

講演者：木村薫（東京大学 元教授、物質・材料研究機構 NIMS 特別研究員）

講演題目：半導体ハイパーマテリアルへの道ー4つの感動と7つの学融合ー

講演概要：

私が東京大学に入学してから47年間の間に経験した4つの感動と7つの学融合が、本新学術領域「ハイパーマテリアル」の大きな目標の一つである半導体準結晶の探索にどのように繋がったか、そして半導体近似結晶の創製に成功し、半導体準結晶の実現に近づいている現状を紹介します。

私が立ち上げに関わった東京大学 大学院新領域創成科学研究科の理念は「学融合」です。私が所属した物質系専攻は、物理学、化学、材料学を融合した新しい学問の創成を目指しています。私の研究室は、この3分野出身の者が集まった研究室内学融合が実施できる体制となりました。そして、新領域研究科の発足から23年間に学融合について考える中で、私が経験してきたことに、様々な学融合があると気が付きました。最も大きな影響を受けたのは、準結晶の発見です。それ以前は、固体の構造は、結晶かアモルファスのどちらかで、それ以外の構造があり得ると考える研究者は、物理学や化学の分野には、ほとんどいませんでした。ところが、数学の分野では、結晶に相当する周期配列とアモルファスに相当するランダム配列の他に、非周期規則配列であるペンローズ・タイルが考えられていました。そのお陰で、物理学、化学と数学の学融合によって「準結晶」という概念が生まれました。典型的な学融合の例で、異分野視点学融合と名付けました。準結晶の発見は、私が物性研の助手に着任した直後で、準結晶の概念を作った論文を感動しながら読んだことが、その後38年間、準結晶を研究し続ける原動力となりました。

さらに遡った理科I類の学部学生時代、剣道とフェンシングの比較研究中に、人類生物学の講義で学んだ人と獣の体の違いによって、剣道とフェンシングにおける体の使い方の違いを理解できることを発見しました。これも異分野視点学融合です。理学系研究科の物理学専攻の大学院生時代には、修士課程入学直後に聞いた日本物理学会のシンポジウム講演に感動したことが、アモルファス半導体の光構造変化を博士課程修了までの5年半研究することに繋がりました。光構造変化とガラス転移を比較研究することにより、光誘起ガラス転移の概念が生まれました。これは、比較学融合と名付けました。

半導体準結晶の探索を開始したのは、大学院生時代にアモルファス半導体を研究し、助手時代に金属準結晶を研究したことから、33年前に工学部の金属材料学科の講師に着任した時でした。助手時代にアルミ系正20面体準結晶が異常な高い電気抵抗率を持つことを発見したことからアルミ系準結晶の半導体化と、正20面体クラスターが周期的に配列した結晶構造を持ち半導体であるボロン系結晶の準結晶化という、二つのアプローチで進めて来ました。アルミ系準結晶では、ホール係数の測定から温度と共に増大するキャリア密度や、光伝導という半導体的な物性を見出しました。純ボロンの結晶が近似結晶と考えられること

を見出し、純ボロンの準結晶構造を検討し、ボロンに炭素を数原子%加えた系で、より近似度の高い近似結晶を見つけました。

新領域に移った 23 年前からは、半導体準結晶探索の研究をさらに発展させました。一般に、金属を半導体や絶縁体にするためには、金属結合を共有結合やイオン結合に変えていけば良いので、クラスターの結合の研究を開始しました。原子数が 10 個程度のクラスターはダングリング・ボンドを水素で終端しないと共有結合を持った構造は安定に存在できず金属結合のコンパクトな構造になります。アルミの正 20 面体クラスターも中心に原子がある金属結合クラスターは安定で、中心原子の無い共有結合クラスターは 5 回軸方向に伸びた共有結合の手を水素で終端することにより安定化します。固体中の結合を評価するために、MEM/Rietveld 法で可視化に成功したフラーレン固体中の電子密度分布の結果に感動して、この方法を採用しました。そして、固体中のアルミの正 20 面体クラスターも、中心原子の有無で結合の性質が変化することを明らかにし、金属結合-共有結合転換という概念を提案しました。この結合転換は、ボロン結晶中の空隙サイトへの他元素の侵入でも起こることを明らかにしました。アルミ系準結晶は金属分野で、ボロン系結晶は半導体分野で研究されていたので、両者の比較研究から提案した、金属結合-共有結合転換や、正 20 面体クラスター固体の統一的描像は、比較学融合の成果です。

半導体準結晶の実現は、固体物理学の基本的な問題の解決になりますが、さらに高性能熱電材料や高温超伝導材料の開発に繋がる可能性もあります。正 20 面体対称性は、結晶で最も高い立方晶対称性の 2.5 倍高いです。したがって、半導体準結晶ではキャリアポケットの数が多くなる可能性があり、大きなゼーベック係数と高い電気伝導率を併せ持った高性能熱電材料となります。また、状態密度が高いエネルギー領域が存在し、ここにフェルミ・エネルギーを調整できると、高い転移温度の超伝導が実現します。アルミ系では、バンドエンジニアリングにより、1/0 立方晶の半導体近似結晶の創製に成功しています。さらに、より近似度の高い 2/1 立方晶近似結晶や準結晶において、縮退半導体的な物性も得られており、僅かなキャリア・ドーピングにより半導体を実現するはずですが、ボロン系では、第一原理計算による生成エネルギーの評価から、純ボロンの準結晶が準安定相として存在する可能性が示されており、過冷却液体急冷により、準安定相の未知相が得られています。

また、過去の文献から実験データをデジタルデータとして取り出す Starrydata プロジェクトにより作られた約 2 万個の試料の熱電物性の温度依存性の図に感動して、材料科学とデータ科学の学融合が進みつつあるマテリアルズ・インフォマティクスに強く惹かれました。準結晶・近似結晶の約 150 個の組成と結晶の約 1 万個の組成から予測された Al-遷移金属三元系の相図が実験を再現し、準結晶・近似結晶の形成に関わる 5 つの量を見出し、新しい準結晶の発見にも繋がりました。今後は、電気伝導率の温度依存性も学習して貰い、半導体準結晶の予測がされると期待しています。