

理論と計算科学の融合 新物質設計シミュレーション手法の研究開発

理論と計算科学の融合

新物質設計シミュレーション手法の研究開発

このプロジェクトに特徴的なふたつの研究手法は、「理論」と「計算」であるといえる。

計算科学という耳慣れない言葉が、実験、理論に次ぐ第三の研究手法として使われはじめたのは1980年代のこと。

以来、『シミュレーションで科学する』技術は長足の進歩を遂げた。

計算科学的なアプローチは

物質・材料設計においても目覚ましく発展し、

高度な計算機環境を駆使した

研究開発が活発におこなわれている。

一方、物質・材料研究の基盤を成す理論体系も大きな変革の只中にある。

新しい概念である『強相関電子系』や『トポロジカル絶縁体』なども、固体物理の教科書を書き換える可能性を秘め、応用への大きなポテンシャルを持つ。

「理論」と「計算」の間に本来明確な線引きは存在しない。

一つの研究の中に同居しながら、

導き出した予測と解析を、実験の現場へと提供し、

フィードバックを受け、また前にすすむ研究の醍醐味が、

ここにはある。

Handwritten mathematical notes on a grid background, including terms like "Gauge-invariant world", "Dislocation in class", and "Layered stack of I". The notes contain various mathematical expressions and diagrams, such as $S^{3d} [B, A, \phi] = \int d^3x$, $S^{2d} [\varphi, A, \phi] = \int d^2x$, and $S_F^{2D} = \int d^2x$. There are also diagrams showing a layered stack of atoms with labels like z , $j+1$, j , and $j-1$.

先端的共通技術部門
理論計算科学ユニット
ユニット長
大野 隆央

新物質設計シミュレーション手法の研究開発プロジェクトと計算科学の概観

研究プロジェクト

低消費電力デバイス、高性能二次電池など、次世代情報通信、環境・エネルギーなどの社会的に重要な分野におけるブレークスルーを創出するためには、実デバイス・実システムを構成する様々な物質・材料から成るナノ機能界面やナノ複合体において発現する物性・機能を理解することが極めて重要です。私たちは「新物質設計シミュレーション手法の研究開発」プロジェクトにおいて、単一の物質・材料の高精度な解析・予測と、複合的な物質・材料の示す特性・機能の解析・予測のための理論、及び計算科学手法を研究開発することを目指しています。

本特集では、主に少し難しいと思われがちな理論からの研究を出来るだけ分かりやすく紹介したいと思います。本稿では計算機パワーの進展により加速する計算科学研究についてご紹介します。

計算科学と計算機パワー

物質・材料の研究開発は、実験、理論、計算科学の3つを基礎としています。計算科学は、実験、理論に続く第三の科学として30年程前に提唱されました。計算科学は、物質の基本方程式を基にして、物質・材料の物性・特性を経験的パラメータなしに電子・原子レベルで高精度に解析・予測する「第一原理計算」と呼ばれる計算手法を基礎としています。第一原理計算は膨大

な計算量を必要とし、当時は解析・予測能力が貧弱でしたが、その後、計算手法・アルゴリズムの開発や計算機パワーの進展を背景に実力を付け、現在では、多くの自由度をもつ現実系(より複雑に絡み合った、現実に近い条件)を解析し、現象・機能を予測・設計する手法として確固たる位置を占めています。

特に、近年の計算機パワーの進展は計算科学を強く牽引しています。計算機パワーは10年で約1,000倍という急激な増加を示しており、我が国では、2002年に地球シミュレータが35.9 TFLOPS (テラフロップス)、2011年に「京」計算機が10.5 PFLOPS (ペタフロップス)を記録し、当時の世界最高速計算機となっています。10.5 PFLOPSとは、1秒間に1京回(10^{16} 回)の演算量です。京計算機を中心に各大学・研究機関の計算機資源を連携したHPCI (High Performance Computing Infrastructure^{*1})も構築され、計算科学によるイノベーション創出に期待が集まっています。NIMSにおいても、材料数値シミュレータとして2009年に52.6 TFLOPSのシステム(導入時には我が国10位)が導入されました(図1)。来年度には機能向上が計画されており、NIMSにおける計算科学研究をさらに充実・進展する好機と捉えています。

第一原理計算プログラム

私たちは、中期計画研究プロジェクトにおいて

NIMS材料数値シミュレータを活用した計算科学研究を実施しています。その他、HPCI戦略プログラムにおいても京計算機を活用した研究をおこなっています。京計算機は約8万計算ノード(約70万コア)のシステム構成を持っており、今日の大型計算機は数万から数10万のコアから構成される超並列計算機なのです。このような特性を持つ計算機資源を有効に活用するためには、計算機の上で効率的に走る計算プログラムの開発が非常に重要で、私たちは第一原理計算プログラム(PHASE, CONQUESTなど)の開発を継続的に実施してきました。

ここで、PHASEに関して少し紹介します。PHASEは密度汎関数理論(DFT)^{*2}に基づく擬ポテンシャル法^{*3}による第一原理分子動力学プログラムです。金属・絶縁体・半導体など幅広い材料の取り扱いが可能で、高精度な電子状態解析や充実した機能解析(誘電応答、反応解析、実験解析など)を提供します。また、超並列計算環境への最適化を実施した結果、約2万原子系に対して京計算機全システム利用で約20%の高い実行効率を達成しました。さらに、数万原子の大規模系に対してのみならず、数千原子系に対しても10万コア付近まで優れた並列性能を示す計算規模によらない高効率性を有しており、実計算規模の数千原子系に力を発揮するプログラムと言えます(図2)。

PHASEは、HPCI戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」の研究課題「次世代半導体集

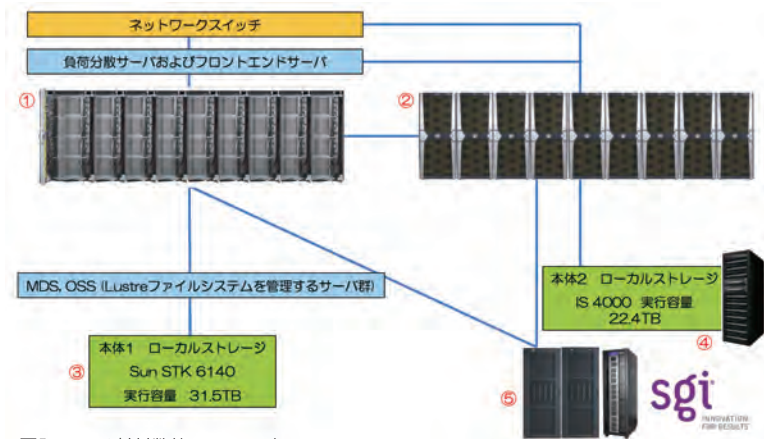


図1 NIMS材料数値シミュレータ

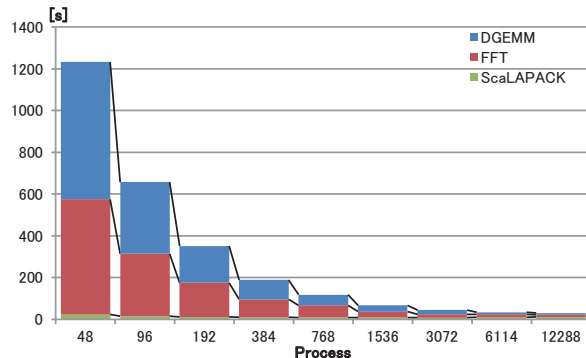


図2 SiC-3,800原子の並列性能

積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発」の基幹プログラムとなっています。第一原理計算の演算量は原子数の3乗に比例して増大、つまり、原子数が10倍になると演算量は 10^3 倍に増大します。具体的な演算量を、1千原子系を例にとって算出すると、分子動力学の1ステップに必要な演算は約100兆回(10^{14} 回)の膨大な量になります。しかし京計算機で効率的に動く計算プログラムを利用すれば、1千原子系の分子動力学1万回ステップを数分間で計算することが可能です。

それでは、PHASEを利用した計算科学研究の具体例をいくつか紹介します。

事例：Si(110)表面構造の探索

Si-CMOSデバイスには通常Si(001)面が利用されますが、Si(110)面は移動度が高く高速化・高集積化の観点から重要な表面です。Si(110)表面のSTM像には特徴的な5員環構造^{※4}が現れますが、実際の原子構造は未だ不明でデバイス・プロセス最適化の妨げになります。そこで私たちは、Si(110)表面に対して、1,000原子規模で1,000個程度のモデル構造を考慮した大規模な構造探索を実施しました。その結果、5員環構造を基礎とした従来モデルと大きく異なる、7員環・4員環・4量体^{※5}から構成される表面構造を見出しました(図3)。得られた表面構造はエネルギー的に安定で5員環構造のSTM像を与えます。

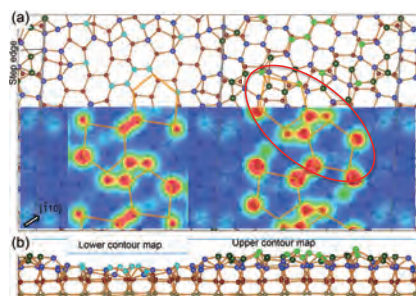


図3 Si(110)表面構造

事例：SiC貫通螺旋転位の解析

ワイドギャップ半導体SiCは高移動度、高絶縁破壊強度などの優れた特性を持ち、次世代パワーデバイス材料として期待されています。しかし、デバイス特性に影響を与える欠陥や転位などの基礎物性や絶縁酸化膜などの界面物性に関する理解は未だ不十分です。私たちは、4H-SiC中の代表的な転位である貫通螺旋転位に対して系統的な大規模計算を実施し、存在形態と電子状態を解明しました。図4は、半径0.6 nmのナノパイプを持つ螺旋転位の原子構造(4,000原子規模)とその価電子帯上端(赤色)及び伝導電子帯下端(青色)の電子状態を示したものです(図4)。ナノパイプを持つ転位と持たない転位が共存し得ること、どの螺旋転位も0.5 eV~0.6 eVのバンドギャップを持ち半導体的性質を保つことが明らかになりました。

事例：グラフェン成長過程の解析

グラフェンは、その優れた特性のため次世代デバイス材料として期待されていますが、高品質・大面積なグラフェンの作成が大きな課題です。有望なグラフェン成長法である、Cu等の触媒金属表面CVD成長法(図5)やSiC基板の熱分解法などのグラフェン成長過程に関して、絶対零度ではなく、従来実施が困難であった実成長温度における長時間の第一原理ダイナミク

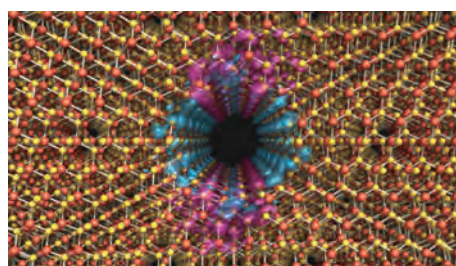


図4 SiC貫通螺旋転位

ス・シミュレーションを実施しました。その結果、融点に近い実成長温度では、遷移金属の表面構造が乱雑化するため、成長グラフェンの平坦化とエッジの終端化が起こり、絶対零度からのモデル描像・計算結果と定性的に異なる特性を示すことなど、グラフェン成長過程に関する原子レベルでの重要な知見を得ました。

おわりに

私たちは、計算機環境の大きな進展を有効に活用し、第一原理計算の他、量子モデリング、古典動力学、統計熱力学、Phase-field法などの理論・計算科学手法を駆使して、革新的な物質・材料の設計、新規な物性・機能の解明、新物質創製の提案などを目指します。今後、エクサ・スケール計算機も計画される中、計算科学研究は量から質へと変化が期待されており、その流れを的確に捉えることが必要だと考えています。

- ※1 スーパーコンピュータ「京」と大学や研究所などに設置されている主要なスパコンをネットワークで結んだ革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)のこと
- ※2 電子系のエネルギーなどの物性を電子密度から計算することを可能とする理論
- ※3 第一原理計算において原子核近傍の内核電子を直接取り扱わず、これを価電子に対する近似的なポテンシャル関数で置き換える手法
- ※4 環状化合物とは、主に有機化学において構成する原子が環状に結合した化合物のこと。5員環構造とは、5つの原子が環状に結合しているもの。
- ※5 量体とは2つ以上の同種の分子やサブユニット(単量体)が物理的・化学的な力によってまとまった分子または超分子を言う。

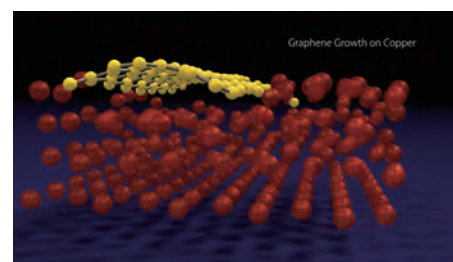


図5 Cu表面でのグラフェンCVD成長

Profile

おの たかひさ 理学博士。1982年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。1984年NTT研究所 研究員、1994年金属材料技術研究所 主任研究官。(併任)筑波大学大学院数理物質科学研究科教授、東京理科大学理学研究科 客員教授、東京大学生産技術研究所 客員教授。

「京」 計算機による超大規模第一原理計算

先端的共通技術部門
理論計算科学ユニット
量子物性シミュレーショングループ
宮崎 剛

計算機「京」と第一原理計算

物質・材料の構造と物性を量子論にもとづいた電子状態計算によって明らかにする第一原理計算は、実験結果に依存せずに信頼性の高い情報を得る事ができる強力な研究手法であり、様々な分野で重要な役割を果たしてきました。しかし、計算量が膨大なために扱える系のサイズが小さく、理想化されたモデル物質系の計算しかおこなえない場合が多い、という問題がありました。

一方、昨年の秋にスーパーコンピュータ「京」が本格稼働を開始し、計算材料科学の世界でも大きな変革が起こっています。京のような大型計算機を用いることによって、現実の材料やデバイスを再現する大規模複雑系の第一原理計算の実現が望まれますが、これには超大規模並列計算を高効率でおこなう必要があります。京は8コア、128 GFLOPSのCPUが88128個ある大型計算機であり、コアの数は全部で70万を越えます。このような多数のコアを用いて高効率の計算をおこなうことは容易でなく、新しい計算手法、高い計算技術が必須となります。

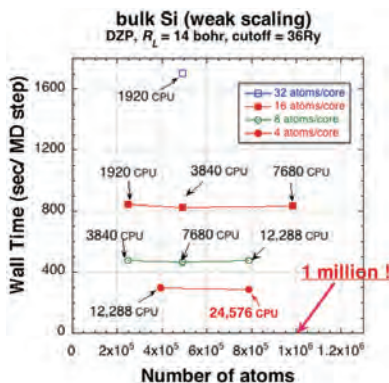


図1 京を用いたとき、固体シリコンの計算で電子状態を解くのに必要な時間。横軸は、原子数。1コアあたりの原子数を一定にした時(Weak Scaling)の計算時間(4通り)が示されている。原子数を増加させても計算時間がほとんど一定となっているので、理想的な並列化効率であることが分かる。同じ原子数の場合の時間を比較すると、Strong Scalingと呼ばれる並列化効率も分かる。図から百万原子の計算も約3万CPUを使えば5分程度で計算できることが分かる。

百万原子系に対する第一原理計算

NIMSでは、英国University College Londonの研究グループとの共同研究により、オーダー N 法第一原理計算プログラム「CONQUEST」を開発してきました。通常的手法では計算時間が系の含む原子数 N の3乗で比例して急激に増大するのに対して、このプログラムでは計算時間が N に比例するオーダー N 法を用い、大規模系に対する第一原理計算を実現します。並列化効率においても有利な計算手法が用いられています。

CONQUESTは、文科省HPCI戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」からの先行プログラムとして、2011年4月から京の試験利用を開始し、プログラムの最適化をおこなってきました。その結果、図1に示されているように約25,000CPU(20万コア)という膨大な数のCPUを用いた計算でも理想的な並列化効率を得ることに私たちは成功しました(図1)。通常的手法では数千原子を越える系を扱うことは困難ですが、京上でCONQUESTを用いる事により、百万原子を含む系に対しても構造最適化を含む第一原理計算が可能となったことが示されました。

実デバイスサイズに対する全原子第一原理計算

このプログラムを京で用いて、Si表面上にGeをヘテロエピタキシー^{*}成長させた時に現れる3次元ナノ構造(ハットクラスター)の成長過程に関するシミュレーションをおこないました(図2)。この研究において、10万原子を越える系に対しても構造最適化計算をおこなっています。ここではハットクラスターのファセット上の多数の吸着サイトに対して吸着Geの安定構造、エネルギー、そして吸着量によるエネルギー変化を計算し、ナノ構造の成長がハットクラスターの上部から始まる事を示す結果を得ました。ここで得られた情報を用いることにより、ナノ構造体の制御方法を見つけ出す事が今後期待されます。

現在は、Si/Ge同軸ナノワイヤの構造と電子状態に対する同様の大規模第一原理計算による研究がNIMS実験グループとの共同研究で行われています。

* ヘテロエピタキシー：基盤の上に結晶を成長させる際に、基盤の結晶面に合致して異なる物質を成長させること。

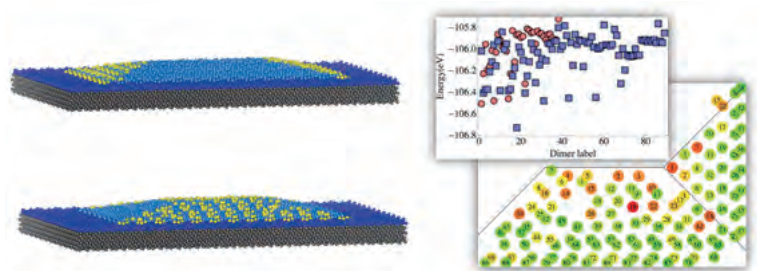


図2 (左図) Si(001)基盤上にヘテロエピタキシー成長したGeの3次元ハットクラスター構造。Si原子は黒、Ge原子は青(濃い青と薄い青)で表されている。3次元島構造は4つのファセット面(すべて{105}面)から出来ている。黄色は、Geがダイマーとして吸着する時の吸着位置。左図上は、小さなファセット面上、左図下は、大きなファセット面上の吸着候補位置。図は縦13nm、横20nm、約2万原子(19973原子)を含んだ系。(右図)右図上は、吸着 Geダイマーのエネルギー。赤丸は小さなファセット上、青四角は大きなファセット上の吸着位置に対するもの。右図下は、吸着Geのエネルギーの場所依存性。赤、オレンジ、黄色、薄い緑、緑の順に安定。頂点、尾根、ファセット間の縁に安定サイトが多い。さらに、下部よりも上部の方が安定であることが分かる。

Profile

みやざき つよし 博士(理学)。1995年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。1996年金属材料技術研究所研究員。2008年よりNIMS主幹研究員。(併任) 東京理科大学理工学系研究科客員教授(2009年より)。 理学研究所、Univ. College London 客員研究員。

トポロジカル絶縁体と、その先にある物質・材料科学

先端の共通技術部門
理論計算科学ユニット
材料特性理論グループ
田中 秋広

トポロジカルな物質相とは

天井まで届く柱にゴムひもをひと巻きさせて結わえた状態を数学者は「トポロジカル(幾何学的)に安定」だと言います。ゴムをいくら引っ張っても(ひもか柱のどちらかを壊さない限り)ひと巻きしている事実は変えようが無いからです。同様にふた巻きさせて結んだ状態も、どう変形を試みても、ひと巻きになったりほどけたりすることはありません。

トポロジカル絶縁体やトポロジカル超伝導体などの「トポロジカル物質相」はこれと同じ幾何学的原理により、安定性が保証された状態です。物性ですから『柱 vs ゴムひも』に代わって『電子の運動量空間 vs 電子のエネルギーバンド構造』と一段抽象的な舞台の上の話となりますが、少々の擾乱(エネルギーバンドを徐々に変形したり、結晶構造を乱す等)に対しては安定な、なんらかの「巻付き回数」をもっています。物理的にはこの回数は試料の表面物性と関係づけられます。このため、巻付き回数が特定の整数の値から容易には変化できないのと同様の原理により、例えば試料表面の電気/熱伝導度が、特定の量子化された値から擾乱のもとでも変わらな

いことが保証されます。この著しい安定性はスピントロニクスや量子情報操作など応用的見地からも魅力的であるため世界中で集中的な研究がすすんでいます。

欠陥が創出する安定な伝導チャンネル

トポロジカル絶縁体はバルク(試料の内部)を見る限り普通の絶縁体ですが、表面は金属的伝導を示し、その輸送特性は先に述べた機構により安定に守られています(図1(a)(b))。そこでユニークな量子機能の発現を求めて、私たちは結晶に欠陥(転位欠陥)を導入した状況を詳しく調べました。欠陥は結晶の規則的配列が終端した場所で、いわばバルク内の表面とみなせるからです(図1(c))。この状況をモデル化して計算したエネルギー分散(図2)は絶縁体のバンドギャップ内を横切る金属的な状態が欠陥に沿って創出されることを示しています。前項に述べた「巻付き数」の存在によりこのチャンネルの伝導度の安定性は保証されており、不純物が行く手にあっても電流はそれを迂回して後方に散乱されません。絶縁体に埋め込んだ量子ナノワイヤーのように振る舞うこのチャンネルがネットワークを形成

すると、熱電材料としても高い性能指数を示すことが示唆されています。

トポロジカルな物質・材料科学へ

当プロジェクト内のサブテーマ「低次元量子機能」は、物質・材料が発現する新しい量子機能を理論的に提起していくことを課題としており、参画者には特にトポロジーが関与する新規量子現象を、世界的な潮流に先行して研究してきた蓄積があります。トポロジカル絶縁体/超伝導体の出現は、電子のバンド描像(電子間相互作用が弱い場合に適用可能)の範囲内で、「トポロジーと対称性に守られた安定した量子物性」という新しい視座を提供してくれました。現在この視点を武器に、強相関電子系、磁性体、冷却原子系などバンド電子を越えた物質系の中から安定な量子効果を引き出す取り組みをおこなっています。

- 1) K.-I. Imura, Y. Takane and A. Tanaka, Phys. Rev. B 84 (2011) 035443; ibid 84 (2011) 195406.
- 2) A. Tanaka and X. Hu, Phys. Rev. Lett. 95 (2005) 036402; Phys. Rev. B 74 (2006) 140407.

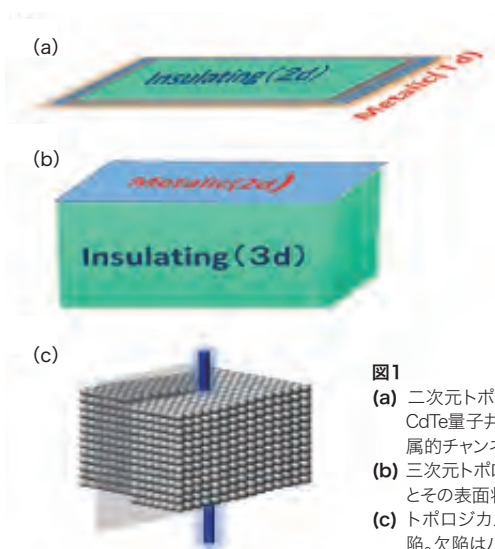


図1
(a) 二次元トポロジカル絶縁体 (CdTe/HgTe/CdTe量子井戸ヘテロ構造)とその周縁の金属的チャンネル
(b) 三次元トポロジカル絶縁体(例えばTlBiSe)とその表面状態
(c) トポロジカル絶縁体に導入された転位欠陥。欠陥はバルク内の「表面」とみなせる

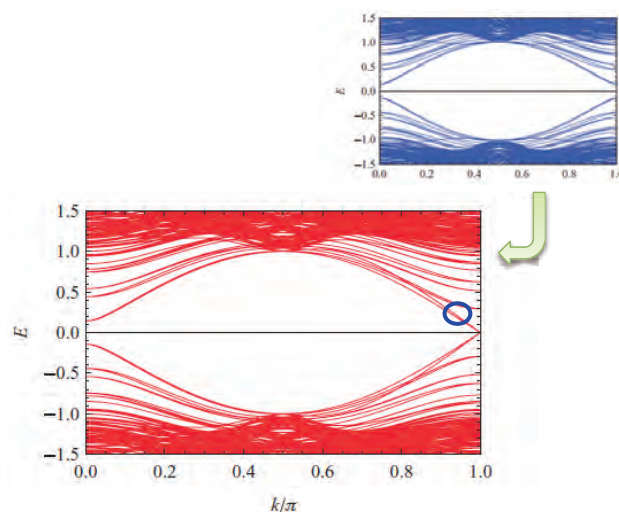


図2 欠陥導入前後のエネルギーバンド。バルク絶縁体のエネルギーギャップ内に、欠陥に沿った金属的状态(青丸)が出現

Profile

たなか あきひろ 博士(工学)。東京大学大学院修了、日本原子力研究所特別研究生等を経て2000年に金属材料技術研究所(当時)入所。2010年NIMS主幹研究員。

光操舵理論 ～トポロジカル絶縁体を舞台に

先端的共通技術部門
理論計算科学ユニット
材料特性理論グループ
井上 純一

モデルハミルトニアンという方法

物質の性質を理解しようとする物理の方法には、大きく分けて第一原理計算法とモデルハミルトニアン法の二つがあります。第一原理計算法は対象を構成する原子核と電子、および物理定数のみから数値的に物質の性質を予言・再現することを目指しています。一方、本稿によって立つ後者の方法は、対象とする系や記述すべき現象などに応じて、本質と考えられる要素の抽出を第一に考え、それを基に「モデルをたてる」「ハミルトニアン(H)を書く」ところからはじまります。このHは喩えるならドラマの人物相関図です。登場人物を選別し、人間関係を物理量に対応するパラメータで定めます。ここから、様々な方法を駆使して物質がどのような性質を持っているかを議論します。物質がどのような性質を示すか(相と呼びます)はパラメータの値によって変わります。この結果を、パラメータの値を軸にとって分布図にまとめたものが相図です。超伝導などの現象では電子間相互作用のパラメータが支配的です。

外部操作を繰り込む

以上のことから、パラメータが表す物理量を外部から操作すると、系を別の相へ移せることがわかります。しかし相図を得たHは外部操作を含んでいませんでしたから、Hに操作項を加える必要があります。この時、変更したHを用いた結果が前と同じ相図になるとは限りません。

そこで「繰り込み」という理論物理の重要な考え方をお手本にして、外部操作を加えたHを外部操作無しの場合のHと同じ形にすることを目指します。外部操作の効果がパラメータに取付けられた「調整つまみ」として現れれば成功です。これを、外部操作をパラメータに繰り込んだ、といいます。とは言っても、うまくいく保証はありませんし、できた場合でもそこに至る道筋と条件の明示が必須です。

光操舵理論

レーザー照射で外部操作をおこなう場合、繰り込みの考え方から、光の強度変化がつまみ調整に対応し、光の強度に伴い電子を重くすることが幾つかの一次元系で示されました¹⁾²⁾。従って、相図の軸に電子質量を含む系では光で相間の移動ができそうです。これを光操舵と呼ぶことにしましょう。

しかし、電子の相互作用が物質の性質を決める上で支配的であれば、光によって電子の質量を変えたところでその効果は埋もれてしまい、興味深い相へ操舵することは難しいでしょう。

そこにトポロジカル絶縁体^{*}が登場してくれました。この絶縁体の特異な性質は電子間相互作用を考えなくても記述できるので光操舵との相性は良いはず。これがアイデアです。

問題は、今迄に電子質量への繰り込みが示せたのは一次元系でしたが、今の対象は最低でも二次元系だということです。ですから、二次元系でも繰り込み可能なことを、まず示す必要があります。沈黙考。先達が創ったトポロジカル絶縁体のHに円偏光照射の項を加えた場合、断熱性という条件を満たせば電子質量につまみが付くことが示されました³⁾。

後は例を作るだけです。波動関数から仮想的な磁束にあたる量Cを計算します。このCは整数であることが厳密に示せ、C=0が通常の絶縁体、C≠0がトポロジカル絶縁体を意味します。図中つまみの調整(=光強度変化)にあたるλ方向の移動で中身(C=±1)と外(C=0)を行き来できること、つまり光操舵で二種の絶縁体間で転移がおこせることがわかります(図)⁴⁾。系によっては時間反転対称性に関連してCの拡張版が必要ですが、その場合も光操舵は有効です⁵⁾。

ここでは光操舵に最も「ハマる」系としてトポロジカル絶縁体を用いました。他にも有効な舞台を模索し、物質を材料に昇格できる可能性を広げたいと思います。

- 1) D.H. Dunlap, et al., Phys. Rev. B34, 3625 (1986)
- 2) J. Inoue & A. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn.68, 2534 (1999)
- 3) J. Inoue, Phys. Rev. B81, 125412 (2010)
- 4) J. Inoue & A. Tanaka, Phys. Rev. Lett.105, 017401 (2010)
- 5) J. Inoue & A. Tanaka, Phys. Rev. B85, 125425 (2012)

* トポロジカル絶縁体: P.9の※1を参照。

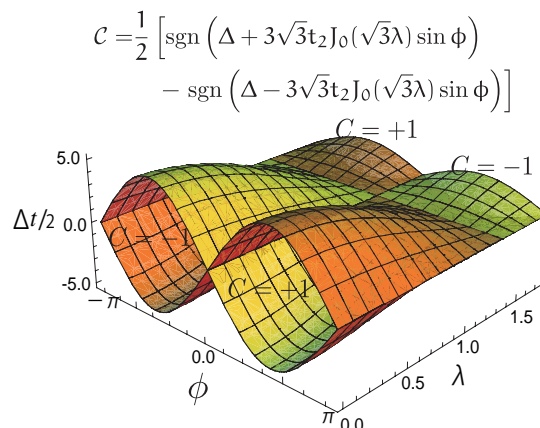


図 C(=0,±1)の表式と分布。φはスピン軌道相互作用、縦軸は(例えば)試料作成時の基板効果に対応

Profile

いのうえ じゅんいち 博士(工学)。1997年東京大学物理工学専攻博士課程。科学技術振興事業団博士研究員、千葉大学助手を経て現職。専門は物性理論、量子光学。

トポロジカル絶縁体の非接触判定法

先端の共通技術部門
理論計算科学ユニット
材料特性理論グループ
井上 純一

簡便な判定法は、なぜ重要か

簡便なスクリーニング検査の有効性は、例えばインフルエンザ感染が疑われた場合などには身をもって実感します。同様のことを、最近流行のトポロジカル絶縁体^{*1}で考えてみましょう。スピントロニクス材料などへの期待から物質探索が精力的におこなわれているこの物質の判定は、主に高分解能の光電子分光を使った特徴的なバンド構造の観測によっています。この方法は、信頼性は高いものの、合成してすぐに測定、という使い方には向きません。実験室レベルで容易に利用できる別の判定法があれば、探索する効率が上がるものと期待されます。本稿はその解決手法¹⁾を提案します。その特徴は、(1)電極等が不要な非接触法であること、(2)結果を定性的(性質、特性の有無)に判断でき、解析が不要であること、です。

この判定法の使用方法

試料を薄膜にし、レーザーから射出した円偏光を分岐して両面へ照射します。測定器を右側

に置いて、透過光と反射光の干渉光強度を周波数の関数として記録します(測定1)。

次に右側の入射光の偏光を逆転させ、同様に干渉光強度を記録します(測定2)。

最後に二つの測定結果の差をとり、それが相殺していれば試料は通常絶縁体、形状はどうあれ残差があればトポロジカル絶縁体です。

この判定法の原理

トポロジカル絶縁体の特徴に、ある条件下では電気分極が磁場にも、磁化が電場にも依存するという交差相関性があります。これをマクスウェル方程式に反映させると、この絶縁体は表面だけは量子ホール伝導度^{*2}を持つ絶縁体と見なせること、更に表面ホール伝導度が膜の表裏で異符号であることが判ります。これを考慮して円偏光の透過率・反射率を計算すると、反射率の位相にトポロジカル絶縁体の情報が入ってきます。位相を抽出するには干渉を見るのが簡単なので、透過光をその相手に採りました。

更に、単純な拡張として何層も周期的に重ねた場合の電磁場モードを調べてみると、トポロ

ジカル絶縁体の特徴として周期系であるにも関わらずギャップが全く無いフォトニックバンドが出てきます²⁾。

この提案がトポロジカル絶縁体の開発に、実質的な役割を果たすことを望んでいます。

- 1) J. Inoue, Opt. Express 21, 8564 (2013)
- 2) J. Inoue, Opt. Express 21, 21317 (2013)

^{*1} トポロジカル絶縁体：物質としてはBi₂Te₃等が該当します。期待される現象は、磁気電気光学効果や散逸ゼロの電流・スピン流で、いずれも「整数」を伴っていることが特徴です。電子波動関数に注目すると、ブリルアンゾーンの一点で決まる局所的性質ではなく、ゾーン全体にわたる位相変化の大域的性質が本質です。そこでは、幾何学の抽象図形を分類する思考の産物が実物質にも顕現したことで、自然記述言語としての数学の力を改めて思い知らされたのでした。

^{*2} 量子ホール伝導度：とびとびの値だけを取り得るホール伝導度。

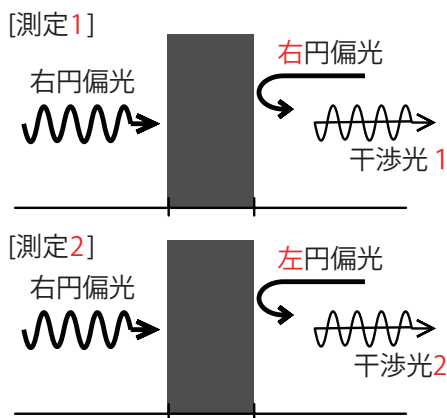


図1 測定の概略図。入射光の偏光を変えて二回測定

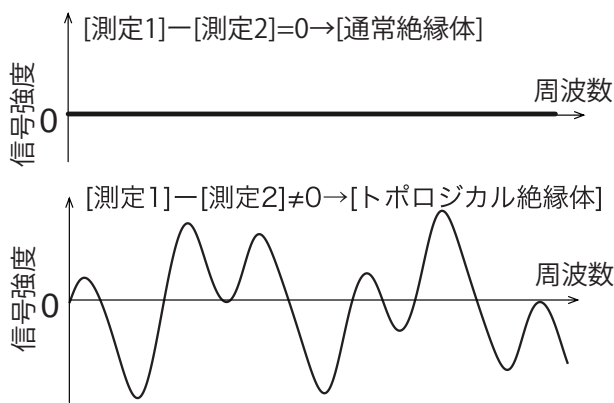


図2 測定結果の差をとる

Profile

いのうえ じゅんいち プロフィールはP.8を参照。

高温超伝導体の電子状態に関する理論・シミュレーション

国際ナノアーキテクトニクス研究拠点

ナノシステム構築ユニット

ナノシステム構築グループ

河野 昌仙

高温超伝導研究の現状

電力損失なしに電気を運ぶことのできる超伝導体は、環境エネルギー問題を解決する有力な材料として期待されています。しかし、これまでに見つかっている超伝導体は、超伝導になる温度が低いため、限られた用途にしか利用することができません。そこで、より高い温度、より常温に近い温度で超伝導になる材料が望まれています。そのためには、既存の超伝導体の中で、最も高い温度（ -120°C ）で超伝導になる「銅酸化物高温超伝導体」のメカニズムを解明し、その知見を材料設計に活かすことが近道だと考えられます。

銅酸化物高温超伝導体が、なぜ通常の超伝導体よりも格段に高い温度で超伝導になるのか、この謎は未だ解明されていません。銅酸化物高温超伝導体の持つ特徴である、強い電子間相互作用のために生じる特異な電子状態が、超伝導を示す温度と関係しているのではないかと考えられています。

2次元系のモット転移近傍の性質

銅酸化物高温超伝導体は、銅と酸素で構成される2次元面を積み重ねたような層構造を持ち、反強磁性を示すモット絶縁体^{*}に少量のホール（電子を欠乏させる）や電子をドーピング（電子を加える）ことによって得られます。そこで、これをモデル化した「2次元ハバードモデル」の性質を調べることにしました。

具体的にはNIMSのスーパーコンピュータを使って数値シミュレーションを行い、得られた数値データに対して、1次元系の厳密解の結果¹⁾に基づく解析をおこないました。

その結果、高温超伝導体のこれまで異常だと考えられてきた様々な特徴は、単純な2次元系のモット転移近傍の性質として統一的に説明できることがわかりました(図1)²⁾。また、金属中で自由電子のように振る舞っていた電子が、どのようにしてスピンと電荷の自由度が分離したモット絶縁体の電子状態へと変化するかという、固体物理学の長年の謎に対しても、明快な答えを出すことができました。^{1,2)}

すなわち、金属中の電子はその動きをスピン自

由に残したまま、モット絶縁体に近づくにつれて電荷自由度が徐々に凍結する、ということが明らかになったのです(図2)。

強相関電子系の理論・シミュレーション

これらの結果は非常に簡単にしたモデルで得られたものなので、電子間相互作用の強い系(強相関電子系)の一般的な特徴であると考えられます。高温超伝導のメカニズム解明には更なる研究が必要ですが、今回の研究によって高温超伝導が生じる舞台となる特異な電子状態について、大幅に理解がすすみました。

元素の組み合わせや合成条件を変えることによって様々な物質・材料が得られますが、これまでにない性質やより高い機能をもつ物質・材料を得るためには、電子相関の効果をきちんと取り入れた理論・シミュレーションによって、物質・材料の基本的な性質を正確に理解することが、今後益々重要になると考えられます。

^{*} モット絶縁体：電子のもつ電荷の間に強い電気的排斥力が働くために、電荷が互いに退け合い、巨視的に動けなくなった状態。

1) M. Kohno, Phys. Rev. Lett. 105 (2010) 106402.

2) M. Kohno, Phys. Rev. Lett. 108 (2012) 076401.

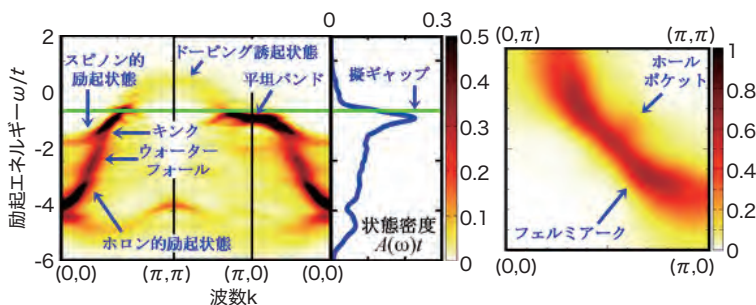


図1 2次元ハバードモデルのモット転移近傍の1電子励起のスペクトル強度分布。強度の大きな部分は、自由電子としての性質が強いことを表します。青字で示したスペクトル強度分布の特徴は、高温超伝導体で観測されている異常な振る舞いと対応しています。左図の縦軸は励起エネルギー ω ($\omega > 0$ では電子を加える励起の励起エネルギー、 $\omega < 0$ では電子を取り除く励起の励起エネルギーに負号をつけたもの)をホッピングの強さ t (> 0)で割ったものを示し、横軸は波数 k を示します。左図の右パネルは1電子励起の状態密度 $A(\omega)t$ を示し、右図はフェルミエネルギー ($\omega = 0$) 付近のスペクトル強度分布を示します。

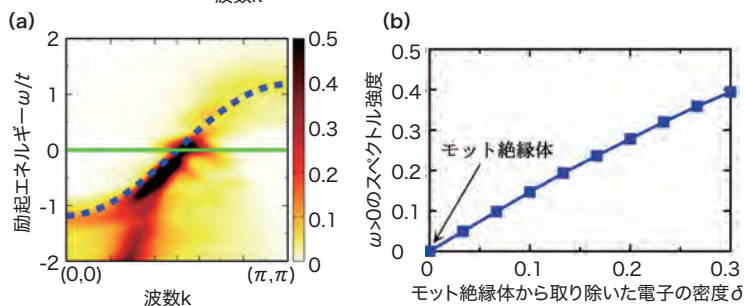


図2 モット転移の特徴

(a) 2次元ハバードモデルのモット転移近傍における波数 $(0,0)$ - (π,π) のスペクトル強度分布。点線は $a) = -\sqrt{2}v_{2D}\cos k$ を示し、モット転移近傍の電子はモット絶縁体の磁気励起の速さ v_{2D} で動くことを表しています。

(b) (a)の $\omega > 0$ のスペクトル強度をドーピング量（モット絶縁体から取り除いた電子の密度） δ に対してプロットしたものを示す。電子は磁気励起の速さで動くにもかかわらず、スペクトル強度が減少することは、モット絶縁体に向けて電荷の自由度が凍結することを意味しています。

Profile

このまきのり 博士(理学)。1998年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了。三菱総合研究所研究員、NIMS研究員を経て、2007年からMANA研究者。

核生成の新たな機構

先端の共通技術部門
理論計算科学ユニット
材料特性理論グループ
西野 正理

核生成とは

核生成は物質の状態が変化するきっかけとなる現象であり、(一次)相転移を起こす系での安定状態(平衡状態)と準安定状態の間で起こります。核生成研究は、エレクトロニクス技術から気象学におよぶ広範囲な研究分野において重要なテーマです。様々な金属の凝固における核(臨界核)の半径は1ナノメートル程度と見積もられており、核生成はこれまでミクロな現象と考えられてきました。

新しい核生成の概念「巨視的核生成」

準安定状態の相の中に現れる安定相の核を構成する粒子集合体(ドロップレット)は、(自由)エネルギーのバリア(対応する核を臨界核と呼ぶ)を超えて成長します。伝統的な核生成の理論では、表面(界面)のエネルギーと内部(バルク)のエネルギーの競合で決まる、特定の微視的な大きさの臨界核が与えられるとされています(図1(a))。従って、マクロな結晶では、一般に核生成は多核生成(図2(a))の機構になります。

スピノクロスオーバー(SC)化合物系¹⁾は、様々な外部の要因(温度や圧力変化、照射など)

で非磁性状態と磁性状態の間で相転移することが知られていますが、もう一つの特徴として、相転移において大きな体積変化を伴うことがあります。このような物質では、構成分子が電子状態と分子サイズに関して双安定性を持ち、分子の大きさが変化する事で起こる格子の歪みが相変化の駆動力となります。私たちは、この格子の歪による弾性相互作用は、長い距離に影響する(長距離相互作用)ことを明らかにし、その核生成機構は、これまで知られていなかった機構で起こることを理論的に示しました²⁾。

この様な、弾性的な長距離相互作用が働く系では、臨界核の大きさに絶対的な値は存在せず、臨界核は全系の大きさに比例して大きくなり、その大きさは系の大きさに対して相対的なものであることがわかりました(図1(b))。この現象は、これまで知られている核生成の概念とは違い、核生成は様々なスケールで実現できることから、巨視的な過程にもなり得るため、ここに「巨視的核生成」という新しい核生成の概念が提案できます²⁾。

この機構では、結晶の大きさに関わらず、図2(b)のように単核生成の機構で核生成はすすみます。実際、実験で観察されているSC系のドメイン成長は、単核生成の機構になります。

以上をまとめると、図1(a)や図2(a)の機構は、短距離相互作用系の特徴であり、多くの核生成現象はこの場合に相当すると考えられます。また、図1(b)や図2(b)は弾性相互作用による長距離相互作用系の特徴ということになります。この巨視的核生成を示す系では、界面成長の揺らぎの性質(ユニバーサルティクラス)に関しても、短距離相互作用系とは異なる特徴があることも私たちの最近の研究で明らかになっています。

波及効果と今後の展開

この新しい「巨視的核生成」の考え方をを用いることによって、物質設計においては、系の大きさを調整することで準安定状態の強さやヒステリシスループの幅を制御する(著しく変える)原理が与えられます。さらに、マルテンサイト変態、磁歪、ヤーン・テラー歪みによる構造相転移などの未解明な機構にたいしても有用な知見を与えると考えられます。

1) "Spin-crossover materials - properties and applications" M. A. Halcrow (ed) John Wiley & Sons, Chichester, UK, 2013
2) M. Nishino, C. Enachescu, S. Miyashita, P. A. Rikvold, K. Boukheddaden and F. Varret, Sci. Rep. 1, 162 (2011).

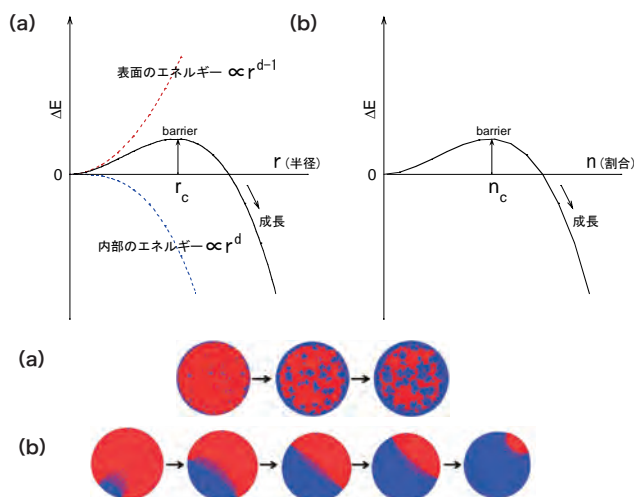


図1
(a) 短距離相互作用系の準安定相における安定相ドロップレットの(自由)エネルギー(実線部分)。横軸はドロップレットの半径。系の空間次元をdとすると、表面(界面)のエネルギー(半径のd-1乗で増加)と内部(バルク)のエネルギー(半径のd乗で減少)の競合により、エネルギーバリアが生じる。バリアにおけるドロップレットが臨界核である。その半径(r_c)は物質の種類で決まる特定の値を持つ。
(b) 弾性相互作用による長距離相互作用系の準安定相における安定相ドロップレットの(自由)エネルギー。ここでは、表面(界面)のエネルギーと内部のエネルギーは分けられない。臨界核の大きさは、全系の大きさに比例する。臨界核の大きさは相対的であり、全系に対する割合(n)で決まる。

図2
(a) 短距離相互作用系の核生成と成長。多核生成。
(b) 弾性相互作用による長距離相互作用系の核生成と成長。単核生成。結晶の大きさが異なっても、相似形を保つ。

Profile

にしの まさみち 主幹研究員。博士(理学)。2004年 NIMS入所。分子科学研究所客員准教授、東大物性研究所客員准教授、ヘルサイユ大学客員教授を歴任し現在に至る。

NIMS NEWS

1 レンヌ第1大学(フランス)との国際連携大学院協定締結

10月29日、曾根理事を始めとするNIMSメンバーがレンヌ第1大学を訪問し、相互に協力して大学院教育を進めるための国際連携大学院協定を締結しました。

レンヌ第1大学(UR1)の歴史は1461年設立の

ブルターニュ第1大学に遡り、その後、分割して1969年に設立された国立大学で、NIMSと

は2010年7月にCCA(姉妹機関協定)を締結しています。毎年、開催場所を日仏交互にした2機関共催によるNIMS-UR1 ワークショップがおこなわれ、本調印式と同時期、2013年10月28-29日にレンヌ第1大学で行われたワークショップ

には大橋直樹環境・エネルギー材料部門長、菱田俊一企画部門長をはじめとするNIMSメンバーが参加しました。NIMSにとって、フランスの大学でははじめてとなる国際連携大学院協定の締結がなされたことから、学生の受入を通じたレンヌ第1大学との一層の連携強化、さらに、日本とフランスの学術面での交流が一層加速されることとなります。

2 NIMSがサイエンスアゴラ2013に出展

11月9日と10日の2日間、NIMSは、日本科学未来館において開催された「サイエンスアゴラ2013」に昨年に引き続き出展しました。NIMSブースは未来館1階の「企画展示ゾーン」に設置され、主に高校生や一般の方々を対象として「耐熱強力磁石材料」「新構造材料」「超耐熱超合金」「蛍光体材料」「超伝導材料」の5つのNIMSの代表的な研究成果について、パネルや研究試料展示をおこな

いました。展示に並行して超伝導コースターなどの各成果に関連するデモンストレーション実験をおこない、参加した子供たちをはじめ、ご覧頂いた多くの参加者から好評を得ました。

また、国際ナノアーキテクニクス研究拠点(MANA)は世界トップレベル研究拠点コーナーに出展し、ナノ診断材料：スマートポリマーに関する研究成果紹介をおこないました。サイエンスアゴラ2013の来場者は2日間で約5800人を数え、NIMSブースには約400人の来訪者がありま

した。多くの来場者から研究内容について詳しい質問を受けるなど、物質・材料研究の最新状況を広く知ってもらう貴重な機会となりました。



サイエンスアゴラでのNIMSブースの会場風景

3 NIMS オープンイノベーションセンター (NOIC) ワークショップを開催

11月14日、TKP東京駅前カンファレンスセンターにおいて、NIMSオープンイノベーションセンター(NOIC)ワークショップが開催されました。2012年4月にスタートした会員制の企業連携研究センターであるNOIC(旧称TIAナノグリーン)は、複数の企業が集まり、NIMSの研究者とともに研究開発を実行することで、それぞれの保有する基盤技術を大きく成長させること、また、単独ではそのリスク故にアプローチ出来ないような挑戦的課題への着手を促進することを意図して設立され

ました。2年目の現在、会員数が当初の9社2機関から11社3機関に拡大し、会員企業とNIMSが一体となって研究をすすめています。

本ワークショップは、生体関連材料研究を、既存の3つのテーマ、電池材料、熱エネルギー変換材料、省エネルギー磁性材料に加わる新たなテーマとして提案することを念頭に、微小空間の制御による新しい生体関連材料の創出に関わるNIMSの研究が紹介されました。

企業からの参加者40名を含む66名の参加者

のもと、NIMS理事の曾根純一が、NOICの仕組み、知財の取扱などを説明し、引きつぎNIMSの研究者4名による研究紹介がおこなわれました。最後に、NOICセンター長の羽田肇から、既存テーマについても紹介されました。質疑応答では、研究内容のみならず、共同研究のメリット、標準化への道筋など、様々な話題で活発な議論が交わされました。



NOICワークショップ会場風景

4 山脇良雄文部科学省大臣官房審議官、川上伸昭文部科学省政策評価審議官がNIMSをご視察

11月1日、山脇良雄文部科学省大臣官房審議官(研究振興局担当)がNIMSを視察されました。山脇審議官はNIMSに到着後、NIMSの概要説明を受けられ、その後、超耐熱合金や高温・負荷条件下での金属の歪み変化を研究するクリープ試験をご覧になりました。次いで、社会インフラ復旧・再生に向けた構造材料技術の開発について、金属の研究がどのように社会インフラに直結しているのか説明を受けられました。並木地区では蛍光体材料のサイアロンや、ナノシートについて説明を受けられました。

また11月21日には、川上伸昭文部科学省政策評価審議官がNIMSをご視察されました。川上審議官はNIMSの概要説明を受けられた後、希少元素を用いない高性能磁石の開発について元素戦略磁性材料拠点で説明を受けられました。続いて社会インフラ復旧・再生に向けた構造材料技術の開発について、説明を受けられました。並木地区ではMANAについて、青野正和MANA拠点長から概要説明を受けられ、その後、原子スイッチや、無機ナノシート、人工光合成などの研究開発について説明を受けられました。



超耐熱合金について説明を受ける山脇審議官



無機ナノシートについて説明を受ける川上審議官



NIMS NOW vol.13 No.9 通巻142号 平成25年11月発行

独立行政法人 物質・材料研究機構



古紙配合率100%再生紙を使用しています



植物油インキを使用し印刷しています

〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1 TEL 029-859-2026 FAX 029-859-2017 E-mail inquiry@nims.go.jp Web www.nims.go.jp

定期購読のお申し込みは、上記FAX、またはE-mailにて承っております。 禁無断転載 © 2013 All rights reserved by the National Institute for Materials Science

表紙写真：第一原理計算のモデリング例と、トポロジカル絶縁体の理論(部分)

表紙CG、P2-3、P5 図4、図5：戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」「次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発」(課題責任者：大野隆央)のCGより