

新しい物質構造による室温超伝導に関する研究の動向調査

(財) 高度情報科学技術研究機構 中村 賢

超伝導現象は、1911年にカマリン・オネスにより水銀 (Hg) の電気抵抗が絶対温度 4.2K 付近で急激に消失する現象として発見された。この抵抗が消失する温度、すなわち、超伝導現象が発現する温度は臨界温度と呼ばれ、通常 T_c と書かれる。その後、鉛 (Pb) のドーナツ型リングを超伝導状態に保てば、1年後でもまったく減衰しないことが確かめられた。超伝導現象は「直流電気抵抗の消失」、「マイスナー・オクセンフェルト効果、あるいは単にマイスナー効果」、「ジョセフソン効果」の3つの性質によって特徴付けられる。この3つの性質を利用して他の材料では実現することはできない様々な応用が可能となる。実際に使われている例として、電気抵抗ゼロの応用 (超伝導電磁石、トカマク型核融合炉、磁気浮上式鉄道)、マイスナー効果の応用 (磁気シールド、ベアリング)、ジョセフソン効果の応用 (生体磁気計測、電波天文台、テラヘルツ能動素子)、などがある。

しかし、超伝導現象が低温でしか起こらないことが広範な実用化への妨げとなっていた。1986年の銅酸化物超伝導体の発見およびそれに続く研究により、超伝導臨界温度はそれまでの 23K からいっきに 140K にまで上昇し、液体窒素 (77K) を使った実用化が視野に入り、エネルギー、資源、環境などの現在の社会が抱えている問題を解決できる有効な手段として期待されるようになった。しかし、140K の T_c では応用も広げるためにはまだ不十分である。超伝導応用の裾野を広げる最大の起爆剤は、 T_c を室温にまで上げることである。室温超伝導は核融合と並んで 21 世紀に達成すべき最も重要な課題である。

20 世紀の超伝導材料探索の歴史を振り返ってみると、初期に調べられた材料のほとんど単体の金属で、元素超伝導であるが、その後、遷移金属元素・合金・金属間化合物、炭化物、窒化物、有機物、分子性結晶などで超伝導物質が発見されている。そして BCS 理論による超伝導機構の解明、銅酸化物高温超伝導体の発見などに伴い、超伝導物質探索の指針も大きく変わってきている。

そんな中、実験研究者の大規模シミュレーションによせる期待は大きく、特に「有力な超伝導物質を対象にした臨界温度 T_c のシミュレーション結果を公開してほしい」と望む声が多い。

一方、現在では従来の電子・格子相互作用の機構であれば、密度汎関数法で電子状態と電子・格子相互作用を求め、 T_c を決定する方法で、10~20%程度の精度で臨界温度をシミュレーションできるようになってきている。大規模シミュレーションで超伝導になると予想されている物質なら、良質な試料の合成方法の探求に研究者は力を注ぐことができ、超伝導物質なのか非超伝導物質なのかの確認ミスを大幅に減らすことができる。

銅酸化物高温超伝導体に関しては、BCSの壁をはるかに凌ぐ T_c を持つことから、高温超伝導発現機構として、従来の電子・格子相互作用とは異質のスピンを媒介とする理論が注目されている。しかしながら、最近の中性子散乱や Spring8 の測定結果によ

ると、高温超伝導体にホールをドープすると格子振動の分散はある波長のところで大きい変化を受けている。これはホールと格子の間に強い相互作用が働いていることを示している。従来の電子・格子相互作用の取り扱いでは格子変位が小さく、電子・格子結合が線形なうえ調和近似が有効であると仮定している。ところが高温超伝導体の場合は、格子振動の非調和性や電子・格子結合の非線形性が重要なとの報告がある。すなわち、強い電子・格子相互作用を含む新しい高温超伝導発現機構の研究が必要である。

このような状況を鑑みると、強い電子・格子相互作用を含め解析するために、電子と格子の運動をともに含んだハミルトニアンで記述される系を出来るだけ正確に解くことが、高温超伝導の発現機構の解明のみならず、超伝導物質探索の近道と考えられる。このためには強い電子・格子相互作用による電子系と格子系の交互作用による電荷ゆらぎをシミュレーションすればよい。この理論に基づいた物質探索には、数千個以上の原子を対象にした量子力学的な大規模シミュレーションが不可欠で、その実現には大規模で高性能なスーパーコンピューターが必要になる。

このように、室温超伝導の研究開発においては、大規模シミュレーションが必須となる。そのような大規模シミュレーションが必要とする大規模計算資源の開発は、2008年には1ペタフロップス、2012年には10ペタフロップの大規模超並列計算機が稼動する見込みである。このような計算資源の発展に伴い既に欧米では、「実験先行で理論はその後を追いかけるだけ」といった従来の研究方法に変化が現れ、シミュレーションにより実験を先導するという新しい科学技術のあり方へ向かっている。

米国はいうまでもなく世界第一位のスパコン大国であり、ナノ・バイオ、物質の研究開発において、理論・実験・シミュレーションを一体とした研究体制を国全体で整備しつつある。また 欧州でも、ペタスケールコンピュータによる大規模シミュレーションの活用の方向へ動きが加速しており、高温超伝導の発現機構の解明や新しい超伝導材料の開発のためのソフトウェア開発がますます盛んになるだろう。

このように、高性能計算機を利用した大規模シミュレーションが、実験に先駆け結果の予言を行ない実験を先導するような研究体制に移行していく動向である。世界に遅れをとらないためには、そのための準備に早急に取り組まなければならない。

今回の調査結果をまとめると以下のようなになる。

・超伝導理論

銅酸化物高温超伝導体が発見され、雨後の竹の子のように出てきた超伝導理論も実験と言うふるいかけられ、銅酸化物高温超伝導体に関しては、スピンゆらぎ機構によるものだと考える研究者は多い。しかし、スピンゆらぎ機構だけでは説明のつかない実験結果もあり、また銅酸化物高温超伝導体では無視されてしまったフォノン機構が重要な働きをしているとの見方も出てきている。

また国内外での聞き取り調査を行ってわかったことだが、「スピンゆらぎ機構が酸化物高温超伝導体特有のフェルミ面をつくり、超伝導につながる引力の起源はフォノン機構にある」と考える理論家は決して少なくない。

今後は、フォノン機構をも取り入れ、自由度が倍に増えた系を扱っていく必要があるだろう。そのためには、現在の計算機能力ではとても足らず、計算機能力の向上が急務となるものと思われる。そうすることによって、これまでに見つかっていない新しい超伝導機構が発見されるかもしれない。

・超伝導実験

高温超伝導の発現機構にせまる実験結果が出ている一方、それらの実験結果の間に矛盾が存在し、高温超伝導の発現機構の確定にはまだまだ時間がかかりそうである。

より高い臨界温度をもつ超伝導材料の開発に力を入れている実験研究者の大規模シミュレーションによせる期待は大きい。たとえ対象にしている物質の超伝導機構がフォノン機構でなくても、フォノン機構によるシミュレーションで臨界温度 T_c が予想されれば、その物質が超伝導になることは保障されており、あとは最低の「1年に一度、見込みのある物質を対象にした精度の高いフォノン機構によるシミュレーション結果が発表されるだけで、実験家のモチベーションが上がり、超伝導材料の開発に弾みがつく」というのが多くの実験家の意見の一致するところである。

・大規模シミュレーション

ドイツの Gross 教授を代表にする、ヨーロッパの第一原理計算研究者たちにより、密度汎関数法を超伝導状態にまで拡張した理論と計算コードが開発されている。現時点では、単原子からなる物質に対するシミュレーションしか実行できていないが、計算能力の向上とともに、銅酸化物高温超電導体のような多くの種類の原子を含む系にも適用かのようになるだろう。

このような近年の膨大な研究データの蓄積と予言能力を備えた大規模シミュレーション手法の開発を背景に、高 T_c をもつ超伝導体を理論的に設計して物質探索への指針を提供することは今後重要な課題となるものと予想される。しかし現在の計算機能力では不足で、理論設計から超伝導体を実現するためには、計算機能力の向上とその計算能力を効果的に使う計算科学技術の高度化が必須条件になる。このような計算資源の開発と計算科学技術の高度化は欧米、日本、そしてアジア諸国でも最優先の課題として取り組まれている。したがって、世界に遅れをとらないために、高性能計算機を利用した大規模シミュレーションにより、実験に先駆け結果の予言を行ない実験を先導するような研究体制を世界に先駆け整備していく必要がある。