

3D プリンターをつかった Ne-Fe-B 系界面構造のモデリング

Modeling of the interface structure in Ne-Fe-B system using 3D printer

○山崎 淳¹、古宇田 光¹、合田 義弘²(1. 東大物性研、2. 東工大総合理工)、

○Jun Yamazaki¹, Hikaru Kouta¹, Yoshihiro Gohda²(1.Univ Tokyo., 2.Tokyo Tech.)

E-mail: yamazaki@issp.u-tokyo.ac.jp

佐川真人博士が発明した $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の特性を超えることを目標とした、永久磁石の研究が活発に行われている。合田等は、スーパーコンピュータ「京」により、磁石を構成する主相の $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ と、その周囲を取り囲む Nd_4O の副相の界面における微細構造と保磁力の関係について詳しく調べた。その結果、主相の結晶構造をゆがめている界面の歪が徐々に緩和していく構造が見られ、それが保持力と関連する可能性が示唆された[1]。この緩和構造を視覚的に理解するため、3D プリンターを用いて主相、副相界面を含む結晶構造のモデリングを試みた。

その緩和構造を視覚的に原子模型で示すために、約 2700 個から構成される金属原子を $500\text{mm} \times 500\text{mm}$ 程度の大きさで作成する目標をたてた。汎用 3D プリンターでこの大きさのものを一度に作るのは困難であるため、界面構造を含む複合結晶の分割したモデリングを試みた。原子座標のデータは合田等のデータ[1]を使い、初めに結晶構造描画ソフト VESTA にて、Ne-Fe-B 系界面構造を描いた。次に 3D グラフィックソフトにて、STL ファイルを制作後、3D-CAD にて Ne-Fe-B 系界面構造を分割した。分割領域は、できるだけ原子の面積が多くなり模型として重ねやすい面を探索し、異相界面を除いた最適面を探索して全体を 25 分割した (図 1 (a))。図 1 (b)にこの界面構造の積層概念図を示す。また、(c)にこの界面構造を含むさらに 4 分割にしたもの、(d)には、その 4 つの模型を重ねたものを示す。

模型を作成した結果、界面から離れるに従い $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の歪んだ結晶構造が本来の構造に戻っていく過程を視覚的に理解することができた。模型の面はできるだけ原子の断面となるように工夫したので、安定して重ねることができた。今後、副相である Nd_4O 相の厚さと主相の $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の結晶構造の緩和の関係等の計算を実施し、3D プリンターによるモデリングを継続する。また、構造緩和をわかりやすく示すために、特定元素だけに着目したモデリング等の工夫を検討する。本研究において、複数の結晶相を含む複雑な構造の結晶構造を 3D プリンターで分割モデリングすることに成功した。今後、この手法を発展させ、新材料の研究・開発に活かしていく。

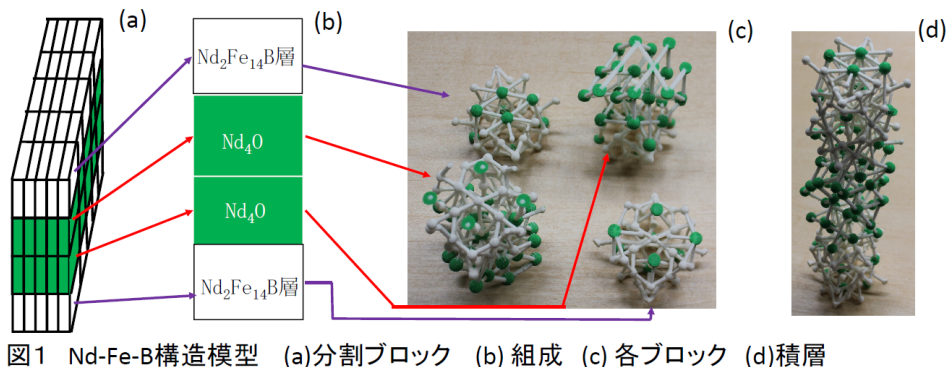


図1 Nd-Fe-B構造模型 (a)分割ブロック (b)組成 (c)各ブロック (d)積層

[1]合田義弘氏(東工大):hp120086、第1回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会、(2014)。