

氏名：嶋田 隆広

所属専攻・職名：機械理工学専攻・助教

派遣国：ドイツ

派遣先(研究機関名)：フラウンホーファー研究所 (Fraunhofer-Institut fuer Werkstoffmechanik IWM)

受入研究者(職・氏名)：Professor, Christian Elsässer

派遣期間：2012年7月24日～2012年8月21日(29日間)

派遣先での研究テーマ：ナノ強誘電体に発現する磁性に関する量子力学シミュレーション
(Quantum Mechanics Simulations of Magnetism Emerged in Nano-Ferroelectrics)

【研究実施概要】

通常、強誘電体は磁気を示さない非磁性体であるが、私はナノスケールの強誘電体では特定の条件下で磁気特性が発現することを発見した。強誘電特性と磁気特性の両方を同時に示す材料はマルチフェロイクスと呼ばれ、両者の相互作用特性を利用することで、これまで達成し得なかった次世代不揮発性メモリや多機能を有するセンサーなどが実現可能であるとして、工学的に重要な材料として近年特に注目を集めている。本発見は世界的にあまり例がなく、その発現メカニズムの解明や特性評価が急務である。したがって、本プログラムを通じ、派遣期間内に、(1) 発現する磁気特性をより厳密に評価するための量子計算理論と技術を修得すること、(2) 複雑なナノスケールの磁性への理解を深め、電子レベルの発現機構を考察するための知識と経験を得ることを目的とした。

量子力学に基づく理論計算は欧州、特に、ドイツで発展しており、現在も活発に研究が行われている。派遣希望先であるフラウンホーファー研究所の Christian Elsässer 教授の研究グループでは、上記の量子計算理論の構築、同理論に基づく計算手法の提案、ならびに、開発した計算手法に基づく新しいナノ材料物性の評価を行っており、量子計算理論に対する深い理解と世界でトップレベルの研究実績を有している。派遣期間中は、Christian Elsässer 教授を含む当該専門分野の研究者とマンツーマンで議論することにより、理論に関する理解を得た。さらに、同理論を組み込んだ量子計算技術に関する習得を行った。特に、私の対象とする強誘電体は、局在電子系・強相関電子系に該当するため、同電子状態を厳密に記述することができるハイブリッド法(密度汎関数理論+ハートリー・フォック法の融合)ならびに LDA+U 法(オンサイト・クーロン補正)に関する先進理論と計算技術について深い理解を得ることができた。

上述の理論・技術に関する理解・習得を基礎とし、強誘電体 PbTiO_3 中の磁気発現に関する電子メカニズムの解明に関する研究を実施した。とくに、原子空孔部では、局所的に結合を失った Ti 原子の d 軌道電子が空孔周辺部に局在化することで磁気モーメントが生じることを明らかにした。同時に、発現する磁気モーメントの値は、材料の強誘電特性の有無によって大きく変化することも明らかにし、顕著な磁気電気相互作用(Magnetoelectric Coupling)を有することが分かった。これらの研究成果は、9月23-28日に開催される国際会議 IUMRS-ICEM2012 にて発表予定である。

【研究成果概要】

本海外派遣プログラム申請時点での当初研究計画は、以下のとおりである。

①最新の量子計算理論の講義を受け、その詳細と今後の発展について学ぶ。同時に、同理論に基づく基礎計算プログラムについて学ぶ。②上記計算理論とプログラムの理解を深めると同時に、実際に解析を実施することで、磁性体の基礎的な特性評価を開始する。③上記の磁性体に対する計算を実施し、研究グループ内で発表・議論する。この過程で磁性に対する基礎的な理解と電子状態から考察を深める。

項目①については、研究実施概要欄にも示したとおり、最新の量子計算理論であるハイブリッド法(密度汎関数理論+ハートリー・フォック法の融合)ならびに LDA+U 法(オンサイト・クーロン補正)について学び、その技術を修得することができた。項目②については、①で得た知識・技術を基礎として実際に量子計算を行い、その特性を評価することに成功した。項目③については、②で得られた成果をまとめ、週一度の

ペースで行われるグループミーティング内で発表・議論を行った。さらに、研究所内のカンファレンス・ルームを借りて、当該研究内容について講演を行った。これは研究所内全員に告知され、約50人程度の研究者が集まり、活発かつ有意義な議論を行うことができた。

また、研究所内には私が在籍した機械材料系グループに加え、バイオメカニクスグループ・応用物理グループなど他分野の研究グループが存在しており、派遣期間中は他分野の研究者と積極的に知識・意見交換と議論を行った。

【外国語のスキルアップ・コミュニケーション能力の向上，海外におけるネットワークづくり】

英語での記述やコミュニケーションは国際化した現在の研究者にとって必要不可欠な能力である。本派遣プログラムに臨むにあたり、英語でのコミュニケーション能力向上をもう一つの目的としていた。派遣期間中は、就業時間中のみならず、休憩時間や OFF の時間帯にも、積極的に他の研究者と交流することで、英会話に関するスキルアップを試みた。実地での環境や研究内容に慣れるまでにおよそ1～2週間を要したものの、それ以降は以前よりもスムーズに英語での会話・議論をすることができるようになった。

海外におけるネットワーク作りについても、上記のような積極的な交流を行うことで自然と形成されたように思える。例えば、私の在籍した機械材料系グループについては、メンバー全員とほぼ毎日顔をあわせて議論をするため、双方の持つ専門知識や技術について理解が進み、現在ならびに将来的な共同研究課題について打ち合わせをすることができた。また、他分野の研究グループとも、分野の垣根を越えた新しい融合分野課題についてアイデアを出し合うことで、該当分野における将来的な発展について刺激的な議論を行うことができた。およそ一か月という派遣期間であったものの、派遣先での研究者とは帰国した現在も共同研究等を通じて議論を行っている。以上のように、派遣先では海外での強力なネットワーク作りをすることができた。



Elsasser 教授と研究グループメンバー

【派遣の感想】

今回の派遣プログラムを通じて、自身の研究分野における最新の技術を得るばかりでなく、将来的な研究の動向や今後の発展性、ならびに、国際的な広い視点を獲得することができた。特に、国際化の進む研究分野において必

要不可欠である英語のスキルアップやコミュニケーション能力を磨くことができたのは、私の今後の研究生活においてかけがえのない財産である。また、本プログラムを通じて得られた海外共同研究者との関係を大切にし、将来の発展へと繋げる所存である。

最後に、このような貴重な機会を与えていただいた組織的な若手研究者等海外派遣プログラムとそれに携わる方々、ならびに、快く海外派遣へ送り出していただいた研究室の長である北村隆行教授に心より御礼申し上げます。