

2023 年度年次報告書

計測・解析プロセス革新のための基盤の構築

2023 年度採択研究代表者

只野 央将

物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究センター
グループリーダー

有限温度効果の導入で挑む第一原理物性予測の革新

研究成果の概要

自己無撞着フォノン(SCP)理論に基づく有限温度構造最適化手法の高機能化を行った。SCP法ではフォノンの自由エネルギーの微分を直接計算することによって有限温度での結晶構造が予測出来るが、構造相転移の前後で基本単位格子のサイズが変化する相転移シミュレーションが扱えないという課題があった。これを解決するため、基本単位格子よりも大きな単位胞を用いてSCP計算を実行できる計算コードの開発を行った。開発した機能をCsPbBr₃の立方晶↔正方晶相転移へ適用したところ、PBEsol交換相関汎関数を用いた場合の構造相転移温度がおおよそ370 Kとなり、実験値405 Kと比較的よく一致する結果が得られた。本機能の開発によって、より広範な構造相転移のシミュレーションが可能となり、次年度以降に計画する相転移前後の物性変調シミュレーションへ見通しが付いた。一方、さらに複雑な構造変化を伴う相転移へ同手法を適用するためには構造の更新アルゴリズムと並列計算のメモリ効率を改善する必要があることが分かったため、これらの点についても次年度に改善を行う。