

研究種目：特定領域研究
研究期間：2006 ～ 2010
課題番号：18070005
研究課題名（和文） マイクロ波と分子磁性相互作用の理論・分子動力学研究
研究課題名（英文） Theory and molecular dynamics study of interactions between microwaves and molecular magnetism
研究代表者
田中 基彦 (Tanaka, Motohiko)
核融合科学研究所、連携研究推進センター、准教授
研究者番号：80167501

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎、応用物理学一般

キーワード：マイクロ波 選択加熱 誘電体 磁性体 電子スピン 理論 分子動力学

1. 研究計画の概要

この研究課題では、マイクロ波が種々の物質を選択的かつ効率的に加熱する特異な物理機構を究明する理論研究を行う。対象物質は、マイクロ波をよく吸収し加熱される誘電体および磁性体である。とくに、磁性金属酸化物、磁性金属に焦点をあてて、マイクロ波による磁気加熱の機構を明らかにする。

2. 研究の進捗状況

成果は主として、以下の3つに分類される。

(1) マイクロ波電場による誘電体の加熱機構（「水、食塩水、食塩氷は加熱、純粋氷は非加熱」）。これはマイクロ波オープンでの食品加熱・解凍に機構であるが、じつは様態ごとに加熱機構がすべて異なる。水の加熱はマイクロ波による電気双極子の非共鳴的な回転励起が原因、食塩水は塩イオンのジュール加熱、食塩を添加した氷の加熱（解凍）は塩イオンによる水素結合ネットワークの弱体化が原因である。

(2) 金属粉体の磁気成分による加熱機構。バルク金属と異なり、マイクロ波は粉体金属中へ10cmのオーダーで浸透することを解析的、および有限要素法を用いた数値計算で示した。誘電性皮膜をもつ場合電場加熱が大きい、銅のような純金属粉体では渦電流が誘起されジュール加熱が起きる。ただしこの原因は粉体を取り巻くマイクロ波磁場である。

(3) 磁性体（マグネタイト、酸化チタン）のマイクロ波磁場による加熱機構を、電子スピンに対するハイゼンベルクモデルを用い、モンテカルロ法およびスピン動力学により定

量的に明らかにした。この過程は3d軌道にある電子スピンが非共鳴的にマイクロ波に応答することが原因であり、単なるゼーマン項の応答を桁違いに上回る加熱が生じる。この加熱過程はFMR過程とは異なり、外部静磁場なしで広い周波数領域にわたって連続的に発生する。我々の研究は、マイクロ波金属焼結の分野において、世界で初めて唯一の理論研究である。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している

マイクロ波による磁性体（金属酸化物）の選択加熱の機構がハイゼンベルクモデルにより「定量的に」解明できたことで、目的の半分は達したといえる。また、この研究に対して、マイクロ波エネルギー応用国際学会から、最高栄誉賞であるR. Roy Innovator Awardが授与された（2008年8月）。

後半の課題としては、遍歴電子系である磁性金属の加熱、電子スピンが吸収したエネルギーの散逸機構の研究がある。

4. 今後の研究の推進方策

平成21年度：計画研究メンバーの専門分野であるマイクロ波理工学と古典・量子分子動力学研究、レーザーと分子系相互作用、スピン物性の研究経験をフルに生かし、磁性分野の研究者と連携して研究を進める。今年度は、磁性金属酸化物が3d電子応答によりマイクロ波を吸収する機構について、平成20年度までの研究を引き継ぎ定量的な解明を進

める。未知の課題として、国際的にも期待されているスピン系から固体格子へのエネルギー散逸の緩和過程の研究に取り組む。

平成 22 年度：磁性金属のマイクロ波による加熱過程では、遍歴電子が存在する。このため局在系のハイゼンベルクモデルにかわる Ab initio 分子動力学法などを利用して研究する。その手法を開発し加熱過程研究を推進、マイクロ波焼結の高度な応用である高性能モーターの開発等に資する研究を行いたい。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 9 件)
全論文査読あり

M. Tanaka, H. Kono, and K. Maruyama, Selective heating mechanism of magnetic metal oxides by a microwave magnetic field, Phys. Rev. B., 79, 104420 (2009).

M. Ignatenko, M. Tanaka, and M. Sato, Absorption of microwave energy by spherical nonmagnetic metal particle, J. J. Appl. Phys., in press.

M. Suzuki, M. Ignatenko, M. Yamashiro, M. Tanaka and M. Sato, Numerical study of microwave heating of micrometer size metal particles, ISIJ (Iron and Steel Institute of Japan), 48, 681-684 (2008).

M. Murakami and M. Tanaka, Nanocluster expansion into vacuum and quasi-mono energetic spectrum by uniformly distributed contaminant ions, Phys. Plasmas, 15, 082702 (2008).

M. Tanaka and M. Sato, Microwave heating of water, ice and saline solution: Molecular dynamics study, J. Chem. Phys., 126, 034509 1-9 (2007).

R. Sahnoun, K. Nakai, Y. Sato, H. Kono, Y. Fujimura, M. Tanaka, Theoretical investigation of the stability of highly charged C60 molecules produced with intense near-infrared laser pulses, J. Chem. Phys., 125, 184306 1-10 (2006).

T. Koga and M. Tanaka, First-principles molecular dynamics studies of plasma-surface interaction, J. Korean Physical Society, Suppl., 49, S52-55 (2006).

[学会発表] (計 25 件)

依頼講演 (国際会議ショートコース)、田中基彦、「マイクロ波加熱の原理：誘電体・磁性体はなぜマイクロ波で加熱できるのか？」 Theoretical Investigations of the Mechanisms of the Microwave Heating, GCMEA 2008 (滋賀, Aug. 4-8 (2008)).

国際会議 (口頭発表), Theoretical studies of microwave heating of liquid and solid materials, M. Tanaka, H. Kono, K. Maruyama, M. Ignatenko, and M. Sato, GCMEA 2008 (滋賀, Aug. 4-8 (2008)).

” Topical Lecture ” (分科会基調講演), Theoretical study of microwave heating of dielectric and magnetic materials, M. Tanaka, H. Kono, K. Maruyama, M. Ignatenko, and M. Sato, Strong Microwaves: Science and Applications (Nizhny Novgorod, Russia, July 27-Aug. 4 (2008)).

依頼講演 : Microwave heating of polar liquid and magnetic materials: Mechanisms of heating, Recent Advances in Microwave Technology and Applications, M. Tanaka (Melbourne, Australia, Jan. 29-31, 2008).

Microwave heating of metallic oxide powders: Mechanism of magnetic energy absorption, M. Tanaka, Materials Research Institute, Pennsylvania State University (University Park, Nov. 5, 2007).

国際会議 : Molecular dynamics study of microwave heating of water and related materials, M. Tanaka and M. Sato, 11th AMPERE Conference (Sep. 4-7, 2007, Oradea, Romania).

国際会議 : Microwave heating of materials: From polar liquid to magnetic oxides, M. Tanaka, M. Sato, M. Suzuki, M. Ignatenko and M. Yamashiro, 17th International Toki Conference (Toki, Oct. 16, 2006).