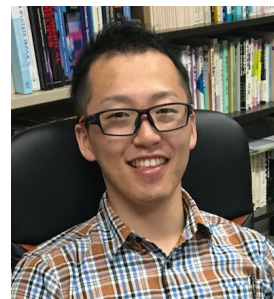


米国立研究所就職までの経緯と第一原理計算による研究

講師：市場 友宏 特任助教

北陸先端科学技術大学院大学
情報科学系

日時：2022年12月27日（火）15:00~16:00

場所：材料・化学系棟 小会議室（MC527）

※対面とWeb会議システム「Zoom」によるオンライン参加を併用

Zoom online platform ID: 951 7503 3959 Passcode: 767801

<https://zoom.us/j/95175033959?pwd=cW9zT0NSS0MwYVJFamJmY0RCOHg1UT09>

私は、米・オークリッジ国立研究所のポスドクとして、3年間、第一原理計算の研究に従事し、2022年11月に帰国した。講演では、学生の方々が海外での雇用機会を考えるきっかけになればと思い、私の雇用までの経緯について話す。次に、私の専門とする第一原理計算について概説し、その中でも私の主たる研究分野である第一原理量子モンテカルロ法が、第一原理計算の中でどのように位置付けられるのかを説明する。そして、以下に示す、3つのプロジェクトについて話す。

水素結晶の構造同定

固体水素の高圧相の一つである PRE-H₂ 相の構造を、第一原理に基づく構造探索と量子モンテカルロ法から見出した。

鉛酸フッ化物のアニオン秩序

Pb₂Ti₄O₉F₂ のアニオン規則配列について実験と第一原理計算から調べ、占有サイトの位置と比率を同定すると共に、フッ素の選好サイトがポーリングの第二規則とわずかながら齟齬する理由について議論した。

PdCrO₂ デラフォサイト表面の不純物層形成メカニズム

CuCrO₂ バッファ層上で合成される PdCrO₂ 膜上で不純物層が形成される原因が、初期状態における酸素の欠乏に起因し得ることを、実験と第一原理計算から明らかにした。

連絡先：工学研究院応用化学部門 三浦 章（内線：7116）