

研究種目：特定領域研究

研究期間：2007～2011

課題番号：19051016

研究課題名（和文）配列ナノ空間物質の物性理論

研究課題名（英文）Theoretical study of materials with regulated nano spaces

研究代表者 有田亮太郎（Ryotaro ARITA）

東京大学・大学院工学系研究科・准教授

研究者番号：80332592

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：複合新領域・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：ゼオライト、クラスレート、ハイドレート、第一原理計算、特異フォノン、カーボンナノチューブ、強相関効果、結晶ピセン

1. 研究計画の概要

ユビキタス元素（クラーク数が大きく地表付近に豊富に存在する元素）によって構成される配列ナノ空間物質に対する理論物質設計を行う。特にクラスレート、ゼオライト、フラーレンおよびカーボンナノチューブにおける配列空間の多様性と内部空間の自由度を活用した新機能発現の可能性を探る。具体的には、第一原理計算による非経験的手法をベースとして、分子動力学法や強相関モデル計算を組み合わせた複合的理論手法により、次の課題に取り組む。

(1) 高圧下のフラーレン、クラスレートの新物質相探索と物性予言、

(2) ゼオライトにおける強磁性などの電子相関設計、

(3) クラスレートの特異フォノンがもたらす巨大熱電能材料や高温超伝導の可能性の探求、

(4) カーボンナノチューブの光学的性質および成長機構の解明。

既存の物質の物性評価にとどまらず、組成、配列、圧力、温度といったパラメーターを系統的に変化させた計算による物質設計を積極的に進める。領域内の実験グループによって新物質を合成されたり、新奇物性が発見されたりした場合にはこれに柔軟に対応する。理論と実験が緊密に協力して配列ナノ空間における新しい物性開拓を実現させることを目指す。

2. 研究の進捗状況

(1) 高圧下の新物質相については、本領域の山中グループによって発見されたフラーレンポリマーについて、単位胞の大きさも含めた構造最適化を行った。さらに、大規模系のフォノンの分散を効率よく計算する方法を開発し、この系に適用した。

(2) ゼオライトの強相関効果については、まず、最も単位胞の小さいソーダライトについて、低エネルギー有効ハミルトニアンを第一原理的に導いた。得られたモデルを高温展開の方法によって計算し、10K 程度のオーダーの磁気転移温度の再現に成功している。また、非磁性元素のみから構成される強磁性体として知られるアルカリ金属を吸蔵したゼオライト LTA について、スピン汎関数理論に基づく第一原理計算を行い、強磁性状態が実際に基底状態になりうることを理論的に示し、さらにケージの中の局所電子状態がどのように系の磁性に影響を与えるかについて系統的な考察を行った。

(3) (1) で開発した効率的フォノンの計算法を発展させ、第一原理的に熱伝導度を計算するアルゴリズムに発展させている。これは熱電指数の第一原理的評価につながり、熱電材料の設計へと発展させる予定である。超伝導については、本領域で発見された世界初の芳香族超伝導体である結晶ピセンについて、その電子状態計算を世界にさきがけておこない、その低エネルギー有効モデルの導出を行った。超伝導がフォノンによって媒介される可能性を含めて発現機構の理論的解析を行っている。

(4) カーボンナノチューブの成長機構の解明については、分子動力学シミュレーションを行った。

3. 現在までの達成度

ゼオライト系については、当初期待していた以上の精度での計算が、特にソーダライトについて達成できている。大規模系フォノンの新計算法は本特定領域発足時には想定していなかった成果で今後の発展が期待できる。本領域で見つかった世界初の芳香族超電導体についても、世界にさきがけてその電子状態を明らかにすることができている。一方で、クラスレート、ハイドレート、ゼオライトを鋳型にしたグラファイトについては、予備的な計算結果がでていいるものの、論文という形にまとまっていない。計画以上に進行しているプロジェクトと、若干遅れ気味のプロジェクトがあるが、両者総合的にみると、のおおむね順調に進行しているという評価が妥当ではないかと思われる。

4. 今後の研究の推進方策

これまでの成果をふまえ、応用への展開を視野にいれ、配列ナノ空間を活用した機能材料の設計という観点から、以下の問題に取り組むことを考えている。

(1) ユビキタス元素あるいは軽元素だけから大きな相対論効果を引き出せるか、という問題を考察する。スピン軌道相互作用はスピントロニクス基礎になるが、特にゼオライトの空隙内に巨大なラシュバ効果を発現させるかを理論的に検討する。

(2) 特定領域内で発見された新超伝導体ピセンについて、その超伝導発現機構を解明する。電子機構、フォノン機構の両方を視野にいれて第一原理的に検討を行う。

(3) フォノンの効率的計算方法の開発を進め、熱伝導度を第一原理的に評価するアルゴリズムを完成させ、性能指数の第一原理計算を通して熱電材料の物質設計を目指す。

5. 代表的な研究成果

[雑誌論文](計 30 件)

Y. Nohara, K. Nakamura, and R. Arita
Spin density functional study of magnetism in potassium-loaded zeolite A
Phys. Rev. B 80 220410(R) (2009)

T. Kosugi, T. Miyake, S. Ishibashi, R. Arita and H. Aoki
First principles Electronic structures of solid picene
J. Phys. Soc. Jpn 78, 113704 (2009)

K. Nakamura, T. Koretsune, and R. Arita

Ab initio Derivation of Low Energy Model for Alkali Cluster Loaded Sodalites
Phys. Rev. B 80, 174420 (2009)

Y. Fujimoto, T. Koretsune, S. Saito, T. Miyake and A. Oshiyama,
A new crystalline phase of four-fold coordinated silicon and germanium
New J. Phys. 10 083001 (2008).

[学会発表](計 75 件)

R. Arita

Magnets comprising non-magnetic element
Psi k Workshop on Magnetism in Complex Systems, Vienna, 2009

[図書](計 0 件)

[産業財産権]

出願状況(計 0 件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

出願年月日:

国内外の別:

取得状況(計 0 件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

取得年月日:

国内外の別:

[その他]