

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	嶋田 隆広
研究機関名	京都大学
所属部署名	大学院工学研究科 機械理工学専攻
役職名	教授
研究課題名	格子欠陥機能力学が拓く極小原子空間の機械機能工学
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

ナノ・量子技術によるパラダイムシフトの渦中にある現在、原子・量子レベルで自在に駆動する極小機械機能の実現が急務である。本研究では、物質中に遍在する格子欠陥が持つ特異な量子状態を制御する力学原理を解明することで、限界寸法を超えた極小な磁性・強誘電機能を創発し、原子レベルで力学・電気・磁気エネルギーの相互変換が可能な格子欠陥機能の創出に挑戦する。

初年度である 2023 年度は、多様な欠陥構造とその磁性強誘電性を解析する数値技術構築と点欠陥を中心とした量子力学解析評価、新奇物性の解明に取り組んだ。複雑な格子欠陥の構造モデリングを行うとともに、高精度かつ大規模な原子・電子レベル解析が可能な第一原理計算技術と並列計算装置の構築を行った。この技術を用い、主として比較的単純な種々の点欠陥構造を対象に大規模第一原理計算を行い、欠陥部の磁性強誘電性発現の評価を行った。非磁性・非強誘電性の CaTiO_3 や SrTiO_3 中の酸素空孔、アンチサイト欠陥、正孔などで母材には磁性と強誘電性が双方発現することを明らかにした。さらに、この空孔誘起の磁性と強誘電性間には相互作用が存在し、電気磁気効果（電気磁気エネルギーの相互変換機能）があることを示した。他方で、格子欠陥に発現する力学-物性間の相互作用機構を解く鍵となる技術として、全物性の根源である電子状態と物質の力学状態とを明示的に繋ぐ新しい理論の開発を行った。本年度はその基礎となる理論の開発とその定式化を実施し、電子の波動関数の基底に原子軌道の線形結合 (LCAO) 法を用いることで、原子・電子系の全エネルギーを電子軌道の関数として陽に表し、これを系のひずみで偏微分することで、各電子軌道（あるいは個々の電子結合）が受け持つ力学状態を定式化することに成功した。今後はこれを第一原理計算プログラムに実装し、具体的対象への汎用的数値解析を実現するよう開発を進める予定である。