

MERIT インターンシップ(国内)報告書

工学系研究科物理工学専攻 修士 2 年

MERIT-WINGS 10 期生 増木亮太

実施期間

2021/08/16~2022/02/10

受け入れ先(担当者)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構(只野 央将氏)

研究課題

非調和フォノン計算に基づいた有限温度における構造最適化手法の開発と応用

研究背景

近年、第一原理から高精度な物性予測が可能になり、物質科学において計算物理的な手法が必要不可欠な役割を持つようになってきている。DFT(密度汎関数理論)計算を始めとした第一原理電子状態計算は結晶構造をインプットとして与える必要があり、結晶構造を非経験的に計算によって予測することは重要な課題である。結晶構造の計算においては、DFTに基づいた結晶構造最適化が頻繁に用いられるが、有限温度効果を取り込めないといった欠点がある。また、現状で有限温度効果を取り込むことができる計算手法は計算が重く、複雑な物質へ適用ができない。そこで、幅広い物質に対して有限温度の結晶構造を効率的に求めることのできる計算手法の開発が求められている。

研究内容

本研究では、非調和フォノン理論である自己無撞着フォノン(SCP)理論を拡張して、有限温度の結晶構造最適化を行う定式化と計算手法開発を行った。得られた理論を、非調和フォノン計算のパッケージである ALAMODE に実装した。ALAMODE は受け入れ研究者の只野氏によって開発されているプログラムであり、定式化や実装を行うにあたって様々な議論をしていただいた。

実装したプログラムを用いて最も代表的な強誘電体である BaTiO_3 の計算を行い、cubic → tetragonal → orthorhombic → rhombohedral の 3 段階の逐次相転移を再現することに成功した。また、格子定数や分極の温度依存性についても高い精度で再現することができた。

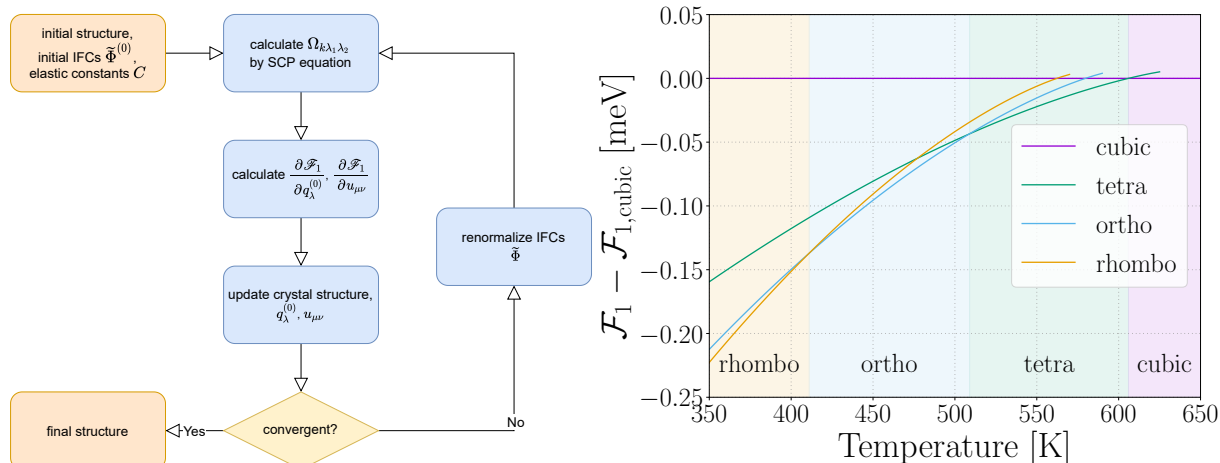


Fig.1 (左) 開発した計算手法の計算スキーム。F は SCP 自由エネルギー。Ω は SCP 振動数、u と q はそれぞれ歪みを表すテンソルと原子の内部座標の変化。(右) BaTiO₃ の 4 つの相の SCP 自由エネルギーの温度依存性。

謝辞

半年間にわたる長期間の滞在を受け入れてくださり、お忙しい中丁寧にご指導くださった受け入れ研究者の只野央将さんに心よりお礼申し上げます。また、滞在中に暖かく迎え入れてくださった磁性理論グループの三浦良雄さん、増田啓介さん、Xing Guangzong さんに感謝申し上げます。また、データ駆動無機材料グループの東後さんには、フォノン計算の技術的な部分について議論していただきました。最後になりますが、このインターンを行うにあたって様々な面でサポートして下さった指導教員の有田亮太郎先生、助教の野本拓也さん、MERIT-WINGS 副指導教員の尾崎泰助先生、MERIT 事務局の浅野様をはじめとした全ての関係者の皆様に厚くお礼申し上げます。