

低電力情報化社会構築に資する新奇高伝導材料の大規模シミュレーション法の調査研究

(一財)高度情報科学技術研究機構 研究員 小野 裕己

本調査研究では、近年さらなる材料革新が期待されている次世代情報化社会構築に寄与する界面由来の新奇機構を利用した高伝導特性材料の研究開発動向を調査し、実用化に資する大規模シミュレーション法について調査研究を行った。高伝導特性材料の有力な候補として(a)位相絶縁体、(b)カーボンナノチューブ-銅(CNT-Cu)複合材料、(c)導電性高分子材料の3トピックスを挙げそれぞれについて専門家への直接のヒアリング、試験的シミュレーションを実施し、各トピックスの現状、動向及び課題について調査を行った。

(a)位相(トポロジカル)絶縁体は、材料の外界との界面、即ち表面における波動関数の位相が振れているという量子状態により完全導体となる物質で、バンド絶縁体、モット絶縁体など従来の絶縁体とは相の異なる新しい絶縁体として理論予測がなされたもので、非常に低い電力で情報を操作可能とするスピントロニクス幅広い応用を実現する基盤となると期待されている。しかし同時にまだ研究の歴史は浅く2000年代後半に入って基礎研究が盛んに行われるようになった新しい物質群であり、具体的な応用にまでは開発が進んでいない現状がある。

このトポロジカル絶縁体については調査として、理論研究をされている大阪大学小口多美夫教授のもとを訪問した。またAPS(米国物理学会)のAPS March Meeting 2015(2015年3月2日・6日、Texas, San Antonio)に参加し主にこのセッションに関連した発表を聴講した。その結果、このトピックスに対するシミュレーション研究の性格として、詳細で正確なバンド構造がトポロジカル絶縁性の判断に必要なことから計算精度は高くとる必要があるが同時に比較的小さい系での計算になることや、界面の構造が大きく影響するため構造特定が重要で、多くの候補に対して電子状態計算を繰り返す必要があることなどが分かった。報告書ではこうした理論研究の進め方や大規模計算機を活用する案について議論した。

続いて試験的シミュレーションとして、実際にこの位相絶縁体の構造探索研究で行われている手順に沿った基礎的かつ具体的な計算を行いその難しさ、計算時間のかかるポイント、今後効率的な並列計算につなげられる要素について論じた。

(b)カーボンナノチューブ-銅(CNT-Cu)複合材料は、CNT、Cu両者の伝導特性の良い性能を引き継いだ材料であることが期待されている新材料である。これはこれまでの予想を覆す伝導特性の現れ方であり、特に温度が上昇しても伝導度の低下が純粋な銅ワイヤーと比較して僅かであるという高い耐熱性は、高密度な配線が敷かれる精密機器内部において

は大きなアドバンテージとなる。しかし発見されてからの日はまだ浅く、詳細な構造や伝導メカニズムなど未解明な部分も多い。実際に電流がどこを流れているのかといった基本的な事項も判明していない。このため、どのような機構でこの特異な伝導特性が発生しているのか理解が急がれている。

調査としては、産業技術総合研究所の関口主任研究員に直接 CNT-Cu の研究についてお話を伺った。この材料の革新的な伝導特性を最初に報告した論文の著者の一人であり、現在も実験条件の探索、構造特定、デバイスへの応用などを手掛けておられる。

試験的シミュレーションとしては、本トピックスでは構造特性、伝導特性など具体的な物理現象を対象に解析を行った。その結果、Cu からの電荷の供給は受けるものの、同時にそこが伝導にとっての散乱源となり、CNT そのものの電気伝導度は上がらないことがわかった。続いて、高い電流容量の発現要因を解析するため、個々の電子の流れによって発生する原子の駆動力源である電子風力の解析を進めた。電子風力の計算には、それを直接計算する新規プログラムを加えて、計算したい系のハミルトニアン行列、重なり積分行列とその微分を原子軌道毎に用意する必要がある。そのため、手頃な計算量でかつ化学結合に伴う電荷移動も表現できる拡張ヒュッケル近似を用いたタイトバインディング電子状態計算プログラムも合わせて開発した。これら開発したプログラム群を併用し、CNT-Cu 複合材料を流れる電子とそれに伴い発生する電子風力の様子をコンピュータ上で直に描写した。また解析の結果、CNT-Cu 間に大きな電子風力がかかっている様子が定量的にわかり、このストレスと界面付近の構造安定性との競合によって電流容量が決定されるものと期待される。本試験的シミュレーションによって得られた基礎的な構造特性と、開発された電流のその場観察が可能なプログラムによって、極めて高い電流容量の発現機構の解析が進んだ。報告書ではこれら理論解析の結果について詳細に論じている。

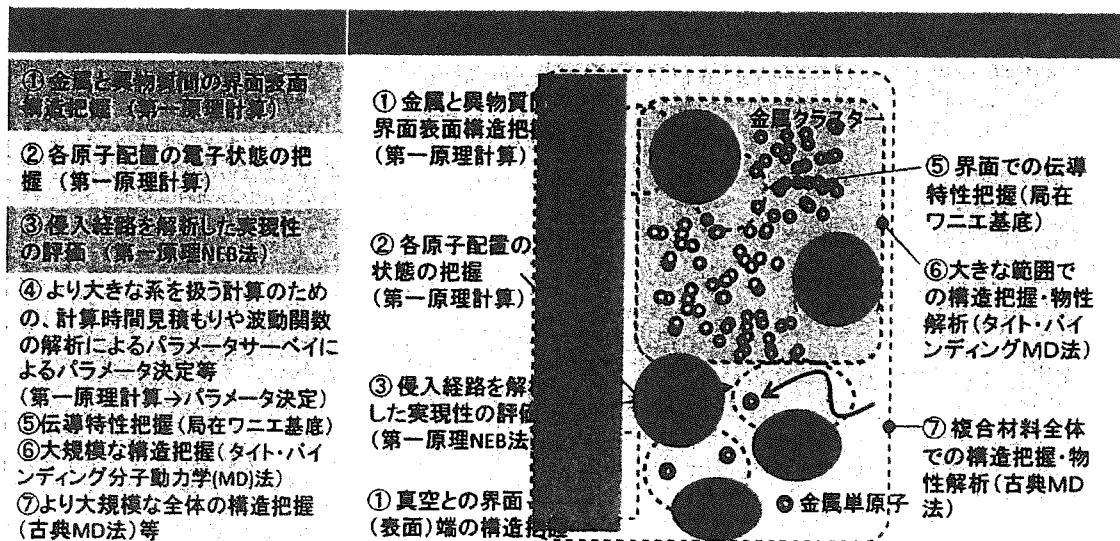
(c)導電性高分子材料は、本調査研究で挙げた3つの中で最も長く研究されており、具体的な応用案や例も豊富なトピックスである。高分子材料は機械的に柔軟なことが多いことから主に太陽電池、電界効果トランジスタ (Field effect transistor: FET)、有機 EL、ウェアラブルデバイス、ソフトロボティクスなどの応用例があり、CNT や fullerene など強靱な炭素材料に Pt、Ag、Au などを吸着させたものが多く研究されている。また有機半導体ポリマーを炭素系の基板に吸着させる場合も多い。

調査研究としては、実験家である大阪大学上西啓介教授、小日向茂氏のもとを訪問し、導電性高分子材料の研究動向についてヒアリングを行った。また第 64 回高分子学会年次大会 (2015 年 5 月 27 日 - 29 日、北海道) を訪れ、導電性高分子材料を開発するにあたってのポイント、応用例を実験・シミュレーション双方の研究についてヒアリングした。

試験的シミュレーションとしては、「金属吸着 CNT」と「フェノール樹脂 - カップリング剤」それぞれの局所的な安定構造とその電子状態解析を実施した。金属吸着 CNT では、第 4 周期遷移金属が CNT 表面にそれぞれどのように吸着するのか第一原理計算を用いた詳細

な解析を行った。続くフェノール樹脂 - カップリング剤では、同じく第一原理計算を用いて吸着時の具体的な電荷分布、各原子にかかる力を計算した。現状としてよく用いられている古典的な手法と比べて、第一原理的手法ではどのような解析が出来るのか論じた。

続いて(a)~(c)での試験的シミュレーションに用いた手法をまとめた。以下の図は金属、ファイバーなどが複雑大規模に混在した場面をイメージしたものであり、シーンを切り出しそれぞれに対応する代表的なシミュレーション法を並べたものである。本調査研究で挙げた各トピックのヒアリング調査、試験的シミュレーション等で得られた情報をもとに、実施した計算がそれぞれどのシーンに対応するのか整理した。



さらにより大規模な並列演算のための Sakurai-Sugiura(SS)法という固有値問題を解く新たなアプローチについて調査し、記述した。既存の第一原理電子状態計算プログラムに実装することを想定し、Hamiltonian 行列作成、近似固有値解析、直交化手続き、Subspace rotation などの計算項目ごとに計算規模を整理し、それぞれがこのSS法によってどのように改善されるのか詳細に論じた。

最後に、経験的な手法を用いて大規模かつ長時間の分子動力学計算を実施するにあたって、そのパラメータサーベイに必要な計算例を簡単に挙げ、予想される計算時間、手間などについて整理した。

ここで調査したシミュレーション技術を活用することで新たな伝導機構の解明が進み、界面由来の新規高伝導材料の開発・設計指針が明らかとなり、その材料開発がより進む。それにより最終的には電力事情に囚われない革新的な ICT 機器・システムの社会への大量注入へと貢献できるであろう。