

客員所員を経験して

産業技術総合研究所 三宅 隆

2013年度に加藤岳生先生のホストのもとで客員所員としてお世話になりました。物性研は私にとって大学院時代の5年間を過ごした場所で、それ以来、共同利用のスパコンユーザとして、また各種の研究会で継続的に世話になっています。柏キャンパスは現代的な造りで六本木時代よりゆったりしていますが、建物内で人にすれ違うことは少なく、以前よりずいぶん静かになった印象を受けました。今回の任期中の大きなイベントとしては、6月に開催された滞在型国際ワークショップ *Emergent Quantum Phases in Condensed Matter (EQPCM)* に参加し、発表する機会をいただきました。7月にはミニワークショップ *“Recent topics on magnetism: from permanent magnets to topological materials”* を加藤先生と赤井先生に開催していただきました。いずれのワークショップもトポロジーがキーワードで、第一原理計算を専門とする私には刺激になりました。充実したホスピタリティを提供していただいたことにも感謝しています。先端的な基礎研究の実施場所と研究交流の場の両面において物性研が高い水準で機能し、引き続き物性研究の中核拠点であり続けることを願っています。

近年の私の物性研とのつながりとしては、2012年度に始まった元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>があげられます。このプロジェクトは、社会、産業界から要請の強い問題に対して、物性科学の基礎研究者が材料科学の研究者と協力しながら課題解決を目指す10年プロジェクトです。磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の4つの領域が設定され、各領域が電子論、材料創製、解析評価の3グループから構成されます。私は磁石材料の電子論を担当することになりました。物性研は磁石材料、電子材料、構造材料の3領域に参画し、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)と連携しながら電子論の共通基盤整備を行っています。以下、磁石研究のねらいと計算科学的アプローチの課題を簡単にご紹介します。

磁石研究の大きな目標は強い磁石を実現することで、その条件として大きな磁化と保磁力が求められます。最も強力な磁石は希土類磁石と呼ばれる物質群で、3d遷移金属と希土類元素を主成分に含みます。なかでもネオジム磁石($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$)が過去30年間、最強磁石の座に君臨しています。磁石は国内電力の50%以上を消費するモータの性能に直結し、身近な生活のさまざまな場面で利用されています。最近需要が急速に大きくなっているのはハイブリッド車や電気自動車、それに風力発電機です。応用の観点から見ると、ネオジム磁石の弱点は耐熱性です。保磁力は温度上昇とともに下がります。そこで自動車の動作温度(200℃程度)に必要な保磁力を補強するためにジスプロシウムを添加します。しかしジスプロシウムは希少金属で元素戦略上の問題を抱えています。(ネオジムも希土類元素ですが、軽希土類は比較的豊富に存在し、資源問題が深刻なのはジスプロシウムなどの重希土類です)。またジスプロシウムの添加で温度特性は改善する一方で、性能(最大エネルギー積)が悪化する問題も存在します。そのため、希少金属に頼らない磁石の高性能化と新規磁石の提案が大きな課題になっています。

このうち前者は、保磁力機構の解明の問題です。保磁力は大まかには異方性磁場と比例関係にあるものの、理論限界である異方性磁場の約20%にとどまります。物質固有の異方性磁場と異なり、保磁力は材料組織に依存する材料パラメータで、保磁力低下の原因特定が重要な課題です。焼結磁石は典型的に数マイクロメートル程度の結晶粒から構成され、粒子の隙間にネオジム酸化物やアモルファス金属等の副相が挟まっています。近年の解析技術の進展により、主相と粒界相の界面の局所状態が保磁力に決定的な影響を与えることが明らかになりつつあり、原子スケールの界面構造の特定と磁気物性値への影響を、第一原理計算に基づいた理論計算で解明することが期待されています。しかし、希土類や遷移金属を含む、乱れのある複雑な界面構造を扱うことは現在の計算能力では限界があり、京コンピュータを用いても理想に近い界面

しか扱うことができません。大規模計算にむけたソフトウェアの整備のみならず、新しい効率的計算手法の開発が必須です。磁石研究のもう一つの主要課題は新規磁石の探索で、バルクの物性値である磁化と結晶磁気異方性の理解がその出発点です。希土類磁石の磁性は、遷移金属(鉄やコバルト)の 3d 電子と希土類の 4f 電子が主役を担います。大きな磁化は主に前者に、強い磁気異方性は後者に起因します。4f 電子の空間分布は結晶中で球対称からわずかに歪み、結晶場を感じて最適な方向が決まります。そのため 4f 電子の軌道磁気モーメントの方向が決まります。すると強いスピン軌道相互作用によりスピン磁気モーメントの容易軸も決まり、これが希土類の 5d 電子を介して遷移金属の 3d 電子に伝わり、3d 電子に由来する大きな磁化の向きが決定します。したがって、希土類磁石の磁性は、局在性の強い f 電子と遍歴的な d 電子が結合した、比較的良好に定義された物性物理の問題です。しかし電子間相互作用とスピン軌道相互作用を適切に取り扱う必要があり、既存の第一原理計算を超えた手法開発が必要です。

私は産総研では密度汎関数理論に基づいた第一原理計算で希土類磁石の機能解明も研究していますが、今回の客員所員としての研究課題には、基盤技術開発として強相関電子系のための第一原理計算手法の開発と応用を設定しました。この分野ではダウンフォールディングと呼ばれる第一原理有効モデルの導出法が過去 10 年間に大きく進展し、世界的な潮流になりました。私たちも密度汎関数理論などを用いた電子構造を出発点とし、低エネルギー多体モデルを導出する汎用的な方法を開発し、鉄系超伝導への応用などを通してその有効性を検証してきました。そこで物性研では、加藤先生に強相関物理の最近のトピックスをいくつかご紹介いただき、その中から Mn 化合物など 2 つの物質を研究対象にすることにしました。任期中に研究を完了することはできませんでしたが、共同研究を継続している状況です。詳細と結果は、物性研の研究会でご報告できればと考えています。ダウンフォールディングの開発には強相関電子系と第一原理計算の双方の知識が必須で、物性研は研究の推進に適した環境にあります。磁石の問題に対する共通基盤整備という性格も備えており、磁石研究へ波及することに期待しながら計算を進めています。

