

## 研究室紹介

# 理論計算による原子・電子レベル における格子欠陥の材料科学

名古屋大学大学院工学研究科物質科学専攻；助教(松永研究室)  
横井 達矢

実材料中に存在する点欠陥、転位、粒界、表面といった格子欠陥は、機械的特性や電気的特性、熱的特性を含む様々な材料特性・機能性に影響を及ぼします。また格子欠陥により、バルク材にはない特異な物性が発現する場合もあります。従いまして格子欠陥に起因する物理現象と局所物性の理解は、高度かつ複合的な材料特性が要求される現代の材料設計において不可欠な課題といえます。私たちの研究室では理論計算と実験により格子欠陥に関する研究を展開しています(図1)。

結晶粒界を対象とした研究では、第一原理計算や分子シミュレーションにより、粒界における原子構造と局所物性(電子的特性、熱的特性、拡散特性など)の解析を行っています。第一原理格子動力学法を用いて酸化物粒界の熱力学的安定性を解析した研究では、個々の粒界によって過剰エントロピーは様々な値をとり、それに起因して粒界間の熱力学的安定性が温度によって変化する可能性を示しました。また最近では従来の計算手法と機械学習的手法を組み合わせることで、化合物半導体や酸化物の粒界に適用可能な原子間ポテンシャルの開発も進めています。粒界モデルを含む第一原理計算結果を用いて人工ニューラルネットワークを学習し、構造最適化手法や分子動力学法、反応経路探索法と統合することで、高精度かつ高速で粒界物性が解析可能な計算手法の構築を達成しています。今後は原子間ポテンシャルパラメータを充実させ、またプログラムの高速化を進めることで、様々な物質における一般粒界を想定した、大規模計算方法の構築を



図1 松永研究室の集合写真。最前列右から1番目が著者。

計画しています。

また化合物半導体である ZnS を対象とした研究では、実験と理論計算を組み合わせることで転位テクノロジーの新たな可能性を見出しています。光環境を精緻に制御した圧縮変形試験を行い、これまで脆性材料と考えられてきた物質が暗室下では数十%に及ぶ塑性変形が可能であることを明らかにしました。またそのような大変形に伴い、バンドギャップが20%程度減少することを見出しました。そして第一原理計算による転位芯のモデリングにより、極性をもつ転位芯構造が光照射により生じた電子・ホールを捕獲して再構成すること、また転位芯構造を起源とする欠陥準位がバンドギャップ中に存在する可能性を示しました。現在、光塑性効果の根本的な理解に向けて、種々の化合物半導体を対象に同様の解析を行っています。

上記で示した研究以外にも、第一原理計算と溶媒イオンを連続体として表現する陰溶媒モデルを用いた生体材料表面における陽イオン置換と表面荷電状態の解析や、小角粒界における転位を利用して電子伝導度と伝導経路を意図的に制御する試みなど、様々な物質の格子欠陥に着目して、それらの物理現象の理解と制御方法の確立に向けて研究しています。

(2019年12月16日受理)[doi:10.2320/materia.59.164]

(連絡先：〒464-8603 名古屋市千種区不老町)