

研究テーマ：全く新しい電子材料・デバイスの提案と普遍的課題の解明

第2期（H27～29年度）の研究目標

- 4つのフォーカス領域(右図)を中心とした
- 新しいアイデア・構造・化学組成を基盤に対象材料を思い切って広げた挑戦的な新材料探索のさらなる発展
 - 実用化による産業への貢献の可能性が高い材料候補の絞り込み
 - 産(官)学連携による実用化研究の始動

半導体

- 日本の主流に欠落している領域に
- 高移動度/両極性/超ワイドギャップ
- 新ドーピング手法
- p型透明アモルファス
- 非酸化物窒化物、硫化物、水素化合物
- Dirac電子などの特異な電子構造系

高・強誘電体

- パワーエレクトロニクス対応、耐高温
- 酸素欠陥が動かない安定性
- 非希少・非毒性ユビキタス元素
- 非/低次元ペロブスカイト
- 非酸化物/(酸)窒化物
- 水素化合物

水素の役割・機能の解明

- 従来無視されて来た酸化物中の水素
- 酸化物中の水素の定量と状態の特定
- 水素と電子物性の相関の解明
- 機能性元素として水素を積極的利用
- 新奇水素化合物の探索

電子論・材料創製の連携推進

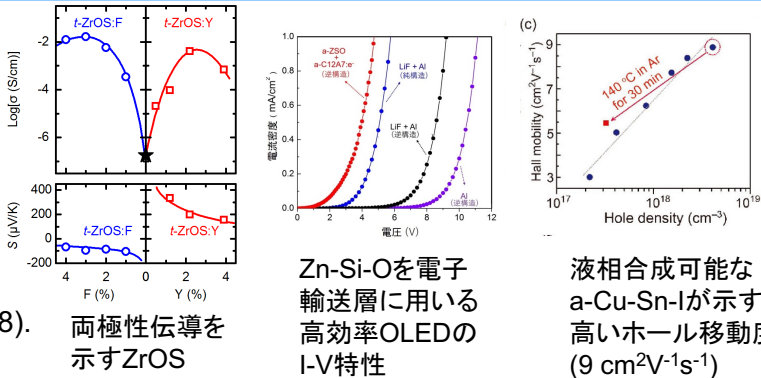
- 物質スクリーニングの高速化
- 欠陥等を含む基本計算手法の確立
- 合成プロセスも含む理論計算予測
- マテリアルズインフォマティクス(M.I.)の活用推進

H27～29年度の代表的な研究成果

◆新しい半導体材料・デバイス設計と実証

1. 前周期遷移金属を用いる新しい両極性硫酸化物半導体材料:ZrOS
2. ありふれた元素で構成され優れた電子物性を示すナノ構造半導体材料:Zn-Si-OとそのOLEDデバイスへの応用
3. 世界初の高移動度をもつp型透明アモルファス半導体:Cu-Sn-I

1(飯村壮士、細野GL) T. Arai, *et al.*, *JACS* **139**, 17175-17180 (2017).
2(J. Kim、細野GL) N. Nakamura, *et al.*, *Adv. Electron. Mater.* **46**, 1700352 (2018).
3(J. Kim、細野GL) T. Jun, *et al.*, *Adv. Mater.* **30**, 1706573 (2017).



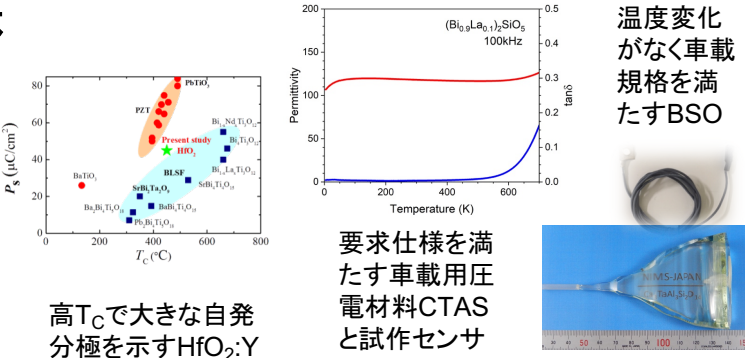
Zn-Si-Oを電子輸送層に用いる高効率OLEDのI-V特性

液相合成可能なa-Cu-Sn-Iが示す高いホール移動度 (9 cm²V⁻¹s⁻¹)

◆パワエレ応用をにらむ非ペロブスカイト系高温高誘電体

1. 高いキュリー温度と自発分極を示す蛍石構造強誘電体:HfO₂:Y
2. 第1期に発見したケイ酸塩系強誘電体の発展により車載用パワーエレクトロニクス規格の温度依存性をクリアした:BSO ((Bi_xLa_{1-x})₂SiO₅)
3. 車載用高温圧電素子用ランガサイト材料:CTAS (Ca₃TaAl₃Si₂O₁₄)

1(清水荘雄、舟窪PI、細野GL) T. Shimizu, *et al.*, *Sci. Reps.* **6**, 32931 (2016).
2(谷口博基、細野GL) H. Taniguchi, *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* **2**, 045603 (2018).
3(島村PI、大橋GL) X. Fu, *et al.*, *Cryst. Growth. Des.* **16**, 2151-2156 (2016).



高T_Cで大きな自発分極を示すHfO₂:Y

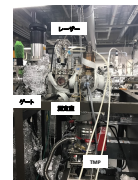
要求仕様を満たす車載用圧電材料CTASと試作センサ

温度変化がなく車載規格を満たすBSO

◆物質中の水素の高感度定量、状態、役割と機能の解明

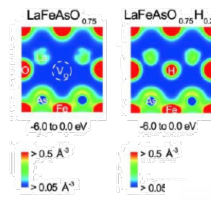
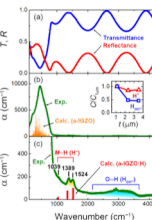
1. 物質中低濃度水素の超高感度(10^{16} cm^{-3})定量測定装置(HSTDs)を開発
2. アモルファス酸化物半導体a-IGZO中のアニオン水素の発見、定量とデバイス不安定性機構の解明
3. 鉄系超伝導体でも酸素欠損よりアニオン水素H⁻の方が安定なことを解明
4. 超伝導第一原理計算手法で硫化水素高圧相の圧力依存性を解明

- 1 (半那拓、平松PI、細野GL) T. Hanna, *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **88**, 053103 (2017).
- 2 (J. Bang、松石聡、細野GL) J. Bang, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **110**, 232105 (2017).
- 3 (村場善行、松石聡、細野GL) Y. Muraba, *et al.*, *Inorg. Chem.* **54**, 11567 (2015).
- 4 (明石遼介、常行GL) X. Fu, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 075503 (2016).



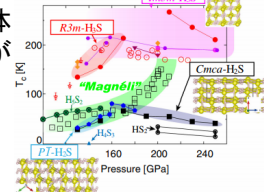
独自開発のHSTDsで低濃度水素の定量に成功

a-IGZO中のアニオン水素の発見と役割を解明



高温超伝導体：硫化水素のT_Cの圧力依存性理論的に解明

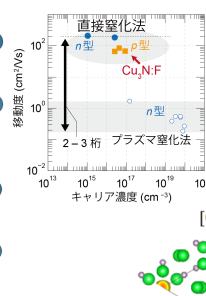
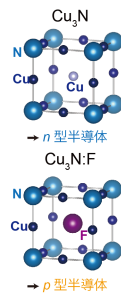
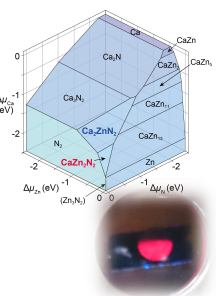
鉄系超伝導体の酸素欠損がアニオン水素で置換される現象を発見



◆電子論と材料創製が連携して得られた典型的な成果

1. マテリアルズインフォマティクスで理論予測した赤く光る新物質窒化物半導体CaZn₂N₂を、これも理論予測した圧力相図に基き実験で実証
2. 窒化物半導体Ca₃Nへの格子間Fによるp型ドーピング法を理論予測し高移動度と両極性を実験的に実証
3. 遺伝的アルゴリズムに基き構造予測を駆使した探索で金属間化合物新物質1次元エレクトライドSr₅P₃を発見し実験的に実証

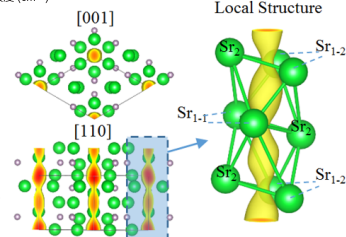
- 1 (大場PI、平松PI、細野GL) Y. Hinuma, *et al.*, *Nat. Comms.* **7**, 11962 (2016).
- 2 (松崎功佑、大場PI、細野GL) K. Matsuzaki, *et al.*, *Adv. Mater.* **30**, 1801968 (2018).
- 3 (J. Wang、半沢幸太、細野GL) J. Wang, *et al.*, *JACS* **139**, 15668 (2017).



理論予測の格子間Fドーピングで高移動度の両極性を実証

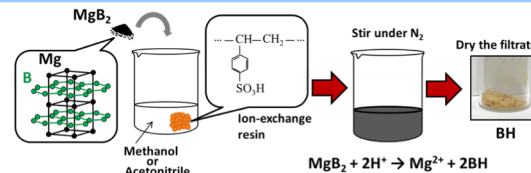
理論予測の圧力相図に基き合成と赤色発光を実証

理論予測の1次元エレクトライドSr₅P₃を実験的に実証

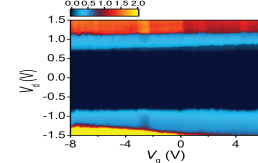
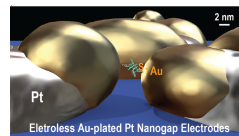
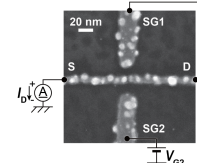


◆フォーカス領域以外の顕著な成果

1. 新しい共有結合性2次元電子材料：ホウ化水素(BH)シートの発見
2. 超微細デバイスの実現に向けた単分子共鳴トンネルトランジスタの作製と動作を実証



2次元電子材料：ホウ化水素(BH)シートの形成プロセスと結晶構造



- 1 (近藤剛弘、細野GL) H. Nishino, *et al.*, *JACS* **139**, 13761 (2017).
- 2 (真島GL) 特許出願済(平成29年度)。

COPVn単分子共鳴トンネルトランジスタのデバイス構造とI-V特性