

強磁場下における弱磁性粒子のチェーン構造形成の数値シミュレーション

日大生産工（院） ○片山 大輔 日大生産工 安藤 努
国立研究開発法人物質・材料研究機構 廣田憲之

1. 緒言

近年、強度や導電性、熱伝導性などの材料の物理的性質の観点から、カーボンファイバーやナノワイヤーなどの一次元構造材料への関心が高まっている。また、超伝導技術の発展により、強磁場を発生させることが容易となってきた。強磁場は高勾配磁気分離や、通常磁場には反応しないと認識されている弱磁性体の配向や構造形成に用いられている。弱磁性体の配向により、導電性や熱伝導性が高い材料などの有用な材料の開発が行われている。

弱磁性体の構造形成の一例を示す^{[1][2]}。球形の反磁性粒子と溶媒を入れた容器を超伝導マグネットのボアに挿入し、強磁場を水平に印加すると、粒子の磁気モーメントの向きが磁場の向きと逆向きにそろい、磁気双極子相互作用による引力によって粒子はチェーン状に整列し、粒子は磁場が弱い方向へと移動する。この強磁場下における反磁性粒子の構造形成は一次元材料の開発に有用であると考えられる。

そこで我々は数値シミュレーションによって強磁場下での反磁性粒子の構造形成を再現し、粒子の直径や数、材質を変化させることによる構造への影響や、粒子のパターニングについて検討した結果を報告する。

2. シミュレーションモデルおよび条件

本研究では、超伝導マグネットを水平に設置し、磁場を重力と垂直方向に印加した。超伝導マグネットに挿入する容器には溶媒の塩化マンガン水溶液と球形の反磁性粒子を入れた。

Fig. 1に本研究のシミュレーションモデルを示す。超伝導マグネットの磁場の中心を原点とし、長さ方向にz軸を、半径方向にr軸をとる。粒子の直径は0.1 [mm]、溶媒の塩化マンガン水溶液の濃度は40 [wt%]とした。粒子と溶媒の物性をTable 1に示す。粒子は最初に容器内にランダムに配置するものとし、磁場の強さは超伝導マグネットの中心 (z=0) で2.5 [T]とした。強磁場中で弱磁性粒子がもつ磁気エネルギー $U_i^{(H)}$ と粒子間の磁気双極子相互作用エネルギー $U_{ij}^{(m)}$ はそれぞれ式(1)と(2)で表される。

$$U_i^{(H)} = \frac{\pi d_p^3}{6} \left[-\frac{1}{2\mu_0} (\chi_p - \chi_f) B_i^2 \right] \tag{1}$$

$$U_{ij}^{(m)} = \frac{\mu_f}{4\pi|r_{ij}|^3} \left[(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) - \frac{3}{|r_{ij}|^2} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij}) \right] \tag{2}$$

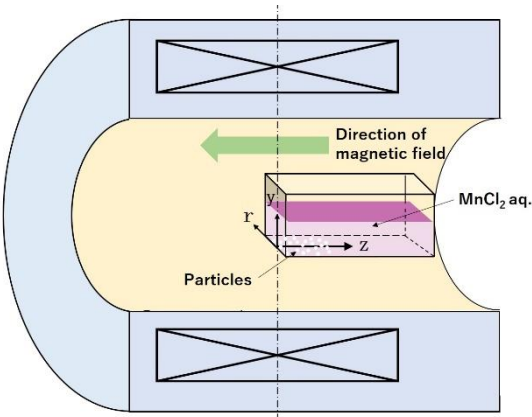


Fig. 1 The model of numerical simulation.

Table 1 Physical conditions for numerical simulation ^[3].

	Particle (glass)	Particle (copper)	Medium (MnCl ₂ aq.)
Diameter [mm]	$d_p = 0.1$	$d_p = 0.1$	-
Volume magnetic susceptibility [-]	$\chi_p = -1.8 \times 10^{-5}$	$\chi_p = -9.68 \times 10^{-6}$	$\chi_f = 7.99 \times 10^{-4}$
Density [g/cm ³]	$\rho_p = 2.26$	$\rho_p = 8.96$	$\rho_f = 1.39$
Viscosity [mPa s]	-	-	$\eta_f = 8.32$

Numerical simulation of chainlike cluster formation of feeble magnetic particles under high magnetic fields

Daisuke KATAYAMA, Tsutomu ANDO, and Noriyuki HIROTA

ここで、 μ_0 は真空の透磁率、 $\mathbf{B}_i$ はそれぞれの粒子の位置での磁束密度とする。 $\mathbf{r}_{ij}$ は隣り合う粒子の位置ベクトルをそれぞれ $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$ としたとき、 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ とする。また、式(2)中の磁気モーメント $\mathbf{m}_i$ はそれぞれの粒子の位置での磁場 $\mathbf{H}_i$ を用いて式(3)のように表せる。

$$\mathbf{m}_i = \frac{\pi d_p^3}{2} \frac{\mu_p - \mu_f}{\mu_p + 2\mu_f} \mathbf{H}_i \quad (3)$$

ここで、 μ_p と μ_f はそれぞれ粒子と溶媒の透磁率を表し、材料固有の値を持つ。これらの式から、粒子に働く力は粒子の大きさおよび材質、磁場の強さに依存することがわかる。また、粒子の運動は式(4)の運動方程式に従うものとする。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_{i \neq j}^N \mathbf{F}_i^{(H)} + \mathbf{F}_{ij}^{(m)} - \mathbf{F}_i^{(v)} + \mathbf{F}_{ij}^{(V)} \quad (4)$$

ここで、式(4)中のそれぞれの力は、 $\mathbf{F}_i^{(H)}$ は式(1)から求められる粒子に働く磁気力、 $\mathbf{F}_{ij}^{(m)}$ は式(2)から求められる誘起磁気双極子相互作用力を表す。また、 $\mathbf{F}_i^{(v)}$ はストークスの粘性法則によって流体が球形粒子に及ぼす力を表し、溶媒の粘度を η 、粒子の速度を $\mathbf{v}_i$ とすると式(5)で表される。

$$\mathbf{F}_i^{(v)} = 3\pi\eta d_p \mathbf{v}_i \quad (5)$$

粒子が界面活性剤で被膜されていると仮定した場合、界面活性剤層厚さを δ 、ボルツマン定数を k 、温度を T 、粒子表面の単位面積当たりの界面活性剤分子の数を n_s とすると、界面活性剤層の重量に起因するエネルギーは式(6)で表される^[4]。

$$U_{ij}^{(V)} = \frac{\pi(d_p - 2\delta)^2 n_s k T}{2} \left\{ 2 - \frac{r_{ij}}{\delta} \ln \left(\frac{d_p}{r_{ij}} \right) - \frac{r_{ij} - (d_p - 2\delta)}{\delta} \right\} \quad (6)$$

式(4)中の $\mathbf{F}_{ij}^{(V)}$ は式(6)から求められる粒子間にはたらく界面活性剤による斥力を表す。なお、粒子直径が $0.1 \mu\text{m}$ と大きく、ファンデルワールス力による影響は無視できると考えられるため考慮しない。また、二次元問題として取り扱うため、重力も考慮しない。

3. シミュレーション結果

Fig. 2 にシミュレーションの結果の一例を示す。なお、図の軸は粒子の直径で無次元化している。これは最初に $40d_p \times 40d_p$ の範囲に 500 個のガラス粒子を分散させ、強磁場を印加した時のガラス粒子の様子を表している。粒子は

磁気双極子相互作用によってチェーン状に整列し、磁場が弱い z 軸正方向に向かって粒子が移動していることがわかる。

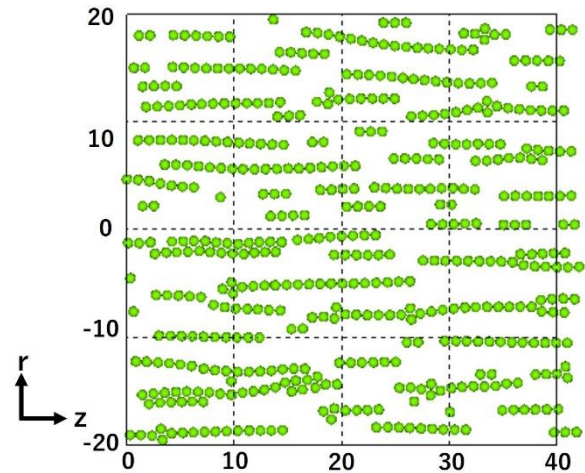


Fig. 2 The result of the simulation. The scale unit is the diameter of a particle.

4. 今後の展望

反磁性粒子は磁場に反発して磁束密度が低い点に移動し留まる性質がある。容器底面にあらかじめ粒子を固定して配置すると、容器内の磁束密度の分布が変化するため、容器内でのチェーン構造の粒子の位置を偏在させることができると考えられる。今後は固定粒子の数や幅、材質を変更すると容器内の可動粒子が形成する構造がどのように変化するか数値シミュレーションを行い検討する。

「参考文献」

- [1] N. Hirota, T. Takayama, E. Beaunon, Y. Saito, T. Ando, et al., Control of structures of feeble magnetic particles by utilizing induced magnetic dipoles: J. Magn. Magn. Mater, 293, (2005), pp.87-92
- [2] T. Ando, N. Hirota, A. Satoh, and E. Beaunon, Experiment and numerical simulation of interactions among magnetic dipoles induced in feeble magnetic substances under high magnetic fields: J. Magn. Magn. Mater, 303, (2006), pp.39-48
- [3] D.R. Lide (Ed.), CRC Handbook of Chemistry and Physics, 79th ed., CRC Press, Boca Raton, (1998), pp.4-131, 12-191.
- [4] 神山新一, 佐藤明, 流体ミクロ・シミュレーション, 朝倉書店, (1997), pp.84-87.