

令和 5 年 5 月 23 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K05303

研究課題名(和文) 第一原理スピンドYNAMICSシミュレーターの構築とスピントロニクス材料のデザイン

研究課題名(英文) Development of ab-initio spin dynamics simulator and its application to spintronics materials

研究代表者

佐藤 和則 (Sato, Kazunori)

大阪大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：60379097

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)：励起状態に関連した材料特性の計算に関して、以下3点について多階層連結法の開発とその応用を行った。

(1) KKR-CPA法による有効交換相互作用計算と有限温度磁性のモンテカルロシミュレーションによる、磁気熱量材料の定量的なシミュレーションとマテリアルデザイン。(2) FPKKR-CPA法によるハイエントロピー合金(HEA)の弾性定数の計算と機械学習によるモデル構築、および原子間相互作用の計算とモンテカルロ法によるHEAの原子配置のシミュレーション。(3) QSGW計算と配位子場理論に基づくモデル化を用いた、希土類添加半導体や遷移金属を含む酸化物系の励起特性の評価とマテリアルデザイン。

研究成果の学術的意義や社会的意義

効率的な新規機能性材料のマテリアルデザインのために、第一原理電子状態計算に基づく材料探索が精力的に実施されている。しかし、通常的第一原理計算は材料の基底状態(絶対0度での)特性は精度良く計算できるが、実際の応用において重要となる有限温度での特性については直接計算することができない。本研究では、第一原理計算と物理系を表すモデルを組み合わせた多階層連結法を開発し、磁気熱量効果材料、ハイエントロピー合金、希土類添加半導体、遷移金属発光中心などの機能性材料について、有限温度での性質や励起状態の特性を理論的に予測してマテリアルデザインに応用できることを示した。

研究成果の概要(英文)：Regarding the calculation of material properties related to excited states, we have developed and applied a multi-scale simulation method for the following three points.

(1) Quantitative simulation and material design of magnetocaloric materials by effective exchange interaction calculation by KKR-CPA method and Monte Carlo simulation of finite temperature magnetism. (2) Calculation of elastic constants of high entropy alloy (HEA) by FPKKR-CPA method and model construction by machine learning. Calculation of interatomic interaction and simulation of atomic configuration at finite temperature of HEA by Monte Carlo method. (3) Evaluation of excitation properties and material design of rare earth-doped semiconductors and oxide systems containing transition metals based on QSGW calculations and ligand field theory.

研究分野：第一原理電子状態計算

キーワード：計算機マテリアルデザイン 不規則系 コヒーレントポテンシャル近似 磁気熱量効果 発光中心 準粒子セルフコンシステントGW法 密度汎関数法 ハイエントロピー合金

1. 研究開始当初の背景

新規機能性材料の効率的な探索のために、密度汎関数法(Density Functional Theory: DFT)に基づく第一原理電子状態計算による物性予測が活用されている。近年では、データ科学的手法と合わせて「マテリアルズインフォマティクス」の有力な手法の一つとして認識されつつある。しかし、DFTは基底状態(絶対0度)については厳密な理論的枠組みを与えるが、励起状態(有限温度)における物性予測の信頼性は十分ではない。しかし、現実的なマテリアルデザインのためには有限温度における物性値の見積りが不可欠である。例えば、機能性材料の典型であるスピントロニクス材料については、ハーフメタルやスピンギャップレス半導体など特異な電子状態を持つ物質が提案され、DFT計算による物質探索も行われているところであるが、磁気相転移温度(T)やスピン偏極度の温度依存性など、有限温度物性についての計算機マテリアルデザインはまだ一般的ではない。

本研究では、DFT計算の結果をモデルハミルトニアンに射影し、有限温度物性へのアプローチを試みる。具体的には、興味のある物性を表現できるモデルハミルトニアンをできるだけ一般的な形に設定し、そのモデルに含まれるパラメータを第一原理計算と矛盾ないように決定する。そして、モンテカルロ法などの統計力学的方法を用いて有限温度物性を計算する。研究代表者は、このようなアプローチを多階層連結法と呼び、スピントロニクス材料のキュリー温度計算やスピン波の計算に用いてきた。本研究では、(1) 磁気熱量効果材料の多階層連結シミュレーション、(2) ハイエントロピー合金(High Entropy Alloys: HEAs)の物性予測モデルの構築および原子配置のシミュレーション、および、(3) 固体中の希土類および遷移金属発光中心のシミュレーション、に応用し有限温度磁性など励起状態に関わる物性についての計算機マテリアルデザインについて研究を実施した。

2. 研究の目的

(1) 磁気熱量効果材料の多階層連結シミュレーション

磁性体に外部磁場を印加することで発生するエントロピー変化を温度制御に用いる「磁気冷凍」の実現に向けた物質開発が世界的に進められており、大きなエントロピー変化を望みの温度で実現する磁性体の材料探索が精力的に行われている。本研究では、多階層連結法を磁気熱量効果に適用し、典型的な磁気熱量効果材料についてシミュレーションを実施し、磁気モーメントの温度および磁場依存性の計算からエントロピー変化を算出し、実験と比較することでシミュレーションの信頼性を評価することを目的とした。

(2) HEAの物性予測モデルの構築および短距離秩序のシミュレーション

HEAは概ね5種類以上の異なる元素をほぼ等原子比で含む多元合金で、配置エントロピーが非常に高くなることから、不規則な原子配置が実現されていると期待される合金系である。構成元素を選択することで、さまざまな機能が発現することが実験的に知られており近年注目されている合金系である。構成元素の組み合わせの多さから系統的な実験研究はもちろん、第一原理計算も網羅的に行うことが難しいため、インフォマティクスのアプローチが求められている。本研究では、まずHEAの弾性特性に注目し機械学習による予測モデルの構築を実施した。次に、有限温度での原子配置のシミュレーションに多階層連結法を適用し、どのような元素の組み合わせで不規則状態が安定するのか予測することで、HEA合成についてのガイドラインとなる知見を得ることを目的とした。

(3) 固体中の希土類および遷移金属発光中心のシミュレーション

半導体や酸化物に添加された希土類および遷移金属イオンは、局在したfまたはd多電子系として振る舞い、それらの集団的な励起による特徴的な吸収や発光を示す発光中心として振る舞う。このような局在多電子系は典型的な強相関係であり、加えて励起状態を扱う必要があることからDFTは直接適用できず、計算機マテリアルデザインが適応されてこなかった物質系の一つである。本研究では、準粒子セルフコンシステントGW(Quasi-particle self-consistent GW)法と配位子場理論を結びつける多階層連結法を開発し、発光スペクトルから実験的に決定された希土類イオンのエネルギー準位図(Diekeダイアグラム)や遷移金属イオンの田辺-菅野図と比較し、有用な発光材料のマテリアルデザインに応用することを目的とした。さらに希土類金属や遷移金属を含む磁性体の磁気励起状態(スピン波)についても線形応答理論を用いることで、QSGWベースで第一原理から計算する方法を開発し典型的な強磁性体に適用することを目的とした。

3. 研究の方法

(1) 磁気熱量効果材料のシミュレーション

大きなエントロピー変化を得るためには、基本的には大きな磁気モーメントを持つ材料が必要であるが、大きな磁気モーメントの変化は T_c 近傍で発生するため、使用温度帯に近い T_c を持つ材料を探索する必要がある。一般に磁気モーメントや T_c の制御法として不純物添加や合金化が用いられるため、電子状態計算においては不規則性を取り入れた第一原理が必要となる。以上の2つの要求を満たすことができる方法として、本研究では **Korringa-Kohn-Rostoker coherent potential approximation (KKR-CPA)**法を用いた。さらに **Liechtenstein**らの方法を用いてハイゼンベルク模型を構築し、モンテカルロ法により磁気相転移の正確な見積もりを行った。本研究ではさらに、磁気熱量効果材料の構造相転移を表すポッツモデルも同時に構築し、ハイゼンベルク模型と同時にシミュレートすることで巨大磁気熱量効果を表現できるモデルを構築した[1~4]。

(2) HEA の物性予測モデル構築と原子配置のシミュレーション

典型的な不規則合金である HEA は周期性を持たないことから、並進対称性を前提とする通常のバンド計算は適用できない。そのため、この系についても磁気熱量材料の計算と同様 **KKR-CPA** 法による電子状態計算が威力を発揮する。さらに、弾性定数の計算のために本研究では小倉らによって開発されたフルポテンシャル **KKR-CPA** 法を用いた。**Sc~Cu, Y~Ag, Ta~Au** の 25 種の遷移金属元素から構成される **BCC** 構造の 5 元系 HEA から 2555 個をランダムに選び、弾性定数(B, c', c_{44})の計算を行った。次に、弾性定数(B, c', c_{44})を目的変数とし、計算データの 80% を使って線形回帰と **leave-one-out** 法による交差検証によりモデル構築を行なった。HEA の 5 つの構成元素それぞれについて、**BCC** 構造を仮定した時の B, c', c_{44} 、格子定数、族、周期、原子番号、伝導電子密度パラメータをもとに、線形独立記述子生成法 (**linearly independent descriptor generation method ; LIDG**)により回帰の記述子を生成し、遺伝的アルゴリズム(**Genetic Algorithm : GA**)により記述子の組み合わせを最適化した[5]。

CPA 法では完全に不規則な状態を仮定して配置平均をとるが、現実の HEA では原子間相互作用が完全に 0 となることはないため、温度によっては規則度が残ると考えられる。有限温度での原子配置を定量的にシミュレートするために、HEA の原子配置を 5 要素のポッツモデルで表現し原子間相互作用を、**Ducastelle** と **Gautier** により定式化された **Generalized perturbation method (GPM)**で計算した。モンテカルロ法により高温側からアニーリングを行うことで、どのような相が残存するのか評価を行った[6]。

(3) 固体中発光中心のシミュレーション

局在多電子系の電子状態は **DFT** では正確に計算することができないが、**QSGW** 法を用いることで **DFT** において通常用いられる局所密度近似を超えた交換相関ポテンシャルの計算が可能となり、強相関系についてももっともらしい電子描像を与えることができる。一方で、配位子場理論により表現された多電子系のハミルトニアン (モデルハミルトニアンと呼ぶ) に **Hartree-Fock** 近似を施すことで得られた 1 電子モデルを **QSGW** の結果と比較することでモデルハミルトニアンに含まれる電子間相互作用パラメータや配位子場定数を決定することができる。一旦、パラメータを決定すると、元のモデルハミルトニアンにもどって対角化を実施し発光中心の電子系のエネルギー準位を算出する。このようなモデル構築法を、小谷らが開発した **QSGW** 計算パッケージ **ecalj** をベースにコーディングし、希土類添加 **GaN**[7]や **Al₂O₃** 中の遷移金属イオン[8]などに適用し発光特性についての議論を行った。これに加えて、固体中の磁性イオン間の磁氣的相互作用によるスピン波のスペクトルを **QSGW** 計算に基づき計算し、上記(1)の **Liechtenstein** の方法による交換相互作用の計算結果との比較に資する知見を得た[9, 10]。

4. 研究成果

(1) 磁気熱量効果材料のシミュレーション

巨大磁気熱量効果材料として知られる **MnP**[1], **MnCoGe**[2], **FeRh**[3]、および、磁気異方性の効果が研究されている **AlFe₂**[4]について、上記の多階層連結法による磁気熱量効果のシミュレーションを行った。具体的には、モンテカルロ法により磁化の温度と外部磁場依存性 $M(H, T)$ を計算し、それから、**Maxwell** の関係式 $\Delta S(H, T) = \int_0^H \frac{\partial M(H, T)}{\partial T} dH$ により等温エントロピー変化を計算した。各系について実験で得られている磁化の温度依存性やエントロピー変化を定性的に再現することには成功したが、構造相転移温度とそれが磁氣的相互作用に及ぼす影響 (構造と磁性の結合定数) を第一原理的に決定することができず、パラメータとして実験値を再現するように決定している。このため、完全な第一原理的な予測とはなっていない点に留意すべきであり、この点において更なる理論的取り扱いの検討が望まれる。構造の相転移により磁性が急激に変化する場合に巨大熱量効果が発生する様子を定性的に捉えることには成功しており、本研究分野において一定のインパクトがあるものと考えている。

(2) HEA の物性予測モデル構築と原子配置のシミュレーション

B , c' , c_{44} およびヤング率 E について、構築したモデルによる予測値と第一原理計算の結果のプロットを図 1 に示す。モデル構築に使わなかった計算データの 20% により求めた B , c' , c_{44} 及び E 予測誤差は、それぞれ 10.2GPa, 4.5GPa, 2.4GPa, 7.7GPa となり、ニューラルネットワークによる予測モデルと同程度の精度が得られた。得られたモデルにより、低ヤング率 HEA、および高ヤング率 HEA の候補材料のスクリーニングを行った。さらに第一原理計算で得られた

電子状態密度と弾性定数の相関を調べることで、フェルミレベルでの状態密度が、 E 及び c' と負の相関を示すことが確認され構造の安定性と密接に関係していることがわかった[5]。

次に、有限温度での原子配置を GPM により得られた相互作用を用いてモンテカルロ法によりシミュレートした。

CrMnFeCoCu についての結果を図 2 に示す。Cu-Cu 間に働く強い引力的な相互作用により、Cu は 1,000K 以上の高温においても分離する傾向があることがわかった。本研究内容の範囲外となるが、機械学習などの方法により原子間相互作用を解析することで、固溶しやすい元素の組み合わせについての指針などの知見を得られる可能性があると考えている[6]。

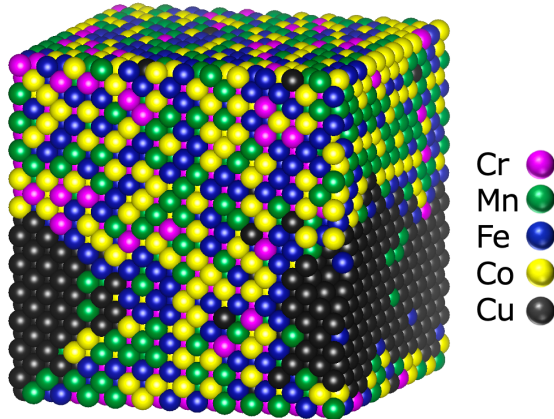


図 2: CrMnFeCoCu ハイエントロピー合金の 1000(K)でのモンテカルロシミュレーションで得られた原子配置のスナップショット[2].

(3) 固体中発光中心のシミュレーション

希土類イオンの発光特性は Dieke ダイアグラムとして実験結果が整理されており、固体中の希土類発光中心の解析に用いられている。十分大きな格子定数を与えてバンド計算を行うことで自由イオンの電子状態を計算し、モデル化を行った。その結果、図 3 に示すように Dieke ダイアグラムを定量的に再現することに成功した[7]。高エネルギー側に行くほど誤差が大きくなり精度が悪くなるが、定性的な議論は可能である。次に、赤色発光中心として知られる GaN 中の Eu^{3+} について計算を行った。まず、Eu イオン周りの格子緩和を Quantum Espresso コードを用いてみつもり、その構造をもとに ecalj パッケージによる QSGW 計算、続いてモデル化を行った。通常、希土類の 4f 軌道は強く局在しており、周りのイオンの影響(いわゆる結晶場の影響)は非常に小さいとされるが、本研究の計算により、エネルギー準位は自由イオンの時から大きく変化することがわかった。ただし、励起状態と基底状態のエネルギー差は大まかには赤色に対応するエネルギーとなっており、GaN 中の Eu^{3+} が赤色発光中心であるという実験結果とは矛盾しない[7]。

Al_2O_3 中の遷移金属イオンもよく知られた発光中心であり、宝石などの煌びやかな色の起源である。本研究で開発した方法を 3d 遷移金属についても系統的に適用し、実験的に構築されている田辺-菅野図を再現することに成功した[8]。これら 2 つの計算はどちらも励起状

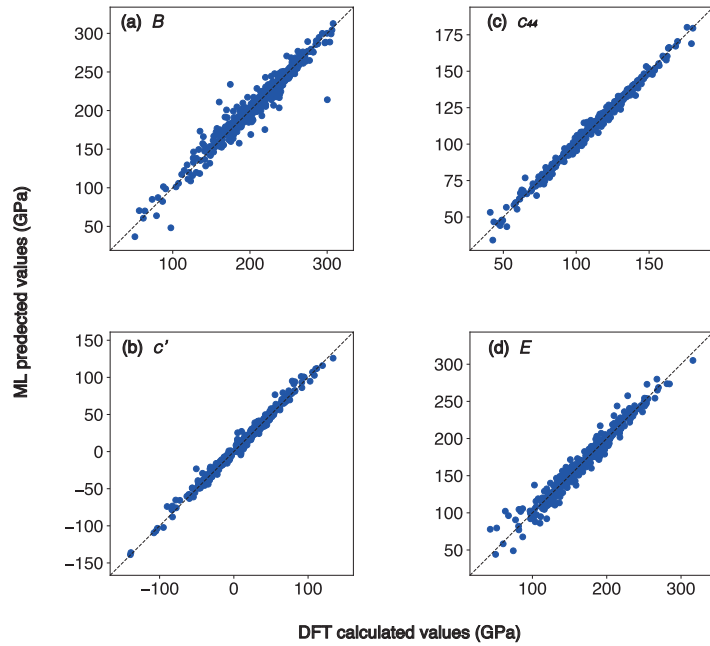


図 1: 本研究で構築した予測モデルによる弾性定数およびヤング率の予測値と第一原理計算の比較[1].

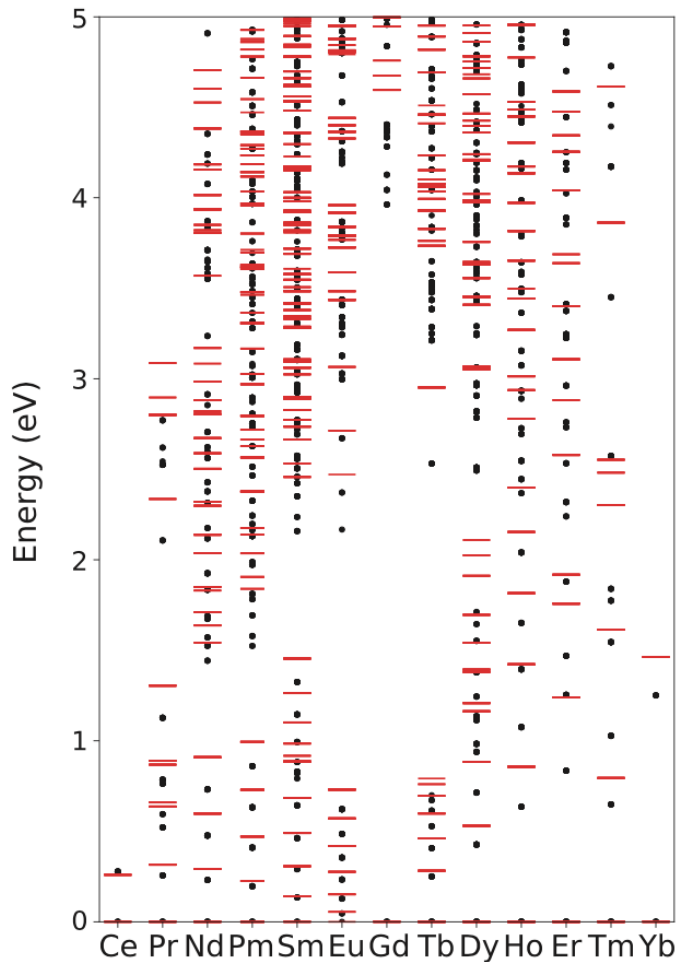


図 3: 希土類 3+イオンのエネルギー準位図。赤線 (Dieke ダイアグラム)、黒点 (QSGW 計算から得たモデルの計算結果) [7]。

態についての計算であり、これまでの DFT ベースの電子状態計算では対応できなかったものである。

上記の QSGW 計算は電子励起についての計算であるが、磁気励起 (スピン波) についても QSGW 計算の結果をモデル化することで実験をよく再現できる結果を得ている [9, 10]。このように本研究により開発した手法で、電子および磁気励起特性についてもデザインできる可能性が拓かれたことになり、計算機マテリアルデザインの新しい方向性を示す結果として大きなインパクトを持つ結果であると考えている。

[引用文献]

- [1]. H. B. Tran, T. Fukushima, H. Momida, K. Sato, Y. Makino, T. Oguchi, Theoretical prediction of large anisotropic magnetocaloric effect in MnP, *Comp. Mat. Sci.*, 188, 2021, 110227.
- [2]. H. B. Tran, T. Fukushima, K. Sato, Y. Makino, T. Oguchi, Tuning structural-transformation temperature toward giant magnetocloric effect in MnCoGe Alloy: A theoretical Study, *J. Alloys and Compounds*, 854, 2021, 157063.
- [3]. H. B. Tran, T. Fukushima, H. Momida, K. Sato, Y. Makino, T. Oguchi, Direct and inverse magnetocaloric effects in FeRh alloy, *J. Alloys and Compounds*, 926, 2022, 166718-1-8.
- [4]. H. B. Tran, H. Momida, Y. Matsushita, K. Sato, Y. Makino, K. Shirai, T. Oguchi, Effect of magnetocrystalline anisotropy on magnetocaloric properties of an AlFe B2 compound, *Phys. Rev. B* 105, 2022, 134402-1-8.
- [5]. G. Hayashi, K. Suzuki, T. Terai, H. Fujii, M. Ogura, K. Sato, Prediction model of elastic constants of BCC high-entropy alloys based on first-principles calculations and machine learning techniques, *Sci. Technol. Adv. Mat.: Methods*, 2, 2022, 381-391.
- [6]. K. Sato, G. Hayashi, K. Ogushi, S. Okabe, K. Suzuki, T. Terai, T. Fukushima, Computational Materials Design of High-Entropy Alloys Based on FPKKR-CPA Calculations and Machine Learning Techniques, *Mat. Trans.*, 64, 2023, in printing.
- [7]. K. Suzuki, T. Kotani, K. Sato, First-principles method justifying the Dieke diagram and beyond, *Phys. Rev. Res.*, 5, 2023, 013111-1-7.
- [8]. H. Saito, K. Suzuki, K. Sato, T. Kotani, Quasiparticle Self-Consistent GW Analysis of Excited States and Model Construction of 3d² Luminescent Centers in α -Aluminum Oxide, *Mat. Trans.*, 64, 2023, in printing.
- [9]. H. Okumura, K. Sato, K. Suzuki, T. Kotani, Electronic Structure and Spin-wave Dispersion of Cu₂MnAl, Ni₂MnSn, Pd₂MnSn based on Quasi-particle Self-consistent GW calculations, *J. Phys. Soc. Jpn.* 89, 2020, 034704.
- [10]. H. Okumura, K. Sato, T. Kotani, Nonlinear Extension of the Dynamical Linear Response of Spin: Extended Heisenberg Model, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 90, 2021, 094710.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 15件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Okumura Haruki, Sato Kazunori, Kotani Takao	4. 巻 90
2. 論文標題 Nonlinear Extension of the Dynamical Linear Response of Spin: Extended Heisenberg Model	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 094710-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.094710	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 091007-1-4
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 Tran Hung Ba, Fukushima Tetsuya, Momida Hiroyoshi, Sato Kazunori, Makino Yukihiro, Oguchi Tamio	4. 巻 188
2. 論文標題 Theoretical prediction of large anisotropic magnetocaloric effect in MnP	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 110227
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2020.110227	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 Tran Hung Ba, Fukushima Tetsuya, Sato Kazunori, Makino Yukihiro, Oguchi Tamio	4. 巻 854
2. 論文標題 Tuning structural-transformation temperature toward giant magnetocaloric effect in MnCoGe alloy: A theoretical study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 157063-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2020.157063	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 Okumura Haruki, Sato Kazunori, Suzuki Katsuhiko, Kotani Takao	4. 巻 89
2. 論文標題 Electronic Structure and Spin-wave Dispersion of Cu ₂ MnAl, Ni ₂ MnSn, and Pd ₂ MnSn Based on Quasi-particle Self-consistent GW Calculations	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 034704-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.034704	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 025216-1-4
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 083901-1-7
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 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 Co ₂ MnSi	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 042402-1-5
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 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 485803-1-6
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 Suzuki Katsuhiro, Kotani Takao, Sato Kazunori	4. 巻 5
2. 論文標題 First-principles method justifying the Dieke diagram and beyond	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 013111-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.5.013111	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 Tran Hung Ba, Fukushima Tetsuya, Momida Hiroyoshi, Sato Kazunori, Makino Yukihiro, Oguchi Tamio	4. 巻 926
2. 論文標題 Direct and inverse magnetocaloric effects in FeRh alloy	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 166718 ~ 166718
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2022.166718	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 Hayashi G., Suzuki K., Terai T., Fujii H., Ogura M., Sato K.	4. 巻 2
2. 論文標題 Prediction model of elastic constants of BCC high-entropy alloys based on first-principles calculations and machine learning techniques	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 381 ~ 391
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2022.2125853	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 Tran Hung Ba, Momida Hiroyoshi, Matsushita Yu-ichiro, Sato Kazunori, Makino Yukihiro, Shirai Koun, Oguchi Tamio	4. 巻 105
2. 論文標題 Effect of magnetocrystalline anisotropy on magnetocaloric properties of AlFe ₂ B ₂ compound	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134402-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.134402	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 K. Sato, G. Hayashi, K. Ogushi, S. Okabe, K. Suzuki, T. Terai, T. Fukushima	4. 巻 64
2. 論文標題 Computational Materials Design of High-Entropy Alloys Based on FPKKR-CPA Calculations and Machine Learning Techniques	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Mat. Trans.	6. 最初と最後の頁 in printing
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 -

1. 著者名 H. Saito, K. Suzuki, K. Sato, T. Kotani	4. 巻 64
2. 論文標題 Quasiparticle Self-Consistent GW Analysis of Excited States and Model Construction of 3d ² Luminescent Centers in γ -Aluminum Oxide	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Mat. Trans.	6. 最初と最後の頁 in printing
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 -

〔学会発表〕 計24件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 鈴木雄大、齋藤悠宇、佐藤和則、榊原寛史、小谷岳生
2. 発表標題 QSGW 法に基づく物質中局在 Eu イオンの励起状態解析
3. 学会等名 日本金属学会秋季講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 林源太、鈴木雄大、藤井将、佐藤和則
2. 発表標題 遺伝的アルゴリズムを用いたハイエントロピー合金の弾性定数予測モデルの最適化
3. 学会等名 日本金属学会秋季講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岡部修一、鈴木雄大、寺井智之、佐藤和則
2. 発表標題 局所磁気モーメント不規則モデルを用いたインパー合金の熱膨張係数の温度依存性の計算
3. 学会等名 日本金属学会秋季講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 齋藤悠宇、鈴木雄大、佐藤和則、榊原寛史、小谷岳生
2. 発表標題 QSGW法を用いた物質中遷移金属不純物のモデル構築と励起状態の解析
3. 学会等名 日本金属学会秋季講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 H. Saito, K. Suzuki, K. Sato, S. Hirofumi and T. Kotani
2. 発表標題 QSGW analysis for excited states and model construction of 3d transition metal ions in Al ₂ O ₃
3. 学会等名 第31回日本MRS年次大会 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Genta Hayashi, Katsuhiro Suzuki, Tomoyuki Terai, Kazunori Sato
2. 発表標題 Optimization of prediction model for elastic constants of high entropy alloys by using LIDG method
3. 学会等名 APS March meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tien Quang Nguyen, Ngoc Nam Ho, Katsuhiro Suzuki, Akira Masago, Hikari Shinya, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato
2. 発表標題 Theoretical Investigation on the Effect of Transition-Metal Doping on Seebeck Coefficient of SiGe Alloy
3. 学会等名 APS March meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Katsuhiro Suzuki, Hirofumi Sakakibara, Takao Kotani, Kazunori Sato
2. 発表標題 Model analysis of multiplet excitation of RE ions using QSGW
3. 学会等名 APS March meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木雄大、佐藤和則、小谷岳生
2. 発表標題 QSGW法に基づいた局在f軌道の高極子励起解析
3. 学会等名 2022年第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 奥村晴紀、小谷岳生、佐藤和則
2. 発表標題 QSGW法に基づく強磁性金属ホイスラー合金のスピนว波計算
3. 学会等名 Spin-RNJ若手オンライン研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 H. Okumura, K. Sato, K. Suzuki, T. Kotani
2. 発表標題 Spin-wave dispersion of $\text{Co}_2\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ based on the quasi-particle self-consistent GW calculation
3. 学会等名 第25回半導体におけるスピ工学の基礎と応用 (Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors: PASPS25)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 H. Shinya, S. Kou, T. Fukushima, A. Masago, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, H. Akai
2. 発表標題 First-principles approach for finite temperature electronic structures and transport properties of Heusler alloy Co_2MnSi
3. 学会等名 第25回半導体におけるスピ工学の基礎と応用 (Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors: PASPS25)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤和則
2. 発表標題 QSGW法による岩塩型希土類窒化物の電子状態と磁性
3. 学会等名 スピンと軌道の理論研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 奥村晴紀、小谷岳生、佐藤和則
2. 発表標題 スピンゆらぎ計算
3. 学会等名 スピンと軌道の理論研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 新屋ひかり、高成柱、福島鉄也、真砂啓、佐藤和則、吉田博、赤井久純
2. 発表標題 KKRグリーン関数法を用いたホイスラー合金の有限温度における電子状態と伝導特性の計算
3. 学会等名 スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク拠点(Spin-RNJ)シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木雄大、佐藤和則、榊原寛史、小谷岳生
2. 発表標題 QSGW法を用いた物質中のEuイオンの励起状態の解析
3. 学会等名 日本金属学会2021年春季講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 齋藤悠宇、鈴木雄大、佐藤和則、小谷岳生
2. 発表標題 QSGW法による α -Al ₂ O ₃ 中遷移金属発光中心の系統的なモデル構築と励起状態の解析
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 齋藤悠宇、鈴木雄大、佐藤和則、小谷岳生
2. 発表標題 QSGW法による物質中Cr ³⁺ の励起状態解析と近赤外蛍光体の探索
3. 学会等名 日本金属学会2023年春季講演大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大串一真、鈴木雄大、寺井智之、佐藤和則
2. 発表標題 ハイエントロピー合金中短距離秩序の第一原理シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木雄大、佐藤和則、小谷岳生
2. 発表標題 QSGW法による希土類f軌道多重項励起の第一原理解析
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Suzuki, K. Sato, T. Kotani
2. 発表標題 The first-principles analysis of Multiplet excitations using QSGW
3. 学会等名 International Symposium on Frontiers in Materials Science (FMS2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Saito, K. Suzuki, K. Sato, T. Kotani
2. 発表標題 Systematic QSGW analysis of excited states and model construction of 3d transition metal luminescent centers in alpha-Al2O3
3. 学会等名 International Symposium on Frontiers in Materials Science (FMS2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Sato, G. Hayashi, K. Ogushi, S. Okabe, K. Suzuki, T. Terai, H. Fujii, M. Ogura
2. 発表標題 Computational materials design of high-entropy alloys based on FP-LMTO-CPA calculations and machine learning techniques
3. 学会等名 International Symposium on Frontiers in Materials Science (FMS2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Saito, K. Suzuki, K. Sato, T. Kotani
2. 発表標題 Systematic QSGW analysis of excited states and model construction of Cr ³⁺ luminescent centers in substances
3. 学会等名 第32回日本MRS年次大会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 吉田博、白井正文、赤井久純、浜田典昭、小田竜樹、中村浩次、神吉輝夫、佐藤和則、真砂啓、福島鉄也、新屋ひかり、三浦良雄、大戸達彦、阿部英介	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	

〔産業財産権〕

〔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
---------	---------