

元素戦略Pj(1)「計算科学・マテリアルズ インフォマティクスが開拓した材料と材料科学」

電子材料研究拠点

神谷 利夫 Toshio Kamiya

東京工業大学 科学技術創成研究院



東工大元素戦略拠点の電子論グループでは、半導体物性を支配するバンドダイアグラム、欠陥計算の高精度・高スループット計算法の開発を進め、網羅的第一原理計算、遺伝的アルゴリズムなどによる新材料・構造の発掘を行い、材料創成グループとの連携により、実際に新材料の合成と予測された物性の実証などに成功してきた。また、解析・評価グループとともに、計測データの解析、理解を進めてきた。以下に、代表的な成果の概略を述べる。

●高速H⁺イオン伝導体の機構解明：本拠点で、酸素ドーピングLaH_{3-2x}O_xが2.6×10⁻² S/cmに達する高いイオン伝導率を示すことを見いだした。イオン伝導体のシミュレーションは多数のイオンと長時間にわたる動的シミュレーションが必要であり、量子分子動力学計算では困難であった。ニューラルネットワークポテンシャルを導入し、力場分子動力学計算を行うことで、2種類のH⁺イオンの協奏的ホッピングにより高いイオン伝導性を実現してい

ることが示された[1]。

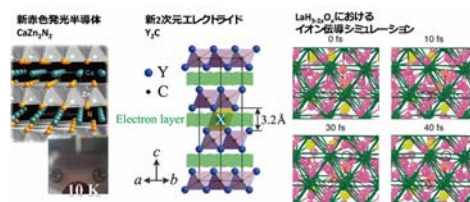
●新しい2次元エレクトライドの探索：2次元エレクトライドCa₂Nをベースに、浮遊電子状態を含む結晶構造をスクリーニングし、第一原理による網羅的计算により8種類の候補物質を見いだした。Y₂Cで合成に成功し、角度分解高電子分光により2次元エレクトライドであることを実証した。さらに、Y₂Cはトポロジカル物質であることを見だし、トポロジカルエレクトライドという新しい物質群を提唱した[2]。

●新赤色発光半導体の開発：豊富な元素のみからなる新しい発光半導体の探索を目的として窒化物に着目した。その結果、CaZn₂N₂を候補物質として見だし、高压合成により窒素の化学ポテンシャルを上げることによって合成に成功するとともに、直接遷移による赤色発光を確認した[3]。

●Cu₃Nにおける高効率p型ドーパントの探索：Cu₃Nは環境親和性が高い元素のみから構成される新半導体であるが、効率的なドーパントが見つかってい

なかった。第一原理計算による網羅的な探索により、Cu₂Nの結晶構造に内因的に存在するアニオンの空隙にFをドーピングすることが提案され、実験により実証した。

●半導体中の水素：半導体では不純物水素が物性に大きな影響を与える。本拠点では実験、理論の両面から、多様な物質中の水素の振る舞いを調べてきた。a-In-Ga-Zn-Oでは水素は、-O²⁻H⁺とH⁻@カチオンの両方の状態を安定して取りシングルドナーとして働くが、カチオンサイトではH₂の状態も安定であり、この場合はドーピングに寄与しないことを明らかにした。μSRの測定・解析と合わせて、a-In-Ga-Zn-Oでは水素濃度が高くなるとH⁻-H⁻複合体を作ることが示唆され、実験によるドーピングリミット10²⁰ cm⁻³を説明した。



参考文献

- [1] Characteristic fast H⁺ ion conduction in oxygen-substituted lanthanum hydride Keiga Fukui, Soshi Iimura, Tomofumi Tada, Satoru Fujitsu, Masato Sasase, Hiromu Tamatsukuri, Takashi Honda, Kazutaka Ikeda, Toshiya Otomo, Hideo Hosono, Nat. Comm. 10 (2019) 2578.
- [2] Exploration for Two-Dimensional Electrides via Database Screening and Ab Initio Calculation Takeshi Inoshita, Sehoon Jeong, Noriaki Hamada, and Hideo Hosono, Phys. Rev. X 4 (2014) 031023
- [3] Discovery of earth-abundant nitride semiconductors by computational screening and high-pressure synthesis Yoyo Hinuma, Taisuke Hatakeyama, Yu Kumagai, Lee A. Burton, Hikaru Sato, Yoshinori Muraba, Soshi Iimura, Hidenori Hiramatsu, Isao Tanaka, Hideo Hosono, and Fumiyasu Oba Nat. Comm. 7 (2016) 11962

関連 WEB

<https://www.ties.titech.ac.jp/>