様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　６ 年　６ 月　５ 日現在

機関番号：１３３０１
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2021～2023
課題番号：２１Ｋ０４８６４

研究課題名（和文）磁界・電界を考慮したスピン密度汎関数法の開発および磁気素子材料への応用

研究課題名（英文）Development of spin density functional method under magnetic/electric field and application to the materials for magnetic device

研究代表者
小田　竜樹（Oda, Tatsuki）

金沢大学・数物科学系・教授

研究者番号：３０２７２９４１

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,200,000円

研究成果の概要（和文）：次世代電子デバイスで重要となるスピントロニクス素子や磁気素子へ応用する磁性材料には、界面や磁壁で原子サイズの電界・磁界が現れるが、その磁性の理解や予測には、電子運動の相対論的取扱いや高精度な電子相関の導入が必要とされる。本研究では、相対論的運動を考慮した理論に基づく非経験的計算手法に、電界印加だけでなく磁界印加できる手法を導入して、局所的な電気分極・磁気分極・原子変位分極の間に内在する相互関係を解析できる手法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義
次世代電子デバイスで最重要となる要件は、超省電力である。これを達成するために、超微細化の達成とスピントロニクス応用の活用である。前者は原子サイズの機構を開発することであり、後者は電子の相対論的機構の中でも、電気入力に対する磁気出力、磁気入力に対する電気出力といった関係（電気磁気効果）を使うことで超低エネルギーにより動作する機構を開発しデバイス(スピントロニクスデバイス)化することが想定される。そのような機構に対する具体的な起源と機構を非経験的に調べる計算手法は、デバイス開発を支援して加速する意義が極めて高い。また電気磁気効果は多くの要素を含み未解明な部分が多く学術的意義も高い。

研究成果の概要（英文）：In magnetic materials applied to spintronics elements and magnetic elements, which are important in next-generation electronic devices, atomic-sized electric and magnetic fields appear at interfaces and domain walls, but understanding and predicting their magnetism requires the relativistic theory of electron motion. In addition, the introduction of high-precision electron correlation is also required. In this study, we introduced a method that can apply not only an electric field but also a magnetic field to an ab initio calculation method based on a theory that takes relativistic motion into account, and thereby we have developed a method that can analyze inherent interrelationships.

研究分野：磁性・計算物質科学

キーワード：磁気異方性エネルギー　スピン軌道相互作用　　スピントロニクス　　ノンコリニアスピン密度汎関数理論　準粒子自己無撞着GW法（QSGW法）　ワイドギャップ半導体　マルチフェロイクス

※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
電気分極、磁気分極、原子変位分極など複数の秩序パラメータが同時に発現するマルチフェロイック現象や、磁気秩序相と電気分極相とが接合する界面の現象等、単一の相互作用では説明できない現象が実験的に数多く見つかっている。そこでは磁気と電気を結合する電子のスピン軌道相互作用の正当な評価が必要とされ重点的勢力的に研究されてきた。その結果多くの成果を生んできたが、それだけを正しく評価しても片手落ちである。その元である電子の相対論的効果に対する総合的評価から、物性現象を記述することが必要である。しかしながら、現実物質系に対して原子変位を想定したうえで相対論的効果を十分に取り込む計算方法はほとんど開発されていない。そのため現況では、例えばビスマスフェライトに代表される、強誘電性と磁性が共存するマルチフェロイック状態の原子スケールでの記述が不十分である。また磁性金属／酸化物誘電体界面での内部電界中や、外部磁界中の磁性体では、軌道磁気モーメントが十分に考慮されていない。スピントロニクスやマルチフェロイックスにおいては、電子の自由度(電荷・スピン・軌道)に起因する非対角的な応答(磁界-電気分極、電界-磁化、磁界-原子変位など)を示す交差相関が重要であり、相対論効果の一つであるスピン軌道相互作用(SOI)を通してラシュバ効果やジャロシンスキー - 守谷相互作用が導出される。一方、クーロン相互作用からは、量子効果として交換相互作用が導出される。これらの相互作用は、密度汎関数理論に基づいた第一原理的電子状態計算の中に、自己無撞着に取り込まれている。クーロンの相対論効果として現れる磁気双極子(スピン-スピン)相互作用(MDI)についてスピン密度を考慮して四重極成分を取り込むことに成功している。SOI や MDI は相対論的エネルギー中(Breit 相互作用エネルギー中)で c (光速)の 2 乗分の１のオーダーをもつが、同じくクーロンの相対論効果で、2 電子が互いに避け合いながら 180 度位相差で軌道運動することの起源とされる軌道-軌道相互作用(OOI)も同じオーダーである。高精度の定量的評価を必要とするスピントロニクスや磁気工学等への応用において、OOI は電子状態計算法と組み合わせ自己無撞着に決定される必要がある。3 つの相対論的相互作用である SOI、MDI、OOI が相互に働き複雑現象を発現すると想定される。一方軌道運動自体が重要であることは磁性体中の軌道磁気モーメントの存在を通して広く知られている。

２．研究の目的
本研究課題は、磁性体の応用上必要不可欠な相対論的取り扱いの中で、電子の軌道運動はどのような役割をどの程度果たしているかというものである。ナノサイズ系の磁気物質・材料に対して交差相関特性を統一的に評価可能な計算手法「スピン密度汎関数法(SDFT)」の開発を発展させるとともに、薄膜界面系(磁性金属層／誘電絶縁体層)や強磁性形状記憶合金系等へ応用し、SOI、MDI、OOI の協奏や競合を解明することである。研究代表者がこれまでに開発したノンコリニア磁気構造に対する第一原理分子動力学法計算手法に、SOI を導入した方法や MDI を導入した方法を出発点として用い、OOI を導入する。

またデバイス応用に第一原理電子状態計算の具体的結果を生かすことを考えた場合、密度汎関数法の物理精度は不十分である問題を将来的に解決するため、乱雑位相近似の水準で電子相関を取入れることができる準粒子自己無撞着 GW(QS-GW)法についても、計算コードの開発を実施することにしていた。固体結晶だけでなく薄膜への応用も可能となる計算機能を開発しており、薄膜系での電子状態への応用計算も進めた。

３．研究の方法
３－１．密度汎関数法への軌道軌道相互作用導入の試み
SDFT に軌道軌道相互作用（OOI)を導入するためには、運動量密度 $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$ を計算する必要がある。運動量演算子の動径微分を無視して、角度方向の微分のみを扱う近似を導入し、運動量密度 $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$ の計算を行った。具体的には、Fe_2 クラスタと Fe 正方格子（1ML）について検証した。Fe_2 クラスタは原子間距離を 3.70au として、一辺 10au の立方超格子内に置いたモデルを用いた。Fe 正方格子では、xy 面内格子定数を 5.42au として、z 方向には 30au の超格子構造とした。計算条件は密度汎関数理論に基づくノンコリニア磁性の第一原理計算を行った．平面波のカットオフエネルギーは，波動関数については 30Ryd，電子密度については 350Ryd を用いた．k 点サンプリングは，Fe_2 クラスタでは 1×1×1，Fe 正方格子では 12×12×1　とした。擬ポテンシャルを採用した計算コードで計算コード開発を行い、スピン軌道相互作用を考慮したウルトラソフト型擬ポテンシャル、交換相関ポテンシャルには Fe2 クラスタには LDA-CA，Fe 正方格子では GGA-PW91 を用いた。

３－２．形状記憶合 Ni_2MnGa の電子状態計算と一般化感受率計算
電子局在の効果が重要と考えられている Ni_2MnGa に対して QSGW 法を用いて電子構造計算を実施した。高温相である立方晶構造と非変調構造をもつ正方晶構造について QSGW 法と DFT＋U 法を用いて電子状態を調べた。系の不安定性の議論を実施するために一般化感受率の計算を実施した。QSGW で得られた電子構造は、DFT 法や DFT＋U 法で得られるものとはフェルミ準近傍の構造が異なっており一般化感受率の計算に定性的な違いを与える。

３－３．準粒子自己無撞着 GW 法の高速化とホイスラー合金正方晶系 Ni_2MnGa への応用

準粒子自己無撞着 GW(QSGW)法では、RPA 近似での誘電関数の数値計算が必要となるが、必要な計算量が SDFT の 10 倍から 1000 倍以上であるため、原子数が多い系について電子状態を計算することが困難であった。誘電関数部分の計算をさらに並列処理するプログラム開発を実施し、原子数 16 個の系を計算できるようにした。誘電関数は、波数 q と角振動数 ω の関数であるが、内部和をとる波数 k と ωについて並列計算することにより多く CPU を取り入れることができるようになった。開発された計算コードを用いて磁気形状記憶合金の性質を示す正方晶系において実証計算を行った。

表1: Fe_2クラスタ，Fe正方格子のスピン磁気モーメントm_S と角運動量演算子から計算される軌道磁気モーメントm_ℓ，および$\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$から計算される軌道磁気モーメント$m_{\mathrm{orb}}$

[001] direction	m_s (μ_B)		m_ℓ (μ_B)		m_{orb} (μ_B)	
Fe_2 cluster	Fe-1	Fe-2	Fe-1	Fe-2	Fe-1	Fe-2
	2.678	2.678	0.236	0.236	0.173	0.173
Fe square lattice	3.028		0.043		0.051	

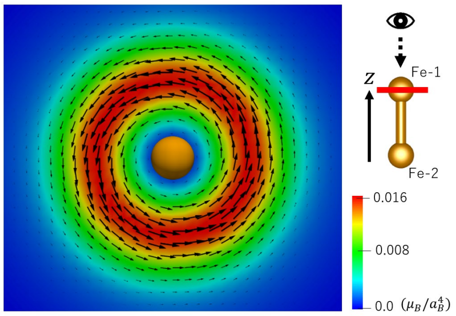

図 1: Fe_2 クラスタの Fe-1 中心を通る $\boldsymbol{xy}$ 平面内の $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$の分布と方向

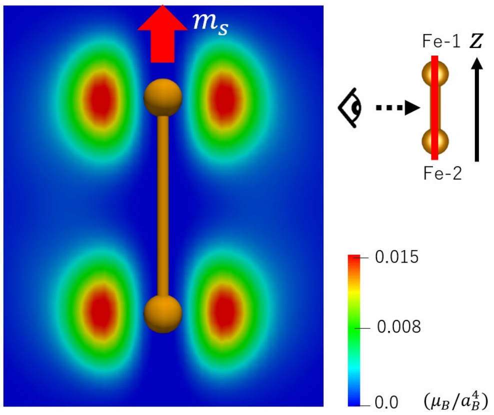

図 2: Fe_2 クラスタの $\boldsymbol{yz}$ 平面内の $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$の分布

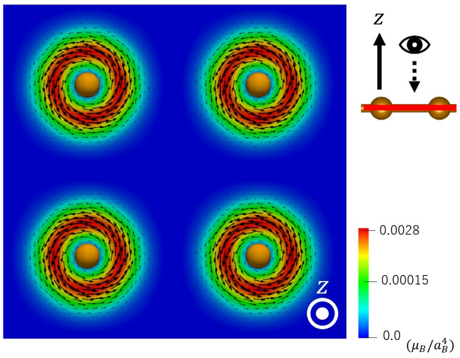

図3: Fe正方格子の原子中心を通る$\boldsymbol{xy}$平面内の$\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$の分布と方向

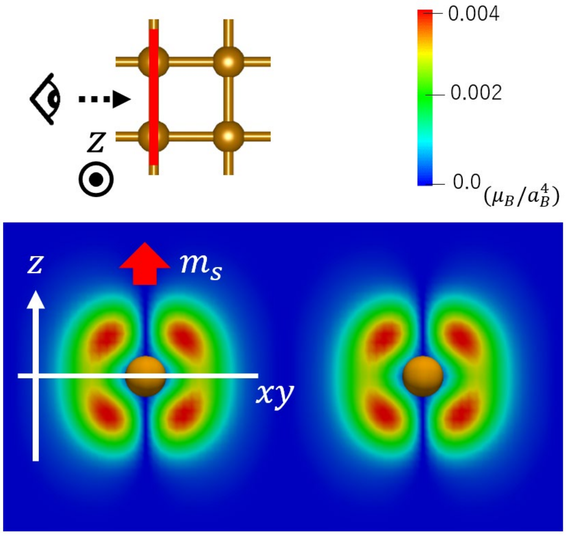

図4: Fe正方格子のyz平面内の$\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$の分布

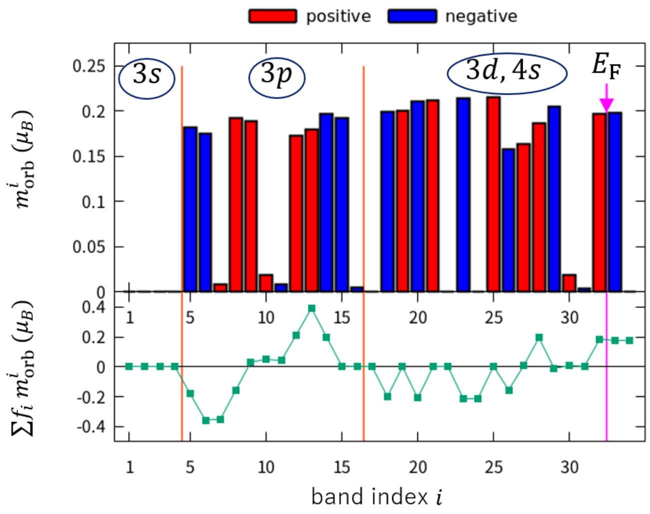

図 5: Fe_2 クラスタの各コーン・シャム軌道の軌道運動量密度から計算した軌道磁気モーメント(上パネル)およびその軌道までの軌道磁気モーメントの和(下パネル)

３－４．準粒子自己無撞着 GW 法による酸化物半導体の電子構造計算
QSGW 法では、半導体のエネルギーギャップについて過大評価することが分かっている。過大評価の大きさは、実験値の 1.2 倍程度である。固体結晶半導体としてパワー半導体材料候補である酸化ガリウム(β相)を使った。また半導体の表面系の計算を試行実施する。固体結晶では原子数 10 個、表面系では原子数最大 18 個の系でそれぞれ試行計算した。これらの計算は並列プログラム開発に成功したために可能となった。固体結晶系では、QSGW の 1 電子ポテンシャルに DFT-GGA のものを 20%混ぜ合わせて用いることにより実験値をおおよそ再現する。この場合 QSGW80 と表示する。表面系では、これまでに計算機能として導入した有効遮蔽媒質(ESM)法を用いて比誘電率(ε_∞)と仕事関数の評価も精度よく見積もることが可能となる。

４．研究成果
４－１．運動量密度
OOI を評価するために運動量密度を評価した。運動量密度を評価するために、運動量密度から計算される軌道磁気モーメントと従来から計算されている原子球内の軌道磁気モーメントを比較検討した。表 1 に示すように、運動量密度から計算される軌道磁気モーメントは従来法による軌道磁気モーメントとおおよそその大きさや符号が一致している。詳細にみると Fe_2 クラスタでは 27%程度小さく、Fe 正方格子では 19%程度大きい結果となっている。図 1 から図 4 には運動量密度 $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$ の空間分布を示した。これらから運動量密度の大きさや向きの空間分布が良く分かる。図 5 では、Fe_2 クラスタについて軌道磁気モーメントの寄与をコーン・シャム軌道に分解したもの示した。この結果から、軌道磁気モーメントはおおよそフェルミ準位付近の軌道のみから決まっていることが良く分かる。次に運動量密度により記述される OOI のエネルギーを考察する。スピン密度による双極子相互作用エネルギーの異方性により、磁性体の形状磁気異方性に寄与するが、その大きさは Fe 正方格子の場合、原子当たり高々0.1meV である。これはおおよそスピン磁気モーメントの 2 乗に比例する。一方同じように OOI のエネルギーも軌道磁気モーメントの 2 乗に比例する量となっている。表 1 から分かるように、軌道磁気モーメントは、スピン磁気モーメントに比べ 1.7%にすぎず極めて小さいため、OOI のエネルギーは双極子相互作用であるエネルギーに比べさらに極めて小さな量となり、磁性体の異方性に寄与するものの、その定量的寄与は無視できると考えてよいことが分かる。
　このテーマに関する研究成果は運動量密度を具体的に評価することに成功した点である。具体的に評価したのは 3d 遷移金属の一つである Fe の系においてであり、一般的に軌道磁気モーメントがスピン磁気モーメントに比べ小さい系である。このような軌道磁気モーメントが小さい性質は 4d や 5d 遷移金属においてもみられるため OOI のエネルギーは異方性エネルギーについては重要ではない可能性が高い。しかしながら、4f や 5f 遷移金属について軌道磁気モーメントが小さいとは限らないと考えられるためここでの成果が役立つ可能性があるかもしれない。

４－２．Ni_2MnGa のバンドヤン・テラー電子状態と一般化感受率解析
立方晶構造ではフェルミ準位直上に Ni 3dε 軌道が現れることが判明した。この準位は、DFT 法や DFT+U 法ではフェルミ準位下の占有状態として現れる。これらの準位の差は電子状態計算

上 0.17eV と小さいですが、このエネルギー差は温度にして 2000K にも届くエネルギー差であるので、電子状態に基づくバンドヤン・テラーの議論では定性的な違いとして現れる。実際に立方晶構造での QSGW 電子状態から得られる一般化感受率でフェルミ面ネスティングを示す波数ベクトルは、観測で得られている 10M 相を示すものであった。また磁化についてのリジットバンドモデルから得られるフェルミ面ネスティングを示す波数ベクトルは、実験で得られている 14M 相を示すものと一致することが分かった。これらのように QSGW により得られる電子状態は、実験観測とよく一致するようなものが得られる可能性が高いことが分かった。このような研究成果は、原著論文として出版している。

４－３．準粒子自己無撞着 GW 法の高速化とホイスラー合金正方晶系 Ni_2MnGa の電子状態
準粒子自己無撞着 GW(QSGW)法の高速化により、これまで計算できなかった系への適用できるようになるはずである。本研究では、ホイスラー合金正方晶系 Ni_2MnGa へ適用し、フェルミ準位付近の電子状態について解析した。非変調相と呼ばれる正方晶構造と４O と呼ばれる斜方晶構造について比較した。後者は双晶境界をもつ最小単位の結晶構造であり双晶境界の電子状態を調べるための構造である。この構造は Ni_2MnGa で実際に観察されることはないが、SDFT-GGA 水準の近似を用いると最低エネルギー構造として得られることが知られている。実際に SDFT-GGA で４O について得られた少数スピン状態のエネルギー状態密度の谷部分にフェルミ準位が掛かっていることは、安定状態であることを示している。一方 QSGW の状態密度では、NM 構造では山の近傍にフェルミ準位が掛かり、４O 構造について平坦な部分に掛かっている。QSGW のエネルギー状態密度の結果は、系の安定性を示唆しているわけではないことが、低温相として観測される 10M 相と呼ばれる変調構造であることと矛盾しているわけではない。10M 相に対する QSGW 計算は、原子数が 40 個含むためまだ実施されておらず、その計算による実証が期待される。

４－４．β酸化ガリウムの電子構造計算
表 2 には QSGW で得られたエネルギーギャップをまとめている。QSGW75 ではおおよそ実験値のエネルギーギャップ 4.76eV を再現している。ESM 法による比誘電率(ε_∞)は、十分な薄膜の厚さを確保した系での計算はまだ実行できなかったが、実験値と同程度の計算値を得た。薄膜系では、系統的な計算は実施できなかったが、QSGW での電子状態計算の可能性を確認することができた。

表 2: β酸化ガリウムのエネルギーギャップ

Approximation	DFT (GGA)	QSGW 1^{th} shot	QSGW 10^{th} shot	QSGW80 10^{th} shot	QSGW75 10^{th} shot
E_{gap}^{direct} (eV)	2.40	5.51	5.67	4.90	4.71
$E_{gap}^{indirect}$ (eV)	2.32	5.43	5.61	4.83	4.65

４－５．まとめ
本研究では、スピン密度汎関数法(SDFT)、準粒子自己無撞着 GW(QSGW)法における計算コード開発を進めつつ、適用範囲となる物質群を広くするべく研究を推進した。QSGW により電子状態の物理精度が高まったことで、伝統的研究手法である一般化感受率の解析が有効に機能することになったと考えられる。このような研究手法と同様に、QSGW によりフェルミ面やそのネスティングに関する研究が一般的により物理高精度で実施することが可能である。これまでにも問題となっているが未解決な研究課題を解決できる展望が開けてきた。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計5件（うち査読付論文　5件／うち国際共著　4件／うちオープンアクセス　2件）

１．著者名 Rinku Majumder, Masao Obata, Chandro Pardede, Jakub Lustinec, Ladislav Kalvoda, and Tatsuki Oda	４．巻 -
２．論文標題 Migration of the Twin Boundary in a Modulated Martensite Phase of Magnetic Shape Memory Alloy Ni2MnGa	５．発行年 2024年
３．雑誌名 The proceedings of CCP2023 (34th IUPAP Conference on Computational Physics)	６．最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 該当する

１．著者名 Chandro Pardede, Masao Obata, Rinku Majumder, Indra Pardede, and Tatsuki Oda	４．巻 -
２．論文標題 Computational acceleration on density functional approach code using GPU	５．発行年 2024年
３．雑誌名 The proceedings of CCP2023 (34th IUPAP Conference on Computational Physics)	６．最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 該当する

１．著者名 (103) Ko Hyodo, Masao Obata, Jakub Lustinec, Ladislav Kalvoda, Takao Kotani, and Tatsuki Oda	４．巻 -
２．論文標題 Parallelization in the code of quasi-particle self-consistent GW and electronic structure in the magnetic shape memory alloy Ni2MnGa	５．発行年 2024年
３．雑誌名 The proceedings of CCP2023 (34th IUPAP Conference on Computational Physics)	６．最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 該当する

１．著者名 Obata Masao、Kotani Takao、Oda Tatsuki	４．巻 7
２．論文標題 Intrinsic instability to martensite phases in ferromagnetic shape memory alloy Ni2MnGa: Quasiparticle self-consistent GW investigation	５．発行年 2023年
３．雑誌名 Physical Review Materials	６．最初と最後の頁 024413-1-14
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevMaterials.7.024413	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 Zeleny; Martin、Sedlak Petr、Heczko Oleg、Seiner Hanus;、Vertat Petr、Obata Masao、Kotani Takao、Oda Tatsuki、Straka Ladislav	4．巻 209
2．論文標題 Effect of electron localization in theoretical design of Ni-Mn-Ga based magnetic shape memory alloys	5．発行年 2021年
3．雑誌名 Materials & Design	6．最初と最後の頁 109917～109917
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.matdes.2021.109917	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 該当する

〔学会発表〕　計19件（うち招待講演　4件／うち国際学会　9件）

1．発表者名 Tatsuki Oda, Masao Obata, Ko Hyodo, Jakub Lustinec, Ladislav Kalvoda, Takao Kotani
2．発表標題 Parallelization in the code of quasi-particle self-consistent GW and electronic structure in the magnetic shape memory alloy Ni2MnGa
3．学会等名 34th IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023, Kobe)（国際学会）
4．発表年 2023年

1．発表者名 Chandro Pardede, Masao Obata, Rinku Majumder, Tatsuki Oda
2．発表標題 Computational acceleration of the density functional approach code with using GPU
3．学会等名 34th IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023, Kobe)（国際学会）
4．発表年 2023年

1．発表者名 Rinku Majumder, Masao Obata, Chandro Pardede, Jakub Lustinec, Ladislav Kalvoda, Tatsuki Oda
2．発表標題 Migration of the twin boundary in a modulated martensite phase of magnetic shape memory alloy Ni2MnGa
3．学会等名 34th IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023, Kobe)（国際学会）
4．発表年 2023年

１．発表者名 Masao Obata, Jakub Lustinec, Rinku Majumder, Chandro Pardede, Kazuki Muranaka, Takao Kotani, Ladislav Kalvoda, Tatsuki Oda
２．発表標題 Electronic structures of ferromagnetic shape memory alloy Ni-Mn-Ga by quasiparticle self-consistent GW approach
３．学会等名 34th IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023, Kobe)（国際学会）
４．発表年 2024年

１．発表者名 宮崎晃希，小幡正雄，小田竜樹
２．発表標題 サファイア基板上のマンカン極薄膜の第一原理電子状態解析
３．学会等名 第71回応用物理学会春季学術講演会（2024年3月22－25日）
４．発表年 2024年

１．発表者名 村中和輝，小幡正雄，兵頭功，小谷岳生，小田竜樹
２．発表標題 準粒子自己無撞着GW法によるパワー半導体酸化ガリウムの電子状態と誘電特性
３．学会等名 第71回応用物理学会春季学術講演会（2024年3月22－25日）
４．発表年 2024年

１．発表者名 小幡正雄，小谷岳生，小田竜樹
２．発表標題 第一原理GW計算による磁性形状記憶合金Ni2Mn1+xGa1-xの電子状態
３．学会等名 第71回応用物理学会春季学術講演会（2024年3月22－25日）
４．発表年 2024年

１．発表者名 Rinku Majumder, Masao Obata, Chandro Pardede, Jakub Lustinec, Ladislav Kalvoda, Tatsuki Oda
２．発表標題 Understanding Twin Boundary Migration in Ni2MnGa Martensite Phase: First-Principles Insights
３．学会等名 第71回応用物理学会春季学術講演会（2024年3月22－25日）
４．発表年 2024年

１．発表者名 Masao Obata
２．発表標題 Quasiparticle self-consistent GW approach: application to Ni2MnGa alloy
３．学会等名 ブルノ工科大学(Brno University of Technology),（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2023年

１．発表者名 Masao Obata
２．発表標題 Electronic structures of ferromagnetic shape memory alloy Ni-Mn-Ga by quasiparticle self-consistent GW approach
３．学会等名 磁気形状記憶合金に関する国際合同研究会atポーランド科学アカデミー(Polish Academy of Sciences)（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2023年

１．発表者名 Masao Obata
２．発表標題 Quasiparticle self-consistent GW approach: application to Ni-Mn-Ga ferromagnetic shape memory alloy
３．学会等名 プラハ・カレル大学 (Charles University)セミナー（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2023年

１．発表者名
Masao Obata,

２．発表標題
Effect of excess Mn to the electronic structure of magnetic shape memory Ni-Mn-Ga alloy via GGA+U and quasiparticle self-consistent GW approaches

３．学会等名
チェコ科学アカデミー講演会（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2023年

１．発表者名
村中和輝，兵頭功，パルデデ・チャンドロ，小幡正雄，小田竜樹

２．発表標題
準粒子自己無撞着GW法による酸化ガリウムの電子構造と誘電特性

３．学会等名
応用物理学会 第70回春季学術講演会

４．発表年
2023年

１．発表者名
Jakub Lustinec, Masao Obata, Ko Hyodo, Takao Kotani, Ladislav Kalvoda, Tatsuki Oda

２．発表標題
Electronic Structures of ferromagnetic Heusler Alloys Ni2MnX (X＝Al, Ga, In) and Magnetic shape memory effect

３．学会等名
応用物理学会 第70回春季学術講演会

４．発表年
2023年

１．発表者名
パルデデ-インドラ, 吉川 大輝, 小幡 正雄, 小田 竜樹

２．発表標題
磁気的力定理による有効ラシュバパラメータの見積もり

３．学会等名
第82回応用物理学会秋季学術講演会(2021年9月9-13日)(オンライン開催)

４．発表年
2021年

１．発表者名 小幡 正雄，小田竜樹
２．発表標題 磁気形状記憶合金Ni2MnGaの電子局在効果
３．学会等名 物理学会２０２１年秋季大会(2021年9月20-23日)(オンライン開催)
４．発表年 2021年

１．発表者名 小幡 正雄，小谷 岳生，小田 竜樹
２．発表標題 QSGW計算による強磁性形状記憶合金Ni2MnGaの電子状態
３．学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会(2021年9月9-13日)(オンライン開催)
４．発表年 2021年

１．発表者名 小幡正雄，小谷岳生，小田竜樹
２．発表標題 フェリ磁性スピネルNiCo2O4の自己無撞着準粒子GW計算
３．学会等名 物理学会２０２１年秋季大会(2021年9月20-23日)(オンライン開催)
４．発表年 2021年

１．発表者名 Daichi Takagi, Daiki Yoshikawa, Indra Pardede, Masao Obata, Tatsuki Oda,
２．発表標題 First-principles evaluation on magnetic anisotropy in antiferromagnetic Mn alloys
３．学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9) --Toward Sustainable Development--（国際学会）
４．発表年 2021年

〔図書〕　計1件

1．著者名	4．発行年
吉田　博、小田 竜樹、等	2022年
2．出版社	**5．総ページ数**
内田老鶴圃	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	

〔産業財産権〕

〔その他〕

ホーム　計算ナノ科学　（金沢大学）
http://cphys.s.kanazawa-u.ac.jp/~oda-web/index.html

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
研究分担者	小幡　正雄 (Obata Masao) (10803299)	金沢大学・数物科学系・助教 (13301)	

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			
チェコ	チェコ科学アカデミー	カレル大学	チェコ工科大学	
インドネシア	スマトラ工科大学			
バングラデシュ	クルナ大学			