

特別シンポジウム「応用物理と元素戦略」開催報告

東京工業大学 応用セラミックス研究所 神谷利夫

2012年第59回春季応用物理学関係連合講演会で、特別シンポジウムとして「元素戦略と応用物理」を開催した。21世紀に入り10余年を過ぎ、地球温暖化問題、石油資源のピークアウト論、大人口を抱える新興国群の成長に伴う資源爆食問題など、資源・エネルギー問題が顕在化・深刻化してきた。これに、金融資本主義の必然的帰結とも言えるバブル崩壊と超金融緩和がもたらした投機的資源高騰・急落の繰り返し、地政学的な理由による資源禁輸ショック、2011年3月の東北大震災、福島原発事故とエネルギー供給問題は、資源・エネルギー輸入国としての日本の弱さと、資源・エネルギーを特定の国・地域に大きく依存することの問題を、これでもかといわんばかりに強制的に我々日本人に再認識させることになった。一方で、政治・経済的な視点を離れても、これらの問題に対して科学者が担うべき社会的責任と社会からの要求は大きくなるばかりである。

これに対する材料学者の一つの提案が「元素戦略」である。その究極の目標は、私たちの生活を支える先端機器に使われているあらゆる素材を、希少・毒性元素を使わずに代替することである。そのために、現在は希少・毒性元素を使って実現されている材料の機能を、上記の資源・環境・経済・政治問題に左右されない、ありふれた元素だけで実現する必要がある。

本特別シンポジウムは、応用物理・物理・化学・材料といった関連学会が連携して「元素戦略」を考える契機とすべく企画された学会連携企画である。それぞれの学会が主催するシンポジウムでは、それぞれが得意な分野・視点で、元素戦略に関する背景・課題調査・問題提起・解決策を議論する場として企画した。本シンポジウムでは「応用物理と元素戦略」と銘打ち、応用物理学会がこれまで大きな貢献をしてきた電子材料・デバイスの「脱／省希少・毒性元素」について議論を行った。

一方、従来の材料研究・開発では、合理的なコストとプロセスで必要な機能を実現することが優先され、希少性・毒性といった制約は二の次であった。「元素戦略」ではこの材料研究・開発指針を逆転させることが強制され、限られた元素で、その組み合わせや配位・構造などによって、旧来と同等以上の機能を実現することが要求される。つまり、従来とは大きく異なる材料設計・開発指針、つまりは新しい材料科学を創り上げることが必然となる。そのため、この学会連携シンポジウムのもう一つの特色として、実際に材料を合成する実験的アプローチだけでなく、物性理論・計算による理論的アプローチを強く連携させ、いかにして新しい材料科学・材料設計指針を創り上げ、新材料開発を支援・促進できるかを問うていることが挙げられる。

以上のことを鑑み、本特別シンポジウムでは下記のようなプログラムを構成した。

1. 開催趣旨

東工大 応セラ研 谷利夫

2. 文部科学省における新しい元素戦略の展望

文部科学省 基盤研究課 ナノテクノロジー・材料開発推進室 坂本修一

3. レアアース資源問題

石油天然ガス・金属鉱物資源機構 (JOGMEC) 馬場洋三

4. マテリアルズ・インフォマティクスによる新材料の探索

京大, JFCC 田中 功, 世古敦人, 大場史康, 東後篤史

5. グラフェンエレクトロニクスの可能性

東北大 末光眞希

6. 鉛フリー圧電体の可能性

山梨大 和田智志, 藤井一郎, 三井龍太, 中島光一, 熊田伸弘

7. 第一原理計算

東大 常行真司

8. 酸化亜鉛は砒化ガリウムを超えられるか?

東大, 理研 川崎雅司

9. ありふれた元素を駆使した機能発現戦略

東工大細野秀雄

まず、最初の2件のご講演により、資源・環境問題を多角的な視点から正しく捉え、社会的要請と技術的課題を明確に整理することを狙った。その後の6件のご講演では、科学・技術がどのように元素戦略に貢献していけるかを、個別課題ごとに紹介していただいた。その際、上記の「実験的アプローチと理論的アプローチを強く連携させる」ことを意識し、田中先生、常行先生に「材料開発」の視点から、物性理論および計算科学の現状と課題をご紹介いただいた。

最初に、文部科学省坂本さんより、資源・環境問題に関して日本が置かれている厳しい状況について説明されたのち、文部科学省が企画している「元素戦略プロジェクト」の視点から、材料科学ならびに応用物理に望まれている社会的要請について紹介があった。

JOGMEC 馬場さんは、資源問題、特にレアアース問題は、資源の偏在だけでなく、採掘に適した地理的条件、採掘時の環境破壊、経済時勢、政治情勢、鉱床から同時に産出される他元素の用途開発・マテリアルフローも重要であるとの指摘をされた。

京大田中先生には、膨大な過去のデータベースから必要な情報を引き出すインフォマティクスをどのように材料科学・新材料開発に応用していくかについて、さまざまなアイデアをご紹介いただいた。特に、近年、計算速度・結果の信頼性が飛躍的に向上している第一原理計算が、未知材料系の未知情報を補完するとともに、膨大な実験結果・計算結果の中から必要な情報を取り出す仕組みを作り上げることでマテリアルズ・インフォマティクスが新材料探索に寄与できるとした。

東北大末光先生には、高移動度かつ希少・毒性元素フリーの電子材料として期待されているグラフェンについて、最新の技術動向と課題についてご紹介いただいた。グラフェンの最大の特徴である高移動度を活かしたトランジスタは作製できるものの、バンドギャップが小さいこと、バンドギャップを大きくすると原理的に移動度が低下することが問題であることを指摘し、むしろ、一分子層で高い伝導度を得られることから透明導電体の代替としての期待を述べられた。

山梨大和田先生からは、現在使われている強誘電・圧電体の代表である $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ の特徴とこの系の材料探索指針について説明された後、鉛フリー圧電体の開発の歴史と現状についてご紹介いただいた。

東大常行先生からは、現状の第一原理計算がどのような目的に対してどの程度の精度・信頼性があるか、正負の両面から詳しくご紹介いただいた。多くの物質系においては、結晶構造・物性について高い信頼性の計算結果が得られるものの、注意が必要な材料系・物性があることも述べられた。その例として、密度汎関数法のバンドギャップ問題と強誘電体の構造・物性の汎関数依存性と計算精度について詳細に説明された。

東大川崎先生からは、GaAs 代替としての視点から、ZnO 研究の現状と課題をお話いただいた。冒頭の「透明導電体代替の ZnO 研究などはやるつもりはない」との発言から始まったが、GaAs の高純度化、高性能化と整数・分数量子 Hall 効果の発見の歴史との比較をしながら、ZnO でも(低温では)GaAs に匹敵する移動度とメゾスコピック・量子現象が観測できること、将来は重い電子、励起子に依る新現象・デバイスを期待していることを紹介された。

最後に東工大細野先生からは、最近実用化されたアモルファス酸化物半導体や、元素戦略の見本ともいえる $12\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3$ を例に、新しい視点とアイデアで開拓された材料の持つインパクトについてご講演があった。

以上のように、科学・技術者だけでは抜け落ちていた経済・社会的な視点、実験屋になじみの薄かった物性理論・計算科学の現状と可能性、理論屋の新しい研究テーマの源泉としての「元素戦略」について、本シンポジウム全体を通して有意義な情報交流ができたと感じた。