

## 2021年度 第16回凝縮系科学賞受賞者業績紹介

### 「理論部門」

#### 業績題目：第一原理に基づく有限温度非調和フォノン物性の研究

受賞者： 只野 央将（ただの てるまさ）氏（物質・材料研究機構）

### 学歴

2013年3月 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 博士課程修了（博士（理学））

### 職歴

2013年4月－2015年3月	東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 博士研究員
2015年4月－2016年9月	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 博士研究員
2016年10月－12月	物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 ポストドク研究員
2017年1月－2019年3月	同機構 若手国際研究センター ICYS フェロー
2019年4月－2021年3月	同機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点 研究員
2021年4月－現在	同機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点 主任研究員
2021年5月－現在	理化学研究所 創発物性科学研究センター 計算物質科学研究チーム 客員研究員

### 授賞理由

原子間力の非調和性は、フォノン散乱や温度による振動数の変化を通じて固体の基本的な性質である格子熱伝導や熱膨張を引き起こし、さらには半導体バンドギャップや超伝導転移温度などの電子物性にまで影響を及ぼすことが知られています。近年、熱電材料や水素化物高温超伝導体など非調和性の強い材料が注目されていますが、調和近似の範囲であればフォノン分散や熱物性が第一原理から手軽に計算できるようになった現在も、非調和フォノン物性の計算手法は限られており、容易ではありません。

只野央将氏は、効率的な構造サンプリング手法やスパースモデリングにより、3次や4次の非調和原子間力定数を高速かつ精度良く決定する第一原理計算手法を開発しました。さらに自己無撞着フォノン（SCP）法を導入し、4次非調和性が繰り込まれた有限温度フォノン物性計算を実現しました。これらの新手法により、調和近似では取り扱うことのできない結晶高温相のソフトフォノンモードや、クラスレート化合物ゲスト原子のラットリング振動を考慮した熱伝導率等の計算が可能になりました。只野氏はこの新手法を用いて、従来法では不可能だった立方晶  $\text{SrTiO}_3$ （高温相）の格子熱伝導率やバンドギャップの温度依存性

が、高精度で予測可能なことを実証しました。また熱電材料候補のクラスレート化合物  $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$  に適用し、その極めて低い熱伝導率がゲスト原子のラットリングによることや、通常の結晶より緩やかな熱伝導率の温度依存性が、4次非調和性に由来するラットリング振動のハード化によって生じることも明らかにしています。作成されたプログラムは、オープンソースソフトウェアとして公開されており、国内外の大学や企業の研究者に幅広く使われています。

以上のように、只野氏の業績は有限温度非調和フォノン物性の新たな第一原理計算手法を開発し、フォノンの非調和性をもたらす様々な熱物性の起源を解明しただけでなく、近年注目されている非調和性高機能材料の開発に必要な物性予測を可能にして当該分野の発展に大きく寄与するものであり、凝縮系科学賞に相応しいものです。

#### 参考文献

- [1] T. Tadano and S. Tsuneyuki,  
“Self-consistent phonon calculations of lattice dynamical properties in cubic  $\text{SrTiO}_3$  with first-principles anharmonic force constants,”  
*Physical Review B* **92**, 054301 (2015).
- [2] T. Tadano, Y. Gohda and S. Tsuneyuki,  
“Impact of Rattlers on Thermal Conductivity of a Thermoelectric Clathrate: A First-Principles Study,”  
*Physical Review Letters* **114**, 095501 (2015).
- [3] T. Tadano and S. Tsuneyuki,  
“Quartic Anharmonicity of Rattlers and Its Effect on Lattice Thermal Conductivity of Clathrates from First Principles,”  
*Physical Review Letters* **120**, 105901 (2018).