

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2007～2011

課題番号：19310083

研究課題名(和文) ホスト=ゲスト型機能性ナノ材料の設計・解析・制御

研究課題名(英文) Design, analysis and control of host-guest functional nanomaterials

研究代表者

飯高 敏晃 (Iitaka Toshiaki)

独立行政法人理化学研究所・戎崎計算宇宙物理研究室・専任研究員

研究者番号：60212700

研究代表者の専門分野：複合新領域

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ科学・ナノ材料・ナノバイオサイエンス

キーワード：①ナノ材料 ②クラスレート ③高压物性 ④第一原理計算 ⑤結晶構造探索

1. 研究計画の概要

新規結晶構造探索：従来の研究では既に実験で得られた結晶構造や理論的に予測された結晶構造のデータを手作業で入力して第一原理計算による物性解析を行ってきた。本研究では理論モデルに基づいて構造データ(単位胞、対称性、内包原子の種類、固溶体の成分比など)を変えたホスト=ゲスト型ナノ材料の構造候補を大量に自動生成し、数値計算加速ボード(将来的には、2012年完成予定の次世代スーパーコンピュータ)の膨大な計算能力を活用して各候補の構造安定性および各種物性を第一原理計算によって予測する。第一段階では各候補の構造安定性を調べ、構造不安定なものを候補からはずす。この段階で大部分の候補が除外される。第二段階では生き残った候補に対して計算時間のかかる各種物性値を計算する。その結果、構造データと発現する物性値との間の関係が理解され、我々は機能性ナノ材料の俯瞰図を手にすることができる。そして実際に実験を行う物質を絞り込んだ効率的な物質開発を可能にする。

2. 研究の進捗状況

(1) 新規結晶構造探索プログラムの基本的なシステムを開発し、高压下の水素化合物の新結晶構造を明らかにした。高压下の水素化合物は高温超伝導物質になる可能性があり、その探索に多大な興味を持たれている。20年度は、水素化ゲルマニウムの超伝導の研究を行ったが、21年度は水素化スズの超伝導を探索した。水素化スズ(SnH₄)は高压下で高温超伝導体になる可能性が指摘されてきたが、超伝導を理解するために不可欠な高压下

での結晶構造は未解明であった。我々は第一原理結晶構造予測法を用いて水素化スズの二つの高压相(結晶群：Ama2 および P63/mmc)を提案した。Ama2相は96-180GPa、P63/mmc相は180GPa以上で安定であることがエンタルピー計算により明らかになった。96GPa以下では、SnH₄は各元素に分解してしまうことが判明した。

(2) 2008年から2009年にかけて、「ダイヤモンド、グラファイトに次ぐ第3の炭素結晶”K4”」が提唱された。ダイヤモンドはsp³結合のみからなる3次元ネットワークであり、グラファイトはsp²結合のみからなる2次元ネットワークであるが、“K4”は、もし存在するとすれば、sp²結合のみからなる3次元ネットワークを持つ結晶である。我々は、密度汎関数線形応答理論に基づき、この新結晶のフォノンの分散関係を計算して、“K4”の結晶構造は不安定であり結晶として存在し得ないことを指摘した。

(3) 2009年8月28日、29日に理化学研究所大河内記念ホールにて「理研ハーバード大学連携シンポジウム：脳科学、量子科学、天文学、流体力学等へのGPU計算の応用」を開催した。

<http://www.iitaka.org/hariken09.html>

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している

理由：新規結晶構造探索の手法やシステムの開発が順調に行われた。実際の物質への適用も進んでいる。しかし、画期的な新材料物質の開発、特許取得には至っていない。

4. 今後の研究の推進方策

今後も新規結晶構造探索の手法やシステムの開発・改良および各種物質への適用を継続するとともに、産業的にも有用な画期的な新材料物質を探索する。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 10 件) 全て査読有り

① Guoying Gao, Artem R. Oganov, Peifang Li, Zhenwei Li, Hui Wang, Tian Cui, Yanming Ma, Aitor Bergara, Andriy O. Lyakhov, Toshiaki Iitaka, and Guangtian Zou, "High-pressure crystal structures and superconductivity of Stannane (SnH₄)", Proceedings of the National Academy of Sciences 107, 1317 (2010).

② Y. Yao, J. S. Tse, J. Sun, D. D. Klug, R. Martoňák, and T. Iitaka, "Comment on "New Metallic Carbon Crystal", Phys. Rev. Lett. 102, 229601 (2009).

③ Emiko Sugimura, Toshiaki Iitaka, Kei Hirose, Katsuyuki Kawamura, Nagayoshi Sata, and Yasuo Ohishi, "Compression of H₂O ice to 126 GPa and implications for hydrogen bond symmetrization: Synchrotron x-ray diffraction measurements and density functional calculations", Phys. Rev. B 77, 214103 (2008)

④ Guoying Gao, Artem R. Oganov, Aitor Bergara, Miguel Martinez-Canales, Tian Cui, Toshiaki Iitaka, Yanming Ma, and Guangtian Zou, "Superconducting High Pressure Phase of Germane", Phys. Rev. Lett. 101, 107002 (2008) .

⑤ Jianjun Yang, J.S. Tse, Y. Yao, and T. Iitaka, "Structural and Electronic Properties of Pristine and Ba-Doped Clathrate-Like Carbon Fullerenes", Angewandte Chemie International Edition 46, 6275 - 6277 (2007).

[学会発表] (52 件)

① Toshiaki Iitaka, "GPU-accelerated Computing for Earth and Planetary High Pressure Science", Harvard-Riken Joint Symposium : Application of GPU Computation to Brain Science, Quantum Science, Astronomy, Fluid Dynamics and other sciences, RIKEN, Wako, 28th Aug. 2009.

<http://www.iitaka.org/hariken09.html>

②飯高敏晃、” GPGPU は「次世代スパコン」の敵か味方か”、東京大学物性研究所短期研究会「計算物理学」、柏、2009年12月10日。

<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/public/keisan09/>

[その他]

ホームページ

<http://www.iitaka.org/>