

令和 5 年 6 月 2 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2022

課題番号：18K04926

研究課題名（和文）データ駆動型マテリアルデザインによる新奇高エントロピー合金材料の探索

研究課題名（英文）Data-driven materials design for new functional high entropy alloys

研究代表者

福島 鉄也（Fukushima, Tetsuya）

東京大学・物性研究所・特任准教授

研究者番号：00506892

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：我々は、スーパーコンピュータ「富岳」と、独自の第一原理計算コードである「AkaiKKR」を用いることにより、約15万個の磁性多元合金から成る広大な材料空間を自動網羅的に探索することで、電子状態、磁化、強磁性転移温度、電気抵抗率を含むユニークで利用価値の高い大規模物性データベースの構築を試みた。また、データベースに頻出パターンマイニング等のデータ科学手法を適用することにより、磁気特性を決定する支配因子や電気抵抗率の法則性の発見にも成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、「富岳」の計算能力と国産ソフトウェアがあってこそなし得たものであり、マテリアルDXにおいて基盤となる大規模物性データベースを構築したモデルケースである。本研究で開発したソフトウェアや自動網羅計算ツールは、4元高エントロピー合金だけでなく、永久磁石材料やスピントロニクス材料等へ適用することができる。そのため、データ駆動により新たな知識や法則性を見つけ出すことが可能になると同時に、多様な材料の開発が大幅に短縮されることが期待される。

研究成果の概要（英文）：We have constructed a unique and useful material properties database for quaternary high entropy alloys by automatic exhaustive calculations on the basis of the supercomputer "Fugaku" and "AkaiKKR" code. This database contains electronic structure, magnetization, ferromagnetic transition temperature, and electrical resistivity in 15,000 systems. By applying frequent pattern mining to our database, we have also succeeded in discovering the dominant factors determining magnetic properties and the new law of the electrical resistivity for the high entropy alloys.

研究分野：物性理論、計算物質科学

キーワード：KKRグリーン関数法 コヒーレントポテンシャル近似 データ駆動型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、研究者個人に帰属します。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

主要金属原子が1種もしくは2種である一般的な合金とは異なり、高エントロピー合金は多種類(5種類以上)の金属元素をほぼ等原子量含む新種の材料である[Adv. Eng. Mater., 6, 299 (2004)]。多種類金属原子が結晶格子に不規則分布するため、ギブス自由エネルギーに含まれる混合エントロピー項が増大することにより安定化する。その高い不規則性によって生じる高強度、耐食性、耐熱性等といった従来の合金材料より優れた特性により、高エントロピー合金は新たな機械・構造材料として注目を集めてきた。

近年、このような機械・構造特性に加え構成原子種・数を制御することにより、磁気・伝導・格子特性を付加する研究が進められている。例えば、 $\text{CoFeNi}(\text{AlSi})_x$ はAlSiの濃度を最適化させることで、高磁化・高抵抗・高強度を実現でき、高性能の軟磁石材料として期待されている[Sci. Rep., 3, 1455 (2013)]。また、 $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ では高エントロピー合金特有の原子配置不規則性による散乱効果により、低熱伝導率・高ゼーベック係数が観測されている[J. Appl. Phys., 118, 184905 (2015)]。

高エントロピー合金は次世代エレクトロニクスとして重要なスピントロニクス材料や高効率の熱電変換材料としても有望視されており、理論・実験の両方の立場から研究が勧められているが基礎研究の段階であり実用化には至っていない。これは高エントロピー合金では5元系、6元系のように多種の金属原子を含むため、ほぼ無限とも言える原子の組み合わせが可能であり、従来の試行錯誤的なトライアル・アンド・エラーによる材料開発手法では、このような広範囲の物質空間での系統的な材料探索はほぼ不可能だからである。

この状況を打破するには、大量の物性データの迅速な解析と効果的な利用により有用な情報や知識を取り出す高精度の第一原理電子状態計算と仮想スクリーニング手法に基づいたデータ駆動型マテリアルデザイン(マテリアルズ・インフォマティクス)による、大幅にコスト・時間短縮が可能な物質探索、デザイン主導による物質開発が必要不可欠である。

2. 研究の目的

新概念データ駆動型マテリアルデザイン手法を開発することにより、新奇な磁気・熱電特性を有する高エントロピー合金の探索を行う。第一原理計算により構築した大量の多次元データベースを基に、ベイズ推論や独自の特徴量抽出手法により、高エントロピー合金材料の一般化有効モデルの構築と巨視的物性を支配する重要因子を推定する。得られた有効モデルに立脚し、スピントロニクスや熱電変換材料として有望な次世代高エントロピー合金材料を定量的に予測する。

3. 研究の方法

我々は国産の第一原理計算コード「AkaiKKR」の開発を行っている。「AkaiKKR」は全電子計算手法の一つであるKorringa-Kohn-Rosotker (KKR) グリーン関数法に基づいた電子状態計算ソフトウェアである。最大の特徴はコヒーレントポテンシャル近似(CPA)と組み合わせることにより、スーパーセル法を用いることなく不規則系の電子状態を高精度かつ高速度に計算可能な点である。CPAはシングルサイト近似の一種であり完全ランダムな配置を仮定するが、非局所CPAなど短距離秩序を記述する手法も存在する。

また、Kohn-Sham方程式に対応する1電子グリーン関数が直接求まるため、線型応答理論との整合性がよく多様な物理量を計算できる。Force theoremに立脚したLiechtenstein公式を用いると磁氣的相互作用及び強磁性転移温度、Kubo-Greenwoodの公式と組み合わせることにより電気抵抗率の定量的評価が可能である。さらに、全電子計算であるため擬ポテンシャルを必要とせず、transferabilityの問題を気にせず自動網羅計算を実行できる。

4. 研究成果

(1) ターゲットとなる材料空間

金属元素を中心に38元素の中から4元素を選びFCC、BCC構造を有する4元高エントロピー合金を構築する(合計約15万個)。図ではMnFePdWが例として示されている。この材料空間に対して全自動網羅計算を実行し、磁化、強磁性転移温度、電気抵抗率のマテリアルデータを蓄積する。計算の収束性制御などは全自動であり、「富岳」と「AkaiKKR」を利用することで1週間以内に15万個から成る材料空間を探索し尽くすことが可能である。図1は全自動網羅計算によって

得られたデータ (BCC 構造のみ) を、各物理量を軸に取った 3 次元散布図で示したものであり、各点の一つの系に対応している。磁気特性が良い材料 (FeCoXY, FeCoNiX, MnFeXY, MnFeCoX, MnFeNiX: X, Y は非磁性元素) は色分けされており、特にオレンジ色で囲まれている領域は、高磁化・高強磁性転移温度・高電気抵抗率を有する新規軟磁性材料の候補物質を示している。

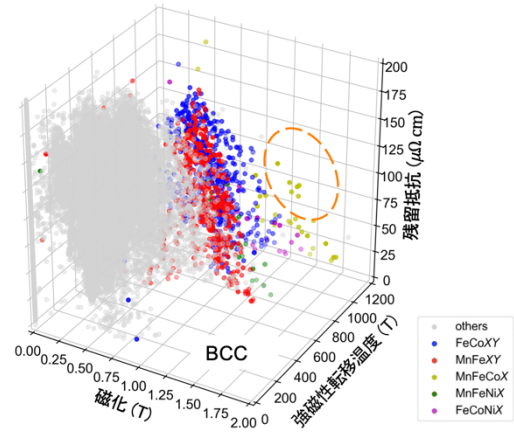


図 1: ハイスループット計算の結果

(2) 頻出パターンマイニングを用いた 4 元磁性高エントロピー合金の特徴量解析

データ科学手法を構築したマテリアルデータベースに適用することで、物性支配因子に関する知識を獲得することができる。今回は、磁化と強磁性転移温度の磁気特性に着目し、これらの特徴づける量を抽出するため、頻出パターンマイニングを用いて区画特徴特定を行った。頻出パターンマイニングは大量のデータから頻出する特徴、規則性、パターンを抽出する機械学習の手法である。マテリアル研究に、このような頻出パターンマイニングが適用された例はほとんどない、その原因はマテリアルデータの少なさにあったと考えられる。

図 2(a) は、BCC 構造を有する四元ハイエントロピー合金の、磁化と強磁性転移温度の 2 次元マップである。高磁化・高強磁性転移温度を有する系は色分けされている。まず、このマップをデジタル化して区画分割を行う。図 2(b) では、10×10 の区画に分割されており、カラーバーは区画内に含まれる系の数を示している。次に各区画に対してトランザクションデータベースを各系のレコードから構築する。レコードを構成するアイテムを次のように定義する。

- ① 四元高エントロピー合金の構成元素: element1, element2, element3, element4.
- ② デジタル化した区画の ID: C10 等 (図 2(b) を参照)。
- ③ 「AkaiKKR」によって得られた構成元素のマフィンティン球内の局所磁気モーメントを $|m_1| > |m_2| > |m_3| > |m_4|$ となるように並び替える。 m_1 を正に取り直し、 m_{th} 以上を磁気モーメントがあると定義して m_1 からの相対磁化で強磁性、反強磁性の磁化並びを定義する。例えば、 $|m_1| > |m_2| > |m_3| > m_{th} > |m_4|$ かつ $m_2 < 0, m_3 > 0$ の場合、この系の磁気モーメントに対するアイテムを階層的に文字列 FA, FAF, FAFN と定義する。 $|m_1| > |m_2| > m_{th} > |m_3| > |m_4|$ かつ $m_2 < 0$ の場合は、FA, FAN のみとする。

例えば、CrRuHgBi に対応するトランザクションは Cr, Ru, Hg, Bi, D4, FA, FAN となる。頻出パターンマイニングには、宇野らによって開発された LCM (Linear time Closed itemset Miner) を用いた。

図 2(c), (d) はそれぞれ頻出パターンマイニングによって抽出された、各区画の元素特徴量とスピン配列特徴量を示している。高強磁性転移温度を得るためには、Fe と Co 原子を同時に含む必要があるのが、本解析によりわかる。

高磁化には、Fe と Mn 原子のスピンの揃う必要がある。合金中の Fe と Mn のスピン配列は、格子定数、他元素種、成長条件に大きく依存することが知られており、これらを制御するのが高磁化実現のキーポイントになる。また、我々の頻出パターンマイニングは Rh 原子が磁化を増強させる効果があることを示唆している。セル ID: B1, D1, E1 からわかるように、early transition metal のスピン配列は late transition metal と反平行になる。これは、電子状態の観点から、次のように理解できる。例えば、Cr と Fe 原子を含む高エントロピー合金を考えると、Fe 原子に比べて小さい原子番号を有する Cr 原子は、相対的に斥力的なポテ

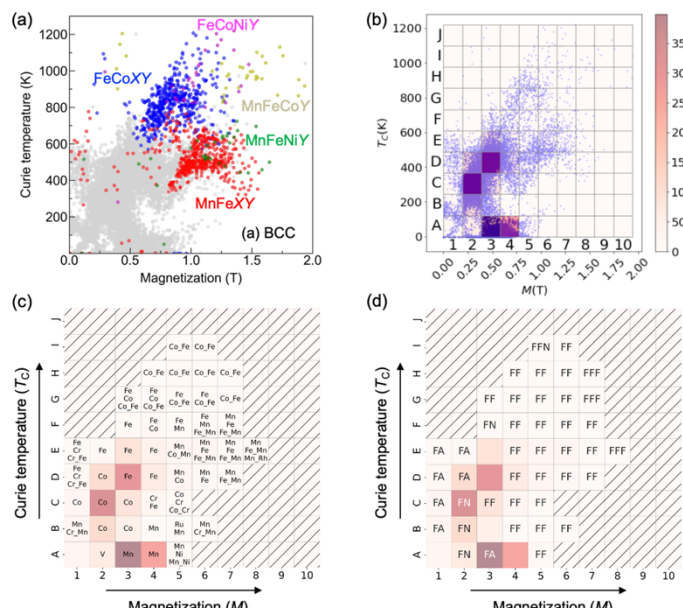


図 2: 頻出パターンマイニング

ンシャルを感じ、その 3d 仮想束縛状態はフェルミ準位直上に押し上げられる。その結果、Cr 原子と Fe 原子の 3d 状態と逆向きにスピン分裂することになる。

(3) 電気抵抗率の回帰と法則性の発見

今回、我々は元素の基礎物理量（原子質量や電子数等）と周期表の特微量（周期と族）に着目し、4つの構成元素に対する最大値、最小値、平均、標準偏差を説明変数（合計 40 個）として、電気抵抗率の回帰を実施した。その結果、説明変数の 3 次までを考慮した線形回帰では決定係数 (R^2) が 0.840、ランダムフォレスト回帰では 0.964、k 近傍回帰では 0.941 と説明力の高い回帰モデルを構築できた。次に permutation importance を使用することで、得られた回帰モデルのホワイトボックス化を行った。permutation importance は、ある説明変数をランダムに置換した際の予測能力の変化から、説明変数の重要度を判定する手法である。この手法により、4 元高エントロピー合金の電気抵抗率においては、周期表の族の平均と標準偏差が重要な説明変数であることが判明した。さらに、我々の解析から周期表で近い族の組み合わせによる系では電気抵抗率が小さく、離れた族で構成される系では電気抵抗率が大きくなるということがわかった。今回得られた電気抵抗率の法則性はランダムな合金であれば満たされる可能性は高いため、磁性材料や抵抗材料等の探索に非常に有用であると考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計19件（うち査読付論文 19件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Nam Ho Ngoc, Suzuki Katsuhiko, Nguyen Tien Quang, Masago Akira, Shinya Hikari, Fukushima Tetsuya, Sato Kazunori	4. 巻 105
2. 論文標題 Low-temperature acanthite-like phase of Cu ₂ S: electronic and transport properties	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 075205/1-11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.105.075205	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 Anh Le Duc, Hayakawa Taiki, Nakagawa Yuji, Shinya Hikari, Fukushima Tetsuya, Kobayashi Masaki, Katayama-Yoshida Hiroshi, Iwasa Yoshihiro, Tanaka Masaaki	4. 巻 12
2. 論文標題 Ferromagnetism and giant magnetoresistance in zinc-blende FeAs monolayers embedded in semiconductor structures	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 4201/1-10
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41467-021-24190-w	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 Masago Akira, Shinya Hikari, Fukushima Tetsuya, Sato Kazunori, Katayama-Yoshida Hiroshi	4. 巻 14
2. 論文標題 A novel method for generating p-type wide- and ultrawide-bandgap III-nitride by doping with magnetic elements	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 091007 ~ 091007
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1882-0786/ac197f	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 Fukushima T., Akai H., Chikyow T., Kino H.	4. 巻 6
2. 論文標題 Automatic exhaustive calculations of large material space by Korringa-Kohn-Rostoker coherent potential approximation method applied to equiatomic quaternary high entropy alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 023801/1-19
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevMaterials.6.023802	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 Umetsu Rie Y., Saito Kotaro, Ono Kanta, Sato Kazunori, Fukushima Tetsuya, Kuroda Fumiaki, Oguchi Tamio	4. 巻 60
2. 論文標題 Magnetic Properties and Electronic State of Mn-based Heusler Alloys	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Materia Japan	6. 最初と最後の頁 205 ~ 211
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/materia.60.205	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 Masago Akira, Shinya Hikari, Fukushima Tetsuya, Sato Kazunori, Katayama-Yoshida Hiroshi	4. 巻 10
2. 論文標題 High Curie temperature in Eu-doped GaN caused by volume-compensated Ga-vacancy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 025216 ~ 025216
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5116054	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 Nunokawa Takumi, Fujiwara Yasufumi, Miyata Yusuke, Fujimura Norifumi, Sakurai Takahiro, Ohta Hitoshi, Masago Akira, Shinya Hikari, Fukushima Tetsuya, Sato Kazunori, Katayama-Yoshida Hiroshi	4. 巻 127
2. 論文標題 Valence states and the magnetism of Eu ions in Eu-doped GaN	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 083901 ~ 083901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5135743	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 Yamada Michihiro, Kuroda Fumiaki, Tsukahara Makoto, Yamada Shinya, Fukushima Tetsuya, Sawano Kentarou, Oguchi Tamio, Hamaya Kohei	4. 巻 12
2. 論文標題 Spin injection through energy-band symmetry matching with high spin polarization in atomically controlled ferromagnet/ferromagnet/semiconductor structures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 NPG Asia Materials	6. 最初と最後の頁 47-47
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41427-020-0228-5	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 Kuroda F., Fukushima T., Oguchi T.	4. 巻 127
2. 論文標題 First-principles study of magnetism and phase stabilities of V2 based antiferromagnetic Heusler alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 193904 ~ 193904
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5143826	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 Shinya H., Kou S., Fukushima T., Masago A., Sato K., Katayama-Yoshida H., Akai H.	4. 巻 117
2. 論文標題 First-principles calculations of finite temperature electronic structures and transport properties of Heusler alloy Co2MnSi	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 042402 ~ 042402
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0017862	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 Masago Akira, Shinya Hikari, Fukushima Tetsuya, Sato Kazunori, Katayama-Yoshida Hiroshi	4. 巻 32
2. 論文標題 Hole-mediated ferromagnetism in a high-magnetic moment material, Gd-doped GaN	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 485803 ~ 485803
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/abac8e	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 Tran Hung Ba, Fukushima Tetsuya, Makino Yukihiro, Oguchi Tamio	4. 巻 323
2. 論文標題 Magnetocaloric effect in MnCoGe alloys studied by first-principles calculations and Monte-Carlo simulation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Solid State Communications	6. 最初と最後の頁 114077 ~ 114077
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ssc.2020.114077	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 Fukushima Tetsuya, Shinya Hikari, Masago Akira, Sato Kazunori, Katayama-Yoshida Hiroshi	4. 巻 12
2. 論文標題 Theoretical prediction of maximum Curie temperatures of Fe-based dilute magnetic semiconductors by first-principles calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 063006 ~ 063006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab2360	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 Yamada S., Kobayashi S., Masago A., Kumara L. S. R., Tajiri H., Fukushima T., Abo S., Sakuraba Y., Hono K., Oguchi T., Hamaya K.	4. 巻 100
2. 論文標題 Experimental verification of the origin of positive linear magnetoresistance in CoFe(V _{1-x} Mn _x)Si Heusler alloys	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195137/1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.195137	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 Nunokawa Takumi, Fujiwara Yasufumi, Miyata Yusuke, Fujimura Norifumi, Sakurai Takahiro, Ohta Hitoshi, Masago Akira, Shinya Hikari, Fukushima Tetsuya, Sato Kazunori, Katayama-Yoshida Hiroshi	4. 巻 127
2. 論文標題 Valence states and the magnetism of Eu ions in Eu-doped GaN	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 083901 ~ 083901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5135743	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 Arima K., Kuroda F., Yamada S., Fukushima T., Oguchi T., Hamaya K.	4. 巻 97
2. 論文標題 Anomalous Hall conductivity and electronic structures of Si-substituted Mn ₂ CoAl epitaxial films	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 054427/1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.97.054427	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 Shinya Hikari、Fukushima Tetsuya、Masago Akira、Sato Kazunori、Katayama-Yoshida Hiroshi	4. 巻 124
2. 論文標題 First-principles prediction of the control of magnetic properties in Fe-doped GaSb and InSb	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 103902 ~ 103902
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5046912	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 Masago Akira、Shinya Hikari、Fukushima Tetsuya、Sato Kazunori、Katayama-Yoshida Hiroshi	4. 巻 98
2. 論文標題 Magnetism of Eu-doped GaN modulations by spinodal nanodecomposition	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214426/1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.214426	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 Yamada S.、Kobayashi S.、Kuroda F.、Kudo K.、Abo S.、Fukushima T.、Oguchi T.、Hamaya K.	4. 巻 2
2. 論文標題 Magnetic and transport properties of equiatomic quaternary Heusler CoFeVSi epitaxial films	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 124403/1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.2.124403	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15件 (うち招待講演 9件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 福島鉄也
2. 発表標題 計算物質科学協議会におけるマテリアルDXへの取り組み
3. 学会等名 第31回日本MRS年次大会 (パンフィコ横浜ノース) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 福島鉄也
2. 発表標題 スーパーコンピュータ「富岳」を用いた磁性材料の探索
3. 学会等名 分子研研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 福島鉄也
2. 発表標題 スーパーコンピュータ「富岳」による磁性材料データの自動創出
3. 学会等名 スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 福島鉄也
2. 発表標題 KKR法を用いた有限温度におけるホイスラー合金の電子状態と伝導特性の計算
3. 学会等名 計算物質科学の新展開2020（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 福島鉄也
2. 発表標題 高速・高精度の第一原理計算を用いたハイスループットスクリーニング手法の開発~不規則系物質への応用~
3. 学会等名 物性科学におけるデータ科学の今と未来（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 福島鉄也
2. 発表標題 KKRグリーン関数法を用いた磁性合金材料のデザイン
3. 学会等名 コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会 (CAMMフォーラム) (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Fukushima, H. Katayama-Yoshida, K. Sato, M. Ogura, R. Zeller, P. H. Dederichs, H. Kino, and T. Chikyo
2. 発表標題 Design of spintronics and magnetic materials by Korringa-Kohn-Rostoker Green's function method
3. 学会等名 the 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福島鉄也
2. 発表標題 KKRグリーン関数法を用いた磁性材料のデザイン
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2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福島鉄也、新屋ひかり、真砂啓、佐藤和則、吉田博
2. 発表標題 Feベース強磁性半導体の物質設計と極めて高いキュリー温度の予測
3. 学会等名 第3回 CSRN-Tokyo Workshop 2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福島鉄也、新屋ひかり、高成柱、真砂啓、佐藤和則、吉田博、木野日織、知京豊裕
2. 発表標題 KKRグリーン関数法を用いたスピントロニクス材料のデザイン
3. 学会等名 Spin Research Network of Japan (SPIN-RNJ) 2019年度年次報告会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tetsuya Fukushima
2. 発表標題 All-electron calculations of crystalline and amorphous phases in magnetic phase change materials by KKR Green's function method
3. 学会等名 APS March Meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Tetsuya Fukushima
2. 発表標題 First-principles design of ferromagnetic phase change materials
3. 学会等名 10th International School and Conference on Physics and Applications of Spin Phenomena in Solid (PASPS-10) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tetsuya Fukushima
2. 発表標題 Theoretical prediction of maximum Curie temperatures of Fe-based dilute magnetic semiconductors by first-principles calculations
3. 学会等名 American Physical Society 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福島鉄也
2. 発表標題 Materials Design of Magnetic Materials
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2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 福島鉄也
2. 発表標題 First-principles investigations of high entropy alloys by all-electron order-N screened KKR Green 's function method
3. 学会等名 NIMS第35回 MaDIS研究交流会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 吉田 博	4. 発行年 2022年
2. 出版社 内田老鶴圃	5. 総ページ数 308
3. 書名 スピントロニクスのための計算機ナノマテリアルデザイン	

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 ユニット、温度調整モジュール、および、温度調整装置	発明者 牧野至洋、佐藤和則、小口多美夫、トラン・パ・フン、福	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、2021-208774	出願年 2021年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

-

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			
ドイツ	Forschungszentrum Juelich			