

# 第一原理計算によるホイスラー合金の材料探索

大阪大学 大学院工学研究科 佐藤和則

目的 第一原理計算によりホイスラー合金系の電子状態を計算し、機能材料の  
マテリアルデザインを行う。

内容 FLAPW法によるバンド計算コードHiLAPWを用いて、ホイスラー合金の  
電子状態を網羅的に計算し、機能材料のスクリーニングを行なう。

結果 計算で得られる電子状態密度 (図参照) をもとに系の安定性などを調査  
し、元素の組み合わせを変えることで第一原理計算結果のデータベースを作成。  
材料系のスクリーニングに資する情報が得られた。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群  
ノード時間 2,476 時間  
使用メモリ 50 GB  
並列化 80ノード 並列

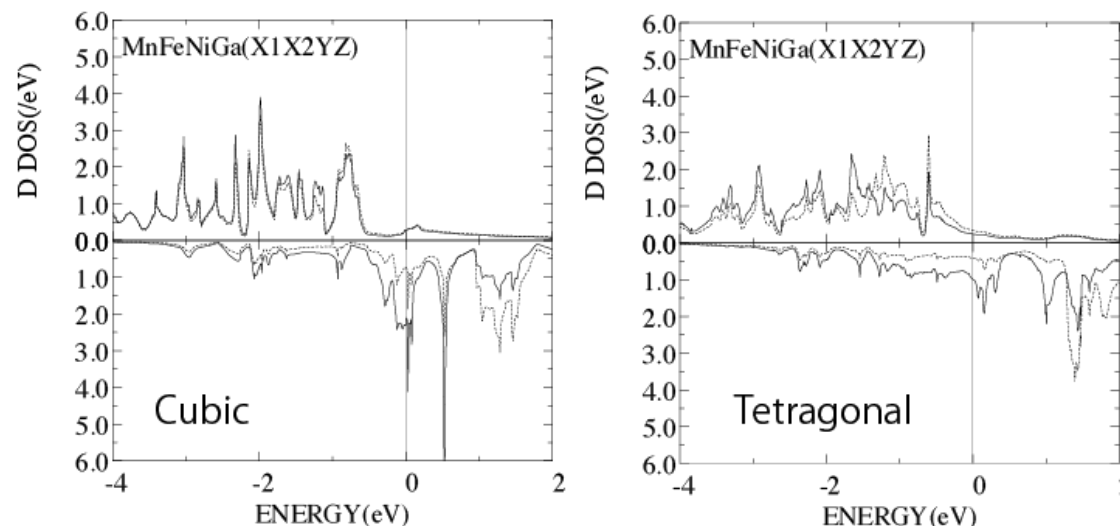


図 HiLAPW法を用いたホイスラー合金MnFeNiGaの状態密度  
(左：立方晶、右：正方晶)