

戦略的創造研究推進事業CREST

研究領域「新たな光機能や光物性の発現・利活用を基軸とする次世代フォトニクスの基盤技術」
研究課題「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」

研究成果

1万原子を超える物質の超高速光応答を「富岳」で計算ミクロの現象解明に道、ソフトの標準化目指す

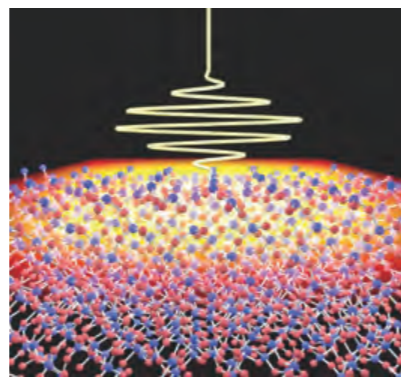
物質に光を当てると物質中の電子とイオンが振動し、この揺れが原因で光の屈折や反射が起こります。これらの現象の解明には、光を照らした物質中で起こる電子やイオンのミクロな運動を第一原理計算法で導き出せる、オープンソースソフトウェアSALMONによる計算が役立ちます。筑波大学計算科学研究センターの矢花一浩教授らの共同研究グループが中心となってSALMONを開発し、2017年に最初のバージョンを公開しました。

今回、共同研究チームはスーパーコンピュータ「富岳」を使って、1万を超える原子を含むナノ物質の光応答の第一原理計算に、世界で初めて成功しました。具体的には、SALMONに高度なチューニングを施し、富岳の全システム

の約6分の1のCPUを用いて、10万以上のプロセスからなる並列計算をしました。これにより、厚さ約6ナノメートルの酸化ケイ素ガラス(SiO₂)の薄膜と強いパルス光の非線形光応答を調べることができました。その結果、ガラスが不透明になり、光の素早い吸収が起きることがわかりました。さらに反射波や透過波には、入射光の振動数の数倍～数十倍の振動数を持つ高次高調波の発生が確認できました。

SALMONは、光のパルス波形や物質の構造を自由に設定してシミュレーションすることで、実験で測定することが難しい、ミクロな空間で電子やイオンの運動がもたらす現象の解

明などに貢献します。今後、多様な光科学現象に対して、富岳をはじめとするスパコンを用いた計算をすることで、原子レベルから現象を明らかにする有効性を示し、SALMONが世界標準のソフトウェアとして広く利用されることを目指します。



光と物質の相互作用のイメージ。多数の原子からなる酸化ケイ素の表面に、パルス光が入射し、光のエネルギーが表面の電子やイオンに移行する様子を表している。

戦略的創造研究推進事業CREST

研究領域「微小エネルギーを利用した革新的な環境発電技術の創出」
研究課題「スマートメカトロニクスを基盤とした振動発電素子の開発」

研究成果

超省エネでIoT制御、生物の神経回路を参考に半永久的に動作する小型デバイスの開発に光

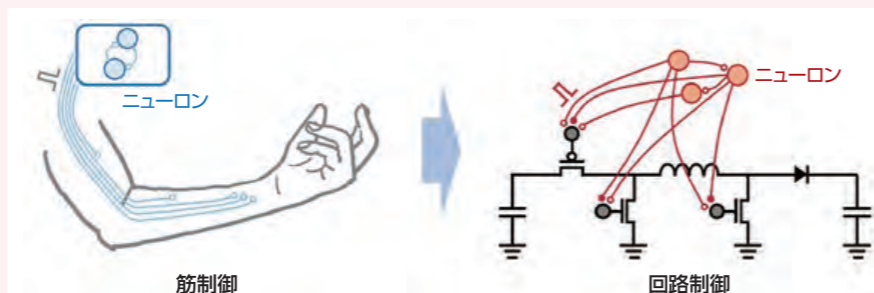
あらゆるモノがインターネットに接続するIoTでは、最末端に配置されたセンサーなどのデバイスを用いて外部の情報を集め、無線で送信しなければなりません。しかし最末端デバイスへの電源供給は難しい上に、使える電力には厳しい制限があり、将来的には1マイクロ(マイクロは100万分の1)ワット未満の電力でデバイスを制御する技術が求められています。

生物の神経回路は、個々の神経細胞(ニューロン)が必要な時に必要な場所だけ動作することで、電力の低消費と高度な制御が実現できています。九州大学大学院システム情報科学研究所の矢嶋赴彬准教授の研究グループはこの生物の神経回路を参考に、独自に設計したニューロン回路を用いて、IoTデバイスを

超省エネ制御する技術を確認しました。具体的には、余分な機能を省き局所的に電子回路のタイミング制御に特化することで、世界最小の消費電力である1.2ピコ(ピコは1兆分の1)ワットで動作するニューロン回路を作製しました。さらに、この回路の応用例として、IoTデバイスの標準機能である直流電圧変換を1ナノ(ナノは10億分の1)ワット程度の超低消

費電力で行えることも示しました。

この成果は、センサー・無線・電源供給などIoTデバイスで必要とされるさまざまな機能に応用できます。これらを数ナノワットの超低消費電力で制御できれば、光や振動などを利用する微小な「環境発電」によって、半永久的に動作する小型IoTデバイスも実現可能になるため、さらなる研究の進展が望まれます。



ニューロン回路を使って無駄なくIoTデバイスを制御する仕組み(Scientific Reports 12, 1150(2022)より引用)

戦略的創造研究推進事業さきがけ

研究領域「革新的光科学技術を駆使した最先端科学の創出」
研究課題「光トラップ技術による量子流体力学の開拓」

研究成果

極低温で光ピンセットが微粒子を捕捉 超流動ヘリウムの性質解明に手掛かり

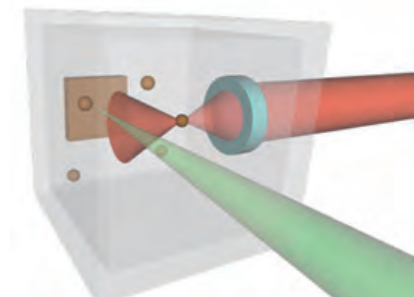
日常生活においてピンセットで小さな物をつまむように、科学の世界では微粒子を捕捉するのに、光ピンセットが使われています。集光したレーザー光の焦点付近に強い電場勾配が発生することを利用した技術で、2018年にノーベル物理学賞を受賞しました。すでに医学・生物・化学・物理などの分野で利用されており、水溶液中や細胞中、真空中や超高压下など、適用範囲が広い点も魅力ですが、極低温で適用した例はありませんでした。

今回、大阪大学大学院基礎工学研究科の葛輪陽介助教、芦田昌明教授らの研究グループは、高強度レーザーパルス光でナノサイズの微粒子を作製するレーザーアブレーション技術と、一体成型非球面レンズをマイナス271.75度

の液体ヘリウム中に導入し、極低温で光ピンセットがナノ微粒子を捕捉できることを世界で初めて示しました。捕捉した微粒子の運動状態を観測することで、粘性が非常に低く超流動の性質を持つ液体ヘリウムの性質を解明する手掛かりも得られました。

加えて、常温の光ピンセットでよく用い

られている金や透明で捕捉力が高いとされる酸化亜鉛が極低温下でも使えることを実証できたことも、重要な成果です。今後は長年蓄積してきた光ピンセット技術の知見やノウハウを極低温でも活用し、新たな発見へとつなげるとともに、超流動ヘリウム中の量子化された渦を操作する応用研究の進展が期待されます。



非球面レンズで焦点を結んだ近赤外レーザー光(赤色)による光ピンセットが、高強度レーザー光(緑色)で作った微粒子を捕捉する模式図

ムーンショット型研究開発事業

ムーンショット目標2「2050年までに、超早期に疾患の予測・予防をすることができる社会を実現」
研究開発プロジェクト「臓器連関の包括的理解に基づく認知症関連疾患の克服に向けて」

研究成果

パーキンソン病の運動療法を検証 軽度の労働が進行を長期的に抑制

パーキンソン病は、脳内でドーパミンという神経伝達物質が不足することで、手足の震えや筋肉のこわばり、運動量の低下、さらには身体バランスが悪くなり転びやすくなるといった身体症状があらわれる病気です。症状を改善させる対症療法は数多くありますが、原因がわかっていないため、疾患の進行を抑制する有効な治療法はまだまだありません。また近年、運動療法に注目が集まっているものの、科学的な検証は不十分なままでした。

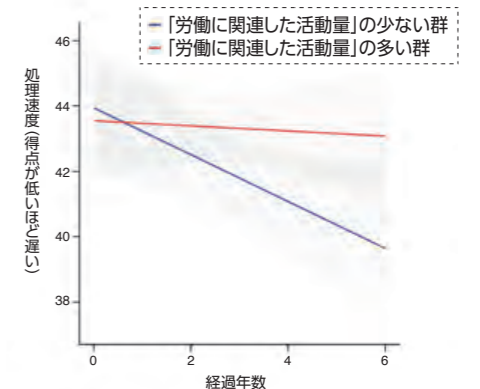
そこで京都大学大学院医学研究科の高橋良輔教授らの研究グループは、国際多施設共同観察研究のデータを用いて、237人のパーキンソン病患者のデータを分析し、運動療法の5~6年にわたる長期的な効果を検証しました。そ

の結果、制限時間内に記号に対応する数字を記入する処理能力検査において、1日に2~3時間程度の労働に関連した活動を継続したグループでは、長期間にわたって処理速度の低下を抑えられたことがわかりました。

他にも、歩行や姿勢の安定性の低下に対しては運動習慣、日常生活における動作機能の低下に対しては家事習慣で、同様の進行抑制効果が期待できることを見いだしました。これらの結果は、日常的な身体活動量や運動習慣の継続が、パーキンソン病の症状改善に長期的な効果をもたらす可能性や患者の状態に合わせた治療の重要性を

示唆しています。研究チームは今後も人におけるビックデータを活用し、認知症発症の要因となる神経変性の予防に向けた研究を進めていきます。

「労働に関連した活動量」以外の背景因子を一致させた二群



「労働に関連した活動量」と「処理速度低下の進行」について、その他の背景因子を一致させて相関を調査した結果、赤線で示した活動量の多いグループは、青線で示した活動量の少ないグループに比べ、処理速度の低下を抑えられていることがわかる。