

計算機を用いた材料設計に向けて

大阪大学大学院工学研究科マテリアル生産科学専攻
マテリアル科学コース計算材料設計学領域；博士課程1年
齋藤悠宇

1. はじめに

私は現在、大阪大学大学院工学研究科マテリアル生産科学専攻マテリアル科学コース計算材料設計学領域の博士後期課程1年生、そして、博士課程教育リーディングプログラム及び大阪大学フェローシップ創設事業の履修生として研究活動に取り組んでいます。今回、「はばたく」での執筆という貴重な機会をいただきましたので、これまでの研究活動や今後の抱負について簡単に述べたいと思います。

2. 計算機を用いた物質設計

私は学部4年次から博士前期課程を通して現在までの約3年半の間、佐藤和則准教授、鈴木雄大特任助教、そして共同研究者である鳥取大学工学部の小谷岳生教授らの指導の下、第一原理計算を用いた物質設計の基礎となる研究を行ってきました。第一原理計算とは、原子番号と結晶構造を入力として物質の電子状態を計算する、原子スケールの量子シミュレーション手法です。電子状態はその物質が持つ磁氣的、電氣的、光学的特性、構造安定性などに深く関連しており、量子力学や統計力学の知識を用いて解析することで、物質の特性を調べることができます。そのため、第一原理計算は物質の特性を予測するために広く用いられています。

学部4年生当時、私は特定の材料よりも幅広い材料を扱って研究したいと考えており、元々理論研究に興味があったこともあり、理論的な計算のみを用いて実験的に観測される材料の特性を予測できるということに大きな興味を抱き、研究室を選びました。そして、元々発光材料に興味があり、実際の材料で理論的に発光特性を説明できたら面白そうと考えたことをきっかけとして、「希土類添加半導体の発光を第一原理計算の観点から研究する」というテーマで研究を行うことになりました。

ただ、いきなり希土類添加半導体を計算するのは難しいこ

とから、最初に取り組んだのは、磁性半導体として古くから知られる EuO の電子状態計算でした。希土類元素の場合、4f 電子軌道は原子位置に局在し、電子間相互作用が強く非局所的であるため、電子間相互作用を平均的に取り込む一般的な固体の電子状態計算手法では正しい答えを得られません。そこで、一般的な手法を超えた、電子間相互作用を取り込むことができる準粒子自己無撞着 GW (Quasiparticle self-consistent GW: QSGW) 法⁽¹⁾を用いて計算を行うこととなりました。

希土類窒化物など一部の希土類化合物については、QSGW 法で尤もらしい電子状態が得られることが確認されていましたが、私が計算した EuO では実験による先行研究と異なる結果が得られ、QSGW 法でも不十分であることが分かりました。そこで、希土類窒化物に対象を換え、磁気的特性を計算しましたが、遷移金属化合物では高精度に計算できていた線形応答理論に基づく手法を用いても、希土類窒化物の場合には補正が必要となり、物質の特性を求める上で多くの問題があることを痛感しました。

そこで、博士前期課程では一旦、遷移金属元素の計算に取り組むことになり、本来の検討対象であった典型的な発光材料である $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$ (ルビー) について計算を行いました。従来、発光特性に関しては分子や原子に対して主に量子化学的な手法による計算が行われてきましたが、固体中の不純物による発光を第一原理計算から議論することは未だに簡単な課題ではありません。さらに、3d 遷移金属元素が持つ強い電子間相互作用の評価や、半導体のバンドギャップを過小評価する問題も存在し、これらを適切に扱うために引き続き QSGW 法を用いました。

この時、希土類イオンに対して光学的励起準位を計算するために必要な Coulomb 相互作用、結晶場、スピン軌道相互作用のパラメータを QSGW 法の電子状態から見積もる方法⁽²⁾を鈴木特任助教が開発中でしたので、私はその手法を固体中の遷移金属不純物に拡張しました。この手法ではイオンのように電子が局在した状態を仮定しており、遷移金属元素が不純物として局在する場合には、実験の光学スペクトルと矛盾しない結果が得られることを確認できました⁽³⁾⁽⁴⁾。学部4年次には研究は思うように進みませんでしたでしたが、このときにしっかり計算手法の基礎を身につけたことで、博士前期課程では光学的励起準位の計算という難しい課題に対して一定の成果を出すことができました。博士前期課程での研究は基礎的なものでしたが、今後、発光材料の計算機材料設計につながるかと考えています。

3. 終わりに

博士後期課程において私は、博士前期課程で取り組んだ手法の改良や開発した手法を応用した発光材料の計算を行うとともに、希土類永久磁石材料への展開も考えて研究を進めています。将来的に私は、計算機を用いた材料設計を行うために、材料の特性を高い信頼性で計算できる手法は重要となる

ので、コツコツと研究を進めていこうと考えています。

最後になりますが、この度「はばたく」への寄稿という大変貴重な機会を与えてくださいました会報編集委員の皆様に、心から感謝申し上げます。

文 献

- (1) D. Deguchi, K. Sato, H. Kino and T. Kotani: Jpn. J. Appl. Phys., **55** (2016), 051201.
- (2) K. Suzuki, T. Kotani and K. Sato: Phys. Rev. Research, **5** (2023), 013111.
- (3) H. Saito, K. Suzuki, K. Sato and T. Kotani: Phys. Rev. B, **108** (2023), 035141.
- (4) H. Saito, K. Suzuki, K. Sato and T. Kotani: Mater. Trans., **64** (2023), 2185–2189.

(2023年9月11日受理) [doi:10.2320/materia.62.806]
(連絡先: 〒565-0871 吹田市山田丘 2-1 R2 棟218号室)



～美しい金属の写真～

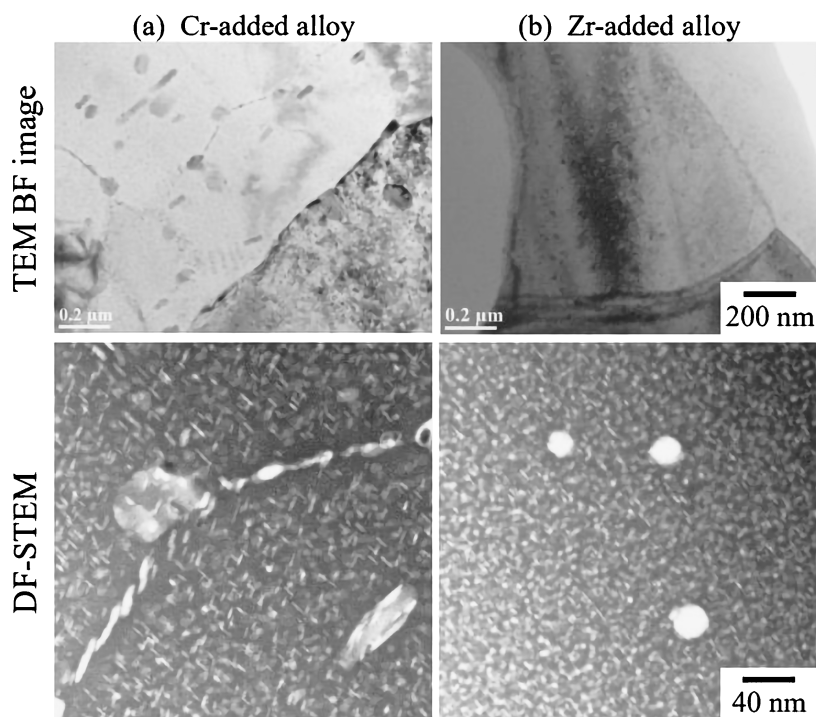


Fig. 3 TEM bright-field images and DF-STEM images of solution-treated samples (before HPT processing).

<Hiroyuki Kawabata, Ichiro Aoi, Keiichiro Oh-ishi, Takanori Nakagaki, Yoshihiro Shimizu and Shigeru Kuramoto: “Improved Combination of Strength and Ductility in Zirconium-Added Al-Zn-Mg-Cu Alloy Processed with High-Pressure Torsion” Mater. Trans., **57** (2016), 1735-1740. より転載>