

令和 3 年 5 月 3 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K04978

研究課題名(和文) ナノ構造における磁性元素と重元素に関する電子論

研究課題名(英文) Electron theory on magnetic elements and heavy elements in nanostructures

研究代表者

合田 義弘 (GOHDA, Yoshihiro)

東京工業大学・物質理工学院・准教授

研究者番号：50506730

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：磁性元素と重元素を含む界面ナノ構造における構造同定と磁性解析手法の技術基盤を確立し、強磁性Heusler合金とBaTiO<sub>3</sub>との界面などに適用した。界面構造と界面電気磁気結合に非常に大きな相関が得られることがわかった。また、界面における電気分極方向と磁気モーメントや磁気異方性などの磁気状態との相関を、界面歪み効果まで含めて理論解析した。さらに、磁性に依存したフォノンによる磁性へのフィードバック効果を取り入れた、第一原理電子論による有限温度磁性の理論解析手法を開発し、CoPtなどに適用した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

磁性元素と重元素の協奏による新奇な物性を理論解析する技術基盤を確立し、ナノ界面の第一原理電子論による理論解析を実行した。ますます微細化の進む電子デバイスでは、電界による磁性の制御など、新しいデバイス動作原理が求められている。白金族や希土類に頼らずとも界面磁気異方性を大きくできる可能性を本研究成果は示しており、重元素を活用した磁性材料の高性能化への一助となることが期待される。

研究成果の概要(英文)：Computational frameworks for atomic arrangements and magnetic properties of nanostructures including magnetic elements and heavy elements were developed. Applications are made for interfaces between ferromagnetic Heusler compounds and BaTiO<sub>3</sub>. Relation between interface atomic structures and magnetic properties were clarified. In addition, strain effects due to the change in the electric polarization on magnetic properties were identified. Furthermore, a new theoretical method for finite temperature magnetism was developed on the basis of first-principles electron theory.

研究分野：物性理論

キーワード：界面磁性

### 1. 研究開始当初の背景

微細加工技術の進展により、ナノスケールで原子構造を制御する事が可能となりつつある。応用研究の例としては、スピントロニクスデバイスにおける原子スケールでの薄膜成長などが挙げられる。したがって、ナノスケールの原子構造、特にナノ界面での磁気結合や磁気異方性の制御・理解が極めて重要となる。

磁性材料やそのナノ界面などの磁氣的性質を向上させるために、様々なアプローチが試みられてきた。例えば、結晶磁気異方性を増強するにあたり、界面の格子歪みの活用や希土類と遷移金属の化合物化、白金との合金化などがこれまで用いられてきた。しかし、希土類あるいは白金を用いる方法は原材料調達という観点からは応用上問題がある。また、白金による磁気異方性増強のメカニズムの理解はまだ十分とは言えず、白金以外の重元素を活用するという試みもこれまでは不十分であった。したがって、遷移金属と重元素の電子間相互作用の理解を深化させ、ナノ構造において大きな磁気異方性などの良好な局所磁気特性を発現させるための設計指針を得る事は非常に重要である。

### 2. 研究の目的

磁性材料において、ナノスケールの構造を制御する必要性は年々高まっており、例えばスピントロニクスの分野では原子層毎に組成を制御すべく薄膜成長の技術革新に向けた努力が続けられている。特にこの様な磁性ナノ構造において磁気異方性を制御する事は極めて重要であるが、現状では結晶磁気異方性の制御においては希少な白金と希土類元素のそれに頼る事が多い。

本研究課題では、白金および希土類元素に頼らない結晶磁気異方性の発現機構として重元素に特有の大きなスピン・軌道相互作用に着目し、重元素を活用した結晶磁気異方性の大きいナノ界面構造を第一原理計算に基づき提案する事を通じて、ナノ構造における磁性元素と重元素に関する電子論における新たな学理を構築する事を、本研究課題の申請時における当初の研究目的とした。

### 3. 研究の方法

ナノ界面などにおける局所磁気特性の第一原理電子論による計算手法を開発し、それを磁性元素と重元素を含むナノ界面に適用することによって行った。理論的枠組みとしては、密度汎関数理論(DFT)における一般化密度勾配近似とDFT+U法と呼ばれる局在電子における電子間相互作用の補正を用いた。数値シミュレーションは、東工大TSUBAMEや東大物性研スパコンなどを用いて実行した。本研究課題により開発・改良した手法は、原子サイトごとに分解した局所磁気異方性の計算手法、原子サイト間の磁氣的交換結合定数の計算手法、フォノンと磁性の寄与の両者を取り入れた自由エネルギー計算による有限温度磁性の理論解析手法である。

### 4. 研究成果

#### (1)

重元素を含む磁性ナノ界面、具体的にはbcc FeとBiFeO<sub>3</sub>(BFO)の(001)界面に対し、スパコンを用いた大規模第一原理計算により構造サンプリングを行った。計算資源としては、主に東工大TSUBAMEを用いた。格子ミスマッチの少ない格子整合界面のスーパーセルをモデル化し、界面の積層終端面および界面での相対的な積層原子配置を同定した。さらに、同定した界面構造に対し3次元的なnon-collinearスピン配置も検討しどのようなスピン物性を示すかについても精査した。まず、BFOのバルクで、スピン軌道相互作用を取り入れた第一原理non-collinear計算を行った結果、Dzyaloshinskii-Moriya相互作用に基づく反強磁性スピンの傾きに由来する磁気モーメントが得られ、その結果は実験と一致する事が分かった。

bcc-Fe/BFO界面のFe原子層ごとの磁気異方性エネルギーを評価した。その結果を図1に示す。界面近傍の3原子層において磁気異方性が非常に大きく、それよりも界面から遠いbcc Fe原子はbcc Fe単結晶と同様ほとんど磁気異方性を持たないことがわかった。この界面磁気異方性は、BFO中Biのスピン・軌道相互作用による重元素効果や、界面の空間反転

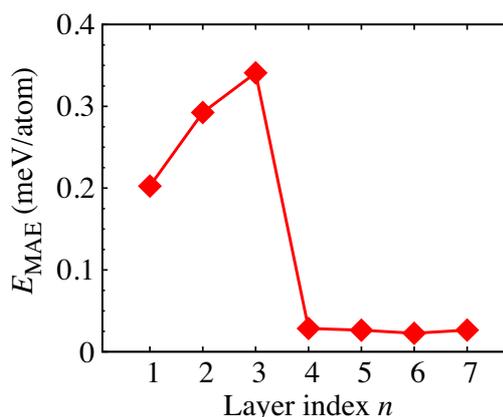


図1: 各Fe原子層における1原子あたりの磁気異方性エネルギー。[K. Fujita and Y. Gohda, Phys. Rev. Appl. 11, 024006 (2019). Copyright (2019) American Physical Society.]

対称性の破れによる構造異方性、および BFO 中 Fe 原子の結合状態の変化に由来するものと考えられる。さらに、bcc Fe の内部では交換相互作用により各 Fe 原子の磁気モーメントが強固に結合しており、界面の磁気異方性が bcc Fe 全体の磁気異方性に影響を与えていることを明らかにした [K. Fujita and Y. Gohda, Phys. Rev. Appl. **11**, 024006 (2019).].

(2)

強磁性 Heusler 合金 Fe<sub>3</sub>Si と BaTiO<sub>3</sub> (BTO) との界面の理論解析を行った。本界面では Fe<sub>3</sub>Si の界面終端層の効果が非常に重要であり、界面に Si が露出している場合には Si との化学結合により BTO の電気分極が界面で固定され、BTO の電気分極反転の効果が界面まで伝わらないことがわかった。したがって、界面の電気磁気結合を増大させるため、異種原子層の挿入効果を検討した、その結果を図 2 に示す。Co をわずか 1 原子層界面に挿入しただけで、界面の電気磁気結合定数はおよそ 10 倍に増幅された [Y. Hamazaki and Y. Gohda, J. Appl. Phys. **126**, 233902 (2019).]. さらに、界面における格子ひずみと磁性の相関を明らかにするために、BTO の電気分極を界面垂直方向から界面並行方向へと変化させ、電気磁気結合への影響を理論解析した。その結果、異種原子を挿入しない界面の場合には界面に存在する Si が界面電気分極を固定するため、格子ひずみの影響が無視できるほど小さくなることがわかった。

さらに、BTO 表面上の結晶成長の初期過程の理解を深めるために、BTO 表面上の遷移金属元素の吸着状態の理論解析を行った。BTO (001) 表面の終端状態と遷移金属元素の種類に応じて、化学結合の共有結合性が大きく影響を受け、吸着サイトに影響を及ぼしていることが明らかとなった [R. Costa-Amaral and Y. Gohda, J. Chem. Phys. **152**, 204701 (2020).]. また、BTO 表面と強磁性 Heusler 合金との界面における電気分極方向と磁気モーメントや磁気異方性などの磁気状態との相関を理論解析した。界面に Si が存在する場合には、界面電気分極がバルク内部の電気分極によらず固定されるため、Si が界面を終端しない界面を精査したところ、電気磁気効果における歪み依存性を定量化することができた。

(3)

フォノンの自由エネルギーと磁気的自由エネルギーの両者を考慮することにより、磁性に依存したフォノンによる磁性へのフィードバック効果を取り入れた、第一原理電子論による有限温度磁性の理論解析手法を開発した [T. Tanaka and Y. Gohda, npj Comput. Mater. **6**, 184 (2020).]. これを bcc Fe に適用した結果、強磁性状態よりも常磁性状態の方が、フォノン振動数が小さいためフォノンの自由エネルギーが小さくなり、常磁性状態がより安定化することがわかった。その結果を図 3 に示す。bcc Fe の Curie 温度は、磁性に依存したフォノンから磁性へのフィードバック効果により 500 K 以上低下することが明らかとなった。さらに、これを CoPt などの化合物に適用することにより、結晶構造の対称性とフォノン振動数の温度依存性との関係を説明する exchange ligand field の概念を提唱した [T. Tanaka and Y. Gohda, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 093705 (2020).].

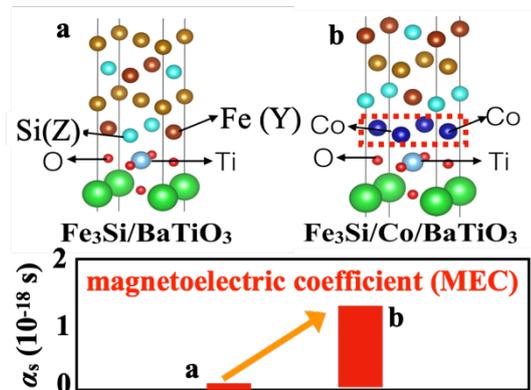


図 2: 界面電気磁気結合定数の界面異種原子層挿入による変化。Co1 原子層の挿入により界面電気磁気結合定数がおよそ 10 倍となった。

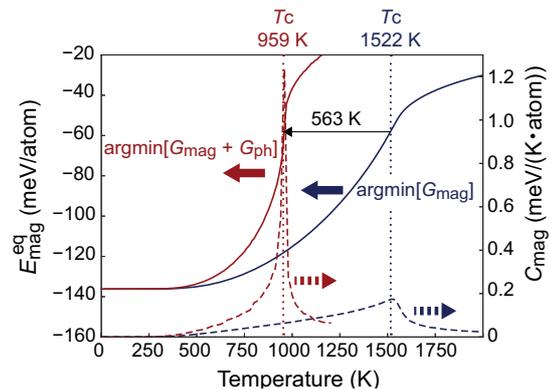


図 3: 開発した自由エネルギー評価手法を bcc Fe に適用して得られた、自由エネルギーを最小化する磁気エネルギーとその温度微分から得られる磁気比熱。 [T. Tanaka and Y. Gohda, npj Comput. Mater. **6**, 184 (2020). Copyright (2020) The Authors.]

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 16件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Costa-Amaral Rafael, Gohda Yoshihiro	4. 巻 152
2. 論文標題 First-principles study of the adsorption of 3d transition metals on BaO- and TiO <sub>2</sub> -terminated cubic-phase BaTiO <sub>3</sub> (001) surfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 204701 ~ 204701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0008130	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ainai Yuta, Kou Sonju, Tatetsu Yasutomi, Gohda Yoshihiro	4. 巻 59
2. 論文標題 First-principles study on magnetism of a crystalline grain-boundary phase in Nd <sub>2</sub> Fe <sub>2</sub> B permanent magnets	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 060904 ~ 060904
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab9402	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Seo Insung, Yokota Shunsuke, Imai Yousuke, Gohda Yoshihiro	4. 巻 184
2. 論文標題 First-principles calculations on high-temperature desorption loss from iridium	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109897 ~ 109897
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2020.109897	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tanaka Tomonori, Gohda Yoshihiro	4. 巻 89
2. 論文標題 First-Principles Study of Magnetism-Dependent Phonons Governed by Exchange Ligand Field	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 093705 ~ 093705
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.093705	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tanaka Tomonori, Gohda Yoshihiro	4. 巻 6
2. 論文標題 Prediction of the Curie temperature considering the dependence of the phonon free energy on magnetic states	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 184 ~ 184
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-020-00458-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Gohda Yoshihiro	4. 巻 22
2. 論文標題 First-principles determination of intergranular atomic arrangements and magnetic properties in rare-earth permanent magnets	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 113 ~ 123
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2021.1877092	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ainai Yuta, Shiozawa Tomoharu, Tatetsu Yasutomi, Gohda Yoshihiro	4. 巻 13
2. 論文標題 First-principles study on surface stability and interface magnetic properties of SmFe12	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 045502-1 ~ -6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ab7bca	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ainai Yuta, Tatetsu Yasutomi, TERASAWA Asako, GOHDA Yoshihiro	4. 巻 13
2. 論文標題 First-principles study of crystalline Nd-Fe alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 017006-1--4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab626e	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hamazaki Yasunari, Gohda Yoshihiro	4. 巻 126
2. 論文標題 Enhancement of magnetoelectric coupling by insertion of Co atomic layer into Fe <sub>3</sub> Si/BaTiO <sub>3</sub> (001) interfaces identified by first-principles calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 233902-1~-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5129312	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Terasawa Asako, Matsumoto Munehisa, Ozaki Taisuke, Gohda Yoshihiro	4. 巻 88
2. 論文標題 Efficient Algorithm Based on Liechtenstein Method for Computing Exchange Coupling Constants Using Localized Basis Set	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 114706-1~-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.114706	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fujita Kazuhiro, Gohda Yoshihiro	4. 巻 11
2. 論文標題 First-Principles Study of Magnetoelectric Coupling at Fe/BiFeO <sub>3</sub> (001) Interfaces	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 024006-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevApplied.11.024006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tanaka Tomonori, Gohda Yoshihiro	4. 巻 98
2. 論文標題 First-principles prediction of one-dimensional giant Rashba splittings in Bi-adsorbed In atomic chains	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 241409-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.241409	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tatetsu Yasutomi, Tsuneyuki Shinji, Gohda Yoshihiro	4. 巻 4
2. 論文標題 First-principles study on substitution effects in Nd <sub>2</sub> (Fe, X) <sub>14</sub> B	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Materialia	6. 最初と最後の頁 388 ~ 394
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mtla.2018.10.018	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Terasawa Asako, Gohda Yoshihiro	4. 巻 149
2. 論文標題 Hidden order in amorphous structures: Extraction of nearest neighbor networks of amorphous Nd-Fe alloys with Gabriel graph analyses	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 154502-1 ~ 9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5045222	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tatetsu Yasutomi, Harashima Yosuke, Miyake Takashi, Gohda Yoshihiro	4. 巻 2
2. 論文標題 Role of typical elements in Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> X (X=B, C, N, O, F)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 074410-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.2.074410	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Nakamura and Y. Gohda	4. 巻 96
2. 論文標題 Prediction of ferromagnetism in MnB and MnC on nonmagnetic transition-metal surfaces studied by first-principles calculations	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 245416--1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.245416	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計56件（うち招待講演 6件 / うち国際学会 28件）

1. 発表者名 合田 義弘
2. 発表標題 磁石材料組織の第一原理電子論による検討
3. 学会等名 第10回材料系ワークショップ（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Amran Mahfudh Yatmeidhy、合田義弘
2. 発表標題 First-principles calculation of $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-PbTiO}_3$ (PMN-PT): a study of atomic arrangement models
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Amran Mahfudh Yatmeidhy、R. Costa-Amaral、合田義弘
2. 発表標題 First-principles calculation of $(\text{Ni}/\text{Cu})\text{PMN-PT}(001)$ heterostructure
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会（2021年）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Rafael Costa-Amaral and Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 "Tuning the magnetoelectric effect via metal substitution at ferromagnetic/ferroelectric interfaces"
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年年次大会（2021年）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中 友規、合田 義弘
2. 発表標題 磁気状態に依存するフォノンが時勢に及ぼす熱力学的フィードバック効果とその影響
3. 学会等名 PCoMSシンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中 友規、合田 義弘
2. 発表標題 磁気状態に依存するフォノンが磁氣的熱平衡状態へ及ぼす影響の第一原理的研究
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会(2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Tanaka and Y. Gohda
2. 発表標題 Magnetism-dependent phonons and its effect on magnetic phase transition from first principles
3. 学会等名 APS March Meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高 成柱, 合田 義弘
2. 発表標題 第一原理計算を用いたNd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> BとNd <sub>2</sub> Feジグザグ界面の磁気特性解析
3. 学会等名 日本金属学会第168回講演大会(2021年春季)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuta Ainai, Y. Tatetsu, A. Terasawa, Y. Gohda
2. 発表標題 First-principles Study on Crystalline Nd-Fe alloys as Candidate Structures for Grain-Boundaries in Nd-Fe-B Sintered Magnets,
3. 学会等名 APS March Meeting 2020 (virtual) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Insung Seo, Shunsuke Yokota, Yousuke Imai, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 First-principles calculations on IrO <sub>3</sub> desorbability at high temperatures
3. 学会等名 ACS Spring 2020 National Meeting (virtual) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yasunari Hamazaki, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 Enhancement of magnetoelectric coupling by insertion of Co atomic layer into Fe <sub>3</sub> Si/BaTiO <sub>3</sub> (001) interfaces identified by first-principles calculations
3. 学会等名 APS March Meeting 2020 (virtual) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Tomonori Tanaka, Y. Gohda
2. 発表標題 The shift of the Curie temperature in bcc-Fe by phonon softening: first-principles phonon and Monte Carlo calculations
3. 学会等名 APS March Meeting 2020 (virtual) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1 . 発表者名 Tomoharu Shiozawa, Yuta Ainai, Y. Tatetsu, Y. Gohda
2 . 発表標題 First-principles calculations on the surfaces and interfaces of SmFe <sub>12</sub>
3 . 学会等名 APS March Meeting 2020 (virtual) (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 Sonju KOU, Taichi ABE, Yoshihiro GOHDA
2 . 発表標題 Theoretical Sm-Fe-Cu ternary phase diagram for subphase-exploration of SmFe <sub>12</sub> permanent magnets
3 . 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 A. Terasawa, T. Shiozawa, Y. Gohda
2 . 発表標題 First-principles study of interface magnetism in materials structures of Nd-Fe-B sintered magnets
3 . 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Yuta Ainai, Y. Gohda
2 . 発表標題 First-principles study of magnetic properties of Nd-Fe alloys in Nd-Fe-B magnets
3 . 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 I. Seo, S. Yokota, Y. Imai, Y. Gohda
2 . 発表標題 Forecasting of IrO <sub>3</sub> Desorbability from Iridium Alloys by First-principles Study
3 . 学会等名 Materials Research Meeting 2019 ( 国際学会 )
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 I. Seo, S. Yokota, Y. Imai, Y. Gohda
2 . 発表標題 IrO <sub>3</sub> Desorbability of Iridium Alloys at High Temperatures from Thermodynamical Perspective
3 . 学会等名 ASIAN-22 ( 国際学会 )
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Y. Ainai, Y. Tatetsu, A. Terasawa, Y. Gohda
2 . 発表標題 First-principles study on structures of crystalline Nd-Fe alloys as candidates for grain-boundary phases in Nd-Fe-B sintered magnets
3 . 学会等名 ASIAN-22 ( 国際学会 )
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 R. Teshima, S. Yokota, Y. Imai, Y. Gohda
2 . 発表標題 Evaluation of solid-solution strengthening of alloys
3 . 学会等名 ASIAN-22 ( 国際学会 )
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 Asako Terasawa, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 Magnetism and structure of amorphous grain boundaries of permanent magnets: First principles study
3. 学会等名 JEMS 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Insung Seo, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 First-principles study of IrO <sub>3</sub> desorption from iridium surfaces and temperature dependence
3. 学会等名 Nano Korea 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 濱崎恭考, 合田義弘
2. 発表標題 Co <sub>2</sub> FeSi/BaTiO <sub>3</sub> 界面における磁氣的性質の解析
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田中友規, 合田義弘
2. 発表標題 フォノン自由エネルギーの磁氣秩序依存性によるキュリー温度の変化
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 塩沢 知春, 相内 優太, 立津 慶幸, 合田 義弘
2. 発表標題 第一原理計算によるSmFe12の表面の安定性と界面の磁気特性の解明
3. 学会等名 日本金属学会 2020年春期(第166回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 相内 優太, 立津 慶幸, 寺澤 麻子, 合田 義弘
2. 発表標題 第一原理計算によるNd-Fe合金の構造同定
3. 学会等名 日本金属学会 2020年春期(第166回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 寺澤 麻子, 相内 優太, 尾崎 泰助, 合田 義弘
2. 発表標題 局在基底密度汎関数法による磁性金属の交換結合定数計算
3. 学会等名 日本金属学会 2020年春期(第166回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田中 友規, 合田 義弘
2. 発表標題 フォノン振動数の温度依存性に起因するキュリー温度の変化
3. 学会等名 材料系ワークショップ
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 R. Costa-Amaral, Y. Gohda
2. 発表標題 Using DFT to Investigate the Magnetoelectric Coupling at Fe <sub>3</sub> Si/Tm/BaTiO <sub>3</sub> (001) (TM = Sc to Cd) Interfaces
3. 学会等名 横浜国立大学 物工談話会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 合田 義弘
2. 発表標題 究極性能磁石の開発に向けた磁石材料組織の電子論による理論解析
3. 学会等名 横浜国立大学 物工談話会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Rafael Costa-Amaral, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 A First Principles Study of Magnetoelectric Coupling at Fe <sub>3</sub> Si/TM/BaTiO <sub>3</sub> (001) (TM = Sc to Cd) Interfaces
3. 学会等名 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム & 計算物質科学スーパーコンピュータ事業報告会 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 濱崎 恭考, 合田 義弘
2. 発表標題 密度汎関数理論に基づく強磁性Heusler合金/Co/BaTiO <sub>3</sub> (001)界面構造における電気磁気結合の評価
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋季講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中 友規, 合田 義弘
2. 発表標題 磁気モーメントの熱揺らぎを考慮したフォノン自由エネルギーの計算
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋季講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomonori Tanaka, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 New spin filtering mechanism through atomic chains without magnetic field: first-principles study
3. 学会等名 APS March Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Asako Terasawa, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 Gabriel Graph Analysis of Amorphous Nd-Fe Alloys and Relationship with Their Magnetism
3. 学会等名 ACSIN-14 & ICSPM26 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Gohda, S. Nakamura
2. 発表標題 First-principles prediction of ferromagnetism in MnB and MnC monolayer films on nonmagnetic transition-metal surfaces
3. 学会等名 ECOSS 34 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasutomi Tatetsu, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 Ab-initio study on Ga-added Nd-Fe-B sintered magnets
3. 学会等名 REPM2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 Surface-science studies by OpenMX
3. 学会等名 ISS2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 合田 義弘
2. 発表標題 磁性材料の第一原理電子論
3. 学会等名 第28回日本MRS年次大会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasutomi Tatetsu, Yosuke Harashima, Takashi Miyake, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 First-principles study on typical elements in Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> X (X = B, C, N, O, F)
3. 学会等名 ICM2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasutomi Tatetsu, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 Ab-initio simulation of Ga-doped Nd-Fe-B magnets
3. 学会等名 IcAUMS 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasutomi Tatetsu, Yoshihiro Gohda
2. 発表標題 Electronic states and magnetic properties around the grain boundary in Nd-Fe-B sintered magnets studied by first-principles calculations
3. 学会等名 Intermag 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 濱崎恭考, 合田 義弘
2. 発表標題 強磁性Heusler合金/BaTiO <sub>3</sub> (001)界面構造における電気磁気結合の第一原理的評価
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中 友規, 合田 義弘
2. 発表標題 Bi原子吸着したIn原子鎖における新奇1次元Rashba効果の第一原理計算
3. 学会等名 第28回日本MRS年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田中友規, 合田 義弘
2. 発表標題 第一原理計算による一次元 Rashba 効果を示す新たな表面系の探索
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中村 将吾, 合田 義弘
2. 発表標題 第一原理計算によるMnX/TM(001)(X=B,C,N, TM=Ag,Cu,Pt,Ir)の表面電子状態の解明
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 田中 友規, 合田 義弘
2. 発表標題 In/Si(111)-4×1表面上のBi原子吸着に関する第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 中村 将吾, 相内 優太, 合田 義弘
2. 発表標題 第一原理計算による磁性界面の局所磁気異方性解析
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 藤田 一大, 合田 義弘
2. 発表標題 第一原理計算によるFe/BiFeO <sub>3</sub> (001)ヘテロ界面における電気磁気結合係数の評価
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 藤田 一大, 合田 義弘
2. 発表標題 第一原理計算によるFe/BiFeO <sub>3</sub> (001)ヘテロ界面における電気磁気結合係数の評価
3. 学会等名 2017年日本金属学会秋季(161回)講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 合田義弘
2. 発表標題 磁石材料組織界面における 局所磁気特性の電子論による解明
3. 学会等名 日本金属学会2018年春季(第162回)講演大会(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Fujita and Y. Gohda
2. 発表標題 Estimation of the magnetoelectric coefficient at Fe/BiFeO <sub>3</sub> (001) heterointerfaces studied by first-principles calculations
3. 学会等名 J. Kanamori Memorial International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 S. Nakamura and Y. Gohda
2. 発表標題 Prediction of ferromagnetism in MnB and MnC on nonmagnetic transition-metal surfaces studied by first-principles calculations
3. 学会等名 ISSS-8 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 S. Nakamura and Y. Gohda
2. 発表標題 Local magnetic anisotropy analysis on manganese boride ultrathin films on transition-metal surfaces studied by first-principles calculations
3. 学会等名 APS March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Fujita and Y. Gohda
2. 発表標題 Magnetoelectric Couplings at Fe/BiFeO <sub>3</sub> (001) Heterointerfaces Studied by First-principles Calculations
3. 学会等名 APS March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Tanaka and Y. Gohda
2. 発表標題 First-Principles Prediction of Giant Rashba Splitting in Bismuth-adsorbed Atomic Nanowires
3. 学会等名 APS March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 合田義弘	4. 発行年 2019年
2. 出版社 NTS	5. 総ページ数 9
3. 書名 次世代永久磁石の開発最前線「第一原理計算による永久磁石材料の局所磁性」	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>研究業績  <a href="http://www.cms.materia.titech.ac.jp/pub.html">http://www.cms.materia.titech.ac.jp/pub.html</a>            原子スケールの構造制御でエネルギー損失を軽減する  <a href="https://www.titech.ac.jp/news/2018/043198.html">https://www.titech.ac.jp/news/2018/043198.html</a>            A new energy-efficient mechanism  <a href="https://www.titech.ac.jp/english/news/2018/043279.html">https://www.titech.ac.jp/english/news/2018/043279.html</a>            Electronics of the future  <a href="https://www.eurekaalert.org/pub_releases/2018-12/tiot-eot122718.php">https://www.eurekaalert.org/pub_releases/2018-12/tiot-eot122718.php</a></p>
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------