

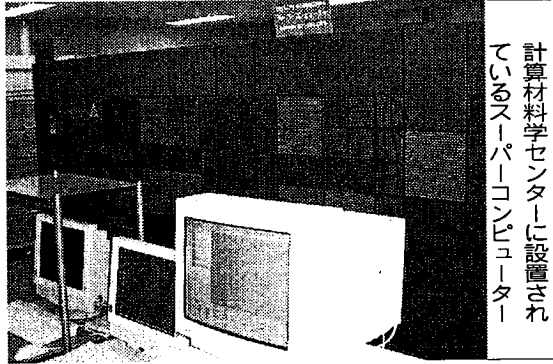
新

産業革命 先端研究室の挑戦

ナノテクで

東北大学金属材料研究所計算材料学センター

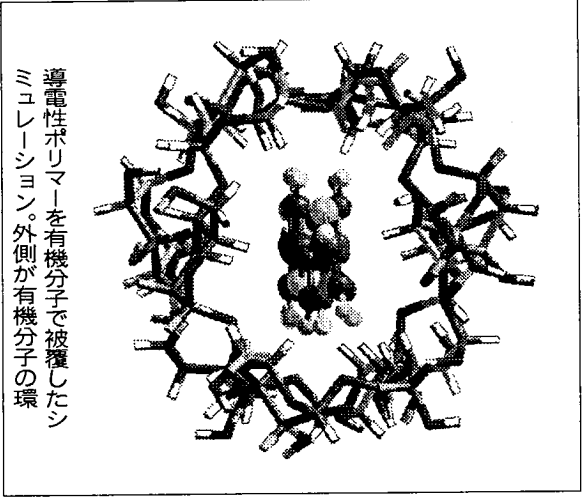
◆金研(Kinken)◆
 の名称で国内外にその存在を知られる東北大学金属材料研究所。1916年臨時理化学研究所第2部として創設以来、わが国における材料研究の中心的な役割を担い、伝統の上に常に新しい成果を積み上げてきた。近年ではその研究対象は金属にこだわらず、その化合物、半導体、セラミックスなど無機材料全般などをカバー。また、「実験」と「計算」が連携したスーパーコンピュータの中で新材料創製も進んでいる。



計算材料学センターに設置されているスーパーコンピュータ

大規模な計算機シミュレーションを活用し、分子エレクトロニクス設計や単結晶の最適作製条件の探索など実験家と共同で、新有用物質開発の迅速化と高度化に挑戦しているのが金研計算材料学センター(川添良幸センター長・合金設計制御工学研究部門教授)。

同センターは01年春、新型スパコン「SR8000モデルG1」(日立製作所



導電性ポリマーを有機分子で被覆したシミュレーション。外側が有機分子の環

製を導入。ペクトル型からスカラー型に更新した。新スパコンの最大理論ピーク性能は、64ノードで921ギガFLOPS(1ギガFLOPSは1秒間に10億回の浮動小数点演算を実行)。導入時において、国内では3位の性能となるもの。実

実験では見えない過程を見えるようにする大規模計算機シミュレーション。材

料設計などの実験がナノテクノロジーの世界に本格突入する中、同センターの任務も増している。例えば、分子エレクトロニクス素子。同素子は現在のコンピュータ用集積回路の1万倍速い素子の実現法として期待されているものの、実験的にはまだハンドリングなど困難な状況。しかし、計算では実験データが不足であっても、分子レベルの回路を仮想につくり、その電気特性が確認できる強みがある。「新型

新型スパコンによる物理法則に基づく第1原理計算を用いた川添センター長らの研究グループによるシミュレーション計算では、すでにいくつかのシミュレーション結果が生まれている。導入当初の計算結果としては、有機分子を使った部品の一種であるスイッチング回路を第1原理計算により予測。複数の個のベンゼン基要素を結合した分子素子で、両端の金電極から硫黄を經由する電気伝導を解析するなど、ナノスケール回路としての性能を確認した。また、金属原子を含む最小で安定したシリコンクラ

分子回路の世界／スパコン使い模擬設計

スターの構造決定にも成功している。シリコン20個からなる金属原子を内包したかご状の構造を収縮させ、安定したシリコンクラスタの構造を求めた。大規模計算では①かご状のフラーレン②Frank-Kasper(FK)と呼ぶ型③立方型④の3種類について確認している。

分子エレクトロニクスでのホットな動きは、シリコン基板上での原子細線による新デバイスづくりをスパコンで予測するもの。すでに実験で作製されている新材料を大規模計算によりその電導性などの特性を確認するの狙い。ごく最近の計算結果の一例では、導電性ポリマーを絶縁体となる有機分子(でんぷんの環)で被覆したワイヤの電気が通る状態などをシミュレーションで可視化。いくつかの計算モデルによりその特性などを確認している。

シリコン技術のその先へ。分子エレクトロニクス素子のイメージはまだはっきりしていない。分子エレクトロニクス素子の実用化には、ハンドリング技術をはじめモノづくりの面で先の見えていない部分が多い。その実用化は早くして2010年ごろ言われている。川添センター長は「確かに今すぐにはとはいかない。ただ、分子エレクトロニクス関連は、また基本から特許を抑えられる。日本が元氣を出せるころ」と強調。わが国の将来に向けた取り組みとして、全力を注ぐナノテク分野と指摘する。その先へ結びつけるには、やはり大学はじめ各方面の密接な連携が欠かせない。