

## 第一原理計算による MnBi 磁気材料の研究

### First-principles studies on the magnetism of MnBi

松井 正冬

筑波大学計算科学研究センター

#### 1. 研究目的

現在、クリーンエネルギー化の社会的要請のもと、モータおよび発電機の高効率化に不可欠な材料として高性能永久磁石の需要が拡大しているが、主流である Nd-Fe-B 系磁石は産出量の少ない希土類資源の供給不安に悩まされている。MnBi は、高温における磁気一次相転移を示す数少ない磁性材料として古くから知られているが、希土類系磁石の代替材料としての期待が近年高まっており、この系に対する高磁性新規化合物の設計指針を構築・達成することは社会的に広い波及効果が期待できる。本研究では、周期系第一原理計算により、MnBi 元素置換系の網羅的計算を行い、スピン電子構造から磁化率や磁気異方性効果を見積もり、様々なドーパント効果を検証する。さらに実験計測データやコヒーレントポテンシャル近似の結果と組み合わせデータ同化手法を適用することにより、所望磁気特性を与えるドーパント最適組成予測を行う。

#### 2. 研究成果の内容

六方晶 NiAs 構造 MnBi の構造を Fig. 1 に示す。2×2×2 スーパーセルを用いて  $Mn_{15}M_1Bi_{16}$  または  $Mn_{16}Bi_{15}M_1$  系 (M; 置換元素) に関して第一原理計算を行い、再安定スピン状態での最適化構造を求めた。計算には VASP を用いた。得られた磁化・置換系生成エネルギーを Fig. 2 に示す。Mn 置換では磁化向上は見られず、15, 16 族元素 (ニクトゲン, カルコゲン) による Bi 置換が、磁化向上・生成エネルギー的に有望であった。MnBi の磁気異方性効果 (MAE) の温度変化をスピン軌道相互作用を取り込んだ第一原理計算により求めた。高密度の k-point サンプリングと、ハバード U パラメータ及び Kuz'min 式による補正を導入することで、スピン軸が低温での結晶 ab 面内から高温での c 軸方向に変化し、500 K 程度でピークを持つ MnBi の MAE の特性を良く再現できた (Fig. 3)。ただし、第一原理計算は実験値と比べて過小評価の傾向があった。これらの計算データ・知見を活用し、NAIST 原嶋助教との共同研究により、データ同化手法を用いて Cr-Sb ドープ系の各組成での磁化の温度変化予測を行った。これにより、所望磁化・キュリー温度を与える最適組成の

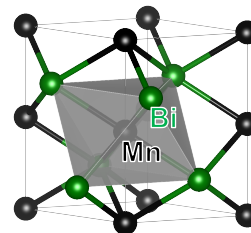


Fig. 1: NiAs structure MnBi.

予測が可能となった。

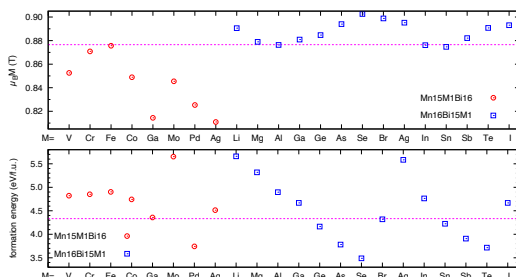


Fig. 2: (a) Magnetization and (b) formation energies of MnBi substitution systems.

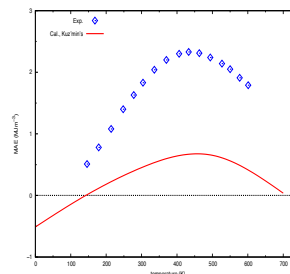


Fig. 3: Temperature dependence of magnetic anisotropic effect of MnBi.

### 3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

ドーパント系の第一原理計算ではスーパーセルのサイズが大きくなるため、メモリが大きく高性能 CPU または GPU を搭載した計算機が必要である。さらに、インフォマティクス研究のための網羅的な元素置換を行うには、多大な計算ノード数または計算時間が必要となる。以上のような計算・研究は、学際共同利用による大規模計算リソースの提供がなければ実現不可能であった。

### 4. 今後の展望

今回の第一原理計算により得られたマテリアルズインフォマティクスの知見と、実験計測データ、データ同化手法を組み合わせることで、広いデータ空間でのドーパント最適組成、磁性異方性・温度特性の予測を可能とすることで、新規磁性材料の設計指針構築を目指す。また、機械学習の手法のブラックボックス的適用のみを行うのではなく、第一原理計算により得られた構造・置換元素と電子状態・磁気特性との相関を明らかにし、その解釈・知見を descriptor として機械学習に取り込むことで、物性理解の構築と予測精度の向上の協調的な高度化・高精度化を実現する。

### 5. 成果発表

- (1) 学術論文  
なし
- (2) 学会発表  
なし

(3) その他

特許出願準備中

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	2000	0
Wisteria/BDEC-01			

※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。