



## 材料研究との出会いと現在

九州大学稲盛フロンティア研究センター学術研究員  
屋山 巴

私は、2013年3月に九州大学大学院工学府 航空宇宙工学専攻にて学位を取得後、現在は同九州大学、稲盛フロンティア研究センターにて研究に従事しています。大学院在学時以来、密度汎関数法に基づく第一原理計算手法を用いて機能材料研究に取り組んできました。この度寄稿の機会を頂きましたので、これまでの振り返るとともに、今後の抱負を述べたいと思います。

私の出身である航空宇宙工学専攻は機械工学科の系統で、学部生の時には現在のような材料の研究、特に量子化学のスケールの研究に携わることになるとは考えていませんでした。当時は航空機の翼の空力特性に関する研究をしていて、その後もその研究を続けていくつもりでした。しかし、同専攻教授、柿本浩一先生の研究室は専攻の協力講座の位置づけで、大学院から希望することができる仕組みでしたので、進学時に改めて進路を考える機会を得ることになりました。半導体材料を扱う柿本研究室は、それまでに学んできた機械工学とは異なる知識が多く必要とされることからやはり他の研究室とは一線を画す存在で、私自身、そこでの研究に対するイメージをしっかりと持っていたわけではありませんでした。しかし、高効率太陽電池などのテーマは私にとって新鮮で、また先生方の熱意ある研究室の気風に魅力を感じて思い切って配属を希望しました。これが私の、今に至る材料研究との出会いとなりました。配属後はやはり知らないことばかりで思い悩むことも多くありましたが、研究室の先生方だけでなく、学会で知り合う全国の先生方や、学生仲間の皆さんに非常に恵まれ、たくさんのことを教えていただきながら、少しずつ研究を進めることができました。

この時の私のテーマはIII族窒化物半導体で、有望な宇宙用タンデム型太陽電池材料として着目されていました。太陽電池において効率よく光を電力に変換するためには、光の波長とセル材料の半導体のバンドギャップエネルギーがよく対応していることが重要です。タンデム型太陽電池は、異なるバンドギャップを持つ半導体薄膜を積層することにより、太陽光が含むさまざまな波長の光を各層で効率よく変換する新型の太陽電池で、人工衛星の電源系としてすでに実用化が進められています。III族窒化物半導体は、Al, Ga, Inなどの

III族元素と窒素の化合物半導体で、それぞれのバンドギャップエネルギーは6.2, 3.9, 0.7 eVと大きく異なります。これらの混晶はそれぞれの間のバンドギャップエネルギーを持つため、同系の材料で紫外から赤外までの幅広い波長の光に対応する薄膜層の作製が可能です。さらに、窒化物材料は安定で、放射線耐性に優れているとされていることから、宇宙線に曝される過酷な宇宙環境での運用にも適していると考えられ、次世代の宇宙用太陽電池材料として期待されます。しかし、これらの組成制御は困難で、特に高In組成薄膜の作製が難しいことが課題でした。ここで私は、Inの取り込み量が薄膜表面の結晶方位によって異なることに着目し、Inを多く取り込むことのできる面方位の指針を得るため、面方位依存性の要因の解明に取り組みました。窒化物半導体薄膜は気相成長法によって、原子層単位で精緻に積み上げられていきます。このときの有限温度条件下における各面の表面再構成構造を、第一原理計算とフォノン計算を組み合わせた手法を用いて調べたところ、表面を終端する窒素原子がInの取り込み効率に影響を与えていることが明らかになりました。この中ではIII族元素の競争的な吸着において、Inは非常に不安定で、通常は表面にさらされている限り一度吸着しても容易に他の元素と置換してしましますが、表面を覆う窒素分子層が安定な表面では、Inを逃さず閉じ込めることによってIn組成が高まることが示唆されました。ここから実際に高In組成薄膜を作製するための指針を示すためには、さらなる研究が必要ですが、この研究を経験したことで、計算と実験を連携して効果的な材料設計を行うという目標が自分の中に得られたと思っています。

現在は半導体から金属に材料系を移し、JST-CREST元素戦略領域の研究課題の下で遷移金属系合金の水素吸蔵特性に関する研究を行っています。現在対象とする材料の一つに、 $Ag_xRh_{1-x}$  ナノ粒子があります。これについては、本来非混和なAgとRhが、ナノ粒子化と水素吸蔵プロセスによって完全固溶型合金となり、さらに単体にはない水素吸蔵特性を獲得するということが実験的に報告されています。AgとRhが周期表の上で、単体で水素を吸蔵するPdの両隣に位置することが、あたかもIV族半導体とIII-V族化合物半導体の関係に似ている点においても興味深く、現在電子構造と水素吸蔵特性の関係について議論を行っています。

これまでに、専門や研究テーマを変わってきたことで、なにもわからないところから何度もやり直してきましたが、いま、それぞれの経験が少しずつつながりを持ち始めていると感じています。航空宇宙工学専攻に進学したときの、人類の平和や健康的な将来に貢献する科学技術開発に携わりたいという思いは、太陽光や水素エネルギーのテーマを経験した今、材料を通じたエネルギー問題の解決という具体的な目標に反映されていると思います。これからさらなる経験を積みながら材料のプロフェッショナルになって、エネルギー問題に役立てる材料設計を目指していきます。

(2014年1月6日受理)[doi:10.2320/materia.53.113]

(連絡先: 〒819-0395 福岡市西区元岡744)