

## in silico スクリーニングによる新規窒化物半導体の探索と実験による実証

大場史康、平松秀典：東工大 IIR/MCES

卓越した機能はもちろんのこと、地球上に豊富に存在する元素により構成され、安価で高い環境調和性をもつ新材料の開拓が望まれている。この厳しい要求を満たす材料を、実験のみにより探索するには多大な労力を要し、そのために探索範囲が大幅に制約されることが新材料開発のボトルネックとなっている。本研究では、この状況を打開することを目指して、第一原理計算により半導体の基礎物性、安定性、格子欠陥特性を高精度・高速に予測し、候補物質の *in silico* (計算機中) ハイスループットスクリーニングを的確に行うための技術を開発した。また、その応用により効率的に有望物質の探索を行い、実験グループと密接に連携することで、新物質の実現につなげることを目指した。

開発した *in silico* スクリーニング手法により窒化物半導体を探索した結果、11 種類の新物質を見いだした。このうち、図 1 に示す  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  は、希少元素を含まず、赤色発光が期待できる直接遷移型のバンド構造や小さなキャリア有効質量を持つことから、有望な新物質と考えられる。この物質をターゲットとして 1200 °C、5.0 GPa、1 h の条件で高压合成を行ったところ、理論予測された結晶構造を有する  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  の多結晶試料が得られ、直接遷移型のバンド構造及び赤色発光が実証された。これはマテリアルズインフォマティクスのアプローチと実験の密接連携による新物質探索の加速の好例と言える。

今後、本研究により見いだされた新規窒化物半導体の薄膜化及びデバイス化を進めるとともに、データ科学手法との連携により *in silico* スクリーニングを高度化・効率化し、多様な電子材料の探索へと展開する予定である。

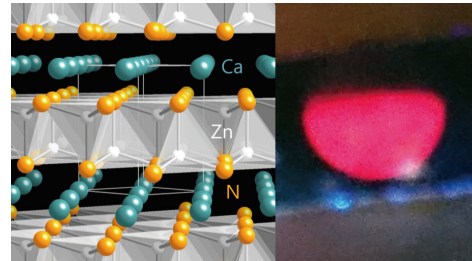


図 1. 第一原理計算を用いた *in silico* スクリーニングによる新規半導体の予測と実験による実証の例。(左) 予測された新物質  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  の結晶構造と (右) 高压合成により得られた試料からの赤色フォトルミネッセンス。

本研究は、東京工業大学 畠山泰典氏、熊谷悠氏、Lee A. Burton 氏 (現 ベルギー-UCL)、赤松寛文氏 (現 九州大学)、佐藤光氏、飯村壮史氏、村場善行氏、細野秀雄氏、千葉大学 日沼洋陽氏、京都大学 田中功氏と共同で行った。また、元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型> 東工大元素戦略拠点、JST イノベーションハブ構築支援事業 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ、JSPS 科研費 25106005、15H04125 の支援を受けた。

### 参考文献

- [1] Y. Hinuma, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, L. A. Burton, H. Sato, Y. Muraba, S. Iimura, H. Hiramatsu, I. Tanaka, H. Hosono, and F. Oba, *Nat. Commun.*, **7**, 11962 (2016).
- [2] Y. Kumagai, K. Harada, H. Akamatsu, K. Matsuzaki, and F. Oba, *Phys. Rev. Applied*, **8**, 014015 (2017).
- [3] A. Gruneis, G. Kresse, Y. Hinuma, and F. Oba, *Phys. Rev. Lett.*, **112**, 096401 (2014).

### 関連 web

<https://www.titech.ac.jp/news/2016/035528.html>