

合成可能な磁石材料予測のためのマテリアルズ・インフォマティクス

Materials Informatics for Synthesizable Magnetic Materials Prediction

原嶋 庸介

奈良先端科学技術大学院大学

1. 研究目的

近年永久磁石材料は、スマートフォンのような小型デバイスから電気自動車・風力発電用モーターまで、その使用目的をますます多様化させており、そしてそれに伴い、多様な環境での高機能発現や、希少資源の使用料削減等の社会的要求が重大性を増し続けている。これらの要求に答えるための新規磁石材料の開発が、基礎科学から産業応用までの広い分野で活発に行われている。このような新規磁石材料を開発するための手法として注目を集めているのが、AI や機械学習を用いて膨大なデータをもとに新規材料を探索するマテリアルズ・インフォマティクス(MI; Materials Informatics)である。特に学習データとして高精度第一原理計算を用いた MI は、output としての磁気特性情報だけではなく、input として原子レベルの微視的構造情報、そして量子レベルのバンド電子構造情報も得ることができ、情報学的手法によりこれらの相関を明らかにすることは、物質科学の一分野となりつつある。だが、MI による磁石材料開発には、1 つの大きな問題が存在する。それは MI により予測した組成・構造が、実際に合成できるか不明であるということである。本研究ではこの問題を克服するために、理論磁性データベース(DB)と実験構造 DB を組み合わせて材料予測を行い、さらに予測材料の磁気特性を高精度第一原理計算により検証する、新しいスキームを提唱する。

2. 研究成果の内容

予測ターゲットとして、磁石材料の重要機能である保磁力の決定因子であり、かつ既存 DB への収録件数が豊富ではない一軸結晶磁気異方性を対象とした。提唱スキームは以下 3 つの Phase からなる:

(Phase 1) 理論磁気 DB である Novomag, Novamag を訓練データとして教師あり学習を行い、材料の磁気異方性を予測する機械学習モデルを構築する。モデル構築は、参考文献[S. Mal and P. Sen, *J. Magn. Magn. Mater.*, **589** (2024) 171590]の手法の特徴量を独自に改良することで行う。

(Phase 2) 実験構造 DB である ICSD のデータに構築した機械学習モデルを適用することで、磁気異方性を有する磁石材料の予測を行う。ICSD データは実験の参考文献を含むため、ここでの予測材料は全て合成可能である。

(Phase 3) ICSD には磁気特性は収録されていないため、予測材料が真に一軸結晶磁気

異方性を有するかを高精度第一原理計算(VASP)を用いたスピン軌道相互作用評価により検証する。

Novomag, Novomag から磁気異方性定数を含むデータ合計 2216 件を抽出した。これらをトレーニングデータとし、独自に改良を加えた 9 種類の特徴量を用いてランダムフォレスト型の機械学習 (ML) モデルを構築した。その予測精度は F1 スコアで 0.708 であった。この ML モデルを用いて、ICSD 構造の磁気異方性予測を行った。約 30 万件のデータの事前スクリーニングとして、安価で高磁化が期待できる Fe の含有量 60%以上、同時に磁気異方性が期待できない立方晶系以外の構造を抽出した。またスピン軌道相互作用の計算コストを考慮し、結晶格子中の原子数を 75 以下に制限した。以上のスクリーニングにより、ML モデルの適用対象データは 2290 件となり、そのうち一軸磁気異方性を持つと予測された構造データは 804 件であった。この 804 件中、同一構造を除外するなどした独立な組成は 325 件であった。さらにこのうち、希土類を含まない組成は 25 件であった。この 25 組成について、スピン軌道相互作用評価により、一軸結晶異方性を有するかを検証した。12 組成については計算が収束困難であり、期間中に結果を得ることができなかった。13 組成については収束した結果が得られた。その結果、13 組成中 11 組成が一軸結晶磁気異方性を有していた。よって今回構築した ML モデルが、トレーニングデータに含まれていない合成可能な実験構造に関しても、高い精度で一軸磁気異方性を予測できることが明らかになった。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

磁石材料の磁気異方性は、スピン軌道相互作用と組成・構造との未だ不明な相関の敬明として学理的に重要であり、また高保磁力磁石材料の開発として産業的にも重要である。今回の ML モデル構築と第一原理計算による検証は、機械学習により組成・構造だけから一軸磁気異方性を予測可能であることを示した非常に有用・有意義なものである。第一原理計算による検証では多数の組成に対してメモリー要求量の大きいスピン軌道相互作用計算を実施する必要があり、大容量メモリー搭載並列マシンである pegasus の学際共同利用プログラムでの利用なしでは実施不可能であった。

4. 今後の展望

磁石材料として希土類含有組成が多く利用されているが、希土類の局在化した f 軌道と結晶場との相互作用を通常の平面波擬ポテンシャル DFT 法で記述することが困難なため、既存 DB でも希土類含有組成の磁気異方性エネルギー収録データは限られていた。そのため開発 ML モデルの希土類含有組成での予測精度は今回検証できていない。希土類元素の磁気異方性エネルギーへの寄与を Crystal field parameter 法により評価し、第一原理スピン軌道相互作用計算の結果と合わせて今回開発の ML モデルに再学習させることで、希土類含有組成についても高精度予測が可能な ML モデルを構築することを計画している。

5. 成果発表

(1) 学術論文

なし

(2) 学会発表

- ① “Analysis of Substitutional Effects of Sn and Sb on Magnetocrystalline Anisotropy of MnBi at Finite Temperature”, Yosuke Harashima, Amane Nishida, Yuto Morishita, Masafuyu Matsui, Naoto Umezawa, Rie Umetsu, Yasuteru Shigeta, Hyun Seok Lim, Namkyu Kim, Seok Bae, Sungwon David Roh, Shogo Takasuka, Tomoaki Takayama, and Mikiya Fujii, The 7th International Conference of Asian Union of Magnetism Societies (IcAUMS 2025), Poster presentation, 2025.04.21.

(3) その他

なし

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*		
		当初配分	移行*	一般利用による追加
Pegasus	○	5,000		0
Miyabi-G				
Miyabi-C				
※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。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				