

Material DX を用いた省 Nd 磁石の開発

加藤 晃¹⁾ 矢野正雄²⁾ 佐久間紀次³⁾ 木下昭人³⁾
 山口剛生^{**} 且野克典⁴⁾ 庄司哲也⁵⁾

1. 開発の背景

今後急速な拡大が予想される電動車に搭載される高出力モーターなど様々なモーターに使用される Nd 磁石には、貴重なレアアース資源の需給バランスを保つ技術が期待されている。それら急速な環境変化に即応するためにも、物性と組織両面の制御を通じたスピード感を持った材料開発が必要とされている。そのため新たに開発した“省 Nd 磁石”の材料技術を報告⁽¹⁾⁻⁽⁴⁾し、実用化に向けて現在も開発を継続している。

他方、AI 技術の普及、様々な産業のデジタルトランスフォーメーション(DX)が進む中、素材産業においてもマテリアルインフォマティクス(MI)の急速な普及等、材料開発の手法に大きな変革が起きつつある。しかし、材料の試験評価データから MI の実現までには、データ解析と整理・蓄積の大きな溝があり、データの解析・蓄積には、いまだ大きな課題が残存していると考えられる。そこで今回我々は、あらゆる材料分析をクラウド上で自動解析し、解析結果を自動的にクラウド上へ蓄積させるとともに、それら蓄積されたデータに統計処理を施すことで、MI サイクルが回り効率的に材料開発を推進することを実現する⁽⁵⁾⁽⁶⁾ 図 1 に示す材料解析プラットフォーム“Material DX”を新たに開発し、実証実験を通じた更なる機能向上・拡充を開始した。これを用いて、省 Nd 磁石の継続課題解決に顕著な成果が得られたので、それらを報告する。

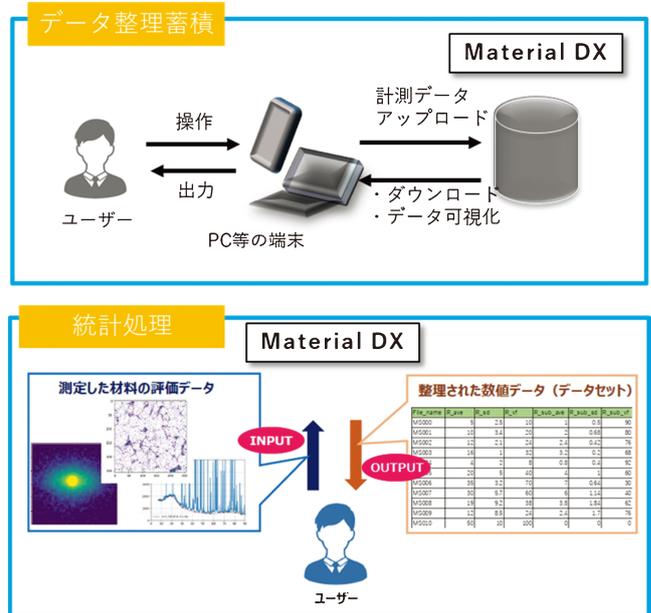


図 1 Material DX の提供技術と機能イメージ。

2. 省 Nd 磁石の開発と継続課題

我々は、Nd を La と Ce に置き換えても磁力・耐熱性の悪化を抑制できる新技術の採用により、Nd を最大50%削減しても、従来の Nd 磁石と同等レベルの耐熱性能を持つ磁石を開発した。開発した省 Nd 磁石は、図 2 の下記 3 つの技術を組み合わせることで保磁力を高温でも維持できる性能を実現している。

- 技術 1: 磁石の結晶粒微細化
- 技術 2: コアシェル二層構造化
Nd-Cu 合金の浸透処理によるコアシェル組織形成⁽¹⁾
- 技術 3: La と Ce の特定の配合比

図 3 に示すように La と Ce を特定の配合比とすることで、Ce のみの添加時に比べ保磁力の低下を抑制し、Dy を 4%添

* トヨタ自動車株式会社 先端材料技術部；
 1) 技範, 2) 主幹, 3) 主任, 4) グループ長,
 5) チーフ・プロフェッショナル・エンジニア
 ** トヨタ自動車株式会社 先進プロジェクト推進部；主任
 Development of Nd Lean Magnets by Means of Material DX;
 Akira Kato*, Masao Yano*, Noritsugu Sakuma*, Akihito
 Kinoshita*, Takeo Yamaguchi**, Katsunori Danno* and
 Tetsuya Shoji* (*Advanced Material Engineering Div., Toyota
 Motor Corporation. **Advanced Project Promotion Div.,
 Toyota Motor Corporation)
 2020年10月20日受理[doi:10.2320/materia.60.57]

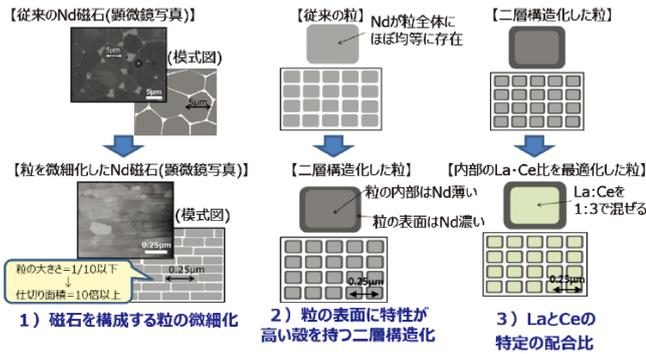


図2 省Nd磁石の3つの開発ポイント。

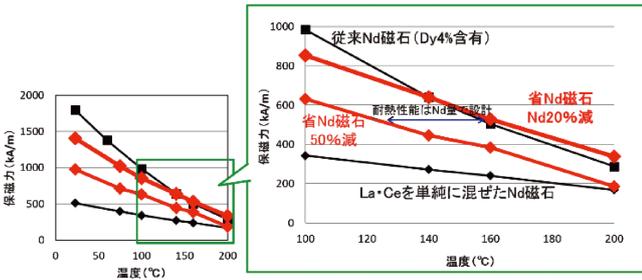


図3 省Nd磁石の保磁力の温度依存性。

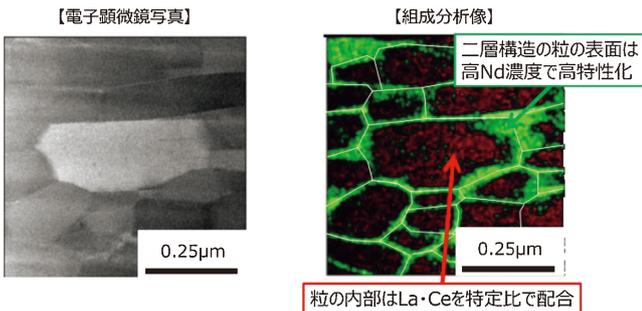


図4 省Nd磁石の微細組織構造。

加した従来磁石と同等の保磁力をDyやTbを用いず、Nd20%減に成功した。

図4に示す電子顕微鏡写真と組成分析像から、この世界初の省Nd磁石が、前述の3つの技術を融合し、ナノメートルレベルで構造を制御した組織を有することが示された。しかし、実用化に向けた継続課題として、コアシェル組織の最適化を通じた特性の最大化が残されており、引き続き現在も開発を継続している。

3. Material DXを用いた省Nd磁石の継続課題の克服

上述のコアシェル組織の最適化のためには、組織を定量化した上で、理想組織の明確化、そのための材料・プロセス設計を行う必要がある。しかし、現状では、図4のように、時間を要する電子顕微鏡写真から局所情報が得られるのみで、短時間に全体の平均情報を得るには至っておらず、継続課題克服の障害となっていた。そこでXRD(X-Ray Diffrac-

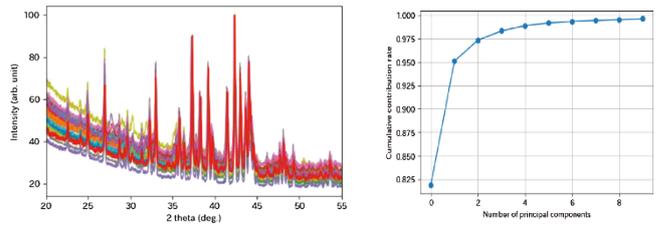


図5 (a)省Nd磁石のコアシェル組織のXRDデータ群(左)、(b)主成分分析の累積寄与率(右)。

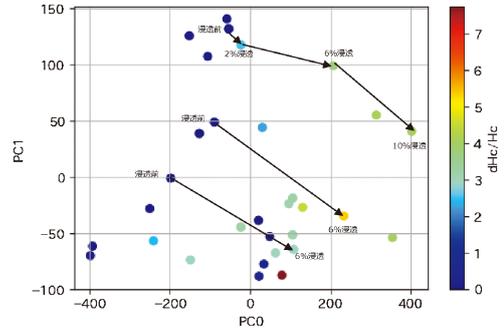


図6 PC0, PC1の係数と保磁力の増加率(ΔHc/Hc)の関係。

tion)に着目した。XRDのスペクトルデータには、ピーク位置には“相、格子定数”，ピーク形状からは“結晶性、結晶子径、歪”，などのように、多くの材料構造の情報が内包されている。そこで図5(a)のようにNd-Cu合金浸透前後の磁石において、短時間に多くの情報が得られるXRDを数多く取得し、Material DXを用いたデータの整理蓄積を行った後、パラメータを設定せず機械学習による特徴量の抽出を行い、あとから構造情報を解釈することで、メカニズムが複雑で複数の要因が絡むコアシェル組織の定量的な組織解析を試みた。解析にあたっては、まずスペクトルデータの規格化・前処理なしでのバックグラウンド成分も含めてPCA(主成分分析)を行った。

図5(b)の累積寄与率と主成分の関係からXRDスペクトルは主成分0(PC0)と主成分1(PC1)で95%以上の寄与率となっているため、この2つの主成分が重要な因子であることが分かる。次にこれらのPC0, PC1と保磁力の増加率(ΔHc/Hc)の関係を図6に示す。

ΔHc/Hcが大きいものが右下に分布していることが分かる。また、図中に代表的な磁石のNd-Cu浸透前後の挙動を矢印で示した。シェルを形成するための組織制御パラメータである浸透量が増加するに従い、PC0は増加し、PC1は減少する傾向にあることが分かる。最も大きい主成分であるPC0の増加が保磁力の増加に寄与していることが示唆された。

そこで改めてPC0とXRDスペクトルの関係に注目してみた。図7に浸透前後のXRDスペクトル例を示す。基本的に浸透後はシェル構造が形成し、シェル中のNd濃度が増加するため、コアの格子定数よりもシェルの格子定数が収縮する。

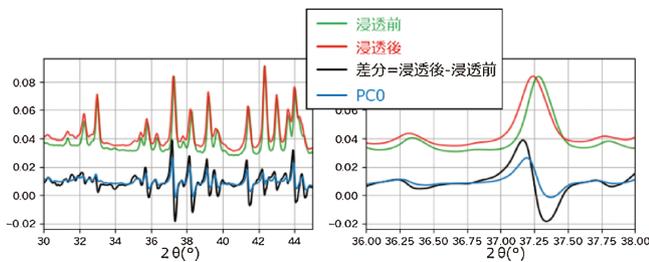


図7 浸透前後のXRDスペクトルとPC0の解釈.

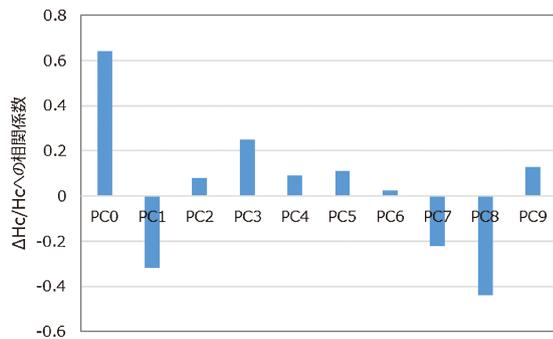


図8 主成分毎の保磁力への相関係数.

そのため、主相(Nd-Fe-B相)に由来するピークの裾が低角側に僅かにシフトすると考えられる。浸透前後の差分とPC0を比較するとかなり近い挙動を示していることが確認できる。したがってPC0の主成分はピークの裾の広がりを表しており、PC0の係数はピーク低角側の裾の大きさを反映していると考えられる。よってPC0の係数が増加するほどNd比率の高いシェルが形成されたことを反映していると考えられる。

図8に主成分毎の保磁力変化への相関係数を示す。累積寄与率に大きく寄与しているPC0が保磁力変化にも大きな正の相関係数を有していることが分かる。従ってシェル形成に寄与していると考えられるPC0の増加は保磁力の増加にも大きく関与していると考えられる。

以上のことから、これまで数nm~数十nmの厚さのシェルの形成は電子顕微鏡でしか確認することができなかったが、今回、Material DXを活用することによりXRDという比較的簡便な手法において、短時間かつ、低コストに省Nd磁石のシェルの形成が判断できた。またシェルの形成有無だけでなく、PC0の係数からそのシェルの形成度も定量的に表すことが可能になった。今回のような検討でわかった制御すべき組織項目と、各社の有する制御条件データを活用することで、性能を高める制御条件の指針が得られると考えられる。今後はそれらのXRDから得られた組織因子である

主成分の係数を記述子とした機械学習を通して、省Nd磁石のコアシェル組織の最適化、特性の最大化を図る。

Material DXを用いて行われたXRDデータの機械学習により、保磁力に影響のある成分(組織因子)を人間の知見を入れることなく自動的に抽出することができた。

今回のコアシェル組織の定量化以外にも、機械学習による特徴量抽出が、新たな材料開発基盤として有効な技術であることが、今回開発された材料解析プラットフォームMaterial DXによる省Nd磁石をモデル材料として行った解析により実証されており、コアシェル組織の高効率かつ詳細な解析とあわせて、省Nd磁石の継続課題の克服の開発加速がはかられた。今後、省Nd磁石のさらなる高性能化が期待される。

4. 実用化状況および今後

省Nd磁石は、種々のNd-Cu合金浸透処理条件でのコアシェル組織制御を用いた材料設計・磁気特性自由度の高い、貴重なレアアース資源の需給バランスを保つ磁石として各社へ試作提供中であり、車両電動化、家電、ドローン、ロボティクス等へ、今後の幅広い利用が期待されている。磁石メーカーとの連携のもと、さらなる社会実装を進める。

Material DXでは、磁石以外にも触媒、高分子、ゴムなど様々な特徴量の抽出に成功しており、無機・有機材料全般に適用可能なスペクトルデータを使い切る有用なシステムとしてすでに内外のユーザーによる実証実験の段階にある。今後も機能向上・拡充を継続しつつ、誰にも使いやすい身近なシステムとして、更なる普及を促進する。

当該開発に関わる特許としては、特許第6183457号、同6642419号などが登録済である。

なお、今回の研究・開発の一部は、新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)が推進する「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」の一環として実施した。

文 献

- (1) M. Ito, M. Yano, N. Sakuma, H. Kishimoto, A. Manabe, T. Shoji, A. Kato, N. M. Dempsey, D. Givord and G. T. Zimanyi: AIP Advances, **6**(2016), 056029.
- (2) T. Shoji, M. Ito, N. Sakuma and A. Kato: Journal of Society of Automotive Engineers of Japan, **72**(2018), 102.
- (3) Toyota Global Newsroom Feb. 20, (2018).
- (4) 新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)ニュースリリース 2月20日, (2018).
- (5) K. Saito, M. Yano, H. Hino, T. Shoji, A. Asahara, H. Morita, C. Mitsumata, J. Kohlbrecher and K. Ono: Scientific Reports, **9**(2019), 1526.
- (6) 小野寛太, 矢野正雄, 庄司哲也, 森田秀和, 浅原彰規, 上野哲郎: SATテクノロジー・ショーケース2018, (2018), 87.