

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3期（H30～R3年度）および最終の研究目標

元素戦略研究センターを中心とする電子材料拠点をより全学的に発展させて右図の4つの領域にフォーカスし

- フラットパネルディスプレイ用半導体やパワーエレクトロニクス用高誘電体材料を産業界へ移転
- コンセプト、アプローチ、材料設計指針、成果をまとめた記録を出版
- ポストTIES(新・元素戦略)へ発展

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
- 電子機能性水素化物の探索

電子論・材料創製の連携推進

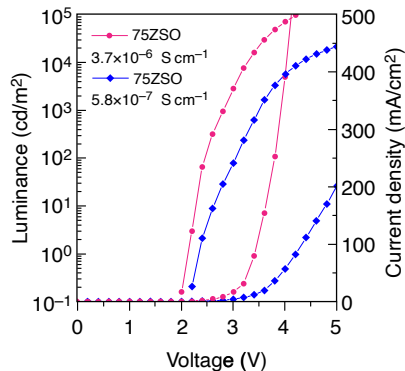
物質スクリーニングの高速化

- 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

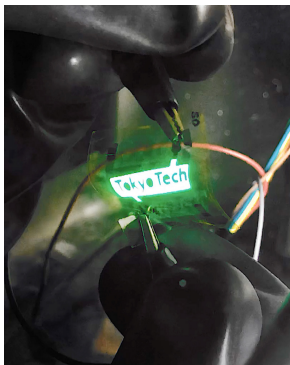
H31・R1年度の代表的な研究成果

◆発光素子用半導体新材料

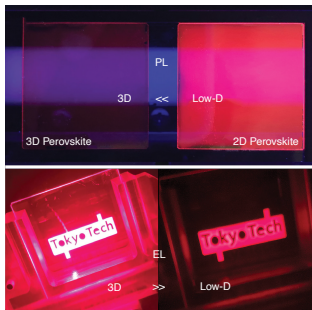
- 新半導体材料:ZSO を電子輸送層に用いた、低温溶液成膜が可能なハロゲン化ペロブスカイト発光素子(PeLED)が更に高効率・高輝度化 (~550,000 cd/m² @5V)、フレキシブル化¹
- GaN系LEDのグリーンギャップ課題の解決のみならず、R・Bでも従来材料を遥かに凌ぎ、BT2020広色域に対応



Gの高効率発光

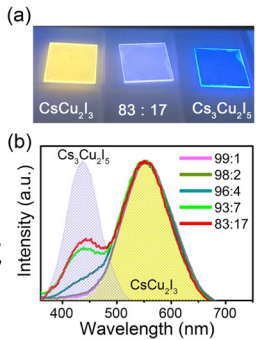


フレキシブル化

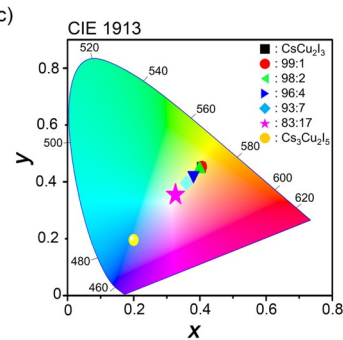


- PLQYでは2Dペロブスカイト等低次元物質が高効率だが、ELでは電荷輸送性能が高い3Dペロブスカイトが遥かに高効率であることを実証

- PLQY>90%の高効率青色発光鉛フリー無機ヨウ化物半導体:
0次元Cs₃Cu₂I₅と1次元CsCu₂I₃の溶液ワンステップ合成で白色発光を実現²



発光スペクトル



色度図中の白色位置

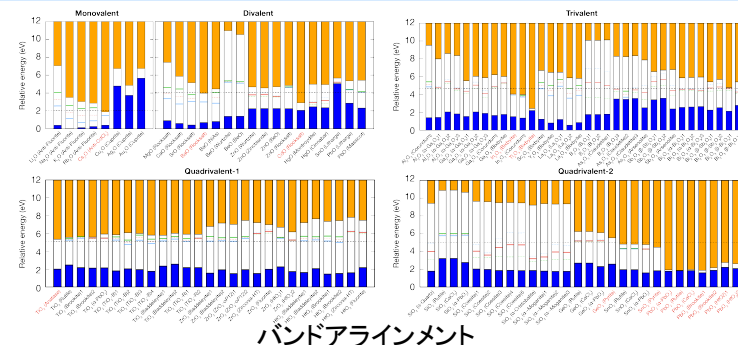
¹(J. Kim、細野GL) K. Sim, *et al.*, Appl. Phys. Rev. **6**, 031402 (2019, Featured).

²(J. Kim、細野GL) T. Jun, *et al.*, APL Mater. **7**, 111113 (2019).

◆酸化物の酸素空孔の電子状態のデータベース化

- プロジェクト第2期までに開発完了した欠陥の電子状態の高速高精度計算法を自動化し、酸化物の酸素空孔の電子状態を網羅的に計算
- 他では得られない独自のデータベースを構築
- 水素様状態の酸素空孔を持つ酸化物は、遷移準位の傾向から定性的に理解が可能になり、機械学習と併せて新物質探索に適用中¹

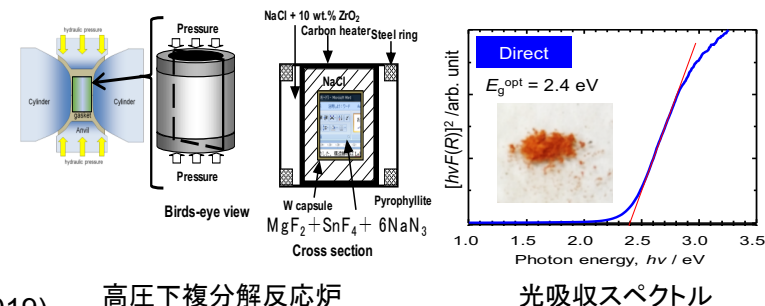
¹(大場 史康P.I.)大場 史康、他、*Ceramics Japan* **54** (2019).



◆新しい直接遷移型3元系窒化物半導体の発見

- これまでM.I.等を用いて新しい直接遷移型3元系窒化物半導体を探索し、ウルツ鉱型の赤色発光 CaZn_2N_2 等を発見し、高圧合成で実証
- 2019年度には岩塩型の MgSnN_2 、 CaSnN_2 を予測し、高圧下複分解反応で合成に成功、 $E_g \sim 2.4$ eVの直接遷移型半導体であることを実証¹
- 緑色発光半導体材料として研究を推進

¹(川村 史朗、大橋GL) F. Kawamura, *et al.*, *Euro. J. Inorg. Chem.* **2020**, 446 (2019).



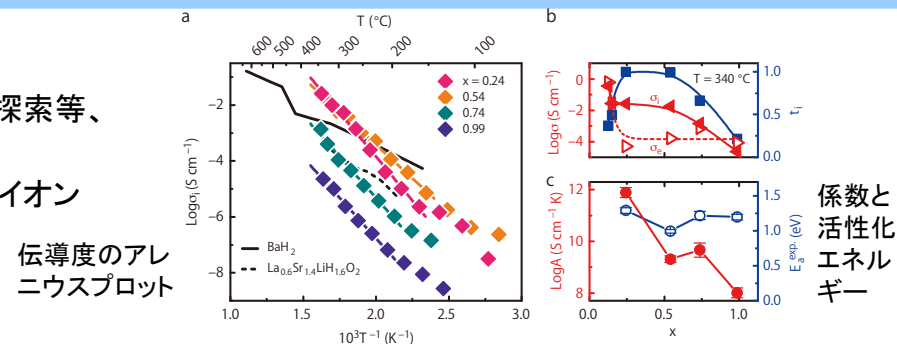
高圧下複分解反応炉

光吸収スペクトル

◆機能性水素化物(ヒドリド伝導体)の発見

- 状態(H^-)や微量水素の定量法・装置の開発、機能性水素化物の探索等、物質中の水素にフォーカス
- $\text{LaH}_{3-2x}\text{O}_x$ がヒドリドイオン(H^-)振動の非調和性により極めて高いイオン伝導度($2.6 \times 10^{-2} \text{ S} \cdot \text{cm}^{-1}$)を示すことを実証¹
- 化学用途以外にメモリ用途等も探索中

¹(飯村 壮史、細野GL) K. Fukui, *et al.*, *Nat. Comms.* **10**, 2578 (2019).



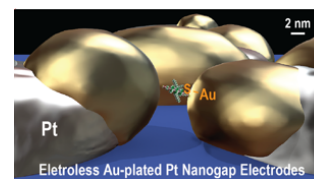
伝導度のアレニウスプロット

係数と活性化エネルギー

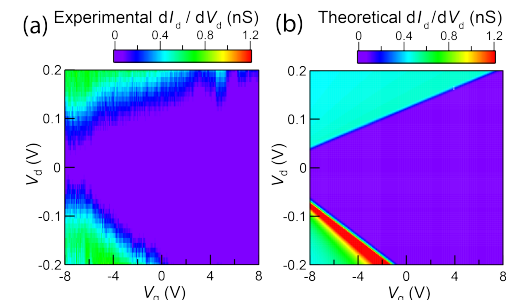
◆単分子トランジスタによる超高速電子素子

- 安定なナノギャップ電極の開発に成功
- 相対するナノギャップ間を単分子チャネルで接続
- 単分子トランジスタによる単電子トランジスタ、共鳴トンネル型トランジスタの動作を実証
- 低消費電力の超高速電子素子の開発に進展

¹(真島GL) S. J. Lee, *et al.*, *Appl. Phys. Exp.* **12**, 125007 (2019).



単分子トランジスタ



電導率のドレイン/ゲート電圧マッピング