

機械学習により世界最高クラスの磁気冷凍材料を発見

物質・材料研究機構（NIMS）の寺嶋健成主任研究員、Pedro Baptista de Castro 筑波大学院生、高野義彦グループリーダーらの研究グループは、機械学習（勾配ブースティング）を用いることで、水素液化温度（約20K）近傍ではこれまで報告されたバルク物質で最も高い磁気エントロピー変化を示す磁気冷凍材料を見いだした。

水素はクリーンなエネルギー源として利用が期待されているが、その効率的運搬・貯蔵には水素を約20Kまで冷却して液化することが望ましい。従来の気体冷凍ではコンプレッサーによる損失が大きく水素の液化は低効率高コストとなるため、代わりに磁性体の磁気エントロピー変化を利用した冷凍法である磁気冷凍への実用の期待が高まっている。そのため、水素液化温度近傍で高い磁気エントロピー変化を示す物質開発が求められていた。

波長制御型赤外線ヒーター

熱ふく射の波長を制御することで、効率的な加熱を実現する取り組みが物材機構でスタートした。なぜ波長の制御なのか？それは、人が顔や指紋といったそれぞれの個性を持つように、材料にもそれぞれの化学組成や原子配列によって、吸収される赤外線の波長分布に違いがあるからである。現在、多くの赤外線ヒーターは、対象物の吸収波長に関係なく、幅広い波長分布で赤外線を放射している。このため、多量の不必要な波長成分によって、乾燥焼けや加熱製品の加工精度・品質の低下、無駄なエネルギー消費が起こるなど、問題点も多い。そこで、加熱対象に応じて熱ふく射の波長を高い精度で制御できる、新たなヒーターの開発が望まれている。

これを実現するには、赤外線ヒーターの動作する1000℃以上でも燃えたり融けたりせず、かつ、波長選択性を劣化させない小さな光学損失のヒーター材料を探索する必要がある。また、電磁場設計の面から特定の波長域の赤

外線を放射できる積層構造や表面ナノ構造の設計とその製造プロセスの確立が必要である。まず前者では、第一原理計算から多数の材料の赤外光学特性を予想して候補を絞り、候補材料の探索を系統的に進めた。そして後者で、それらの材料を基に電磁場設計を行い、どのような積層構造や表面ナノ構造が良いかを割り出し、その構造の実現のための加工プロセスを開拓した。両者をフィードバックさせながら開発を進めた結果、1100℃で安定動作し、狙った波長で100nm幅の狭帯域な赤外線をふく射するヒーター材料が実現することができた。このような波長制御型ヒーターによって、加熱加工に新たな方法論が生まれることが期待される。

本研究は物質データに基づく材料探索が機械学習により効率的に行える事例を示したもので、例えば探索物質域を室温に移すことで室温磁気冷凍への展開が期待できる。今後、本物質を磁気冷凍装置に組み込むための加工性の検証や、高い磁気エントロピー変化の起源解明

に向けての研究を進める。本研究成果は、オープンアクセス科学誌「NPG Asia Materials」に2020年5月12日に掲載された。

(物質・材料研究機構 グループリーダー高野義彦)

E-mail:TAKANO.Yoshihiko@nims.go.jp)

URL:https://www.nims.go.jp/news/press/2020/05/202005121.html

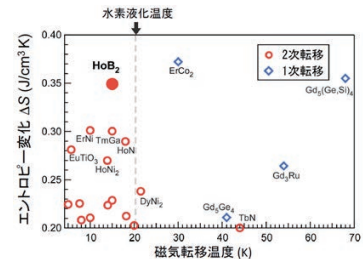


図1 エントロピー変化と、磁気転移温度の分布図。HoB₂以外の値は、P. B. Castro et al. NPG Asia Materials 12:35 (2020) 中に記載の引用論文による。

[2020年6月26日]

(国研) 物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点
グループリーダー長尾忠昭
連絡先: 〒305-0044 茨城県つくば市並木1-1, E-mail: NAGAO.Tadaaki@nims.go.jp

URL https://samurai.nims.go.jp/profiles/nagao_tadaaki?locale=ja

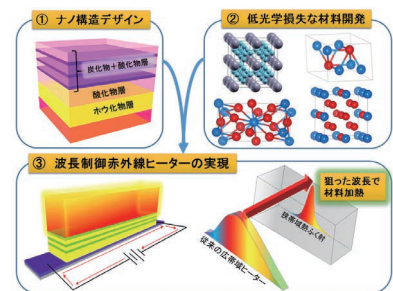


図1 ヒーター材料の第一原理計算とナノ構造電磁場デザインとを組み合わせた狭帯域な赤外線ヒーターの開発

[2020年6月26日]