

ハイエントロピー合金自動網羅計算環境の開発

P52

Automation of the first-principles calculation to search functional materials in high entropy alloys

木野 日織 kino.hiori@nims.go.jp

物質・材料研究機構 木野日織

1. ハイエントロピー合金について

ハイエントロピー合金(HEA)は準安定相にあるがその強さ・硬さにより初期は注目を集めた。HEAの物性発現の起源は特有なカクテル効果(構成原子間の非線形相互作用)であると曖昧に説明される。最近部分秩序の存在が理論・実験から示唆されている[1]。このため、HEAのエントロピーは当初考えられたより小さく、基本的な部分で理論修正が必要である。理論的な議論は部分秩序の存在を基にせねばならないが、様々なHEAに対してどのような部分秩序になるかも実は分かっていない。あるHEAに対してカクテル効果とは具体的に何か、学術として明らかにするために、例えば、大規模な第一原理計算がなされている。[1]

一方、実用に対しても様々な原子の組み合わせ・割合を調整することで、例えば、磁気相転移温度や磁化の大きさ、スピン軌道相互作用の大きさを組み合わせて目標値とする物質を得ることができるはずである。HEAの構造はBCCもしくはFCCが主であるために構造由来の柔磁性体となるが、モーターの磁心材料、現在パーパロイに依存している次世代携帯電話向けのより高周波に電磁波吸限界を持つ物質、スピントロニクス分野向けの機能性材料となる大きな可能性を持つ。

HEAの機能探索研究の障害は、実験では膨大な組成・比率組み合わせに対応できない点である。このため、理論的な研究を先行して行い、機能スクリーニングすることが求められる。しかし、それでも構造組み合わせは多い。HEAの組成・比率組み合わせは、それぞれの元素を10%~90%の組成で10%刻みに変化させるとして、*d*電子系を中心とした四元系 $A_xB_yC_zD_w$ で620万通り、五元系HEAでは5300万通り、六元系HEAでは3.4億通り存在する。機能探索のために機械学習を行うとしてもデータがまず無いと何もできないため、①高速な評価手法を用い、②人間を介さない計算自動化によりHEAの機能データを溜める必要がある。

2. KKR-CPA法による自動探索環境の構築

HEAは原子配置がランダムであるため基本格子ではそのままでは計算ができない。CPA法を用いると周波数空間で原子をランダムに混ぜることができるため基本格子での計算が可能であり、①高速な物性値評価が可能になった。KKR法はGreen関数法であり、VASP等の波動関数法とは異なる困難さを持つ。もっとも大きな問題点は計算パラメータとして電子状態のエネルギー積分範囲を人間が選択せねばいけない点である。我々は計算パラメータ及び収束パラメータ

を収束するまで自動調整するようにエキスパートシステムを構築した。これにより等比率四元型HEAのBCC、FCC構造を合わせて14万件の電子状態を②人手を介することなく自動計算することに成功した。(図1)

3. 今後の課題

安定性や全磁化、磁気相転移温度に対して大きな影響を持つ部分秩序を考慮に入れた配置を自動的に作成する。五元系、六元系などの多成分系のHEAの組成・比率を変えて計算を行い、機械学習により目的に応じて膨大な可能性から最適な機能を見つけられるデータセットを作る。

本環境はHEAに限らず元素割合を変化させた場合に同一な計算パラメータによる計算を人手を介することなく自動的に行うことが可能にする。金属のみならず絶縁体や半導体の高速な巨大データセット作成とそれによる最適機能探索が可能になる。

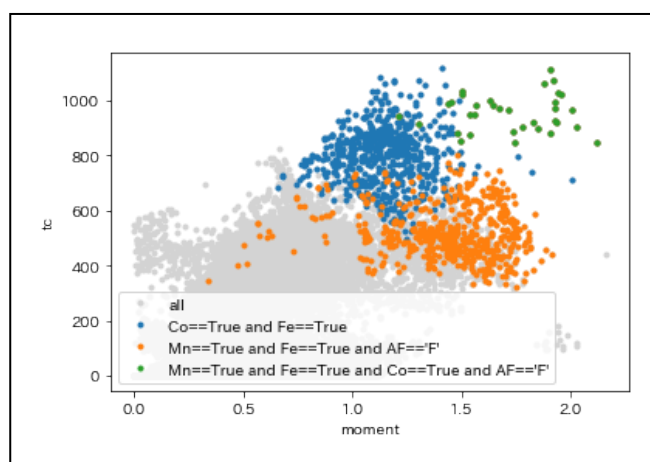


図 BCC格子を仮定した場合の第一原理計算により予測されたハイエントロピー合金の全磁化とキュリー温度。

【共著者(所属)】

福島 鉄也(東京大学・物性研究所)・知京 豊裕(物質・材料研究機構)

【関連プロジェクト】

元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>磁性材料拠点・未来社会創造事業「共通基盤」領域

【参考文献】

- [1] M. Ogura, et al., J. Alloys and Compounds 715, 454 (2017).
[2] T. Fukushima, et al., J Phys. Soc. Jpn. 86 114704 (2017).