

令和 2 年 6 月 1 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05566

研究課題名(和文)フルポテンシャル・コリンハ・コーン・ロストカー・グリーン関数法開発とその応用

研究課題名(英文)Development of full-potential Korringa-Kohn-Rostoker Green's function method and its applications

研究代表者

赤井 久純 (Akai, Hisazumi)

東京大学・物性研究所・特任研究員

研究者番号：70124873

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では高速性というKKR法(コリンハ・コーン・ロストカー法)の特徴を活かしたまま、より高精度な計算を可能にするフルポテンシャルKKR法の開発を行った。フルポテンシャルKKR法自体は従来から存在するが、空間の多面体分割という方法を使うために高速性が犠牲にされ、また力の計算に適用することが困難である。この問題を解決するために、空間の多面体分割にたよらずフルポテンシャルKKRを実現する複数の異なった方法を試みた。その結果、通常のKKR法から出発して、格子間隙位置やその周辺のフルポテンシャル部分を摂動として取り扱う方法が最も有効であることを見出した。この方法は力の計算も可能にするものである。

研究成果の学術的意義や社会的意義

固体中電子の第一原理計算の重要性は、基礎科学のみならず、材料開発の観点からも広く認識されるようになってきた。この方法の有効な利用のためには、信頼性の高い計算が、多数の物質群に対して実行されその結果が蓄積されることが必須である。KKR法は高速計算と不規則合金の計算等に対しても適用できるという他にない長所を合わせ持っており有用である。本研究では高速性というKKR法の特徴を活かしたまま、より高精度な計算を可能にするフルポテンシャルKKR法の開発を行った。従来のフルポテンシャルKKR法とは異なった新しいアプローチに基づくものであり、従来法では難しかった高速計算や原子にはたらく力の計算が可能となった。

研究成果の概要(英文)：The full potential KKR method that enables us to perform high-accuracy and high-speed calculations of electronic structures of solids was developed. There already exists a full potential KKR method but it relies on the Voronoi decomposition of space, and hence, sacrifices the important KKR feature of high-speed. Also the method is not suitable to calculate atomic forces. To resolve these problems, several different approaches to realize full-potential KKR without the Voronoi decomposition have been tried out in this study. As a result the method starting from muffin-tin KKR and treating the full-potential part in the interstitial as well as its nearby region as perturbing potential was found to be most efficient. The method also can be applied to direct calculation of the atomic forces.

研究分野：物性理論

キーワード：全電子第一原理計算 フルポテンシャルKKR法 密度汎関数法 グリーン関数法 コヒーレントポテンシャル近似 計算物質科学 計算機マテリアルデザイン

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

電子状態計算手法は近年の計算機性能向上とあいまって、多くの物質についてツールとして使えるほどに洗練されてきた。そこで用いられる電子状態計算は多くが擬ポテンシャル法によっており、そこでは擬ポテンシャルの「移植可能性」(transferability)が暗黙裏に仮定されている。移植可能性は多くの場合経験的に満たされるが、必然性をもった原理ではないから、本来予備計算と考えるべき計算を最終結論とみなす危険を常にはらんでいる。したがって擬ポテンシャル法を補完する高速・高精度の計算法の出現がのぞまれる。

APW法とならび高精度であるKKR法は線形化や有限基底にたよらず電子系グリーン関数を散乱法により直接計算するため、高精度・高速計算が可能である。しかしそのフルポテンシャル化(FPKKR法)は容易ではなく、当該研究の実施者を含む国内外の限られた数グループにより慎重な吟味のもとに使用されている状況である。困難の要因は次の通りである。KKR法やFPKKR法では互いに重ならないポテンシャル領域を各原子に割り当てる。KKR法ではポテンシャル領域として球(マフィンティン球)を考えてその中で球対称なポテンシャル(マフィンティン・ポテンシャル)を仮定するが、FPKKR法では結晶を埋め尽くす多面体を考え、多面体の内部を各原子のポテンシャル領域と定める。多面体は稜や頂点を持ち、そこでは領域表面に沿った解析性が失われたため数値的な困難を生み出し、高精度・高速度を阻害する。

FPKKR法はこのような問題点を含むが、KKR法やFPKKR法がグリーン関数法であり、コヒーレントポテンシャル近似(CPA)の適用、線形応答理論や多体摂動論への適用等、他の手法には無い展開があるため、FLAPW法などに対する相補的な手法として支持を受けており、上に述べたような欠点を含まない新FPKKR法の定式化が強く望まれている。

KKR法は上に述べたように高速・高精度計算を可能にするとともに通常の電子状態計算手法では取り扱うことが困難な不規則系・合金系を扱うことのできる手法であり、そのフルポテンシャル化は計算物質科学、材料科学におけるデータ蓄積に大きく寄与するものと期待される。

### 2. 研究の目的

コリンハ・コーン・ロストカー(KKR)グリーン関数法のフルポテンシャル(局所球対称等を仮定しないポテンシャル)化は空間を多面体に分割する方法によって実現されてきた。しかし、このことが高精度・高速度であるKKR法の特性を阻害している。また原子にはたらく力の直接計算の障害となってきた。この問題を解決するために、フルポテンシャル化への異なった方向からのアプローチを推進する。これによって取り扱いが難しかった原子充填が疎な構造を持つ系、f電子系のクーロン相互作用の取り扱い、磁気異方性評価、超大規模遷移金属合金系の高精度・高速度計算やKKR法では簡単ではない構造最適化計算を可能にする。

### 3. 研究の方法

FPKKR法ではポテンシャル一定の参照系からの散乱状態として電子状態を記述する。各ボロノイセルによる多重散乱からグリーン関数を求め、そこで得られた電子密度を再度ボロノイセルに分割し有効ポテンシャルを再構成する。これらはボロノイセル分割で可能になる一方、前述の通り非解析性を生み出す。これを根本的に解消するために、原子間隙位置のポテンシャルをその一部として含む系を参照系として用いることを考える。すなわち、ゆるやかに変化する参照系ポテンシャルと、互いに重ならない散乱ポテンシャルの和が結晶ポテンシャルとなるように選ぶ(下図)。



これによりボロノイセル分割は不要となる。その一方、次の問題が生じる。(i) 参照系のグリーン関数をどう構成するか：従来のFPKKR法では参照系グリーン関数が解析的に与えられるが、一定ポテンシャルでない参照系に対する構造グリーン関数の構成は数値計算にたよるしかなく最大の問題点である。(ii) 得られたグリーン関数からどのようにポテンシャルを構成するか：ボロノイセル分割を用いた手法が使えず、他の有効な方法が必要となる。

この問題を解くために当初、(A) 参照系グリーン関数を有限基底で展開する、(B) 摂動論的に参照系グリーン関数を計算する、の2つの方法を試みた。しかし、いずれも十分な高速性を得ることが難しくしたがって大規模系の計算には最適ではないことが明らかとなったため、第3の方法として(C) 通常のマフィンティンポテンシャルを用いたKKR法で計算されたグリーン関数を無摂動グリーン関数として上の図の参照系ポテンシャルに相当する部分を摂動として系のグリーン関数を構成する方法を選択することとした。

このような方法に適合する定式化を完成し、それを実装する計算機コードを開発することによって、フルポテンシャルKKR法の可能性を検討した。

#### 4. 研究成果

まず前節でのベタ (A) の方法の定式化を行った。ポイントは原子核位置を囲む適当な半径の原子球内のポテンシャルを表す擬ポテンシャルを構成し、それによって格子間隙位置の情報を含んだ参照系を作ることによって、参照系グリーン関数を生成することである。擬ポテンシャル法とは異なり、原子球内のポテンシャルにはエネルギー依存性やノルム保存等の要請は何もなく、擬ポテンシャルの構成は極めて効率よくなされる。生成されたポテンシャルを用いて参照系のグリーン関数(構造グリーン関数)を計算する必要があるが、その手法として、とりあえず平面波基底規定を用いた対角化に頼ることにした。これは滑らかな格子間隙位置のポテンシャルを反映したグリーン関数が得られれば良いので、高いエネルギー成分は重要でないという判断に基づく。この方針にしたがってフルポテンシャル KKR 法に適した擬ポテンシャルの定式化および構成法の開発を行った。

引き続き平面波基底を用いた対角化によって構造グリーン関数を構成するためのコード開発を行った。しかし、この方法によりマフィンティン KKR で用いられる空格子に対する構造グリーン関数に匹敵するだけの精度を出すことは実用上困難であることが明らかになった。空格子の場合にはその解析的な形は分かっており、その数値計算にはエバルト法を用いることによって事実上、対角化において無限個の基底をとったものと同等の精度が得られるが、対角化では無限個の基底をとるわけにはいかず、計算時間の観点から言って数百~千個の平面波基底に制限せざるを得ないからである。

次に (B) の方法である格子間隙位置のポテンシャルを摂動的に取り扱うことによって参照系グリーン関数を構成する方法を試みるために、その定式化および計算機コードの開発を実施した。また、(A) の方法と全エネルギーの計算においては精度的にあまり劣ることのないと期待できる実用的な方法として空格子を参照ポテンシャルに用いながらも電子分布の形状にはマフィンティンチャージを用いない(フル・チャージ)でエネルギーを計算する方法を考案した。空格子を参照系にした場合、格子間隙位置の電子分布はマフィンティン球内の情報のみを使って表されるところがポイントである。これによって計算されるバンドエネルギーは変分的に良い近似になっている。マフィンティン近似ではここで格子間隙位置での波動関数を計算せずに、そこでの電子分布を一様分布と仮定して静電エネルギーを計算する。このことが大きな誤差を生み出しているが、上記方法はここでの誤差発生を食い止める効果がある。この計算のための計算機コードの開発を行った。

(B) の方法は (A) の方法より高速なフルポテンシャル化を実現するが、そのためには摂動論的に計算した参照系グリーン関数に現れる非対角成分を落とす必要がある。参照系グリーン関数の逆行列をとる必要があり、非対角成分を考慮すると行列を有限サイズで打ち切らざるを得ないが、ここで (A) で遭遇したのと同様な問題を生じてしまう。この意味で、大規模系での多量の計算を行うという目的にそぐわない。

最終的に妥協的な方法ではあるが、最も現実的な方法として (C) を提案して、その定式化とコード化を推進した。アイデアはマフィンティンポテンシャル模型によって記述される系を参照系に使うことであるが、このような参照系を用いて格子間隙位置のフルポテンシャルによる散乱を扱おうとしても、原子に局在した散乱ポテンシャルが構成できないから多重散乱理論が使えない(それを行おうとすると従来のフルポテンシャル KKR と同じ問題に突き当たる)。しかし、フルポテンシャルの寄与はマフィンティン球内の寄与も含めて弱く、かつ滑らかであることが明らかであるので、有限個のボルン散乱で摂動的にグリーン関数を十分正確に計算することができる。このための定式化を行い、その実装のためのコード開発を行った。また、静電エネルギーを計算する方法として、計算された波動関数からつくられる電子密度分布を局在基底の重ね合わせで再度展開してから計算する手法を提案した。これによって、全体の計算が飛躍的に簡素化されて、高速化が可能になった。

フルポテンシャル KKR による計算例として、大規模な多層膜系の計算を以下に示す。SPring8 において日本原子力開発機構の三井隆也博士を中心とするチームによって鉄の多層膜に対して核モノクロメータを用いたエネルギー領域放射光メスバウア分光の実験がなされた。その結果、鉄表面層から各層ごとに分解されたメスバウアデータが得られた。実験から得られた超微細相互作用パラメータは層ごとに振動しており、表面から内部に進むに従って、振幅は減少しやがてバルクの値に落ち着いた。これは表面の存在によって生じたスピン密度のフリデール振動を実空間で直接検出した初めての例と考えられる。直接得られたのは超微細磁場や核四重極分裂、アイソマーシフトであるが、そこから電子状態を推論するためには精密な第一原理計算との比較がなされなければならない。このような解析のための電子状態計算に擬ポテンシャル法は無力である。原子核位置における詳細な電子状態計算が必要だからである。この解析にフルポテンシャル KKR を用いた。表面が関与しているために電子状態計算にはフルポテンシャルが必須であり、また核四重極分裂を導く超微細相互作用は電子系が核の位置につくる電場勾配に比例するが通常の KKR では信頼性のある電場勾配を得ることができない。

図 1 に表面付近の (110) 面における電子密度分布とスピン密度分布、およびそれらのバルク鉄からの変化分を示す。計算は真空層 10 層および鉄 30 層からなるあわせて 40 層のスラブ構造に対して行った。電子密度分布に関してはスクリーニングの効果は強く表面から中へ進むにしたがって表面の影響は急速に減衰するが、静電スクリーニングがきかないスピン密度に関しては

明らかな振動が見られる。

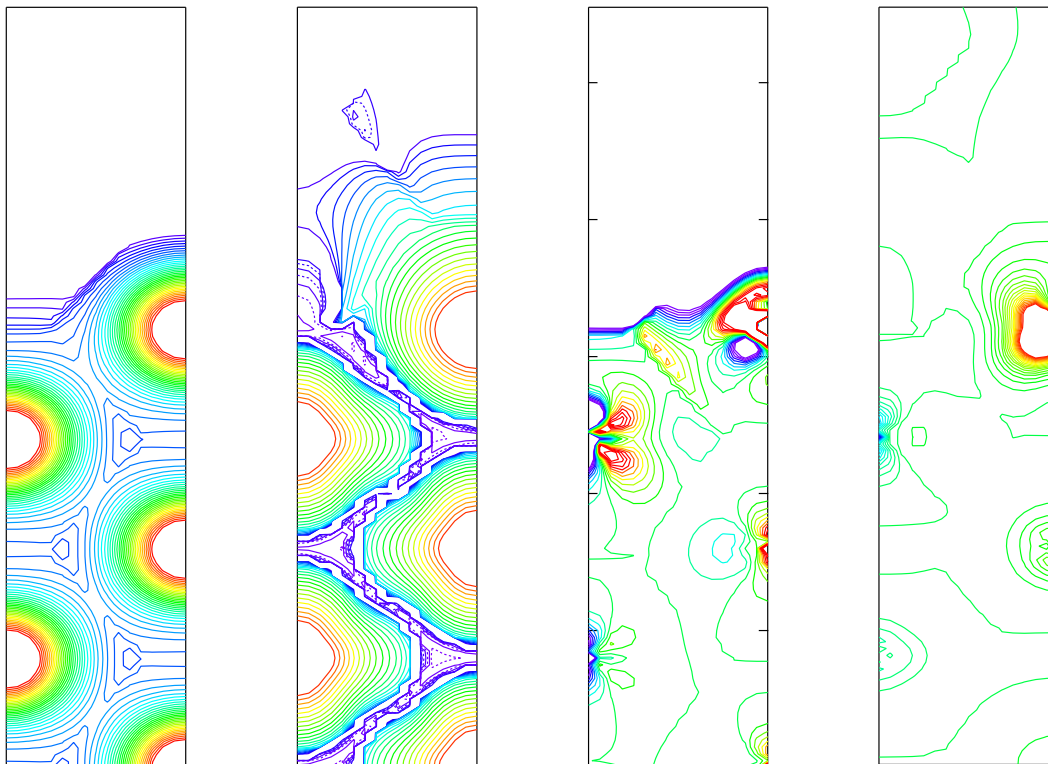


図 1. 左から順に(1)電子密度, (2)スピン密度, (3)電子密度のバルクからの差, (4)スピン密度のバルクからの差. 赤が密度の高いところ, 青が密度の低いところを示す. スピン密度に対して負の領域は点線で示されている. バルクからの差に関しては赤の領域は正, 青の領域は負となっておりその間連続的に変化している.

図 2 に計算された各層ごとの超微細磁場および核四重極シフトの計算結果を示す. これらのデータ以外に, アイソマーシフト等も計算されている. 超微細磁場は表面層をのぞいて実験との一致は良く, 表面の存在によるフリデール振動が実験的に検出されていることを示している. 核四重極シフトについては表面付近での実験との不一致が見られるが, 表面近傍の格子の乱れが影響していると考えられる. このような計算によって, 実験的には直接観測することのできない磁気モーメント分布などについての信頼できる情報が計算と実験とのデータ同化を通じて可能であることを示し, フルポテンシャル KKR 法による高精度計算が有効であることが結論された.

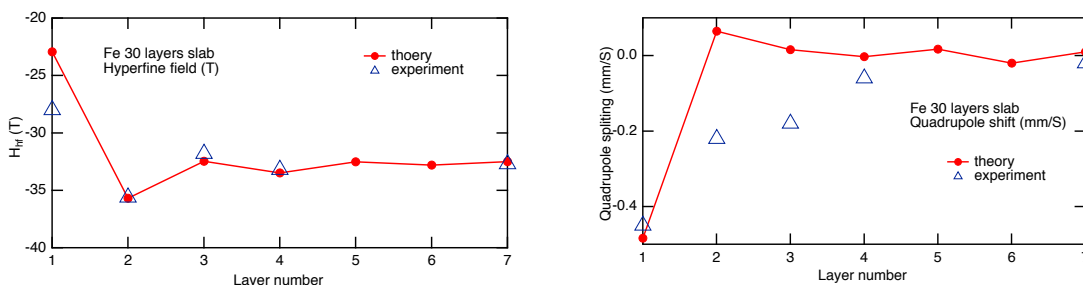


図 2. 表面から 7 層目までの超微細磁場 (左) および核四重極シフト (右)

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件（うち査読付論文 12件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Yamamoto Sh., Gorbunov D. I., Akai H., Yasumura H., Kotani Y., Nakamura T., Kato T., Mushnikov N. V., Andreev A. V., Nojiri H., Wosnitza J.	4. 巻 101
2. 論文標題 Element- and orbital-selective magnetic coherent rotation at the first-order phase transition of a hard uniaxial ferrimagnet	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 174430 1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） DOI: 10.1103/PhysRevB.101.174430	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 Matsumoto Munehisa, Akai Hisazumi	4. 巻 101
2. 論文標題 Calculating Curie temperatures for rare-earth permanent magnets: Ab initio inspection of localized magnetic moments in d-electron ferromagnetism	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 144402 1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） DOI:10.1103/PhysRevB.101.144402	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 Fukazawa Taro, Akai Hisazumi, Harashima Yosuke, Miyake Takashi	4. 巻 55
2. 論文標題 Curie Temperature of Sm <sub>2</sub> Fe <sub>17</sub> and Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B: A First-Principles Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Magnetics	6. 最初と最後の頁 2101305 1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） DOI:10.1109/TMAG.2019.2895669	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 Nishihara Hironori, Akai Hisazumi, Sato Kazunori, Kanomata Takeshi, Geshi Masaaki, Sakon Takuo, Wada Takahiro	4. 巻 88
2. 論文標題 Ab initio Study of High-field NMR Shift of <sup>59</sup> Co in the Ferromagnetic Heusler Alloy Co <sub>2</sub> TiGa	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 034712 1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） DOI: 10.7566/JPSJ.88.034712	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 Fukazawa Taro, Akai Hisazumi, Harashima Yosuke, Miyake Takashi	4. 巻 469
2. 論文標題 First-principles study of spin-wave dispersion in Sm(Fe <sub>1-x</sub> Cox) <sub>12</sub>	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Magnetism and Magnetic Materials	6. 最初と最後の頁 296 ~ 301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmmm.2018.08.071	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 Kou S., Akai H.	4. 巻 276
2. 論文標題 First-principles calculation of transition-metal Seebeck coefficients	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Solid State Communications	6. 最初と最後の頁 1 ~ 4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1016/j.ssc.2018.02.018	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 Akai H.	4. 巻 154
2. 論文標題 Maximum performance of permanent magnet materials	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 300-304
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1016/j.scriptamat.2018.02.006	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 Miyake Takashi, Akai Hisazumi	4. 巻 87
2. 論文標題 Quantum Theory of Rare-Earth Magnets	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 041009 ~ 041009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.7566/JPSJ.87.041009	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 Fukazawa Taro, Akai Hisazumi, Harashima Yosuke, Miyake Takashi	4. 巻 87
2. 論文標題 First-principles Study of Intersite Magnetic Couplings and Curie Temperature in RFe <sub>12-x</sub> Cr <sub>x</sub> (R = Y, Nd, Sm)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 044706 ~ 044706
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.7566/JPSJ.87.044706	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 Kubota Y., Hirata Y., Miyawaki J., Yamamoto S., Akai H., Hobara R., Yamamoto Sh., Yamamoto K., Someya T., Takubo K., Yokoyama Y., Araki M., Taguchi M., Harada Y., Wadati H., Tsunoda M., Kinjo R., Kagamihata A., Seike T., Takeuchi M., Tanaka T., Shin S., Matsuda I.	4. 巻 96
2. 論文標題 Determination of the element-specific complex permittivity using a soft x-ray phase modulator	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214417-1 ~ 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1103/PhysRevB.96.214417	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 Kubota Y., Taguchi M., Akai H., Yamamoto Sh., Someya T., Hirata Y., Takubo K., Araki M., Fujisawa M., Yamamoto K., Yokoyama Y., Yamamoto S., Tsunoda M., Wadati H., Shin S., Matsuda I.	4. 巻 96
2. 論文標題 L-edge resonant magneto-optical Kerr effect of a buried Fe nanofilm	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134432-1 ~ 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1103/PhysRevB.96.134432	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 Nishino Masamichi, Toga Yuta, Miyashita Seiji, Akai Hisazumi, Sakuma Akimasa, Hirose Satoshi	4. 巻 95
2. 論文標題 Atomistic-model study of temperature-dependent domain walls in the neodymium permanent magnet Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094429-1 ~ 7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1103/PhysRevB.95.094429	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20件（うち招待講演 6件 / うち国際学会 17件）

1. 発表者名 H. Akai
2. 発表標題 Remarks -in view of first-principles calculation
3. 学会等名 Toyota Japan-Europe meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Matsumoto and H. Akai
2. 発表標題 Ab initio inspection on the metallicity trends among rare-earth permanent magnet compounds
3. 学会等名 Joint European Magnetic Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Akai
2. 発表標題 Effects of electron-phonon scatterings
3. 学会等名 3rd International Conference on Materials and Environmental Scienc (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 N. Hirayama and H. Akai
2. 発表標題 Effects of Electron-phonon Scattering on Temperature Dependence of Half-metallicity of Co <sub>2</sub> MnSi
3. 学会等名 Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年



1. 発表者名	S. Miyashita, Y. Toga, M. Nishino, T. Hinokihara, I. E. Uysal, A. Sakuma, T. Miyake, H. Akai and S. Hirose
2. 発表標題	Atomistic Approach to the Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B magnet
3. 学会等名	Materials Research Meeting 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	Taro Fukazawa, Hisazumi Akai, Yosuke Harashima, and Takashi Miyake
2. 発表標題	Spin-wave dispersion in magnetic compounds: RFe <sub>11</sub> Ti (R=Y, Nd, Sm) and Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B
3. 学会等名	22nd ASIAN workshop on first-principles electronic structure calculations (国際学会)
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	H. Akai and S. Kou
2. 発表標題	Ab-initio calculation of Seebeck coefficient of transition-metal elements
3. 学会等名	APS March Meeting 2020 (開催中止) (国際学会)
4. 発表年	2020年

1. 発表者名	深澤太郎, 赤井久純, 原嶋庸, 三宅隆
2. 発表標題	第一原理電子状態計算に基づく磁石化合物におけるスピン波分散の計算手法
3. 学会等名	日本物理学会 第75回年次大会 (開催中止)
4. 発表年	2020年

1. 発表者名 T. Fukazawa, H. Akai, Y. Harashima, and T. Miyake
2. 発表標題 First-principles study of spin-wave dispersion in Sm(FeCo) <sub>12</sub>
3. 学会等名 Intermag 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Akai
2. 発表標題 Origin of magnetocrystalline anisotropy of Sm <sub>2</sub> Fe <sub>17</sub> N <sub>3</sub> permanent magnet materials
3. 学会等名 21st International Conference of Magnetism (ICM2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Kou and H. Akai
2. 発表標題 Calculated Seebeck coefficient of transition-metal elements
3. 学会等名 XXX IUPAP COnference on Computational Physics (CCP2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Akai
2. 発表標題 Effects of electron-phonon scattering on half-metallicity of Co <sub>2</sub> MnSi
3. 学会等名 10th International School and Conference on Physics and Applications of Spin Phenomena in Solid (PASPS10) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Akai
2. 発表標題 Possible highest performance of permanent magnet materials
3. 学会等名 9th Joint European Magnetic Symposia (JEMS) Conference 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Akai and S. Kou
2. 発表標題 First-principles calculation of transition-metal Seebeck coefficients
3. 学会等名 Turkish Physical Society-34th International Physics Congress (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松本宗久, 赤井久純, Martin Hoffmann
2. 発表標題 広い組成空間における希土類磁石の第一原理にもとづく探索の手法
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 S. Kou and H. Akai
2. 発表標題 First-principles calculation of temperature dependent electrical resistivity and Seebeck coefficient
3. 学会等名 Junjiro Kanamori Memorial International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1 . 発表者名 M. Ogura, A. Mashiyama, and H. Akai
2 . 発表標題 First-Principles Calculation of Electronic Structure and Magnetic Properties of Sm <sub>2</sub> Fe <sub>17</sub> Nx
3 . 学会等名 Junjiro Kanamori Memorial International Symposium (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 M. Hoffmann M. Matsumoto, and H. Akai
2 . 発表標題 Magnetic properties of La doped rare earth permanent magnets
3 . 学会等名 Magnetic properties of La doped rare earth permanent magnets (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 H. Akai
2 . 発表標題 Upper limits of magnetization, Curie temperature, and magnetic anisotropy of permanent magnet materials
3 . 学会等名 APS March Meeting (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 H. Akai
2 . 発表標題 Must for candidates of permanent magnet materials
3 . 学会等名 第41回 日本磁気学会学術講演会 (招待講演)
4 . 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

赤井チーム

[http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/akai\\_team.html](http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/akai_team.html)

Akai Team

[http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/akai\\_team\\_en.html](http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/akai_team_en.html)

AkaiKKR (Machikaneyama)

<http://kkri.issp.u-tokyo.ac.jp>

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
--	---------------------------	-----------------------	----