

令和 6 年 6 月 5 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03424

研究課題名（和文）先進フォノン計算を用いたペロブスカイト型材料の熱・光学物性解析

研究課題名（英文）Investigation of thermal and optical properties of perovskite materials by advanced phonon calculations

研究代表者

只野 央将（Tadano, Terumasa）

国立研究開発法人物質・材料研究機構・磁性・スピントロニクス材料研究センター・主任研究員

研究者番号：90760653

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：格子振動の非調和性が強い材料系においても利用出来るフォノン計算・有限温度構造最適化手法を開発した。従来の自己無撞着フォノン(SCP)法で無視されていた3フォノン散乱に由来する振動数シフトを準粒子近似の元で取り入れる手法を提案し、ペロブスカイト材料の非調和フォノン振動数を高精度に予測することに成功した。また、フォノン線幅や熱伝導率における4フォノン散乱の影響を明らかにした。さらに、準調和近似とSCP法に基づく有限温度構造最適化手法を開発し、ZnOやBaTiO₃の構造相転移や熱膨張を高精度で予測することに成功した。これらの応用研究から、開発した手法の有効性と汎用性を実証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

開発した非調和フォノン計算・結晶構造最適化手法はペロブスカイト型材料に限らず多様な材料系へ適用可能であり、これまで困難だった有限温度物性計算への道を拓くものである。今後は太陽電池材料や光学デバイス、熱電変換材料への適用が進み、持続可能な社会構築に資する研究成果に繋がることが期待される。

研究成果の概要（英文）：We have developed a phonon calculation and finite temperature structure optimization method that can be used for material systems with strong anharmonicity of lattice vibrations. We have proposed a method to incorporate the frequency shift due to 3-phonon scattering, which is neglected in the conventional self-consistent phonon (SCP) method, under the quasiparticle approximation, and have successfully predicted the anharmonic phonon frequencies of perovskite materials with high fidelity. The effect of 4-phonon scattering on phonon linewidths and thermal conductivities was also investigated. Furthermore, we developed a finite temperature structure optimization method based on the quasi-harmonic approximation and the SCP method, and have successfully predicted the structural phase transitions and thermal expansion of ZnO and BaTiO₃ with reasonable accuracy. These application studies demonstrated the effectiveness and versatility of the developed method.

研究分野：計算物質科学

キーワード：非調和効果 フォノン 構造相転移 第一原理計算 熱伝導率 光学特性

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

ペロブスカイト構造 (ABX_3 や A_3BX) は、構成元素の組み合わせに応じて強誘電性、超伝導、磁性、マルチフェロイックス、高い光起電力など多彩な物性を示すことから、物性物理や材料科学の分野で広く研究されてきた。例えば、ハライドペロブスカイトは 2014 年頃から太陽電池材料として注目を集め、25%を超える高いエネルギー変換効率が達成されている。一方、ペロブスカイトは温度や圧力に対して極めて敏感に物性が変化するため、これらの物性を正確に予測・理解することが望まれるが、既存の理論計算手法ではそれが困難であった。密度汎関数法 (DFT) にもとづく第一原理計算は絶対零度では有効だが、顕著な温度依存性を示す物性の予測には限界がある。熱物性や光学特性は、フォノン (格子振動) の熱励起に伴って顕著な温度依存性を示すため、フォノンダイナミクスや電子格子相互作用を定量的に予測する技術が不可欠である。しかしペロブスカイト材料の格子振動の非調和性が大きいと、従来の調和近似に基づくフォノン計算が破綻する問題があった。非調和効果を考慮できる手法としては自己無撞着フォノン (SCP) 法が普及しつつあったが、ハライドペロブスカイトに対しては定量性に不満があり、さらなる精度向上が必要であることが示されていた。

2. 研究の目的

既存の自己無撞着フォノン (SCP) 法をさらに改良し、第一原理非調和フォノン計算手法の定量的性と汎用性をさらに広げることである。この新手法を用いて、ペロブスカイト構造の熱・光学物性を非経験的かつ高精度に予測し、これまで理論的に困難とされてきたペロブスカイトの特異な物性の起源を解明することを目指す。また、同手法をペロブスカイト構造以外の材料系へも適用し、手法の汎用性と有用性を実演する。

3. 研究の方法

(1) Bubble 図形を考慮した SCP 法の改良

SCP 法は平均場理論であるため、非調和性の偶数次項 (最低次は 4 次項) からの振動数繰り込みは考慮される一方で、3 次非調和項が引き起こすフォノン-フォノン散乱に伴う振動数シフトは考慮されない。そこで、3 フォノン散乱過程である Bubble 図形を追加で考慮することで、より正確なフォノン分散計算を目指す。同手法をハライドペロブスカイトへ適用し、立方晶から正方晶への構造相転移温度 T_s が SCP 法で過小評価される問題を解決するか検証する。

(2) 4 フォノン散乱過程の第一原理計算

ハライドペロブスカイトにおけるフォノン線幅や格子熱伝導率の予測精度改善を狙い、従来は考慮されていなかった 4 フォノン散乱過程を計算するための効率的アルゴリズム・コード開発を行う。また、熱伝導率計算手法としては Boltzmann 輸送方程式ではなく熱流演算子の非対角成分を考慮可能な Wigner 熱輸送理論を採用し、より正確な熱伝導率計算を目指す。

(3) 有限温度での結晶構造最適化

フォノン振動数は有限温度で結晶構造が変化することによっても大きく変化する。そこで、フォノンの自由エネルギーを原子座標や格子定数などの構造パラメータに関して最小化するアプローチによって、有限温度での結晶構造最適化を行う計算手法・コードを開発する。これを熱膨張や構造相転移のシミュレーションへ応用する。

4. 研究成果

(1) 準粒子近似を用いた SCP+Bubble 法の開発

従来の SCP 法で計算した非調和フォノン振動数 ω_q ・分極ベクトル \mathbf{e}_q 、そして 3 次の非調和力定を用いて Bubble 図形のフォノン自己エネルギー $\Sigma_q^B(\omega)$ を計算し、それを Dyson 方程式へ代入することで Bubble 図形の効果を含んだフォノンスペクトル関数 $A(\omega)$ を得る事ができる。このスペクトル関数は準粒子近似に頼っていないため、スペクトルの重みが Lorentzian から変化する効果を表現する事が出来る。しかし、準粒子バンドを与えないため、例えば電子格子相互作用の計

算への入力に使えないなどの制限がある。そこで、我々は Dyson 方程式に準粒子近似を適用するアプローチを提案した。この方法では $\Sigma_q^B(\omega)$ のフォノン分枝に関する非対角成分を無視し、さらにエネルギー依存性を特定の ω_0 での値で近似する。SCP+Bubble 法に基づくフォノン振動数は $\Omega_{qv}^2 = \omega_{qv}^2 - 2\omega_{qv} \text{Re}\Sigma_{qv}^B(\omega_0)$ で与えられる。 $\omega_0 = 0$ とする静的近似に加え、 $\omega_0 = \omega_{qv}$ や $\omega_0 = \Omega_{qv}$ とする計算手法を実装し、それぞれの方法をハライドペロブスカイト CsPbBr₃ へ適用して $A(\omega)$ と比較した結果、 $\omega_0 = \Omega_{qv}$ とする方法が $A(\omega)$ のピーク位置を最も良く再現する事を確認した (図 1 左)。

同手法を用いて CsPbBr₃ におけるソフトモードの温度依存性を計算し、そこに Curie-Wiess 則を当てはめることで構造相転移温度の見積を行った。DFT 計算は Quantum ESPRESSO を利用し、交換相関汎関数には実権の格子定数を比較的良く再現する PBEsol を利用した。従来の SCP 法を用いると、ソフトモード振動数が過大評価されるため、立方晶→正方晶の構造相転移温度が 200 K 程度となり、実験値 405 K の半分程度となってしまう。一方で SCP+Bubble 法を用いると振動数の過大評価が補正され、結果的に相転移温度の実験値を良く再現することが出来た (図 1 右)。また、構造相転移温度は格子定数を 1% 変えるだけで 100 K 程度変化することも分かっており、格子定数を精度良く計算する重要性が明らかになった。これらの研究成果は Physical Review Letter 誌に掲載され Editor's Suggestion へ選定された (Phys. Rev. Lett. **129**, 185901 (2022))。

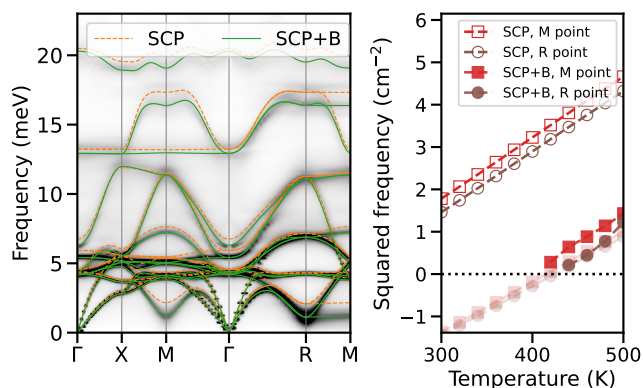


図 1. SCP 法と SCP+Bubble 法による立方晶 CsPbBr₃ のフォノン振動数。(左図) 500 K におけるスペクトル関数と準粒子バンドの比較。(右図) ソフトモード振動数の温度依存性。

また、構造相転移温度は格子定数を 1% 変えるだけで 100 K 程度変化することも分かっており、格子定数を精度良く計算する重要性が明らかになった。これらの研究成果は Physical Review Letter 誌に掲載され Editor's Suggestion へ選定された (Phys. Rev. Lett. **129**, 185901 (2022))。

(2) CsPbBr₃ の熱伝導における 4 フォノン散乱効果の解析

正方晶 CsPbBr₃ について、3 フォノン散乱と熱流演算子の非対角成分を考慮する Wigner 輸送理論を組み合わせる方法で実験結果を定量的に説明可能とする第一原理計算の報告例があった。しかし非調和性が極めて大きなハライドペロブスカイトにおいては高次の 4 フォノン散乱効果も無視できないと考えられる。そこで、4 フォノン散乱過程のフォノン線幅や熱伝導率への影響を定量的に解析した。

4 フォノン散乱確率の計算はコストが非常に高く、密な逆空間サンプリングが難しい。一方、熱伝導率を収束させるには比較的密なサンプリングが必要である。これらを両立するため、4 フォノン散乱確率を相対的に粗い q 点メッシュで実行し、それを trilinear interpolation を用いて密な q 点メッシュに補間する対策を行った。立方晶構造に対して上述の SCP+Bubble 法に基づいてフォノン線幅を計算した結果、中性子散乱実験から見積もられた音響フォノン線幅を説明するには 3 フォノン散乱だけでは不十分であり、4 フォノン散乱を考慮する必要があることが明らかになった。その一方で、4 フォノン散乱を考慮して熱伝導率を評価すると 400-500 K 付近で 0.2-0.3 W/mK と実験値を過小評価する結果になった。ハライドペロブスカイトではフォノンの非調和性が極めて強いため、フォノンの準粒子描像に基づく Wigner 理論が破綻している可能性が高い。熱伝導率の定量性を改善するには、自己エネルギーの振動数依存性まで考慮した熱輸送理論を用いる必要があるという結論に至った。

(3) SCP+Bubble 法を用いた TiO₂ の誘電率計算

開発した SCP+Bubble 法の汎用性を TiO₂ の誘電率計算によって実証した。ルチル型構造の TiO₂ に対して SCP+Bubble 法に基づく非調和フォノン計算を実施し、さらに 3 フォノン散乱と 4 フォノン散乱による線幅を計算し、フォノン振動数や線幅の実験値と比較した。meta-GGA 法である r²SCAN 汎関数を用いた場合、E_g¹モードと A_{2u}モードの振動数を高い精度で計算出来る事を確認した。また、これらのモードの線幅予測において 4 フォノン散乱の寄与が室温で無視できない事を明らかにした。さらにエネルギー依存の複素誘電率や反射率の計算を行い、実験値とよく一致する結果が得られた。非調和効果を摂動的に取り込む方法では実験値と大きな乖離が見られたことから、変分法に基づく SCP 法や SCP+Bubble 法の有効性と汎用性が明らかになった。 (Phys. Rev. B **107**, 094305 (2023))

(4) QHA と SCP に基づく有限温度構造最適化手法の開発と応用

有限温度における結晶構造最適化を実現するため、フォノン励起による (擬) 自由エネルギー $F_{\text{vib}}(T; \mathbf{X})$ (\mathbf{X} : 構造パラメータ) と Born–Oppenheimer エネルギー曲面 $U_0(\mathbf{X})$ で定義される自由エネルギー $F(T; \mathbf{X}) = U_0(\mathbf{X}) + F_{\text{vib}}(T; \mathbf{X})$ の構造パラメータ微分 $\partial F(T; \mathbf{X})/\partial \mathbf{X}$ を効率的に計算する方法を提案した。この方法では、 $\partial F(T; \mathbf{X})/\partial \mathbf{X}$ を非調和力定数や 2 次 3 次の弾性テンソルを用いて近似的に評価し、すべての構造パラメータ \mathbf{X} を有限温度で更新可能であり、構造パラメータの変化量が大きすぎない場合には高い精度も期待できる。

格子振動の非調和性がそれほど強くない場合は準調和近似 (QHA) が良い近似となり、 $\partial F(T; \mathbf{X})/\partial \mathbf{X}$ が高速に計算可能である。我々は開発した手法をウルツ鉱型構造の ZnO へ適用し、 a, c 軸長の異方的な熱膨張を高い精度で予測することに成功した (図 2a)。また、 a, c 軸長に加え原子の内部座標も有限温度で同時に最適化することで焦電定数の定量予測にも成功した (図 2b)。本手法は対称性が低くグリッドサーチによる自由エネルギー最適化が困難な系の構造最適化が比較的容易に実行出来る点で有用である。(Phys. Rev. B **107**, 134119 (2023))

ペロブスカイト構造など格子振動の非調和性が強い場合は QHA が破綻するため、そもそも $F_{\text{vib}}(T; \mathbf{X})$ とその微分係数が計算出来ない。その場合は SCP 法を用いて非調和効果を繰り返すことでフォノンの自由エネルギーを計算する。このアプローチを BaTiO₃ へ適用し、立方晶 → 正方晶 → 直方晶 → 菱面体晶の逐次相転移を正しい順番で再現することに成功した (図 3)。また、構造パラメータだけでなく自発分極の大きさについても実験結果と定量的に整合する結果を得ることが出来た。相転移温度については実験結果を過大評価しているものの、これまで困難だった有限温度の構造最適化を可能にするものであり、今後多方面への応用が期待できる重要な成果と言える。(Phys. Rev. B **106**, 224104 (2022))

(5) 開発した計算手法・コードの公開

本研究で開発した先進フォノン計算の方法および有限温度構造最適化手法を ALAMODE の新機能として公開した (<https://github.com/ttadano/alamode>)。また、チュートリアルなどのドキュメント整備を行うなどして研究成果の普及を図っている。

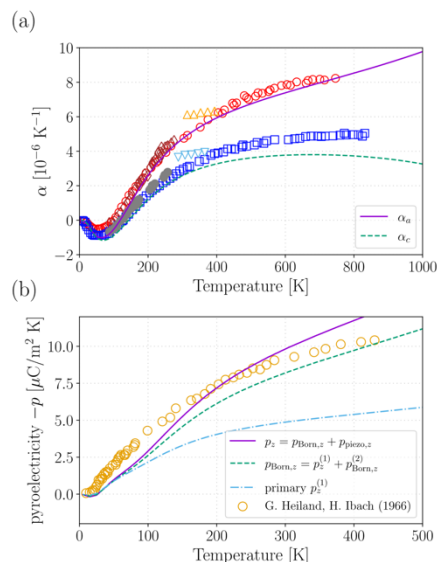


図 2. QHA に基づく ZnO の有限温度構造最適化。(a) 格子定数の線熱膨張係数 (b) 焦電定数。Phys. Rev. B **2023**, **107**, 134119 より引用。Copyright © 2023 by the American Physical Society.

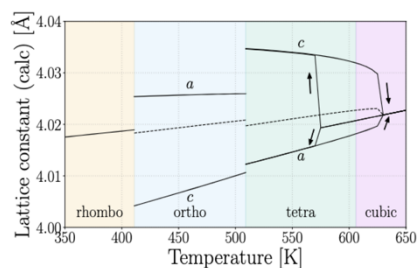


図 3. SCP に基づく BaTiO₃ の有限温度構造最適化。Phys. Rev. B **2022**, **106**, 224104 より引用。Copyright © 2022 by the American Physical Society.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 16件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 増木亮太、野本拓也、有田亮太郎、只野央将	4. 巻 58
2. 論文標題 非調和フォノン理論に基づいた有限温度における結晶構造の第一原理計算	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 419~432
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Togo Atsushi, Chaput Laurent, Tadano Terumasa, Tanaka Isao	4. 巻 35
2. 論文標題 Implementation strategies in phonopy and phono3py	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 353001 ~ 353001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/acd831	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 He Xinyi, Nomoto Seiya, Komatsu Takehito, Katase Takayoshi, Tadano Terumasa, Kitani Suguru, Yoshida Hideto, Yamamoto Takafumi, Mizoguchi Hiroshi, Ide Keisuke, Hiramatsu Hidenori, Kawaji Hitoshi, Hosono Hideo, Kamiya Toshio	4. 巻 33
2. 論文標題 Hydride Anion Substitution Boosts Thermoelectric Performance of Polycrystalline SrTiO ₃ via Simultaneous Realization of Reduced Thermal Conductivity and High Electronic Conductivity	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Advanced Functional Materials	6. 最初と最後の頁 2213144-1~11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adfm.202213144	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Fransson Erik, Rosander Petter, Eriksson Fredrik, Rahm J. Magnus, Tadano Terumasa, Erhart Paul	4. 巻 6
2. 論文標題 Limits of the phonon quasi-particle picture at the cubic-to-tetragonal phase transition in halide perovskites	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Communications Physics	6. 最初と最後の頁 173-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42005-023-01297-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 He Xinyi, Kimura Shigeru, Katase Takayoshi, Tadano Terumasa, Matsuishi Satoru, Minohara Makoto, Hiramatsu Hidenori, Kumigashira Hiroshi, Hosono Hideo, Kamiya Toshio	4. 巻 11
2. 論文標題 Inverse Perovskite Ba3B0 (B = Si and Ge) as a High Performance Environmentally Benign Thermoelectric Material with Low Lattice Thermal Conductivity	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Advanced Science	6. 最初と最後の頁 2307058-1~14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/advs.202307058	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Basini M., Pancaldi M., Wehinger B., Udina M., Unikandanunni V., Tadano T., Hoffmann M. C., Balatsky A. V., Bonetti S.	4. 巻 628
2. 論文標題 Terahertz electric-field-driven dynamical multiferroicity in SrTiO3	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Nature	6. 最初と最後の頁 534 ~ 539
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41586-024-07175-9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 只野 央将	4. 巻 78
2. 論文標題 非調和フォノン理論が拓く有限温度物性の第一原理計算	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 日本物理学会誌	6. 最初と最後の頁 542 ~ 547
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11316/butsuri.78.9_542	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Masuki Ryota, Nomoto Takuya, Arita Ryotaro, Tadano Terumasa	4. 巻 107
2. 論文標題 Full optimization of quasiharmonic free energy with an anharmonic lattice model: Application to thermal expansion and pyroelectricity of wurtzite GaN and ZnO	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134119-1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.134119	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Amano Tomohito, Yamazaki Tamio, Akashi Ryosuke, Tadano Terumasa, Tsuneyuki Shinji	4. 巻 107
2. 論文標題 Lattice dielectric properties of rutile TiO ₂ : First-principles anharmonic self-consistent phonon study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094305-1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.094305	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Masuki Ryota, Nomoto Takuya, Arita Ryotaro, Tadano Terumasa	4. 巻 106
2. 論文標題 Ab initio structural optimization at finite temperatures based on anharmonic phonon theory: Application to the structural phase transitions of BaTiO ₃	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 224104-1-26
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.106.224104	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tadano Terumasa, Saidi Wissam A.	4. 巻 129
2. 論文標題 First-Principles Phonon Quasiparticle Theory Applied to a Strongly Anharmonic Halide Perovskite	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 185901-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.129.185901	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Cho Kenichi, Tahara Hirokazu, Yamada Takumi, Suzuura Hidekatsu, Tadano Terumasa, Sato Ryota, Saruyama Masaki, Hirori Hideki, Teranishi Toshiharu, Kanemitsu Yoshihiko	4. 巻 22
2. 論文標題 Exciton-Phonon and Trion-Phonon Couplings Revealed by Photoluminescence Spectroscopy of Single CsPbB ₃ Perovskite Nanocrystals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 7674 ~ 7681
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.2c02970	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Togo Atsushi, Hayashi Hiroyuki, Tadano Terumasa, Tsutsui Satoshi, Tanaka Isao	4. 巻 34
2. 論文標題 LO-mode phonon of KCl and NaCl at 300 K by inelastic x-ray scattering measurements and first principles calculations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 365401 ~ 365401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ac7b01	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ishioaka Kunie, Tadano Terumasa, Yanagida Masatoshi, Shirai Yasuhiro, Miyano Kenjiro	4. 巻 5
2. 論文標題 Anharmonic organic cation vibrations in the hybrid lead halide perovskite CH ₃ NH ₃ PbI ₃	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 105402-1 ~ 9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevmaterials.5.105402	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Masuki Ryota, Nomoto Takuya, Arita Ryotaro, Tadano Terumasa	4. 巻 105
2. 論文標題 Anharmonic Gruneisen theory based on self-consistent phonon theory: Impact of phonon-phonon interactions neglected in the quasiharmonic theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 064112-1 ~ 17
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevb.105.064112	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Cho Kenichi, Yamada Takumi, Tahara Hirokazu, Tadano Terumasa, Suzuura Hidekatsu, Saruyama Masaki, Sato Ryota, Teranishi Toshiharu, Kanemitsu Yoshihiko	4. 巻 21
2. 論文標題 Luminescence Fine Structures in Single Lead Halide Perovskite Nanocrystals: Size Dependence of the Exciton-Phonon Coupling	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 7206 ~ 7212
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.1c02122	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 8件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 只野 央将
2. 発表標題 第一原理フォノン計算を用いた有限温度における構造最適化
3. 学会等名 第36期CMMフォーラム 本例会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 只野 央将
2. 発表標題 ハライドペロブスカイトにおける高次非調和効果の第一原理解析
3. 学会等名 日本物理学会 2023年年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Terumasa Tadano
2. 発表標題 Anharmonic phonon theory in condensed matter physics with applications based on DFT
3. 学会等名 RIKEN Symposium Second Workshop on Fundamentals in Density Functional Theory (DFT2024) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 只野央将
2. 発表標題 自己無撞着フォノン理論による構造相転移温度の第一原理計算
3. 学会等名 物性研究所パソコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Terumasa Tadano
2. 発表標題 First-principles calculations of phonons and crystal structures at finite temperatures
3. 学会等名 Recent Progress in Thermal Transport Theory and Experiments (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Terumasa Tadano
2. 発表標題 Ab initio calculation of phonons and crystal structures at finite temperatures: A self-consistent phonon approach
3. 学会等名 ISSP Theory Seminar, ISSP (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Terumasa Tadano
2. 発表標題 Ab initio phonon calculation at finite temperature toward computational exploration of metastable phases
3. 学会等名 The Twelfth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC12) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Terumasa Tadano
2. 発表標題 Extending first-principles structural optimization method to finite temperatures
3. 学会等名 APW-RIKEN-Tsinghua-Kavli workshop "Highlights on condensed matter physics" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 只野 央将
2. 発表標題 フォノン計算を活用した熱伝導の非経験予測
3. 学会等名 透明酸化物光・電子材料第166委員会 第92回研究会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Terumasa Tadano
2. 発表標題 First-principles study of thermal and optical properties of perovskite materials
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 マイクロ・ナノ熱工学の進展編集委員会、丸山 茂夫、稲田 孝明ほか17名	4. 発行年 2021年
2. 出版社 エヌ・ティー・エス	5. 総ページ数 808
3. 書名 マイクロ・ナノ熱工学の進展	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関

米国	University of Pittsburgh	SLAC National Accelerator Laboratory	University of Connecticut	
スウェーデン	Chalmers University of Technology	Stockholm University	NORDITA	
イタリア	Ca ' Foscari University of Venice	Sapienza ' University of Rome		