



東京大学工学系研究科総合研究機構
第11回次世代ジルコニアセミナー

第一原理計算による材料科学へのアプローチ
～構造多様性と動的現象～

桑原 彰秀

一般財団法人ファインセラミックスセンターナノ構造研究所 主席研究員

第一原理計算は与えられた原子配置のもとで対象とする物質中の電子のシュレディンガー方程式を解き、電子系のエネルギー状態や材料の持つ諸物性に関する情報を定量的に得ることができる計算手法である。近年ではその有用性は広く認知され、多くの材料研究において第一原理計算が用いられている。

古典力場計算と比較すると、第一原理計算の計算負荷は非常に大きく、2000年代前半までは比較的単純な結晶構造の化合物での計算が一般的であった。しかし、近年におけるコンピューターの飛躍的な計算速度の上昇によって、第一原理計算でも網羅的な配置探索や複雑な動的現象を取り扱うことが可能となった。例えば、セラミック材料の物性発現に必要な添加元素や点欠陥の局所的な秩序構造を実験で直接決定することは困難であるが、種々の欠陥配置に対する第一原理計算から系統的にエネルギー状態を定量比較すれば、複合欠陥でも安定構造を解明することができる。また原子変位に伴う復元力を計算することで、調和近似の範囲内で格子振動（フォノン）を計算し、有限温度における振動の自由エネルギーを求めることで相転移挙動を追跡することも可能である。

本セミナーでは、固体材料の構造多様性や動的挙動に関する第一原理計算に着目し、その研究例として、第一原理格子動力学計算による結晶性セラミック材料中のフォノン（格子振動）と構造相転移、振動の自由エネルギーに関する研究、また固体イオニクス材料における欠陥配置とイオン伝導のダイナミクスに関する研究例の紹介を行う。

日時：2022年11月1日（火） 13:00～14:30 Zoom 開催
主催：東京大学「次世代ジルコニア創出」社会連携講座

問合せ先：ngzirconia@gmail.com