

研究分野が変わって

松 中 大 介*

Belonging to Two Research Fields

Key Words : Solid Mechanics, Solid-State Physics, Computational Mechanics,
Computational Science

1. はじめに

平成 17 年 6 月より大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻で助手として採用して頂いてから、早いもので 4 年と半年が過ぎました。現在は原子分子イオン制御理工学センターで助教として、研究と教育を行っています。もともと学生時代は同大学同研究科の応用物理学専攻に所属し、日本学術振興会特別研究員の間も含めて、場の量子論を用いた物性物理に関する理論的な研究を行っておりましたが、機械工学専攻に着任することをきっかけに計算力学や計算科学に関する研究を進めてきました。研究対象とする時空間スケールが大きく異なる分野が変わったことで苦戦も多いですが、新しく学ぶことも多く充実感を感じています。今回「生産と技術」へ寄稿するチャンスを頂きましたので、私がこれまで行ってきた研究と現在感じていることを述べさせていただきます。

2. 電子と不純物

私が物性物理の理論研究を始めたのは学部の 4 年生の時、研究室配属のための研究室紹介で「物質の性質を紙と鉛筆で解き明かす」という謳い文句に惹かれたのがきっかけでした。物性物理での最も重要な主役は電子であり、その電子の振る舞いによって多彩な物性が発現します。電子のようにミクロな

スケールの要素の運動状態は量子力学によって記述されるわけですが、簡単なハミルトニアンから出発して、場の理論のような解析的手法や数値シミュレーションを駆使することで、磁性や超伝導などの物理現象が説明されることがとても神秘的に感じられました。実際に研究室に入って最初に驚いたのは、わずか数年しか変わらない先輩達が、最先端の解析手法を用いたり新しいアプローチを考え出したりして、未解決の問題について議論をしていることでした。もちろんそれこそが研究なのですが、研究室に配属されるまでの学部時代に講義と教科書で単に勉強をしていただけの私にとって、これまで勉強した知識を使って答えのわかっていない問題を考えるということは斬新に感じ、果たして自分にできるだろうかと不安にも思いました。

面白い物理現象がたくさんある中で、銅酸化物高温超伝導体は母体である酸化物絶縁体への正孔や電子のドーピング量によって絶縁体、超伝導、金属へと変化する特に興味深い物質です。そこで見られる多様な物性は多数の電子がお互いに強く相互作用することに起因しており、その電子相関の効果を解明するために様々な理論的アプローチによる研究が行われてきました。一方で、不純物によってどのように影響を受けるかという情報が、複雑な銅酸化物高温超伝導体の理解に対して有用だろうと考えられ、早い時期から不純物効果に関する研究も行われていました。銅酸化物高温超伝導体における不純物効果の注目すべきものの一つとして、フォノンによって媒介される金属超伝導体の超伝導状態は非磁性不純物によって弱く乱されるのに対し、銅酸化物高温超伝導体では Cu を Zn で置換した場合のような非磁性不純物によって超伝導性が著しく抑制されてしまうことです。私は強い電子間相互作用と不純物による電子の散乱の両方を考慮した解析を行うことで、電子



* Daisuke MATSUNAKA

1978年3月生
大阪大学・大学院工学研究科・応用物理学専攻(2005年)
現在、大阪大学 大学院工学研究科 原子分子イオン制御理工学センター 超微小機械分野 助教 博士(工学) 計算力学, 計算科学, 物性論
TEL: 06-6879-4121
FAX: 06-6879-4121
E-mail: matsunaka@mech.eng.osaka-u.ac.jp

相関に対する不純物の効果を調べました。しかし、研究室では誰も似たような解析をしている人がいなかったため、解析手法の習得から数値計算のプログラムの作成まで非常に苦労しました。遅々として研究が進みませんでした。それでもなんとか結果が得られるようになり、銅酸化物高温超伝導体におけるd波クーパー対を媒介する反強磁性スピン揺らぎが不純物散乱によって抑制されることを明らかにしました。そして最適ドーピング量からオーバードーピング量の領域に対して不純物による超伝導転位温度低下率の実験結果を定性的に説明しました。また、博士後期課程の後半からは希薄磁性半導体におけるキャリア誘起強磁性に関する研究にも取り組みました。希薄磁性半導体は、半導体に少量の磁性不純物をドーピングすることで磁性を発現させるもので、半導体として実績のある物質をベースにしたものが合成され強磁性を示すことが確認されたことを契機に、電気伝導と磁性の融合を目指したスピントロニクスにおける有力な材料として注目されています。希薄磁性半導体においては、不純物散乱をしながら遍歴していくキャリアによって磁性不純物のスピンモーメント間に有効的な相互作用が働き、強磁性はキャリアによって誘起されます。私はランダムに配置した磁性不純物によって散乱を受けるキャリアの電子状態を解析するために、マルチサイト散乱による非局所相関を自己エネルギーに考慮する新しい手法を適用しました。そして、非磁性不純物間の反強磁性的な超交換相互作用によってキャリアのスピン偏極が抑制されることを示し、キャリアと磁性原子の相互作用が強いほどその抑制が大きいことを明らかにしました。これはキュリー温度を上げるためには磁性不純物の均一な分布がより重要になることを示唆しています。

不純物は電子に働くポテンシャルの一部の変化であり、電子の振る舞いに変化をもたらす重要な脇役です。一般的にものづくりにおいて不純物というとあまり良いイメージではないかと思いますが、不純物による効果を理解することから複雑な電子の振る舞いを探ったり、積極的に不純物を利用することで新しい電子特性を与えたりすることができます。このことは不純物効果に関する研究の重要な意義だと思っています。

3. ややマクロなスケールへ

固体力学においては、不純物や欠陥などはとても重要な主役です。例えば、金属材料の塑性変形は転位の挙動によって支配されており、降伏、加工硬化、局所変形などの力学現象に対しては個々の転位の運動や転位群としての集団的振る舞いに関する理解が必要です。そのため、近年では、原子や電子のミクロなスケールからマクロな連続体までを視野に入れた力学現象のマルチスケールモデリングに関する研究が精力的に行われています。固体力学の分野へ飛び込んでみて、これまで量子力学に基づく電子の振る舞いを研究していた私にとっては、ひずみや応力といったマクロ場はもちろんのこと、転位をはじめとする原子レベルの欠陥でさえも新鮮なものでした。新しく学ぶことが多い一方で、結晶中の電子の振る舞いと応力場中の転位の挙動の間に類似した点もあると感じることもあります。

現在、私は異種材料界面に関する電子論的・原子論的な解析を行っています。異種材料間のヘテロ界面は、材料の間で力学的性質、結晶構造、化学結合状態などが異なる境界で、それら界面の特性の変化を適切に考慮したモデリングが重要です。実際に私は、化学結合の様式の大きく異なる金属と酸化物の界面の場合、界面特有の電子状態が生じ、それが界面原子配列に強く依存することを第一原理計算から明らかにしています。界面垂直方向には微視的な取り扱いが必要であり、また界面水平方向にはマクロなサイズを持つため、界面はマルチスケールの対象です。量子力学と固体力学の双方の視点から、界面などのマルチスケールモデリングの問題に取り組んでいきたいと思っています。

4. 教員になって

機械工学専攻へ来て所属する分野が変わったことと同様に、教員となったことも非常に大きな節目だったと思います。学生やポスドクのときは一人で研究に没頭している時間が多かったのですが、教員として学生を教育することが多くなって、毎日とても刺激を受けますし、こちらが勉強させられることも多々あります。まだまだ、学生を指導・教育するというよりは、一緒に悩み考え、ともに一喜一憂している毎日です。そして、毎年どんどん新しく入ってくる学生達と触れ合うことで常に新しい発見もさせ

られます。この大学の刺激的な教育環境はとても恵まれたありがたい場所だなあとつくづく感じます。

5. おわりに

研究者としてはまだまだ若輩者の私が、大学4年生から研究活動を始めてから10年の短い間に、異なる研究分野に所属して研究を行うことができたのはとても幸運なことだと思います。この貴重な経験を活かして、物性物理と固体力学の両方の分野で独

創的な研究を行っていきたいと思っています。

最後になりましたが、執筆する機会を与えて下さいました大阪大学大学院工学研究科、梶島岳夫教授ならびに「生産と技術」の関係者の方々に感謝致します。また、学生時代に懇切丁寧なご指導を頂きました笠井秀明教授と、固体力学の分野への機会を与えてくださり、いつも貴重な議論を頂いている澁谷陽二教授に感謝致します。

