



電子材料研究拠点

(TIES: 東京工業大学)

代表研究者 細野 秀雄 Hideo Hosono

TIESの到達目標

- ▶多元素を使用した材料設計コンセプトの創出、材料科学の確立と新機能電子材料の開発
- ▶FPD用半導体材料や、パワーエレクトロニクス用高安定高誘電体材料を産業界へ移転
- ▶元素戦略研究センターを中心とする電子材料拠点の全学的発展(新・元素戦略)

研究体制

これまでの主任研究員、アドバイザー

統括・企画	材料創製グループ	電子論グループ	解析評価グループ
代表研究者 材料創製GL 細野 秀雄	材料創製SGL 半導体/超伝導体 東工大 大友 明	電子論GL 半導体/計算 東工大 神谷 利夫	解析評価GL 量子デバイス 東工大 真島 豊
NIMS拠点長 材料創製GL 大橋 直樹	高・強誘電体 東工大 舟窪 浩	スピノ物性理論 東工大 村上 修一	精密構造解析 東工大 山浦 淳一
KEK拠点長 解析評価GL (2019) 村上 洋一	高・強誘電体 東工大 (2013-20) 伊藤 満	2次元物質理論 東工大 高藤 晋	放射光回折 NIMS 坂田 修身
KEK拠点長 解析評価GL (2020-) 門野 良典	高・強誘電体 山梨大 (2013-) 和田 智志	2次元原子層物質 筑波大 (2016-) 近藤 剛弘	光電子分光 KEK→東北大 組頭 広志
企画マネージャー 雲見 日出也	高・強誘電体 名古屋大 (2013-) 谷口 博基	エレクトライド/触媒 東工大 北野 政明	半導体分光物性 京大 (2019) 金光 義彦
バルク単結晶育成 NIMS 島村 清史	高・強誘電体 名古屋大 (2019-) 山田 智明	2次元原子層物質 筑波大 (2016-) 近藤 剛弘	μSR KEK (2018) 小嶋 健児
		エレクトライド 反応系計算 東工大→九州大 多田 朋史	表面X線回折 東北大 (2019) 若林 裕助
		理論/計算手法 東京大 常行 真司	

ロードマップ

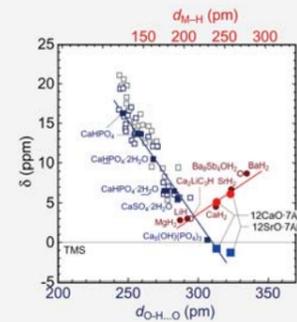
3期にわたり継続する基礎研究から、元素戦略材料への展開とデバイス応用に移行



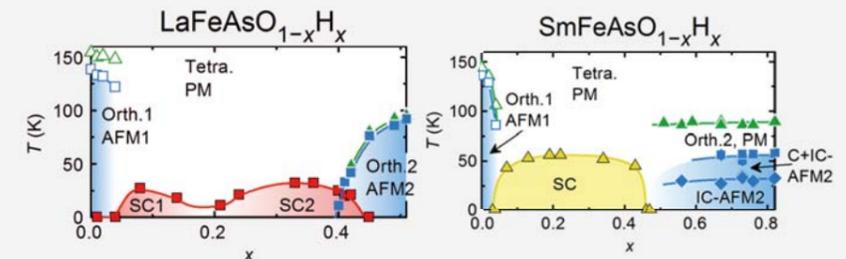
新しい基盤学理の創出

電子材料中の水素の科学

水素は広範な電子材料に含まれる最も普遍的な不純物だが、その存在状態や物性との関係はほとんど解明されていなかった。本プロジェクトでは、ミュオン、中性子などの量子ビームによる計測と計算によって、この問題に取り組んだ。その結果、酸化物半導体中(特に薄膜)にはかなり高い濃度の水素が存在し、その状態はOH(水素の電荷は+)だけでなく、ヒドリドイオン(電荷は-1)として取り込まれていることがわかった。これらはキャリア電子の生成や光による特性劣化など特性と深く関係していることが分かった。



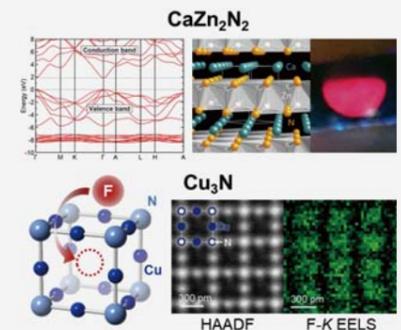
H核NMRの化学シフトとH+/H-の関係。化学シフトとは1:1に対応しない。Nat. Commun.(2014)



明らかになった水素ドーピング系超伝導体の電子相図。Nat. Commun.(2014), PNAS(2017)

第一原理計算による新規窒化物半導体の設計・探索と実験による実証

第一原理計算に基づいたハイスループットスクリーニングにより、希少元素を含まず、赤色発光する新規窒化物半導体CaZn₂N₂の存在を予測し、実験で実証した。また、格子間F添加によるCu₃Nのp型ドーピング法を提案し、これも実験により実証できた。

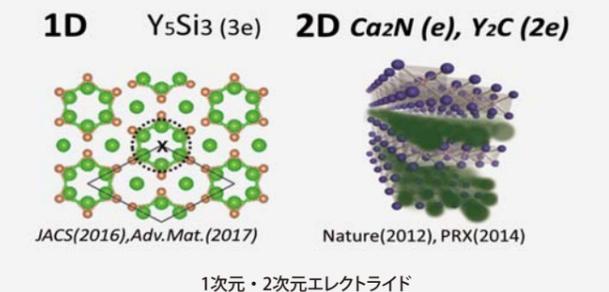


計算と実験で実現した赤色発光半導体とp型Cu₃N
Nat. Commun.(2016)
Adv. Mater.(2018)

エレクトライドの物質科学の進展

アニオン電子が存在する空間はこれまで0次元に限られていたが、1次元および2次元の物質を計算と実験から見いだした。

Y₂Cのアニオン電子のバンドが、角度分解光電子分光による実測とDFT計算の結果に矛盾がなかったことから、2Dエレクトライドであることが実証された。また、Y₂Clはトポロジカル物質であることが明らかとなった。



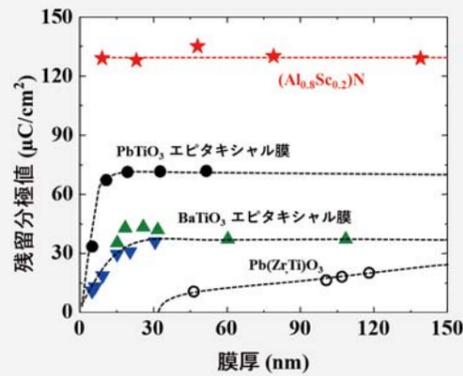
1次元・2次元エレクトライド



社会実装につながる成果

極薄膜でも高性能が維持できる強誘電体

従来のペロブスカイト型強誘電体では、5 nm以下になると分極が顕著に低下してしまうことが問題だった。本PJは、薄膜化しても特性の劣化がない、強誘電体($\text{Al}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{N}$)を開発した。超低消費電力で駆動可能なメモリや高温でも動作可能なメモリ素子としての応用が期待されている。多くの企業が実用化に向けた検討を行っている。

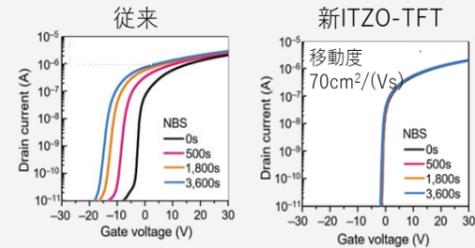


強誘電体薄膜の特性と厚さ。Appl. Phys. Exp. (2021)

ポリシリコンに匹敵するアモルファス酸化物薄膜トランジスタ(TFT)

約20年前に発表したIGZO-TFTは、アモルファスシリコンよりも電子の移動度が一桁ほど高く、作製が容易なので、各種ディスプレイの駆動に広く実用化されている。

この研究では、移動度と安定性のトレードオフ関係(経験則)を解明することで、多結晶シリコンに匹敵する高い移動度と電圧印加で劣化しないアモルファス酸化物半導体(ITZO) TFTを実現した。これにより次世代ディスプレイだけでなく、論理回路など新しい応用が期待される。

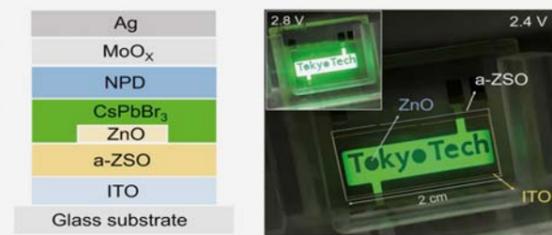


新ITZO-TFTの安定性(NBS:ゲートに負バイアスを印加したときの安定性) Nat. Elec. (2021)

低電圧で高輝度のペロブスカイトLED

ハライド系ペロブスカイトは塗布で作製しても高い量子効率で発光する。これを使った高性能LEDには、電極からこの層に電子を速やかに注入でき、しかも生成した正孔と電子を閉じ込めて励起子を高効率で生成させる電子注入層が必要となる。

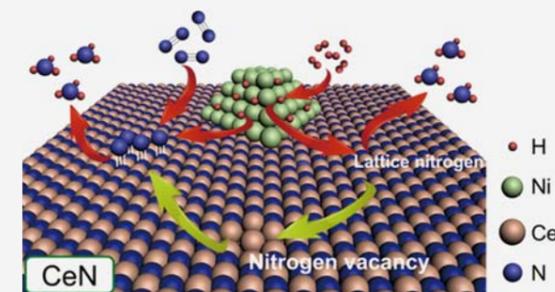
これらの両方を満たすアモルファス(a) ZnO-SiO_2 (ZSO) 薄膜を用いることで、2.9 Vで10,000 cd/m^2 、5 Vで500,000 cd/m^2 の輝度(通常のスマートフォンの最大輝度は400 cd/m^2 程度)を達成した。



LED素子の構成と発光。Appl. Phys. Rev. (2019)

貴金属を使わないアンモニア合成触媒

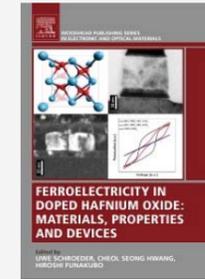
低圧・低温下でも高濃度のアンモニアを合成できる触媒が求められている。この目的には律速となる窒素分子の活性化に効果的なルテニウムがもっぱら用いられてきた。窒素の活性化をセリウム窒化物の表面に高濃度で生成する窒素欠陥で行い、担持する金属には水素の解離だけを担わせるという発想で、これまで着目されてなかったニッケルの担持でルテニウムに匹敵する活性を実現した。



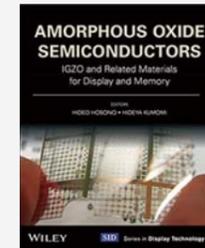
ニッケル担持窒化物触媒とその機構。Nature (2020)

プロジェクトのバトンをつなぐ

本プロジェクトの成果に関する成著と総説



ハフニウム酸化物系強誘電体



アモルファス酸化物半導体



エレクトライドの物質科学

東工大元素戦略拠点では、新型エレクトライド、エレクトライド電子によるトポロジカル電子状態、非ペロブスカイト型強・高誘電体、ペロブスカイト型無機発光半導体、金属間化合物触媒など、前例のない構造・概念の新機能材料群の開発に成功してきた。また、電子論グループでは高精度・高スループット第一原理計算法を開発し、網羅的な探索計算により新しい半導体や高効率ドーピング手法を材料創製グループに提案し、理論計算の予測を実証してきた。

上記のような成果は、ロードマップのない研究課題にあえて挑戦する気概と、前例のない新材料を設計・創製する知識とセンスをもつ人材を育成し、材料創製-電子論-解析-評価の異グループ間で忌憚のない意見交換を行う研究風土を醸成してきた結果である。

また、従来は別々の学術ソサイエティで研究・議論が行われていた、半導体-誘電体-イオン伝導体-触媒という異分野材料の研究をunder the one roofの拠点内で実施した結果、分野間の材料設計指針・研究手法が交配され、上記のような新材料群を開発する土壌が形成された。

これらの多様な電子材料群の設計指針、研究データは、データ科学を基盤として統合・交配することで、本拠点の研究者ですら思い至らなかった、さらに新しい材料を発掘することができる。

一方、従来のマテリアルズインフォマティクスとビッグデータ型の機械学習による材料探索には、すでに得られているデータベースや学習データの内部にある「内挿データ」の範囲でしか新材料が提案されないという問題がある。この点については、遺伝的アルゴリズムなどの「不連続構造の交配」により、未知結晶構造を探索することが可能であることが実証されてきており、本拠点でも新型エレクトライドの発掘に成功した。

私たちは、本拠点で培ってきた新材料設計指針・データと、従来の機械学習の「例外」を手掛かりとして、不連続な構造を探索して「前例のない新材料を提案する」マテリアルDXシステムを構築し、さらに多くの実用に資する新材料群を開発していく、「複相機能開拓拠点」を提案している。

未知材料を発見するMDXシステムの構築へ

