

# 研究報告書

-2015年度研究会活動-

第23回 研究報告会

2016年7月13日

**ATI** 公益財団法人新世代研究所  
FOUNDATION ADVANCED TECHNOLOGY INSTITUTE

界面ナノ科学研究会

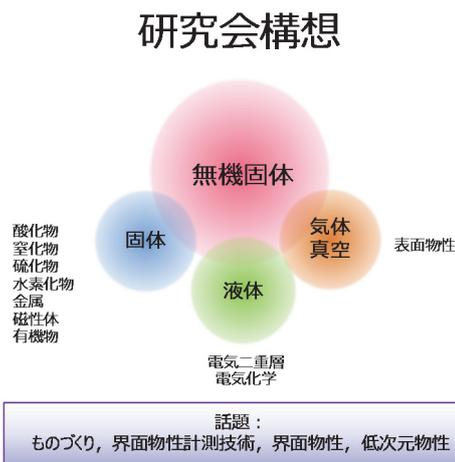
## 界面ナノ科学の進展と取り巻く環境

委員長 一杉 太郎  
東京工業大学 教授

### 1. 研究構想

界面ナノ科学研究会では幅広い分野の研究者を集め、無機固体物質を中心とした界面物性に関する学理の構築に力を注いでいる(図1)。その研究テーマは界面に関わる電気伝導性、磁性、誘電性、化学反応と多岐にわたり、最新の物性制御法、試料作製法、評価法、物性発現の理論までカバーする。

本研究会は2012年度に発足し、2014年度に第一期を完了した。そして、2015年度から第二期に入った。第二期でも、人材交流を重視しつつ、多彩な界面について研究を進める。



(図1)無機固体を軸として、他の物質系と形成する界面機能を研究対象とする

#### 1.1 界面研究の深化

界面に関係する研究は、進展が速い研究領域である。古くはシリコンやGaAs半導体の表面界面の理解がホットトピックであったが、今や、グラフェンやトポロジカル絶縁体、二次元遷移金属ダイカルコゲナイドなど二次元系の研究が最高潮である。さらに最近ではFeSe系の一原子層薄膜が、バルクの超伝導転移温度よりも高い転移温度で超伝導を示すことから、その起源について活発な研究が展開されている。それらに加え、硫化水素の超伝導が注目されている。驚くべきことに超高压下で超伝導転移温度  $T_c = 203$  Kの超伝導が報告され(Droz dov, Nature **525**, 73 (2015))、一気に銅酸化物超伝導体の  $T_c$  (高压下で164 K)を越えた。今こそ界面の出番である。界面を活用して、常圧でいかに超伝導を実現するのかを考える必要がある。界面構造制御、バンドエンジニアリング等、これまで蓄積した様々な技術の総動員が期待される。

また電気化学において、界面制御の重要性が増している。界面で形成される電気二重層や化学反応についての理解は、リチウムイオン電池、燃料電池、キャパシタ、そして人工光合成や触媒材料の開発に直結する。持続可能な社会の実現に向けて、「エネルギー」の重要性がクローズアップされるなか、それを実現するための界面研究をますますスピードアップしなければならない。

以上は学術面、応用研究面での「界面研究の深化」という観点だった。そのような研

究を進める上で、現在、研究自体の進め方について大きな変革が起きつつある。その一つの流れが、マテリアルズインフォマティクスであり、昨今、大きな研究費が投じられて数多くの研究プロジェクトが走っている。

## 1.2 界面研究を取り巻く環境 「実験室の産業革命」に向けて

現在のマテリアルズインフォマティクスは、「多量の計算を効率的に行って物性を予測し、より良い物質を高速に選び出す」ことが骨子である。現状は、理論家が主体となって動いており、実験家には「正確な物性データを提供する」ことが求められている。次のステップとしては、その選び出された物質を「いかに高速に合成するか」という点が、重要になってくる。つまり、理論予測プロセスが高速になったとしても、物質合成プロセスがもたもたしていたら、全体として研究開発スピードは上がらない。したがって、目的とする物質を速やかに合成する技術が極めて重要になる。

そこで、「実験室の産業革命」ともいべきものを起こさねばならない。旧態依然とした実験室から脱却し、新たな高みに立たなければならない。ここで重要になるのが、「超高速ものづくり」「インテリジェントものづくり」、あるいは「自律的ものづくりシステム」といった概念である。最近、人工知能が話題になっているが、「研究室でこそ、人工知能が活きる」と考えている。今や、Pepper が家で動き回り、ルンバが掃除をしてくれるという世の中である。実験室で人工知能を搭載したロボットが実験をしても、何ら不思議ではないし、その方向に我々も積極的に動かねばならない。

このような背景から、今やるべきことが定まってくる。荒唐無稽と思われるかもしれないが、究極の目標は「望みの物性を指定したら、翌朝にその物性を示す物質ができあがっている」というものである。そんなことができるのか？と思われるかもしれないが、筆者の専門分野である酸化物薄膜成長においてどのようにして実現するのか妄想してみた。以下、徒然なるままに筆を進めてみよう。

まず、現在の研究の進め方を概説する。我々は通常、将来構想と各種情報を総合的に考え、合成する物質を決める。そして、その物質の成膜を試みる。その際、成膜条件として、酸素分圧と基板温度を振ることとしてマトリックスを作成し(図2)、そのマトリックス内で最高の結晶性を有する条件を探し出す。順を追って述べると、これまでの経験と勘から、最初の成膜条件を決定し、成膜する。そ

### 従来の実験プロセス: 成膜を例に

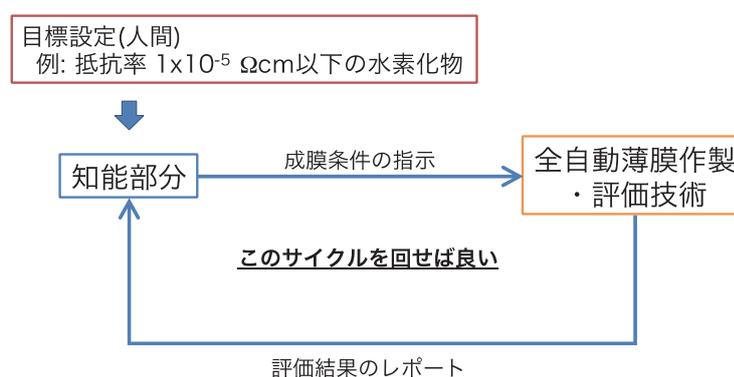


1. ベストな条件をいかに速く見つけ出すか?
  2. マトリックスをいかに速く埋めるのか
- 卒論生の1年間に1ヶ月に短縮

(図2) 実験では、成膜条件を振ったマトリックスを埋めていき最適な成膜条件を見つけて出す。

して、狙った物質ができているのか X 線構造解析により確認し、さらに、結晶の質を評価する。その結果を我々はマトリックスに書き込み、次の成膜条件を決める。これらの手順を目的物質が得られるまで繰り返すか、すべてのマス目を埋めても物質合成ができなかったら、別のパラメータを設定して成膜を行う（あるいは、あきらめる）。卒論生の場合、成膜手順を覚え、一つの物質に集中して成膜に取り組み、かつ、物性評価を行うとちょうど一年が終わって卒論発表となる。そんなペースを何とか高速化し、研究全体をスピードアップさせたい。

実験の高速化を実現するための要素は二つある。「全自動薄膜作製・評価技術（ロボット技術）」と「知能部分（コンピュータソフトウェア:人工知能技術）」である。知能部分は次に設定すべき成膜条件を決め、全自動薄膜作製・評価装置へ成膜と評価を指示する。そして、その結果を知能部分が受け取り、マトリックスの頂点を見つけることを目指して次の成膜条件を決める（図 3）。このサイクルを繰り返せば、狙いの物質が得られるというわけである。



(図 3) 目的の物性が得られるまで繰り返すシステム。

知能部分がなくとも、全自動薄膜作製・評価技術があれば、高速にマトリックスを埋める

全自動薄膜作製・評価技術については、現状の技術を組み合わせることにより、構築可能である。すなわち、成膜後、ロボット技術により評価装置に搬送し、X 線回折を自動的に行い、そのピークをソフトウェアで解析する。半導体デバイス作製技術の進展により、ロボット搬送装置が低価格となり、実験室でも導入可能になっている。では、知能部分についてはどうだろうか。これも現在のソフトウェア技術を使えば、可能である。上記プロセスは、地図上で山の頂点を求めることにほかならない。どのマス目がもっとも標高が高いのかを考え、そこに向かって次の成膜条件を考える。あたえられたマトリックスから次の一手を決定するソフトウェアアルゴリズムはすで存在する。

以上より、図 3 で示したサイクルは現在の技術で実現可能であり、「自動的に求める材料を得る」ことが可能であろう。ただし、研究者が初期条件を決める必要がある。

上記のプロセスでは、研究者が初期成膜条件を決める必要があるが、それを省いて、さらに自律的なシステムにしたい。もう少し考えを深めていこう。頂点に早く到達するには、最初の一手をどこに打つのが決め手となる。つまり、問題は、どの成膜条件か

ら始めるか、という最初の一手である。ここは、本当に人工知能技術が必要かもしれない。コンピュータが膨大な文献（論文）を解釈し、「どの物質の場合、どのような酸素分圧と温度で始めれば良いのか」ということを決める技術が必要である。つまり、我々が、類似物質の成膜条件を探ることや、金属元素の酸化数から成膜条件を決めることをコンピュータに任せるわけである。今や囲碁名人に人工知能が勝てるのであるから、それも可能であろう。それに、データが多いほど人工知能技術は活躍するので、これまで人類が蓄積してきた知見が活きる。そのような意味で、実験家がしっかりとした実験をおこなう、すなわち、再現性が高く、均質なデータを得ることが望まれている。

### 1.3 研究者は何をすべきか？

マテリアルインフォマティクスから興味深い物質が提案され、それが実際に合成される例が増えてきた。次回の界面ナノ科学研究会（2016年7月）では、そのような例を取りあげる予定である。もちろんマテリアルインフォマティクスにも強みと弱みがある。弱みは、「エンジニアリングの要素を取り入れるのが難しい」点である。純粋な単結晶の物性予測はある程度できる。しかし、多結晶体、あるいは異種材料との混合体となると、膨大な「場合」が考えられ、現状のマテリアルインフォマティクスでは全く手に負えなくなる。つまり、現状では試料が均一で単結晶に近い試料を扱う物性物理という観点では、マテリアルインフォマティクスは活用可能であろう。しかし、いったん、粒界などの要素や不均一の導入が鍵を握る物性、すなわち、材料科学の分野に入ってくると、様子は異なる。たとえば、機械的強度や保磁力などは粒界特性に大きく左右される。その界面状態まですべて取り入れて計算するのは当分不可能である。つまり、「界面」が関与すると格段に難しくなるのである。

そのような環境の中、我々は何をすべきか。まず、化学系、材料系の研究者は、予測された物質の合成やその周辺物質の合成、さらには上記の弱みで述べたように、「物質から材料への作り込み」では多数の仕事がある。界面制御もその一例であろう。物性物理学者は、第一原理計算では考慮できていない物理現象の探索が主務となる。

前述のような全自動システムを開発すると、「学生が考えなくなる」という批判がある。しかし、過去を考えると、ごく自然な流れである。ある実験装置が開発されて、その物性測定に時間と労力がとられなくなり、その分、新しい発想で別の実験に取り組むという歴史を繰り返してきた。このシステムもその一つであり、「考えない学生を増やす」装置ではないことを強調したい。

## 2. 2015年度の研究活動の概要

本研究会メンバーには、ものづくり、物性測定、第一原理計算・理論家、など多様な人材がそろっており、メンバーは総勢15名である。メンバー間のフランクな関係を築き上げ、「議論すべきことはきっちり議論する」という姿勢で毎年度、研究会を最低2

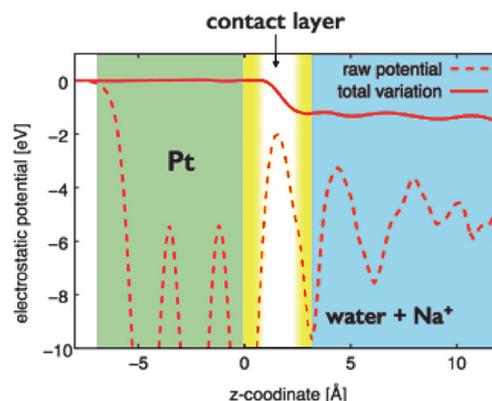
回、開催している。本年度から研究会メンバー内で幹事を決め、研究会を企画することとした。これにより、より広範囲の研究トピックについて議論を進めることができる。

## 2.1 第1回界面ナノ科学研究会（2015年9月24日 ATI 会議室）

**界面物性の電界制御**に着目した研究会を開催し、界面ナノ科学研究会の委員である東京大学の**安藤康伸**先生（現 産総研）と**千葉大地**先生に、詳しく話をうかがい、議論を行った。

まず、安藤先生より、「**電気化学界面のシミュレーション技術と電気二重層の微視的解析**」と題して、電気二重層の最先端の理解について説明していただいた。安藤先生は気鋭の理論家であり、第一原理計算手法の開発と共に、幅広い材料について研究を進めている。さらには、最近では情報科学を材料科学に取り込み、効率的な計算手法の開発も進めている。

どのようなモノでも何かに接触した瞬間に界面において電子の移動が起きる。したがって、電気化学はユビキタスな現象である。固液界面の特徴として、電極表面に「電気二重層」と呼ばれる静電的構造が形成する。電気二重層は電極上の表面電荷と、電解液中のカウンターイオンから成り、Gouy-Chapman-Stern の古典理論モデルにより微視的なキャパシタのようなものとして理解されてきた。しかし、電気二重層の厚みは nm オーダーでありながら、量子力学的な描像は明らかにされていなかった。そこで安藤先生らは第一原理シミュレーションを用いて電気二重層の微視的解析を行った。本講演では、古典モデルでは指摘されていなかった、固液界面に生じる極めて薄い低誘電率領域（コンタクト層）の存在に



(図4) 白金-ナトリウムイオン水溶液界面における界面垂直方向における静電ポテンシャルの面平均分布（赤線）。緑領域：白金、黄色領域：「コンタクト層」、青領域：水溶液 をそれぞれ示す。[Ando *et al.*, Chem. Phys. Lett. (2013)より]

ついて (図4)、また最新の第一原理シミュレーション技術について語っていただいた。

次に、「**電界による金属超薄膜の磁性の制御**」と題して千葉先生より講演をしていただいた。千葉先生は「**スピントロニクスの魔術師**」と言っても良い存在であり、千葉先生の手にかかると、ありとあらゆるものが磁性を帯び、自在に磁性制御できるのではと思わせる。

金属薄膜に電界を加えると、遮蔽効果のために表面一原子層程度の電子濃度が変化する。この変化は、金属が数原子層程度の超薄膜であれば、その物性に变化をもたらす原

因となりうる。それは、3d 遷移金属強磁性体でも例外ではなく、これまで多くの磁気的性質、例えば磁気異方性・キュリー温度・磁気モーメントなどが電界で変化するという結果が得られている。本講演では、Pt/Co 系における磁性の電界効果や、非磁性体を磁石化する試みに向けた実験など、最近の取り組みについても紹介していただいた。

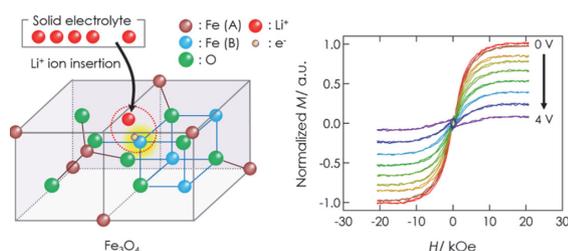
## 2.2 第2回界面ナノ科学研究会（2016年3月15日 ATI会議室）

界面を活用した物性制御について、東工大・谷山智康先生、そして、物材機構・土屋敬志博士を招き、密な議論を行った。

まず、谷山先生より、「**界面マルチフェロイクにおける磁性の電界制御**」と題して講演をしていただいた。現在、磁化スイッチングや、磁壁移動に基づく新規スピントロニクスデバイスが注目を集めている。これらの磁気メモリは spin-transfer torque や spin-orbit torque 等、電流を通電することにより発現する磁化変調機構をその基本原理としているため、ジュール熱に伴うエネルギー損失を伴う。一方、強磁性体と強誘電体とのヘテロ界面において顕在化する界面マルチフェロイク状態では、電気-磁気結合効果により電流を流すことなく電界のみで磁性を制御可能であることから、低消費電力で磁性の変調を可能とする新たな舞台として近年脚光を浴びている。講演では、磁性の電界制御に関する最近の研究の進展について説明があり、その後、界面ひずみ転写による磁壁、磁化配向、磁気秩序、巨大磁気抵抗等の電界制御についての研究成果を紹介していただいた。

土屋博士は、「**固体ナノイオニクスの魔術師**」と呼べるだろう。固体中のイオンを自在に動かして物性制御する研究に強みを持ち、今回、「**ナノイオニクスデバイスによる様々な物性制御の試み**」と題して、講演していただいた。ナノイオニクスデバイスとは、イオン伝導性を有する薄膜や固体/固体電解質界面における局所的なイオン輸送によって、様々な物性を制御する機能性デバイスである。従来、ナノイオニクスデバイスに関する研究はもっぱら ReRAM や原子スイッチ、すなわち酸化還元反応を制御機構とする不揮発性スイッチ素子機能が着目されてきた。しかし、制御機構として電気二重層を利用することや、電気抵抗以外の様々な物性（超伝導、磁気特性、バンドギャップ、蛍光等）をも制御出来ることが最近わかってきており、より広範な応用に向けた新たな局面を迎えつつある。講演では、特に磁気特性制御デバイスを中心に報告していただいた（図5）。

これら講演に先立ち、ちょうど日本を訪問していた Basel 大学の Thilo Glatzel 博士よ



(図5) Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>にLiを脱挿入する固体デバイスを作製した。それにより磁化のスイッチングを行うことができる。[Tsuchiya *et al.*, ACS Nano(2016)より]

り，原子間力顕微鏡を用いた最先端の研究を紹介していただいた。その精緻な研究には驚くばかりであった。

### 3. 研究会開催記録

【第1回】2015年9月24日（木） 於）A T I 会議室

テーマ：「テーマ：界面物性の電界制御」

1. 「電気化学界面のシミュレーション技術と電気二重層の微視的解析」

安藤 康伸（東京大学）

2. 「電界による金属超薄膜の磁性の制御」

千葉 大地（東京大学）

3. 「界面ナノ科学研究会の今後の運営の仕方」

【第2回】2016年3月15日（火） 於）A T I 会議室

テーマ「界面マルチフェロイクス・スピントロニクス」

1. 「Manipulation and Imaging of Single Molecules by Atomic Force Microscopy」

Thilo Glatzel（バーゼル大学）

2. 「界面マルチフェロイクにおける磁性の電界制御」

谷山智康（東京工業大学）

3. 「ナノイオニクスデバイスによる様々な物性制御の試み」

土屋敬志（物質・材料研究機構）

## 界面ナノ科学研究会委員

委員長	一杉 太郎	東京工業大学大学院理工学研究科 教授
委員	山田 啓文	京都大学工学研究科 教授
	梶村 皓二	産業技術総合研究所電子光技術研究部門 研究顧問
	高橋 琢二	東京大学生産技術研究所 准教授
	森田 清三	大阪大学 名誉教授
	大友 明	東京工業大学大学院理工学研究科 教授
	柴田 直哉	東京大学大学院工学系研究科・総合研究機構 准教授
	戸川 欣彦	大阪府立大学工学研究科 准教授
	陰山 洋	京都大学大学院工学研究科 教授
	村上 修一	東京工業大学大学院理工学研究科 教授
	合田 義弘	東京工業大学大学院総合理工学研究科 准教授
	安藤 康伸	東京大学大学院工学系研究科 助教
	千葉 大地	東京大学工学系研究科 准教授
	福間 剛士	金沢大学理工研究域電子情報学系 教授
	杉本 宜昭	東京大学大学院新領域創成科学研究科 准教授

(2016年3月現在 所属・役職は当時)

(第10回ATI合同研究会開催報告)

## 『ナノサイエンスの進展』

水和ナノ構造研究会 委員

新村 信雄

新世代研究所の目的のひとつは、異分野の研究やその手法に触れることによって、また異分野間の人材交流を通じて、それぞれの研究を新たな展開につなげることにある。このための合同研究会が第10回目の節目を迎え、2015年11月25日(水)にTKPガーデンシティお茶ノ水で開催された。今年度のテーマは主催者の説明によると、『ナノサイエンスの進展』で、①高い社会性・手法の先端性・高い注目度、②典型的な異分野融合・明快な結論、③高い社会性・期待される実用性をポイントに、講演テーマおよび講演者を選定されたようである。

研究会は恒例の理事長挨拶を兼ねた古典巡礼から始まった。2015年は一般相対論百年記念の年でもある、との前置きで1922年アインシュタインの来日を記念して出版されたアインシュタイン全集を取り上げられた。全4巻からなるもので、第1巻の序が訳者の石原純氏の挨拶になっていて、肝腎のアインシュタインの巻頭言が第2巻の序に収められているのが面白いとの説明があった。第1巻の一番目の論文「運動体の電気力学について」に特殊相対論の本質のすべてが論じられているそうである。ただし、全4巻の中にノーベル賞の受賞理由になっている「光電子効果」の論文は含まれていないそうである。理事長は全4巻をご自宅に所有されているとのことであった。

次は昨年度まで「バイオ単分子研究会」の代表者であった佐々木先生の講演である。高齢化社会で最も危惧される疾病のひとつが「認知症」であり、「アルツハイマー型認



知症」は認知症の中で一番多いとされており、しかもどんどん増加の傾向にあるとされている昨今である。東京大学柏キャンパスの一般公開 2015 で「アルツハイマー」に関する展示を行ったところ、多くの方が関心を持って集まってくれたそうであるが、「どうしたら罹らないで済むか？どうすれば治るか？」等の質問には閉口したそうである。私も出来るならしたい質問である。アルツハイマーは正常な分子が脳内でアミロイドベータという異常な構造に変化することが原因の一つと考えられるようになって来ている。先生等のグループはこれまで開発して来た金コロイド法によるタンパク質 1 分子運動を観測する手法で、アルブミンタンパク質 1 分子がリン酸化というプロセスでアルツハイマーに関係した構造変化する様子を捉えている。アルツハイマーの解明へのひとつのステップへ発展することを期待したい。

休憩後の最初の講演は萩原先生である。ATI 研究会で何度も取り上げられたカーボンナノチューブ (CNT) にスピン量子数 1 の常温で気体の馴染みのある酸素分子を閉じ込めて、一次元反強磁性体として有名なハルデン磁性体を創成する話である。ハルデン磁性体の決定的な証拠は、非磁性の基底状態とそこから有限の大きさのエネルギーギャップを持つ磁性励起状態の存在を証明することである。先生のグループは阪大のパルス強磁場を用い、ハルデンギャップを観測し、酸素分子を CNT に閉じ込めることでハルデン磁性体を創成できたことを証明した。CNT に種々の化合物を閉じ込めて新規材料を創成する試みはいくつか成されているが、ここにまた一つ新規材料が加わったことになる。次はどのような新規材料が CNT から産まれるか興味は尽きない。

最後の講演は白石先生である。ATI 研究会の中でも複数の研究員が著名な受賞の榮譽を受けるなど際立った成果を上げている研究会の一つが「スピントロニクス」であり、本日のテーマは最近先生等のグループで開発された n 型縮退シリコンを用いた室温スピン輸送のお話である。現在の CMOS トランジスタが抱える技術的、物理的限界を超える新機能素子の一つ (スピントランジスタ) として、その実現に大きな期待が集まっている。日本においては「京」という壮大なコンピュータが実現し、この分野の発展に目を見張っていたが、それを更に超えるコンピュータの実現にはスピントランジスタが中心になるのだろうか、と勝手に思いを巡らしている。ゲルマニウムから始まってシリコン、炭素系へと変遷したエレクトロニクス半導体の歴史とは反対に半導体スピントロニクスは炭素系からシリコン、ゲルマニウムへ向かっているとのお話には、今年度の合同研究会のメインテーマである「ナノサイエンスの進展」の面白さを垣間みた感じがした。合同研究会の醍醐味を味わった一日であった。

(第10回合同研究会)

## 『ナノサイエンスの進展』

日時：2015年11月25日(水) 13:30-17:30

場所：TKP ガーデンシティ御茶ノ水 3F

### I. コンセプト

(公財) 新世代研究所はその目的として、科学技術の分野において異なった発想を持つ人材による専門領域を超えた研究の推進及び新世代を担う人材の育成を掲げている。科学の歴史におけるブレイクスルーが異分野間の交流から生まれていることは紛れもない事実であるが、近年、研究分野の細分化に伴って、異分野の研究者との交流や、異分野の研究に触れる機会が少なくなっていることが懸念される。当財団が開催する合同研究会は、異分野の研究やその手法に触れることによって、また異分野間の人材交流を通じて、それぞれの研究が新たな展開につながることを目指している。

今年度は、テーマを「ナノサイエンスの進展」とし、①高い社会性・手法の先端性・高い注目度、②典型的な異分野融合・明快な結論、③高い社会性・期待される実用性をポイントに、講演テーマおよびご講演者を選定させていただいた。

### II. プログラム

座長：大島 泰郎 (ATI 理事)

1. 挨拶講演「古典巡礼 アインシュタイン全集」 伊達 宗行 (ATI 理事長)
2. 研究講演(1)「アルツハイマー – バイオ単分子の目 –」  
佐々木裕次 (東京大学大学院 教授)

— 休 憩 —

座長：新庄 輝也 (ATI 上席副理事長)

3. 研究講演(2)「ナノチューブに酸素 – ハルデンギャップの出現 –」  
萩原政幸 (大阪大学 教授)
4. 研究講演(3)「室温スピントロニクス – ゲルマニウム時代来る? –」  
白石誠司 (京都大学大学院 教授)



発行 : 公益財団法人 新世代研究所  
Foundation Advanced Technology Institute

〒101-0063

東京都千代田区神田淡路町 1-23-5 淡路町龍名館ビル 4 階

電話 : 03-3255-5922 ファックス : 03-3255-5926

ホームページ : <http://www/ati.or.jp>