creative commons

COMMONS DEED

저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:

저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.

비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.

변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 이용허락규약(Legal Code)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

Disclaimer

dCollection

공학석사 학위논문

미소자기 전산모사를 이용한 NdFeB 영구자석의 에너지 최적 향상을 위한 미세구조 최적화 연구

2016년 06월

서울대학교 대학원

공과대학 재료공학부

최 진 혁

미소자기 전산모사를 이용한 NdFeB 영구자석의 에너지 최적 향상을 위한 미세구조 최적화 연구

지도 교수 김 상 국

이 논문을 공학석사 학위논문으로 제출함
2016년 06월

서울대학교 대학원
공과대학 재료공학부
최 진 혁

최진혁의 공학석사 학위논문을 인준함
2016년 06월

위 원 장 _____ 김 미 영 _____ (인)

부위원장 _____ 김 상 국 _____ (인)

위 원 _____ 이 건 도 _____ (인)

초 록

상용화된 $(Nd_{0.7}Dy_{0.3})-Fe-B$ 자석은 ~240kJm^{-3} 의 $(BH)_{max}$ 와 ~3.0T의 보자력을 가지며 하이브리드 자동차 및 전기차의 모터에 사용되고 있다. 하지만 중희토류 원소인 Dy의 자원량은 희박하며 가격이 비싸기 때문에, 이를 저감시키거나 완전히 없앤 Nd-Fe-B 영구자석의 개발이 큰 관심을 모으고 있다. 중희토류를 사용하지 않고 Nd계 자석의 보자력을 향상시키기 위해서는 무엇보다 재료의 미세구조 및 자구의 역할을 이해하는 것이 매우 중요하다. 본 연구에서는 유한요소법 모델링 및 전산모사를 통해 영구자석의 미세구조를 제어함으로써 보자력을 향상할 수 있는 방법을 살펴보았다. 본 연구에서는 유한요소법 미소자기 전산모사을 사용하여 500nm^3 큐브 내에 보로노이 다이어그램(Voronoi diagram)을 이용하여 다수의 결정립과 수 nm의 결정립계를 형성시키고 z축으로 외부자기장 +6T ~ -6T 까지 변화하며 자기이력곡선 및 자화반전 과정을 분석하였다. 결정립의 크기, 결정립계의 자기적 특성 및 결정립 간 자화용이축의 오배열 정도에 따라 달라지는 자석의 특성과 그 원인을 분석하였다.

주요어 : 영구자석, NdFeB, 결정립, 결정립계, 미소자기 전산모사
학 번 : 2014-21479

목 차

초 록 3
목 차 4
그림 목차 5
표 목차 7
제 1 장 서 론 8
1.1 영구자석의 재료 및 응용분야 8
1.2 현 NdFeB 영구자석의 문제점 9
제 2 장 연구 배경 13
2.1 영구자석의 보자력 기구 13
2.2 미소자기 전산모사 18
2.3 3차원 모델링 23
제 3 장 결정립의 크기에 따른 영구자석의 특성 변화 24
3.1 모델링 및 전산모사 조건 24
3.2 결정립 크기 변화에 따른 보자력 및 에너지 변화 25
3.3 결정립 크기 변화에 따른 감자장 크기 변화 29
제 4 장 결정립계의 자기적 물성에 따른 영구자석의 특성 변화 35
4.1 모델링 및 전산모사 조건 35
4.2 결정립계의 포화자화값 변화에 따른 자석 특성 37
4.3 결정립계의 Aex값 변화에 따른 자석 특성 42
제 5 장 결정립의 자화용이축의 배열에 따른 영구자석의 특성 변화 50
5.1 이방성 자석의 결정립의 자화용이축 50
5.2 결정립 간 자화용이축 배열 정도에 따른 자석 특성 53
제 6 장 결 론 55
참고문헌 56

그림 목차

그림 1. 영구자석의 M-H 곡선 및 B-H 곡선 11
그림 2. 영구자석 재료의 발전 및 최대에너지적 12
그림 3. (a) 단자구 입자와 다자구 입자의 내부 스핀배열 모식도
(b) 결정립 크기에 따른 보자력 경향성 16
그림 4. (a) 단자구 입자가 외부자장에 의해 회전할 때의 모식도 및
자기이력곡선 (b) 역자구가 형성된 자석 및 단면도 17
그림 5. (a) 500nm^3 큐빅 내 생성된 8개의 결정립 및 내부 단면
(b) 결정립 내부와 결정립계에서 형성된 크기가 다른 메쉬...
23
그림 6. 각 결정립 모델의 자기이력곡선 27
그림 7. 결정립 크기가 250nm 일때 외부자장에 따른 에너지 변화 ...28
그림 8. 평균 결정립 크기가 166nm 인 모델의 자화 상태에 따른 내부의
반자장 크기 분포도..... 32
그림 9. 평균 결정립 크기가 125nm 인 모델의 역자구 형성 전, 후 및
전파될 시 반자장 크기 분포도 33
그림 10. 결정립 크기에 따른 반자장 분포도 34
그림 11. 결정립계의 포화자화가 달라질 때 자기이력곡선 및 보자력과
잔류자화.....39
그림 12. 결정립계의 포화자화에 따른 B-H 곡선 및 최대에너지적 ..40
그림 13. 결정립계의 포화자화 값에 따른 역자구 형성 시 각 모델의
자화 41
그림 14. 결정립계의 다른 포화자화에 대해 각 A_{ex} 값 변화에 따른
자이기력곡선 46

그림 15. 결정립계의 포화자화가 0.5T 일 때, A_{ex} 값 변화에 따른 역자구 형성 구도 48
그림 16. 결정립계의 포화자화가 0.5T, 0.9T 일 때 A_{ex} 값에 따른 보자력 및 잔류자화 49
그림 17. 인접한 결정립 간 자화용이축의 틀어짐 52
그림 18. 결정립 간 자화용이축의 오배열 정도에 따른 자기이력곡선 및 보자력과 잔류자화 및 최대에너지적 변화..... 54

표 목차

표 1. 결정립계의 포화자화를 변화한 계산 조건 36

표 2. 결정립계의 포화자화가 0.1T, 0.5T, 0.9T 일 때 결정립계의 A_{ex} 를 변화시킨 계산조건 45

표 3. 결정립계의 포화자화가 0.5T 일 때 A_{ex} 값에 따른 보자력 47

제 1 장

서 론

1.1 영구자석의 응용분야

최근 세계 각국의 이산화탄소 배출 규제와 고효율의 친환경 에너지원에 이목이 집중됨에 따라 전기자동차 및 하이브리드 자동차의 수요가 급증하고 있다[1-4]. 이에 따라, 기존 화석연료의 연소를 기반으로 한 모터가 아닌 전기로 인해 구동되는 모터(Electric drive motors)의 개발이 시급하다. 전기 모터가 기존의 모터를 대체하려면 저비용 및 소형화 뿐 만 아니라 높은 온도에서도 작동하며 높은 출력을 가져야한다. 전기 모터는 코일이나 영구자석으로 인해 생긴 자장으로 구동될 수 있다. 그 중 영구자석을 기반으로 한 영구자석 모터는 높은 자속 밀도를 가지며, 고정자 코일에만 전류를 인가하기 때문에 에너지 손실이 작으며 부피 당 토크가 높고 기존 모터보다 유지하기 편한 장점을 가진다[5-6]. 때문에 영구자석 모터는 기존 화석연료를 기반으로 한 모터를 대체할 유력한 후보이며 고성능의 영구자석을 개발하기 위한 연구가 활발히 진행 중이다.

외부 자장이 없이 자화를 가지는 강자성체 중 경자성체 재료는 높은 보자력 및 잔류자화를 가지고 있어 영구자석의 재료로 사용된다.[7] <그림 1>은 전형적인 경자성체의 자기이력곡선이다. 이 때, 각형을 나

타내는 M−H 곡선과 2사분면에서 x,y축과 만나는 지점을 각각 보자력(coercivity) , 잔류자화(remanance)라 한다. 두 값은 영구자석에서 가장 핵심적인 물성으로 자석의 성능을 결정한다. 보자력은 포화자화된 시편의 자화를 0으로 만드는데 필요한 반대방향의 자장을 의미하고, 잔류자화는 외부 자장이 0일 때 시편의 자화량을 의미한다. M−H 곡선을 통해 수식(I.1)에 따라 B−H 곡선으로 변환한 후 2사분면 내 내접하는 사각형 면적의 최댓값이 최대에너지적이 된다. 최대에너지적은 보자력이 상당히 클 때(I.2) 포화자화 값에 의해 결정된다.

$$\mathrm{B} = \mu_0(H + 4\pi M)\ [cgs] \qquad (\mathrm{I}.1) \qquad \mu_0 H_c \geq \frac{M_s}{2}\ , (BH)_{m,ax} = \frac{M_s^2}{4\mu_0} \qquad (\mathrm{I}.2)$$

현재 주로 사용되는 소결 $Nd_2Fe_{14}B$ 자석은 영구자석 중 가장 자기적 성능이 뛰어난 물질로 제품의 소형화 및 경량화에 필수적인 소재가 되었으며, 1980년대 초 개발되기 시작하여 많은 연구를 통해 현재는 최대에너지적이 이론치(64MGOe)에 근접하고 있다.<그림 2>[8].

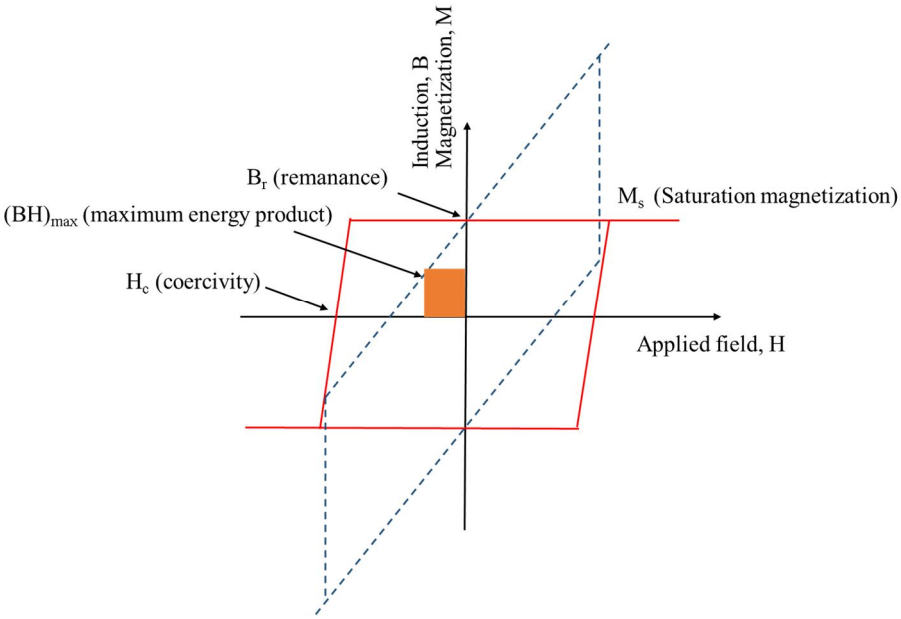
1.2 현재 NdFeB 영구자석의 문제점

NdFeB 영구자석의 결정구조 내에서 Nd 와 Fe 의 스핀은 반평행한 배열을 한다. 온도가 올라가게 되면 이 반평행한 배열 때문에 자석의 보자력이 극감하는 현상을 보인다. 이처럼 보자력의 감소는 모터의 구동

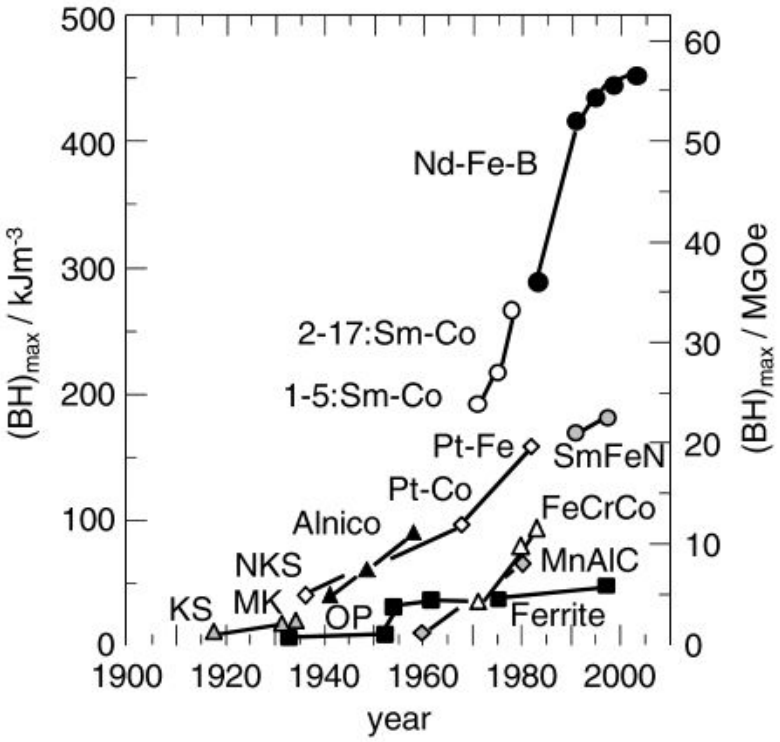
온도인 약 150° 에서 더 이상 영구자석의 역할을 제대로 수행하지 못하게 되는 원인이 된다. 따라서 NdFeB 영구자석의 고온 성능을 갖추게 하기 위해 결정구조 내에 Dy(Dysprosium),Tb(Terbium) 과 같은 중희토류 원소를 첨가한다. 첨가된 중희토류 원소는 결정구조를 왜곡시켜 자기이방성을 증가시키고 결과적으로 고온 보자력을 향상시킨다.[9]

하지만 중희토류가 첨가된 NdFeB 자석은 크게 두가지 단점을 가진다. 첫째로, 결정립 내에 존재하는 중희토류는 재료의 잔류자화 값을 감소시켜 상온에서 최대에너지적을 감소시킨다. 둘째로 중희토류 원소의 희소성 때문에 그 값은 다른 원소에 비해 매우 비싸 재료를 사용하는데 그 원가경쟁력을 확보하기 힘들다. 따라서 중희토류를 첨가하지 않고도 기존 NdFeB 자석의 보자력 특성을 향상시키기 위해 다양한 측면으로 연구가 진행되고 있다[10-11].

특히 영구자석은 그 미세구조에 의해 특성에 큰 영향을 받는다. 표면의 결함으로 인한 보자력 감소는 전체의 10%에 그치지만, 표류자장 및 결정립의 불완전 배향으로 줄어드는 보자력은 약 50KOe 에 달한다[12]. 따라서 영구자석의 미세구조를 제어하고 자화 반전 거동을 분석하는 것이 매우 중요하다.



<그림 1> 영구자석의 M-H 곡선 및 B-H 곡선



<그림 2> 영구자석 재료의 발전 및 최대에너지적[6]

제 2 장

연구 배경

2.1 영구자석의 보자력 기구

강자성체 입자는 크기에 따라 내부의 정자기에너지를 줄이기 위해 자구를 형성한다<그림 3>. 그러나 자성체가 아래 수식(II.1)과 같이 계산되는 임계 크기 이하로 작아지면 그 내부에 자구를 만드는 것이 에너지적으로 더 불안정하게 되어 하나의 자구를 형성하게 된다. γ 는 자구벽 에너지, M_s 는 포화자화, D_c 는 단자구 임계 크기를 의미한다. NdFeB 영구자석의 상수를 이용하여 단자구 크기를 계산하면 약 300nm 해당한다.

$$D_c \sim \frac{\gamma}{M_s^2} \qquad \text{(II. 1)}$$

단자구 입자는 자벽의 이동을 수반하지 않고 자기모멘트 회전에 의해서만 자화가 반전하기 때문에 다자구 입자보다 더 큰 보자력을 가질 수 있다<그림 3>. Stoner-Wohlarth의 이론에 따르면[13], 단자구 입자가 외부 자장에 의해 회전할 시 각형의 자기이력곡선을 나타내게 되고 그 때의 보자력은 이방성 자장과 같게 된다. NdFeB 자석의 이방성 자장은 약 7.02T 이다.<그림 4.(a)>

$$H_A(Anisotropy\ field) = \frac{2K_u}{\mu_0 M_s} = H_c(coercivity) \qquad (\mathrm{II.2})$$

따라서 결정립을 단자구 크기 내로 제작하려는 많은 실험 연구가 진행되어왔다. 현재 소결공정으로 제작할 수 있는 NdFeB 자석의 결정립 크기는 약 1μm 에 해당한다. 이를 단자구 크기(300nm) 이내로 만들기 위한 연구가 활발히 진행 중이다[14−17]

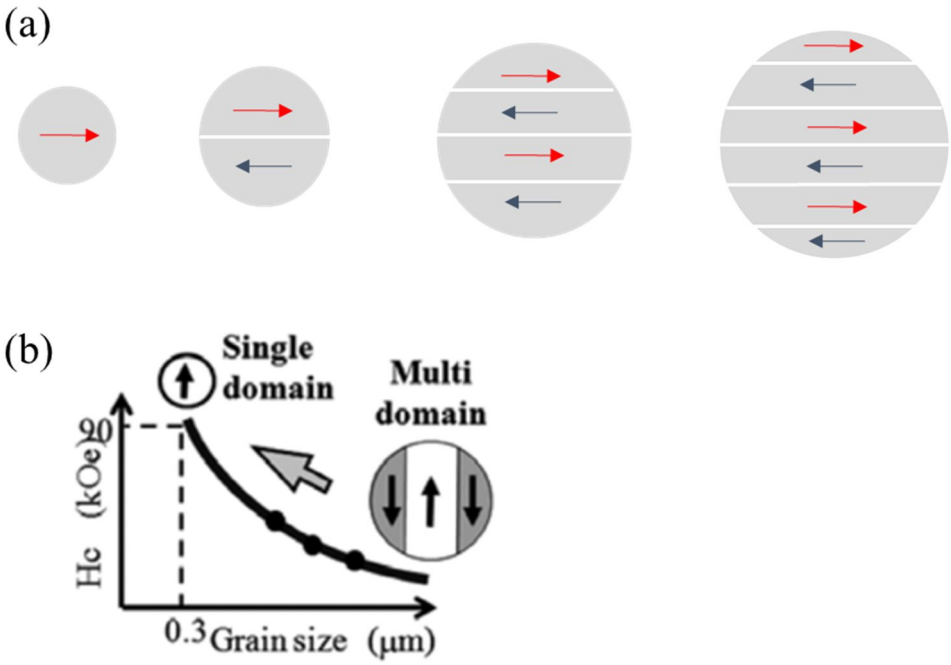
영구자석의 결정립 크기가 단자구보다 클 때는 다른 보자력 기구가 작용하게 된다. 외부 자장에 의해 역자구가 결정립 내에 형성되고 전파되는 경우로 <그림 4.(b)>처럼 국부적인 자화반전 핵과 그에 따른 자벽이 형성되고 그 후 자벽이 전파되며 자화반전이 일어난다. 이 때, 보자력은 다음과 같은 수식(II.3)에 의해 결정된다.

$$H_c = \alpha\left(\frac{2K_u}{M_s}\right) - \left(\frac{N_d M_s}{\mu_0}\right) \qquad (\mathrm{II.3})$$

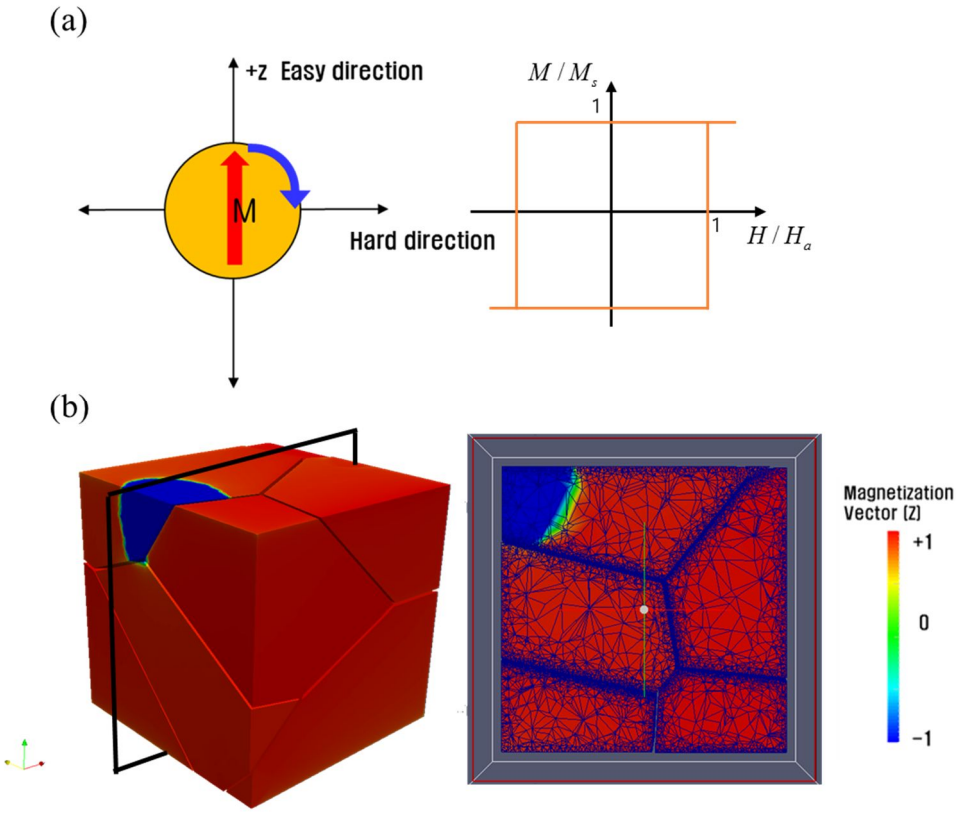
수식에서 α 는 온도에 의존하는 인자로서 영구자석의 미세조직, 결정립 크기 및 결정립계의 상태에 의존한다. α를 포함한 첫번째 항은 이방성 자장의 국부적인 저하를 의미한다. N_d 는 미세구조에 크게 영향받는 내부의 유효 반자장 계수이며, 이를 포함한 두번째 항은 반자장의 영향을 나타낸다. 따라서, 재료의 상수 값인 K_u, M_s 를 제외한 α와 N_d 를 조절하여 보자력을 향상시키는, 즉 영구자석의 미세조직적 요소를 이해하고 조절하여 자석의 특성을 향상시키는 연구가

진행되어왔다. 대표적으로 결정립계의 두께를 조절하거나, 결정립계에 Eutectic alloy를 첨가시켜 결정립계의 성질을 바꾸어 결정립들을 효과적으로 고립시키면서 보자력을 향상시킨 연구가 있다[18,19].

앞선 설명과 같이 미세조직적 요소가 영구자석의 보자력에 큰 영향을 끼치는 것이 알려지고, 비자성체라고 여겨왔던 결정립계를 실험적으로 관측하려는 많은 시도가 있었다. 전자빔 홀로그래피, 스핀 편향 주사전자현미경, Soft x-ray magnetic circular dichroism 등에 의해 결정립계는 상당한 자기적 물성을 가지는 것이 밝혀졌다[20-22]. 최근 Gallium, Vanadium 등의 원소를 결정립계에 확산시키면서 결정립계의 자기적 특성을 감소시키며 비자성체로 만들기 위한 연구가 진행되었다[21,22].



<그림 3> (a) 단자구 입자와 다자구 입자의 내부 스핀배열 모식도
(b) 결정립 크기에 따른 보자력 경향성[8]



<그림 4> (a) 단자구 입자가 외부 자장에 의해 회전할 때의 모식도 및 자기이력곡선 (b) 역자구가 형성된 자석 및 단면도

2.2 미소자기 전산모사

본 연구에서 영구자석을 모델링하고 내부 스핀의 거동을 관측하기 위해 미소자기 전산모사를 수행하였다. 미소자기 전산모사는 강자성체를 대상으로 자화 벡터의 동적 거동을 기술하는 주요 도구이다[25,26]. 미소자기학에서 자화 벡터의 거동은 Landau-Lifshiz-Gilbert(LLG) equation 에 의해 기술되며 이는 Gilbert 에 의해 제안된 감쇠상수(α)를 포함하여 다음과 같이 표현된다[25,26].

$$\frac{d\boldsymbol{M}}{dt} = -|\gamma|\left[\boldsymbol{M} \times \boldsymbol{H}_{eff}\right] + \frac{\alpha}{M_s}\left[\boldsymbol{M} \times \frac{d\boldsymbol{M}}{dt}\right] \qquad \text{(II. 4)}$$

위 식에서 M 은 포화자화(Saturation magnetization) 값 M_s 를 갖는 자화 벡터이며 γ 는 길버트 자기회전비율(Gilbert gyromagnetic ratio), α 는 감쇠상수(Gilbert damping constant)를 의미한다. 위 식에서 첫번째 항은 자화 벡터 M 이 유효자장(H_{eff}) 주위로 세차운동하는 것을 의미하고, 두번째 항은 자화 벡터가 회전의 중심 방향으로의 감쇠를 의미한다. 자화 벡터는 세차운동을 하면서 결국 유효자장의 방향으로 정렬하게 된다. 유효자장은 아래와 같은 수식으로 표현되며 전체에너지를 자화 벡터로 변분 미분한 값이다.

$$\boldsymbol{H}_{eff} = -\frac{\delta E}{\delta \boldsymbol{M}} \qquad \text{(II. 5)}$$

이 때 전체에너지는 정자기에너지, 교환에너지, Zeeman 에너지, 자기결정이방성 에너지를 포함한다.

강자성체내에서의 자기 모멘트는 결정 구조 안에서 서로 평행한 배열을 선호한다. 인접한 스핀 간의 틀어진 각도가 작다고 가정할 시 교환에너지는 다음과 같은 수식으로 표현된다.

$$E_{ex} = \int_V A_{ex}[(\nabla m_x)^2 + \left(\nabla m_y\right)^2 + (\nabla m_z)^2]\, dV \qquad \text{(II. 6)}$$

A_{ex} 는 단위 격자가 격자상수 a 와 n 개의 원자를 가질 때의 교환상수를 의미하며($\mathrm{nJ}S^2/a$), m_x , m_y , m_z 는 각 방향으로의 단위 자화 벡터를 의미한다. 미소자기학에서 계산을 위해 모델을 잘개 쪼개는 과정(Mesh)에서 그 크기를 교환상수에 의해 계산되는 Exchange length 보다 작게 해야 그 조각 내에서의 스핀 방향을 동일하다고 가정할 수 있고 신뢰할 수 있는 계산 결과를 얻을 수 있다.

정자기에너지(magnetostatic energy)는 각각의 스핀들 간 dipole-dipole 상호작용 때문에 발생하는 에너지이다. 맥스웰 방정식으로부터 정자기에너지는 다음과 같이 주어진다.

$$E_{ms} = \int_V -\frac{1}{2}\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{H_d}\, dV \qquad \text{(II. 7)}$$

dipole 들은 자화 벡터 M 의 방향과 반대방향으로 내부 힘을 만들어내고 이를 정자기적 자장 또는 반자장(demagnetization

field)이라 한다. 이 때, H_d 가 반자장을 의미한다. 따라서 시편 내에서 작용하는 실질적인 자장은 외부자장(H_{ex})와 반자장을 합한 자장이 된다.

스핀들은 결정구조에서 스핀-궤도 결합에 의해 용이한 방향을 가지게 된다. 그 방향을 자화용이축(easy-axis)이라 한다. 따라서 자발적 자화는 자화용이축과 평행한 배열을 했을 때 에너지적으로 안정하게 되며 그 에너지는 단축 자기 이방성을 가지는 재료의 경우 다음과 같이 표현된다.

$$E_{ani} = K_1 sin^2\theta + K_2 sin^2\theta + K_3 sin^2\theta + \ \ldots \qquad \text{(II. 8)}$$

이 때 θ 는 자화 벡터와 자화용이축 간의 각도를 의미하고, K_n 은 자기이방상수이다. 경자성체의 경우 연자성체보다 큰 자기이방상수를 가지게 된다. NdFeB 의 경우 약 4.5 MJ/m^3 의 자기이방상수를 가진다. 자기이방상수는 보자력에 큰 영향을 끼치는 값으로써 큰 자기이방상수를 가지는 재료가 영구자석의 재료에 부합하다고 할 수 있다. 본 연구에서 계산을 진행할 때, 결정립은 NdFeB 의 자기이방상수를 적용하고, 결정립계는 비정질로 가정을 하여 자기이방상수를 0 으로 고정하였다.

마지막으로, Zeeman 에너지는 자화 벡터와 외부 자장 사이의 상호작용으로 나타나며 아래와 같이 표현한다.

$$E_{ext} = \int_V -\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{H_{ext}}\, dV \qquad \text{(II. 9)}$$

본 연구에서는 FEMME (finite element micromagnetics) 프로그램을 통해 미소자기 전산모사를 수행하였다. 이 프로그램은 SUESSCO 에서 개발된 소프트웨어로 유한요소법을 사용하여 LLG 방정식을 시간과 공간에 대해 계산하며 구동된다[29].

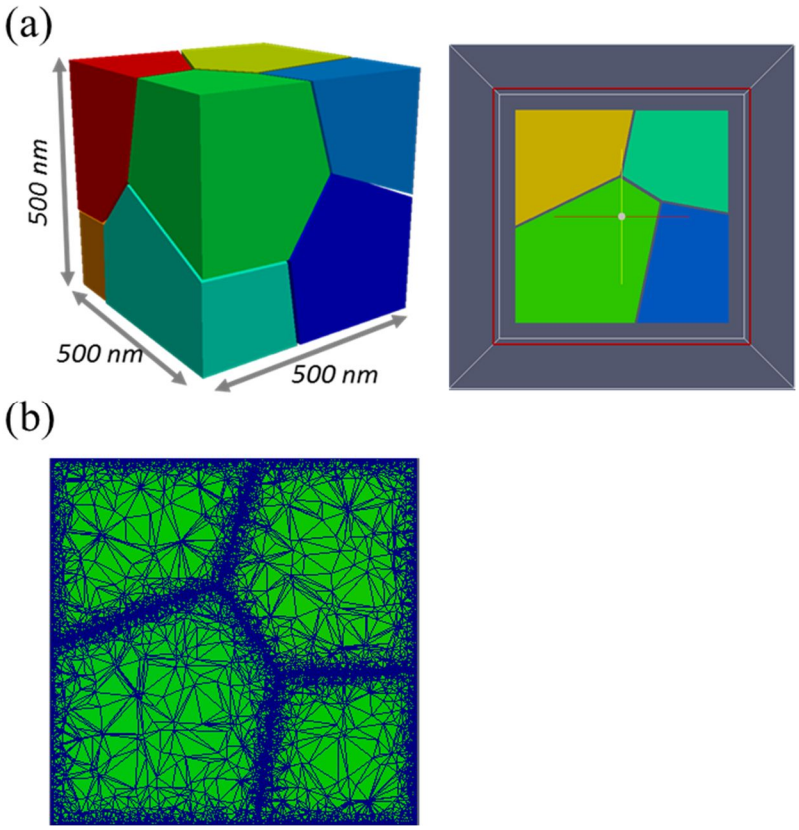
2.3 3 차원 모델링

본 연구에서 다수의 결정립을 가진 영구자석을 모델링하기 위해 보로노이 다이어그램(Voronoi Diagram)을 사용했다 <그림 5.(a)>. 보로노이 다이어그램은 어떤 시드 점(seed point)들과의 거리에 따라서 평면을 분할하는 방법이다. 시드 점에 대해 평면 위의 점들이 어떤 점과 가장 가까운 지에 따라서 영역을 분할한 다이어그램이다. 브로노이 다이어그램은 결정립을 포함한 미세구조를 구현하기 적합한 방법으로 알려져있다[30]. 위 방법을 이용하여 다수의 결정립이 존재하는 한 변이 500nm 인 큐빅을 모델링하였다.

다음으로 모델링한 자석을 계산하기 위해 잘게 나누었다. 나누어진 element 의 각 꼭지점에 각 하나의 스핀이 부여되며 계산이 진행된다. 신뢰할 수 있는 결과를 얻기 위해 스핀과 스핀 사이의 거리는 Exchange length 이내로 형성되어야 한다. 경자성체인 NdFeB 는 다음과 같은 수식에 따라 Exchange length 의 값이 정해진다[31]. 그 값은 약 2nm 이내이다.

$$\sqrt{A/K_u} \approx 2nm \qquad \text{(II. 10)}$$

따라서 500nm^3 큐빅을 2nm 의 크기로 잘게 쪼갠다고 가정한다면 그 때의 element 수는 250^3 개가 되어 미소자기 전산모사로 계산 할 수 있는 범위를 벗어난다. 효과적인 계산을 위해 <그림 5.(b)>과 같이 결정립 내부와 결정립계의 메쉬의 크기를 달리하였다. 자화 반전이 일어나는 결정립계는 Exchange length 보다 작은 메쉬를 적용하였고, 결정립 내부에는 성긴 메쉬를 적용하였다. 크기가 다른 메쉬를 적용한 계산의 신뢰성을 보하기 위해 전체 영역을 Exchange length 이내의 조밀한 메쉬로 모델링하였을 때와 결정립과 결정립계의 메쉬를 다르게 적용하였을 때의 결과 간 차이가 없음을 확인하였다.



<그림 5> (a) 500nm^3 큐빅 내 생성된 8개의 결정립 및 내부 단면

(b) 결정립 내부와 결정립계에서 형성된 크기가 다른 메쉬

제 3 장

결정립의 크기에 따른 영구자석의 특성 변화

3.1 모델링 및 전산모사 조건

앞서 언급한 바와 같이 보자력은 입자의 크기가 단자구에 가까워질수록 높아진다. 자석 내에는 수많은 결정립이 존재하게 되는데 이론상으로 결정립의 크기(D)가 작아질수록 보자력은 아래와 같은 수식(III.1)과 같이 증가한다[30].

$$H_c = a - b\ln D \qquad \text{(III. 1)}$$

본 계산에서는 단자구의 크기 혹은 단자구 이내의 크기를 가지는 결정립을 모델링하여 결정립 크기에 따른 보자력의 변화와 그 변화의 원인을 분석해보았다. 계산을 위해 다음과 같이 모델링을 하였다. 각 변이 500nm인 정육면체 내 결정립의 수를 8개, 27개, 64개를 형성시켰다. 각 모델의 평균 결정립 크기는 250nm, 166nm, 125nm에 해당한다[그림 8]. 결정립의 자기상수는 $M_s = 1.61T$, $A_{ex} = 12.5\,pJ/m$, $K_1 = 4.5\,MJ/m^3$ 을 적용하였고[33], 결정립계의 상수 값은 $M_s = 0.03T$, $A_{ex} = 1\,pJ/m$, $K_1 = 0\,MJ/m^3$ 으로 고정하였다. 결정립에 비한 상대적인 결정립계의 두께는 0.05 혹은 그 이하로 형성시켜 결정립

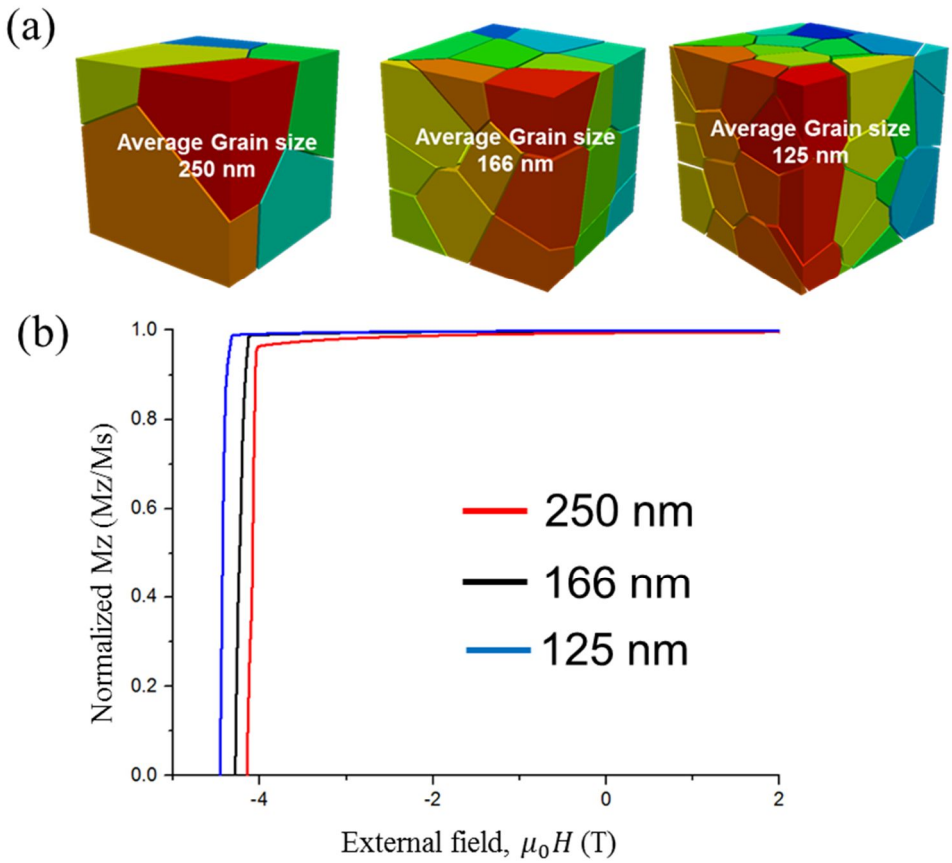
크기에 따라 결정립계의 두께 또한 일정 비율로 변화시켰다. 모델링 후 결정립 크기에 따른 보자력을 계산하고, 그 원인을 분석하기 위해 역자구 형성 시 내부의 반자장의 분포를 계산하였다.

3.2 결정립 크기 변화에 따른 보자력 및 에너지 변화

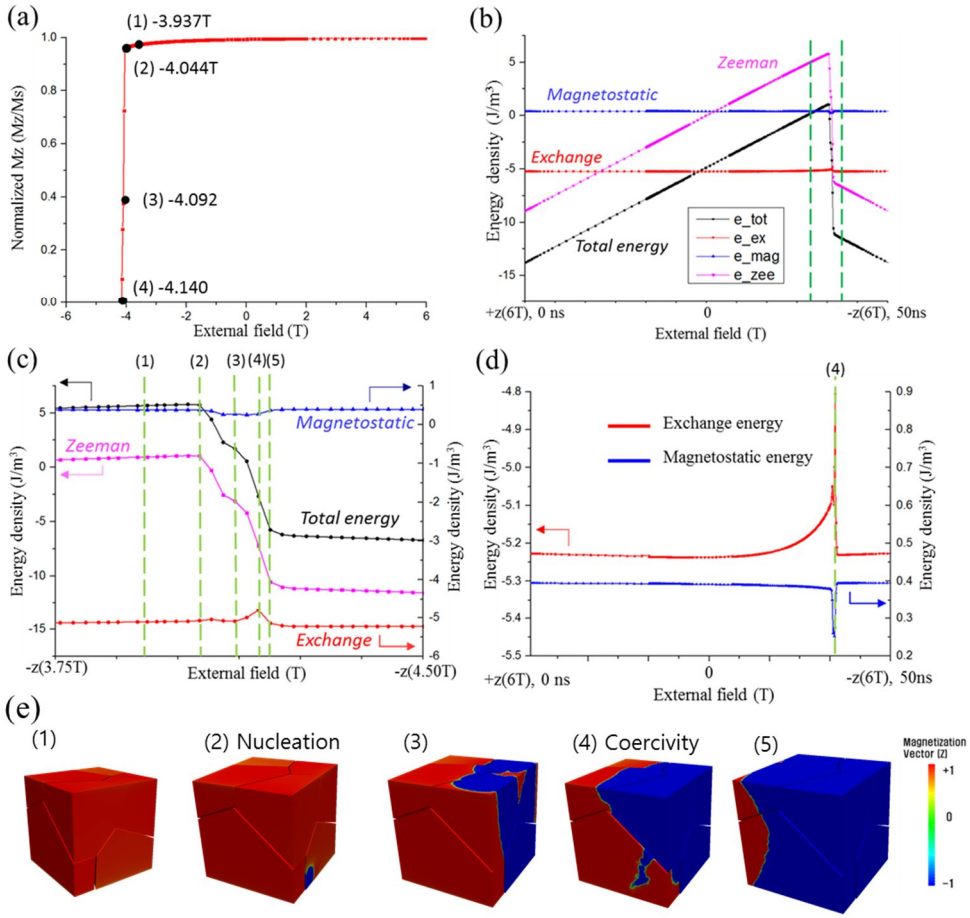
평균 결정립의 크기가 250nm, 166nm, 125nm 일 때 z축으로 외부자장을 인가하며 자기이력곡선을 구하였다. 결정립의 크기가 작아짐에 따라 보자력이 감소하는 것을 확인 할 수 있다<그림 6>. 이 경향성은 앞서 설명한 결정립 크기에 따른 보자력 변화의 경향성과 일치한다.

앞서 설명한 바와 같이 스핀에 영향을 주는 유효자장은 전체에너지를 자화 벡터로 변분 미분한 값이며, 그 전체 에너지는 Zeeman 에너지, 정자기에너지, 교환에너지, 자기이방에너지를 포함한다. 외부자장 하에서 각 에너지가 변함에 따라 자화 상태의 변화를 분석하였다. <그림 7>은 결정립의 크기가 250nm 일 때 외부자장이 –z 방향으로 증가하면서 변하는 각 에너지를 나타내었다. <그림 7.(a)>의 자기이력곡선에서 자화 반전이 일어나는 부분에서의 에너지의 분포를 분석하였다. <그림 7.(b)>를 보면 외부자장이 인가됨에 따라 Zeeman 에너지가 증가하고 그 값이 지배적으로 전체에너지를 결정한다. Zeeman 에너지의 변화가 일어나는 시점을 전 후로 국부적으로 생기는 정자기에너지와 교환에너지의 변화를 분석하기 위해 −3.75T 부터 −4.5T까지 확대하여

분석을 진행하였다. <그림 7.(c)>에서 보면 전체에너지와 Zeeman 에너지는 −4.044T 일 때 그 최댓값을 가진다. 그 때의 자화는 <그림 7.(e)>에서 (2) 역자구 형성에 해당한다. 역자구가 형성된 지점은 전체에너지가 최댓값인 지점으로 에너지적으로 불안정하다. 따라서, 전체에너지를 감소시키기 위해 역자구가 전파하게 된다(3). 그 결과, 전체 자화는 줄어들게 되면서 정자기에너지와 교환에너지의 변화가 가장 크게 일어나며, 전체 자화가 0이 되는 보자력 지점에 위치한다(4). 이후 전체적으로 역자구가 전파되며 −z 방향으로 모든 스핀이 배열된다.



<그림 6> (a)500nm^3 큐빅 내 생성된 결정립 모델. (a) 8개 결정립(평균 결정립 크기 250nm), 27개 결정립(평균 결정립 크기 166nm) 64개 결정립(평균 결정립 크기 125nm) (b) 각 결정립 모델의 자기이력곡선. 결정립의 크기가 감소하면서 보자력이 증가하는 것을 확인 할 수 있다.



<그림 7> 결정립 크기가 250nm 일 때 외부자장 변화에 따른 에너지 변화. (a) 자기이력곡선 (b) 외부 자장 6T ~ −6T 전 범위에서 에너지 변화. (c) −3.75T ~ −4.5T 범위에서 확대하여 각 최댓값 및 변화 시 자화 상태. (d) 교환 에너지 및 정자기 에너지의 에너지변화. (e) 각 위치에서의 자화 상태.

3.3 결정립 크기 변화에 반자장 크기 변화

앞선 자기이력곡선에서 확인 할 수 있듯이 결정립의 크기가 감소함에 따라 보자력이 증가한다. 그 원인을 분석하기 위해 내부의 반자장의 크기를 분석해보았다. 반자장은 아래와 같은 수식으로 정의된다.(III.2) 외부자장 하에 놓여있는 자성체의 자화값을 M이라 하면, 반자장 H_d는 M에 비례한다. 이 때, N_d를 반자장계수라고 한다. 내부에서 형성되는 자석의 자화 방향과 역방향의 자장을 의미한다. 자성체 내에서 유효하게 작용하는 자장은 외부 자장과 반자장의 크기를 합한 자장이 된다.

$$H_d = -\frac{N_d M}{\mu_0} \qquad \text{(III. 2)}$$

계산을 위해 잘게 쪼갠(Mesh)모델링 자석의 각 Element에서 반자장 벡터를 계산하고 그 벡터의 크기를 얻어 전체의 반자장 벡터를 계산하였다. 반자장의 크기를 분석하기 위해 500nm^3 크기의 큐빅을 z축으로 2nm의 두께를 가지도록 250개의 xy평면으로 나누었다. 각 xy평면에서 반자장의 크기가 최대가 되는 값을 얻어 z축으로의 반자장 분포도를 계산하였다.

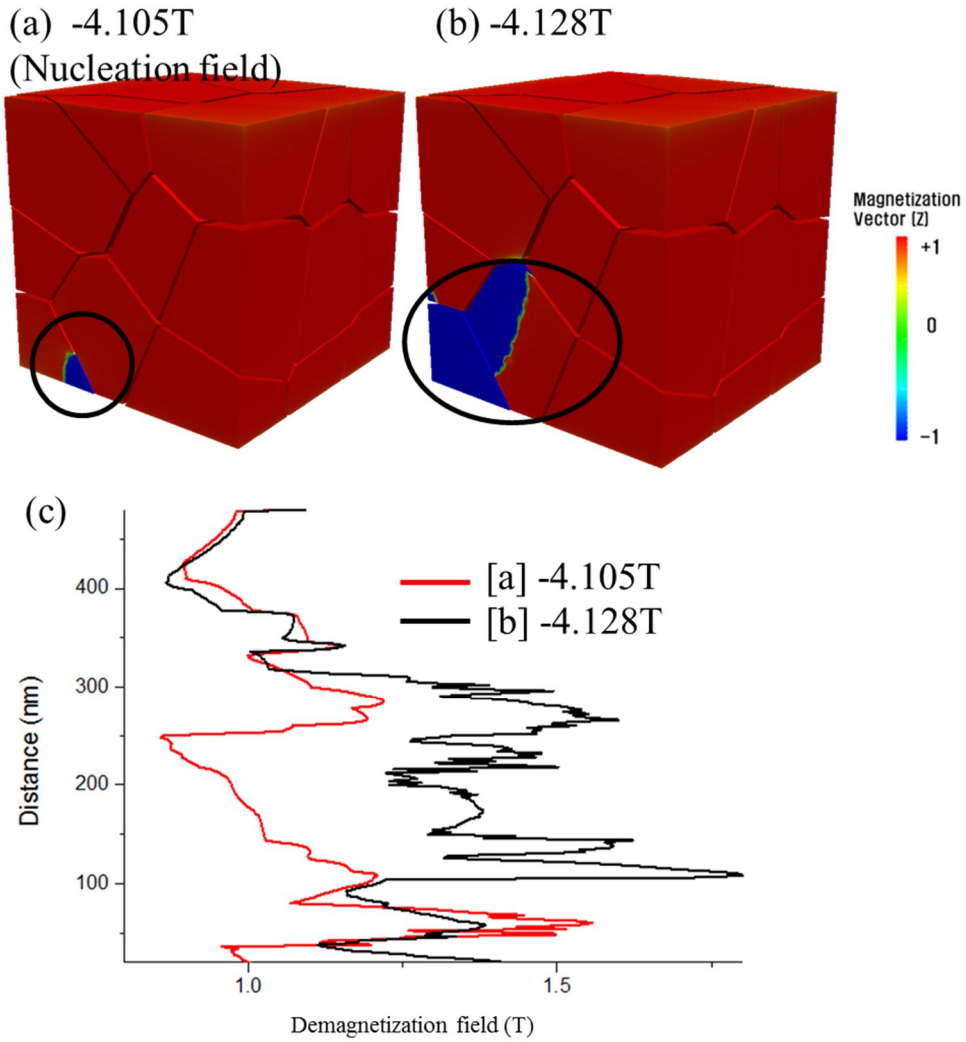
우선, 결정립의 크기가 166nm일 때 반자장의 분포를 분석해보았다. <그림 8>의 (a)는 –z축 방향으로 4.105T가 인가될 때 역자구가

형성되는 역자구 형성 자장 하의 자화를 나타내고, (b)는 −4.218T가 인가될 때 역자구가 형성 된 후 전파될 때의 자화를 나타낸다. 각 경우의 역자구가 존재하는 지점에서 반자장의 크기가 최대가 되는 것을 (c)를 통해 확인 할 수 있다. 또한 (a) −4.105T 에서 형성된 역자구가 (b)−4.128T 와 같이 전파되면서 (c)의 반자장 분포도의 최댓값 또한 같이 변화하는 것을 알 수 있다.

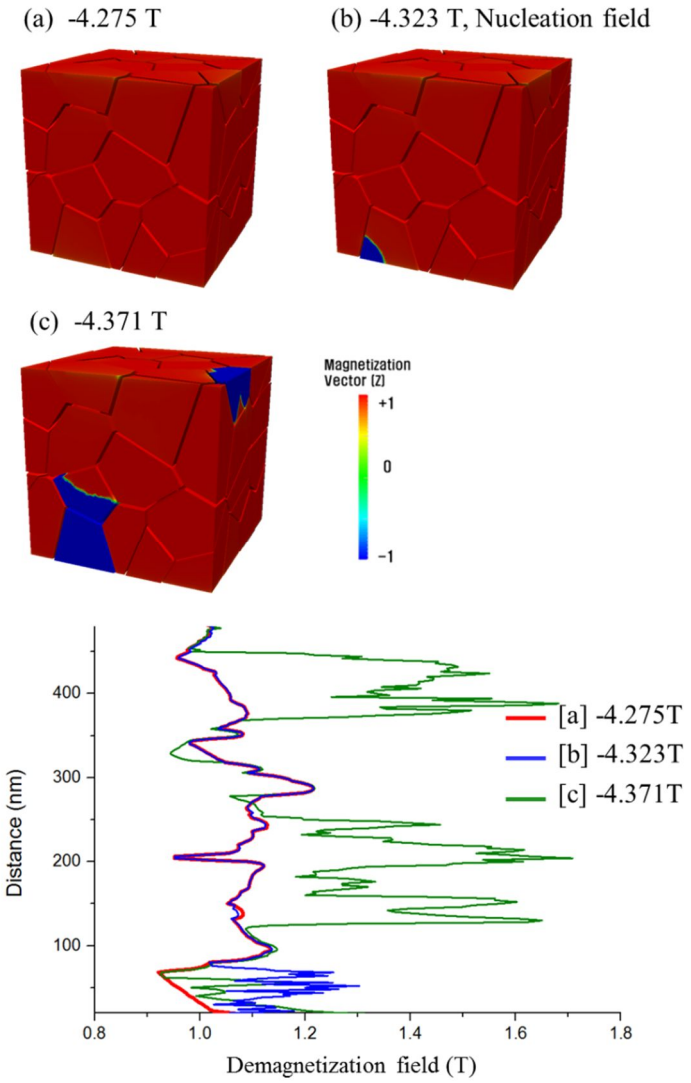
다음으로 결정립의 크기가 더 작은 125nm의 반자장 분포를 분석해보았다. <그림 9>의 (a) −4.275T 는 역자구가 형성되기 직전의 자화를 나타내고, (b) −4.323T 는 역자구가 형성되는 외부 자장 하의 자화를 나타낸다. (c) −4.371T는 역자구가 형성된 후 전파될 때의 자화를 나타낸다. 각 경우의 반자장 분포를 (d)에 나타내었다. (a)에서 (b)로 진행함에 따라 큐빅의 아래에서 역자구가 형성된다. 이 변화는 (d)에서 [a], [b]의 반자장 분포도에서 100nm 이하의 높이에서만 반자장의 크기가 국부적으로 변하는 것으로 설명할 수 있다. 다음으로 (c) −4.371T 로 외부 자장이 커짐에 따라 역자구는 진행하고 큐빅의 윗 부분에서 새로운 역자구가 형성된다. 이는 반자장 분포도에서 [c]를 보면 쉽게 확인 할 수 있다. 결론적으로 역자구가 형성되는 지점 및 역자구의 계면에서 반자장의 크기는 최대가 되고 역자구가 전파하고 형성되는 지점에서만 국부적으로 반자장의 크기가 변화함을 알 수 있다.

다음으로 결정립 크기에 따른 보자력 변화를 분석하기 위해 250nm, 166nm, 125nm 의 평균 결정립 크기를 가지는 세 모델에 대해 역자구가 형성되는 순간의 외부자장에서 내부의 반자장의 크기를 앞선

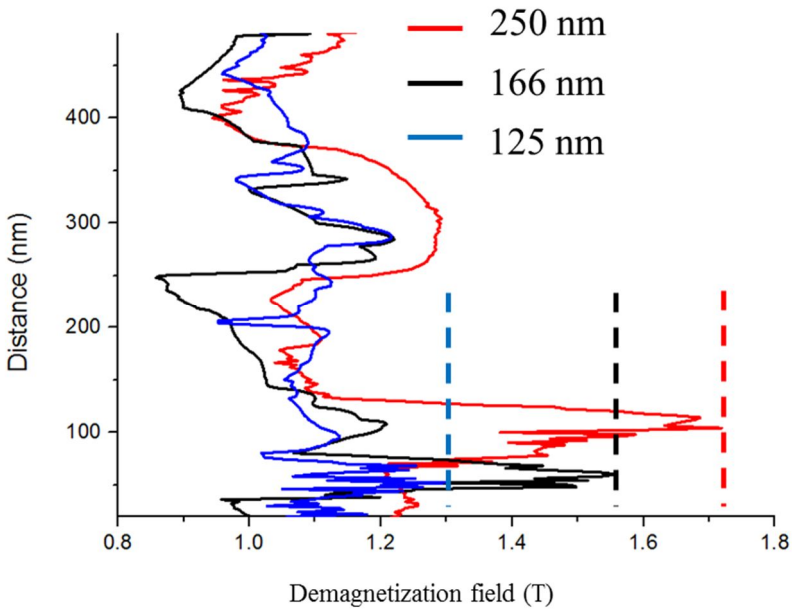
방법과 같이 나타내었다. <그림 10>에서 확인 할 수 있듯이, 결정립의 크기가 작아질수록 반자장의 최댓값이 작아진다. 큰 반자장은 인접한 결정립이 낮은 외부자장에서도 자화반전이 일어나게 만드는 주요한 원인이다. 이 요소가 결정립 크기에 따른 보자력의 변화를 가져오게 되는데 본 계산에서 결정립 크기에 따라 반자장의 크기가 변함을 확인하였고 그 원인을 분석하였다.



<그림 8> 평균 결정립 크기가 166nm인 모델의 (a) 역자구 형성되는 순간의 외부자장 −4.105T에서의 자화 상태. (b) 역자구가 형성된 후 전파될 시 자화 상태. (c) 내부의 반자장 크기 분포도.



<그림 9> 평균 결정립 크기가 125nm인 모델의 (a) 역자구 형성 전 외부자장 −4.275T 하에서 자화 상태 (b) 역자구 형성 외부자장, −4.323T에서의 자화 상태 (c) 역자구 형성 후 전파될 시 자화 상태 및 각 상태에서 내부의 반자장 크기 분포도.



<그림 10> 결정립 크기에 따른 반자장 분포도. 결정립 크기가 작아짐에 따라 역자구가 형성되는 위치에서 반자장 크기의 최댓값이 작아지는 것을 확인 할 수 있다.

제 4 장

결정립계의 자기적 물성에 따른 영구자석의 특성 변화

4.1 모델링 및 전산모사 조건

앞서 기술된 것과 같이, 영구자석의 결정립 및 결정립계의 자기적 물성에 따라 보자력을 비롯하여 자석의 특성이 변화한다. 실험적으로 약 10nm 혹은 그 이하로 매우 얇게 생성된 결정립계의 자기적 성질을 예측하기 쉽지 않으므로, 본 연구를 통해 결정립계의 자기적 물성 중 대표적으로 포화자화와 Aex 값을 변화하며 NdFeB 자석의 특성을 관찰하였다.

보로노이 다이어그램을 이용하여 $500\,nm^3$의 정육면체 내에 8개의 결정립을 형성시켰다. 결정립계의 두께는 약 10nm 혹은 그 이하이며, 평균 결정립 크기는 250nm 이다. 결정립의 자기 상수 값은 $M_s = 1.61T$, $A_{ex} = 12.5\,pJ/m$, $K_1 = 4.5\,MJ/m^3$ 을 적용하였다[33]. 다음으로, 결정립계의 자성치는 [표 1]과 같이 적용하였다. 결정립계의 포화자화 값이 보자력에 미치는 영향을 확인하기 위해 우선 A_{ex} 값은 고정시키고, 포화자화 값을 0.03T ~ 1.1 T까지 변화시키며 자화반전거동을 관찰하였다.

Condition	1	2	3	4	5	6	7
M_s of GB phase (M_s/M_{s0})	0.03T 0.013	0.1T 0.062	0.3T 0.186	0.5T 0.310	0.7T 0.434	0.9T 0.559	1.1T 0.683
A_{ex}	1pJ/m						

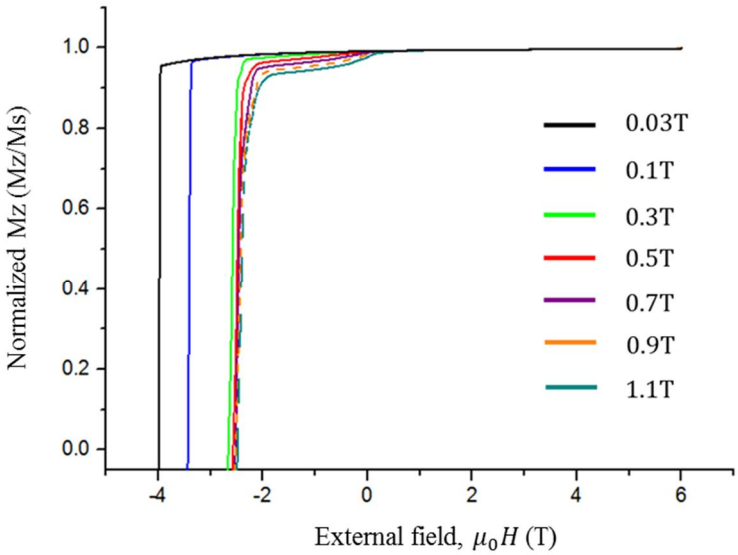
<표 1> 결정립계의 포화자화를 변화한 계산 조건.
(M_s – 결정립계의 포화자화, M_{s0}–결정립의 포화자화)

4.2 결정립계의 포화자화값 변화에 따른 자석 특성

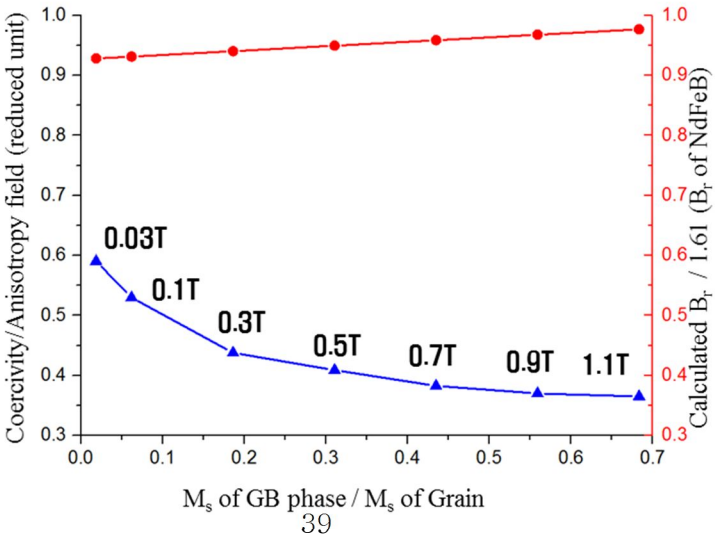
위 <표 1>과 같이 결정립계의 포화자화값을 변화시키며 전산모사를 수행하였다. 외부자장은 −6 Telsa 부터 6 Tesla 까지 가하였고, 각 조건에 따른 감자곡선은 <그림 11>과 같다. <그림 11>에서 확인 할 수 있듯이 결정립계의 포화자화값이 증가할수록 자석의 보자력이 감소한다. 결정립계의 포화자화값이 증가하면서 보자력은 감소하는 경향을 보이는 반면, 전체 모델의 잔류자화 값은 증가한다. 앞서 설명했듯이, 자석의 최대에너지적은 잔류자화와 보자력이 클수록 그 값이 커진다. 따라서 최대에너지적은 단지 결정립계가 비자성체에 가까워질수록 최댓값을 가지지 않을 것이며, 그 경향성을 파악하기 위해 각 계산 조건에서의 최대에너지적을 계산해보았다. <그림 12>를 보면 모델의 최대에너지적의 경향성은 보자력의 경향성과 다른 것을 확인 할 수 있다. 최대에너지적의 경우 결정립계의 포화자화가 결정립의 포화자화에 비해 약 0.3 의 비율을 가질 때 최대에너지적이 가장 높게 나타났다. 반면 그 최대에너지적의 변화는 최댓값 대비 최솟값의 변화가 약 2.5%에 그친다. 보자력이 상당히 감소했음에도 불구하고 이처럼 변화가 작은 이유는 (a)B−H curve 에서 확인할 수 있듯이 2사분면에서 조건이 변함에 따라 차이가 거의 나지 않기 때문이다. 수식(I.2)과 같이 보자력의 크기가 충분히 크면, 최대에너지적은 보자력의 함수가 아니게 된다. 온도에 따라 치명적인 감소하는 경향성을 보이는 것은 보자력이기 때문에 본 계산에서 보자력의 변화에 대해 초점을 맞추고 분석을

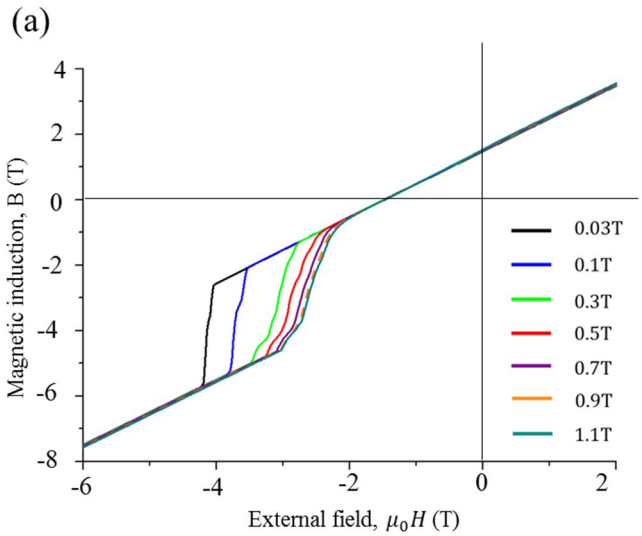
진행하였다.

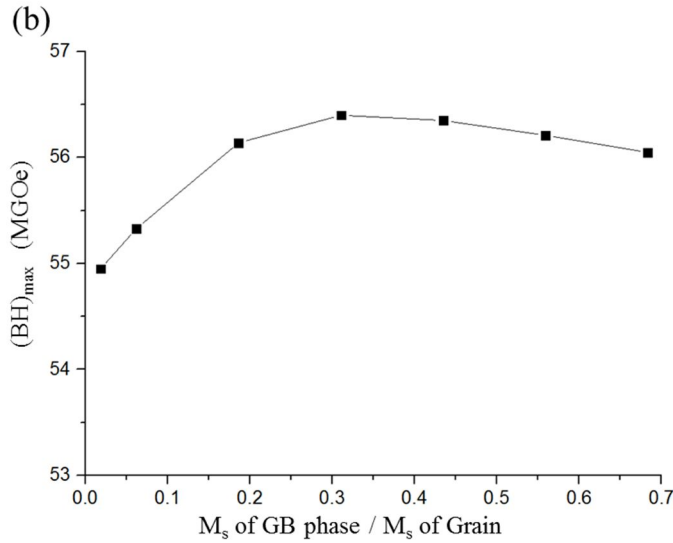
결정립계의 포화자화값에 따른 보자력 변화의 원인을 분석하기 위해 결정립계의 포화자화값이 0.1T, 0.5T, 1.1T 일 때, 자화반전 과정을 분석하였다. 각 모델에서 역자구가 형성될 때 자화벡터의 분포를 <그림 13>에 나타내었다. 결정립계의 포화자화가 0.1T(0.06), 0.5T(0.31), 1.1T(0.68) 과 같이 증가함에 따라 각 모델의 역자구 형성 지점이 증가하는 것을 확인 할 수 있다. 결정립계의 포화자화가 증가하면 상대적으로 낮은 외부자장에서도 역자구 형성이 쉽게 일어난다. 따라서 역자구가 형성되는 지점의 수가 증가하게 되고 각 지점에서 결정립 내부로 전파되면서 자화반전이 일어나므로 낮은 보자력을 가지게 된다. 따라서 결정립계의 포화자화가 클수록 결정립계가 외부 자장에 취약해지며, 결과적으로 역자구 형성 지점이 증가하여 보자력이 감소하게 됨을 확인하였다.



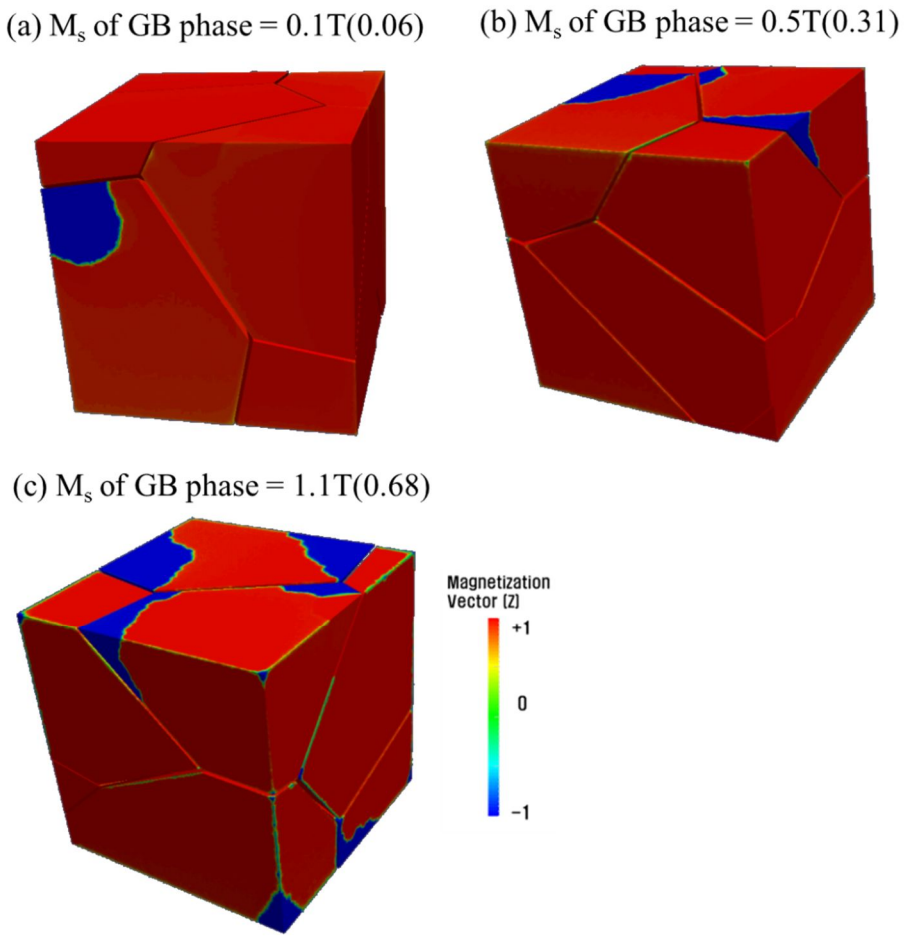
<그림 11> 결정립계의 포화자화가 달라질 때 자기이력곡선, 보자력 및 잔류자화.







<그림 12 > 결정립계의 포화자화 변화에 따른
(a)B-H 곡선 (b) 최대에너지적



<그림 13> 결정립계의 포화자화 값에 따른 역자구 형성 시 각 모델의 자화 (결정립계의 M_s / 결정립의 M_s)

4.3 결정립계의 A_{ex}값 변화에 따른 자석 특성

앞서 결정립계의 포화자화 값의 변화에 따른 영구자석의 자기적 특성을 분석하였다. 앞선 시뮬레이션에서는 결정립계의 A_{ex}를 1pJ/m 로 고정하고 포화자화만 변화하였다. 하지만 포화자화와 A_{ex} 는 자성체에서 독립적인 상수가 아니다. 따라서 어느 상수를 고정시키고 영향을 분석하는 것은 정확한 해석이 되지 못할 수 있다.

최근 실험적 관측을 통해 결정립계의 포화자화를 예측한 반면[18-20] 결정립계의 A_{ex} 값은 알려진 바가 없다. 또한, 본 연구와 비슷하게 영구자석을 대상으로 미소자기 전산모사를 수행한 선행연구에서도 결정립계의 A_{ex} 값의 경향성을 찾아보기 힘들다[34-36]. 따라서 본 연구에서는 결정립계의 A_{ex} 값의 영향을 면밀히 분석해 봄으로써 그 값의 변화가 영구자석의 특성에 어떠한 영향을 끼치는지 확인하였다.

본 계산에서는 <표 2>와 같이 결정립계의 포화자화가 다른 3가지 경우에서 A_{ex} 값을 1, 3, 6, 9pJ/m 로 변화하며 전반적인 경향성을 살펴보았다. 결정립계의 포화자화가 다른 3가지 경우 각 A_{ex}에 따라 감자곡선을 <그림 14>에 나타내었다. (a),(b),(c)는 각각 결정립계의 포화자화가 0.1T(0.06), 0.5T(0.31), 0.9T(0.56)일 때이다. 그래프에서 확인할 수 있듯이 포화자화와 달리 A_{ex}의 변화에 따라 보자력이 크게 변화하지 않는다. 결정립계의 포화자화가 0.1T(0.06)일 때 A_{ex}가 다른 4가지 경우에 대하여 그 최댓값에 비해 최솟값은 6.65% 변화하며 0.5T(0.31)일 때는 8.13%, 0.9T일 때는 6.12% 변화한다. 그

변화의 폭이 크지 않으며, 가장 크게 변화하는 0.5T(0.31)인 경우를 더 분석해보았다. <표 3>에 결정립계의 포화자화가 0.5T(0.31)일 때, A_{ex}값 변화에 따른 보자력을 나타내었다. 포화자화 값에 비해 극단적인 A_{ex}인 1pJ/m, 9pJ/m 를 제외하고 3pJ/m와 6pJ/m 인 경우를 비교하면 보자력은 각각 2.711T, 2.631T 로 그 차이가 매우 작다. 따라서 A_{ex}가 영구자석 특성에 끼치는 영향은 포화자화에 비해 작음을 확인할 수 있다.

다음으로 앞선 결과의 원인을 분석하기 위해 자화반전 거동을 분석하였다. 대표적으로 보자력의 변화가 가장 큰 결정립계의 포화자화가 0.5T(0.31)인 경우의 자화반전을 <그림 15>에 나타내었다. (a)결정립계의 A_{ex}가 1pJ/m(0.08)인 경우와 (b)결정립계의 A_{ex}가 3pJ/m(0.24)인 두 가지 경우를 먼저 비교해보면, 역자구가 동일한 지점에서 형성되고 인접한 결정립으로 전파되지 않고 역자구가 형성된 결정립 내부로 우선적으로 전파가 일어나는 것을 확인 할 수 있다. 이때, 결정립계는 역자구의 전파를 비교적 효과적으로 막아주는 역할을 한다. 다음으로 (c)결정립계의 A_{ex}가 6pJ/m(0.48)인 경우와 (d)결정립계의 A_{ex}가 9pJ/m(0.72)인 경우를 비교해보면, Region.1 에서는 두 경우 역자구가 결정립들의 모서리에 걸쳐 형성되고 각각의 결정립으로 전파되는 자화반전 거동을 보인다. 하지만, Region.2 에서는 (c)의 경우 인접한 결정립으로 전파되지 않는 거동을 보이며, (d)의 경우는 앞선 거동과 같이 역자구가 결정립들의 모서리에서 형성되어 인접한 결정립으로 전파된다. 결론적으로 결정립계의 A_{ex}값은 자화반전이 일어날 때 역자구의 형성 위치와 결정립 내부 혹은 인접한

결정립으로 쉽게 전파되는 정도에 기여한다고 볼 수 있다.

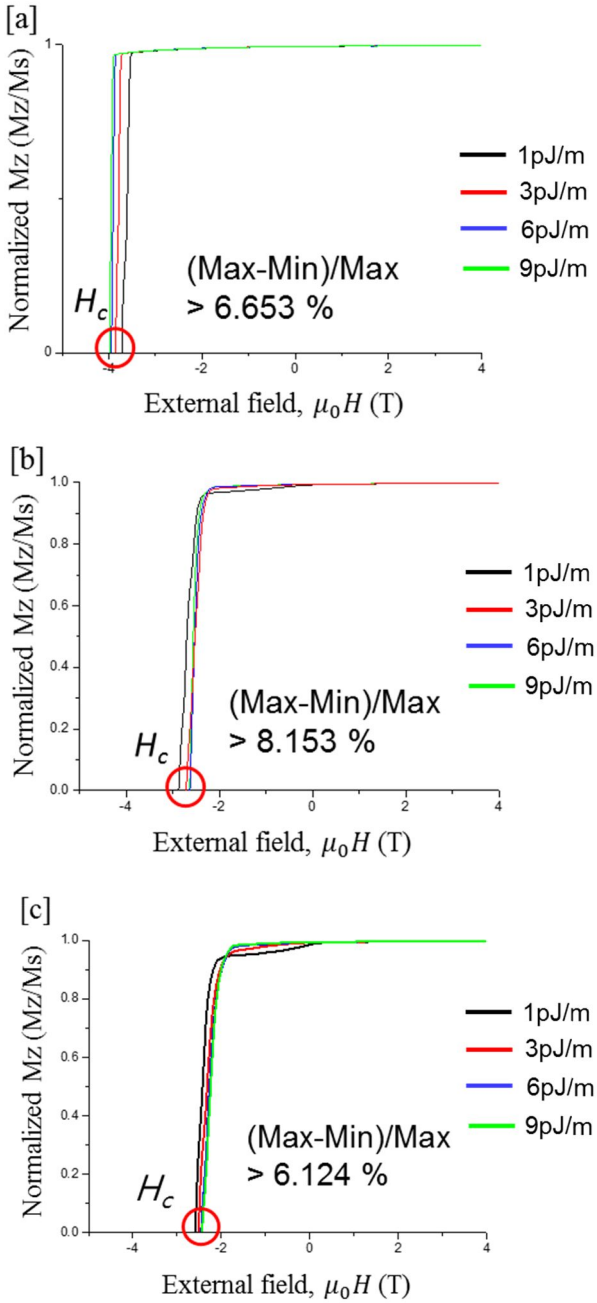
앞선 결정립계의 포화자화 값에 따른 보자력 변화의 그래프와 결정립계의 A_{ex}의 변화에 따른 보자력 변화의 그래프를 같이 보며 그 두 상수의 영향성을 분석해보았다. 앞서 설명했듯이, 결정립계의 포화자화 값에 따른 보자력 변화는 가시적으로 크다. 하지만, <그림 16>에서 결정립계가 어느 정도의 포화자화 값을 가지는 0.5T(0.310), 0.9T(0.559)인 경우에서 A_{ex}의 변화에 따른 보자력 변화는 매우 작음을 확인할 수 있다. 잔류자화 또한 변화가 크지 않으므로, 최대에너지적에도 큰 변화를 가져오지 못할 것이다. 이를 통해 결정립계의 A_{ex}를 대변하는 Exchange energy 의 변화(IV.1)보다 dipole-dipole energy(IV.2)가 더 유효하게 자화반전에 영향을 준다는 결론을 내릴 수 있다.

$$\Delta E_{exchange} = A\frac{|\nabla M|^2}{M_S^2} \qquad \text{(IV. 1)}$$

$$\Delta E_{dipolar} = -\int \frac{\nabla \cdot M(r')}{|r-r'|}dV + \int \frac{n \cdot M(r')}{|r-r'|}dS \qquad \text{(IV. 2)}$$

Ms of grain (Ms / Ms_0)	0.1T (0.06)	0.5T (0.31)	0.9T (0.68)
A_{ex} of GB phase (pJ/m)	1, 3, 6, 9 pJ/m		

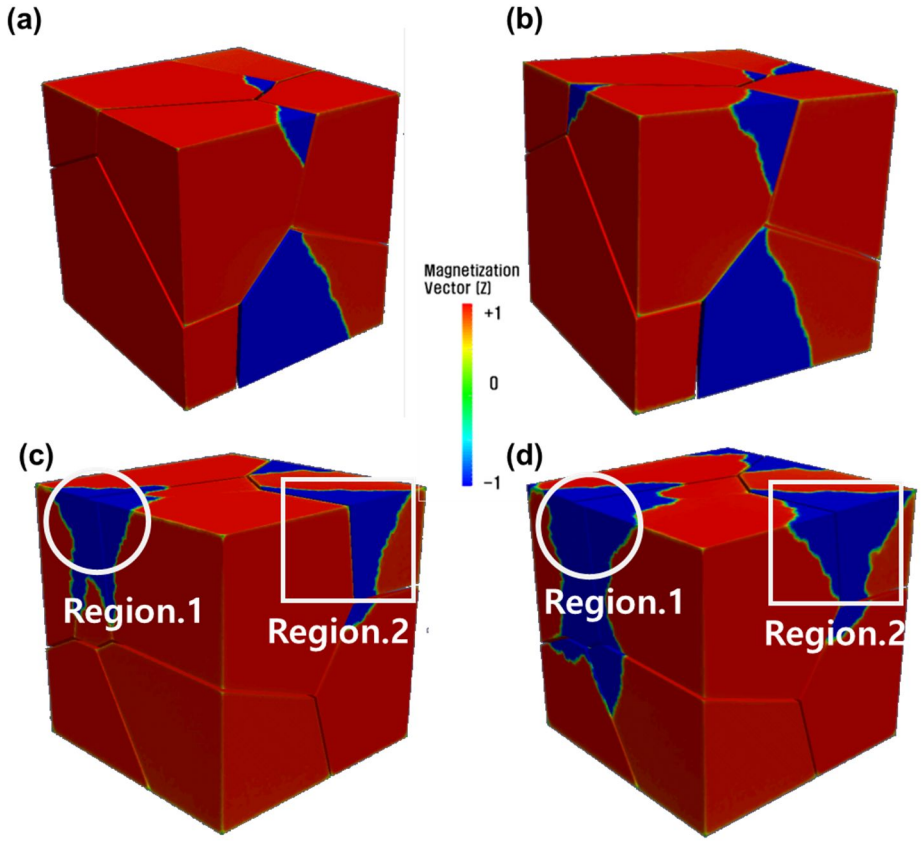
<표 2> 결정립계의 포화자화가 0.1T, 0.5T, 0.9T 일 때 결정립계의 A_{ex}를 1, 3, 6, 9 pJ/m 로 변화시킨 조건. (M_s – 결정립계의 포화자화, M_{s0}– 결정립의 포화자화)


[a]
Normalized Mz (Mz/Ms)
External field, $\mu_0 H$ (T)
1pJ/m
3pJ/m
6pJ/m
9pJ/m
(Max-Min)/Max
> 6.653 %
H_c
[b]
Normalized Mz (Mz/Ms)
External field, $\mu_0 H$ (T)
1pJ/m
3pJ/m
6pJ/m
9pJ/m
(Max-Min)/Max
> 8.153 %
H_c
[c]
Normalized Mz (Mz/Ms)
External field, $\mu_0 H$ (T)
1pJ/m
3pJ/m
6pJ/m
9pJ/m
(Max-Min)/Max
> 6.124 %
H_c

M_s of GB phase (M_s/M_{s0})	A_{ex} of GB (A_{ex} of GB / A_{ex} of Grain)	Hc (T)
0.5 T (0.31)	1 pJ/m (0.08)	2.870
0.5 T (0.31)	3 pJ/m (0.24)	2.711
0.5 T (0.31)	6 pJ/m (0.48)	2.631
0.5 T (0.31)	9 pJ/m (0.72)	2.636

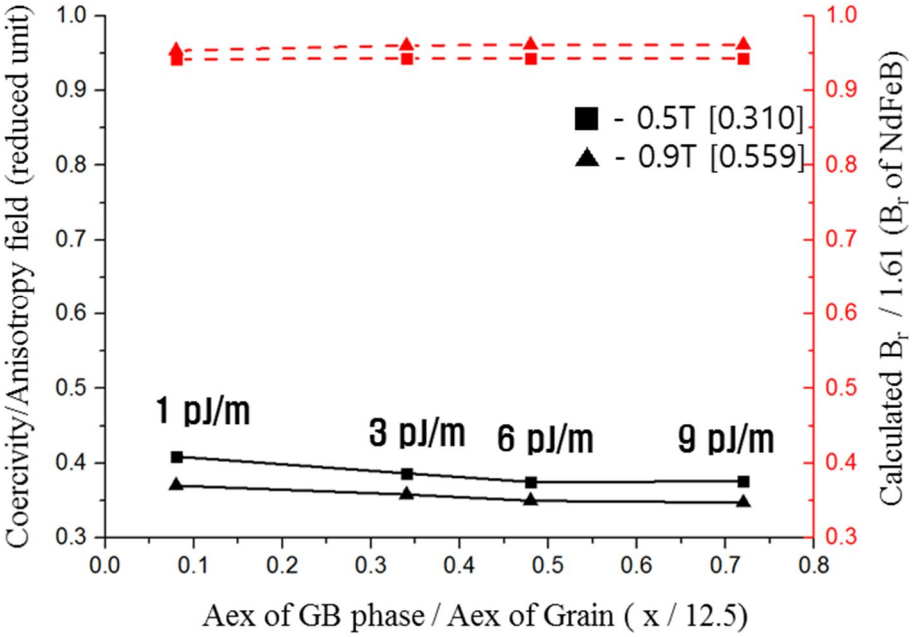
<그림 14> 결정립계의 포화자화가 (a) 0.1T(0.06) (b)0.5T(0.31) (c)0.9T(0.68) 일 때 A_{ex} 변화에 따른 자기이력곡선 및 보자력의 최댓값, 최솟값의 차이.

<표 3> 결정립계의 포화자화가 0.5T(0.31)일 때, A_{ex}값에 따른 보자력



<그림 15> 결정립계의 포화자화가 0.5T(0.31)일 때 A_{ex}가 (a)1pJ/m (b)3pJ/m (c)6pJ/m (d)9pJ/m 일 때 역자구 형성 구도.

Region.1 인접한 결정립에 걸쳐 역자구가 형성되고 전파되는 것을 볼 수 있다. 반면 Region.2에서는 (c)6pJ/m의 경우 결정립 내부로 전파되고 (d)9pJ/m의 경우 결정립에 걸쳐 역자구가 전파된다.



<그림 16> 결정립계의 포화자화가 0.5T(0.310), 0.9T(0.559)일 때 A_{ex} 에 따른 보자력 및 잔류자화.

제 5 장

결정립의 자화용이축의 배열에 따른 영구자석의 특성 변화

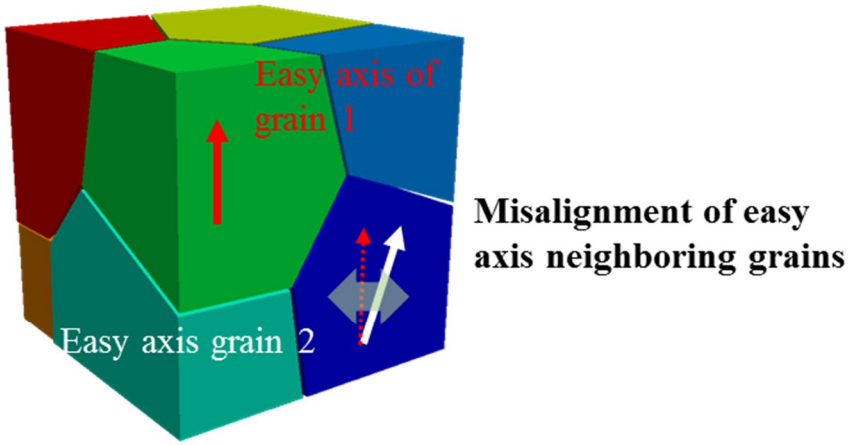
5.1 이방성 자석의 결정립의 자화용이축

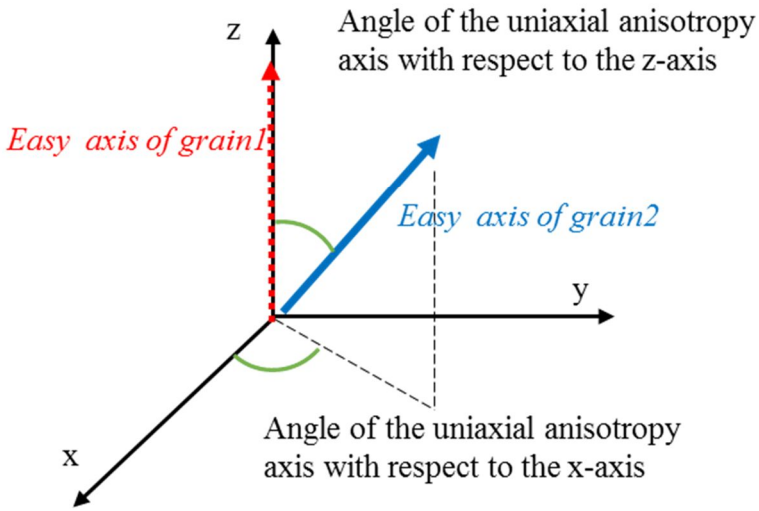
$Nd_2Fe_{14}B$의 결정구조는 Tetragonal 구조로 c축으로 자화용이축을 가진다. 따라서 미세구조를 제어함에 따라 등방성 혹은 이방성 자석을 제작할 수 있다. 이방성을 설명하는 모델은 Stoner-Wohlfarth가 제안한 외부 자장이 회전하며 달라지는 자기이력곡선에 대한 이론이 있다[11]. 이 모델은 일축자기이방성을 가지는 자성 입자가 뭉친 상황을 가정한다. 자기이방성 에너지를 계산해보면 $E_{an} = Ksin^2\theta$ 가 되고 E_{an}는 이방성 에너지, K는 자기이방상수, θ는 인가된 외부 자장과 입자의 자화용이축 간의 각도를 의미한다. 이 이방성 에너지는 자화용이축을 향하고 있는 자기모멘트를 자화곤란 방향으로 돌리는데 필요한 에너지를 의미한다. 이 에너지가 클수록 보자력이 강해지므로, 자석의 성능은 높아진다고 할 수 있다. 결정립 혹은 입자들의 자화용이축이 정렬되어 있는 자석을 이방성 자석이라 하며, 이 자석은 정렬된 방향에서만 우수한 특성을 보인다. 이에 반해, 자화용이축이 임의로 배열되어 있는 자석을 등방성 자석이라 하고 그 최대에너지적 값은 이방성 자석의 1/4 정도로 낮아진다.

실제 자석의 미세구조에서 모든 결정립이 한 방향의 자화용이축을 가지게 하는 것이 이상적이다. 아래 수식(V.1)은 이방성 자석의 이론적 최대에너지적 값을 나타낸다. J_r은 자석의 포화자화를 의미하고, V_{hm}은 결정립의 부피 분율, φ는 결정립 간 자화용이축의 각도를 의미한다. cosφ=1 이면 자화용이축 간 배열이 완전할 때가 된다. 하지만 제작을 하며 결정립 간 자화용이축의 배열이 조금씩 틀어지게 된다.

$$(BH)_{max} = \frac{1}{4 \cdot \mu_0} \cdot J_r^2 = \frac{1}{4 \cdot \mu_0} \cdot \left(J_s^2 \cdot \frac{\rho}{\rho_0} \cdot V_{hm} \cdot cos\varphi\right)^2 \quad (\mathrm{V.1})$$

본 연구에서는 결정립 간의 자화용이축 간 틀어짐 정도에 따라 보자력 및 영구자석의 특성에 어떠한 영향을 끼치는지 분석하였다. 500nm^3 큐빅 내 평균 결정립의 크기가 250nm인 8개의 결정립을 형성시켰고, 결정립의 상수는 $Nd_2Fe_{14}B$ 자석과 똑같이 적용하였고($M_s = 1.61T$, $A_{ex} = 12.5\ pJ/m$, $K_1 = 4.5\ MJ/m^3$) 결정립계의 상수는 $M_s = 0.03T$, $A_{ex} = 1\ pJ/m$, $K_1 = 0\ MJ/m^3$ 으로 고정하였다. 분석을 위해 <그림 17>과 같은 방법으로 인접한 두 결정립 간의 자화용이축 각도를 조정하였다. 한 결정립을 기준으로 z축 방향 및 x축 방향으로 틀어진 정도를 조절하며 결정립 간 자화용이축의 틀어짐 정도를 나타내었다. 큐빅 내 생성된 8개의 결정립 간 최대 틀어짐 정도를 5°, 10 °, 15 °, 20 °, 30 °, 60 ° 까지 변화시키며 계산을 진행하였다.



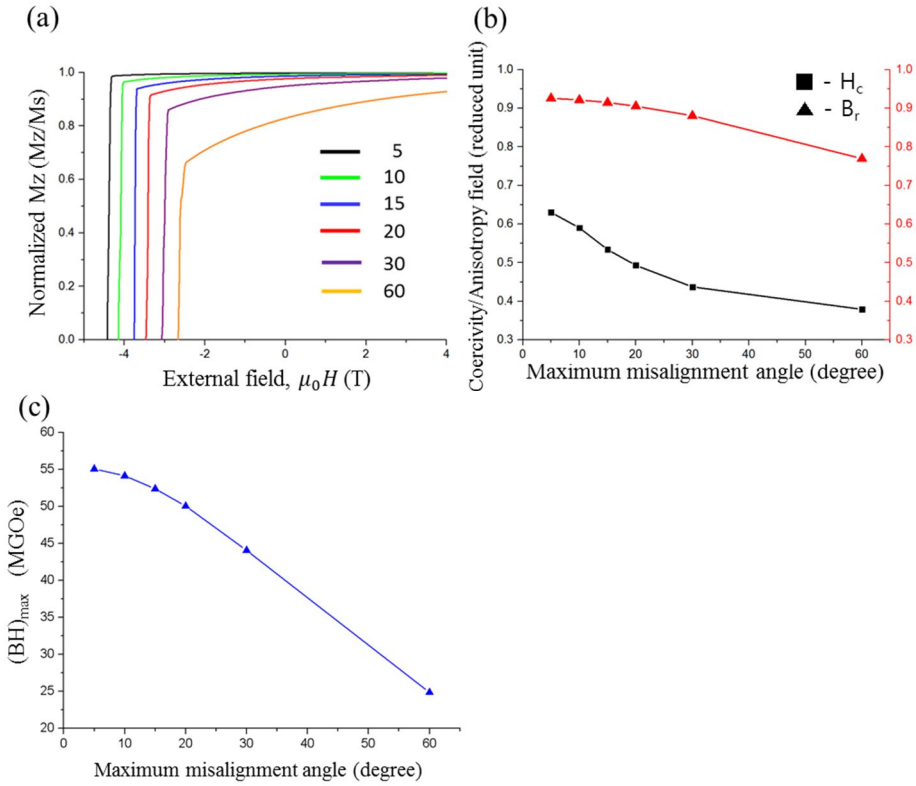


<그림 17> 인접할 결정립 간 자화용이축의 틀어짐.

5.2 결정립 간 자화용이축 배열 정도에 따른 자석 특성

앞서 설명한 각 조건에서 전산모사를 하여 자기이력곡선을 얻었다. 각 조건의 자기이력곡선과 보자력 및 잔류자화를 <그림 18>에 나타내었다. 자기이력곡선에서 확인할 수 있듯이 결정립 간 자화용이축의 틀어진 각도가 증가하면서 보자력은 감소한다. (b)에서 보자력과 잔류자화의 감소를 비교하면 두 값은 자화용이축의 틀어진 각도가 증가함에 따라 감소하는 경향을 보인다. 잔류자화는 틀어짐 각도가 약 20°까지는 큰 감소를 보이지 않으나 보자력은 완벽한 정렬부터 멀어짐에 따라 계속하여 감소하는 경향을 보인다. 따라서, 잔류자화의 감소보다 보자력의 감소가 조금 더 영향을 받는 것을 확인할 수 있다.

다음으로 위 자기이력곡선을 통해 최대에너지적을 계산하였다<그림 20.(c)>. 보자력 및 잔류자화의 감소로 인해 최대에너지적은 결정립 간 자화용이축이 틀어짐에 매우 치명적이다. 최대 틀어짐 각도가 약 10°가 넘어가면서부터는 선형적으로 감소하는 경향을 보인다. 반면 완벽한 정렬에 가까울수록 최대에너지적은 약 55MGOe 에 수렴되는 경향을 보인다. 따라서 영구자석의 최대에너지적을 높이기 위해선 결정립 간 자화용이축의 배열 또한 매우 중요한 요소이며 결정립 간 자화용이축의 틀어짐 각도가 최대 10° 이내로 모든 결정립의 자화용이축을 한 방향으로 배열시켜야 보자력 및 잔류자화의 손실을 줄이고 최대에너지적을 높일 수 있다.



<그림 18> 결정립 간 자화용이축의 오배열 정도에 따른

(a)자기이력곡선. (b) 보자력 및 잔류자화 (c)최대에너지적 변화

제 6 장

결 론

본 연구에서는 미소자기 전산모사를 이용하여 NdFeB 영구자석의 자화반전 시 에너지를 분석하고, 미세구조를 제어함으로써 보자력을 향상시키는 방법 및 그 원인에 대해 분석하였다. 역자구는 Zeeman 에너지가 최대가 될 때 형성되며, 전체 에너지를 감소시키기 위해 역자구가 전파된다. 역자구가 전파되며 정자기 에너지와 교환에너지의 변화가 최대가 될 때 보자력을 나타낸다. 결정립 크기가 작아질수록 역자구 형성 시 내부의 국부적인 반자장의 크기가 작아져서 인접한 결정립에 끼치는 영향이 줄어들어 결과적으로 보자력이 향상되었다. 또한 결정립계의 포화자화 값이 증가할수록 자화 반전 시 역자구 형성 지점의 수가 증가하며, 이는 보자력을 감소시킨다. 반면, 결정립계의 A_{ex} 는 역자구가 형성되고 전파되는 양상에 기여를 하고 보자력에는 큰 영향을 끼치지 않음을 알 수 있었다. 마지막으로, 결정립 간 자화용이축의 오배열은 보자력 및 잔류자화에 매우 치명적이므로, 이방성 자석의 경우 모든 결정립의 자화용이축을 10° 이내로 정렬해야 그 손실을 최소화 할 수 있다는 것을 알아내었다. 본 연구의 이러한 결과들은 중희토류를 삭제한 NdFeB 영구자석을 개발하는데 있어, 실험적으로 관찰 할 수 없는 자화 반전 거동 및 미세조직의 영향을 분석함으로써 실험이 진행되어야 할 방향에 대한 기반 지식을 제공하였다는데 그 의의가 있다.

참고 문헌

[1] J.M.D. Coey, *Permanent magnet applications*, Journal of Magnetism and Magnetic. Materials, 248, 441 (2001)

[2] K.J. Strnat, Modern *Permanent Magnets for Applications in Electro-Techonology*, Proceedings of the IEEE, 78,6 (1990)

[3] R.Skomski, J.E.Shield, D.J.Sellmyer, *Magnetics Technology International*, UKIP Media & Events, p.26-29 (2011)

[4] N.Jones, *Material science: The pull of stronger magnets*, Nature 472,22 (2011)

[5] J. F. Gieras, R.-J. Wang, and M. J. Kamper, Axial Flux Permanent Magnet Brushless Machines, 2nd Edition ed.: Springer, 2008.

[6] J. F. Gieras and M. Wing, Permanent Magnet Motor Technology: Design and Applications, 2nd Edition ed. New York: Marcel Dekker, 2002.

[7] Ümit Özgür, Yahya Alivov, Hadis Morkoç, *Journal of Materials Science : Materials in Electronics.* 20, 789 (2009)

[8] S Sugimoto, *Current status and recent topics of rare-earth permanent magnets*, Journal of Physics D: Applied Physics, 44, 064001 (2011)

[9] Nakamura H, Hirota K, Shimao M, Minowa T and Honshima M, *Magnetic properties of extremely small Nd-Fe-B sintered magnets*, IEEE Transactions on. Magnentics. 41, 3844 (2005)

[10] Sepehri-Amin H, Ohkubo T, Nishiuchi T, Hirosawa S and Hono K, *Coercivity enhancement of hydrogenation–disproportionation–desorption–recombination processed Nd–Fe–B powders by the diffusion of Nd–Cu eutectic alloys*, Scripta Materialia,63,11 (2011)

[11] Kneller E F and Hawig R, *The exchange-spring magnet: a new material principle for permanent magnets*, IEEE Transaction on Magnetics 27, 3588 (1991)

[12] *Magnetic Materials And Spintronics*, The Korean magnetic society, p.53-83

[13] E. C. Stoner and E. P.Wohlfarth, *A Mechanism of Magnetic Hysteresis in Heterogeneous Alloys*, Philosophical Transactions of the royal society A, 10,1098 (1948)

[14] R. Ramesh, K. Srikrishna, *Magnetization reversal in nucleation controlled magnets. II. Effect of grain size and size distribution on intrinsic coercivity of Fe-Nd-B magnets*, Journal of Applied Physcis 64,6416 (1988)

[15] K. Uestuener, M. Katter, W. Rodewald, *Dependence of the Mean Grain Size and Coercivity of Sintered NdFeB Magnets on the Initial Powder Particle Size*, IEEE Transaction on Magnetics 42, 2897 (2006)

[16] W.F. Li, T. Ohkubo, K. Hono, M. Sagawa, *The origin of coercivity decrease in fine grained Nd–Fe–B sintered magnets*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 321, 1100 (2009)

[17] H. Sepehri-Amin, Y. Une, T. Ohkubo, K. Hono, M. Sagawa, *Microstructure of fine-grained Nd–Fe–B sintered magnets with high coercivity*, Scripta Materialia 65,396 (2011)

[18] H. Sepehri-Amin, W.F. Li, T. Ohkubob, T. Nishiuchi, S. Hirosawa, K. Hono, *Effect of Ga addition on the microstructure and magnetic properties of hydrogenation–disproportionation–desorption–recombination processed Nd–Fe–B powder*, Acta Materialia 58,1309 (2010)

[19] Lihua Liu, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, M. Yano, A. Kato, T. Shoji, K. Hono, *Coercivity enhancement of hot-deformed Nd-Fe-B magnets by the*

eutectic grain boundary diffusion process, Journal of Alloys and Compounds 666,432 (2016)

[20] Teruo Kohashi, Kumi Motai, Takeshi Nishiuchi, Satoshi Hirosawa, *Magnetism in grain-boundary phase of a NdFeB sintered magnet studied by spin- polarized scanning electron microscopy*, Applied Physics Letters 104, 232408 (2014)

[21] T. Nakamura, A. Yasui, Y. Kotani, T. Fukagawa, T. Nishiuchi, H. Iwai, T. Akiya, T. Ohkubo, Y. Gohda, K. Hono, S. Hirosawa, *Direct observation of ferromagnetism in grain boundary phase of Nd-Fe-B sintered magnet using soft x-ray magnetic circular dichroism*, Applied Physics Letters 105, 202404 (2014)

[22] Y. Murakami, T. Tanigaki, T.T. Sasaki, Y. Takeno, H.S. Park, T. Matsuda, T. Ohkubo, K. Hono, D. Shindo, *Magnetism of ultrathin intergranular boundary regions in Nd–Fe–B permanent magnets*, Acta Materialia, 71, 370 (2014)

[23] T.T.Sasaki, T.Ohkubo, Y.Takada, T.Sato, A. Kato, Y. Kaneko, K. Hono, *Formation of non-ferromagnetic grain boundary phase in a Ga-doped Nd-rich Nd–Fe–B sintered magnet*, Scripta Materialia 133,218 (2016)

[24] Masato Sagawa, *Review of Sintering Process Development for Nd-Fe-B*, Reprinted from Journal of Materials Engineering, 13, 95 (1991)

[25] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies*. Phys. Z. Sowjetunion, 8, 153 (1935)

[26] W. F. Brown, Micromagnetics. John Wiley & Sons (1963)

[27] I. L. Landua, *Comparison of the scaling analysis of mixed-state magnetization data with direct measurements of the upper critical field for YBa2Cu3O7-x*. Journal of Physics-Condensed Matter, 20, 275229 (2008)

[28] T. L. Gilbert, *Lagrangian Formulation of the Gyromagnetic Equation of the Magnetization Field*. Physical Review, 100, 1243 (1955)

[29] Schrefl, T. & Fidler, J. *3D calculation of magnetization processes in Co/Pt multilayers*.

Journal of Magnetism and Magnetic. Materials, 155, 389 (1996).

[30] Zhigang Fan, Yugong Wu, Xuanhe Zhao, Yuzhu Lu, *Simulation of polycrystalline structure with Voronoi diagram in Laguerre geometry based on random closed packing of spheres,* Computational Materials Science 29,301 (2004)

[31] Gavin S.Abo, Yang-Ki Hong, Jihoon Park, Jaejin Lee ,Woncheol Lee, Byoung-Chul Choi, *Definition of Magnetic Exchange Length*, IEEE TRANSACTION ON MAGNETICS, 49,8 (2013)

[32] R. Ramesh and K. Srikrishna, *Magnetization reversal in nucleation controlled magnets*, Journal of Applied Physics, 65, 3734 (1989)

[33] Thomas Schrefl and Josef Fidler, *Finite Element Modeling of Nanocomposite Magnets,* IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS, 35,5 (1999)

[34] Jun Fujisaki, Atsushi Furuya, Yuji Uehara, Koichi Shimizu,Hirotaka Oshima, Tadakatsu Ohkubo, Satoshi Hirosawa, Kazuhiro Hono, *Micromagnetic Simulations of Magnetization Reversal in Misaligned Multigrain Magnets With Various Grain Boundary Properties Using Large-*

Scale Parallel Computing, IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS, 50, 11 (2014)

[35] Hirotoshi Fukunaga, Ryousuke Hori, Masaki Nakano, Takeshi Yanai, Ryutaro Kato, Yoshiyuki Nakazawa, *Computer simulation of coercivity improvement due to microstructural refinement*, Journal of Applied Physics 117, 17A729 (2015)

[36] J. Liu, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, K. Hioki, A. Hattori, T. Schrefl, K. Hono, *Grain size dependence of coercivity of hot-deformed Nd–Fe–B anisotropic magnets*, Acta Materialia 82, 336 (2015)

Presentation in conferences

Domestic Conference

1. [2016] 한국자기학회 2016 년도 임시 총회 및 하계 학술 연구 발표회, 부산, May 25-27,2016

Jinhyeok Choe, Jae-Hyeok Lee, Yeon Jun Chung, Bo Kyeong Han, and Sang-Koog Kim

"미소자기 전산모사를 이용한 NdFeB 영구자석의 미세구조 최적화"