

令和 5 年 6 月 1 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2022

課題番号：19K03717

研究課題名(和文)大規模系に適用可能な第一原理構造探索法の開発とその応用

研究課題名(英文)Development of first-principles structure search method applicable to large-scale systems and its application

研究代表者

下司 雅章 (Geshi, Masaaki)

大阪大学・エマージングサイエンスデザインR3センター・特任准教授(常勤)

研究者番号：70397660

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：未知の結晶構造を第一原理計算に基づいてできる限り最小限のコストで探索する方法として、初期構造をランダムに生成して1回のエンタルピー計算から選択したものだけ最適化する方法と、空間群を網羅して探索する方法を組み合わせ、できる限り探索漏れがないようにする方法を確立した。これをTe、S、Se、Sn、P、As、Sbなどの新高圧相探索に適用した。重要な点として、カットオフエネルギーやk点サンプリングで決まる計算精度が極めて重要であり、擬ポテンシャル法で行う場合は擬ポテンシャルが最も精度の高い方法であるFLAPW法と十分一致していることを確認した信頼性の高い計算で行わなければならないことを明かにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、数百コアレベルの規模の計算機で合理的な時間内で構造探索を行う方法を確立し、大規模系へ展開できる方法の基礎を築いた。それに加えて、構造探索においてカットオフエネルギーやk点サンプリングで決まる第一原理計算の計算精度の重要性を示し、また通常用いられる擬ポテンシャル法も、最も計算精度が高いFLAPW法と結果を比較することの重要性も示した。これは、データ創出を急ぐあまり信頼性を欠く結果で作られたデータは無意味になることでもあり、信頼性の高い計算を実施していくことの重要性を明らかにしたことの意味は大きい。構造の安定性を、電子論から理解することの意義を示したことも学術的に重要である。

研究成果の概要(英文)：As a method to search for unknown crystal structures with the least possible cost based on first-principles calculations, we have established a method that combines the method of randomly generating initial structures and optimizing only selected ones from a single enthalpy calculation and the method of searching over a space group to avoid as many search omissions as possible. This was applied to the search for new high-pressure phases such as Te, S, Se, Sn, P, As, and Sb. Importantly, I clarified that the calculation precision determined by the cutoff energy and k-point sampling is extremely important, and when using the pseudopotential method, it must be done with a reliable calculation that confirms that the pseudopotential is sufficiently consistent with the FLAPW method, which is the most precise method.

研究分野：高圧物性

キーワード：高圧物性 第一原理計算 結晶構造探索

### 1. 研究開始当初の背景

高圧物性分野では、高圧測定技術の発展と共に物質の高圧相の発見が重要なテーマの一つであり、結晶構造が圧力を加えるにつれて変化して行くことが報告されていた。一方、第一原理計算手法が開発され、各構造のエネルギーの比較が精度よくできるようになってきた。2000年台になると第一原理計算のソフトウェアのパッケージ化が進み、またこのころから圧力制御できる機能がいくつかのソフトウェアに追加された。それによって、圧力を指定して結晶構造を最適化できるようになった。こういった背景と計算機の高速化もあって、結晶構造探索を行う手法開発が高圧物性の中で始まった。

それまでの構造探索法は、遺伝的アルゴリズムやその類似手法を用いてエンタルピーの低い構造をエリート種として探す方法か、ランダムに初期構造を生成し、それらを構造最適化してエンタルピーの一番低いものを最安定構造とするランダムサーチ法に分けられる。前者は、前世代のエリート種であるエンタルピーの低い構造を基に次世代の構造を作り、それに交叉や突然変異の構造も導入して第一原理計算で構造最適化して世代を進めていく。後者は、ランダムに生成した初期構造全てに構造最適化を行って最安定構造を見つけ出す。これらは原子数が多くなると組み合わせの数が急激に多くなり、かつ1回1回の第一原理計算自体の時間も増加するため、十分に探索空間を網羅できない。これまで大規模系に適用されたもの極僅かしかなく、それらもパソコンや人的資源を大量に投入して行う必要があった。従って、最安定構造を探索するまでの第一原理計算の部分の時間の削減が一番の課題である。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、第一原理計算に基づいた結晶構造探索手法を、大規模系に適用できるように合理的な時間内で実行できる手法を開発することである。その基礎となる物理的内容と計算技術をどうつなげばそれができるかということも明らかにする。これを用いて、超伝導を発現する新規金属水素化合物や磁性材料、硬質材料など新物質の提案をする。

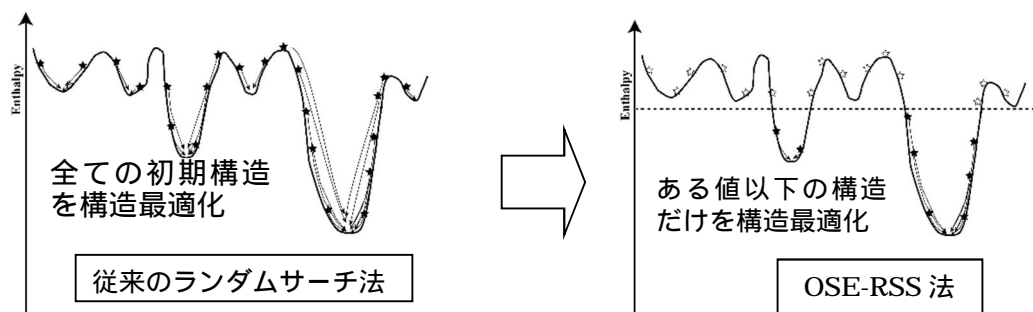


図1. 従来のランダムサーチ法と修正ランダムサーチ法の概念図。黒塗りの星マークが生成された初期構造で構造最適化をする構造で、白抜きの星マークは構造最適化をしない点である。選別の結果として、構造最適化を行う点は収束性がよい点だけになる。

### 3. 研究の方法

本研究ではランダムサーチ法を基に開発を行った。その理由は、個々の構造の最適化は全て独立であるので、利用環境に応じて探索効率の向上(時間短縮)が可能となるからである。基本的な概念として、ポテンシャルエネルギー面についての学術的独自性を示す物理的考察をする。

「最安定構造に収束するための初期構造は、最安定構造の近傍である」という命題を証明することは出来ないし、必ずしもそうではないかもしれない。しかし、「最安定構造の近傍の構造であれば最安定構造に収束する」という命題は最安定構造近傍のポテンシャルエネルギー面が病的に異常でない限り真であると考えられるので、探索空間で偏りなくランダムに初期構造を与えれば最安定構造の近傍構造が得られる。図1の左図の例であれば、6個の極小値があるので最低6個をそれぞれの極小値に至るように生成出来ればよいことになる。しかし、実際にはポテンシャルエネルギー面を知ることは不可能なので、格子定数や原子位置のパラメータといった構造生成の条件を均等にある程度の数を生成して極小値を網羅するしかない。こうなると膨大な数の初期構造が必要であり、それを全て最適化しては到底大規模系に適用できない。そこで初期構造を最初に与えた段階では構造最適化は行わず、1回(あるいは2,3回)の電子系の収束計算で得られるエネルギーと圧力からエンタルピーを計算して選別する。選別された構造に対してだけ構造最適化を行い、最安定構造を得る(図1右)。図1から、エネルギーが高い電子状態として収束性が悪い状態も排除されるので、構造最適化する場合でも収束性がよく計算時間がかからない構造のみが残る。これを One-shot Enthalpy used Random Search 法 (OSE-RSS 法) と呼ぶ。この方法を出発点にして改良していった。

## 4. 研究成果

### 4.1 構造探索法の開発と Te の高圧相への適用

Te の最も高圧の相は、実験から 100GPa で bcc 構造から fcc 構造と dhcp 構造の共存相になり、さらに加圧するにつれて dhcp 相が消滅して fcc 相のみになることが報告されていた。これに OSE-RSS 法を用いて調べた。ここで OSE-RSS 法の問題点が明らかになった。OSE-RSS 法では、生成する結晶構造の格子定数を生成するのに正規分布に基づいた乱数を用いている。すると、生成する構造が立方体を中央値として生成するため、歪んだ構造が十分にサンプルできず、最安定構造やそれに近い構造がそのような構造の場合は探索から漏れてしまう可能性が高くなる。dhcp 構造は  $c/a$  が 3.0 以上と cubic からかなり歪んでおり、この程度に歪んだ構造は初期構造の中に数個しか含まれておらずこの方法では見つけれなかった。これを解決する方法として、空間群を網羅する方法を近大高専の船島と共同開発した。これを Metis と名付けた。空間群は 230 個と決まっているので、空間群を網羅して初期構造を生成すれば、原理的にはこの中に最安定構造も含まれるはずである。対称性を利用すれば、重複する構造をかなり削除できて、実際に計算する構造は最小限にできる。

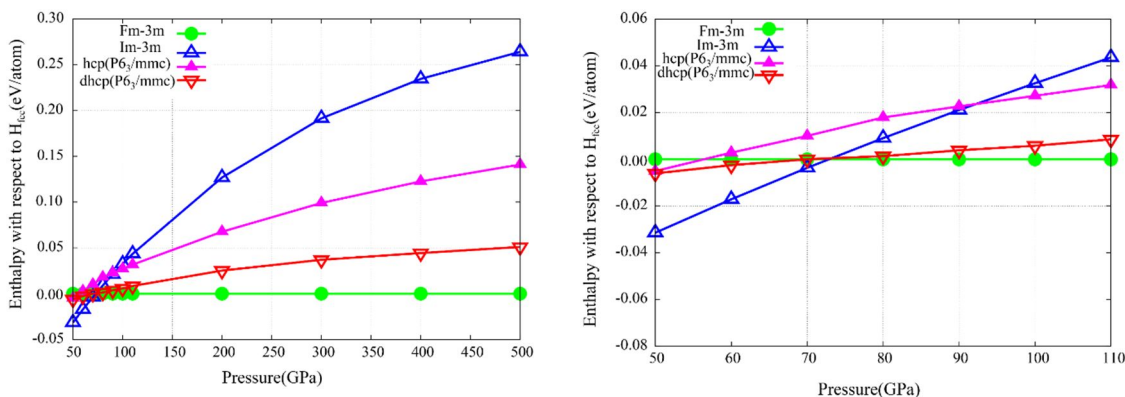


図 1 (a) 圧力変化に対しての bcc 構造を基準とした fcc 構造、hcp 構造、dhcp 構造のエンタルピー。 (b) 圧力範囲を転移圧力近傍で拡大した図。

Metis は、原理的には確実に最安定構造を見つけられるが、単位胞の中の原子数が多くなると当然計算コストが大きくなり、本研究の目的の一つである合理的な時間で行える方法としては難しくなる。しかも低対称の構造は OSE-RSS 法である程度考慮できているとも考えられるため、OSE-RSS 法で探索空間を万遍なく探索した上で、特に集中して網羅できる領域をこの方法で“補強して”探索すると考えられる。あるいは、Metis で完全に探索した周辺の探索領域を、OSE-RSS 法で広くカバーし大域的探索を行うとも言える。Te の場合は空間群の番号で 143 から 230 まで、つまり hexagonal、trigonal、cubic を完全に探索し、それ以外は OSE-RSS 法でカバーしたとして探索を行った。その結果、図 1 に示すように実験結果を再現し、fcc 構造と dhcp 構造の共存と圧力増加に伴って dhcp 構造のエンタルピーは高くなって消えていくことも説明できた。

図 1 の転移圧力近傍を拡大した図 1(b) は、正確に実験事実を説明する結果を示しているが、この結果を得るために第一原理計算の精度を決めるカットオフエネルギーを 120Ry まで高くする必要があった。これより小さい値では、dhcp 構造が低くなる領域が現れる。これはカットオフエネルギーを大きくするにつれてなくなるため、計算精度に依存した人工的なものであると判断できる。k 点サンプリングは Monkhorst-Pack のメッシュで  $24 \times 24 \times 24$  で十分精度があるので、カットオフエネルギーの依存性に十分注意しないといけないことが明らかになった。

構造探索法は、第一原理計算の部分が一番時間掛かるため、この部分のコストを下げるように計算する構造の数を減らせるように工夫をすることは必要であるが、計算精度は絶対に必要最低限以下に下げることができない。これは、顕微鏡で言えば分解能以下の構造を見分けられないのと同じで、エネルギーあるいはエンタルピーの差が非常に小さい構造を正確に区別できる精度を確保した計算をしないと、間違った構造を予測してしまうことがある。

この研究は、M. Geshi and H. Funashima, J. Phys. Soc. Jpn. 89, 124603(2020)で出版されている。

### 4.2 S の高圧相への適用と信頼性の高い計算の重要性

S の高圧相は  $\beta$ -Po 型菱面体晶の次の高圧相が 1999 年ごろから第一原理計算によって調べられていたが、この高圧相の新しい構造を探索するために我々の方法を適用した。Rudin らは次の高圧相として simple cubic(sc)構造を提案し、それが bcc 構造になると報告した。2017 年の Gavryuskin らは Oganov が開発した構造探索法である USPEX を使って同様の結果を得たと報告していた。しかし、我々はこれらの予測が誤っていることを示した。

構造探索を行って、各圧力における最安定構造及びそれに続くエンタルピーの低い構造をプロットすると、200GPa から 500GPa までの間で sc が最安定構造になる圧力領域は存在しないこ

とが分かった。このプロットの各圧力の点は非常にきれいな曲線を描いているが、一切構造を仮定しての計算ではなく、それぞれの圧力で高精度な計算をした結果であることもこの計算の高品質なことを示していると考えられる。

二つの先行研究の結果が間違っていた原因は、それぞれで異なる。Gavryuskin らは USPEX を使って VASP による第一原理計算を実行していたにもかかわらず、用いていたカットオフエネルギーが 350eV (25.7Ry) と非常に低く、計算された全エネルギーの精度が悪かったためである。つまり、どんなに有名な構造探索法を使い、デファクトスタンダードとなっているソフトウェアを使っても、必要な精度を得られるように正しく計算しなければ誤った結果になることを示している。その点 Rudin らの計算の精度自体は 70Ry のカットオフエネルギーを使っており十分であったと考えられるが、こちらの場合は擬ポテンシャルが正しくなかったためである。図 2 (a) に、今回用いた擬ポテンシャルで、菱面体角を変化させたときのトータルエネルギーの結果を示している。計算した圧力範囲で sc が最安定になる圧力領域がないことが示されている。図 2 (b) では同じ計算を、第一原理計算で最も精度が高い FLAPW 法 (WIEN2k を使用) で行った結果であり、図 2 (c) は両者の結果を 400GPa の場合で比較している。これによって今回用いた擬ポテンシャルが FLAPW 法の結果と非常に良い一致を示していることが分かる。

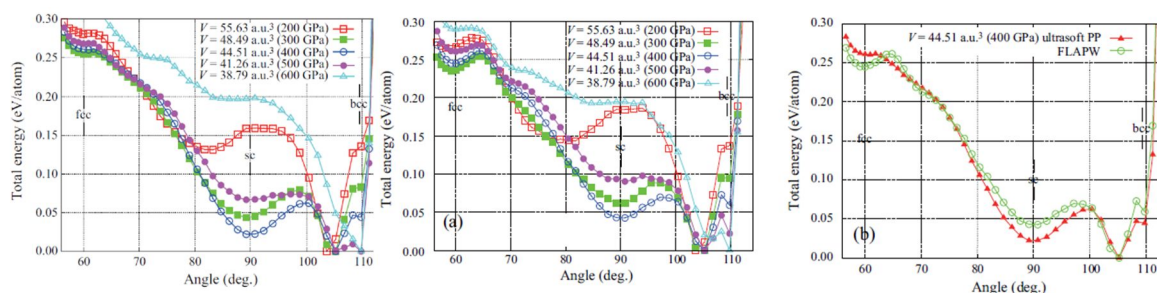


図 2 菱面体晶を六方晶で考えたときの  $c/a$  (菱面体の角度  $\alpha_r$  と対応) を変化させたときの擬ポテンシャル法の結果。(b) 同じ計算を FLAPW 法で計算した結果。(c) 400GPa に相当する体積で二つの手法の比較をした結果。

図 2 の結果は極めて重要なことを主張している。カットオフエネルギーや  $k$  点サンプリングで決まる計算精度が不十分な場合は誤った結果になることは上で述べたが、擬ポテンシャルは作られる場合に FLAPW 法と比較して状態方程式が一致するように作られるのであるが、超高压状態のような場合がその時に考慮されていなければ、体積が非常に小さくなって原子間距離が小さくなる場合の擬ポテンシャルが FLAPW 法の結果と十分一致するように作られていない可能性があるということである。そして、擬ポテンシャルの正確性は同じ密度汎関数理論に基づいて交換相関ポテンシャルも同じものの範囲で作られたのであれば、図 2 (c) のように FLAPW 法と比較してその誤差を確認しておくべきであって、擬ポテンシャル法の中だけでどれだけカットオフエネルギーを大きくして  $k$  点サンプリングを多くとって精度を上げたとしても、そもそもの擬ポテンシャルが FLAPW 法と一致していなければ無意味であるということである。我々より少し前に Whaley-Baldwin と Pickard らが同様の圧力領域の計算を行って新構造を発見したことは素晴らしいが、彼らの Supplemental Material に示されている計算精度は彼らの方法の中で計算誤差が十分小さいという主張であって、FLAPW 法と一致していることを示していないので、擬ポテンシャル自体の正確性を示していることにはならない。

近年構造探索法を用いて新構造探索を行った論文が多く出版されているが、このような計算精度に注意を払っていないものが少なくない。信頼性の高い計算を実施してこそ第一原理計算の結果は意味があることを示す重要な結果を示している。

本研究は M. Geshi, H. Funashima, and G. P. Hettiarachchi, Phys. Rev. B 104, 104106 (2021) で出版されている。

#### 4.3 P, As, Sb への高圧相への適用と電子状態からの構造安定性の理解

P, As, Sb はの高圧相は、As と Sb が A7 構造、Host-Guest 構造から bcc 構造になる構造変化はよく似ており、As は 97GPa から、Sb は 29GPa 付近で bcc 構造になって以後これ以上の高圧で構造変化が見つかっていない。これは計算のグループでも既に構造探索を実行している可能性が高いと考えられるが、まだ見つけられていないと思われる。一方、P は A7 という構造の圧力領域はあるものの、As や Sb とは異なる構造の相が実験で見つかっており、構造探索による研究では 1.7TPa 付近まで調べられている。多くの高圧相は、周期表の同じグループでは同じ価電子を持っていることにも関係して似た高圧相のシークエンスを取ることが多く、しかもこのシークエンスは重い原子のほうが低圧で実現していくことが多く、低圧側で知られている構造が軽

い原子の高圧相の候補として考えてよいことが多い。P、As、Sb の場合はこれと全く違う状況になっていることは大いに疑問であり、何らかの物理的な説明が必要である。

開発した構造探索法で調べた結果、少なくとも 1000GPa まで bcc が最安定構造で、原子数が 32 原子系まで調べた結果でも bcc より安定な構造は見つからなかった。フォノンを計算すると、P では bcc 構造が安定な圧力領域は非常に狭く、As と Sb は計算した範囲では安定であった。

これらの結果は M. Geshi, H. Funashima, and G. P. Hettiarachchi, Jpn. J. Appl. Phys. で出版している。

この結果は電子状態からの帰結と考えれば、電子論的に説明がつくはずである。電子状態密度 (Density of States: DOS) を P、As、Sb のそれぞれで詳しく解析した結果、bcc 構造のトータルの DOS はどれもフェルミレベル近傍に窪みがあり、電子状態的に安定な結果のように見えるが、これを部分状態密度で  $s$ 、 $p$ 、 $d$  状態に分解してみると、As と Sb はほぼ  $p$  状態のみでフェルミレベル近傍は構成されているのに対し、P は  $3d$  状態がフェルミレベル近傍に多く存在していて、 $p$  状態と  $d$  状態からできている。このことから、As と Sb は  $p$  状態がフェルミレベルを境に完全な結合 - 反結合状態を成しており、このため bcc 構造が非常に堅固に維持されると解釈できる。それに対して P は、 $d$  状態がフェルミレベル近傍に現れて  $p$  状態に入る電子を奪ってしまい、結合 - 反結合状態になるのを妨げていると解釈できる。P の場合に  $3d$  状態がフェルミレベル近傍に現れる理由は、内殻に  $d$  状態がないため波動関数の直交性が働かないが、As と Sb は内殻に  $4d$  あるいは  $4d$  が存在するため、波動関数の直交性からフェルミレベル近傍に現れないためと考えられる。同様の解釈は S と Se と Te の場合にも適用でき、bcc 構造の安定性を説明できる。この内容は現在投稿中である。

#### 4.4 Sr の高圧相への適用と超伝導転移温度

Sr の高圧相は fcc から  $\beta$ -Sn 構造、単斜晶相 (空間群:  $1a$ ) incommensurate な Host-Guest (HG) 構造になることが実験から報告されていたが、低圧側の構造で通常の第一原理計算で構造が再現できていないという問題があった。また、近年 Ba で incommensurate な HG 構造は高温相で、低温側に  $Pnma$  という比較的少ない原子数で表現できる結晶構造になっているとの報告があり、しかもその相のほうが HG 構造よりも超伝導転移温度 ( $T_c$ ) が高いことも別のグループから報告された。Sr においても同様のことが起こっていることがおおよそ分かりつつある。Sr のこれらの高圧相に開発した構造探索法を適用し、150GPa を境に高圧側では hcp 構造になることが分かり、それより低圧側の構造も確定しつつある。hcp 構造で超伝導転移温度を計算すると、実験での報告とほぼ近い値になっていることも確認できている。これらは投稿準備中である。

#### 4.5 まとめ

本研究では大規模系に適用可能な第一原理構造探索法を開発することを目的とし、1 回の SCF 計算で求めたエンタルピーで低いほうから選択した構造だけを最適化する OSE-RSS 法と、空間群を網羅する方法である Metis を組み合わせた方法を開発し、それを高圧下での Te、Se、Sb、P、As、Sb、Sn、Sr に適用した。以上の計算は全て本研究費で購入した計算ノードと、数百コアレベルの PC クラスタでの計算である。それほど大規模ではない計算環境の中で、構造探索を行う手法をおおよそ確立できた。しかし、信頼性の高い計算を実施するために、ある程度の大きさの波動関数のカットオフエネルギーを使う必要があり、今回計算した中では As は 60Ry、k 点メッシュは  $32 \times 32 \times 32$  を用いたが、多くは 80Ry、k 点メッシュは  $24 \times 24 \times 24$  とし、Te では 120Ry とする必要があった場合もあった。こうなると CPU のメモリが十分でない計算が困難になる場合があるので、メモリを増設した。これらで決まる計算精度は様々な条件とのトレードオフという考え方があるが、正しい結果を得るための精度は譲ることができない。また、擬ポテンシャル法は、その計算自身の精度として必要最低限のカットオフエネルギーにする必要があるが、擬ポテンシャル自身の正確性の確認を FLAPW 法とすることが重要で、特に高圧下での計算では注意が必要である。構造探索法は、どの方法でも第一原理計算ソフトウェア自身に何かの改良を加えているのではなく、それを効率よく利用して最低限の計算で最安定構造にたどり着く方法として開発されている。この第一原理計算の精度を確保して信頼性の高い計算を行って初めて正しい結果に到達できることを強調しておく。

本研究の期間では、二元系以上の物質には適用できなかった。OSE-RSS 法では問題なく出来ており、テスト計算では高い超伝導転移温度を示す  $H_3S$  の高圧相の構造などいくつかで確認している。空間群を網羅する方法である Metis の改良が今後の課題である。OSE-RSS 法などランダムサーチ法に基づいた方法は、Si などの共有結合性の強い物質の探索はやや苦手で、共有結合性のために多くの局所構造でトラップされて、ダイヤモンド構造が現れにくい傾向がある。それに比べて異方性の少ない金属結合などが優勢な  $H_3S$  などの構造探索は得意である。なので、補完しあえる両者を組み合わせる方法は有効である。まだ単元系でも未解明の高圧相はたくさんあり、実験に先駆けて信頼性の高い計算を実施して、それらを調べていくことも今後の課題である。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Geshi Masaaki, Funashima Hiroki, Hettiarachchi Gayan Prasad	4. 巻 61
2. 論文標題 First-principles study of highly-compressed Sb: a stubborn body-centered cubic structure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 085505 ~ 085505
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac8035	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 Geshi Masaaki, Funashima Hiroki, Hettiarachchi Gayan Prasad	4. 巻 104
2. 論文標題 Study of compressed sulfur based on reliable first-principles calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 104106
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.104106	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 Geshi Masaaki, Funashima Hiroki	4. 巻 89
2. 論文標題 First-Principles Study for High-Pressure Tellurium near a Transition from bcc to fcc	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 124603 ~ 124603
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.124603	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

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 0件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 下司 雅章、船島 洋紀, Gayan Prasad Hettiarachchi
2. 発表標題 第一原理計算による高圧ストロンチウムの構造II
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春季大会
4. 発表年 2022年 ~ 2023年

1. 発表者名 下司 雅章、船島 洋紀, Gayan Prasad Hettiarachchi
2. 発表標題 第一原理計算による高圧プニクトゲンの構造と物性
3. 学会等名 第63回高圧討論会
4. 発表年 2022年～2023年

1. 発表者名 下司 雅章、船島 洋紀, Gayan Prasad Hettiarachchi
2. 発表標題 第一原理計算による高圧アンチモンの構造
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下司 雅章、船島 洋紀, Gayan Prasad Hettiarachchi
2. 発表標題 信頼性の高い第一原理計算から得られたる高圧硫黄構造相転移
3. 学会等名 第62回高圧討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下司 雅章、船島 洋紀, Gayan Prasad Hettiarachchi
2. 発表標題 第一原理計算による高圧ストロンチウムの構造
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 下司 雅章、船島 洋紀
2. 発表標題 第一原理計算による高圧カルコゲンのpost-bcc構造の探索
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 下司 雅章、船島 洋紀
2. 発表標題 第一原理計算による高圧テルルのbcc-fcc構造相転移と準安定構造dhcpの存在性
3. 学会等名 第61回高圧討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 下司 雅章、船島 洋紀
2. 発表標題 Snの高圧相の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 下司 雅章、船島 洋紀
2. 発表標題 高精度・高効率な結晶構造探索を行う第一原理構造探索手法と実装
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 下司 雅章、船島 洋紀
2. 発表標題 第一原理計算による高压テルルのbcc-fcc構造相転移と準安定構造dhcpの存在性
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会(2020年)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<a href="https://researchmap.jp/geshi/published_papers">https://researchmap.jp/geshi/published_papers</a> <a href="http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/~geshi/works.html">http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/~geshi/works.html</a> <a href="http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/~geshi/">http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/~geshi/</a>
---

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
---------	---------