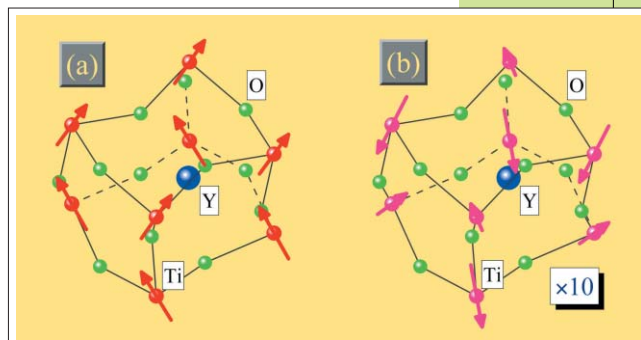
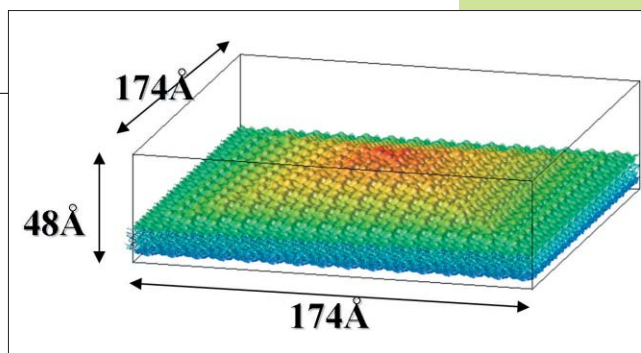


I 特集:新規20プロジェクトの紹介と最近の成果 — 計算科学センター —

- 緒言「ナノ機能探索に向けて」
- 先進第一原理シミュレーション手法の開発
- ナノスケールからの物性解明
- 銅酸化物が繰り出す強相関系と
それを利用した新機能探索
- Phase-field法による組織解析

I 機構の動き

- 南アフリカイノベーション科学技術展示会に出展
- 物質・材料工学専攻
平成19年度学生追加募集について
- つくば科学フェスティバル、
大好きいばらき県民まつりに出展
- NIMSフォーラムのお知らせ



図上: Si(001)表面上のGeクラスターに対する約23,000原子の第一原理シミュレーション: 電子密度の等電荷密度面を高さで色分けして表現している(青色が低く、赤色が高い)。

図下: 第一原理電子状態計算により純理論的に導き出されたYTiO₃での磁性配置(a)電子スピン部分、(b)電子軌道部分。矢印の大きさは、磁気モーメントの大きさを表す。(b)では磁気モーメントの大きさを1.0倍に拡大している。

NIMS NOW

「ナノ機能探索に向けて」

計算科学センター
センター長
大野 隆央

21世紀の科学技術におけるナノ物質の重要性は、国内外において広く認識され、活発な研究開発が行われています。ナノ物質では、構造形態が電子状態と量子論的に密接に絡み合い、バルク物質では顕在化しない新規な物性・機能の発現を引き起こします。ナノ物質やバイオ物質に対する最も大きな期待は、革新的な機能を発現させ、またその機能を自在に設計・制御することであり、これがナノテクノロジーの基盤です。

第一原理計算に代表される量子論的な計算科学手法は、物質科学の幅広い分野への適用を通して、物質の物性・機能を高精度に解析・予測できることが実証されてきました。一方、地球シミュレータや計画中の京速計算機^{*}に見られるように、現在、計算機パワーも飛躍的に増大しています。このような計算手法の発展と計算機パワーの増大を背景に、数万原子群から構成されるナノ物質の構造と機能を量子論的に解明する挑戦が現実のものとなってきました。

計算科学センターでは、第一原理物性グループ、第一原理反応グループ、強相関モデリンググループ、粒子・統計熱力学グループの4グループ体制で、ナノ物質・材料及びナノ複

合体を対象に、構造形態、電子状態、物性・機能の相関を統合的に解析するための新機能探索ナノシミュレーション手法の開発（図）を目指しています。具体的には、(1) 第一原理計算手法を基礎にして、ナノ物質の誘電応答、電子移動、スピン伝導等の様々な物性・機能の解析、超大規模系の解析等の先進的な第一原理解析手法、(2) 凝集・磁気特性、応答特性等のナノ領域における電子物性解析手法、(3) 強相関系に現れる量子多体効果や量子輸送現象を解析する強相関モデリング手法、(4) 分子動力学法等の粒子計算やPhase-field法等の統計熱力学計算等、メソスケール物質（ナノ物質の複合体等）に対するマルチスケール組織・特性解析手法の開発を行います。新機能探索ナノシミュレーション手法は、構造や形状等の物質の形態をデザインすることにより革新的な機能を有するナノ物質・材料を創成する新しいものづくりパラダイム構築の基盤となるものであり、これにより、新規な物性・機能の提案が可能になると期待されます。

^{*} 現在稼働中の地球シミュレータ（1秒に40兆回の演算速度）を上回る理論性能（1秒に1京回の演算速度）をもつ京速計算機が2012年稼働予定で計画中です。

新機能探索ナノシミュレーション手法の開発

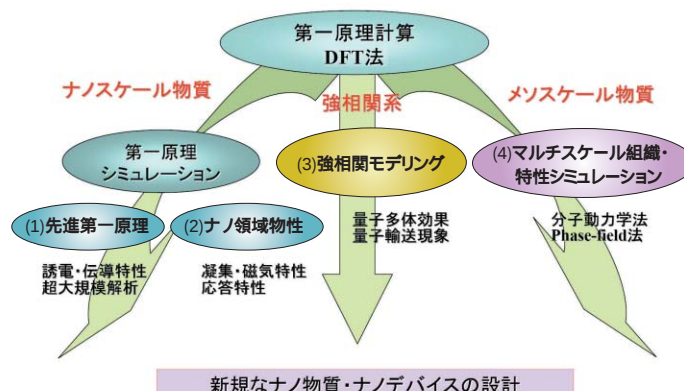


図 新機能探索ナノシミュレーション手法の概要。

特集

新規20プロジェクトの紹介と最近の成果
— 計算科学センター —先進第一原理シミュレーション
手法の開発計算科学センター
第一原理物性グループ大野 隆央 宮崎 剛 木野 日織
西野 正理 奈良 純 館山 佳尚

ナノ物質はバルク物質と異なる新規な物性・機能を示します。バルクでは触媒機能を持たない金が、ナノクラスター構造(図1)では一酸化炭素の酸化反応に対する触媒機能を示すことは顕著な例です。このように新規な物性を示すナノ物質の構造と機能の相関を解明することは、科学的にも応用的にも極めて重要な課題です。

第一原理物性グループでは、ナノ物質を対象に、構造形態、電子状態、物性・機能の相関を解析するために、先進第一原理シミュレーション手法の開発を目指しています。第一原理計算手法は物質科学の幅広い分野に適用され、物質の物性・機能を高精度に解析・予測できることが実証されています。この第一原理計算手法を基礎にして、数万以上の多数の原子群から構成されるナノ物質に対する超大規模解析手法の開発、ナノ物質の誘電応答、電子移動、スピン伝導等の様々な物性・機能の解析手法等の開発を行います。

ナノ物質の物性・機能には多数の原子が関与すると考えられます。金ナノクラスターの例で考えると、クラスター構造に加えて欠陥を含む酸化物表面との相互作用も重要です。このような大規模系を第一原理的に解析するために、オーダーN法と呼ばれる解析手法を開発しています。第一原理オーダーN法では、全解析系を実空間において領域分割し、各領域の計算を並列処理することで大規模計算を実現します(図1)。Si(001)表面上のGeクラスターは量子ドットを実現する系として注目されています。最近、我々は地球シミュレータを利用して、Si(001)表面Geクラスター(図

2)に対する約23,000原子の第一原理シミュレーションを実現しました。表紙図上(phys.stat.sol.(b)243,989(2006)より転載)に、計算により得られた等電荷密度面を示します。Si基板(青色)の上にGe層(2原子層)があり、その上にGeクラスター(赤色が頂点)があります。これは、第一原理計算として世界トップデータの大規模計算です。地球シミュレータや計画中の京速計算機に見るように、計算機パワーは飛躍的に増大しています。第一原理オーダーN法はナノ物質やバイオ物質を解析する強力な手法になると期待されます。

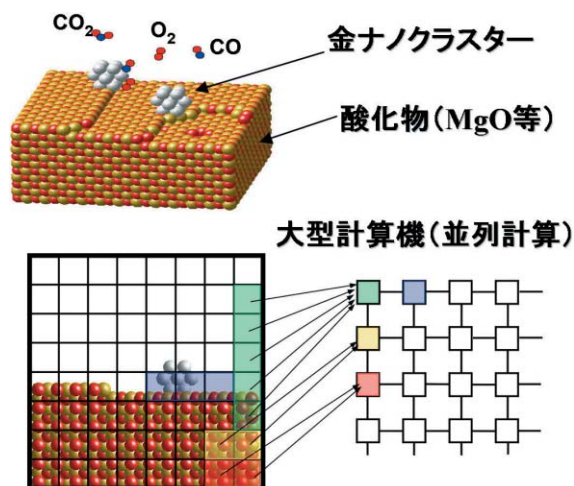


図1 酸化物上の金ナノクラスターを例とした、第一原理オーダーN法の概念図。

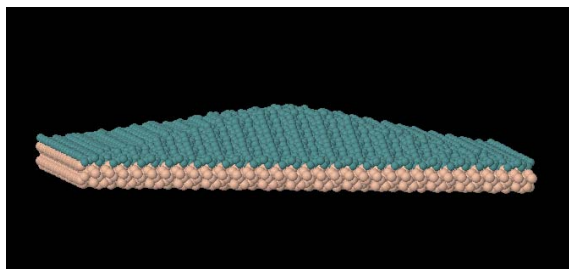


図2 Si(001)表面上のGeクラスターの原子構造：約23,000原子から構成され、茶色はSi原子、緑色はGe原子を示す。

ナノスケールからの物性解明

- 磁性と電気的性質の

第一原理電子構造計算による制御 -

計算科学センター
第一原理反応グループ佐々木 泰造 Igor Solovyev 小林 一昭
新井 正男 末原 茂 前園 涼

量子力学の原理によると物質・材料の性質は、電子構造によって完全に決められます。電子構造とは物質中の電子の運動状態で、これを実験に頼らず理論的に導くのが「第一原理」電子構造計算です。当グループでは、ナノスケールでの様々な現象をこの電子構造計算により解明し、物質・材料としての性質・機能を調べています。ここでは、その一部(Solovyevによる)を紹介します。

材料科学的に見て電子構造計算の最も魅力的な点は、欲する特性を持つ材料の理論的予測や設計にあります。この点で、遷移金属酸化物は興味ある物質です。ある種の遷移金属酸化物では、磁場や電場などによって電子構造が劇的に変化し、その性質を大きく変化させます。従って電子構造を設計することで狙った電気的・磁氣的性質を導けることになります。

例えば $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ が示す巨大磁気抵抗効果は、電子構造計算によって説明されました。我々は、電子構造計算の研究をさらに進め、電子構造と磁気構造*、さらに結晶構造との結びつきを調べるとともに、第一原理からの「モデル化」によって、様々な物性の導出を簡便かつ精密に行う理論の構築を進めています。第一原理計算は、膨大な計算を要することが多いのですが、特定の計算結果を単純な「モデル」で表すことによって様々な現象を簡便に表すことができます。その応用例が YVO_3 です。この物質では、温度を変えることによって磁氣的性質などが変化します。図は結晶構造と今回導かれた磁気構造です。図

の a, b, c の長さや角度変化と磁気構造の変化の様子が「モデル」によって表されました。また、 YTiO_3 に対しても応用し物性の説明に成功しました(表紙図下参照)。この研究によって、実験結果の理論的再現にとどまらず、結晶構造による電子構造の変化の物理描像を得ることができ、また磁氣的構造の制御法を明らかにすることができました。

このような方法を複雑な構造を持ったナノマテリアルなどに適用すれば、膨大な計算を行うことなく希望する性質を実現する電子構造の設計に向けて道が開けていくものと考えています。

* 磁気構造：各原子上での電子分布とスピンによって作られる磁気モーメントの配列のこと。物質全体の磁氣的性質に大きく関係する。

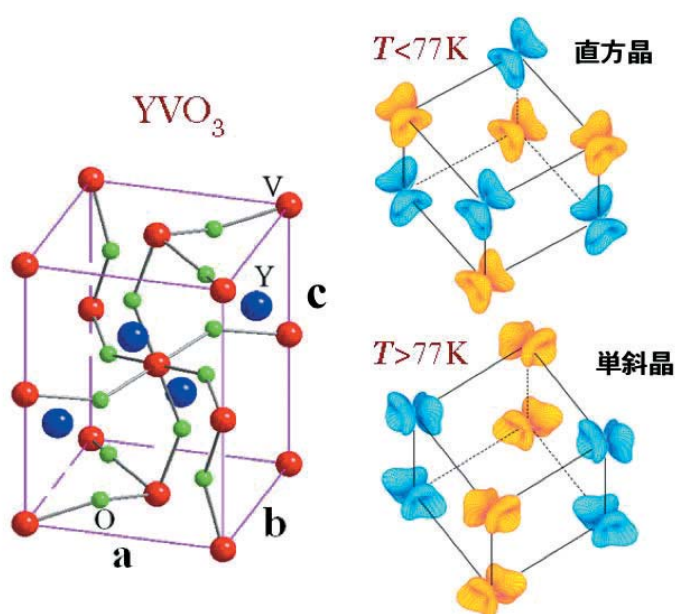


図 YVO_3 の結晶構造(左)と理論的に導いた磁気構造(77 K 以下: 右上、77 K 以上: 右下)。右図の曲面は V 原子上の電子分布を表し、色の違いはスピンの向きの違いを表している。

特集

新規20プロジェクトの紹介と最近の成果
— 計算科学センター —銅酸化物が繰り出す強相関系と
それを利用した新機能探索計算科学センター
強相関モデリンググループ

古月 暁 野々村 禎彦 田中 秋広 河野 昌仙

スピン、電荷、結晶構造間の強相関結合が繰り出す新機能物質の理論解析、それに基づく物質創成ガイドラインの提案が、私達の目標です。以下に銅酸化物の磁気・電気特性に関する研究を、当グループ最近の研究活動の一例として紹介します。

ペロブスカイト構造をもつ新しい銅酸化物 $\text{Sr}_8\text{CaRe}_3\text{Cu}_4\text{O}_{24}$ の合成及び室温以上 ($T_c=440\text{K}$) での磁化状態が報告されたのは2003年です。この物質は鉄やニッケルのような磁性イオンを持たないのに、磁気相転移温度は他の銅酸化物磁性体より十倍以上も高く、非常に興味深いものです。第一原理計算によれば、この物質に2種類の銅(Cu)原子が存在し、空き軌道を見ると、Cu1のスピン上向き e_g 軌道、Cu2のスピン下向き $d_{3z^2-r^2}$ 軌道、及び酸素のp軌道が秩序化し、強いpdσボンドが形成され、このために高い転移温度を持つフェリ磁性が生じます(図)。第一原理計算からはじき出したスピンモデルの量子モンテカルロ解析から、相転移温度や磁化の温度依存性が高い精度で説明されます。この系に於ける電子間の強相関効果が重要であり、 $\text{Sr}_8\text{CaRe}_3\text{Cu}_4\text{O}_{24}$ がモット絶縁体であることも判明しています。

それ以外のユニークな性質も分かりました。この物質ではレニウム(Re)原子は磁気モーメントをほとんど持ちませんが、その電気陰性度がもたらしたCu2を囲む酸素八面体のヤン・テラー歪の大きさはこの系の性質を決める上で重要です。このことは、より電気陰性度の低い元素でReを置換すれば、バンド構造が制

御できることを意味しています。この性質を利用すれば、新規物質の理論設計が可能になります。我々はReサイトにタングステン(W)やモリブデン(Mo)を置き換えて第一原理計算を行いました。Cu2の電子状態が予想通りに変化して、そのバンドがフェルミ面を跨ることが判明し、その結果、スピン上向きd電子は絶縁的に、スピン下向きd電子が金属的に振舞う、いわゆるハーフメタル物質になることが理論的に予言されます。またエネルギー計算により、新物質の磁気相転移温度が室温以上になる可能性も確認しました。ハーフメタルは片方のスピンを持つ電子の流れ(電流)を遮断できるので、スピントロニクスデバイス用の材料として重要視されています。磁性を持ち始める温度が室温以上であれば、日常生活に於いてハーフメタルの特性を生かせるので、応用にとっては好都合です。現在、この理論指針に基づく物質探索が行われ、その結果が待たれています。

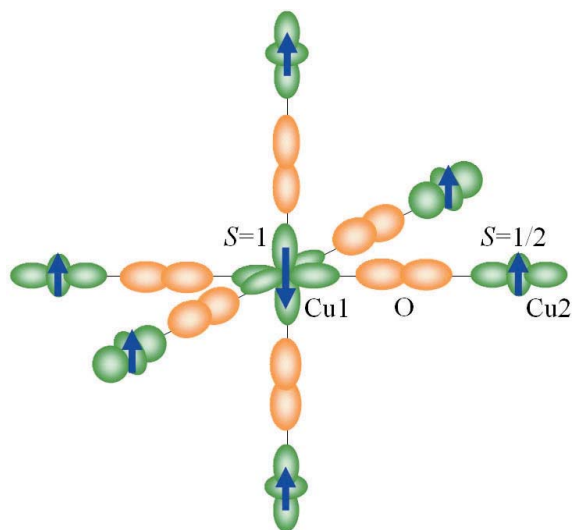


図 新機能発現の舞台となる銅酸化物 $\text{Sr}_8\text{CaRe}_3\text{Cu}_4\text{O}_{24}$ の軌道秩序と磁性。

Phase-field法による組織解析

- 鉛フリーはんだミクロ組織の解析例 -

計算科学センター
粒子・統計熱力学グループ

小野寺 秀博 楠 克之 小山 敏幸
下野 昌人 片桐 昌彦 阿部 太一 大出 真知子

肉眼では“のっぺらぼう”に見える材料を顕微鏡で観察すると、様々なパターンを見ることができます。これらは「内部組織」と呼ばれ、材料特性に大きな影響を及ぼします。

粒子・統計熱力学グループでは、様々な計算手法を駆使してナノ～ミクロスケールの内部組織の研究を行っています。ここではその一例として、大出による Phase-field 法を用いた研究を紹介します。

環境への配慮から EU は、電気機器への有害重金属の使用を禁止しました。これにより、はんだの「鉛フリー」化が義務付けられ、電気メーカーは代替合金として Sn-Ag-Cu 系の研究を行っていました。しかし、実用化のためには様々な課題があり、その一つに、はんだ表面に樹状組織（ミクロ組織の一種）が現れて表面が荒れ、「はんだ割れ」などの欠陥を見つけ難くする、という問題がありました。

図1にはんだ表面ミクロ組織を示します。樹木のように見える部分が「樹状相」、樹間を埋めているのが共晶相と呼ばれています。割れ目は「引け巣」と呼ばれ、共晶相が少ない時によく見られる現象です。引け巣は、はんだ付けの機能を損なうことはありませんが、欠陥である「はんだ割れ」とよく似ており、選別は困難です。メーカーは試行錯誤の上、樹状相の少ない合金組成を発見しましたが、平衡熱力学では、その理由を説明できませんでした。そこで非平衡熱力学に基づく Phase-field 法によって、共晶相と樹状相の比率を決める因子を検討する計算を行いました。

図2に Cu の添加量と共晶率の関係を示します。○が実験値、■が Phase-field 法の計算

値です。Phase-field 計算では実験の1点を基準とし、拡散や偏析など平衡論では取り扱わない現象を考慮して、他濃度の共晶率を求めます。計算と実験がよく一致していることから、Cu の添加量が共晶相率を決めていたことが分かりました。私たちは、この他にも様々な「ミクロ組織」の解析を行い、材料設計・開発への寄与を目指しています。

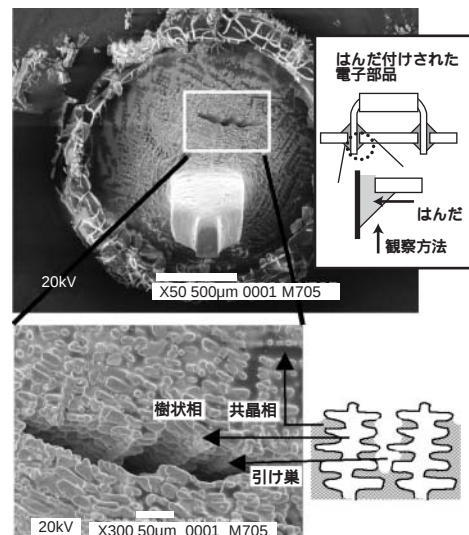


図1 はんだ表面の電子顕微鏡写真（千住金属工業 上島氏提供）。

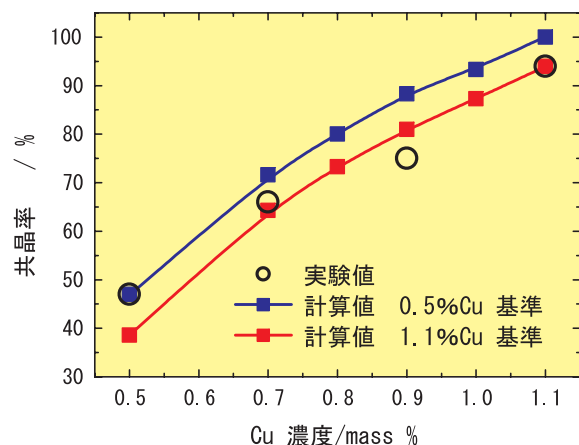


図2 Cu の添加量と共晶率の関係。

機構の動き

南アフリカイノベーション科学技術展示会に出展

平成18年9月24日から27日まで、南アフリカにおいてイノベーション科学技術展示会（INSITE 2006）が開催されました。本展示会では、情報・通信、人的資源、システム、観光資源、自動車、家電製品などの幅広い分野から10カ国の39機関が参加しました。NIMSからは南アフリカの研究機関とMOUを結んでいる超耐熱材料センターがNIMSの研究内容を紹介しますとともに、白金族元素を含むNi基単結晶超合金の最新の研究成果を出展しました。NIMSブースには、M-Tech Industrial、CSIRなど多くの来訪者があり、NIMSの研究を広く認知してもらうとともに、高い関心を感じることができました。また、25日には南アフリカのMosibudi Mangena 科学技術大臣や古屋昭彦・駐南アフリカ日本大使も来訪され、NIMSの研究に非常に関心をお持ちいただきました。



北嶋研究員が南アフリカMangena科学技術大臣（中央）と古屋駐南アフリカ日本大使（右）に説明している様子。

物質・材料工学専攻平成19年度学生追加募集について

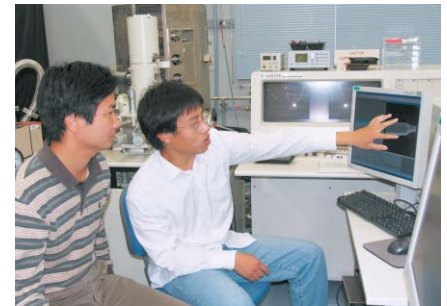
筑波大学大学院数理物質科学研究科物質・材料工学専攻において、下記のとおり平成19年度学生追加募集を行います。本専攻は、NIMSと筑波大学との連携協力により運営され、NIMSの研究者が教員となり学生の教育研究指導を行います。

また、今回の入試から、社会人修士取得者等を対象に、最短1年間で博士課程を修了する「早期修士プログラム」が始まります。

ご興味ある方は物質・材料工学専攻事務室まで気軽にご連絡ください。

入学試験スケジュール（予定）

募集要項配布	平成18年11月下旬
願書受付期間	平成19年1月9日～1月11日
学力審査	平成19年2月5日、6日
合格発表	平成19年2月20日
入学	平成19年4月1日又は8月1日（選択可能）
お問い合わせ先	筑波大学大学院数理物質科学研究科 物質・材料工学専攻事務室（独立行政法人物質・材料研究機構内） Tel: 029-863-5348 E-mail: nims_admin@pas.tsukuba.ac.jp HP: http://www.nims.go.jp/graduate/



研究指導の様子。

つくば科学フェスティバル、大好きいばらき県民まつりに出展

平成18年10月7、8日に、つくば市のつくばカピオにてつくば科学フェスティバル、ひたちなか市の笠松運動公園にて大好きいばらき県民まつりが行われ、NIMSも出展しました。

NIMSは「いろいろな材料の名前を当てよう！」「キーホルダーを作ろう！」「ダイヤモンド模型を作ろう！」「NMRを模型で学んでみよう！」と題し、ヒントを元に、鉄や銅などの代表的な金属を当てるクイズや、真鍮板に刻印を打ってオリジナルキーホルダーを作成する、ダイヤモンドの原子模型を組み立てる、NMRの模型を設置してその仕組みを見て知ってもらう、などの出し物を行いました。

非常に強い風の中での開催となりましたが、どちらのイベントも多数の来場者が訪れ、大盛況のうちに終了いたしました。

今後も、NIMSはこの様な教育・啓発型イベントに積極的に出展しますので、是非皆様もNIMSブースに足を運んで、様々な特性を持つ物質・材料に触れていただきたいと思います。



つくば科学フェスティバルの様子。

機構の動き

NIMSフォーラムのお知らせ

第6回NIMSフォーラム

物質・材料の最先端研究と技術移転

～NIMSセカンドステージの幕開け～

日 時 2006年11月30日(木) 9:15開場 9:45開演
 会 場 東京ビッグサイト 会議棟7F 国際会議場
 入 場 無料(懇親会のみ有料)
 主 催 独立行政法人 物質・材料研究機構
 協 力 日刊工業新聞社
 お問合せ先 NIMSフォーラム事務局 TEL:029-859-2026 FAX:03-5644-7215
 お申し込み方法 下記ホームページからお申し込みください。
http://www.nikkan.co.jp/6th_nims/

プログラム 9:45 - 9:55 開会のご挨拶 NIMS理事長 岸 輝雄
 9:55 - 10:00 来賓のご挨拶

～ NIMSの戦略的研究とは～ 10:05～12:05

10:05 - 10:25 「次世代ナノテクノロジー基盤技術の開発と利用」ナノテクノロジー基盤領域 青野 正和
 10:25 - 10:45 「ナノスケール物質領域における新物質・新材料の開発」 ナノスケール物質領域 室町 英治
 10:45 - 11:05 「ナノテク活用による情報通信材料研究の躍進」 情報通信材料研究領域 堀池 靖浩
 11:05 - 11:25 「医工学とナノバイオを指向する生体材料研究領域」 生体材料研究領域 立石 哲也
 11:25 - 11:45 「社会的ニーズに先導的に応える環境・エネルギー材料領域」環境・エネルギー材料領域 長井 寿
 11:45 - 12:05 「ナノテクノロジーを融合した近未来の構造材料」 材料信頼性領域 香川 豊

～ 社会と共に歩むNIMS～ 13:15～15:50

13:15 - 13:30 「共用基盤部門の概要」 共用基盤部門 古屋 一夫

- NIMS技術移転トピックス -

7件のNIMS技術移転トピックスおよび、まとめとして当機構の産独連携についてもご紹介いたします。

～ポスターセッション～

NIMSで取り組んでいる59の研究テーマをポスターセッションにて紹介します。

～懇親会のご案内～

NIMSフォーラム終了後、懇親会を開催いたします。皆様のご参加をお待ちしております。

時間：17:00～18:30 会場：レストラン・トレヴィイ(会議棟8Fレストラン) 参加費：¥3,000

詳細はホームページをご覧ください。http://www.nikkan.co.jp/6th_nims/

NIMS NOW (ニムスナウ) 2006.Vol.6 No.11

発行 独立行政法人物質・材料研究機構
 〒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

通巻第68号 平成18年11月発行
 編集発行人 神田 久生
 ホームページ <http://www.nims.go.jp/>
 印刷 前田印刷株式会社