

令和3年4月15日

## 「第一原理による相図・磁気計算」ZOOM 勉強会開催

環境負荷低減のために、電気自動車（EV）社会、パワーエレクトロニクス社会の実現が進んでいる。そこでは小型軽量化のために高周波化が進展しているが、その実現のボトルネックとなっているのが量産化を前提とした高周波磁性材料であり、新たな材料研究開発である。磁気エネルギー活用においては電圧・電流の同時性・共通性のために、材料・回路・モータの一貫した研究体制が望ましい。今回、新しい材料研究開発を効率よく行う研究が進められている量子力学の第一原理に基づくフェーズフィールド法応用相図・磁気計算について、そのユーザを含めての勉強会を以下のごとく開催する。多くの参加者を期待する。

### 記

1. 日時 令和3年6月2日 水曜日 13:30 ~ 17:15

2. ZOOM (別途連絡、下記参照)

3. 主催 日本磁気学会エネルギーマグネティックス専門研究会、豊田工大電磁システム研究室

協賛 電気学会産業応用部門、日本鉄鋼協会、日本金属学会、ナノ学会、応用物理学会、日本 AEM 学会、自動車技術会、豊田工大スマートエネルギー技術研究センター、同スマートビークル研究センター、IEEE 名古屋支部、IEEE 仙台支部、日本電磁波エネルギー応用学会、電気学会、電気学会東海支部、日本物理学会、IEEE Japan Council、IEEE 東京支部、電気学会リニアドライブ技術委員会

参加費 無料

4. 講演内容 (司会：藤崎 (豊田工大)、質疑応答込み)

① EV 社会・パワエレ社会に向けた材料開発への期待 (はじめに) 豊田工業大学 藤崎敬介

<https://www.toyota-ti.ac.jp/Lab/Denshi/emes/index.html>

13:30-13:45

② 新材料の予測が可能な第一原理計算による磁気特性計算

東北大学 川添良幸

<https://ja.wikipedia.org/wiki/川添良幸>

13:45-14:45

(休憩)

③ 第一原理フェーズフィールド法による合金微細構造予測

横浜国立大学 大野かおる

[https://ja.wikipedia.org/wiki/大野かおる\\_\(物理学者\)](https://ja.wikipedia.org/wiki/大野かおる_(物理学者))

15:00-16:30

④ 第一原理計算に基づく LLG 計算

工学院大学 赤城文子

<http://www.ns.kogakuin.ac.jp/~wwa1065/report.html>

16:30-16:50

⑤ 総合討論、終わりに 全員

16:50-17:15

5. 参加希望者は、「氏名、所属、メールアドレス、電話番号」を記載して、下記に送付してください。受領確認後 ZOOM-address を送付いたします。締め切り：R3.5.31 (人数多数等の場合お断りすることもあります)

豊田工業大学 三浦 052-809-1827 (masamimiura\_at\_toyota-ti.ac.jp ★\_at\_を@へ変更してください)

6. 問い合わせ先

● 豊田工業大学 藤崎敬介 052-809-1826 fujisaki\_at\_toyota-ti.ac.jp★\_at\_を@へ変更してください

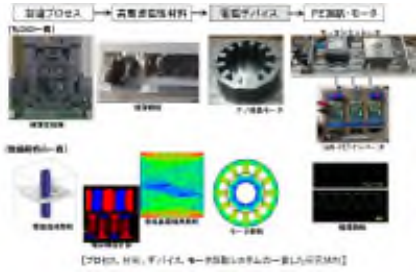
● 東北大学 川添良幸 022-795-3121 kawazoe\_at\_imr.edu★\_at\_を@へ変更してください

以上

# EV社会・パワエレ社会に向けた材料開発への期待 (はじめに)

豊田工業大学 藤崎敬介

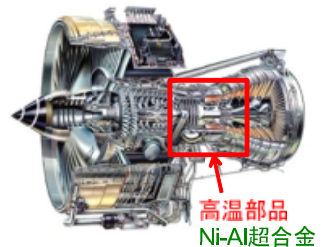
- 電気自動車(EV)の実用化、パワーエレクトロニクス技術の普及が現在進行している。
  - 調査会社Bloomberg New Energy Financeによると、2020年200万台、世界販売台数の3%であるEVが、2040年には58% = 7000万台 = 200-300兆円市場と予測。20年で市場が35倍に拡大することになる。(https://macocollabo.or.jp/お知ろく/sdgs-cs89-0712(R030430))
  - 現在国内エネルギーの42%が電気エネルギーで消費されているが、2030年には電気エネルギーの80%がパワーエレクトロニクス技術を活用して利用される、との予測。
- その実用化のボトルネック技術と言われているのが、高周波大電力の高周波磁性材料である。
- 高周波で高磁束密度が必要となっており、磁気非線形特性に優れた材料の出現が待たれるだけでなく、昇圧チョッパーのインダクタ、DCDCコンバータの高周波変圧器、モータ駆動システムのフィルタなど用途に応じた磁気特性を必要としている。
- 更に、エネルギー系の磁性材料は、パワーエレクトロニクス回路内で、電圧、電流が共通の回路動作に大きな影響を与えるため、材料開発が必要である。
- そこで材料開発を早急に行い、新たな磁性材料の材料開発、磁気特性計算についての勉強会を開催する。



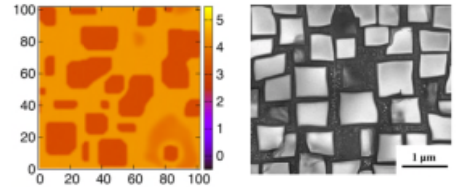
## 第一原理フェーズフィールド法による合金微細構造予測

大野 かおる (横浜国立大学)

佐原 亮二 (NIMS)、桑原 理一 (ダツソーシステムズ)  
Swastibrata Bhattacharyya (Birla工科大学Pilani校)  
Thi Nu Pham (科学技術振興機構)



原子・電子レベルの第一原理計算により完全ノンパラメータで合金の微細構造(濃度 $\phi_x$ )、局所自由エネルギー $F$ 、局所応力 $|VF|$ を正確に予測する新しい第一原理フェーズフィールド(FPPF)法を開発したので、その詳細をお話します。



## 現状の磁性理論の根本的問題点とその解決策

東北大学 川添良幸

### 1. モデル計算 (ハバード模型の類いの2準位模型)

以下の標準的な式は必要条件のビリアル定理を満たさないために間違い。

$$\hat{H} = \sum_i \left\{ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 \right\} - \sum_i \frac{Z}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} \quad \therefore E^{\uparrow\uparrow} - E^{\downarrow\downarrow} = -2K_{12} < 0$$

(Exchange energy)

### 2. 第一原理計算 (交換相関相互作用をパラメータ化)

GGA+U等の実験に合う様にパラメータを導入した計算は予測能力がない現象論。

これらの問題点を抜本的に改善し、実験的に知られていない新磁性体の設計と物性予測を可能とするのが、真の第一原理計算。

LLG方程式等のマクロ模型へのマルチスケール・パラメータ引き渡し。  
TDDFTにより有限温度での物性算定も可能とする。

## 第一原理計算に基づくLLG計算

工学院大学 赤城文子

LLG方程式((1)式)は、磁化ベクトルに外部磁界が印加された時の挙動を求める微分方程式である。本式は歳差運動と制動作用の和で表される。一般には解析領域を複数の要素(nmから $\mu\text{m}$ オーダー)に分割して磁化ベクトルを割り当てて計算を行う。LLG方程式を計算するには、飽和磁化とダンピング定数、及び、実効磁界における異方性磁界と交換磁界を求めるための、異方性定数 $K_u$ と交換スティフネス定数 $A$ を入力磁気パラメータとする。これらの磁気パラメータは量子力学の精密解法に基づいた正しい値と体積効果の取り込みが必要となる。それにより、例えば、軟磁性体の単結晶のB-Hループを正確に求めることができる。

### Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 方程式

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma(\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) + \frac{\alpha}{M_s} \left( \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \quad \dots(1)$$

歳差項                      制動項

$t$ : 時間,  $M_s$ : 飽和磁化,  
 $\gamma$ : ジャイロ定数,  $\alpha$ : ダンピング定数

$\vec{H}_{eff}$ : 実効磁界  
 $\vec{H}_{eff} = \vec{H}_a + \vec{H}_s + \vec{H}_k + \vec{H}_e + \vec{H}_{ed} + \vec{H}_t$

- $\vec{H}_a$ : 外部磁界
- $\vec{H}_s$ : 静磁界
- $\vec{H}_k$ : 異方性磁界
- $\vec{H}_e$ : 交換磁界
- $\vec{H}_{ed}$ : 渦電流による磁界
- $\vec{H}_t$ : 熱等価磁界

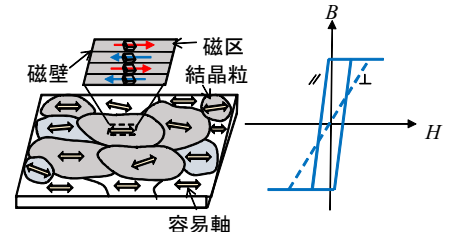


図 軟磁性体のモデル 図 外部印加磁界を変えたときのB-Hループ