

令和3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4年5月30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3年度（報告年度）の実施内容.....	- 2 -
2-1. 当該年度（令和3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 -

## 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3年度（報告年度）の実施内容

#### 2-1. 当該年度（令和3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3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。密度汎関数理論計算により、界面近傍の原子スケールの磁気物性値を算出し、永久磁石における面指数の異なる面間の比較を行う。
- (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、磁性材料の候補を提示する。
- (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、保磁力の界面構造依存性を調べる。
- (iv) 鉄濃度を変えた一連の鉄基希土類化合物の安定性を評価する。安定性に優れた構造に対して、組成を変えた混晶の第一原理計算を実行し、高い磁気物性値を有する組成を調べる。
- (v) データ駆動手法を用いて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、磁性に関する構造などの予測モデルを構築し、データ取得の効率化や構造理解を加速する。

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。密度汎関数理論計算により、界面近傍の原子スケールの磁気物性値を算出し、永久磁石における面指数の異なる面間の比較を行う。

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。密度汎関数理論計算により、界面近傍の原子スケールの磁気物性値を算出し、永久磁石における面指数の異なる界面間の比較を行った。面指数および終端面による依存性を定量化し、Ga 添加により 2-14-1 系磁石界面における交換結合が減少するという知見が得られた。さらに、Sm-Cu-Fe の 3 元系に対し第一原理フォノン計算を実行し、相平衡の基礎となる自由エネルギー評価を実行した。SmCu 規則相においては、低温において FeB-b 構造が安定であったが、600 K 程度よりも高温では B2 構造（CsCl 構造）が安定となることが明らかとなった。

（実施・検討内容）

### (a) ネオジウム磁石界面の第一原理計算

主にネオジウ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 Nd-Fe 合金結晶相である場合に対して明らかにするために、OpenMX による大規模第一原理計算を実行した。Ga の添加効果に着目し Ga の添加量による交換結合の変化を精査した。大規模計算に用いた界面構造を図 1 に示す。Ga の添加により Nd-Fe 副相の構造はより安定化することが生成エネルギーの計算により示された。さらに、交換結合は総じて Ga 添加により減少するが、Nd-Nd ペアの交換結合の変化は小さいこともわかった。また、主相界面 Fe 原子の交換結合は Ga 原子が界面近傍に存在するときに顕著に減少した。面指数と界面終端の依存性に関するデータも得られ、この点に関して詳細な解析を進める準備を整えた。

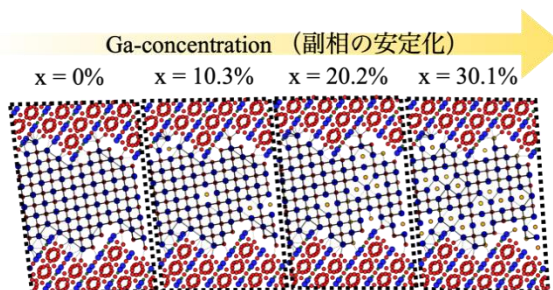


図 1 Ga を添加したネオジウム磁石主相(001)面および(100)面により構成されるジグザグ界面の原子配置。

さらに、得られた磁気モーメントと交換結合のデータは格子スピン模型のグループと共有した。第一原理計算の座標データそのものでは現実の材料組織と比較してスケールが小さいため、上記の大規模第一原理計算のデータを界面近傍のものとして扱い、これとバルク単結晶の主相および粒界相のデータを組み合わせることにより、原子サイト格子模型のマイクロマグネティクスシミュレーションにおいて用いる座標および磁気定数のパラメーターセットを用意することができる。

#### (b) Sm-Cu-Fe 系のフォノン自由エネルギー

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 金属間化合物は、Sm-Fe-Cu 状態図中に平衡相として存在しうる、との知見が我々の計算および実験により得られていた。ただし、過去の材料組織界面のシミュレーションにおいて検討したのは最安定構造である FeB-b 構造であった一方、相平衡の評価に用いたのは B2 構造 (CsCl 構造) であった。つまり、アモルファス相ではなく結晶相が粒界相として現れることが予想される一方、どの結晶相を考えれば良いかは、結論が出ていなかった。そこで、Sm-Cu-Fe の 3 元系に対し第一原理フォノン計算を実行し、相平衡の基礎となる自由エネルギー評価を実行した。その検討に用いた結晶構造を図 2 に示す。SmCu 規則相においては、低温において FeB-b 構造が安定であったが、高温では B2 構造が安定となることが明らかとなった。フォノン振動数を比較した結果、B2 構造の方がフォノン振動数は小さく、フォノン励起による自由エネルギーの低下が顕著となった。これらの計算結果から、想定する温度領域あるいは熱処理の方法により、1-12 系磁石副相の構造が変わりうることおよび制御しうる事が示された。また、FeCu、SmFe いずれの B2 規則相もフォノン計算により動的に不安定であることがわかったため、4 次の非調和効果を取り入れた自己無撞着フォノン計算を実行した。その結果、有限温度では FeCu、SmFe のいずれも非調和効果により動的不安定性が解消し、有限温度における安定構造として自由エネルギーを算出することができた。さらに、これらの計算に加えて、Sm-Cu-Fe の 3 元系状態図の評価に必要となる自由エネルギー計算の技術基盤となる、クラスター展開法による混合エンタルピー評価と Bragg-William 近似を超えた配列エントロピーの評価を実行した。

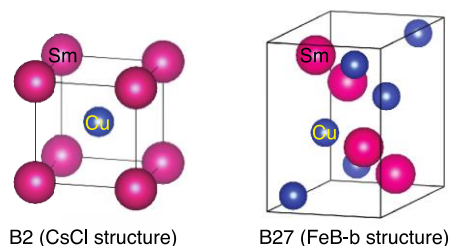


図 2 SmCu 規則合金における第一原理計算において検討した 2 種類の結晶構造。

(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、磁性材料の候補を提示する。

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 AkaiKKR を用いた第一原理計算の自動化技術を開発し公開した。また有限温度相図の網羅自動計算をおこなう為に AiiDA を用いたフォノン計算 ALAMODE 用の基本的なワークフローを開発し公開した。Y-Co-B を含む三元合金に対して進化論アルゴリズムを用いた構造探索を実行し 30 以上の主相、副相候補となる新規結晶を発見し、特に遷移金属を多く含む結晶の物性値を評価した。また、磁気異方性に対してフォノンの有限温度効果を評価する手法を開発した。

（実施・検討内容）

(a) Y-Co-B を含む三元合金の進化論アルゴリズムにより構造探索

進化論的アルゴリズムは結晶構造と結晶内原子位置を切り張りする mating、格子変位と原子位置置き換えを行う mutation、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、USPEX パッケージを含め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。

希土類磁石は、希土類元素と 3d 遷移金属 (Fe および/または Co) を主成分とする強力な永久磁石である。Fe や Co の濃度が高いと高い磁化が得られ、希土類は高い結晶磁気異方性の源となるため、高い異方性を与える為には不可欠である。特に、①Y は基底状態の電子構成に f 電子を持たないため理論的に有利であること、②Co は単体では hcp 構造であり、Y の f 電子と相性が良いことが予想されること、③B は  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  と同様に、様々な Y-Co 化合物の安定化および新規結晶構造の形成に関与する可能性があることから、Y-Co-B 三元系結晶の構造探索を行った。

構造エネルギーの評価には Quantum Espresso 第一原理計算パッケージを用い、約 1 万初期構造を生成し構造安定化させた。絶対零度での convex-hull 相図を図 3 に示す。図では構造探索結果のうち 4.4mRy 以下の hull 距離 ( $\Delta E$ ) を持ち、安定に存在する可能性がある Y-Co-B 構造の Co が多い部分を特に表している。図で線の頂点の青色点構造が絶対零度で安定に存在する構造である。このうち特筆すべきは  $\text{YCo}_{12}$  構造より Co 濃度が高い  $\text{YCo}_{16}$ ,  $\text{YCo}_{20}$  とである。前者の  $\Delta E$  は 2.72mRy/atom であり、後者の  $\Delta E$  は 3.92mRy/atom である。更に、新規  $\text{YCo}_5$  組成においては  $\text{CaCu}_5$  構造の  $\text{YCo}_5$  より 0.27mRy/atom 低い新規構造を見出した。

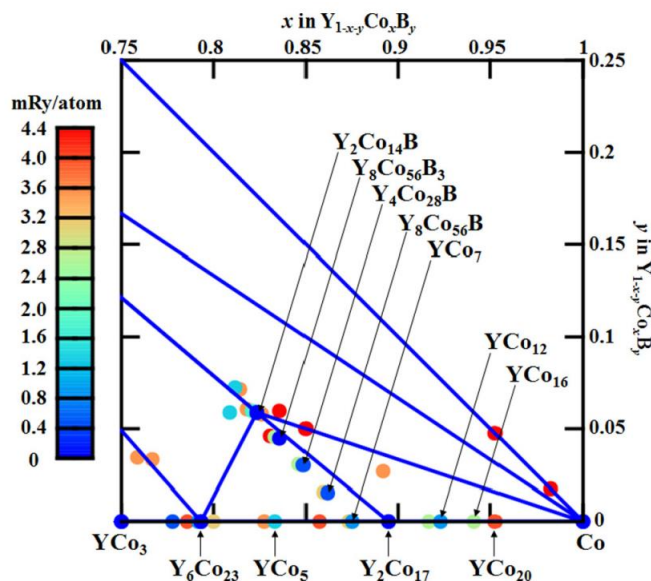


図3 Y-Co-B 構造のうち hull 距離が 4.4mRy/atom 以下の Co 濃度が多い有限温度相図領域。

$Y_{1-x}Co_x$  組成に対しては特にフォノンの効果を取り入れた有限温度安定性の評価を Phonopy を用いて行い、温度が上がるほど  $\Delta E$  が 0 に近づく様子が得られた。残念ながら、 $YCo_{16}$ ,  $YCo_{20}$  は  $YCo_{12}$  に比べて有限温度でも安定ではないが、 $\Delta E$  の差が小さいことから本物質を母物質として元素置換や挿入を行うと安定化される可能性は残っていると思われる。

更に、これらの物質のキュリー温度を平均場近似法で計算し、 $YCo_{12}$  よりも高い磁化 ( $\geq 1.47T$ ) と磁気相転移温度 (1378K) を示すことを確認した。更に、Co を Fe に置換した物質では、磁化は高くなるが、磁気相転移温度が低くなるという物理量の変化も確認した (表 1 参照)。また、磁気異方性の評価も行い、 $YCo_{16}$  では  $[723]$  方向が困難軸の一軸磁気異方性であり、Y の濃度は低くなるが  $YCo_{12}$  と同程度の異方性値  $0.46\text{meV/f.u.}$  を持ち、一方、 $YCo_{20}$  は  $[605]$  が困難軸の面内磁気異方性を持ち、異方性値は  $0.44\text{meV/f.u.}$  であることを示した。

表 1  $YCo_x$  の体積 ( $V$ )、単位原子あたりの磁化 ( $m$ )、全磁化 ( $M$ )、磁気相転移温度 ( $T_C$ )

Structure	$V$ ( $\text{\AA}^3/\text{atom}$ )	$m$ ( $\mu_B/\text{atom}$ )	$M$ (T)	$T_C$ (K)
$Y_2Co_{17}$	$R\bar{3}m$	12.60	1.354	1.252 1.25 <sup>a</sup> 1174 1167 <sup>a</sup>
$YCo_{12}$	$I4/mmm$	12.15	1.455	1.396
$YCo_{16}$	$P\bar{1}$	11.90	1.505	1.474
$YCo_{20}$	$C2/m$	11.77	1.555	1.539
$Y_2Fe_{17}$	$R\bar{3}m$	13.42	1.979	1.719 1.48 <sup>b</sup> 720 310 <sup>c</sup>
$YFe_{12}$	$I4/mmm$	12.88	2.019	1.826
$YFe_{16}$	$P\bar{1}$	12.65	2.093	1.928
$YFe_{20}$	$C2/m$	12.41	2.053	1.928

磁石の副相には具体的な構造が分かっていない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多元素系ではこれまでされてこなかった。今回、進化論的アルゴリズムで三元構造でも第一原理計算全エネルギー評価と組み合わせた構造探索が可能であり、結果として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具体的に示すことができ、多元素系で多くの物質発見が期待できる。また、新規結晶に対して磁化、磁気相転移温度、磁気異方性を計算できる体制をプロジェクトメンバー内で構築できていることも大きな利点である。

#### (b) 高次フォノン有限温度効果を取り入れる磁気異方性の評価手法の開発適用

従来手法の絶対零度における静的な第一原理計算によるエネルギーのみを用いている方法では実験の安定構造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、主として格子振動エントロピーを考慮した理論計算を行うと磁石相図が実験をよく再現するのが昨年度の研究で分かった。

一方、磁気異方性に関しては、例えば、 $\text{YCo}_5$ では絶対零度では計算値と一致する( $K_1 \sim 1\text{meV/f.u.}$ )が有限温度では実験では急激に  $K_1$  が減少する ( $K_1(T=300) - K_1(T=0) \sim -0.9\text{meV/f.u.}$ ) ことが知られている。既存の Disordered Local Moment (DLM)法有限温度電子状態理論ではこの減少を過大評価する ( $K_1(T=300) - K_1(T=0) \sim -1.5\text{meV/f.u.}$ ) ために異なる解析が求められていた。今回、磁気異方性値のフォノンの効果の評価手法を新規開発し  $\text{CaCu}_5$  構造の  $\text{YCo}_5$  に対して適用した。

有限温度磁気異方性は  $K_1(T) \approx F_{\perp}(V, T) - F_{\parallel}(V, T) \approx K_1^{el}(V_0) + K_1^{vib}(V_0, T) + K_1^{spin}(V_0, T) + \dots$  で表され、フォノンの寄与は  $K_1^{el}(V_0) + K_1^{vib}(V_0, T)$  のアンサンブル平均による寄与  $\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N [E_{\perp}^{el}(\{R_i\}^t) - E_{\parallel}(\{R_i\}^t)]$  から評価できる。ここに、 $K_1^{el}(V_0)$  自体は第一原理計算から評価可能な絶対零度での値であり、 $N$  はサンプル数で、 $\{R_i\}^t$  は例えば有限温度第一原理分子動力学による原子座標である。

対象とした  $\text{CaCu}_5$  構造には  $\text{YCo}_5$  だけでなく、 $\text{YFe}_5$  や  $\text{YNi}_5$  など元素置換された組成が存在し、Co 元素を置換することにより系の電子数の変化が可能であることが知られている。更に、 $\text{CaCu}_5$  構造の  $\text{YCo}_5$  は Co(2c)の面内振動により絶対零度では不安定構造であることが既存研究で分かっており、従来は分担者が開発した ALAMODE パッケージ(<https://github.com/ttadano/alamode>)による高次フォノン項の効果を通りこした有限温度フォノン計算を行う必要があった。更に、有限温度効果だけでなく電子数に対する効果を同時に考えた評価を行った。分担者が作成した ALAMODE パッケージを用いた計算結果を図 4 に示す。図 4(a)は全体、図 4(b)は差を表す。図中の 56 は  $\text{YCo}_5$  に対応する電子数であり、図 4(b)の白丸が実験値、オレンジ色丸が電子の有限温度を入れた DLM 法による計算結果を示す。一方、青丸がフォノンの高次の効果を含めた結果である。DLM 法による結果は  $K_1$  の高温での減少を過大評価している。一方、フォノンの効果は温度を大きくするにつれ  $K_1$  は減少するがその減少値は実験に大きく及ばない。また、Co を Fe に置換する電子数を小さくする方向に変化させると、 $K_1$  がより大きく減少し、電子数を  $-2/\text{f.u.}$  変化させると減少値が定量的に一致する大きな変化値を与えることも分かった。更に、この減少の起源についても調和近似であるがフォノンモードでの解析を行っている。実験による観測も待たれる。



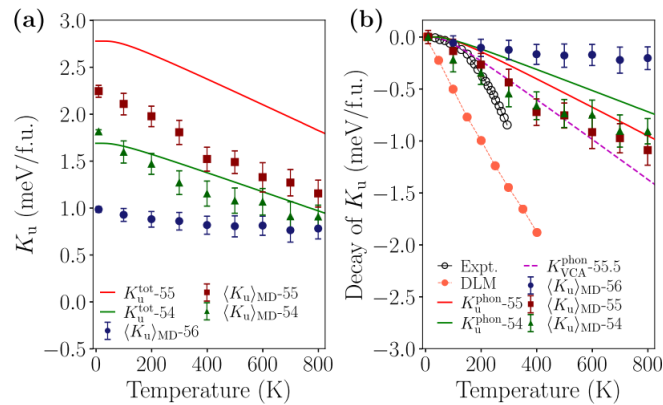


図4  $K_1$ (図中は  $K_u$  で示す) に対する高次を含めたフォノンの有限温度効果。

例えば、磁石の全磁化の温度依存性は経験的な Kuz'min の式が知られている。一方、第一原理計算では電子系の有限温度効果を取り入れた様々な理論手法の提案がなされているが実験値と温度依存性を一致させることはできていない。更に、磁気異方性に関しては理論計算による温度依存性の評価はほぼなされていない。残念ながら、 $\text{YCo}_5$  に対しては実験の温度変化と定量的には一致しなかったが、今回開発した手法は原理的には原子変位を与えるサンプル数を増やせばよい。このため「富岳」のような超並列計算機向きである。更に、絶対零度での不安定性を考慮しなくて良い計算が可能であるため適用物質範囲は広い。磁気異方性のフォノンによる有限温度効果に対して網羅計算が可能な手法が開発できたと考えられる。

(c) 四元ハイエントロピー合金の網羅物性量評価結果に対する既存解釈の妥当評価と新規「法則」の学習  
 ハイエントロピー合金は磁性が発現する場合に構造由来の軟磁性体となるが、乱れが大きいため高い電気伝導度を持つことが期待できる。四元等比ハイエントロピー合金に対して昨年度に約 14 万件の網羅物性値計算を行った。このデータを活用し知識に昇華させることは情報理論家の責務である。

データの活用法の一つは既存の解釈の妥当性を検証することである。既存の解釈はある構造の元素を系統的に置換したごく少数のデータセットの範囲内で簡単な特徴量を用いてされることが多い。電気伝導に関しては、異なるスピンの電子が別のスピンを持つ電子に対して散乱体になるという解釈から (P)DOS の大きさ、及びその差により残留電気抵抗率の大きさの解釈が行われてきた。一方、電気伝導率の網羅データを持っていれば Projected Density of States (PDOS) を説明変数として回帰モデルを学習するとその解釈の妥当性を検証することが可能である。しかし、残念ながら従来の解釈はデータ全体を説明するには妥当で無いことが明らかになった。

データを活かすもう一つの方法は新規回帰モデルの学習がある。四元ハイエントロピー合金の残留電気抵抗率は元素の基本的な 10 の特徴量に対して、四つの構成元素に対する最大値、最小値、和、標準偏差操作を行った計 40 の説明変数を用いた。k 近傍回帰モデルでは ( $R_{\text{test}}^2=0.94$ )、ランダムフォレスト回帰モデルでは ( $R_{\text{test}}^2=0.96$ ) の高い予測性能値を持つ回帰モデルを学習することができた (図 5 参照)。更にこの回帰モデルをホワイトボックス化することで、周期律表のグループの平均値と標準偏差が最も重要な説明変数であることが明らかになった。

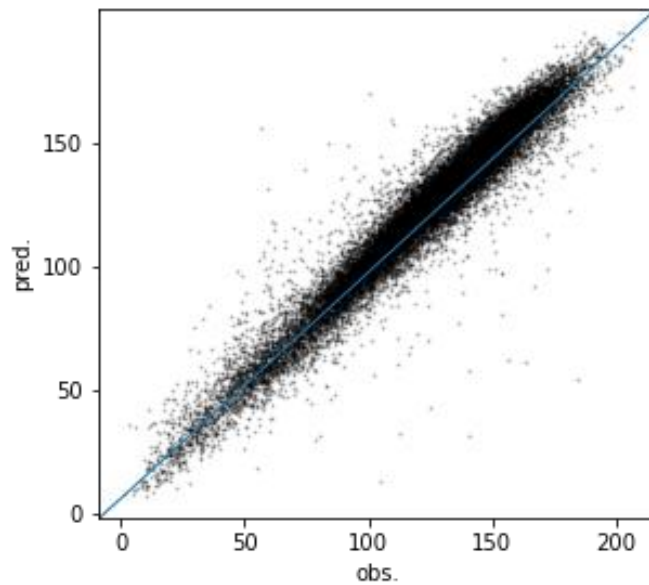


図5 四元 BCC ハイエントロピー合金の残留電気抵抗率 (単位は  $\mu\Omega \cdot \text{cm}$ ) の約 7 万件の網羅計算値(obs.) と k 近傍回帰モデル( $R_{test}^2=0.94$ )による予測値(pred.)。

具体的に周期律表を用いて残留電気伝導率の「法則」を表したのが図 6 である。四つの元素記号 WXYZ で表される四元等比ハイエントロピー合金に対し、XYZ を図中の元素記号、W を図中の周期律表を模した位置の元素とした場合の残留電気抵抗率の大きさを示す。図中の丸は残留電気抵抗率の大きさを示し、全てのパネルで同じスケールで表している。ほぼ同じ周期律表グループの元素を用いた場合の残留電気抵抗率が小さく、異なる周期律表グループ間の元素を用いた場合は逆に大きいことが分かる。一方、二元系で微小ドープした乱れが微小な Cu、Al 導線でも周期律表に書くと同じ傾向が報告されている。今回の四元系は乱れが最も大きな場合であり、合わせてこの「法則」が残留電気抵抗率の一般的な傾向である可能性は高いだろう。膨大なデータそして多くの説明変数をそのまま用いるのではなく、簡単な「法則」に昇華させることで、人がその知識を活かすことが簡単になり大きな価値を持つだろう。

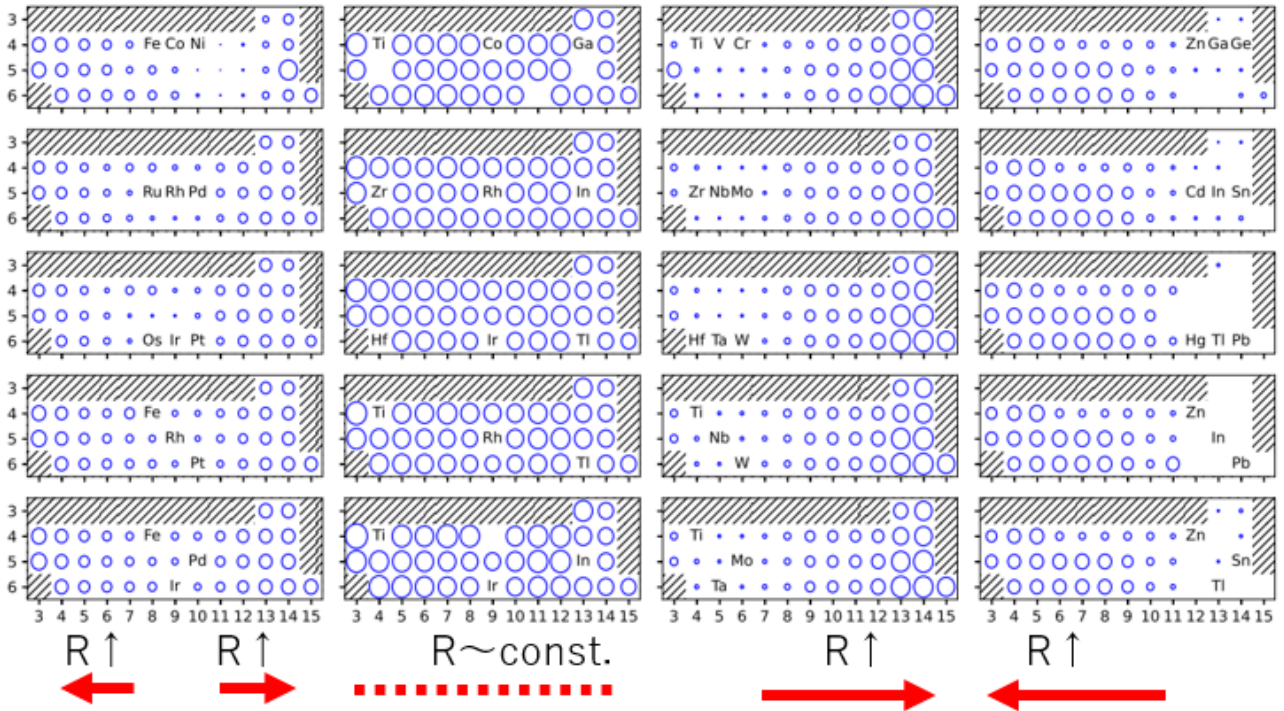


図 6 WXYZ で表される四元ハイエントロピー合金の残留電気抵抗率 (R) の大きさ。

(d) AkaiKKR 用網羅計算 Python ライブラリの開発と公開

欧米を中心とした第一原理計算データベースは VASP などの波動関数法による第一原理構造網羅計算が行われ、例えば materials project では約 14 万件に及ぶ膨大なストイキオメトリな結晶の (主として) 絶対零度の構造安定性のデータベースが作成されている。一方で自然界では元素置換・添加などを行った合金の存在比率の方が遥かに多い。更に、物質としての有用性を評価するには、構造安定性だけでなく物性値の評価を行う必要があることは言うまでもない。

Green 関数法電子状態計算 AkaiKKR パッケージは Coherent Potential Approximation (CPA)法を適用することで、一様な元素置換・添加された物質を高速に計算でき合金の磁性物質物性値の評価を高速に行え、また実験とよく一致する電気伝導を計算できる手法である。

AkaiKKR を用いてある結晶構造に対してハイエントロピー合金、 $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{B}_3$  に代表されるある種の構造などに対し元素を置換した物質の網羅物性値評価が分担者などによりなされている。一方、AkaiKKR により異なる結晶構造に対する網羅計算はあまり行われていない。この理由は、主として、結晶構造を cif ファイルなどから結晶対称性を最大限用いた形で AkaiKKR 入力構造に変換するのが困難だった為である。分担者は構造変換を行うモジュールを作成し、既存の AkaiKKR 用 Python ライブラリと合わせて公開した。

実験による結晶構造 cif ファイル及び、自然界に存在しない空間群に対しては cif ファイルを作成し、計 1 万件以上の cif ファイルでテストを行った。また、有限温度電気伝導計算には微小変位を与える必要がある。この際には結晶対称性を高精度に保った微小変位を与えないと T-matrix が収束しないという問題があった。この問題に対しても cif ファイルの空間群を利用した AkaiKKR 入力構造への変換ができるようになり、空間群操作による高精度な微小変位の自動的作成が可能になった。この Python モジュール

は `github` にて公開している(<https://github.com/AkaiKKRteam/AkaiKKRPythonUtil>)。異なる結晶構造に対して入力生成が容易に可能となったことで、諸構造への網羅計算実行が行われることが期待される。

(e) フォノン有限温度効果による自由エネルギーの第一原理網羅計算を自動化するツールの作成と公開

従来型の自動化フレームワークはサーバーからバッチジョブとして実行できる環境であることを仮定して作成されていた。このため、計算環境を変えると異なるサーバー上での実行になり実行結果の統一的な取得が困難であった。また、計算が失敗した際に計算過程の確認も自動計算の必要な要素であるが、従来のワークフローではこれらの点を区別して実行し結果を保存する統合的な手段が存在しなかった。近年は `Python` による `AiiDA` フレームワークを利用したワークフロー作成そして計算自動化が欧州を中心として行われている。`AiiDA` は①原子位置に対する第一原理計算を行うことを念頭に開発されており、②ローカル PC から計算サーバーへ `ssh` を利用してリモートログインし自動的にファイルの送受信を行い、③入出力及びそれらの変換情報も実行時にデータベース化することで計算過程と結果を保存できる仕組みを持ち、④入出力に対する統一的な検索を行え、⑤開発済みプラグインを用いることで異なる第一原理プログラムに対応でき、⑥エラー処理を書く仕組みを持つ、ことで作成済みモジュール再利用可能性を増したワークフロー環境である。

分担者が開発している `ALAMODE` パッケージは有限変位法を用いたフォノンによる有限温度自由エネルギーや、上で述べた磁気異方性の効果を評価できる。しかし、その実行は各実行過程を `shell script` で記述・実行し、第一原理計算は計算機を計算サーバーに移動し実行させるという従来方式を取っていた。更に、フォノンの計算にはスーパーセルを定義する必要があるが、この定義によっても結果は大きく変化する。このため、更にスーパーセルを変化・実行させ結果を人が見て選択する必要がある。このため、従来方法では計算対象が増えると手間が増加し、その分を人間が担う必要があった。

人の手間を最小限にして網羅実行可能な自動化を行うために `ALAMODE` パッケージの `AiiDA` ワークフローを作成した([https://github.com/nim-hrkn/alamode\\_aiida](https://github.com/nim-hrkn/alamode_aiida))。このワークフロー例を図 7 に記す。上から下へ実行し、緑と青の楕円が入出力データであり、赤系の四角がデータを変換するモジュールを示す。

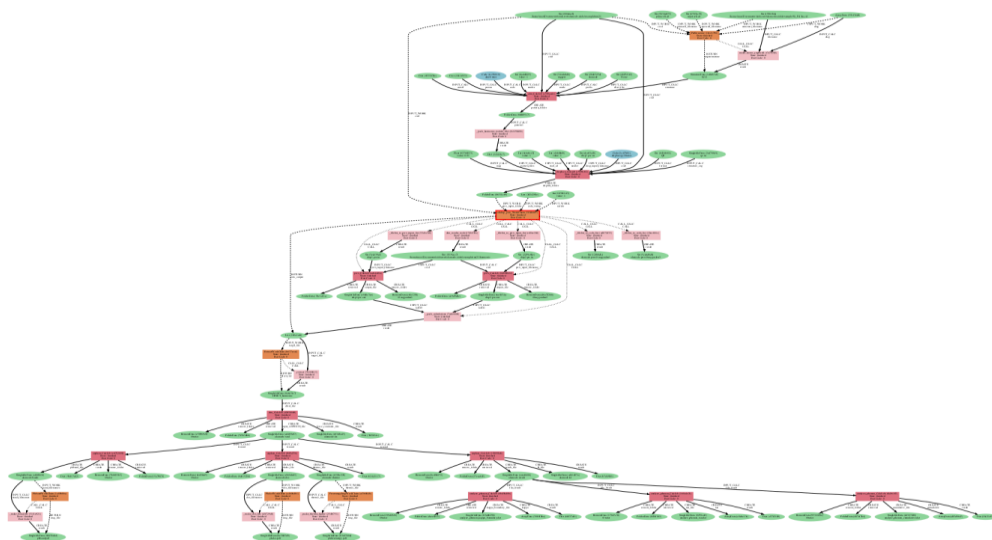


図 7 `ALAMODE` パッケージ調和フォノン項部分の `AiiDA` ワークフロー。

(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、保磁力の界面構造依存性を調べる。

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)

Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) + コヒーレントポテンシャル近似 (CPA) 法に立脚した、磁性合金材料を対象とする基盤的シミュレーションコードの開発を行った。結晶磁気異方性を第一原理的に計算するため、スピン軌道相互作用とオープン・コア近似を考慮したフルポテンシャル KKR 法を開発・拡張した。本コードと「AkaiKKR」コードを組み合わせることで、永久磁石材料の磁気特性（磁化、キュリー温度、磁気異方性）の定量的評価、及び多目的最適化が可能になる。実際に、 $Y(\text{Co,Fe,Cu,Ni})_5$ 系と $(\text{La,Ce})(\text{Co,Fe})_5$ 系からなる材料空間を網羅的に探索することで、永久磁石材料を開発にすに当たって利用価値の高い磁気物性データを構築した。また、永久磁石材料の有限温度特性を特徴づけるマグノン励起およびフォノン励起をシングルサイト CPA のもとで取り扱い、磁気特性を評価した。さらに、四元磁性高エントロピー合金の大規模物性データベースを構築し、頻出パターンマイニングを適用することで、元素特徴量とスピン配列特徴量を抽出した。

(実施・検討内容)

#### (a) フルポテンシャル KKR-CPA 法の開発と拡張

東京大学物性研究所は長年に渡り、マフィンティン型の球対称ポテンシャルを仮定する全電子 KKR-CPA プログラム「AkaiKKR」を中核にした磁性材料シミュレーション基盤システムを用いて、永久磁石材料の磁化とキュリー温度を網羅的に計算し、電子論の立場から微視的メカニズムの解析と新材料の探索を行ってきた。

希土類磁石が永久磁石材料として高性能である理由は、希土類元素の f 軌道に由来する結晶磁気異方性であり、その起源は f 状態のスピン軌道相互作用である。磁気異方性はスピン軌道相互作用に静電相互作用と軌道混成が加わって発現する。永久磁石においては、f 状態自体の軌道混成の効果は例外的な場合を除いて限定的で、磁気異方性は主として f 電子の静電相互作用、4f-5d フント結合、5d-3d の軌道混成が主な要因となる。

KKR-CPA 法により磁気異方性を定量的に評価するためには、結晶の対称性を反映したフルポテンシャルとスピン軌道相互作用の考慮、そして f 電子の妥当な取り扱いにより、異方的な f 電子の分布による異方的静電相互作用および異方的な電子移動エネルギーを計算する必要がある。「AkaiKKR」では磁気異方性の高精度計算は困難なため、上記要件を満足するフルポテンシャル KKR 法に基づいた KKR-CPA 法のコード開発を実施した。

フルポテンシャル KKR 法では、空間を shape function と呼ばれる形状関数で記述されるボロノイセルにより分割(図 8c))し、各セルポテンシャルと形状関数は球面調和関数を用いて展開される。マフィンティン型 KKR 法の場合と同様に、系のグリーン関数はシングルサイト散乱項と多重散乱項に分けて記述される。異方的ポテンシャルがシングルサイト・シュレディンガー方程式の解に与える寄与 ( $R_{LL'}(\mathbf{r})$ ) は、球対称ポテンシャルでのシングルサイト・シュレディンガー方程式の解 ( $R_L(\mathbf{r})$ ) から、ボルン近似を用いて逐次的に求める。

従来、永久磁石の f 電子の静電相互作用は、f 電子が存在しないものとして静電ポテンシャルを計算することによって計算されてきた。F 電子に対する静電ポテンシャルをつくる電子分布が、f 電子の存在に



よって大きく影響を受けることを考えると到底容認できない取り扱いと言わざるをえない。しかし、局在した f 電子の取り扱いには困難を極める。そのため、第ゼロ近似として、フルポテンシャル KKR-CPA 法にオープンコア近似を実装し、f 電子に適用した。F 電子系には LDA+U 法や動的平均場近似が用いられることが多いが、パラメーター任意性があるため網羅計算には妥当ではない。

図 8(a)はフルポテンシャル KKR-CPA 法による、結晶磁気異方性計算のベンチマークを示している。ターゲットは CaCu<sub>5</sub> 型 Y(Co,Fe)<sub>5</sub> 系であり、縦軸は磁気異方性エネルギー、横軸はユニットセル内の Fe の個数を表している。CPA を用いることで、スーパーセルを用いることなく、高精度で不規則系の電子状態計算が可能である。Fe 原子は 3g サイトのみを置換するとし(図 8(b))、磁気異方性は量子化軸を [100]、[001]に向けた時の全エネルギー差から計算した。我々のフルポテンシャル KKR-CPA 法は、Y(Co,Fe)<sub>5</sub> における磁気異方性の絶対値は実験値に比べて過小評価しているが、他の計算手法に比べて実験のケミカルトレンド (黒線) をよく再現しているのがわかる。また、同じフルポテンシャル KKR-CPA 法である「SPR-KKR」コードは、Y(Co,Fe)<sub>5</sub> の磁気異方性を非常に小さく予測してしまう。

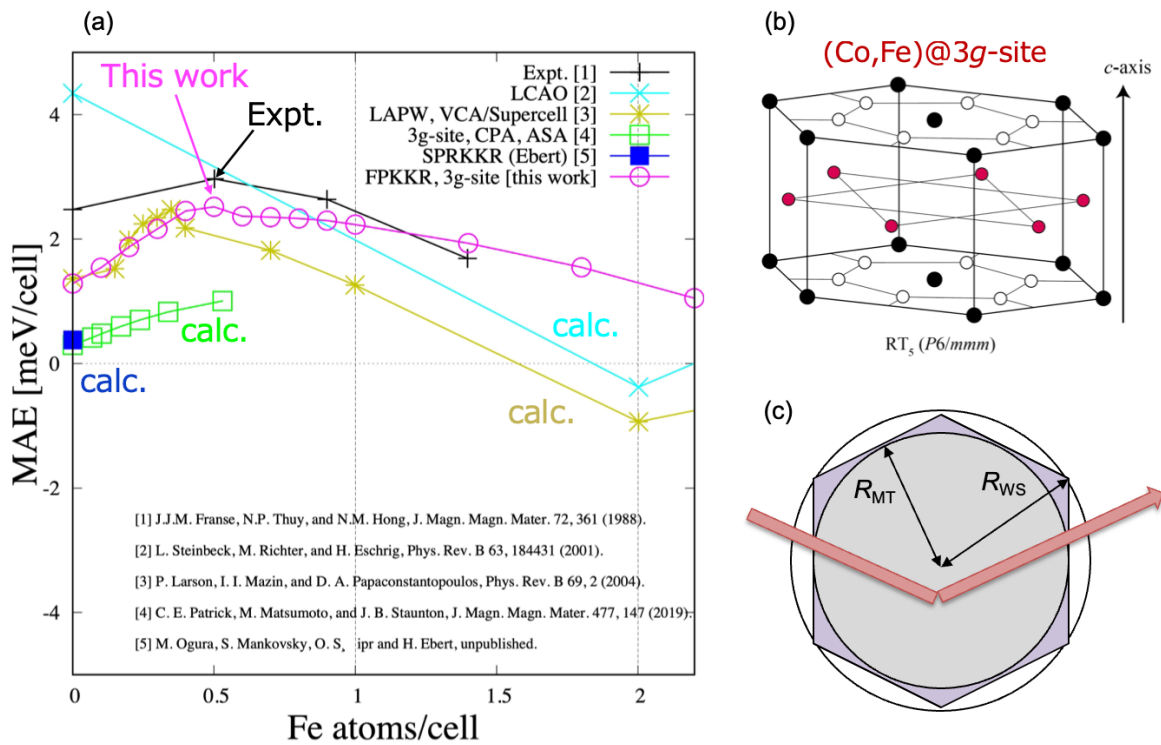


図 8 フルポテンシャル KKR-CPA 法のベンチマーク。ターゲットは Y(Co,Fe)<sub>5</sub>。

### (b) 永久磁石材料 Y(Co,Fe,Cu,Ni)<sub>5</sub> 系の結晶磁気異方性と磁化

フルポテンシャル KKR-CPA 法を用いて、磁石材料 Y(Co,Fe,Cu,Ni)<sub>5</sub> の結晶磁気異方性定数( $K_u$ )と磁化( $J_s$ )を系統的に計算した。これらの物性値をもとに、高い磁石性能をもつ材料の探索をおこなった。交換相関汎関数は局所密度近似による汎関数を用いた。格子定数は、YCo<sub>5</sub> などの母材料について最適化をおこない、非化学量論組成をもつ材料の格子定数は Vegard 則により内挿した。

YCo<sub>5</sub> 中のコバルトは結晶学的に 3g と 2c サイトを占有しており(図 8(b))、鉄と銅を 3g サイト、ニッケルを 2c サイトへ 0.1 濃度ずつ置換する組は 726 個ある。この材料 Y(Co<sub>1-x-y</sub>Fe<sub>x</sub>Cu<sub>y</sub>)<sub>3</sub>(Co<sub>1-z</sub>Ni<sub>z</sub>)<sub>2</sub> の中で、強

磁性状態にある材料の  $K_u$  と  $J_s$  の計算値を図 9(左)に示す。第三元素を少量添加した場合( $x=0.1$  など)、 $YCo_5$  の参照値と比べて  $J_s$  は減少するが  $K_u$  は増大する。銅・ニッケル添加は濃度が高くなるにつれて磁化が単調に減少する一方、鉄添加は高濃度域( $0.6 \leq x$ )で  $K_u$  と  $J_s$  とともに  $YCo_5$  の値を超える。とくに図 9(左)の右上に位置する  $YFe_3Co_2$  は、計算した材料の中で最も大きな  $K_u$  と  $J_s$  を同時に有するため、磁石材料として有望であると考えられる。

$YFe_3Co_2$  は高い  $K_u$  と  $J_s$  を同時に有することが期待できるが、1-5 相では鉄添加による相安定性が課題となる。そこで、「ニッケルを添加することで 1-5 相を安定化させる」という理論計算の知見から、 $YFe_3(Co_{1-z}Ni_z)_2$  の  $K_u$  と  $J_s$  を計算した。図 9(右)に  $K_u$  と  $J_s$  のニッケル濃度依存性の計算結果を示す。ニッケル添加により  $K_u$  と  $J_s$  はともに減少しており、ニッケル添加による相安定性と磁石性能はトレードオフの関係にあると考えられる。しかし、2c サイトのコバルトの半分をニッケルで置き換えた場合( $z=0.5$ )でも、その  $K_u$  は  $YCo_5$  の値と同程度に高いことが期待できる。

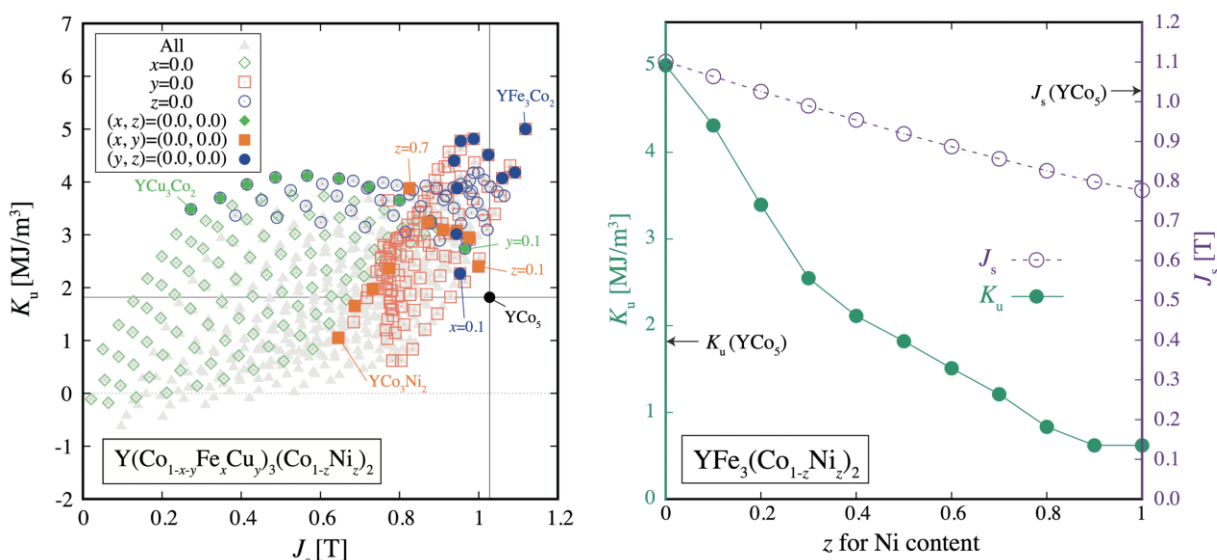


図 9 (左) :  $Y(Co,Fe,Cu,Ni)_5$  の磁化  $J_s$  と結晶磁気異方性定数  $K_u$  の計算値。  $YCo_5$  の基準値を黒丸に示す。(右):  $YFe_3(Co_{1-z}Ni_z)_2$  における異方性エネルギー定数  $K_u$  と磁化  $J_s$  の計算値。

### (c) (La,Ce)(Co,Fe)<sub>5</sub> 系の結晶磁気異方性と磁化

La-Co, Ce-Co 中にあるコバルトの一部を鉄で置換した  $(La_{1-\alpha}Ce_{\alpha})(Co_{1-x}Fe_x)_5$  について、 $K_u$  および  $J_s$  を理論計算により評価した。交換相関汎関数は一般化勾配近似による汎関数を用いた。その他の計算手法は  $YCo_5$  系の場合と同じである。図 10 に  $K_u$  および  $J_s$  の鉄濃度依存性を示す。この系では鉄を添加すると  $J_s$  は増大するが、20%以上添加すると  $K_u$  は減少に転じる。詳細に見ると、セリウム系( $\alpha=1.0$ )において鉄量  $x=0.1$  (Co の 10% を置換) で  $K_u$  の極大値が確認できた。また、ランタン系( $\alpha=0.0$ )についても、 $x=0.05$  (Co の 5% を置換) で極大値をとった。このような少量の鉄であれば、1-5 系も安定して存在できる可能性があり、(La,Ce)Co<sub>5</sub> 系への鉄添加が有効であると考えられる。

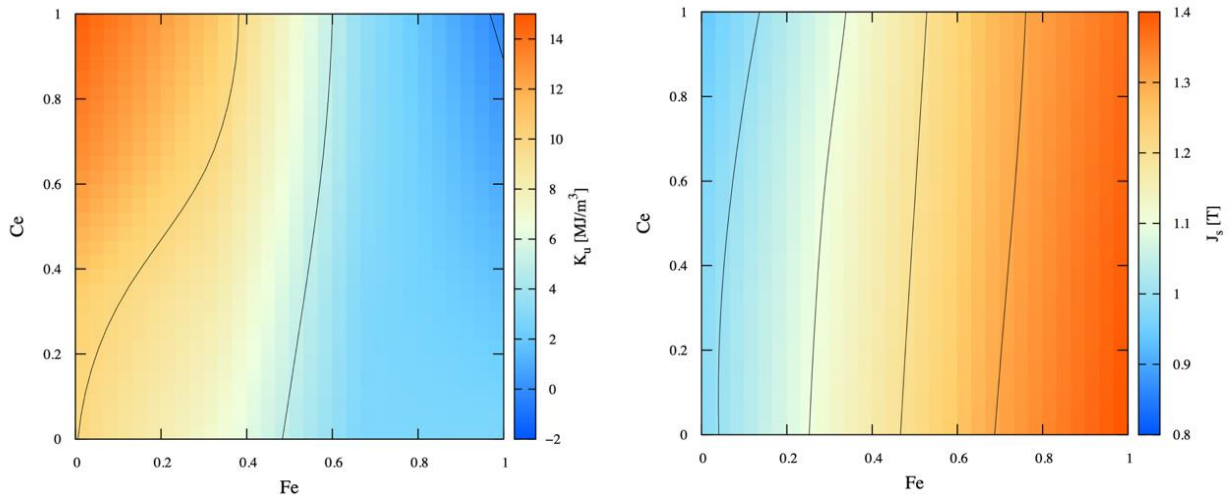


図 10  $(La_{1-a}Ce_a)(Co_{1-x}Fe_x)_5$  の(左)結晶磁気異方性定数  $K_u$  と(右)磁化  $J_s$ 。

(d) 「AkaiKKR」による永久磁石材料の有限温度特性の評価

永久磁石材料の有限温度特性は永久磁石の性能向上を目指す上で重要な指標となる。永久磁石の動作温度(300K~600程度)で、特性を決めているのは主としてマグノン励起およびフォノン励起である。これらの励起を静的近似、鞍点近似およびシングルサイト近似のもとでとりあつかい、電子散乱の効果を取り入れて、磁気特性の評価を行った。

ベンチマークとして bcc 鉄の場合についてキュリー温度( $T_C$ )を評価した結果、マグノン散乱の効果を取り入れると  $T_C$  は 200K 近く上昇し 1200K 程度となる(図 11(a))。これに加えてフォノン散乱の効果を入れると、 $T_C$  は逆に抑えられ、最終的には( $T_C$  の実験値に比べてかなり低い)880K 程度の  $T_C$  が得られた。この値はマグノン散乱がないとしてもあまり変化せず、この系においてはフォノン散乱が支配的であることを示している。

現実の永久磁石材料である  $Nd_2Fe_{14}B$  について磁化の温度依存性を計算した。この計算においてはマグノンの励起に関しては、まずマグノン励起の強さに応じた有効ハイゼンベルクハミルトニアンを構成する。それをを用いて得られるマグノン励起が仮定したマグノン励起の強さと一致する温度を求めることによって磁化の温度依存性を決める。フォノン励起に関しては与えられた温度における平均二乗原子変位をデバイモデルにより算出して、フォノン励起とした。得られた結果を図 11(b)に示す。低温度領域に於いて磁化の減少が実験値に比べて大きい、単一イオン磁気異方性を全く考慮していないことと、有効ハイゼンベルクの取り扱いが分子場近似に基づくものであることが影響している。顕著な特徴としてこれらの励起との結合によって  $T_C$  において弱い一次転移を示すことである。



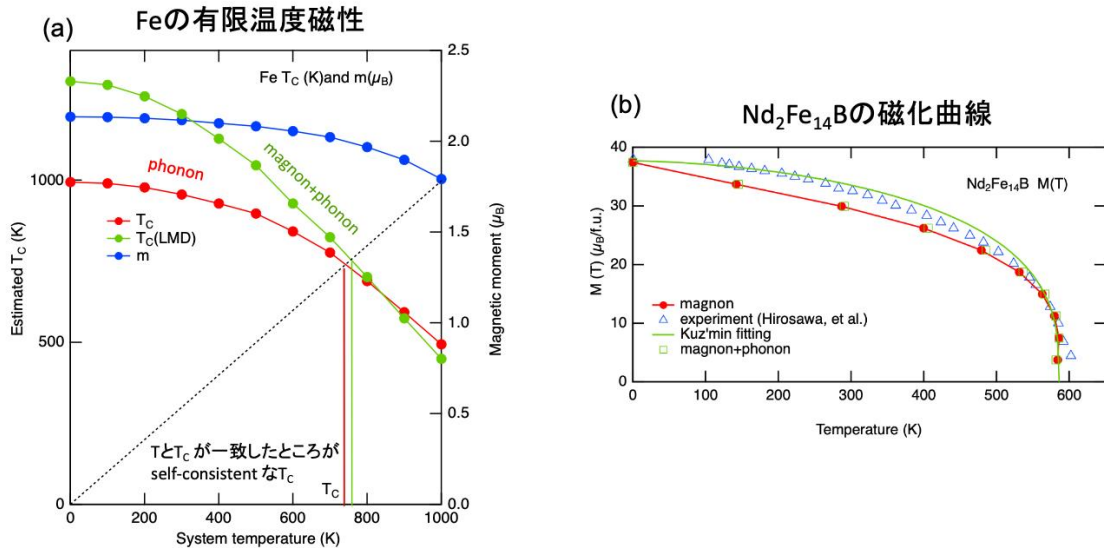


図 11 マグノン励起とフォノン励起を考慮した(a) Fe のキュリー温度( $T_C$ )と(b) Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B の磁化曲線。

(e) 頻出パターンマイニングを用いた四元磁性ハイエントロピー合金の特徴量解析

物質・材料研究機構の木野日織氏、知京豊裕氏との共同研究のもと、四元ハイエントロピー合金の大規模物性データベースを構築した。データは「AkaiKKR」コードに立脚した自動網羅ツールを「富岳」上で実行することで創出されており、約 14 万件の電子状態、磁化、キュリー温度、残留抵抗を含んでいる。データ科学手法を構築したデータベースに適用することで、物性支配因子に関する知識を獲得することができる。

今回は、磁化とキュリー温度といった磁気特性に着目し、これらの特徴づける量を抽出するため、頻出パターンマイニングを用いて区画特徴特定を行った。図 12(a)は、BCC 構造を有する四元ハイエントロピー合金の、磁化とキュリー温度の 2 次元マップである。高磁化・高キュリー温度を有する系は色分けされている。まず、このマップをデジタイズして区画分割を行う。図 12(b)では、10×10 の区画に分割されており、カラーバーは区画内に含まれる系の数を示している。次に各区画に対してトランザクションデータベースを各系のレコードから構築する。レコードを構成するアイテムを次のように定義する。

1. 四元高エントロピー合金の構成元素 : element1、element2、element3、element4。
2. デジタイズした区画の ID : C10 等 (図 12(b)を参照)。
3. 「AkaiKKR」によって得られた構成元素のマフィンティン球内の局所磁気モーメントを  $|m_1| > |m_2| > |m_3| > |m_4|$  となるように並び替える。 $m_1$  を正に取り直し、 $m_{th}$  以上を磁気モーメントがあると定義して  $m_1$  からの相対磁化で強磁性、反強磁性の磁化並びを定義する。例えば、 $|m_1| > |m_2| > |m_3| > m_{th} > |m_4|$  かつ  $m_2 < 0, m_3 > 0$  の場合、この系の磁気モーメントに対するアイテムを階層的に文字列 FA、FAF、FAFN と定義する。 $|m_1| > |m_2| > m_{th} > |m_3| > |m_4|$  かつ  $m_2 < 0$  の場合は、FA、FAN のみとする。

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

図 12(c)(d)はそれぞれ頻出パターンマイニングによって抽出された、各区画の元素特徴量とスピン配列特徴量を示している。高キュリー温度を得るためには、Fe と Co 原子を同時に含む必要があるのが、本解

析によりわかる。高磁化には、Fe と Mn 原子のスピンの平行に揃う必要がある。合金中の Fe と Mn のスピン配列は、格子定数、他元素種、成長条件に大きく依存することが知られており、これらを制御するのが高磁化実現のキーポイントになる。また、我々の頻出パターンマイニングは Rh 原子が磁化を増強させる効果があることを示唆している。セル ID : B1、D1、E1 からわかるように、early transition metal のスピン配列は late transition metal と反平行になる。これは、電子状態の観点から、次のように理解できる。例えば、Cr と Fe 原子を含む高エントロピー合金を考えると、Fe 原子に比べて小さい原子番号を有する Cr 原子は、相対的に斥力的なポテンシャルを感じ、その 3d 状態はフェルミ準位直上に押し上げられる。その結果、Cr 原子と Fe 原子の 3d 状態と逆向きにスピン分裂することになる。

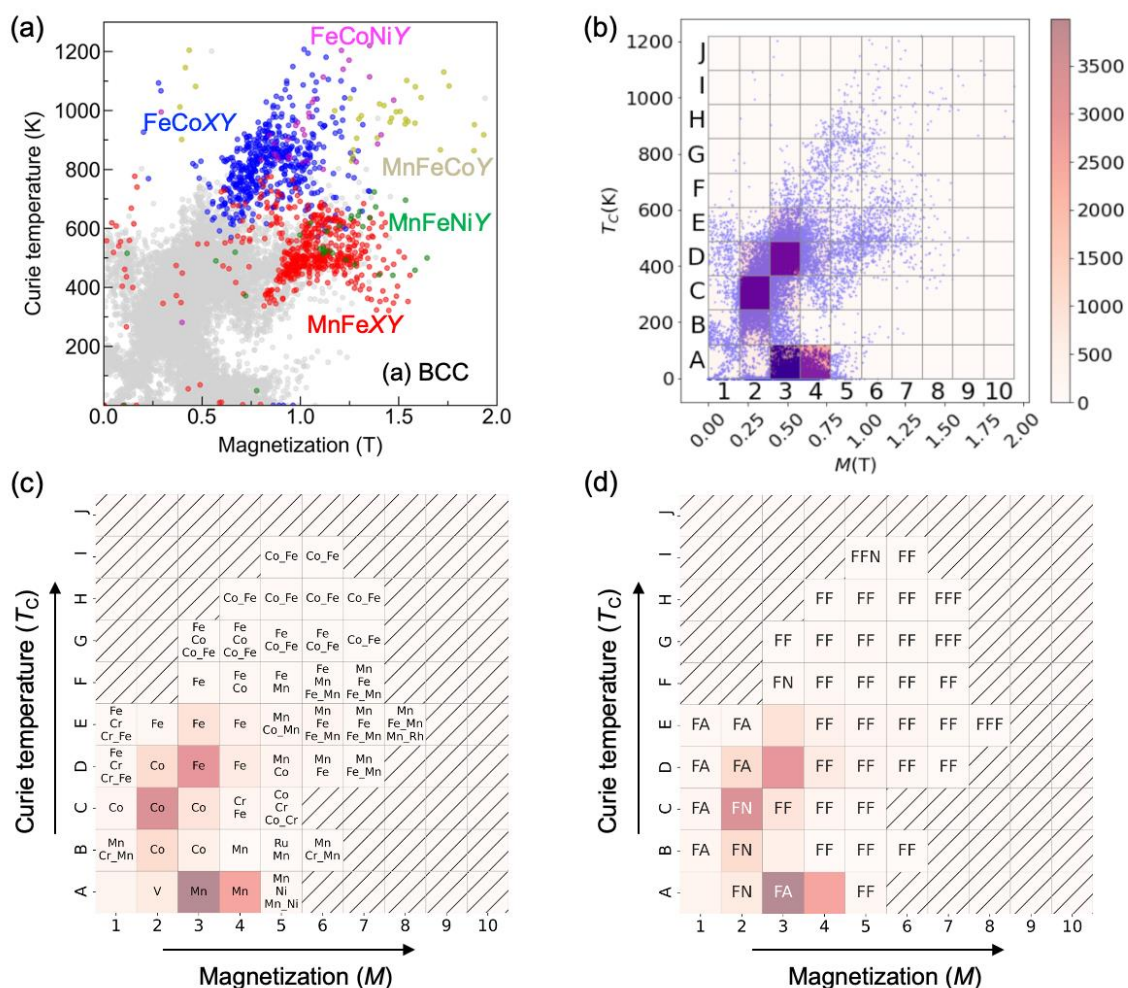


図 12 (a)BCC 構造を有する四元ハイエントロピー合金における磁化とキュリー温度の 2 次元マップ。(b) 2 次元マップの区画分割。(c)、(d)頻出パターンマイニングによって得られた元素特徴量とスピン配列特徴量。

(iv) 鉄濃度を変えた一連の鉄基希土類化合物の安定性を評価する。安定性に優れた構造に対して、組成を変えた混晶の第一原理計算を実行し、高い磁気物性値を有する組成を調べる。

協力機関(再委託先)：なし

(総括)

鉄濃度を変えた Sm-Fe 系  $\text{CaCu}_5$  型派生構造の安定性を評価した。第一原理計算データとクラスター展開を用いた解析の結果、温度上昇とともにダンベル鉄がランダムに配置した不規則相が安定化することがわかった。また、高いキュリー温度をもつ  $\text{NdFe}_{12}$  のドーパ系を第一原理計算により調べた。鉄サイトにおけるドーパント濃度が 1/6 以下の約 90,000 組成に対するベイズ最適化の結果、Co 添加や Co と As,Ge の共添加によりキュリー温度が上昇することがわかった。

(実施・検討内容)

#### (a) Sm-Fe 系、Sm-Co 系における不規則相の安定性

永久磁石の主相化合物には、高磁化のために Fe、あるいは Co をベースとし、また高結晶磁気異方性のために希土類元素を加えることが有望である。そのため、高 Fe/Co 濃度希土類化合物の新物質探索に注目が集まっている。代表的な希土類磁石化合物として、 $\text{CaCu}_5$  型構造、 $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$  型構造、 $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$  型構造、 $\text{ThMn}_{12}$  型構造の物質群が知られているが、これらの構造は  $\text{CaCu}_5$  型構造を出発点として、希土類の一部を 2 個の Fe、あるいは Co (ダンベルと呼ばれる) で置換することにより得られる。ダンベルの配置には無限のバリエーションが考えられ、それ以外の安定相に期待が高まっている。昨年度は、第一原理計算とクラスター展開を用いて、複雑構造の生成エネルギーを予測した。第一原理計算には、Quantum ESPRESSO コードを用い、 $\text{CaCu}_5$  型構造の  $2 \times 2 \times 2$  セルに対して一部、あるいは全部の希土類をダンベルで置換する全ての配置に対する計算を実行した。これを訓練データとして得られたクラスター展開モデルを用いて、今年度はダンベルが不規則に配置する  $\text{TbCu}_7$  型構造の安定性を調べた。まず、与えられたダンベル濃度に対して、ダンベルが不規則に配置した場合の自由エネルギーをクラスター展開モデルで計算した。ついで、不規則相の配置エントロピーを Bragg-Williams 近似で求め、自由エネルギーを評価した。図 13 に Sm-Fe 系と Sm-Co 系に対する結果を示す。温度上昇とともにエントロピーの効果で不規則相が安定化することがわかる。 $\text{bcc-Fe}$  ( $\text{hcp-Co}$ ) を通る直線と自由エネルギー曲線の接点からダンベルの固溶限を評価した。その結果、温度上昇とともに固溶限が増加し、温度 0.15 eV (約 1740 Kelvin) では  $\text{SmFe}_z$  の  $z$  が約 9 であることがわかった。

#### (b) ベイズ最適化による高キュリー温度組成の探索

$\text{ThMn}_{12}$  型構造を有する鉄基希土類化合物は高磁化を有することから磁石材料の主相化合物として注目されている。本研究では、 $\text{NdFe}_{12}$  に注目し、Fe の一部を元素置換することでキュリー温度が上昇するか第一原理計算と平均場近似を用いて調べた。置換元素には、原子番号 19 (K) から 36 (Br) の 18 元素を選んだ。Liechtenstein の方法でドーパ系のキュリー温度の変化を調べ、Cr, Co, Ni, Ge, As の 5 個の元素に絞った。次に、複数のドーパントを考慮した  $\text{Nd}(\text{Fe}, \text{Cr}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Ge}, \text{As})_{12}$  を考え、Fe サイトへの置換量が 20% 以下の 92,378 組成を対象とした。ベイズ最適化を適用して高キュリー温度の組成を探索した。その結果、

Co がキュリー温度を上昇させること、As や Ge も有効であることがわかった。表 2 にトップ 10 のリストを示す。

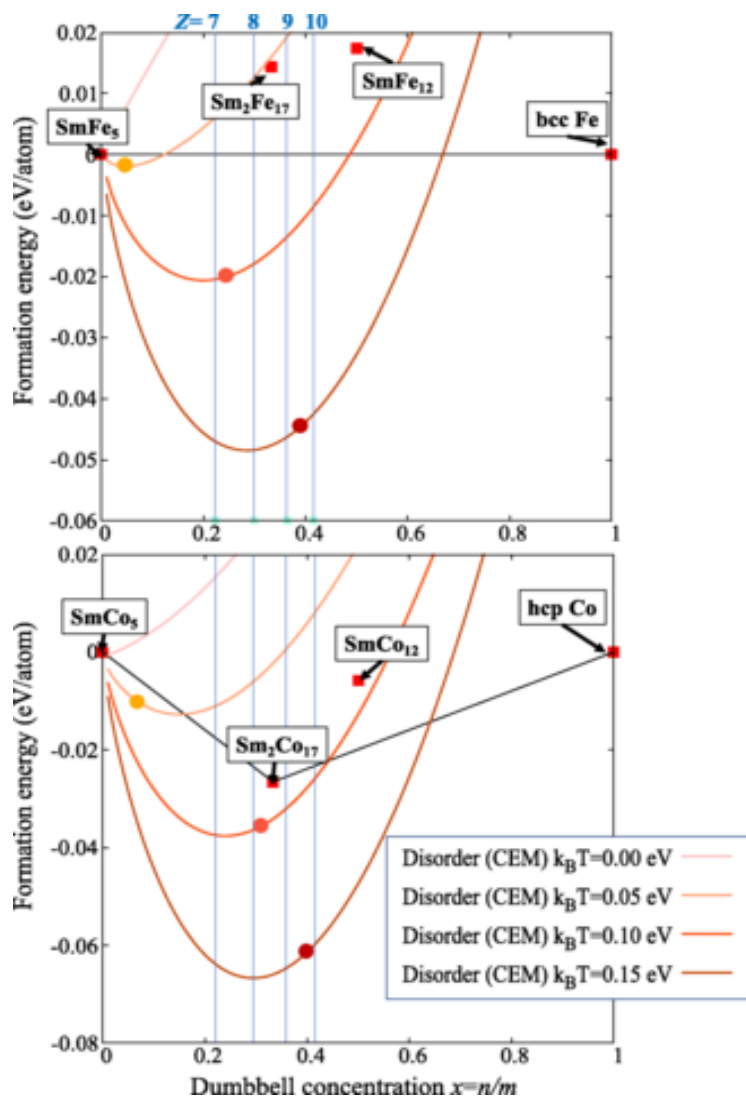


図 13 クラスタ展開モデルによる不規則相 (TbCu<sub>7</sub> 型構造) の自由エネルギー。F. Kuroda et al., Phys. Rev. Mater. **5**, 124405 (2021)より転載。

Formula	$T_c$ (K)	$\mu_0 M$ (T)	$\Delta E$ (eV)
NdFe <sub>10</sub> Co(8f) <sub>1.8</sub> As <sub>0.2</sub>	1201	1.72	-0.237
NdFe <sub>10</sub> Co(8f) <sub>1.6</sub> As <sub>0.4</sub>	1200	1.69	-0.267
NdFe <sub>10</sub> Co(8f) <sub>1.8</sub> Ge <sub>0.2</sub>	1199	1.71	-0.381
NdFe <sub>10</sub> Co(8f) <sub>1.4</sub> As <sub>0.6</sub>	1198	1.65	-0.299
NdFe <sub>10</sub> Co(8f) <sub>1.2</sub> As <sub>0.8</sub>	1198	1.62	-0.211
NdFe <sub>10</sub> Co(8f) <sub>2.0</sub>	1198	1.76	-0.333
NdFe <sub>10</sub> Co(8f) <sub>1.6</sub> Ge <sub>0.2</sub> As <sub>0.2</sub>	1197	1.68	-0.410
NdFe <sub>10</sub> Co(8f)As	1197	1.59	-0.368
NdFe <sub>10</sub> Co(8f) <sub>1.6</sub> Ge <sub>0.4</sub>	1195	1.68	-0.554
NdFe <sub>10</sub> Co(8f) <sub>0.8</sub> Ge <sub>1.2</sub>	1195	1.56	-0.403
NdFe <sub>12</sub>	881	1.73	0.405

表 2 ベイズ最適化により得られた高キュリー温度を有する Nd(Fe,Cr,Co,Ni,Ge,As)<sub>12</sub> の組成。キュリー温度は、平均場近似を用いて評価した。T. Fukazawa et al., Acta Materialia **226**, 117597 (2022).

(v) データ駆動手法を用いて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、磁性に関する構造などの予測モデルを構築し、データ取得の効率化や構造理解を加速する。

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）

データ駆動手法を用いて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、磁性に関する構造などの予測モデルを構築し、データ取得の効率化や構造理解を加速した。CaCu<sub>5</sub> 構造をもつ磁性材料の予測モデルのモンテカルロ計算により、磁性を担う主要因である鉄対の配置に関する有限温度での秩序化や規則性について知見を得た。鉄対の濃度や磁性原子の違いによる安定構造の顕著な違いも明らかになった。

（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。

一般的に大きなセルでの構造探索は第一原理計算の計算量の増大が困難となる。大きなセルでの第一原理計算の計算量を軽減するために、統計モデルを導入して機械学習の手法を取り込むことが考えられる。ここでは CaCu<sub>5</sub> 型の基本となる結晶構造は六方晶を前提として、その六方晶の格子点に  $R$  と  $T$  ダンベルの二種類の「原子」を配置する構造探索問題を扱った。ダンベルの割合と配置を設定した第一原理計算により得られた形成エネルギーを近似するクラスター展開モデルを構築する。4 体項までに制限を加えたモデルへの回帰は本プロジェクトですでに得られており、その多体相互作用を含むクラスター展開モデルについてマルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC) 法を用いて、より大きなセルでの構造探索を行った。具体的には、SmFe と SmCo の二種類の合金について計算を行った。どちらの合金も Fe-Fe ダンベルと Co-Co ダンベルが密度  $x=1/2$  において最安定の構造をとり、それは ThMn<sub>12</sub> 型構造であることがわかった。また、SmCo に対しては、準安定状態として、 $x=1/3$  近傍に非自明な構造が現れることを見出した。この構造は Th<sub>2</sub>Zn<sub>17</sub> 型構造に近いがより乱れた構造であり、小さなクラスターでは見つからなかった構造である。これがクラスター展開モデルによる偽構造の可能性もあり、第一原理計算で検証する必要がある。

もう一点は、近年データ科学の手法として用いられるスパースモデリングに関する研究である。通常、L1 正則化に基づく LASSO が標準的に用いられてきたが、少数の自由度を推定する際に誤検知の問題が本質的に LASSO には内在することが指摘されてきた。物質科学においてもこの問題は看過できるわけではない。そこでベイズ統計の枠組みからスパースモデリングの方法を見直すことで改善する方法が模索されているが、ここでは馬蹄型事前分布を用いることにより誤検知が改善することを理論的に確かめることができた (図 14)。

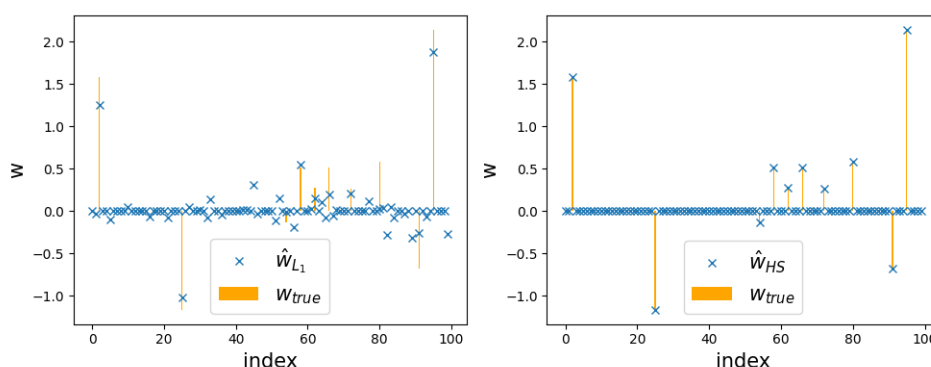


図 14：スパースモデリングによる推定結果の例。真の信号を棒で示している。LASSO による推定（左）では真の信号にない推定結果をしているが、馬蹄型事前分布の推定（右）ではそれが抑制されている。

## (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。

#### （実施・検討内容）

令和 3 年度において、「MateriApps」のポータルサイトは約 78,709 ユーザーのアクセス、約 235,404 件のページビューの実績を達成した。「MateriApps」に加え、アプリケーションの公開を促進するため「MateriApps LIVE!」を提供しており、2021 年度、SourceForge より「Community Leader」、「Community Choice」、「Open Source Excellence」、「SourceForge Favorite」の各賞を受賞した。

### (ii) コンピューテーショナル・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 39 回 CMD-WS（参加者 78 名）を令和 3 年 9 月 6 日から 9 月 10 日に、第 40 回 CMD-WS（参加者 55 名）を令和 4 年 2 月 21 日から 2 月 25 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、マレーシアプトラ大学（Universiti Putra Malaysia）で開催された International Webinar on Computational Material Design 2021(13-15 Jul. 2021)では、計算機マテリアルデザインの基礎と最近の成果についてセミナーを行い、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、コンピューテーシ



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3年度中に2回開催した。第37、第38回に引き続き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、さらに X Window System が正常に動作している証拠のスナップショットを事前に送ってもらうなど、計算環境の設定での不備がないように事前確認を念入りに行なった。そのため、前回に比べて初歩的なところでのつまずきは減った。オンラインでの開催は、旅費など経済的な負担がなくなるメリットがあり、遠方からの参加がより容易であることから、当面の間継続する予定である。第40回でCMDワークショップ開催20年となり、これまでの延参加人数は1,931名となっている。以下にCMD39、40について詳細を報告しておく。

第39回CMDワークショップは、令和3年9月6日から9月10日の日程でオンラインで実施した。今回はビギナーズコース(ABCAP、Machikaneyama、STATE-Senri)53名、アドバンストコース(A群[HiLAPW、Salmon]、B群[Machikaneyama、ES-OPT、RSPACE]、A、B群からそれぞれ1つずつ選択)12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)1名、マテリアルズインフォマティクスコース(CrySPY、LIDG)4名の参加者に対して講義と演習を行なった。全体講義はWebexを、コース毎の講義と実習はZoomまたはTeamsを用いて実施した。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、原嶋庸介氏(筑波大学助教)、辻川雅人氏(東北大学助教)、尾澤伸樹氏(東北大学准教授)、東後篤史氏(物質・材料研究機構主幹研究員)を招待し講演していただいた。

第40回CMDワークショップは、令和4年2月21日から2月25日の日程でオンラインで実施した。今回はビギナーズコース(ABCAP、STATE-Senri、Machikaneyama)31名、アドバンストコース(A群[HiLAPW、Naniwa-Series、ecalj、Salmon]、B群[Machikaneyama、STATE-Senri、ES-OPT]、A、B群からそれぞれ1つずつ選択)11名、スパコンコース(RSPACE)2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)7名、マテリアルズインフォマティクスコース(CrySPY、LIDG)3名、エキスパートコース(受講生が研究課題を持ち寄りそれについての計算をCMD期間中に実施する)1名の参加者に対して講義と演習を行なった。開催側はオンラインでの遠隔講義と遠隔実習にある程度慣れてきており、受講生の出席チェックや各自の実習状況の把握はSlackを活用して行なっている。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り、今回も各講師が活用していたようである。個人PCの準備については事前のチェックを十分行い、接続や計算環境についての問題はかなり少なくなった。今回は先端研究事例講師として、小幡正雄氏(金沢大学助教)、Sasfan Arman Wella氏(Indonesia National Research and Innovation Agency Researcher)、國貞雄治氏(北海道大学助教)、木野日織氏(物質・材料研究機構主任研究員)を招待し講演していただいた。スピントロニクスコースの講義については、教科書「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」(吉田博編著、内田老鶴圃)が講師陣により執筆され出版されている。

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、マレーシアプトラ大学(UPM)で開催されたInternational Webinar on Computational Material Design 2021(13-15 Jul. 2021)において、Machikaneyama、STATE-Senri、HiLAPWの基礎と最近の研究成果についてセミナーを実施し、CMDについての情報発信を通してアプリケーションの普及活動を行なった。

(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 15 の通りである。

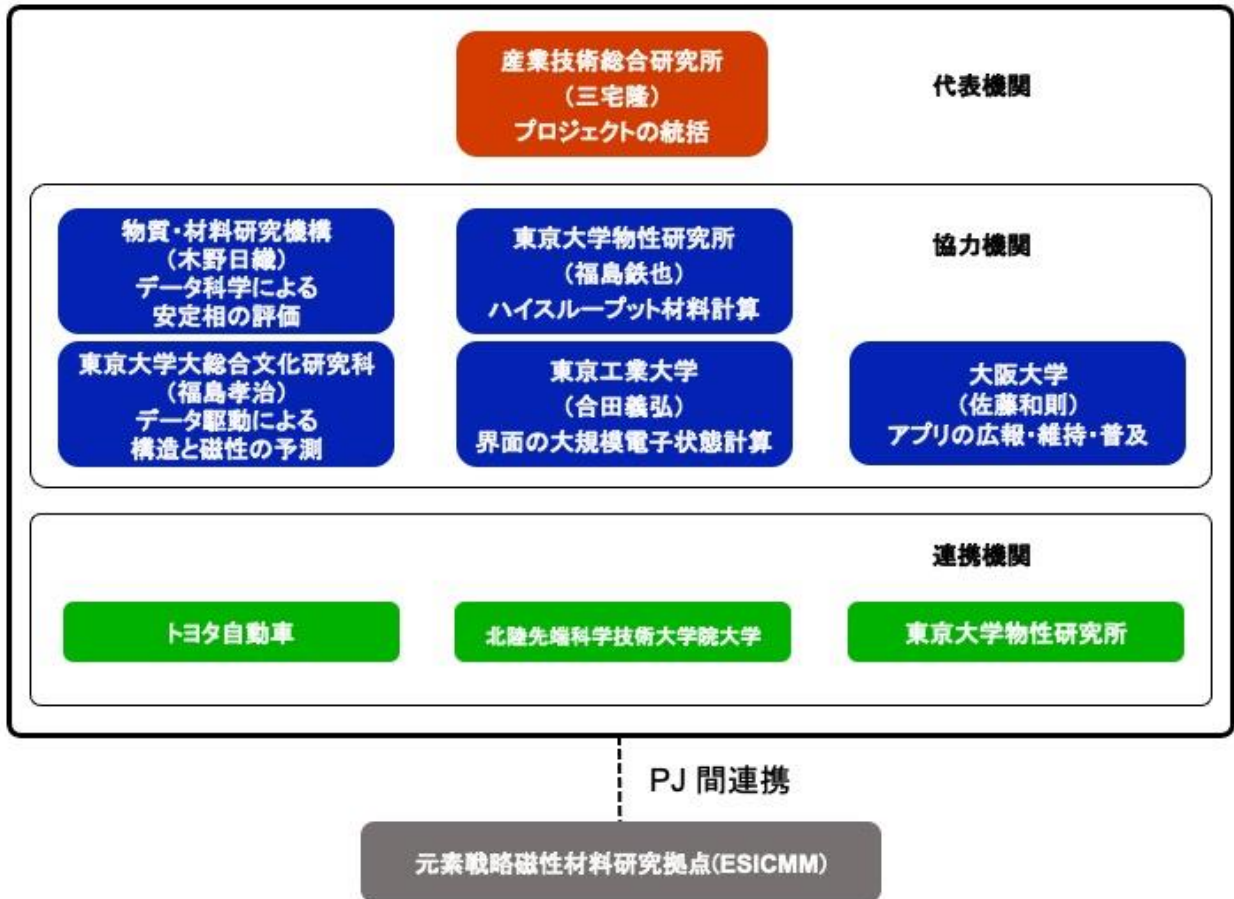


図 15 プロジェクトの実施体制。

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ている。

<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）

アドバイザー 赤井久純（東大物性研）

運営委員会を令和3年6月22日（火）と令和4年3月2日（水）に、成果報告会を令和3年8月5日（木）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6回開催した(6/3, 7/1, 9/2, 10/7, 1/6, 3/7)。さらに、令和3年12月8（水）-9日（木）に「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題（7課題）の合同研究会を開催した。

### 2-3. 活動（研究会の活動等）

<成果報告会>

令和3年8月5日（木）にオンライン開催。口頭発表7件、参加人数30名。

<「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題合同研究会>

令和3年12月8（水）-9日（木）にオンライン開催。口頭発表25件、参加人数139名（12/8）、125名（12/9）

<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39回CMD-WS（オンライン開催）：令和3年9月6日（月）-9月10日（金）（参加者78名）
- ・第40回CMD-WS（オンライン開催）：令和4年2月21日（月）-25日（金）（参加者55名）
- ・CMD 広報および普及活動：マレーシアプトラ大学（マレーシア）で開催された International Webinar on Computational Material Design 2021 (13-15 Jul. 2021)において Machikaneyama、STATE-Senri、HiLAPW の基礎と最近の研究成果についてのセミナー開催

<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 4th R-CCS International Symposium を後援した。

- ・第12回材料系ワークショップ（オンライン開催）：令和3年10月6日（水）
- ・第13回材料系ワークショップ（オンライン開催）：令和4年2月9日（水）
- ・The 4th R-CCS International Symposium（オンライン開催）：令和4年2月7-8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	三宅 隆
	〒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	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

### 別添 1 学会等発表実績

#### 【論文（査読有）】

- 1) A novel method for generating p-type wide- and ultrawide-bandgap III-nitride by doping with magnetic elements  
A. Masago, H. Shinya, T. Fukushima, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida  
Appl. Phys. Exp. **14**, 091007-1~4 (2021).  
DOI: 10.35848/1882-0786/ac197f
- 2) Evolutionary search for cobalt-rich compounds in the yttrium-cobalt-boron system  
Takahiro Ishikawa , Taro Fukazawa , Guangzong Xing, Terumasa Tadano and Takashi Miyake  
PHYSICAL REVIEW MATERIALS **5**, 5, 054408-1~ 6 (2021).  
DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.054408
- 3) Understanding and optimization of hard magnetic compounds from first principles  
Takashi Miyake, Yosuke Harashima, Taro Fukazawa, and Hisazumi Akai  
Sci. Technol. Adv. Mater. **22**, 1, 543- 556 (2021).  
DOI: 10.1080/14686996.2021.1935314
- 4) Role of Ferroelectricity, Delocalization, and Occupancy of d States in the Electrical Control of Interface-Induced Magnetization  
Rafael Costa-Amaral and Yoshihiro Gohda  
Phys. Rev. Appl. **15**, 064014-1~ 14 (2021).  
DOI: 10.1103/PhysRevApplied.15.064014
- 5) Ferromagnetism and giant magnetoresistance in zinc-blende FeAs monolayers embedded in semiconductor structures  
L. D. Anh, T. Hayakawa, Y. Nakagawa, H. Shinya, T. Fukushima, M. Kobayashi, H. Katayama-Yoshida, Y. Iwasa, and M. Tanaka  
Nature Commun. **12**, 4201 (2021).  
DOI: 10.1038/s41467-021-24190-w

- 6) Atomistic theory of thermally activated magnetization processes in Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B permanent magnet  
Seiji Miyashita, Masamichi Nishino, Yuta Toga, Taichi Hinokihara, Ismail Uysal, Takashi Miyake, Hisazumi Akai, Satoshi Hirose, and Akimasa Sakuma  
Sci. Tech. Adv. Mater. **22**, 658- 682 (2021).  
DOI: 10.1080/14686996.2021.1942197
- 7) Estimation of Neuronal Dynamics of Izhikevich Neuron Models from Spike-Train Data with Particle Markov Chain Monte Carlo Method  
Hiroaki Inoue, Koji Hukushima, and Toshiaki Omori  
J. Phys. Soc. Jpn. **90**, 10, 104801-1~9 (2021).  
DOI: 10.7566/JPSJ.90.104801
- 8) Direct observation of magnetic Friedel oscillation at Fe(001) surface  
T. Mitsui, S. Sakai, S. Li, T. Ueno, T. Watanuki, Y. Kobayashi, R. Masuda, M. Seto, and H. Akai  
Hyperfine Interact. **242**, 37-1~15 (2021).  
DOI: 10.1007/s10751-021-01772-0
- 9) Ordered and disordered phases in CaCu<sub>5</sub>-type derived structures: Dumbbell cluster modeling with first-principles calculations  
Fumiaki Kuroda, Taro Fukazawa and Takashi Miyake  
Phys. Rev. Materials. **5**, 12, 124405-1~5 (2021).  
DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.124405
- 10) First-principles investigation of Nd(Fe,M)<sub>12</sub> (M=K-Br) and Nd(Fe,Cr,Co,Ge,As)<sub>12</sub>: possible enhancers of Curie temperature for NdFe<sub>12</sub> magnetic compounds  
Taro Fukazawa, Yosuke Harashima, Hisazumi Akai and Takashi Miyake  
Acta Materialia **226**, 117597-1~9 (2021).  
DOI: 10.1016/j.actamat.2021.117597
- 11) Automatic exhaustive calculations of large material space by Korringa-Kohn-Rostoker coherent potential approximation method applied to equiatomic quaternary high entropy alloys  
T. Fukushima, H. Akai, T. Chikyow, and H. Kino  
PHYSICAL REVIEW MATERIALS **6**, 2, 023802-1~19 (2022).  
DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.6.023802
- 12) Data-driven sensitivity analysis in surface structure determination using total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)  
Takeo Hoshi, Daishiro Sakata, Shotaro Oie, Izumi Mochizuki, Satoru Tanaka, Toshio Hyodo, Koji Hukushima  
Computer Physics Communications **271**, 2, 108186-1~8 (2022).  
DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108186
- 13) Low-temperature acanthite-like phase of Cu<sub>2</sub>S: electronic and transport properties  
H. N. Nam, K. Suzuki, T. Q. Nguyen, A. Masago, H. Shinya, T. Fukushima, and K. Sato  
Phys. Rev. B **105**, 075205-1~ 11 (2022).  
DOI: 10.1103/PhysRevB.105.075205

- 14) Lattice dynamics and its effects on magnetocrystalline anisotropy energy of pristine and hole-doped YCo5 from first principles  
Guangzong Xing, Yoshio Miura, and Terumasa Tadano  
PHYSICAL REVIEW B **105**, 3 104427-1~7 (2022).  
DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.6.054404
- 15) Mn 基ホイスラー合金の磁気特性と電子状態—猿橋賞受賞によせて—  
梅津理恵, 斉藤耕太郎, 小野寛太, 佐藤和則, 福島鉄也, 黒田文彬, 小口多美夫  
あたりあ **60**, 4, 205-211 (2021)  
DOI: 10.2320/materia.60.205
- 16) 希土類磁石における粒界原子配置と磁性の第一原理電子論  
合田義弘  
粉体および粉末冶金 **69**, S109- S117 (2021)  
DOI: 10.2497/jjspm.69.S109
- 17) 鉄の表面近傍の特異な磁性を発見—原子一層毎に磁気モーメントの大きさが増減する  
三井 隆也, 境誠 司, 瀬戸 誠, 赤井 久純  
日本物理学会誌 **77**, 1, 23-28 (2022)  
DOI: none

【口頭発表（招待講演）】

- 1) サロゲートモデルとベイズ最適化 - 結晶構造探索への応用  
福島孝治  
統計物理と統計科学のセミナー（統計数理研究所, オンライン） 2021/5/17
- 2) Theoretical study of CaCu5-type derived structures  
Takashi Miyake  
The 26th International Workshop on Rare-Earth and Future Permanent Magnets and Their Applications (REPM2021)（オンライン） 2021/6/9
- 3) 進化的アルゴリズムの物質科学への応用  
石河孝洋  
兵庫県立大学大学院理学研究科第 2 回マテリアルズインフォマティクス研究会, 2021/8/30
- 4) Multiscale analyses of interfaces and phase equilibria in magnetic materials  
合田義弘  
日本物理学会 2021 年秋季大会（オンライン）, 2021/9/20
- 5) 計算物質科学協議会におけるマテリアル DX への取り組み  
福島鉄也  
第 31 回日本 MRS 年次大会（パシフィコ横浜ノース）, 2021/12/15
- 6) スパコン「京」・「富岳」を用いた磁性材料研究  
三宅隆

文部科学省元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>第5回元素戦略シンポジウム ～革新的マテリアルでカーボンニュートラルな社会を構築～(オンライン), 2022/2/4

7) 磁石材料探索に向けた計算科学的アプローチ

福島孝治

第 236 回研究会/第 69 回化合物新磁性材料専門研究会(オンライン) 2022/2/11

8) 先端事例講義 IV

木野日織

CMD40 ワークショップ, 2022/2/25

9) スーパーコンピュータ「富岳」を用いた磁性材料の探索

福島鉄也

分子研研究会(オンライン), 2022/3/1

10) スーパーコンピュータ「富岳」による磁性材料データの自動創出

福島鉄也

スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム, 2022/3/15

11) 第一原理計算による磁石化合物の有限温度物性

三宅隆

日本金属学会 2022 春期大会第 170 回講演大会(オンライン), 2022/3/16

12) 進化的アルゴリズムによる新奇高鉄濃度希土類化合物の探索

石河孝洋

令和 4 年電気学会全国大会, 2022/3/23

【口頭、ポスター発表】

13) ベイズ最適化と進化的アルゴリズムによる結晶構造探索

山下智樹, 木野日織, 津田宏治, 三宅隆, 小口多美夫

第 82 回応用物理学会秋季学術講演会(オンライン), 2021/9/11

14) クラスタ展開モデルによる構造予測

福島孝治, 黒田文彬, 三宅隆

日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021/9/21

15) 不規則合金の組成探索

三宅隆

第 12 回材料系ワークショップ(オンライン), 2021/10/6

16) Multiferroic interfaces studied by first-principles electron theory

Y. Gohda, R. Costa-Amaral, A. M. Yatmeidhy

The 9th International Symposium on Surface Science(オンライン), 2021/11/29

17) 進化的アルゴリズムによる新規磁石化合物の探索

石河孝洋

「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題 合同研究会(オンライン), 2021/12/9

18) 磁石課題の概要

三宅隆

「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題 合同研究会(オンライン), 2021/12/9

19) Origin of the anisotropic magnetoresistance effect tunable with electric field in Co<sub>2</sub>FeSi/BaTiO<sub>3</sub> interfacial multiferroic system (ポスター)

S. Tsuna, R. Costa-Amaral, and Y. Gohda

Materials Research Meeting (MRM) 2021 (オンライン), 2021/12/13

20) Lattice dynamics effects on magnetocrystalline anisotropy energy of YCo<sub>5</sub> from first principles

Guangzong Xing, Yoshio Miura, Terumasa Tadano

APS March Meeting 2022, 2022/3/15

21) AkaiKKR を用いてハイスループット計算を行う為の Python ライブラリ (ポスター)

木野日織、福島鉄也

富岳百景交流会, 2022/3/15

22) 階層的な正則化による圧縮センシングにおける相転移の解析

長野泰志, 福島孝治

日本物理学会第 77 回年次大会 (オンライン), 2022/3/15

23) 薄膜 X 線ラウエ振動の膜厚混合分布モデルによるベイズ推定

崎下雄稀, 鍋島冬樹, 前田京剛, 福島孝治

日本物理学会第 77 回年次大会 (オンライン), 2022/3/15

24) クラスタ展開法による fcc Ni の遍歴磁性へのアプローチ

黒田文彬, 深澤太郎, 三宅隆

日本物理学会第 77 回年次大会(岡山大学・岡山理科大学, オンライン), 2022/3/16

25) First-principles study of the magnetic anisotropy at Co<sub>2</sub>FeSi/BaTiO<sub>3</sub> interfaces (ポスター)

Amran Mahfudh Yatmeidhy, Rafael Costa-Amaral, Yoshihiro Gohda

日本物理学会第 77 回年次大会(オンライン), 2022/3/17

26) テンソルくりこみ群によるブロック周期ランダム系の研究

吉山幸太, 福島孝治

日本物理学会第 77 回年次大会 (オンライン), 2022/3/17

#### 【受賞】

1) 凝縮系科学賞

只野央将

凝縮系科学賞運営委員会, 2021/11/27

#### 【プレスリリース】

1) 磁性元素を配列した強磁性超格子構造の作製と巨大磁気抵抗の実現～究極の原子層結晶成長法を駆使したスピントロニクス機能の実現へ新たな道～ 2021/7/9

Le Duc Anh、早川奈伊紀、中川裕治、新屋ひかり、福島鉄也、小林正起、吉田博、岩佐義宏、田中雅明

[http://www.t.u-tokyo.ac.jp/press/foe/press/setnws\\_202107091127413335199590.html](http://www.t.u-tokyo.ac.jp/press/foe/press/setnws_202107091127413335199590.html)

- 2) 次世代半導体のための新たな価電子制御法のデザイン～EX-doping 法:母体物質に依存しない汎用的で一般的な価電子制御法の提案～ 2021/8/24  
真砂啓、新屋ひかり、福島鉄也、吉田博  
[http://www.t.u-tokyo.ac.jp/press/foe/press/setnws\\_202108261945504130446354.html](http://www.t.u-tokyo.ac.jp/press/foe/press/setnws_202108261945504130446354.html)
- 3) スーパーコンピュータ「富岳」による大規模物性データの自動創出～不規則系磁性材料におけるビッグデータの実現へ～ 2022/2/16  
福島鉄也、赤井久純、知京豊裕、木野日織  
<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/news2.html?pid=14730>

#### 【広報活動等】

- 1) CCMS Web ハンズオン: 2DMAT 講習会 (オンライン), 2021/4/20  
参加者(人数): 36 名
- 2) CCMS Web ハンズオン: PHYSBO 講習会 (オンライン), 2021/5/24  
参加者(人数): 34 名
- 3) International Webinar on Computational Material Design 2021, マレーシアプトラ大学(オンライン), 2021/7/13-7/15
- 4) CCMS Web ハンズオン: MateriApps LIVE!を用いた Quantum Espresso 講習会 (オンライン), 2021/8/19  
参加者(人数): 75 名
- 5) 第 39 回コンピューショナル・マテリアルズ・デザインワークショップ, 大阪大学 豊中キャンパス(オンライン), 2021/9/6-9/10, 参加者(人数): 78 名
- 6) CCMS Web ハンズオン: HΦ 講習会 (オンライン), 2021/10/1, 参加者(人数): 10 名
- 7) 第 12 回材料系ワークショップ (オンライン), 2021/10/6, 参加者(人数): 397 名
- 8) 「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題 合同研究会 (オンライン), 2021/12/8-9, 参加者(人数): 139 名
- 9) 第 13 回材料系ワークショップ (オンライン), 2022/2/9, 参加者(人数): 341 名
- 10) 第 40 回コンピューショナル・マテリアルズ・デザインワークショップ, 大阪大学 豊中キャンパス (オンライン), 2022/2/21-2/25, 参加者(人数): 55 名
- 11) CCMS Web ハンズオン:OpenMX 講習会 (オンライン), 2022/2/22, 参加者(人数): 13 名
- 12) CCMS Web ハンズオン:Google Colab を用いた LibTetraBZ・FermiSurfer 講習会 (オンライン), 2022/3/31, 参加者(人数): 30 名