



令和3(2021)年度学術変革領域研究(A)

2.5次元物質科学： 社会変革に向けた物質科学のパラダイムシフト

現実と非現実の間からアプローチする 2.5次元物質科学研究

A01班

物質創製班 研究代表者
(DFTによる新規物質の設計と計算支援)

岡田 晋
筑波大学

先生は元々、何にご興味を持たれて、どのような研究をされていらっしゃいましたか？

岡田 最初学部では日大の理工学部物理学科というところで、電子系の理論の研究室にいたんです。ただそこで勝手に卒研で、古典スピンの研究をやったんです。で、「大学院でも同じテーマをやりたい」と言ったら「君は東工大にいった方がいい」と、とある先生を紹介されて、そこに移ったんです。でも結局そこが折り合いが悪くて。その年の3/1に斎藤晋先生が助教授でいらっしゃって、そこに泣きついで拾ってもらったのがきっかけ(笑)。だからようがなく始めたのが、多分正解だと思いますね。

その後、筑波大に助教として就職したんですが。最初に着任する予定の研究室のボスが、着任のちょうど半月前に亡くなられたんですよ。いわゆる「親なし助手」状態で宙ぶらりんで筑波大に入ったんです。そこにたまたま押山先生、カーボンナノチューブの電子状態の計算を世界で最初にやった先生がいらっしゃって、その方のところにまた泣きついで、グラフェンとかチューブの研究を始めたという経緯があります。

偶然の巡り合わせ、といったところでしょうか？

岡田 そう。だから主体的に「これをやりたいんだ」や「興味を持って今までこうやってきたんだ」って言うのも、なんか違うような気がしているんですよ(笑)。

今はまさにこの分野、この領域で対象にしているような物の理論計算をやっています。遷移金属カルコゲン化合物(TMDC)、グラフェン、六方晶窒化ホウ素(h-BN)や、カーボンナノチューブもやってますし……もちろんフラーレンも、まだまだ普通に研究していて。最近はTMDC関係の電子状態計算をメインにやってますね。



どうして「2.5次元物質」をターゲットにしようと先生は考えられたのでしょうか？

岡田 僕自身は元々は、フラーレン分子をずっとやってて。一番初めに、グラファイトの層間で、フラーレンを挟み込むという研究をさせられた。させられたって言つたら怒られますね(笑)だから「どうしてか」のきっかけは、指導教員ですね、僕にとっては(笑)。当時「2.5」なんて言葉は全くなかったんですが、そういうなんか異なる物質、次元性を持つものを混ぜましょうということで、94年にテーマをもらいました。28年前ですかね。

そのテーマを敢えて「続けよう」と思った面白さは、どこにあるのでしょうか？

岡田 実は当時はあまり面白くなくて(笑)論文1本だけ書いて、その後は本当に純粋に分子だけの世界に入ったんですよ。だから正直に言うとその「隙間にに入る」って話は、その後しばらくはやってなかつたんです。

理論の研究ってぶっちゃけ「面白いものがあつたらとりあえずそれに飛びつく」みたいなところがあるんですよ。計算機にうまく乗っつけられれば、こっちのものなんですね。だから、結構節操無く色々やってたんです。

その後、就職するかしないかの時期に、チューブの中にフラーレンが入ってる物質、ピーポッドって言うんですけど、その研究もやりました。だから連続的に続けてないけど、断続的には続いてますね。

なんで続けてるかって言うと何ですかね……綺麗ですよね。見たときに形が(笑)。その面白さですかね。

面白い形、という意味では、事前にいただいたお写真(右図)も、とてもユニークでした。

岡田 左上は、 C_{36} がベースになっています。 C_{36} 分子の赤道にある6枚の6員環を互いに共有させて作った構造で、二次元のネットワークを作つて遊んでいたって話です。 C_{36} とは違つて、実在の物質ではないんですが。

絵と模型を作つた時に、綺麗だなと思ったんですよ。純粹に見た目がかっこいいからっていうんで、やってみたという研究です。

実験の人とのペアで「その状態について説明する」って研究はいっぱいやってますし、もちろんすごく楽しいんです。これはそれとは別にこういう遊び、あるいはパズル的な研究になるのかな。何かこう色々と形を組み合わせて綺麗なのができたらいいなと思ってやつた仕事です。

それと当時学生だった、今助教の方が折り紙が好きだったんですよ。彼女が「物理は嫌いだけど、折り紙は好き」って言つたんで、「じゃあ面白い形つくろつか」でやり始めたことがきっかけ。その中のゴールの1つですね。

確かに形を組み合わせて、それがきれいにはまる、それだけでわくわくしますよね。

岡田 そうですね。僕もそう思うんです。右下のも本当に遊びで……物理学って、一番人気は素粒子の理論なんですよ。二番目は宇宙関係の理論。で、物性の理論って、ぶっちゃけちゃうとものすごく人気ないんですよ。あまりにも癪に障つたんで、「宇宙でも作るか」ってなって(笑)。計算して“nano saturn”「ナノ土星」って論文を書いたんです。

眞面目に実際の物質もやつてあるけど、そうじゃない遊び的な部分がある。それがうちの特徴なんですよ。あまりシリアルスさがないっていうところを、あえてここに載せて欲しかった、というところがあります。

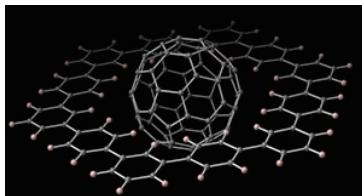
なるほど。ところで先生が研究代表者のA01班は、領域においてどのようなポジションに当たるのでしょうか？

岡田 A01班というグループが、この領域の一番ベースにあるポジションなんですよ。

吾郷さんは、グラフェンのCVD合成を使って、ものすごくきれいな大面積のグラフェンを作れるという技術を持つていらっしゃいます。これは例えば、この後大きな系を作りたい時などに、よい材料となります。渡邊さんはさつきも話題に出た、h-BNHVの大家です。ほとんどの二次元、2.5次元物質の実験では、基盤としてh-BNを使っています。櫻井さんは、有機合成の方ですね。スマネンと言つてお椀状の3回対称の分子の合成をしていますが、それを使つたHOFやCOFやMOFといった、ネットワーク構造の合成もされている方です。

そういう意味でどなたも、それぞれのオリジナリティがある特技があって、そこで作られた物質や材料を通じて、常にA02～05班の皆さんのお実験をサポートする。そういう位置にあるんだと思っています。

二次元ネットワーク



"nano saturn"
ナノ土星

その中でも先生は、どういった部分を担つていらっしゃいますか？

岡田 実はこの領域のかなりの先生と共同研究しているんですよ。新しい方を除いて、領域の大体半分以上の先生方と多分一緒に仕事をしたことがあるんじゃないですかね。一次的だけじゃなくて二次的な側面を入れたら、ほとんど全員になるんじゃないですか(笑)。物理だと計算する人は計算だけ、実験する人は実験だけをやるんです。プログラムがどうしても、専門に使つている人以外には使いにくいんです。なので例えば吾郷さんから「こんな計算して」と言つて、それを僕が計算するんですよ。

なので僕は領域の便利屋的なポジションなのかもしれないですね。物質設計もする。さらに、その安定性とか何故そななるかとか反応のバリア見積もりとか、そういうところを色々とやっていく。だからこのグループに入つてはいる、そんな気がしますね。

最後に、今後の展望について一言お願いします。

岡田 「2.5次元」ってそれ自体が非常に突拍子もない話で。共有結合ではないところの科学(サイエンス)をやりたいって話ですね。その中でも「ポイント5」が重要じゃないかと。「ポイント5」という言葉に「たくさんの次元が畳みこまれている」んじゃないのかなって、僕はそう思つています。

その中で僕自身は、まずは堅実にその他の皆さんとコラボレーションして裏方に徹する。それとは別にさつきの変な絵がありましたよね。そんな感じで2.5次元に関連することで、「人が犬を噛んだような」変な何かを考えたいですね。それは物質の設計であつたり、さつきみたいなナノ土星みたいなやつ。他のグループの実験の皆さんには「そんなお前できないよ」と言われるようなやつ、そういう言われるからこそ、やりたいんです。

Interviewee



岡田 晋
筑波大学
数理物質系
教授