

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Magnetic properties of rare-earth magnet compounds studied from first principles
著者(和文)	SEOInsung
Author(English)	Insung Seo
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第12831号, 授与年月日:2024年9月20日, 学位の種別:課程博士, 審査員:合田 義弘,尾中 晋,中田 伸生,寺田 芳弘,中辻 寛
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第12831号, Conferred date:2024/9/20, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

(博士課程)

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第		号	学位申請者氏名		SEO, Insung	
論文審査 審 査 員		氏 名	職 名		氏 名	職 名	
	主査	合田 義弘	准教授	審査員	中辻 寛	准教授	
	審査員	尾中 晋	教授				
		中田 伸生	教授				
		寺田 芳弘	准教授				

論文審査の要旨（2000 字程度）

本論文は“Magnetic properties of rare-earth magnet compounds studied from first principles”と題し、英文で5章からなる。

第1章“Introduction”では、永久磁石材料の主相として用いることの可能な新磁石化合物が社会的に要請されていることを紹介し、これまで様々な手法により化合物探索が試みられてきたこと・その試みでは材料探索空間が既存磁石化合物の近傍に限定されており必ずしも成功しているとは言い難いことを述べた。さらに、希土類磁石化合物における磁気異方性発現機構の基礎的な理解と高磁気異方性化合物設計指針が確立されていないことを示した。以上を総括し、本論文の目的が機械学習を用いた新磁石化合物探索と希土類磁石化合物における磁気異方性発現機構の解明である旨を述べた。

第2章“Basic theory and computational methods”では、本研究で用いた理論的枠組が述べられた。東工大スパコン TSUBAME で実行される数値解析の基礎となる第一原理電子論と、希土類磁石化合物の安定性・磁気特性を評価する理論解析手法の要点を述べた。さらに、化合物探索に用いる機械学習の手法に関して記述した。軽元素を添加した3元系化合物探索手法の構成要素として、2元化合物の原子配置から空隙を評価し、軽元素の占有する侵入型サイトを同定する手法を構築し数値解析プログラムを開発したことが述べられた。

第3章“Materials informatics approach for developing new permanent magnets”では、非磁性物質も含めたデータベースから元素置換により Nd-Fe 化合物を多数検討し、その中で既存のネオジム磁石化合物 2-14-1 系を上回る高磁化を持つ NdFe₁₆ 化合物 (1-16 系) を見出した。2元系では化合物の安定性が十分でなかったが、軽元素の添加により生成エネルギーが低下し、化合物が安定化することを明らかにした。特に、1-16 系での酸素添加の効果としては良好な磁気特性が概ね維持され、磁化はほぼ変化せず化合物は顕著に安定化し、磁気異方性はわずかに減少した一方、Curie 温度は上昇した。当該化合物を含む検討した化合物を訓練データとして random forest 法により、大幅な計算コストの削減を実現し、化合物探索を 20,000 種類以上行った結果、有望な 2 元化合物を得た。これらの結果により、Nd-Fe の 2 元化合物データベースの構築がなされた。

第4章“Magnetocrystalline anisotropy energy in RFe₁₂X and R₂Fe₁₇X₃”では、磁気異方性発現機構の理解を化合物探索指針に反映させることを目指し、2種類の希土類化合物結晶構造に対し、磁気異方性解析を行った。その結果、軽元素により磁気異方性が強く変調されることを示し、軽元素による磁気異方性変調機構および原子配置と磁気異方性の相関を検討し、基礎的な知見を得た。軽元素による磁気異方性変調では、軽元素の電気陰性度と 2p 軌道のエネルギー変化のみならず、軌道混成効果を精査することにより、原子番号の増加に対する非単調な振る舞いの理解を提示した。原子配置と磁気異方性の相関に関しては、原子配置から磁気異方性を予測するための理論手法を提案した。

第5章“Conclusion”では、本論文を総括し、今後の展望について述べた。

以上を要するに、本論文では希土類磁石新化合物探索の枠組みを提示するとともに、高磁化である新磁石化合物を新たに理論設計した。さらに、希土類磁石化合物における磁気異方性発現機構に関して、多角的な検討を行い磁気異方性発現機構および変調機構の一般則に対する基礎となる知見を得た。これらの結果は希土類磁石新化合物探索に資する理論的枠組みおよび基礎的な知見を提供し、化合物探索および希土類磁石化合物における磁気異方性を記述する理論の発展として、理学的に貢献するところが大きい。よって、本論文は博士（理学）の学位論文として十分な価値があるものと認められる。

注意：「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。