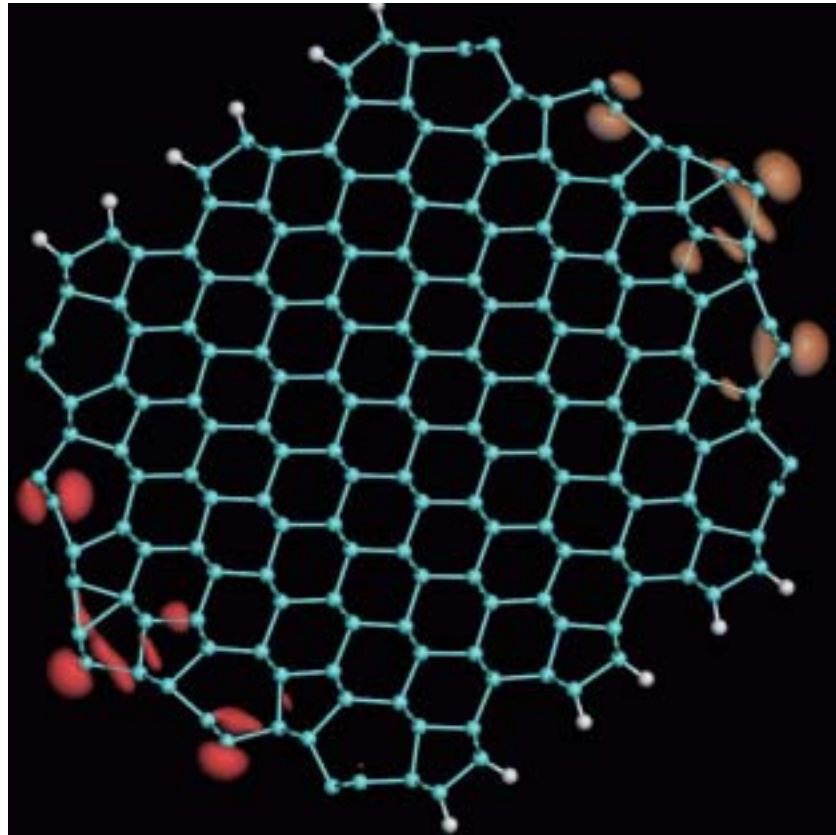


大学院工学研究科教授  
伊藤智徳

いとものり  
工学博士  
専門分野は材料設計(材料物性の理論予測)、  
材料形成過程の計算機シミュレーション  
1955年生まれ

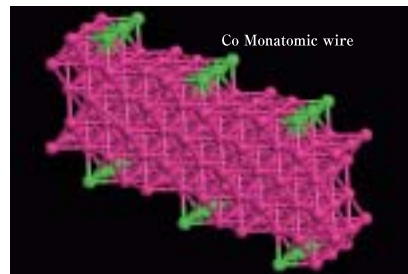
この記事に関連した情報は以下のアドレスでもご覧になれます。  
▶ <http://www.mie-u.ac.jp/links/research/>

右図/シリコンナノワイヤにおける電子雲の分布

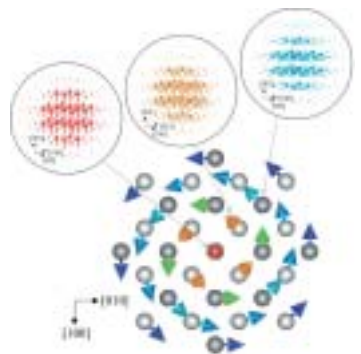


## 世界をリードする計算手法を開発し、 ナノテクノロジーの可能性を探究

21世紀の科学技術の中で、大きな期待を集めるナノテクノロジー。工学研究科では、世界に先駆けて画期的な計算手法を開発し、国内外のナノテクノロジーの研究をリードしています。各国の研究機関との情報交換、米国大学との共同研究を進めるなど今後も計算材料科学の最前線で、その可能性を開拓していきます。



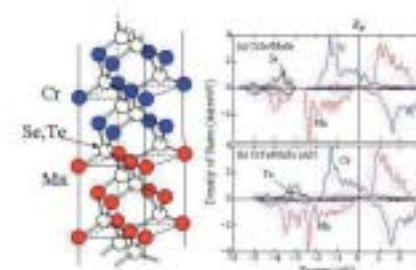
Pt(111)ステップエッジ上のCo単原子ワイヤの構造(図1)



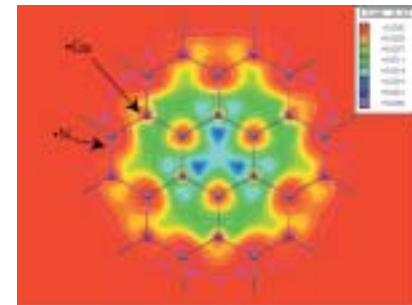
磁気ボルテックスのスピントロニクス構造(図2)

### 21世紀の科学技術を担う、ナノテクノロジー

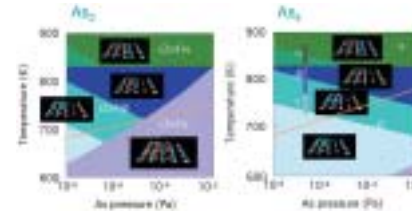
科学技術の世紀と呼ばれた20世紀、科学における重要な成果の一つに、電子の波動性の発見があります。これは、量子力学という新たな学問を創出しました。技術においては、トランジスタの発明が大きな成果の一つと言えます。これはエレクトロニクスという技術分野を創出し、今日の計算機、携帯電話といった情報機器開発の礎となりました。では21世紀における科学技術はどうなっていくのでしょうか。多くの人々がナノテクノロジーという言葉に耳にしたことがあると思います。ナノテクノロジーというのは、ナノメートル(1nm=10<sup>-9</sup>[m]=10億分の1メートル)の微小な世界を扱う技術のことです。このナノテクノロジーは、21世紀の重要な技術の一つと位置づけられており、そこでは原子ある



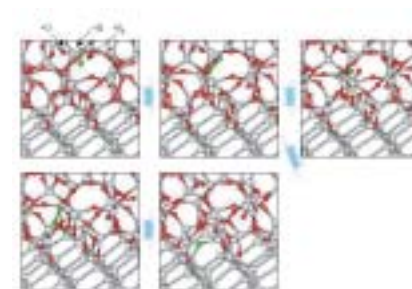
CrSe/MnSe及びCr/MnTe界面の構造と状態密度(図3)



GaNナノワイヤの電子雲分布(図4)



GaAs(001)面表面構造状態図(図5)



SiO<sub>2</sub>/Si界面での酸化反応(図6)

いは電子が重要な役割を果たします。私たちの研究室では、20世紀の科学技術の成果である量子力学と計算機を使って、ナノテクノロジーの基礎となる原子や電子の振る舞いについて研究を行っています。

### 新たな手法を開発し、国内外の研究機関を先導

ナノテクノロジーにおいては、物質の表面が重要な「場」となります。表面上に原子を積層し成長させていくことで、ナノ構造と呼ばれる新しい性質を持つ、様々な構造を形成していきます。人の表面と内面が異なるのと同様に、物質表面も内部と異なる様々な様相を呈します。具体的には、成長条件に依存して特異な表面原子配列をもつことが実験的に知られています。しかし実験だけでは、何が、どのように寄与して、その特異な配列をもたらすのかはなかなかわかりません。しかし、計算機を利用すると、この問題を解決することができます。私たちは1995年に量子力学に基づく表面原子配列予測手法(エレクトロンカウンティング・モンテカルロ法)を開発し、特に半導体表面上での原子の移動に関する研究において、国内外の研究機関を先導する成果を挙げてきました。その後2001年に量子統計化学に基づく新たな手法を提案し、成長条件の関数としての表面原子配列デザインへと展開しています。また、半導体酸化膜界面および半導体量子ドット、半導体ナノワイヤと呼ばれる低次元ナノ構造についても、その成因の解明、準安定構造の予測等を行っています。

### 世界に先駆けた計算手法で、スピントロニクス分野に貢献

20世紀のエレクトロニクスは、主に電子の電荷の性質(電荷の蓄積や流れ)を利用して発展してきました。電子は一方でハードディスク等の磁気記録技術に活用されている、磁石の起源でもあるスピンと呼ばれる量子力学的性質も持っています。今日では、この電子の電荷とスピンの自由度を同時に活用すべくスピントロニクスと呼ばれる新しい技術分野が生まれ、次世代の高度情報処理・通信技術開発に向けた基礎研究が世界的に推進されています。この分野においても表面界面が重要なキーワードとなります。このような背景のもと、私たちは表面界面のスピン構造の解明とその物性をデザインすることを目標として、2001年に最先端の量子力学理論に基づく第一原理全電子スピン構造計算手法(ノンコリアスピンfilm-FLAPW法)を世界に先駆けて開発しました。この計算手法は、現在最も高い信頼性をもつ手法として知られており、遷移金属表面や超薄膜・多層膜構造体、単原子ワイヤ等々のナノ構造体のスピン構造予測へ適用されています。

### 米国大学との共同研究、国際交流を展開

ここで述べてきた研究は、最近では計算材料科学という研究分野に属しています。21世紀に入り、新たな計算手法の開発と計算処理能力の一段の向上とが相まって、計算材料科学という分野は大きな広がりを見せています。ただ計算機を使って得られた結果については、その信頼性、妥当性に対して常に注意を払う必要があります。その観点から、国内外の研究機関と実験、計算の両面で情報交換をしながら研究を進めています。特にスピンに関する研究では、米国のノースウェスタン大学と共同で手法の開発を進めており、先日先方から博士課程に在籍している学生が来日し、私たちの研究室に2週間余り滞在していました。研究室の学生とも交流して、教育的にも良い影響を与えてくれました。今後も研究、教育の両面において、国際的視野で交流を図っていきたく考えています。