

# 大阪大学 大学院工学研究科 応用物理学専攻 物理工学講座 理論物性学領域



研究室紹介

笠井 秀明\*

Theoretical Materials Science Laboratory, Department of Applied Physics,  
Graduate School of Engineering

Key Words : Computational Materials and Process Design, Nanospintronics, Hydrogen storage,  
New Electron Phases at Surfaces, Dynamics in Complex Systems

## 1. はじめに

理論物性学領域では、物性物理学の教育と研究を行っている。特に、固体表面の新電子相、原子架橋、量子ドット等の表面・界面ナノ物性および励起と反応における量子ダイナミクスの解明、制御、デザインを対象として解析的手法や計算物理学的手法を用いて研究を進めている。このような研究を通して、多様性の背後にある普遍性を探索し、地球上の我々を取り巻く自然界で生じる諸現象の理解を深めたいと考えている。現在の主な研究の概要を以下に紹介する。(図1)

## 2. 近藤効果のスペクトルおよび実空間像の観察

希薄磁性合金で見出される近藤効果が、磁性原子吸着金属表面系においても見出される可能性を示唆している。また、その「近藤効果の実空間像が、走査トンネル顕微鏡(STM)で如何に観測されるか。」を局所フェルミ流体論や厳密解を援用して理論的に示しており、実験的にも検証されるようになっている。さらに金属表面の量子囲い中の磁性原子系において見出される量子壁気相現象の再現にも成功を収め、表面でのスピノ偏極電子波干渉演算装置の提案

## 応用物理学専攻・物理工学講座・理論物性学領域 笠井研究室

笠井秀明教授、中西寛学内講師

物質科学を探索する研究室!

笠井研究室では、物質の特性やダイナミクスの理論的研究を行っています(理論物性学)。特に、固体表面での励起と反応における量子ダイナミクス、原子架橋、ナノワイヤ、量子ドット、超格子、量子囲い等のナノ物性の解明、制御、デザインを理論として解析的手法や計算物理学的手法を用いて研究を進めています。このような研究において、常に物性の材料である普遍性をもとめることを忘れず、地球上の我々を取り巻く自然界で生じる諸現象の理解を深めたいと考えています。

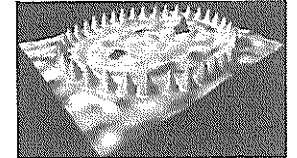
研究室の最近の研究テーマ

- I カーボンナノチューブの電子物性
- II クリーンエネルギー燃料電池、水素貯蔵の理論
- III スピンエレクトロニクス・ナノデバイスの設計
- IV 原子架橋の構造安定性と磁性(マテリアル・強磁デザイン)
- V 反応性を制御する合金表面の設計(マテリアル・強磁デザイン)
- VI STM 観測ダイナミクスの理論とその電子マニピュレーションとしての応用
- VII 近藤効果の実空間観測の理論
- VIII 高温超伝導中の干渉物の構造についてに関する理論
- IX 表面電子系の遠望光学応答(時間分解多光子光電子顕微鏡)の理論
- X 表面におけるはばきと反応・吸脱反応の量子ダイナミクスの理論

カーボンナノチューブ (CNT)とは、炭素原子が共有結合してできたグラファイトシートを筒状に丸めて出来た、直径数ナノメートル、長さ数マイクロメートルの巨大分子です。この極めてユニークな物質の電子物性を管理する研究、および、強磁デバイス、STM、設計への応用研究を行っています。

また、水素反応触媒の観点から、CNTを用いた水素貯蔵の研究も行っています。  
一 水素貯蔵の応用分野: 燃料電池自動車

表面ナノ構造  
金属表面に原子をならべて、人工ナノ構造を構築し、その物性を調べ、新規機能デバイスを設計する理論研究を行っています。



上図は銅表面にコバルト原子を規則的にならべて作った量子囲い STM 像です。緑色の丸は原子 (右) にコバルト原子を置く、もう一方の原子 (左) は銅原子です。  
(電子顕微鏡画像)

これからの理論物性学  
理論物性学すなわち、「マテリアルの特性を自然界の第一原理である量子力学を用いて理論的に予測する学問領域」は、近年、IT(情報技術)の進歩とともに急激に、基礎科学研究や、様々な工学的応用プロジェクトにおいて重要な役割を果たしています。産業界では、特にエレクトロニクス・デバイス、化学合成、製薬、バイオテクノロジー等の分野がその応用分野として上げられます。今世紀の新しい分野としては、次世代エレクトロニクスである「スピノエレクトロニクス」関連の機能マテリアル・デバイス設計、クリーンエネルギー-水素循環社会関連の産業技術分野等が上げられます。そのほか多くの分野で、理論物理学的手法は、その開発スピードを加速していくでしょう。

研究体制と研究実績  
当研究室の研究協力体制には以下のものがあります。大学内では、理学研究科、基礎工学研究科、高分子科学研究科それぞれの理論物性研究グループと連携し大阪大学ナノグループ・ナノマテリアルデザイン・ネットワークを形成しています。また、東京大学物性研究所、同大学生産技術研究所等の先端研究施設とは理論・実験を連携した共同研究を実施中です。研究協力および人的交流のある国外研究機関として、ドイツ・ミュンヘン工科大学理学部 Beug 教授のグループ、Finis-Huber 研究所 Schindler 教授のグループ、デンマーク工科大学理学部 Nørskov 教授のグループ等があります。いずれも世界第一級の研究機関で最先端の研究活動を行っています。民間企業としては、トヨタ自動車(株)、松下電器産業(株)があります。  
研究費源として、スーパーコンピュータ「SMR1」(NRI/RIKEN)のワークスペースやシミュレーション「FPGA CELLUSTER」24 台の pc から成る PC クラスタを研究室内で自由に活用しています。  
ホームページ: [www.dyn.op.eng.osaka-u.ac.jp](http://www.dyn.op.eng.osaka-u.ac.jp)  
皆さんが、この分野に選出し、活躍することを心待ちにしています。  
2004年1月

図1 研究室紹介

へと発展しつつある。

## 3. 表面電子系の過度光学応答

1つ目のフェムト秒パルス光(ポンプ光)で、系を励起し、2つ目のパルス光(プローブ光)を照射して応答を調べることにより、フェムト秒時間分解で電子系的高速応答を調べることができる。金属表面で励起される電子・正孔の振舞、および、寿命に現れ



\* Hideaki KASAI  
1952年1月生  
昭和51年大阪大学大学院・工学研究科・前期課程修了  
現在、大阪大学・大学院工学研究科・応用物理学専攻、教授、工学博士、物性理論  
TEL 06-6879-7857  
FAX 06-6879-7859  
E-Mail [kasai@dyn.ap.eng.osaka-u.ac.jp](mailto:kasai@dyn.ap.eng.osaka-u.ac.jp)

るクーロン相互作用の効果を解析し、実験で観測される光電子強度時間相関関数の内容を明らかにしている。さらに、金属表面から吸着子がレーザー照射によって脱離する時の電子系の振舞を非平衡グリーン関数法により定式化し、その結果を応用して、この系の時間分解2光子光電子分光法による観測理論を与えている。また、観測時間に依存する非平衡グリーン関数を新たに導入し、位相緩和の微視的機構を明らかにしつつある。

#### 4. 非磁性不純物を含む高温超伝導体の磁氣的性質

銅酸化物における高温超伝導の有力な発現機構と考えられているスピン揺らぎ機構は、ある程度信頼できる超伝導転移温度 $T_c$ を再現することができる。そこで、スピン揺らぎ機構を考慮できる揺らぎ交換近似(FLEX)と不純物効果を考慮できるコヒーレント・ポテンシャル近似(CPA)を同時に適用し、不純物を含む銅酸化物高温超伝導体の電子状態を調べている。Cu原子と置換した非磁性不純物が反強磁性スピン揺らぎを抑制すること、その結果、実験結果と同程度の $T_c$ の低下が生じることを見出している。さらに、酸素欠損の効果についても考察を進めている。

#### 5. 原子架橋の量子輸送現象に現れる電子相関効果

STM探針と金属表面の間に形成される原子サイズの架橋構造(原子架橋)の量子輸送現象に現れる電子相関効果をハバード・モデルを用いて調べている。探針引き上げに伴う架橋構造の変化により、有限温度の場合、低次元性を反映してサブバンド間の電子・電子散乱が極端に増強される。その結果、量子化コンダクタンスが強く抑制されることを見出している。

#### 6. 磁性ナノワイヤーの安定構造と磁性と伝導性

Cu(111)表面上のFeナノワイヤーの安定原子配置とその磁性、伝導性を電子状態の第一原理計算によって調べている。その結果、Cu表面に対しワイヤーを平行に配置するのが安定構造で、Fe原子1個当たり、 $3\mu_B$ の磁気モーメントを持つ強磁性的な状態が基底状態であることを見出している。Cu表面上でも、Fe原子架橋と同じく、バルク中よりFe原子の磁気モーメントが増強される。さらに、下記のスピントロニクスで重要な、このワイヤーを伝導する

スピン偏極電流を見出している。このような第一原理計算によるナノ物性の解析は、半導体表面上の磁性薄膜・ナノワイヤーへと進展している。

### 7. ナノスピントロニクスのデザインと創製

現代のエレクトロニクス・デバイスの微細化は動作原理の理論的限界に達しつつあり、素子速度、省エネルギー性等の性能にも限界が見え始めている。そこで、新規な原理に基づき、電子のもつスピン自由度を活用する次世代エレクトロニクス「スピントロニクス」の構築が急務となっている。そこで第一原理計算によるナノマテリアル・デザイン手法を発展、融合させ、ナノスピントロニクスのマテリアル・デバイスの新しいデザイン手法を開発している。特に表面ナノ構造ベースのスピントロニクスのマテリアル・デバイス・デザインに顕著な成果を挙げており、表面ナノスピントロニクスデバイス(特願2003-179726号)を提案している。

この「ナノスピントロニクスのデザインと創製」研究は、平成14年度文部科学省科学技術振興調整費「先導的研究等の推進」プログラムに採択されており、理論グループ5、実験グループ5からなるネットワーク型組織から構成され、デザイン主導で推進されている。(図2)このデザイン主導の研究形態は、投下資金に対する高効率性と環境に対する低負荷性を併せ持ち、これからのプロパテント化時代に相応しいものとして、広く産学官界から注目を集めている。

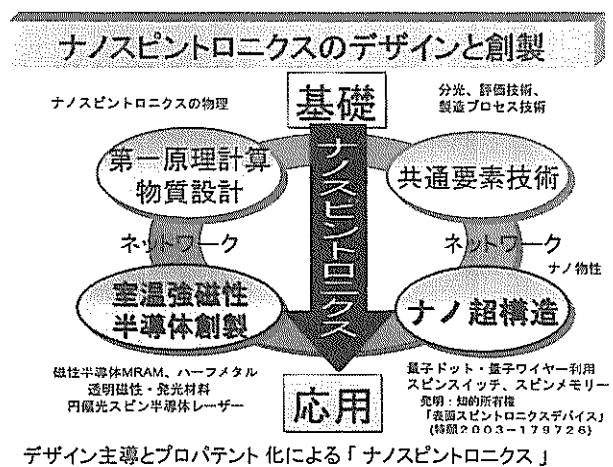


図2 ナノスピントロニクスのデザインと創製

### 8. 表面反応の解析と制御とデザイン

固体表面における原子・分子の反応ダイナミクスを解析するために、反応系を構成する電子系から、原子・分子および表面構成原子の運動にまで、自然界の第一原理である量子力学を適用するアプローチ「第一原理量子ダイナミクス計算手法」(NANIWAシリーズ)を開発し、このアプローチにより「動的量子フィルタリング(DQF)効果」「振動補助吸着促進効果」「ステアリング効果」「各種反応への分子配向効果」「表面フォノンの反応抑制・促進効果」などを見出している。これらの効果は、現在、国内外の実験グループにより確認され実証されており、第一原理量子ダイナミクス計算の有効性が証明されつつある。この手法をさらに発展させ、表面反応の解析、制御、デザインを進めている。

### 9. クリーン水素エネルギー基盤技術開発

燃料電池技術をコアとする水素エネルギー・システムは、生態循環系との調和性、熱機関によらないエネルギー変換効率の良さから、今後のエネルギー・システムの根幹と目されている。そこで、これまでの研究を進展させ、自動車産業、家電産業などの産

業界とも連携し、水素エネルギー・システムの基盤技術(水素貯蔵供給材料、燃料電池電極材料など)の研究開発を行っている。

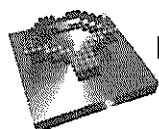
その結果、特に上記のDQF等の量子ダイナミクス効果は、触媒を用いたプロセス設計に革新をもたらすことがわかってきた。すなわち、従来、触媒を改良することにより反応性を改善しているところであるが、研究の結果、反応分子の量子状態を制御することでその反応性をより一層高める方法を見出している。この知見に基づいて、新しい水素の液化促進法(特願2001-274461号、特願2002-327405号)を提案している。(図3)

また、第一原理量子ダイナミクス計算法を駆使し、従来法とは異なる反応経路を人工的に設計することにも成功している。その結果、水素吸蔵物及びその製造並びに該吸蔵物からの水素放出方法(特願2003-030717号)を提案している。

### 10. おわりに

理論物性学によるマテリアル、プロセス、デバイスのデザイン主導による研究開発は、正確さと信頼性の向上により、その重要性が産学官界において認識されつつあり、これまで行われてきた経験的、実験的研究開発に置換わる可能性も出始めている。特にエレクトロニクス、化学合成、製薬等がターゲットと思われるが、その他多くの分野でも、環境に対する高負荷型の経験に基づく実験的手法は、理論物性学の手助けを得て、今後、その研究開発スピードを加速して行くと考えられる。

大阪大学が法人化され、中期目標・中期計画にそって専攻再編が順調に進めば、表題の専攻や講座の名称も無くなる。このような折に編集委員の萩行正憲教授から研究室紹介の執筆の依頼があり、時節到来、気楽にお引受けした次第である。



### 「水素の液化促進法」

(特願2001—274461号)

目的：水素液化時のオルソ水素の害を取り除く。  
 内容：固体表面から脱離する分子の動的量子フィルター作用と、オルソ・パラ変換表面反応の回転軸選択性を利用して、オルソ・パラ変換を効率よく行う。

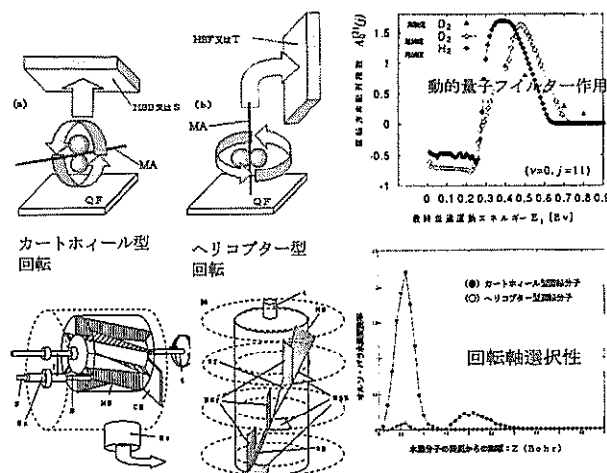
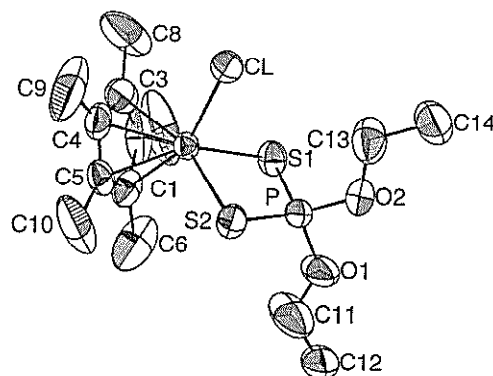


図3 水素の液化促進法



この記事をお読みにになり、著者の研究室の訪問見学をご希望の方は、当協会事務局へご連絡ください。

事務局で著者と日程を調整して、お知らせいたします。

申し込み期限：本誌発行から2か月後の月末日

申し込み先：生産技術振興協会 tel 06-6395-4895 E-mail seisan@maple.ocn.ne.jp

必要事項：お名前、ご所属、希望日時(選択の幅をもたせてください)、複数人の場合はそれぞれのお名前、ご所属、代表者の連絡先著者の都合でご希望に沿えない場合もありますので、予めご了承ください。

