

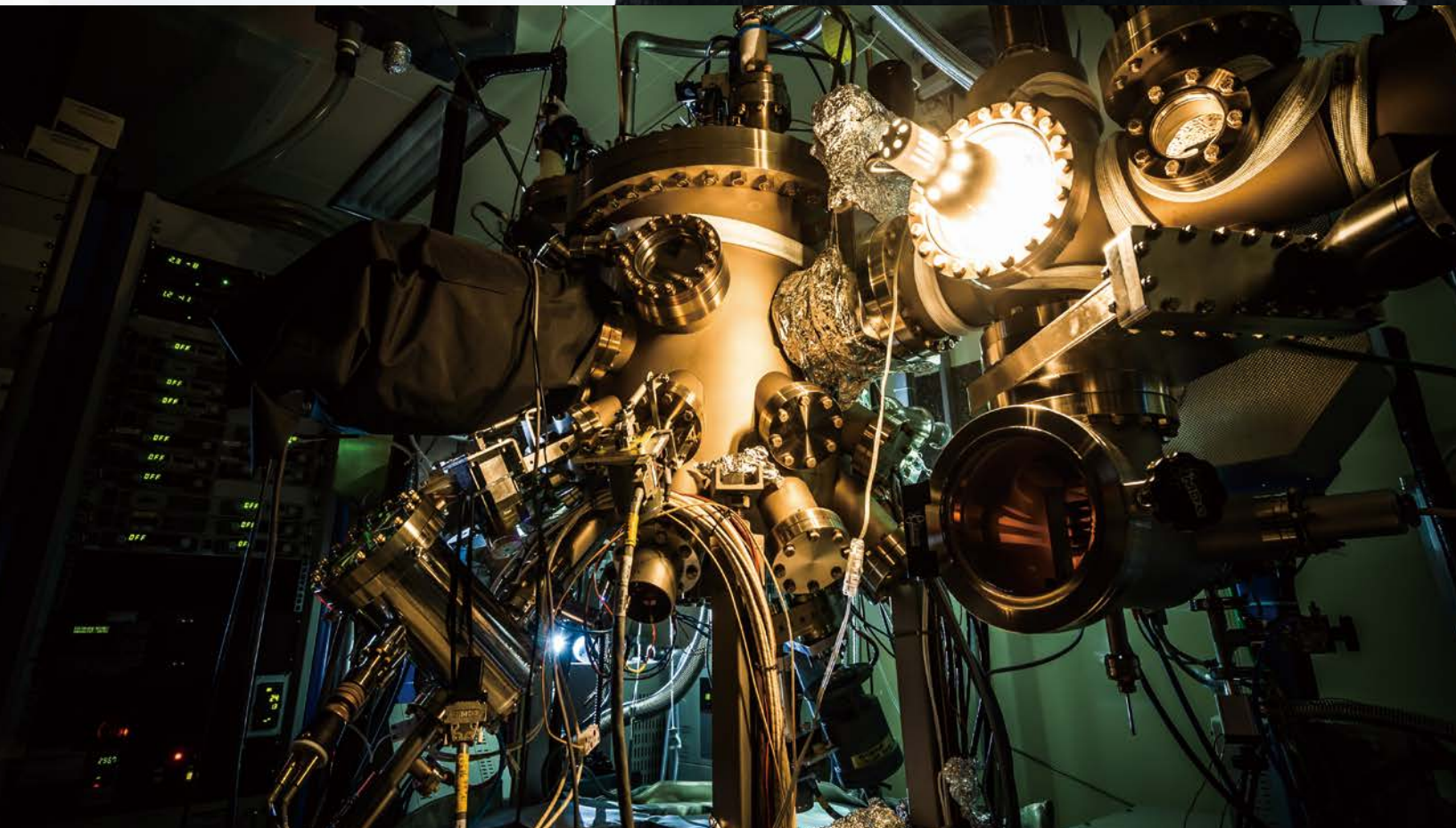


機能性材料研究拠点①

「機能X」を

創り出せ

豊かで快適な社会に導く新材料



「機能X」を 創り出せ

豊かで快適な社会に導く新材料

はるか遠い昔、私たちの祖先が残した躍動感あふれる洞窟壁画。
長い時を経てなお、人々の心を揺さぶる作品を生み出したのは、
人類の持つ創造力と、絵の具という材料だ。

土や鉱物を砕いたものが持つ、
光を反射して色を発現する“機能”の発見があったからこそ、
色彩豊かな絵画が生まれ、現代にてその壮大さを感じることができる。

私たちはこれまで、材料が持つ機能を巧みに扱い、
生活を、社会を彩り、新たな価値を創造してきた。
白熱電球やLED、トランジスタ。
新たな機能を持った材料は、時に社会のあり方を変えるだけのチカラを持つ。

そして今、さらに豊かで快適な社会を目指し、
人類が直面するさまざまな課題を解決するため、
社会を変えるカギとなる機能＝「機能X」を持つ材料の探求を続けているのが、
有機・無機・金属の膨大な知見を有した、NIMS「機能性材料研究拠点」の研究者たちだ。

小型・省電力な究極の半導体、盗聴不可能な通信デバイス——

物性の根本的な理解と豊かな創造力、
そして電子や分子のふるまいを制御する高度な技術を武器に、
彼らは、次なる「機能X」を創り出す。



世界を変えた材料、未来を担う材料



機能性材料研究拠点は、有機・無機・金属の専門家が集まるNIMS最大の拠点だ。連綿と受け継がれてきた知見やノウハウを基に、革新的な材料を創り出してきた。今回は、この一大拠点を率いる大橋直樹拠点長に、機能性材料開発の潮流、そして拠点の強みを聞いた。

高性能や軽薄短小、省エネに貢献する機能性材料

—そもそも機能性材料とは、どのような材料のことを言うのでしょうか。

“機能”という言葉が示すとおり、人間の生活において必要な特徴をそなえた材料のことです。ですから、すべての材料は「機能性材料」と呼びうるのですが、中でも、“光や電子、熱など外からの刺激に対して物理的あるいは化学的に応答する材料”、これが我々の「機能性材料」の定義です。もう1つのくくりが「構造材料」です。構造材料には外からの刺激で変化しない安定性が求められるという点で大きな違いがあります。

特に身近なものとして、古くは壁画などに使われた絵の具も機能性材料と考えて良いでしょう。絵の具に含まれる粒子は、外からの光を反射・吸収して発色す

る“機能”を有することから、光学機能材料の1つに数えられます。

その他、ガラスやプラスチックなど多々ありますが、実際に「機能性材料」という言葉が使われるようになったのは、おそらくトランジスタなどの半導体素子が登場し始めた頃ではないでしょうか。以来、機能性材料はコンピュータなどデジタル機器の高性能化や軽薄短小を目的に研究開発が進められてきました。スマートフォンの発展はその典型です。

近年、社会に変革をもたらした機能性材料としては、電気を通すポリマーや、青色LEDの半導体が挙げられます。いずれも日本人による発明でノーベル賞に輝いていることは周知のとおりです。

—時代とともに求められる材料は変わってきているかと思いますが、現在ほどのような機能性材料の開発が進んでいるのでしょうか？

材料開発においてはこれまで、科学的な新発見が種となり、材料が創り出されてきました。そして今、科学技術が進歩し、社会が豊かになるにしたがい、社会の課題やニーズが生まれ、今度はそこを出発点にした材料開発が求められるようになってきています。

現在、とりわけ急務なのが、省電力化や熱効率改善によるCO₂排出量の削減です。コンピュータの放熱の抑制、従来利用されずに棄てられてきたエネルギーの有効活用など、「どれだけ少ない電力で機能するか」は、機能性材料開発における重要なキーワードとなっています。と同時に、より高速な処理や安全な通信といった、素子の高性能化に向けた探求も続いています。

我々、機能性材料研究拠点は、そうした課題に取り組むNIMS最大の拠点です。有機・無機・金属の専門家がそろい、半導体やセラミック、生体材料など幅広

Naoki Omashi



大橋直樹

機能性材料研究拠点 拠点長

電子セラミックスグループ グループリーダー
ワイドバンドギャップ材料グループ グループリーダー
半導体ナノ界面グループ グループリーダー



く研究を進めています (P.7に組織図)。例えば、サイアロン蛍光体はその代表例です。この蛍光体と青色LEDを組み合わせることで構成される液晶パネル用の白色LEDが広く普及した今、さらにエネルギー変換効率を上げる、輝度を上げるといった目標の下、研究開発が進められています。他にも、タラを原料に用いた生体親和性の高い医療用接着剤、有機と金属のハイブリッドポリマーで構成される折りたためるディスプレイなど、より豊かで快適な社会を実現する材料開発に日々取り組んでいます。

—特に注目の最新成果はありますか。

先に述べた省エネ・高性能化といった課題に向けて、ダイヤモンドは今注目の材料の1つです。熱伝導率や耐高電圧に優れることから「究極の半導体材料」と目されています。本拠点の寺地徳之氏が研究開発を進めている「超高純度ダイヤ

モンド」(P.8参照)は極めて高品質で、世界中の研究者から注目を浴びています。また、誰からも盗聴されない量子暗号通信の実現に挑む間野高明氏の「量子ドット素子」(P.10参照)、有機と無機のハイブリッドで、発光材料などへの応用が見込まれる吉尾正史氏の「液晶性分子材料」も、次世代の材料として期待されています (P.12参照)。

加えて、物性の基礎的なメカニズムを解明することも「物質・材料」の専門機関である我々の重要な使命です。材料を新たに開発するには、どのような結晶構造や電子状態であるべきかを正確に理解し、予測する必要があります。本号で取り上げる寺嶋太一氏の研究も基礎研究の1つで、鉄系超伝導体の電子状態に迫るものです。これは現時点では未解明の超伝導発現メカニズムを解き明かす一助になると期待しています (P.14参照)。

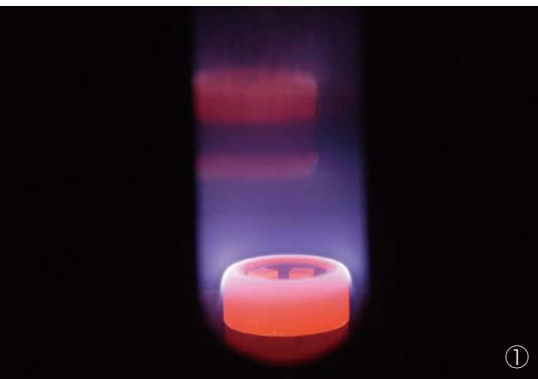
また、新材料を見つけ出すと同時に、

その効果的な製造方法を提示しなければ、実用化には結びつきません。形や大きさの制御、低コストで安定した品質で作る製造技術など、デバイスに組み込むには課題が山積みです。そこで我々の拠点では、実用化を見据えたプロセス技術の創出にも注力しています (次号で紹介)。

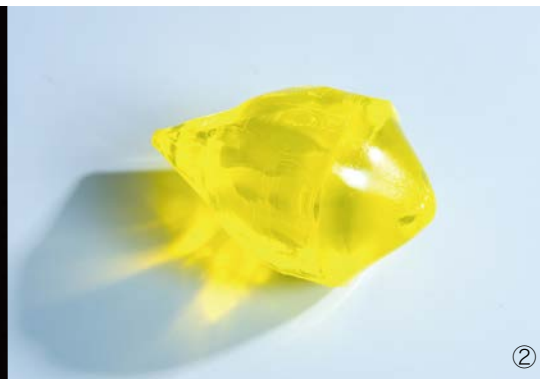
高性能センサや やわらかいエレクトロニクスで 少子高齢化社会をサポート

—今後、機能性材料はどのように発展していくと思われますか。

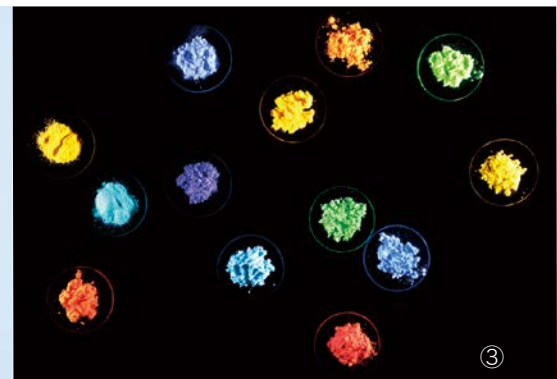
1つは、センサの高性能化です。これは自動車の自動運転やロボットの高度化に欠かせないものです。もう1つは、やわらかいエレクトロニクス。自由に伸縮する筋肉のような材料を開発できれば、生き物のようにやわらかくてしなやかで、



①



②



③



④



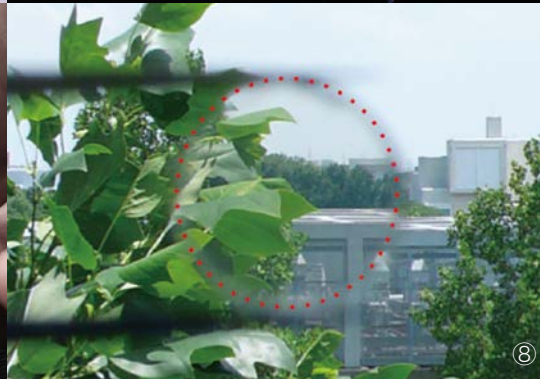
⑤



⑥



⑦



⑧

- ①マイクロ波プラズマ法にて生成されるダイヤモンド
- ②超高輝度でハイパワーな白色照明に最適な、温度特性の優れたYAG単結晶蛍光体
- ③赤色蛍光体の開発により、白色LEDの実現を可能にしたサイアロン蛍光体
- ④エレクトロクロミック特性をもつポリマーを使用した、切れるディスプレイ
- ⑤油田随伴水に含まれる可燃性ガスの回収を可能にする高性能オイル吸着剤、ポリカブチャー
- ⑥フレキシブルで光電変換効率の高い、有機薄膜太陽電池
- ⑦室温でも液状のままなので使いやすい、医療用接着剤の材料となるタラゼラチン
- ⑧放電プラズマ焼結法により850°Cで作製した透明ハイドロキシアパタイトセラミックス

低消費電力のロボットを実現できます。

これまで機能性材料はコンピュータなどの硬い機器を対象に研究開発が進められてきました。しかし今後は、高性能センサと柔らかいエレクトロニクスの融合により、少子高齢化社会に生きる我々の生活を直接サポートしてくれるようなシステムやロボットが現実のものとなることが期待されます。

—そうした中で、機能性材料研究拠点の特徴や強みとなる点を教えてください。

新材料の種となるような物質・構造を見つけ出す研究には、非常に時間がかかります。そこにじっくり取り組める環境にあることが我々の強みです。例えば、ダイヤモンド素子の研究は約30年間、量子ドットの研究は約20年間続けられて

おり、長年蓄積されてきた膨大な知識や技術、ノウハウがあります。だからこそ、いまでも世界を驚かす研究成果を生み出し続けているのです。

加えて、国の研究機関として、最先端の計測装置や評価装置、そしてそれらを適切に扱える技術者がそろっていることが挙げられます。例えば、非常に微細な結晶を分析・評価できる装置が注目されています。これまで見落としていた材料の優れた機能を見いだすなど、セレンディピティの確率向上にもつながると期待されています。

そして何より、有機から無機まで、材料に関する幅広い分野の研究者が集まっていることが最大の強みと考えます。研究の基本は、やはり人材、ヒトです。研究者間の交流を通じて新しいアイデ

アが生まれることは多々あります。極めて高い専門性を持った専門家同士が、分野の垣根を越えて切磋琢磨する、文字通りの異分野融合が実現された我々の拠点の力を大いに発揮し、豊かで快適な社会に貢献する材料を創り出していきたいと思います。

(文・山田久美)



機能性材料研究拠点 組織図



パワーデバイス
高感度センサ



LED

- 電子セラミックスG
- セラミックス表面・界面G
- ワイドバンドギャップ材料G
★超高純度ダイヤモンド P.8
- 半導体ナノ界面G
★液晶性分子材料 P.12
- 高温超伝導線材G
- 低温超伝導線材G

- 光学単結晶G
- サイアロンG
- コロイド結晶材料G
- ナノフォトニクスG
- エピタキシャルナノ構造G
★量子ドット P.10
- プラズモニクスG

電気・電子機能

光機能

機能性粉体・セラミックス

機能性分子・ポリマー

- 外場制御焼結G
- 微粒子工学G
- セラミックスプロセッシングG

- 分子機能化学G
- 電子機能高分子G

機能性材料 研究拠点



薄型スピーカー

バイオ機能

機能探索



フレキシブル端末

- バイオポリマー G
- バイオセラミックスG
- 細胞機能化ナノバイオ材料G
- ナノメディスンG
- 生体組織再生材料G

量子機能

- マグネットエレクトリック結晶G
- 超高压G
- カーボン複合材料G
- 機能性粘土材料G

- 量子輸送特性G
★鉄系超伝導体 P.14
- 量子物質創製G
- 超伝導物質合成G
- 強相関物質G
- 超伝導位相エンジニアリングG



医療用材料



機能探索



量子コンピュータ

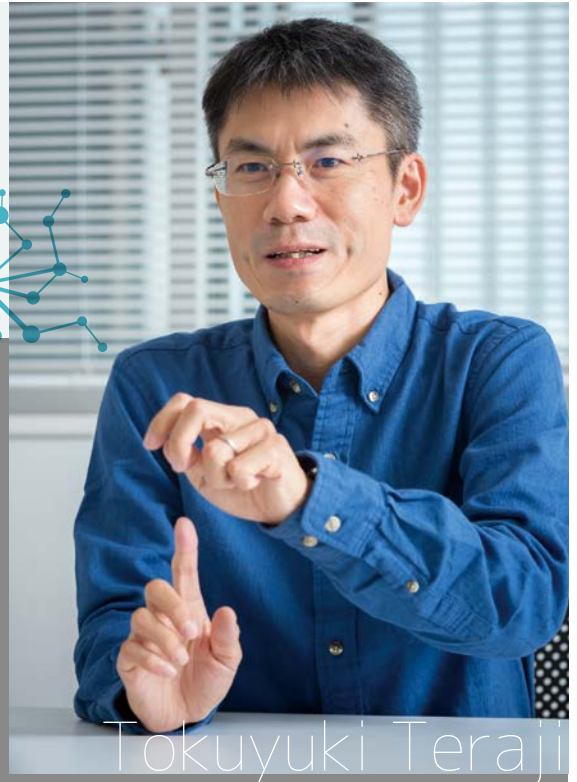
※G はグループの略称
※★は本号で紹介している研究

機能X= 耐高電圧+電子スピンの高度な制御 を引き出す高純度化技術



世界最高の「ダイヤモンド」で 革新的なデバイスを

宝石の王様とも呼ばれるダイヤモンド。実はいま、耐高電圧特性や電子スピン特性に優れる「究極の半導体」として注目を集めている。そんな中、高純度かつ高品質な単結晶ダイヤモンド薄膜の成長で、パワーデバイスと量子デバイスの研究開発に携わっているのが寺地徳之だ。



Tokuyuki Teraji

寺地徳之

機能性材料研究拠点
ワイドバンドギャップ材料グループ
主幹研究員

エレクトロニクスへの応用には、 高純度・高品質な 薄膜の作製が必須

ダイヤモンドは昔から宝石として親しまれてきた。20世紀後半に人工ダイヤモンドが合成されはじめてからは、その硬さを利用して、工業用研磨剤としても広く用いられており、近年では、熱伝導性などの優れた特性から、機能性材料としても注目されている。中でも研究開発が盛んに行われているのがエレクトロニクス分野への応用だ。

ダイヤモンドは実は、半導体としての性質も持っている。一般的な半導体材料であるシリコン(Si)の5倍に相当する5.5eVのバンドギャップを持つワイドバンドギャップ半導体だ。バンドギャップ幅が広いことで熱によって励起されるキャリアが少なくなるため、高温動作が可能となる。また電子回路において、電圧印加下での絶縁状態の高さの指標である絶縁破壊電界もシリコンの30倍と極めて大

きいことから、素子の薄膜化・小型化と低消費電力化が同時に実現できる。そのため、「究極の半導体」と言われ、特にパワーデバイスとしての応用が期待されている。実用化に向けては、優れた絶縁破壊特性を実験的に示す必要があり、不純物を極力排除した高純度かつ高品質な単結晶を作ることが不可欠だ。さらに今、量子デバイス応用でも、同様の結晶が求められている。この単結晶ダイヤモンド薄膜の作製で世界をリードするのが寺地徳之である。

ダイヤモンドの半導体応用研究を リードしてきたNIMS

従来、人工ダイヤモンドの作製には自然界同様、高圧合成法が用いられてきた。しかし、高圧合成は一般的に大気中で行われるため、窒素やホウ素などの不純物が混入しやすいという問題がある。宝石や工具材料としての用途であれば十分だが、半導体デバイスへの応用には適さ

ない。一方、寺地が用いるのは、「マイクロ波プラズマ化学気相成長法(MPCVD法)」と呼ばれる製造方法だ。これは、ダイヤモンドの結晶基板が設置された真空チャンバーの中に、原料となるメタンガスを送り込み、メタンガス中の炭素が基板上でダイヤモンドとして析出するというものだ(図1)。プラズマでガスを分解することと、ガスの主成分が水素であることが、ダイヤモンド薄膜を成長させる鍵となっている。無機材質研究所(NIMSの前身)で1980年代に独自に開発した方法であり、世界で初めて低圧装置でダイヤモンド薄膜を成長させることに成功したものだ。

「MPCVD法は、真空装置を使うため、高純度のダイヤモンド薄膜を作製できます。ただ、パワーデバイスでは、不純物が0.1ppm(1ppm=10⁻⁶:10万分の1)程度という非常に高純度な単結晶が要求されます。そこで私は所属グループの協力のもと、市販のダイヤモンド成長装置にはない、超高真空方式のダイヤモ

ンド成長装置を設計しました。さらに真空排気装置を強化することで、高純度化に適した装置へと改良を重ねていきました。その結果、基準をクリアする高純度の達成に世界に先駆けて成功しました」

以降、寺地のもとには世界中からパワーデバイスの試作用に試料提供の依頼がまきこむようになった。その後も、パワーデバイスとしてすでに実用化が始まっている炭化シリコン (SiC) を超える高耐圧特性を持たせるため、高純度化だけでなく、結晶の高品質化や不純物ドーピングによるダイヤモンド薄膜の電気伝導制御など、さらなる高機能化への工夫を重ねている。

そんな中、一層の高純度化を要求する「量子デバイス」への応用という依頼が届く。

世界最高値の“超高純度”を記録

電子のスピンを利用した演算処理などを行う量子デバイス。通常は絶対零度近くまで温度を下げてスピンの状態を制御しなければならない。しかし、1997年にドイツから「ダイヤモンドは結晶中に、常温でスピンの状態を操作できる電子スピが存在している」と発表されたのを機に、ダイヤモンドの量子デバイス応用への関心が急速に高まった。この電子スピンは「NVセンター」として、広く知られている。寺地のもとにも海外の研究者から協力依頼があり、量子デバイス用にダイヤモンド薄膜の作製に着手することとなった。しかしその要求は驚くほど高いものだった。「純度を、パワーデバイスで求められるよりもさらに2桁以上も上げなければなりません。これは不純物を1ppb (1ppb = 10^{-9} : 10億分の1) 程度にとどめるということです。加えて、炭素には ^{12}C と ^{13}C という同位体がありますが、 ^{12}C 同位体の純度を高めていく同位体濃縮も必要でした。 ^{13}C に含まれる核スピがノイズ源になり、電子スピをうまく制御できないからです」

それに対し寺地は、真空チャンバー外部からの不純物の混入を極限まで抑制するため、成長装置を大気暴露させずに試料を装置内に導入する機構を新たに設置

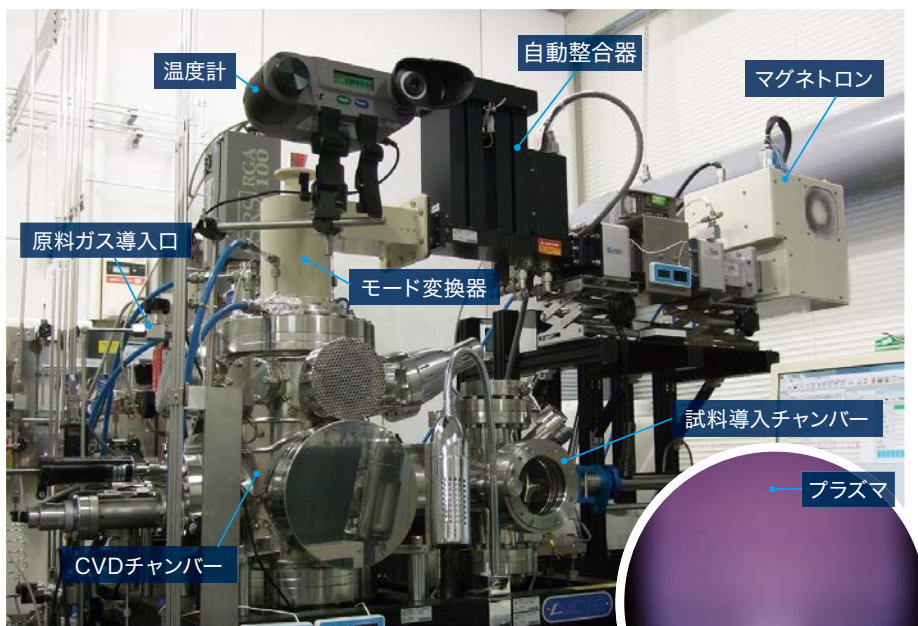


図1 NIMSで開発した超高純度ダイヤモンド成長装置

マイクロ波プラズマ化学相成長法 (MPCVD法) と呼ばれる成長法でダイヤモンド薄膜を成長させる装置。MPCVD法は原子状水素を高密度に生成でき、不純物混入の抑制に適していることから、高純度ダイヤモンド結晶成長に最適な方法と考えられている。原子状水素は成長中のダイヤモンドの表面を水素終端することで安定化させるなどダイヤモンド成長において重要な役割を担っている。

するなど MPCVD 装置の改良を進めたほか、同位体濃縮メタンガスの調達とガス純化装置の設置に努めた。その結果、主な不純物である窒素の濃度は目標値をさらに1桁上回る0.1ppb (100億分の1) 程度、 ^{12}C 同位体濃度は99.998%に達しており、単結晶ダイヤモンド薄膜としては世界最高値の“超高純度”を記録した。その後、2週間にわたってダイヤモンド成長を行うことで、サイズが3mm ×

3mm × 0.56mmのダイヤモンド単結晶基板を得ることに成功した(図2)。「我々のところで作った試料を使い、高感度・高空間分解能をもち、室温・常圧でも動作する量子磁気センサなどの研究が進められています。今後もパワーデバイス応用と量子デバイス応用の両輪で単結晶ダイヤモンド薄膜の作製技術の向上に努めていきます」。寺地はこう意気込む。(文・山田久美)

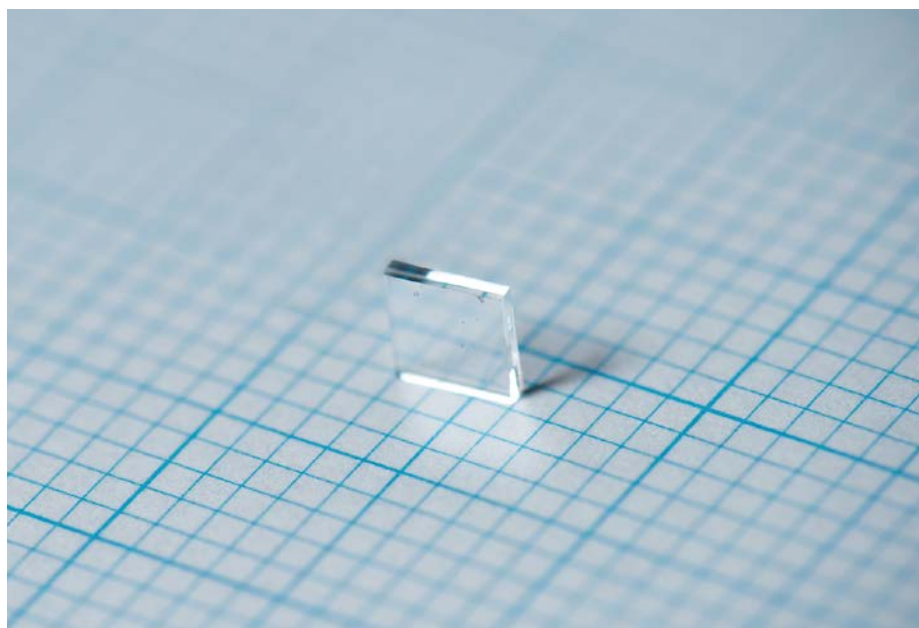


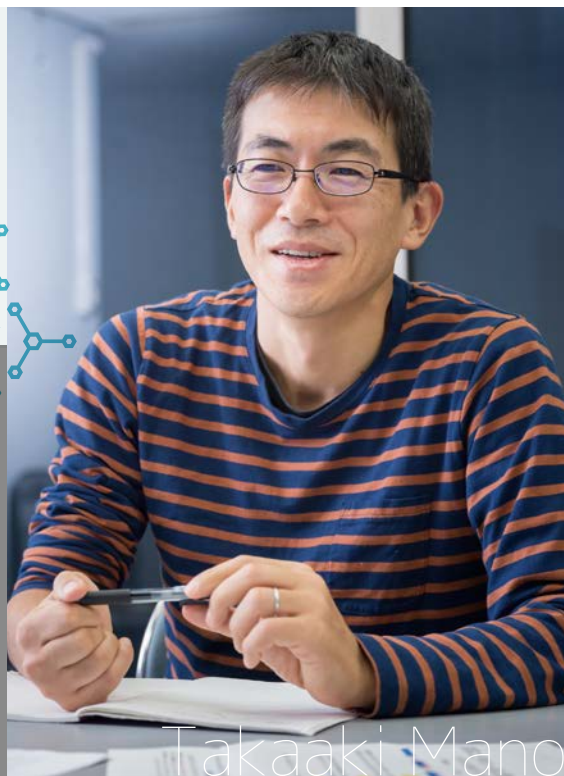
図2 寺地の作製した“超高純度”ダイヤモンド単結晶基板。不純物である窒素の濃度は0.1ppb以下、 ^{12}C 同位体濃度は99.998%と、世界最高水準に達している。

機能X=
もつれた光子対を発生する!
で量子暗号通信を



「量子ドット」、 安心・安全な通信の担い手

一辺が約10ナノメートルという微小な半導体の粒子「量子ドット」。現在、半導体レーザーとして実用化されているほか、太陽電池や光検出器、高精細ディスプレイなど幅広い分野への応用に向け、研究開発が進められている。中でも次世代通信技術として期待されている量子暗号通信の実現に取り組んでいるのが間野高明だ。



Takaaki Mano

間野高明

機能性材料研究拠点
エピタキシャルナノ構造グループ
主幹研究員

期待が高まる「量子ドット」

電子を閉じ込めるために半導体を使って形成した微小な粒「量子ドット」。大きさは一辺が約10ナノメートルだ。電子は狭い空間に閉じ込められると、電子が自由な空間を移動している物質では起こりえない多様な現象を発現する。例えば、量子ドットのサイズを変えることで、さまざまな波長の光を出したり吸収したりすることができるようになるため、液晶ディスプレイ用バックライト素子や、太陽電池への応用が研究されている。

量子ドットの特徴を生かしたこれまでにない光・電子デバイスの研究開発が世界中で進められる中、量子ドットを使うことで、“絶対に盗聴されない”通信技術の実用化に向けた研究が進みつつある。

量子暗号通信と呼ばれるその技術は、現在はまだ通信距離が短く、実用化に至っていない。長距離通信の実現に必要な不可欠なのが、「もつれ光子対」と呼ばれる不可思議な関係性を持った光子

のペアだ。そしてもつれあった光子のペアを量子ドットから出すには、「量子ドット」の形を精密に制御する新たな作製技術が必須である。これに挑んでいるのが、間野高明だ。

量子ドットで 遠距離量子暗号通信を

量子暗号通信は、光の量子性を利用した次世代の光通信技術だ。「量子もつれ」と呼ばれる、2つの量子がもつれ合った量子特有の現象を利用する。もつれ合った量子は、お互いがどんなに離れていようとも、片方の量子を観測することでもう片方の量子の状態が変化する。そのため、通信の途中で情報が読み取られればすぐに分かり秘匿性が完全に保証され、情報の外部漏洩を防ぐことができる。

量子暗号通信では、量子の一種である光子1つずつが情報を担い、光ファイバー内を伝送する。しかし、光子が持つ

量子状態は壊れやすく、現在のところその伝送距離は、数十キロメートルが限界だ。長距離通信を実現するには、2つの光子同士の量子もつれ状態を利用した量子中継器の設置が不可欠だ。この量子中継器を、量子ドットを使って実現しようというのが間野の目標だ。

「単一の量子ドットに1対の電子と正孔があると1つの光子が発生します。同様に2対の電子と正孔が存在すると、2つの光子がほぼ同時に発生します。量子ドットの対称性が十分高いと、2つの光子の状態は区別できなくなり、量子的にもつれた光子対ができます。しかし、どのようにして真円や正三角形など等方的な形状のドットを作るかが技術的な課題となっていました」

量子ドットの形成方法は、「SK法（ストランスキ・クラスタノフ法）」などいくつかある。SK法は、半導体の薄膜結晶のエピタキシャル成長を用いる。基板上に格子定数の異なる材料を結晶させる際に生じる歪みから、自己組織的に量子

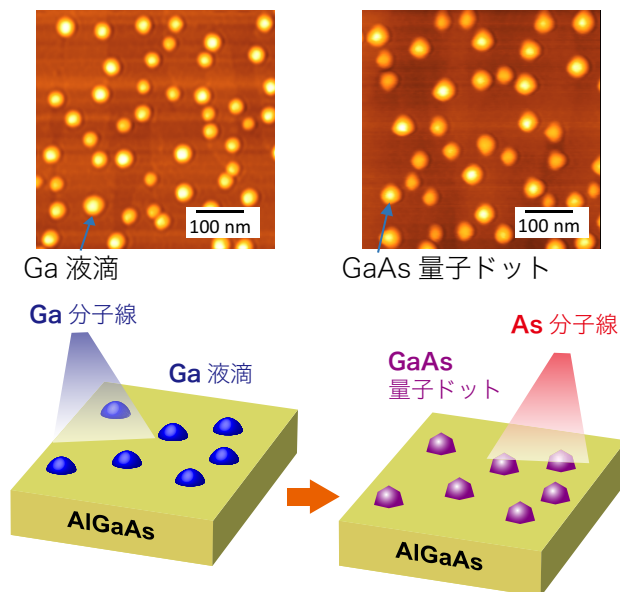


図1 液滴エピタキシー法によるGaAs量子ドットの作製プロセス
原子間力顕微鏡による観察結果(上)と模式図(下)。

ドットを形成させている。しかし、この方法では、等方的な形状の量子ドットを形成するのは難しい。

「一方、NIMSでは、1990年にNIMSの前身である金属材料技術研究所の小口信行氏が『液滴エピタキシー法』を独自に開発し、改良を重ねてきました。液滴エピタキシー法では、ガリウムヒ素(GaAs)やインジウムリン(InP)の基板にGaやInだけを照射して、ナノメートルサイズの半球状の金属液滴を自然に形成させ、さらにこの液滴にAsを供給します。それにより液滴中のGaやInとAsが結合して結晶化し、GaAsやInAsの量子ドットが形成されます(図1)。SK法とは異なり、格子整合する基板を用いることができ、さらに等方的な形状の量子ドットを形成できるのが特徴です」と間野はその優位性を語る。

液滴エピタキシー法ならではの 特徴を生かす

間野は遠距離量子暗号通信の実現に向け、試行錯誤を繰り返す中、2013年には、対称性の高いGaAs(111)という面方位の基板を使って量子ドットを形成することで、世界最高性能の量子もつれ光子対の発生に成功した(図2)。

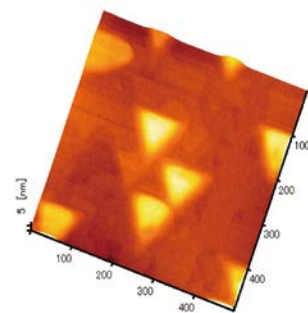
しかし、開発に成功した量子もつれ光子対の光源の波長は700ナノメートル

前後。一方、通信インフラに実装するには、現在使われている石英ファイバーの最大透過帯である1.55マイクロメートルという近赤外域での発光を実現しなければならない。そこで2015年頃から間野は新たにInPの(111)基板に液滴エピタキシー法によりInAsの量子ドットを形成する研究を開始した。「近赤外域での発光を実現するには、InAsの量子ドットを形成させる必要があります。最初は基板としてGaAsを使っていましたが、うまく光らせることができなかったため、InAsにより格子定数が近いInPを試してみたところ、うまくいくことが分かりました。ただし、InP基板は高価なGaAsのさらに2、3倍高価ですので、実用化に向けてはより低コストの基板を使うなどの工夫もしなければなりません」と間野は語る。

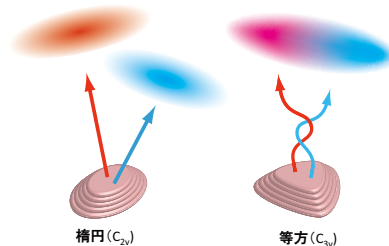
量子もつれ光子発生素子の LED化にも着手

加えて、間野が並行して進めているのが、電流を使って量子もつれ光子対を発生させる研究だ。2013年に成功させた実験では、量子ドットに光を照射して量子もつれ光子対を発生させていた。しかし、実用化のためには、光ではなく電流を流して光らせることにより、デバイスサイズを小さくすることが必要だ。

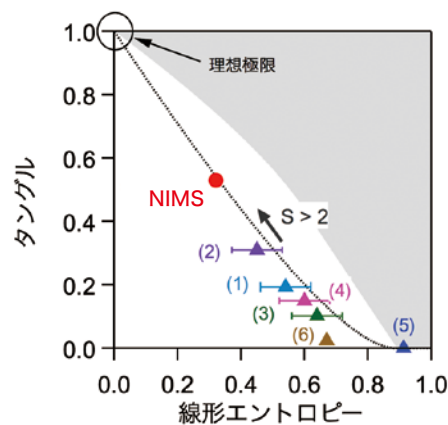
図2 (111)面上のGaAs量子ドットと量子もつれ光子対



原子間力顕微鏡像。GaAsの(111)面の表面は3回対称性を持つため等方的な形状の量子ドットが形成可能である。



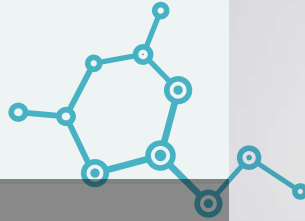
量子もつれ光子対の模式図。等方的な量子ドットを形成することで、世界最高性能のもつれ度を達成した。



これまで報告された光子源との性能比較。(1)～(6)は他の研究機関によるもの。間野らの光源は、抜き出した性能を示している。縦軸は、量子性の強さを示し、横軸は、状態混合の強さを示す。

現在は基礎研究の段階だが、これが実現すれば、遠距離量子暗号通信も夢ではない。「今後も遠距離量子暗号通信に限らず、液滴エピタキシー法ならではの手法を生かした応用先の開拓に尽力していく計画です」と間野は語る。(文・山田久美)

機能X=
高速にモノを流す、発光が変わる!
で広がる応用分野



柔軟で省エネ 「液晶材料」の可能性

分子同士が自己組織的に結合し集合構造を取ることで、さまざまな機能を発現させることができる液晶材料。そんな液晶材料の特性を生かして、これまでにない仕組みの分離膜や燃料電池、発光材料など、新たな応用分野を開拓しようとしているのが吉尾正史だ。



Masafumi Yoshio

吉尾正史

機能性材料研究拠点
半導体ナノ界面グループ
主幹研究員

自己組織的に構造を形成し 可動性と可逆性を備えた 液晶材料

液晶ディスプレイでおなじみの“液晶”。液体のように流動性があるやわらかく、かつ分子が結晶のように規則的に配列した状態のことをいう(図1)。吉尾正史は、そんな液晶状態をとれる分子の“ある特徴”を利用して、新たな機能性材料の研究開発を進めている。

「液晶材料の最大の特徴は、構造が自己組織化により形成されることです。自己組織化とは、分子や原子・イオンが人の操作を直接介在せずに自発的に秩序構造を作り上げていく過程のこと。それにより、複雑な製造プロセスを必要とせず、低コストで機能性材料を製造することができるのです。例えば、私が今注目している『ジャイロイド構造』の場合、3次元構造の中を縦横斜めに微小の空孔が通る非常に複雑な構造をしています。これを人工的に作るのは困難です。しか

し、液晶材料であれば、種となる液晶分子の設計次第で、そうした構造が勝手に形成されてしまうのです(図2)」と吉尾は語る。

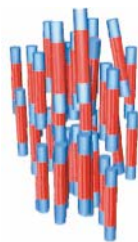
加えて、液晶分子同士は共有結合や金属結合とは異なり、水素結合やファンデルワールス力といった比較的弱い相互作用によって結合している。そのため、構造が変化しやすく、変形と復元を繰り返すことが容易だ。こういった可動性と可逆性を兼ね備えているのも液晶材料の

特徴だ。

「このような特徴を生かせば、既存の材料では実現できなかった画期的な機能を実現できると考えています」と吉尾は語る。

“モノを流す”機能を高め 分離膜や燃料電池への応用を加速

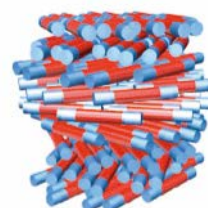
現在、吉尾が最も注力しているテーマの1つが、イオンや電子といった“モノを



ネマチック相



スメクチック相



コレステリック相



カラムナー相

図1 液晶相の分類

液晶ディスプレイには棒状のネマチック相を示す液晶分子が使われているが、棒状分子が層状構造を形成したスメクチック相や螺旋構造のコレステリック相、円盤状分子のカラムナー相や3次元的な分岐構造を形成するジャイロイド型キュービック相(図2)などがある。

流す”機能をもつ材料の研究だ。

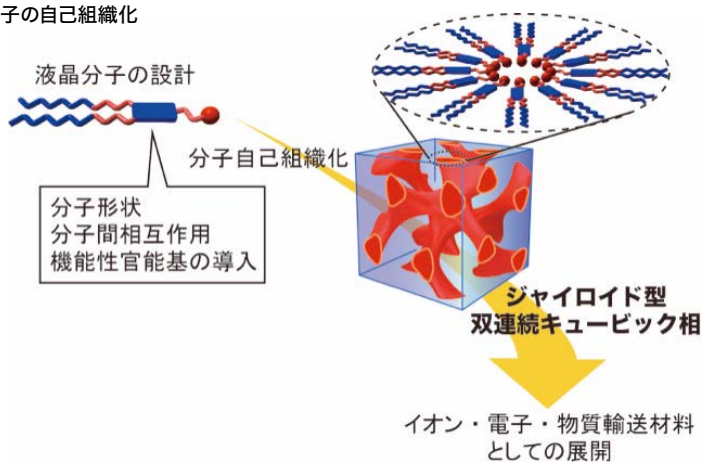
その1つに、海水から塩分などを除去して淡水に換える水分離膜がある。これに液晶材料のジャイロイド構造が力を発揮する。楔形分子構造のアンモニウム塩で形成したジャイロイド構造は、縦横斜めに無限に連結した等方的な3次元構造をしている。大きな水和金属イオンはその空孔を通れないが、小さな水分子なら通り抜けが可能で、淡水化に使うことができる。ジャイロイド構造は、カラムナー構造などの異方的な構造と違って、マクロスケールで配向制御しなくても物質を連続的に輸送でき、機械的強靭さを兼ね備えていることがメリットだ。また、可動性や可逆性を生かせば、分離膜の伸縮によって空孔の大きさを変えることができるので、1種類の分離膜をさまざまな応用に使い回すことも将来的には実現可能だ。

同じくジャイロイド構造を活かした材料として、燃料電池への応用も考えられる。現在、自動車用の固体高分子形燃料電池(PEFC)では、イオン交換膜を正極と負極ではさみ、水素イオンがイオン交換膜内を移動することで発電している。イオン交換膜にはナフィオンと呼ばれるポリマーが使われている。ナフィオンは、水を媒介して水素イオンを通すため、燃料電池が高温になり水が蒸発してしまうと、水素イオンが流れなくなり発電量が低下するという課題を抱えている。「それに対し、私は現在、水を媒介することなく水素イオンを直接流すことができる液晶材料の開発を進めています。ナフィオンの代わりにこの液晶材料を使えば、強靭で、高温でも発電量が低下しない燃料電池が実現できると考えています」と吉尾は語る。2020年3月末までの予定で、「無水プロトン伝導性液晶高分子膜の創製と燃料電池への応用」というプロジェクトが推進中で、数年後の実用化を目指している。

こすると色が変化！ 省エネな発光材料への展開も

もう1つの吉尾の研究テーマに、液晶分子を使った発光材料の開発がある。摩擦やせん断など機械的な刺激によ

図2 液晶分子の自己組織化



て、結晶構造が変化し、それにより色が変化する発光材料を「メカノクロミックルミネッセンス」と呼ぶ。通常こういった発光材料には、有機金属錯体の結晶構造が変化してしまうと元には戻らない上、結晶のため用途も限られる。それに対し、可動性と可逆性を備えた液晶材料であれば、少しの刺激で発光色を大きく変化させることができる上、色を元に戻すことも容易だ(図3)。すなわち、吉尾が目指すのは、カメレオンのように色が変わる絵の具だ。固体の結晶と違って流動性があるので、色々なものにコーティングすることも簡単になる。「この特徴を生かせば、紙などのやわらかいものに塗布できる偽造防止のセキュリティー塗料や、色の変化によって摩擦度合いの程度が分かる船底用塗料などが開発できると考えています。

それにより、低抵抗な船底を開発したり、傷んでいる箇所をいち早く見つけたりできるようにになるでしょう」と吉尾は語る。

現時点では1種類の液晶分子から発光可能な色の数は2色程度だが、今後は多色発光に挑戦していきたいと吉尾は意気込む。実際このような発光材料は、電気を使わずに機能する性質をもつことから、省エネやCO₂削減の観点からも近年急速に注目され始めている。

「私は子ども時代、父から『日本はエネルギー資源に乏しい国なので、大人になったらエネルギー問題を解決してほしい』と言われました。自分の中には父のその言葉が今でも残っています。私が開発した液晶材料を使った燃料電池や顔料・発光材料を1日も早く実現し、父の願いを叶えたいですね」。吉尾は研究への思いを新たにしている。

(文・山田久美)

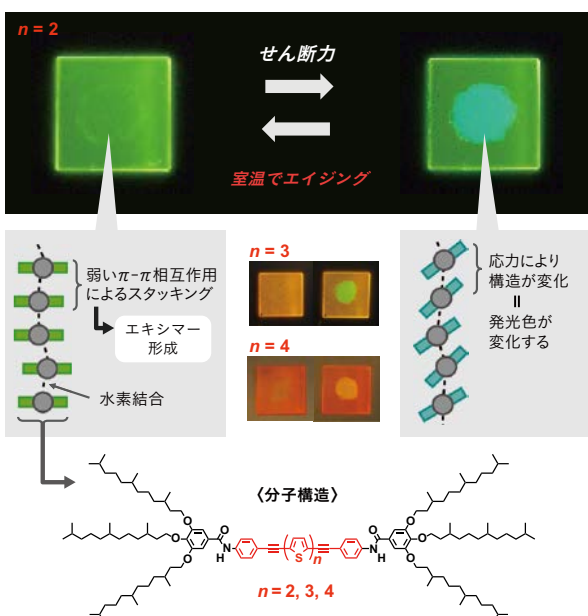


図3
メカノクロミックルミネッセンス液晶
室温におけるせん断とエイジングにより、可逆的な発光色変化を示すオリゴチオフェン誘導体。液晶分子同士が弱い力であるπ-π相互作用や水素結合で結合し、発光性のπ共役部位(分子構造の赤色部)が近接することにより、エキシマー(励起二量体)から発光を示す。これにせん断力を加えることでエキシマー構造が形成できなくなり、π共役部位の単量体からの発光を示すようになるため発光色が変化する。

Vol. ①

「超伝導」の根源を求めて

鉄系超伝導体、
鉄セレン (FeSe) の電子状態を測定

新材料探索の指針を得るには、基礎となる物性のメカニズム解明が欠かせない。そこで、革新的な材料の種となり得る注目の基礎研究を2号にわたってご紹介。今回は、省エネの切り札として期待を集める鉄系超伝導体のメカニズムに迫る。



寺嶋太一

Taichi Terashima

機能性材料研究拠点
量子輸送特性グループ 主席研究員

ある金属や化合物を極低温に冷却すると、電気抵抗がゼロになる。「超伝導」と呼ばれるこの現象は、大電流によって強力な磁場を発生できることから、現在、MRIやリニアモーターカーに利用されている。また、エネルギー損失を大幅に減らせることから省エネ材料として期待される。しかし、一方で冷却にかかる多大なコストが普及の妨げとなっている。この状況を打開するため、より高い温度で超伝導が起こる物質の発見を目指し、超伝導体の機構解明に取り組んでいるのが寺嶋太一だ。

寺嶋がターゲットとするのは「鉄系超伝導体」だ。東工大・細野教授らの発見後、わずか1年で転移温度が絶対温度56度(−217℃)に及ぶ物質が発見されるに至ったことで世界中から注目を浴びている。

10種類ほどある鉄系超伝導体の中でも、寺嶋が特に注目しているのが、鉄セレン (FeSe) だ。通常の鉄系超伝導体の場合、低温にすると結晶構造にひずみが生じ、反強磁性という状態になる。そこに圧力をかけたり、他の元素をドーピングしたりすることでひずみや反強磁性がなくなり、超伝導を発現すると考えられている。ところが、FeSeの場合、極低温にしても反強磁性にはならず、しかも圧力などなしに超伝導を発現する、とりわけ風変わりな物質だ。

「FeSeと他の物質との違いを探ること

で、鉄系超伝導体がなぜ高い温度で超伝導になれるのか、手がかりを得たいと考えています」と寺嶋。そこで寺嶋が調べているのが「フェルミ面」だ。

「フェルミ面とは、エネルギーの一番大きな電子の状態を表しており、電子がどのように流れるか、ひいてはどのような条件で超伝導状態になるのかを知るために不可欠な情報です。フェルミ面は、基本的に第一原理計算で予測可能で、ほとんどの超伝導体では実験での測定結果と大体一致します。ところが、鉄系超伝導体ではそれが異なるケースが散見されるため、FeSeにおいても実際の測定は重要です。そこで私は、『量子振動測定』によるフェルミ面の実験での決定に取り組みました」

量子振動測定は、物質を−270℃近い極低温まで冷却し、非常に強い磁場をかけて行う。すると、物質の電気抵抗などが大きくなったり小さくなったり

を繰り返す「量子振動」という現象が起きる。その振動具合を解析することで、フェルミ面の形状や大きさ、面数を知ることができる。

2014年、寺嶋は京都大学、独カーlsruheスルーエ工科大学、米国立強磁場研究所との共同研究で、FeSeのフェルミ面を世界で初めて測定。その結果、その面数と大きさが、計算結果と大きく異なることが判明した(図)。「長年の実績を認めていただき、質の高い試料と強磁場環境の提供を受けることで測定が実現しました。計算予測と測定結果が異なる理由は、理論家と議論の最中ですが、理論計算で考慮されていない電子と電子の相互作用が関係していると考えられます。その因子こそが超伝導を解き明かすカギとなるかもしれず、今後も協同でぜひ解明していきたいと考えています」と寺嶋は語る。

(文・山田久美)

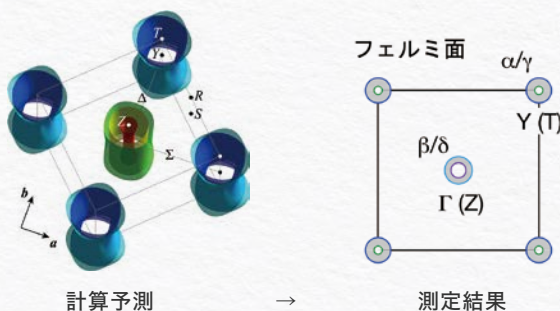


図 計算予想と測定結果でのフェルミ面の違い

計算では、ブリルアンゾーンと呼ばれる四角の四隅に2枚ずつ、中央に3枚のフェルミ面が期待されるが、実測では、四隅に1枚、中央に1枚しかないことが分かった。また、大きさも計算より顕著に小さかった。なお、実測の図はフェルミ面の大きさだけが正確で形状は正確でない。

きみが思っているより
科学はもっとおもしろい



室温超伝導材料が できたなら

文・えとりあきお
イラスト・岡田 丈 (vision track)

映画1本を数分でダウンロードし、家で楽しむ。ひと昔まえには考えもしなかった光景が、今やごく当たり前のことになりました。情報をため、送る手段が飛躍的に発展したことで、私たちの生活は大きく変化したのです。その背景には、コンピュータの高性能化と、それを支える材料の発展があります。代表的なものが、シリコンを素材とする“トランジスタ”という半導体の固体素子の開発です。

トランジスタは、1948年に米国・ベル研究所の3人の研究者によって発明され、コンピュータの中でそれまで計算処理のスイッチングに使われていた真空管を置きかえた材料です。

それまでの真空管は、サイズがとても大きい上に、大きな電力を消費し、ひんぱんにタマ切れを起こしていました。それに対してトランジスタは、小型で、スイッチングで故障を起こすことがないため、まさに革命的な材料として迎えられました。さらに、その後IC、LSIが考案されたことでトランジスタはうんと小さくなり、その集積化によって、大量の情報を処理できるようになりました。

また、電気ではなく光による情報(信号)の伝送を担う“光ファイバー”を実現した、ガラス材料やプラスチック材料の進化があったことも忘れてはいけません。

そうしたたくさんの材料の力があつまって、情報を大量に、しかも高速に送ることができる、いまの便利な社会が実現してきたのです。

もし将来、社会を大きく変えるような材料があらわれるとしたら、それは何なのでしょう。私が心待ちにしている材

料は、室温超伝導材料です。

ご承知のように、超伝導物質は特筆すべき性質を持っています。電気抵抗がゼロであることです。この性質(機能)を生かすと、すばらしいことができます。

すでに、脳のなかをくっきりとうつし出すMRIが実現していますし、品川-名古屋間を超高速で走るリニアモーターカーの計画も、いままさに進んでいます。

しかし、超伝導材料には大きな欠点があります。その性質を発現させるには、ごく低い温度まで冷やさなくてはならないのです。1911年に最初に超伝導になる物質が見つかったときには、何と -269°C でした。1986年になって -243°C で超伝導になる物質が見つかり、その後、少しずつ高い温度でみつかってきてはいますが、まだまだ -100°C 近くの段階で、私たちにとってはとてつもない冷たさです。

したがって、超伝導物質を材料として使おうとすると、冷却装置の設置と運転にばく大な手間と費用がかかることになります。

もし、室温で超伝導を示す物質が見つかって、それで材料ができることになった

ら、これはトランジスタ以上の発明、発見になるでしょう。そんな夢の物質が地球上に存在するでしょうか。

さすがにこれには悲観的な見方をする人が多いようです。しかしいま、まだまだ謎に包まれた超伝導のしくみを調べ、明らかにしようとしている研究者が大勢います。それらは新しい物質を見つけ出す、あるいはつくり出す上で、おおいに役立つはずで

す。もしも、私たちが室温超伝導物質をつくり出し、長大なケーブルや大きな磁石を作れるようになったとしたら……。想いをめぐらすのはとても楽しいものです。

電力をため、遠くはなれたところまで無駄なく送電できるようになり、大陸間をリニアモーターカーが走り回る。そんな世の中が訪れたなら、どんなにすばらしいことでしょう。

それは、見果てぬ夢かもしれません。しかし、夢は私たちの大きな原動力となります。実現へと挑むその道すがら、思いがけない発見をすることもあろうでしょう。夢を描くことは、理想の社会に近づく足がかりとなるにちがひありません。



第17回 ナノ材料科学環境拠点シンポジウム

17th

GREEN 1/25 THU. Symposium

エネルギー関連材料の開発を加速する新手法 ～ MI, シミュレーションを中心として～

開催日：平成30年1月25日(木) 13:00-17:25
交流会17:30-19:00(参加費：3,000円)

会場：一橋講堂(学術総合センター 2階)

参加費：**入場無料**

主催：国立研究開発法人 物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 (Greater GREEN)
国立研究開発法人 物質・材料研究機構 ナノ材料科学環境拠点 (GREEN)

文部科学省の「ナノテクノロジーを活用した環境技術開発プログラム」の下で始まったGREEN。現在は社会システム全体を俯瞰した技術統合と理論・計測・材料創製を融合した材料研究との協働により研究開発を推進する、統合型材料開発プロジェクトの中核機関として位置づけられています。

17回目をむかえる本シンポジウムでは、国際的競争が激しくな

りつつあるエネルギー関連材料の研究開発を効率化し加速する新しい手法にフォーカスします。情報学を統合したマテリアルズ・インフォマティクスや、分子スケールからデバイススケールを網羅したマルチスケール計算を活用する試み、あるいは反応経路探索の自動化アルゴリズム開発など、招待講演とGREEN内での研究紹介を交えて広く議論を行います。

主な
招待講演者

菅 義訓氏 トヨタ自動車 基盤材料技術部 材料創生・解析室 室長

「自動車用材料開発における先端計測とマテリアルズ・インフォマティクスへの期待」

石川 潤氏 パナソニック株式会社 水素・エネルギープロジェクト室 水素燃料電池研究課 主任研究員

「3次元構造分析とモデリングを駆使した燃料電池の新規電極設計手法」

前田 理氏 北海道大学 大学院理学研究院化学部門 教授

「反応経路自動探索プログラムGRRMとその応用：
固体表面反応および結晶構造探索への展開を中心に」

※講演タイトルは変更になる場合があります。



NIMS NOW vol.17 No.6 通巻167号 平成29年12月発行

国立研究開発法人 物質・材料研究機構



古紙配合率70%再生紙を
使用しています



植物油インキを
使用して印刷しています