

## SHRY:固溶体モデルのハイスループット生成 - Python による実装

### SHRY: a Suite for High-throughput generation of models with atomic substitutions implemented by python

内村 慶舟<sup>1</sup>、○中野 晃佑<sup>2</sup>、Genki I. Prayogo<sup>1</sup>、本郷 研太<sup>2,4,5</sup>、前園 涼<sup>2,3</sup>

(1. 北陸先端大マテ、2. 北陸先端大情報、3. 理研、4. 物材機構、5. JST さきがけ)

Keishu Utimula<sup>1</sup>、○Kousuke Nakano<sup>2</sup>、Genki I. Prayogo<sup>1</sup>、Kenta Hongo<sup>2,4,5</sup>、Ryo Maezono<sup>2,3</sup>

(1. Sch. Mater. Sci., JAIST, 2. Sch. Info. Sci., JAIST, 3. RIKEN, 4. NIMS, 5. PRESTO, JST)

E-mail: mwkumk1702@icloud.com

スーパーセル法は第一原理計算で固溶体を取り扱うために用いられる方法である。計算機の発展に伴い、ユニットセルあたり数百程度の原子を取り扱うことも頻繁に行われるようになってきた。これは、対象の合金に対して数%の不純物をドーピングする、対象の元素を別の元素種に数%置換する、といったモデルを取り扱うことが出来る計算規模である。磁性合金などは、このような、わずか数%未満の置換で特性が向上したり、あるいはレアアースの削減につながることから、このような系を第一原理的に扱い、その物性を評価するというのは、工業的応用という意味においても興味深い研究対象である。

ここで問題となるのは、元素置換を行う際に発生する膨大な配位のパターンである。例えば、磁性合金としてNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>Bをベースとした(Nd<sub>0.7</sub>Ce<sub>0.225</sub>La<sub>0.075</sub>)<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>Bを考えた場合、ユニットセル中に40個のNdを含むような系を考え、NdをCeとLaにそれぞれ9個と3個置換することで、目的の組成が達成される。この時、ユニットセル内の原子は340個であり、密度汎関数法などを用いた第一原理計算で十分に評価できる規模であるが、その組み合わせの数が問題となる。単純に40個のサイトをNd、Ce、Laにそれぞれ28個、9個、3個、分配すると考えると、 $40!/(28!9!3!) = 1,229,107,765,600$ という配位のパターンが考えられ、これら全ての計算を行うことは不可能である。そこで、固溶体を持つ対称性に注目する。単純に元素置換したパターン(可約構造)のなかには、結晶の空間対称性の観点から同一とみなすことの出来る構造が

かなりの割合で含まれており、実際に計算しなければならないユニークな構造(既約構造)は多くはない。本講演では、可約構造の中から既約構造を効率よく探索する方法、及びその適用例について報告する[1]。

与えられた2つの構造が対称性の観点から同一か否かを判定する方法を実装したプログラムは、すでにいくつか公開されている。[2]しかし、比較対象となる構造の組み合わせが前述のように膨大である場合には、単に全ての可約構造を比較しつくすことは、計算コストの観点から非現実的である。これに対処する素朴な方法としては、全ての可約構造を生成、比較するのではなく、既約構造の数より十分多くの可約構造をランダムに生成した後、そこから既約構造を探すような方策が挙げられるが、そのためには、何らかの方法で、既約構造の数を予め見積もる必要がある。我々は、ランダムに生成した可約構造から得られる既約構造数の分散の振る舞いを調べ、その最大値から全ての既約構造の数を推定可能であることを明らかにした[1]。

#### 引用文献

- [1] K. Utimula, *et al.* arXiv, 1911.08071 (2019).  
 [2] G. Flor, *et al.* J. Appl. Crystallogr. **49**, 653-664 (2016).