



第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 (オンライン開催) 報告 (1)

CRDS 特任フェロー 佐藤勝昭

9/8 シンポジウム T16「多様な安定相の エンジニアリングの新展開 ~環境・エネルギー デバイスと材料の未来~」

[8a-Z28-1] はじめに 佐藤 勝昭 (農工大/JST)



このシンポジウムが、2019年7月のJST/CRDS戦略プロポーザル「未来材料開拓イニシアチブ~多様な安定相のエンジニアリング」を受けて、産総研の反保衆志氏が世話人となって企画されたことに感謝し、本プロポーザルが、材料創製の探索範囲をこれまで人類が扱ってこなかった未開拓の領域まで大きく拡大することで、高性能・高機能化、複数機能の共存、相反する機能の両立などの材料に対する高度化した要求に応えうる未来材料を創製するための研究開発戦略であることを述べた。

[8a-Z28-2] ワイドギャップ半導体 Ga₂O₃ の準安定相の制御と応用 大島 祐一 (NIMS)



次世代のパワー半導体として注目される酸化ガリウム(Ga₂O₃)は、安定相であるβ相(単斜晶、E_g=4.9eV)の他、準安定相のα相(コランダム、E_g=5.2eV)、κ相(直方晶、E_g=4.9eV)などの多形が存在する。準安定相のGa₂O₃のデバイス応用のためには、相制御された薄膜のエピ成長技術を確立する必要がある。これを指してミストCVD、HVPE、MBE、MOCVD、PLD等が試みられている。準安定Ga₂O₃のエピ成長には異種基板を使う必要がある。この講演ではELO基板を用いたHVPEによるラテラル成長による成長制御について述べた。

[8a-Z28-3] SiC 単結晶成長におけるポリタイプ制御 加藤 智久 (産総研)



SiCはワイドギャップ半導体の一つとして大出力パワーモジュール応用が大きく進んだ半導体材料である。SiCには2H、3C、4H、6H、8H、15R、21R、など多数の結晶多形が存在するが、パワーデバイスにはE_gの大きな4Hが使われる。低抵抗化のために高濃度ドーピングすると4Hが不安定化する。産総研では、ドナーとアクセプターを同時にドーピングするコーディング法を昇華法に導入することで、4H多型を安定化させたまま比抵抗をさらに下げられる成長条件を見だし、超低抵抗高品質ウエハの試作を通じて技術を実証した。

[8a-Z28-4] 多結晶材料情報学による粒界構造の解明と制御に向けて 宇佐美德隆 (名大)



大量の実用多結晶ウエハに対するデータ収集・機械学習・理論計算の連携により、シリコン多結晶材料の高性能化に有用な「多結晶材料情報学」の学理を構築し、さらに他材料への横展開を目指して研究を進めている。多結晶ウエハの蛍光イメージに画像処理を行い、3次元再構成を行うことにより、組織と欠陥の複雑な分布を3次元可視化した。また、白色照明の入射角を変化させて多次元反射イメージを収集、機械学習による領域識別を含めた画像処理を適用し結晶粒界を抽出した。今後、粒界制御を含めた多結晶成長制御の高度化を進める。

[8a-Z28-5] 擬自由エネルギーを用いた多様な安定相の探索: 微細組織構造の情報解析

小嗣 真人 (東理大)



ミクロな組織構造データに内在する特徴を抽出し、マクロ機能（例えば磁性体の磁区など）との対応関係を構築する。組織と機能の単純相関解析ではなく、機能の背後にある自由エネルギーランドスケープを良質な特徴量を用いてモデリングする点の特徴。パーシステントホモロジーを活用し、マルチスケールで特徴抽出を行い、新たな模型「擬自由エネルギーランドスケープ」によってマクロ機能を説明する。本モデルから見出される多様な安定相を積極的に利用すれば、磁性材料・金属材料・分子システム材料など実材料の機能デザインの進展が期待される。

[8p-Z28-1] デジタルラボラトリを活用した新多元系マテリアル研究 一杉太郎 (東工大)



有用な機能を示す物質相をどのように探索するか。我々人類がこれまで合成した化合物は、考え得る化合物のほんの一部である。したがって、巨大なマテリアル探索空間が我々の目の前に存在し、そこに有用な材料が眠っている。マテリアル科学は、宇宙開拓や深海探査のように、人類のフロンティアであり、夢がある。そのフロンティアを探索するためには、材料科学にも、宇宙探査機や深海探査艇のようなツールが必要で、実験室に変革が必要である。合成や評価を担う実験装置は、Connected、Autonomous、Shared、High-throughput に向かっている。

[8p-Z28-2] 非平衡合成法による多元素ナノ合金の作製と応用展開 北川宏 (京大)



バルク状態では相分離する金属元素の組み合わせを、非平衡合成、ナノサイズ化、水素プロセス法などの手法により、原子レベルで固溶化させる研究を実施してきた。この方法で作製した人工擬 Rh 合金 (Pd-Ru) は、天然 Rh を凌ぐ NO_x 還元触媒活性を示した。PdRu 固溶合金の電子状態は Pd と Ru の単純な足し合せではなく、Pd と Ru が原子レベルで混合した固溶体を形成する。第 3 元素の添加によるハイエントロピー効果によって 1000 °C 耐熱性・耐久性を付加された。最近、Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt による白金系六銃土触媒でエタノールの完全酸化に成功した。

[8p-Z28-3] 計算熱力学および計算組織学に基づく安定相・安定組織の材料デザイン

小山 敏幸 (名大)



戦略プロポーザル「未来材料開拓イニシアチブ」では材料組織について言及がないが、磁性材料・耐熱合金などでは、材料組織の制御によって機能を発現するので重要である。Nd₂Fe₁₄B 磁石において優れた磁気特性を担保する B の役割は、開発当初、Fe-Fe 間の距離を空けるためとされたが、B の存在で非磁性異相が結晶粒を覆うように形成されていることにあるとされる。新材料探索には、CALPHAD 法による双安定性の計算に加え、Phase-field 法により組織の安定性を計算することが重要。

[8p-Z28-5] 熱電材料の設計指針と高性能材料開発の現状 竹内恒博 (豊田工大)



大きな ZT を得る為に必要となる電子構造の条件は、 $10k_B T_A$ 以上のバンドギャップ、バンド端から数 $k_B T_A$ 程度の範囲における状態密度の立ち上がり、同じエネルギー領域におけるスペクトル伝導度 $\sigma(\epsilon, T) = (1/3)N(\epsilon)vG^2(\epsilon)\tau(\epsilon, T)$ の急激な立ち上がり、および、バンド端近くに定義できるフェルミエネルギー（縮退半導体であること）である。開発する材料は、上記条件の全てを満たす電子構造が望ましい。さらに、格子熱伝導度を小さくするために、複雑な結晶構造、ラットリング、重い不純物元素、非調和格子振動、階層的散乱構造などのいずれか実現していると良い。

竹内らは、このような考えに立って、世界最高性能 ($ZT = 3.7$) を示すバルク Si-Ge-XY 熱電材料の開発に成功した。

[8p-Z28-6] 三元系疑似Ⅲ族窒化物の合成と特性 山田直臣 (中部大)



GaN の Ga をⅡ族の Zn やアルカリ土類とⅥ族の Sn で置き換えた疑似三元系Ⅲ族窒化物は、合成が難しく未知材料が多い。なかでも 4 価元素が Sn の II SnN_2 系は歴史が浅く、 ZnSnN_2 の合成は 2013 年に、 MgSnN_2 2019 年に初めて報告されている。 II SnN_2 系は三元系ならではの物性チューニングが可能である。 MgSnN_2 は高压合成で NaCl 構造 ($E_g = 2.3 \text{ eV}$)、常圧薄膜ではウルツ鉱構造 ($E_g = 2.3 \text{ eV}$)、キャリア濃度は Mg/Sn 比で制御可能である。

[8p-Z28-8] ソーラー水素製造と材料開発 入江寛 (山梨大)



酸化還元媒体を必要としない二段階励起による純水（試薬を必要としない）を完全分解できる光触媒を目指し検討を行い、 H_2 発生光触媒としてロジウム酸亜鉛 (ZnRh_2O_4 , $E_g = 1.2 \text{ eV}$)、 O_2 発生光触媒としてバナジウム酸ビスマス ($\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$, $E_g = 1.7 \text{ eV}$) を選択し、酸化銀 (Ag_2O) の熱分解を利用することによって銀を介して両光触媒を接合した全固体型二段階励起光触媒を創出した。この接合系において波長 740nm までの赤色光を利用し、純水の完全分解反応に成功している。

[8p-Z28-9] Pb free Sn ペロブスカイト太陽電池の研究開発動向 早瀬 修二 (電通大)



Pb ペロブスカイト (PVK) 太陽電池 の効率は 25.2% に達しており、無機多結晶半導体太陽電池と同じレベルに達している。一方 Pb イオンを含まない PVK 太陽電池に対する期待が大きい。周期律表で同族の Sn PVK 太陽電池は近年大きな進歩が見られ、比較的高い効率がいくつかの研究機関で報告されるようになった。Sn PVK には Sn^{2+} の欠損と Sn^{4+} の存在に関する欠陥が多く、研究初期には Sn 系 PVK は太陽電池には不向きであるという報告があった。早瀬らは Sn PVK 層に Ge^{2+} を添加することにより、欠点が克服できることを見出した。Ge イオンはヘテロ界面に局在し PVK フラーレン界面の平坦化、および界面粒界パッシベーションにより電荷再結合中心である電荷トラップ密度を下げている。早瀬らは最近 $V_{oc} = 0.85 \text{ V}$ を実現し 13% 程度の効率を報告した。