

平成 30 年 8 月 20 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26400330

研究課題名(和文) f電子系の第一原理計算手法開発と磁気異方性評価への応用

研究課題名(英文) Development of first-principles method for f-electron systems and its application to calculations of magnetic anisotropy energy

研究代表者

赤井 久純 (Akai, Hisazumi)

東京大学・物性研究所・特任教授

研究者番号：70124873

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)：希土類磁石材料などのf電子系の第一原理計算を、密度汎関数法の枠組みの中で取り扱う計算手法を開発し、その応用として、f電子系結晶の電子状態や磁性を、議論するための基礎を確立することが目的である。電子が自分自身と相互作用する自己相互作用をf軌道に対して補正する方法および、そのような効果を密度汎関数法の枠内でも取り入れることのできる最適化有効ポテンシャルを用いる方法を開発した。その結果、ポテンシャルの形状に特別な仮定をしないフルポテンシャル最適化有効ポテンシャルの方法で希土類元素のf状態を取り扱えることを見出した。これらの手法の応用として希土類磁石材料の電子状態と磁気異方性の研究を行った。

研究成果の概要(英文)：The purposes of the present research are, firstly, to develop methods that enable us to treat the f-states of rare earth elements within the framework of the density functional theory, and second, to apply thus obtained methods for study of the electronic structure and magnetic properties of rare earth systems. Two methods were developed: one is to include the self-interaction correction (SIC) to the f-states and the other is a full-potential version of the optimized effective potential method. The latter, which is completely within the framework of the density functional theory, turned out to be much more powerful than the former for the investigation of the electronic structure of f-electron systems. As applications of these methods, the electronic structure and magnetic anisotropy energy of rare earth permanent magnet materials were investigated.

研究分野：物性理論

キーワード：f電子系 磁気異方性 自己相互作用補正 最適化有効ポテンシャル 交換相互作用 フルポテンシャル  
非局所ポテンシャル 国際情報交換

## 1. 研究開始当初の背景

電子状態計算手法の発展と計算機性能の向上により固体の第一原理計算の高精度化が進み、場合によっては数パーセント以下の誤差で現実物質の解析・予測が行えるようになった。しかし電子間相互作用の影響が強く現れる強相関電子系やf電子が開殻構造をつくるランタナイドやアクチナイドにおいては、第一原理計算が失敗する例が数多く見られる。これらの計算で用いられている密度汎関数法の局所密度近似 (local density approximation: LDA) や generalized gradient approximation; GGA) の破綻が主な原因である。LDA では、系は各点でその密度に応じた一様電子ガスの交換相関エネルギーを局所的に持ち、系全体の交換相関エネルギーはそれらの和で表されるとする。この近似は電子間相互作用が弱く金属性の高い系に対して有効であるが、相互作用が強くなり局在性が強くなると破綻する。多彩な物性の多くがこのような領域で発現することが状況をいっそう深刻なものにする。

第一原理電子状態計算の立場からは 80 年代後半より局所密度近似に対する改良への模索が続けられ、特に d 電子系に対しては数多くの研究がなされた。多体摂動論、動的平均場近似、量子モンテカルロ法等の方法が第一原理計算に適用可能な有力な方法として提案されそれぞれ一定の成果をあげた。

一方、f 電子系に関しては、第一原理計算という意味では 90 年代以降大きな発展はない。d 電子系ほど重要視されなかったのは、ランタナイドにおいて f 電子の局在性は強く、これを原子軌道として取り扱うオープン・コア近似等の手法が有効で、とりあえず問題を回避できたからである。このような取扱いでは、f 電子はそれ自身が凝集や電子状態に直接寄与することはなく、f 電子の関与する物性は、f 電子の遍歴性を無視して計算された環境中に置かれた、原子としての f 軌道が示す性質を調べることによって評価される。そのような取扱いでも f 電子とそれ以外の電子とのクーロン相互作用は原子内交換相互作用も含めて考慮されるので、結晶の性質を一部取り込んでいる。このことがこのような取扱いをある程度正当化している。

しかし、もう一步踏み込むと、このような f 電子の取扱いはランタナイド単体の凝集機構にさえ十分記述しないことが分かる。図 1 に示すのは、Min らによるオープン・コア近似によって計算されたランタナイド単体結晶の原子体積の実験との比較である<sup>①</sup>。実験との系統的なずれが見られるが、これは f 電子をコア状態として局在させ、その遍歴性を無視したために、金属結合が実際より小さく見積られた結果である。

もう少し工夫された方法として f 電子に自己相互作用補正 (self interaction correction: SIC) を導入して、局在性を「手で入れる」近似を避ける方法がある。1980 年代末頃から

英国のグループや本研究代表者らのグループで開発された。この方法では占有 f 状態は自然と価電子バンドの下へ分離してセミ・コア状態になる。一方、非占有 f 状態はフェルミ面よりエネルギーの高いところに状態を作る。これは多電子 f 状態を一電子状態に射影した状況を表しているので、素直なアプローチと言える。このような手法で計算されたランタナイド単体結晶の原子体積を図 1 に示すが<sup>②</sup>、実験とのより好ましい一致を示すことがわかる。しかし、これらの取扱いは、いずれも密度汎関数法の観点からは、整合性のとれた方法とは言えない。

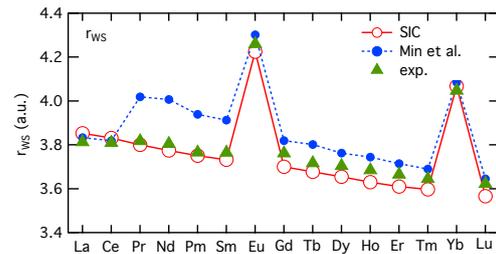


図 1. オープン・コア近似による計算 (Min et al. [1]) および f 状態に自己相互作用補正をいれた計算 [2] と実験値との比較。

これら以外に LDA+U (あるいは GGA+U) と称する手法が近年しばしば用いられる。これも 1980 年代に考案されたものであるが、電子間クーロン相互作用に対応する経験的パラメータ U を導入して、LDA をタイトバインディング模型の局所ハートリー・フォック近似レベルの交換エネルギーに置き換えるものである。決して進んだ近似とは言えない上に、調整可能な経験的パラメータを導入する必要があり、もはや第一原理計算と考えることはできない。f 電子系に適用する場合には単に非占有軌道がフェルミ面より低エネルギー側に現れることを阻止するために用いられていると言って良く、その理論的基礎付けは困難である。

## 2. 研究の目的

密度汎関数法の局所近似で扱うことの難しい f 電子系の第一原理計算を、密度汎関数法の枠組みの中で統一的かつ信頼のおける方法で扱う計算手法を開発する。その応用として、従来 f 電子を原子軌道として取り扱うことによって評価されてきた f 電子系結晶の結晶磁気異方性を、一般の電子状態計算と整合のとれた方法で扱うための基礎を確立し、それによって、永久磁石材料開発において必要になる結晶磁気異方性の高精度予測を可能にする。

## 3. 研究の方法

1) と 2) に示す二つの方法によって f 電子

系の記述を行う第一原理電子状態計算手法を開発していく。

1) 最適化有効ポテンシャル法 (optimized effective potential: OEP) においては、密度汎関数法における独立変数を密度から有効ポテンシャルに変換する。有効ポテンシャルは1電子状態を一意的に定義することから交換相関エネルギーを1電子状態によって表現する。その結果、エネルギー変分汎関数は有効ポテンシャルで表される。この方法の利点は交換相関エネルギーを、多体摂動論を用いて書き下すことができ、また系統的に近似を上げていくことが出来る点である。本研究代表者らはハートリー・フォック近似レベル (厳密交換項の方法 OEP-EXX), 乱雑位相近似レベル (OEP-RPA) の計算手法を開発し、単純金属、遷移元素金属、遷移金属酸化物などに適用してきた。同じ手法はf電子系の電子状態計算に対しても適用できると考えられる。

2) f電子を含む系に対する計算機マテリアルデザインを実行していくためには、計算の高精度化とともに計算の高速化が不可欠である。これに答える方法として、非局所ポテンシャルを用いた密度汎関数法とそれを用いたf電子系の第一原理計算手法を開発する。密度汎関数法は通常、局所ポテンシャルが系のハミルトニアンを指定する。しかし、非局所ポテンシャルについて理論の枠組みをつくることも可能である。実際、スピン偏極コーン・シヤム方程式ではスピン空間での非局所ポテンシャルを導入している。そのようなスピン偏極の座標空間への拡張と考えられる非局所ポテンシャルを、射影演算子を用いて書いたとき、外部非局所ポテンシャルと一対一対応するのは同じ空間に射影された多体波動関数から作られた密度である。したがってこの枠組みは、これまで密度汎関数法で扱うことが難しかった軌道分極などの整合性がよく応用の範囲は広い。この枠組みに対するコーン・シヤム不定式も構築することが出来、軌道分極の第一原理電子状態計算が可能になる。

#### 4. 研究成果

##### (1) $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ の磁性と磁気異方性

最も単純に LDA からの改良と目指す方向として f 軌道に SIC を取り入れた計算によって、希土類磁石材料である  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  の磁性と磁気異方性の詳細な計算を行った<sup>3)</sup>。この物質は  $x=0$  の時は面内磁気異方性を示すが、 $x$  の増加とともに面内磁気異方性から一軸磁気異方性へと変化し、 $x=3$  付近では  $8 \text{ MJ/m}^3$  に達する。N は Nd を含む面内で 3 角形を形成するように Nd に配位するが、このための静電ポテンシャルによって、Nd の葉巻型にのびた f 電荷分布がその軸を z 軸方向に向ける方がエネルギー的に有利であるために一軸異方性ができると説明される。このような説明では f 電子の自由度は全く無視されており、原子内に静的な電荷分布として存在する対象物と

して取り扱われる。しかし 1. で述べた通り f 状態は実際には凝縮にも寄与しており、このような取り扱いの正当性は注意深く吟味する必要がある。SIC を用いた計算を行った結果、Nd 周辺の N と f 状態の混成は磁気異方性の左右するほど大きく、無視することができないことがわかった。図 2 に計算の結果得られた磁気異方性の N 濃度依存性を示す。

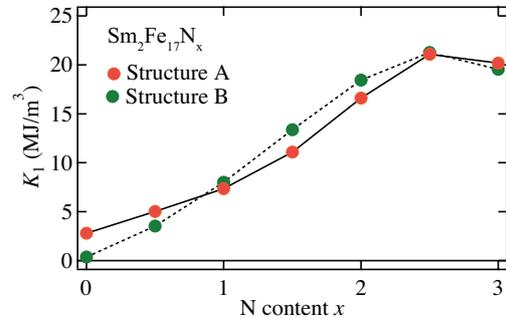


図 2.  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  の磁気異方性定数  $K_1$ . 構造 A と B は格子定数の違いで、それぞれ  $x=3$  および 0 の時の格子定数を用いた。

ここでは SIC を用いた。磁化の方向が z 軸方向のとき、xy 面内のとき、 $x=0$  のとき  $x=3$  のときのそれぞれの場について f 状態密度曲線 (DOS) を図 3 に示す。この図から磁気異方性の起源を読み取ることができるが、ここでは f 状態密度の分裂に注目する。

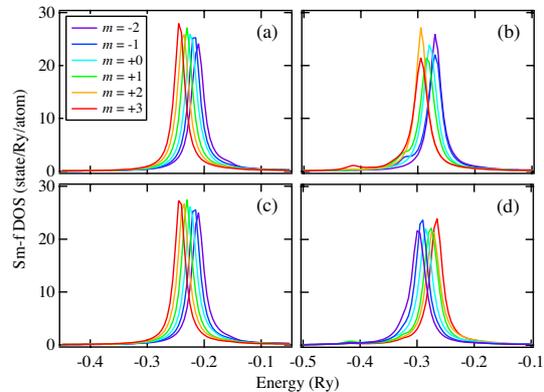


図 3.  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  の下向きスピン f 状態密度。θ を磁化と z 軸のなす角度として、(a)  $x=0, \theta=0$  (b)  $x=3, \theta=0$  (c)  $x=0, \theta=90$  (d)  $x=3, \theta=90$  の場合を表す。

f 状態の分裂はスピン軌道相互作用によるものである。低エネルギー側に見られる構造は N の p 状態との混成によるものであるがここでは議論しない。SIC を入れない LDA 計算では f 状態はフェルミ面 ( $E=0$ ) の位置にピン止めされるが、SIC のために占有軌道がフェルミ面の下  $0.25\text{Ry}$  の付近存在し、非占有状態である  $m=-3$  の軌道 (ここには示されていない) がフェルミ面より上  $0.1\text{Ry}$  のあたりに大きく分裂して存在する。このことは物理的にみて正しい描像であると考えられる。

しかし、ここで用いられた有効ポテンシャルはコーン・シャム軌道に依存したポテンシャルであり、このことは大きな問題を含んでいる。最も深刻な点はこれが密度汎関数法と、整合しないと言う点である。あと一つ問題となる点は、今の取り扱いではポテンシャルがユニタリー不変ではないということである。つまり有効ポテンシャルを構成するために用いる軌道のユニタリー変換によって、結果が変化してしまう。エネルギー最小が満たされるようなユニタリー変換を選ぶことも考えられるが、計算量は膨大になり現実的な選択ではないし、その意義も曖昧である。これらの点を改良する方法として最適化有効ポテンシャルの法があるが、これを用いた成果については次のサブセクションで述べる。

## (2) 最適化有効ポテンシャル法の開発

外部ポテンシャルを与えると、ホーエンベルグ・コーンの定理によって、交換相関エネルギーと粒子密度はともに決まる。すなわち交換相関エネルギーと粒子密度を、外部ポテンシャルをパラメータとしたパラメータ表示とすることができる。3. でも述べた通り、最適化有効ポテンシャル法(OEP)はそのことを利用して、粒子密度の汎関数としての交換相関ポテンシャルを決める手法である。コーン・シャム軌道を用いて得られる交換相互作用や相関効果の表式を直接用いることができ、しかも得られた交換相関ポテンシャルが局所ポテンシャルとなり、したがって完全に密度汎関数法の枠組みにおさまり、したがってその正しさが(相関項の表式を得るためになされた近似の範囲内)密度汎関数法によって保証されていることが大きな利点である。

本研究代表者らはOEPを開発し、これを遷移金属化合物等に適用し、また乱雑位相近似(RPA)レベルでの相関効果を取り入れる等の研究を行ってきた結果、LDAが失敗するような系に対しても適用が可能であることを見てきた。これがf電子系にOEPを適用しようとする動機であった。このような方向性をもって、希土類を含む永久磁石材料にこれまで開発してきたOEPを適用した計算を行いその結果を解析したが、単純なOEPの結果はLDAの結果は大きく改良しないことが本研究の早い段階で明らかになった。失敗の原因は以下の通りである。とりあえずスピン軌道相互作用を考えないことにするとコーン・シャムf軌道は14重の縮退を持つ。そのうちスピンに関する縮退はスピン分極密度汎関数を考えることによって、縮退が取れる。軌道状態に関する縮退は結晶場によって取れるが、良く局在化したf軌道に対してその効果は非常に小さい。そのため、通常のLDAを行うと全ての軌道状態がフェルミレベルの位置にピン止めされることになる。しかし、ハートリー・フォック近似流の見方からは4.1でも述べたように、占有軌道と非占有軌道は分裂しており、非占有軌道はフェルミ面より高いエ

ネルギーに、占有軌道は低いエネルギーに位置しているはずである。OEPを用いてもハートリー・フォック近似で定義される交換項を用いる限り、これと同様の結果が得られることを期待した。しかし、実際に計算してみると、f軌道の軌道間の違いを局所ポテンシャルで表現するためには、最適化有効ポテンシャルがフルポテンシャルタイプでなければならないことがわかる。最適化有効ポテンシャルは一種の隠れた射影演算子の機能(あらわにそのような形をしていないが)を持っており、その機能によって、それぞれの軌道に対して最適なポテンシャルを与える仕組みになっているからである。この機能が働くためにはポテンシャルが軌道の形を峻別できなければならない。これまでなされてきた全電子最適化有効ポテンシャル法は最適化有効ポテンシャルとして球対称を仮定しており、これでは軌道の峻別が行えない。

この点を抜本的に改良して、OEPの可能性を追求するために、フルポテンシャル最適化有効ポテンシャル法(FP-OEP)を開発した。ベースにしたのは本研究の研究協力者である小倉昌子博士が中心となって、開発したフルポテンシャルKKR法である。フルポテンシャルKKR自身が通常のマフィンティン・ポテンシャルを用いたKKR法より格段に重たい計算が必要となる上に、最適化有効ポテンシャル法が重たい計算であるために、現在まで現実的な永久磁石材料であるNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B(単位胞に68原子をふくむ)等への適用は継続中であるが、単純希土類系へのFP-OEPによる計算を実施し、その結果を詳細に吟味した。

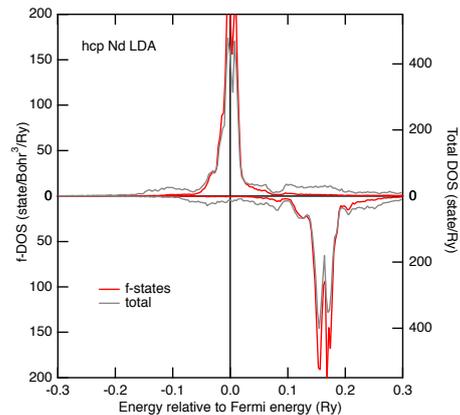


図4. hcp Ndの球対称KKRとLDAを用いて計算されたDOS.

図4に示すのは、非フルポテンシャルKKRと通常のLDAによって計算されたhcp NdのDOSを示す(Ndはdhcp構造をとるが、ここでは重要な問題ではない)。上むきスピンバンドのf状態は縮退し、フェルミレベルにピン止めされていることがわかる。通常の球対称OEPを用いても交換分裂は大きくなるものも、占有軌道である上むきスピンの状態はほとんど変わらない。それに対して、図5に示すものはフルポテンシャルKKRとFP-OEPを用

いて計算された結果である。占有  $f$  状態が大きく非占有  $f$  状態から分裂していることがわかる。フルポテンシャルでも縮退が残る部分占有された  $f$  状態がフェルミレベル上にピン止めされてはいるが、LDA 計算で実現する状態とは全く異なっていることがわかる。当然ながら、単なる結晶場あるいは周辺原子との混成によってもこのような軌道の対称性を反映した軌道分裂が生じる可能性がある。

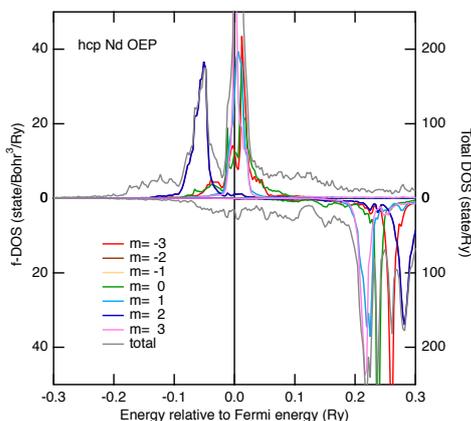


図 5. hcp Nd の FP-OEP による DOS.

どの効果が軌道の分裂に寄与しているのかを調べるために、やや極端な例として fct 構造の Nd についてフルポテンシャルの LDA を用いて電子状態を計算した結果を図 6 に示す。  $c/a$  の値としては最も正方性の強くなる  $c/a=2^{1/4}$  を用いた。非常に強い立方対称からのずれを持った正方対称であるにもかかわらず、結晶場単独の分裂への寄与は非常に小さく、LDA 計算では OEP で得られるような軌道の分裂は再現されないことが示され、OEP の必要性が明らかになった。

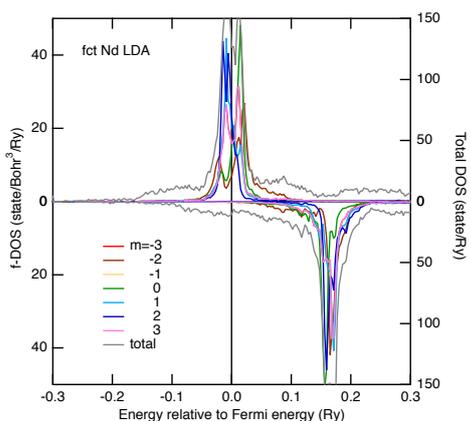


図 6. fct Nd の FP-LDA による DOS.

これらの結果から  $f$  状態に対して、物理的に最も意味が明らかでかつ現実的な取り扱いの方法はフルポテンシャル KKR を用いた最適化有効ポテンシャルの方法であることがと結論された。

〈引用文献〉

- ① B.I. Min, et al. JMMM **61**, 139 (1986).
- ② H. Akai, private communication (1995).
- ③ M. Ogura and H. Akai, J. Phys. Soc. Jpn **84**, 084702 (2015)

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 17 件)

1) Maximum performance of permanent magnet materials, H. Akai, Scripta Materialia, (2018) in press. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2018.02.006 (査読有)

2) First-principles study of intersite magnetic couplings and Curie temperature in  $R\text{Fe}_{12-x}\text{Cr}_x$  ( $R = \text{Y, Nd, Sm}$ ), T. Fukazawa, H. Akai, Y. Harashima, T. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn **87**, 044706-1-5 (2018). DOI: 10.7566/JPSJ.87.044706 (査読有)

3) Quantum Theory of Rare-Earth Magnets, T. Miyake and H. Akai, J. Phys. Soc. Jpn **87**, 041009-1-10 (2018). DOI: 10.7566/JPSJ.87.041009 (査読有)

4) Atomistic-model study of temperature-dependent domain walls in the neodymium permanent magnet  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ , M. Nishino, Y. Toga, S. Miyashita, H. Akai, A. Sakuma, and S. Hirose, Phys. Rev. B **95**, 094429-1-7 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.95.094429 (査読有)

5) Monte Carlo analysis for finite-temperature magnetism of  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  permanent magnet, Y. Toga, M. Matsumoto, S. Miyashita, H. Akai, S. Doi, T. Miyake, and A. Sakuma, Phys. Rev. B **94**, 174433-1-9 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevB.94.174433 (査読有)

6) Relevance of 4f-3d exchange to finite-temperature magnetism of rare-earth permanent magnets: an ab-initio-based spin model approach for  $\text{NdFe}_{12}\text{N}$ , M. Matsumoto, H. Akai, Y. Harashima, S. Doi and T. Miyake, J. Appl. Phys. **119**, 213901-1-7 (2016). DOI: 10.1063/1.4952989 (査読有)

7) Near-field correction in the first-principles calculations by the exact two-center expansion for the inverse of the distance, M. Ogura, C. Zecha, M. Offenberger, H. Ebert, and H. Akai, J. Phys: Condens. Matter **27**, 485201-1-8 (2015). DOI: 10.1088/0953-8984/27/48/485201 (査読有)

8) Role of N in the Permanent Magnet Materials  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{Nx}$ , M. Ogura and H. Akai, J. Phys. Soc. Jpn **84**, 084702-1-6 (2015). DOI: 10.7566/JPSJ.84.084702 (査読有)

9) Optimized effective potential method and application to static RPA correlation, T. Fukazawa and H. Akai, J. Phys: Condens. Matter **27**, 115502-1-10 (2015). DOI: 10.1088/0953-8984/27/11/115502 (査読有)

〔学会発表〕(計 52 件)

- 1) H. Akai, Upper limits of magnetization, Curie temperature, and magnetic anisotropy of permanent magnet materials, APS March Meeting, 2018.
- 2) M. Ogura, A. Mashiyama, and H. Akai, First-Principles Calculation of Electronic Structure and Magnetic Properties of  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ , Junjiro Kanamori Memorial International Symposium, 2017.
- 3) M. Hoffmann, M. Matsumoto, and H. Akai, Magnetic properties of La doped rare earth permanent magnets, Junjiro Kanamori Memorial International Symposium, 2017.
- 4) H. Akai, Must for candidates of permanent magnet materials, 第 41 回 日本磁気学会学術講演会, 2017 年.
- 5) 赤井久純, 希土類磁石材料の探索, ナノテクイニシヤティブ研究会, 2017.
- 6) H. Akai and M. Ogura, Non-equilibrium KKR Green's function method and its applications (invited), Spintronics and Core-to-Core Workshop 2017, 2017.
- 7) T. Fukazawa, H. Akai, Y. Harashima, T. Miyake, Inter-site magnetic couplings in  $\text{NdFe}_{12-\delta}\text{M}_\delta$  ( $\text{M}=\text{K}-\text{Br}$ ), Computational Sciences Workshop 2017 (CSW2017), 2017.
- 8) H. Akai, f-states and magnetic anisotropy of rare-earth magnet, EU-Japan Workshop on Computational Materials Design and Realization for Spintronics, Moltronics, Quantronics, Superconductivity and Topotronics, 2016.
- 9) H. Akai, Hyperfine interactions of f-electron systems, International Conference on Hyperfine Interactions and their Applications, 2016.
- 10) H. Akai, Contribution of f-states to the magnetic anisotropy of rare-earth permanent magnet materials, 24th International Workshop on Rare-Earth and Future Permanent Magnets and their Applications (REPM 2016), 2016.
- 11) 深澤太郎, 赤井久純, 原嶋庸介, 三宅隆, 磁石化合物  $\text{Nd}(\text{Fe}_{12-x}\text{M}_x)\text{X}$  ( $\text{M}=\text{Ti}, \text{Co}; \text{X}=\text{B}, \text{C}, \text{N}, \text{O}, \text{F}$ )におけるサイト間磁気結合の第一原理電子状態計算, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016.
- 12) Hisazumi Akai and Masako Ogura, Magnetic anisotropy of rare-earth magnets calculated by SIC and OEP, APS March Meeting 2016, 2016.
- 13) T. Fukazawa and H. Akai, Reformulation of optimized effective potential method and its application to RPA correlation, Uppsala-Osaka Mini-Workshop on Computational Materials Design, 2015.
- 14) H. Akai and M. Ogura, Role of 4f states in rare earth magnet compounds: all electron theory, ESICMM-G8 Symposium On Next Generation Permanent Magnets, 2015.
- 16) H. Akai and T. Fukazawa, Optimized effective potential method in static RPA and its applications, Psi-K 2015 Conference, 2015.

- 15) M. Ogura, A. Mahiyama, and H. Akai, Origin of magnetic anisotropy in  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ , Psi-K 2015 Conference, 2015.
- 17) H. Akai and M. Ogura, Magnetic anisotropy of  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  calculated by SIC and OEP, Workshop on ab-initio modelling of adaptive d- and f-electron magnetic materials, 2015.
- 18) T. Fukazawa and H. Akai, Optimized effective potential method and application to static RPA correlation, Wilhelm und Else Heraeus-Seminar, Green's Functions in ab initio Electronic Structure Calculations of Solids: From Implementations to Applications, 2015.
- 19) H. Akai and M. Ogura, Hyperfine fields and magnetic anisotropy in  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  and  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_3$ , APS March Meeting 2015, 2015.
- 20) H. Akai and M. Ogura, First-principles calculation towards new permanent magnets, International Workshop of Computational Nano-Materials Design on Green Energy, 1-3 June, Osaka, Japan, 2014.
- 21) H. Akai, Electronic structure and isomer shift of valence-fluctuating  $\beta\text{-YbAlB}_4$ , Joint International Conference on HFI/NQI, 2014.
- 22) H. Akai and M. Ogura, Hyperfine fields and magnetic anisotropy in  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  and  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_3$ , Joint International Conference on HFI/NQI, 2014.
- 23) H. Akai, Going beyond LDA, 未来研究イニシヤティブ「計算機ナノマテリアルデザイン新元素戦略」1 DAY SYMPOSIUM, 26 January, 基礎工学研究科シグマホール, 2014.

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 2 件)

名称: 希土類磁石

発明者: 赤井久純, 他 5 名

権利者: 同上

種類: 特許

番号: 特願 2017-191466 (国内)

出願年月日: 2017 年 9 月 29 日

番号: 特願 2018-027405 (国外)

出願年月日: 2017 年 2 月 19 日

〔その他〕

ホームページ等

[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/akai\\_group\\_en.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/akai_group_en.html)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

赤井 久純 (AKAI, Hisazumi)

東京大学・物性研究所・特任教授

研究者番号: 70124873

### (4) 研究協力者

小倉 昌子 (OGURA, Masako)

ルートヴィヒ・マクシミリアン大学ミュンヘン・研究員

研究者番号: 30397640