

신조성 영구자석 디자인을 위한 다중물리 전산모사 방법

Multi-functional simulations for designing new permanent magnetic materials

이기석^{1*}, 이억균², 심지훈³

¹울산과학기술원,

²한국과학기술원,

³포항공과대학교

신조성 영구자석을 개발하기 위해서는 우수한 자성특성을 가지는 새로운 조합의 신물질 합성과 실제 제작을 위한 공정 개발이 모두 필요하다. 전산모사를 통해 이를 디자인하기 위해서는 원자단위에서부터 미세조직에 이르는 광범위한 스케일과 다양한 물리적 모델을 기반으로 하는 계산이 필요하며 이러한 계산들이 유기적으로 이루어져야 한다. 지금까지 다양한 자성물질에 대한 전산모사가 이루어져 왔지만 이러한 다양한 스케일의 전산모사에 적용되는 모델과 접근 방식이 달라 각 스케일별로 독립적으로만 수행되어 왔다. 예를 들어 원자단위에서는 제일원리 기반의 계산을 통한 조성에 따른 최대자화량, 결정자기이방성 상수, 상호교환작용상수 등의 기초적인 자성 물성 예측이 이루어지거나 알려진 기초 상수들을 기반으로 미소자기 전산모사를 통해 자구구조나 자화이력곡선, 자기동역학등을 계산하였다. 미세조직구조의 경우 열역학을 기반으로 수행되어 왔다.

본 연구에서는 우선 제일원리 기반 신조성의 물성을 탐색하고 이를 바탕으로 원자단위 미소자기 전산모사 및 일반 미소자기전산모사를 통해 열적특성 및 자구구조를 예측하고 열역학 기반의 미세조직구조와 연계하여 실제 영구자석의 자기적 특성 및 공정 디자인을 수행하고자 한다.

본 발표에서는 각각의 계산 방법에 대한 간략한 소개와 각 계산 단계의 효율성을 높이는 새로운 계산 방식의 적용 가능성, 그리고 전체 계산을 유기적으로 통합하는 방법등을 살펴보고자 한다.