

第一原理計算によるナノスケールの 光・スピントロニクスデバイスデザイン

First-principles design of nanoscale optical and spintronics devices

植本光治

国立大学法人神戸大学 大学院工学研究科

1. 研究目的

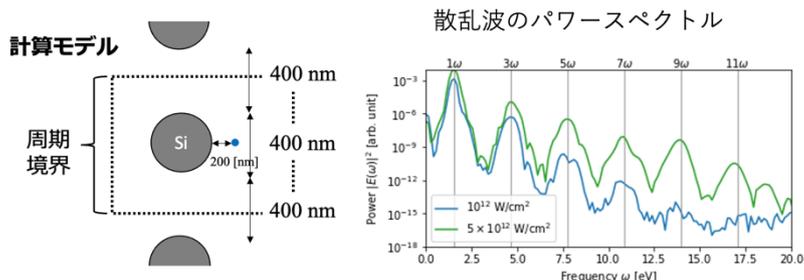
本研究課題では、第一原理計算手法にもとづく大規模計算を駆使し、ナノスケールの物質の光学特性、磁性、伝導特性などを予測し、「光波長数変換デバイス」、「光スイッチ」、「スピントロニクスデバイス」への応用の可能性を探る。また、協力関係にある国内の実験グループと連携し、実験の解析や理論予測の実験的実証を試みる。

2. 研究成果の内容

ナノ構造における非線形降光学応答の第一原理的数値シミュレーション

・**薄膜への斜方入射の理論計算モデル**：本研究では半導体ナノ薄膜へのレーザーパルス斜め入射時にあらわれる非線形光学効果の計算手法構築を行っている。2021年度まで、斜方伝搬するパルスの波動方程式を一次元方程式に変換するフォーマリズムを構築し、シリコンナノ薄膜によるブリュースター反射の非線形効果のデモンストレーションを行っており。2022年には同成果に関する論文を **Optics Express** 誌へ投稿[1]した。

・**半導体 Bloch 方程式と Maxwell 方程式の結合手法による任意形状三次元なフォトニクスシミュレーション手法の構築**：本課題では、筑波大計算科学研究センターを中心に開発されているオープンソースの光科学シミュレータ「SALMON」コードの向けに Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーションの実装・機能拡張を行った。大規模な3次元構造物において TDDFT の適用は現状では計算量的に困難なことから、より高速な「半導体ブロッホ方程式(SBE)」をもちいたマルチスケール法ソルバーを開発し実装を行なった。近年、全誘電体(all-dielectric)ナノ構造による非線形フォトニクスが盛んに研究されている。本課題では、前述の Maxwell+SBE マルチスケール法をシリコンナノ粒子アレイや、ナノ周期構造をもつ表面の光励起シミュレーションに適用している。(下図：シリコンナノ円柱アレイによる高調波発振の例)

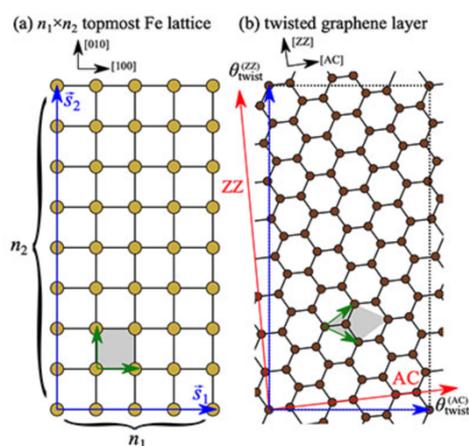


二次元物質における非線形光学効果の第一原理予測

グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイドなどの二次元物質はその特異な電子状態により、巨大かつ高速な非線形応答（可飽和吸収）を見せる。本研究では、2021年度までグラファイトや硫化チタン(TiS₂)などをターゲットに可飽和吸収の第一原理予測を試みており、2022年度は対象をリン二次元物質(Phosphorene)などの異方性を示す二次元物質へと広げ可飽和吸収の計算をすすめている。

二次元物質・強磁性合金のヘテロ接合界面における電子物性・磁性の第一原理予測

鉄・パラジウム(FePd)は、L1₀秩序構造をもつ強磁性合金であり、高い垂直磁気異方性と低い磁気摩擦定数をもつため、スピントロニクスデバイス材料への応用が期待されている。FePdをMRAMの磁気トンネル接合素子(MTJ)として利用するために、FePdにグラフェン等の二次元物質を積層した構造(FePd/Gr)が最近実験的に合成され、応用上良好な性質を持つことが報告されている。一方、これまでの実験では



面の原子スケールの詳細な界面構造はまだ明らかとなっていない。本研究では第一原理計算を駆使しエネルギー的に安定と考えられる界面構造の予測するため、FePd(001)面上の炭素原子配置を網羅的に生成し、ひずみの小さなモデルを自動探索する方法を構築しており、 $-0.19 \sim -0.22$ eV/atom の大きな吸着エネルギーを持つツイスト界面構造を見出した。2022年度は同成果を論文化し **Journal of Applied Physics** 誌へ投稿[2]している。

レーザー加工プロセスのシミュレーション

ダイヤモンドの窒素空孔(NV)中心などの格子欠陥は、近年、超高感度センサや量子情報処理におけるビットとして注目を集める対象である。本研究では、実験グループと共同でフェムト秒レーザーパルス照射によるダイヤモンド NV 中心生成の効率の解析を行なっている。2022年度は、**実験と TDDFT による理論計算を合わせた成果論文を Optics Express 誌へ投稿[3]**している。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

上記、課題中の大規模なナノ構造物における第一原理電子ダイナミクス計算の実施には高並列な計算資源が必要であり、本共同利用プログラムは達成に不可欠であったと考える。

4. 今後の展望

「ナノ構造における非線形降光学応答の第一原理的数値シミュレーション」で構築した手法をさらに高速化・高精度化をすすめる。さらに、固体表面のレーザー加工時に生じる微細表面構造形成のシミュレーションなどへの応用を計画している。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- [1] Mitsuharu Uemoto, Kazuhiro Yabana "*First-principles method for nonlinear light propagation at oblique incidence*", *Optics Express* **30**(13) 23664-23664 (2022)
- [2] Mitsuharu Uemoto, Hayato Adachi, Hiroshi Naganuma, Tomoya Ono "*Density functional study of twisted graphene $L1_0$ -FePd heterogeneous interface*", *Journal of Applied Physics* **132**(9) 095301-095301 (2022)
- [3] Y. Shimotsuma, K. Kinouchi, R. Yanoshita, M. Fujiwara, N. Mizuochi, M. Uemoto, M. Shimizu, K. Miura "*Formation of NV centers in diamond by a femtosecond laser single pulse*", *Optics Express* **31**(2) 1594-1594 (2023)

(2) 学会発表

- [4] 植本光治, 木原康輝 「非線形ナノフォトニクスのための第一原理シミュレーション」 第70回応用物理学会春季学術講演会（上智大学） 2023年3月17日
- [5] 植本光治, 安達隼人, 新屋ひかり, 永沼博, 小野倫也 「FePd(001)/グラフェン磁気トンネル接合における磁気抵抗率の第一原理伝導計算」 第16回強的秩序とその操作に関わる研究（東京大学） 2023年1月28日
- [6] 木原康輝, 植本光治 「第一原理計算による III-V 族化合物半導体の非線形光学効果のシミュレーション」 第33回光物性研究会（大阪大学） 2022年12月10日
- [7] Mitsuharu UEMOTO 「Ab-initio study of nanoscale optical and electronics devices」 The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba（つくば国際会議場） 2022年10月14日
- [8] 植本光治, 安達隼人, 新屋ひかり, 永沼博, 小野倫也 「FePd/グラフェンの異種結晶界面状態の第一原理計算」 強的秩序とその操作に関わる第15回夏の学校（石巻グランドホテル） 2022年9月23日
- [9] 植本光治, 安達隼人, 永沼博, 新屋ひかり, 小野倫也 「FePd/グラフェンのヘテロ界面の電子・磁気状態の第一原理計算」 第83回応用物理学会秋季講演会（東北大学） 2022年9月23日
- [10] 木原康輝, 植本光治 「第一原理計算による固体物質の非線形光学効果のシミュレーション」 第83回応用物理学会秋季講演会（東北大学） 2022

年 9 月 21 日

(1) その他

プレスリリース「スピントロニクス向け強磁性合金材料と二次元物質間の異種結晶界面の状態を第一原理計算で予測」https://www.kobe-u.ac.jp/research_at_kobe/NEWS/news/2022_09_06_01.html

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus			
Wisteria/BDEC-01	○		
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			