

22p-XC-1 自己組織化によるナノ構造材料形成に向けたマルチスケールの視点 —はじめに—

京大・工 西谷滋人

Multi-scale approaches to self-organizations of nano-structures

Department of Materials Sci. & Eng., Kyoto Univ., S. R. Nishitani

ナノテクノロジーは次世代の製造業のキーテクノロジーとして、半導体デバイス、光デバイス、バイオ、エネルギーなど広い分野で研究が盛んに行われており、物理学会でも近年多くの発表があります。

しかし、巷にあふれるナノテクの解説で気になるのは、

『ボトムアップのナノ構造物創製には自己組織化を利用する』

というような安易な記述です。パターンを作る原理はあまりに単純化されており、素直に納得できません。そうすると、さらに、

『そもそも自己組織化は本当にボトムアップの決定打なのか？』

『自己組織化する系をコントロールするにはどうしたらいいのか？』

『自己組織化を示す新しい系というのはどうやってさがすのか？』

という疑問が湧いてきます。

格子欠陥・ナノ分科の中心課題の一つである材料の組織形成では、ミクロンオーダーの組織の生成を電子、原子レベルから捉えるマルチスケールの研究が長年月をかけて試みられてきました。そこで利用されるシミュレーション手法は図1に示したように、電子レベルの第一原理計算、原子レベルの分子動力学、組織レベルのフェーズフィールド法、バルクレベルの有限要素法などそれぞれのスケールでは十分に使える段階にきています。しかしスケール間の情報共有、交換がスムーズに行なえないと

いわゆる『マルチスケール問題』が生じているのも事実です。

組織形成過程で考慮される相変態に伴う系の核生成・成長過程は、ボトムアップのナノ構造物生成機構においても同じです。ナノテク分野ではスケールの違いがほとんどないため、マルチスケール問題が生じにくいはずですが、研究者間の視点の違いによる障壁が今後ますます高くなるという懸念もあります。そこで、ナノテクのキーとなる現象である自己組織化現象を、マルチスケールの視点から検討することが、その黎明期にこそ必要と考えます。

本シンポジウムでは、まず自己組織化を使った具体例として、デバイス開発における半導体量子ドットを荒木から、自発的分子の組合せによる一次元ナノ構造などのナノ構造創成の現状を清水から紹介していただきます。自己組織化のシミュレーションに関しては、まず寺倉から全般的にレビューしていただきます。後半ではマルチスケールのシミュレーションから、組織レベルを扱うフェーズフィールド法の適用例と課題について小山、齊藤から、第一原理計算から抽出した原子間相互作用を用いた組織形成シミュレーションについて星野から、第一原理と分子力学の融合法について森下から報告していただきます。

このようなマルチスケールの視点に基づいた講演と議論が、“自己組織化を利用した新しいナノ構造物の創製”の指導原理の確立の一助となることを願っています。

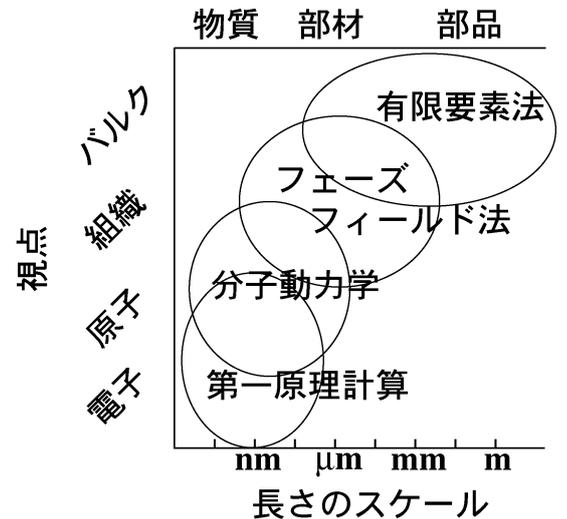


図1:材料開発の各種スケールにおけるシミュレーション手法の視点と対象.