

MERIT インターンシップ (国内) 報告書

理学系研究科 物理学専攻
MERIT 6 期生 福井 毅勇

実施期間

2019 年 9 月 17 日～11 月 1 日

受入先

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 多階層第一原理計算手法開発チーム

概要

茨城県つくば市の産業技術総合研究所つくば中央の第二事業所内にある機能材料コンピューショナルデザイン研究センター (CD-FMat) の中でも、三宅隆氏がチーム長を務められている多階層第一原理計算手法開発チームに約 7 週間滞在させていただいた。私は第一原理計算の経験がほとんど無いため、第一原理バンド計算の経験者が多く、様々なノウハウを有する研究チームに滞在することで第一原理バンド計算の習得とそれを用いた研究に取り組んだ。

研究内容

強相関電子系の研究では、単純化されたモデルでの計算手法が多く開発されており、精力的に研究されている。しかしながら、強相関物質の材料としての性能を定量的に評価したり、各物質の違いを議論したりするためには物質の個性を反映した計算が求められる。そこで、第一原理バンド計算から定エネルギー有効モデルへ射影を行い (ダウンフォールディング法)、得られた有効模型に対してモデル計算で開発された計算手法を用いる MACE (Multi-scale *Ab-initio* scheme for Correlated Electrons) という手法が提唱された。

本インターンシップでは、MACE による強相関物質の物性解明を目指し、第一原理バンド計算パッケージである Quantum ESPRESSO、その計算結果から最局在 Wannier 関数を構成する Wannier90、制限乱雑位相近似 (cRPA) によって遮蔽された電子間 Coulomb 相互作用を求める RESPACK の使用法を習得し、それらを典型的な強相関物質へ適用することで有効模型の構成を行なった。また、WannierTools や cif2cell といった第一原理バンド計算の支援ツールの導入も行った。

今後は得られた有効模型をいくつかの手法で計算することで各強相関物質の個性を反映した研究を行いたい。

謝辞

今回のような国内インターンシップを受け入れてくださった産業技術総合研究所に深く御礼申し上げます。特に、受け入れを快諾していただき、事務手続き的なことから、第一原理計算のノウハウの伝授、さらには、滞在中の生活の充実を図るために色々と気を使ってくださった三宅隆様、計算パッケージの使い方や様々な支援ツールの使い方、そして並列計算や大規模計算について教えて面倒を見てくださった深澤太郎様、佐藤暢哉様、土居抄太郎様、雑談や疑問に付き合っていて文献や所内の施設を親切に教えてくださった加藤洋生様、上に挙げた方々に加え滞在中にいつも昼食にお付き合いいただいた宮本良之様、都築誠二様、中村壮伸様、萩原聡様、産総研での受入や所内の宿舎への滞在手続きをしていただき、産総研周辺のスーパーやコーヒー豆店等を教えてくださったり差し入れを下さったりした秘書の原田久美様には大変感謝いたします。皆様から暖かく迎え入れていただいたおかげで充実した研究滞在となりました。また、本インターンシップの実施を承諾していただき、三宅様にご相談下さった指導教員の加藤雄介教授と MERIT 副指導教員の求幸年教授、最後に、このような機会を下さった MERIT プログラムとインターンシップ旅費申請手続きをして下さった MERIT 事務局の浅野様にも深く感謝いたします。