

研 究 主 論 文 抄 録

論文題目 強磁性遷移金属の粒界局所磁気モーメントに関する研究  
(Local magnetic moments at grain boundaries in ferromagnetic transition metals)

熊本大学大学院自然科学研究科 産業創造工学専攻 マテリアル工学講座  
(主任指導 連川 貞弘 教授)

論文提出者 平山 恭介  
(by Kyosuke Hirayama)

主論文要旨

多結晶材料における主要な格子欠陥の一つである結晶粒界は、多結晶材料のバルク特性に影響を及ぼす。特に、現代の高度社会を支える重要な基盤材料である磁性材料の磁気特性は、粒径や粒方位などの材料微細組織に著しく影響され、粒界は磁化過程における磁区の発生・消滅場所あるいは磁壁のピン止め場所として作用することが知られている。磁性材料の高性能化のためには、粒界磁性を理解することが重要である。粒界磁性に関しては、これまで第一原理計算手法を用いて理論的に検討され、磁気モーメントが粒界近傍で上昇することが予測されてきた。しかしながら、従来の実験的手法ではナノスケールでの局所磁気モーメントの測定が困難であったため、その実証が得られていなかった。また、結晶粒界の様々な特性は、隣接する結晶粒の相対的な方位関係や粒界面方位に依存して多様に変化することが知られているが、粒界磁性がそのような粒界性格・構造にどのように影響されるのか、理論的にも明らかになっていない。本研究は、最近提案された、透過型電子顕微鏡 - 電子エネルギー損失分光法(TEM-EELS)を用いた局所磁気モーメントの測定方法を粒界磁性の評価に応用し、強磁性遷移金属における粒界磁気モーメントと粒界性格・構造との関連を実験的に明らかにするとともに、第一原理計算手法を用いて電子論的に粒界磁性の起源を検討することを目的として行われた。

これまでに第一原理計算で予測されていたように、純鉄および純ニッケルにおいて粒界の局所磁気モーメントが粒内の値と比較して上昇することが TEM-EELS を用いることで初めて実証した。また、粒界磁気モーメントが粒界性格に依存し、相対方位差の増加にともない増加することが見出すとともに、粒界磁気モーメント-相対方位差曲線において、対応粒界において磁気モーメントの上昇が小さいカスプが現れることを発見した。一方、第一原理計算の結果、粒界近傍における局所磁気モーメントは、粒界の自由体積と密接に関連することを見出した。また、このような粒界磁気モーメントに対する磁気体積効果は、鉄の方がニッケルと比べ顕著であることを明らかにした。