

戦略的国際科学技術協力推進事業（日本－フィンランド研究交流）

1. 研究課題名：「大規模分子動力学シミュレーションと放射光 X 線を用いた高速相変化材料の構造解析および新規材料設計」
2. 研究期間：平成 21 年 4 月～平成 24 年 3 月
3. 支援額： 総額 18,057 千円
4. 主な参加研究者名：

日本側（研究代表者を含め 6 名までを記載）

|              | 氏名   | 所属                | 役職    |
|--------------|------|-------------------|-------|
| 研究代表者        | 小原真司 | (公財) 高輝度光科学研究センター | 主幹研究員 |
| 研究者          | 尾原幸治 | (公財) 高輝度光科学研究センター | 協力研究員 |
| 研究者          | 臼杵 毅 | 山形大学 理学部          | 教授    |
| 研究者          | 山田 昇 | パナソニック(株)         | 嘱託    |
| 研究者          | 松永利之 | パナソニック(株)         | 主任技師  |
| 研究者          | 高田昌樹 | 理化学研究所            | 主任研究員 |
| 参加研究者 のべ 7 名 |      |                   |       |

フィンランド側（研究代表者を含め 6 名までを記載）

|              | 氏名             | 所属          | 役職    |
|--------------|----------------|-------------|-------|
| 研究代表者        | Jaakko Akola   | タンペレ工科大学    | 特任教授  |
| 研究者          | Robert O Jones | ユーリッヒ総合研究機構 | 客員研究員 |
| 研究者          | Julen Larrucea | ユバスキュラ大学    | 博士研究員 |
| 研究者          | Janne Kalikka  | ユバスキュラ大学    | 研究協力員 |
| 参加研究者 のべ 4 名 |                |             |       |

5. 研究・交流の目的

本研究は、DVD、Blu-ray 材料といった高速相変化材料の原子配列および電子状態を調べることによりその動作メカニズムを明らかにし、さらに「記録相の安定性」、「高速書き換え」と言った機能発現に資する各原子の役割を明らかにする。そして、得られた知見から新規材料設計における開発指針を導き出すことを目的とする。そのために、日本側は、大型放射光施設 SPring-8 における高輝度放射光を用いた実験により精密な構造情報を取得し、フィンランド側が大規模分子動力学シミュレーションによる構造モデルを構築する。そして、国際交流を通じた実験・理論の融合からこの目的を達成する。

6. 研究・交流の成果

6-1 研究の成果

国際交流により代表的な DVD 材料である  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  (GST)、 $\text{Ag}_{3.5}\text{In}_{3.8}\text{Sb}_{75.0}\text{Te}_{17.7}$  (AIST) の記録相のアモルファス構造および電子状態を実験（日本側）および理論（フィンランド側）の組み合わせにより世界ではじめて明らかにすることができた。そして、GST、AIST のアモルファス構造（記録相）の構造と結晶構造（未記録相）を比較することにより、アモルファス相から結晶相への高速相変化過程を考察し、実験事実と矛盾のないメカニズムを構築した。さらに、SPring-8 の元素選択性のある X 線異常散乱法を応用することで、相変化材料の記録相の安定性と高速書き換えを実現するための各構成元素の役割を明らかにした。以上より、二つの実用相変化材料である GST 系、AIST 系に共通して含まれる Sb の役割を明らかにすることができ、Sb 系材料のさらなる開発、および代替材料の探索と言った設計指針を提出することができた。

## 6-2 人的交流の成果

最先端の研究交流に若手研究者（当財団の協力研究員）を参加させた結果、着任後の最初の第一著者の論文が *Advanced Functional Materials* 誌に掲載され、若手の人材育成という観点でも成功を収めた。フィンランドとの研究交流の成果を論文および学会で広くアピールしたことにより、その交流は他大学にも波及し、日本側の共同研究者のグループからフィンランドの Akola グループへ、若手研究員を平成 24 年度 10 月より外国人特別研究員として派遣することとなった。

今回の交流やその成果は大型放射光施設 SPring-8 を利用しているグループにも高く評価され、日本の大学の研究グループとフィンランドの Akola グループとの共同研究へと発展した。

今回の交流やその成果をもとに、高輝度放射光と大規模理論計算を組み合わせた高屈折酸化物ガラスの機能発現メカニズムの解明に関する共同研究を計画している（科学研究費補助金基盤研究(B)（平成 24 年度-平成 26 年度）として採択された）。

## 7. 主な論文発表・特許等（5 件以内）

相手国側との共著論文については、その旨を備考欄にご記載ください。

| 論文<br>or<br>特許 | ・論文の場合： 著者名、タイトル、掲載誌名、巻、号、ページ、発行年<br>・特許の場合： 知的財産権の種類、発明等の名称、出願国、出願日、<br>出願番号、出願人、発明者等   | 備考                         |
|----------------|--|----------------------------|
| 論文             | T. Matsunaga, J. Akola, S. Kohara, T. Honma, K. Kobayashi, E. Ikenaga, R. O. Jones, N. Yamada, M. Takata, and R. Kojima, "From local structure to nanosecond recrystallization dynamics in AgInSbTe phase-change materials", <i>Nature Materials</i> , <b>10</b> , 129-134 (2011).   | 相手国側との共著<br>分野トップレベル雑誌への掲載 |
| 論文             | T. Matsunaga, N. Yamada, R. Kojima, S. Shamoto, M. Sato, H. Tanida, T. Uruga, S. Kohara, M. Takata, P. Zalden, G. Bruns, I. Sergueev, H. C. Wille, R. P. Hermann, and M. Wuttig, "Phase-Change Materials: Vibrational Softening upon Crystallization and Its Impact on Thermal Properties", <i>Advanced Functional Materials</i> , <b>21</b> , 2232-2239 (2011).   | 相手国側との共著<br>分野トップレベル雑誌への掲載 |
| 論文             | K. Ohara, L. Temleitner, K. Sugmito, S. Kohara, T. Matsunaga, L. Pusztai, M. Itou, H. Ohsumi, R. Kojima, N. Yamada, T. Usuki, A. Fujiwara, and M. Takata, "The Roles of the Ge-Te Core Network and the Sb-Te Pseudo Network During Rapid Nucleation-Dominated Crystallization of Amorphous Ge <sub>2</sub> Sb <sub>2</sub> Te <sub>5</sub> ", <i>Advanced Functional Materials</i> , DOI: 10.1002/adfm.201102940 (2012). | 分野トップレベル雑誌への掲載             |
| 論文             | J. Kalikka, J. Akola, R. O. Jones, S. Kohara, and T. Usuki, "Amorphous Ge <sub>15</sub> Te <sub>85</sub> : density functional, high-energy x-ray and neutron diffraction study", <i>Journal of Physics: Condensed Matter</i> , <b>24</b> , 015802(12pp) (2012).  | 相手国側との共著<br>雑誌カバーページに掲載    |
| 論文             | J. Akola, R. O. Jones, S. Kohara, T. Usuki, and E. Bychkov, "Density variations in liquid tellurium: Roles of rings, chains, and cavities", <i>Physical Review B</i> , <b>81</b> , 094202(7pp) (2010).   | 相手国側との共著                   |