第 54 卷第 1 期
2026 年 1 月

硅 酸 盐 学 报
JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY

Vol. 54，No. 1
January，2026

http://jccsoc.cbpt.cnki.net

DOI：10.14062/j.issn.0454-5648.20250793

综 合 评 述

数据驱动的 Sm-Co 基稀土永磁合金研究进展

吕 皓，许国婧，刘培鑫，韩崇宇，郭 凯，刘 东，宋晓艳

(北京工业大学材料循环低碳再生全国重点实验室，新型功能材料教育部重点实验室，材料科学与工程学院，北京 100124)

摘 要：Sm-Co 基稀土永磁合金在高温用永磁材料领域具有不可替代的重要地位。然而，目前对 Sm-Co 基永磁合金的成分设计仍以实验试错法为主，使得新型合金的研究开发效率较低。本文系统综述了数据驱动研究范式在 Sm-Co 基稀土永磁合金高性能化设计研究中的关键进展，阐述了如热力学计算、第一性原理计算等传统计算材料学方法在 Sm-Co 基合金物相分析和磁性能预测方面的进展，重点介绍和讨论了基于机器学习方法的 Sm-Co 基永磁合金成分高通量设计与多目标性能协同优化的新进展。最后展望了多尺度计算模拟、物理可解释机器学习、逆向设计闭环系统等融合人工智能的研究新范式推动本领域数字化高效研究的发展趋势。

关键词：数据驱动；机器学习；稀土永磁合金；计算材料学；相稳定性；磁性能
中图分类号：TG131　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2026)01–0049–21
网络出版时间：2025–12–31

作为世界范围内最具有资源特色的关键战略材料之一，稀土功能材料是支撑新一代信息技术、航空航天与现代武器装备、先进轨道交通、新能源汽车和高性能医疗器械等高技术领域的核心材料。按照使用功能划分，稀土功能材料主要包括稀土永磁材料[1–2]、稀土催化材料[3]、稀土发光材料[4]、稀土储氢材料[5–6]和稀土抛光材料[7]等。其中，稀土永磁材料由稀土元素和过渡族金属元素组成，是支撑现代社会的重要基础功能材料。永磁材料的重要磁性能指标包括矫顽力、饱和磁化强度、剩余磁化强度、居里温度、最大磁能积等。相比其他磁性材料，稀土永磁材料具有更高的最大磁能积和内禀矫顽力，其优异性能促进了器件的小型化、轻量化和节能降耗，已广泛应用于能源、机械、医疗、航天、航空等多个重要领域。

稀土永磁合金高的磁性能与稀土元素特殊的 4f 电子层存在较强的各向异性密切相关，稀土元素同典型的铁磁性过渡金属元素相结合，最大限度地保留了过渡金属的高饱和磁化强度，确保了稀土永磁材料在饱和磁化强度和磁晶各向异性两个方面的优势[8]。根据开发应用的时间，稀土永磁材料一般划分为 3 代：第一代 1:5 型稀土钴基材料、第二代 2:17 型稀土钴基材料以及第三代钕铁硼(Nd-Fe-B)稀土永磁材料[9]。商用 Nd-Fe-B 磁体的室温综合磁性能最好，可以满足大部分工况下的使用要求[10–13]，但是其主相 $Nd_2Fe_{14}B$ 较低的居里温度导致其即便在添加重稀土元素后也只能在 200 ℃以下使用，难以满足特殊领域的应用要求。

尽管受到 Nd-Fe-B 永磁材料行业迅速发展的影响，Sm-Co 基永磁体仍然是现有使用温度可达 250 ℃以上的磁性能最佳的永磁材料，且具有良好的耐蚀性及抗氧化能力，在一些苛刻的环境和特定领域中仍有其独特的优势，在航空航天发动机、磁力轴承、微波通讯等高精尖技术领域有着不可替代的作用[9, 14]。随着新应用领域和新技术的发展，Sm-Co 基永磁体行业将持续受到关注并获得新的发展机遇。Sm-Co 合金因具有高的居里温度、大的磁晶各向异性以及良好的热稳定性，成为最有希望在 500 ℃及以上温度使用的永磁材料，但是其综合磁性能仍有待提高。$SmCo_5$ 基磁体具有高磁晶各向异性和高矫顽力，力学性能好，适于加工成各种复杂

收稿日期：2025–10–31。　修订日期：2025–11–20。
基金项目：国家重点研发计划项目(2021YFB3501502，2021YFB3501504)；
国家自然科学基金(52494942)。
第一作者：吕 皓(1990—)，男，博士，副教授。
通信作者：吕 皓(1990—)，男，博士，副教授。
宋晓艳(1970—)，女，博士，教授。

Received date: 2025–10–31.　**Revised date:** 2025–11–20.
First author: LU Hao (1990–), male, Ph.D., Associate Professor.
Correspondent author: LU Hao (1990–), male, Ph.D., Associate Professor.
SONG Xiaoyan (1970–), female, Ph.D. Professor.
E-mail: haolu@bjut.edu.cn; xysong@bjut.edu.cn

异形，但是最大磁能积较低。Sm_2Co_{17} 型化合物的磁矩大，居里温度高，但是磁晶各向异性小。研究人员通过优化成分、调控多级退火和缓慢冷却等一系列工艺制备了具有胞状组织的 Sm_2Co_{17} 基合金，提高了室温和高温磁性能[9]。

高温永磁体的研究多以 2:17 型磁体为对象，但是随着应用需求的发展，需要开发更多的 Sm-Co 体系以适应不同服役条件的要求。近年来，以亚稳相为主体的新型磁体得到了越来越多的关注，例如具有 $TbCu_7$ 型晶体结构的 1:7 型合金和具有 $ThMn_{12}$ 型结构的 1:12 型合金。1:7 型磁体具有更低的矫顽力温度系数[15]，1:12 型磁体则具有更高的饱和磁化强度[16]，两者对开发新型高温永磁合金具有重要的意义。但是这些亚稳的物相通常不能在室温稳定存在，需要通过添加掺杂元素和优化微观组织来调控它们的稳定性[17–22]，这又会带来对于其磁性能的影响。

长期以来，通过工艺设计和成分优化提升磁性能是稀土永磁材料研发的重点。目前，针对 Sm-Co 基永磁材料的研究在制备方法和成分设计方面已经取得显著进展，特别是在通过工艺优化、掺杂改性提高室温与高温磁性能方面。然而，单一的实验研究往往难以揭示材料磁性变化的内在机制，材料成分、物相组成和微观组织的调控优化主要依赖于实验试错法，这在很大程度上限制了 Sm-Co 基稀土永磁材料的研发与迭代速度。

在人类对材料认知和利用的过程中，研究范式在不断演变，经历了实验观测、理论建模、计算仿真、数据科学 4 种范式[23]。近年来，智能化科研(AI for science)作为第五范式异军突起，逐步成为科学研究的主流范式之一[24]。随着科学研究范式的发展，多尺度计算模拟研究开始在 Sm-Co 基永磁材料的开发中占据重要地位。利用计算仿真的方法，研究者能够更加深入地理解材料的内在特性与规律。这一研究途径为 Sm-Co 基永磁合金的性能优化和新材料的探索提供了强有力的支持。同时，结合日益先进的计算机硬件与算法，将实验研究、多尺度建模与数据驱动方法相结合的材料智能数据挖掘与应用也显著加速了人工智能辅助的面向目标性能的材料设计[25–29]。Sm-Co 基永磁材料在成分设计和工艺优化方面的广阔探索空间与多尺度计算和数据驱动方法的耦合，显著推动了智能化稀土永磁材料的设计开发进程。

本文在简要介绍热力学计算、第一性原理计算等传统计算材料学方法应用于 Sm-Co 基合金物相分析和磁性能预测等方面工作的基础上，将重点综述数据驱动研究范式在 Sm-Co 基稀土永磁合金相稳定性控制、高性能化设计等研究中的代表性研究进展。

1 Sm-Co 基合金物相稳定性的热力学计算

1.1 Sm-Co 基合金的相图计算

Sm-Co 二元体系是 Sm-Co 基合金的基础，Buschow 等[30, 31]首先系统研究了 Sm-Co 体系，发现了包括 Sm_3Co、Sm_9Co_4、$SmCo_2$、$SmCo_3$、Sm_2Co_7、$SmCo_5$、Sm_2Co_{17} 在内的 7 种金属间化合物。后续的大量研究发现了 Sm_5Co_{19} 新的物相[32–34]，并将 Sm_9Co_4 修正为 Sm_5Co_2 化学计量比[35]。Sm-Co 系统中存在的多种金属间化合物及相互之间复杂的转化对 Sm-Co 基永磁材料的设计和开发提出了挑战。热力学计算作为材料设计的关键工具，可高效揭示元素之间的相互作用、相平衡规律及相稳定性，为合金成分优化与制备工艺改进提供理论支撑。从二元体系建模、三元体系扩展到关键相稳定性分析，热力学计算在 Sm-Co 基合金的设计中发挥了重要作用。

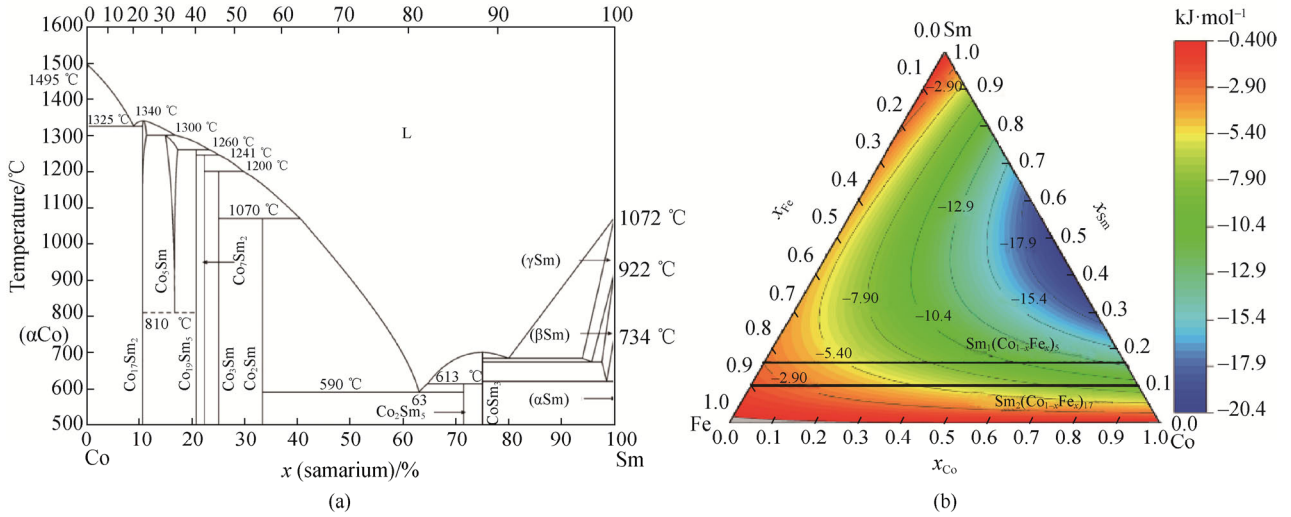
Sm-Co 二元体系的热力学建模需精准描述多相平衡与化合物特性。早期研究中，Schneider 等[36]虽开展了热力学评估，但未公布关键参数；Su 等[37]通过相图计算(CALPHAD)方法优化了体系，却存在高温下不切实际的混溶液相间隙问题。Yuan 等[38]基于亚晶格模型，首次考虑了 $SmCo_5$ 和 Sm_2Co_{17} 的溶解度特征，并利用 Hillert-Jarl 模型引入居里温度与磁矩参数，修正了吉布斯自由能的磁贡献，最终获得自洽的热力学参数，计算相图与实验数据高度吻合，为 Sm-Co 基永磁合金的设计与制备提供了可靠的热力学基础。

然而实际应用的 Sm-Co 基永磁体均为多组分合金，多元体系的元素间相互作用复杂，数据量庞大且热力学数据稀缺。测定合金的热力学参数又需昂贵耗材和大量重复性实验。目前最常用的 2:17 型高温永磁体一般以 $Sm_2(Co,Fe,Cu,Zr)_{17}$ 为核心成分，其相平衡数据仅涉及部分温度和成分范围[39, 40]，难以指导成分优化和热处理工艺设计。为了解决热力学数据缺失的问题，研究者通过耦合理论模型来开展多元 Sm-Co 基合金的相图计算。Miedema 公式[式(1)]作为经典的半经验理论模型，常被用于预测二元合金体系的混合焓(ΔH_{AB})，近似认为合金物相的

形成能力与组成合金的元素的电负性(φ)和电子密度(n_{WS})差异相关[41, 42]，式中：P、Q、R、α、μ 为材料相关的常数；V 为摩尔体积；x 为摩尔分数。但是其应用于稀土合金时误差较大，主要因未考虑稀土元素独特的电子壳层结构及与金属原子的复杂相互作用。Zhu 等[43, 44]将 Li 等[45]提出的原子尺寸修正因子[b，见式(2)]引入 Miedema 模型，计算的 Sm-Co 基合金热力学参数的平均偏差远小于原始模型。进一步耦合不对称几何模型(Toop)[46]，将二元合金的热力学参数外推至多元合金，并分析了 Sm 分别与 Co、Fe、Cu、Zr 元素形成化合物的能力。Liu 等[47]也基于实验结果与已有二元体系(Sm-Co、Sm-Fe、Co-Fe)的热力学评估，如图 1b 所示，采用 CALPHAD 方法计算了 Sm-Co-Fe 三元体系的等温截面、垂直截面、液相投影图及自洽热力学参数，与实验数据吻合良好。

$$\Delta H_{AB}=f_B^A\frac{x_A\left[1+\mu_A x_B(\varphi_A-\varphi_B)\right]\times x_B\left[1+\mu_B x_A(\varphi_B-\varphi_A)\right]}{x_A V_A^{2/3}\left[1+\mu_A x_B(\varphi_A-\varphi_B)\right]V_B^{2/3}\left[1+\mu_B x_A(\varphi_B-\varphi_A)\right]},$$
$$f_B^A=\frac{2PV_A^{2/3}V_B^{2/3}\left[\frac{Q}{P}\left(n_{WSA}^{1/3}-n_{WSB}^{1/3}\right)-(\varphi_A-\varphi_B)^2-\alpha\frac{R}{P}\right]}{\left(n_{WSA}^{1/3}\right)^{-1}+\left(n_{WSB}^{1/3}\right)^{-1}} \tag{1}$$

$$b(x)=1-\frac{1}{2}\cdot\frac{x_A x_B\left|V_A^{\frac{2}{3}}-V_B^{\frac{2}{3}}\right|}{x_A^2V_A^{\frac{2}{3}}+x_B^2V_B^{\frac{2}{3}}} \tag{2}$$



x is mole fraction.

图 1　(a) Sm-Co 二元合金相图[48]；(b)热力学计算的 Sm-Co-Fe 三元系统混合焓的 1873 K 等温截面[44]

Fig. 1　(a) Sm-Co binary alloy phase diagram[48]; (b) calculated isothermal section at 1873 K for the mixing enthalpy in the Sm-Co-Fe ternary system[44]

以上计算结果为 $Sm_2(Co,Fe)_{17}$ 型磁体的成分设计提供了关键的相图与热力学支撑，通过调控 Fe 的含量和退火工艺，可以优化 1:5 相和 2:17 相的比例，并避免弱磁性相的析出，得到兼具高各向异性和高磁化强度的磁体。

1.2　引入晶粒组织尺度的 Sm-Co 合金相稳定性热力学计算

大量研究表明，纳米晶 Sm-Co 合金的矫顽力较粗晶 Sm-Co 铸锭显著提高。随着晶粒尺寸的减小，畴壁被增加的晶界强烈钉扎，磁畴转动和畴壁位移困难，矫顽力逐渐增大，并在达到与单畴尺寸相等的临界晶粒尺寸时达到最大值[49, 50]。传统粗晶材料的相稳定性可通过经典热力学解释，但纳米晶材料因晶粒尺寸减小造成晶界原子占比显著提升，会出现与粗晶材料截然不同的相行为。该现象的核心原因是：纳米晶材料中大量无序的晶界原子会改变体系的熵、焓和吉布斯自由能，使其热力学函数与粗晶材料产生本质差异。需建立新的纳米尺度热力学

模型来解释其物相稳定性规律。

为了量化晶界和晶粒尺寸对热力学函数及纳米晶合金物相稳定性的影响，将纳米晶体系视为“晶粒内部(有序原子结构)+晶界(无序原子结构)” 的复合体系，总热力学性质为两部分的加权平均。为表征晶界的结构特征，反映晶界原子排列的疏松程度，引入了与式(3)表示的晶粒尺寸直接相关的过剩体积概念，其中：d 为晶粒直径；h 为晶界厚度；ρ_i 为晶粒内部原子数密度；ρ_b 为晶界原子数密度。因此，晶界的单胞体积可由式(4)计算，其中 V_0 为完美晶体的单胞体积。

$$\Delta V=\frac{\left[d^3-(d-h)^3\right]/\rho_b}{d^3/\rho_i} \tag{3}$$

$$V_b(d)=V_0(1+\Delta V) \tag{4}$$

基于晶界过剩体积的概念，可以得到晶界[见式(5)]和整个纳米晶体系[见式(6)]的焓(H)、熵(S)、吉布斯自由能(G)函数；其中：E 为晶界原子结合能；P 为晶界负压；C_v 为定容比热容；γ 为晶界膨胀晶体的 Grüneisen 参数；T_R 为参考温度；x_b 为晶界体积分数；N_A 为阿伏伽德罗常数；H_i、S_i、G_i 为晶内的焓、熵和吉布斯自由能[51]。

$$\begin{aligned}&H_b(d,T)=E(d)+P(d,T)V_b\\&S_b(d,T)=C_v(d,T)\gamma(d,T)\ln\left[V_b(d)/V_0\right]\\&G_b(d,T)=H_b(d,T)+C_v(d,T)(T-T_R)-\\&T\left[S_b(d,T)+C_v(d,T)\ln(T-T_R)\right]\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}H(d,T)&=N_A x_b H_b(d,T)+(1-x_b)H_i(T)\\S(d,T)&=N_A x_b S_b(d,T)+(1-x_b)S_i(T)\\G(d,T)&=N_A x_b G_b(d,T)+(1-x_b)G_i(T)\end{aligned} \tag{6}$$

利用以上模型，Xu 等[52]计算了晶粒尺寸对 2:17R 菱方相和 2:17H 六方相稳定性的影响。在传统的粗晶 Sm-Co 合金中，室温下 2:17R 相稳定，2:17H 相仅在高于 1520 K 时稳定。然而，随着晶粒尺寸减小，2:17H 相和 2:17R 相的吉布斯自由能差 ΔG_{H-R} 减小，如图 2a 所示。当晶粒尺寸小于临界值(30 nm)时，2:17H 相可在室温下稳定存在，计算结果也得到了实验验证[52]。

模型进一步引入了物相活度参数 a_i 来定量描述亚稳相的稳定性[见式(7)]，其中：$\mu_i(d)$ 为合金中组元的化学势，是吉布斯自由能的偏微分；$\mu_i^o(d)$ 为参考态化学势；R 为气体常数；$a_i=1$ 表示物相处于热力学平衡状态，可以稳定存在，$a_i<1$ 表示物相不稳定[53]。如图 2b 所示，当晶粒尺寸小于 51 nm 时，$SmCo_7$ 相的活度为 1，传统粗晶合金中不能以单相形式存在的亚稳态 $SmCo_7$ 相在纳米晶系统中可以稳定存在。亚稳相 $SmCo_7$ 活度随晶粒尺寸变化的计算结果已在实验中得到了验证[54]：当合金的晶粒尺寸为 20 nm 和 35 nm 时，室温下为单一 $SmCo_7$ 相，当晶粒尺寸为 161 nm 时，$SmCo_7$ 分解为 Sm_2Co_{17} 和 $SmCo_5$。

$$\mu_i(d)=\mu_i^o(d)+RT\ln\ln a_i(d) \tag{7}$$

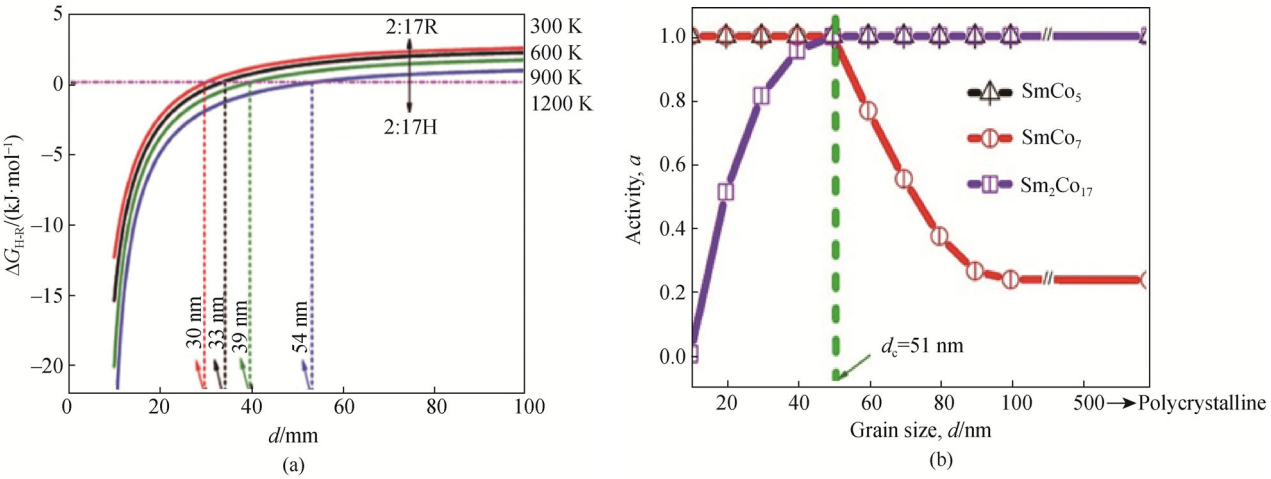


图 2 晶粒尺寸对 Sm-Co 二元合金物相组成的影响：(a) 晶粒尺寸对 2:17R 相和 2:17H 相吉布斯自由能的影响[52]；(b) 晶粒尺寸对 1:5 相、1:7 相、2:17 相活度的影响[53]

Fig. 2 Effect of grain size on the phase constitution in Sm-Co binary alloys: (a) Influence of grain size on Gibbs free energy of the 2:17R and 2:17H phases[52]; (b) Influence of grain size on the activity of 1:5, 1:7, and 2:17 phases[53]

以上针对纳米晶材料建立的系列热力学模型可以定量描述相稳定性、相变行为和多相平衡对晶粒尺寸的依赖性，为纳米晶 Sm-Co 基永磁材料的物相设计提供了理论工具。通过调控晶粒尺寸可以稳定

包括 $SmCo_7$ 在内的亚稳相并设计物相组成和比例，从而优化磁性能。

2　Sm-Co 基合金物相稳定性和磁性能的第一性原理计算

自二十世纪九十年代起，科研工作者就开始利用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算对稀土永磁合金进行理论研究。第一性原理计算主要通过求解系统的薛定谔方程，计算材料的电子结构、能量状态和物理性质，因此可以在原子和电子尺度上计算 Sm-Co 体系的原子占位、磁矩、磁晶各向异性场、形成能、能带结构等，分析 Sm-Co 基合金的物相稳定性和磁性能机理，为高性能 Sm-Co 基合金的成分设计提供理论指导。

2.1　二元 Sm-Co 合金磁性能的理论分析

经典的 $SmCo_5$ 体系常被当作模型化合物进行研究，DFT 计算明确了其磁晶各向异性的核心来源。采用全势线性缀加平面波(FLAPW)结合 LDA+U 方法，研究发现，$SmCo_5$ 的磁晶各向异性能(MAE)主要源于 Sm 的 4f 壳层各向异性，晶体场与自旋-轨道耦合强度相当，使 4f 电子态对磁场方向变化敏感，计算得到的 MAE 与实验值吻合[55]。电子结构分析显示，LDA+U 方法可有效避免 Sm 的 4f 电子被错误地钉扎在费米能级，将 4f 带分裂为上、下哈伯德带，反映 4f 态的部分离域性；电荷密度计算显示，磁化沿 *c* 轴(易轴)与 *a*–*b* 面(难轴)时，Sm 的电荷分布形状存在明显差异(见图 3)[56]。这些都为理解 4f-3d 电子交互作用提供了关键依据。然而利用这种方法计算得到的 Sm 原子轨道磁矩存在严重的淬灭现象，导致计算得到的 Sm 的磁矩远低于洪德规则的预期数值；且 Sm 轨道矩与总自旋矩反平行，与传统两亚晶格模型矛盾。但是，由于 Sm 和 Co 元素交换耦合作用方向的计算错误叠加 Sm 轨道磁矩的淬灭，反而使得计算得到的总磁矩与实验具有很好的一致性。此外，LDA+U 的方法虽然能够较好地再现 Sm-Co 化合物的 MAE 和总磁矩数值，但是计算结果强烈依赖于在位库仑排斥能哈伯德 U 参数的取值，此参数的选取却通常无严格的定义。

Meena 等[57]比较了基于原子轨道线性组合(LCAO)的 DFT 计算、全势线性缀加平面波的 DFT 计算等多种 DFT 计算方法和不同哈伯德 U 参数选取方案对于 $SmCo_5$ 晶体中不同晶格位点 Sm 原子和 Co 原子磁矩的影响，并与实验结果进行了对比验证。发现 LCAO-GGA 方案可以更好地描述交换关联能，LDA+动力学平均场理论(DMFT)方法的计算结果更接近实验测试得到的磁矩。该研究为利用 DFT 计算分析 Sm-Co 合金的磁性能提供了计算参考方案。如何准确描述 Sm-Co 合金中 Sm 原子的电子分布以及 Sm 和 Co 原子中的电子交互作用是计算 Sm-Co 合金磁性能面临的关键挑战。

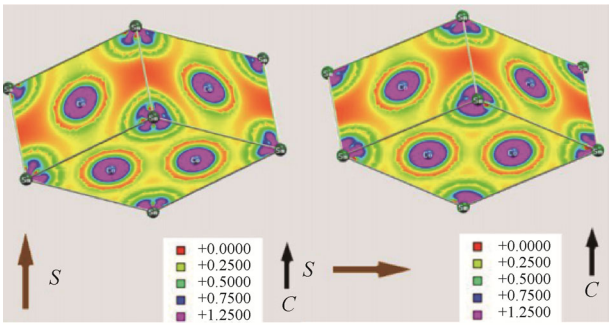


图 3　DFT 计算的磁化沿 *c* 轴(易轴)和 *a*–*b* 面(难轴)时，$SmCo_5$ 晶体中的电荷分布形状[56]

Fig. 3　DFT-calculated charge distribution in $SmCo_5$ crystal when magnetized along the *c*-axis (easy axis) and *a*–*b* plane (hard axis) [56]

Sm_2Co_{17} 基合金胞状组织对其高的综合磁性能起到关键性作用，为了从原子尺度研究胞状组织的形成以及 $Sm_2Co_{17}/SmCo_5$ 相界面的结构，需要开发能够反应界面处原子相互作用的精准的原子间势函数。现有 Sm-Co 体系的 Morse 势需针对不同物相单独拟合参数，且界面区域拟合无物理意义；嵌入原子势(EAM)具普适性，但其精度尚存在疑问。Sobolev 等[58]利用标准稀土赝势，将 Sm 的 4f 电子纳入赝势，利用 DFT 方法计算了 Sm-Co 金属间化合物的结构、磁矩和弹性常数。基于这些数据，采用力匹配法构建了 Sm-Co 体系的嵌入原子势，该势函数能准确复现 Co 富集相的晶格参数、结合能及空位形成能，适用于研究相界面的结构和元素分布[58]。

对于其他二元体系，DFT 计算同样揭示了独特的磁性能机理。例如，$SmCo_3$ 作为亚稳体系，DFT 预测其磁矩主要源于 Co 的 3d 电子，且其高轴比导致显著的晶格各向异性，为后续掺杂优化提供了基础[59]。

2.2　掺杂元素影响 Sm-Co 合金相稳定性和磁性能的计算分析

过渡金属掺杂是优化 Sm-Co 合金性能的核心策略，DFT 计算通过对掺杂元素占位偏好、取代能及电子结构的分析，可以揭示掺杂调控相稳定性与磁性能的微观机制，为实验掺杂方案提供精准指导。

较早的研究多集中于 $SmCo_5$、Sm_2Co_{17} 物相，

前者具有高磁晶各向异性，后者具有高居里温度和高磁化强度。Liu 等[60]计算了不同浓度 Fe 掺杂对 $SmCo_5$ 晶格常数、态密度、磁矩、交换耦合参数的影响规律，提出了能够最大程度提高磁矩和交换耦合强度的最佳掺杂浓度。Gabay 等[61]计算了 $Sm(Co,Cu)_5$ 与 $Sm(Co,Fe,Cu)_5$ 的磁状态与结构转变，揭示了 Cu 的占位偏好依赖于合金的磁状态，预测了矫顽力提升源于 Cu 和 Co 原子的占位重排。本研究组和国内外其他研究者也开展了大量的 DFT 计算，分析多种掺杂元素对于 $SmCo_5$ 磁矩和磁晶各向异性能的影响[62, 63]。Sabirianov 等[64]计算了 Cu、Ti、Zr 在 1:5 和 2:17 两种物相中的占位倾向和偏聚能力，从电子结构层面揭示了 2:17 基磁体中胞状组织的形成机制。

尽管对于经典的 $SmCo_5$、Sm_2Co_{17} 体系已经开展了大量计算分析，对于一些潜在的具有优异磁性能的亚稳相的研究还相对较少。例如，$SmCo_3$ 的晶体结构为 $PuNi_3$ 型三角晶系，轴比 c/a>4.8，具有高晶格各向异性，是潜在的高性能永磁体。但实验证实其为亚稳态，且饱和磁矩低，这限制了其实际应用，需通过掺杂来优化其稳定性和磁性能。Fang 等[59]采用标准稀土赝势，利用 GGA+U 方法开展了 DFT 计算，研究了系列 3d 过渡金属取代不同的 Co 晶格位点时对结构稳定性、总磁矩、磁晶各向异性能的影响(见图 4)。发现掺杂 Cr、Mn、Fe 可同时提高 $SmCo_3$ 的结构稳定性和总磁矩。这些掺杂元素与 Co 之间的电子云重叠增强，强化了晶体中的金属键，因此稳定了 $SmCo_3$ 的晶体结构。$SmCo_3$ 晶胞中的 Cr、Mn、Fe 的自旋态密度不对称性显著，从而增强了 $SmCo_3$ 的总磁矩。同时，掺杂低浓度的 Cr 还可提高磁晶各向异性能，相比其他掺杂元素，低浓度 Mn、Fe 对磁晶各向异性能的降低程度更低。因此，DFT 计算推荐了 Cr、Mn、Fe 为提高 $SmCo_3$ 晶体稳定性和综合磁性能的优选掺杂元素。采用类似的计算分析方法，Fang 等[65]分析了掺杂元素对亚稳的 Ce_5Co_{19} 型菱方结构的 Sm_5Co_{19} 化合物稳定性和总磁矩的影响，本研究组研究了掺杂元素对亚稳的 $TbCo_7$ 型菱方结构的 $SmCo_7$ 化合物稳定性和总磁矩的影响[66]。

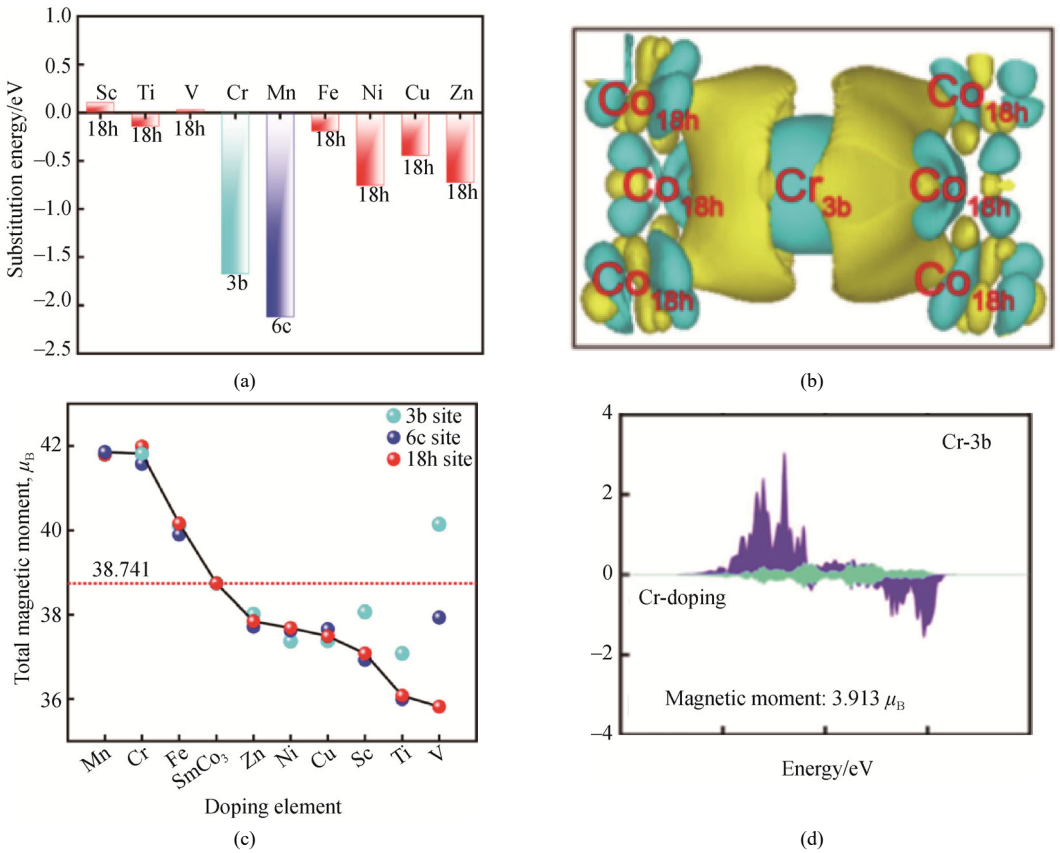


图 4 DFT 计算的掺杂元素对 $SmCo_3$ 晶体结构稳定性、电荷密度分布(黄色和蓝色分别代表电子的富集和缺失)、总磁矩和态密度的影响[59]

Fig. 4 Effects of doping elements on the structural stability, charge density distribution (yellow and blue regions represent electron accumulation and depletion, respectively), total magnetic moment, and density of states in $SmCo_5$ crystal, as obtained from DFT calculations[59]

2.3 新型 Sm-Co 基合金的计算设计

在对典型 Sm-Co 化合物进行掺杂研究的基础上，国内外研究者也对新的物相和复合材料展开了研究。为提高 $SmCo_5$ 基合金的磁性能，研究者尝试用 Fe 替代 Co，但 $SmFe_5$ 在热力学上不稳定，无法保持六方晶体结构。Söderlind 等[67]提出通过 Ni 掺杂来稳定 Sm-Fe 基合金，通过第一性原理计算，发现过渡金属的 3d 电子数是决定 $SmTM_5$ 结构稳定性的关键因素(TM 表示过渡金属元素)。预测了 $SmCoNiFe_3$ 兼具高磁性能和高稳定性，其磁矩高于 $SmCo_5$，同时具有远高于 $Nd_2Fe_{14}B$ 的居里温度和磁晶各向异性能。Sabiryanov 等[68]计算设计了 $SmCo_5/Co_{1-x}Fe_x$ 复合材料，平衡硬磁相的高磁晶各向异性和软磁相的高饱和磁矩。DFT 计算发现二者界面晶格失配仅约 1%，结构兼容性优异；界面处近邻与次近邻原子的交换参数接近，界面交换耦合稳定，为复合材料制备提供了理论基础。进一步结合微磁学模拟，设计了硬磁相和软磁相的厚度，能够在保证 $SmCo_5$ 高居里温度的同时大幅度提升其最大磁能积[68]。这些新的物相和复合材料的设计，拓展了 Sm-Co 基永磁材料的应用场景，为兼顾高稳定性和高磁性能的稀土永磁材料设计提供了新路径。

DFT 计算已成为 Sm-Co 基稀土永磁合金研究的核心工具，在原子与电子尺度为理解与设计 Sm-Co 基稀土永磁合金提供了若干普适性结论与关键指导：明确了 Sm-Co 基合金高磁晶各向异性主要源于 Sm 的 4f 电子轨道与晶体场的相互作用；揭示了过渡金属掺杂元素存在明确的晶格占位偏好，从而调控 4f-3d 电子间的相互作用和态密度，可以影响体系的饱和磁矩与磁晶各向异性；通过计算形成能和电荷分布，证实了特定的掺杂可以增强金属键合来有效稳定具有优异磁性能潜力的亚稳相，给出了亚稳相稳定化的电子结构判据。DFT 计算在二元体系机理解析、掺杂调控及新合金设计中发挥了不可替代的作用：通过对电子结构、磁矩及 MAE 的定量计算，为实验掺杂提供了精准指导，设计出多款高性能新合金，推动了 Sm-Co 基永磁材料向高磁性能和高稳定性方向发展。

尽管 DFT 计算能够揭示原子尺度的磁相互作用，但是对 Sm 4f 电子强关联效应的描述仍需进一步优化。此外，多元掺杂体系的超胞计算和 f 电子交互作用需要大量的计算资源，目前还较难实现高通量的成分筛选和精确的掺杂元素含量设计。

3 Sm-Co 基合金物相稳定性和磁性能的机器学习研究

如前两节所述，以热力学计算和第一性原理计算等为代表的传统计算材料学方法在揭示 Sm-Co 基稀土永磁合金的相平衡规律、微观磁性能机理和磁性能优化方面已经发挥了关键的作用。然而，高性能稀土永磁材料的开发趋于成分和物相组成的多元化、结构演变复杂，当研究目标转向多元复杂体系的高通量成分筛选、多种磁性能指标的协同优化时，这些传统的计算材料学方法仍然面临挑战，难以对涵盖广泛成分和相结构的材料体系以及含多种掺杂元素的体系进行高通量计算和预测。CALPHAD 依赖于精确但获取困难的热力学参数，其高通量计算效率受限；DFT 计算虽然能从原子尺度提供深刻见解，但其巨大的计算成本使得对广阔成分空间进行系统扫描变得不切实际。因此，永磁材料的热力学计算和第一性原理计算仅局限于部分特定体系，难以开展涵盖更多影响因素且计算效率高的大规模预测。近年来，基于机器学习(ML)的数据驱动模型与方法在新材料开发领域发挥着越来越重要的作用，面对高维、非线性的复杂科学问题，机器学习方法展现出其独特优势。通过数据驱动和人工智能的方式，直接从海量数据中学习并建立复杂映射关系，从而实现对材料性能的快速预测与设计，在材料科学与工程领域受到的关注日益增加。发展一种能够融合现有理论知识、高效挖掘“成分–结构–性能”内在关联，并实现快速预测与优化的新方法，成为推动 Sm-Co 基稀土永磁合金研发的必然需求，有望加速 Sm-Co 基稀土永磁材料的开发。

3.1 Sm-Co 基合金数据库的构建

数据驱动材料设计的前提是构建高质量的数据集，其数据来源可分为两类：一类来自高通量计算或实验，另一类来自已发表的研究成果。第一类数据的获取在很大程度上依赖于高通量实验方法与计算方法的发展，目前其应用范围还局限于较窄的材料体系。而从分散的研究成果中获取的数据集，能够充分利用以往研究产生的海量数据，解决各类科学问题。虽然 Sm-Co 基合金经过多年研究已经积累了大量分散数据，但是来自不同研究者的数据通常存在较大的多源异构性，数据规范度和完整度各不相同，这将极大程度影响数据库的质量，且很难直接用于机器学习。

本研究组基于多年来对 Sm-Co 基合金体系实

验和计算研究数据的收集和评估，建立了 Sm-Co 基合金专题数据库，对文献中的数据进行了整合、筛选、标准化处理。根据数据源与材料数据的关系，以“数据集”的概念来整理材料数据，同一数据集中的材料数据在原材料使用、工艺关系、测试方法、文件存储等方面起到了重要的协调作用，解决了数据源中对材料数据的重复使用造成数据冗余的问题。

为了提升数据收集效率与数据质量，加快生成适用于机器学习与数据驱动材料设计的高质量数据集，开发了可用于 Sm-Co 体系材料人工智能研究与应用的数据解析、关联和管理的信息系统，引导多用户协同、准确、全面、快速地从离散的文献中标注材料研究中的全方位信息，并自动建立数据之间的关联[69–70],该系统的框架如图 5 所示。在整合数据源、成分、物相、结构、制备工艺及性能的关系模型后，来自数据源的材料数据可被精准存储到数据库的各个关系表中，数据库符合科学数据的 FAIR(可发现、可访问、可互操作、可重用)原则。在材料知识信息解析、关联与管理系统的框架下，形成了多个面向不同材料设计问题的高质量数据集，为开展基于机器学习的数据驱动 Sm-Co 基永磁合金设计奠定了关键基础。

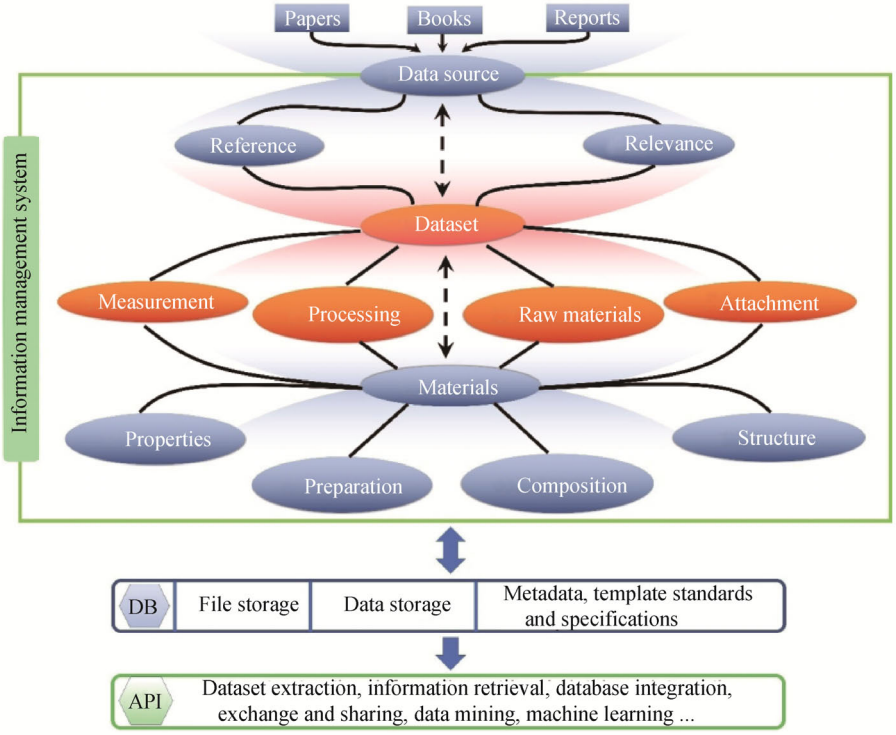


图 5 材料知识信息解析、关联与管理系统的架构与功能布局[69, 70]

Fig. 5 Architecture and functional layout of the Material Knowledge Information Analysis, Association and Management System[69, 70]

3.2 Sm-Co 基合金成分设计问题的机器学习研究策略

在构建的 Sm-Co 基材料专题数据库的基础上，针对 Sm-Co 基永磁合金不同性质的优化提出了广泛的利用机器学习进行掺杂元素筛选和成分设计的策略，如图 6 所示[71]。首先进行探索性的数据分析，将科学问题转化为与元素特征相关的参量。然后针对目标性能与元素特征开展相关性的分析。最后将所有可能元素的选定特征作为预测模型的输入，定量评估元素对目标性能的影响。根据这些结果，进行高通量的元素筛选和目标导向的成分设计。

3.2.1 面向磁性能的掺杂元素优选 在稀土永磁合金中，饱和磁化强度的指标水平决定了剩磁所能发挥的上限并限制了最大磁能积的开发，是磁性指标体系中的重要参量。理论上，合金的饱和磁化强度主要受成分调控，但制备及处理过程中不同技术路线、工艺参数组合等因素使磁体具有不同的微观组织状态，只能达到理论饱和磁化强度的某一分数，这让研究人员无法获知掺杂元素对饱和磁化强度的独立作用机理。至今，在针对饱和磁化强度这一磁性能指标进行的合金掺杂元素筛选、多元合金成分设计中，只是凭借经验避开那些对饱和磁化强度不利的元素。同时，实验周期长、测试成本高等因素又导致了大规模实验方案难以开展。

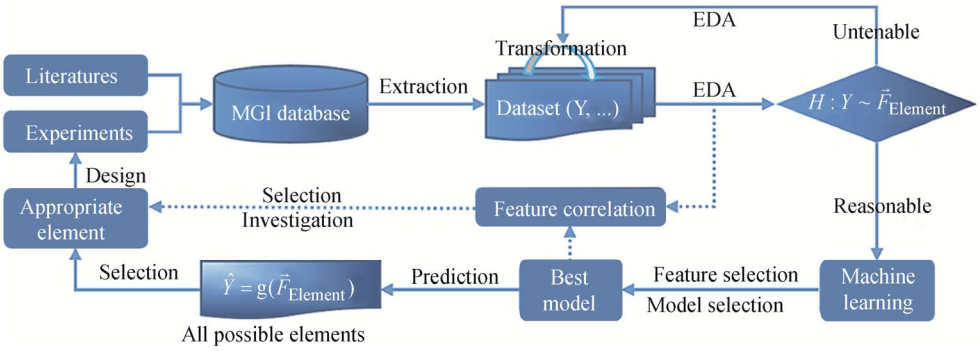


图 6　基于机器学习的 Sm-Co 基永磁合金元素筛选和成分设计策略示意图[71]

Fig. 6　Schematic diagram of machine learning-based strategy for element selection and composition design of Sm-Co-based permanent magnet alloys[71]

本研究组构建了 Sm-Co 基三元合金饱和磁化强度数据集，对大量数据按掺杂元素种类、制备工艺、材料形态、母合金中 Sm 和 Co 原子比例等进行分组，发现饱和磁化强度对掺杂元素含量的分组线性回归参数[式(8)中 S_R 和 I_R]是分析其各种影响因素的重要特征，如图 7 所示。回归截距 I_R 是受母合金 Co 含量和材料形态主导的量，而回归斜率 S_R 是受掺杂元素主导的量。基于径向基核函数的支持向量回归模型在已知掺杂元素的线性回归参数与掺杂元素典型特征之间建立了关联，实现了利用元素周期表大范围评估掺杂元素对 Sm-Co 基合金磁体饱和磁化强度的影响[71]。此外，机器学习中常采用的随机交叉验证方法展现出对已探索空间中随机产生的样本的预测能力，无法用于含新元素的材料设计方案。为了解决这一问题，构造了根据掺杂元素种类划分交叉验证子集的方法。与传统的随机划分数据不同，此方法在每一轮验证中，将某一种掺杂元素的所有相关数据作为测试集，其余元素的数据作为训练集。这样每一次的预测都是训练中没有用过的“新掺杂元素”，将这种交叉验证方法称为留出一种元素交叉验证法。这种方法旨在严格评估模型对完全未知的新掺杂元素的预测与泛化能力，更符合新材料发现的场景。

$$M_s = S_R \cdot x_{doping} + I_R \tag{8}$$

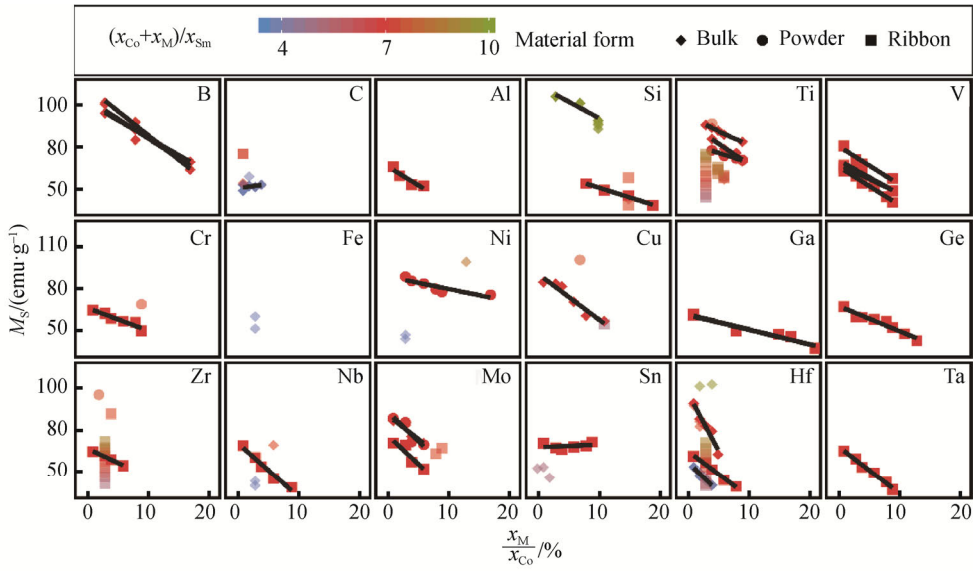


图 7　$SmCo_{x-y}M_y$ 合金的饱和磁化强度 M_s 与掺杂量 x_M/x_{Co} 之间的关系及其分组线性回归(散点为数据集中的数据，黑色线为机器学习方法的预测结果)[71]

Fig. 7　Relationship between saturation magnetization (M_s) and doping ratio (x_M/x_{Co}) in $SmCo_{x-y}M_y$ alloys, along with linear regression (scatter points represent data in the dataset, the black line indicates prediction results of the machine learning method)[71]

进一步利用线性回归、随机森林、支持向量机等多种机器学习算法进行模型训练，并基于掺杂元素的本征特性构建了考虑掺杂比例和成分的特征加权平均值和标准差两类新特征。采用包括初始特征

选择、子集选择以及自助抽样等步骤在内的多步特征选择策略，筛选出了对模型性能具有关键影响的特征，预测了掺杂元素的赝势核半径、熔化热、沸点、价电子数、共价半径的综合作用影响 Sm-Co 基合金的饱和磁化强度[72]。

基于以上机器学习模型的预测，绘制了不同掺杂元素的回归斜率 S_R，如图 8a 所示。其中红色较深的是变化斜率接近于 0 的掺杂元素，这样的掺杂元素具有维持与母合金同样高的饱和磁化强度的能力。蓝色较深的是显著降低合金饱和磁化强度的元素，在高饱和磁化强度 Sm-Co 基合金成分设计中应尽量避免。以 $SmCo_7$ 基合金为例，预测了含有不同浓度掺杂元素的合金饱和磁化强度，如图 8b 所示。除 Fe 和 Bi 外，其他掺杂元素均会不同程度地降低合金饱和磁化强度。其中，Mn、Ni、Ag、Sn、Cu 对饱和磁化强度的削弱作用较弱，与 Fe、Bi 一样可被认为是 M_s 友好型元素。基于预测的结果制备出了磁化强度高于 $SmCo_7$ 的 $SmCo_{6.2}Fe_{0.5}Mn_{0.3}$ 合金[72]。

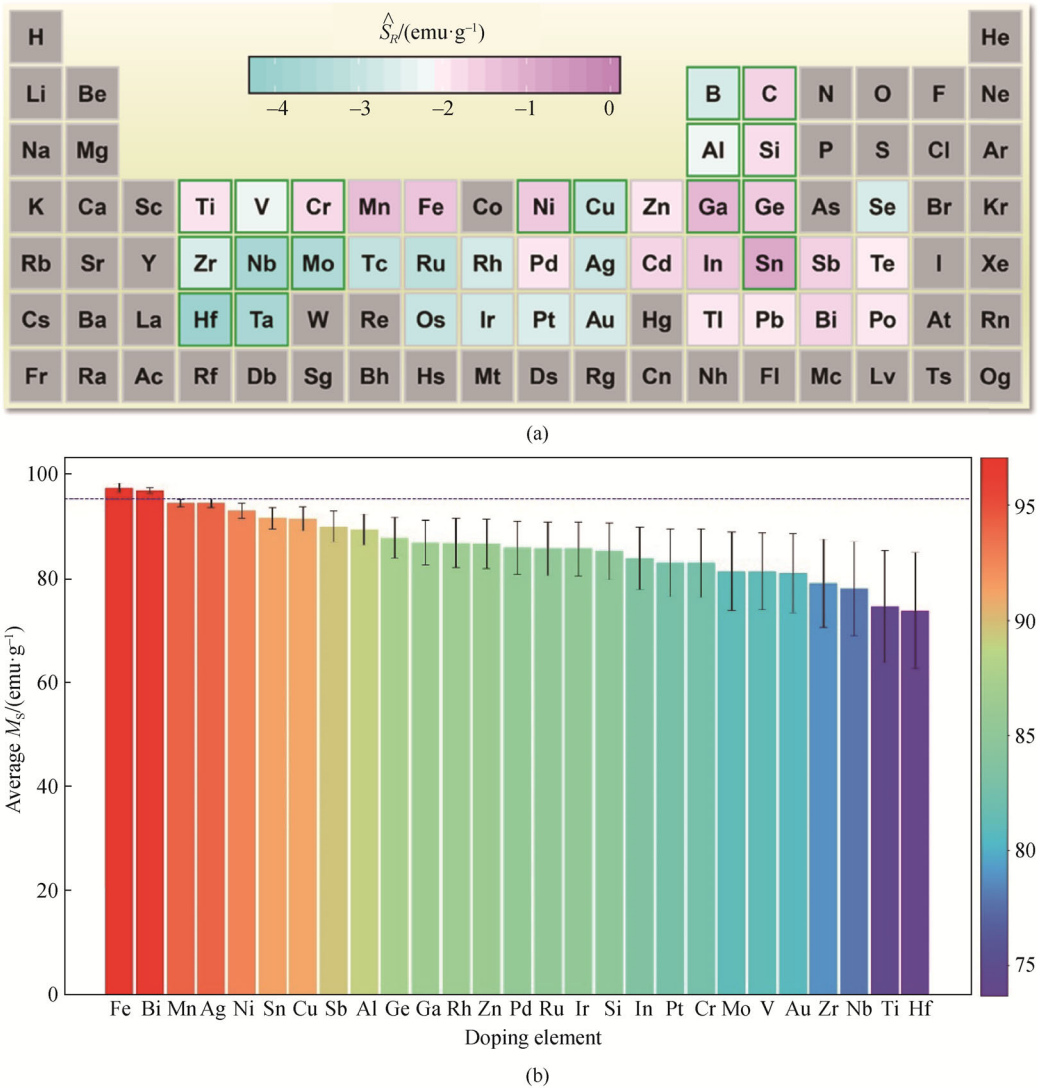


图 8　机器学习预测的掺杂元素对 Sm-Co 基合金饱和磁化强度的影响：(a) 掺杂元素对 Sm-Co 基合金饱和磁化强度作用系数的预测值[71]；(b) 掺杂元素对 $SmCo_7$ 基合金饱和磁化强度的影响[72]

Fig. 8　Machine learning-predicted effects of doping elements on the saturation magnetization of Sm-Co based alloys: (a) Predicted values of the influence coefficients of doping elements on the saturation magnetization of Sm-Co-based alloys[71]; (b) Impact of doping elements on the saturation magnetization of $SmCo_7$-based alloys[72]

矫顽力是 Sm-Co 基永磁合金设计中需要考虑的另一个关键性能，衡量了永磁体抵抗外部磁场干扰、保持自身磁化的能力。基于永磁材料科学的经验知识，结合已有的研究结果与磁学理论，选择了晶粒尺寸(d)、合金中的 Co 含量(二元基体合金中 Co 和 Sm 的摩尔比，X_{Co})、掺杂元素与 Co 的原子半径差

d_{Co}、掺杂元素取代 Co 的摩尔比(X_C)、合金的饱和磁化强度(M_s)作为影响矫顽力的材料特征。利用 SISSO 算法[73]构建了输入特征与合金矫顽力之间的显性构效关系，提升模型的可解释性。进一步选择与合金矫顽力相关性最强的描述子，统计每个运算特征出现的频率，筛选出现频率排名前 3 的描述子，组成重构特征集。最后对重构特征集进行线性相关性分析与 SHAP 重要性评价[74]，计算每个特征对于最终预测结果的贡献度，筛选出能够准确预测 Sm-Co 基合金矫顽力的重构特征为 $(X_{Co})^{-1}$, $\lg(M_S)$, $(X_C \cdot \Delta r - X_{Co})$, $(d)^2$, $e^{X_C \cdot \Delta r}$, $e^{-(d/M_S)}$。

利用筛选出的与 Sm-Co 基合金矫顽力最相关的 6 个重构特征训练机器学习模型，进一步对 Sm-Co 基合金矫顽力进行了高通量预测。发现利用重构特征集训练的模型准确率远高于利用原始特征集训练的模型，能够更加准确地预测 Sm-Co 基合金的矫顽力，更加适合对合金矫顽力的高通量预测。模型筛选了能够大幅提高 $SmCo_7$ 合金矫顽力且仍能保持较高饱和磁化强度的掺杂元素，如图 9a 所示。基于机器学习的预测，制备得到的掺杂 Ti、In、Al 的纳米晶合金的矫顽力比现有的 $SmCo_7$ 基合金矫顽力的最佳水平提高 33%左右(见图 9b)。

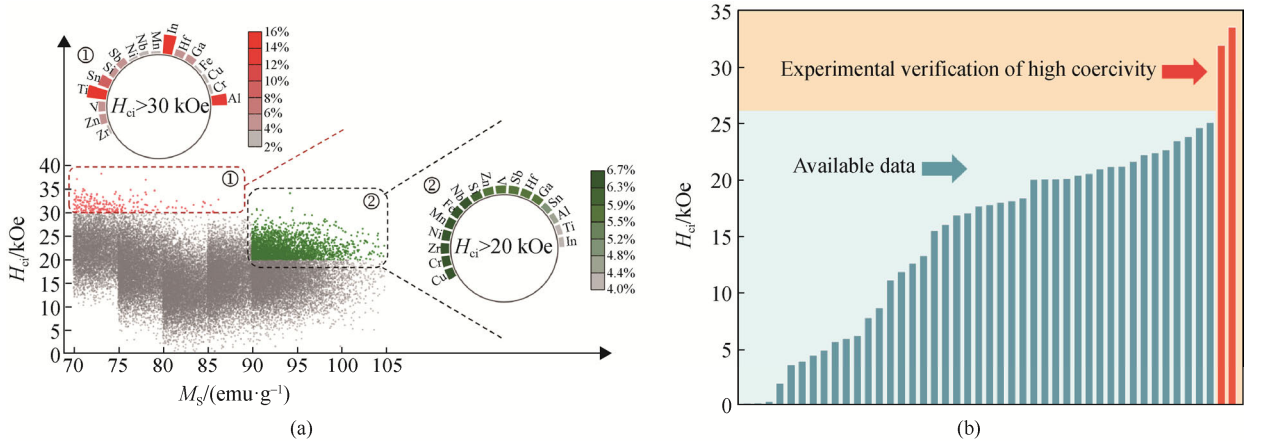


图 9　机器学习预测的掺杂元素对 Sm-Co 基合金矫顽力的影响：(a) $SmCo_7$ 基合金矫顽力高通量预测结果；(b) 机器学习优选成分的矫顽力实验结果与数据集中 $SmCo_7$ 基合金的矫顽力对比

Fig. 9　Machine learning-predicted effects of doping elements on the coercivity of Sm-Co-based alloys: (a) High-throughput prediction results of coercivity for $SmCo_7$-based alloys; (b) Comparison between experimentally measured coercivity of machine learning-optimized compositions and coercivity values of $SmCo_7$-based alloys in the dataset

永磁合金的不同磁性能之间存在明显的互斥制约关系，尤其是饱和磁化强度和矫顽力通常此消彼长，这在很大程度上阻碍了合金综合磁性能的提升。矫顽力和饱和磁化强度通常受到合金组成元素种类及其含量、微观组织、物相组成、磁晶各向异性场、晶粒尺寸和制备工艺等多种因素的影响，前述研究利用机器学习的方法构建了这些影响因素和矫顽力及饱和磁化强度之间的关系模型。如何解决矫顽力和饱和磁化强度之间的互斥制约关系、协同提高磁性能，是稀土永磁材料领域一直存在的挑战性难题。本研究组采用多目标优化的机器学习方法来突破不同磁性能之间的互斥关系、获得高的综合磁性能。基于特征重要性分析，筛选出掺杂元素的电负性(χ)、晶粒尺寸(d)、合金中的 Co 含量(X_{Co})、掺杂元素含量(X_C)是同时影响饱和磁化强度和矫顽力的重要因素，并用 SISSO 方法构建了这些特征和 2 个磁性能之间的关系表达式[式(9)]。

$$\begin{aligned} H_{ci} &= 246.63(\chi \cdot X_{Co})^{-1} - 568.64d^{-2} - 5.90 \\ M_S &= 1012.85X_{Co}^{-2} - 898.56(d-\chi)\cdot(d \cdot X_{Co})^{-1} - \\ &\quad 4.05(X_{Co}-\chi)\cdot(X_C \cdot X_{Co}) + 191.39 \end{aligned} \quad (9)$$

将所得到的特征与饱和磁化强度、矫顽力的数学表达式(9)作为多目标优化中的目标函数，利用基于遗传算法的 NSGA-II 多目标优化方法建立了 Sm-Co 基合金饱和磁化强度和矫顽力的多目标优化模型，采用评价指标超体积 Hypervolume(Hv)和间距 Spacing(SP)来判断模型是否收敛，得到多目标协同优化的帕累托前沿面[75]。该曲面上的每一个点都代表一个非支配解，意味着在这一点上，任何一项性能(如矫顽力)的提升都必然导致另一项性能(如饱和磁化强度)的下降。因此，该前沿面清晰地展示了两项性能之间此消彼长的最优匹配关系。图 10 展示了利用机器学习多目标优化算法得到的 Sm-Co 基合金矫顽力和饱和磁化强度协同提升的

帕累托前沿面，利用该算法和模型可以快速高效地从 162 万种不同晶粒尺寸和成分的合金中筛选出 106 个具有高综合磁性能的候选。进一步利用熵权法对帕累托前沿面上的最优解进行排序[76]，选定熵权值高的名义成分进行实验验证，如图 10c 所示。

当晶粒尺寸在 10~80 nm 范围、掺杂量小于 4%(摩尔分数)时，熵权值 e_j 大于 0.4，此时容易得到兼具高饱和磁化强度和高矫顽力的具有优异综合磁性能潜力的 Sm-Co 基合金，这些合金通常含有掺杂元素 Hf 和 Zr。

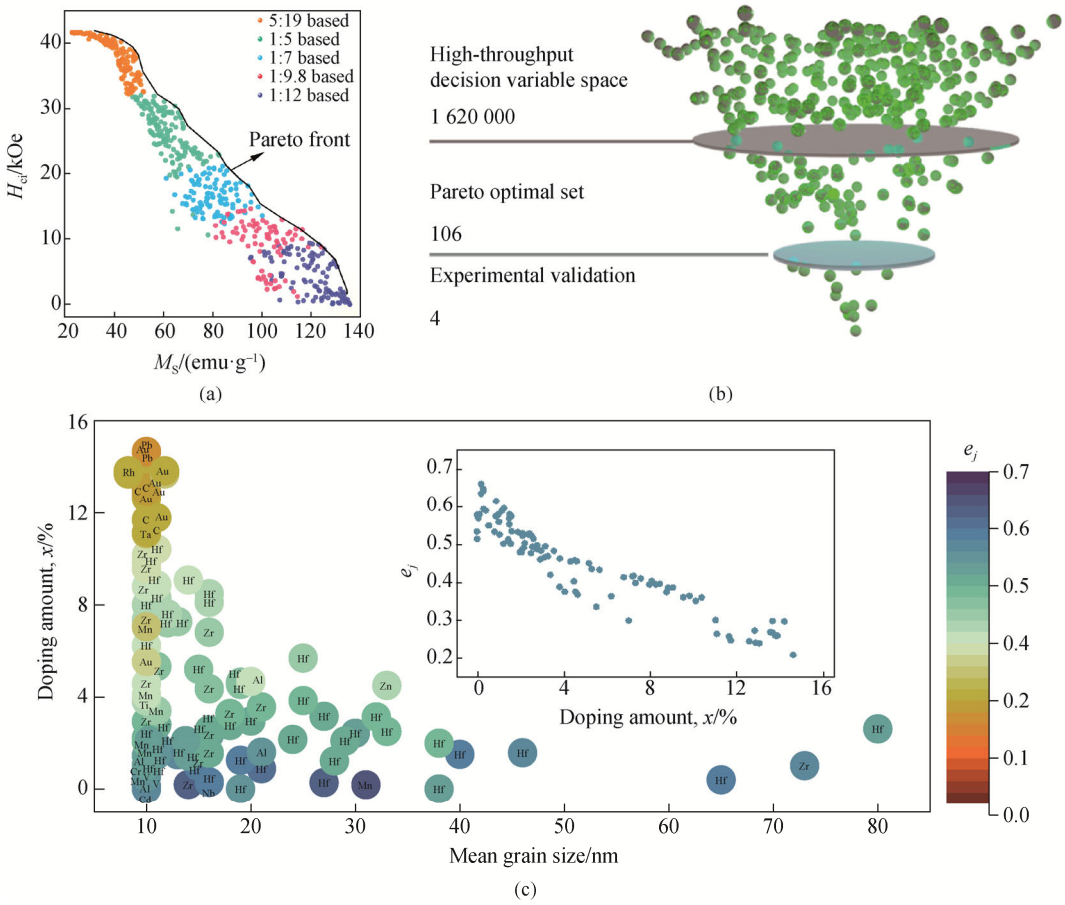


图 10 多目标优化机器学习方法得到的 Sm-Co 基合金矫顽力和饱和磁化强度协同提升的(a)帕累托前沿面；(b)模型筛选效率；(c)根据熵权值优选晶粒尺寸、掺杂量、掺杂元素种类[75]

Fig. 10 Multi-objective optimization machine learning method for synergistic enhancement of coercivity and saturation magnetization in Sm-Co-based alloys: (a) Pareto front; (b) Model screening efficiency; (c) Optimization of grain size, doping content, and doping element types based on entropy weight values[75]

3.2.2 面向居里温度的掺杂元素优选 Sm-Co 基合金由于具有高居里温度(T_C)，是公认的适用于高温服役环境的永磁体的最佳候选材料。准确预测居里温度对于设计新型 Sm-Co 基合金以促进磁体应用于高端工业领域和更高的工作温度非常重要。利用高效精确的机器学习高通量预测方法可以解决多年来稀土永磁合金居里温度预测的难题。前人设计了一系列数据驱动策略，通过数据挖掘的手段，机器学习算法已被应用于预测二元过渡金属体系[77]和铁磁材料[78–79]的居里温度。然而，目前只有少数利用机器学习方法对二维磁性材料居里温度进行预测的研究会涉及 Sm-Co 合金。例如 Belot 开发的基于化学成分预测居里温度的机器学习模型[80]，使用 t 分布随机邻域嵌入(t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding, t-SNE)投影将高维数据降至二维，揭示数据中的聚类现象，发现高居里温度材料通常含有 Co 或 Fe 元素。

本研究组利用特征工程找到影响 Sm-Co 基合金居里温度的关键描述符，发现电导率大且熔化热与 Sm 相似的掺杂元素可能会提高 Sm-Co 基合金的居里温度。建立了基于符号回归算法的高通量预测模型，可以预测尚未发现的 Sm-Co 基合金体系的居里温度。进一步，以符号回归预测结果为初始数据集，建立了逻辑回归分类模型，以揭示掺杂对 Sm-Co

基合金居里温度的影响。提出并定义了式(10)的居里温度敏感因子 Z，可以定量描述掺杂元素关键物理特征对 Sm-Co 基合金居里温度的影响规律，指导高居里温度的 Sm-Co 基高温永磁体的高效开发[81]。T_C 敏感因子 Z 通过 Sigmoid 函数可以进一步转化为概率(prob)的表达形式，当 prob>0.5 时，可认为掺杂元素会提高合金的 T_C；而当 prob<0.5 时，掺杂元素会降低合金的 T_C。利用建立的模型和居里温度敏感因子，设计了系列 Sm-Co 基合金，对其居里温度进行了定量验证，证实了预测模型的准确性。

$$\begin{aligned} Z &= X_C \cdot \left(1.13\kappa - 3.17\Delta H_{f_Sm}\right) + 0.45X_{Co} - 2.65\left(X_{Co} \leqslant 8.1\right) \\ Z &= X_C \cdot \left(33.56\kappa - 5.34\Delta H_{f_Sm}\right) + 0.59X_{Co} - 4.84\left(X_{Co} > 8.1\right) \end{aligned} \tag{10}$$

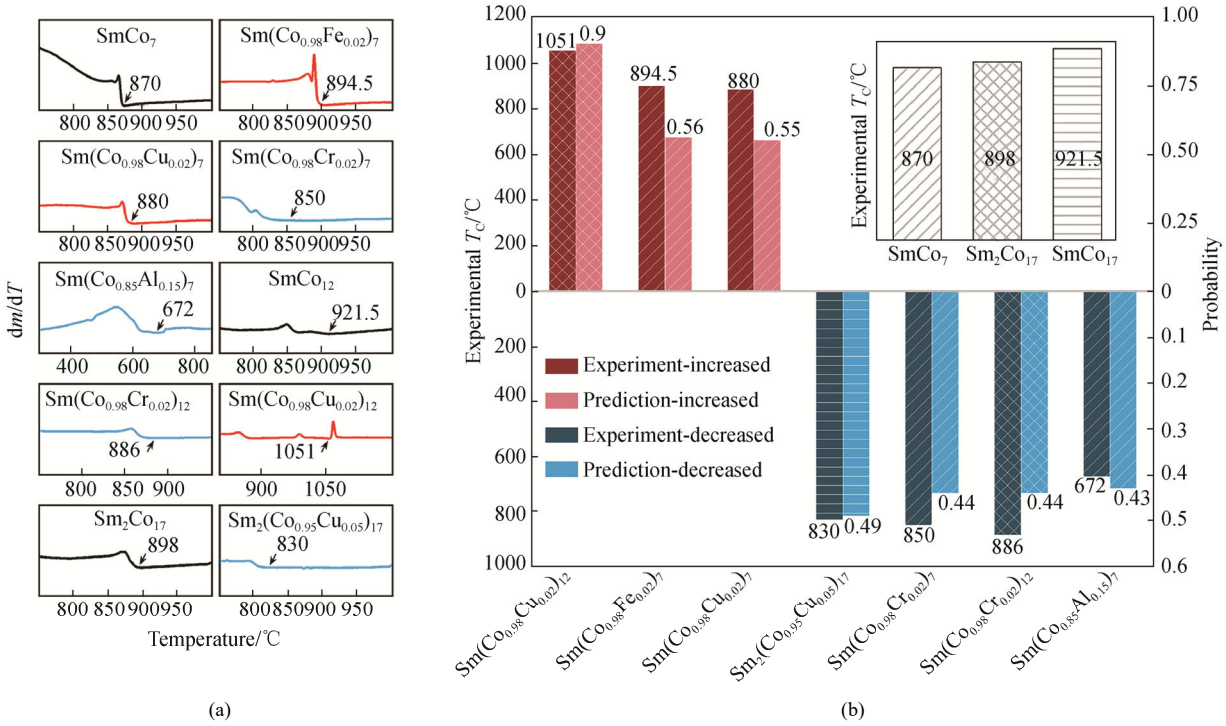


图 11　利用磁场中热重法测量得到的不同 Sm-Co 基合金的居里温度及与机器学习模型预测结果的比较：(a) 实验测定的 10 种 Sm-Co 基合金的 DTG 曲线；(b) 实验结果与预测结果的比较[81]

Fig. 11　Curie temperatures of different Sm-Co-based alloys measured by thermogravimetry under magnetic field and comparison with machine learning model predictions: (a) DTG curves of 10 Sm-Co-based alloys experimentally determined; (b) Comparison between experimental results and predicted results[81]

3.2.3　面向亚稳相稳定性的成分设计与组织调控　　尽管高温永磁体的研究多以 2:17 型磁体为对象，但是随着应用需求的发展，需要开发更多的 Sm-Co 体系以适应不同服役条件的要求。近年来，以亚稳相为主体的新型磁体得到了越来越多的关注。其中，具有 $TbCu_7$ 型晶体结构的 $SmCo_7$ 合金因具有高的磁晶各向异性、较大的饱和磁化强度和较高的居里温度，同时具有低的矫顽力温度系数，被广泛认为是最具发展潜力的一种高温永磁合金。但是，六方晶系的 $TbCu_7$ 结构(以下简称为 1:7H)在室温是一种亚稳结构，会分解为 $Sm_2Co_{17}R$ 和 $SmCo_5H$ 相。为了获得优异的室温和高温磁性能，必须保持稳定的 1:7H 物相。热力学计算和 DFT 计算均开展了针对亚稳相稳定性的研究，分析了晶粒尺寸和掺杂元素对 1:7H 物相稳定性的影响。但是，从二元合金扩展到多元体系，不同元素之间的相互作用会使计算的复杂程度和成本呈指数增长，尤其对于 Sm-Co 基合金很难实现高通量的计算预测。

参照 Miedema 经验公式对合金中相稳定性的分析，共有 3 类因素影响合金的焓变和物相组成：化学项与功函数有关，弹性项与电荷密度有关，结构项与原子体积有关。综合化学元素常用的本征特性和 Miedema 经验公式，利用皮尔森相关系数分析，筛选这些特征中不存在共线性的代表特征，本研究组利用数据驱动的方法从庞大的潜在成分描述符中发现了掺杂元素熔点、掺杂元素与 Co 的电负性差

的组合判据。提出留出 2 种元素交叉验证方法(LTECV)以增强模型的泛化能力，其与随机交叉验证方法相比具有更好的泛化能力，并能有效避免过拟合，如图 12a 所示。进一步利用支持向量机模型，实现了对具有不同材料形态、晶粒尺寸、掺杂元素种类及掺杂量的 $SmCo_7$ 基合金相组成的高通量预报，得到了不同因素影响 $SmCo_7$ 基合金相组成的规律[82]。如图 12b 和图 12c 所示，发现 Fe、Ni、Cu、Si 等与 Co 的电负性相差较小的掺杂元素，能显著促进 1:7 H 单相的形成；通过调节掺杂量，这些元素可以在较大的晶粒尺寸范围内维持 1:7 H 单相稳定存在。

基于以上机器学习预测的掺杂元素对 Sm-Co 基合金饱和磁化强度、矫顽力、1:7H 相稳定性的影响规律，筛选出 Mn、Cu、Fe 元素既可以提高 1:7H 相的稳定性，又同时对饱和磁化强度和矫顽力起到较为有利的作用。在数据驱动分析预测的指导下，设计制备出 $SmCo_{6.2}Mn_{0.5}Cu_{0.3}$ 和 $SmCo_{5.7}Mn_{0.5}Cu_{0.5}Fe_{0.3}$ 2 种磁性能优异的合金，其磁性能和微观组织测试结果如图 13 所示。开发的新 $SmCo_7$ 基合金平均晶粒尺寸约 40 nm，矫顽力和饱和磁化强度达到了协同提高的效果，综合性能超过了此前文献报道的各向同性磁体的性能数据。

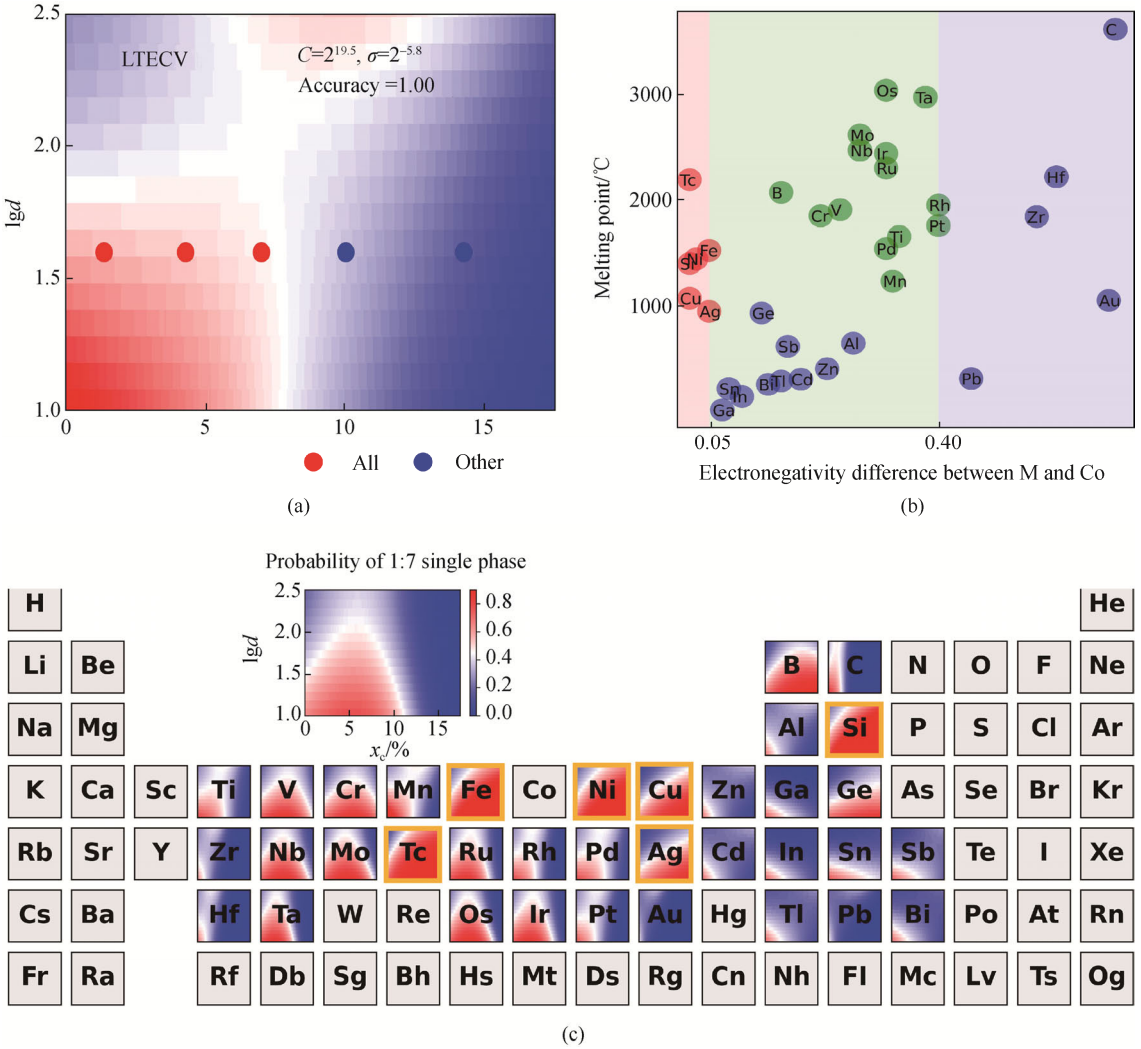
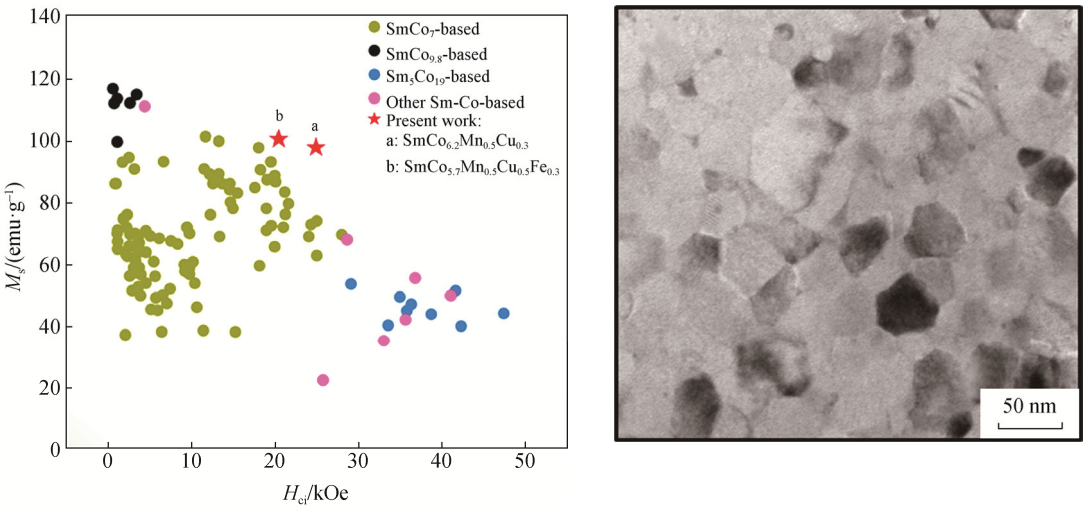


图 12 机器学习预测的晶粒尺寸和掺杂元素对 1:7H 相稳定性的影响：(a) 留出 2 种元素交叉验证方法的预测结果和实验数据对比(圆点为实验数据)；(b, c) 高通量预测的 $SmCo_7$ 基块状合金在成分和晶粒尺寸协同作用下的相组成(红色圆球内的元素能促进 1:7H 单相的形成，蓝色圆球内的元素只能在较窄的掺杂量和晶粒尺寸范围内稳定 1:7H 相)[82]

Fig. 12 Machine learning-predicted effects of grain size and doping elements on the stability of the 1:7H phase: (a) Prediction results and experimental datas comparison using the leave-two-elements-out cross-validation method (dots represent experimental data); (b, c) High-throughput predicted phase constitution of $SmCo_7$-based bulk alloys under the synergistic effects of composition and grain size (elements within red spheres promote the formation of a single 1:7H phase, and elements in blue spheres can only stabilize the 1:7H phase within a narrow range of doping content and grain size)[82]



(a) Magnetic properties　　(b) Microstructure

图 13　数据驱动设计制备出的 $SmCo_7$ 基纳米晶合金的磁性能和微观组织[83]

Fig. 13　Magnetic properties and microstructure of $SmCo_7$-based nanocrystalline alloys designed and fabricated via the data-driven approach[83]

3.3　Sm-Co 基永磁合金的智能化设计系统开发

利用机器学习策略，国内外研究者已开展了对 Sm-Co 基合金磁性能、居里温度、物相组成的高效准确预测研究。值得说明的是，以上数据驱动方法不仅在 Sm-Co 基稀土永磁合金研究中取得了显著成效，其所展现的研究范式对于其他磁性材料体系的设计同样具有重要的借鉴意义。类似的方法已被成功应用于优化 RE-Fe-B 磁体的磁性能[84]、预测掺杂元素对 $SmFe_{12}$ 基[85]和 Sm-Fe-N 基[86]磁体性能的影响等。数据驱动与人工智能辅助的研究范式正逐步成为加速稀土永磁合金甚至更广泛类型材料研发的共性关键技术。

但是，机器学习方法的应用要求研究人员有一定的编程基础，这很大程度上限制了研究人员利用机器学习方法对 Sm-Co 基永磁材料进行高效设计。因此，亟需通过链接算法、桥接模型、格式转化等计算机方法和手段，将机器学习数字化研发方法集成于系统中，尽可能实现机器学习算法的“流程化、自动化、智能化”，减少人工干预，推进机器学习方法在 Sm-Co 基永磁合金研究中的广泛应用和使用效率提升。

本研究组针对 Sm-Co 基合金的居里温度和相稳定性研究，设计开发了轻量级智能化系统，采用 Python 作为开发语言，利用插件技术、机器学习技术和 Django 后台数据库，开发了“物理+数据驱动的 Sm-Co 基合金居里温度智能预测系统”和“数据驱动的 1:7H 型 Sm-Co 永磁合金相稳定性分析系统”，集成了 Sm-Co 基合金居里温度和 1:7H 相稳定性的高通量预测结果与机器学习算法流程。系统提供良好的用户图形交互界面(如图 14 所示)，同时具备“已有预测结果查询”和“机器学习在线预测” 2 大功能模块，能实现数据挖掘、机器学习等一体化的数据驱动 Sm-Co 基永磁合金设计预测，有效解决了 Sm-Co 基稀土永磁合金居里温度和 $SmCo_7$ 型合金相组成的高效预测问题。

3.4　多尺度计算和机器学习方法在 Sm-Co 基永磁合金开发中的耦合应用

尽管上述机器学习研究加速了对高性能 Sm-Co 基永磁合金的设计，但是机器学习辅助材料发现仍然存在一些关键瓶颈：一方面，数据量较少，难以支撑复杂模型训练；另一方面，虽然采用了 SISSO、SHAP 等可解释计算方法，但是多数机器学习模型依然无法用物理语言解释，难以提取材料设计规律。针对这一问题，研究者提出了耦合多尺度计算和主动学习动态数据集构建的可解释机器学习流程。

Lu 等[87]采用边际采样法，优先选择模型难以分类的 “模糊样本”进行 DFT 验证，反馈至训练集迭代优化，平衡模型泛化能力与计算成本。并且构建了考虑原子磁学特征和晶体场特征等融合物理知识的特征集合，采用“末位淘汰”和 SISSO 算法两步筛选，确定最优特征。经过热力学稳定性、磁性候选、铁磁候选、高铁磁和反铁磁能量差四步分阶段筛选，预测出了高居里温度二维合金。Yang 等[88]结合高通量微磁模拟与正反向机器学习模型，系统探究了 $Sm(Co, Fe, Cu, Zr)_{7\pm\delta}$ 永磁体纳米结构对矫顽力的影响。首先构建涵盖纳米结构参数与微磁参数的输入空间，模拟纳米结构的反向磁畴成核效应，训练神

经网络模型，并进行特征灵敏度分析，揭示这些参数对矫顽力的影响，明确了各纳米相的作用机制。接下来训练逆向神经网络模型，根据目标矫顽力，设计对应的纳米结构与相组成。

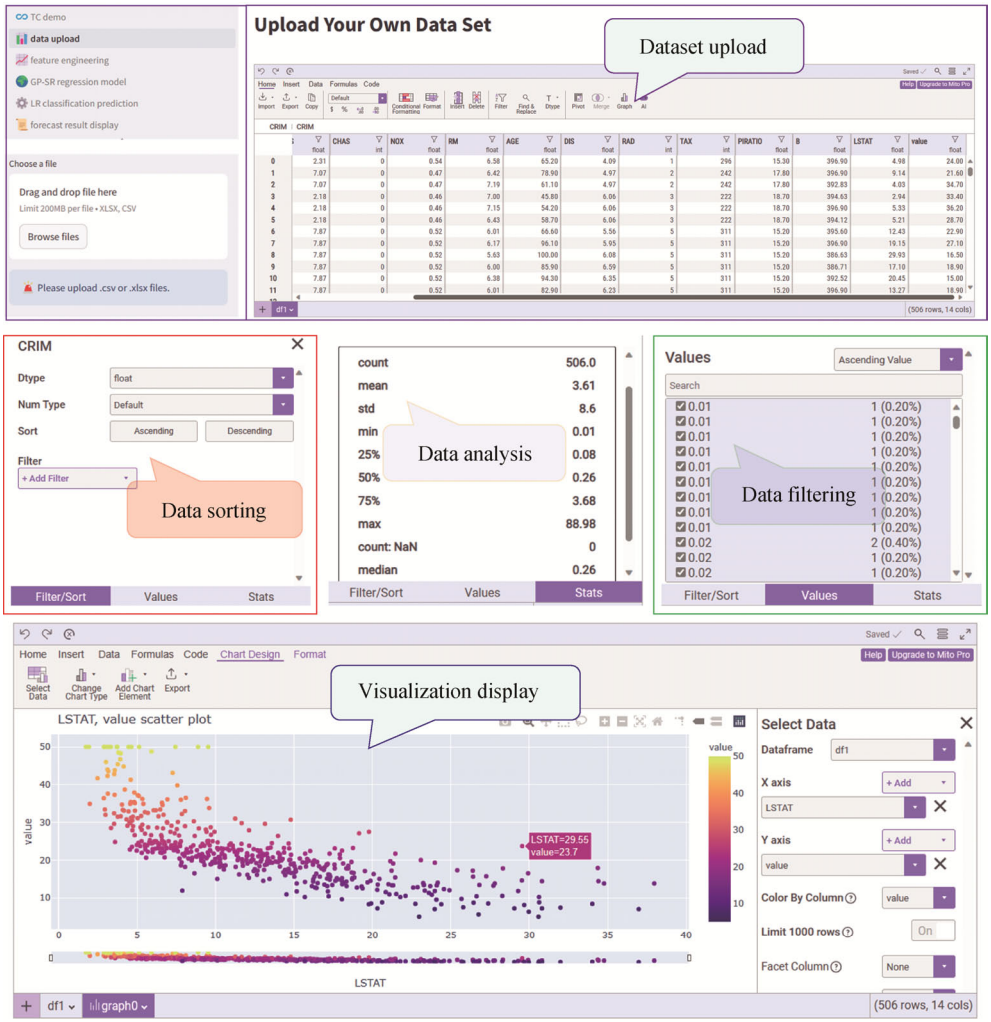
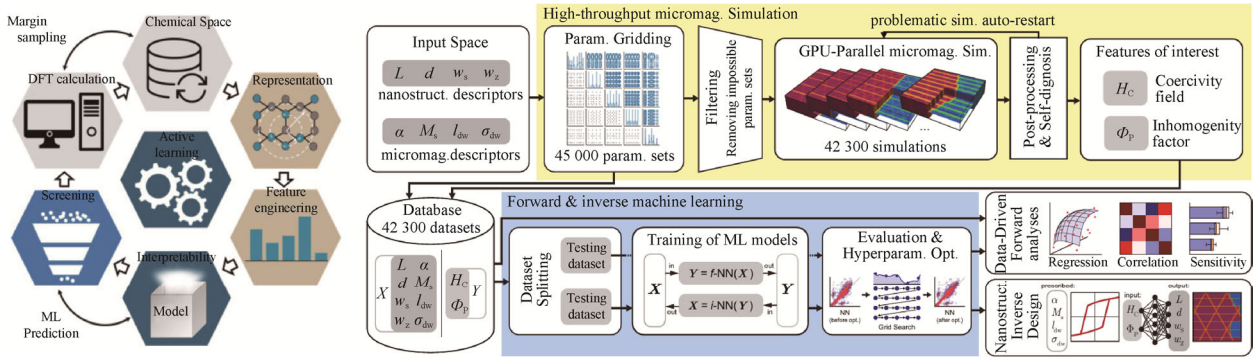


图 14 Sm-Co 基合金居里温度智能预测系统的页面展示实例

Fig. 14 Interface demonstration of the intelligent prediction system for Curie temperature of Sm-Co-based alloys



(a) (b)

图 15 耦合多尺度计算和数据驱动方法的稀土永磁材料设计流程：(a) 耦合 DFT 计算和主动学习动态数据集构建的机器学习设计流程[87]；(b) 耦合高通量微磁学模拟和机器学习的设计流程[88]

Fig. 15 Design workflow for rare-earth permanent magnet materials coupling multiscale calculations and data-driven methods: (a) Machine learning design workflow coupling DFT calculations and active learning-based dynamic dataset construction[87]; (b) Design workflow coupling high-throughput micromagnetic simulations and machine learning[88]

传统的计算材料学方法和基于机器学习的数据驱动研究范式在 Sm-Co 基稀土永磁合金设计中的应用并非孤立存在，而应是构成一个从原子–电子尺度、相平衡再到数据驱动的高通量挖掘的相互关联与验证的研究体系。DFT 计算深入原子与电子尺度，是揭示磁矩、磁晶各向异性、相稳定性等物理性质微观机理的核心工具。它能够精确计算特定成分与结构的性质，为掺杂元素选择和成分设计提供理论依据，但其计算成本高昂，难以直接应用于广阔的成分空间筛选。热力学计算专注于相平衡与相稳定性，预测合金的平衡物相组成，其优势在于处理多元体系的平衡问题，但对非平衡态及磁性能的微观机理解释有限。机器学习则擅长处理高通量、多目标的复杂关联性问题。它通过从海量数据(包括热力学计算与 DFT 的计算结果)中学习，建立“成分–结构–性能”的复杂映射关系，从而实现快速预测和性能优化，有效弥补了传统计算材料学方法在效率与广度上的不足。而传统的计算材料学方法又为解决机器学习等数据驱动和 AI 研究范式面临的数据量不足和解释性难题提供了有效方案。

4　总结与展望

本文系统综述了数据驱动研究范式在 Sm-Co 基稀土永磁合金高性能化设计与物相稳定性研究中的最新进展。传统计算材料学方法，如 CALPHAD 热力学计算和第一性原理计算，已在揭示 Sm-Co 基合金的相平衡规律、纳米尺度相稳定性、微观磁性能机理以及掺杂元素影响等方面发挥了不可或缺的作用。然而，这些方法在面对多元复杂成分体系和高通量筛选需求时，常面临计算成本高昂或难以直接关联宏观性能的瓶颈问题。

近年来，随着 AI + Materials 理念的不断深入，数据驱动的研究范式为应对上述挑战提供了创新、高效的路径。通过构建高质量的稀土永磁合金专题数据库，并应用先进的机器学习算法，研究者在合金关键性能的快速预测、亚稳相稳定性的精准评估、多种磁性能协同优化等方面取得了显著成效。通过引入 SISSO、SHAP 等可解释性机器学习技术，不仅提升了模型的预测精度，更深化了对成分-性能之间内在物理关联的理解。初步构建的智能化设计开发系统标志着以 Sm-Co 基合金为代表的稀土永磁合金的研究正从传统的试错法向高效的数字化与智能化方向转型。

尽管数据驱动研究已展现出巨大潜力，但其在稀土永磁合金领域的深度应用仍面临诸多挑战与机遇。基于当前的研究现状，未来有望在以下几个关键方向上取得突破：

1) 强化机器学习模型的物理可解释性。未来的研究应超越将机器学习视为“黑箱”预测工具的层面，更加注重模型的物理内涵与可解释性。一方面，应积极构建融合磁学理论、晶体场理论等物理先验知识的特征描述符；另一方面，在持续深化对 SISSO、SHAP 等可解释性 AI 技术的应用，量化不同特征对性能的贡献基础上，深入研究并探索神经网络等 AI 新算法和优化策略的应用，将第一性原理计算、微磁学模拟等多尺度计算得到的数据和规律耦合进 AI 算法模型。

2) 发展多源异构数据的数字化与跨尺度迁移学习策略。稀土永磁合金研究产生的数据是典型的多源异构数据，包括计算和实验测量的数值、显微组织的图像等，且其微观组织极大程度影响磁性能。未来可利用深度学习等方法将这些数据转化为机器可读的标准化特征向量。在此基础上，开发跨尺度的迁移学习方法和主动学习方法，避免传统机器学习方法在小样本场景下陷入过拟合和局部最优陷阱。

3) 实现闭环的逆向设计系统。数据驱动的终极目的是实现目标性能导向的智能研发。未来可着力构建自动化的 “逆向设计–自动验证”智能系统。该系统以目标性能为驱动，利用条件生成模型自动生成满足条件的候选成分与工艺方案。随后，将这些候选方案送入多尺度计算链中进行仿真验证与优化。计算结果将作为新数据反馈至数据库和机器学习模型中，用于持续迭代和优化设计策略。

4) 数据辅助的资源节约型和绿色替代方案探索。以 Sm-Co 基永磁合金为例，通过构建包含部分替代元素的合金性能数据库，预测 Ce/La 等高丰度稀土元素部分替代 Sm 对磁性能的影响，在确保高性能的前提下，提高高丰度稀土的利用率，开发低成本新成分体系。此外，综合考虑制备工艺、原料成本、性能参数等，设计低碳绿色的新型稀土永磁合金体系。

参考文献:

[1] COEY J M D. Perspective and prospects for rare earth permanent magnets[J]. Engineering, 2020, 6(2): 119–131.

[2] LI Y C, XING Z C, YU N J, et al. High-performance anisotropic SmCo-based magnet with novel microstructure[J]. J Rare Earths, 2024, 42(8): 1539–1545.

[3] HAO Y H, WANG Y, ZHANG T T, et al. Cu docking-activated Nb incorporation in multivariate CuO-Nb_2O_5/CeO_2 catalysts for selective reduction of NO_x with NH_3[J]. Appl Catal B Environ, 2024, 340:

123254.

[4] LIU Y H, XUE Y, LIU R H, et al. White-light emitting single-phase phosphor $La_3Si_6N_{11}$: Dy^{3+}, Tb^{3+}: Color tunable emission, thermal stability and energy transfer process[J]. J Rare Earths, 2019, 37(4): 350–355.

[5] JOUBERT J M, PAUL-BONCOUR V, CUEVAS F, et al. $LaNi_5$ related AB_5 compounds: Structure, properties and applications[J]. J Alloys Compd, 2021, 862: 158163.

[6] NAKAMURA Y, SAKAKI K, KIM H, et al. Reaction paths *via* a new transient phase in non-equilibrium hydrogen absorption of $LaNi_2Co_3$[J]. Int J Hydrog Energy, 2020, 45(41): 21655–21665.

[7] FENG X D, AL ET AL E. Converting ceria polyhedral nanoparticles into single-crystal nanospheres[J]. ChemInform, 2006, 37(36): 200636200.

[8] MIYAKE T, AKAI H. Quantum theory of rare-earth magnets[J]. J Phys Soc Jpn, 2018, 87(4): 041009.

[9] JIANG C B, AN S Z. Recent progress in high temperature permanent magnetic materials[J]. Rare Met, 2013, 32(5): 431–440.

[10] BRÜCK E. Handbook of Magnetic Materials [M]. Amsterdam: North Holland, 2018: 269–372.

[11] YANG J B, HAN J Z, TIAN H D, et al. Structural and magnetic properties of nanocomposite Nd–Fe–B prepared by rapid thermal processing[J]. Engineering, 2020, 6(2): 132–140.

[12] HONO K, SEPEHRI-AMIN H. Strategy for high-coercivity Nd–Fe–B magnets[J]. Scr Mater, 2012, 67(6): 530–535.

[13] HONO K, SEPEHRI-AMIN H. Prospect for HRE-free high coercivity Nd-Fe-B permanent magnets[J]. Scr Mater, 2018, 151: 6–13.

[14] SAITO H, TAKAHASHI M, WAKIYAMA T, et al. Magnetocrystalline anisotropy for $Sm_2(Co\text{-}Mn)_{17}$ compound with $TbCu_7$ type disordered structure[J]. J Magn Magn Mater, 1989, 82(2–3): 322–326.

[15] LIU J F, ZHANG Y, DIMITROV D, et al. Microstructure and high temperature magnetic properties of $Sm(Co, Cu, Fe, Zr)_z$ (z=6.7–9.1) permanent magnets[J]. J Appl Phys, 1999, 85(5): 2800–2804.

[16] SHANG M Y, LU H, XU G J, et al. Nanocrystalline $SmCo_{12}$ main-phase alloys with V-doping: Structure stability and magnetic performance[J]. J Mater Sci Technol, 2025, 210: 254–264.

[17] LUO J, LIANG J K, GUO Y Q, et al. Effects of the doping element on crystal structure and magnetic properties of $Sm(Co, M)_7$ compounds (M=Si, Cu, Ti, Zr, and Hf)[J]. Intermetallics, 2005, 13(7): 710–716.

[18] LUO J, LIANG J K, GUO Y Q, et al. Crystal structure and magnetic properties of $SmCo_{7-x}Hf_x$ compounds[J]. Appl Phys Lett, 2004, 85(22): 5299–5301.

[19] ZHOU J, AL-OMARI I A, LIU J P, et al. Structure and magnetic properties of $SmCo_{7-x}Ti_x$ with $TbCu_7$-type structure[J]. J Appl Phys, 2000, 87(9): 5299–5301.

[20] WANG P J, KAO H, ZHANG C W, et al. Electronic structures and magnetic properties in $SmCo_{7-x}M_x$[J]. Chin Phys B, 2009, 18(10): 4490–4496.

[21] LUO J, LIANG J K, GUO Y Q, et al. Crystal structure and magnetic properties of $SmCo_{5.85}Si_{0.90}$ compound[J]. Appl Phys Lett, 2004, 84(16): 3094–3096.

[22] GUO Y Q, FENG W C, LI W, et al. Magnetism and phase stability of $R(Co, M)_7$ pseudobinary intermetallics with $TbCu_7$-type structure[J]. J Appl Phys, 2007, 101(2): 023919.

[23] AGRAWAL A, CHOUDHARY A. Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science[J]. APL Mater, 2016, 4(5): 053208.

[24] 李国杰. 智能化科研(AI4R): 第五科研范式[J]. 中国科学院院刊, 2024, 39(1): 1–9.
LI Guojie. Bull Chin Acad Sci, 2024, 39(1): 1–9.

[25] CURTAROLO S, HART G L W, NARDELLI M B, et al. The high-throughput highway to computational materials design[J]. Nat Mater, 2013, 12(3): 191–201.

[26] NYSHADHAM C, OSES C, HANSEN J E, et al. A computational high-throughput search for new ternary superalloys[J]. Acta Mater, 2017, 122: 438–447.

[27] WANG A Y, MURDOCK R J, KAUWE S K, et al. Machine learning for materials scientists: An introductory guide toward best practices[J]. Chem Mater, 2020, 32(12): 4954–4965.

[28] WANG J Y, XU P C, JI X B, et al. Feature selection in machine learning for perovskite materials design and discovery[J]. Materials, 2023, 16(8): 3134.

[29] TAO Q L, XU P C, LI M J, et al. Machine learning for perovskite materials design and discovery[J]. NPJ Comput Mater, 2021, 7: 23.

[30] BUSCHOW K H J, VAN DER GOOT A S. Intermetallic compounds in the system samarium-cobalt[J]. J Less Common Met, 1968, 14(3): 323–328.

[31] BUSCHOW K H J, DEN BROEDER F J A. The cobalt-rich regions of the samarium-cobalt and gadolinium-cobalt phase diagrams[J]. J Less Common Met, 1973, 33(2): 191–201.

[32] DERKAOUI S, ALLIBERT C H. Redetermination of the phase equilibria in the system Sm-Co-Cu for Sm content 0–20 at.% at 850℃[J]. J Less Common Met, 1989, 154(2): 309–315.

[33] GE W Q, WU C H, CHUANG Y C. Reinvestigation of the Sm-Co binary system[J]. Int J Mater Res, 1993, 84(3): 165–169.

[34] CATALDO L, LEFÈVRE A, DUCRET F, et al. Binary system SmCo: Revision of the phase diagram in the Co rich field[J]. J Alloys Compd, 1996, 241(1–2): 216–223.

[35] YUAN Y, DELSANTE S, YI J, et al. A revision of the Sm-rich region of the Sm–Co system[J]. J Alloys Compd, 2010, 508(2): 309–314.

[36] SCHNEIDER G, HENIG E T, LUKAS H L, et al. Phase relations in the samarium-poor Sm–Co–Fe system[J]. J Less Common Met, 1985, 110(1–2): 159–170.

[37] SU X P, ZHANG W J, LIU G Q, et al. A thermodynamic assessment of the Co–Sm system[J]. J Alloys Compd, 1998, 267(1–2): 149–153.

[38] YUAN Y, YI J H, BORZONE G, et al. Thermodynamic modeling of the Co–Sm system[J]. Calphad, 2011, 35(3): 416–420.

[39] CHEN D K, LUO L, DAI F L, et al. Phase equilibria in Sm-Co-Ti ternary system[J]. J Phase Equilib Diffus, 2022, 43(3): 317–331.

[40] FARTUSHNA I, BAJENOVA I, SHAKIROVA J, et al. Experimental investigation of the phase equilibria in Co–Fe-Sm system with special attention to the effect of Fe substitution in structure and magnetic properties of intermetallic phases[J]. Intermetallics, 2022, 143: 107502.

[41] ZHANG L L, ZHENG Q J, JIANG H X, et al. Effect of La addition on microstructure evolution of hypoeutectic Al–6Si alloys[J]. J Mater Sci, 2020, 55(17): 7546–7554.

[42] DONG G Y, YOU X G, XU Z H, et al. A new model for studing the evaporation behavior of alloy elements in DD98M alloy during electron beam smelting[J]. Vacuum, 2022, 195: 110641.

[43] ZHU Z, FANG Y K, WU W, et al. Prediction of Sm- (Co, Cu, Fe, Zr) binary alloys’ thermodynamic parameters by improved miedema model[J]. Mater Res Express, 2024, 11(9): 096513.

[44] ZHU Z, FANG Y K, WU W, et al. Computation of the thermodynamic parameters of Sm–Co–Fe ternary alloys[J]. Mater Res Express, 2025, 12(4): 046101.

[45] LI C, YUAN Y, LI F, et al. Modification and verification of Miedema model for predicating thermodynamic properties of binary precipitates in multi-element alloys[J]. Phys B Condens Matter, 2022, 627: 413540.
[46] LI R Q. The application of R function to new asymmetric model and toop model[J]. Calphad, 1989, 13(1): 67–70.
[47] LIU P P, DAI F L, LUO L, et al. Experimental study and thermodynamic calculation of the Sm-Co-Fe system[J]. Calphad, 2022, 78: 102447.
[48] OKAMOTO H. Co-Sm (cobalt-samarium)[J]. J Phase Equilib Diffus, 2011, 32(2): 165–166.
[49] LESLIE-PELECKY D L, RIEKE R D. Magnetic properties of nanostructured materials[J]. Chem Mater, 1996, 8(8): 1770–1783.
[50] LU N D, SONG X Y, ZHANG J X. Crystal structure and magnetic properties of ultrafine nanocrystalline[J]. Nanotechnology, 2010, 21(11): 115708.
[51] XU W W, SONG X Y, LU N D, et al. Thermodynamic and experimental study on phase stability in nanocrystalline alloys[J]. Acta Mater, 2010, 58(2): 396–407.
[52] XU W W, SONG X Y, LU N D, et al. Nanoscale thermodynamic study on phase transformation in the nanocrystalline Sm_2Co_{17} alloy[J]. Nanoscale, 2009, 1(2): 238–244.
[53] 宋晓艳, 徐文武, 张哲旭. 亚稳相的纳米尺度稳定化: 热力学模型与实验研究[J]. 物理学报, 2012, 61(20): 151–158.
SONG Xiaoyan, XU Wenwu, ZHANG Zhexu. Acta Phys Sin, 2012, 61(20): 151–158.
[54] SEYRING M, SONG X Y, ZHANG Z X, et al. Concurrent ordering and phase transformation in $SmCo_7$ nanograins[J]. Nanoscale, 2015, 7(28): 12126–12132.
[55] LARSON P, MAZIN I I, PAPACONSTANTOPOULOS D A. Calculation of magnetic anisotropy energy in $SmCo_5$[J]. Phys Rev B, 2003, 67(21): 214405.
[56] DAS B, CHOUDHARY R, SKOMSKI R, et al. Anisotropy and orbital moment in Sm-Co permanent magnets[J]. Phys Rev B, 2019, 100(2): 024419.
[57] MEENA L, AHUJA U, KUMARI MEENA S, et al. Electronic properties and quantitative mapping of magnetic moments of rare-earth hard magnet $SmCo_5$: First principles computations and inelastic scattering[J]. J Magn Magn Mater, 2024, 603: 172272.
[58] SOBOLEV A N, GOLOVNIA O A, POPOV A G. Embedded atom potential for Sm–Co compounds obtained by force-matching[J]. J Magn Magn Mater, 2019, 490: 165468.
[59] FANG C, YAN Z, ZHANG X J, et al. Enhanced structural stability and magnetism of $SmCo_3$ permanent magnet doped with 3d transition metals: An *ab initio* study[J]. Rare Met, 2025, 44(2): 1256–1266.
[60] LIU X B, ALTOUNIAN Z. Magnetic moments and exchange interaction in $Sm(Co, Fe)_5$ from first-principles[J]. Comput Mater Sci, 2011, 50(3): 841–846.
[61] GABAY A M, LARSON P, MAZIN I I, et al. Magnetic states and structural transformations in $Sm(Co, Cu)_5$ and $Sm(Co, Fe, Cu)_5$ permanent magnets[J]. J Phys D Appl Phys, 2005, 38(9): 1337.
[62] MAO F, LU H, LIU D, et al. Structural stability and magnetic properties of $SmCo_5$ compounds doped with transition metal elements[J]. J Alloys Compd, 2019, 810: 151888.
[63] YAN Z, FANG C, ZHANG X J, et al. Synergistic 3*d*-orbital modulation in dual-doped $SmCo_5$-based alloys: Quantifying electronic synergy for enhanced permanent magnetic performance[J]. J Alloys Compd, 2025, 1034: 181408.
[64] SABIRIANOV R F, KASHYAP A, SKOMSKI R, et al. First principles study of transition-metal substitutions in Sm–Co permanent magnets[J]. Appl Phys Lett, 2004, 85(12): 2286–2288.
[65] FANG C, YAN Z, ZHANG X J, et al. Stable geometries and magnetic properties in transition-metal-doped Sm_5Co_{19} permanent magnet alloys: Insights from DFT[J]. Sci China Phys Mech Astron, 2025, 68(4): 247512.
[66] 毛斐, 吕皓, 唐法威, 等. Mn 和 In 添加对 $SmCo_7$ 结构稳定性及磁矩影响的第一性原理计算[J]. 金属学报, 2021, 57(7): 948–958.
MAO Fei, LU Hao, TANG Fawei, et al. Acta Metall Sin, 2021, 57(7): 948–958.
[67] SÖDERLIND P, LANDA A, LOCHT I L M, et al. Prediction of the new efficient permanent magnet $SmCoNiFe_3$[J]. Phys Rev B, 2017, 96(10): 100404.
[68] SABIRYANOV R, JASWAL S S. Magnetic properties of hard/soft composites: $SmCo_5/Co_{1-x}fe_x$[J]. Phys Rev B, 1998, 58: 12071–12074.
[69] 宋晓艳, 刘东, 刘雪梅, 等. 面向数据驱动材料设计的专用数据库及信息管理系统[J]. 中国科学: 技术科学, 2020, 50(6): 786–800.
SONG Xiaoyan, LIU Dong, LIU Xuemei, et al. Sci Sin Technol, 2020, 50(6): 786–800.
[70] SONG X Y, GUO K, LU H, et al. Modelling of phase stability: Integrating computational materials science and materials informatics[J]. J Mater Inform, 2021: 7.
[71] LIU D, GUO K, TANG F W, et al. Selecting doping elements by data mining for advanced magnets[J]. Chem Mater, 2019, 31(24): 10117–10125.
[72] GUO K, LU H, ZHAO Z, et al. Magnetic performance oriented composition design of Sm-Co based alloys by machine learning and experimental studies[J]. Comput Mater Sci, 2022, 205: 111232.
[73] OUYANG R H, CURTAROLO S, AHMETCIK E, et al. SISSO: A compressed-sensing method for identifying the best low-dimensional descriptor in an immensity of offered candidates[J]. Phys Rev Materials, 2018, 2(8): 083802.
[74] LUNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions[C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems. Long Beach, California, USA. ACM, 2017: 4768–4777.
[75] LIU P X, LU H, XU G J, et al. Breaking through the trade-off between saturation magnetization and coercivity: A data-driven strategy[J]. Acta Mater, 2025, 289: 120945.
[76] CAO Z W, ZHANG T L, TONG X K. Quality evaluation of chicken soup based on entropy weight method and grey correlation degree method[J]. Sci Rep, 2024, 14(1): 13038.
[77] NGUYEN D N, PHAM T L, NGUYEN V C, et al. Ensemble learning reveals dissimilarity between rare-earth transition-metal binary alloys with respect to the Curie temperature[J]. J Phys Mater, 2019, 2(3): 034009.
[78] LONG T, FORTUNATO N M, ZHANG Y X, et al. An accelerating approach of designing ferromagnetic materials *via* machine learning modeling of magnetic ground state and Curie temperature[J]. Mater Res Lett, 2021, 9(4): 169–174.
[79] NELSON J, SANVITO S. Predicting the Curie temperature of ferromagnets using machine learning[J]. Phys Rev Materials, 2019, 3(10): 104405.
[80] BELOT J F, TAUFOUR V, SANVITO S, et al. Machine learning predictions of high-Curie-temperature materials[J]. Appl Phys Lett, 2023, 123(4): 042405.

[81] XU G J, CHENG F, LU H, et al. Predicting the Curie temperature of Sm-Co-based alloys *via* data-driven strategy[J]. Acta Mater, 2024, 274: 120026.

[82] XU G J, LU H, GUO K, et al. Predictions on the phase constitution of $SmCo_{7-x}Mx$ alloys by data mining[J]. Nanomaterials, 2022, 12(9): 1452.

[83] HAN C Y, LU H, XU G J, et al. Magnetic properties enhancement of multi-element-doped $SmCo_7$ nanocrystalline alloys[J]. Mater Today Phys, 2024, 40: 101306.

[84] WANG Z, ZHANG S Y, WANG J, et al. Machine learning guided design of RE-Fe-B (RE=Pr, Nd, La, Ce) with comprehensive high performance[J]. Acta Mater, 2025, 292: 121031.

[85] TANG X, LI J, SRINITHI A K, et al. Role of V on the coercivity of $SmFe_{12}$-based melt-spun ribbons revealed by machine learning and microstructure characterizations[J]. Scr Mater, 2021, 200: 113925.

[86] HOSOKAWA H, CALVERT E L, SHIMOJIMA K. Machine learning prediction for magnetic properties of Sm-Fe-N based alloys produced by melt spinning[J]. J Magn Magn Mater, 2021, 526: 167651.

[87] LU S H, ZHOU Q H, GUO Y L, et al. On-the-fly interpretable machine learning for rapid discovery of two-dimensional ferromagnets with high Curie temperature[J]. Chem, 2022, 8(3): 769–783.

[88] YANG Y W, KÜHN P, FATHIDOOST M, et al. Coercivity influence of nanostructure in SmCo-1:7 magnets: Machine learning of high-throughput micromagnetic data [J]. arXiv, 2024, 2408.03198v2.

Research Advances in Data-Driven Sm-Co-Based Rare-Earth Permanent Magnet Alloys Design

LU Hao, XU Guojing, LIU Peixin, HAN Chongyu, GUO Kai, LIU Dong, SONG Xiaoyan

(State Key Laboratory of Materials Low-Carbon Recycling, Key Laboratory of Advanced Functional Materials, MOE, College of Materials Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

Extended Abstract

Samarium-Cobalt (Sm-Co) based rare-earth permanent magnets are critical materials for high-technology applications, particularly in aerospace and defense systems, due to their unmatched high-temperature performance, including an exceptional Curie temperature and superior magnetic stability under extreme operating conditions. However, optimizing their comprehensive magnetic properties remains a challenge, hindering by the inefficiency of traditional trial-and-error methodologies. The emergence of a new research paradigm, integrating computational modeling and data-driven science, is now powerfully addressing the trial-and-error limitations. This review comprehensively examines key advancements in this field. Traditional computational materials science methods, including thermodynamic calculations *via* the CALPHAD approach and nanoscale thermodynamic modeling, have enabled accurate predictions of phase equilibria and metastable phase stability in multicomponent alloys. First-principles calculations have provided atomic-level insights into the electronic structure origins of magnetocrystalline anisotropy and the mechanistic role of transition metal doping in tuning magnetic properties and phase stability. This review highlights the transformative impact of data-driven and AI strategies. By constructing high-quality databases for Sm-Co-based alloys and employing advanced machine learning (ML) algorithms, researchers have achieved high-throughput prediction and multi-objective optimization of key properties such as saturation magnetization, coercivity, Curie temperature, and phase constitution. The application of multi-objective optimization strategies successfully breaks the inherent trade-off between saturation magnetization and coercivity, leading to the discovery of novel compositions with superior comprehensive magnetic properties. The development of user-friendly intelligent design systems has significantly lowered the barrier for employing these AI methods and tools in practical magnet design. The coupling of multi-scale simulations (*e.g.*, DFT, micromagnetic modeling) with active learning frameworks also presents a promising pathway for building physically informed and data-efficient models, marking a significant step towards inverse design. These data-driven models have successfully guided the experimental synthesis of novel nanocrystalline Sm-Co-based alloys with superior magnetic performance, validating this modern AI approach.

Summary and prospects Despite the significant progress, the full potential of data-driven and AI methodologies in Sm-Co-based permanent magnet research is yet to be realized. To overcome existing challenges and harness future opportunities, the following prospects are proposed.

1) Enhancing Physical Interpretability of ML Models. Future research should go beyond treating machine learning as a "black-box" predictive tool and place greater emphasis on the physical interpretability of models. On one hand, efforts should be made to actively develop feature descriptors that integrate physical priors and domain knowledge such as magnetism theory and crystal field theory. On the other hand, while continuing to deepen the application of interpretable AI techniques like SISSO and SHAP to quantify the contributions of different features to performance, in-depth research should be conducted to explore the application of new algorithms and optimization strategies such as neural networks. Exploring hybrid models that embed constraints and relationships derived from first-principles calculations and micromagnetic simulations will be crucial for predictions in physical reality.

2) Developing Frameworks for Multi-Source Data and Transfer Learning. The data generated from research on rare-earth permanent magnetic alloys are typical multi-source heterogeneous data, including numerically computed and experimentally

measured values, microstructural images, where the microstructure significantly influencing magnetic properties. Future work should leverage deep learning to create unified, machine-readable representations of this diverse data. On this basis, cross-scale transfer learning methods and active learning approaches should be developed to prevent traditional machine learning methods from falling into the traps of overfitting and local optima in small-sample scenarios.

3) Establishing Closed-Loop Inverse Design Systems. The ultimate goal of data-driven approaches is to achieve target-performance-oriented intelligent research and development. Future efforts should focus on constructing an automated intelligent pipeline for inverse design and automated validation. Driven by target performance, this system utilizes conditional generative models to automatically generate candidate compositions and process schemes that meet the requirements. These candidate solutions are then fed into a multi-scale computational chain for simulation validation and optimization. The computational results are fed back as new data into the database and machine learning loops, enabling continuous iteration and optimization of design strategies.

4) Pursuing Data-Assisted Sustainable and Economic Alternatives. By constructing a database incorporating substitution elements, this approach predicts the impact of partially replacing Sm with high-abundance rare-earth elements such as Ce/La on magnetic properties. The goal is to enhance the utilization of high-abundance rare-earth elements while ensuring high performance, thereby developing new cost-effective composition systems. Furthermore, by comprehensively considering factors such as manufacturing processes, raw material costs, and performance merits, novel low-carbon and environmentally friendly rare-earth permanent magnetic alloy systems can be designed.

Keywords data-driven; machine learning; rare-earth permanent magnet alloys; computational materials science; phase stability; magnetic properties