

# 第179回フロンティア材料研究所講演会

## 「フォノン計算を用いた有限温度構造の 第一原理計算」

**講師：只野 央将 先生**

(物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点)

日時：2024年5月21日(火) 15:30~16:30

場所：東工大フロンティア材料研究所 R3棟1階会議室

主催：フロンティア材料研究所

### 要旨

現在の物質・材料研究において密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算の役割は極めて大きく、例えば与えられた組成の結晶構造や未知物性の予測などに広く用いられている。しかしDFTは基底状態の理論であるため、有限温度における結晶構造計算が困難だった。近年、我々は非調和フォノン計算を用いて有限温度効果を取り入れる手法を開発しており、熱膨張係数や焦電定数、構造相転移温度の効率的な計算を実現した[1-3]。本講演では、有限温度構造の第一原理計算を可能にする方法論の解説と応用例を紹介したい。

[1] R. Masuki, T. Nomoto, R. Arita, and T. Tadano, Phys. Rev. B 106, 224104 (2022).

[2] R. Masuki, T. Nomoto, R. Arita, and T. Tadano, Phys. Rev. B 107, 134119 (2023).

[3] R. Masuki, T. Nomoto, R. Arita, and T. Tadano, <http://arxiv.org/abs/2404.00917>.

[連絡先] 片瀬貴義 E-mail: [katase@mces.titech.ac.jp](mailto:katase@mces.titech.ac.jp), 内線5314