ない。

6. おわりに

ここでは、磁気ヒステリシス現象を簡単に説明し、日立製作所が取り組んでいる磁性解析に関してヒステリシスを中心に、電子レベルから始まる量子力学解析、マクロからのアプローチによるヒステリシスモデル解析、またそのモデルを用いた動磁場解析によるMRI機器の設計支援シミュレーションについて述べた。

解析技術はかなり進展してきているが、未解決の課題も山積している。ミクロ解析における課題の一つは、計算時間の制約により、取り扱うことのできる原子数が数百個に限定されることである。また、マクロ解析においても、ここで紹介したMRIのヒステリシス解析はスカラー型モデルを基本としており、より正確には磁化回転を考慮したベクトルモデルを用いる必要がある。今のところ信頼できるベクトルモデルは発表されていない。

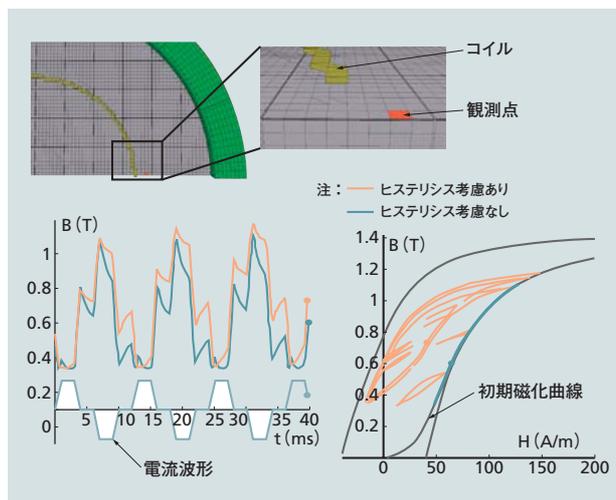


図13 コイル直下の電磁鋼板の磁場変化とマイナーループ
コイルによって励起される磁界と観測点周辺の磁性体の磁界により、励起される磁化のマイナーループを示す。

日立製作所は、これまで開発してきたシミュレーション技術を製品設計に生かしながら、これらの問題解決に向けて、さらに発展させていく計画である。

参考文献

- 湯川, 外:岩波講座 現代物理学の基礎, 量子力学I, 岩波書店(1978)
- G. Bertotti, et al.:Hysteresis in Magnetism, Academic Press(1998)
- I. Kitagawa, et al.:Calculation of electronic structures and magnetic moments of $Nd_2Fe_{14}B$ and $Dy_2Fe_{14}B$ by linear combination of pseudo atomic orbital method, Proceedings of the 53rd Magnetism and Magnetic Materials Conference(2008)
- G. Bertotti, et al.:The Science of Hysteresis II, Academic Press(2006)
- 李, 外:強磁性体における新ヒステリシスモデルの検証, 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-05-36/RM-05-36(2005)
- 真野:図説MRI, 秀潤社(1989)
- 宮田, 外:差分透磁率を用いた渦電流ヒステリシス磁界解析, 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-05-37/RM-05-37(2005)
- 李, 外:MRIにおける大規模ヒステリシス磁界解析, 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-06-20/RM-06-20(2006)

執筆者紹介



李 燦

1991年日立製作所入社, 日立研究所 モータインベションセンタ 所属
現在, 磁性体理論の研究およびSEMの研究開発に従事
理学博士
日本物理学会会員



宮田 健治

1981年日立製作所入社, 日立研究所 モータインベションセンタ 所属
現在, 有限要素法電磁場解析の研究開発に従事
工学博士
電気学会会員, 日本物理学会会員



濱田 智之

1988年日立製作所入社, 基礎研究所 ナノ材料・デバイスラボ 所属
現在, 材料設計のための第一原理計算技術の研究開発に従事
工学博士
応用物理学会会員, アメリカ化学会会員