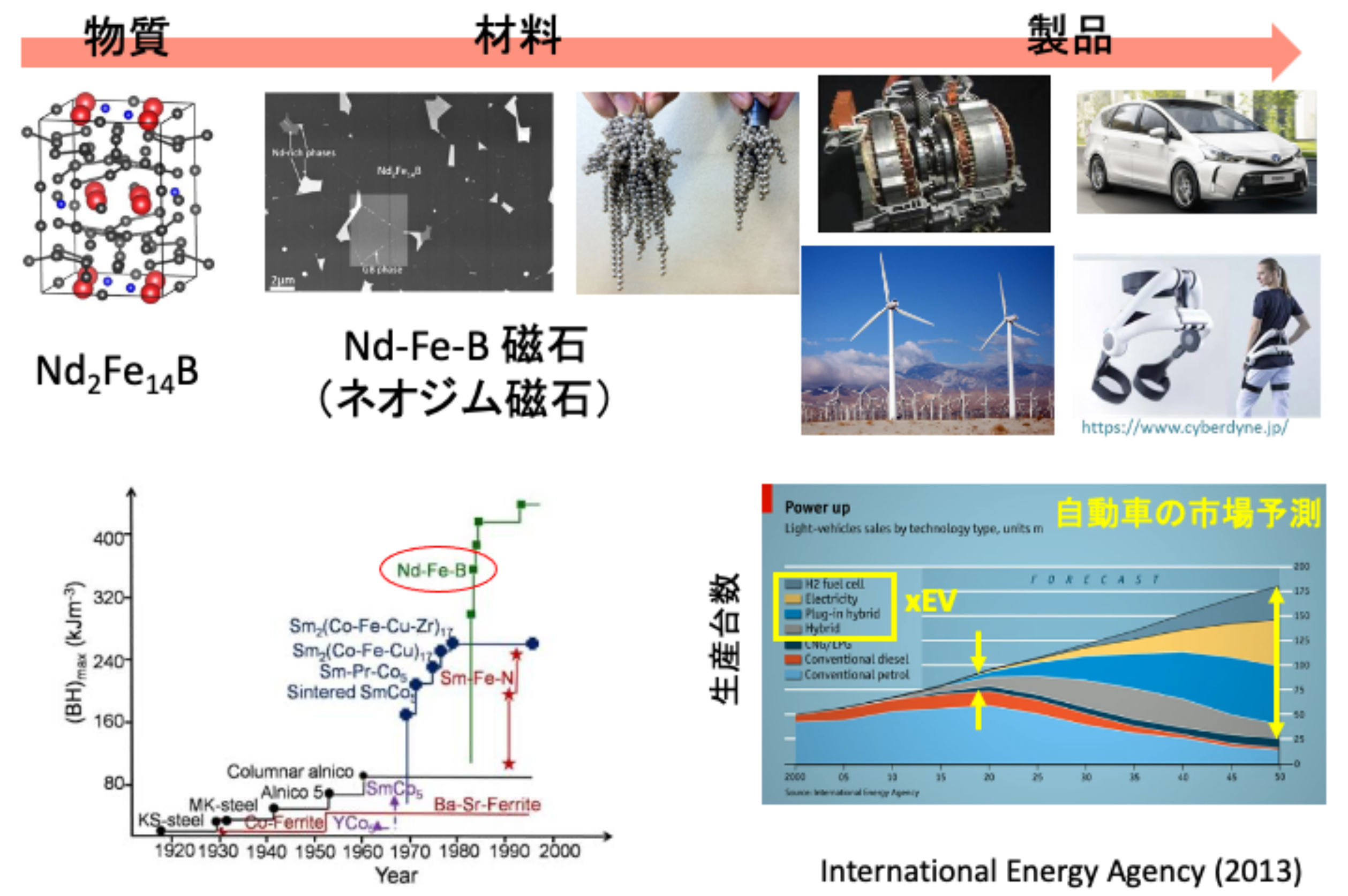


大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発

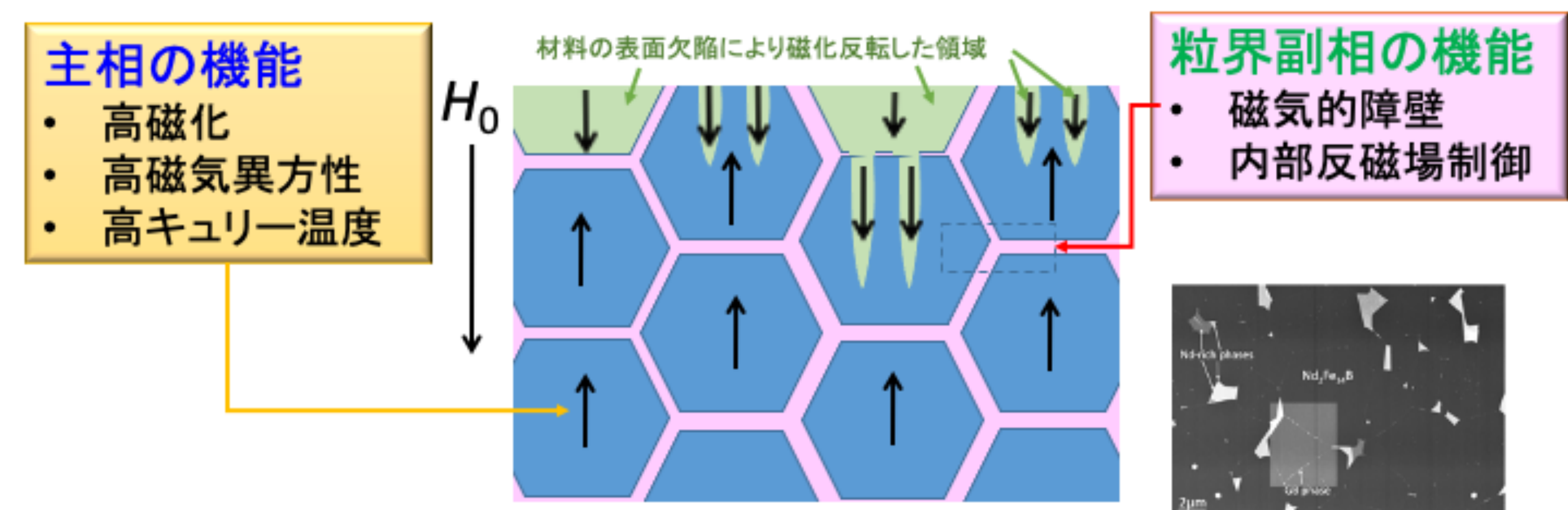
Development of high-performance Permanent Magnets by large-scale Simulations and Data-driven approaches

省エネ社会における高性能永久磁石



- 電動車の駆動モータや風力発電機等に用いる高性能永久磁石の使用量が近年増加
- 特性(保磁力)改善のため希土類元素が使用されており、レアメタルの有効活用が求められる

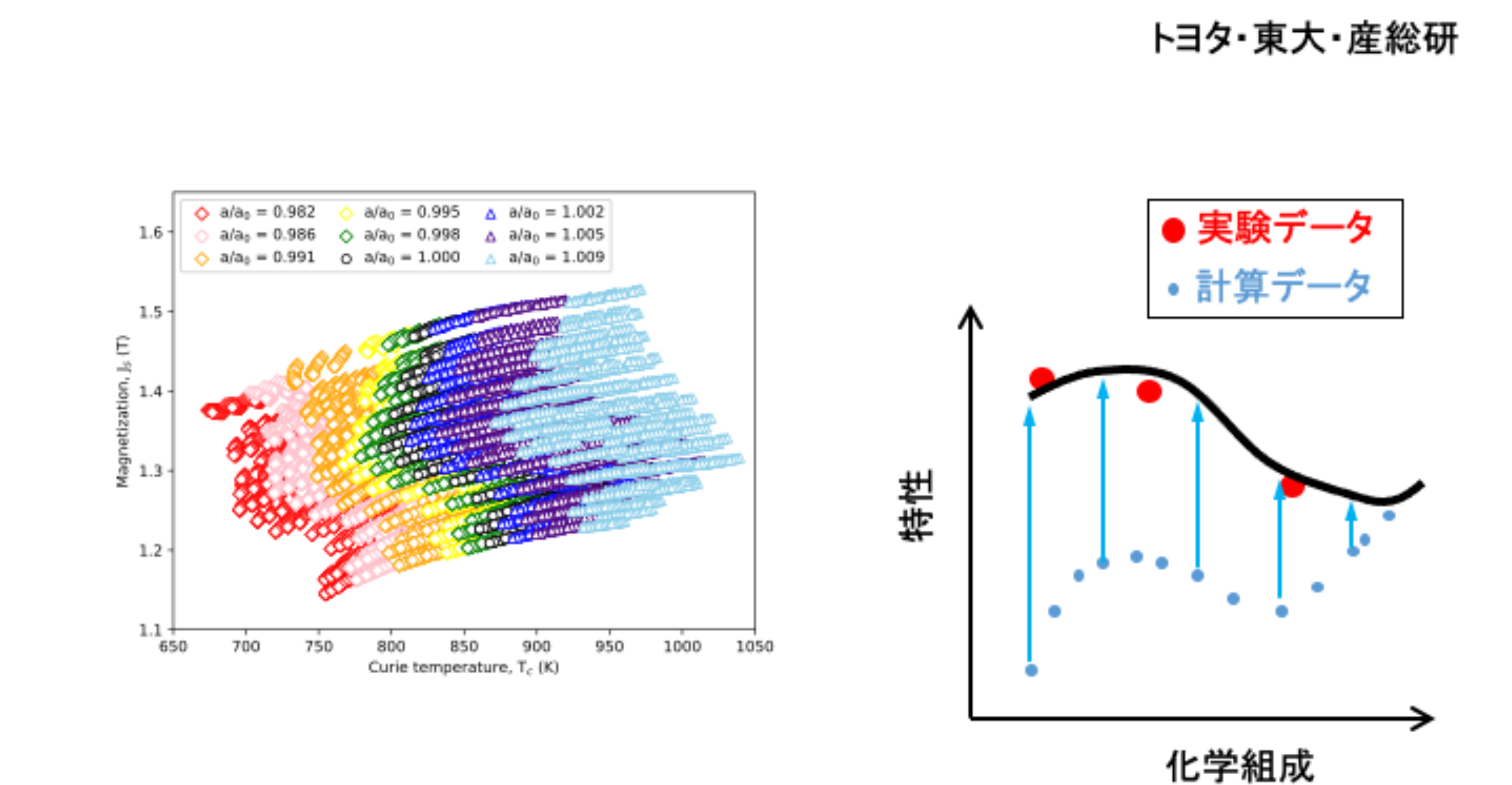
研究課題



磁石粒界の大規模第一原理計算、磁化反転シミュレーションとマテリアルズ・インフォマティクス手法を組み合わせ、高性能磁石の特性と構造・組成の関連を特定し、利用環境に応じた最適な特性を持つ磁石の設計技術を確立する。

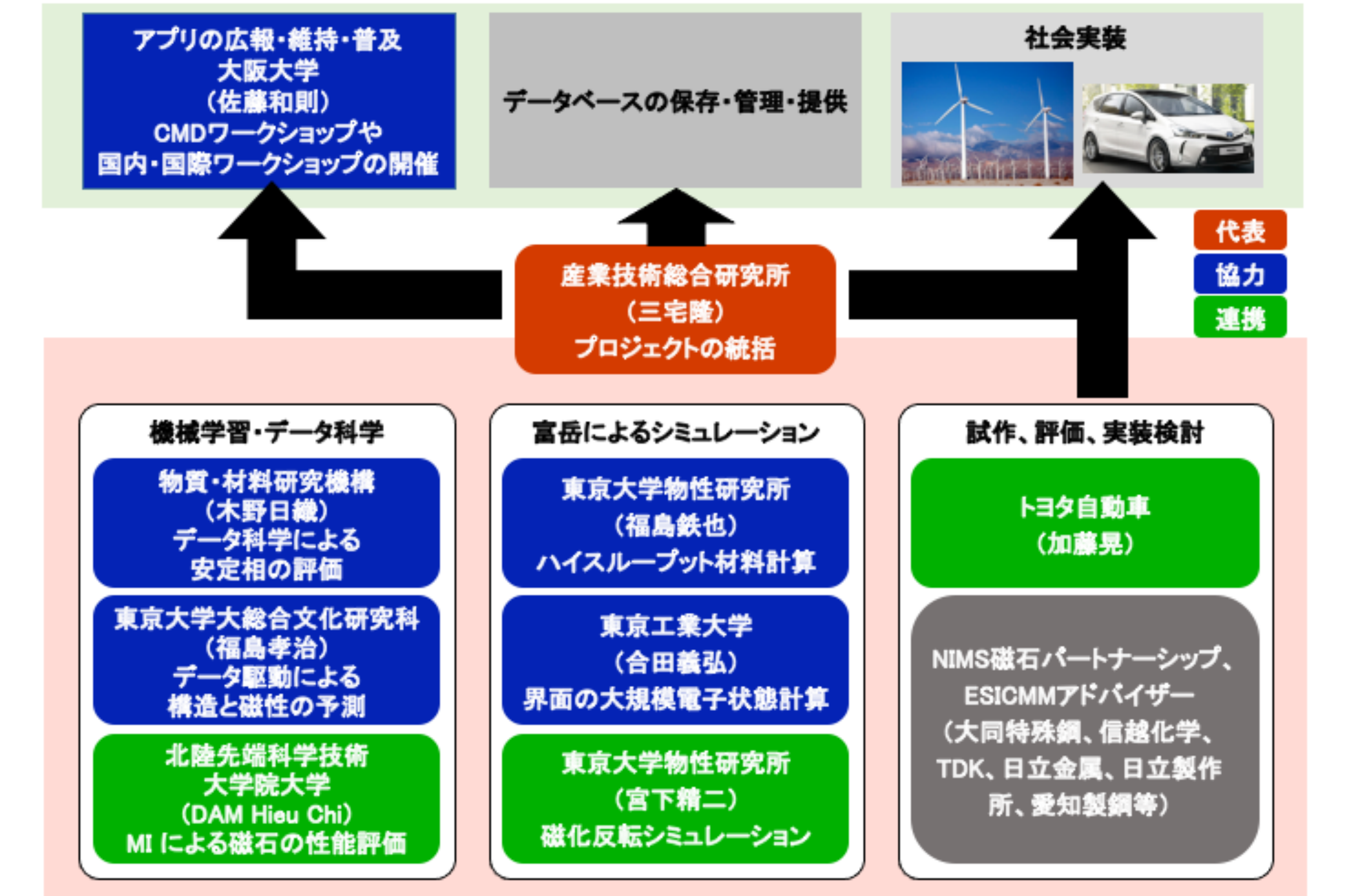
- 最適な主相の設計(省レアメタル、耐熱性、...)
- 界面や微細組織の最適化による材料特性(保磁力)の改善

多元化合物の組成最適化



- KKR-CPAIによる化学組成を変えたハイスループット計算
- 実験データと第一原理計算のデータ同化で材料特性を定量評価

実施体制



アプリ開発

重点課題7(CDMSI)で開発・整備・機能拡張したアプリ

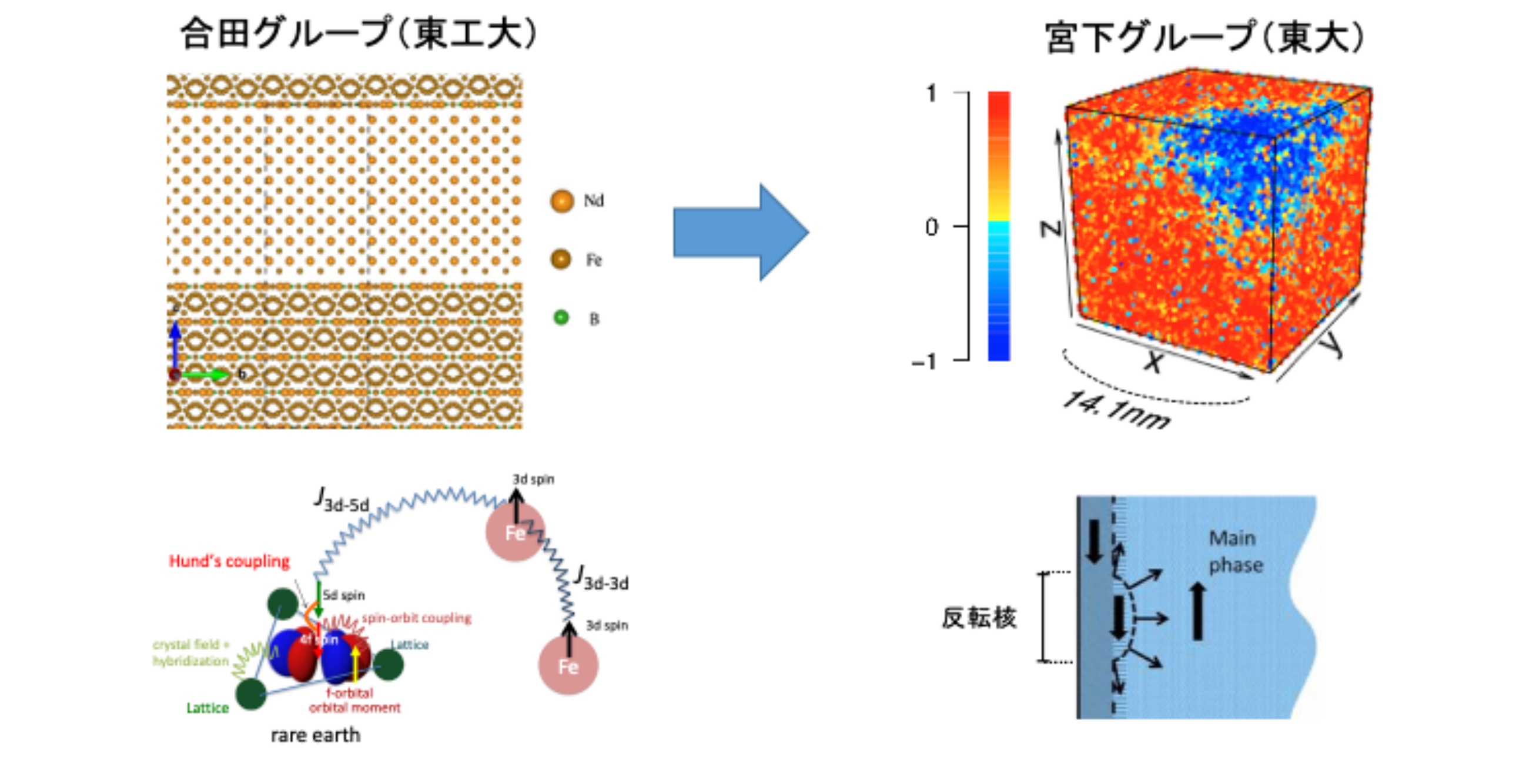
- AkaiKKR (machikaneyama)
- KKRグリーン関数法に基づいた第一原理計算コード
 - コヒーレントポテンシャル近似(CPA)による混晶(非化学量論組成)の取り扱い、磁性への実績
 - 自動計算ワークフローを作成し、遷移金属合金のデータを蓄積



- OpenMX
- 擬原子軌道基底の第一原理計算コード
 - 希土類磁石界面:「京」で2700原子系の計算、8500原子系での動作確認



保磁力機構の解明



- 希土類磁石界面の第一原理計算
- 第一原理計算に基づいた原子論的スピンモデルの導出
- 磁化反転シミュレーションによる保磁力の評価