

# データ創出・活用型磁性材料研究拠点

## Digital Transformation Initiative Center for Magnetic Materials (DXMag)

研究担当 | 大久保 忠勝 | データ創出・活用型磁性材料研究拠点 代表研究者  
加藤 晃 | データ創出・活用型磁性材料研究拠点 企画マネージャー

✉ OHKUBO.Tadakatsu@nims.go.jp  
✉ KATO.Akira@nims.go.jp



**Keywords** Data-driven materials design, Permanent magnets, Soft magnetic materials, Functional magnetic materials

### 研究の狙い

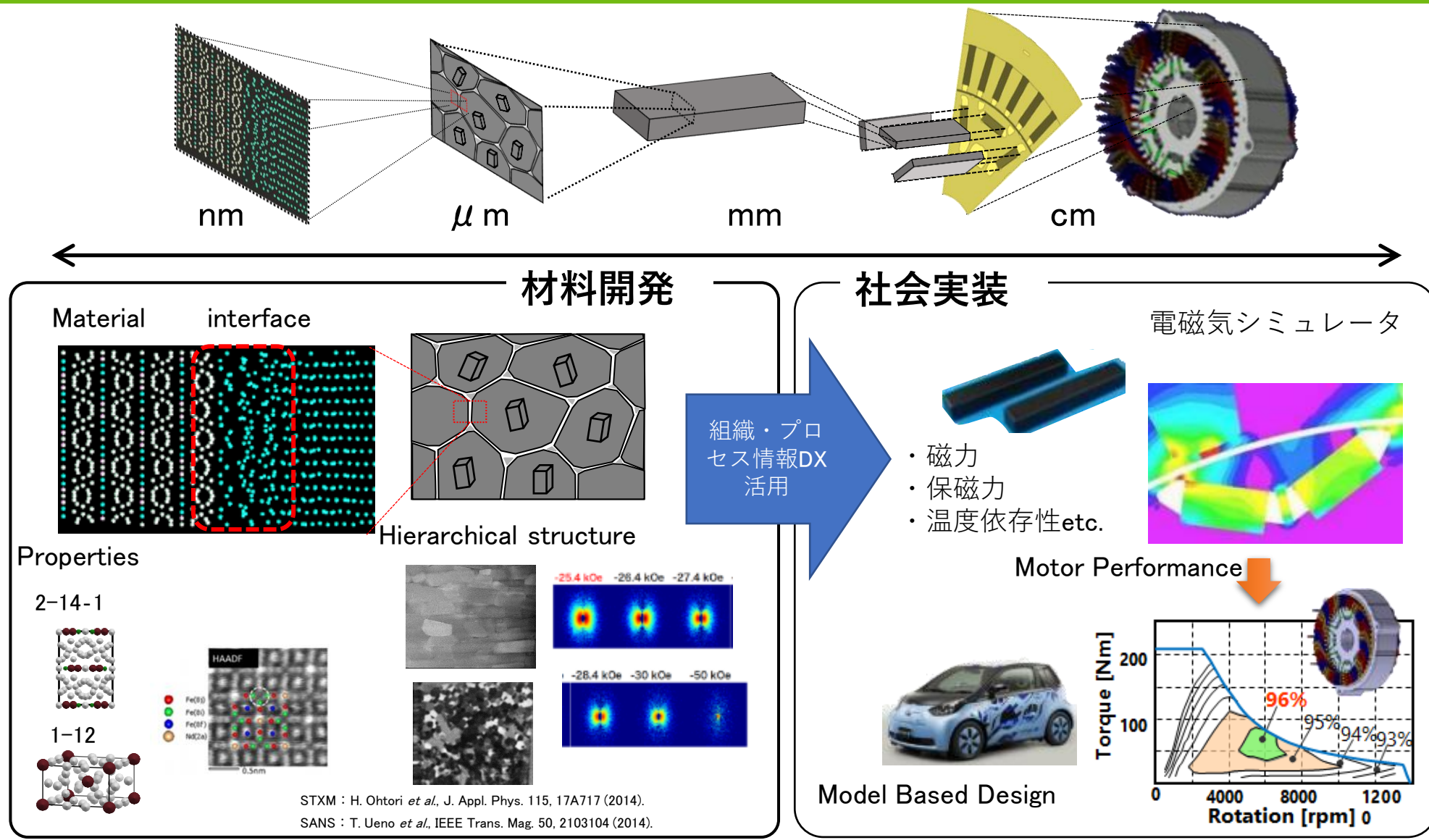
データサイエンス的手法を用いたデータ駆動型の先進的新規材料創製技術により、10年先の社会像に重要な役割を果たす、革新的な機能、従来を上回る性能強調を発現する、永久磁石、軟磁性材料、機能性磁性物質等の多種多様なエネルギー変換マテリアルを効率的に創出する。

### 研究の要点

データ創出・活用型磁性材料研究において、①.データ創出から、②.データ統合・管理、③.データ利活用まで、一気通貫した材料研究のDXを推進し、世界を先導する価値創造の核となる「材料研究DXプラットフォーム(PF)」を構築、その材料DX・PFを通じて革新的な磁性材料を創製する。

### 磁性材料開発で材料DX手法を確立

### 例)磁石

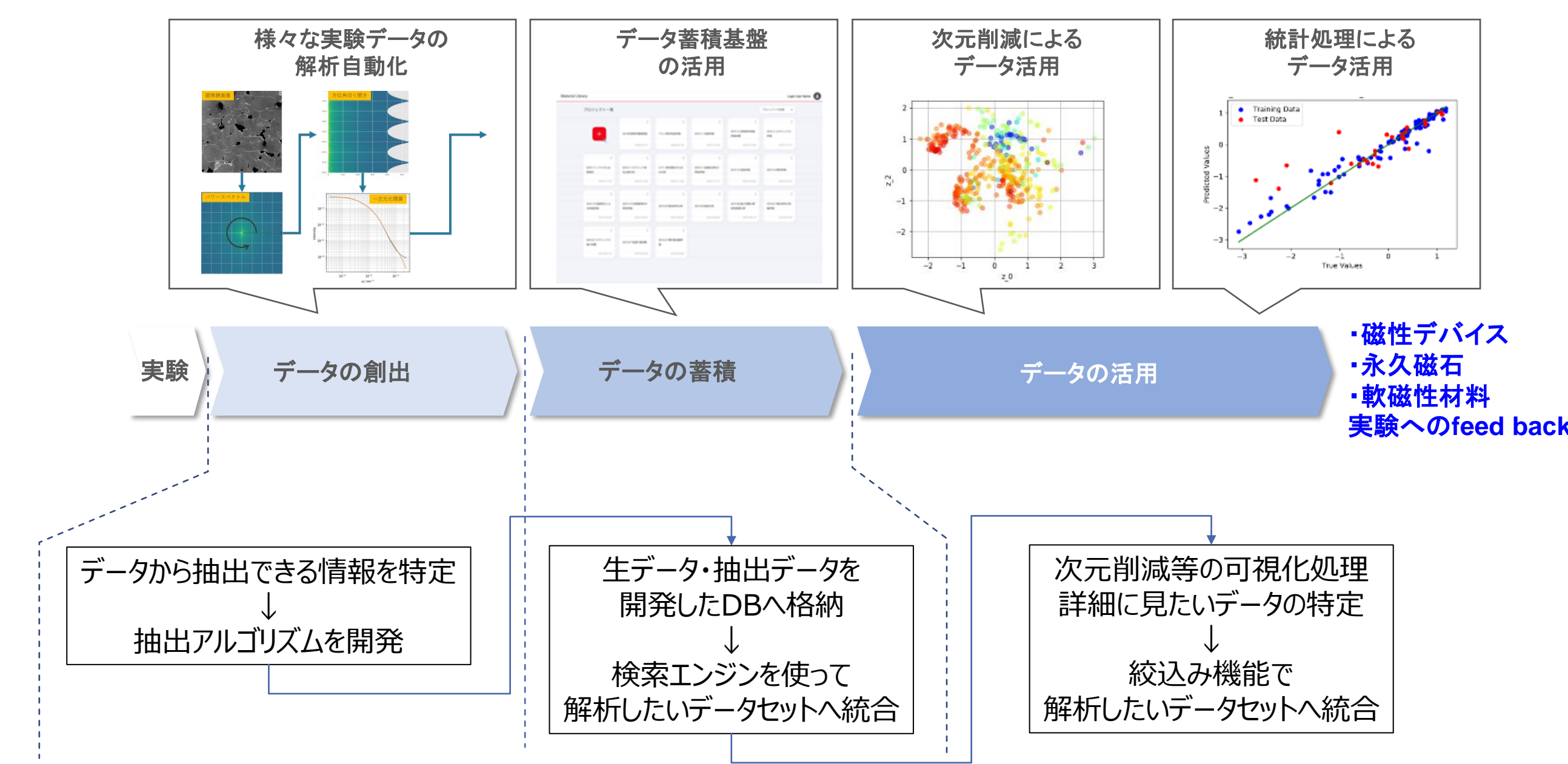


蓄積のある  
・磁石  
データなども活用して  
手法確立し  
他の磁性材料  
・新規磁性材料  
・軟磁性材料  
などに展開

マルチスケール情報取得 → データを効率的かつ統一的に蓄積 → 機械学習により各種予測器構築、MI・PI活用で材料開発、社会実装

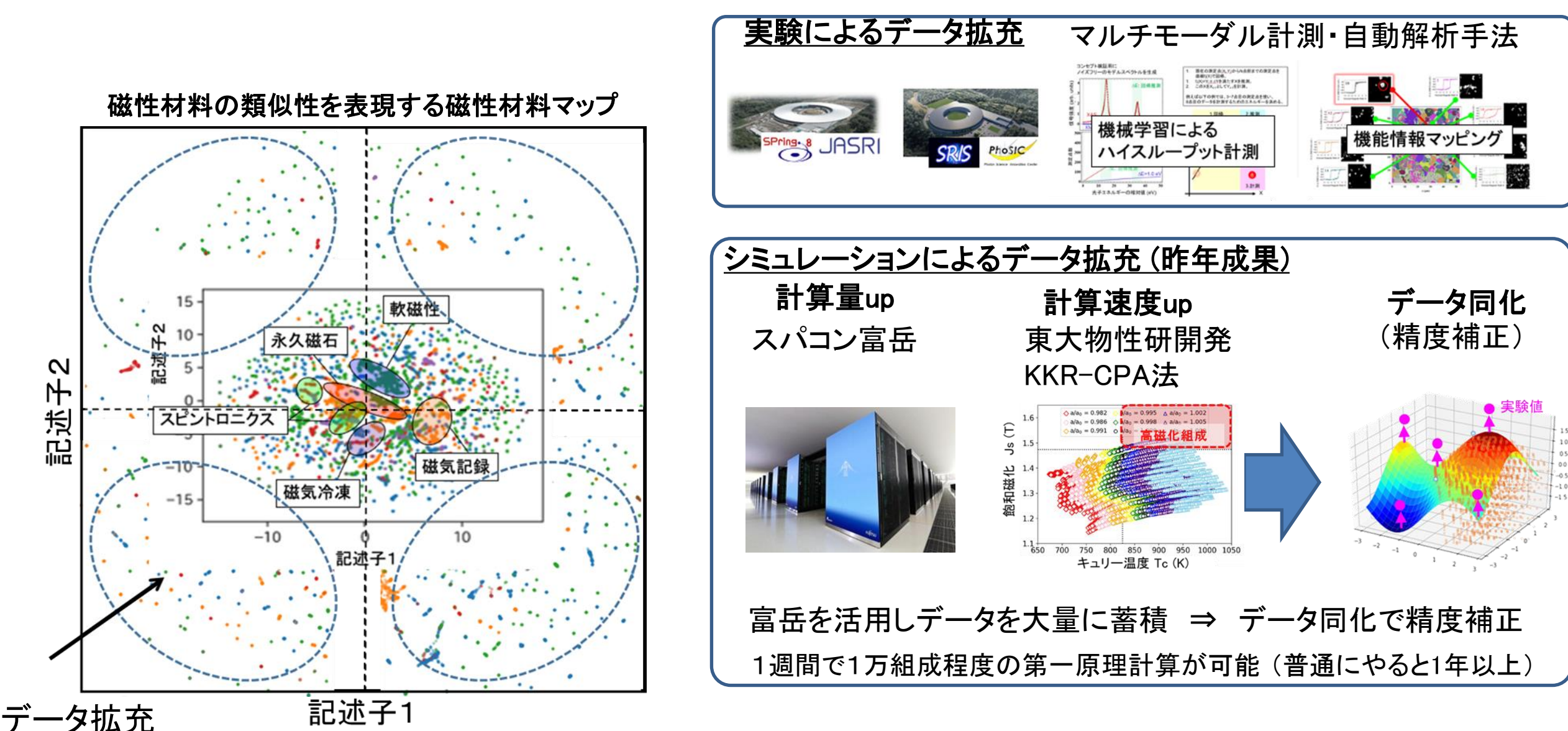
磁性材料の特性発現はマルチスケールでの理解が重要、マルチスケールで情報を取得し、そのデータを効率的、かつ統一的に蓄積し、機械学習により各種予測器構築、MI・PI活用で材料開発、社会実装を目指す

### データ創出・蓄積・活用の具体的方法



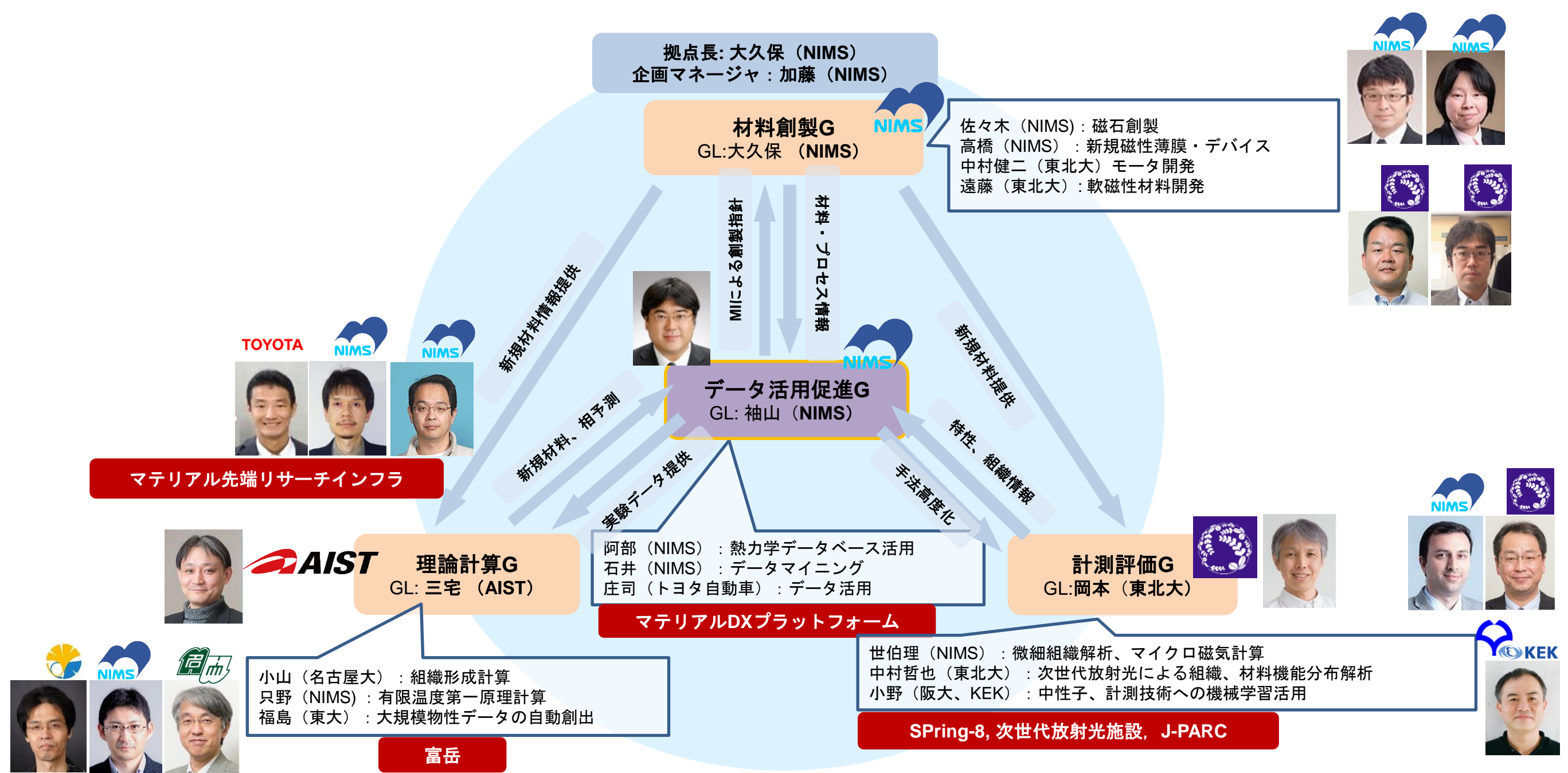
人間の気づきにくいスペクトルや画像の持つ統計情報の変化を捉えることでより深い材料の構造情報と性能情報の相関を見出すことを推進しています

### 探索範囲を未探索領域に拡張し、高機能、高性能を有する未知の物質・材料をも見つけ出すための具体的な方策



磁性材料マップを拡張することで新たなデータ空間が創出され、拡張した領域での内挿により新規磁性材料創出につながる

### DXMag 研究体制 および ロードマップ



「データ活用促進G」を中心に「材料創製G」、「計測評価G」、「理論計算G」が一体となり、大規模先端施設、NIMSに設置されるデータ中核拠点、マテリアルリサーチインフラ事業、磁石MOP、産業界と連携

	2022	2023	2024	2025	2026	2027	2028	2029	2030
課題1: 新規機能性磁性物質探索・材料設計 (理論計算)	新規機能性磁性物質探索 (課題2, 3も含む)	新規機能性磁性物質探索・材料設計	新規提案材料のスクリーニング	新規機能性磁性材料創製					
課題2: AI駆動型オンデマンド永久磁石開発	個々の特性予測器開発	多重特性最適化手法の検討	オンデマンド開発ツール完成						
課題3: データ駆動型最適設計に基づく軟磁性材料・デバイス開発	ネオジム磁石シミュレータ	課題1, 3への展開	他材料への応用検討						
データ創出活用	マルチスケール・マルチモーダル鉄損解析	低損失軟磁性材料創製							
	設計シミュレーター構築	モータ試作評価							
	手法開発・検討・展開	手法高度化検討・展開							
	データ蓄積・活用サポート		他拠点連携						
	人材育成(セミナー、研修)								
計測評価	磁化過程可視化解析								
	放射光施設活用による磁性材料計測	新手法探索、導入検討							
	マルチスケール3次元組織解析	手法高度化検討・活用							
	磁性材料計測の自立化・自動化								

課題1「新規機能性磁性物質探索・材料研究」における、磁性材料をモデルとした他材料へも広く応用展開可能な、材料DX・PFの構築を通じたハイスループット物質探索等により、従来を上回る高性能な課題2「永久磁石」、課題3「軟磁性材料」の候補物質を見出し、それぞれの応用分野で産業競争力の高い新材料を創製し、社会実装することで、10年先の社会像・産業像を実現する。

### 課題

- 磁石、軟磁性材の領域を越えた磁性材料マップの構築
- 広大な材料空間を効率よく調べる材料設計手法
- データの蓄積と相互利用の考え方、協調と競争、データ連携を進める上でのルール作り