

俯瞰ワークショップ報告書

ナノテクノロジー・材料分野 領域別分科会
「材料設計・制御～物質科学の未来戦略(物性物理の観点から)～」

2015年12月25日(金)、26日(土) 開催



エグゼクティブサマリー

本報告書は、国立研究開発法人科学技術振興機構(JST) 研究開発戦略センター(CRDS)が平成27年12月25日、26日に開催した『俯瞰ワークショップ(WS) ナノテクノロジー・材料分野 領域別分科会「材料設計・制御」～物質科学の未来戦略(物性物理の観点から)～』に関するものである。

ナノテクノロジー・材料分野は物理学、化学、生物学を横断し、原子分子レベルでの観測や構造形成・機能発現などを通して、物質科学や材料技術、デバイス技術などを進展させ、さらには異分野の融合を促進しつつ進化する技術分野である。CRDSでは、ナノテクノロジー・材料分野の俯瞰報告書を2年毎に発行しており、直近では平成27年4月に「研究開発の俯瞰報告書 ナノテクノロジー・材料分野(2015年)」を発行している。これに続く2017年版を検討するに当たって、「材料設計・制御」「ELSI/EHS」「社会インフラ材料科学」「ナノエレクトロニクス」「バイオナノテクノロジー」の5つの領域に焦点を当てた活動を行っている。今回、その一環として『「材料設計・制御」～物質科学の未来戦略(物性物理の観点から)～』と題してワークショップを開催した。尚、来年度には「材料設計・制御」領域に関する化学分野のワークショップを開催する予定である。

「材料設計・制御」領域とは、ナノテクノロジー・材料分野全体に関与するものであり、所望の機能を実現させるための構造の設計・制御手法を用いて、サイエンスの新局面を拓き、我が国の将来社会を支え、産業に貢献しうる技術領域である。

本ワークショップでは、3つの分科会を設置して、物性物理の観点から「材料設計・制御」領域に関する国内外の研究動向の俯瞰、国として取り組むべき物質科学分野における将来の研究目標や方向性等について議論することを目的とした。ワークショップの進め方としては、各分科会から3名および全体俯瞰の観点から4名の計13名の識者による話題提供、分科会形式による集中討論、参加者全員による総合討論を実施した。また、ワークショップ開催に先立ち、招聘の識者には下記3項目に関するアンケートを実施した。

【項目1】

最近10年間程度の期間に見られた重要な成果

【項目2】

今後10年あるいはもう少し将来において重要となる研究分野あるいは方向性

【項目3】

我が国の科学技術の発展に資する、かつ、将来に新しい産業を興すようなインパクトのある研究開発プロジェクトの提案

上記の一連の検討・議論の結果得られた3つの研究開発の方向性の概略および物性物理から見た「材料設計・制御」領域の俯瞰図を示す。

1. 革新的量子技術を可能にするタフ&スマート量子物質

堅牢(タフ)かつ先進的(スマート)な量子物質と量子技術の開発を目指し、電子状態の位相や数学におけるトポロジーの概念に立脚した革新的量子技術を創出する研究を対象とする。量子位相やトポロジーの観点から、既知の物質に新たな理解を与えると同時に、新物質設計や積層デバイス開発へと有機的に結合した研究展開

を図る。具体的には、電子構造デザイン、物質合成・薄膜合成、量子物性の評価、さらにデバイス物性への展開研究が含まれる。また、トポロジカル物性が既存物質における超伝導や強磁性などと結合した相関現象も含め、トポロジー保護によって温度や不純物などで電子状態が乱されにくい物質や、新しい制御因子で動作するデバイス機能の探索を目指す。

2. 動的相転移・散逸構造に基づくスマートエネルギー機能

電子の「ほぼ均一」かつ「ほぼ平衡」な状態を扱っていたこれまでの物性物理から脱却し、電子の相互作用に由来する空間的に不均一な電子のテクスチャ（超構造）を作り出してそれを外場により制御すること、さらに外場によって動的な電子相変化や過渡応答などの非平衡状態を作り出しそれを制御することを目指す。舞台となる物質開発から始まり、空間的・時間的に不均一な電子の振る舞いの観測、大規模計算等による理論的解明、さらにそのような振る舞いの新規エネルギー変換素子等への応用までをシームレスに行える研究体制の確立が重要である。

3. 電子の動きを見る時空間分解スペクトロスコーピー

分光測定・時間分解測定・走査型プローブの最近10年の急速な発展を基に、時間的・空間的な分解能を極限まで向上させた革新的なスペクトルスコーピー技術を開発する。それによって、従来計測が困難であった電子の動きやスピン流、もしくはトポロジカル流を物質中で計測することで、新しい理解の枠組みを創出することを目指す。将来的には物質科学分野に留まらず、生体関連分野との融合などへの展開が期待できる。

物性物理から見た「材料設計・制御」領域の俯瞰図



これらの活動の結果は、CRDS でさらに検討を加えて、2016 年度末に発行を予定している「研究開発の俯瞰報告書 ナノテクノロジー・材料分野 (2017 年)」に反映させるとともに、今後国として重点的に推進すべき研究領域、具体的な研究開発課題の検討に活用していく予定である。

目 次

エグゼクティブサマリー	i
1. 開会挨拶 曾根 純一 (JST-CRDS)	1
2. 趣旨説明 十倉 好紀 (理化学研究所)	3
3. 話題提供①	7
3.1 「磁性・超伝導・強相関・光物性」～物性科学の既存の枠を打ち破れるか?～ 勝藤 拓郎 (早稲田大学)	7
3.2 室温超伝導に向けた電子活性化 野原 実 (岡山大学)	13
3.3 電子テクスチャと準粒子を活用した機能創造 求 幸年 (東京大学)	18
4. 話題提供②	21
4.1 「低次元・トポロジカル物質・デバイス物理」～新現象をデバイス革新につなげられるか?～ 塚崎 敦 (東北大学)	21
4.2 物性開発によるエネルギー圏拡大戦略～トポロジカル素励起物理～ 齊藤 英治 (東北大学)	25
4.3 非平衡性能指数の必要性～デバイスに資する物性物理～ 山本 貴博 (東京理科大学)	28
5. 話題提供③	33
5.1 「物質設計・計算機シミュレーション・情報物理」～物質と情報の新しい世界を築けるか?～ 村上 修一 (東京工業大学)	33
5.2 準粒子エンジニアリング 物質設計・計算機シミュレーションの観点から 有田 亮太郎 (理化学研究所)	38
5.3 計算機ナノマテリアルデザインと実証 吉田 博 (大阪大学)	42
6. 話題提供④	53
6.1 電子・イオン協奏: イオントロニクス 岩佐 義宏 (東京大学)	53
6.2 量子技術の最近の進展と今後の展望 樽茶 清悟 (東京大学)	58
6.3 直線運動から回転運動へー進歩信仰から持続性社会へー 永長 直人 (理化学研究所)	63
6.4 超伝導における最近の進展と今後の展望 松田 祐司 (京都大学)	70

7. 分科会検討結果報告	75
7.1 分科会1「物質設計・計算機シミュレーション・情報物理」～物質と情報の新しい世界を築けるか?～ ...	75
7.2 分科会2「低次元・トポロジカル物質・デバイス物理」～新現象をデバイス革新につなげられるか?～ ...	77
7.3 分科会3「磁性・超伝導・強相関・光物性」～物性科学の既存の枠を打ち破れるか?～	78
8. 総合討論 コーディネーター：十倉 好紀（理化学研究所）	79
9. 閉会挨拶 曽根 純一（JST-CRDS）	85
付録	87
付録1：開催趣旨・プログラム	87
付録2：参加者一覧	90
付録3：分科会メンバー表	92

1. 開会挨拶

曾根 純一 (JST-CRDS)

本ワークショップは、CRDSの「俯瞰ワークショップ」中の1つに位置付けられる。今回、物質科学あるいは物性物理の中で「どういうトレンドや動きがあるのか」「その中で日本として大きく育てるべき領域はどこなのか」「それに対して、我々JSTも含め、国はどのような戦略をとるべきなのか」について議論していきたい。

議論のアウトカムの一つは、国に対する提言だが、その具体的な形の例としてCRESTがある。今どんなCREST研究領域があるのか図1-1にピックアップした。

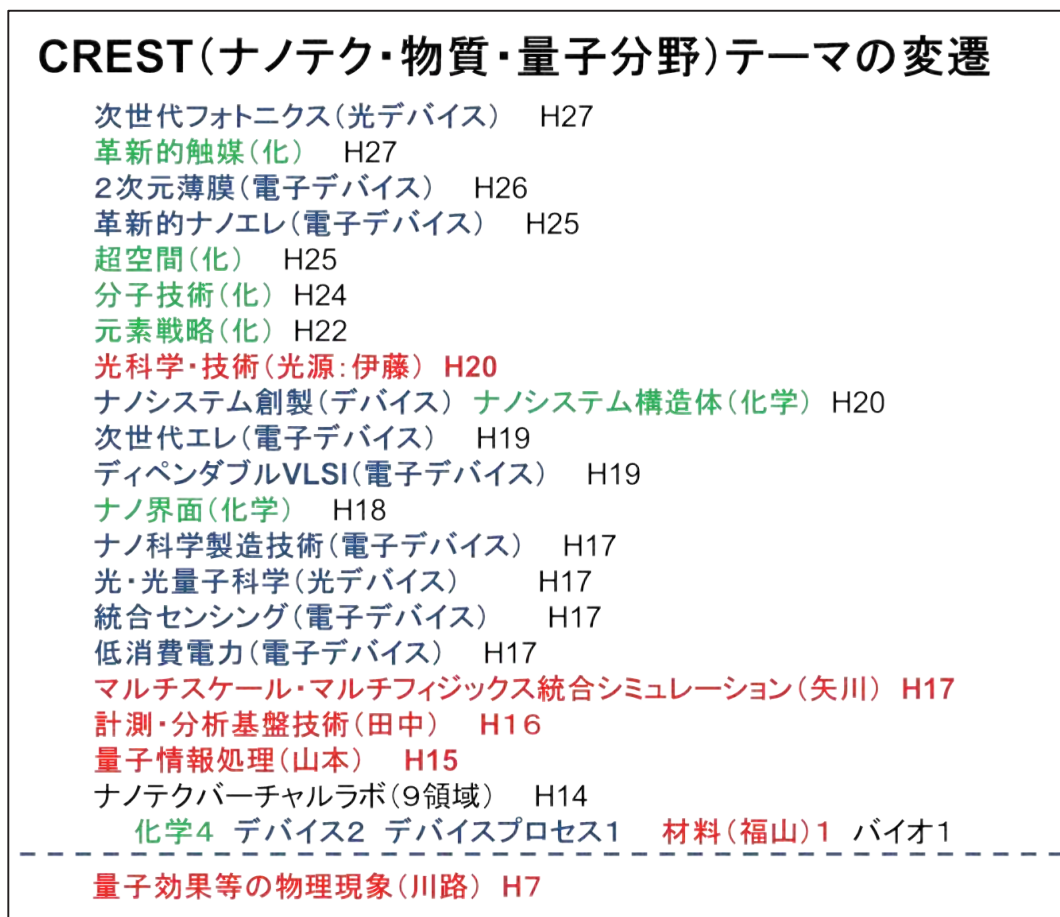


図 1-1

図1-1はCREST発足領域が最近のものから順番に上から下にリストアップされており、青字がデバイス系、緑字が化学系、赤字が物理系を表している。

ナノテクノロジーの最初のブームとして、平成14年にナノテクバーチャルラボがスタートした。化学系が4領域あり、物理系は福山先生が研究総括をした1領域だけだった。その後、意見は分かれるかもしれないが、山本先生の量子情報、田中先生の計測分析基盤、矢川先生のマルチスケール・マルチフィジックス統合シミュレーションといくつか物理系

の CREST 領域が発足している。時代の流れの中で、我々が直面している社会的課題をどう解決していくか、ということが主流になり、デバイス系がクローズアップされた。

一方で平成 20 年頃から化学系が増加し、物理系は平成 20 年発足の伊藤先生が研究総括の光科学技術あたりが最後ではないか。「元素戦略」「分子技術」「超空間」は、全て化学系といえる。

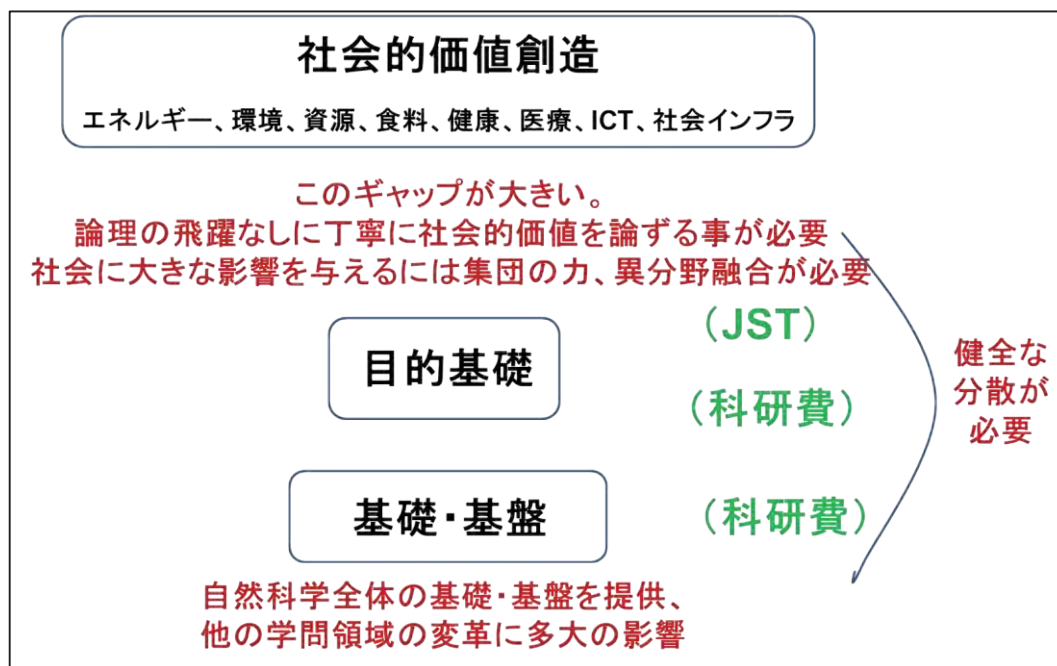


図 1-2

図 1-2 にあるように、基礎基盤から社会的価値創造までには健全な分散が必要であり、物理というのは自然科学全体に基礎基盤を提供し、バイオや化学といった他の分野にも多大な影響を与える学問であるため、JST だけではなく科研費でしっかりと物性の新しいステージを用意しておくことも重要である。その一方、社会的価値を創造する、エネルギー、環境、資源、食料、健康、医療、ICT、社会インフラなどの領域に対して、物理がどういような影響を与えられるのか、という問いに答えていくことも重要である。私が思うに、物理学では図 1-2 の中にある「目的基礎」と「社会的価値創造」のギャップが非常に大きいのではないか。社会を大きく動かす影響を与えるには、「目的基礎」から上の部分、1 人でなかなか立ち行かないところに対して、集団の力や異分野融合が必要になるであろう。今回のワークショップでは是非そういう議論をしていただきたい。

同時に、物理のテーマがなかなか発足しない現状に対する個人的な思いとしては、社会的価値にどう繋げるのかという議論の中では論理を余り飛躍させないで、丁寧に粘り強く論理を作っていくことをやらないといけないと考えている。物性物理あるいは物質科学がどのような方向へ進むべきか、物理の方々の力を結集した方向性が見出されることを期待している。特に、今回は若い人を多く招聘したので、積極的に発言していただき、次の時代は自分たちで築いていくんだ、という意気込みで議論に参加いただきたい。

2. 趣旨説明

十倉 好紀 (理化学研究所)

ナノテクノロジー・材料分野、特に物性物理の観点から皆様にご議論いただく。これまで JST や諸機関が「Target-driven Research」ということを強調していたが、今回のワークショップでは「Seeds-oriented Research」をキーワードとして、皆様と新しいコンセプトを考えていきたい。

では、シーズとは何か。シーズは我々の持続的な好奇心のためのものでもあるが、もっと大きな社会的なアウトカムのためである。社会的なアウトカムとしては、エネルギー、環境、安全・安心、健康などがある。強相関関係を例にとれば、「Strong Correlation for Energy」や「Physics for Sustainability」など、非常に高い社会的アウトカムに向かってシーズを伸ばしていくことが求められている。

より具体的なものとしてどういうアウトカムが考えられるか、参考として考えようと思ったものが第5期科学技術基本計画の中のキーワードである(図2-1)。

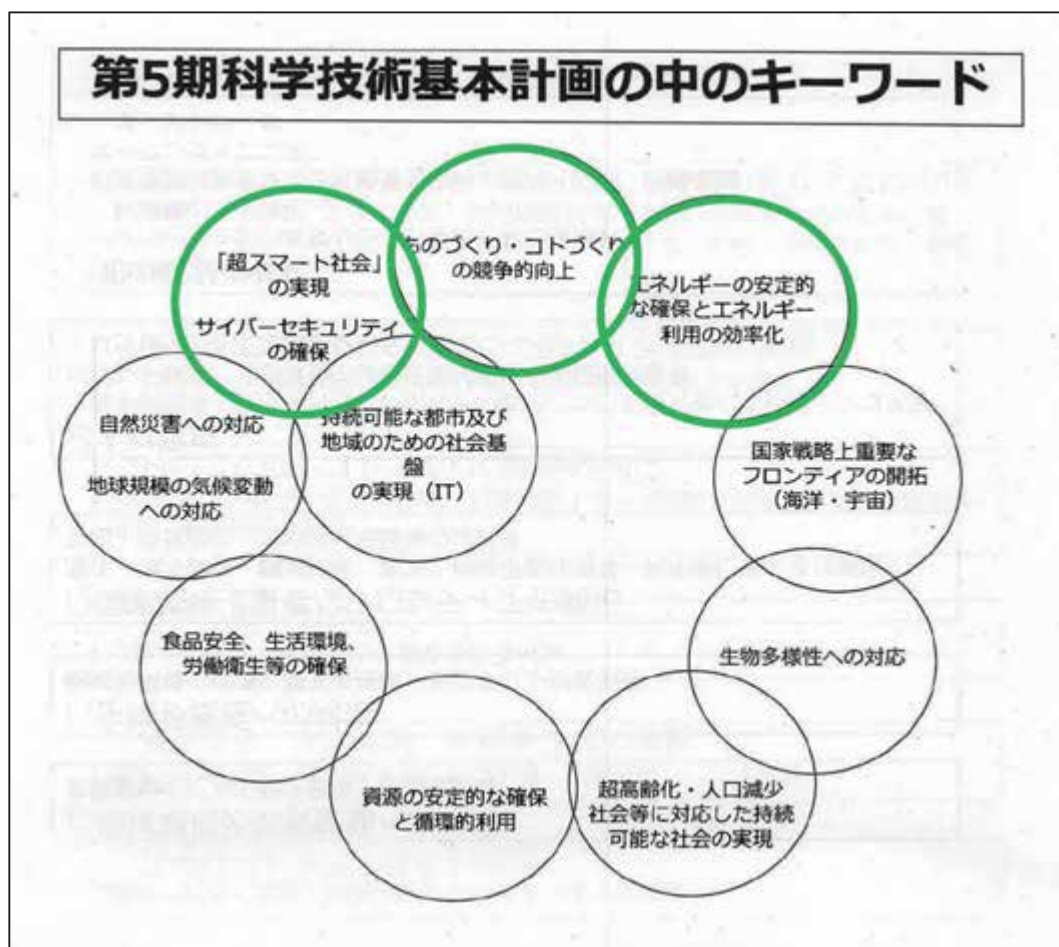


図 2-1

直接的に我々と関わるものが見えにくい構造になっているが、エネルギー、ものづくり、情報セキュリティの3つの区分に関しては、物性科学全てに対応するのではないかと考えられる。

また、図 2-2 は CRDS が作成した俯瞰報告書 2015 の俯瞰図である。ここには物質科学・物性科学の共通するキーワードがいくつか書かれているが、肝心なものが欠落していることがわかる。こういうところに大事なキーワードが抜け落ちないようにすることも重要である。



図 2-2

例えば、強相関電子材料という言葉は入っているが、実はこういうキーワードとかコンセプトというものは、どこか一つの分野が全て背負うものでもないし、ある分野とある分野でコンセプトが縦割りの分かれるというものでもないだろう。

強相関物理にしても、高温超伝導、超巨大磁気抵抗やマルチフェロイックス、トポロジカルな励起の物理と応用、非線形あるいは非平衡なダイナミクスなどの内容が非常に盛んである。ただ、強相関物理の中だけをぐるぐる歩いているだけではなく、外の分野に出て行けば、もしかすれば強相関でなくても高温超伝導は可能かもしれないし、電気磁気効果という意味でももっと広い分野があるかもしれない。それらがいずれ人類社会に役立つ機能、社会的アウトカムへと繋がっていくのではないかと考えている。

したがって、我々がやるべきことは、特定分野のキーワードを並べる言葉遊びをするのではなく、基本的なコンセプトから様々な分野が演繹されると同時に、いろいろなキーワー

ドを集めて新しいコンセプトを創出することであり、またはそれを政策に活かしていきたい。

本日夜と明日午前には分科会に分かれてご議論いただく。10人を超えると実質的なディスカッションができないだろうということで3つの分科会に分け、村上先生、塚崎先生、勝藤先生にリーダーをお願いした。またそれぞれの分科会の副題として「物質と情報の新世界」「新現象とデバイス革新」「物性科学の枠を超えて」というのを付けたが、あまりこの分科会の名称にはこだわらず、できるだけいろいろな分野の話にも踏み込んだ議論をしていただきたい。場合によっては分科会を渡り歩いていただいても構わないと考えている。



図 2-3

図 2-3 は、先日理研で開催した事前検討会での検討内容を踏まえて CRDS に作成してもらったものであるが、一番下の層に皆様から事前にいただいたアンケートの中のキーワードを並べている。既に 2015 年の俯瞰図 (図 2-2) には載っていないものがたくさん出てきており、「トポロジカル」、「波動関数エンジニアリング」、「ベリー位相」などは同じことを言っているとは思いますが、とにかく新しいキーワードがいろいろある。ここから上位概念をうまく作っていききたい。もちろん上位と下位は時代によって入れ替わる可能性もあるが、上位概念と下位概念の形をうまく作って、どういうことがこれからのサイエンス、技術の発展、それから社会的アウトカムに重要なのかということ議論していただきたい。

今回のワークショップでの作業としては、様々なキーワードから具体的な重要課題 (図 2-3 中の真ん中の 6 つの球に相当)、それらを包含するような新しい物性や機能の科学概

念をここから是非提言したい。もちろん、上位と下位の概念は変わりうるものであり、逆の流れもあるかもしれないが、本日と明日の2日間で活発な議論、密なコミュニケーションをお願いしたい。

3. 話題提供①

3.1 「磁性・超伝導・強相関・光物性」～物性科学の既存の枠を打ち破れるか?～

勝藤 拓郎 (早稲田大学)

分科会3のテーマである物質及び光に関し物性科学の既存の枠を打ち破れるか、ということについて話す。

まず、物質に関して、この10年での大きな出来事を図3-1-1に示す。この最初の3つは恐らくほとんどの方が賛成していただけたと思う。鉄系超伝導体は2008年、グラフェンが2005年、トポロジカル絶縁体に関しては、二次元系が2006年、三次元系が2008年あたりに発見され、この3つがこの10年間の物質関連の大きな出来事だったのではないかと感じる。個人的には、ペロブスカイト太陽電池も大きな発見であったと感じている。これは2009年に日本で見つかったが、今では効率が20%に届き、引用数が1500になるほど非常に大きな分野になっている。それ以外として、10年以上昔になるが、マルチフェロイクスやスキルミオンも物質関連で大きな出来事だったと思う。



図 3-1-1

この中で、新物質発見という意味で日本発だったのは、鉄系超伝導体、ペロブスカイト太陽電池、マルチフェロイクスであり、この10年という単位では、物質分野で日本はまだ競争力があつたといえる。これが物質の話であるが、同じように重要なのが測定という観点であり、測定技術の物質科学への貢献が大きかったと言える。測定手法の発展が物質科学に貢献したというのがこの10年の特徴である。例えば、超伝導やトポロ

ジカル絶縁体の研究は恐らく光電子分光がなかったら、ほとんど成り立っていなかったのではないかと。SEM、各種走査型顕微鏡、超高速分光、光学測定だけでなく、最近ではX線、電子線回折などにまで超高速という分野が進んできている。また、テラヘルツの技術も非常に進み、それが物質科学に寄与している。それから、原子層が見える高分解電子顕微鏡やスピン分解できるものが物質科学へ貢献している。ナノ構造・ナノ測定、あるいは放射光やパルス中性子のような大型施設といった最先端の測定手法の発展も物質科学に大きく貢献した。これらがこの10年の中身ではないかと思う。

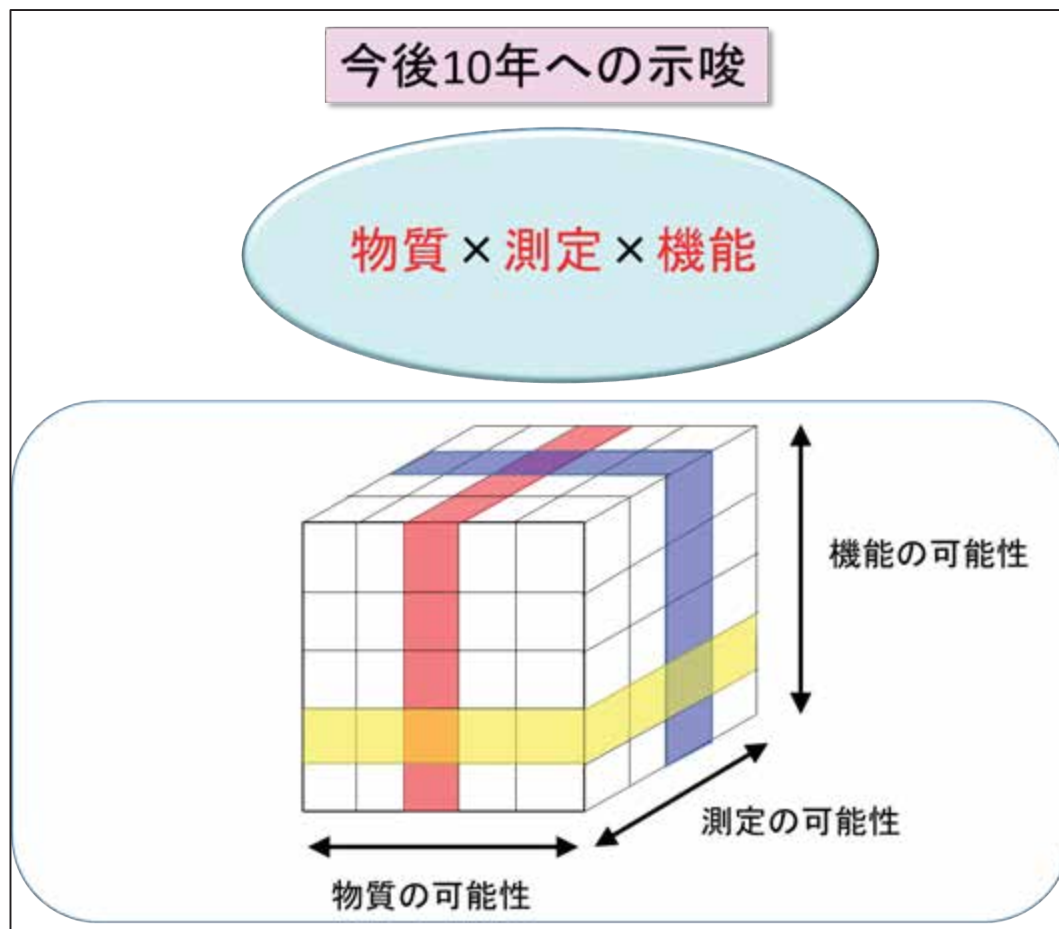


図 3-1-2

もう一つ、「機能」という観点から見てみると、既存の物質の新しい機能の発見が相次いだと言える。例えば、最初の鉄系超伝導は細野先生の鉄オキシニクタイトだが、これはもともと細野先生が透明電極として銅オキシ硫化物を研究されていたところに、超伝導が専門の神原さんが関わって、同じ結晶構造で同じ遷移金属ということで始めたものである。つまり、同じ物質ではないが、全く違う機能という形で発見があったと言える。ペロプスカイト太陽電池はもっと極端である。物質としては20年ぐらい前から光物性では有名だったが、20年の時を超えて突如太陽電池として花開いている。この場合は、物質としてもあつたし、測定としても太陽電池であるのでそんなに新しいものがあるわけではなく、機能のみが新しいと言える。このように、機能という観点から新しい話がでてきたということで、

今後 10 年の示唆として、図 3-1-2 に示すようなことを考えている。個人的には、この 10 年はいろんな意味で測定の方にお金の重点が行き過ぎていたのではないかと考えている。もっと物質の方にと考えているが、実は物質と測定だけではだめで、やはり機能のことをきちんと考えるようにしないと新しい発見もないと考えている。

もう一つはちょっと暗い話であるが、日本の物性物理の相対的な没落ということがある。これには幾つかの意味がある。対外的には中国、台湾、韓国の台頭、特に中国の勢いが激しいが、この 5 年間くらいでいえば、例えば鉄系超伝導でも二元系は台湾、異常量子ホール効果を発見したのもそうであり、最近はやりのリンの二次元電子系も中国から出てきている。特に後の 2 つは、物質も最先端で測定も最先端であり、ある意味物量で成果を上げている。このように、相対的に日本が没落していると思うところがある。科学技術予算に関しても、化学系は昔からお金が潤っているように感じるが、生命系が躍進してきた分だけ物理が追い出されている。測定装置が近年高額化し、既存の予算配分とのミスマッチがあるのではないかと。例えば、我々が使っている SQUID 装置は、20 年前に私が購入したときは 1000 万円ぐらいだったが、最近、早稲田で共同利用として買ったなら 4000 万円だった。ここまで高くなると、昔と同じような予算規模では買えなくなるわけで、いろいろと考えなければならぬことがあるのではないかとと思う。

これに関しての今後 10 年の示唆としては、1 グループで全部やるというのはだんだん厳しくなると考えられるので、共同研究をより円滑にするという方向が良いと考えている。これは余談になるが、国立大学に行くと優秀な人が余っていて、研究所へ行くと装置が余っており、私立大学には学生がたくさんいる。これを平滑化するのがいいと思うが、組織として平滑化するのが難しいのなら、このようなりソースを共同研究を通して平滑にするのが良いのではないかと。

物質関連で今後どういうものが重要かということについては、皆さんのアンケートも参考になると、図 3-1-3 に示すように 4 つぐらいにまとめられるのではないかとと思う。一番上はトポロジカル、超伝導などであり、いわゆる散逸がないという話である。2 番目は非平衡あるいは動的であり、光励起で平衡からずれた系のテーマなどがある。3 番目は強相関の本流で、揺らぎとか集団運動に関するものである。4 番目は物質という意味で、物質科学そのものをテーマにしたいと考えている。

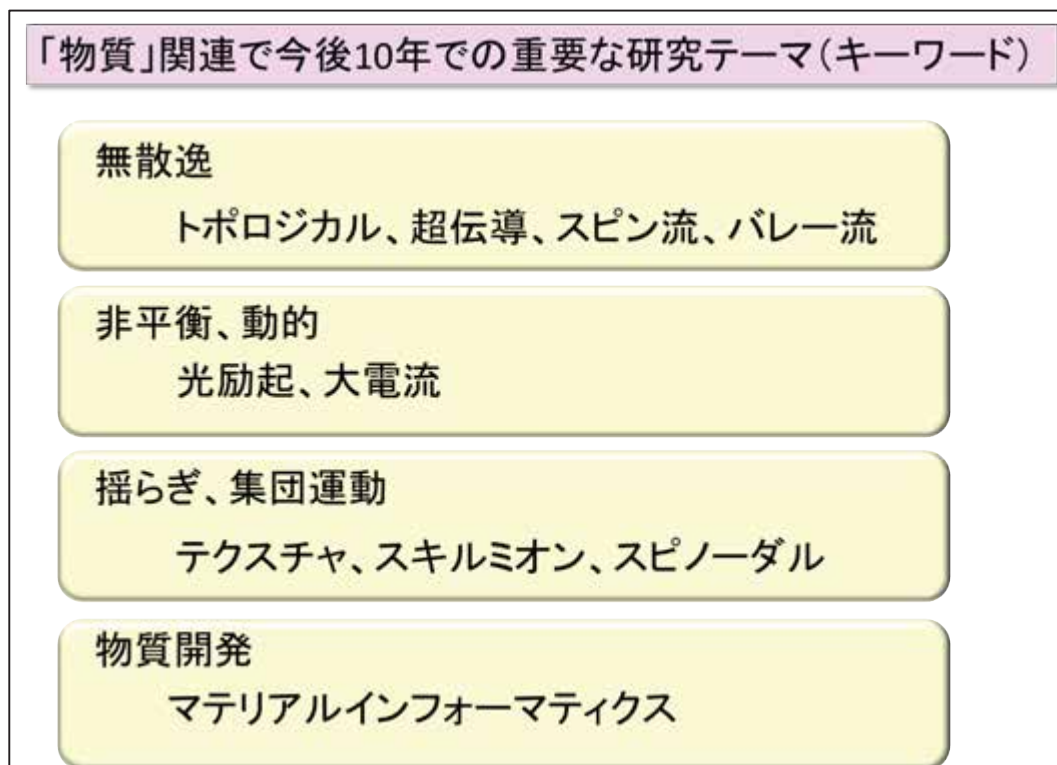


図 3-1-3

ここで取りまとめるアウトプットのクライアントは誰かということ、物理学者ではないとは言わないが、予算の獲得競争なので、クライアントとしては化学、生物、工学、一般の人たちになり、これらの人たちに向けて何か出す必要がある。この観点から見ると、言葉には意味をなすものとなさないものがある。例えば、超伝導、太陽電池、熱電効果、この辺は生物の人でも意味をなす言葉である。量子、トポロジカル、非平衡、量子情報、エッジなどは辛うじて意味がわかる。しかし、ディラック、マヨラナ、ワイル、スキルミオン、ラシュバ、ベリー、バレーはもう全く意味をなさない。では、意味をなさないのであれば、別の言葉に言い換えればよいかということ、それは違う。順番に概念を積み上げて説明していく必要があるのだろう。

例えば、回転という言葉はスピンや角運動量を思い浮かべるが、生物の人は F1 モーター(分子モーター) が回るのを思い浮かべ、化学の人は回転異性体という幾何異性体のことを思い浮かべると思う。我々にとっての回転が他の分野のものと何が違うのかと考えると、例えば一周したときに位相が揃っているとか、コヒーレンシーのことを言っているので、そのような概念を回転という言葉にもう少し足さないといけない。

我々が揺らぎというと、思い浮かべるものがある。新学術領域で揺らぎという言葉が入っているのを引っ張ってくると、生命系では揺らぎでもものが動いている話になる。ソフトマターでも揺らぎという言葉が出てくる。強相関係の揺らぎというのは多数の電子が量子力学的に揺らいでいる状態である。このような概念を付け足さないと、他分野の人たちにはわからない。

非平衡も同様である。非平衡は平衡の裏返しだが、平衡を扱うのは物理の特徴であり、化学や生物ではそもそも非平衡なものを扱っているもので、これらの人たちには非平衡と言っても多分通じない。我々が非平衡と考えているものは、多体系や量子の状態である。

散逸も同じであり、散逸というのは悪い意味があつて、非散逸という言葉がある。化学や生物の人たちにとって、散逸はそんなに悪いものではないので、非散逸といっても伝わりにくい。

超伝導は、超伝導だけだったらインパクトに欠けるとすると、極限状態での量子効果と言い替えると良いかもしれない。このようなことを考えてきた。

既存の枠を打ち破れるかの「枠」は何かと考えたときに、半導体を越える記憶素子やエネルギー変換でも良いが、環境や安全・安心、健康、福祉というところには直接つながり難いので、その間をつなぐ概念が必要であろう。例えばトポロジカルと環境の間にもう一つ概念が必要だろう。

つまり、研究テーマを設定するときに、物理の人は得てして内容を深くして間口を狭くする傾向があるようにあるが、研究費を獲得する上では間口を広くする必要があるのではないか。分科会のまとめ役としては、単に尖ったテーマを考えるだけでなく、間口をできるだけ広げること考えていきたい。

分科会では、図 3-1-3 の下の 3 つを中心に議論したいと考えている。下の 2 つはこの後、野原先生と求先生から話があると思うので、ここでは、非平衡・動的に関して私の考えを述べたい。

まだアイデアの段階であるが、基となる技術としては、超高速測定、光以外の測定、アト秒の測定、あるいは、テラヘルツ光で非常に強い電界をかけられるようになっている。ナノ構造下で非平衡状態があると、例えば物質ではどういうものがあるか、デバイス機能、大規模計算とのつながり、などを考えることができる。非平衡を説明するためには多体電子の量子的な状態が重要になると思うが、出口が何かあつて、最終的に何か売り文句が必要になるだろう。ほとんど平衡なデバイスから真に非平衡なデバイスへとつなげるために何が必要になるか議論したい。

【質疑応答】

Q: 研究テーマに関して、間口の広さと深さの話があつたが、物理は金をとるのが下手という点では全く同じ意見である。研究ファンディングとして、ERATO、FIRST、CREST のスキームは異なるが、どれを意識したものなのか。

A: CREST を意識している。例えば、物理や光の分野では、昔は変なものでも許されていたが、だんだんと「最先端」などのすごい修飾語がついたテーマになっている。化学の人は自分の弟子が入れるぐらいの枠を作っているような気がする。その辺のセンスが大分違うと感じる。

Q: 研究開発、共同研究の話の中で、国研は頭脳が負けているような話があつたが、予算が削られる中でどういう研究の仕方をすれば良いのか。拠点をつくったところで人が

密に集まらないと意味がない気もするが、日本の資源の活用法など何かアイデアはあるか。

A : CREST には幾つかのチームがあるので、機能探索などを一緒にやってもいいのではないかと思う。今の流れはこちらに行っていると思う。要するに、あるチームだけで全部やるというのは、中国に勝てないと思う。

Q : JST は既にいろんな実験をやっている。例えば、ナノテクバーチャルラボというのは、そういうことを意識してナノテクの装置が多く準備されていて、お互いに乗り合っていて、ナノテクバーチャルのプレスを立ち上げたと思うが、それは実効的に機能したのか。

A : そのご質問に対しては CRDS から回答する。最終的にはナノテクバーチャルラボは領域ごとにばらばらに見えたというふうには聞いている。ただ、その後ナノテクプラットフォームで先端設備を共用する流れがある。また、CREST で見れば、研究総括の考えでチーム間の共同研究をどんどん推進しているところもあり、全然分野が違っていても、強制的に設備を共有するといったことも試験的になされている。ただし、そのような実態が他の CREST 領域や全体には伝わっていないという印象がある。

C : 国研には装置があるということは、同じようなイメージを持っている。国研に資金が投入されどんどん新しい装置が入ってくると、その中で主役がだんだん変わってくる。運営交付金は削られ研究費がどんどん減ってくるため、だんだんインフラを使う部隊のほうメインになってくる。強力なインフラをうまく使える人がそこに集まって研究をする。それを使えない人は、分散しているんなところで次のネタを作ってくる。むしろそういうふうになっていかないといけないと思う。

3.2 室温超伝導に向けた電子活性化

野原 実 (岡山大学)

私の専門は超伝導物質の開発である。この分野で10年後に何が日本でできていれば良いか考えたときに、やはり室温超伝導の実現ではないか。中国、韓国には負けたくない。そこで、10年後に日本から室温超伝導を出すためのアイデアについて述べたい。

最近10年間における重要な進展として、2008年の鉄系超伝導の発見がある。さらに最近の進展として、驚くべきことだが、 H_3S (硫化水素) が150GPaという超高压下で、200Kを超える超伝導を示したことがあげられる。これをもう少し伸ばして、300Kの超伝導を実現したい。室温超伝導に向けて何をしたら良いか。私が提案したいのは、これまでに使われていなかった電子をどうにかして活性化させ、電気伝導を担わせるということである。 H_3S のように水素の1s電子を活性化させることは既に高压下でできている。カルシウム3d電子の高压による活性化も可能である。 H_3S にも当てはまるが、ファンホーブ(van Hove)特異点の電子を活性化する手もある。さらに、グラファイトの σ 電子や、フラーレンのHOMO分子軌道の電子を活性化することも考えられる。このような電子の活性化ができると、室温超伝導が実現できるのではないかと考えている。

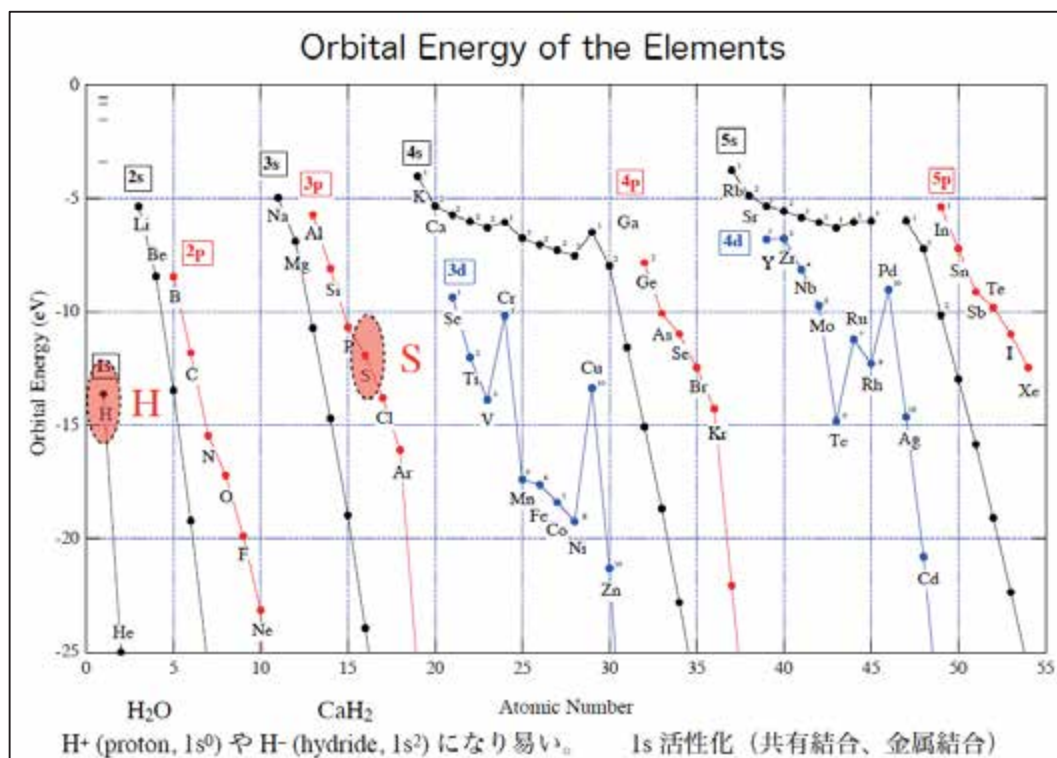


図 3-2-1

図 3-2-1 は私が最も好きなグラフのひとつである。原子軌道のエネルギーが原子番号でどのように変わっていくかを一覧にまとめたものである。水素は、ちょうど真ん中ぐらいのエネルギーに1s軌道があるため、電子をもらうこともできるし、与えることもできる。

ところが、通常は、水素をどの原子と組み合わせても、全部電子を失ってプロトン (H^+) になるか、電子をもらってヒドリド (H^-) になるため、1s 電子が電気伝導を担うのは簡単なことではない。

今回、 H_3S が高压で超伝導を示したのは、硫黄 (S) と組み合わせ、つまり水素 (H) の軌道エネルギーと同じぐらいの軌道エネルギーを持った元素と組み合わせ、超高压をかけて共有結合を実現したことで、1s 軌道が電気伝導を担うようになったからである。これが H_3S の超伝導であり、203K で反磁性シグナルが出る。これは単なる超高压の実験ではない。圧力をかけると H_2S が分解して H_3S が生成するという超高压の化学と、高压下における計測という物理学を組み合わせた実験である。

さらに興味深い点は、超高压下の硫化水素の状態密度を見たときに、フェミル準位に水素の 1s 軌道だけでなく硫黄の 3d 軌道の寄与もあることである。硫黄の 3d 軌道が電気を流すということは驚くべきことである。また、結晶構造が立方晶にも関わらず、二次元電子系のような対数発散のファンホープ特異点がある。これらが活性化されたおかげで、200K の超伝導が実現したと考えられる。

さて、図 3-2-2 に示すように、金属カルシウム (Ca) に超高压をかけると 3d 軌道の電子が活性化される。圧力をかけていくと、3d 軌道のバンド幅が広がっていく。4s 軌道のバンド幅も広がっていくが、エネルギーはどんどん高くなる。これは 4s 軌道が動径方向に節をもつために、圧力をかけると (波長が短くなり) 運動エネルギーが高くなることに起因している。(恐らく、これは間違い。3d 軌道に電子が入ると核電荷が遮蔽されるので、4s 軌道のエネルギーが高くなるのが正しい。) ある圧力で電気伝導が s 軌道から d 軌道にスイッチして、その瞬間に 25K の超伝導が現れるというわけである。したがって、圧力ではなく、常圧下でカルシウムの d 軌道が活性化するよううまい仕組みを見つけることができれば、高い T_c を実現できると考えられる。

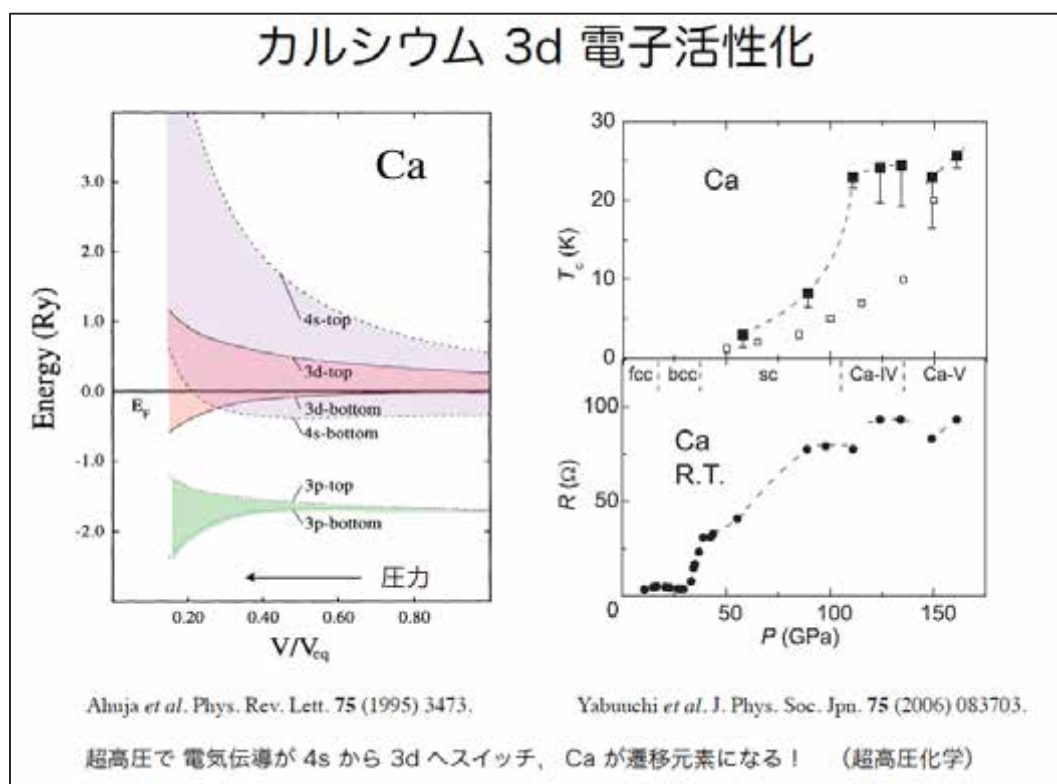


図 3-2-2

常圧でカルシウムの3d電子が活性化され超伝導が現れる例が一つある。それがCaC₆(T_c = 10 K)である。グラファイトの層間にカルシウムを入れたものだが、電気伝導は、グラファイトのπ電子ではなく、カルシウムの3d軌道の電子がほとんど担っている。これが常圧下でカルシウム3d軌道の電子が電気伝導を担う一例である。うまく設計すれば他の化合物でも3d電子が活性化され、さらに高いT_cが望めるのではないか。

先ほど述べたように、H₃Sの電子状態の特徴の一つに、鋭いファンホープ特異点がある。結晶構造が立方晶であるにも関わらずファンホープ特異点が出るのは、恐らくbcc格子の特徴だと思われる。立方晶でこのような電子状態が存在する化合物に充填スクッテルダイトLaRu₄As₁₂がある。この充填スクッテルダイト中のルテニウムは電子数が6個であるが、結晶の対称性からt_{2g}軌道とe_g軌道に分かれて低スピン状態になっているため、2つの軌道間にバンドギャップが開く。そのバンドギャップの中にAsのp軌道が1本だけ通ることで、きれいなファンホープ特異点を作ることが知られている。そのため、bcc格子のブリルアンゾーンに非常にフラットなパーフェクトネスティングのフェルミ面ができる。この物質では元素が重いためT_cは10K程度と低い、興味深い電子状態と考えている。このような電子状態を軽い元素で設計できるようになると、さらに高いT_cになるのではないか。

グラファイトの超伝導はπ電子が担っているため、今のところどう化学的に工夫してもT_cは0.1Kにしかならないが、σ電子を活性化させることでT_cが高くなった例がMgB₂である。グラファイトはπ電子が伝導を担っており、σ電子はフェルミレベルの深いとこ

ろにあるが、 MgB_2 では Mg^{2+} イオンのほうに π 軌道が伸びているため、相対的に π 電子のエネルギーが下がって σ 電子のエネルギーが上がり、 σ 電子が伝導を担うようになる。この σ 軌道の強い電子格子相互作用を使って T_c が 39K となっている。 π 電子も電気伝導を担っているが、これは超伝導発現を邪魔する。 π 電子を不活性化して σ 電子だけを活性化できれば、もっと T_c が上がるはずである。ただし、二次元系でそんなことができるのかという問題がある。それを解決する一つのアイディアはダイヤモンド構造を使うことである。もし炭素ではなくホウ素でダイヤモンド構造が合成できるとか、窒素でダイヤモンド構造が合成できるということになれば、全ての電気伝導が σ 電子に由来するため、室温超伝導につながるのではないかと。本当にそんなものができるのかは、わからない。

最後に炭素系について述べる。図 3-2-5 に示すように、 C_2 分子軌道の縮退を利用すると T_c が上がるということが知られている。例えば、 Y_2C_3 結晶中には C_2 分子が入っている。分子軌道はエネルギーの低い方から π 軌道、 σ 軌道、 π^* 軌道、 σ^* 軌道である。中性の炭素分子が一番下の π 軌道に電子が 4 個入っているが、これに 4 個の電子を加えると、二重縮退した π^* 軌道がハーフフィールドになる。ここで T_c が最も高くなり 18K となる。

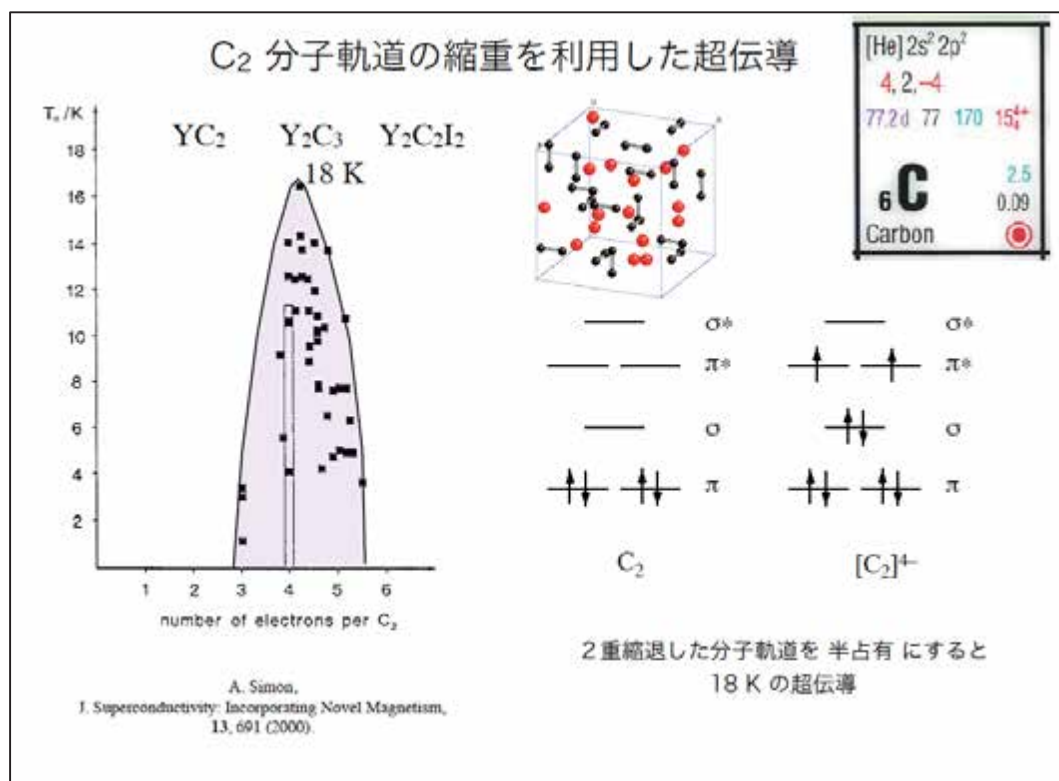


図 3-2-3

類似のことがフラーレンでも起こる。 C_{60} の 3 重縮退の LUMO 軌道に電子 3 個を入れてハーフフィールドにすると、最高で 38K になる。HOMO 軌道には既に電子が 10 個入っているが、この 5 重縮退のところを半分入れると相当 T_c が高くなるのではないかと考えられる。10 年位前のシェーン論文はウソであったが、このような分子へのキャリアドーピングの技術開発ができれば、さらに T_c が高くなるのではないかと想像している。

以上をまとめると、室温超伝導を実現するためには今まで使われていなかった電子を活性化することができないか、そのための化学と物理学を開発する必要があるのではないかと考えている。このようなことが実現できると、超高压フロンティアあるいは超高压化学という新しい領域ができる。物理の分野では、200GPaを超える領域での計測技術が必要になり、また、第一原理計算も非常に重要な役割を果たすと思われる。化学では200GPaの合成技術が重要になる。このような化学合成は、実は地球惑星科学の分野で十分やられているものの、彼らが興味を持っているのはマントルに大量に入っている元素(マグネシウム、カルシウム、シリコン、酸素など)であり、物性物理の研究者が一般に使っている希少な元素が高压でどうなるかという研究は進んでいない。このようなところにお宝があるのではないかと考えている。

【質疑応答】

- Q：電子活性化の意味をもう少し詳しく知りたい。軌道をフェルミエネルギーの近くに持っていくという意味なのか。
- A：そういうことである。例えばカルシウムのd軌道はエネルギーが高いので、そこに電子を入れることが普通はできない。しかし、例えば高压をかけてフェルミエネルギーのところまで3d軌道を引き下げることができれば電気伝導を担うようになる。あるいは、エネルギー的に深いところにあって普通はホールが入らないところにホールを入れる技術(軌道をフェルミエネルギーの近くに引き上げる技術)の開発も考えられる。このような意味で活性化という名前を付けた。
- Q：そうすると、1s軌道や3d軌道などの電子相関をコントロールするというよりも、むしろ全体のエネルギー位置の設計をするということか。
- A：単純にはそうである。
- Q：縮退軌道をハーフフィールドにする原理について聞きたい。カーボンのダイマーというのは固体の中に入っても2重縮退を持っているのか。固体になると対称性がかなり低くなるため、C₆₀では5重縮退であっても、固体になれば3重と2重とかに分かれるのではないか。
- A：もちろんバンドを作るため、そう簡単な話にはならないとは思っているが、電子数を形式的にカウントすることで、うまく整理できているのは事実である。

3.3 電子テクスチャと準粒子を活用した機能創造

求 幸年 (東京大学)

私が専門とする強相関系を論じる前に、これまで大成功を収めてきた半導体のことを簡単に振り返ってみたい。半導体の成功の理由を図 3-3-1 に 2 つ示す。1 つ目は、キャリアが単純な電子や正孔であり、電子間の相互作用を無視した独立粒子の集団として取り扱える点である。もうひとつは、電子の運動をポテンシャル(電場)によって制御している点である。例えば pn 接合では、非一様な空間構造のもとでポテンシャルの高低差(=勾配)を作り込むことによって互いに独立な電子・正孔の集団を制御する、というわかりやすい古典的な描像が成り立つ。半導体の物理はこうした非常にシンプルな原理に基づいているため、ほぼ思い通りのデバイス設計が可能であったことが、今日の大成功を支えている。

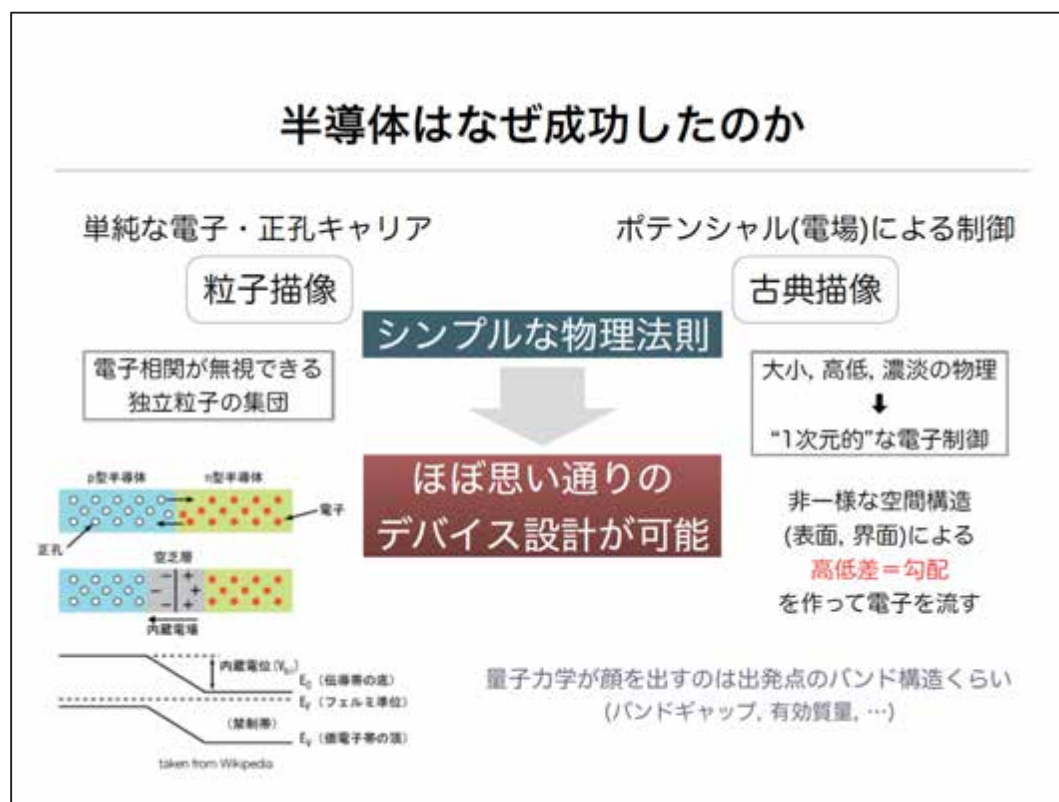


図 3-3-1

では、強相関系ではどういったことがアドバンテージになるのでしょうか。半導体ではフルに使われていない電子の量子性と電子相関の 2 つが鍵となる。この 2 つの要素は、半導体では実現が難しい新しい量子状態を生み出す源泉として、現代の物性科学の中心的課題のひとつとして盛んに議論されている。

そこで図 3-3-2 で示す 2 つの柱を考えると、ある程度系統的に面白いことを引き起こせるのではないかと。ひとつは「原子～ナノサイズの電子が持つテクスチャ」である。詳しく

は後述するが、これをうまく使うことで物質中に巨大な内部電磁場を生むことができるため、半導体におけるポテンシャルの高低差による一次元的な電子制御とは質的に異なった、量子力学的な位相の自由度まで含めた多面的な制御が可能となる。

もうひとつの柱は、単純な電子や正孔を超えた準粒子の概念である。後述する通り、準粒子は、複雑な相互作用系に現れる新しい量子力学的な粒子であり、量子多体系に対して質的に新しい理解を与えてくれるツールのひとつである。これら2本の柱を有機的に組み合わせる研究を進めることによって、物理を深化させるだけでなく、半導体では実現できていない新しい物性や機能を発掘していくことができるのではないかと考えている。

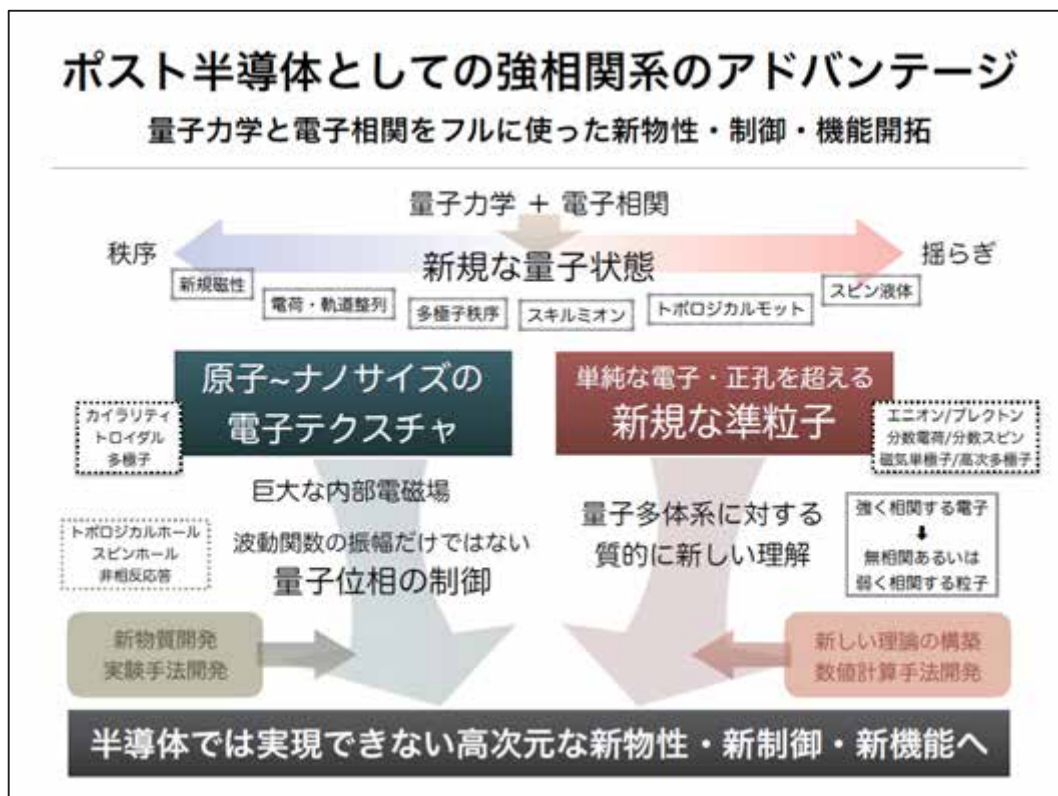


図 3-3-2

次に2本の柱について少し詳しく述べたい。

まず「原子～ナノサイズの電子テクスチャ」について述べる。電子が持つ自由度として電荷、スピン、軌道というものがあり、それぞれ固体中で様々なテクスチャを生み出すことで、新しい電子状態の源泉となっている。電荷自由度に関しては、例えば最近注目を集めている遷移金属ダイカルコゲナイト系では、様々な電荷配列が現れることで、新しいバレー自由度というものが活性化され、それに伴った新しい物性が引き出されている。スピンに関しては、スキルミオンをはじめとするテクスチャが見出され、カイラリティやトロイダルといった自由度を通じてトポロジカルホール効果やスピンホール効果などの新規物性の制御が議論されている。軌道に関しては、例えばマンガンペロブスカイト酸化物においては、軌道配列が巨大磁気抵抗効果をはじめとする物性に支配的な効果を及ぼしている。

こうした電子テクスチャは、ポテンシャルによる波動関数の振幅の制御だけでなく、位相の自由度まで含めた新しい制御を生み出す要素となっている。

次に「準粒子」について述べる。準粒子とは、相互作用し合う混沌とした粒子集団などの複雑な量子多体問題を単純化して理解する見立てのようなものである。例えば、互いに結合して振動する原子集団は「フォノン」という準粒子、スピンの集団は「マグノン」、金属中の電子集団は「ランダウ準粒子」で理解できることがよく知られている。さらには、電子の基本的な自由度が分裂して現れる新しい準粒子も存在して、最たる例としては、分数量子ホール効果に現れる分数電荷を持った「複合フェルミオン」が挙げられる。最近ではスピンも分数化することが指摘され、「マヨナラ準粒子」が現れうることが論じられている。このような分数化した準粒子は、ボース統計でもフェルミ統計でもない量子統計に従うこともある。こうした新しい準粒子を制御し活用することで、全く新しい物性を引き出すチャンスがある。

これらの新しい概念を具体的にどのように新物性につなげていくかは非常に難しい問題であるが、「原子～ナノサイズの電子テクスチャ」と「準粒子」の2つの柱をうまく活用して、波動関数の位相自由度まで含めたエンジニアリングを行うことで、新しい物性や機能の創造と制御を開拓していくことができると考えている。

【質疑応答】

Q：カイラリティやトロイダルを制御するにはどうすればいいのか。

A：ドメイン壁を制御することで可能になるのではないかと思うが、どういうドメイン壁が安定で、どうすれば制御できるのかはこれから議論していく必要がある。

4. 話題提供②

4.1 「低次元・トポロジカル物質・デバイス物理」～新現象をデバイス革新につなげられるか?～

塚崎 敦(東北大学)

分科会2では、新現象からのデバイス革新というテーマで議論する予定であるが、物質の中の一つの物性ではなく、何かしらの刺激を与えて、どんな応答を得るかという視点がデバイスとしては重要ではないかと考えている。私自身はこれまで薄膜合成、酸化物やトポロジカル絶縁体といった物質系の界面形成、発光ダイオードや二次元系における量子ホール効果などの研究をしてきた。また、量子異常ホール効果、鉄セレン系超伝導やイオン液体 FET の研究も対象としてきた。

分科会2のメンバーの方々のアンケートの中で「最近10年間の重要な成果」について私なりにまとめた結果を図4-1-1に示す。

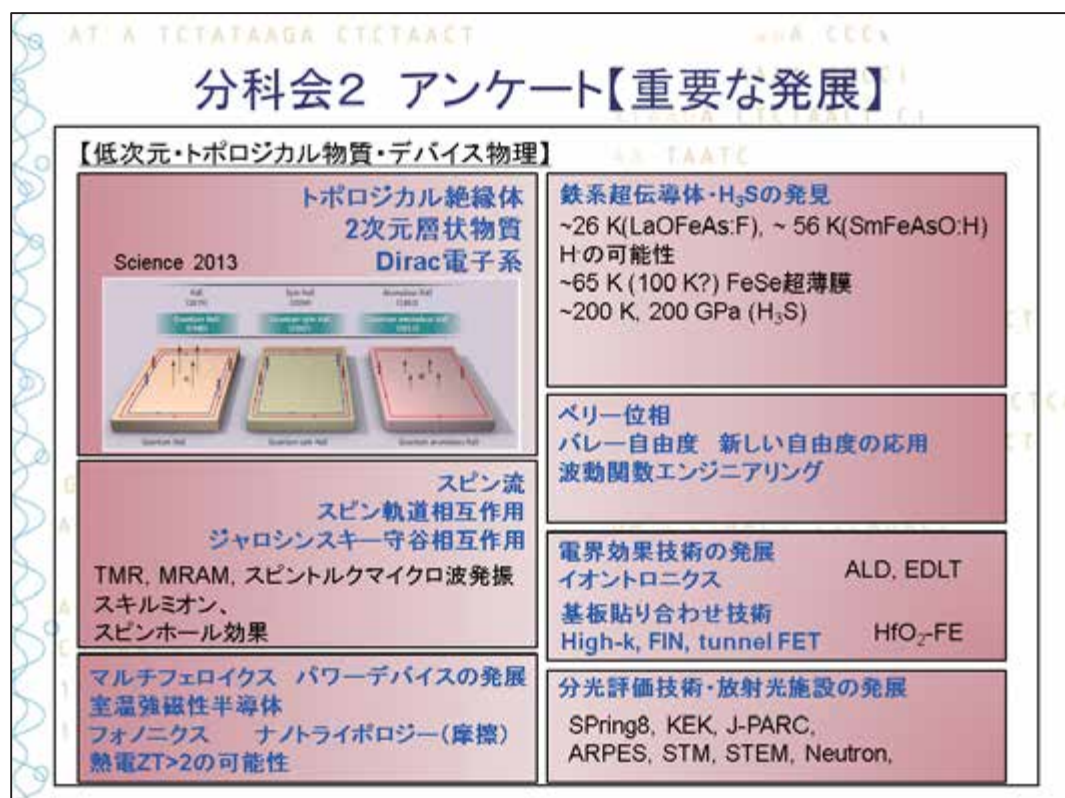


図 4-1-1

多く出たキーワードとしては、「トポロジカル絶縁体」「二次元層状物質」「ディラック電子系」、これらはグラフェンがきっかけになっている。もう一つ多く挙げたものとしては「鉄系超伝導・H₃Sの発見」。他には「スピン流」「スピン軌道相互作用」など TMR や MRAM などのデバイスを見据えた、磁性もしくはスピントロニクス分野に関するもの

である。これら全てに関連するところとして「ベリー位相」「バレー自由度」「波動関数エンジニアリング」といったものがあつた。それ以外では、電界効果技術の発展、イオントロニクス、FETに関連するデバイス、マルチフェロイクス、室温強磁性半導体、加えて、分光評価技術や放射光施設などの発展というキーワードが含まれていた。

次に今後 10 年の方向性ということで出たキーワードをまとめたものが図 4-1-2 である。



図 4-1-2

やはり一番多く出てきたものとしては、高い H_c , J_c , H_c を持つ超伝導体の実現もしくはその発現機構の理解があつた。要するに、室温超伝導物質の発見である。これを、先日の理研での事前検討会に出てきたキーワードに対応づけると、「超室温量子物質技術」「強相関量子物質・量子技術」という分野に含まれるであろう。トポロジカル絶縁体や二次元層状物質であるダイカルコゲナイト等は「トポロジカル量子物質・量子技術」の中に入るだろう。その中のものとして、複合物性としてトポロジカルと強相関とスピントロニクスといった要素を活用できるのではないかと、という指摘もあつた。熱電変換、微小エネルギー変換という「スマート量子物質・スマートナノ物質」の中にはスピン流などのスピントロニクスの発展に寄与するものがいくつか入っている。電圧による磁化制御はマルチフェロイクスと強い関連があると思うが、そのような技術を活用したデバイスの発展、それに加えて、ベリー位相やバレー位相、非平衡状態というキーワードも出てきている。理論や物質合成の強化とともに、機能もデザインしようというインフォマティクスもキーワードとして出てきた。あとは、イオントロニクスや量子フォトンクスなども出てきている。

以下に私の提案内容を示す。上記の話題でも触れた通り、私は薄膜や二次元系の物性開拓を行ってきた。最近、物質系で言えばトポロジカル絶縁体やカルコゲナイト系と酸化物、物性で言えば超伝導や量子位相の制御に注目している。

従来、量子ホール効果というのは、二次元電子系に対して強い外部磁場を与えることで試料端に電気(エッジ状態)が流れる現象である。磁性トポロジカル絶縁体を用いた場合、外部磁場を用いることなく自発磁化のみでエッジ状態を作ることが可能(量子異常ホール効果)で、非散逸の電気伝導チャンネルをエッジにつくることができる。実際には、どちらの場合も、物質のバルク内にはエネルギー損失がないが、系全体で見ると、エッジのどこかでごくわずかながら光や熱としてエネルギーを損失する。

量子異常ホール効果のメリットとしては、磁化の方向を上向きもしくは下向きに変えるだけでそれぞれの試料端にできるエッジの方向を変えることができ、それを単純に抵抗として検出できる。その抵抗は量子化された h/e^2 にスケールされているため、非常に微小な電流で大きな電圧を出すことができるとともに、安定した状態であれば、量子化値しかとらない。また、グラフェン研究においても同様に非散逸の伝導が存在する。最近報告されたものであるが、バイレイヤーのグラフェンを使って2つのバンドにギャップを作ることによってバレー流というものを流すことができる。これらの量子異常ホール効果やバレー流という非散逸状態を如何にエネルギー損失が少ない形で、もしくは外部から与えるエネルギーを少なくして利用することが可能かを日々考えている。

このようなことを思い当たった背景として、私自身がこれまでに関わってきた分野が関係しているということを説明したい。

SiO_2 もしくは GaAs/AlGaAs の二次元電子系というものは、真空装置の中でエピタキシャルプロセスもしくは SiO_2 であれば熱酸化やイオン注入などをして作るが、デバイスには「作る」という技術が大きく貢献していることは間違いない。青色LEDにしても、TMRにしても「作る」という技術が革新的機能に直結していると考えられ、マテリアルサイエンスの研究が物性物理分野においても非常に重要な役割を果たしているのではないかと考えている。また、手前味噌ではあるが、 GaAs/AlGaAs に続いて、酸化物/酸化物の界面においても偶数分母分数状態と呼ばれる複合フェルミオンを安定させることに成功しており、やはり「作る」技術が新しい粒子や新しいチャンネルを産み出すことにも繋がると考えている。

グラフェンに関しては、スコッチテープと電子リソグラフィという2つの技術が非常に重要になっているが、本当に汎用的なデバイスの実現や次世代の要素技術開発を実現していくためにはもう一段の技術革新が必要ではないか。その意味では、Geimの言うブロックビルディングという考えは次世代素子開発に向けた新しい発想であり、有用ではないかと感じている。なぜなら、エピタキシーとは全く違う概念であり、角度を変えて積層することも可能であるため、面白い技術に発展していく可能性を感じている。

もう一つ、この10年間に発展した技術として、電界制御技術が挙げられる。かつて、ベル研で開発された点接触型ゲルマニウムのトランジスタから人類はシリコンのコンピュータを作るまでに至ったが、電子濃度をさらに広く制御できるようになれば、シリコ

ンなどの半導体だけでなく、強相関係の銅酸化物やマンガン酸化物などの物質でも、その物性を制御することができるのではないかと、言われたのが10年ほど前だった。当時は、強誘電体をゲート絶縁層とする電荷量制御の研究が多かったと思うが、この10年で電界制御技術が大きく発展した。その一つとして、電気二重層を使うトランジスタが挙げられる。電気二重層を活用することで高密度な二次元電荷制御を可能にしたという点が挙げられる。電荷量を制御するという意味では、非常に強力なツールとして、様々な超伝導体の発見にも貢献し、強相関係デバイスを同じ方法で制御できると、伝送制御も可能であることが示されている。

もう一つは、Atomic Layer Deposition (原子層堆積) 技術がこの10年の間に様々なところで利用されているのではないかと感じている。この技術によって、III-V族半導体のMISFETが使えるようになり、さらに金属系の強磁性薄膜の電界制御においても興味深い研究成果が報告されている。つまり、デバイスとは、物質単体の性質だけではなく、界面などにおいて、何かしら制御する、もしくは外場として何を使うかという点からも、今後さらなる技術革新をもたらす可能性を持っていると考えている。

トポロジカル絶縁体に関しては、私自身は薄膜を研究対象としているため、薄膜技術に特化して述べる。トポロジカル物質ではない基板の上にトポロジカル絶縁体を堆積させると、表面(真空や大気と物質との境界)もしくは基板との境界に2つのディラック準位を作ることができる。この2つのディラック準位をエネルギー的にどう制御するかということ自体が、新しい積層自由度として、グラフェンのみでは実現できない、トポロジカル絶縁体だからこそできるデバイスの可能性を示唆していると感じている。そのためにもバルクの絶縁性をとにかく高めて、表面準位のみ物性制御を実現することが必要であるが、今までに知られるトポロジカル絶縁体ではバンドギャップが大きなものでも0.3eVであるため、実際に室温で絶縁化して動作させることは難しい。今後、新しい物質設計指針や物質群の発見、さらには作製技術の進展が必要で、今は高品質な薄膜を作るための技術を開発している。

トポロジカル絶縁体研究に関連する先行分野も多い。表面状態の関連からグラフェンの技術、量子異常ホール効果に欠かせない磁性不純物添加の関連から希薄磁性半導体の研究、さらには鉄系超伝導体と言った研究との相関が非常に良いと考えている。実際にディラック電子系のベリー位相もしくはスピン運動量ロッキングと呼ばれる特徴に関連して、特に室温でのスピン流生成はすでに多様な研究が実施されており、トポロジカル絶縁体薄膜の作製技術が高まっていくことで今後さらに様々な分野の先にある物性を引き出せるのではないかと考えている。

【質疑応答】

Q: 先ほどのブロックビルディングの話で、どういうメリットがあるのか。

A: スコッチテープをうまく駆使して積層することで、格子整合とか格子の面内回転や上下層の回転などを変えることが可能になり、従来の真空プロセスを経て作るものとは全く異なる人工設計や物質設計が可能になるのではないかとという意味である。

4.2 物性開発によるエネルギー圏拡大戦略～トポジカル素励起物理～

齊藤 英治 (東北大学)

今後 10 年のことを考えたとき、現在のスピントロニクス応用の推進というのは当たり前前の話で、スピン RAM が成功すれば我が国産業にとって非常に重要であることは論じる必要もないため、それ以外の点を指摘したい。

まずはニーズを確認したい。ここ数年社会との接点が少し変わってきた印象がある。最近、企業の方との会話では「これは何年後に使えますか」という話は比較的少なく、「大きな流れとして将来どういうことが起こると考えていますか」といった質問をよくされるようになってきている。物理に対しては小さなスペックの向上よりも大きな飛躍を期待されていると認識している。学生との会話でも同じようなことが言えるであろう。

では、私の専門であるスピントロニクス基礎物理からどのような大きな飛躍が期待できるかということだが、日本は明らかにエネルギー、廃炉、資源、安全保障といった切実な問題を抱えており、ここにスピントロニクスが解決しうる大きな飛躍のニーズがある。



図 4-2-1

その中でもエネルギー、廃炉の2つは非常に深刻な問題である。ここ数年でエネルギーの効率的な使い方と省エネルギー、廃炉をなんとか解決しないとイケない。そのソリューションとして、過酷環境において自律動作するIoTなどのデバイスを作り出す必要がある。図 4-2-1 の左側の荒野のような人が住んでいないような場所にセンサをつけ、さらに消費する電力もその場所で作らないとイケない。さらには、炉心や福島のような人が入ってイケないような場所でも使えるようにしないとイケない。将来的には宇宙産業への応用も重要になるであろう。そういうところで使うためには、室温以上できちんと動作して、安定で物性が守られている必要がある。特に、炉心や廃炉に関しては放射線に弱いものは

使えない。実際に、スピン RAM として現在一番使われているのは、商用の飛行機やロケット専用のものである。また、戦闘機の中には磁気バブルメモリというものが使われているが、FETではなくコンデンサもないため放射線でもそんなに損傷しないが、それがスピン RAM に変わりつつある。おおよそ 1500 億円ほどのマーケットになりつつあり、年 3% の成長率である。

重要で本質的な解決法は、電子が持つ電荷以外の性質を使うことである。それは、スピンと位相である。これらは従来は使えなかった。なぜなら電磁気では基本的には電荷的に中性のものは結合しないため、何かの電荷を持っていないと使えなかった。最近、スピンを使う有効な方法が見つかり、それは位相を使うことと等価である。ベリー位相という概念を使うと、中性励起を制御することが可能になる(図 4-2-2)。マグノンホール効果やスカルミオンなどの特別な構造であるだけでなく、普通の磁石を持ってこるだけでも、スピン軌道相互作用に似た性質が作れ、また、長距離相互作用も近い性質を作ることができるため、熱をコントロールできる状況になる。

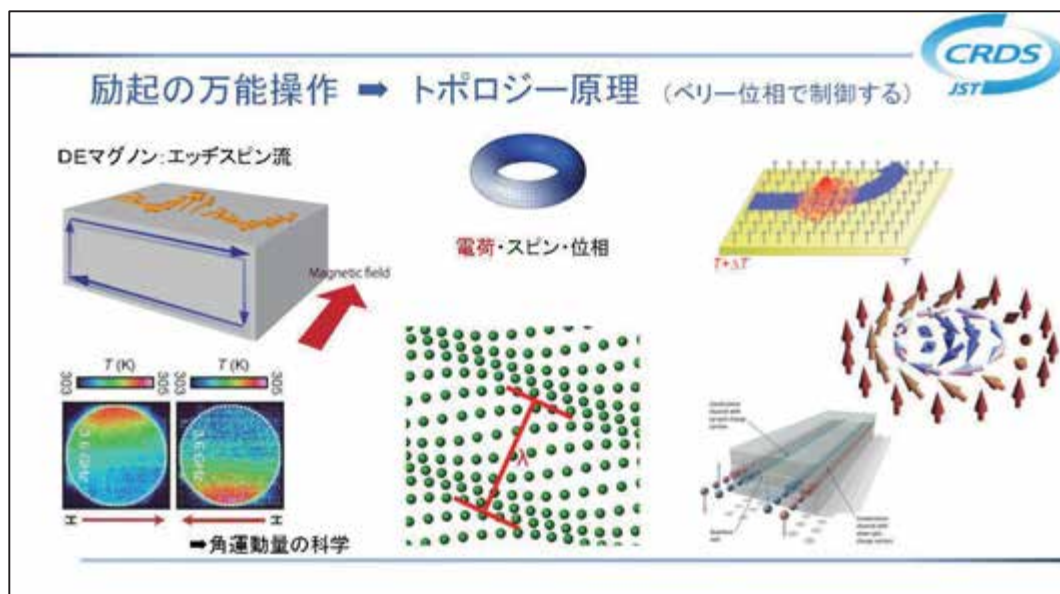


図 4-2-2

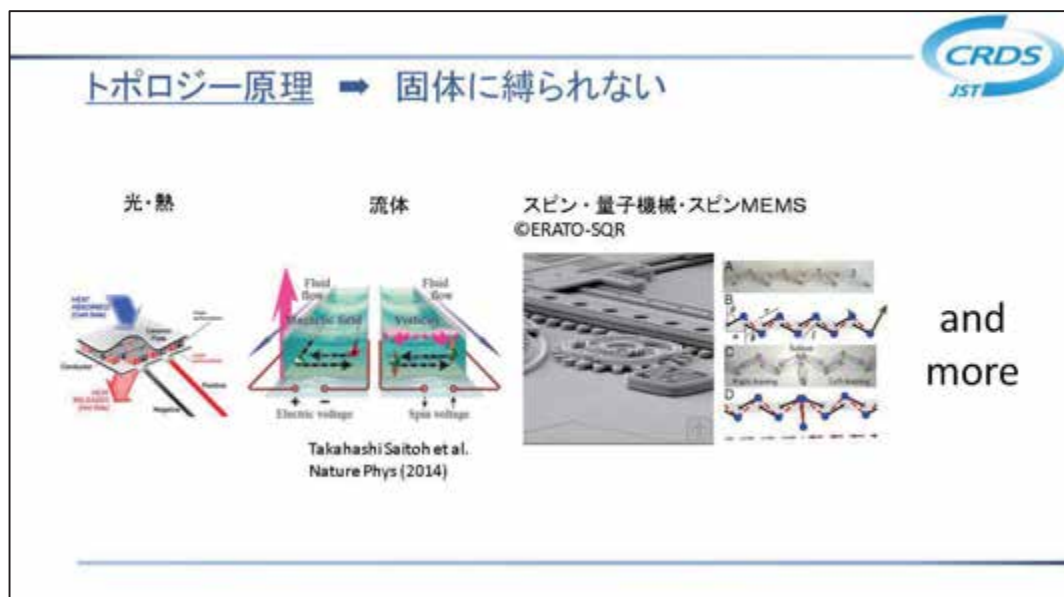


図 4-2-3

この原理には普遍性があるため、電荷が不要で、ある相互作用を制限しない方法であるため、フォノンやスピン波など、いろいろなものに使える。さらに言うと、固体の中でなくても使える。先ほどの求先生のお話と近いものがあるが、この原理は電荷から他の素励起に広がるだけではなく、固体の外のものにも使えるという点で、例えば、日本に優位性がある MEMS とかとの相性がよく、日本が世界と勝負できる有効なルートの一つではないかと考えている (図 4-2-3)。

まとめると、基本的に固体中の励起はベリ一位相で制御できるため、電荷を持たないものも含めた素励起を制御することが可能である。また、固体の外励起も利用したナノテクノロジーとも相性がよい。どういうものに使えるかと言うと、IoT のエネルギーハーベスト、廃炉工学、将来的にはニュートラルであるがゆえに宇宙航空産業にも使えるのではないかと考えている。

【質疑応答】

Q: トポロジーの原理は固体に縛られないということで、流体や物体の話があったが、具体的にはどういうことなのか。

A: 流体に関しては、流れているということは表面に粘性があるということだが、粘性というものはスピン軌道相互作用と似た形になっていて、ボルテックスがつけられる物理とスピン軌道相互作用の物理には類似性がある。そう考えると、ボルテックスがあるということは非自明な状態であり、そこからスピン流や固体状態を使ってその周辺の物性を制御することを考えると、固体状態を中心にしてナノ流体や MEMS とかを含めた広い学術体系を作っていくのではないかと考えている。

4.3 非平衡性能指数の必要性～デバイスに資する物性物理～

山本 貴博 (東京理科大学)

10年先を見据えた話題提供というのは中々の難題だが、私自身のこれまでの経験をもとに、今後の産業界、とりわけエレクトロニクス業界から物性物理の分野に求められるであろうことをざっくばらんにお話し、夕方以降の議論のたたき台になればいいと考えている。電界効果トランジスタや太陽電池などのデバイスの性能を定量的に評価するために、様々な性能指数が定義され、性能指数の向上に向けた努力が行われている。例えば、電界効果トランジスタの動作速度に関わる性能指数としては、サブスレッショルド係数があり、室温での限界値はおおよそ 60 mV/桁程度である。また、pn 接合の太陽電池では、ショックレー・クワイサー限界があり、単接合の pn 接合では 33.5% である。圧電変換であれば e 定数や d 定数、熱電変換だと ZT やパワーファクターという性能指数がある。

デバイス設計に資する物性理論

- 熱平衡あるいは局所平衡から**非平衡物性**

- 低温量子物性から**室温(または超室温)量子物性**

- 線形応答から**非線形応答**

- 単一物性から**複合物性**

図 4-3-1

これらはいわゆる熱平衡状態あるいは線形応答を前提とした性能指数であるが、これまで多くのデバイスの性能の評価に役立ってきた。しかし近年の各種デバイスの動作環境は、以前にも増して、非平衡性や非線形性が顕在化する環境となっている。言い換えると、従来の性能指数では役不足な状況が多く見られるようになってきた。

例えば、熱電変換素子を自動車に搭載することを考えると、600K ～ 800K 程度の高温部と 300K 程度の外気との温度差 300K ～ 500K での熱電変換性能を評価する必要がある。

たとえ温度差が小さい場合でも、素子サイズが小さくなると、温度勾配が大きくなり、線形応答から逸脱することが懸念される。今後においては、平衡状態から極端に逸脱した非平衡状態や非線形効果を考慮に入れた性能指数が必要になってくるように思われる。

性能指数とは話が異なるが、もの作りの現場では、単純に性能指数だけを上げただけでは役不足であることが多く、機械的強度が足りない、とか、化学的に不安定といった問題が出てくるため、今後の物性物理は、単一の物性理解に留まることなく、複合的な物性制御が要求されるように思われる。(図 4-3-1)。

話を性能指数に戻して、ここでは、熱力学第二法則と関係する熱電変換の性能指数である ZT について簡単に話をしたい。熱電変換とは、物質の両端に温度差を与えると電位差が生じる現象(ゼーベック効果)のことであるが、これは高熱源と低熱源の間で働く熱機関のようなもので、熱電変換の場合には少なからず熱流が流れるため、カルノー効率を超えることができない。熱電変換物質の変換効率を ZT の関数として示したものが図 4-3-2 のグラフであるが、当然、最大効率はカルノー効率には届かない。

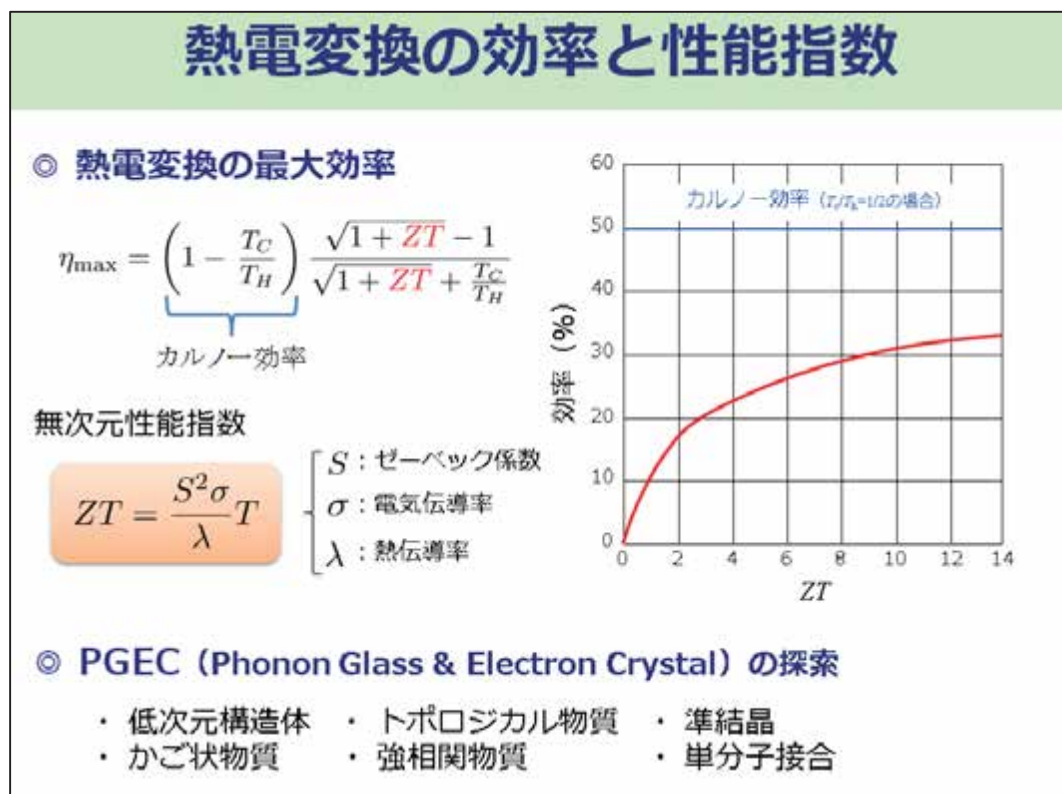


図 4-3-2

ここで、ZT という性能指数は、ゼーベック係数 S、電気伝導率 σ 、熱伝導率 λ によって決まるものである。もし、熱伝導率 λ がゼロの場合(熱流が流れない場合)には、ZT は無限大になって、変換効率はカルノー効率となるが、実際には熱伝導率が有限であるため、最大効率はカルノー効率よりも低くなる。現在の熱電材料開発は、この ZT の値を大きくすることを目標に、材料開発に取り組んでいる。

ZT を大きくする戦略の一つに低次元化することが挙げられるが、カーボンナノチューブで作った薄膜で試してみると、室温と体温の温度差でも発電する。しかし、物質科学としては1本のカーボンナノチューブの熱電物性を知りたいわけで、そもそもバルク物質でも熱測定が大変だったところを、ナノレベルで計測するのは困難を極める。また、先に述べたように、試料サイズが小さくなることで、非線形効果の顕在化するため、ZTによる性能評価にも限りが生じる。例えば、10ミリのものが100ナノになると、温度勾配は10万倍になってしまう(図4-3-3)。

こんな状況であるため、非平衡状況下で様々な材料を評価する方法を物質科学や物性理論の立場から与える必要があるのではないかと、ということが私自身の問題意識である。以上より、非平衡の物性予測を精密科学化していくことは、物性物理学の1つの重要な在り方であると考えている。

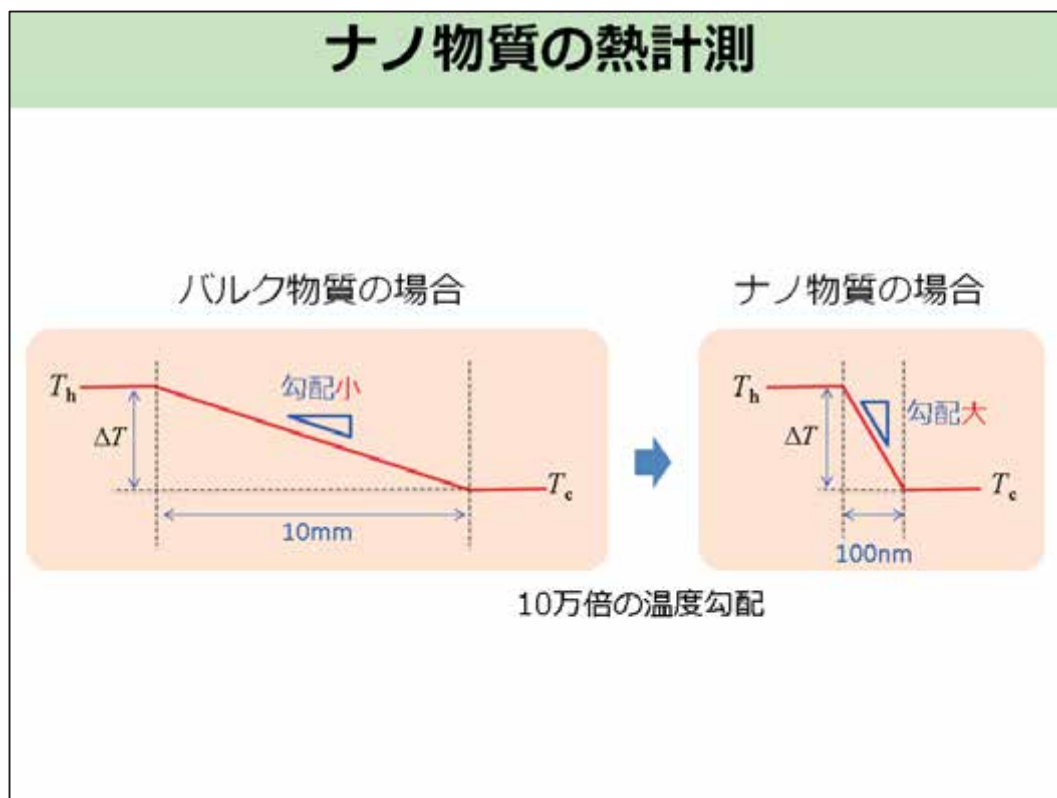


図 4-3-3

さて、ZT を向上させることは、変換効率をカルノー効率に近づけることを意味するが、そもそもカルノーサイクル(可逆機関)は、準静的過程が仮定されているために、仕事率がゼロの機関であり、実用的観点からは使い物にならない機関である。実用の立場から求められることは、仕事率を最大とした上で、変換効率を上げることである。これはまさに非平衡物理学の問題であり、この分野の今後の発展に期待したいところである。

【質疑応答】

- Q：非平衡性が増していくと周りの熱環境とかも含めて考えないといけなくなるような気がするが、それと系の非平衡性を分けることは可能なのか。
- A：おっしゃる通り、非平衡性が大きくなると、物質自身の物性を見ているのか、環境とカップルして起こっている現象なのか区別できなくなり、観測系全部を含めた物理系として見ていかないと理解できない。物理系をどう閉じたものにするかをしっかりと考えた上で、**figure of merit**を決めないと、動作環境下での性能に対しては何も言えないのではないかと考えている。
- Q：線形あるいは平衡で決まっている **figure of merit** に対して、実動作下では非線形や非平衡のため正しく性能を表していないのではないかと、ということのようだが、むしろ線形や平衡で予想される **figure of merit** を超える非線形や非平衡を使ったことによって太陽電池の効率が猛烈に上がるといったことの方が科学者としてはわくわくすると思うのだが。
- A：同じことを言っていると思うが、線形あるいは平衡で与えられている **figure of merit** では表現しきれない性能を記述する性能指数を作る必要があると思う。その上で、各種デバイスの性能が飛躍的に向上しうることなどが発見されれば、物性物理学からエレクトロニクス分野への貢献は極めて大きい。そのためにも、非平衡動作するデバイスを正しく評価する **figure of merit** を物性科学として与える価値はあると思う。
- Q：それは物性値とかバンドギャップとかを決める **figure of merit** と、実デバイスの効率を比べたときに、実デバイスの効率が勝ればよいということなのか。
- A：それを期待している。非平衡動作する実デバイスに対する **figure of merit** を構築できれば、既存の性能指数では計り知れなかった高性能デバイスの設計に繋がることを期待している。

5. 話題提供③

5.1 「物質設計・計算機シミュレーション・情報物理」～物質と情報の新しい世界を築けるか?～

村上 修一 (東京工業大学)

私がとりまとめる分科会には、理論だけでなく実験の方もおられるため、「物質と情報の新しい世界を築けるか?」というかなり大きいタイトルがついているが、なるべく新しいネタを出せるように議論していきたい。

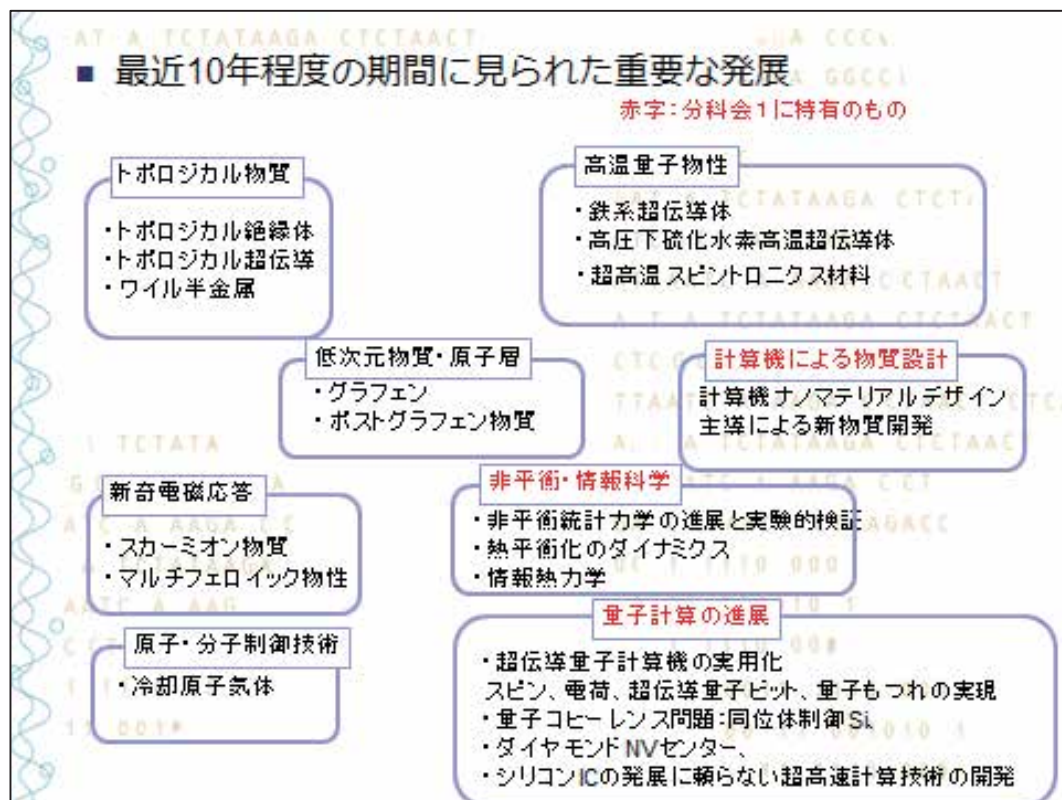


図 5-1-1

図 5-1-1 は、最近 10 年間の重要な発展について、分科会 1 のアンケートの結果を整理したものである。入っていないものもあるかと思うが、おおよそこのぐらいのキーワードに分かれると考えている。

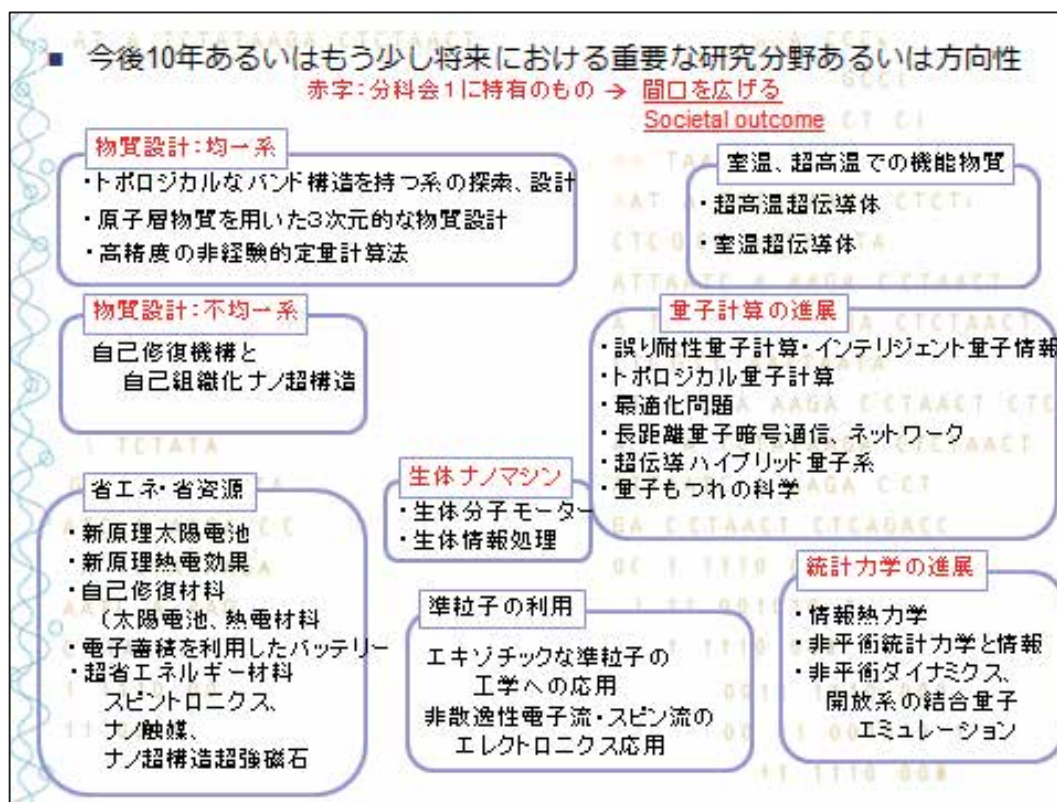


図 5-1-2

図 5-1-2 は、今後 10 年あるいはもう少し将来の方向性というアンケート結果をまとめたものである。特筆すべきものとしては、均一系、不均一系としての物質設計である。つまり、均一系としてはバルクの物質でどういったバンド構造があるか、どういった機能が可能かということ、また、例えば自己組織化などを用いた不均一な系の拡張である。あとは量子計算、統計力学、生体ナノマシンの話などがある。最初の十倉先生の話にもあった Societal Outcome に関連したものとして、省エネルギーや省資源に絡んだテーマという意味で太陽電池、熱電効果、自己修復材料がある。省エネルギー材に関係したテーマも挙がっている。分科会ではこのあたりのところも議論していければと考えている。

ざっとテーマを眺めてみると、いろんなテーマがあるが、勝藤先生のお話にもあったように、やはり間口を広げることが重要ではないかと考えている。他の分野の方も参加できる形で間口を広げていくことと、サイエンティフィカルな興味だけではなく、社会にどのように還元していくかということも含めたストーリーをつくっていくことが重要であり、分科会ではその点についても議論できればと考えている。

以下では、私が考えてきたことについて話をしたい。分科会 2 のテーマとも絡む話にはなるが、トポロジカル絶縁体に始まったいわゆるトポロジカルな物質のカテゴリーというものが日進月歩でどんどん広がってきており、その物質の種類も多くなっている。そういった物質群をいわばビルディングブロックとして使うことで、さらに機能設計をしていくのではないかと、ということが 1 つ目である。

ここで重要な点は、既存の物質を使えるということである。つまり、実は今まで我々がよく知っていた物質の中に、トポロジカルな性質をもったものがたくさんあるということがわかってきた。新しい物質を作ろうとするとハードルが高いが、既存の物質も含めていろいろ考えようというところほどハードルは高くなく、計算機内の新物質探索とも組み合わせ、いろんな分野に展開していくことが可能ではないか。

ここで簡単にトポロジカル絶縁体についてイントロをしておく。トポロジカル絶縁体とは、図 5-1-3 に示すように、バルク結晶の中は絶縁体であるが、表面は金属状態になっている物質群であり、その表面ではスピンのぐるぐる回っている。

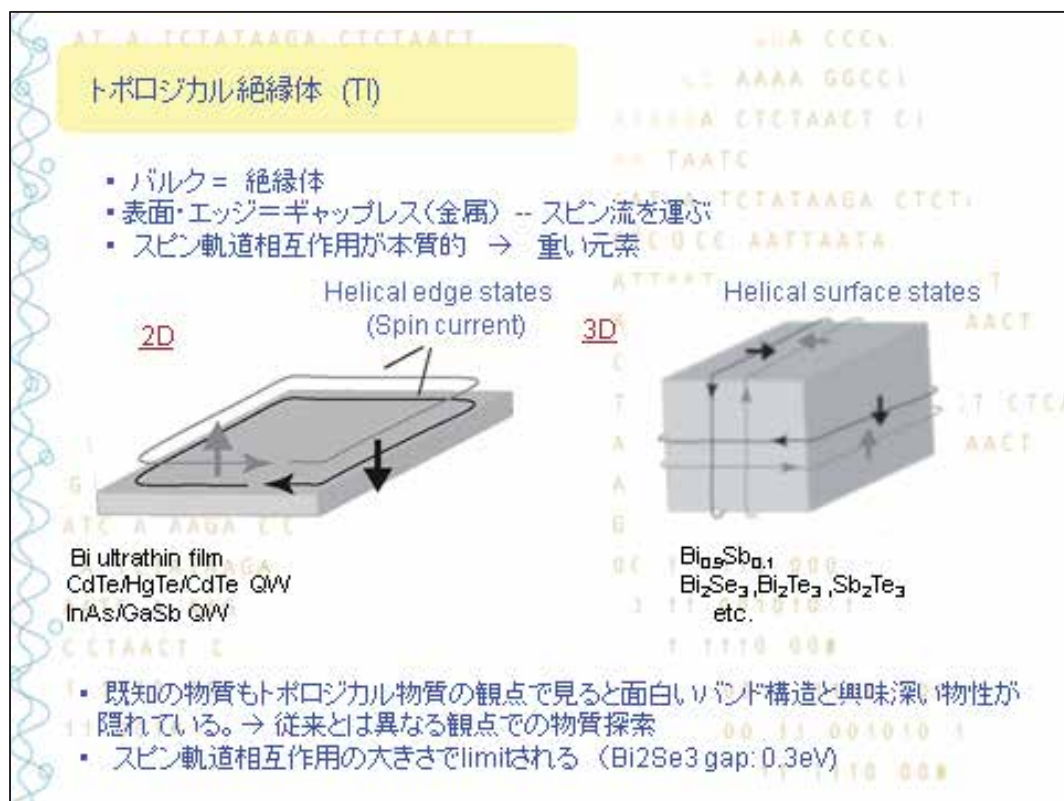


図 5-1-3

ここではスピン軌道相互作用が本質的な役割を担うため、重い元素を使っていることが重要である。様々な物質がトポロジカル物質として知られているが、ほとんどの物質は、実は従来から知られている物質であって、既存の物質であっても新しい側面が発掘され得るということが興味深い点である。

トポロジカル絶縁体ではただ一つの制限としてスピン軌道相互作用が必要になるため、どうしても重い元素を用いた物質でなければならない。さらに、スピン軌道相互作用の大きさが温度などに対するロバストネスが制限される。例えば Bi_2Se_3 では 0.3eV というギャップの大きさがいろいろな物性が制限されている。また、重い元素を使わないといけないため、使える元素も限られてしまう。

ただ、トポロジカル絶縁体の発見を契機としていろいろな物理も展開しており、例えば、グラフェンナノカーボンに見られるように、ワイル半金属やディラック半金属というもの

がトピックとして挙がっている。これらは三次元のディラックコーンという状態、つまり、線形の分散を持つようなバンド構造を持つ三次元半金属であるため、変わった物性を持つことが知られている。

では、何故そういう物質群がおもしろいのか。例えば、GeTe と Sb₂Te₃ の超格子を考えたとき、実はこれは相変化メモリとしてよく使われている物質を超格子にしたものであるが、このような超格子をつくと、実はバルクにディラックコーンが現れるということが第一原理計算からわかっている。ここで興味深いことは、もともと GeTe は普通の絶縁物質であり、Sb₂Te₃ も絶縁体であるにも関わらず、これらを積層していくとエネルギーギャップが閉じて金属になったという非自明である点である。

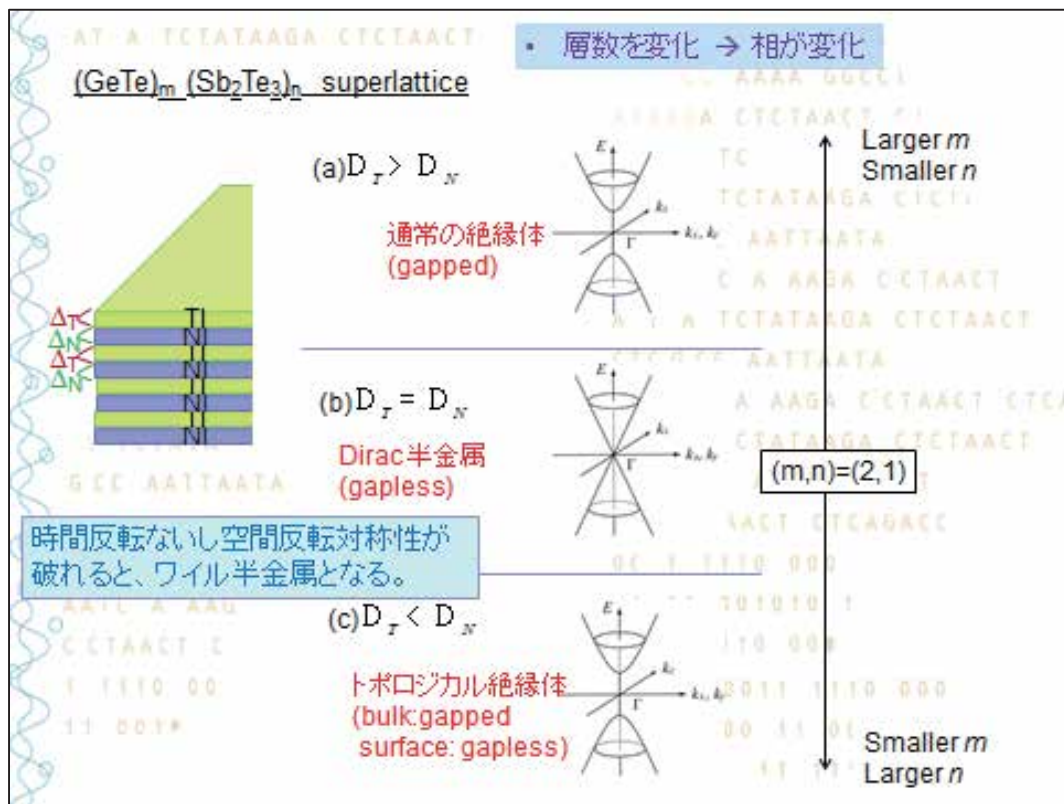


図 5-1-4

何故そのようなことができるのかということ、実はトポロジカル絶縁体の物理が絡んでいる。例えば図 5-1-4 のようにトポロジカル絶縁体と普通の絶縁体を単に積層していくと、m と n、要するに層の数を変えることで相がいろいろ変わる。通常の絶縁体、例えば m が大きく n が小さいと通常の絶縁体、逆だとトポロジカル絶縁体になるが、その中間にはディラック半金属という、バンド構造がディラックコーンになっていてギャップが閉じている状態になる。

このようなトポロジカル絶縁体の物理を利用することで相制御が可能になり、例えばこの物質はゲルマニウムの原子位置がスイッチすると考えられているわけだが、それによって例えば相方向を変えることも可能になるため、応用に使える。こういった物理をビルディ

ングブロックとしていろいろな機能設計ができるのではないかと考えている。

物質設計に関しては、基本的にはトポロジカルの話と、旧来からの対称性の話をいろいろ組み合わせていくことで、いろいろとおもしろいことが可能になるのではないかと。特に「なぜ既に知られている物質の中に新たな物性が出るのか」ということに関しては、例えば普通のバンド計算ではある高対称な点やある対称線に沿った線上だけで計算してきたが、実はそれ以外の見過ごされてきた点におもしろい物性があるということがわかってきた。

トポロジカル物質についても同様のことが言え、トポロジカル物質のカテゴリーは広がりつつあり、今後はスピン軌道相互作用の小さい軽元素を用いた物質を含め広がっていくことが予想される。こういったものを構成要素として使うことで、特異なバンド構造や、室温での量子物性、つまり、スピン軌道相互作用の大きさを制限されないような機能設計が可能になるのではないかと。そういったことを進めるためにはやはりいろいろな分野の緊密な連携が必要であると感じている。

【質疑応答】

- Q：現時点ではトポロジカル絶縁体にはある程度の大きさのスピン軌道相互作用が必須であるが、軽元素でも実現しようとするとういうことが必要になるのか。
- A：トポロジカル絶縁体ではないが、別のカテゴリーのトポロジカル相が提案されており、そこではスピン軌道相互作用が本質であるものもあればそうではないものも提案されており、軽元素であっても特異なトポロジカルな表面状態などが提案されている。
- Q：トポロジカル絶縁体の発見以降、海外では ARPES の研究などの実験がどんどん進んでいると思うが、日本ではそんなに進んでいないように感じている。
- A：難しい質問だが、1つの理由としては、日本国内で実験、理論とも新物質開拓をする人が減っていることが挙げられるのではないかと。研究者人口が減っている中で、物質開拓のようなこうやれば確実に成果が出るということは必ずしも言えない分野での仕事がしにくくなっている印象がある。そういった方がもう少し報われる仕組みが必要かもしれない。

5.2 準粒子エンジニアリング 物質設計・計算機シミュレーションの観点から

有田 亮太郎 (理化学研究所)

ここでは、物質設計や計算機シミュレーションなどの基盤技術が今どういう現状にあって、どういう課題があるかについて私見を述べたい。

世の中にはエレクトロニクスやスピントロニクスといった、何とかニクスといった分野が確立しており、そこではいろんな粒子が活躍している。エキシトンやいろいろなものがあるが、特に最近ではマヨナラフェルミオンやワイルフェルミオンなどのよりエキゾチックな準粒子が物性利用として考えられており、こういうものが実際に活用できると良いのではないかと。実際に現実物質と結びつけていくためには、その物質の個性を反映した第一原理計算がとても重要になり、準粒子エンジニアリングの発展という意味では、第一原理計算が基礎になるだろうと考えている。

先ほどの村上先生のお話にも出てきたワイル半金属の例として、図 5-2-1 に MoTe_2 の例を挙げるが、実際に計算してみると、結晶の構造が変わるとワイルの位置がかなり変わったりするので、計算の精度が物質設計を考えていく上ではとても大事になる。

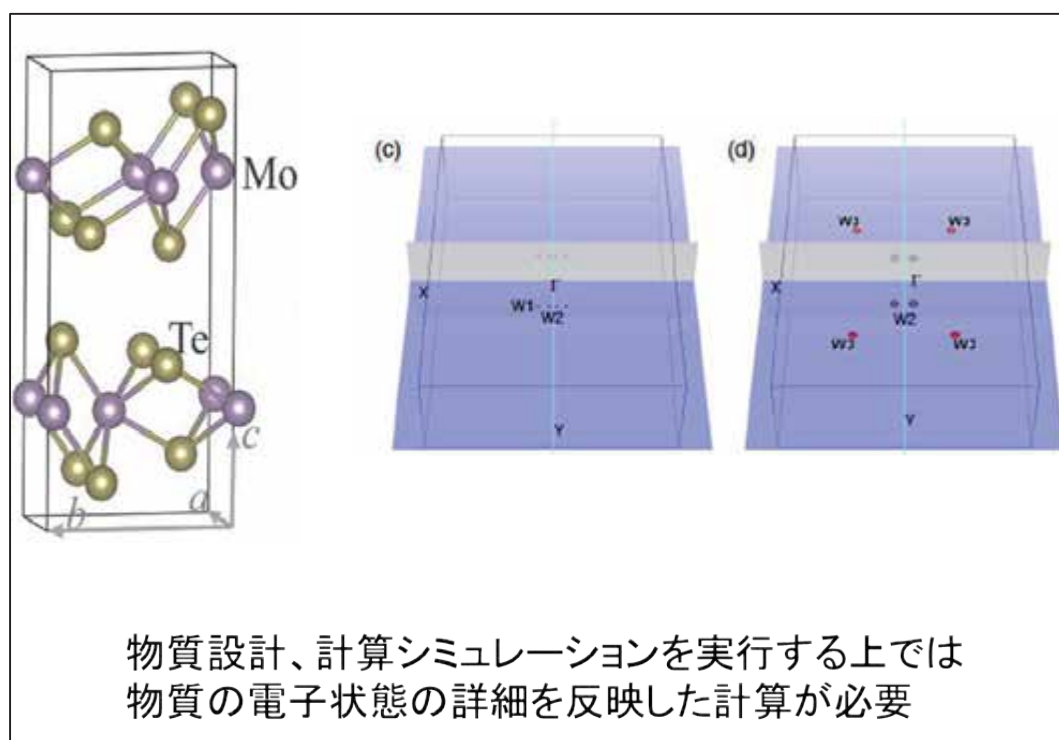


図 5-2-1

例えば今までのバンドエンジニアリングでは、バンドの固有値だけを見ていたわけだが、最近では波動関数そのものの情報が大事になってきていて、同じ物質のフェルミ面に関しても、どの部分がどういう軌道でできているかということが重要になっている。また、波

動関数と波動関数の間の接続も正確に計算しなければならなくなっているため、物質設計をやっていく上では固有値だけではなく、その基礎になる波動関数の情報もいろいろ考慮しなければならない。

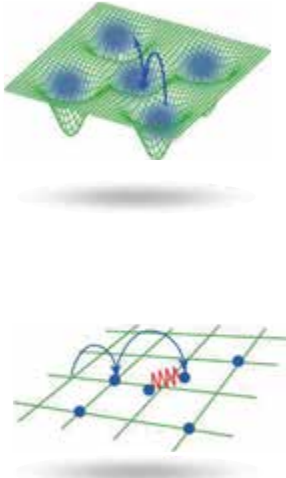
第一原理計算の基盤技術の整備を今後どういうふうに進めていくべきかについては、おそらく3つの方向があり、どれも大事な方向性だと感じている。1つ目としては、密度汎関数理論(DFT)がこの半世紀ぐらい中心的な役割をしていて、それを深めていくという方向である。その際には、静的な物理量だけではなく動的な物理量に注目したり、基底状態として多極子秩序状態や超伝導状態など多彩な状態を記述することが重要になると思われる。2つ目としてはDFTとグリーン関数法などの多体電子論の方法を組み合わせる方向がある。この方向はこの十数年大きな発展を見せているが、異なる方法論をどう融合するかについてはまだまだ課題が残ると考えている。最後に、DFTから離れて完全に波動関数理論に進むという方向もある。

方法論開発は一般に地味に見えることが多いが、個人的には非常に大事な分野であると思っている。しかし、日本の現状を見ると、方法論開発は必ずしも大きな研究領域にはなっていないように感じる。第一原理計算のコードは、一般的に非常に大規模かつ手間がかかるものになっており、総力戦で対抗していかないと世界から置いていかれるのではないかという懸念がある。そういう状況の中で、現在の日本の大学において若い世代に方法論開発に強い意欲を持った人材がどんどん育っているかという点、必ずしもそうでもないような気がしていて、国益の観点から危機感を持っている。

では、競争に勝つためにはどのようにすればよいか。例えば、超伝導転移温度の予測に特化したコードを開発するなどの独自性、特色を出していく必要があるのではないかと。もう一つは意見が分かれるところであると思うが、海外の研究者と共同研究をしていく上では有名パッケージの中に入り込んでいくことも大事で、海外の有名パッケージの開発チームにどんどん日本人が入っていく状況をつくっていかないと日本が孤立してしまうのではないかと考えている。

物質と物性間の関係を直接見るのではなく物質を特徴づける少数パラメータを活用

第一原理ハミルトニアン

$$\mathcal{H} = - \sum_j^{N_e} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 - \sum_\alpha^{N_i} \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \nabla_\alpha^2 - \sum_j^{N_e} \sum_\alpha^{N_i} \frac{Z_\alpha e^2}{|\vec{r}_j - \vec{R}_\alpha|} + \sum_{j < k}^{N_e} \frac{e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_k|} + \sum_{\alpha < \beta}^{N_i} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|}$$


“第二原理ハミルトニアン”

arXiv:1511.07675

Second-principles method including electron and lattice degrees of freedom

Pablo García-Fernández,¹ Jacek C. Wojdel,² Jorge Iñiguez,^{3,2} and Javier Junquera¹
¹Departamento de Ciencias de la Tierra y Física de la Materia Condensada, Universidad de Cantabria, Cantabria Campus Internacional, Avenida de los Castros s/n, 39005 Santander, Spain
²Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC), Campus UAB, 08193 Bellaterra, Spain
³Materials Research and Technology Department, Luxembourg Institute of Science and Technology, Avenue des Hauts-Fourneaux 5, L-4362 Esch/Alzette, Luxembourg

図 5-2-2

最後に、話題提供として、機械学習で物質と物性の間をどうつないでいくかについて、一つのアプローチを紹介したい(図 5-2-2)。与えられた物質の物性を第一原理計算で記述するには、第一原理ハミルトニアンから出発する。その際に物質の個性を特徴づける、あるいは基本物性を記述する上で本質的な第二原理ハミルトニアンとよばれる少数自由度のハミルトニアンを非経験的につくって、そのハミルトニアンに含まれるパラメータをデータベース化する、という試みが欧州で始まっているようである。アイデアは私の興味ともちょっと重なっていて、物質と機能を結びつけるときに有望なアプローチではないかと考えている。

私の研究室で、機械学習でどれぐらいの規模のことができるのかを試している。インターネットからダウンロードした 35 万ぐらいの結晶のデータをもとに電子状態計算のインプットファイルを自動的につくって、ユニットセルに含まれる原子が 10 個ぐらいのものを順番に計算して、どれぐらいのスピードで収束するのかを調べた。その結果、1 日当たり 200 種類ぐらいの物質に対する計算ができることがわかった。そこからボルツマン方程式に従ってゼーベック係数を計算することもそれほど時間がかかるものではない。このような熱電材料の機械的探索というのはかなり現実的にできて、1 年かければ 6 万個ぐらいの機械的検証が可能になるレベルにはある。ただ、第二原理ハミルトニアンの構成にはまだまだ手作業による調整が必要で、こういうところを自動化していくことが今後の課題ではないかと考えている。

【質疑応答】

Q: 米国のマテリアルゲノムイニシアチブが出てからいろんなことが起こっているが、お話を聞いた国益という点では、こういう計算をして新物質を見つけて特許をとってみ

んなに使ってもらおうということも重要かと思うが、計算のコードを公開してみんなが使ってくれれば、どういう国益に繋がるのか。

- A：最近、人材交流という意味で日本が世界から孤立しているような印象を持っている。人材交流を活性化することで日本の存在感を出すことが非常に重要と言う意味で、国益という言葉を使った次第である。なぜアメリカや欧州の第一原理計算の若手研究者が大量に日本に押しかけてこないのかについて、海外の研究者が心理的バリアーなしに日本で開発されたコードをたくさん使いたくなる状況になっていないことが一つの理由ではないかと考えている。慣れ親しんだコードがベースになってユニークな方法論開発が行われていて、マニュアルも英語で整備されているという状況であれば、そのような心理的バリアーは限りなく低くなるのではないかと思う。

5.3 計算機ナノマテリアルデザインと実証

吉田 博 (大阪大学)

私は計算機ナノマテリアルデザインを専門としているが、現在、大阪大学を中心に第一原理計算に立脚した多階層連結量子シミュレーションによるデザイン手法を開発・公開・応用・普及・デザイン結果を権利化する活動を行っている。量子シミュレーションにより様々な既存物質のメカニズムを解明し、それらを統合して、遍歴的に逆問題を解くことにより、新物質を予測し、その機能を多階層連結量子シミュレーションで検証し、デザイン主導により実証するという仕事をしている。計算機ナノマテリアルデザインのバックにはデジタル・データベースがあるが、これを用いて一般的なデザイン則を導き、デザインした新機能物質を実証実験で次々に調べていこうというのが計算機ナノマテリアルデザイン研究である。

これからお話する1つ目のトピックスは「スピノーダル・ナノ分解」であり、水と油のように互いに溶けない複数種類の原子系や分子系からなる異なる系を混合し、非平衡状態での結晶成長法によりナノスケールサイズのスピノーダル・ナノ分解を誘起し、自己組織化を利用してナノ超構造をつくり、様々なナノ超構造による量子効果を積極的に利用した新機能デバイスを実現することが目的である。例えば、太陽電池、触媒、熱電材料などの低コストの高効率エネルギー変換ナノ材料、また、省エネルギーデバイスを可能にするスピントロニクス・デバイスなどに活用することを考えている。こういうことを考え始めたきっかけは、昔(1959年12月29日)、リチャード・ファインマンがカルテックで行ったAPSの講演録(“*There’s plenty of room at the bottom.*”)を読んでいて、ナノリソグラフィーのようなトップダウンのナノテクノロジーに対して、ボトムアップ(自己組織化)のナノテクノロジーの方は確固たる制御性の高いものがないということだったため、それが何かをずっと探していたところ、スピノーダル分解をナノスケールサイズで起こすことができれば、低コスト・高効率のナノ超構造を利用したエネルギー材料やスピントロニクス材料のデザイン主導による実証にある程度使えるのではないかとすることに思い当たった。

スピントロニクスでは強磁性に転移するキュリー温度(T_c)が最低でも1000Kはないと室温で安定なデバイスとしては使えないわけであるが、半導体にランダムに遷移金属をドーブした希薄磁性半導体では二重交換相互作用などの磁氣的相互作用が短距離であるため、希薄な領域では強磁性相互作用のパーコレーション・パスが少ないため、 T_c はなかなか室温を超えない。 T_c が室温の3倍程度を超えなければ基本的にはスピントロニクス・デバイスとしては商売にならない。

では、 T_c が室温をどうやって超えられるかということで、例えばGaNにドーブしたMnやCrなどの遷移金属のスピノーダル・ナノ分解によるナノ超構造の超常磁性状態でのブロック温度を考えると、二次元的な拡散が主となる結晶成長法を用いて、自己組織化により昆布相と呼ばれるナノ超構造(量子細線)を育成することができる。結晶成長の多階層連結量子シミュレーションでは、結晶成長中に基板温度、基板劈開面、蒸気分圧、結晶成長速度を外部から制御し、形状制御やサイズ制御が可能であることが第一原理計算

による原子間相互作用の計算とこれらをイジングモデルに射影し、モンテカルロ法による結晶成長の多階層連結シミュレーションでデザインされ、その結果が実証されている(図5-3-1)。自己組織化ナノ超構造としての昆布相などの各ナノ磁性体は磁気的には独立であり、超常磁性状態である。そのため磁場をかけないと磁化は出ないが、一つ一つの昆布相を一個の量子ビットとしてスピントロニクスに使おうということによって繰り返し積層すると、ナノスケールサイズの昆布相にはブロッホ壁が入らないため、一つ一つの昆布相が非常に大きな結晶磁気異方性や形状磁気異方性を持つようになり、その結果、超常磁性のブロッキング温度は簡単に1000Kくらいまでは上昇する。これらは自己組織化ナノ超構造を使った強い磁石のデザイン則ともなっている。デザイン主導による様々な実証実験をやると、ナノ超構造の中では磁気モーメントはきちんとそろっているし、結晶成長中にあるところから濃度を高くすると、結晶成長方向に垂直に昆布相が成長し、特殊な劈開面を持つ基板上に成長させると昆布相がキャントして、あたかも昆布が海水でなびいているようなものも作製できる。Mnや希土類元素をGe, GaAsやGaNに入れた昆布相では、1~2nmの直径で、長さが150~300nmぐらいで、これも室温をはるかに超える高いブロッキング温度を持つ。スピノーダル・ナノ分解により、最高1050Kのブロッキング温度がCr-doped GaNで得られており、また、ゲートによる印加電場で磁気的な相互作用が強磁性や反強磁性の間で自由に制御できるため、半導体スピントロニクス応用としてはかなり現実的になったと考えられる。

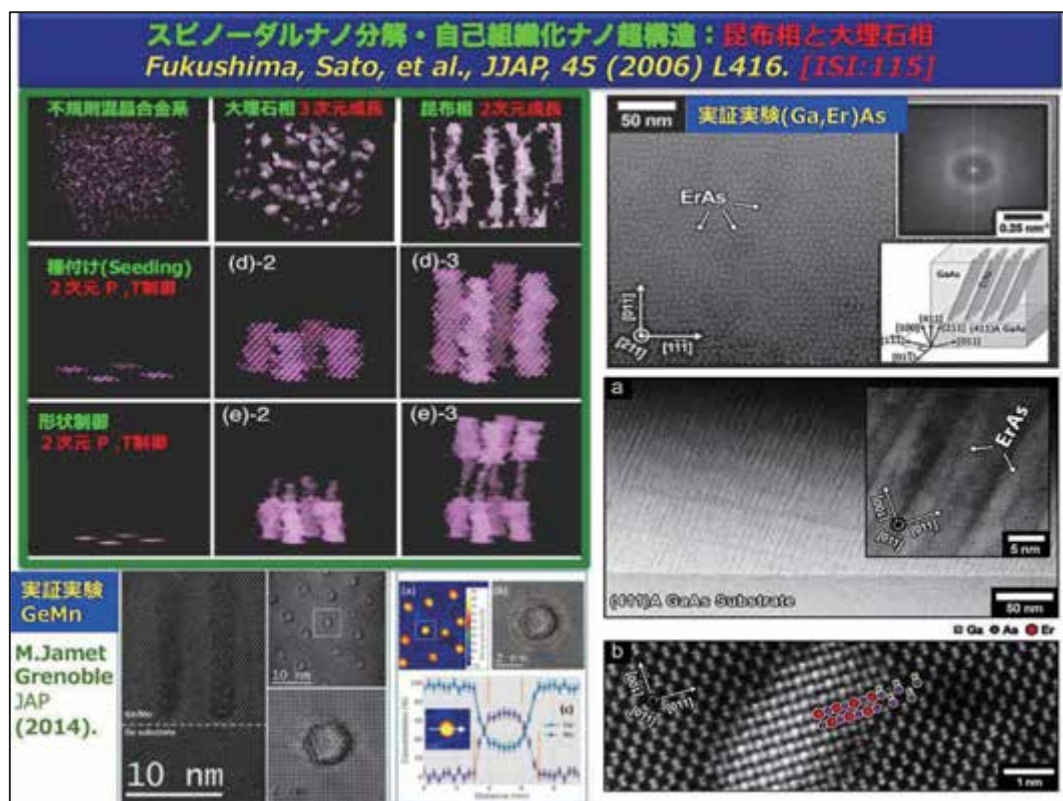


図 5-3-1

スピントロニクスのデバイス応用最も重要な点は、ナノスケールのゲートによる印加電場でスピン間の相互作用を強磁性や反強磁性の間で自由に制御することである。現時点

では、ほとんどの研究者がスピン軌道相互作用を使って電場でスピンを制御しようとしているが、それは 3d 遷移金属や半導体では極めて小さい相互作用であるため微細化によるシステム集積化において、すぐ壁にぶつかることは物理学の立場からは誰の目にも明白である。スピン間の交換相互作用を直接電場で制御する手法のデザインと技術開発が現実的なスピントロニクスの実現のためには不可欠である。

例えば、(Ga,Mn)N だと強磁性であるが、電圧をかけると反強磁性になって、さらに電圧を上げると強磁性になる(図 5-3-2)。また、(Ga,Fe)N は反強磁性であるが、電圧をかけて強磁性に変えたり、逆方向の電場印加により、これをもう一回反強磁性を経由して強磁性に変えたり、ゲート電圧をスイッチすることにより、スピン間の相互作用の大きさと符号を自由に変えられる。

ナノ超構造の昆布相にすると量子効果のため状態密度に対数の特異点があられ、また、スピン間の磁氣的相互作用は近似的には状態密度のエネルギーに対する二階微分に比例する Alexander-Anderson-Moriya 相互作用が働くため、相互作用の大きさは Friedel の仮想束縛状態の状態密度の二階微分となる。一次元の昆布相の状態密度に対数の特異点が現れるため、超巨大物性応答がデザインでき、磁氣的相互作用は小さいゲート印加電圧の変化に対して、巨大な磁化の物性応答が 1000K という非常に高い温度でも発現させることができる。

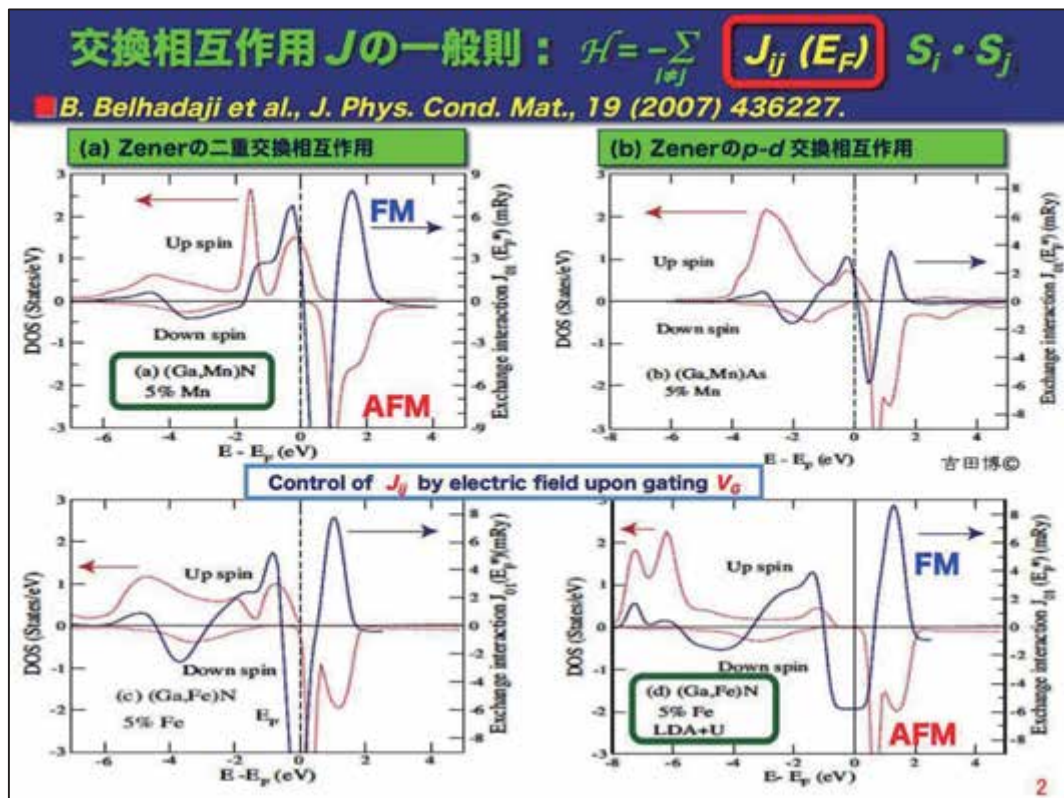


図 5-3-2

スピノーダル・ナノ分解の考え方を一般的に使うことを考えてみる。例えば高効率の太陽電池を安く大量につくろうと思うと、塗布法とかスピコート法で作製しないといけないが、このような安価で、高速の自己組織化によるナノ超構造の結晶成長法を使うと、熱

平衡状態から極単に離れてしまい多くの欠陥が生成する。そのため、これらを自己修復する機構を結晶成長時に導入しないと欠陥だらけになって、高効率化や低コスト化が難しくなってしまう。そこで、非平衡結晶成長中に生じる $(\text{Cu}, \text{V}_{\text{Cu}})$, (Ga, In) , $(\text{Zn}, \text{V}_{\text{Cu}})$, (S, Se) , $(\text{Cs}, \text{V}_{\text{Cs}})$, $(\text{Pb}, \text{V}_{\text{MA}})$, $(\text{MA} = \text{メチルアンモニウム})$ などのスピノーダル・ナノ分解による昆布相がチャルコパイライト、ケステライトやペロブスカイトなどでも生じて、タイプIIのバンド構造を持つナノ超構造が作製できる。さらには、スピノーダル・ナノ分解と同時に自己修復機能をビルト・インすることにより、スピノーダル・ナノ分解による昆布相が形成されるとバンド構造配置はType IIとなり、電子とホールを高速分離して、それぞれのキャリアパスのチャンネルが全く異なるため、平均自由行程が簡単に $1 \mu\text{m}$ と大きくなる。膜厚 300nm ぐらいの薄膜がつくれるが、キャリアの寿命が極端に長くなり、高効率の太陽電池材料を作ることができる(図5-3-3)。

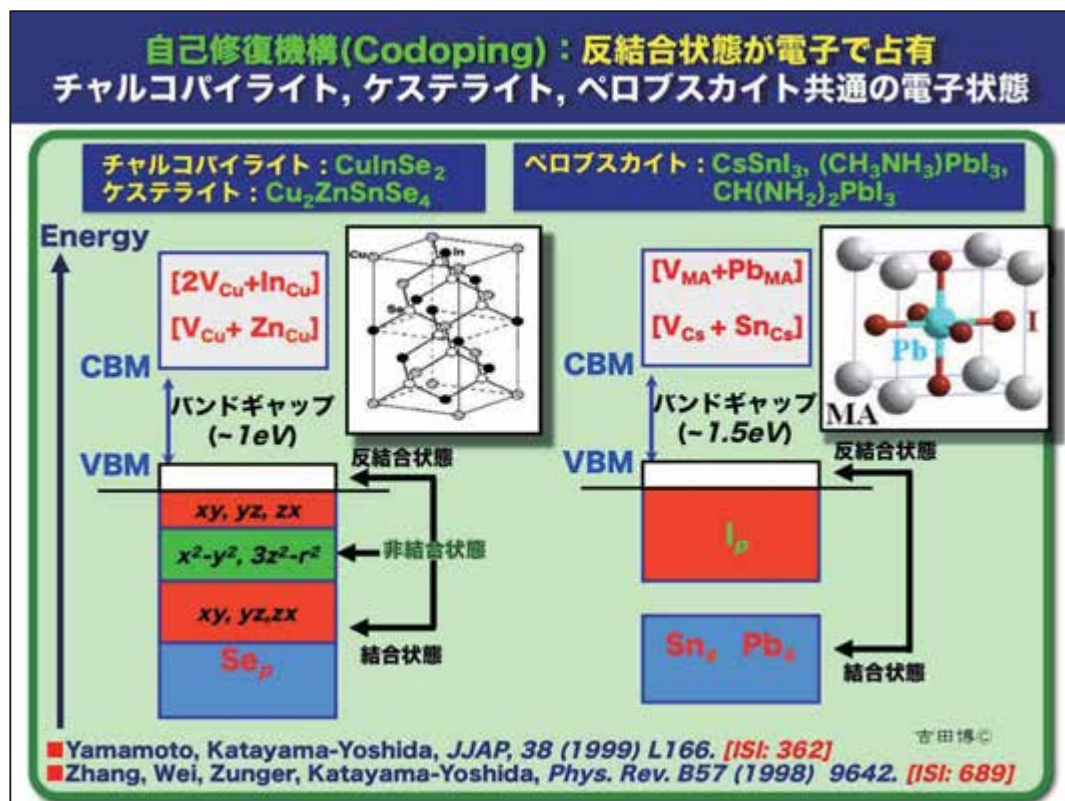


図 5-3-3

自己組織化ナノ超構造を形成する結晶成長時に自己修復機能を同時にビルト・インすることは、非常に重要で、例えばチャルコパイライトの CuInSe_2 では、Cuの周りに四面体に配意したSeが4個あって、強いp-d混成により、価電子帯のトップは反結合軌道からできているため、電子は反結合状態まで詰まっていたりして半導体としては共有結合性が弱く不安定である。このような系では、価電子帯のトップにホールを入れると共有結合性が增大するために系は安定化し、例えばアクセプターであるCu原子空孔を入れると、全エネルギーが下がって、大体67%ぐらいCu原子空孔を高濃度に導入することができる。ところが、Le Chatelierの法則というのがあるから、Cuの分圧を下げてやると、Inの分圧はどうしても増やさないといけない。そうすると高濃度のInはCu原子空孔位置に入り、

ドナーとして働き、アクセプターの Cu 原子空孔をドナーが補償する自己補償効果が生じる。このような補償を我々は自己修復機構とか Mother Nature’s Codoping Method (母なる自然が行う同時ドーピング法) と呼んでいる。

同じく CsSnI₃、(MA)PbI₃ (MA=メチルアンモニウム=MA)、(FA)PbI₃ (FA=フォームアミドニウム)などのペロブスカイトも、SnやPbのs軌道とIのp軌道が強いs-p混成により、反結合状態が価電子帯のトップとなり、電子に占有されているために不安定化する。例えば、メチルアンモニウム(MA)やCsなどの金属イオンの分圧を下げると、MA原子空孔やCs原子空孔の形成エネルギーが低くなり、MA原子空孔やCs原子空孔によるホールがドーピングされて共有結合性が増大し、系が安定化する。MA原子空孔の濃度が上昇するとLe Chatelierの法則に従って、PbやSnの分圧を増やさないとなくなると、PbやSnはMA原子空孔位置やCs原子空孔位置にPbやSnが入りドナーとなる anti-site defect が次々に生じて、MA原子空孔やCs原子空孔を20~50%ぐらいはドーピングできる。チャルコパイライトのときには、Cuの分圧を下げてもInを上げてみると、自己修復のための形成エネルギーは負となり、自発的に自己修復が生じる。一方、そういう自己修復はSiやGaAsやZnSeなどの価電子帯のトップが結合状態である通常の半導体では起きない。これらの通常の半導体中では、アクセプターである金属原子の空孔の形成により、結合状態である価電子帯にホールがドーピングされるため、高い形成エネルギーとなり、自己修復は決して起きないことがわかる(図5-3-4)。自己修復機構をデザインしようとするときは、価電子帯のトップが反結合状態となっている系を意識的に選択するデザイン則となり、不安定な物質を安定化させるための自己修復機構をデザイン主導で実証することが重要である。

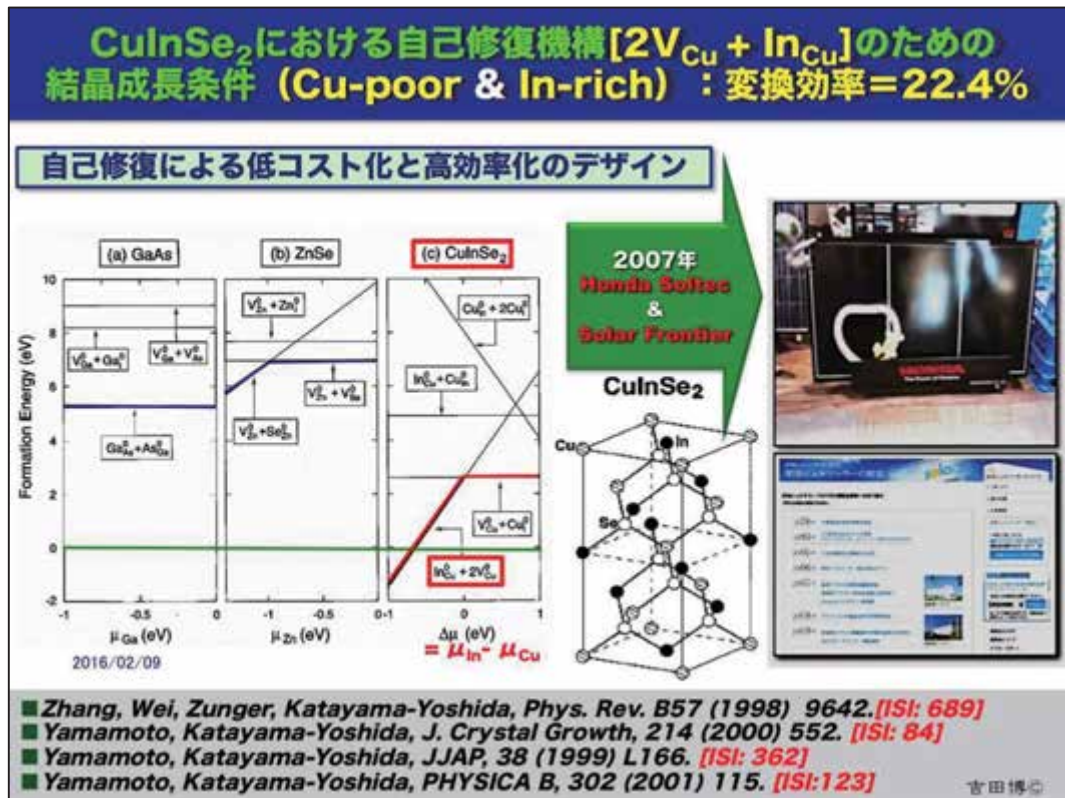


図 5-3-4

CuInSe₂ は Cu と In を蒸着しておいて、H₂Se の中で蒸し焼きにしてやるだけで 22.3% まで効率が出る (12/08/2015 現在)。これは実際に事業化されていて、九州の宮崎県国富町では 2007 年から事業化され、2011 年頃から、ちょうど原子力発電所 1 基分の製造 (1 ギガワット /Year) をしている。現在、東北・宮城県の大衡村というところでトライアルと増産化を計画しているが、もう 1 ギガワットふやすので、年間あたり原子力発電所 2 基分ぐらいの製造になる。

こういうスピノーダル・ナノ分解と、自己修復が同時に起きて三次元や二次元の結晶成長を行うと、不均一化が起きて Type II の半導体になり、電子とホールが完全に分離して空間を走っていく (図 5-3-5)。電子が走るチャンネルとホールが走るチャンネルが完全に分かれる。(Cu, V_{Cu})、(In, Ga)、(Zn, V_{Ga}) などが全部 Type II になり、光でたたき上げられた伝導帯ボトムの子電子と価電子帯トップもホールが実空間で完全にポテンシャル差によりセパレートして、ナノスケールで走る電子とホールの実空間が異なるため、昆布相 (二次元結晶成長) や大理石相 (三次元結晶成長) でもキャリアを高速で分離することができる。実際、実験的に確かめると高効率化が進むに従って、確かにナノスケールサイズで不均一化が起きていて、結晶粒界でも電子とホールは異なるパスを流れるため決して再結合を起こさず、電子とホールが異なるチャンネルを走り、ハイウェイでいえば右向きと左向きのように再結合 (衝突) することなく実空間で別のパスを走ることがわかる (図 5-3-6)。

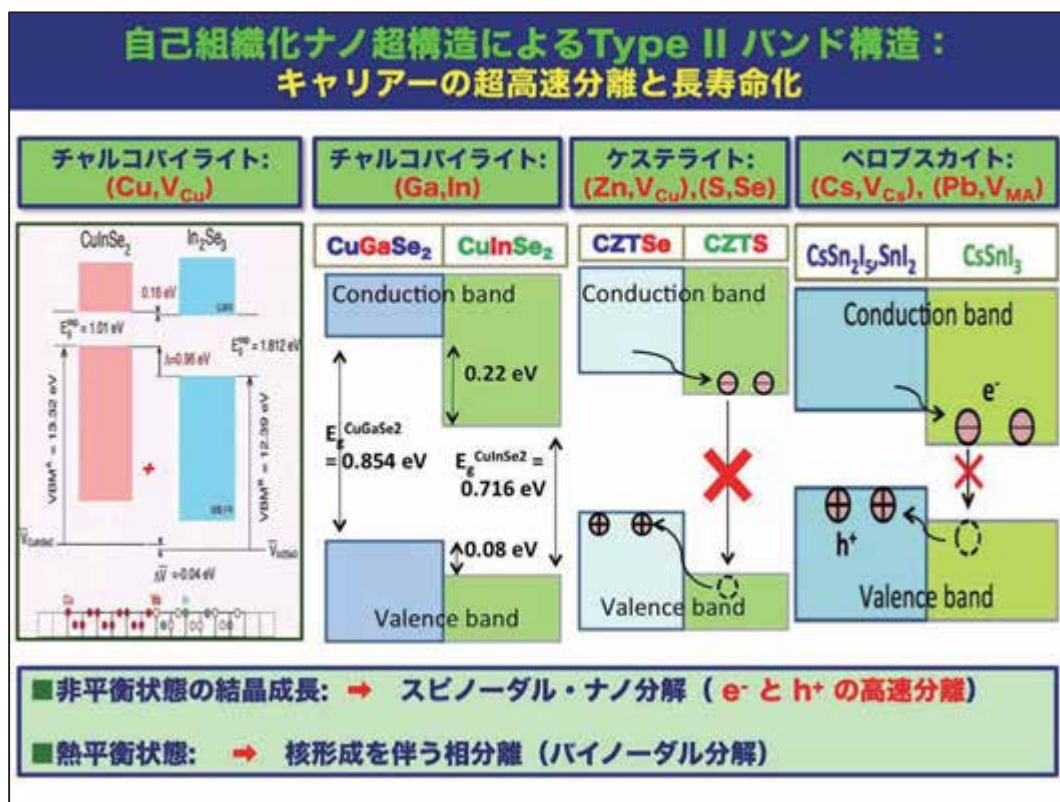


図 5-3-5

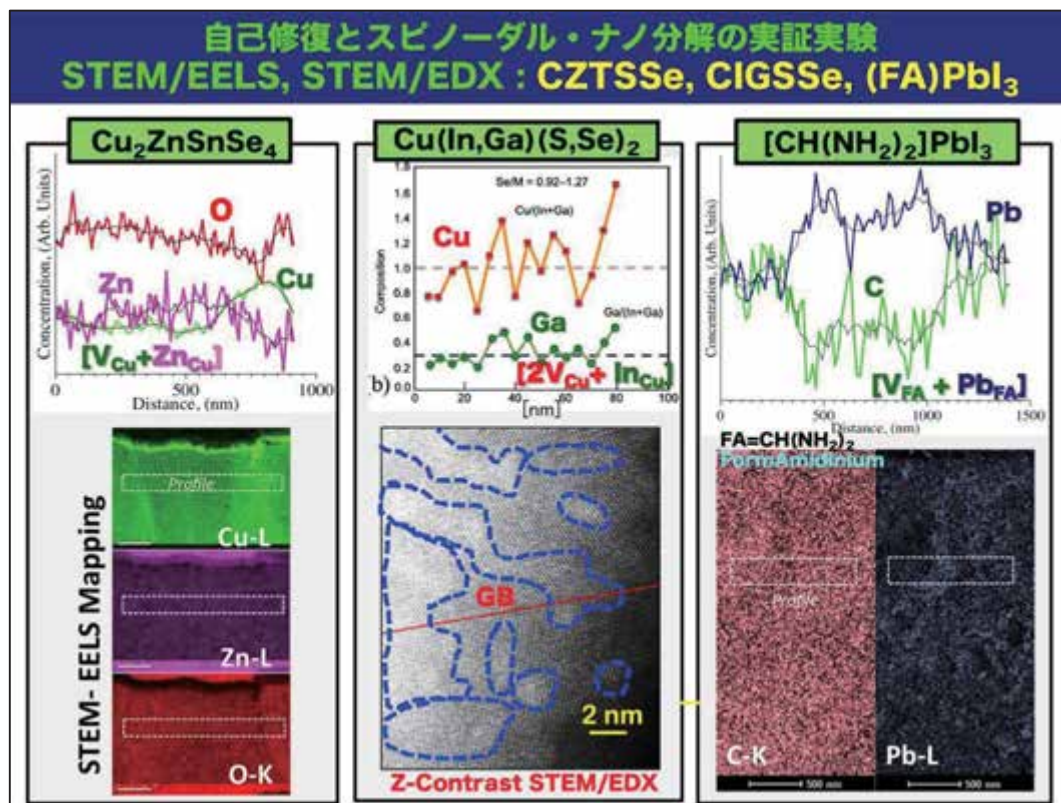


図 5-3-6

最後にお話しするトピックスは大変チャレンジングなテーマであり、超高温超伝導体 ($T_c > 1000\text{K}$) のデザイン主導による研究である。高温超伝導体の探索は、『犬も歩けば棒にあたる』式に、指導原理やデザイン原則もなく闇雲に試行錯誤し、偶然発見したものがほとんどであるため、現象の目新しさと興味深さに目が奪われ、一般化したデザイン理論や統一的な物理に立脚したデザイン則が得られている訳ではなく、その証拠には、偶然発見されてもその後の発展がほとんどないのが現状である。工業化社会から知識社会へと産業構造の転換が行われている状況には、全くマッチせず、知識社会にふさわしい新しい探索手法とデザイン主導による新物質開発が不可欠であり、これらの研究開発が遅れていることが大いなる反省です。

このテーマに関しては、我々もかなり長い間水面下で研究を進めているが、実際に室温でエネルギーロスなく電気を運ぼうと思うと、超伝導転移温度 T_c が室温の3倍の 1000K は最低限必要となる。 T_c が上がれば当然コヒーレンス長が短くなり、 1000K を越える高い温度で本当に量子効果による超伝導が起きるのかという疑問が出るが、身近な例として高温で発現する量子効果として Fe, Ni, Co などの強磁性状態がある。これらの強磁性状態は、 $5 \sim 6 \text{ eV}$ の原子内クーロン斥力 (U) によって仮想束縛状態による大きな磁気モーメントが誘起され、遍歴的な d バンドが部分的に占有されることによりバンドエネルギーの大きな利得 (バンド幅 $W = 4 \sim 5 \text{ eV}$) により、量子状態としての強磁性状態が安定化する。Fe では 1045K 、Co では 1388K で強磁性状態という量子効果が実現していることが確認できる。このことは、引力や斥力が充分大きければ、量子状態としての超伝導状態や強磁性状態が実現できることを示唆している。このことから類推すると、 T_c が 1000K

を越える実用的な超高温超伝導の実現には、 T_c よりも一桁以上大きな電子間の引力（～10000K）をデザインする必要がある、これらはフォノンやマグノンなどの素励起を利用する対形成では難しく、純粋に電子論的な引力機構のデザインが必要となる。この場合、電子間の引力が eV オーダー（～10000K）で遍歴的なフェルミ液体がデザインできれば、実用的な超高温超伝導体も実現可能ではないかと考えられる。また、現実の産業応用を考えると、p 波や d 波などのギャップレスの超伝導では意味がなく、s 波の超伝導体が不可欠である。

N 電子系の電子間相互作用 U は、全エネルギー $E(N)$ を使って、 $U = E(N+1) + E(N-1) - 2E(N)$ で定義される。第一原理計算により $E(N)$ はかなりの高い精度で正確に計算でき、引力相互作用（negative- U , $U < 0$ ）を実現するためのいくつかの物理機構がデザインされている。すなわち、(1) 電荷励起誘起による $U < 0$ の系（現象論的には、閉殻構造による化学結合の安定性による s^2 , p^6 , d^{10} などの電子構造の安定化により、その近傍である s^1 , p^1 , p^5 , d^1 , d^9 電子構造の相対的な不安定性により生じる $U < 0$ の系）と、(2) 交換相関相互作用による $U < 0$ の系（現象論的には、フント則（高スピン状態）である d^5 の安定性により生じる d^4 , d^6 構造での $U < 0$ の系）、などが現時点ではデザインされている。これらは引力の弱い電子格子相互作用とは大きく異なり、電子論的機構により強い引力を引き出し、高い超伝導転移温度を実現することが可能であり、純粋に電子論的な引力機構によるものである（図 5-3-7）。

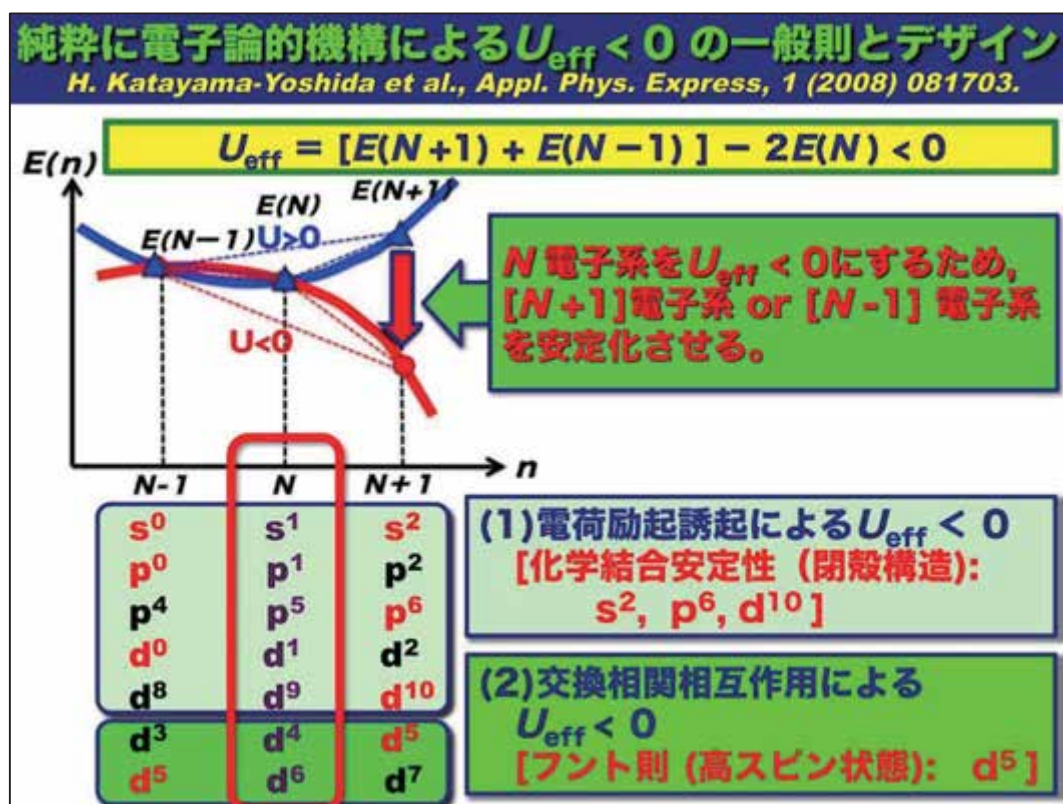


図 5-3-7

室温で産業応用が可能な超高温超伝導体を実現するための非経験的なデザイン戦略は、次の3つのステップ（ホップ、ステップ、ジャンプ）から構成される（図 5-3-8）。

【ステップ1】：電子格子相互作用により、比較的高い $T_c(50K\sim 300K)$ をもつ超伝導体を第一原理計算に基づいて、電子格子相互作用を計算し、エリアッシュバーク方程式を解いて超伝導体をデザインする。これらは、現時点では、構造の最適化を含めてルーチン・ワークとして大学院生レベルで容易に実行できる。

【ステップ2】：純粋に電子論的機構による強い引力を発現するための系について、(1) 電荷励起誘起による $U < 0$ の系（現象論的には閉殻構造による化学結合安定性 s^2, p^6, d^{10} などの安定化により、その近傍で生じる $U < 0$ の系）、や (2) 交換相関相互作用による $U < 0$ の系（現象論的にはフント則（高スピン状態）である d^5 の安定性により生じる d^4, d^6 構造での $U < 0$ の系）など探索する。例えば、(1) については、周期表における $U < 0$ の系と“失われた酸化数状態”等のマテリアルデザインのガイドラインやデータベースを利用する（図 5-3-9）。

【ステップ3】：上記の設計指針に基づいて negative U となる系を第一原理計算から探して、第一原理計算で得られたバンド構造と $U < 0$ を用いて、それを Negative- U ($U < 0$) Hubbard model モデルに射影して、多階層を連結することにより、 $U < 0$ Hubbard Model に立脚して、モンテカルロ法により相図や T_c を求めると、 $U < 0$ Hubbard Model の場合は理論的にも、また、モンテカルロ法による量子シミュレーションでも、ほぼその全貌は確立しているために、原子番号だけを入力パラメータとして、多階層連結量子シミュレーションにより、相図や T_c もかなり定量的に求められる（図 5-3-10）。

超高温超伝導体デザインのための戦略

STEP 1 : [Hop]

■ 第一原理計算による電子格子相互作用を起源とする高い T_c をもつ ($T_c = 50\sim 200K$) s波超伝導ギャップをもつ超伝導体のデザイン。

STEP 2 : [Step]

■ 純粋に電子論的引力機構による負の有効電子間相互作用のデザイン、

$$U_{\text{eff}} = E(N+1) + E(N-1) - 2E(N) < 0$$
 (1) 電荷励起誘起による $U_{\text{eff}} < 0$ (s^1, p^1, p^5, d^1, d^9)
 [化学結合安定性 (閉殻構造) : s^2, p^6, d^{10}]
 (2) 交換相関相互作用による $U_{\text{eff}} < 0$ (d^4, d^6)
 [フント則(高スピン状態) : d^5]

STEP 3 : [Jump]

■ 第一原理計算による $U_{\text{eff}} < 0$ Hubbard Model (t, U_{eff}, μ) の導出と量子モンテカルロ法計算による T_c の計算

吉田博 © 7

図 5-3-8



図 5-3-9

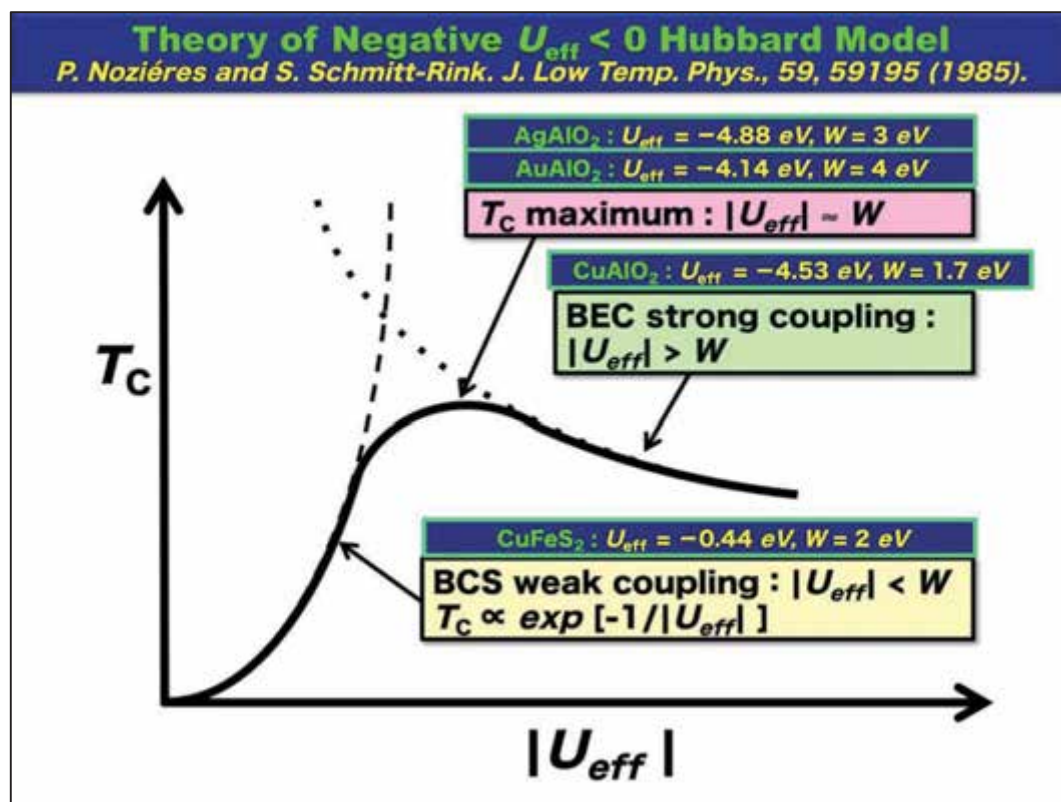


図 5-3-10

超高温超伝導体をデザインするための戦略に基づいて、デラップオサイト系 (CuAlO_2 , AgAlO_2 , AuAlO_2 , CuCrO_2 , CuSnO_2 , CuPbO_2) やチャルコパイライト系 (CuFeS_2) でのデザインは行われつつあるが、まだ実験での実証には至っていない。しかしながら、ある程度の探し方の戦略や方向性も理論的な立場から追いかけていくことができるため、超高温超伝導体のデザインと実証のようなチャレンジングな研究を提案し、実現したいと思っている。

【質疑応答】

Q：吉田先生の最後のお話にてた $\text{negative } U$ というのは、格子の緩和が入っている計算になっているのか。

A： $\text{negative } U$ の計算では、格子緩和は入っている。電子格子相互作用（ヤンテラー効果）で $\text{negative } U$ になるのは Anderson の $\text{negative } U$ (1975 年) とよばれ、当たり前の話である。それを使わなくても、純粋に電子論的なメカニズムで (1) 電荷励起誘起機構や (2) 交換相関相互作用による機構を用いて $\text{negative } U$ にすることができる。

Q：そのときに格子緩和が必ず起きて、ダイポールがトラップされるという不安定性があるのではないか。

A：その場合もある。例えば銅酸化物超伝導体の場合の $\text{Cu}^{2+}(\text{d}^9)$ の場合、Jahn-Teller イオンであるため、 $\text{Cu}^{2+}(\text{d}^9)$ がヤンテラー効果で安定化し $\text{negative } U$ ではなく通常の $\text{positive } U$ になっているが、Bednorz と Muller らはこれに着目して安定な $\text{Cu}^{2+}(\text{d}^9)$ から出発して、さらにホールをドーピングして $\text{Cu}^{3+}(\text{d}^8)$ を格子緩和による Anderson の $\text{negative } U$ にして銅酸化物高温超伝導を発見した。この場合、銅酸化物の引力機構は純粋な電子論的機構ではなく Tc は 200K~300K が最高で、超高温超伝導体 (Tc ~1000K) とはならないだろう。

6. 話題提供④

6.1 電子・イオン協奏：イオントロニクス

岩佐 義宏 (東京大学)

本日は、イオントロニクスという研究とその可能性について紹介したい。私はナノカーボンサイエンス分野に長らく関わっており、図 6-1-1 のようなすばらしい発見を次から次へと目の当たりにしてきた。この発見の歴史は、本当に革命的な物質というのは、専門家でない人がなし遂げるということを如実に物語っている。こういう中に日本人がおられることはとても素晴らしいことである。この3つの材料の発見の歴史の中間かつ世紀の変わり目に、クリントン大統領によるナショナルナノテクノロジーイニシャチブ政策が始まったことを考えると、ナノカーボンナノテクノロジーを先導した材料であり、かつその最大の成果であると言える。

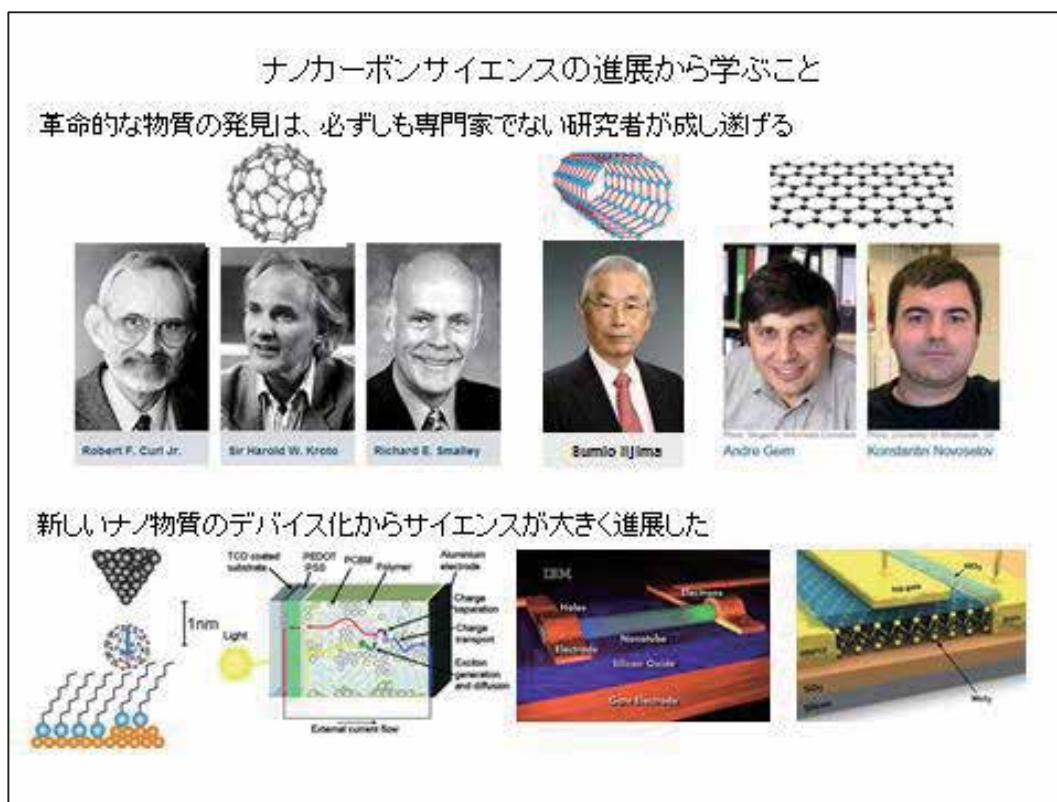



図 6-1-1

もう一つ、ナノ材料について我々が経験したことは、常に何かデバイスに組み上げて、機能性が出てきたときに、同時に物理として本当におもしろくなってきたということが繰り返されていることである。しかしながら、新しいナノカーボン材料のデバイス化という意味では、日本は常に世界の後塵を拝してしまった。特に、カーボンナノチューブについては、飯島さんが物質を作って、なおかつ齊藤理一郎さんたちをはじめとする日本の理論家が予言していたにもかかわらず、誰も一本のナノチューブを使って測定しようとした人がいなかった。

日本はもともと物質に強いという特徴を持っている。フラーレンとカーボンナノチューブについては、合成すること自体とても新規性があり且つ重要であったため、日本の材料科学者、化学者が大いに活躍し、日本は現在でも強い存在感を發揮している。ところがグラフェンは既存物質であるため、化学者の活躍の場があまりなく、日本の存在感は薄い。これは、デバイス展開の遅れによるものであり、近年やっと新学術領域研究や CREST が立ち上がり、挽回の気配が見え始めた。つまり、私を含めたナノカーボン分野の物理屋は、新しいナノ材料をデバイスにしてその特性を速成することに心理的なバリアを感じ、それを越えることができなかつたのではないかと。総じて我々は、新材料は作れるが、すぐにそれをデバイス展開することがあまり得意でないように感じられてならない。

JST/CREST「ナノ界面技術の基盤構築」

(統括) 新海 征治
 崇城大学工学部 教授
 九州大学 名誉教授



領域立ち上げ会議 2006/10/16

(1) CRESTチームの早期立ち上げのすすめ
 ☆チームを早期に立ち上げてスタート
 ☆終了時に愚痴、口実を言わない!!

(2) 共同研究のすすめ
 ☆何故なら、人は固定観念に捕らわれて行動、思考していることが多い!!

日本人 = 農耕民族

→

“自分の領地を保守”
 (今西総司の住み分け理論)

欧米人 = 狩猟民族

→

“他人の領地を侵略”
 (ダーウインの進化論)

要するに……

- (1) 独創性に富んだ
- (2) Made-in-Japanのブランドで世界に向けて情報発信できる
- (3) 世界最高、世界最先端のラベルが貼れる

図 6-1-2

私は 21 世紀に入った直後から、3 つのナノテク関連の CREST で研究代表者と研究分担者を務めさせていただいたが、その中で特に経営的マネジメントという意味でとても印象深かったのは、新海先生が領域統括をお務めになった CREST である。このとき、私は川崎先生のチームの研究分担者として入っていた。採択後のキックオフ会議で新海先生は、「(1) 早期立ち上げのすすめ」「(2) 共同研究のすすめ」を強調された。(1) では、立ち上げない人にはお金をあげないよ、(2) では本当の共同研究をしないとお金をあげないよと、言外におっしゃっておられた (図 6-1-2)。

そのときに、特に推奨されたのは、「日本人というのは農耕民族で、自分の領地を保守したがって他のテリトリーに行かないが、この CREST では無理してでもチームを組んでやってください。欧米型の狩猟民族になってください」ということであった。これこそが今、

ナノカーボン分野の物理屋に欠けていたことであって、本当に材料がすぐそばに転がっているのに何もできない、何もしなかった。そういうメンタルな点を将来のJSTのプロジェクトでも意識してプログラミングをしてもらいたいなと感じている。

イオン트로ニクスの意味するところは ion controlled electronics であるが、もともとのモチベーションとしては、CRESTで有機エレクトロニクスの研究をしており、そのそばで二次電池やキャパシタの研究をしている人がいて、それらを合わせるととてもおもしろいのではないかと、既にテクノロジーとしてどんどん進んでいるもののいいところを合わせることによって、基礎科学へのフィードバックをすることができるのではないかと考えたことにある。CRESTの目指すものとは違ってはいたかもしれないが、そういう発想でイオン트로ニクスを始めた。イオニクスとかプロトニクスという言葉もあるが、イオントロニクスとは電子の機能性に着目するもので、イオニクス(イオン伝導体を扱うもの)とかプロトニクス(水素吸蔵合金や水素の燃料電池の触媒を扱うもの)などとちょっと違うということに注意していただきたい。

この言葉は川崎先生と一緒に考えたものであるが、その当時の3年前ぐらいに「Iontronics」と題した本が既に出ており、今年になって日本から「有機イオントロニクス」という本が出た。この2つは基本的に何について書かれているかというと、コンジュゲートポリマーを使って電気化学的なデバイスをつくってアクチュエータ、光デバイス、センサ、FETなどのデバイス作製に関するものである。我々としては、そういうものは有機にこだわるのではなくて、いろんな材料に応用して、いろんな機能を出していいのではないかと考えている。

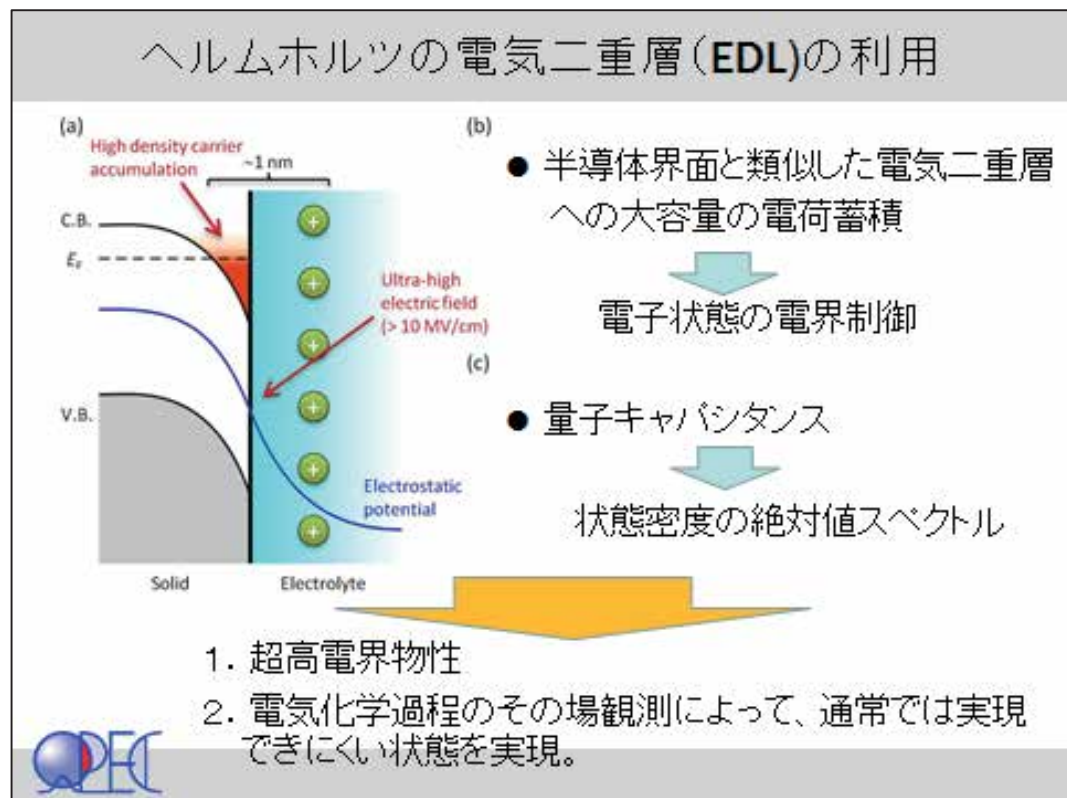


図 6-1-3

我々が注目したのは電圧をかけたときに形成される電気二重層であり、ヘルムホルツが19世紀の半ばに提案したものである(図6-1-3)。電池の表面、電極の表面に電解質が発生したときにイオンが非常に近くに寄ってきて、それをスクリーニングするように余計な電荷が蓄積される。そのときのこのコンデンサ構造の厚みが非常に薄く電荷がたくさん溜まるため、電気二重層キャパシタ(EDLC)とかスーパーキャパシタにこれが利用されている。電気二重層を使うと大容量の電荷蓄積が可能になるため、電子状態の電界制御に使えるだろうと考えた。

長さのスケールでいうと、STMの針が接近している距離、あるいは、トンネルスペクトルをとるときの厚みに相当しており、うまく容量をはかると、量子キャパシタンスが求まる。つまり、固体側の状態密度の絶対値スペクトルを求めることができる。この方法は超強電界がかかったときの電子状態、物性、あるいは電気化学反応のその場観察の一つである。広い意味での電気化学過程を途中で止めて、通常の状態では安定ではない状態を実現できる可能性がある。物質の状態をプローブするために、電気抵抗測定用端子を設けると、それはそのままトランジスタ配置となるため、電気二重層トランジスタ(EDLT)と呼んでいる。電圧の力で絶縁体を超伝導にしたり、強磁性を誘起するなど、さまざまな電子状態を制御したり、熱電効果の制御をしたり、新規2次元超伝導やバレートロニクス舞台になったり、あるいはメモrista機能を示したりと、豊富な世界が開けているということが最近わかってきている。つまりこのEDLTというものは電気化学と固体物理と電子工学の境界にあるもので、それを生かした物理、物質開発、応用物理をやることを目的として、文科省のプロジェクトを進めている。

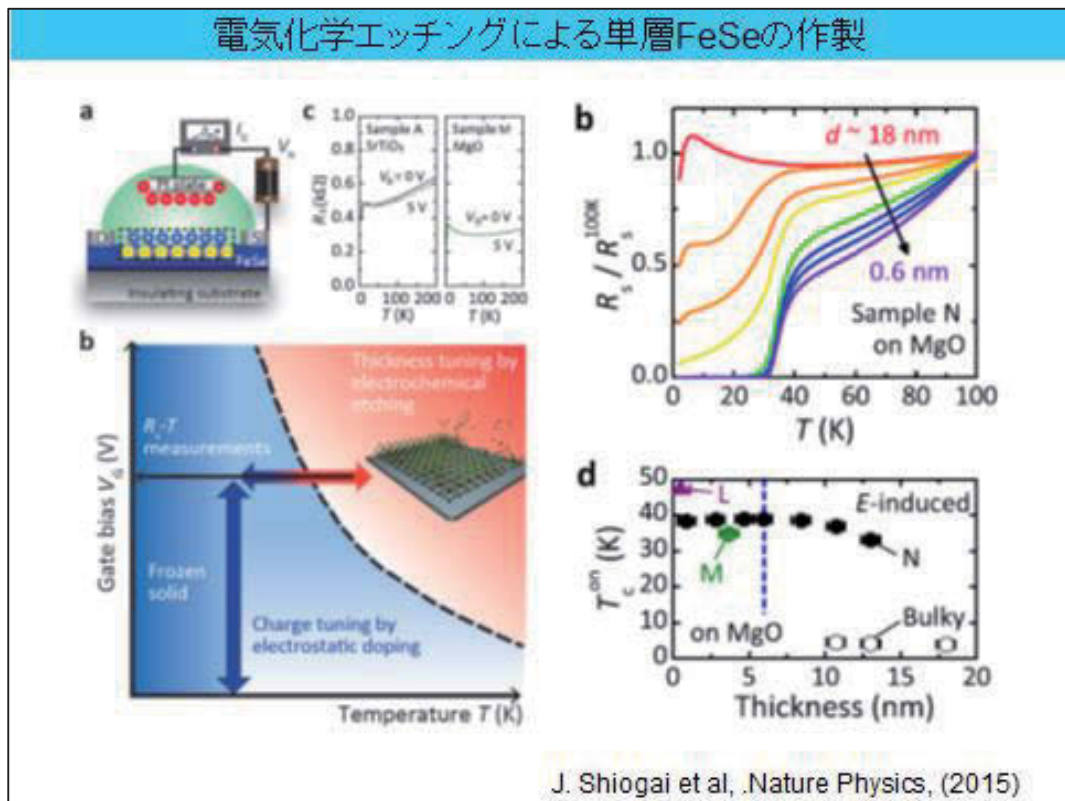


図6-1-4

最近の興味深い成果の例として、図 6-1-4 に塚崎先生のお仕事を上げたい。これまで電気二重層は電子を蓄積することしか頭になかったのだが、きちんと制御することによって一原子層ごとにエッチングできて、FeSe を多原子層からスタートして、最終的に単原子層にできることが明らかになった。その結果、超伝導転移温度が劇的に上昇することがわかったのである。EDLT には、我々が思っていた先入観つまり静電蓄積というだけではなく、電気化学エッチングという能力があることが示されたわけである。

もう少し視野を拡大して、固体の中でイオンが重要な仕事をしているごく最近の例として、有機物質の例を挙げたい。十倉先生はイオントロニクス先駆者であり、既に室温の有機強誘電体をつくっておられるが、これは基本的にプロトンによってドライブされている強誘電体である。しかも、塗布膜でも動作するという点で応用上非常に期待が持たれている。

一方で、物性研の森先生はプロトンの位置制御によって伝導性あるいは磁性が制御できるということを説明しておられる。今後イオンの動きと電子の動きを一つの固体の中でうまく制御して、例えば高温超伝導体を創出するというのも考えられると思うが、視点を変えて、イオントロニクスというものをもう一度考え直してみると、例えば脳で行われている情報処理は、Ca イオンによって電気信号を出しているという意味で、イオントロニクスそのものであるといえる。

脳の原理を使った非ノイマン型のコンピューティングを実現するためには、ニューロンのオペレーション、つまり学習するデバイスをつくる必要があるが、今盛んに研究されていることは、基本的には半導体のデジタル回路でプログラミングやソフトウェアによって学習するものをつくらうということが主流になっている。そのような学習するデバイスをメモrista と呼ぶが、実際の固体デバイスに入れて、ハードウェアでつくるという研究がある。メモrista は、最初は概念的に提案されただけで実態がわからなかったが、少し前に酸化物の RRAM で実現するということが提案されて、多段のスイッチングがいろいろできるということが TMD でも出されている。強誘電体でも同じようなアイデアが出されている。つまり、これは基本的には固体物理が目指しているものとは全然違う領域に、固体物理が貢献できる何かがあることを示唆しているのではないか。

まとめると、物理の提案をするときに、物理の概念に駆動された物理提案に注力するだけではなくて、異なる分野や領域に入り込んで、その中で物理をやってもいいし、自分の領域に外から使えるデバイスやコンセプトを持ってきて初めて可能になる物理を展開してもいい。そのような開拓型の研究こそ物理屋が主導したいものである。

6.2 量子技術の最近の進展と今後の展望

樽茶 清悟 (東京大学)

量子情報研究のこれまでの状況とこれからの動向についてお話ししたい。量子情報になじみのない方にはちょっとわかりにくいかもしれないが、これらの研究の方向性がわかっていたいただければよいと考えている。

・最近10年程度の期間に見られた重要な発展について、箇条書きでご記入ください。

(量子技術と関連材料)

- ・ スピン、電荷、超伝導量子ビット、量子もつれの実現
- ・ 量子コヒーレンス問題: 同位体制御Si、ダイヤモンドNVセンター、核スピン環境
- ・ 多ビット化(超伝導回路7、イオントラップ10、スピン3)
- ・ トポロジカル量子計算
- ・ 量子アニーリング
- ・ 単一光子伝送(>100km)、量子暗号技術(試験)
- ・ 単一光子源、もつれ光子源
- ・ ハイブリッド量子系(光子-スピン、超伝導-光子)

図 6-2-1

図 6-2-1 は、最近 10 年程度の期間で達成された重要な発展について書いたものである。この間、量子情報で実現すべき原理、そして量子ビットや量子もつれの確認実験は既に終わり、次の段階に進むには何をクリアすべきか、そのためにはどんな材料やデバイスが必要かということが次第にわかってきた。

(量子技術)

- ・ 誤り耐性量子計算: 忠実度 > 99.9%、拡張性2次元、誤り訂正
- ・ インテリジェント量子情報(量子変換、フィードバック制御)
- ・ トポロジカル量子計算: トポロジカル超伝導、マヨラナ、Braiding
- ・ 量子エミュレーション: 非平衡ダイナミクス、開放系量子系(ImPACT)
- ・ 最適化問題(ImPACT)
- ・ 長距離量子暗号通信、ネットワーク: 中継、テレポーテーション
- ・ 超伝導ハイブリッド量子系
- ・ 量子もつれの科学(量子計測、相転移、非局所性)

図 6-2-2

次に、今後 10 年の研究課題を考えてみる (図 6-2-2)。量子技術としては誤り耐性のある量子計算を行うことが最大の課題である。その解決には、一つは誤り訂正のプロトコルを実行するためのデバイスやアーキテクチャをどう実現するか、あるいは、誤りに対して原理的に耐性を持っている、例えばトポロジカル量子現象などを利用できるか、という 2 つのテーマに対して挑戦的な研究が進むと考えられる。

もう一つの課題は、量子エミュレーションに関するものである。量子計算はデジタル型の論理回路を組んで計算を行うのに対して、エミュレーションはアナログ型の計算方式であるため少し難易度は低く、最適化問題への応用が期待されている。

また、近い将来という意味では、「長距離の量子暗号通信」というリソースが小さくて実現できそうなターゲットがある。そのほか、私が個人的に興味を持っている物理の問題として、超伝導ハイブリッドの量子系や量子もつれに関する科学の研究も進むと考えられる。

図 6-2-3 に示すように、量子コンピュータの情報処理能力は、30 ビットを 1 ギガのクロックで動かすと、単純計算で京コンピュータの 100 倍の能力が発揮できる。たった 30 ビットでいいが、誤謬訂正を含むという条件が大変な課題である。完全に間違いなく動く 30 の論理ビットを手に入れるためには非常に大きなリソースが必要になるという点が大問題となる。そのためには、先述の通り、誤りを訂正するためのプロトコルやシステム、それに適した材料、デバイス構造を開発することが必要である。それにこたえる材料として脚光を浴びているものとして同位体制御の ^{28}Si がある。これは、慶応の伊藤先生が早くから研究され、最近はニューサウスウェールズのグループと共同研究されている。 Si は自然には 4.7%の ^{29}Si を含んでおり、 ^{29}Si は核スピンをもつため、これがスピン量子計算のコヒーレンスを制限している。伊藤先生たちの研究では、 ^{29}Si を同位体工学で 0.08% 以下にまで減らした同位体制御 ^{28}Si を使うことでゲート操作の忠実度 (Fidelity) として 99%以上の高い値が達成されている。

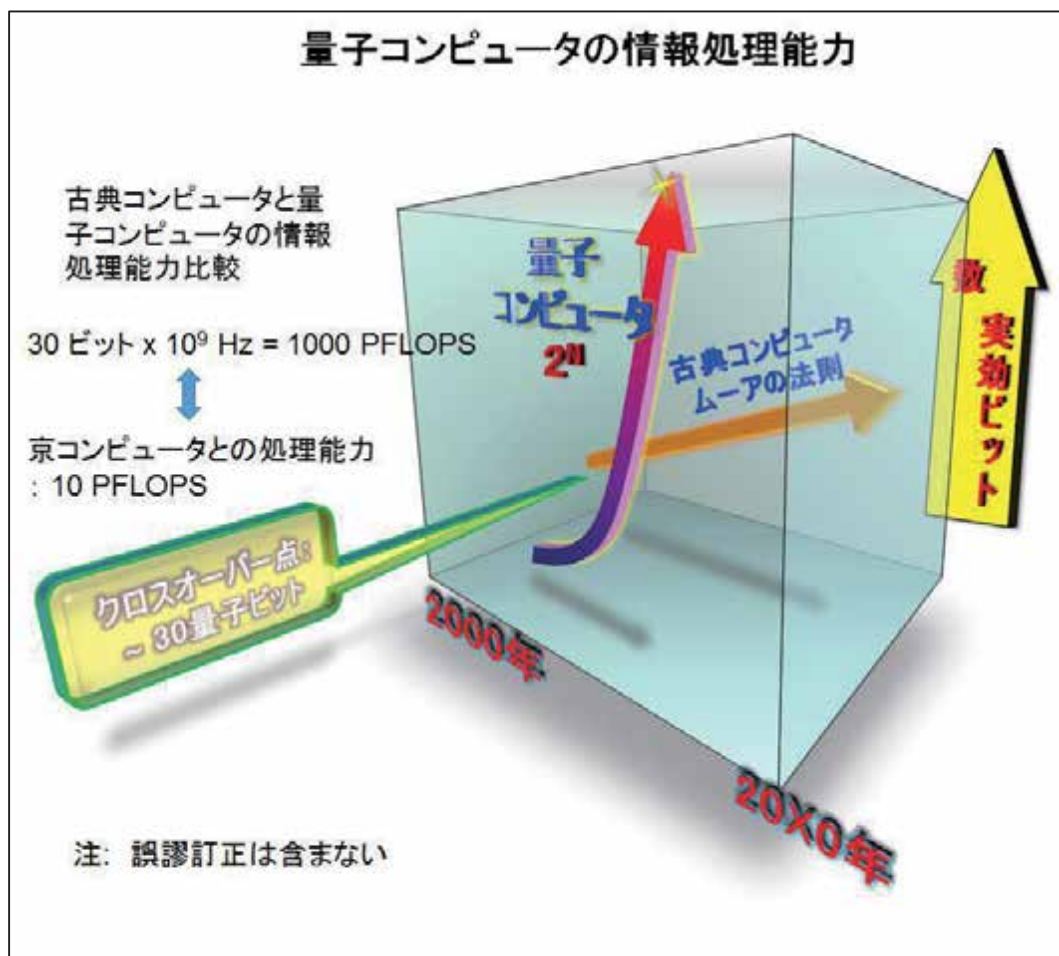


図 6-2-3

我々は最近、理研で自然の Si を使って実験を行っている。同位体制御 ^{28}Si に比べてコヒーレンスは確かに 2 桁ぐらい悪いものの、その代りゲート操作時間を 2 桁ぐらい大きくすることで、同等の 99% 以上の忠実度を達成することができた。このほか、ゲート忠実度の意味では、ダイヤモンドの NV センターで 99.9952%、超伝導回路で 99.9% という値が実現されている。

なお我々の研究では、忠実度を 99% 以上にするためには、コヒーレンス時間とゲート操作時間の比が重要で、この比を 100 位に大きくすればよいことが分かった。

また環境雑音の影響から保護された量子ビットに関して、特有のトポロジ性をもつ量子現象を利用する方法が注目されている。例えばマヨラナフェルミオンと呼ばれる非可換統計性のエニオンな粒子を用いる方法が理論家を中心に議論されているものの、実験は余り進んでいない。非可換エニオン自体の研究はずっと前から始まっており、GaAs 系の量子ホール状態のうち $\nu=5/2$ の状態がよく研究されてきた。最近では川崎先生たちが研究されている ZnO の $\nu=3/2$ の状態が新しい非可換状態ではないかということで注目されている。

最適化問題に関しては、最近量子アニーリングの話が注目を集めている。この火つけ役になったのはカナダの D-Wave 社であり、超伝導量子回路を使って量子アニーリングに成功し、商品化した。このアニーリングでは量子力学効果を含んでエネルギー的に最小と

なる状態を計算していく。また、ごく最近では日立が半導体の CMOS 回路上で非ノイマン型のプロセッサを使って CMOS 回路による古典アニーリングを実現している。ここでは、エネルギー最小値を探す際にわざとノイズを入れて、ノイズの揺らぎを使うという方法を用いることで、通常の(古典)方式の 2000 倍ぐらいの高速化が達成されている。一方、ImPACT のプロジェクトでは、山本先生がレーザーのフィードバック回路を使ったコヒーレントイジングマシンというものを提案し、今実現に向けて研究を進めている。

忠実度を上げた測定に関しては単一量子の検出器がとても重要な役割を担っている。単一ショットで、オンチップで測定する技術が、電荷、スピン、超伝導量子回路などで進んでいる。いずれの量子系でも、測定の忠実度は 99% を超えている。現在のところ、この忠実度に加えて読み出し速度が重要で、1 から 10 MHz が最速になっている。しかし、これを量子計算の誤り訂正の回路に組み込むには 100MHz ぐらいまで速くする必要がある。

量子計算、量子シミュレーションは大きいリソースを必要とするのに対して、量子暗号や量子中継、量子計測といった分野では、比較的小さいリソースが小さくできるため、比較的近い将来に実現可能と考えられている。

なお量子中継では、テレポーテーションによるエンタングルメント(量子もつれ)の交換を原理として、量子情報を中継する。様々なアプローチがあるが、例えば光のもつれ光子を使ってスピンに情報を受け渡す、そのときにテレポーテーション操作をする。また、東大先端研の中村先生たちはマグノン励起を利用して、超伝導量子ビットと可視光の情報を受け渡す技術を開発している。ダイヤモンド NV センターを使った研究では、最近デルフト工科大のグループが 1.3 キロメートル離れた地点の間で光子の情報をスピンの中継したという報告をしており、注目を集めている。

【質疑応答】

Q: 「誤り訂正」は先生が述べられたように非常に重要であると感じている。忠実度が 99% 以上だと誤り訂正ができるが、誤り訂正をするためのハードウェアがたくさん必要になるということか。

A: 忠実度が高ければ高いほど、誤り訂正を補正するための量子ビットの数が少なく済むが、今は 99.9% ぐらいであり、例えば誤り訂正によって 1 論理ビットを作るために 13 から 17 ビットぐらい必要とされている。

Q: その誤り訂正の話は量子アニーリングに対しても同じか。

A: 今のアニーリングは誤り訂正をしていない。アニーリングの場合に問題になりそうなのは、エネルギーの最小値を見つける計算において、真のエネルギーの最小値よりも少し高いところにエネルギーの極小値がある場合、最適化の過程がその極小値に留まりやすいため、最適解に到達できないか、あるいは到達時間が長くなることである。エネルギー最小値を他から差別化するエネルギー(励起エネルギー)はビット数に反比例して小さくなるため、ビット数が増えるほど差別化するための計算精度が要求され、その分時間がかかる。

Q：量子暗号が以前からあまり変わっていないという印象を受けたが、技術的にやれることがはっきりしているからではないかと考えている。つまり、今のステージというのは、あの技術を実際に使う人がいるのだろうかということではないかと思うが、ユーザー向けにもうデバイスを出していける状況なのか。

A：量子暗号では暗号鍵を送るため、それほどたくさんの情報を送る必要はない。情報データ自身は通常の伝送方式、公開方式でいい。暗号鍵を送るときにどのくらいのレートなら時間的に満足できるかが問題である。ユーザーとしては、非常に高いセキュリティが必要になる、例えば銀行や病院や政府機関が考えられる。まず、そういう機関で量子暗号を使ってくれるかどうかではないか。

Q：10年前にも同じような議論がなされていた印象があるが。

A：10年前は完全に安全な量子暗号を送るという立場だったが、今は、完全ではないが、十分な安全性が保たれる条件で我慢し、その代り暗号鍵を送るスピードを上げましょう、という考え方ではないか。

6.3 直線運動から回転運動へー 進歩信仰から持続性社会へー

永長 直人 (理化学研究所)

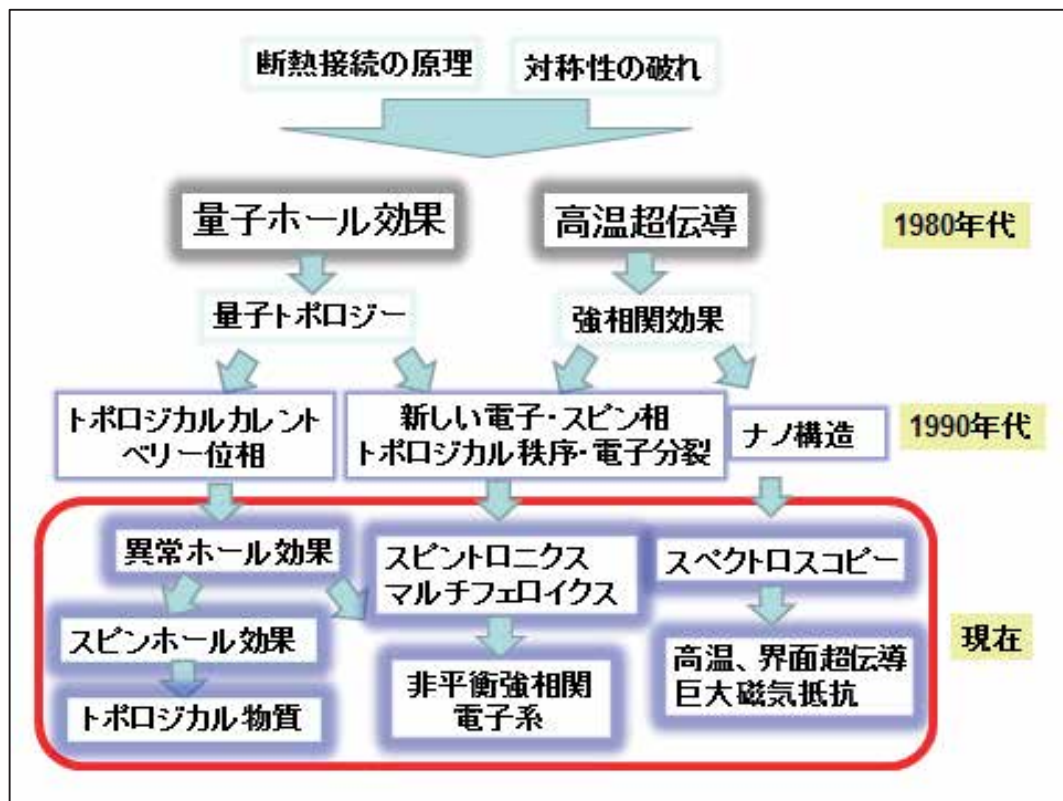


図 6-3-1

本日お話ししたいことは、12年前の軽井沢でのWSのときに話したこととほとんど寸分たがわらないアイデアであるが、少し時間を経て、より広い立場から専門外の人にもわかるようにお話ししたい。

恐らく20世紀は、エネルギーがあたかも無限にあるように考えられていて、科学技術も永遠に進歩すると思っていた時代ではないか。それが21世紀になると、持続性のサイクルをうまく定常的に回そうと社会が変化してきた。それに対応して、物理学でも直線運動をもとにする物理学から回転運動というものを基本にする物理学へと進展してきたということが私の認識である。

その歴史的な背景は、1980年代に起きた二大発見、量子ホール効果と高温超伝導にあり(図6-3-1)、それらが量子力学におけるトポロジーと強相関効果という2つの大きな潮流の源となるとともに、いろんな多彩な発展へと繋がった。トポロジーに関しては、トポロジカルカレント、ベリー位相という概念が提出されたが、一方の強相関系でもそれら概念が非常に重要であるということが分かってきた。現在のスピントロニクスやトポロジカル物質、それから、非平衡電子系といった主要な発展が、この2つ潮流が合流するところで起こっていると考えている。

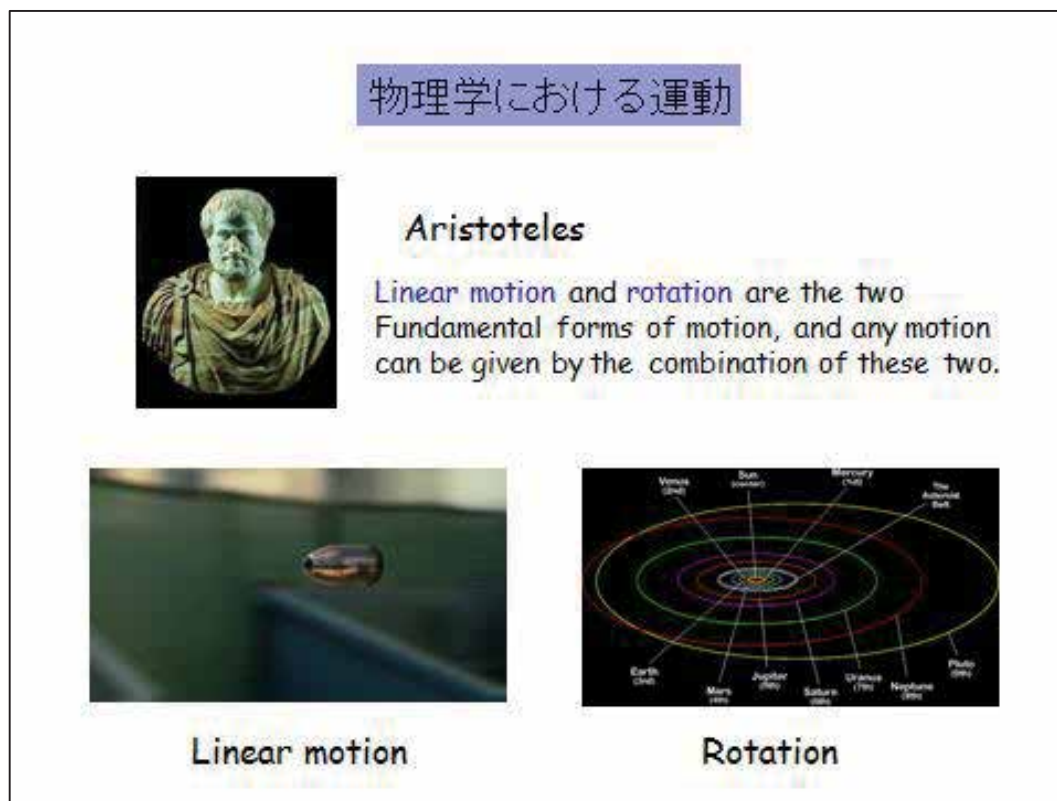


図 6-3-2

歴史をひもとくと、アリストテレスが既に「物理学における運動というのは、直線運動と回転運動に分かれて、あらゆる運動はその組み合わせで書ける」ということを言っている(図 6-3-2)。彼は、直線運動というのは地上の運動、回転運動というのは天界の運動であり、この2つの運動法則というものは、ある種別個であるというふうに考えていた。直線運動のほうは地上の運動のためすぐにとまってしまうが、この天界の運動というのは、永遠に続く永久運動であり、非常に高貴なものである、と考えたのである。

今、我々は、この回転運動を固体の中で操作、設計することで持続性社会に寄与したいと考えている。回転運動というものの代表例は磁場中の運動であり、磁場がかかるとローレンツ力という力が働く。ローレンツ力は必ず速度の垂直方向に働くという性質を持っている。つまり、磁場は仕事をしないので、回転運動というのは本質的にエネルギーの散逸を伴わない運動を引き起こすということになるわけである。空におけるオーロラは磁場中の運動で起こっており、固体中ではホール効果というものに代表されるような効果として現れる。

では、この磁場が常に必要かという点、必ずしもそうではない。量子力学の基本的な原理に戻ると、量子力学における幾何学が磁場に相当するものをもたらしということが最近の大きな認識の進展である。

少し専門的にはなるが、量子力学においては、物理的な状態がヒルベルト空間におけるベクトルとして表現されており、エネルギー的に階層構造を持っているシステムを考えると、エネルギーの低い状態とは、このヒルベルト空間におけるある部分空間であり、数学

的には多様体と呼んでいる部分空間をなす。この部分空間というのは、一般には図 6-3-3 のように曲がっており、この図形は、多様体の接続、あるいは、曲率によって表現される。

この曲率は物理の言葉でいうとゲージ場であり、これはまさに創発電磁場と我々が呼んでいる場である。特に静的な構造においては、これは創発磁場を与えることになり、波動関数の構造によって物質の中に磁場をつくり出すことができるという概念で、まさにベリー位相の概念になる。

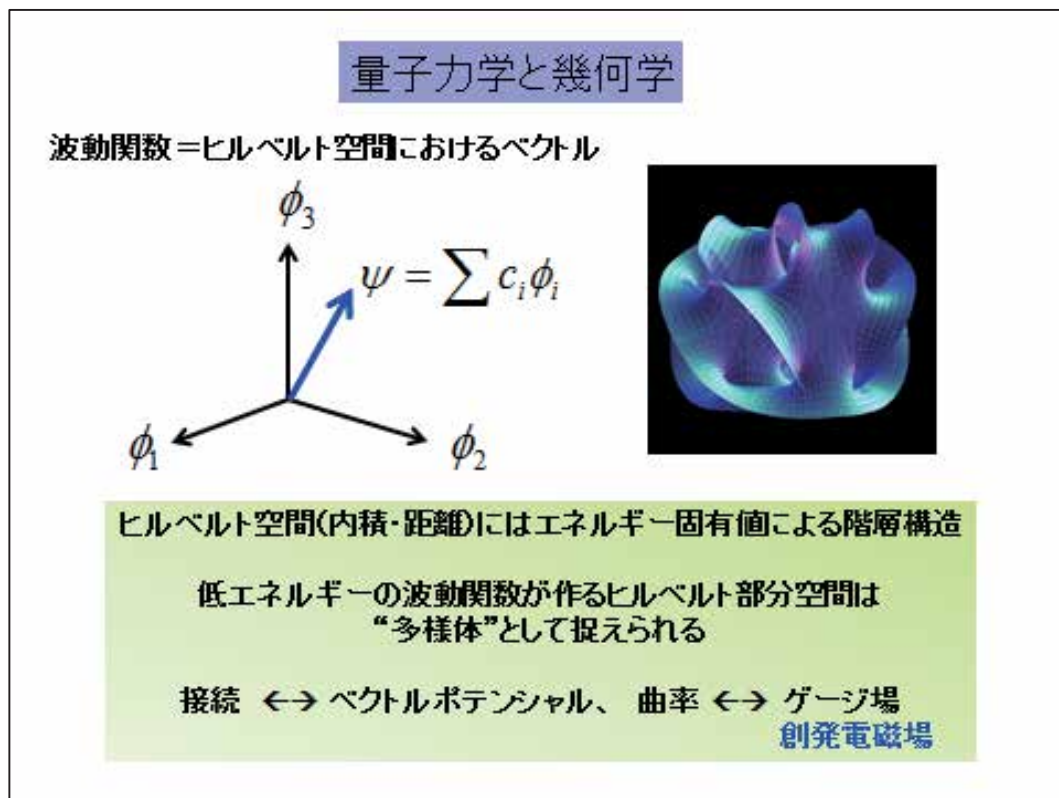


図 6-3-3

このように幾何学というものが量子力学とは切っては切れない関係にあるが、このような抽象的な概念が非常に多くの現象を引き起こすということがここ 10 年間でわかってきた。それを創発電磁気学と私たちは呼んでいるが、それは「磁場のようなもの」が運動量空間や実空間に存在し、それが電流を引き起こすと考えればよい。

この創発電磁場によって引き起こされる電流こそがトポロジカル電子流であり、これは幾何学的に駆動される電流であって、本質的に室温でも動作が可能で、超伝導電流や普通のオーミック流に比べて第三の電流としての機能開発を行うということを示した(図 6-3-4)。

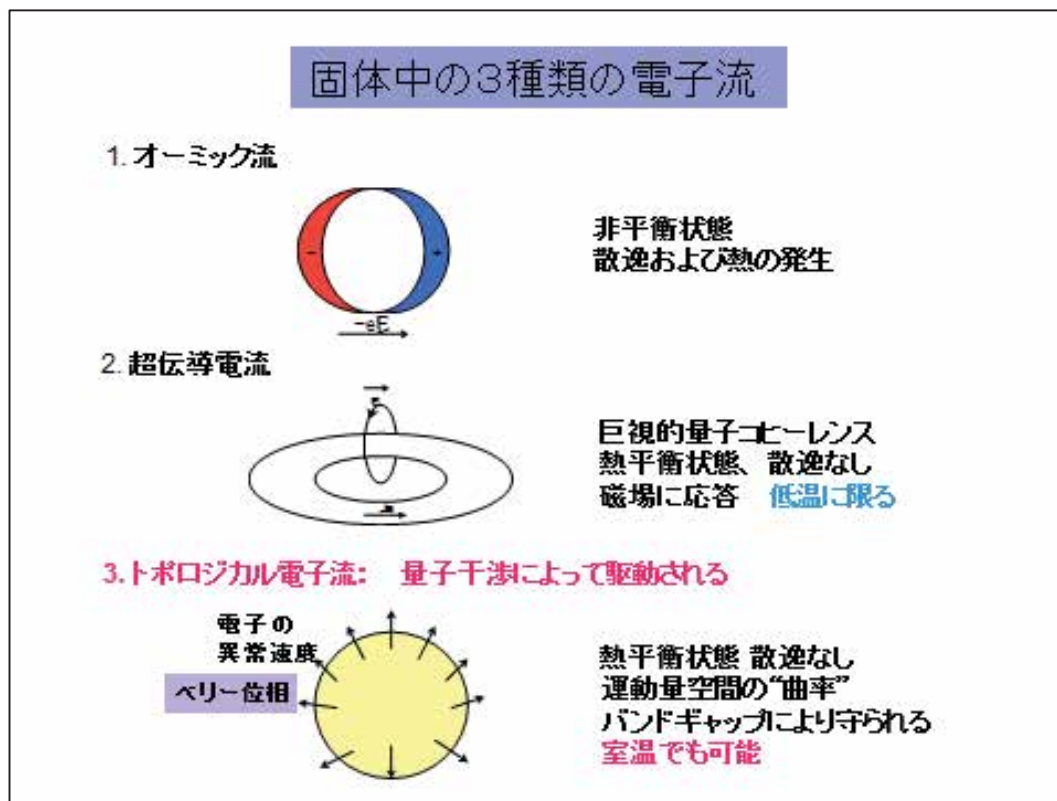


図 6-3-4

私の考えはこの12年間全く変わっておらず、ますます確信を深めているわけであるが、その哲学について述べたい(図 6-3-5)。

ヒルベルト空間で多様体を定義したとき、その大域的な構造というものが必要になる。それは数学的にはガウス曲率を多様体にわたって積分すると、それがジーナスと呼ばれている穴の数に対応することを示した Gauss-Bonnet の定理とその拡張に対応する。この Gauss-Bonnet の思想を、これがヒルベルト空間の多様体に対して応用する、トポロジカル秩序状態が現れるというわけである。

回転運動そのものでは外に取り出すことはできない。しかし、トポロジカル秩序状態がバルク中で発生すると、この回転運動がエッジチャンネルという一方向の運動に化ける。例えば反磁性電流というものは外に電流として取り出すことができないが、エッジチャンネルを通じて直線運動に化けることはできる。一方向の運動というものは、図 6-3-6 に示したような一方通行のハイウェイのようなものであって、本質的に散逸を伴わないような電流を流すことになる。これが通常の固体中の拡散電流と大きく違う点である。

もう一つ回転を直線運動に変える方法がある。それは量子ポンプと言われる方法論である。つまり図 6-3-6 の右図に示したように、ペロブスカイトの強誘電体の簡単な一次元モ

デルでは、ボンド交替とサイトエネルギーの交替を両者含めると、反転対称中心がなくなり、これを $Q1$ 、 $Q2$ というパラメータをループで動かすことで電荷が右のほうへどんどんと運ばれていく。実はこの量子ポンプが部分的に起こっていて、電子が1個ではなくて0.2個とか0.1個とか右に動くという現象が、強誘電にほかならない。

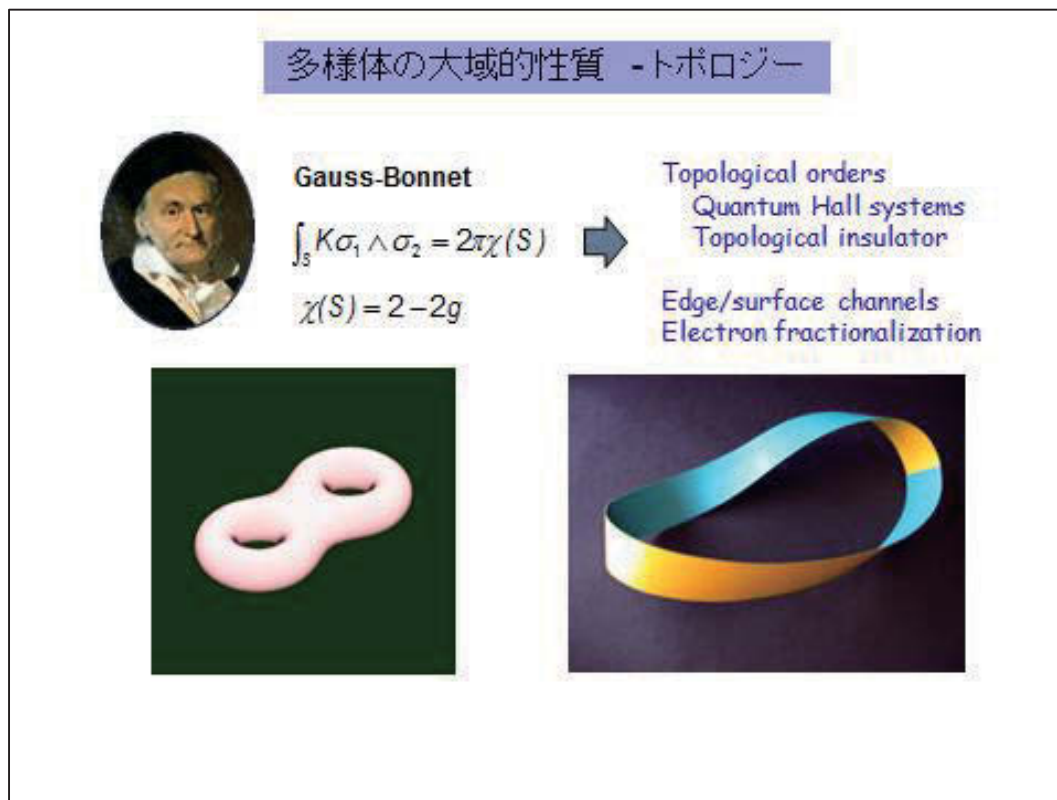


図 6-3-5

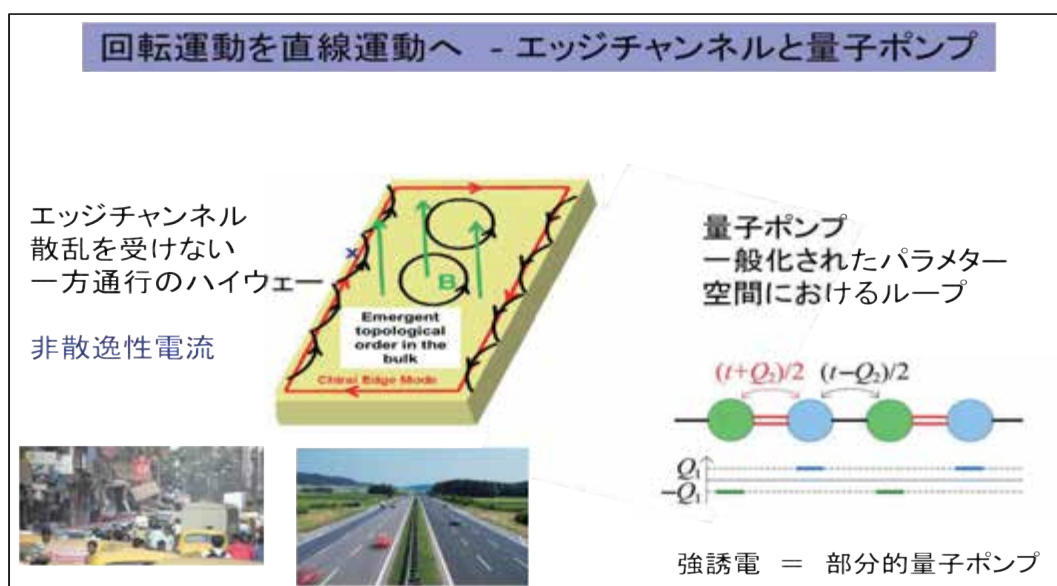


図 6-3-6

このように量子力学的に位相を用いて電子を操作しようという概念は、運動量空間だけではなく実空間においても幅広く実現することができる。その一つの例がスキルミオンとされている渦上の構造である。スピンは自転運動なので回転であるが、その回転がさらに格子構造として回転の構造をつくるというもので、回転だらけのシステムになっている。これがトポロジカルな安定性を持つということが知られており、何回スピン構造が球面上を覆うかというトポロジカルナンバーによって創発的な粒子が安定性を持つことが知られている。これは適切な物質を選ぶことで、しかも、最近の進んだ観測技術で実証することができるのである。

この粒子は先ほどの創発電磁現象を示し、実効的な磁場を持つため、電子がホール効果を示したり、あるいは運動に伴う創発電場を発生したりと、新しい固体中の電磁力学を検出することができる。これは基本的に回転の粒子なので、磁場中の電子とほとんど同じ運動をして、その速度は力の垂直方向にあり、ローレンツ力と同じような性質となり、ピン止めのポテンシャルがあっても、不純物を避けて運動することができる。つまり、このスキルミオンという粒子は余り衝突を起こさない粒子で、散逸を抑える働きをすることがわかる。

今までの話は、比較的エネルギーの低い領域の話だったが、最近はこのトポロジーという概念が太陽電池にも応用できるという話が勃興しつつある(図 6-3-7)。従来の太陽電池は、図 6-3-7 右上図のような pn 接合を用いて光励起された電子正孔対が拡散電位差の勾配によって電流として取り出されるという仕組みであるが、ペロブスカイト太陽電池は、そもそも結晶構造が反転対称性を破っていることから電流が光励起によって流れる、つまり電場勾配を必要とせずに結晶の構造の反転対称性の破れを用いて電流を取り出すことができるシステムである。実は、ペロブスカイトの一次元モデルに対応したもので解析することができる。ここで重要な点は、電子がバンド間遷移、つまりバンドギャップを超えて励起されていることである。高いエネルギーを与えているため、異なる多様体間の遷移を起こしているのである。この状況は、トポロジーが「低い状態群のヒルベルト部分空間に拘束されている」場合に有用な概念となる、という条件を逸脱しているように思われる。ところが、この場合にも、遷移前後の2つの多様体の接続、あるいはベクトルポテンシャルの差に対応した部分がカレントとして流れるのである。この非定常状態、非平衡定常状態におけるトポロジーというものが、連続的に DC の電流を流すということを理論的に示唆している。

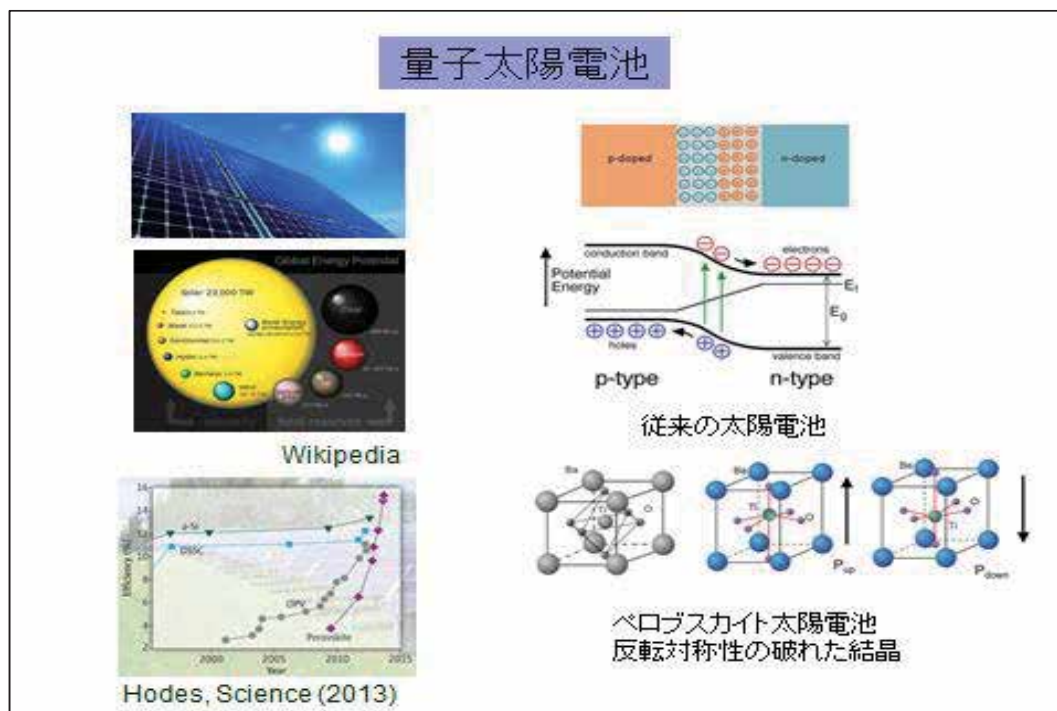


図 6-3-7

このように非平衡状態にすると、揺らぎあるいはラチェットの運動を用いてトポロジと絡めて物質の機能を開拓することができるのではないかと考えている。電流の話をしたが、対応してトポロジカルなエネルギー流を駆動することも可能である。従って、光を当てるとどんどん熱流が流れるという現象もベリー位相によって駆動できるということが予見される。

今申し上げた全ての現象にわたって電子系の幾何学的な量子位相というものが効いており、将来は「広義での回転運動」を統一的に理解、設計する学理が構築できるのではないかと考えている。

6.4 超伝導における最近の進展と今後の展望

松田 祐司 (京都大学)

私の専門は超伝導（特に *unconventional* な超伝導）と磁性である。社会との接点は非常に重要であるが、主に強相関電子系における異方的な超伝導に関して実験の立場からどう見ていえるのかということと、将来どういう方向に進んでいくのかということをお話したい。

過去 10 年程度で得られた重要な発展の中で、一番大きな話は、おそらく鉄系の高温超伝導体が発見されたことではないか。これには 3 つの点で非常に重要な意味があったと感じている。1 つ目は、とにかく高温超伝導が銅酸化物だけではないということを示した点である。2 つ目は、異方的超伝導のファミリーである点、つまり、BCS 理論で説明できない超伝導のファミリーである銅酸化物、重い電子系に続く 3 番目として鉄系超伝導が含まれたことである。3 つ目の重要な点は、超伝導発現メカニズムがもしかすると今まで考えてきたものとは異なるのではないのかという考えが出てきている点である。

銅酸化物高温超伝導に関しては、ここ 10 年ぐらいで非常に大きく進展したが、一番進んだ理由の一つは、計測技術の進歩により非常に良質な試料で量子振動が見えるようになってきたことである。フェルミ面がきちんと決定されたということと電荷密度波(CDW)転移というものも見つかり、電子の振る舞いが非常にはっきりしてきたことである。

また、Tc が 200K を超える H_3S の超伝導が見つかったことも重要な発展である。

異方的な超伝導において、様々な人工的な二次元超伝導物質や界面超伝導の創成が可能になってきている点も重要である。技術的に超伝導ギャップ構造を決定する様々な実験手法が開発されてきたことがその主要因ではないかと感じている。また、超高压などの極限環境の整備や様々な有機超伝導が発見されてきた点も重要である。さらに、おそらく一番重要な点だと思うが、角度分解型光電子分光 (ARPES) の進化である。20 年前の ARPES と比べると、非常に分解能がよくなったことと、走査型トンネル顕微鏡 (STM) も非常に性能がよいものが市販されるようになってきている。中性子、X 線、電子線を初めとする電子状態や磁気状態を直接観測するスペクトルスコーピー技術の分解能がここ 10 年間で非常に大きく向上したことがもっとも重要な点ではないかと感じている。

今後 10 年の超伝導研究の方向性に関しては、先ほど吉田先生が転移温度 1000K の超伝導の話をしていただいたが、実験から見たときには、電子間相互作用やスピン揺らぎ機構以外の超伝導の発現機構を解明することが非常に重要になると感じている。さらに BSC の壁を超えられるかという点も非常に重要になるのではないか。それらの点について簡単に説明したい。

今までの超伝導体というものは、s 波超伝導体では格子振動によって電子間に引力が生じていた。それに対して、高温超伝導体が我々に教えてくれたことは、反強磁性の揺らぎを使って超伝導が起こる、つまり、電子間相互作用が斥力でも良いということである。図

6-4-1 の右図に示すように、非常に大きな波数依存性を持っている。これが銅酸化物高温超伝導体が教えてくれた超伝導体のメカニズムであり、d 波超伝導体が生じる要因である。

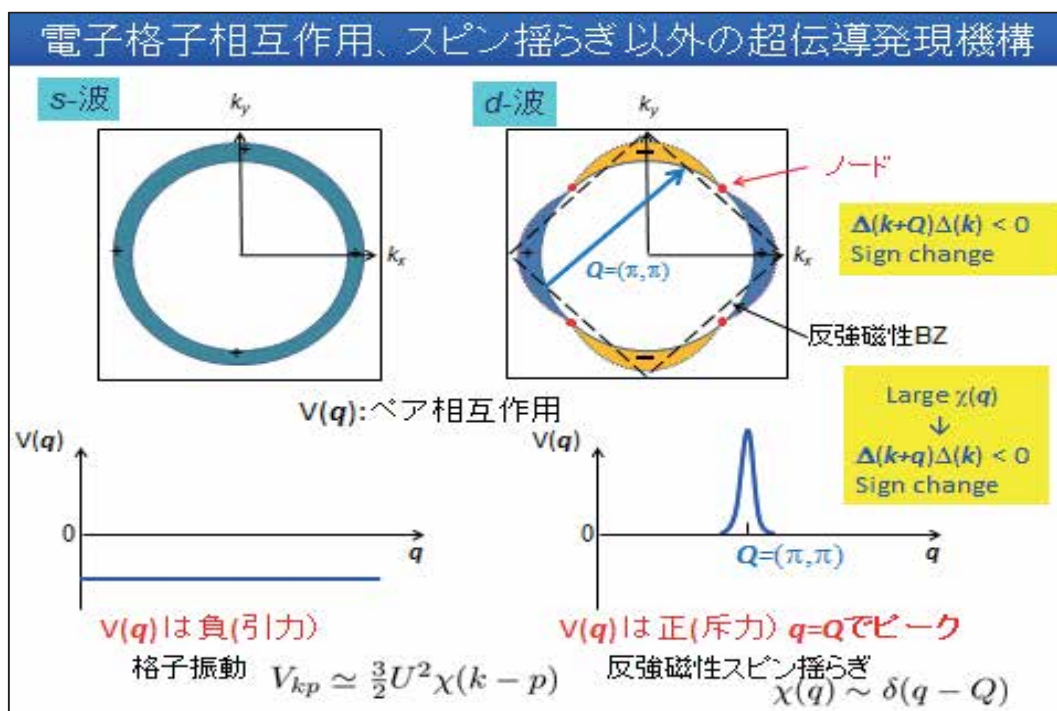


図 6-4-1

異論があるかもしれないが、1986年に銅酸化物の高温超伝導体が発見されるまでは、ほとんどのあらゆる超伝導体は、電子格子相互作用が原因で超伝導が生じているだろうと考えられていた。では、1986年から2015年の最近はどうかと言うと、実験から見ると、電子格子相互作用ではない、いわゆる非従来型の超伝導体のほとんどのものはスピン揺らぎの機構に起因するものではないかと考えていたのではないかと。

本当にそうなのかということ最近の発見を含めてもう一度きちんと考え直してみると、例えば先ほど塚崎先生がFeSeの単層膜でTcが50Kを超えるという話をされたが、その電子構造を見ていると、どう考えてもスピン揺らぎがあるようには思えないのである。

今一番ホットなFeAs系の超伝導体においても本当にスピン揺らぎが原因で超伝導が起きているかという点においても最近の実験結果からは疑問に感じることがある。

もう一つ、例えばCeCu₂Si₂という1979年にSteglichによって発見された一番最初の重い電子系超伝導体であるが、発見当初はスピン揺らぎに起因する非従来型超伝導体ではないと言われていた。しかし、どうも最近のいろんな実験結果を見ていると、とても単純なスピン揺らぎで超伝導が起こっているようには見えない。つまり、スピン揺らぎ以外の機構があるのではないかと考えている。また、スピン揺らぎがほとんどないと思われる有機物質においても超伝導が起こるものもあることから、2015年以降は、スピン揺らぎのドグマから脱却する時期に来ているのではないかと感じている。これが実験家から見た非従来型超伝導の現状であり、これからはスピン揺らぎ以外の機構を解明することが重要になってくると考えている。

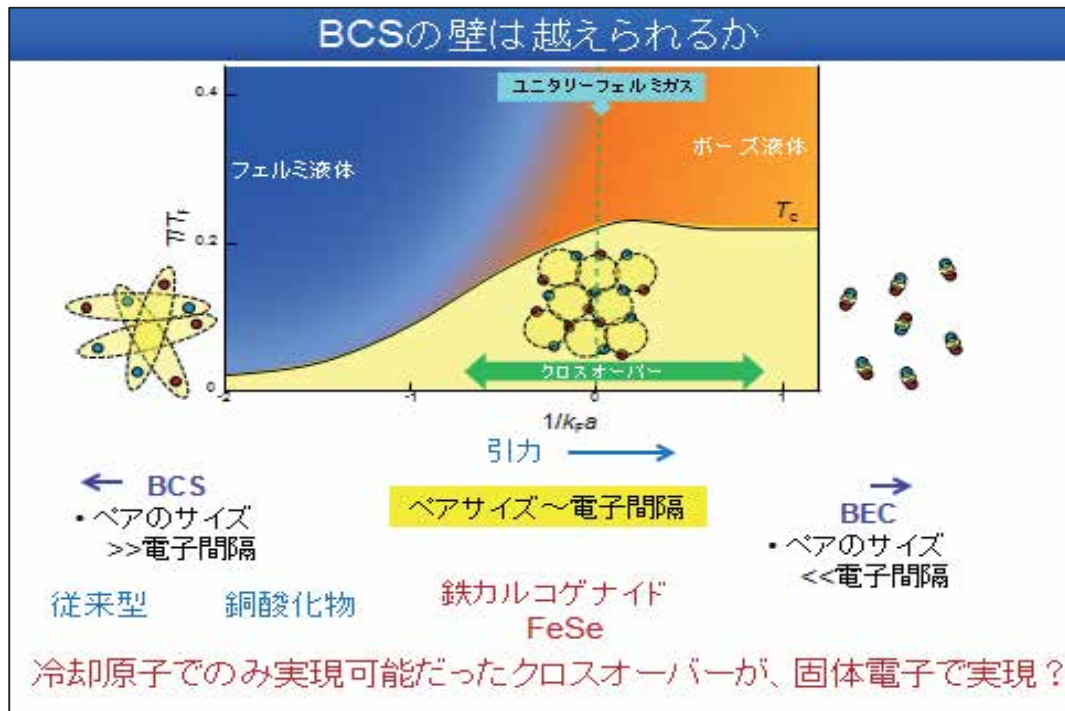


図 6-4-2

図 6-4-2 に示す「BCS の壁」について説明したい。図の左端の BCS 超伝導体においては引力の起源は何であってもいいが、要するに超伝導のペアのサイズが超伝導の電子間隔よりも圧倒的に長いことが特徴である。つまり、コヒーレンス長の中にたくさん電子がいるということである。それが BCS 超伝導体である。もう一方の極限（図の右端）がボーズアインシュタイン凝縮（BEC）と言われている状態で、電子のペアが分子みたいになって凝縮を起こす。つまり、ペアのサイズが電子間隔よりも圧倒的に小さいことを意味する。従来型の超伝導体というのは、言うまでもなく、図の左側の BCS の極限（弱結合極限）である。銅酸化物高温超伝導体はどこに位置するかというと、おそらく BCS の領域にあるのではないかと思われる。一方で、図の真ん中のクロスオーバーが起こるあたり、つまり、超伝導のペアのサイズと電子間隔が同じぐらいになったところではユニタリー・フェルミガスというものが現れ、いわゆる冷却原子系の Feshbach 共鳴によって実現できた状態と同じである。最近では、先ほどの鉄カルコゲナイド（FeSe）の電子構造を見たときに、ペアサイズと電子間隔が同じぐらいにしか見えないという実験事実がいろいろと出ている。つまり、冷却原子でのみ実現可能だった BCS と BEC の間のクロスオーバーが固体電子系でも実現しているのではないのかと考えてしまう。

これまでどうして固体電子系でクロスオーバーの領域に近づけないのかということや、ずっと疑問に思っていたわけだが、実は既にクロスオーバーの領域に近づけているのではないのか。この辺りの解析も今後やらなければいけないことの一つではないのかと考えている。

他には、エキゾチックな超伝導状態に関しても様々な研究があり、カイラル超伝導や Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) 状態と言われている。例えばカイラル超伝導としては Sr_2RuO_4 と URu_2Si_2 という物質が有力な候補になっているが、 Sr_2RuO_4 にしても URu_2Si_2 にしても今のところ本当にカイラル超伝導が実現しているかどうかははっきりしない状況である。また、FFLO 状態に関しても、40 年前に予測されているものの、未だ実現していると明確にいえの物質は発見されていない。

カイラル超伝導が見つかったところで何の役に立つのかという点に関してはよくわからない部分もあるが、最近、 URu_2Si_2 において巨大なネルンスト効果が現れるという実験結果が報告されている。この熱電性能指数を出してみると 0.9 になり、カルノーサイクルの 1 に非常に近い値になっている。もしかするとカイラリティというものが重要になっているのではないかという理論指摘もある。つまり、カイラル超伝導が実現すると、ただのアカデミックな研究対象だけではなく、もしかすると何かの役に立つのではないかと考えられる。

もう一つ、これからやらないといけない重要なこととして、やはり非従来型超伝導の人工的な制御が挙げられるのではないかと。先ほどの岩佐先生の話にもあったように、最近いろいろな技術で新しい超伝導体をつくり出すことが可能になっている。これを非従来型超伝導に当てはめると、例えばマヨラナ粒子やワイル粒子を探索したり、あるいは空間反転対称性を導入することもできるだろう。あるいは超薄膜、超格子によって制御することも可能になるのではないかと。これまでのスペクトルスコーピーの分解能を 1 桁上げることによって、エキゾチック超伝導状態を観測することも可能になると考えている。

人工的に新規超伝導状態を実現できたとして、では一体それをどういうふうに観測するのか、そして、それを観測するためにどういうものが必要なのかという点に関して、図 6-4-3 のような装置が必要ではないかと感じている。Molecular Beam Epitaxy (MBE) あるいは Pulsed Laser Deposition (PLD) などによって人工的に薄膜をつくり、それを高分解能 ARPES と極低温の STM を一体化した装置によってインサーチで観測することが必要である。おそらくこれから界面の超伝導というところが非常に重要なテーマになってくると考えられるため、こういう装置をどこかでつくれば良いなと感じている。

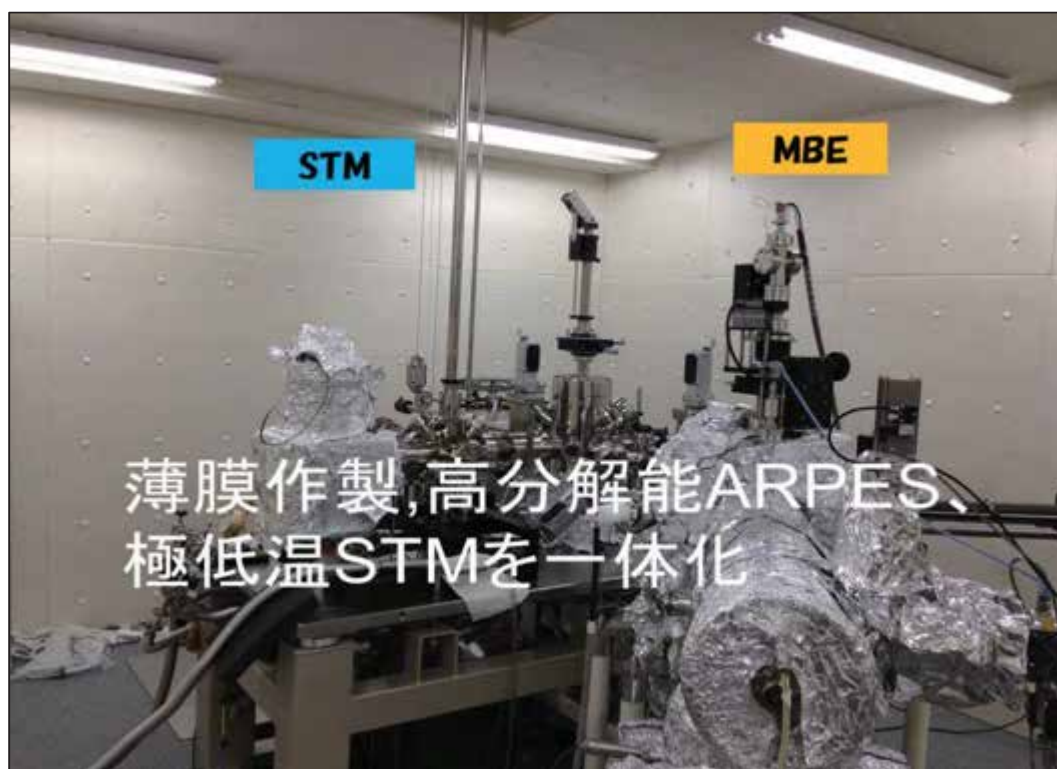


図 6-4-3

【質疑応答】

Q：サーモマグネティックな材料でカルノーサイクルの 90%を達成するという話に関して、サーモマグネティックでは磁場をかけて冷却するというイメージがあるが、どういう熱電材料なのか。

A：性能指数が 0.9 になったという計算がある。冷却に使えるとは思いますが、5K～1Kまで冷やす必要があるため、今のところは役に立たない。

7. 分科会検討結果報告

7.1 分科会1「物質設計・計算機シミュレーション・情報物理」～物質と情報の新しい世界を築けるか?～

リーダー 村上(東工大)

メンバー 有田(理研)、伊藤(公)(慶応大)、川崎(東大)、沙川(東大)、
十倉(理研)、樽茶(東大)、吉田(阪大)、伊藤(聡)(JST、理研)、
小川(経産省)、川喜多(NIMS)、五明(JST)、島津(JST)、
永野(JST)、的場(JST)

分科会1では、「物質設計・計算機シミュレーション・情報物理」～物質と情報の新しい世界を築けるか?～というテーマの下、以下の3つの研究開発課題を抽出した。

1. 揺らぎエンジニアリング【上位概念：トポロジー】

古典的な限界を持つ制御技術に対して、量子力学を利用した制御により限界を突破することを目的とする。量子情報分野においては量子コヒーレンス確保が世界的に喫緊の課題となっており世界的に盛んに研究が展開されている。それらの知見と、日本初のアイデアである量子アニーリング、また新しく研究され始めた情報熱力学、生体情報処理などを組み合わせて、新原理に基づく揺らぎ制御、量子力学的な制御を目指す。内容としては、例えば量子力学を利用した散逸(熱損失)制御、光から電子への変換効率の飛躍的向上、量子制御技術、系のコヒーレンス制御、ラチェット、生体ナノマシンのエミュレーション、量子アニーリング、passive/active制御、などを想定している。また、柔軟かつ高効率といわれる生体情報処理の原理を理論と実験の両面から明らかにする。熱力学と情報理論を融合させた新しい理論である「情報熱力学」の確立、実験的検証、それを積極的に利用した制御技術の確立をめざす。

2. トポトロニクス【上位概念：トポロジー】

量子ホール効果に端を発するトポロジカル量子現象の発見は、既知の物質に新しい側面があることを見出し、新たな付加価値を見出してきた。代表例はトポロジカル絶縁体や異常量子ホール効果である。ここでは、こうしたトポロジカル量子現象により示唆された、エネルギー消費を伴わない伝導の物理を理解し応用することを目的とする。またそれに用いられる要素としての、トポロジカルなバンド構造の系を予言、探索、デザインする。既存の物質を含めた幅広い分野から物質探索を進め、トポロジカル物質の物質群を広げることにより、劣化に強い材料の探索を目指し、太陽電池や熱電効果等に対する新原理の可能性を提示する。

また、現在低温で動作するデバイスは出来ておりそれをより高温へ展開し応用化を目指す。

3. マルチ自由度に基づく物質・機能設計【上位概念：マルチ自由度】

物質中にはさまざまな自由度が存在する。そのような自由度に着目して、計算機主導での物質開発・新機能創成を行う。考える自由度としては、固体中の様々な準粒子（フォノン、プラズモン、エキシトン、ポーラロン、スキルミオン、マヨラナ粒子など）、トポロジカル構造、ナノスケール相分離、超伝導も含む。これらの自由度に着目して、新原理に基づいて物質の機能設計を計算機主導で行い、実験と計算物理、物性理論との緊密な連携により、相分離を利用することで太陽電池の高効率化、自己修復する不老不死のエネルギー変換材料、低温熱エネルギーの有効利用（太陽電池、誘電体ポンピング、揺らぎの利用）を行う。マテリアルズ・インフォマティクスに関して、人海戦術的、網羅的な形ではなく、さまざまな物質中の自由度に着目して研究対象とする物質を絞り込み、新しいコンセプトに基づく物質設計を行う。

7.2 分科会2「低次元・トポロジカル物質・デバイス物理」～新現象をデバイス革新につなげられるか?～

リーダー 塚崎 (東北大)

メンバー 石坂 (東大)、岩佐 (東大)、小野 (京大)、齊藤 (東北大)、
谷垣 (東北大)、長汐 (東大)、山本 (東理大)、若林 (関学大)、
井関 (NEDO)、佐藤 (JST)、田中 (秀) (JST、東北大)、
中山 (JST)、宮下 (JST)

分科会2では、「低次元・トポロジカル物質・デバイス物理」～新現象をデバイス革新につなげられるか?～というテーマの下、以下の3つの研究開発課題を抽出した。

1. トポロジカル機能開拓【上位概念：機能創出・発現・操作】

物質に内在するトポロジカルな性質の理解を深めることで、機能として活用する物性の開拓を行う。特に、ベリー位相に由来する波動関数のエンジニアリングを行うことで、物質に新たな機能を発現させる原理を探求し、デバイスへの橋渡しに資する原理開拓までにフォーカスする。例えば、バレー流やスピン流など非散逸機構などの理解を基盤に、多様な物性を発展させて機能化を目指す。

2. エッジトロニクス【上位概念：機能創出・発現・操作】

バルクエッジ対応に基づくナノ・界面・エッジの物質科学・物性開拓・機能発現を探求する。エッジとしては、3次元系に対する2次元、2次元系に対する1次元を想定し、top-down と bottom-up での物質合成やデバイス作製および物性開拓を網羅的に検証する。さらに、構造からの次元性制御に加えて、磁場や電場などの外場制御によってアクティブチャネルの次元性を制御することは対称性の破れなどの観点からも重要である。例えば、磁区や電子相制御を素にする電子素子の高機能化や低消費電力化などが挙げられる。

3. 非平衡性能指数の標準化【上位概念：計測】

近年のめざましいナノ材料創成技術やデバイスの微小化、新原理の導入により、以前にもまして、強電界効果や高温勾配など極端な非平衡状態での物性評価が重要になっている。さらに、トポロジカル流 (例えば、スピン流やバレー流) といった新しい非平衡状態の発見により、それらの計測と機能化が強く望まれる。従来のデバイス特性評価やエネルギー変換効率評価には、線形応答に基づく性能指数 (例えば、熱電変換における ZT) が用いられてきたが、これらは極限物性やデバイスの性能を評価するには不十分であり、「非平衡性能指数の確立と標準化」を行う必要がある。「非平衡性能指数の確立と標準化」は、極限物性、化学反応、デバイス動作、生体などへの適用も含め、幅広い分野の真の理解と機能化を促進させるのに重要かつ不可欠な課題である。

7.3 分科会3「磁性・超伝導・強相関・光物性」～物性科学の既存の枠を打ち破れるか?～

リーダー 勝藤 (早稲田大)

メンバー 賀川 (理研)、腰原 (東工大)、瀧川 (東大)、永長 (理研)、
野原 (岡山大)、藤森 (東大)、松田 (京大)、求 (東大)、浅野 (JST)、
黒田 (産総研)、曾根 (JST)、田中 (一) (JST、産総研)、馬場 (JST)

分科会3では、「磁性・超伝導・強相関・光物性」～物性科学の既存の枠を打ち破れるか?～というテーマの下、以下の4つの研究開発課題を抽出した。

1. 物質内の動的多体電子の創成と応用【上位概念：タフ量子機能・量子物質】

これまでの「ほぼ平衡状態」を扱っていた固体物理から脱却して、超短パルスレーザー、テラヘルツ超巨大電場、ナノ構造下での大電流密度等のもとでの多体電子の量的かつ動的な振舞を、実験と理論の両面から解明する。舞台となる物質開発から始まり、「超強外場」の印加手法と、それに伴う動的な振舞いの検出手法の開発、大規模計算等による理論的な解明、さらにそのような動的な振舞のデバイス応用までを、シームレスに行える研究体制を確立する。

2. 強相関電子系における安定量子状態と多次元制御【上位概念：タフ量子機能・量子物質】

電子の集団が相互作用しつつ集団的な運動を行ったりテクスチャを持つなどした系の物質開発と、その運動(流れ)制御、機能の探索を行う。具体的には、スキルミオン、各種秩序のドメイン壁、超伝導ボルテックスなどの定常状態として存在するものだけでなく、フォノンやマグノンなどの励起状態、光などの外場によって誘起された動的な構造も含まれる。こうした強相関電子特有の振舞を示す物質の開発、外場による多元方向(多次元)の制御、それを用いた具体的な素子の提案までを行う。

3. 超室温量子物質【上位概念：タフ量子機能・量子物質】

物質の電子状態の第一原理計算に基づく物質設計に加えて、イオン伝導(イオントロンクス)、超高压合成や超高压相、単層化、界面や光誘起の活用など、これまで物性物理研究であまり用いられていなかった手法を積極的に用いることにより、室温より低温でしか発現しなかった超伝導、異常量子ホール効果など、電子の位相のコヒーレンスに基づく量子現象を、室温以上で発現させる研究である。

4. 局所的な電荷・スピンの流れの動的な測定【上位概念：計測】

物性物理におけるオペランド計測を実現することを目指す。分光測定と走査型プローブのこの10年の急速な発展を前提に、物性における様々な非平衡な状態、特にデバイス中の局所的な電荷・スピンの流れを動的に測定するための装置、測定する物質、その間のインターフェイスの開発を行う。

8. 総合討論

コーディネーター： 十倉 好紀 (理化学研究所)

これまでの各プレゼンテーション・質疑応答、および分科会での検討結果を踏まえて、物性物理の観点から物質科学分野における将来の研究目標や方向性に関して議論を行った。以下では、その全体像および3つの抽出された研究課題に関する要点を示す。

全体像 (物性物理から見た「材料設計・制御」領域の俯瞰図)



図 8-1

- ・今回のワークショップの全体像 (物性物理から見た「材料設計・制御」領域の俯瞰図) を図 8-1 に示す。
- ・このワークショップ中で「トポロジー」という言葉が何回も出てきたように、この数年、物性物理分野を凌駕するような、あるいは皆がシェアする概念として、大きな流れになっている。実のところ、従来の半導体バンド構造をトポロジーという観点でもう一度見直してみると、非常に面白いことが見つかり、それが将来の非散逸エレクトロニクスにも繋がる可能性が高いという話が多くある。
- ・他には、温度の高いところ (室温) で物質的な量子現象を発現する量子物質・技術を使いましょう、という話や、非平衡物性や磁区の散逸構造をうまく利用するといった話もあった。また、スピンと軌道の2つの自由度を同等に扱う「スピン・オービトロンクス」、スマートナノ物質、エネルギー機能に重点を置いた強相関電子テクスチャ、さらに、物質を設計するのではなく、機能や物性を設計しよう、

- また知識データベースをうまく活用できないか、という話もあった。
- これらの分野を包含する形で、超機能を出すイオントロンクスの話もあった。イオンの変位によって電子状態が変わる、あるいはそのイオンの変位をうまく使って電子と結合させると、従来の電池への応用を超えてエレクトロニクスにも使えるのではないか。
 - 最終的なアウトカムである、エネルギー、環境、安全・安心、健康・福祉などに対して、上述のテーマに共通する概念としては、「超低消費電力機能」「タフ&スマート量子機能」が挙げられる。
 - 各分科会で検討した研究課題やコンセプトに関しては以下の3つに大別できる。

1. 研究課題①「革新的量子技術を可能にするタフ&スマート量子物質」

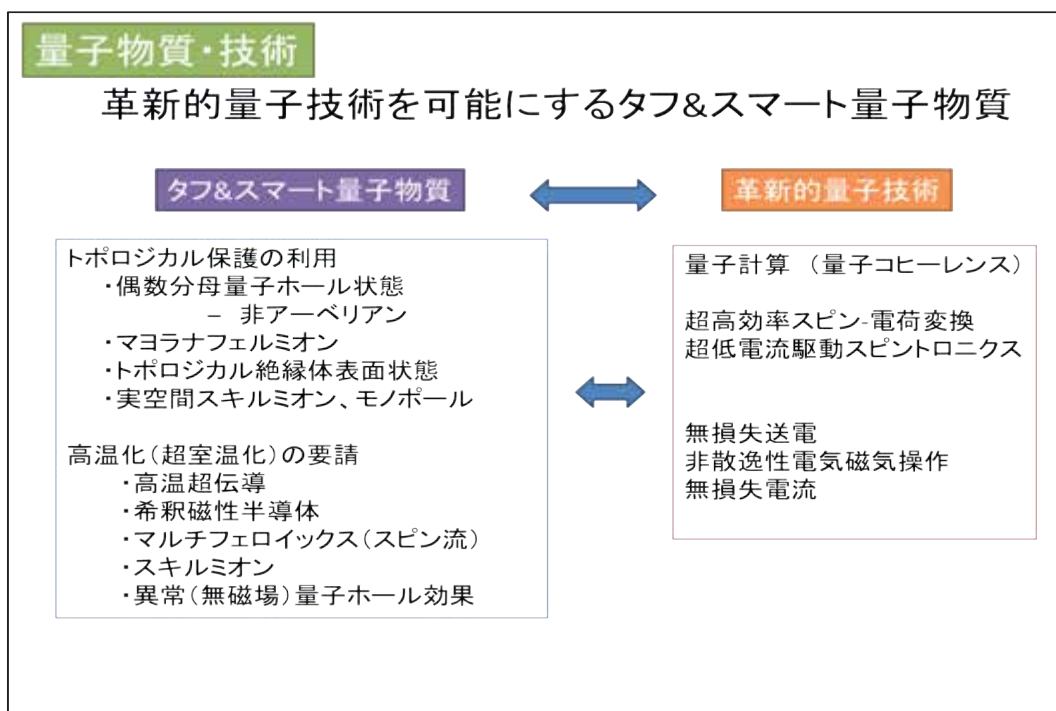


図 8-2

- 1つ目のテーマは最近の学術の潮流を反映した量子物質や量子技術に関するものである(図8-2)。
- 半導体にしろ磁石にしろ、全て量子技術には違いないのだが、21世紀に入り、特に最近になって、量子技術をもう一度見直そうという動きがある。
- このような波は過去にも何回か来ては浮き沈みを繰り返しているが、様々な新物質の発見も相まって、今はまた大きな流れができています。
- タフとスマートという意味は、一つはトポロジーをうまく使おうということである。トポロジーには運動量空間と実空間の両方があり、材料科学や化学の研究者は実空間でのトポロジーの方が考えやすい。ただし、物性科学で主に議論してい

るのは運動量空間の中の話であり、バンド構造におけるトポロジーを意味している。そのようなトポロジーで保護された状態、すなわちトポロジカル保護を使いこなすことが、いよいよ現実的になってきている。

- トポロジカル保護の利用としては、偶数分母量子ホール状態があり、量子コヒーレンスを使うことで非常にタフな状態を作ることができるかとされている。また、超伝導を組み合わせることでマヨラナフェルミオンという、粒子と反粒子が同じ性質を持つ状態をつくったり、トポロジカル絶縁体の表面状態をうまく使うことで、革新的な量子技術が実現され、アウトカムとしては将来の量子計算に資するということである。
- 実空間スキルミオンに対しては、非常に高効率なスピンと電荷の変換が可能になり、従来よりも数桁低い電流で駆動できるので、超鄭電流駆動スピントロニクスに繋がる可能性がある。
- 高温化に関しては、例えば高温超伝導においては、高圧下ではあるが硫化水素で 200K を超える超伝導が最近発見された。これは、極端条件で物質が準安定でも創ることができれば 200K を超えることが可能だということを示したものである。マルチフェロイクスという、例えば磁化と分極を相互に制御するものであるが、室温でこの状態が可能になれば電氣的な刺激で磁化をコントロールでき、しかも磁化反転は分極流しか使わないためほとんどエネルギーを使わない。これができるスピントロニクスに革新をもたらす。もちろん室温超伝導ができると無損失送電に革命が起こる。
- トポロジカル流を室温でも使えるようになれば無損失電流や非散逸電気磁気操作が実現可能になる。
- こういうことが現実的な視野に入ってきているため、トポロジーをうまく取り込んだ課題設定がますます大きな話題の一つになっている。

2. 研究課題②「動的相転移・散逸構造に基づくスマートエネルギー機能」

- 2つ目のテーマは、「スマートなナノ物質」に関するものである。ここでいうスマートとは、エネルギー的にスマートである、という意味であり、物質の観点から、新しい時間軸、ナノの空間軸の両方から新しい考え方を取り入れて、巨大でスマートなエネルギー機能を出していこう、ということである(図 8-3)。
- 動的相転移や自己組織化といった言葉はナノテクの中でさんざん使い古された言葉ではあるが、ここでは電子の自己組織化に基づいてスマートエネルギー機能を持つものを創れないか、ということで、「動的相転移・散逸構造に基づくスマートエネルギー機能」というタイトルにした。

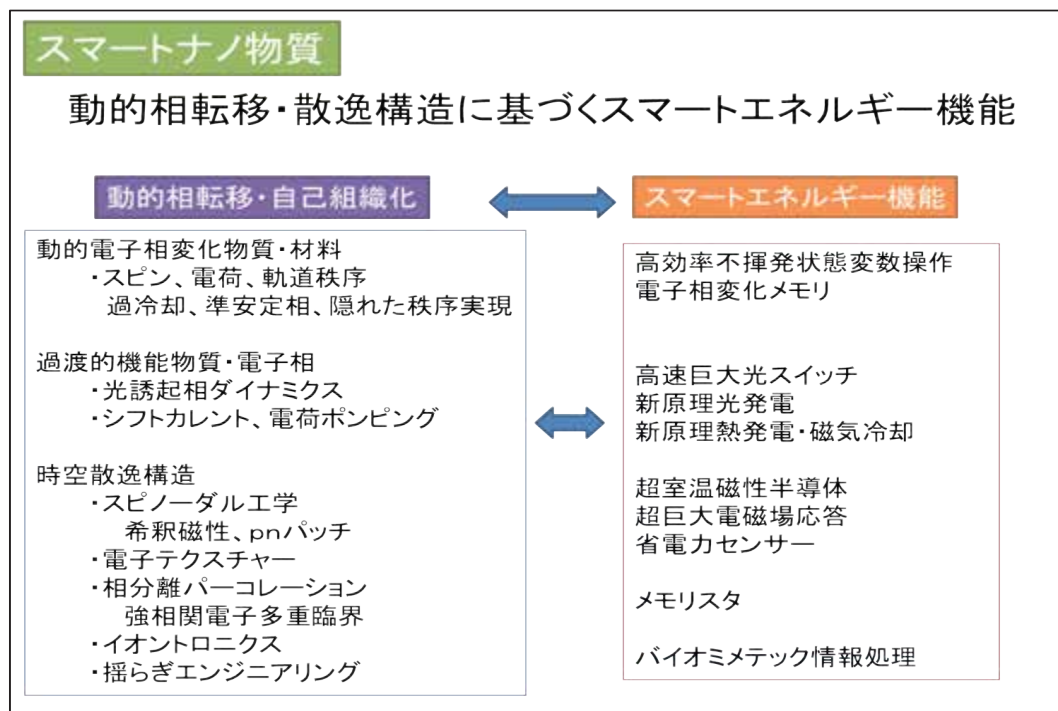


図 8-3

- ・動的相転移や自己組織化に関しては、例えばアモルファス状態を急速冷却すると結晶状態への相転移が起こり、光学的な屈折率の変化や電気伝導率の変化が起こる。これを利用したものが相変化メモリ（PRAM）である。
- ・また、電子場に利用すると、動的な電子相変化を用いたメモリや機能材料ができる可能性がある。そのときのパラメータとしてはスピン、電荷、軌道自由度がある。
- ・過冷却と準安定を用いて、隠れた秩序（Hidden Order）を実現することができれば、従来の PRAM の性能を超えて、高効率かつ揮発性の状態を変数操作できる。これを電子相変化メモリと呼ぶ。
- ・過渡的な機能物質や電子相が作れないかという提案もあった。今、計測技術がかなり進化してきており、光誘起相転移のダイナミクスやそこに現れる Hidden Order、物性を見ることが可能になってきている。シフトカレント、電荷ポンピングについては、トポロジーの概念に分類した方がいいかもしれないが、一種の非線形光学過程であり、新原理光発電や新原理熱発電などに使える可能性がある。
- ・時空間散逸構造に関しては、スピノーダル工学が実際に使えるようになってきている。つまり、アニール処理などによって、一方の相の濃度を高くしたり、別の相をナノスケールでうまく取り込むことで、例えば希釈磁性半導体でも非常に高い温度でも機能する。
- ・また、電子テクスチャーを散逸構造の一種としてつくったり、相分離している状態をパーコレーティブに繋いだり切ったりすることで巨大応答が得られるため、それをより広範な電子機能に拡張できる可能性もある。
- ・イオントロニクスは一種の散逸構造の利用と考えられる。固体の中のイオンの位

置を変化させることによって電子状態(強誘電状態、絶縁状態、金属状態、超伝導状態など)を制御しようというアイデアであり、メモリスタ(電荷量に応じて抵抗値や電圧が変わるメモリ)に利用できる可能性がある。メモリスタは実現すればシナプスの発火現象をトレースできるようになる可能性がある。

- ・揺らぎエンジニアリングについては、外部の電磁場の応答を巨大化できることから、エネルギーをほとんど使わない省電力センサや、バイオミメティックな意味での省エネ情報処理に利用できる。
- ・物質の観点から、新しい時間軸、ナノの空間軸の両方から新しい考え方を取り入れて、巨大でスマートなエネルギー機能を出していく、ということが大きなトピックスだろうと感じる。

3. 研究課題③「電子の動きを見る時空間分解スペクトロスコープ」

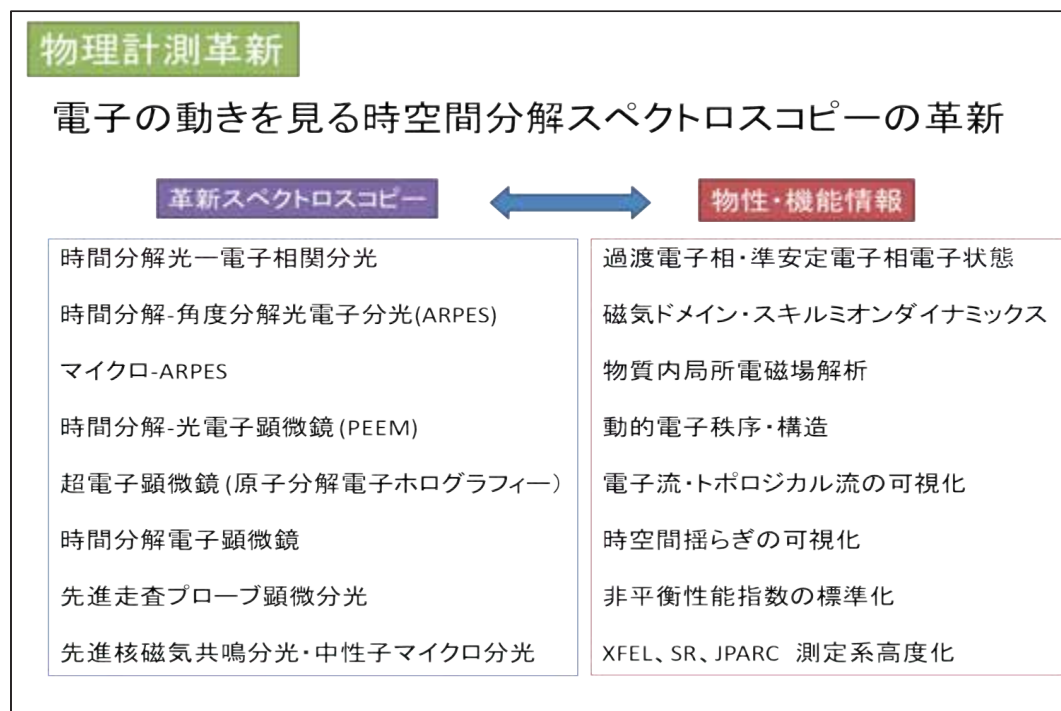


図 8-4

- ・3つ目として「物理計測革新」に関するもので、ここ10年で計測手法、主にスペクトロスコープが進化し、それを一層加速させようというものである(図8.4)。
- ・計測技術は物質科学、物性科学だけではなく、バイオ、ライフサイエンス、メディカルサイエンスなど広い分野に大きな発展をもたらすものであるが、まずは物性科学分野から出発して発展的な計測手法を開発すればいいのではないかと考えている。
- ・計測手法の革新に関しては、電子の振幅や濃度を見ることはかなり進展したが、これからはカレントを見るが必要になるのではないかと考えている。

数の意味では位相情報も含んでいるため、電子の動きを見るような時間と空間の分解スペクトルスコーピーを革新する必要がある、物性科学から発信できる技術の一つである。

- 具体的な例としては、時間分解に関しては角度分解光電子分光 (ARPES) がある。フェムト秒単位の短い時間に光や電子線などの外部刺激を与えて、電子構造がどう発展するかを運動量空間で分解するものである。基本的には1電子のスペクトルを見ているため、2電子相関が関係するカレントを観測することは容易ではなく、何かしらの工夫を要する。
- もう一つは、マイクロ ARPES で、スピノーダル分解した小さな空間の中で電子構造がどうなっているかを解析でき、今とても盛んな領域である。
- 放射光施設を使わないといけないが、時間分解の光電子顕微鏡もホットな領域である。光電子顕微鏡でスピンなどを見ようとすると軟 X 線が必要になるが、軟 X 線分光に関して日本は世界の先端から大変立ち遅れている印象がある。
- スカルミオンなどの小さなスピンのテクスチャの時間変化を解析するなどの研究が現在世界的には盛んになされているが、日本ではそのような研究はほとんどなされていないのではないかと。
- 超電子顕微鏡においては、既に原子分解能が達成されているので、近い将来、反強磁性が電子顕微鏡で見られるようになると考えられるが、更に高機能化することで観測できる対象が増えるのではないかと。
- 時間分解電子顕微鏡については、日本もトップを走っているものの、非常に競争が激しい分野である。
- STM などの走査プローブ顕微鏡や核磁気共鳴、中性子マイクロ分光なども近年急速に発展してきている。
- もちろん、これらだけではなく、SACLA、PF、SPring-8、J-PARCなどを高度化することも大事である。
- スペクトロスコーピー、マイクロスコーピーが発展することで物性機能情報が得られ、様々な機能創成に繋がっていくことは自明である。

9. 閉会挨拶

曾根 純一 (JST-CRDS)

3つの分科会では、夜遅くまで議論いただき感謝する。各々の分科会からいくつかのテーマを抽出していただいたが、結果的には、「タフ&スマート量子物質」「スマートエネルギー」「計測」という3つのテーマに収束したのではないかと理解している。

この2日間の議論に参加して、最近、Industrie4.0といった言葉をよく耳にするが、量子力学もステージが変わりつつある印象を受けた。もともと1930年頃にハイゼンベルクとシュレディンガーによって量子力学が確立し、その恩恵を受けて半導体エレクトロニクスが発展し我々の生活を支えているが、その量子力学が量子力学2.0とも呼ぶべき新しいステージに入ったのではないか。それをどういう風に表現すべきかはわからないが、物性科学にトポロジーという概念が入ってきたことで、今までのバンドエンジニアリングではなく、波動関数の位相も含めたエンジニアリングが可能になりつつあるということだと理解した。

今の半導体で困っていることは、どんどん微細化が進むのはいいが、半導体であるがゆえに電子数や不純物数などが揺らいでしまっていてエレクトロニクスとして成り立ちにくくなっている。トポロジーという概念によって、そういう微細なところでも非常に安定な量子力学的な相、つまり、微細化に対してロバストな状態を提示してくれるという意味は大きく、またそこを流れる電流の散逸がほとんどない、もしくは無散逸である点も大きい。今のエレクトロニクスはまさにエネルギーをどう下げるか、要するに消費電力をどう削減するかということが問題になっている中で、エネルギーロスのない量子力学的な状態の変位を活用できることのインパクトは大きい。

量子コンピュータの世界でも、量子コヒーレンスをいかに長く保持するかということが問題になっているが、昔はナノ秒くらいだったものが、マイクロ秒、ミリ秒と、どんどん長くなってきて、量子コヒーレンス時間を制御できるようになってきている。そういう意味でも、量子力学の世界が新しいステージに立っていると言え、今後は何ができるかということを示していくことが必要になるだろう。

スマートエネルギーに関しては、電気エネルギーを量子力学的な枠組みの中で、スピン、電荷、熱、磁気などから変換していくことが重要ではないか。固体照明というものがあるが、例えば、固体冷却はできないか。今、温暖化の影響もあり、冷却ということが重要になってきているが、ロバストな量子効果を用いて、ノイズレスで無振動で簡単に温度を下げることを示していただければ社会的インパクトは非常に大きいだろう。

あと、物理の強さはやはり計測にあるのではないかと感じた。単に計測の技術や装置を作るだけでなく、使い方までを含めて様々な可能性を示すことが重要であろう。スピン流やエッジ流などの量子スケールのカレントも含め、電子やスピンの動きを動的にも空間的にもいろいろと観測できるようにすることで、ライフの世界や化学などのいろいろな世界へ展開していくのではないか。

今回のワークショップでは量子力学が誕生して80年が経過し、新しいステージに入ったということを非常に感じた。ここで議論いただいた内容をベースに今後新しい施策に繋がるプロポーザルを作成できるよう取り組んでいきたい。

付録

付録1：開催趣旨・プログラム

開催趣旨

ナノテクノロジー・材料分野は物理学、化学、生物学を横断し、原子分子レベルでの観測や構造形成・機能発現などを通して、物質科学や材料技術、デバイス技術などを進展させ、さらには異分野の融合を促進しつつ進化する技術分野です。このため、新しい科学技術や新たな産業の創出ばかりでなく、グローバル課題の解決あるいは「社会的期待」に迅速に応える「課題解決型」を支える科学技術基盤の一つとして位置づけられます。CRDSでは今春、ナノテクノロジー・材料分野における世界各国の国家計画、投資戦略、研究ポテンシャル、技術進化そして企業化動向、重要な研究開発領域を含むナノテクノロジー分野全体の俯瞰の結果を記載した俯瞰報告書 2015年版を発行しました。

俯瞰報告書 2015では、CRDSが抽出した41の重要領域について研究開発状況や国際比較を取り纏めています。さらなる調査・検討が必要な領域や、基盤的な技術のために複数の領域に分かれた記述となり、その領域全体について今後国としてどうすべきか、まだ十分に把握・検討できていないものもあります。このため、今年度はさらに検討が必要ないくつかの領域に注目し、ナノテクノロジー・材料分野の俯瞰をさらに充実させます。以上の経緯から、CRDSでは今年度と来年度にかけて、「材料設計・制御」領域に関する物理分野および化学分野それぞれのワークショップを開催することを計画いたしました。本領域は、ナノテクノロジー・材料分野全体に関与するものであり、所望の機能を実現させるための構造の設計・制御手法としてサイエンスの新局面を拓き、日本の将来社会を支え、産業に貢献しうる領域です。今回、国内外の状況・動向把握とともに、物性物理の観点から物質科学分野における将来の研究目標や明確な方向性を設定するための戦略を立案することを試みます。短期的には文部科学省の戦略目標や種々の競争的資金制度への反映を目的とし、学問的には基礎的でありながら、将来的には新しい産業を興すようなインパクトのある研究コンセプトの発掘を目指します。中長期的には各省庁の科学技術政策への反映を目指し、第5期科学技術基本計画策定後のむこう10年を見据えた課題の抽出や合意形成に資することを目的とします。ここで得られた結果については、俯瞰報告書 2017年版に反映する予定であり、CRDSにおける戦略立案および各界における施策立案等に活用していただくことを念頭に置いています。

プログラム (敬称略)

開催日時：2015年12月25日(金) 13:00～26日(土) 15:45

開催会場：りんどう湖ロイヤルホテル ロイヤルホール

オーガナイザー	曾根 純一 (JST-CRDS)
コーディネーター	十倉 好紀 (理研)
分科会リーダー	勝藤 拓郎 (早稲田大)
	塚崎 敦 (東北大)
	村上 修一 (東工大)
司会	宮下 哲 (JST-CRDS)

12月25日(金)

13:30～13:40	開会挨拶、事務連絡	曾根 純一、宮下 哲 (JST-CRDS)
13:40～13:50	趣旨説明	十倉 好紀 (理研)
13:50～14:25	話題提供①(分科会リーダー：発表15分、その他：各発表10分)	
13:50～14:05		勝藤 拓郎 (早稲田大)
14:05～14:15		野原 実 (岡山大)
14:15～14:25		求 幸年 (東大)
14:15～14:25	質疑応答	
14:25～15:15	話題提供②(分科会リーダー：発表15分、その他：各発表10分)	
14:25～14:40		塚崎 敦 (東北大)
14:45～14:55		齊藤 英治 (東北大)
14:55～15:05		山本 貴博 (東理大)
15:05～15:15	質疑応答	
15:40～16:25	話題提供③(分科会リーダー：発表15分、その他：各発表10分)	
15:40～15:55		村上 修一 (東工大)
15:55～16:05		有田 亮太郎 (理研)
16:05～16:15		吉田 博 (大阪大)
16:15～16:25	質疑応答	
16:25～17:35	話題提供④(各発表15分)	
16:25～16:40		岩佐 義宏 (東大)
16:40～16:55		樽茶 清悟 (東大)
16:55～17:05		永長 直人 (理研)
17:05～17:20		松田 祐司 (京都大)
17:20～17:35	質疑応答	

19:30～21:30 分科会①(分科会リーダー:勝藤拓郎、塚崎敦、村上修一)

- ・話題提供①～④で発表していない方のショートプレゼン(5分/人)
- ・物性物理の観点からの物質科学における将来の研究目標や方向性について議論

12月26日(土)

09:00～11:00 分科会②(分科会リーダー:勝藤拓郎、塚崎敦、村上修一)

- ・前日の議論を踏まえて、社会ニーズと結びつく(結びつきそうな)研究コンセプトもしくはCREST級研究領域の提案(各分科会で2件以上)
- ・優先順位付け、発表資料作成

11:00～12:00 分科会検討結果報告(各発表15分)

11:00～11:15 「物質設計・計算機シミュレーション・情報物理」

村上 修一(東工大)

11:15～11:30 「低次元・トポロジカル物質・デバイス物理」

塚崎 敦(東北大)

11:30～11:45 「磁性・超伝導・強相関・光物性」

勝藤 拓郎(早稲田大)

11:45～12:00 質疑応答

13:00～14:00 総合討論①(コーディネーター 十倉 好紀)

- ・研究コンセプトの抽出(各分科会から得られた結果を統合もしくはブラッシュアップ)

14:10～15:40 総合討論②、まとめ(コーディネーター 十倉 好紀)

- ・総合討論①で抽出した研究コンセプトの具体的研究課題の検討
- ・WSまとめ

15:40～15:45 閉会挨拶

曾根 純一(JST-CRDS)

付録 2：参加者一覧

招聘識者

- ・有田 亮太郎 国立研究開発法人理化学研究所 創発物性科学研究センター
チームリーダー
- ・石坂 香子 東京大学 大学院工学系研究科 准教授
- ・伊藤 公平 慶応義塾大学 理工学部 教授
- ・岩佐 義宏 東京大学 大学院工学系研究科 教授
- ・小野 輝男 京都大学 化学研究所 教授
- ・賀川 史敬 国立研究開発法人理化学研究所 創発物性科学研究センター
ユニットリーダー
- ・勝藤 拓郎 早稲田大学 理工学部 教授
- ・川崎 雅司 東京大学 大学院工学系研究科 教授
- ・腰原 伸也 東京工業大学 大学院理工学研究科 教授
- ・齊藤 英治 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授
- ・沙川 貴大 東京大学 大学院工学系研究科 准教授
- ・瀧川 仁 東京大学 物性研究所 教授
- ・谷垣 勝己 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授
- ・塚崎 敦 東北大学 金属材料研究所 教授
- ・十倉 好紀 国立研究開発法人理化学研究所 創発物性科学研究センター
センター長
- ・樽茶 清悟 東京大学 大学院工学系研究科 教授
- ・永長 直人 国立研究開発法人理化学研究所 創発物性科学研究センター
副センター長
- ・長汐 晃輔 東京大学 大学院工学系研究科 准教授
- ・野原 実 岡山大学 大学院自然科学研究科 教授
- ・藤森 淳 東京大学 大学院理学系研究科 教授
- ・松田 祐司 京都大学 大学院理学研究科 教授
- ・村上 修一 東京工業大学 大学院理工学研究科 教授
- ・求 幸年 東京大学 大学院工学系研究科 教授
- ・山本 貴博 東京理科大学 大学院工学研究科 准教授
- ・吉田 博 大阪大学 大学院基礎工学研究科 教授
- ・若林 克法 関西学院大学 理工学部 教授

JST-CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット

- ・曾根 純一 上席フェロー
- ・永野 智己 フェロー・ユニットリーダー
- ・伊藤 聡 特任フェロー、国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究機構
コーディネーター
- ・田中 一宣 特任フェロー、国立研究開発法人産業技術総合研究所

- 名誉リサーチャー
- ・田中 秀治 特任フェロー、東北大学大学院工学研究科 教授
 - ・佐藤 勝昭 フェロー
 - ・中山 智弘 フェロー・エキスパート
 - ・馬場 寿夫 フェロー・チームリーダー (ナノテクノロジー・材料ユニット)
 - ・宮下 哲 フェロー

関係府省・機関

- ・小川 博嗣 経済産業省 産業技術環境局 研究開発課 研究開発専門職
- ・川喜多 磨美子 国立研究開発法人物質・材料研究機構 調査分析室 主任エンジニア
- ・黒田 隆之助 国立研究開発法人産業技術総合研究所 分析計測標準研究部門 主任研究員
- ・井関 隆之 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター 研究員

JST

- ・浅野 佳那 経営企画部 イノベーション企画推進室 主査
- ・五明 明子 研究プロジェクト推進部 主任調査員
- ・島津 博基 CRDS 環境・エネルギーユニット フェロー・ユニットリーダー
- ・的場 正憲 CRDS システム・情報科学技術ユニット フェロー

付録3：分科会メンバー表

分科会1：「物質設計・計算機シミュレーション・情報物理」～物質と情報の新しい世界を築けるか？～

- ・リーダー 村上 修一 (東京工業大学)
- ・メンバー 有田 亮太郎 (理化学研究所)
- 伊藤 公平 (慶応義塾大学)
- 川崎 雅司 (東京大学)
- 沙川 貴大 (東京大学)
- 十倉 好紀 (理化学研究所)
- 樽茶 清悟 (東京大学)
- 吉田 博 (大阪大学)
- 伊藤 聡 (JST、理化学研究所)
- 小川 博嗣 (経済産業省)
- 川喜多磨美子 (物質・材料研究機構)
- 五明 明子 (JST)
- 島津 博基 (JST)
- 永野 智己 (JST)
- 的場 正憲 (JST)

分科会2：「低次元・トポロジカル物質・デバイス物理」～新現象をデバイス革新につなげられるか？～

- ・リーダー 塚崎 敦 (東北大学)
- ・メンバー 石坂 香子 (東京大学)
- 岩佐 義宏 (東京大学)
- 小野 輝男 (京都大学)
- 齊藤 英治 (東北大学)
- 谷垣 勝己 (東北大学)
- 長汐 晃輔 (東京大学)
- 山本 貴博 (東京理科大学)
- 若林 克法 (関西学院大学)
- 井関 隆之 (NEDO)
- 佐藤 勝昭 (JST)
- 田中 秀治 (JST、東北大学)
- 中山 智弘 (JST)
- 宮下 哲 (JST)

分科会3：「磁性・超伝導・強相関・光物性」～物性科学の既存の枠を打ち破れるか？～

- ・リーダー 勝藤 拓郎 (早稲田大学)
- ・メンバー 賀川 史敬 (理化学研究所)
- 腰原 伸也 (東京工業大学)
- 瀧川 仁 (東京大学)
- 永長 直人 (理化学研究所)
- 野原 実 (岡山大学)
- 藤森 淳 (東京大学)
- 松田 祐司 (京都大学)
- 求 幸年 (東京大学)
- 浅野 佳那 (JST)
- 黒田 隆之助 (産業技術総合研究所)
- 曾根 純一 (JST)
- 田中 一宜 (JST、産業技術総合研究所)
- 馬場 寿夫 (JST)

6

話題提供④

7

分科会検討結果報告

8

総合討論

9

閉会挨拶

付録

■ワークショップ企画・報告書編纂メンバー■

曾根 純一	上席フェロー
荒岡 礼	フェロー
河村 誠一郎	フェロー／エキスパート
佐藤 勝昭	フェロー
末村 耕二	フェロー
永野 智己	フェロー
中山 智弘	フェロー／エキスパート
馬場 寿夫	フェロー
宮下 哲	フェロー
伊藤 聡	特任フェロー
魚崎 浩平	特任フェロー
河田 聡	特任フェロー
清水 敏美	特任フェロー
竹村 誠洋	特任フェロー
田中 一宜	特任フェロー
田中 秀治	特任フェロー
馬場 嘉信	特任フェロー
村井 眞二	特任フェロー

※お問い合わせ等は下記ユニットまでお願い致します。

CRDS-FY2015-WR-11

俯瞰ワークショップ報告書

ナノテクノロジー・材料分野 領域別分科会 「材料設計・制御～物質科学の未来戦略(物性物理の観点から)～」

2015年12月25日(金)、26日(土) 開催

平成 28 年 3 月

ISBN 978-4-88890-493-3

国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター
ナノテクノロジー・材料ユニット
Nanotechnology/Materials Unit, Center for Research and
Development Strategy,
Japan Science and Technology Agency

〒 102-0076 東京都千代田区五番町 7 番地

電 話 03-5214-7481

<http://crds.jst.go.jp/>

© 2016 JST/CRDS

許可無く複写／複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission.

Application should be sent to crds@jst.go.jp. Any quotations must be appropriately acknowledged.

ISBN 978-4-88890-493-3

