

シミュレーションと機械学習による永久磁石開発

P51

Development of permanent magnets by simulation and machine learning

三宅 隆 t-miyake@aist.go.jp

産業技術総合研究所

1. はじめに

電動車の駆動モータや風力発電機等に用いる高性能永久磁石の使用量は年々増加しており、小型化、耐熱性、希少元素低減などの要請から高保磁力、高飽和磁化、高キュリー温度の条件を満たす磁石材料の開発が期待されている。保磁力は粒界や材料組織に依存するが、その微視的機構は未だに解明されていない。本課題では、第一原理計算に基づいた磁化反転シミュレーションにより、保磁力の発現機構に迫る。また、ネオジム磁石に代わる新規磁石開発に向けて、磁石材料の主相・副相物質の探索を行うためのマテリアルズ・インフォマティクス手法を開発する。

2. 保磁力機構の解明

ネオジム磁石主相 ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$) に対する定量的な原子論的スピン模型を構築した。得られた模型を Wang-Landau 法を用いた制限モンテカルロ法で解析した。 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶の飽和磁化と結晶磁気異方性の温度依存性を算出し、実験とよく一致する結果を得た [1]。保磁力機構を解明するには、ネオジム磁石粒界を扱う必要がある。そのため、OpenMX コードを高度化し、4000 原子規模のネオジム磁石の主相・副相界面の構造最適化と各原子サイトにおける磁気物性値の評価に成功した。また 8500 原子規模の界面系に対して動作確認を行った。

3. 機械学習を活用した新規磁石開発

RFe_{12} 型希土類化合物は、高性能磁石主相としてのポテンシャルを有し、高い磁気特性と安定性を両立する最適な化学組成の決定が課題となっている。我々は、サイズ最適化とデータ同化を用いた効率的な化学組成の最適化手法を開発した。 RFe_{12} 型化合物に適用し、飽和磁化、キュリー温度、生成エネルギーを目的変数として、化学組成の 5 変数を最適化する探索効率を検証した結果、適切な記述子を選択するとランダムサンプリングよりも圧倒的に高効率であることがわかった [2]。

新規磁石開発のためには、主相のみならず副相の設計も重要である。与えられた元素の組み合わせに対して出現する相の候補を絞り込むことが大きな課題となる。そこで、磁石材料に適用可能な、第一原理計算と機械学習を併用した仮想スクリーニング手法を開発した。記述子として、ポロノイ分割と構成原子の電子配置の情報に基づいた軌道場行列 (OFM) を考案した [3]。4,220 種類の遷移金属化合物の生成エネルギーや 658 種類の化合物の局所磁気モーメントに対して、その有効性を検証した。

4. 今後の課題

最新の実験情報とネオジム磁石主相・副相界面の第一原理計算に基づき、ネオジム磁石界面系のスピン模型を構築し、その磁化反転シミュレーションを実行して粒界近傍の磁化反転機構の解明を行う。また、開発したマテリアルズ・インフォマティクス手法を用いて、新しい鉄基希土類磁石の提案を目指す。

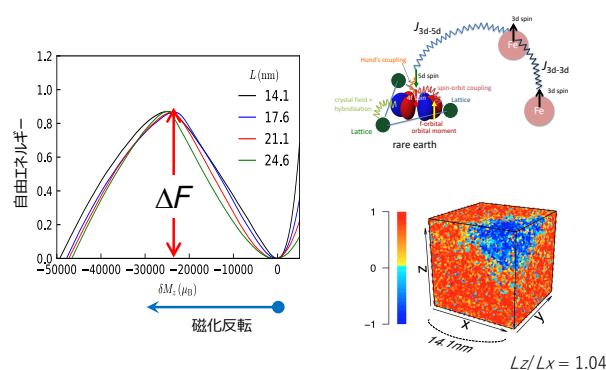


図1 原子論的スピン模型を用いた $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒の磁化反転シミュレーション。密度汎関数法を用いた第一原理計算により、サイト間磁気交換結合などを求める。得られたスピン模型をモンテカルロ法で解析し、磁化反転に伴う自由エネルギー障壁を算出し、保磁力を評価する。

【共著者(所属)】

梶裕太 (NIMS)、宮下精二 (東大)、佐久間昭正 (東北大)、赤井久純 (東大物性研)、合田義弘 (東工大)、尾崎泰助 (東大物性研)、深澤太郎 (産総研)、PHAM Tien-Lam (北陸先端大)、DAM Hieu-Chi (北陸先端大)、木野日織 (NIMS)

【関連プロジェクト】

ポスト「京」プロジェクト重点課題7 (CDMSI)
元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>磁石材料拠点 (ESICMM)
情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²)

【参考文献】

- [1] Y. Toga et al., Phys. Rev. B **98**, 054418 (2016).
- [2] T. Fukazawa et al., Phys. Rev. Mater. **3**, 053807 (2019).
- [3] T.L. Pham et al., Sci. Technol. Adv. Mater. **18**, 756 (2017).

【関連 WEB】

- [1] www.openmx-square.org