

令和 4 年 6 月 20 日現在

機関番号：17104

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K03673

研究課題名(和文)熱力学状態図の第一原理計算 - 水素化物状態図作成と圧力・組成・温度特性評価 -

研究課題名(英文)Development of first principles calculation scheme of thermodynamic phase diagram

研究代表者

中村 和磨 (Kazuma, Nakamura)

九州工業大学・大学院工学研究院・教授

研究者番号：60525236

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：第一原理計算を用いて遷移金属水素化物 TiH の熱力学状態図の作成を行った。ギブス自由エネルギーは、エンタルピー項、フォノン項、固溶エントロピー項の三つからなり、これらを第一原理計算より評価した。エンタルピー項は金属の空隙サイトに水素を部分的に挿入させた構造を大量発生させ、各構造に対して第一原理計算を行い評価した。これらの構造に対してクラスター展開およびクラスター変分法を用いて固溶エントロピー項を評価した。第一原理フォノン計算より自由エネルギーへのフォノン寄与を評価した。この自由エネルギーに対する拡張正則溶体モデルを構築し熱力学状態図を作成した。実験と比較し良い一致を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

金属水素化物の熱力学状態図の作成は、水素脆化の原因究明、新規水素吸蔵合金の探索など、工学的実用性において重要である。これまで状態図作成は実験主導であり、経験的アプローチに基づいて研究が進められてきた。本研究では、第一原理計算による物質の熱力学状態図の作成を行った。第一原理計算に基づくと、熱力学的状態の安定性に関わる各項を個別に評価できるため、相の安定性起源に関する微視的理解が得られる。実験状態図を定量的に再現できる第一原理状態図が得られれば、実験結果の解析において威力を発揮するだけでなく、理論手動で物質・材料設計をリードすることも可能となる。

研究成果の概要(英文)：A thermodynamic phase diagram of the transition-metal hydride TiH was calculated with first-principles calculations. The Gibbs free energy consists of three terms; the enthalpy, phonon, and solid-solution entropy terms, which were evaluated by ab initio calculations. The enthalpy term was evaluated by generating a large number of atomic configurations in which hydrogen was partially inserted into the void sites of the Ti metal, and performing first-principles calculations for each structure. Cluster-expansion and cluster-variational methods were performed for these structures to obtain a solid-solution entropy term. The contribution of phonons to the free energy was evaluated from ab initio phonon calculations. A regular solution model for the obtained free energy was constructed, and a thermodynamic phase diagram based on this model was calculated. We obtained a good agreement between the theoretical and experimental results.

研究分野：計算物質科学

キーワード：第一原理計算 熱力学状態図

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

近年、計算機の性能向上にともない、膨大な数の固体第一原理電子構造計算を並列実行することが可能になっている。効果的な探索アルゴリズムを併用することで膨大な構造自由度の空間を効率的に探索し新物質を発見しようとする試みがある。また、特定の構造系列に属する構造を大量発生させ、発生構造すべてに対して第一原理計算を実施することも可能になっている。構造系列の構造/エネルギーデータから、ある相のギブス自由エネルギー曲線の組成依存性を第一原理的に評価できる。得られた様々な構造系列の自由エネルギーの比較から第一原理計算に基づく物質の熱力学状態図が作成可能である。

熱力学状態図は歴史的課題であり、物質・材料の機能を最適化するための組織制御において重視されてきた。これまでの状態図作成は実験主導であり、現象論的知見の蓄積を念頭に研究が進められた。しかし熱力学相を同定するプローブとしてどの実験手段を選ぶかで結果が異なるため、ある物質について異なる複数の状態図が存在することは珍しくない。これは詳細な組織制御を必要とする実用材料開発では悪因となる。第一原理計算の観点からは、計算コストと精度の粗さのため、状態図作成は敬遠されている。しかし熱力学相の評価を完全に非経験的計算に基づかせることができれば、実験状態図をサポートする第一原理状態図が得られ、理論手動で物質・材料設計をリードすることも可能になるだろう。

2. 研究の目的

本申請課題では、物質相の自由エネルギーを非経験的に計算し、熱力学状態図と物性を評価するための第一原理計算スキーム確立を目的とする。研究課題の核心をなす問いとして、第一原理計算に基づく物質の熱力学状態図は実験結果を再現できるか？ 再現するためにどのようなノウハウが必要か？この二点に絞り研究を進める。具体物質として金属水素化物を取り上げる。金属水素化物は、水素吸蔵合金や水素蓄電池として知られ、多くの研究者が性能改善に取り組んでいる。実験データも豊富なため定量検証が可能であり、実用材料を意識した第一原理方法論開発に適している。

3. 研究の方法

工業的重要性の高い金属水素化物に焦点を当て、二元系水素化物 TiH 系の状態図作成を行う。単純物質だけでなく実用材料の状態図評価に耐える方法論確立がこの研究の目標であるが、今回の課題では実験と比較可能な TiH を選んだ。電子状態評価、最適化構造評価、フォノン系エネルギー評価に加えて、有限温度物性を評価するためのクラスター展開法およびクラスター変分法を用いる。また得られた第一原理データをもとに、有限温度・任意組成の自由エネルギー評価のための正則溶体モデル関数を構築し、これを用いて熱力学状態図を作成する。

4. 研究成果

本申請課題で取り組んだ課題の内、中心的に取り組んだ物質の第一原理熱力学状態図作成スキーム構築について詳しく述べ、また論文として纏まった三つの研究について解説する。

TiH の熱力学状態図作成スキーム構築

計算の出発点は第一原理ギブス自由エネルギー評価である。自由エネルギーは、エンタルピー項、固溶エントロピー項、フォノン項の三つからなる。エンタルピー項は規則状態と完全固溶状態の電子エネルギーから評価される。固溶エントロピー項はクラスター展開法およびクラスター変分計算を用いて評価される。フォノン項は第一原理フォノン計算から評価される。固溶エントロピー項とフォノン項は温度依存性を持つ。以下各項の評価について詳述する。

まずエンタルピー項について述べる。図1はTiH固溶体の模式図である。図1(a)では体心立方格子(bcc)のTi(青)の内部の空隙サイトを部分的に水素が占有した構造が示されている。赤線で結ばれた正四面体の中心が空隙サイト(黄)である。この空隙サイトを水素(ピンク)が占有することでTiHが構成される。計算セルのサイズを増やすと空隙サイトも増えるので、空隙サイトを占有するHの比率を変えることで、任意のH濃度のTiH固溶体を構築することができる。図1(b)は面心立方格子(fcc)の場合、図1(c)は六方格子(hcp)の場合である。このような固溶構造をソフトウェアATAT[1]を用いて生成させた。以下では、bcc Tiの四面体空隙サイトに水素を挿入させて作った構造系列をbcc四面体系列(bcc-tetra)と書く。bcc-tetraの場合、規則状態が純Tiに対応し、水素完全固溶状態がTiH₆に対応する(つまりbcc Tiの場合、ユニットセル内に空隙サイトは6つ存在し、すべての空隙サイトがHで占有されるとTiH₆となる)。fcc Tiの場合は、fcc-tetra、hcp Tiの場合は、hcp-tetraと略

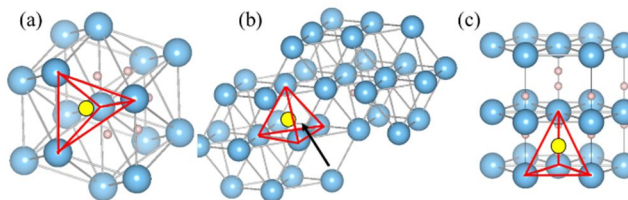


図1. (a) bcc-tetra, (b) fcc-tetra, (c) hcp-tetra 構造系列。正四面体の中心が空隙サイトである。

図1(a)では体心立方格子(bcc)のTi(青)の内部の空隙サイトを部分的に水素が占有した構造が示されている。赤線で結ばれた正四面体の中心が空隙サイト(黄)である。この空隙サイトを水素(ピンク)が占有することでTiHが構成される。計算セルのサイズを増やすと空隙サイトも増えるので、空隙サイトを占有するHの比率を変えることで、任意のH濃度のTiH固溶体を構築することができる。図1(b)は面心立方格子(fcc)の場合、図1(c)は六方格子(hcp)の場合である。このような固溶構造をソフトウェアATAT[1]を用いて生成させた。以下では、bcc Tiの四面体空隙サイトに水素を挿入させて作った構造系列をbcc四面体系列(bcc-tetra)と書く。bcc-tetraの場合、規則状態が純Tiに対応し、水素完全固溶状態がTiH₆に対応する(つまりbcc Tiの場合、ユニットセル内に空隙サイトは6つ存在し、すべての空隙サイトがHで占有されるとTiH₆となる)。fcc Tiの場合は、fcc-tetra、hcp Tiの場合は、hcp-tetraと略

記する。fcc-tetra および hcp-tetra 構造系列で、空隙サイトが H に完全占有されると TiH_2 および Ti_2H_4 となる。本報告書では簡単のため、空隙配置として tetra 構造系列を考えるが、Ti-H 系では bcc-八面体系列、fcc-八面体系列 hcp-八面体系列もあるため、実際の計算ではすべての固溶構造を考慮した。

発生させられた構造系列のすべての配置に対して、第一原理計算 [2] が実施される。図 2 に四面体構造系列に対して計算された

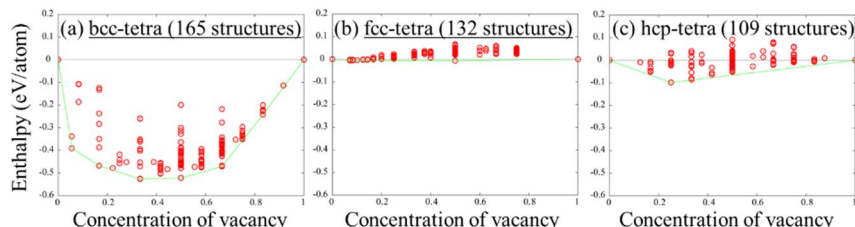


図 2. (a) bcc-tetra, (b) fcc-tetra, (c) hcp-tetra 構造系列に対して計算された標準生成エンタルピーの空隙組成依存性。

標準生成エンタルピー (赤丸) を示

す。bcc-tetra, fcc-tetra, hcp-tetra 構造系列では、それぞれ 165, 132, 109 の化合物が生成された。緑線は凸包 (convex hull) と呼ばれ、この凸包を構成する固溶構造が絶対零度で実現しえる化合物である。図から分かる通り bcc-tetra 系列では、標準生成エンタルピーが負に大きいので安定な TiH 化合物が形成できる。一方で fcc-tetra 系列では負の標準生成エンタルピーが得られていない。よってこの構造系列では Ti 水素化物が形成されない (この構造系列では H は空隙サイトを占有しえない)。hcp-tetra 系列の場合は水素は Ti 格子内に侵入できるが、大きな安定化エネルギーは得られないようである。以上がエンタルピー項の評価である。

次に自由エネルギーへの固溶エントロピー寄与について述べる。上で得られた各構造系列のエネルギーデータに対してクラ

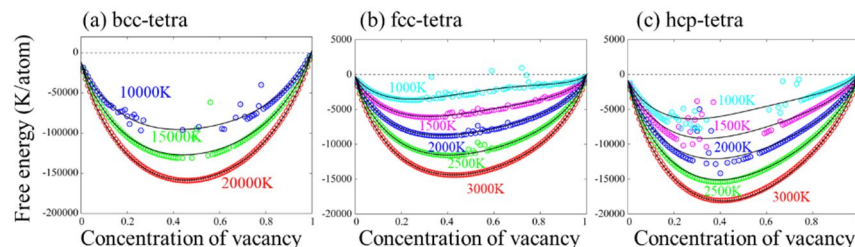


図 3. (a) bcc-tetra, (b) fcc-tetra, (c) hcp-tetra 構造系列に対して計算されたクラスター変分法に基づく固溶エントロピー項の自由エネルギー寄与の空隙組成依存性。

スター展開 [3] が実施され、各構造のエネルギーを簡便評価

するための展開パラメータを求める。パラメータが得られると、これに基づきクラスター変分法 [4] が実施され、有限温度、任意空隙組成のもとでの最適化グランドポテンシャルが評価される。図 3 は与えられた温度の下で計算された各構造系列の自由エネルギーである。(a) の bcc-tetra 構造系列は温度ゼロの結果 [図 2(a)] を反映して、高い安定化エネルギーが得られている。温度が増すにつれて自由エネルギーが負に大きくなっているが、これは配置エントロピーの自由エネルギーへの寄与が大きくなるためである。fcc-tetra や hcp-tetra 系列でも有限温度では安定な自由エネルギーが得られていることが分かる。

次にフォノン項について述べる。すべての固溶構造に対して第一原理フォノン計算を実施することはコスト的に難しいので、組成の端点、たとえば bcc-tetra 系列では bcc Ti [図 4(a)] と TiH_6 [図 4(b)] に対して PHONOPY [5] によるフォノン計算を行い、自由エネルギーへのフォノン寄与 (赤) を求めた。同様に fcc-tetra および hcp-tetra 系列についても自由エネルギーへのフォノン寄与を求めた。

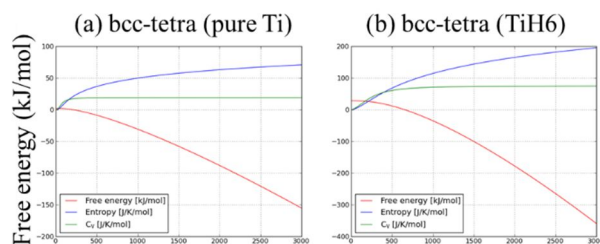


図 4. フォノン自由エネルギー (赤) の温度依存性 (0-3000 K). 青: フォノンエントロピー, 緑: 定積比熱

エンタルピー項、固溶エントロピー項、フォノン項の 3 つを合わせたものが全自由エネルギーであり、温度 T と

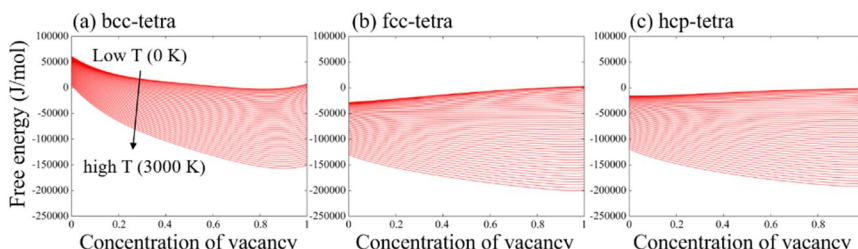


図 5. (a) bcc-tetra, (b) fcc-tetra, (c) hcp-tetra 構造系列に対して計算された正則溶体近似に基づく自由エネルギーの空隙組成依存性 (0-3000 K).

組成 x (H 濃度) の関数として得られ

る。この自由エネルギー曲面を拡張された正則容体近似に基づく関数形を仮定してパラメータフィッティングを行い、最終的な自由エネルギー曲面を得る。図 5(a), (b), (c) はそれぞれ bcc-tetra, fcc-tetra, hcp-tetra 構造系列に対して得られた自由エネルギー曲面である。横軸を空隙濃度にとり、温度を 0 K から 3000 K まで振った曲線が比較されている。この 3 つのエネルギー曲面データを CALPHAD 法に基づく状態図作成プログラム (PANDAT) に入力し熱力学状態図を作成する。

図 6 が PANDAT [6] より得られた TiH の熱力学状態図である。状態図作成では bcc-tetra, fcc-tetra, hcp-tetra 構造系列が考慮された。八面体空隙を有する構造系列は結果に影響しないことを確認した。

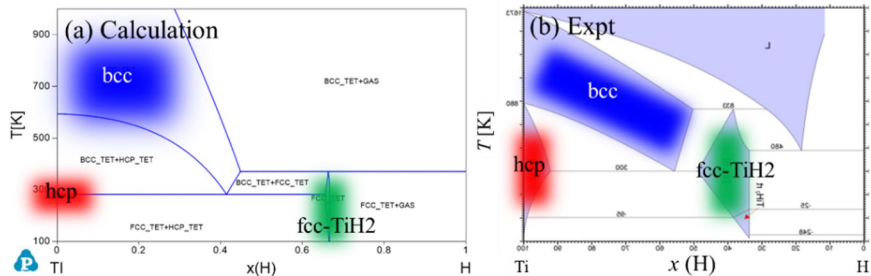


図 6. PANDAT により得られた TiH の熱力学状態図. (a) が第一原理シミュレーション (拡張正則溶体モデル), (b) が実験である。

(a) が第一原理計算より得られた状態図, (b) が実験である。比較から計算は実験を定性的に再現できることが分かった。

[1] <https://www.brown.edu/Departments/Engineering/Labs/avdw/atat/>

[2] <https://www.vasp.at>

[3] M. Sluiter, D. de Fontaine, X. Q. Guo, R. Podloucky, A. J. Freeman, Phys. Rev. B 16, 10460 (1990).

[4] クラスタ変分法 材料物性論への応用, 菊池良一, 毛利哲雄, 森北出版 (2010).

[5] <https://atztogo.github.io/phonopy>

[6] <https://computherm.com/>

課題 量子ドットの蛍光時系列データに対する機械学習解析

実験グループと共同で量子ドットの蛍光時系列データに対する機械学習解析プログラムの開発を行った [7]。蛍光時系列データは実験条件や装置環境のために深刻なノイズを含み、このため有効なシグナル検出が難しく、実験結果の定性的理解さえ得ることができない状況があることが知られている。我々は隠れマルコフモデルに基づいて蛍光時系列データからノイズを除去し、蛍光状態のシグナルを高精度に検出できるプログラムを開発した。人間の認知能力では認識不可能な状況の時系列データでも、正しく状態判定を実施できることが分かった。

[7] T. Furuta, K. Hamada, M. Oda, K. Nakamura, in preparation.

課題 汎用性ソフトウェア公開

第一原理多体摂動計算のために開発を行ってきたプログラムを汎用ソフトウェア RESPACK として公開した。最局在ワニエ関数, RPA 応答関数, 周波数依存電子間相互作用パラメータが計算可能であり, バンド計算ソフト xTAPP および Quantum ESPRESSO に対応している。OpenMP/MPI に対応しており, 金属, 半導体, 遷移金属化合物, 有機化合物など広範な物質群を計算できる。日本語・英語マニュアルを整備し, 計算アルゴリズムとベンチマークデータを纏めた論文を作成した [8]。2017 年 10 月にバージョン 1 を公開し, 2022 年 6 月までのダウンロード数は 4,290 である。

[8] K. Nakamura, Y. Yoshimoto, Y. Nomura, T. Tadano, M. Kawamura, T. Kosugi, K. Yoshimi, T. Misawa, Y. Motoyama, Comput. Phys. Commun. 261, 107781/1-20 (2021).

課題 イリジウム酸化物 $\text{Ca}_5\text{Ir}_3\text{O}_{12}$ の低エネルギー有効模型導出

イリジウム酸化物 $\text{Ca}_5\text{Ir}_3\text{O}_{12}$ の低エネルギー有効模型導出を行った [9]。自身が開発・管理している第一原理多体摂動計算ソフトウェア RESPACK をスピノル形式に拡張し, 強いスピン軌道相互作用のある物質群でも有効模型導出計算が可能となるよう改変した。この物質の有効模型パラメータの解析から, 最近接トランスファー t は 0.197 eV, 制限 RPA によるオンサイト U および隣接 V 電子間相互作用は, それぞれ 2.41 eV および 0.96 eV であることが分かった。結果, 強相関度 $(U - V)/t$ は 7.36 であり, 系は強相関電子系に分類されることが分かった。またトランスファー解析より, この系の擬次元性が確認された。スピン軌道相互作用に関わるオンサイトトランスファーは 0.213 eV, 一方オンサイト交換積分は 0.205 eV であり, 結果, スピン軌道相互作用物理とフント物理が競合することが分かった。

[9] M. Charlebois, J.-B. Morée, K. Nakamura, Y. Nomura, T. Tadano, Y. Yoshimoto, Y. Yamaji, T. Hasegawa, K. Matsuhira, M. Imada, Phys. Rev. B 104, 075153/1-19 (2021).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件／うち国際共著 1件／うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Kanno Shu, Tada Tomofumi, Utsumi Takeru, Nakamura Kazuma, Hosono Hideo	4. 巻 12
2. 論文標題 Electronic Correlation Strength of Inorganic Electrides from First Principles	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 12020 ~ 12025
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.1c03637	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 Charlebois Maxime, Moree Jean-Baptiste, Nakamura Kazuma, Nomura Yusuke, Tadano Terumasa, Yoshimoto Yoshihide, Yamaji Youhei, Hasegawa Takumi, Matsuhira Kazuyuki, Imada Masatoshi	4. 巻 104
2. 論文標題 Ab initio derivation of low-energy Hamiltonians for systems with strong spin-orbit interaction: Application to Ca5Ir3O12	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 075153(1-19)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.075153	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 Nakamura Kazuma, Yoshimoto Yoshihide, Nomura Yusuke, Tadano Terumasa, Kawamura Mitsuaki, Kosugi Taichi, Yoshimi Kazuyoshi, Misawa Takahiro, Motoyama Yuichi	4. 巻 261
2. 論文標題 RESPACK: An ab initio tool for derivation of effective low-energy model of material	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 107781(1-20)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2020.107781	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 Hanate Hiroki, Hasegawa Takumi, Tsutsui Satoshi, Nakamura Kazuma, Yoshimoto Yoshihide, Kishigami Naohiro, Haneta Sho, Matsuhira Kazuyuki	4. 巻 89
2. 論文標題 Study of Phonon Dispersion of Iridium Oxide Ca5Ir3O12 with Strong Spin-Orbit Interaction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 053601(1-5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.053601	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 Hanate Hiroki, Nakamura Kazuma, Matsuhira Kazuyuki	4. 巻 498
2. 論文標題 Harmonic voltage response to AC current in the nonlinear conductivity of iridium oxide Ca5Ir3O12	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Magnetism and Magnetic Materials	6. 最初と最後の頁 166203(1-4)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmmm.2019.166203	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 Hasegawa Takumi, Yoshida Wataru, Nakamura Kazuma, Ogita Norio, Matsuhira Kazuyuki	4. 巻 89
2. 論文標題 Raman Scattering Investigation of Structural Transition in Ca5Ir3O12	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 054602(1-11)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.054602	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 Mito Masaki, Kitamura Yuichiro, Tajiri Takayuki, Nakamura Kazuma, Shiraishi Ryo, Ogata Kazuma, Deguchi Hiroyuki, Yamaguchi Tomiko, Takeshita Nao, Nishizaki Terukazu, Edalati Kaveh, Horita Zenji	4. 巻 125
2. 論文標題 Hydrostatic pressure effects on superconducting transition of nanostructured niobium highly strained by high-pressure torsion	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 125901(1-13)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5083094	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 Nomura Yusuke, Hirayama Motoaki, Tadano Terumasa, Yoshimoto Yoshihide, Nakamura Kazuma, Arita Ryotaro	4. 巻 100
2. 論文標題 Formation of a two-dimensional single-component correlated electron system and band engineering in the nickelate superconductor NdNiO2	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205138(1-11)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.205138	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 Mito Masaki, Tajiri Takayuki, Saisho Seiya, Deguchi Hiroyuki, Kohno Atsushi, Nakamura Kazuma	4. 巻 489
2. 論文標題 Anisotropic compression effects on nanocrystalline crystals of nickel oxide	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Magnetism and Magnetic Materials	6. 最初と最後の頁 165407(1-7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmmm.2019.165407	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 MITO Masaki, NAKAMURA Kazuma, MATSUMOTO Kaname, TAKANO Yoshihiko	4. 巻 29
2. 論文標題 Uniaxial Compression Effects on Cuprate Superconductors	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Review of High Pressure Science and Technology	6. 最初と最後の頁 262 ~ 271
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4131/jshpreview.29.262	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 Mito Masaki, Shigeoka Shun, Kondo Hirotsuka, Noumi Nozomi, Kitamura Yuichiro, Irie Kunihiko, Nakamura Kazuma, Takagi Seishi, Deguchi Hiroyuki, Tajiri Takayuki, Ishizuka Mamoru, Nishizaki Terukazu, Edalati Kaveh, Horita Zenji	4. 巻 60
2. 論文標題 Hydrostatic Compression Effects on Fifth-Group Element Superconductors V, Nb, and Ta Subjected to High-Pressure Torsion	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 1472 ~ 1483
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MF201932	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6件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 古田達央, 中村和磨, 濱田啓輔, 小田勝
2. 発表標題 時系列データ解析のための隠れマルコフシミュレーション: 量子ドットblinking現象解析への応用
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名	中村和磨, Maxime Charlebois, Jean-Baptiste Moree, 野村悠祐, 只野央将, 吉本芳英, 山地洋平, 長谷川巧, 松平和之, 今田正俊
2. 発表標題	幾何学的フラストレート系イリジウム酸化物Ca5Ir3O12の第一原理低エネルギー有効模型導出
3. 学会等名	日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年	2021年

1. 発表者名	古田達央, 中村和磨, 小田勝
2. 発表標題	時系列データ解析のための隠れマルコフシミュレーション: 量子ドット発光・消光継続時間解析への応用
3. 学会等名	第126回日本物理学会九州支部例会
4. 発表年	2020年

1. 発表者名	Kazuma Nakamura
2. 発表標題	RESPACK: Ab initio software for many-body perturbation calculation and effective-model derivation
3. 学会等名	International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	中村和磨
2. 発表標題	Ca5Ir3O12の第一原理計算
3. 学会等名	新学術領域 J-Physics: 多極子伝導系の物理 J-Physics 地域研究会 - 北九州 - (招待講演)
4. 発表年	2019年

1. 発表者名 中村和磨
2. 発表標題 第一原理多体摂動論ソフトウェア RESPACKの開発と公開
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

RESPACK: ab initio many body perturbation theory
<https://sites.google.com/view/kazuma7k6r>
 RESPACK は第一原理多体摂動計算に関する汎用ソフトウェアである。2017/07/14 に公開以来、2022/06/14まででダウンロード総数4,285である。2018年には東京大学物性研究所が公募するソフトウェア開発・高度化プロジェクトの対象ソフトウェアに採択され、現在、東大物性研スーパーコンピュータの公式アプリケーションとして利用されている。ソフトウェアの講習会も、東京大学物性研究所の協力のもと、2017年と2019年に実施している。

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