

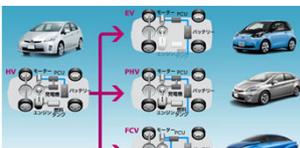
XRDによる磁性材料の電子軌道解明

株式会社デンソー ○龍 祥平, 清水 皇, 浅田 裕介, 山本 悠斗, 小山内 健太

背景と研究目的

研究背景 (自動車と磁性の関わり)

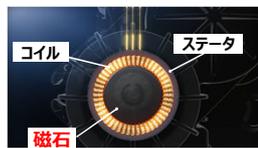
HV・EVの開発推進



https://news.infoseek.co.jp/article/clickcar_416047/

CO₂削減に向けた
電動化社会において高効率モータが求められる

モータの構成



磁束を受けてトルクを生み出す
磁束密度向上

高効率モータの設計指針

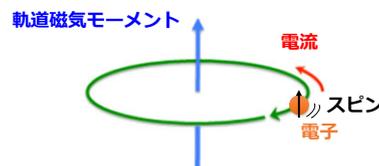


高効率モータ用磁性材料技術研究組合
http://maghem.jp/about.html

高効率のモータには高性能磁性が不可欠

磁性の発現

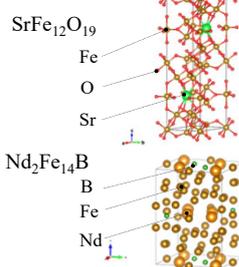
軌道磁気モーメントとスピン磁気モーメント



汎用的なフェライト磁石とネオジウム磁石について
電子軌道の形状を解明する

実験条件

サンプル



BL5S2 透過配置 粉末XRD

λ = 0.8857 Å



BL8S1 反射配置 XRD

λ = 0.8625 Å



リートベルト解析

$$S(x) = \sum_{i=1}^N w_i [y_i - f_i(x)]^2$$

観測点
観測強度 計算強度
重み $w_i = 1/y_i$

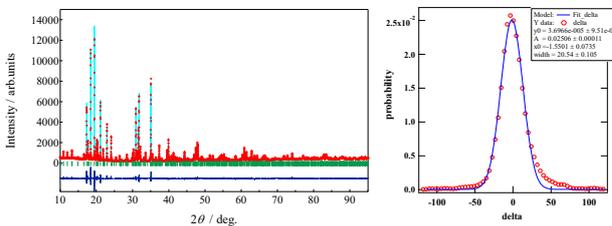
- ピーク位置 ⇒ 面間隔 ⇒ 格子定数, 単位胞体積
- 積分強度比 ⇒ 結晶構造 ⇒ 結合距離
- パラメータ 結合角
- ねじれ角
- 電荷密度 ⇒ 不規則構造
- 非調和熱振動
- 占有率
- プロファイル ⇒ 結晶子サイズ
- 格子歪
- 尺度因子 ⇒ 質量分率(混合物)

観測強度と計算強度の重み付き残差二乗和 $S(x)$ が最小となるようにパラメータ群をフィッティング。

BL5S2 透過配置 粉末XRD結果

BL8S1 反射配置 XRD結果

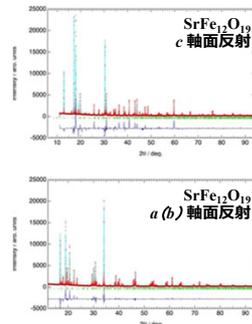
SrFe₁₂O₁₉ 粉末 リートベルト解析結果.



収束パラメータ.

検体名	S	Rwp / %	Rp / %	Re / %	RB / %	RF / %
SrFe ₁₂ O ₁₉ 粉末	1.1	5.1	3.9	4.6	5.8	5.8

SrFe₁₂O₁₉ リートベルト解析結果.

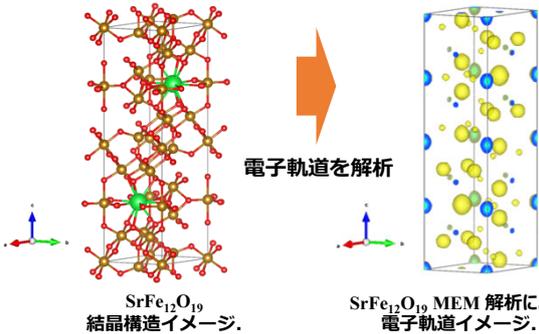
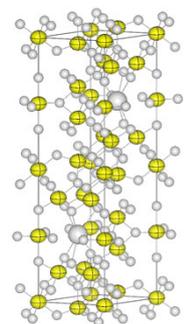


収束パラメータ.

検体名	S	Rwp / %	Rp / %	Re / %	RB / %	RF / %
c 軸面	5.1	24.6	15.7	4.8	30.9	25.7
a(b) 軸面	2.6	12.6	8.5	4.9	13.4	10.1

温度因子パラメータ.

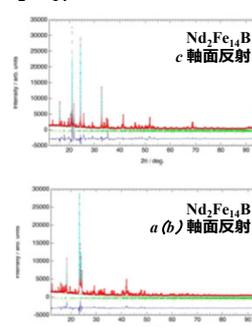
サイト	平均温度因子 B	B11-B22	B33
Sr0	0.2	0.2	0.2
Fe1	0.124	0.136	0.1
Fe2	0.124	0.136	0.1
Fe3	0.124	0.136	0.1
Fe4	0.124	0.136	0.1
Fe5	0.124	0.136	0.1
O6	1	1	1
O7	1	1	1
O8	1	1	1
O9	1	1	1
O10	1	1	1



電子軌道を解析

SrFe₁₂O₁₉ MEM 解析による
電子軌道イメージ.

Nd₂Fe₁₄B リートベルト解析結果.



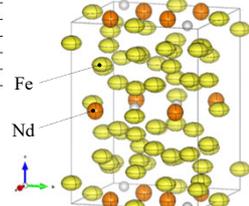
収束パラメータ.

検体名	相	S	Rwp / %	Rp / %	Re / %	RB / %	RF / %
c 軸面	Total	5.5	17.9	13.1	3.3	-	-
	Nd ₂ Fe ₁₄ B	-	-	-	-	22.5	17.2
	NdO	-	-	-	-	24.0	12.6
a(b) 軸面	Total	2.2	7.5	5.5	3.3	-	-
	Nd ₂ Fe ₁₄ B	-	-	-	-	8.4	5.0
	NdO	-	-	-	-	6.5	3.5

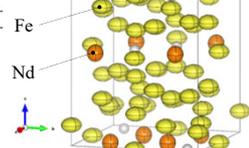
温度因子パラメータ.

サイト	平均温度因子 B	B11-B22	B33
Nd1	0.124	0.12	0.14
Nd2	0.124	0.12	0.14
Fe1	0.17	0.2	0.1
Fe2	0.17	0.2	0.1
Fe3	0.17	0.2	0.1
Fe4	0.17	0.2	0.1
Fe5	0.17	0.2	0.1
Fe6	0.17	0.2	0.1
B1	2	2	2

SrFe₁₂O₁₉ 回転楕円 電子軌道イメージ.



Nd₂Fe₁₄B 回転楕円 電子軌道イメージ.



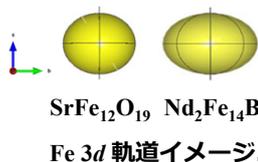
粉末状態の電子軌道は等方的な円形状であり磁性は
キャンセルされていると推察.

⇒ 構造材料の状態での測定及び最適化が必要.

残差二乗和の最小化に至らないが、c 軸とa(b) 軸で温度因子に差異が生じる
傾向。(電子軌道の異方性に由来する可能性.)

まとめ

結論: ① Ndの電子軌道はほぼ等方的、② Feの電子軌道はab面に扁平、③ Nd₂Fe₁₄BのFe電子軌道の扁平率はSrFe₁₂O₁₉より大きいと推察される。Ndに関し、磁性を担う4f電子は内殻に集中するため異方性は薄まると考えられる。一方、Feに関し、a(b)面に扁平でありa(b)面内の軌道角運動量由来の磁気モーメントがc軸(容易磁化軸)方向に発生している可能性がある。



SrFe₁₂O₁₉ Nd₂Fe₁₄B
Fe 3d 軌道イメージ.

謝辞

本研究における放射光測定・解析におきましては、日産アーク 富安啓輔 様に大変お世話になりました。心より感謝申し上げます。
課題番号: 2019P1001

