

CASE 1

「理学で挑む実用材料開発 最高性能の透明電極」

液晶ディスプレイや太陽電池のような光と電気の間が関わるデバイスには透明電極が縁の下で重要な役割を果たす。二酸化スズ (SnO_2) は透明電極として半世紀以上に渡って実用に供されている材料である。その長い歴史にも関わらず、材料本来のポテンシャルを完全に引き出せるかどうかは明らかではなかった。今回われわれは、高品質な試料を系統的に作製し、その性質を調べることから理論上限(すなわち最高性能)の達成が可能なことを実証した。



この文章を PC やスマホで読まれている諸氏も少なくないだろう。その際には電気も必要だが、2019 年には太陽光発電は日本における総発電量の 7.4% に達した。今やわれわれの生活に必要な不可欠な液晶ディスプレイや太陽電池には透明電極(透明導電体を用いた電極)が必要であり、その特性がデバイス自体のコストや性能を左右する。

透明導電体とは、透明なのに電気を流すことが出来る(一見)不思議な材料である。その仕組みは、可視光を透過できる程度のバンドギャップを持つ半導体に透明性が維持できる程度の電子濃度(典型的な金属より 1~2 桁程度少ない量)をドーピングにより付与し、電気伝導性を持たせることにある。

ここで、透明導電体を透明電極として用いる際には、形状に制限があることに注意する必要がある。すなわち、0.1~1 マイクロメートルの厚さの透明導電体の薄膜をガラスなどの基板の上に形

成し、その上に発電層や発光層などを積層した後、微細加工技術を駆使して最終的な製品とする。残念なことに、薄膜においては組成のズレや結晶の不完全性などの理由により材料本来の性能が発揮できない場合が多い。その理由を解明することが高性能な透明電極の実用化に繋がる。

透明電極の性能は移動度(電場によって電子や正孔が固体中を移動するときの移動のしやすさを表す値)で議論することが多い。電気伝導率が移動度とドーピングで決まる電子濃度の積に比例するからである。移動度の理論上限は材料自身の格子振動による散乱と、ドーパントによる散乱で見積もられる。図に太陽電池電極の実用材料である二酸化スズの移動度の理論上限値と文献値を示す。実際の移動度の値は商用薄膜では理論上限の 1/3~1/10 程度、基礎研究の高品質薄膜でも 2/3 程度の値しか報告されていない。

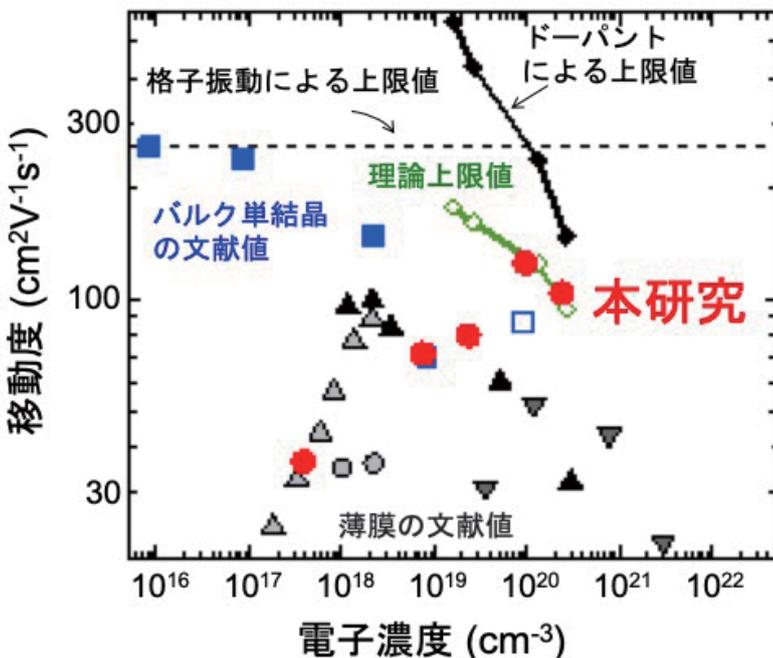
今回われわれは、タンタルのドーピングにより電子濃度の異なる二酸化スズ薄膜を系統的に作製し、その特性を調べた。驚くべきことに、ある条件において非常に高い移動度 $130 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ が得られ、その値は理論上限に一致した(図)。もちろん、二酸化スズ薄膜における過去最高の値である。詳細は割愛するが、面欠陥の生成とそれを抑制する成長方位の選択が鍵であった。

今回の発見は単なる値の向上に留まらない。現在、太陽電池の開発の一つの大きな流れは近赤外光の有効利用である。その際、透明電極にも赤外光に対しても透明性が要求される。赤外透明性は更なる低電子濃度化とそれを補う高移動度化によってのみ実現可能であり、今回の発見が近赤外光を利用する次世代太陽電池の変換効率向上に寄与することを期待している。

本研究成果は M. Fukumoto *et al.*, *Scientific Reports* 10, 6844 (2020) に掲載された。

(2020 年 4 月 22 日プレスリリース)

電子濃度に対する二酸化スズの移動度の比較。本研究で作製した薄膜(赤シンボル)は最高値 $130 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ を示し、移動度の理論上限(緑実線)とよく一致する。



CASE 2

記録された太陽加熱の痕跡に 小惑星リュウグウの表面に

炭素質小惑星は形成直後の地球に水と有機物を運んだ候補天体だと考えられている。そのため、炭素質小惑星が小惑星帯から地球軌道近傍へどのように供給されるのか？その過程で起こる炭素質物質のさまざまな変成過程は何か？を理解することは重要な問題である。小惑星探査機「はやぶさ2」は炭素質小惑星リュウグウからの試料を採取するために2度の着陸を行った。われわれはその際に得られた高解像度画像を用いたリュウグウ表面の地形と色の分布の解析から、小惑星リュウグウの軌道と表面地質の歴史に関する新たなシナリオを提示した。

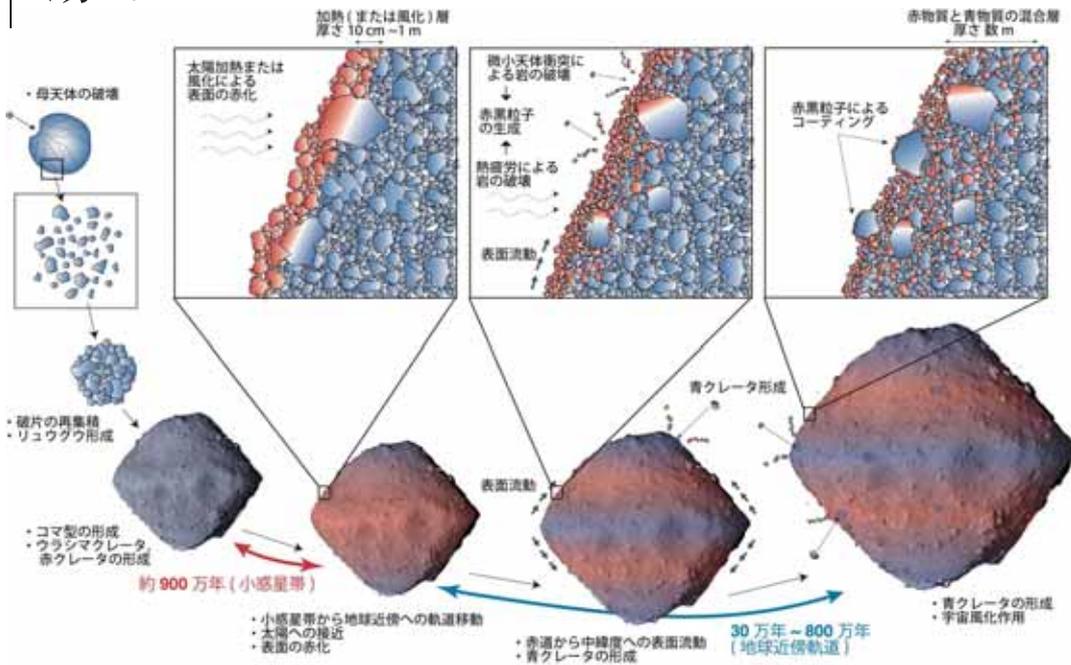


「はやぶさ2」はリュウグウの試料を採取するために、2019年2月22日に第一回目の着陸を行った。着陸の際に得られた高解像度画像から、試料採取のための弾丸発射と探査機上昇のためのガス噴射によって、リュウグウ表面から多くの岩石とともに大量の赤黒い微粒子が舞い上がったことが分かった。飛ばされた岩石の多くは白く変化したことから、もともと赤黒い微粒子は岩石の表面や内部の隙間に付着していたと考えられる。

につくられたものであり、内部が青いクレータは表面の赤化が起こった後につくられ、地下の新鮮な青い物質を露出させたものであると解釈できる。リュウグウ表面を赤くした原因は何であろうか？赤く変化した領域が中低緯度帯であり、極域では変化が無いことから、太陽に起因した変質であると考えられる。また、赤いクレータと青いクレータが明瞭に二分されることから、表面赤化は短期間で起こったことを意味している。これらのことから、われわれは過去にリュウグウは一時的に太陽

に接近した軌道にあり、その際にリュウグウ表面が太陽に焼かれる、または風化を受けることで表面赤化が起こったと結論づけた。実際に軌道計算研究によると、地球や火星などの内惑星との接近によって地球近傍にある小惑星の軌道は頻繁に変化することが知られている。今回の成果は、小惑星表面に残された地質記録から、そのような軌道進化を実証的に示したものであると言えるだろう。

着陸で観測された赤黒微粒子は、この太陽接近



推定されたリュウグウの進化史

いっぽうでリュウグウの全球的な観測から、リュウグウ表面は中低緯度では赤黒く、両極では特に青白くことがわかってきた。さらに詳細に調べてみると、この赤黒—青白の分布は天体衝突によって作られたクレータ地形と関係があることがわかってきた。古い時代につくられたクレータの内部は赤い色を持つのに対して、若いクレータの内部は周囲よりも青くなっている。このことからわれわれは、リュウグウの表面が過去に赤く変化するイベントがあったと推測している(図)。その場合、内部が赤いクレータはリュウグウ表面の赤化が起きる前

の際に変成を受けた物質が破碎されたものであると考えられる(図)。今回の着陸によって変成をうけていない物質と変成を受けた物質の両方の物質が採取されたと考えられており、持ち帰られるリュウグウ試料の物質科学分析から、上述したリュウグウの進化シナリオが検証されるとともに、地球軌道に供給される炭素質物質の太陽加熱・風化作用の物質科学的解明が期待される。

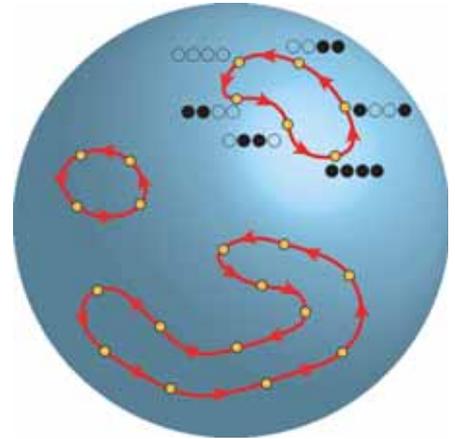
本研究成果は、T. Morota *et al.*, *Science* 368, 654 (2020) に掲載された。

(2020年5月8日プレスリリース)

CASE 3

「熱平衡化しない数理モデル」 オンサーガーの残した傷跡

温水の中に氷を入れると、やがて氷が解け一様な冷水へと落ち着いていく。温水中の水が解けたり凍ったりを繰り返すのを見たことがある人は一人もいないであろう。ところが、近年、それに類する現象が実際に実験で確認されたことを契機として、「量子多体傷跡状態」と呼ばれる不思議な状態についての理論的研究が活発に行われている。傷跡状態がどのような条件で生じるかについての完全な理解はいまだ得られていない。本記事では、その理解に迫ったわれわれの最近の研究成果について紹介したい。



量子多体傷跡状態のイメージ。水色の球の表面で表された状態空間の中で、熱平衡化しない傷跡状態(図のオレンジ色の小さい丸)は、他の熱的な状態から分離した部分空間上で周期的運動を繰り返す。

理科系の大学生の多くが1年次で習う「熱力学」では、「熱平衡化」という概念が出てくる。これは、「外界とエネルギーのやり取りがない孤立したマクロ系は、時間とともに然るべき状態へと落ち着いていく」という経験則のことであり、熱力学・統計力学を支える重要な事実である。では、これを現代物理の基本原則といえる量子力学から導くことはできるのだろうか。

結論を大雑把に言うと、「かなり一般的な量子系の設定で、ほとんどの状態は熱平衡化する」ということが現在までに分かっている。その背景にあるのが、理論的に量子系の熱平衡化を説明する「固有状態熱化仮説 (Eigenstate Thermalization Hypothesis, ETH)」と呼ばれる機構である。ETHが特別な対称性をもたない一般的な系(非可積分系^{注1)})で成立することは、数値計算により多くの系で確認されている。また、並進対称性^{注2)}と呼ばれる性質をもつ均一な系では、弱いETHと呼ばれる条件を緩めたものの成立が証明されている。しかし、近年、熱平衡化が極めて遅い実験系が報告されたことを受けて、非可積分系にも関わらずETHを満たさない系に大きな注目が集まっている。このような系における熱平衡化しない、すなわち初期状態への再帰を示すような奇妙な状態を量子多体傷跡状態と呼ぶ。この例外的な状態を理解することは、熱平衡化の機構をより深く解明するために重要であるが、

どのような条件で傷跡状態が生じるかなどの全容はいまだ謎に包まれている。また、これまで提案されてきた傷跡状態が生じるモデルは並進対称性を仮定したものが主流であったが、それが傷跡状態の存在のために本質的に重要なのかも明らかではなかった。

われわれは、従来提案されてきたものとは異なる新しい機構で、量子多体傷跡状態をもつ量子スピンモデルを無限に構成できることを発見した。この構成の核となるのは、統計力学では非常に有名な2次元イジング (Ising) モデルの厳密解を得る過程で、ラルス・オンサーガー (Lars Onsager) が見出したオンサーガー代数と呼ばれる数理的構造である。具体的には、オンサーガー対称性と呼ばれる特殊な対称性をもつ量子スピンモデルに対して、その高い対称性は崩すが平衡化しない特殊な固有状態は残すような摂動を加えることで、熱平衡化せずに完璧な周期的振動を繰り返す傷跡状態を構成した。加える摂動は並進対称性をもたないものでもよく、そのような乱れに対しても安定な傷跡状態を陽に構成したのは本研究が初めてである。

本研究は今後の量子多体傷跡状態や熱平衡化に関する研究の新たな方向性を開拓し、それらの分野のさらなる発展を促すことが期待される。今後の方向性として、例えば、並進対称性のない状況下では証明されていない弱いETHとの関連性などを調べていきたい。

本研究成果はN. Shibata *et al.*, *Physical Review Letters* **124**, 180604 (2020) に掲載され、特に重要な成果として Editors' Suggestion に選ばれた。

(2020年5月8日プレスリリース)

注1) 非可積分系: 無限系であっても保存量が高々有限個しかないような系のこと。逆に、十分な数の保存量が存在することによって系の詳細が調べられる系を可積分系という。

注2) 並進対称性: 空間的な並進操作に対して系が不変であること、すなわち、空間的に均一であること。