

令和２年度高性能汎用計算機高度利用事業
「富岳」成果創出加速プログラム
「大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発」
成果報告書

令和３年５月２８日
国立研究開発法人産業技術総合研究所

三宅 隆

目次

1. 補助事業の目的	- 2 -
2. 令和2年度（報告年度）の実施内容	- 2 -
2－1. 当該年度（令和2年度）の事業実施計画	- 2 -
2－2. 実施内容（成果）	- 3 -
2－3. 活動（研究会の活動等）	- 24 -
2－4. 実施体制	- 25 -
2－5. 学会等発表実績	- 27 -

補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

「大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発」

1. 補助事業の目的

大規模第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクス手法により、利用環境に応じた最適な特性を持つ高性能磁石の設計技術を確立するとともに、ポスト「京」重点課題プロジェクトで開発したアプリケーションの維持・普及活動を行うことを目的とする。

2. 令和2年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和2年度）の事業実施計画

（1）シミュレーションとデータ駆動手法による永久磁石研究

大規模第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクスによる磁石研究の一環として、令和2年度は次の研究課題に取り組む。

- (i) 希土類磁石界面の第一原理計算を実行する。典型的な永久磁石界面の密度汎関数理論計算を行い、界面近傍の原子スケールの磁気物性値を算出する。
- (ii) 磁石化合物に適用可能な第一原理計算の自動化技術を開発する。これを遷移金属化合物に適用し、安定構造の候補を提示する。
- (iii) 磁性体の系統的な第一原理計算を実行し、磁気モーメント等のデータを蓄積する。第一原理計算の結果に基づいた磁化反転シミュレーションを実行し、結晶粒の保磁力を求める。
- (iv) 鉄基化合物の結晶構造探索を行う。その結果を踏まえ、高鉄濃度希土類化合物を対象として化学組成を変えた第一原理計算を実行し、組成に対する磁性と安定性のマップを作成する。
- (v) データ駆動手法により、構造や構成元素と磁性の相関を調べる。第一原理計算や実験・計測データをデータマイニングすることにより、磁性に関する構造や構成元素の要因抽出を行う。

なお、国立研究開発法人物質・材料研究機構、国立大学法人東京工業大学、国立大学法人東京大学大学院総合文化研究科、国立大学法人東京大学物性研究所とは、委託契約を結んで推進する。

（2）アプリケーションの普及

「MateriApps」の運用、改善を行い、アプリケーションの効率的な開発および活用を促す。また、CMD Workshop 等のイベントを開催し、アプリケーションの普及を図る。

なお、国立大学法人東京大学物性研究所、国立大学法人大阪大学とは、委託契約を結んで推進する。

(3) プロジェクトの全体推進

本事業を効率的かつ効果的に推進するため、プロジェクト推進会議を適宜開催し、参画各機関の連携・調整を実施する。具体的にはプロジェクト全体の管理・調整業務、全サブテーマに共通的な課題の推進支援業務を行う。

2-2. 実施内容（成果）

(1) シミュレーションとデータ駆動手法による永久磁石研究

- (i) 希土類磁石界面の第一原理計算を実行する。典型的な永久磁石界面の密度汎関数理論計算を行い、界面近傍の原子スケールの磁気物性値を算出する。

協力機関（再委託先）：国立大学法人東京工業大学、協力機関代表者：合田義弘

（総括）

希土類磁石界面の第一原理計算を実行した。典型的な永久磁石界面の密度汎関数理論計算を行い、界面近傍の原子スケールの磁気物性値を算出した。その結果、界面の面指数および界面原子配置の詳細に、界面 Nd-4f 電子による結晶磁気異方性が大きく影響を受けることが明らかとなった。特に、平均した振る舞いでは (001) 界面では垂直磁気異方性が弱まり、(100) 界面では垂直磁気異方性が増強された。また、当初は絶対零度の計算のみを計画していたが、有限温度磁性の記述をより精緻化するために、磁性に依存したフォノンの効果を考慮した、新しい自由エネルギー評価手法の開発を追加で実施した。開発した手法を bcc Fe に適用した結果、磁性に依存したフォノンから磁性へのフィードバック効果により、bcc Fe のキュリー温度は 500 K 以上低下することが明らかとなった。

（実施・検討内容）

(a) ネオジム磁石界面の第一原理計算

主にネオジム磁石界面をターゲットとし、複数の主相面が露出した非平坦な界面の局所磁気特性を副相が NdFe 合金である場合に対して明らかにするために、スーパーコンピュータ「富岳」・TSUBAME・北大スパコンなどを用いた大規模第一原理計算を実行した。図 1 に示す界面構造に対し、OpenMX による電子状態計算を実行したが、オーダー N アルゴリズムのみならず、磁気特性の評価のためには通常オーダー N^3 アルゴリズムも実行する必要がある、メモリの確保に工夫を要することが分かった。本年度は、磁気モーメントと交換結合定数の評価に成功した。通常鉄原子同士の距離が近いほど交換結合は大きくなるが、今回の計算ではそうならない非自明な結果が得られた。

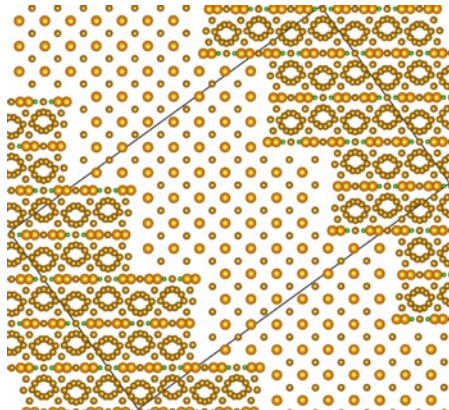


図 1:ネオジウム磁石主相(001)面および(100)面により構成されるジグザグ界面の原子配置。

(b) フォノンから磁性へのフィードバック効果

従来では系統的な評価の難しかったマグノン・非調和格子振動・およびそれらの相互作用など、有限温度特性の第一原理的評価により、永久磁石材料組織・マルチフェロイク界面・磁気冷凍材料などの理論設計を目指し、2020 年度はフォノンの自由エネルギーと磁気的自由エネルギーの和を最小化することにより、磁性に依存したフォノンによる磁性へのフィードバック効果を定量化した[T. Tanaka and Y. Gohda, npj Comput. Mater. **6**, 184 (2020).]. フォノンの自由エネルギーへの寄与は磁性によるものよりも常に遥かに大きいため、このフィードバック効果は間接的な効果であるにもかかわらず、図 2 に示す通り bcc Fe の Curie 温度を 500 K 以上も変化させることが分かった。また、磁性とフォノン振動数との相関における結晶構造依存性を「交換配位子場」という概念を導入することにより説明した[T. Tanaka and Y. Gohda, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 093705 (2020).].

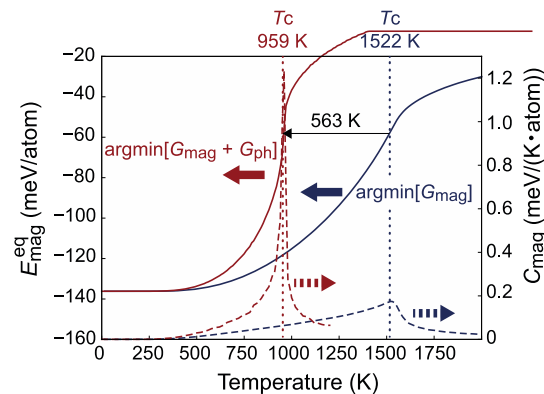


図 2：開発した自由エネルギー評価手法を bcc Fe に適用して得られた、自由エネルギーを最小化する磁気エネルギーとその温度微分から得られる磁気比熱。[T. Tanaka and Y. Gohda, npj Comput. Mater. **6**, 184 (2020). Copyright (2020) The Authors.]

(c) Sm-Fe-Cu-Co-Ti 系の熱力学データ

磁石材料の材料組織設計において、原子スケールでの異相界面における局所磁気特性を明らかにすることは重要であるが、それと相補的にマクロスコピックな相平衡の知見を得ることも非常に重要である。これまでに 1-12 系磁石の副相候補として検討した SmCu 化合物は、Sm-Fe-Cu 状態図中に平衡相として存在する、との知見が得られていた。ただし、これまでの検討は 3 元系に対するものであり、そこでは 2-17 系と本来平衡すべきであるところ、その効果を取り去って 1-12 系との相平衡を議論していた。そこで本年度は、1-12 系磁石副相候補化合物に対する 1-12 系との相平衡を明らかにするために、Sm-Fe-Cu-Co-Ti 系状態図作成のための熱力学データを第一原理計算により整備した。具体的には Calphad 法における過剰 Gibbs 自由エネルギー項を混合エンタルピーで近似し、それを第一原理計算により求めた。その結果得られた Sm-Fe-Ti 状態図を図 3 に示す。Co 添加は 1-12 相の安定化に寄与しない一方で、Ti 添加により状態図に $\text{SmFe}_{11}\text{Ti}$ 相と Fe_2Ti 相が安定相として現れた。この結果は $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ 相、 $\text{SmFe}_{11}\text{Ti}$ 相、SmCu 相、 Fe_2Ti 相の 4 相平衡の実験結果と矛盾せず、SmCu が液相焼結における有望な非磁性粒界相の候補となることが明らかとなった。

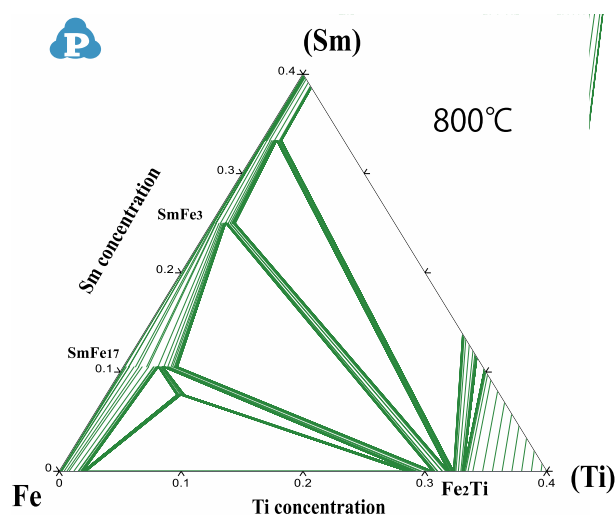


図 3：第一原理計算による混合エンタルピーのデータを用いて得られた Sm-Fe-Ti の 3 元系 Calphad 状態図。

(d) Nd-Fe-Dy アモルファス相の磁性

ネオジム磁石の中でも、Dy 含有磁石での副相の振る舞いが Dy を含まない磁石と比較してどうなっているかは明らかになっていない。そこで本年度は、Nd-Fe-Dy アモルファス相の磁性を第一原理計算により検討した。粒界相に Dy を含むと磁化がどのように変化するかを調べたところ、図 4 に示す様に Dy の添加に伴って磁化が減少した。

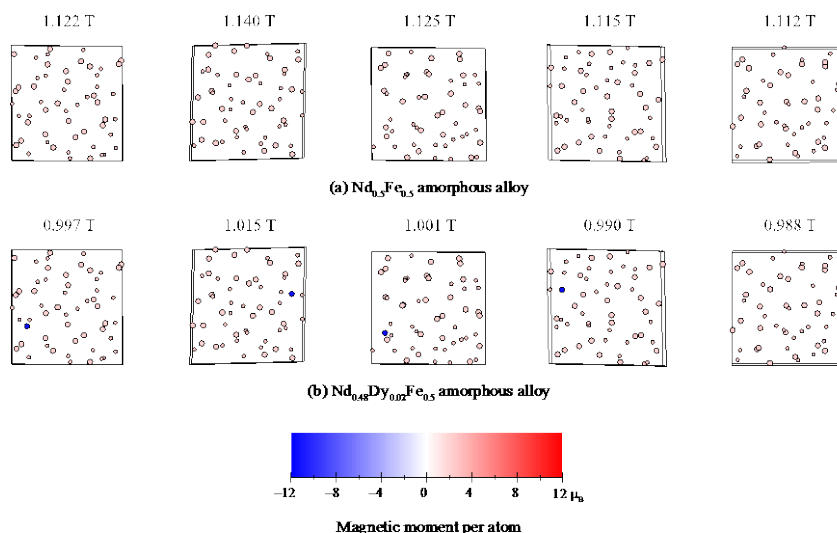


図 4：第一原理計算により計算した Nd-Fe-Dy アモルファス 合金の磁化。アモルファス構造は一意に決まらないためそれぞれの組成に対し 5 種類ずつ構造をサンプルしている。

(ii) 磁石化合物に適用可能な第一原理計算の自動化技術を開発する。これを遷移金属化合物に適用し、安定構造の候補を提示する。

協力機関（再委託先）：国立研究開発法人物質・材料研究機構(NIMS)、協力機関代表者：木野日織

（総括）

磁石化合物に適用可能な第一原理計算の自動化技術として、ワークフローと機能分解統合理論を開発した。また、第一原理計算の自動化技術に伴う膨大なデータの機械学習による解析のためにサブグループレバンス解析法の可視化プログラムを作成し公開した。さらに、遷移金属化合物の安定構造を進化論的アルゴリズムにより探索した。その結果、YFe₁₂斜方晶系の安定構造の候補とその物性を提示した。有限温度のゆらぎの効果を取り入れた安定性評価計算を遷移金属化合物に適用し、鉄基希土類化合物の有限温度安定性を評価した。

（実施・検討内容）

(a) 第一原理計算を用いた進化論的アルゴリズムによる新規 YFe₁₂構造の予測

NIMS により初めて合成された ThMn₁₂構造の RFe₁₂磁石は鉄の割合が多いことから、高性能な磁性特性を持つことが期待されているが、一方、薄膜での合成しか成功していない。このため既存の RFe₁₂磁石をより安定化し、バルクで合成できるような元素置換研究が行われてきた。

異なる方向性としては化学式 RFe₁₂でも別の結晶構造を取る可能性があり、具体的に YFe₁₂の安定した

結晶構造を、独自開発した進化論的アルゴリズムと絶対零度の第一原理計算に基づく結晶構造予測手法を用いて理論計算プログラムにより探索した。その結果、2つの単斜晶が新規準安定相として発見された。これらの2つの構造では全磁化は $25.6 \mu\text{B/f.u.}$ から $26.8 \mu\text{B/f.u.}$ に増加し ThMn_{12} 構造よりも磁氣的に優れていることが分かった。

進化論的アルゴリズムは結晶構造と結晶内原子位置をスラブ場に切り張りする mating と、格子変位と原子位置置き換えを行う mutation と、更に、これらによって荒く作成された構造を第一原理計算により構造最適化し上位にランクづけされる安定構造を選択する世代交代、という過程を繰り返すことにより新規安定構造を求める手法であり、世界的にも最も多くの新規構造を発見している実績のある手法である。

ThMn_{12} 構造は薄膜実験での生成が知られている $I4/mmm$ 構造が最も安定であるが、今回計算機内で発見した2つの構造はどちらも単斜晶 $C2/m$ 構造であり、 ThMn_{12} 構造に比べて単位格子で約 40meV 程度全エネルギーが高い。

更に、これらの構造のキュリー温度を平均場近似法で計算し Fe, Co 合金時の物性を調べて、磁気相転移温度が 792K から 940K まで上昇することを示した。例えば、最良値である ThMn_{12} 構造での $\text{Y}(\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1})_{12}$ で単位格子あたり全磁化 = $25.2 \mu\text{B}$ で、磁気相転移温度 1042 K であるが、単斜晶 $\text{Y}(\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2})_{12}$ では $25.0 \mu\text{B}$ 、磁気相転移温度は 1123 K に上昇することが分かり、構造的な異方性もあり、磁石の母物性としては ThMn_{12} を凌ぐ可能性が十分にあることを示した。更に、磁気相転移温度上昇の原因も解析し、主に $2.3\sim 3.1\text{\AA}$ の距離にあるサイト間磁気結合の増加によるものであることが分かり、結晶構造生成時の知見とすることができると期待される。

磁石の副相には具体的な構造が分かっている結晶構造が含まれていることは知られており、構造探索の必要性は理解されていたが、具体的な計算機による探索は磁性の計算の困難さもありほぼされてこなかった。今回、進化論的アルゴリズムで、結果的に新規構造を発見することができた点は手法適用の有用性を、磁性物質においても具体的に示すことができ、今後更なる適用により多くの物質発見が期待される大きな進歩である。

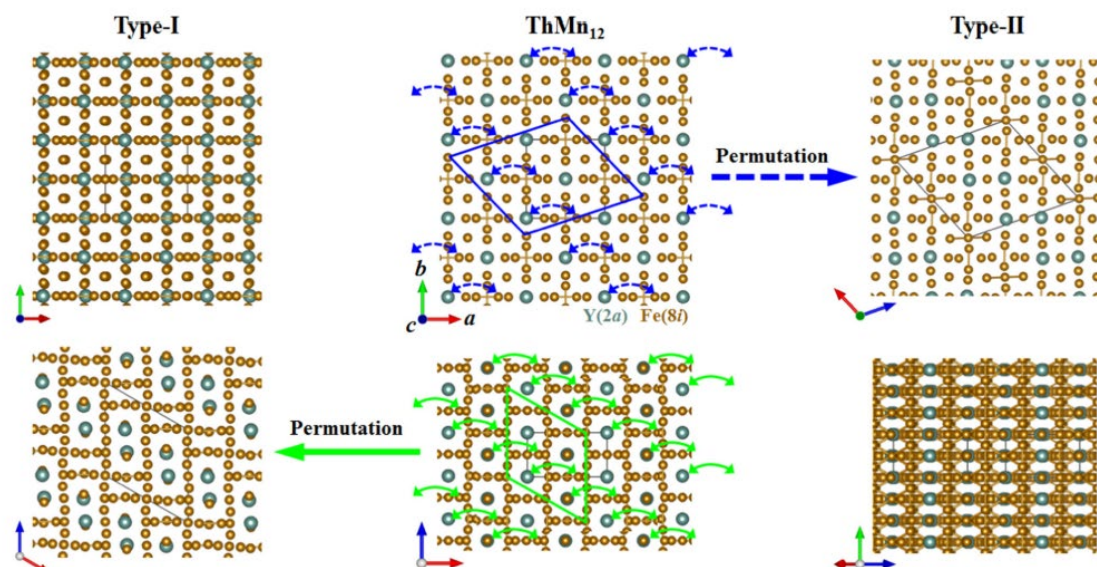


図5：既知 ThMn_{12} 構造と今回新規発見した Type-I, Type-II 構造との関係を示す。

(b) 第一原理計算を元にした有限温度効果を取り入れた安定性の評価

従来手法の絶対零度 0K における静的な DFT エネルギーのみを用いている方法では実験の有限温度相図を予測できないことがよく知られている。この問題を解決するために、具体的に電子および格子の振動自由エネルギーを含むエントロピーの寄与を考慮し、 $R_{1-x}Fe_x$ ($0 < x < 1$) (R: 希土類元素 (Dy, Y, Sm, Nd, Ce) の二元系化合物の格子振動計算による動的および、有限温度の電子及び、格子振動エントロピーを含めた理論計算により熱力学的安定性評価を行った。

更にハルプロットを作成することで、様々な既知の化合物の熱力学的安定性をうまく説明することができる。今回の計算では、1-2 系、1-3 系、1-5 系、2-17 系、6-23 系、3-29 系などの様々な物質を $R_{1-x}Fe_x$ の範囲で網羅計算し有限温度安定性を評価している。評価した物質数は、それぞれの R に対して 9 構造である。図 6 にハルプロットを示す。今回の研究は世界で始めて系統的に $R_{1-x}Fe_x$ の有限温度安定性を評価した計算である。

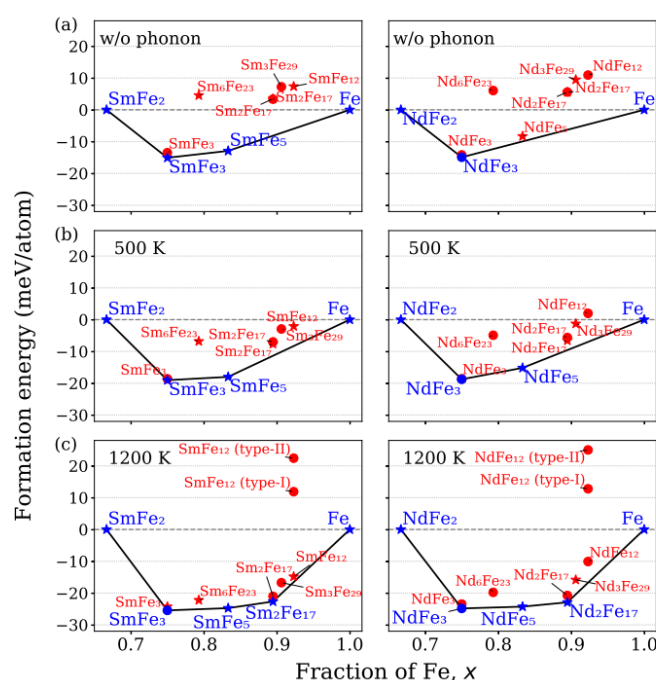


図 6 : Sm-Fe の SmFe2 に対する、Nd-Fe の NdFe2 に対するハルプロットを示す。高温（下）になると 2-17 構造が安定になる。

この結果、例えば、実験的に安定な存在が報告されているが絶対零度の第一原理計算では準安定とされてきた R_2Fe_{17} 化合物は、約 800K 以上で熱力学的に安定になることが有限温度のエントロピー効果を取り入れた計算により予測できることが初めて示された。このように、有限温度効果を取り入れることにより、有限温度相図を第一原理計算で、実験由来のパラメータ無しに実験相図と同程度に定量的に評価できるようになったことは大きな進歩である。

また、今回の理論計算では、実験的に報告されている構造以外にも、最近石河らによって本プロジェクトで発見された 2 つの新しい単斜晶 RFe_{12} 構造の安定性を調べている。石河らが進化論的アルゴリズムで計算機内で発見した単斜晶 RFe_{12} 構造は格子振動を調べることで動的に安定であることが分かった。また、この構造は、絶対零度で準安定であることが石河らにより示されていた。今回の計算では、有限

温度の安定性をハルプロットにより、評価することで、単斜晶 $R\text{Fe}_{12}$ 構造は熱力学的には不安定であるが、温度を上げると生成エネルギーが大幅に減少することから、これらの化合物を高温で合成できる可能性があることも示すことができた。単斜晶 $R\text{Fe}_{12}$ 構造は全磁化が ThMn_{12} 構造より高いことから、実験での検証が待たれる。

更に自由エネルギーの寄与を評価して有限温度効果のうち、格子振動エントロピーが様々な $R_{1-x}\text{Fe}_x$ 化合物の安定化に主として役立つことが分かった。また、 R を変換させ、系統的に評価することで、 $R_{1-x}\text{Fe}_x$ 熱力学的安定性がレアアースの原子半径に依存していることを示すことができた (図 7)。絶対零度ではすでに報告されているが、有限温度でもレアアースの原子半径に対してなめらかに生成エネルギーが変化し、原子半径が小さい Dy、Y の方が原子半径の大きな Sm、Nd、Ce より安定になることも理論計算で評価できた。これにより、鉄を含む磁化が高い安定な磁性物質の生成には第三、第四元素が重要であることが分かった。

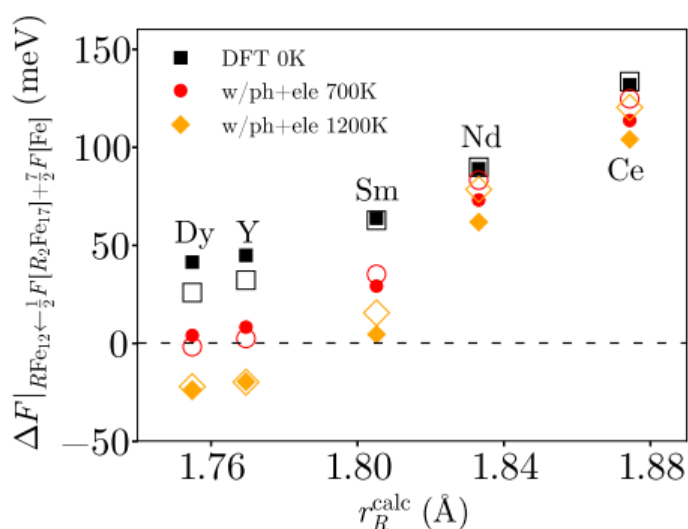


図 7：原子半径に対する Dy、Sm、Nd、Ce 化合物の安定性を示す。高温になるほどより安定になる傾向があることが分かる。

(c) 第一原理計算を用いた進化論的アルゴリズムによるコバルトを多く含む新規 Y-Co-B 構造予測

成果 (b) で、2 元素から成る磁石は安定構造の周りではもう探索し尽くされた感があり、また、その物性も計算機内で定量的に予測が可能となっている。更なる磁石関連物質探索には第三元素の添加による新規磁石母相探索が必須である。また、主として希土類遷移金属元素からなる磁石母相において、遷移元素を多く含む合金では大きな磁化が得られることが期待される。我々は、(a) で新規磁石母相候補を得て有用性が証明された、第一原理計算に基づく進化的探索スキームを Y-Co-B 系に適用した。更に (b) の手法を組み合わせた、格子振動に関して安定な 37 種類のコバルト化合物を計算機内で発見することができた。

特に、顕著にコバルトに富む化合物である P1bar 対称性の YCo_{16} と C2/m 対称性の YCo_{20} について、詳しく解析を行うと、全磁化は単位格子あたり Y_2Co_{12} で $1.354 \mu\text{B}$ 、磁気相転移温度 1174 K に対して、 YCo_{16}

は $1.505 \mu\text{B}$ 、 1378 K 、 YCo_{20} は $1.555 \mu\text{B}$ 、 1378K であり、良好な磁気特性を示す。更に同構造で Fe 置換を行うと Y_2Fe_{17} で $1.979 \mu\text{B}$ 、 720K 、 YFe_{16} で $2.93 \mu\text{B}$ 、 719K 、 YFe_{20} で $2.053 \mu\text{B}$ 、 434K が得られた。

ハルプロットによると絶対零度ではこれらは Y_2Co_{17} と Co に相分離する。更に、これらの相の有限温度での安定性を調べた (図 8)。これらは有限温度でも準安定相であることは変わらないが、(b) と同様な振動エントロピーの寄与により、温度の上昇とともに相の安定性が増すことを計算により予測することができた。磁石関連物質の探索手法、有限温度効果をほぼ完成されることができ、両者の連携も行うことができたことは、計算機による理論的な磁石研究の大きな進歩である。

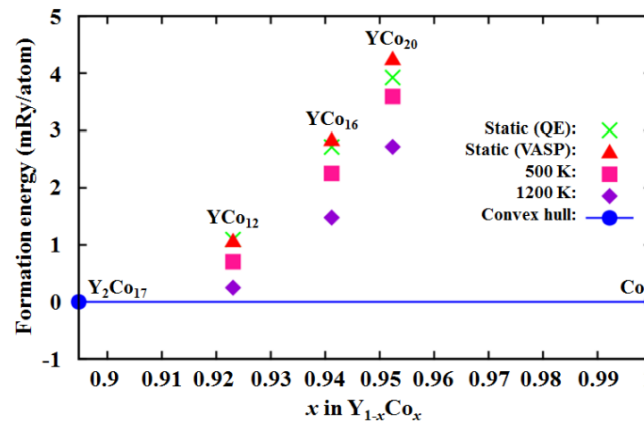


図 8: Y_2Co_{17} に対するコバルトを含む合金の有限温度安定性を示す。両端の物質以外は準安定であることを示すが、高温になるほど生成エネルギー差が小さくなる。

(d) 第一原理計算を自動化するツールの作成

大規模第一原理計算を行う際には「富岳」など HPCI の計算機を使用し、一方、データをまとめる計算機はデータベースなどを使用することがあり、第一原理計算を行う計算機と別であることが多い。多くの過程ではデータをまとめる計算機が第一原理計算のための入力を生成し、それを大規模第一原理計算を行う計算機に人間がログインして移動させ、バッチキューとして計算を行い、計算が実行できたか、成功して終了かどうかを人間が大規模第一原理計算を行う計算機にログインして判断し、成功した計算結果を人間がデータをまとめる計算機に再度移動させて、再び解析を行う。この部分が人間にとってもっとも面倒で律速段階である。大規模第一原理計算を行う計算機への移動、実行、取得を簡便化するための自動化するツールを試作した。

(e) 自動計算によるハイエントロピー合金の網羅自動計算と物性量評価

高強度物質として知られる固溶状態相であるハイエントロピー合金は 3d 遷移金属元素などを含む場合に磁性を持つ可能性がある。構造がほぼ BCC もしくは FCC であることから磁性を持つ場合は柔磁性になり、高い異方性や大きな保持力を持つ Nd 磁石とは別の用途が存在する。また、ハイエントロピー合金は様々な元素が混じった合金であり、単結晶として原理的に大きな電気抵抗を持つことも期待され、現在フェライトが担っている柔磁石材料の代価磁石となりうる。

四元等比ハイエントロピー合金の物性評価を用いて行った。固溶状態相では原子位置の長距離秩序はあるが、各元素はランダムに分布する。このため、VASP などの計算では非常に大きな周期格子を作成して計算が行われるため簡単な物質にも関わらず高速な物性値評価ができない。この困難を回避する方法にコヒーレントポテンシャル近似がある。これは構成元素の不規則性をグリーン関数の自己エネルギーとして混ぜる手法であり、Green 関数の不規則性由来の虚数部分の評価も行うことが可能である。これを実装する Green 関数法を用いた KKR 法の手法の自動化を行う際の困難なところは、価電子数を評価するエネルギー積分下限値を入力としなければならない点である。更に、このエネルギー積分下限値はバンドギャップ内にある必要があり、また、物質ごとに変化する値であり、更に、一度収束計算をしなければその値は分からない。主としてこの自動化を行い、KKR 法の網羅自動計算を実現した。

KKR 法は磁性の評価も可能であるのみならず、Green 関数法であることからリヒテンシュタインの方法による原子間磁気相互作用の評価をそのまま行うことが可能である。この評価を通じてスピンハミルトニアンを作成し、磁気相転移温度を評価することができる。また、ハイエントロピー合金の元素不規則性による Green 関数の虚数部分の評価することが可能であり、久保グリーンウツの公式を用いて有限の残留電気伝導率の計算が可能である。4f 系を除いて金属元素を中心に 38 元素の組み合わせによる四元等比ハイエントロピー合金の BCC 構造、FCC 構造それぞれに対して、7 万個、合計 14 万個の物質質量計算を行った(図 9)。

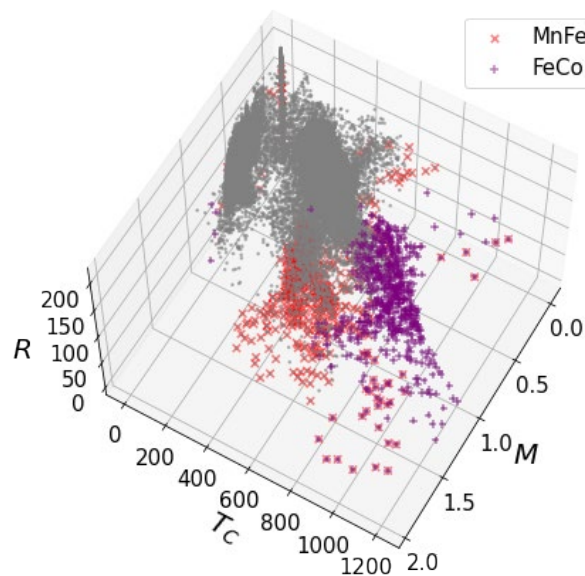


図 9: 全磁化(M)、磁気相転移温度(T_c)、残留磁気抵抗(R)の 3 次元空間で BCC 相 7 万個の表示 (灰色) を行った。
MnFe (赤色)、FeCo (紫色) 元素を含む物質群を特に示す。

これらの結晶体積に関しては各元素の実験平均体積の平均から評価した。この結晶体積から計算される BCC 構造と FCC 構造のエネルギー差を用いて、95%の正確性で 4 元ハイエントロピー合金の実験での

BCC、FCC を分類することが可能であり、ある程度の妥当性があることが分かる。

現状、結晶全磁化について妥当な回帰予測モデルを作成することは困難である。一方、磁気相転移温度はある程度妥当な回帰予測モデルの作成ができ、残留電気抵抗率は $R^2 > 0.9$ の回帰モデル作成ができることが分かった。また、残留電気抵抗率の回帰モデルでは元素周期律表の列グループの重要性が高く、元素周期律表の列グループに対して $R^2 = 0.8$ 以上の予測モデル作成が可能である。更に、個別に MnFeCoX 系列で X を変えて残留電気抵抗率を表示すると周期律表の行方向はほぼ同じ値を持つが、列方向に大きく変化することが読み取れ、回帰から分かる全体の傾向でなく MnFeCoX などの X を変えた場合の変化も理解できることが分かる。磁気相転移温度と残留電気抵抗率はある程度妥当な回帰予測モデルが作成できることから、目標領域を約 800K-1000K の磁気相転移温度、電気抵抗率を約 $75\text{--}110\ \mu\ \Omega\text{cm}$ として目的領域を設定し多目的ベイズ最適化を行った (図 10)。3d 遷移金属元素が重要であることは物性の知識があれば分かるが、その知識を用いずに最適化を行い、約 230 回で目的領域の物性を持つ元素組み合わせを発見できることが分かった。これは物質組み合わせ数 7 万の 0.3% である。高い磁気相転移温度を持つため、3d 遷移金属元素を必ず含むという条件をつければ、更に少ない回数で目的変数領域に達することが可能であることも分かり、実験での検証の具体的な回数の評価も行うことができた。無機及び金属系結晶は有機分子系に比べると実験コストが高く、探索が進まない物質系が多いが、物性量の計算を含めた自動計算によるハイエントロピー合金の物質スクリーニングを行うことで効率的な物質探索が行えることは大きな進歩である。

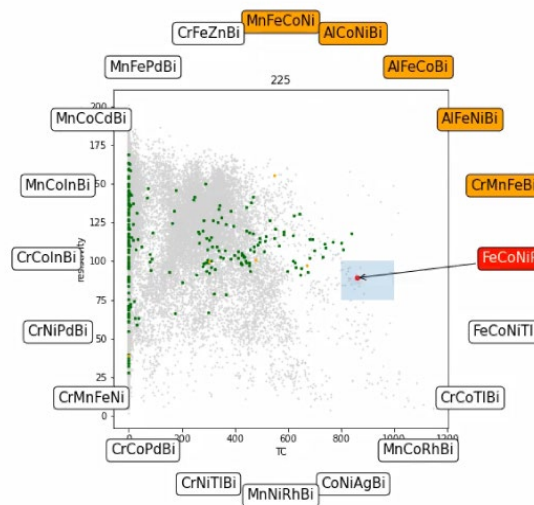


図 10：磁気相転移温度と残留電気抵抗率空間での多目的ベイズ最適化過程を示す。約 230 回 (全物質の 0.3%) の探索で目的領域の物性を持つ物質の探索が行える。

(iii) 磁性体の系統的第一原理計算を実行し、磁気モーメント等のデータを蓄積する。第一原理計算の結果に基づいた磁化反転シミュレーションを実行し、結晶粒の保磁力を求める。

協力機関（再委託先）：国立研究開発法人東京大学物性研究所、協力機関代表者：福島鉄也

（総括）

電子状態計算パッケージ AkaiKKR に立脚した自動ハイスループット材料計算ツールを用いて SmFeN 系磁石化合物を対象とした磁性体の系統的第一原理計算を実行し、磁気モーメントとキュリー温度の高精度の磁気物性データを蓄積した。また、第一原理計算の結果に基づいた Wang-Landau モンテカルロ法による磁化反転シミュレーションを実行し、永久磁石材料の結晶粒の保磁力解析を行なった。その結果、実験において観測される保磁力の温度特性の再現に成功した。

（実施・検討内容）

（a）希土類磁石材料を対象とした第一原理ハイスループットスクリーニング

a-1. KKR グリーン関数法に立脚した自動網羅計算ツールの開発

一般的な材料開発では性能の良い材料が発見されると、その周辺の局所的な材料空間でのみ積極的に探索が行われる。未踏の材料空間にはより良い高機能材料が存在するはずだが、大域的に探索を行うにはリスクとコストの点から困難である。それゆえ、「富岳」に代表される大型計算機を利用して低コストで網羅的に材料を探索することは非常に重要になる。これまで、第一原理計算を用いた網羅計算は行われてきたが、対象は単体物質や単純化合物における単純な電子状態や構造安定性が中心であった。

今年度、我々は広大な不規則性材料空間（不純物系や合金系）を第一原理計算によって自動的に探索可能なアプリケーションツールの開発を行った。我々のツールは全電子 KKR グリーン関数法（AkaiKKR）に基づいており、配置不規則性はコヒーレントポテンシャル近似にて取り扱われる。また、電気伝導率やゼーベック係数等の伝導特性、磁化やキュリー温度等の有限温度磁性といった、海外の汎用的な電子状態計算パッケージでは取り扱えない物理量の計算が可能であり、ユニークかつ利用価値の高い大規模物性データベースを構築できる（図 11 参照） [1, 2]。

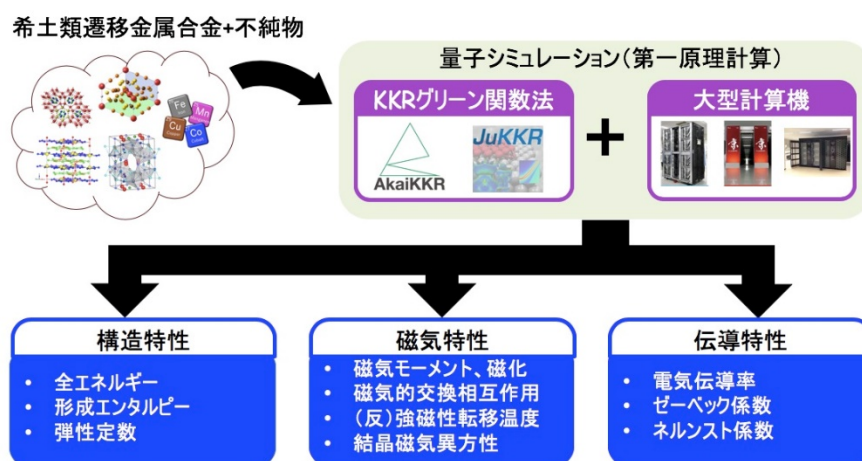


図 11：KKR グリーン関数法に基づいた高精度・高速度のハイスループット材料計算ソフトウェアの開発。

a-2. 永久磁石材料 Sm-Fe-N 系の大規模磁気物性データベースの構築

上記で述べた自動網羅計算ツールを用い、4 元系 $(\text{Sm}_{1-\alpha-\beta}\text{La}_{\alpha}\text{Ce}_{\beta})_2(\text{Fe}_{1-\gamma-\delta}\text{Co}_{\gamma}\text{Ni}_{\delta})_{17}\text{N}_3$ の電子状態と磁気特性を解析し大規模物性データベースを構築した。対象となる材料空間は $0.0 < \alpha, \beta, \gamma, \delta < 0.4$ の領域、そして格子定数 (a と c/a) の自由度も含んでおり、全体の計算データ数は 31,104 件になる。原子位置は固定し実験値 (J. Appl. Phys. 115, 17A712 (2014)) を使用している。計算の系統性を保つため、すべての計算はマフィンティンポテンシャルと局所密度近似を用い、4f 状態の局在化した部分を開殻コア状態として扱うオープン・コア計算を標準とした。

自動網羅計算の結果を図 12 に示す。計算にはスーパーコンピュータ「富岳」を利用した。AkaiKKR は OpenMP による並列化が実装されており、1 つの材料パラメータに対し 1 ノード (48 コア) を用いて計算を実行する。材料パラメータを変えた計算に対しては MPI 並列を適用するが、ノード間の通信はほとんど存在しないため MPI 並列化効率はほぼ 100% を期待できる。本研究では 1,000 ノード (48,000 コア) を用いたハイブリッド並列計算を行っている。1 つの材料に必要な計算時間 (セルフコンシステント計算とキュリー温度計算) は約 1 時間程度である。右図の点線は格子定数が実験値と等しい場合の磁化とキュリー温度の計算結果を示している。計算データ群を眺めてみると、格子定数 a を大きくすることで磁化とキュリー温度の向上が可能であることがわかる。また、キュリー温度を増やすことは元素置換によって容易であるが、磁化を増大させるのは困難である。Ce 置換を行うことで小さな変化であるが磁化とキュリー温度を共に上昇させることができ、永久磁石材料の磁気特性を向上させることができることが明らかになった。このように、我々の開発した自動網羅計算ツールは未踏の材料空間を効率的に探索することが可能である。

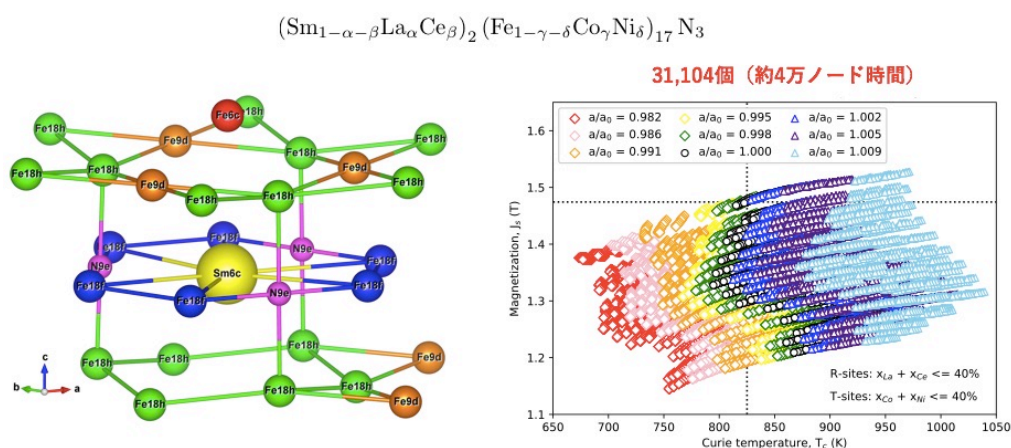


図 12 : (左図) 永久磁石 SmFeN の結晶構造。(右図) $(\text{Sm}_{1-\alpha-\beta}\text{La}_{\alpha}\text{Ce}_{\beta})_2(\text{Fe}_{1-\gamma-\delta}\text{Co}_{\gamma}\text{Ni}_{\delta})_{17}\text{N}_3$ 系のハイスループット計算。縦軸、横軸はそれぞれ磁化とキュリー温度を示している。

(b) 第一原理計算に基づいた磁化反転シミュレーションによる有限温度保磁力解析

b-1. 原子論的スピンモデルの構築と磁気特性の計算

AkaiKKR によって得られた原子間の交換結合定数と磁気モーメントに加えて、磁気異方性定数に関する

情報を実験や第一原理計算から求め、個々の原子をスピンとみなす事で、現実の磁石材料に対応する古典スピン (ハイゼンベルグ) モデルの構築が行える。構築したスピンモデルにマルコフ鎖モンテカルロ (MC) 法および制限モンテカルロ法[3]を適用することで、希土類磁石材料 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 、 $\text{Dy}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 、 $\text{Sm}(\text{Fe}, \text{Co})_{12}$ の磁化及び磁気異方性について、実験値を精度良く再現することを確認した。また、Rescaled モンテカルロ法[4]を用いて量子効果を補正することで、実験と比較可能な磁気比熱の温度依存性を求めている (図 13)。

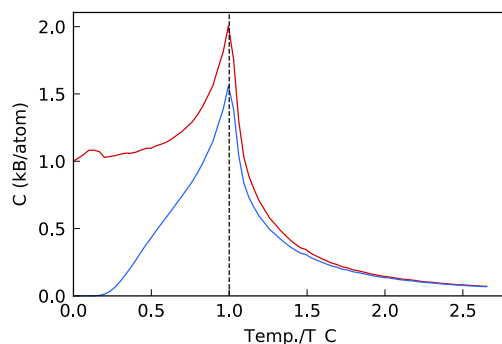


図 13 : $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ スピンモデルの磁気比熱。赤線が通常のモンテカルロ法、青線が Rescaled モンテカルロ法での補正結果に対応する。

b-2. スピンモデルに基づく有限温度保磁力解析

磁化反転は準安定状態から安定状態への確率的な遷移であるため、自由エネルギーランドスケープの観点から保磁力を捉え直す試みを進めた。自由エネルギーランドスケープの計算 (図 14) には、レプリカ交換 Wang-Landau MC 法による 1000-3000 並列程度の高効率な並列化計算に加えて、計算次元の縮約と $1/t$ 法による系統誤差の圧縮を行うことで、磁化反転の核生成を記述するために必要な十万スピン以上のシステムサイズに対して適用可能な手法の開発を行った[5]。

上記手法を磁石の孤立粒子を念頭に置いた原子論的スピンモデルに適用することで、熱ゆらぎの効果を正確に取り込んだ磁化反転解析を進め、保磁力の決定要因である反転核の生成状況を調べた[5]。磁化反転の際の自由エネルギーバリアの頂点は反転核の形成エネルギーと外部磁場によるゼーマンエネルギーの均衡点として捉えられてきたが、実際には磁壁移動による磁化反転領域の拡大に起因したエネルギーの増大を考慮に入れる必要があることを明らかにした。この反転核の形成が磁壁移動へと移り変わる点が、エネルギーバリアの頂点として外部磁場に対して安定的に存在することを確認している。実験において反転核サイズが外部磁場の強度によらず一定であることが知られているが、本計算において初めて定量的な説明が可能となった。

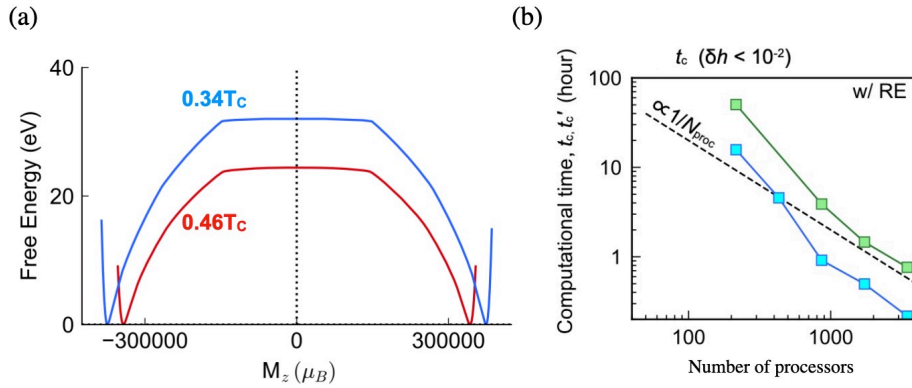


図 14 : (a) $Nd_2Fe_{14}B$ スピンモデルの孤立粒子系 (一片 14nm, 212, 536spin) での自由エネルギーランドスケープ。(b) 並列化数に対する計算速度。緑線が 212, 536spin、青線が 90, 816spin の系での計算に対応する。

b-3. 修正確率的カットオフ法による保磁力計算への磁気双極子相互作用の導入

磁石の保磁力の定量性を考える上で磁気双極子相互作用 (反磁場) の影響を計算に取り込む必要があるが、従来広く用いられてきた並進対称性に基づく畳み込み積分 (高速フーリエ変換) をもちいた長距離相互作用の高速計算技法は $Nd_2Fe_{14}B$ に代表される希土類磁石材料ではその対称性の悪さから計算効率がよくない。長距離相互作用を複雑な結晶構造にも適用可能で、 $O(N \log N)$ の計算速度で近似なしに取り扱う方法として、修正確率的カットオフ法の開発をこれまでに進めてきた [6]。この手法はモンテカルロ法の範囲で適用可能な手法であり、これを自由エネルギーランドスケープ計算に導入することで、磁気双極子相互作用を考慮に入れた保磁力の有限温度解析を可能とした。図 15 に粒子系に対する保磁力の変化を示す。その結果、磁気双極子相互作用 (反磁場) の影響は表面熱ゆらぎの効果によって従来の考えより強く抑え込まれていることを明らかにした。

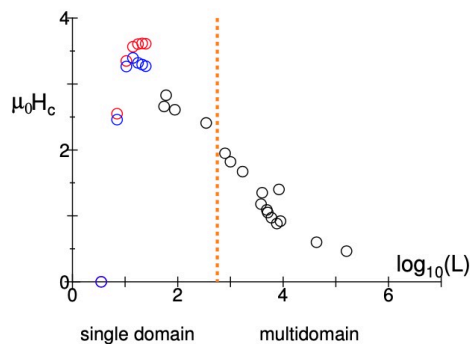


図 15 : 粒子径 (L nm) の変化に対する保磁力 (室温)。青丸 (赤丸) が磁気双極子相互作用のない (ある) 場合の計算値、白丸が実験値に対応している。

- [1] H. Shinya, S. Kou, T. Fukushima, A. Masago, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, and H. Akai, Appl. Phys. Lett. **117**, 042402/1-5 (2020).
- [2] A. Masago, H. Shinya, T. Fukushima, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida, J. Physics: Condens. Matter **32**, 485803/1-6 (2020).
- [3] P. Asselin, R. F. L. Evans, J. Barker, R. W. Chantrell, R. Yanes, O. Chubykalo-Fesenko, D. Hinzke, and U. Nowak, Phys. Rev. B **82**, 054415 (2010).
- [4] F. Körmann, A. Dick, T. Hickel, and J. Neugebauer, Phys. Rev. B **81**, 134425 (2010).
- [5] Y. Toga, S. Miyashita, A. Sakuma, and T. Miyake, Npj Comput Mater **6**, 1 (2020).
- [6] T. Hinokihara, M. Nishino, Y. Toga, and S. Miyashita, Phys. Rev. B **97**, 104427 (2018).

(iv) 鉄基化合物の結晶構造探索を行う。その結果を踏まえ、高鉄濃度希土類化合物を対象として化学組成を変えた第一原理計算を実行し、組成に対する磁性と安定性のマップを作成する。

協力機関(再委託先)：なし

(総括)

鉄基希土類化合物の結晶構造探索を行い、CaCu₅型派生構造として、Th₂Zn₁₇型構造、ThMn₁₂型構造、及びその間の鉄濃度領域で複数の準安定構造を得た。その結果を踏まえ、高鉄濃度希土類化合物である (Y, Zr) (Fe, Co)₁₂ を対象として化学組成を変えた第一原理計算を実行し、組成に対する磁化と安定性のマップを作成した。その結果、生成エネルギーが Zr 濃度と Co 濃度に対して非単調に変化することを見出した。また、(Nd, Pr, La, Ce)₂ (Fe, Co, Ni)₁₄B の有限温度磁化をデータ同化手法により定量評価した結果、低温では Co 添加で磁化が増加しないものの、320K 以上では Co を添加すると磁化が増加することを見出した。

(実施・検討内容)

(a) CaCu₅型派生構造の安定性

第一原理計算に基づいて希土類磁石の主相を探索した。代表的な希土類磁石化合物として、SmCo₅、Sm₂Fe₁₇N₃、NdFe₁₂N、Nd₂Fe₁₄B が知られている。このうち Nd₂Fe₁₄B 以外の3つはそれぞれ CaCu₅型構造、Th₂Zn₁₇型構造、ThMn₁₂型構造を持ち、その化学組成は $R_{m-n}T_{5m+2n}$ で表現される。ここで、 R は希土類元素、 T は遷移金属（鉄、コバルト）である。これらは、CaCu₅型構造を起点として、 m 個の希土類のうち n 個を $T-T$ の原子ペア（ダンベルと呼ばれる）で置換することで得られる。Th₂Zn₁₇型構造は $(m, n)=(3, 1)$ 、ThMn₁₂型構造は $(m, n)=(2, 1)$ に相当する。 $(m, n)=(3, 1)$ には、Th₂Zn₁₇型構造以外に Th₂Ni₁₇型構造も知られており、両者はダンベルの配置が異なる。これら以外に安定性に優れた CaCu₅型派生構造が存在するか Sm-Fe、および Sm-Co を対象として調べた。ダンベルの配置には無限の多様性があり、巨大な単位胞を必要とする構造も多数存在する。そこでまず、比較的小さな CaCu₅型構造の 2x2x2 セルを用意し、Sm をダンベルで部分置換した系に対する第一原理計算を実行する。得られた生成エネルギーを用いて、次式のようにクラスター展開モデルを構築する。

$$E = J_0 + \sum_i J_i \sigma_i + \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i,j,k} J_{ijk} \sigma_i \sigma_j \sigma_k + \sum_{i,j,k,l} J_{ijkl} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l$$

ここで、 σ_i は擬スピんで、 i 番目の Ca サイトを Sm が占有するとき $\sigma_i = +1$ 、ダンベルが占有するとき $\sigma_i = -1$ と定義する。続いて、クラスター展開モデルを用いて、 $3 \times 3 \times 2$, $3 \times 3 \times 3$ セルの $\text{Sm}_{m-n}\text{Fe}_{5m+2n}$ 、および $\text{Sm}_{m-n}\text{Co}_{5m+2n}$ の生成エネルギーを評価した (図 16)。この結果、 $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ 型構造と ThMn_{12} 型構造の間の Fe (Co) 濃度領域に、これらと安定性が同等の多数の準安定構造が存在することが分かった。また、Sm-Fe 系に比べて Sm-Co 系の方が、多様な結晶構造が生成可能である事が示唆される。

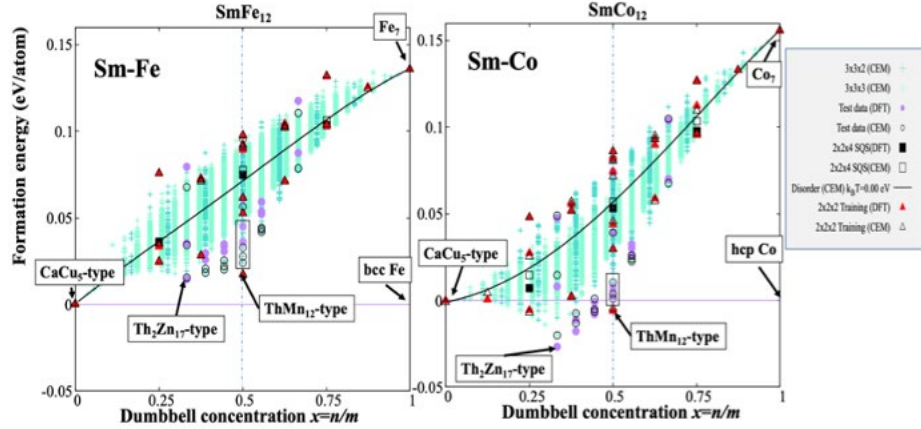


図 16 : (左) $\text{Sm}_{m-n}\text{Fe}_{5m+2n}$ と (右) $\text{Sm}_{m-n}\text{Co}_{5m+2n}$ の生成エネルギー。

(b) (Y, Zr) (Fe, Co)₁₂の第一原理計算

与えられた結晶構造に対して元素を部分的に置換して磁気特性や安定性を向上させることはよく行われる。ここでは、近年注目を集めている ThMn_{12} 型構造の部分置換効果を、第一原理計算を用いて調べた。計算には AkaiKKR コードを用い、コヒーレントポテンシャル近似 (Coherent Potential Approximation, CPA) により非化学量論組成を扱った。 $(\text{Y}_{1-y}\text{Zr}_y)(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{12}$ の磁化と生成エネルギーを計算した。そこから、Fe、 Y_2Fe_{17} 、 $\text{Zr}_2\text{Fe}_{17}$ の 3 相分離系を基準としたエネルギー (hull distance) を求めたところ、 x に対して非単調に変化し、 $y=0$ ライン上では $x=0.5$ 付近で極大になることが分かった。

(c) データ同化による有限温度磁化の定量評価

第一原理計算に含まれる系統誤差を小さくするため、東大、トヨタ自動車と協力して、データ同化手法を開発した。この方法では、図 17 に示すように、系統的な第一原理計算データと少数の実験データを組み合わせて物性値を定量評価する。この方法をネオジウム磁石主相 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の元素置換系 $(\text{Nd}_{1-\alpha-\beta-\gamma}\text{Pr}_\alpha\text{La}_\beta\text{Ce}_\gamma)_2(\text{Fe}_{1-\delta-\zeta}\text{Co}_\delta\text{Ni}_\zeta)_{14}\text{B}$ に適用した。実験は 119 サンプルに対して行った。各サンプルで 3 点~7 点の温度に対して磁化を測定し、そこから絶対零度の磁化とキュリー温度を求めた。計算は 2,869 組成に対して KKR-CPA 法で絶対零度の磁化とキュリー温度を算出した。以上の実験データと計算データに対して上記のデータ同化手法を適用し任意の組成に対する磁化とキュリー温度を求めたのちに、Kuz' min の式を用いて任意の温度の磁化を評価した。図 18 に、0K と 400K における磁化の組成依存性を示す。低温では Co 濃度 (δ) の増加に対して磁化が単調に減少するのに対し、温度 320K 以上では、 δ の小さな領域では磁化が増加し、途中から減少に転じることが分かった (Y. Harashima et al., Phys. Rev. Mater. **5**, 013806 (2021))。

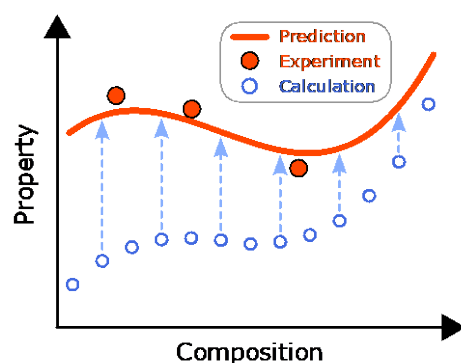


図 17：組成に対する物性値を定量評価するための実験・計算のデータ同化手法の概念図。

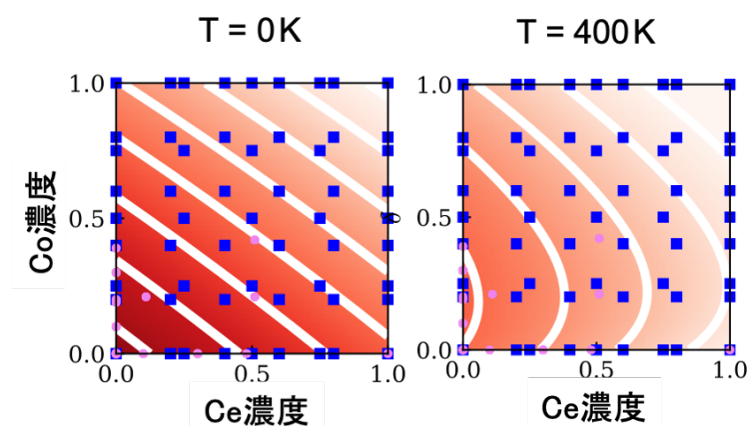


図 18：データ同化により求めた $(\text{Nd}_{1-y}\text{Ce}_y)_2(\text{Fe}_{1-\delta}\text{Co}_\delta)_{14}\text{B}$ の磁化。ピンクが実験データ、青が計算データ。白線は等高線を示す。

(v) データ駆動手法により、構造や構成元素と磁性の相関を調べる。第一原理計算や実験・計測データをデータマイニングすることにより、磁性に関する構造や構成元素の要因抽出を行う。

協力機関（再委託先）：国立大学法人東京大学総合文化研究科、協力機関代表者：福島孝治

（総括）

データ駆動手法により、構造や構成元素と磁性の相関を調べた。第一原理計算や実験・計測データをデータマイニングすることにより、結晶構造や構成元素の要因抽出を行った。計測データ解析では構造推定と同時に推定の不確実度の評価や、計測データを再現する交換結合定数の推定が可能となった。要因抽出ではスパース度の推定を行う方法の開発に至った。

（実施・検討内容）

データ駆動手法により、構造や構成元素と磁性の相関を調べることが目的であるが、今年度の成果は以下の二点にまとめられる。

近年データ科学の手法としてスパースモデリングが浸透し、物質科学を含めた多くの分野で応用され

てきた。得られたデータからできるだけ疎な表現を得る一般的なデータ解析手法である。例えば、第一原理計算で得られた形成エネルギーなどの物理量をクラスター展開し、できるだけ少ない説明変数によるコンパクトな有効モデルを構成するときなどに用いられる。その際に、L1 正則化に基づく LASSO と呼ばれる解析方法がたびたび利用される。しかし、LASSO などで選択される説明変数が真の変数かどうかは不明である。真の変数にもかかわらず選択されない場合や真の変数でないにもかかわらず選択してしまう場合が生じる。この真の変数と選択した変数との齟齬を変数誤差と定義する。注意したいことは、回帰の問題における予測誤差の最小化と変数誤差の最小化は必ずしも一致しないことである。予測誤差は交差検証法などで近似的に評価できるものの、真の変数が未知の状況では変数誤差を評価することは難しい。今年度は、解析で測定可能な量から、変数誤差を推定する方法論を提案し、真の変数が既知である人口データについて試行することにより方法の妥当性は検証できた。これにより、例えば LASSO の解析を通じて変数誤差最小化により「重要な説明変数」の抽出が可能となる。今後は実データについて応用する予定である。

もう一点は、計測データの解析に関する進展である。磁氣的相互作用の推定は第一原理計算から評価することが一般的である。それと相補的な方法は実験・計測データからの推定である。これまで直接的なニーズがなかったことや素朴な推定には計算物理的なフォワード計算の計算量の問題から解析されてこなかった。ベイズ推定の枠組みに従うと、ミクロな相互作用からマクロな測定量に繋げるためには量子統計力学のモデル計算を尤度に組み込むことになる。ここに計算量の問題の原因がある。最近注目されている深層学習などはこの過程を物理過程の入らないニューラルネットワークで置き換えていることに相当する。学習のために十分な訓練データが必要となるが、一般に十分なデータが得られる保証がない状況においては物理モデルを組み込むことが賢明であると思われる。これまでに、ベイズ推定の方法論を継続的に整備して、マルコフ連鎖モンテカルロ法やベイズ最適化などの機械学習の方法を組み合わせることにより、マクロな観測量を入力として、現実的な計算時間により磁氣的相互作用の推定が可能となった。実際に、量子スピン系 KCuPO の磁化測定に適用することにより、磁氣的相互作用の大きさを評価することができた。特に、観測ノイズを適切に評価することにより、推定誤差も評価できたことは強調しておきたい。様々な計測データの解析結果や第一原理計算からの推定結果を定量的に比較できる状況が整ったと言える。また、並行して、X 線や陽電子などの回折実験データから結晶構造を推定する方法論が進展した。量子ビームの種類に依存して、フォワード計算のモデルが異なり、それに伴い計算量が大きく異なる。探索領域を離散点に限定しても、次元の呪いの探索点は膨大にある。ここでは、その網羅的計算を超並列計算で実行し、実際に SiC 上の SiON の二次元表面の積層構造を決定することができた（学術論文投稿中）。

（２） アプリケーションの普及

（i）「MateriApps」の運用・整備

協力機関（再委託先）：国立大学法人東京大学物性研究所、協力機関代表者：福島鉄也

（総括）

「MateriApps」の運用、改善を行い、アプリケーションの効率的な開発および活用を促した。令和 2 年度において、「MateriApps」のポータルサイトは月間で約 4,000 ユーザーのアクセス、約 17,000 件のページビューの実績を達成した。

(ii) コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン ワークショップ (CMD-WS) 等の開催

協力機関（再委託先）：国立大学法人大阪大学、協力機関代表者：佐藤和則

（総括）

第 37 回 CMD-WS（参加者 74 名）を令和 2 年 8 月 31 日から 9 月 4 日に、第 38 回 CMD-WS（参加者 72 名）を令和 2 年 2 月 22 日から 2 月 26 日までオンラインで実施し、アプリケーションの普及を行った。また、バンドン工科大学（インドネシア）で開催された International Virtual Course（4-15 Jan. 2021）の 1 部として、CMD ハンズオンコースを実施し、アプリケーションの普及を行った。

（実施・検討内容）

「アプリケーションの広報および維持・普及活動」として、阪大のグループを中心に、コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD) ワークショップを令和 2 年度中に 2 回開催した。通常の CMD ワークショップでは、UNIX/Linux を扱ったことのない初心者でも参加できるように、PC を開催者側で用意するなどのサービスを行なっているが、第 37、第 38 回はオンラインでの開催のため、X Window System と Linux 環境を自分で用意できる方に参加者を限定して実施した。そのため、参加者の減少が危惧されたが、以下の報告にみるように、参加者数はこれまでで最高水準となっている。おそらく、旅費など経済的な負担がオンライン開催のためなくなったので、そのことから遠方からの参加がより容易になったからと想像される。以下に CMD37、38 について詳細を報告しておく。

第 37 回 CMD ワークショップは、令和 2 年 8 月 31 から 9 月 4 日にかけてオンラインで実施した。今回はビギナーズコース (APCAP、Machikaneyama、STATE-Senri) 34 名、アドバンストコース (A 群 [APCAP、Naniwa-Series、RSPACE、Salmon]、B 群 [Machikaneyama、ES-OPT、RSPACE]、A、B 群からそれぞれ 1 つずつ選択) 14 名、スパコンコース (STATE-Senri) 8 名、スピントロニクスコース（講義 10 コマと上記アドバンストコースの B 群から 1 つ選択したコードについての実習）10 名、マテリアルズインフォマティクスコース (CrySPY、LIDG) 8 名の参加者に対して講義と演習を行なった。Webex を用いて全体講義を実施した。Zoom または Teams を用いてコース毎の講義と実習を行なった。受講生からの質問やトラブル対応のためのコミュニケーションツールとして Slack を用いた。また、先端研究事例講師として、越智正之氏（大阪大学大学院理学研究科助教）、渋谷靖氏（東京大学工学部マテリアル工学科准教授）、志賀基之氏（日本原子力研究開発機構研究主幹）を招待し講演していただいた。

第 38 回 CMD ワークショップは、令和 3 年 2 月 22 から 2 月 26 日にかけてオンラインで実施した。今回はビギナーズコース (APCAP、STATE-Senri、Machikaneyama) 35 名、アドバンストコース (A 群 [HiLAPW、STATE-Senri、ecalj、Salmon]、B 群 [Machikaneyama、Naniwa-Series、ES-OPT]、A、B 群からそれぞれ 1 つずつ選択) 20 名、スパコンコース (RSPACE) 4 名、スピントロニクスコース（講義 10 コマと上記アドバンストコースの B 群から 1 つ選択したコードについての実習）5 名、マテリアルズインフォマティクスコース (CrySPY、LIDG) 8 名の参加者に対して講義と演習を行なった。オンライン開催 2 回目となり、開催側は遠隔講義と遠隔実習にある程度慣れてきているようであったが、受講生の出席チェック、各自の実習状況の把握、個人 PC の準備不足への対応などオンライン特有の難しさも明らかになってきており次回以降検討を継続していく必要がある。演習において Slack の活用が有用であることがわかってきた。受講生各自の演習結果を図にして Slack 上に掲載させ、全員で議論するなどの実施方法が有効であること

がわかってきた。今回は先端研究事例講師として、Fahdzi Muttaquien 氏 (Institut Teknologi Bandun 准教授)、深澤太郎氏 (産業技術総合研究所) を招待し講演していただいた。また、小口多美夫氏 (大阪大学産業科学研究所教授) を招待し特別講演をしていただいた。

海外の大学および研究機関へのアプリケーションの広報・維持活動として、インドネシアバンドン工科大学 (ITB) で開催された International Virtual Course (IVC, 4-15 Jan. 2021) の一部として CMD のハンズオンコースを実施した。Machikaneyama、STATE-Senri、HiLAPW の講義と実習を、ITB、Thu Dau Mot University (ベトナム) 及び大阪大学のクラスター計算機を用いて実施した。インドネシア 57 名、ベトナム 16 名、フィリピン 2 名、中国 2 名、マレーシア 3 名、日本 1 名が受講した。海外の大学・研究所を結んだオンラインでの実施は今回が初めてである。講義については、全く問題なく実施できたが、演習に関しては、今回は 3 つの機関にそれぞれに設置してあるクラスター計算機を用いたため、ジョブ投入の仕方やそのためのスクリプトの準備が各クラスターで異なるものとなってしまった。そのために、ジョブ投入の説明が煩雑になり受講生は少なからず混乱したようである。

(実施・検討内容)

物質科学シミュレーションのポータルサイト「MateriApps」の整備を進めた。掲載アプリ・ツールを増やし、レビュー記事などコンテンツのさらなる充実を進めた。令和 2 年度の平均月間アクセス数は 22,300 ページビュー、6,700 ユニークユーザと令和元年度(それぞれ 16,700 ページビュー、4,400 ユニークユーザ)から大幅に増加した。また、計算物質科学アプリ・ツールなどをおさめた統合パッケージ MateriApps LIVE! についても、新しいアプリ・ツールの追加、OS のバージョンアップなど整備を進め、3 回のリリースを行った。ダウンロード数も前年度の 1,500 回から 4,850 回と 3 倍以上に増えた。この MateriApps LIVE! を活用した、第一原理電子状態計算や分子動力学法のオンライン講習会も 4 回開催した。計算科学の専門家以外にも実験家や企業の研究者など毎回約 100 名の参加があり大変好評であった。

(3) プロジェクトの全体推進

本事業(「大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発」、略称: DPMSD)の実施体制は図 19 の通りである。

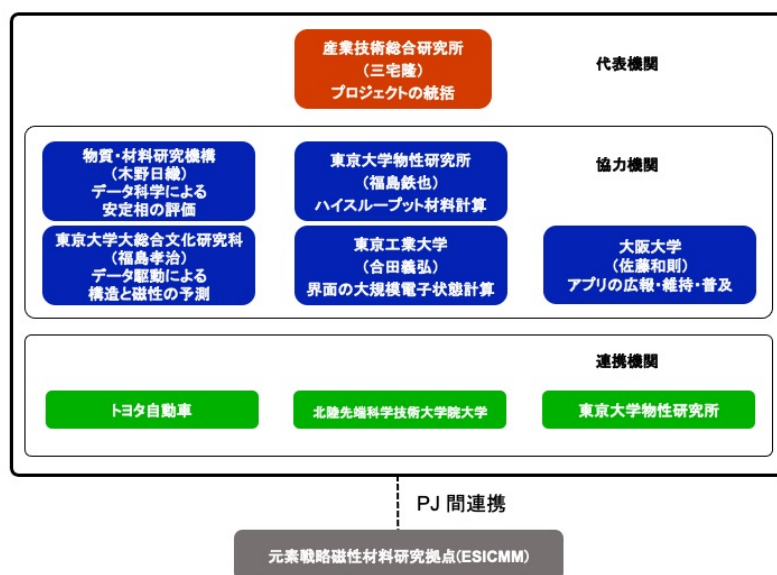


図 19：プロジェクトの実施体制。

事業を効率的に推進するため、プロジェクトの運営委員会を設置した。

<DPMSD 運営委員会メンバー>

研究開発課題責任者 三宅隆（産総研）

協力機関代表者 合田義弘（東工大）

協力機関代表者 木野日織（NIMS）

協力機関代表者 福島鉄也（東大物性研）

協力機関代表者 福島孝治（東大総合文化）

協力機関代表者 佐藤和則（阪大）

産学官連携担当 庄司哲也（トヨタ自動車）

アプリ普及担当 藤堂眞治（東大）

運営委員会を令和2年5月25日（月）、キックオフ会議を令和2年6月1日（月）、成果報告会を令和3年1月25日（月）に開催し、プロジェクト全体の管理・調整、全サブテーマに共通的な課題の推進支援を行った。また、元素戦略プロジェクト磁石拠点電子論グループと合同で進捗会を8回開催した。

2-3. 活動（研究会の活動等）

＜成果報告会＞

令和3年1月25日（月）にオンライン開催。口頭発表12件、参加人数30名。

＜アプリケーションの普及＞

「2-2 実施内容（成果）(2)」に記載の通り、CMD ワークショップの開催、および「MateriApps」の運用・整備を実施した。

- ・第37回CMD-WS（オンライン開催）：令和2年8月31日（月）-9月4日（金）（参加者74名）
- ・第38回CMD-WS（オンライン開催）：令和2年2月22日（月）-26日（金）（参加者72名）
- ・CMD ハンズオンコース（オンライン開催）：バンドン工科大学（インドネシア）で開催された International Virtual Course (4-15 Jan. 2021)の一部としてオンライン開催
- ・「MateriApps」のオンライン講習会を4回開催

＜ワークショップの共催・後援＞

材料系ワークショップ（RIST 主催）を共催した。また、The 3rd R-CCS International Symposium を後援した。

- ・第10回材料系ワークショップ（オンライン開催）：令和2年10月16日（金）
- ・第11回材料系ワークショップ（オンライン開催）：令和3年2月10日（水）
- ・The 3rd R-CCS International Symposium（オンライン開催）：令和3年2月15-16日

2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) シミュレーションとデータ駆動手法による永久磁石研究(i)	〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター	三宅 隆
	〒226-8502 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259 国立大学法人 東京工業大学 物質理工学院	合田 義弘
(1) シミュレーションとデータ駆動手法による永久磁石研究(ii)	〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター	三宅 隆
	〒305-0044 茨城県つくば市並木 1-1 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門	木野 日織
(1) シミュレーションとデータ駆動手法による永久磁石研究(iii)	〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター	三宅 隆
	〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5 国立大学法人 東京大学 物性研究所	福島 鉄也
(1) シミュレーションとデータ駆動手法による永久磁石研究(iv)	〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター	三宅 隆
(1) シミュレーションとデータ駆動手法による永久磁石研究(v)	〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター	三宅 隆
	〒153-8902 東京都目黒区駒場 3-8-1 国立大学法人 東京大学 大学院総合文化研究科	福島 孝治
(2) アプリケーションの普及(i)	〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター	三宅 隆
	〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5 国立大学法人 東京大学 物性研究所	福島 鉄也

(2) アプリケーションの普及(ii)	〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料 コンピューテーショナルデザイン研究センター 〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1 国立大学法人 大阪大学 工学研究科マテリアル 生産科学専攻	三宅 隆 佐藤 和則
(3) プロジェクトの全体推進	〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料 コンピューテーショナルデザイン研究センター	三宅 隆

2－5. 学会等発表実績

論文

- 1) Monoclinic YFe₁₂ phases predicted from first principles
Takahiro Ishikawa, Taro Fukazawa, and Takashi Miyake
PHYSICAL REVIEW MATERIALS **4**, 104408(1–6) (2020).
DOI:10.1103/PhysRevMaterials.4.104408, 査読有
- 2) First-principles calculations of finite temperature electronic structures and transport properties of Heusler alloy Co₂MnSi
H. Shinya, S. Kou, T. Fukushima, A. Masago, K. Sato, H. Katayama–Yoshida, and H. Akai
Applied Physics Letters **117**, 042402(1– 5) (2020).
DOI:10.1063/5.0017862, 査読有
- 3) Hole-mediated ferromagnetism in a high-magnetic moment material, Gd-doped GaN
A. Masago, H. Shinya, T. Fukushima, K. Sato, and H. Katayama–Yoshida
Journal of Physics: Condensed Matter **32**, 485803(1– 6) (2020).
DOI:10.1088/1361-648X/abac8e, 査読有
- 4) First-principles study of magnetism and phase stabilities of V₂ based antiferromagnetic Heusler alloys
F. Kuroda, T. Fukushima, and T. Oguchi
Journal of Applied Physics **127**, 193904(1– 8) (2020).
DOI:10.1063/1.5143826, 査読有
- 5) Magnetocaloric effect in MnCoGe alloys studied by first-principles calculations and Monte-Carlo simulation
H. B. Tran, T. Fukushima, Y. Makino, and T. Oguchi
Solid State Communications **323**, 114077(1–5) (2020).
DOI:10.1016/j.ssc.2020.114077, 査読有
- 6) Tuning structural-transformation temperature toward giant magnetocaloric effect in MnCoGe alloy: A theoretical study
H. B. Tran, T. Fukushima, K. Sato, Y. Makino, and T. Oguchi
Journal of Alloys and Compounds **854**, 157063(1–9) (2020).
DOI:10.1016/j.jallcom.2020.157063, 査読有
- 7) Theoretical prediction of large anisotropic magnetocaloric effect in MnP
H. B. Tran, T. Fukushima, H. Momida, K. Sato, Y. Makino, and T. Oguchi
Computational Materials Science **188**, 110227(1– 8) (2020).
DOI:10.1016/j.commatsci.2020.110227, 査読有
- 8) Role of atomic-scale thermal fluctuations in the coercivity
Y. Toga, S. Miyashita, A. Sakuma and T. Miyake
npj Computational Materials **6**, 67, 1–7 (2020).
DOI:10.1038/s41524-020-0325-6, 査読有
- 9) Prediction of the Curie temperature considering the dependence of the phonon free energy on magnetic states

- T. Tanaka and Y. Gohda
npj Comput. Mater. **6**, 184 (2020).
DOI:10.1038/s41524-020-00458-5, 査読有
- 10) First-Principles Study of Magnetism-Dependent Phonons Governed by Exchange Ligand Field
T. Tanaka and Y. Gohda
J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 093705 (2020).
DOI:10.7566/JPSJ.89.093705, 査読有
- 11) First-principles study on magnetism of a crystalline grain-boundary phase in Nd-Fe-B permanent magnets
Yuta Ainai, Sonju Kou, Yasutomi Tatetsu, Yoshihiro Gohda
Jpn. J. Appl. Phys. **59**, 060904 (2020).
DOI:10.35848/1347-4065/ab9402, 査読有
- 12) First-principles study of the adsorption of 3d transition metals on BaO- and TiO₂-terminated cubic-phase BaTiO₃(001) surfaces
R. Costa-Amaral and Y. Gohda
J. Chem. Phys. **152**, 204701 (2020).
DOI:10.1063/5.0008130, 査読有
- 13) Maximum Separated Distribution with High Interpretability Found Using an Exhaustive Search Method — Application to Magnetocrystalline Anisotropy of Fe/Co Films—
Hiori Kino, Kohji Nakamura, Koji Hukushima, Takashi Miyake, and Dam Hieu Chi
Journal of Physical Society of Japan **89**, 064802(1–14) (2020).
DOI:10.7566/JPSJ.89.064802, 査読有
- 14) Data-driven determination of the spin Hamiltonian parameters and their uncertainties: The case of the zigzag-chain compound KCu₄P₃O₁₂
Ryo Tamura, Koji Hukushima, Akira Matsuo, Koichi Kindo, and Masashi Hase
Physical Review B **101**, 224435(1–9) (2020).
DOI:10.1103/PhysRevB.101.224435, 査読有
- 15) Replica Exchange Particle-Gibbs Method with Ancestor Sampling
Hiroaki Inoue, Koji Hukushima and Toshiaki Omori
Journal of Physical Society of Japan **89**, 104801(1–7) (2020).
DOI:10.7566/JPSJ.89.104801, 査読有
- 16) Explainable machine learning for materials discovery: predicting the potentially formable Nd-Fe-B crystal structures and extracting the structure-stability relationship
Tien-Lam Pham, Duong-Nguyen Nguyen, Minh-Quyet Ha, Hiori Kino, Takashi Miyake, and Hieu-Chi Dam
IUCrJ **7**, 1036 (2020).
DOI:10.1107/S2052252520010088, 査読有
- 17) Boron cage effects on Nd-Fe-B crystal structure's stability
Duong-Nguyen Nguyen, Duc-Anh Dao, Takashi Miyake and Hieu-Chi Dam
J. Chem. Phys. **153**, 114111 (2020).

DOI:10.1063/5.0015977, 査読有

18) Diverse densest binary sphere packings and phase diagram

R. Koshoji, M. Kawamura, M. Fukuda, and T. Ozaki

Physical Review E **103**, 023307(1–23) (2021).

DOI:10.1103/PhysRevE.103.023307, 査読有

19) Magnetic Friedel Oscillation at Fe(001) Surface: Direct Observation by Atomic-Layer-Resolved Synchrotron Radiation ^{57}Fe Mössbauer Spectroscopy

T.Mitsui, S.Sakai, S.Li, T.Ueno, T.Watanuki, Y.Kobayashi, R.Masuda, M.Seto, and H.Akai

Physical Review Letters **117**, 236806(1–6) (2020).

DOI:10.1103/PhysRevLett.125.236806, 査読有

20) Element- and orbital-selective magnetic coherent rotation at the first-order phase transition of a hard uniaxial ferrimagnet

Sh.Yamamoto, D.I.Gorbunov, H.Akai, H.Yasumura, Y.Kotani, T.Nakamura, T.Kato, N.V.Mushnikov, A.V.Andreev, H.Nojiri, and J.Wosnitzer

Physical. Review B **101**, 174430 (2020).

DOI:174430–1– 174430–6, 10.1103/PhysRevB.101.174430, 査読有

21) Lattice dynamics effects on Finite-temperature stability of $\text{R}_{1-x}\text{Fe}_x$ ($\text{R} = \text{Dy}, \text{Y}, \text{Sm}, \text{Nd}$, and Ce) alloys from first-principles

Guangzong Xing, Takahiro Ishikawa, Yoshio Miura, Takashi Miyake, and Terumasa Tadano

Journal of Alloys and Compounds. **874**, 159754(1–11) (2021).

DOI:10.1016/j.jallcom.2021.159754, 査読有

22) Evolutionary search for cobalt-rich compounds in the yttrium-cobalt-boron system

Takahiro Ishikawa, Taro Fukazawa, Guangzong Xing, Terumasa, Tadano, and Takashi Miyake

Phys. Rev. Matter. **5**, 054408(1–6) (2021).

DOI:10.1103/PhysRevMaterials.5.054408, 査読有

23) First-principles determination of intergranular atomic arrangements and magnetic properties in rare-earth permanent magnets

Y. Gohda

Sci. Technol. Adv. Mater. **22**, 113–123 (2021).

DOI:10.1080/14686996.2021.1877092, 査読有

24) Data Assimilation Method for Experimental and First-Principles Data: Finite-Temperature Magnetization of $(\text{Nd}, \text{Pr}, \text{La}, \text{Ce})_2(\text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni})_{14}\text{B}$

Yosuke Harashima, Keiichi Tamai, Shotaro Doi, Munehisa Matsumoto, Hisazumi Akai, Naoki Kawashima, Masaaki Ito, Noritsugu Sakuma, Akira Kato, Tetsuya Shoji, and Takashi Miyake

Physical Review Materials **5**, 013806 (2021).

DOI:10.1103/PhysRevMaterials.5.013806, 査読有

25) Spin-wave dispersion and exchange stiffness in $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ and RFe_{11}Ti ($\text{R}=\text{Y}, \text{Nd}, \text{Sm}$) from first-principles calculations

Taro Fukazawa, Hisazumi Akai, Yosuke Harashima and Takashi Miyake

Phys. Rev. B **103**, 024418 (2021).

DOI:10.1103/PhysRevB.103.024418, 査読有

26) 自由エネルギーからみた希土類磁石の保磁力と核生成

梶 裕太、宮下 精二

まぐね(日本磁気学会) **16**, 27-37, (2021).

口頭発表(招待講演)

1) 高鉄濃度・高磁化ハード磁性材料の理論的可能性

三宅 隆

NIMS 磁石パートナーシップ (オンライン開催), 2020/9/2

2) 計算科学と機械学習を組み合わせた永久磁石開発

三宅 隆

日本磁気学会スピントロニクス専門委員会 (オンライン開催), 2020/9/25

3) 磁石材料組織の第一原理電子論による検討

合田 義弘

第 10 回材料系ワークショップ, 2020/10/16

4) Development of Data-driven Methods as a bridge to Deductive Methods

木野 日織

The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion (岐阜県土岐市), 2020/10/30

5) Nucleation and Coercivity analyses on the atomistic spin model of permanent magnets

Yuta Toga

65th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials (MMM 2020), 2020/11/2

6) ベイズ最適化と第一原理計算を用いた磁石化合物の組成最適化による物質探索

深澤 太郎, 三宅 隆

2020 年日本表面真空学会学術講演会 (オンライン開催), 2020/11/19

7) 材料インフォマティクスによる物質および組成探索

三宅 隆

日本学術振興会合金状態図第 172 委員会研究会 (オンライン開催), 2020/12/7

8) 「富岳」におけるデータ駆動型材料開発

三宅 隆

第 13 回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム「「富岳」が拓く HPC の未来 ～Society5.0 の実現に向けて～」 (オンライン開催), 2020/12/10

9) Challenges to the coercivity of Nd-Fe-B magnet

Seiji Miyashita, Masamichi Nishino, Yuta Toga

The 44th MSJ Conference on Magnetism, 2020/12/16

10) 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

福島 鉄也

物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の新展開 2020」, 2020/12/21

- 11) Data-driven materials design of high-performance permanent magnets

Takashi Miyake

e-ASIA Joint Research Program Online Workshop on Materials Informatics (オンライン開催) 2021/1/13

- 12) 進化的アルゴリズムによる新物質探索

石河 孝洋

第 11 回材料系ワークショップ(オンライン開催), 2021/2/10

- 13) 高速・高精度の第一原理計算(KKR グリーン関数法)

福島 鉄也, 新屋 ひかり, 真砂 啓, 佐藤 和則, 吉田 博, 赤井 久純

東京大学物性研究所ワークショップ「物性科学におけるデータ科学の今と未来」(オンライン開催),
2021/2/24

- 14) データ駆動手法による遷移金属合金の探索と理解

三宅 隆

東京大学物性研究所ワークショップ「物性科学におけるデータ科学の今と未来」(オンライン開催),
2021/2/24

- 15) 第一原理計算の自動化によるマテリアル空間の拡大

木野 日織, 福島 鉄也, 知京 豊裕

第 68 回応用物理学会 春季学術講演会 (オンライン開催), 2021/3/14

- 16) 希土類磁石の保磁力機構における熱ゆらぎの役割

梶 裕太

日本金属学会 2021 春季講演大会, (オンライン開催), 2021/3/18

口頭発表(その他)

- 17) ガウス過程回帰の摂動論的近似

長野 泰志, 中西(大野) 義典, 福島 孝治

日本物理学会 2020 年秋季大会(オンライン開催), 2020/9/9

- 18) 形成エネルギー凸包の進化的構築:Y-Co-B 系への適用

石河 孝洋, 三宅 隆

日本物理学会 2020 年秋季大会 (オンライン開催), 2020/9/10

- 19) 磁場掃引中の Ginzburg-Landau モデル上に現れる二次元磁気パターンの時間発展

中西 亮, 福島 孝治

日本物理学会 2020 年秋季大会(オンライン開催), 2020/9/10

- 20) Systematics in Curie temperature of rare earth permanent magnets

H. Akai

Joint European Magnetism Symposia (JEMS2020), 2020/12/11

- 21) 磁気状態に依存するフォノンが時勢に及ぼす熱力学的フィードバック効果とその影響

田中 友規, 合田 義弘

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, 2021/2/16

22) ハミルトニアン・シミュレーテッドテンパリングについて

福島 孝治

日本物理学会第 76 回年次大会(オンライン開催), 2021/3/13

23) 磁気状態に依存するフォノンが磁氣的熱平衡状態へ及ぼす影響の第一原理的研究

田中 友規, 合田 義弘

日本物理学会 第 76 回年次大会(オンライン開催), 2021/3/15

24) 古典粒子系における自己学習ハイブリッドモンテカルロ法を用いた相転移の研究

松原 和毅, 福島 孝治

日本物理学会第 76 回年次大会(オンライン開催), 2021/3/15

25) $R_{1-x}Fe_x$ ($R = Y, Ce, Nd, Sm, \text{ and } Dy$) compounds: Entropy-induced phase stabilization at finite temperature

Guangzong Xing, Takahiro Ishikawa, Yoshio Miura, Takashi Miyake, Terumasa Tadano

APS March Meeting 2021 (Online meeting), 2021/3/16

26) Finite-temperature stability of $R_{1-x}Fe_x$ ($R = Y, Ce, Nd, Sm, \text{ and } Dy$) alloys from first-principles calculation

Guangzong Xing, Takahiro Ishikawa, Yoshio Miura, Takashi Miyake, Terumasa Tadano

日本金属学会 2021 年春季講演大会 (online meeting), 2021/3/18

27) 第一原理計算を用いた $Nd_2Fe_{14}B$ と Nd_2Fe ジグザグ界面の磁気特性解析

高 成柱, 合田 義弘

日本金属学会 2021 年春季第 168 回講演大会(オンライン開催), 2021/3/18

28) 進化的アルゴリズムによる Y-Co-B 系の安定相探索

石河 孝洋, 深澤 太郎, G. Xing, 只野 央将, 三宅 隆

日本金属学会 2021 年春季第 168 回講演大会(オンライン開催), 2021/3/18

29) Magnetism-dependent phonons and its effect on magnetic phase transition from first principles

T. Tanaka and Y. Gohda

APS March Meeting 2021 (online meeting), 2021/3/19

30) ダンベルクラスター展開モデルによる $CaCu_5$ 型派生化合物の構造予測

黒田 文彬, 深澤 太郎, 三宅 隆

日本金属学会 2021 年春季講演大会 (オンライン開催), 2021/3/19

広報活動

1) CCMS Web ハンズオン: MateriApps LIVE! 講習会, (オンライン開催), 2020/4/23, 2020/5/14, 2020/6/18, 全 3 回 参加人数各約 100 名

2) CCMS Web ハンズオン: MateriApps LIVE!を用いた LAMMPS 講習会, (オンライン開催), 2020/8/6 参加人数約 100 名

3) 第 37 回コンピュテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップ

(大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター、大阪大学大学院基礎工学研究科、大阪大学大学院理学研究科、大阪大学大学院工学研究科、大阪大学産業科学研究所、大阪大学 Quantum Engineering Design Research Initiative、文部科学省「分野別の研究開発情報通信分野スーパーコンピューター」、「富岳」成果創出加速プログラム「領域3産業競争力の強化」、大阪大学大学院基礎工学研究科附属スピントロニクス学術連携研究教育センター、国立明石工業高等専門学校、近畿大学工業高等専門学校、東京大学工学系研究科スピントロニクス学術連携研究教育センター、東北大学スピントロニクス学術連携研究教育センター、慶應義塾大学スピントロニクス研究センター)

大阪大学 豊中キャンパス(オンライン開催), 2020/8/31-9/4

参加人数 74 名

4) スマートサンプリング講演会(オンライン開催), 2020/9/4

参加人数 151 名

5) International Virtual Course (IVC2020) "Basics and Applied Nanotechnology from Computational to Experimental Methods" (バンドン工科大学)

インドネシアバンドン工科大学(オンライン開催), 2021/1/4-1/15

参加人数 81 名

6) 第 38 回コンピュテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップ

(大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター、大阪大学大学院基礎工学研究科、大阪大学大学院理学研究科、大阪大学大学院工学研究科、大阪大学産業科学研究所、大阪大学 Quantum Engineering Design Research Initiative、文部科学省「分野別の研究開発情報通信分野スーパーコンピューター」、「富岳」成果創出加速プログラム「領域3産業競争力の強化」、大阪大学大学院基礎工学研究科附属スピントロニクス学術連携研究教育センター、国立明石工業高等専門学校、近畿大学工業高等専門学校、東京大学工学系研究科スピントロニクス学術連携研究教育センター、東北大学スピントロニクス学術連携研究教育センター、慶應義塾大学スピントロニクス研究センター)

大阪大学 豊中キャンパス(オンライン開催), 2021/2/22-2/26

参加人数 72 名