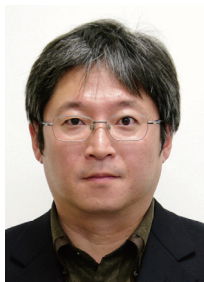


物性科学における 計算機シミュレーションによる理論研究

中村 淳 研究室



中村 淳
Jun NAKAMURA

とで、その物質の性質(物性)を知ることができるとのことです。

指導原理に基づく物質設計とルールづくり

炭素材料のダイヤモンドは透明でとても硬い絶縁体です。一方、同じ炭素でも鉛筆の芯などに使われる黒鉛(グラファイト)は真っ黒で比較的柔らかく、電気を通します。このような色や硬さ、電気を通す・通さないといった物質の性質や機能は何によって決まるのでしょうか。それは原子の種類や並び方であり、これによって原子の中心にある原子核の周りを回っている電子の状態が定まります。つまり、物質の電子状態を調べるこ

と、中村淳教授は、物質(モノ)の性質や機能を明らかにするこうした物性科学の分野において、計算機シミュレーションによる理論研究を行っています。ナノメートル(ナノは10億分の1)の領域では、我々が経験的に知っている古典力学の世界とは全く異なる、量子力学が支配する世界が広がっています。量子力学における基本方程式「シュレディンガー方程式」にも、原子配列が決まれば物質の電子状態が分かり、それによって物性が明らかにすることが示されています。

す。

この自然界のルールに従う指導原理に基づいて原子配列をデザイン(設計)すれば、原子レベルで物質を設計できるようになります。これは応用研究であり、工学的なアプローチと言えるでしょう。一例として、中村教授は「フラットバンド磁性」と呼ばれる新しい指導原理を基に、ホウ素(B)と窒素(N)、炭素(C)を組み合わせた細長いリボン状の物質が磁性を示すことを理論的に予測しました。従来は不可欠だと思われていた鉄(Fe)やコバルト(Co)、ニッケル(Ni)などの遷移金属元素を含まない新しい軽い磁性材料として期待され、その後、実際に実験グループによってその存在が確かめ

られました。こうした物質設計においては、機械学習などの情報処理技術を活用して材料開発を進める「マテリアルズ・インフォマティクス」の手法も用いています。一方、合致する指導原理がない場合はどうすればよいでしょうか。中村教授は実験で明らかになった結果について、実験グループからその理由を説明する理論を構築してほしいという依頼を受けることがあるそうです。なぜこのような物性が現れるのか。その理由が既存の指導原理に当てはまらなければ、物質の電子状態を明らかにして新たなルールを作り出せばよいと中村教授は考えています。これこそが基礎研究であり、自然界のルールを探るサイエンス

キーワード

ナノエレクトロニクス、ナノマテリアルの電子物性、誘電特性、光学特性、磁気特性、電気伝導、カーボン系新材料開発、量子ドット、カーボン系触媒、エネルギー材料

| | |
|--------|--|
| 所属 | 大学院情報理工学研究科 基盤理工学専攻 |
| メンバー | 中村 淳 教授 |
| 所属学会 | 日本物理学会、応用物理学会、日本表面真空科学会、アメリカ物理学会、アメリカ化学会、アメリカ材料科学会 |
| E-mail | jun.nakamura@uec.ac.jp |

(理学)なのです。このようにして、中村教授は理論計算の研究者ながら、「モノの理屈を明らかにする『理学』と、その理屈を使って新しいモノを作る『工学』との間を行き来しながら研究を進めている」といいます。

グラフェンナノリボンの熱伝導率と熱電変換効率を向上

具体的な成果としては、炭素原子がハチの巣構造に並んだ1原子の厚さのシート状物質「グラフェン」をリボン状にした、「グラフェンナノリボン」に関するさまざまな物性研究があります。グラフェンはノーベル賞にも輝いた有名な材料ですが、中村教授は世界でもまだその物性がほとんど知られて

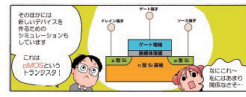
川類電子工学（基盤理工学専攻）
中村（淳）研究室 詳細はウェブサイトで見るといい 検索 中村淳
 研究室構成：教授1名、博士3名、修士7名、卒研生3名、研究員1名、研究生1名



これを解いてから
 原子の並びかたを
 変えることで
 望みの性質をもった
 物質を作り出す
 ことができますよ！

これは何だかの
 研究している
物質設計
 という分野
 なんです！

そんなことが
 できる
 ですよ！



「理論」と「実験」をつなぐ
計算機シミュレーション

500 core を超える
 並列コンピュータによる
 シミュレーション技術



グラフェンとその誘導体
熱電変換材料の開発
 廃熱から電気エネルギーを！！

化合物半導体
 IV/III-Vヘテロ構造
**超高速デバイス
 光デバイス
 センサー**

ルールを知ることが
 サイエンス！
 そしてそれを
 利用するのが
 物質設計
 なのです！



望みの性質を持った物質を原子レベルから設計する
原子レベル物質設計
 による
新規エネルギー材料の創製
 第一原理量子計算、分子軌道計算、
 機械学習、マテリアルズインフォマティクス



卒業生の最近の就職先
 2021卒業者（内々定）
 日立製作所、大和総研、IJ、
 日本ユニシス、川崎重工、大林組

2020以前
 トヨタ、矢崎総業、富士電機、アンリツ、
 本田技研、ソニー、東芝、J-Power、村田製作所、
 ジーシー、パナソニック、鳥取大学、富士重工、
 ソフトバンク、サンディスク、マイクロンメモリ、
 三菱電機、JR東日本、東北電力、日産化学、
 ルネサス、日立製作所、ローム、キヤノン、
 セイコーエプソン、ファナック、阿南高等、
 ジブラルタ生命保険、...

要するにいろいろ

グラフェン（2010年ノーベル物理学賞）を用いた新しい炭素物質の探索
燃料電池のための貴金属を使わない酸素還元触媒の設計 2019年10月
 日経新聞をはじめとする
 各種メディアで取り上げられた

熱烈歓迎 グローバルに活躍したい人
 研究のフロ（博士）を目指す人
 遊びも勉強も手を抜きたい人
 知恵熱を出してみたい人

番外編
 クラシック「演る」人
 体を動かすことが好きな人
 人が好きな人
 etc.

いなかった時代にこれに着目し、
 1994年にはすでに炭化ケイ素
 (SiC)の基板上に(後にグラ
 フェンと呼ばれる)単層のグラ
 ファイトが形成された構造に関す
 る論文を発表しています。

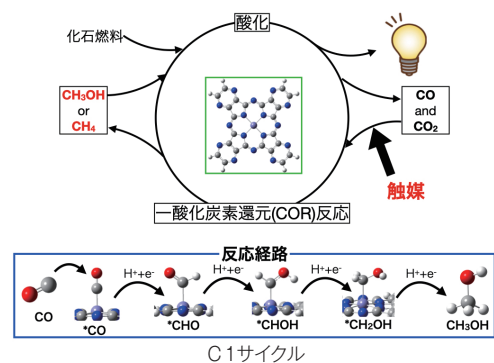
その後も、グラフェンの電子状
 態とグラフェンナノリボンのエッ
 ジ(端)状態の効果を利用して熱伝
 導率をさらに高めるといった世界
 に先駆けた研究や、グラフェンに
 BとNを混ぜると高効率な熱電変

換デバイスとして機能するという
 可能性を示した研究などを行って
 きました。

**燃料電池の安価な触媒開発と
 C1サイクルへの応用**

最近では、グラフェンに異種元
 素を添加して燃料電池の「触媒」と
 して使う研究などに力を入れてい
 ます。現在の燃料電池自動車の触
 媒には希少金属の白金が用いられ
 ています。高価で耐久性が低い
 などの課題があります。中村教授
 は東北大学などと共同で、窒素を
 添加したグラフェンと青色顔料と
 して知られる鉄フタロシアニンに
 窒素を入れた誘導体を組み合わせ
 ると、白金と同等以上の効率を持
 つ安価な触媒が作れることを理論
 と実験の両面で実証しました。将
 来実用化できれば、「燃料電池車
 だけでなく、身体に装着できる
 ウェアラブルデバイスなどに使え
 るのではないか」と中村教授は考
 えています。これをさらに発展さ
 せた新しい触媒の研究を進めてい
 るそうです。

このような触媒を、現在注目さ
 れつつある「C1化学」を応用した
 エネルギーサイクル(C1サイク



ル)に導入する研究も手がけてい
 ます。C1化学とは、一酸化炭素
 (CO)や二酸化炭素(CO₂)、メ
 タン(CH₄)、メタノール(CH₃
 OH)など炭素数が1の化合物か
 ら、炭素数が2以上の化合物を合
 成する有機化学プロセスです。C
 1サイクルは現行の「カーボン
 ニュートラル(温室効果ガス排出
 量ゼロ)」政策とは異なり、脱炭素
 ではなく炭素を捨てずに循環させ
 る、より進んだ「炭素再利用の循
 環型社会」に向けた新しい取り組
 みとして期待されています。

産業界の声に応える

以上のように、中村教授の研究
 は、炭素系に限らず、あらゆる物
 質を対象に原子レベルまで立ち
 返ってそのルールを調べ、これを
 基に最先端の物質を設計してい
 ることが最大の特徴です。近年で
 は、企業でも理論計算をベースに
 したものづくりの手法が浸透しつ
 つあり、中村教授は「これからも
 多くの産業界の要望に応えていき
 たい」と考えています。

【取材・文】藤木信穂