

領域略称名：特異構造の科学
領域番号：2801

令和3年度科学研究費助成事業
「新学術領域研究（研究領域提案型）」
に係る研究成果報告書（研究領域）兼
事後評価報告書

「特異構造の結晶科学」

領域設定期間

平成28年度～令和2年度

令和3年6月

領域代表者 東京大学・生産技術研究所・教授・藤岡 洋

目 次

研究組織

1 総括班・総括班以外の計画研究	2
2 公募研究	4

研究領域全体に係る事項

3 交付決定額	8
4 研究領域の目的及び概要	9
5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	11
6 研究目的の達成度及び主な成果	13
7 研究発表の状況	18
8 研究組織の連携体制	23
9 研究費の使用状況	24
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況	26
11 若手研究者の育成に関する取組実績	27
12 総括班評価者による評価	28

研究組織

(令和3年3月末現在。ただし完了した研究課題は完了時現在、補助事業廃止の研究課題は廃止時現在。)

1 総括班・総括班以外の計画研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
X00 総	16H06413 総括班	平成28年度 ～ 令和2年度	藤岡 洋	東京大学・生産技術研究所・教授	5
Y00 国	16K21722 国際活動支援班	平成28年度 ～ 令和3年度	藤岡 洋	東京大学・生産技術研究所・教授	3
A01-1 計	16H06414 非平衡状態の時間ドメイン制御による特異構造の創製	平成28年度 ～ 令和2年度	藤岡 洋	東京大学・生産技術研究所・教授	2
A01-2 計	16H06415 平衡状態に基づくトップダウン法による特異構造の創製	平成28年度 ～ 令和2年度	三宅 秀人	三重大学・地域イノベーション学研究所・教授	3
A01-3 計	16H06416 多次元・マルチスケール特異構造の作製と作製機構の解明	平成28年度 ～ 令和2年度	上山 智	名城大学・理工学部・教授	4
A01-4 計	16H06417 化学平衡・非平衡制御による特異構造のボトムアップ創製	平成28年度 ～ 令和2年度	熊谷 義直	東京農工大学・工学(系)研究科(研究院)・卓越教授	5
A01-5 計	16H06418 計算科学によるヘテロボンドの理論的材料設計	平成28年度 ～ 令和2年度	伊藤 智徳	三重大学・工学研究科・招へい教授	5
A02-1 計	16H06419 III族窒化物ナノラミネート特異構造を用いたダイヤモンド電子デバイスの開発	平成28年度 ～ 令和2年度	小出 康夫	国立研究開発法人物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・グループリーダー	4
A02-2 計	16H06420 特異構造結晶の特性を生かした新機能発光デバイスの研究	平成28年度 ～ 令和2年度	平山 秀樹	国立研究開発法人理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員	2
A02-3 計	16H06421 特異構造を含む異種接合の界面制御と電子デバイス展開	平成28年度 ～ 令和2年度	橋詰 保	北海道大学・量子集積エレクトロニクス研究センター・特任教授	3
A02-4 計	16H06422 酸化物/窒化物ヘテロ特異構造を制御した酸化還元デバイスの開発(廃止)	平成28年度	大川 和宏	東京理科大学・理学部第一部応用物理学科・教授	2

B01-1 計	16H06423 結晶特異構造およびその挙動の マルチスケール構造解析評価	平成 28 年度 ～ 令和 2 年度	酒井 朗	大阪大学・基礎工学研究 科・教授	2
B01-2 計	16H06424 陽電子消滅による結晶特異構造 のキャリア捕獲・散乱ダイナミッ クスの評価	平成 28 年度 ～ 令和 2 年度	上殿 明良	筑波大学・数理物質系・教 授	5
B01-3 計	16H06425 フォノン科学による特異構造 3 次元分光評価と応用欠陥物性	平成 28 年度 ～ 令和 2 年度	石谷 善博	千葉大学・大学院工学研究 院・教授	3
B02-1 計	16H06426 近接場分光 (SNOM) による特異 構造の発光機構解明と制御 (廃 止)	平成 28 年度 ～ 令和 2 年度	川上 養一	京都大学・工学研究科・教 授	3
B02-2 計	16H06427 時間空間分解カソードルミネッ センスによる特異構造の光物性 解明と機能性探索	平成 28 年度 ～ 令和 2 年度	秩父 重英	東北大学・多元物質科学研 究所・教授	3
B02-3 計	16H06428 結晶特異構造における励起子多 体効果の光物性評価と光機能性 探索	平成 28 年度 ～ 令和 2 年度	山田 陽一	山口大学・創成科学研究 科・教授	2
総括班・総括班以外の計画研究 計 17 件 (廃止を含む)					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

2 公募研究

研究 項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人 数 [2]
A01- 17-1 公	17H05335 窒化物半導体極性制御特異構造 の非線形光学素子応用	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	片山 竜二	大阪大学・工学研究科・教 授	1
A01- 17-2 公	17H05343 窒化物半導体超薄膜における構 造多形の成長と物性	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	高橋 正光	国立研究開発法人量子科 学技術研究開発機構・次世 代放射光施設整備開発セ ンター・グループリーダー	1
A01- 17-3 公	17H05324 自己形成ボイドを用いた応力緩 和による異種基板上への高品質 結晶成長技術の開発	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	出浦 桃子	東京大学・大学院工学系 研究科(工学部)・助教	1
A01- 17-4 公	17H05331 バルク SiC 結晶中の積層欠陥の アクティブ制御	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	原田 俊太	名古屋大学・未来材料・シ ステム研究所・講師	1
A01- 17-5 公	17H05329 機能性酸化物における非対称傾 斜歪場及び秩序・無秩序人工格子 による特異構造創出	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	田畑 仁	東京大学・大学院工学系 研究科 (工学部)・教授	1
A01- 17-6 公	17H05334 チタン酸カルシウム微結晶の特 異構造と光触媒活性の相関の解 明	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	吉田 寿雄	京都大学・人間・環境学研 究科・教授	1
A02- 17-1 公	17H05323 窒化ガリウム系ナノワイヤによ る縦型 FET の作製と評価	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	本久 順一	北海道大学・情報科学研究 科・教授	1
A02- 17-2 公	17H05325 分極効果の能動的作用による窒 化物半導体の伝導制御	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	谷川 智之	東北大学・金属材料研究 所・講師	1
A02- 17-3 公	17H05333 窒化物半導体への精密イオン注 入技術の開発と集積回路応用	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	関口 寛人	豊橋技術科学大学・工学 (系)研究科(研究院)・准教 授	1
A02- 17-4 公	17H05336 多層グラフェン薄膜の乱層構造 に起因する特異物性の研究	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	小林 慶裕	大阪大学・工学研究科・教 授	1
A02- 17-5 公	17H05326 完全結晶に存在する空間自由度 が創出する非調和性と熱電変換	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	谷垣 勝己	東北大学・材料科学高等研 究所・教授	1

	へ応用				
B01-17-1 公	17H05327 窒化物半導体における欠陥構造のマルチスケール解析	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	木口 賢紀	東北大学・金属材料研究所・准教授	1
B01-17-2 公	17H05338 テラヘルツ放射を用いた半導体特異構造が誘起する電荷・分極電場の計測	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	川山 巖	大阪大学・レーザ科学研究所・准教授	1
B01-17-3 公	17H05330 酸化物の特異構造におけるイオンダイナミクスの理論計算	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	渡邊 聡	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授	1
B01-17-4 公	17H05328 先端 X 線利用による回折結晶学の再構築	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	西堀 英治	筑波大学・数理物質系・教授	1
B02-17-1 公	17H05341 輻射・非輻射再結合の同時観測とそれに基づく特異構造の電子状態の理論モデル構築	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	山口 敦史	金沢工業大学・工学部・教授	1
B02-17-2 公	17H05339 特異構造を介してのエネルギー転換機構の理論	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	小田 将人	和歌山大学・システム工学部・講師	1
B02-17-3 公	17H0534 フェムト秒レーザー加工によるシリコンカーバイドへの単一光子源の作製	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	富田 卓朗	徳島大学・大学院理工学研究部(理工学域)・准教授	1
A01-19-1 公	19H04543 窒化物半導体極性制御特異構造の形成技術の深化と物性・機能の制御	令和元年度 ～ 令和 2 年度	片山 竜二	大阪大学・工学研究科・教授	1
A01-19-2 公	19H04534 自己形成ボイドを用いた応力緩和による異種基板上への高品質結晶成長技術の実現	令和元年度 ～ 令和 2 年度	出浦 桃子	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・助教	1
A01-19-3 公	19H04535 非対称性酸化物人工格子による空間反転対称性の破れと特異物性創出	令和元年度 ～ 令和 2 年度	田畑 仁	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授	1

A01-19-4 公	19H04549 GaN系LEDの転位に起因するVピットの形状操作と転位無効化メカニズムの解明	令和元年度 ～ 令和2年度	岡田 成仁	山口大学・大学院創成科学研究科・准教授	1
A01-19-5 公	19H04544 歪場・表面構造の自在制御による窒化物半導体の新奇物性創製	令和元年度 ～ 令和2年度	市川 修平	大阪大学・工学研究科・助教	1
A01-19-6 公	19H04541 一般化アンサンブル法を用いたGaN結晶成長の解析	令和元年度 ～ 令和2年度	洗平 昌晃	名古屋大学・未来材料・システム研究所・助教	1
A01-19-7 公	19H04548 結晶欠陥を生かすためのGaAs系混晶半導体の低温成長技術の確立	令和元年度 ～ 令和2年度	富永 依里子	広島大学・先進理工系科学研究科(先)・講師	1
A01-19-8 公	19H04550 有機ラジカルの分子内自由度を利用した特異構造の創成	令和元年度 ～ 令和2年度	細越 裕子	大阪府立大学・理学(系)研究科(研究院)・教授	1
A02-19-1 公	19H04528 GaNによる特異構造を利用した縦型FETの作製と高性能化に向けた評価技術の検討	令和元年度 ～ 令和2年度	本久 順一	北海道大学・情報科学研究院・教授	1
A02-19-2 公	19H04530 完全結晶に存在する空間自由度および乱れが創出する機能と応用	令和元年度 ～ 令和2年度	谷垣 勝己	東北大学・材料科学高等研究所・名誉教授	1
A02-19-3 公	19H04545 グラフェンの乱層構造に起因する特異物性の研究	令和元年度 ～ 令和2年度	小林 慶裕	大阪大学・工学研究科・教授	1
A02-19-4 公	19H04529 レーザープロセス技術を利用した新奇ランダムレーザー光源作製法の開発	令和元年度 ～ 令和2年度	藤原 英樹	北海学園大学・工学部・教授	1
A02-19-5 公	19H04538 チェノイソインジゴ骨格を基本とする近赤外光応答型単結晶トランジスタの創出	令和元年度 ～ 令和2年度	芦沢 実	東京工業大学・物質理工学院・助教	1
A02-19-6 公	19H04539 結晶不完全性の積極利用による高機能テラヘルツ帯機能素子	令和元年度 ～ 令和2年度	河野 行雄	東京工業大学・科学技術創成研究院・准教授	1

A02-19-7 公	19H04546 機械学習を応用した原子層物質チャンネル FET のシミュレーションと最適化設計	令和元年度 ～ 令和2年度	相馬 聡文	神戸大学・工学研究科・准教授	1
A02-19-8 公	19H04552 有機-無機界面の特異構造を利用した光蓄電素子の開発	令和元年度 ～ 令和2年度	石井 あゆみ	桐蔭横浜大学・工学研究科・特任講師	1
B01-19-1 公	19H04536 窒化物半導体の特異構造におけるフォノン挙動の理論解析	令和元年度 ～ 令和2年度	渡邊 聡	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授	1
B01-19-2 公	19H04532 多光子励起フォトルミネッセンスによる結晶欠陥の非侵襲観察	令和元年度 ～ 令和2年度	谷川 智之	大阪大学・工学研究科・准教授	1
B01-19-3 公	19H04531 窒化物および酸化半導体の局所電子状態・光学特性に及ぼす弾性場の影響	令和元年度 ～ 令和2年度	木口 賢紀	東北大学・金属材料研究所・准教授	1
B02-19-1 公	19H04553 輻射・非輻射再結合の同時観測とそれに基づく特異構造の電子状態の理論モデル構築	令和元年度 ～ 令和2年度	山口 敦史	金沢工業大学・工学部・教授	1
B02-19-2 公	19H04547 電子-格子相互作用による特異構造の移動・変形の理論	令和元年度 ～ 令和2年度	小田 将人	和歌山大学・システム工学部・講師	1
B02-19-3 公	19H04533 特異格子配列 InGaN ナノコラムを用いたプラズモニックナノ構造の作製と光機能制御	令和元年度 ～ 令和2年度	大音 隆男	山形大学・大学院理工学研究科・助教	1
B02-19-4 公	19H04537 特異表面ナノ構造体と酸化半導体メタマテリアルの光学制御	令和元年度 ～ 令和2年度	松井 裕章	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・准教授	1
B02-19-5 公	19H04540 単原子層物質のナノスケール特異構造制御による新奇光デバイスの創成	令和元年度 ～ 令和2年度	矢野 隆章	徳島大学・ポスト LED フォトニクス研究所・准教授	1
B02-19-6 公	19H04554 プロトン欠陥有機結晶のフォトン照射による機能開拓	令和元年度 ～ 令和2年度	小林 由佳	国立研究開発法人物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・主幹研究員	1
公募研究 計 43 件					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

研究領域全体に係る事項

3 交付決定額

年度	合計	直接経費	間接経費
平成 28 年度	295,360,000 円	227,200,000 円	68,160,000 円
平成 29 年度	268,710,000 円	206,700,000 円	62,010,000 円
平成 30 年度	270,660,000 円	208,200,000 円	62,460,000 円
令和元年度	276,120,000 円	212,400,000 円	63,720,000 円
令和 2 年度	276,640,000 円	212,800,000 円	63,840,000 円
合計	1,387,490,000 円	1,067,300,000 円	320,190,000 円

4 研究領域の目的及び概要

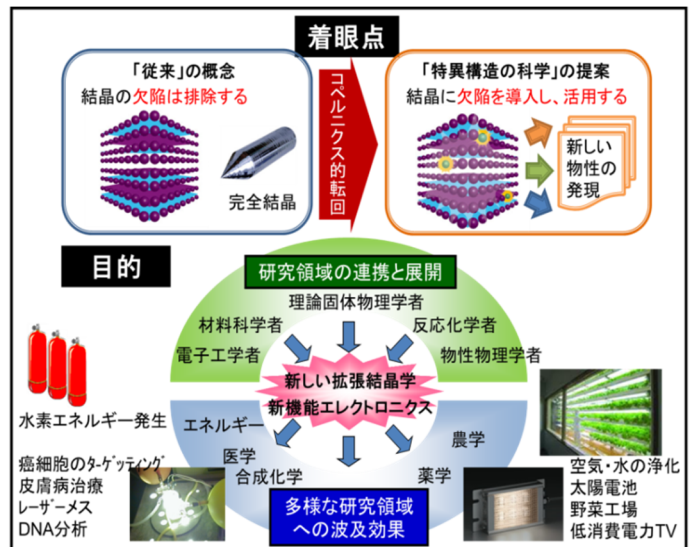
研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

単結晶は半導体エレクトロニクスや磁性素子、光学結晶など多種多様な分野におけるキー材料として今日の情報社会の重要な礎となっている。この単結晶材料とは原子が一定の規則をもって周期的に整列したもので、その構造の完全性が有用な物性を得るために極めて重要と考えられてきた。実際に Si や GaAs などの半導体結晶の場合、不純物や欠陥の極めて少ない大口径結晶の作製が実現され、半導体デバイスが作製されている。しかしながら、完全結晶のみに基盤をおくエレクトロニクスには、微細化技術の停滞とともに限界が顕在化している。

これまで周期性を乱す特異領域は排除すべき異物（欠陥）として捉えられてきた。一方で、この欠陥は完全結晶には見られない興味深い物性を示すことも近年明らかになってきた。ゆえに、我々は結晶中の構造の乱れ（特異領域）を排除するのではなく、完全性を乱す領域を意図的に導入した結晶を積極的に利用するという着想を得た。

結晶学は、Si や GaAs などの半導体や LiTaO₃ や水晶などの酸化物といった単結晶の成長と応用を対象とする広範な学問分野であるが、結晶の周期性を乱す特異構造は取り除かれるべきネガティブなものとして、その除去方法のみが熱心に研究されてきた。実際、これまでに特異領域が結晶物性に与える影響をポジティブに捉え積極的に利用しようという研究は殆ど見られない。

本領域の目的は、結晶中における構造的な特異性（結晶欠陥）が物性に及ぼす影響を解析・理解・制御することで、結晶欠陥を包含する拡張結晶学という新学問領域を構築し、さらに、それらを積極的に利用する新機能デバイスを開発することである。研究分野としては結晶工学と電子デバイス・電子機器を選択した。具体的には、本新学術領域研究では「不完全な特異領域を減らせば、結晶の物性が良くなり、作製されるデバイスの性能も向上する」というこれまでの常識を打ち破り、特異領域を制御して積極的に結晶に導入することによって新たな付加価値を創成することを提案する。我々は、このアイデアを実現する舞台（物質系）として、窒化物半導体に先ず注目した。窒化物半導体は、光・電子材料として高いポテンシャルを有していることに加え、結晶の対称性が比較的低いため、特異構造制御により、応力場や分極電場、ケミカルポテンシャルの揺らぎなどの多種多様な現象が生じ、それを積極的に制御・利用できると考えられる。これらを化学結合の立場に視点を移して考えると、この特異構造導入の本質は、周期的な化学結合の繰り返しを壊して異種結合を制御性良く導入することにある。この異種結合の導入をコントロールすることは、本提案の根幹をなす概念と位置付けられ、この異種結合の解析を通して特異構造を包含する新しい結晶学を創出し、そこから生み出されるエンジニアリングを駆使して次世代新機能エレクトロニクスが創出できるものと確信する。窒化物半導体の分野は長年、結晶品質の向上が巧く進まず、実用化が遅れていたが、1986年に本提案のメンバーである名古屋大学 赤崎グループによって提案された AlN 低温緩衝層の利用によって劇的に結晶性が改善された。それまでは、格子不整合を1%以下に抑えるのが常識であり、GaN とサファイアには13%以上の格子不整合があるため、当時の常識では高品質の結晶が得られないと信じられていた。しかし、上記のブレイクスルーによって「格子不整合が大きい系におけるエピタキシー」という新しい学術分野が創造され、この知見を基幹技術として、青色・緑色・白色 LED、パワートランジスタ等の素子の実用化と産業創出に至っている。基礎光物性的な観点からは、1996年頃に、我が国のグループから、ポテンシャル揺らぎによって局在中心が自然形成され、貫通転位があっても高効率発光し得るというモデルが提唱された。さらに、1997年に結晶の対称性・歪に起因したピエゾ・自発分極制御による発光再結合確率の増強の提案がなされるなど、結晶の特異構造における



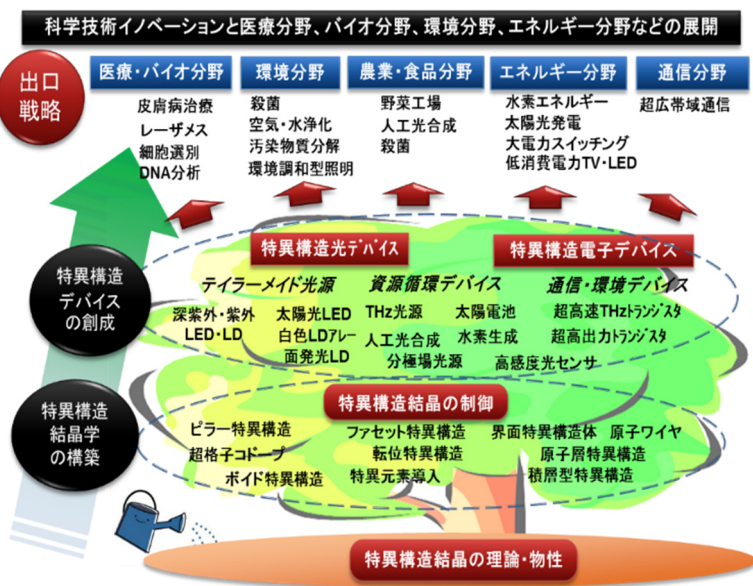
物理機構の解明とその応用への萌芽となった。

本領域では、この分野を基礎的モデルケースとして、思考回路を「欠陥の排除」から「特異領域の積極利用」に切り変えることによって、これまでの延長線上にない飛躍を目指している。我々が開拓する新しい学問を基礎とするイノベーションは医療、環境、計測といった広汎な科学技術分野の歴史的発展への起爆剤となる可能性を秘めており、その影響は極めて大きい。特に窒化物半導体結晶成長分野は日本が育んだオリジナル技術であり、国際的にも評価が高い。この日本生まれのこの技術の独創性が評価され日本人3人（赤崎教授、天野教授、中村教授）が2014年のノーベル物理学賞に輝いたことは記憶に新しいが、日本の窒化物研究者は結晶成長基礎から素子応用まで研究者の層が極めて厚く、国際的な競争力は高い。実際、世界中の研究者誰もが無理と思っていた窒化物半導体の青色LEDを独創的技術開発によって実現し、世界の電力消費の低減に大きく貢献していることは周知の事実である。また、青色LEDの実現後も、緑色LED、青紫色半導体レーザーや高周波GaNトランジスタなどの窒化物半導体デバイスが日本発で実用化されており、これらの成果は層の厚い窒化物半導体研究者による精力的な取り組みによるものである。

また、本提案では特異構造という概念を抽象化すること、さらにはその概念を酸化物や炭素系材料といった他の材料分野に広げていくことを計画研究に盛り込んでいる。本提案を遂行することによって、概念の整理や学術論文の投稿といったアウトプットのみならず、これまでに無い新しい機能を持った素子を世の中に供するという形で現実社会に役立つアウトプットも期待できる。これらの点から考えて、本領域の発展性は極めて高い。結晶工学において、高性能デバイスを実現するための金科玉条は完全結晶を志向することであった。その一方で、完全結晶を志向するがゆえにこれまでに実現されているデバイスは、材料が持つポテンシャルを十分に発揮されているとは言い難い。完全結晶という条件がなくなり、さらに欠陥を含む特異構造結晶が系統的に理解できれば、これまで発現できていなかった革新的なデバイスが実現可能となる。具体的には、窒化物半導体は紫外から可視全域、さらには赤外領域の光デバイスが実現可能であることは当然のこと、熱伝導率が高いこと・極めて大きなバンド不連続や内部電界を得ることが可能であり、従来の半導体材料は当然のことながら、高品質結晶を志向してきた窒化物半導体やそれに関連する材料の物性で実現できないようなハイパワーデバイスが実現できるようになる。すなわち、我々が開拓する新しい学問を基礎とするイノベーションは、医療・環境・計測・エネルギー創造/マネジメントといった広汎な科学技術分野の歴史的発展への起爆剤となる可能性を秘めており、その影響の大きさは計り知れない。本提案の共同研究や連携により、皮膚病治療や手術補助ロボットなどの医療、空気及び水の浄化システム等の環境衛生、薬品や繊維などの化学合成プラント、安全・安心のためのセキュリティ分析、野菜工場など幅広い分野への波及効果が期待できる。具体的には、LEDや高周波パワーデバイスなど次世代グリーンテクノロジー基盤として高い潜在能力を持つ窒化物半導体やSiC、ダイヤモンド、酸化物を主な研究対象として、新機能デバイスの実現を目指す。これらのデバイスは、農学、医学、薬学、合成化学など様々な分野への波及効果が期待できる。

本提案のもう一つの特徴は、我々の新しい概念の実社会への適用と貢献である。我々は製造プロセスのすべてを見直し、結晶特異構造の科学とそれにより創成される新機能エレクトロニクスを基にした低価格な高スループットプロセスを開発する。窒化物半導体結晶による次世代グリーンテクノロジー基盤の創出は、発展途上国も含めた全世界でエレクトロニクス革命を誘起することに貢献するものと確信している。

本領域では、このような学問的な背景のもと、「従来の結晶学における限界を打破することが可能な結晶の特異構造の学問体系を、経験的なパラメータ制御によるものから解析・評価により得た知見を基に体系化・学術化することを目指す。それによって、結晶の特異構造を能動的に活用し、次世代エレクトロニクスを創成する。



5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、審査結果の所見及び中間評価結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

(審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

採択時の審査結果の所見において指摘を受けた留意事項は以下の3点である。

(1) 「特異構造の結晶科学」の学理の構築には、各種欠陥の形成・変成に関する基礎研究ならびに第一原理計算等による理論研究をより強化する必要があると考えられる。公募研究の募集に際して検討すること。

(2) 多数の計画研究があることから、それらを領域としてまとめ、「特異構造の科学」の考え方の共通理解を図っていく上で、総括班における具体的な方策の検討とともに、領域代表者の強力なリーダーシップが求められる。

(3) 計画研究「計算科学によるヘテロボンドの理論的材料設計」については、積算根拠を明確にし、必要な経費を精査した上で研究を遂行すること。

これらの貴重なご意見に関して、領域メンバーで詳細に検討し、以下の様な対策をおこなった。

(1) 審査結果の所見において、領域内で理論・基礎物理分野の研究者の不足が指摘されていることを受け、B01グループでは、公募研究として、局所的な特異構造におけるイオンダイナミクスの理論計算を扱う研究提案を採択し、第一原理計算と機械学習(ニューラルネットワーク: NN)を組み合わせた計算・解析法の開発を推進した。本公募研究で扱っているイオンダイナミクスは、当領域が注目している特異構造の一つである、荷電状態にある点欠陥との類似性が高い。ここで得られた数々の知見は、点欠陥ベースの特異構造を扱っている領域内研究班の研究に波及し、特異構造の拡張結晶学を構築するにあたり、点欠陥や荷電粒子の挙動を体系化するうえでの理論的な下支えとなった。

また、特異構造の理論的解析を担当するA01-5(計画・伊藤)では、海外研究機関における理論研究者を研究協力者とする事で理論・基礎物理分野の充実を図った。具体的には、バンド構造解析に関してT. Suski教授、I. Gorczyca教授(ポーランド科学アカデミー高圧物理学研究所)、非平衡量子熱力学適用においてM. R. von Spakovsky教授(バージニア工科大学)、特異構造形成プロセスシミュレーションに関してA. Pimpinelli教授(ライス大学)と共同研究を実施すると共に、海外研究協力者の招聘、A01-5の若手研究者の派遣を通して、理論・基礎物理分野の研究強化を推進している。

また留意事項においては「各種欠陥の形成・変成に関する基礎研究ならびに第一原理計算等による理論研究をより強化する必要があると考えられる。」という指摘もいただいた。A01-5では欠陥を形成する特異構造場としての界面を対象に、界面エネルギーのみを分離して評価する第一原理新手法を開発し、実験グループの結果との定量的な比較を可能にしている。現在、同手法を、欠陥を含む極性反転機構解明に適用し、従来の界面構造モデルに代わる新たな界面構造モデルを提案しており、独自第一原理手法開発による理論と実験の橋渡しを通じ、基礎物理の強化を図っている。

(2) 指摘を受けたように、本領域には多数の研究者が参加することから、運営には「特異構造の科学」に関する考え方など全メンバーに共通の認識の理解を徹底することが肝要となる。文書での伝達による共通理解の醸成には限界があるので、直接多くのメンバーが対面できる機会を増やすことに努めている。具体的には、領域全体の方針決定および計画研究間での相互理解を深めるために、研究期間中に16回の総括班会議を開催した。また、領域研究者を集めたインフォーマルミーティング、キックオフミーティング、領域全体会議を開催し、公募研究を含む各研究グループ間における相互理解を促進させた。さらに、この分野で最大の参加者数を誇る応用物理学会学術講演会において特異構造結晶に関するシンポジウムを9回開催し、それぞれ250名を超える観衆を集め、領域内外での理解の増進に努めた。さらに、領域ホームページ(<http://tokui.org>)やニュースレター(全16号)を通じて、当領域の学術的背景や目的を分かりやすく領域内外に周知することに努めた。ホームページでは、原著論文、領域研究者の受賞報告、研究成果のメディア報道などを掲載し、本領域のアクティビティを領域の内外で共有した。また、連絡会の実施概要を報告できるシステムをホームページ上に構築し、共同研究活動をサポートした。また、2017年11月には紫外材料に関する国際ワークショップ(IWUMD2017)を主催し、合計268名の研究者が集まった(国内:146名、海外:122名)。また、2018年11月には窒化物半導体国際ワークショップ(IWN2018)

を主催した（参加者総数：約 1,300 名）。このように、領域代表者の指示の下、総括班を中心に領域メンバーが一体となり、共同研究や国際的活動を推進した。

（3）A01-5 班「計算科学によるヘテロボンドの理論的材料設計」においては各年度直接経費 1,040 万円の内、平成 28 年度は、計算科学の基盤となる電子計算機購入を中心に“物品費”として約 760 万円、成果発表、調査のための旅費として約 240 万円、学会参加費、論文掲載料等を含むその他として約 40 万円を、それぞれ執行した。平成 29 年度は、ソフトウェア等計算機関連を中心に物品費として約 290 万円、研究成果発表の増加に伴い旅費の割合を増加させ約 600 万円、その他としてソフトウェアライセンス等約 150 万円を、それぞれ執行した。

（中間評価結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況）

中間評価結果の所見において指摘を受けた留意事項は以下の 3 点である。

（1）本研究領域における特異構造の定義については結晶欠陥に限定して説明されているが、更に広い定義で捉えている計画研究も見受けられる。定義について研究領域内で再共有するとともに、拡張された結晶学としてどのようにまとめるのか検討いただきたい。

（2）採択時に指摘のあった理論研究の強化については、海外研究機関との共同研究と公募研究の採択で対応しており、今後その成果が出てくることが期待される。ただし、計画研究との連携の状況や貢献度については、評価報告書では余り明らかでない。理論の研究成果の研究領域内共有や実験チームとの交流・議論など有機的な連携が望まれる。

（3）論文発表等が個別の研究成果にとどまらないよう、研究領域内での連携、共同研究等を通して、領域の成果として「特異構造の科学」をまとめていただきたい。欠陥による機能を系統的に予測しつつ材料開発を進める手法を確立することが望ましい。

これらのご指摘に対し、領域終了時まで以下の対応を行った。

（1）総括班の会議やメンバー間の打ち合わせで、特異構造という概念の定義について深い議論を重ねた。その結果、空孔などの点欠陥や転位などの線欠陥、積層欠陥などの面欠陥、ポイドの様な 3 次元欠陥など、教科書に記載されている従来の狭義の結晶欠陥だけでなく、結晶の周期性の途切れる表面、ヘテロ界面なども含めて、統括的に取り扱っていくことが重要との認識に至った。大小の領域内の会議などでこの概念を皆で共有することに努め、現在ではメンバーの理解は深まっていると考える。

（2）理論グループの成果を実験グループが実際の研究で利用することを意識して、緊密な連携が実現できるような配慮のもと領域運営を推進した。例えば、これまで理論の研究成果はケミカルポテンシャルといった実験分野の研究者が利用しづらいパラメータを用いて表現されていたが、九州大学の理論グループ（計画研究 A01-5 研究分担者）は、圧力等の実験グループが利用しやすいパラメータを用いて理論解析の結果を表現する手法を開発した。また三重大学の理論グループ（計画研究 A01-5 研究代表者/研究分担者）は成長中の結晶表面の状態を統括的に理解する解析を行った。東京大学の理論グループ（公募研究 B01-17-3/B01-19-1）は、機械学習を用いて欠陥の荷電状態の変化が結晶に与える影響を大規模な材料系でも利用できる手法を開発した。これらの理論グループの成果は、領域全体会議や連絡会を通じて実験グループに共有され、実際に結晶成長実験グループが直面する課題の解決に利用され、特異構造を含有する結晶作製プロセスの精密制御や素子作製に多いに貢献した。

（3）本領域では幸にも各分野で多くの成果が得られ、優れた学術論文も多数出版された。さらに、領域内の共同研究が極めて活発に行われ、基礎理論からデバイス製造分野の研究者まで、発足前から比較すると 7.5 倍、件数にして 160 件以上の共同研究が行われた。共同研究プラットフォーム事業に代表される、総括班の活動によって領域内外での連携が活発になったことが、共同研究の飛躍的な増加をもたらしたと考えられる。さらに、海外との共同研究件数も増加しており、ヨーロッパ・アジア・アメリカと全世界との共同研究がバランス良く進展した。これらの多分野・多地域での連携を通して、多くの分野の研究者に特異構造が新しい機能出現の源泉となることが理解されつつある。これらを取りまとめて、理論・材料・分析・デバイス分野の研究者が協力して欠陥による機能出現を系統的に予測しつつ材料開発を進める手法の確立に努めている。

6 研究目的の達成度及び主な成果

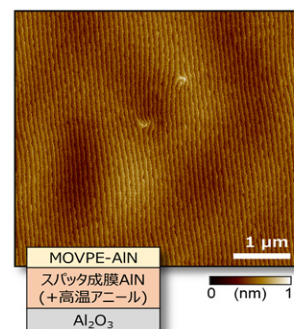
(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。(1)は研究項目ごと、(2)は研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

結晶成長およびその応用分野は研究者人口も多いが、これまで各自がばらばらに研究を進めていた。本領域の実施によって、理論、結晶成長、評価、素子応用の各分野の研究者が、特異構造の科学の解明と応用探索というテーマで協力し、欠陥を含有する結晶構造の基本物性やその制御方法、さらには、その素子応用まで多岐にわたる分野で統合的な知見を得、特異構造とその利用に関する基礎概念を確立した。以下に、研究項目ごとに主な成果を述べる。

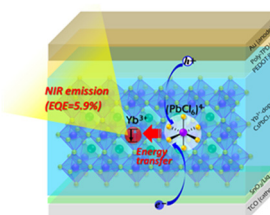
研究項目 A01：特異構造の作製と拡張結晶学の構築

計画研究では、非平衡でのパルス堆積法、平衡状態にもとづくトップダウン的手法、およびその場観察技術を活用したナノメール構造作製技術により、特異構造の作製および作製メカニズムの解明を予定していた。当初の目的は概ね予定通りに達成され、特異構造の作製技術および形成機構の理解が飛躍的に高まった。具体的には、プラズマ変調技術を開発して窒化物半導体に薄膜内へ高濃度の特異構造(点欠陥)を導入可能にし(A01-1)、格子不整合の大きいヘテロ接合を可能にする成膜法を確立し(A01-2)、マルチスケールナノ特異構造としての GaN ナノワイヤ注入励起型量子殻レーザによる室温パルス発振に成功(A01-3)した。また、III族セスキ酸化物においても特異構造としての準安定相の発現機構を解明してデバイス作製技術へと展開した(A01-4)。これら特異構造の作製メカニズムの理解には、理論的アプローチによる現実の成長条件下での表面・界面構造およびナノ構造に対する制御指針の提案(A01-05)が貢献した。また、学理の構築には海外研究機関における理論研究者との共同研究および公募研究による理論・基礎物理分野の採択(A01-19-6)が大きく寄与した。さらに、本研究領域の特異構造を提供することで、ナノビーム X 線回折による結晶学的効果の解明(B01-1)、同時分解カソードルミネッセンスによる AlN のバンド端励起子発光の偏光特性および発光起源の解明(B02-2)、陽電子消滅法による AlN における特異構造の同定(B01-2)が達成されている。一方、公募研究では窒化物半導体における新たな特異構造の作製技術の確立(A01-19-1, A01-19-2, A01-19-4, A01-19-5)およびデバイス作製がなされ、さらに窒化物半導体以外においても酸化物(A01-19-3)、Bi 系 III-V 族半導体(A01-19-7)、有機分子(A01-19-8)における各種特異構造の作製が達成された。これらの特異構造は量子情報通信およびスピントロニクスをはじめとする様々な分野への展開がなされており、特異構造ならびに拡張結晶学のさらなる飛躍へと繋がることを期待できる。



高結晶性AlN膜の作製を達成

計画研究では、窒化物半導体やダイヤモンドを主な対象として特異構造を制御/活用するためのデバイス科学を構築し、特異構造を活用した新規パワーデバイス、高周波通信デバイス、テラヘルツレーザーへ展開する予定であった。原子層堆積型 MOVPE 法を用いたナノラミネート膜成長技術を開発し、特異的な窒化物半導体周期的多層薄膜構造による誘電率の増大効果を世界で初めて実証した(A02-1)。これを基盤として $\text{TiO}_x/\text{AlO}_x$ ナノラミネート膜をゲート構造に応用したダイヤモンド MOSFET の動作実証に成功した。また、特異構造結晶の特性を活かし光取り出しに有利なナノ加工基板上 LED の実現、分極効果高濃度 p 型 AlGaIn の創成と高電流注入の実現、高光利得サブバンド構造の設計とテラヘルツ量子カスケードレーザの高出力化を達成した(A02-2)。さらに、種々のプロセスに曝された GaN 表面および絶縁膜界面に特有な電子捕獲準位を同定し、特異構造を含む異種材料界面の電子物性を明らかにした(A02-3)。これに公募研究が加わり、窒化物半導体を中心として、ナノワイヤ作製技術の確立(A02-17-1, A02-19-1)、高電子移動度トランジスタの高性能化(A02-17-2)、CMOS 集積化技術の確立(A02-17-3)、低しきい値ランダムレーザの実現(A02-19-4)が達成され、無機系薄膜材料では、乱層グラフェン成膜技術の確立(A02-17-4, A02-19-3)、原子層物質チャネル FET の最適化設計法の確立(A02-19-7)が達成された。さらに有機材料へと対象を展開し、特異構造を導入した有機分子の合成技術の開発(A02-19-5)と THz デバイス応用(A02-19-6)、有機-無機ヘテロ接合界面を活用した光増幅型受光素子(A02-19-



900nm以上で発光する薄膜型LED
⇒近赤外領域での高発光効率を達成

研究項目 A02：特異構造の作製と新規エレクトロニクス展開

計画研究では、窒化物半導体やダイヤモンドを主な対象として特異構造を制御/活用するためのデバイス科学を構築し、特異構造を活用した新規パワーデバイス、高周波通信デバイス、テラヘルツレーザーへ展開する予定であった。原子層堆積型 MOVPE 法を用いたナノラミネート膜成長技術を開発し、特異的な窒化物半導体周期的多層薄膜構造による誘電率の増大効果を世界で初めて実証した(A02-1)。これを基盤として $\text{TiO}_x/\text{AlO}_x$ ナノラミネート膜をゲート構造に応用したダイヤモンド MOSFET の動作実証に成功した。また、特異構造結晶の特性を活かし光取り出しに有利なナノ加工基板上 LED の実現、分極効果高濃度 p 型 AlGaIn の創成と高電流注入の実現、高光利得サブバンド構造の設計とテラヘルツ量子カスケードレーザの高出力化を達成した(A02-2)。さらに、種々のプロセスに曝された GaN 表面および絶縁膜界面に特有な電子捕獲準位を同定し、特異構造を含む異種材料界面の電子物性を明らかにした(A02-3)。これに公募研究が加わり、窒化物半導体を中心として、ナノワイヤ作製技術の確立(A02-17-1, A02-19-1)、高電子移動度トランジスタの高性能化(A02-17-2)、CMOS 集積化技術の確立(A02-17-3)、低しきい値ランダムレーザの実現(A02-19-4)が達成され、無機系薄膜材料では、乱層グラフェン成膜技術の確立(A02-17-4, A02-19-3)、原子層物質チャネル FET の最適化設計法の確立(A02-19-7)が達成された。さらに有機材料へと対象を展開し、特異構造を導入した有機分子の合成技術の開発(A02-19-5)と THz デバイス応用(A02-19-6)、有機-無機ヘテロ接合界面を活用した光増幅型受光素子(A02-19-

8), 両極性有機半導体電極の創出 (A02-17-5,A02-19-2) を実現した。計画研究と多彩な公募研究の相乗効果により, 特異構造の持つ可能性が無機材料から有機材料まで広く展開され, 多様な新機能デバイスの創出に繋がる基盤技術が確立された。

研究項目 B01 : 特異構造の局所結晶評価と欠陥物性

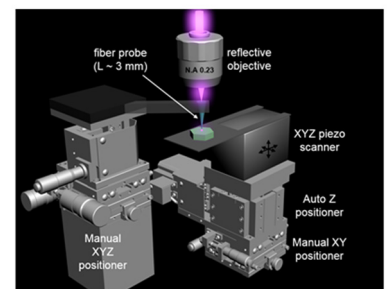
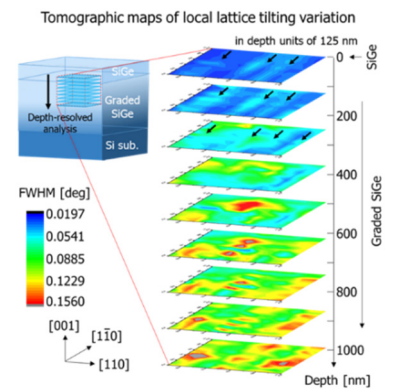
計画研究においては, 放射光 X 線回折, 陽電子消滅, フォノン分光等に基づく新規解析評価手法を独自に開発・駆使し, 各種半導体結晶中に存在する 0~3 次元の特異構造やデバイス内に作り込まれた特異構造に照準した欠陥物性の評価・解明を目的とした研究を遂行した。特異構造誘起の格子形態・歪分布, 特異構造の光学・電気的特性, キャリア-励起子-フォノン相互作用等の理解を深め, 特異構造の制御機構と機能を見出すことで当初の目的を概ね予定通り達成した。また, 拡張結晶学にかかる学理の構築と同時に, 結晶・デバイス性能の飛躍的向上に貢献することができた。具体的には, マルチスケール, 高空間分解能, 3 次元, 非破壊, 定量性を同時に達成する放射光 X 線回折による新たな構造解析技術を開発し, 各種顕微鏡観察との有機的併用によって, 窒化物半導体や IV 族半導体の結晶・デバイスにおける転位やナノボイド等の特徴抽出や発生機構の解明にあたり, 結晶性やデバイス特性に影響する特異構造の物性・機能を明らかにした。また, 窒化物半導体結晶の圧電物性に着目し, AlGaIn/GaN HEMT デバイス動作時の逆圧電効果が誘発する微細格子変形の直接観察を通して, 外部刺激に応答する特異構造ダイナミクスの新たな科学的知見を得た (B01-1)。陽電子消滅, 発光スペクトル解析の併用により, 0 次元特異構造の光学・電気的特性の評価解析手法を確立し, デバイスの作製・動作指針を提供することに成功した (B01-2)。さらに, フォノン物性の評価では, 2 波長のレーザを試料に同時照射するラマン散乱分光装置を立ち上げ, これにより格子不整欠陥が 3 次元的なフォノン輸送に及ぼす影響が解明された (B01-3)。

一方, 公募研究では, 多様な独自の解析手段を駆使して特異構造の物性や機能を多角的に評価・解明することを目指した。高分解能透過電子顕微鏡による窒化物・酸化物材料のマルチスケール解析 (B01-17-1, B01-19-3), テラヘルツ放射による界面ポテンシャルの超高感度計測 (B01-17-2) がなされ, 既存解析の限界を超え高度に精緻化された X 線結晶構造解析を用いた極弱化学結合の検出 (B01-17-4), 多光子励起 PL による GaN 中転位種の新分類 (B01-19-2) が可能となった。理論の側面からは第一原理計算と機械学習による高信頼・高速シミュレーション解析法が開発され, イオン移動挙動や特異構造がフォノン挙動・熱伝導に及ぼす影響が明らかにされた (B01-17-3, B01-19-1)。いずれも計画研究の内容を補完かつ補強する成果が得られており, 特異構造の拡張結晶学のさらなる発展に貢献している。

研究項目 B02 : 特異構造の光物性解明と機能性探索

計画研究では, 窒化物半導体における組成や膜厚の揺らぎによるポテンシャル揺らぎや欠陥など, 結晶の周期性を乱す「特異構造」において発現する物性を, ナノスコピックからマクロスコピックまで, さまざまな空間階層で評価することを目的としていた。計画研究は, 主に自然に形成された特異構造の光学物性に重点を置いていたが, 公募研究により, 人為的に制御された構造, 酸化物などの他材料, 第一原理計算に基づいた物性理解などをカバーすることで, 特異構造結晶の物性の系統的理解を目指した。これらの目標は, 以下の通りおおむね予定通り達成できた。紫外近接場光学顕微鏡(SNOM)が開発され, 従来の可視発光素子だけではなく紫外材料もナノメートルスケールで評価が可能になった(B02-1)。時間空間分解カソードルミネッセンス装置の高性能化により, A01 班で作製した特異構造も含め局所キャリアの緩和機構の解明が進んだ(B02-2)。局在励起子系の物性評価により, 励起子が関与した新しい物性発現機構の指針が得られた(B02-3)。また, 公募研究では, 非輻射過程を計測することによるキャリア再結合過程の検討(B02-19-1)や, 窒化物半導体ナノ構造のボトムアップ的な配置制御とプラズモン効果を合わせた発光増強を理論・実験両面からの実証(B02-19-3)が進み, 計画研究と相補的な研究展開がなされた。また, 欠陥の挙動の理論的な解析(B02-19-2)や, 酸化物における分極制御(B02-19-4), 二次元物質における局所歪が誘起する特異構造における電子物性制御(B02-19-3), 有機材料へのプロトン欠陥の導入による金属化(B02-19-6)など, 様々な材料の特異構造への展開が達成されている。また, プラットフォームなどを利用した A01, A02 班との交流も進められており, 特異構造の光物性評価および新機能性発現に関して飛躍的な進展がみられるとともに, 今後のさらなる発展の基盤が構築された。

半導体特異構造断層マッピング解析



構築したDUV-SNOM

(2) 本研究領域により得られた成果

研究項目 A01：特異構造の作製と拡張結晶学の構築

A01-1 (計画・藤岡)：パルス励起堆積法における非平衡化学反応を積極的に結晶成長学に展開し、半導体パワーデバイスやマイクロ LED ディスプレイ技術に応用可能であることを示した。特異構造導入に適したプラズマ変調技術を開発し、p 型 GaN において従来にない高濃度特異構造の導入に成功した。

A01-2 (計画・三宅)：スパッタ成膜法に高温アニールを組み合わせることで世界最高の結晶性を有する AlN 膜の作製に成功し、原子レベルでのその作製メカニズムを解明した。

A01-3 (計画・上山)：X 線・3 波長レーザーによるその場観察、顕微ラマン分光、AFM を活用して、半導体ナノ構造をベースとした特異構造の作製機構を明らかにした。GaN ナノワイヤ注入励起型量子殻レーザー室温パルス発振などの成果が得られ、マルチスケール特異構造の作製と作製機構の解明が達成できた。

A01-4 (計画・熊谷)：熱平衡および非熱平衡下における III 族セスキ酸化物半導体群(In₂O₃, Ga₂O₃, Al₂O₃)の成長を種々の基板(結晶)上で試み、非熱平衡下成長、基板結晶構造と原料分子構造による拘束が準安定相発現のキーパラメータであることを解明し、安定相 β-Ga₂O₃ 層の成長技術を確立した。

A01-5 (計画・伊藤)：特異構造を包括的に取り扱うための計算手法の開発および適用を行い、主に窒化物半導体を対象として、極性反転、ナノワイヤ形状、不純物原子制御、自然超格子形成、原子層物質形成、量子ドット形成における機構解明、新奇物性予測、創成指針の提案を行った。

A01-17-1 (公募・片山)：特異構造を使った深紫外第二高調波と量子もつれ光子対発生の実証を目指しており、これまでに GaN 極性反転構造の作製に成功し、その特性評価を行っている。

A01-17-2 (公募・高橋)：AlN 超薄膜や Ga 吸着層などの構造解析で新しい知見を得た。

A01-17-3 (公募・出浦)：自己形成ボイド構造の応用を目指し、核生成のメカニズムを解析した。

A01-17-4 (公募・原田)：SiC 中の積層欠陥を X 線トポグラフィーその場観察によって拡張・収縮挙動のモデル化を試み、積層欠陥の拡張・収縮の定式化やキャリア寿命の解析などに成功した。

A01-17-5 (公募・田畑)：機能性酸化物中に傾斜歪を導入することによって新しい双極子-スピン相互作用の創出を試み、ガーネット型鉄酸化物で空間反転対象性の破れを実現した。

A01-17-6 (公募・吉田)：光触媒活性と歪、酸素欠陥、不純物などの特異構造の関係の相関の解明を試み、希土類元素ドーパや微結晶の構造特性が光触媒活性に大きな影響を与えることを見出した。

A01-19-1 (公募・片山)：窒化物半導体の極性反転特異構造の形成技術を深化させ、エピタキシャルに極性反転させた AlN・GaN チャンネル導波路の形成と青紫色帯域の第二高調波発生の実証に成功した。

A01-19-2 (公募・出浦)：基板表面近傍に存在するボイドを用いた内部応力緩和により、表面凹凸ボイドつき SiC(111)/Si(111)基板に対して単一 c 軸配向の GaN 連続層 1 μm を成長することに成功した。

A01-19-3 (公募・田畑)：結晶学的に空間反転対称性を破った非対称人工格子による、双極子ゆらぎ誘起の新規磁気誘電体創成に挑戦し、磁気誘電カップリングに由来するエレクトロマグノン誘起に成功した。

A01-19-4 (公募・岡田)：GaN 上 InGaN-LED の転位起因 V ピットと InGaN 層が果たす役割を個別に評価することに成功し、これらの要素が LED の効率改善に寄与する割合を定量的に評価することに成功した。

A01-19-5 (公募・市川)：特異な不純物である希土類元素を GaN 結晶成長中に in-situ 添加する技術を応用し、マクロステップフリーのバイポーラ素子の作製に成功した。

A01-19-6 (公募・洗平)：GaN 結晶成長における原料ガスである TMG に対して、ニューラルネットワークを利用した経験的ポテンシャルの優位性を検証した。

A01-19-7 (公募・富永)：MBE 法による半導体基板上に Bi 系 III-V 族半導体を低温成長させる技術を確立し、GaAs(001) 基板上に成長した低温成長 GaAsBi の成長条件依存性や基礎物性を明らかにした。

A01-19-8 (公募・細越)：有機分子が単結合周りの回転自由度を持つことに着目して結晶中で分子配置の乱れを導入する分子設計を行い、有機ビラジカルを非磁性亜鉛に配位させた S=1/2 二次元ハニカム格子磁性体において量子磁気状態の発現を観測した。

研究項目 A02：特異構造の作製と新規エレクトロニクス展開

A02-1 (計画・小出)：[AlN(0.2nm)/GaN(0.04nm)] (250 対) のナノラミネート膜を成長させ、同程度膜厚の AlN 単層膜に比べて 3.6 倍の誘電率増加を観測し、III 族窒化物半導体のナノラミネート膜における誘電率の増大効果を世界で初めて実証した。さらに、海外との共同研究成果として TiO_x[xnm]/AlO_y[y nm] (x, y=1~2 nm) ナノラミネート膜をゲート構造に応用したダイヤモンド MOSFET を初めて試作し、動作に成功した。

A02-2 (計画・平山)：光取り出しに有利なナノ加工基板上 LED の実現、分極効果高濃度 p 型 AlGaIn の創成と高電流注入の実現、高光利得サブバンド構造の設計値と THz-QCL の高出力動作の実現、GaN 系

THz-QCL の光利得の理論実証などを行い、特異構造結晶の特性を利用した新機能デバイスの基礎的な実証を達成した。

A02-3 (計画・橋詰): 種々のプロセスに曝された GaN 表面に特有な電子捕獲準位を同定し、無極性 GaN 表面に形成した MOS 構造の界面特性を明らかにした。さらに、ハフニウムシリケート膜の採用と通電電極不要の光電気化学エッチングプロセスを適用することにより、MOS 型 GaN 高電子移動度トランジスタの動作安定性を飛躍的に向上させることを達成した。

A02-17-1 (公募・本久): ナノワイヤ形成のための成長条件最適化の方向性として、成長温度を上昇させると同時に Ga 供給量を増加させることが必要であることを明らかにし、目標としていた断面寸法 100nm 以下のナノワイヤを高密度(ナノワイヤ周期 200nm)および高充填率(25%)で形成することに成功した。

A02-17-2 (公募・谷川): N 極性 InGaN/AlGaIn/GaN の HEMT 構造を作製し、InGaIn 層と二次元電子ガス濃度の関係をホール効果測定により明らかにした。InN モル分率の増大に伴い、圧電分極が大きくなり界面の二次元電子ガス濃度が最大 2 倍程度に増加することを見出した。

A02-17-3 (公募・関口): p-GaN テンプレート基板にエンハンスメント型およびディプレッション型 MOSFET の作製を試み、設計通りのエンハンスメント型 MOSFET はノーマリオフ動作およびディプレッション型 MOSFET はノーマリオン動作が確認され、集積回路応用への可能性を得た。

A02-17-4 (公募・小林): 物性測定に適した乱層グラフェン形成法の確立を進め、スケーラブルなプロセスを確立した。

A02-17-5 (公募・谷垣): 無秩序構造を利用した両極性有機半導体の新しい電極の概念を適用して、有機半導体レーザ動作の可能性を示唆する実験結果を得た。

A02-19-1 (公募・本久): 断面寸法 100nm 以下のナノワイヤを高密度および高充填率(25%)で形成することに成功し、また 2 段階成長を導入することによって、縦型 FET 応用に必要な長さの GaN ナノワイヤを得ることに成功した。A-02-3 班との共同研究で最小断面寸法として 20nm の GaN ナノワイヤを得ることに成功した。

A02-19-2 (公募・谷垣): 無秩序構造を利用した両極性有機半導体電極に関して、新しい概念の電極を提案し電子と正孔の大電流注入を基盤として、高効率の有機半導体発光素子を実現した。

A02-19-3 (公募・小林): 通常が多層グラフェンとは全く異なる単層グラフェンの優れた特性と多層グラフェンの容量の大きさを兼ね備えた新規ナノ炭素材料を創成し、今後のスケーラブルな応用技術へ展開するための基盤を構築した。

A02-19-4 (公募・藤原): レーザ誘起表面凹凸作製法を用いたマクロな形状制御による低しきい値の紫外および近赤外ランダムレーザーの誘起に初めて成功し、本手法が様々な基板で簡便にランダムレーザーを作製できる有効な手法であることを示した。

A02-19-5 (公募・芦沢): チェノイソインジゴ骨格の両末端にトリイソプロキルアセチレン基を導入したモノマー分子の合成に成功し、比較的狭いエネルギーギャップを持つことを明らかにした。狭いエネルギーギャップに起因してホールと電子の両方を輸送するアンバイポーラ特性を示すことを明らかにした。

A02-19-6 (公募・河野): イオン化不純物、欠陥、有機物など、これまで無機物の完全結晶の観点からは好ましくないとされていた物質や構造を積極的に導入し、新たな光機能をもたすことを可能とした。

A02-19-7 (公募・相馬): 歪みグラフェン疑似磁場効果(ベクトルポテンシャル効果)を用いた FET 制御について、電子フォノン散乱を考慮した上でのデバイス特性を明らかにし、原子層新材料を用いた FET の高性能化を実現する設計指針を明らかにした。

A02-19-8 (公募・石井): 有機および無機結晶のヘテロ接合界面で生じるトラップによる電荷移動の障害を積極的に利用し、その特異界面に希土類錯体の光誘起レドックス特性を組み込みこむことで可視領域の光の増幅や蓄積を可能とする新しい素子構造を見出した。

研究項目 B01: 特異構造の局所結晶評価と欠陥物性

B01-1 (計画・酒井): ナノビーム X 線回折を利用することで、AlGaIn/GaN 高電子移動度トランジスタにおける逆圧電効果のナノ秒オーダーダイナミクス応答を初めて明らかにした。さらに、Pt ワイヤプロファイラを用いて AlN 厚膜のサブミクロン空間分解トモグラフィックイメージングに成功した。

B01-2 (計画・上殿): 陽電子消滅を用いた空孔型欠陥解析により、MBE 成長した GaN ナノワイヤの成長条件や焼鈍温度が点欠陥の形成メカニズムに与える影響を明らかにした。また、得られた知見を用いて、AlN や Ga₂O₃ を用いたデバイスを動作させることに成功した。

B01-3 (計画・石谷): 3 次元的フォノン輸送機構のイメージング計測を基に、GaInN/GaN ヘテロ界面における格子不整転位がフォノン輸送を抑制することを見出した。また、キャリア-フォノン相互作用では

フォノンの放出量が発光スペクトル線幅の増加と励起子寿命に変化を及ぼすことを明らかにした。

B01-17-1 (公募・木口): 電子顕微鏡マルチスケール解析により、窒化物 (GaN/InGaN MQW) 及び酸化物 (Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃, ε-(Ga,Fe)₂O₃) 極性材料中の特異構造の微細組織形成機構を明らかにした。

B01-17-2 (公募・川山): テラヘルツ放射を用いて High-k 多層膜誘起の Si 表面分極及び SiN_x/Si 界面ポテンシャルを評価し、特に後者では、0.1 程度の屈折率の小差が及ぼすポテンシャル変化の高感度検出に成功した。

B01-17-3 (公募・渡邊): 特異構造のイオンダイナミクスシミュレーションのために、第一原理計算と機械学習を組み合わせた計算・解析法を開発し、電場下での多元化合物のニューラルネット・ポテンシャル利用に目処をつけた。

B01-17-4 (公募・西堀): X 線回折結晶構造解析の精緻・高度化を進め、既存の解析の限界を超えた情報を Bragg 散乱強度変調から検出し、0.1 電子以下の電子が形成する極めて弱い化学結合の精密観測に成功した。

B01-19-1 (公募・渡邊): イオン伝導やフォノン挙動・熱伝導に関する物理量について、第一原理計算に匹敵する予測精度を持つ機械学習ポテンシャルを作成できることを明らかにし、GaN 中の N 原子空孔近傍でのフォノン挙動およびこの空孔による熱伝導特性の変化を解析することに成功した。

B01-19-2 (公募・谷川): 生体組織の非侵襲イメージングに用いられている多光子顕微鏡を半導体材料のイメージングに活用し、GaN の貫通転位をバーガースベクトル毎に識別・分類するプロセスの確立に成功した。

B01-19-3 (公募・木口): 透過型電子顕微鏡を利用したマルチスケール解析によって、窒化物 (GaN/InGaN MQW) 及び酸化物 (PbZr_xTi_{1-x}O₃, ε-(Ga,Fe)₂O₃) 極性材料の転位と局所弾性場の相互作用解析を通して微細組織の形成機構を明らかにした。

研究項目 B02: 特異構造の光物性解明と機能性探索

B02-1 (計画・川上): 可視域では In リッチ InGaN の近接場分光(SNOM)マッピングにより自己形成局在中心や非輻射再結合中心を詳細に評価し、緑色発光 InGaN 量子井戸の Droop 現象を解明した。深紫外域では、CW レーザシステムや近接場プローブ材料・技術を開発し、世界最短波長で分光可能な SNOM 開発に成功した。

B02-2 (計画・秩父): フェムト秒レーザ励起パルス光電子銃を、走査型電子顕微鏡に組み込み構築した時空間同時分解カソードルミネッセンス計測系を高性能化し、完全結晶や完全構造体では発現しない機能を呈する「特異構造」における局所キャリア緩和・発光機構の物理的モデルを構築した。

B02-3 (計画・山田): AlGaIn 混晶薄膜およびその量子井戸構造の励起子分子を対象とした実験的研究により、構造的不完全性に起因した不均一局在系における励起子多体効果の基礎物性を解明した。また、AlGaIn 量子井戸構造を対象とした誘導放出特性の評価により、光学利得の生成機構への励起子の寄与を初めて見出した。

B02-17-1 (公募・山口): 光音響・発光同時計測法を用い内部量子効率を正確に評価する手法を開発した [招待講演多数]。

B02-17-2 (公募・小田): 第一原理計算で GaN 中の Ga 欠陥の振動モードや電子準位を解析した [Jpn. J. Appl. Phys. **56**, 091001 (2017).]。

B02-17-3 (公募・富田): フェムト秒レーザを用いて Ni/SiC の界面拡散を誘起し特異構造を形成した [Appl. Phys. Express **11**, 165 レーザ(2018).]。

B02-19-1 (公募・山口): 非輻射再結合の直接観察により内部量子効率(IQE)を評価した。結晶の周期性の乱れから生じるバンド裾状態、局在状態を様々な光学手法で測定し、物性を説明する理論モデルを構築した。

B02-19-2 (公募・小田): 簡便な電子-格子相互作用算出方法を開発して Ga 空孔欠陥周辺の欠陥反応に適用し、その反応時定数を定量的に算出することに成功した。

B02-19-3 (公募・大音): 特異格子配列プラズモニック結晶を作製に成功し、赤色発光増強およびバンド構造による光機能制御を理論・実験の両方から確立した。

B02-19-4 (公募・松井): 非極性 ZnO (11-20) の分極方位制御及び表面ナノ構造 (特異ナノ構造) 制御を通じて、高い偏光性と光電機能を実現した。

B02-19-5 (公募・矢野): 金属ナノプローブ先端で単原子層化合物半導体表面に局所的に歪みやドーピングを誘起することによって、単原子層物質の電子物性が局所的に変調されることを実証した。

B02-19-6 (公募・小林): プロトン欠陥を分子内に取り入れた新規有機伝導体 (プロトン欠陥有機結晶) において、フォトン照射により最大で 4 桁も抵抗値が増大する現象など新しい光機能性を見出した。

7 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、ホームページ、主催シンポジウム、一般向けアウトリーチ活動等の状況。令和3年6月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。なお、雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding author には左に*印を付すこと。

<発表論文>

研究項目 A01：特異構造の作製と拡張結晶学の構築

A01-1 (計画・藤岡) 計 27 件

*K. Ueno, K. Shibahara, A. Kobayashi, *H. Fujioka, “Vertical p-type GaN Schottky barrier diodes with nearly ideal thermionic emission characteristics”, Applied Physics Letters 118, 022102 (2021).

A01-2 (計画・三宅) 計 65 件

*H. Miyake, CH. Lin, K. Tokoro, K. Hiramatsu, “Preparation of high-quality AlN on sapphire by high-temperature face-to-face annealing”, Journal of Crystal Growth 456, 155-159, (2016).

A01-3 (計画・上山) 計 85 件

*S. Kamiyama, W. Lu, T. Takeuchi, M. Iwaya, I. Akasaki, “Growth and Characterization of Core-Shell Structures Consisting of GaN Nanowire Core and GaInN/GaN Multi-Quantum Shell”, ECS Journal of Solid State Science and Technology 9 (1), 015007 (2019).

A01-4 (計画・熊谷) 計 11 件

*K. Goto, H. Nakahata, H. Murakami, and Y. Kumagai, “Temperature dependence of Ga₂O₃ growth by halide vapor phase epitaxy on sapphire and β-Ga₂O₃ substrates”, Appl. Phys. Lett. 117, 222101 (2020).

A01-5 (計画・伊藤) 計 63 件

*Y. Inatomi, Y. Kangawa, A. Pimpinelli, T. L. Einstein, “Kinetic-thermodynamic model for carbon incorporation during step-flow growth of GaN by metalorganic vapor phase epitaxy”, Physical Review Materials 3, 013401-1-8 (2019).

A01-17-1 (公募・片山) 計 1 件

*Y. Hayashi, R. Katayama, T. Akiyama, T. Ito, and H. Miyake, “Polarity inversion of aluminum nitride by direct wafer bonding”, Appl. Phys. Express 11, 031003-1-4 (2018).

A01-17-2 (公募・高橋) 計 2 件

*H. Suzuki, *F. Ishikawa, T. Sasaki and M. Takahashi, “Coherent strain evolution at the initial growth stage of AlN on SiC(0001) proved by in-situ synchrotron X-ray diffraction”, Appl. Phys. Express 13, 055501 (2020).

A01-17-4 (公募・原田) 計 3 件

*F. Fujie, S. Harada, K. Hanada, H. Suo, H. Koizumi, T. Kato, M. Tagawa, T. Ujihara, “Temperature dependence of double Shockley stacking fault behavior in nitrogen-doped 4H-SiC studied by in-situ synchrotron X-ray topography”, Acta Materialia 194, 387 (2020)

F. Fujie, S. Harada, H. Koizumi, K. Murayama, K. Hanada, M. Tagawa, and T. Ujihara, “Direct observation of stacking fault shrinkage in 4H-SiC at high temperatures by in-situ X-ray topography using monochromatic synchrotron radiation”, Appl. Phys. Lett. 113, 012101 (2018).

*M. Kato, S. Katahira, Y. Ichikawa, S. Harada, and T. Kimoto, “Observation of carrier recombination in single Shockley stacking faults and at partial dislocations in 4H-SiC”, J. Appl. Phys. 124, 095702 (2018).

A01-17-5 (公募・田畑) 計 5 件

*L. D. Anh, N. Okamoto, M. Seki, H. Tabata, *M. Tanaka, and *S. Ohya, “Hidden peculiar magnetic anisotropy at the interface in a ferromagnetic perovskite-oxide heterostructure”, Sci. Rep. 7, 8715-1-7 (2017).

A01-17-6 (公募・吉田) 計 1 件

A. Anzai, N. Fukuo, A. Yamamoto, *H. Yoshida, “Highly selective photocatalytic reduction of carbon dioxide with water over silver-loaded calcium titanate”, Catal. Commun. 100, 134-138 (2017).

A01-19-1 (公募・片山) 計 1 件

*T. Nambu, T. Nagata, S. Umeda, K. Shiomi, Y. Fujiwara, T. Hikosaka, A. Mannan, D. Bagsican, K. Serita, I. Kawayama, M. Tonouchi, M. Uemukai, T. Tanikawa and R. Katayama, “Monolithic microcavity second harmonic generation device using low birefringence paraelectric material without polarity-inverted structure”, Appl. Phys. Express 14, 061004 (2021).

A01-19-3 (公募・田畑) 計 19 件

B. Zhang, *M. Seki, H. Zhou, J. Chen, and H. Tabata, “InFeO₃ photoelectrode with two-dimensional superlattice for visible- and ultraviolet-light-driven water splitting”, APL Materials 8(5), 051107 (2020).

A01-19-4 (公募・岡田) 計 2 件

H. Itakura, T. Nomura, N. Arita, *N. Okada, C. M. Wetzel, T. P. Chow, and K. Tadamoto, “Effect of InGa_N/Ga_N

superlattice as underlayer on characteristics of AlGaIn/GaN HEMT”, AIP Advances 10, 025133 (2020).

A01-19-5 (公募・市川) 計 2 件

*S. Ichikawa, K. Shiomi, T. Morikawa, D. Timmerman, Y. Sasaki, J. Tatebayashi, and Y. Fujiwara, “Eu-doped GaN and InGaIn monolithically stacked full-color LEDs with a wide color gamut”, Appl. Phys. Express 14, 31008 (2021).

A01-19-6 (公募・洗平) 計 2 件

*M. Araidai, M. Itoh, M. Kurosawa, A. Ohta, and K. Shiraishi, “Hydrogen desorption from silicene and germanene crystals: Toward creation of free-standing monolayer silicene and germanene”, J. Appl. Phys. 128, 125301 (2020).

A01-19-7 (公募・富永) 計 2 件

*Y. Tominaga, S. Hirose, K. Hirayama, H. Morioka, N. Ikenaga, O. Ueda, “Crystalline quality of low-temperature-grown $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ coherently grown on InP(0 0 1) substrate”, Journal of Crystal Growth 544, 125703 (2020).

A01-19-8 (公募・細越) 計 3 件

*Y. Kono, T. Okabe, N. Uemoto, Y. Iwasaki, Y. Hosokoshi, S. Kittaka, T. Sakakibara, and *H. Yamaguchi, “Magnetic properties of a spin-1/2 honeycomb lattice antiferromagnet”, Phys. Rev. B 101(1), 014437/1-6 (2020).

研究項目 A02 : 特異構造の作製と新規エレクトロニクス展開

A02-1 (計画・小出) 計 40 件

*J-W Liu, O. Auciello, E. Obaldia, B. Da, Y. Koide, “Science and Technology of Integrated Super-High Dielectric Constant $\text{AlO}_x/\text{TiO}_y$ Nanolaminates/Diamond for MOS Capacitors and MOSFETs”, Carbon 172, 112-121 (2020).

A02-2 (計画・平山) 計 13 件

*N. Kamata, “Spectroscopy of Nonradiative Recombination Levels by Two-Wavelength Excited Photoluminescence”, Physica Status Solidi B 258, 2000370 (2021).

A02-3 (計画・橋詰) 計 29 件

*J. T. Asubar, *Z. Yatabe, *D. Gregusova and *T. Hashizume, “Controlling surface/interface states in GaN-based transistors: Surface model, insulated gate, and surface passivation”, J. Appl. Phys. 129, 121102 (2021).

A02-17-2 (公募・谷川) 計 4 件

*T. Tanikawa, K. Ohnishi, M. Kanoh, T. Mukai, and T. Matsuoka, “Three-dimensional imaging of threading dislocations in GaN crystals using two-photon excitation photoluminescence”, Appl. Phys. Express 11, 031004-1-4 (2018).

A02-17-3 (公募・関口) 計 1 件

*H. Okada, K. Miwa, T. Yokoyama, K. Yamane, A. Wakahara, H. Sekiguchi, “GaN-Based Monolithic Inverter Consisting of Enhancement- and Depletion-Mode MOSFETs by Si Ion Implantation”, Phys. Stat. Sol. A 217, 1900550 (2020).

A02-17-4 (公募・小林) 計 3 件

*R. Negishi, K. Yamamoto, H. Kitakawa, M. Fukumori, H. Tanaka, T. Ogawa and Y. Kobayashi, “Synthesis of very narrow multilayer graphene nanoribbon with turbostratic stacking”, Appl. Phys. Lett. 110, 201901-1-4 (2017).

A02-17-5 (公募・谷垣) 計 9 件

*T. Kanagasekaran, *H. Shimotani, R. Shimizu, T. Hitosugi, *K. Tanigaki, “A new electrode design for ambipolar injection in organic semiconductors”, Nature Communications 8, 999-1-7 (2017).

A02-19-2 (公募・谷垣) 計 11 件

J. Wu, J. Xu and *K. Tanigaki, “Site occupancy preference, electrical transport property and thermoelectric performance of $\text{Ba}_8\text{Cu}_{6-x}\text{Ge}_{40+x}$ single crystals grown by using different metal fluxes”, Mater. Adv. 1, 2953-2963 (2020).

A02-19-3 (公募・小林) 計 4 件

*R. Negishi, C. Wei, Y. Yao, Y. Ogawa, M. Akabori, Y. Kanai, K. Matsumoto, Y. Taniyasu, Y. Kobayashi, “Turbostratic Stacking Effect in Multilayer Graphene on the Electrical Transport Properties”, Phys. Status Solidi B. 257, 1900437 (2020).

A02-19-4 (公募・藤原) 計 8 件

*H. Fujiwara, T. Suzuki, C. Pin, *K. Sasaki, “Localized ZnO Growth on a Gold Nanoantenna by Plasmon-Assisted Hydrothermal Synthesis”, Nano. Lett. 20, 389-394 (2019).

A02-19-5 (公募・芦沢) 計 2 件

A. Kohara, T. Hasegawa, *M. Ashizawa, Y. Hayashi, S. Kawachi, H. Masunaga, N. Ohta, *H. Matsumoto, “Quinoidal bithienoisatin based semiconductors: Synthesis, characterization, and carrier transport property”, Nano Select 1, 334-345 (2020).

A02-19-6 (公募・河野) 計 3 件

D. Suzuki, T. Okamoto, J. Li, Y. Ito, T. Fujita, and *Y. Kawano, “Terahertz and Infrared Response Assisted by Heat Localization in Nanoporous Graphene”, Carbon 173, 403-409 (2021).

A02-19-7 (公募・相馬) 計 4 件

*S. Souma and M. Ogawa, “Acceleration of nonequilibrium Green's function simulation for nanoscale FETs by

applying convolutional neural network model”, IEICE Electronics Express 17, 20190739 (2020).

A02-19-8 (公募・石井) 計 4 件

*A. Ishii, T. Miyasaka, “Direct detection of circular polarized light in helical 1D perovskite-based photodiode”, Science Adv. 6, eabd3274 (2020).

研究項目 B01 : 特異構造の局所結晶評価と欠陥物性

B01-1 (計画・酒井) 計 6 件

A. Ueda, T. Hamachi, A. Okazaki, S. Takeuchi, T. Tohei, M. Imanishi, M. Imade, Y. Mori, and *A. Sakai, “Local piezoelectric property in Na-flux GaN bulk single crystals”, Journal of Applied Physics 128, 125110 (2020).

B01-2 (計画・上殿) 計 37 件

*A. Uedono, K. Shojiki, K. Uesugi, S. F. Chichibu, S. Ishibashi, M. Dickmann, W. Egger, C. Hugenschmidt, and H. Miyake, “Annealing behaviors of vacancy-type defects in AlN deposited by radio-frequency sputtering and metalorganic vapor phase epitaxy studied using monoenergetic positron beams”, J. Appl. Phys. 128, 085704(1-8) (2020).

B01-3 (計画・石谷) 計 13 件

*B. Ma, M. Tang, K. Ueno, A. Kobayashi, K. Morita, H. Fujioka, and *Y. Ishitani, “Combined infrared reflectance and Raman spectroscopy analysis of Si-doping limit of GaN”, Appl. Phys. Lett. 117, 192103 (2020).

B01-17-1 (公募・木口) 計 3 件

*T. Kiguchi, C. Fan, T. Shiraishi, T.J. Konno, “Strain-induced nanostructure of $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-PbTiO}_3$ on SrTiO_3 epitaxial thin films with low PbTiO_3 concentration”, Jpn. J. Appl. Phys. 56, 10PB12-1-7 (2017).

B01-17-2 (公募・川山) 計 7 件

*Y. Hotta, I. Kawayama, S. Miyake, I. Saiki, S. Nishi, K. Yamahara, K. Arafune, H. Yoshida, S. Satoh, N. Sawamoto, A. Ogura, A. Ito, H. Nakanishi, M. Tonouchi, and H. Tabata, “Control of dipole properties in high-k and SiO_2 stacks on Si substrates with tricolor superstructure editors-pick”, Appl. Phys. Lett. 113, 012103 (2018).

B01-17-3 (公募・渡邊) 計 2 件

W. Li, Y. Ando, and *S. Watanabe, “Cu diffusion in amorphous Ta_2O_5 studied with a simplified neural network potential”, J. Phys. Soc. Jpn. 86, 104004-1-7 (2017).

B01-17-4 (公募・西堀) 計 3 件

H. Kasai, K. Tolborg, M. Sist, J. Zhang, V. R. Hathwar, M. Ø. Filsø, S. Cenedese, K. Sugimoto, J. Overgaard, E. Nishibori, *B. B. Iversen, “X-ray electron density investigation of chemical bonding in van der Waals materials”, Nature Materials 17, 249-252 (2018).

B01-19-1 (公募・渡邊) 計 2 件

D. Yoo, K. Lee, W. Jeong, D. Lee, S. Watanabe, *S. Han, “Atomic energy mapping of neural network potential”, Phys. Rev. Mater. 3, 093802 (2019).

B01-19-2 (公募・谷川) 計 3 件

M. Tsukakoshi, *T. Tanikawa, T. Yamada, M. Imanishi, Y. Mori, M. Uemukai, and R. Katayama, “Identification of Burgers vectors of threading dislocations in freestanding GaN substrates via multiphoton-excitation photoluminescence mapping”, Appl. Phys. Express 14, 055504 (2021).

B01-19-3 (公募・木口) 計 4 件

*T. Kiguchi, T. Shimizu, T. Shiraishi, T.J. Konno, “Epitaxial growth mechanism of $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ thin films on SrTiO_3 by chemical solution deposition via self-organized seed layer”, J. Ceram. Soc. Jpn. 128, 501-511 (2020).

研究項目 B02 : 特異構造の光物性解明と機能性探索

B02-1 (計画・川上) 計 26 件

R. Ishii, M. Funato, *Y. Kawakami, “Pushing the limits of deep-ultraviolet scanning near-field optical microscopy”, APL Photonics 4, 070801 (2019).

B02-2 (計画・秩父) 計 21 件

*S. F. Chichibu, Y. Ishikawa, K. Hazu, and K. Furusawa, “Spatio-time-resolved cathodoluminescence studies of wide-bandgap group-III nitride semiconductors”, Japanese Journal of Applied Physics 59 (2), pp.020501 1-17 (2020).

B02-3 (計画・山田) 計 13 件

*H. Murotani, R. Tanabe, K. Hisanaga, A. Hamada, K. Beppu, N. Maeda, M. Ajmal Khan, M. Jo, H. Hirayama, and *Y. Yamada, “High internal quantum efficiency and optically pumped stimulated emission in AlGaIn-based UV-C multiple quantum wells”, Appl. Phys. Lett. 117, 162106 (2020).

B02-17-1 (公募・山口) 計 1 件

*A. A. Yamaguchi, K. Kawakami, N. Shimizu, Y. Takahashi, G. Kobayashi, T. Nakano, S. Sakai, Y. Kanitani, and S. Tomiya, “A novel method to measure absolute internal quantum efficiency in III-nitride semiconductors by simultaneous photo-acoustic and photoluminescence spectroscopy”, IEICE Transactions on Electronics E101-C, 527 (2018).

B02-17-2 (公募・小田) 計 1 件

T. Tsujio, *M. Oda, and Y. Shinozuka, “First-principles calculation of electron–phonon coupling at a Ga vacancy in GaN”, *Jpn. J. Appl. Phys.* 56, 091001-1-5 (2017).

B02-17-3 (公募・富田) 計 2 件

*T. Okada, T. Tomita, T. Ueki, T. Hashimoto, H. Kawakami, Y. Fuchikami, H. Hisazawa, and Y. Tanaka, “Low-temperature diffusion assisted by femtosecond laser-induced modifications at Ni/SiC interface”, *Appl. Phys. Express* 11, 016502-1-4 (2018).

B02-19-1 (公募・山口) 計 2 件

T. Fujita, S. Sakai, Y. Ikeda, *A. A. Yamaguchi, S. Kusanagi, Y. Kanitani, Y. Kudo, and S. Tomiya, “Experimental studies and model analysis on potential fluctuation in InGa_N quantum-well layers”, *Japanese Journal of Applied Physics* 59, 091003-1~5 (2020).

B02-19-2 (公募・小田) 計 3 件

*R. Furuki, M. Oda, and Y. Shinozuka, “Study on the initial growth mechanism of (ZnO)_{1-x}(InN)_x using first-principles calculation”, *Jpn. J. Appl. Phys.* 59, SGGK11 (2020).

B02-19-3 (公募・大音) 計 4 件

*T. Oto, M. Okamura, Y. Matsui, K. Motoyama, S. Ishizawa, R. Togashi, and K. Kishino, “Photonic band characterization in InGa_N/Ga_N nanocolumn arrays with triangular and honeycomb lattices by angle-resolved micro-photoluminescence measurements”, *Jpn. J. Appl. Phys.* 60, 060904 (2021).

B02-19-4 (公募・松井) 計 3 件

*H. Matsui and H. Tabata, “Assembled films of Sn-doped In₂O₃ plasmonic nanoparticles on high-permittivity substrates for thermal shielding”, *ACS Appl. Nano Mater.* 2, 2806 (2019).

B02-19-5 (公募・矢野) 計 2 件

T. Fujita, K. Yamaguchi, T. Yano, T. Tanaka, and *N. Takeyasu, “Comparison of hot carrier generation between self-assembled gold and silver nanoparticle arrays tailored to the same hybrid plasmon resonance”, *J. Appl. Phys.* 128, 123104 (2020).

B02-19-6 (公募・小林) 計 2 件

*T. Subramani, J. Chen, Y. Kobayashi, W. Jevasuwan, *N. Fukata, “Highly Air-Stable Solution-Processed and Low-Temperature Organic/Inorganic Nanostructure Hybrid Solar Cells”, *ACS Appl. Energy Mater.* 2, 2637 (2019).

<書籍>

- T. Ito, T. Akiyama, Y. Kangawa, T. Nakayama, K. Shiraishi, “Epitaxial Growth of III-Nitride Compounds: Computational Approach”, Springer Nature, in T. Matsuoka, Y. Kangawa (eds.), Springer Series in Materials Science, vol. 269 (2018).
- Y. Shinozuka, “Electron-Lattice Interactions in Semiconductors”, Jenny Stanford Publishing (2021).
- J. Motohisa and S. Hara, “Nanowire Field-Effect Transistors” (in Fundamental Properties of Semiconductor Nanowires), Springer Nature Singapore Pte Ltd (2020).

<ホームページ>

新学術領域研究「特異構造の結晶科学」 <http://tokui.org/>

<主催シンポジウム等の状況>

(主催)

- 第 68 回応用物理学会春季学術講演会 シンポジウム T-17 「特異構造の結晶科学～学術とエレクトロニクス展開～」, オンライン 2021 年 3 月 18 日, 参加者 170 名
- Virtual Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity, オンライン, 2021 年 2 月 1-3 日, 参加者 106 名
- 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム T-14 「窒化物半導体特異構造の科学～実験と理論の協奏的アプローチ：物性解明と制御～」, オンライン, 2020 年 9 月 8 日, 参加者 280 名
- 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会 シンポジウム T-23 「窒化物半導体特異構造の科学～新機能性の発現と電子・光デバイスへの展開～」, 北海道大学, 2019 年 9 月 18 日, 参加者 300 名
- 第 66 回応用物理学会春季学術講演会シンポジウム S18 「窒化物半導体特異構造の科学 ナノ物性評価技術の進展と物性制御」, 東京工業大学, 2019 年 3 月 9 日, 参加者 200 名
- International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN2018), 石川県立音楽堂/ANA クラウンプラザホテル金沢, 2018 年 11 月 11-16 日, 参加者 1,281 名
- 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム 「窒化物半導体特異構造の科学 ～窒化物プロセス技術の新展開～」, 名古屋国際会議場, 2018 年 9 月 18 日, 参加者 200 名
- OIST-Singularity Project Joint Workshop, 沖縄科学技術大学院大学, 2018 年 4 月 23 日, 参加者 60 名

- 第 65 回応用物理学会春季学術講演会シンポジウム「窒化物半導体特異構造の科学 ～格子欠陥はどこまで制御できるのか：先端評価と機能探索～」，早稲田大学，2018 年 3 月 19 日，参加者数 200 名
- International Workshop on UV Materials and Devices 2017 (IWUMD-2017)，九州大学百年講堂，2017 年 11 月 14-18 日，参加者 268 名
- 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム「窒化物半導体特異構造の科学 ～先進 GaN 電子デバイスのための結晶成長・評価・応用～」，福岡国際会議場，2017 年 9 月 6 日，参加者 300 名
- 第 64 回応用物理学会春季学術講演会シンポジウム「窒化物半導体特異構造の科学 ～発光再結合の解明と制御～」，パシフィコ横浜，2017 年 3 月 14 日，参加者 200 名
- 第 77 回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム「窒化物半導体特異構造の科学～新機能の発現と理解～」，朱鷺メッセ，2016 年 9 月 15 日，参加者 300 名
(共催)
- The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (CGCT-8)，オンライン，2021 年 3 月 1-4 日
- The 9th Asia-Pacific Workshop on Widegap Semiconductors (APWS2019)，沖縄科学技術大学院大学，2019 年 11 月 10-15 日
(協賛)
- 日本結晶成長学会ナノエピ分科会「第 12 回ナノ構造・エピタキシャル成長講演会」，オンライン，2020 年 7 月 30-31 日
- International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2019)，名古屋大学，2019 年 9 月 2-5 日
- 日本結晶成長学会 ナノ構造・エピタキシャル成長分科会 「2019 年講演会第 11 回 ナノ構造・エピタキシャル成長講演会」，広島大学，2019 年 6 月 13-15 日

<アウトリーチ活動>

広報誌・パンフレット：22 件

定期的にニュースレターを発行し，領域のアクティビティを発信。

イベント参加・出展：9 件

東京大学駒場リサーチキャンパス公開にて，一般参加者を対象に，本新学術領域の活動内容を紹介。(2017 年 6 月 2 日～3 日)

一般向け講演会・セミナー：17 件

茨城県，いばらぎ成長産業振興協会，つくば市，茨城県信用保証協会が共済する「めぶき FG ものづくり企業フォーラム 2017」にてパネル展示を実施。B01-2 (2017 年 2 月 22 日)

小中高生向け授業・実験・実習：16 件

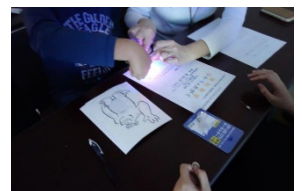
理科教室「ひかりのかがく」を，九州大学医学部百年講堂で実施。本教室は，同会場で開催された「紫外光材料および素子に関する国際会議 (IWUMD-2017)」にあわせて開催されたものである。(2017 年 11 月 14 日)

サイエンスカフェ・その他：8 件

スペインマヨルカ島で開催された Workshop on Frontier Photonic and Electronic Materials and Devices (2017 German-Japanese-Spanish Joint Workshop)に於いて海外研究者向けにアウトリーチ活動を行った。(2017 年 3 月 6 日)

プレスリリース

1. 大阪大学「日常使いできる殺菌消毒用光源へ一歩前進！—微細加工で超小型波長変換デバイスを実現—」2021 年 6 月 4 日
2. 大阪大学プレスリリース「使える次世代半導体の実現。GaN 半導体の結晶欠陥を非破壊で識別する技術」2021 年 4 月 28 日
3. 東京農工大学「β 型酸化ガリウム結晶の有機金属気相成長に成功！～次世代パワーデバイスによる脱炭素社会実現を加速～」2021 年 4 月 1 日
4. 東北大学「混ざり合わない混晶半導体の特異構造を利用した高効率光源実現に道—窒化アルミニウムインジウム超格子の自己組織化メカニズムを解明—」2020 年 11 月 5 日
5. 東北大学「省エネルギーに資する窒化ガリウム単結晶基板の量産法—次世代パワーエレクトロニクスの実現に道—」2020 年 6 月 1 日
6. 東北大学「公衆衛生や生活の質的向上に寄与！～深紫外発光素子の高効率動作メカニズムを解明～」2019 年 1 月 30 日
7. 理化学研究所「高温動作可能な高出力テラヘルツ量子カスケードレーザー—非平衡グリーン関数計算による新しいリーク電流の解析—」2019 年 2 月 15 日
8. 東北大学「非極性面窒化アルミニウムインジウム薄膜ナノ構造を用いた新しい深紫外線～緑色偏光光源」2016 年 11 月 24 日



小学生対象の理科教室



取材を受ける藤岡(領域代表)と三宅(A01-2)

8 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

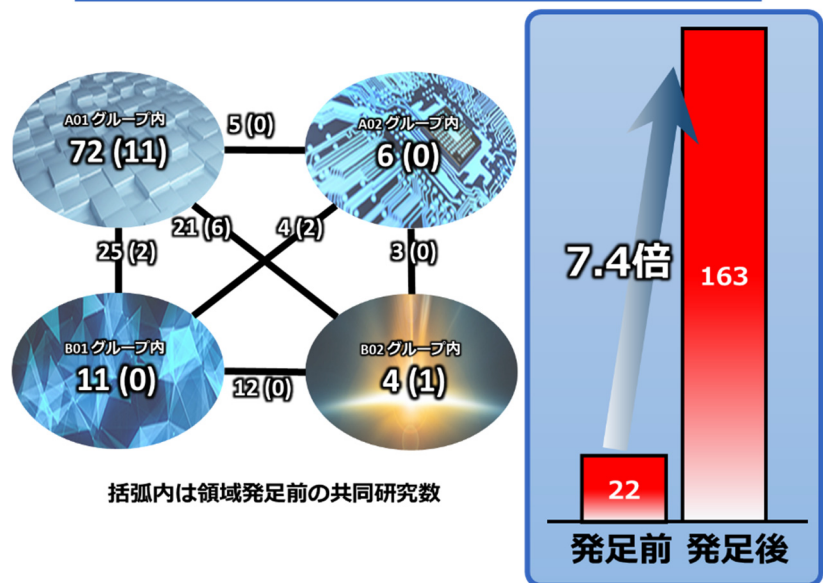
本領域では、結晶成長—デバイス—構造評価—物性評価のそれぞれで非常に優れた研究成果を発表しているが、さらに右図に示すように、領域内の共同研究が非常に活発に行われ、発足前から比較すると7.4倍、件数で160件以上の共同研究が行われている。各グループで特異構造に関する興味深い顕著なデータが多数でつつあり、その成果も目を見張るものがある。共同研究の飛躍的な推進の要因は、領域内グループ間や領域外との連携が進んで、研究は発展していることを意味している。

成長グループ A01 と、評価グループ B01, B02 やデバイスグループ A02 との共同研究数が顕著に多いことがわかる。これは A01 で作製された新しい特異構造の試料が B01, B02 で評価され A02 でデバイス化されていると解釈できる。この様な連携への取り組みは今後、各グループの研究の実験・理論解析の進展に伴い増加していくものと考えている。

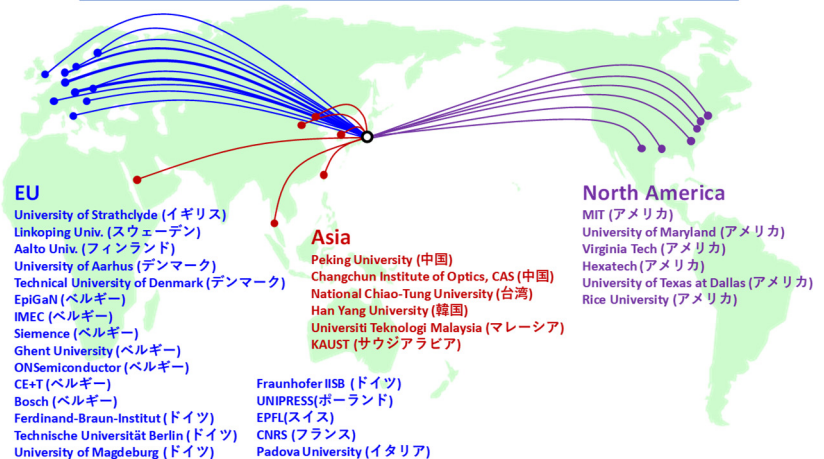
さらに、視点を海外に移し、海外との共同研究の進捗の様子を世界地図にマッピングしたものが下図である。ヨーロッパ・アジア・アメリカと全世界との共同研究がバランス良く始まっていることがわかる。これらの共同研究はサンプルの受け渡しをベースとするものが多いが、本領域では、若手研究者が実際に数ヶ月海外の研究グループに滞在し海外拠点形成を行う派遣事業も実施し、順調に進んでいる。「11若手研究者の育成に関する取組実績」で後述するように、若手研究者を2-3ヶ月の期間、海外に派遣した。現時点までの派遣先は、欧米諸国が多く、アジア地域の派遣数が少なく偏りがみえるが、短期の訪問や共同研究を通してアジア諸国との関係構築にも積極的に取り組んだ。世界に向けて若手を派遣するこの事業は今後も継続的に行っていくので本領域研究の終了後も世界中をカバーするネットワークの構築が期待できる。

なお、当初東京理科大学大川和宏が代表となって推進する予定であった A02-4「酸化物/窒化物ヘテロ特異構造を制御した酸化還元デバイスの開発」に関する研究は、大川研究代表者が本領域採択直後にサウジアラビアの KAUST (King Abdullah University of Science and Technology)に転出したために、廃止となり、その代わりに京都大学の吉田を研究代表者とする同分野の公募研究を採択し当該分野の補強が行われた。転出した大川らは、新学術領域研究への予算的な参加資格は失ったものの、廃止後も、欧州やアジア諸国と深い繋がりを持つ KAUST のネットワークを生かして側面から本領域の海外活動を支えた。実際、サウジアラビアと日本国内で本領域の共同の研究会を開催しており、海外展開の支えとなった。

領域内共同研究数（公募研究を含む）



海外共同研究数



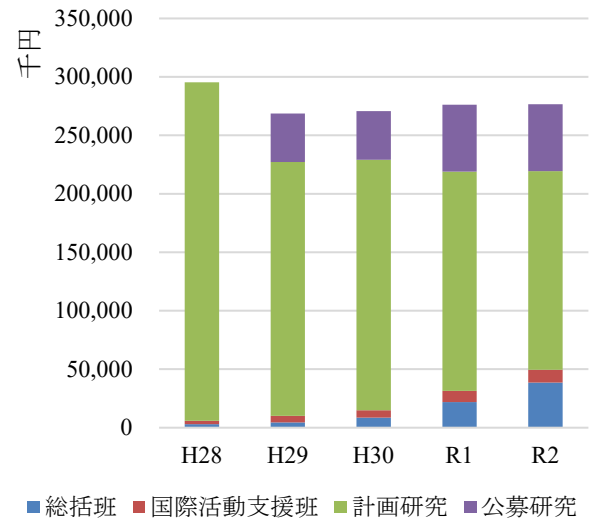
9 研究費の使用状況

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や効果的使用の工夫、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。また、領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究（総括班・国際活動支援班を含む。）がある場合は、その内容を記述すること。

<全体について>

右図に、総括班、国際活動支援班、計画研究、公募研究の年度ごとの研究費（直接経費と間接経費の合計）を示す。初年度の平成28年度は各計画研究において研究の基盤となる装置を積極的に導入した。平成29年度からは公募研究が追加され、以降、年度を追うごとに公募研究への配分経費を増加させた。

下表に本領域で導入した設備のうち主要なもの（単体で1,000万円以上のもの）をリスト化した。また、研究領域内で共同研究の実施実績も併せて記載した。本領域では、種々の特異構造を実験的に作製するA班および評価を担当するB班があるが、整備した装置によって多くの共同研究での活動実績があることを確認している。例えば、表には非掲載だが東京大学に整備した真空搬送装置を用いて作製した特異構造結晶は4つの領域内機関で活用された。三重大に整備した薄膜X線装置は、三重大で作製した特異構造結晶を7つの連携先に提供し密接な連携をはかることによって新たな学理の開拓がなされた。千葉大学に整備したラマン分光装置では、領域内外で作製された試料の特異構造物性評価がなされた。表に示されていない計画研究で導入された他の装置でも同様に多くの領域内共同利用がなされ適切に有効活用された。

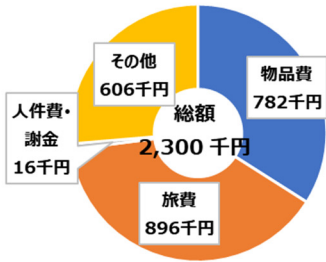


計画研究	装置名	数量	金額 (千円)	年度	機関	共同研究の活用実績
A01-3	ICP エッチング装置	1	30,996	平成 28	名大	名城大, 三重大, 東北大 東大, 物材機構
A02-1	ガスソース原子層気相成長装置	1	27,000		物材機構	東大, 北大
B01-3	ラマン分光装置	1	14,990		千葉大	東大, 三重大, 北大
B02-1	CW 単一周波数 2/4 倍波発生器	1	11,544		京大	山口大学, 三重大
A02-2	薄膜X線回折装置	1	15,120	平成 29	三重大	名大, 阪大, 物材機構 筑波大, 東北大 山口大, 名城大

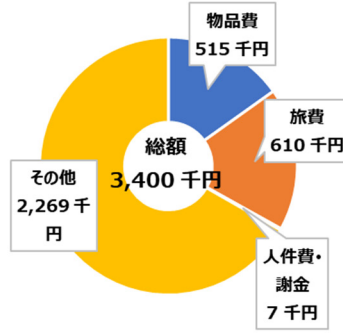
<総括班の活動について>

総括班の費目内訳を年度ごとに示す。平成30年度より共同研究プラットフォーム事業を開始し、三重大、京大、東大、阪大、物材機構、北大、筑波大などを拠点として、主に共同研究遂行に必要な実験消耗品を積極的に購入した。その結果、平成30年度より物品費支出の比率が増えており、共同研究プラットフォームが適切に運用されたと言える。平成30年度には国際会議 IWN2018 を主催し、若手研究者や学生の教育支援となるチュートリアルセッションを開催し、そのための費用を支出した。他にも、IWUMD2017 や CGCT-8 を主催し、学会予稿集印刷などに係る必要経費を総括班から支出した。

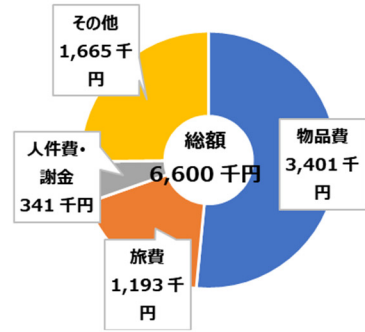
平成28年度使用内訳



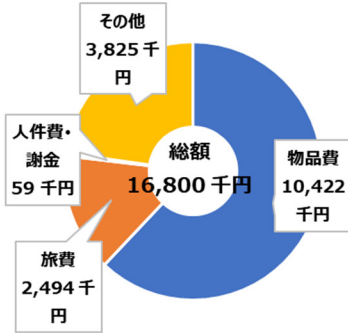
平成29年度使用内訳



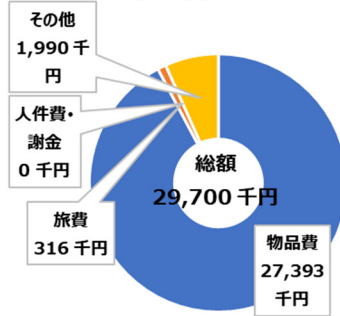
平成30年度使用内訳



令和元年度使用内訳



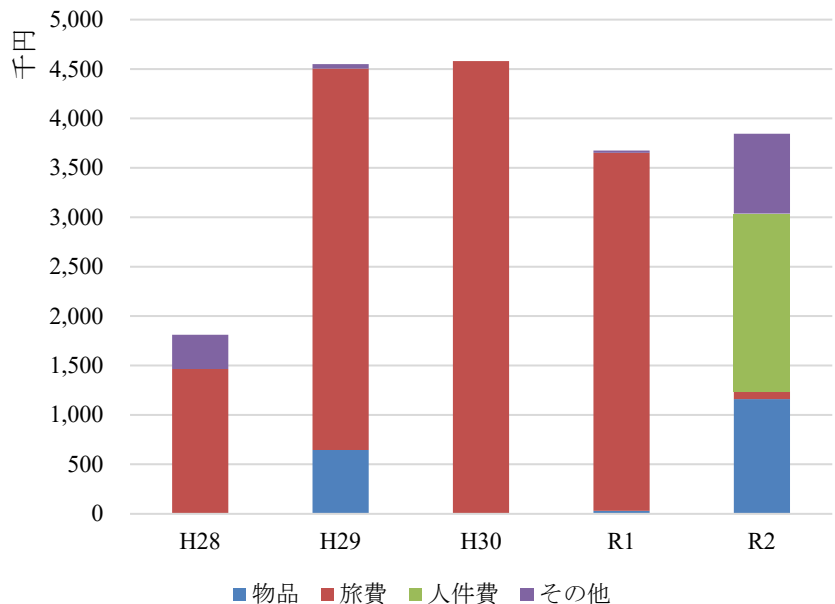
令和2年度使用内訳



<国際活動支援班の活動について>

国際活動支援班では若手研究者海外派遣事業を実施し、殆どの経費を領域内の若手研究者の海外旅費として支出した。「11 若手研究者の育成に関する取組実績」にて詳細を述べるが、派遣者数は 15 名(他に 5 名が新型コロナウイルス感染症拡大の影響で渡航時期延期中)で、旅費の総額は 1,360 万円であった。図に示すように、支出の殆どが若手研究者派遣のための旅費であることから、国際活動支援班が若手研究者育成と国際共同研究ネットワークの構築に成功していることがわかる。令和 2 年度は新型コロナウイルス感染症パンデミックにより、予定していた海外派遣が延期されたため、事業計画を変更し、総括班と連携してオンラインにて Virtual Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity (2020 年 2 月)を開催し、開催に係る経費を支出した。Virtual Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity では海外から 18 名の招待講演を招いた。この招待講演は若手研究者海外派遣事業で受入先ホストとなっていた方々であり、本事業がもたらした成果の一つと言える。

また、国際活動支援班は研究期間が令和 3 年度まで延長され、研究費の繰越が承認されている。この理由は、前述の通り新型コロナウイルス感染症拡大の影響で、若手研究者の海外派遣事業が中断され、令和 2 年度に旅費としての支出が困難であったためである。日本および海外各国での感染症が終息し、海外渡航が認められるようになれば、海外派遣事業を再開し、国際活動支援班から若手研究者の海外渡航旅費を支出する予定である。



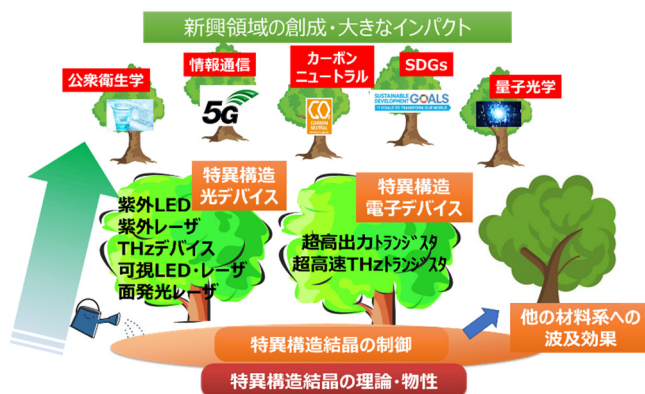
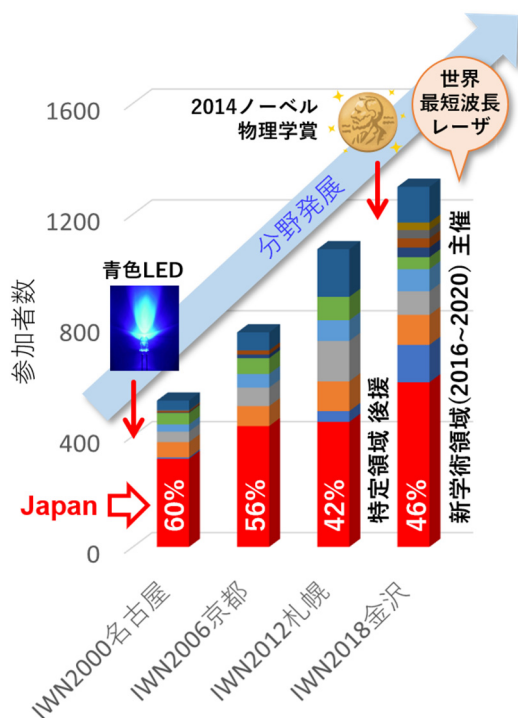
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果などについて、「革新的・創造的な学術研究の発展」の観点から、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、応募時に「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」、「②当該領域の各段の発展・飛躍的な展開を目指すもの」のどちらを選択したか、また、どの程度達成できたかを明確にすること。

本新学術領域の主たる学問領域である窒化物半導体分野では、結晶成長基礎からデバイス応用・評価まで研究者層が厚く国際的な競争力は極めて高い。実際、世界中の研究者の誰もが21世紀中の実現は不可能と考えていた青色LEDを独自の技術により開発し、世界の電力消費の低減に大きな貢献を成し遂げたことは周知の事実である。また、青色LEDの実現後も、緑色LED・青紫色半導体レーザや高周波GaNトランジスタなどの窒化物半導体デバイスが日本で実用化されている。これらの研究成果は我が国の層の厚い窒化物半導体研究者による精力的な取り組みによるものである。窒化物半導体分野では、科研費特定領域研究、科研費新学術領域研究を推進しており、新学術領域研究が主催のInternational Workshop on Nitride Semiconductors 2018 (IWN2018)は1,300人の参加者を集め、さらに全参加者数の46%を日本からの参加者が占めている。また、ここには掲載していないが、海外（ポーランド）で開催されたIWN2014においても日本からの参加者は全体の13%と、開催国ポーランドやドイツをはじめとしたヨーロッパ諸国をしのぎ世界最大の参加者数を占めており、我が国の当該学問分野の発展に極めて大きなインパクトを与えた。

一方、既存の窒化物半導体材料の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創生に大きな貢献をしている。具体的には、特異構造を窒化物半導体結晶以外の酸化物、ダイヤモンドをはじめとした多くの材料への拡張を進め、本領域が主催したThe 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technologyや若手研究者の受け入れ研究室の研究者および若手研究者によるVirtual Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularityを開催し、研究分野の拡張をはかった。結果として前者では205件の口頭発表が、後者では46件のオンラインでの発表が行われ、様々な材料分野の研究者が一同に介して議論が行われた。

さらに、特異構造光デバイスや特異構造電子デバイスは多くの新しい領域を形成しつつあり、多くの国家プロジェクトが生み出されようとしている。具体的には、GaN系トランジスタは「5G」と呼ばれる大容量情報通信分野の分野を切り開いている。また、GaN系トランジスタを用いた「パワーエレクトロニクス」はカーボンニュートラルに必要な要素となりつつある。さらに、特異構造光デバイスである、青色LEDよりも波長が短く光のエネルギーが大きい紫外発光素子は、従来は実現できないと考えられていたが、10%を超える高効率なデバイスが実現され、空気、水の浄化、汚染物質分解、さらにはコロナウイルスなどを不活化することが可能であることが見出され、公衆衛生学に対して多大な貢献を果たしている。その他、特異構造結晶を用いた波長変換素子は量子コンピュータ、量子光学、さらにはAIへの貢献も期待されており、SDGsの多くの新興・融合領域の創成を実現しつつあり、多くの波及効果が得られた。



11 若手研究者の育成に関する取組実績

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（令和3年3月末現在で39歳以下。研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組の実績について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

総括班と国際活動支援班を中心に、若手研究者の育成に関わる取り組みとして、主に以下の3点を実施した。

(1) 若手研究者海外派遣事業

平成29年度より領域内の若手研究者を海外の著名な研究者のもとへ数ヶ月の期間で派遣し、本領域と海外研究機関との共同研究ネットワークを構築するとともに、若手研究者のグローバルな視点形成と新規研究分野の開拓を支援した。図に示すように、研究期間内に15名の若手研究者の派遣を実施した。米国・欧州を中心に材料科学分野における先進的成果を数多く輩出する研究機関と密な連携が実現した。



令和2年度以降は、COVID-19の感染拡大により、海外派遣や対面での国際会議開催を行うことが困難になったが、COVID-19拡大直前まで活発に行っていた若手海外派遣事業でそれぞれの若手研究者が培った研究者ネットワークを活かして、若手研究者が運営の中心となり“Virtual Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity”を2021年2月1日から2月3日の3日間にわたりオンラインで開催した。本ワークショップの発表者は、若手海外派遣事業を利用した日本の研究機関に所属する若手研究者15名を中心とし、若手研究者の受入先のホストとなった欧米の研究者に中国および韓国などアジアの著名な研究者18名を招待講演者として招いた。時差の問題もある中、受入先研究者が若手研究者からの講演・参加の依頼を快諾してくれたため、充実したプログラムとなった。このことから海外派遣事業に参加した若手研究者がそれぞれの派遣先との関係を海外派遣終了後も密にし、各々の研究の発展の糧としていることが分かる。

(2) 国際会議と連携したスクールの開催および若手賞の設立

本領域の若手研究者が企画から運営を行った国際事業として、紫外材料に関する国際ワークショップ（IWUMD-2017）ではTutorialsを開催し、世界から若手研究者を中心に129名を集めた。また、その他の主催国際会議（IWN2018, CGCT-8）では、優れた発表をした若手研究者や学生を表彰するYoung Researcher Awardを設立し、関連分野の若手育成に貢献した。

	派遣先	
	国名	研究機関
H29年度実績	米国	マサチューセッツ工科大学
	ドイツ	ケムニッツ工科大学
	ポーランド	ポーランド科学アカデミー-高圧研究所
	ドイツ	University of Erlangen-Nürnberg
	イギリス	University College London
H30年度実績	イタリア	ミラノ-ビッコカ大学
	ドイツ	Paul Drude Institute
	イギリス	University of Strathclyde
	アメリカ	The University of Texas at Dallas
	アメリカ	コーネル大学
R1年度実績	フランス	モンペリエ第2大学
	ドイツ	ポール・ドルーデ固体エレクトロニクス研究所
	ドイツ	Otto von Guericke University Magdeburg
	ポーランド	ポーランド科学アカデミー-高圧研究所
	シンガポール	シンガポール国立大学

(3) 共同研究プラットフォームを活用しての若手研究者の受入れと研究交流

総括班が設置した共同研究プラットフォームを活用した、若手研究者の国内留学を支援した。若手研究者がプラットフォーム拠点に滞在することで、

研究設備の有効活用のみならず、将来に繋がる頭脳循環をおこなった。具体的には、結晶成長・プロセスなどの特異構造作製における共同研究プラットフォーム（三重大）に領域内の助教らを受け入れて共同研究を行った。また、光物性評価の共同研究プラットフォーム（京大）では、ナノ構造発光特性に関する共同研究を支援した。

12 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制（総括班評価者の氏名や所属等）や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

西永 頌（東京大学・名誉教授）

本新学術領域研究では、結晶に特異構造を形成し新しい電子・光物性を創出するとともにデバイスとして実現することを目的としている。コロナ災禍の中で様々な支障があったと思われるが順調に研究がすすめられ、領域代表者、A01～B02各グループ代表研究者の強いリーダーシップの下、計画研究、公募研究ともに大きな成果が得られたことをまず評価したい。本領域では、特異構造を形成する有力な方法として結晶成長を用いている。本領域としては結晶成長を単なる道具として利用し、特異構造を作成すれば目的は達成されるとも考えられるが、結晶成長はそれ自身科学を背後に持っており、これを追求することにより高度な特異構造を形成することが可能となる。本領域の研究の中で結晶成長のメカニズムに強く関係していると思われる実験的知見が多く得られたことは大きな成果である。まず、非平衡における成長原子の振る舞いであるが、平衡では起こりえない高濃度の欠陥導入がなされており、ステップ成長においてミクロな部分で非平衡プロセスが行われていることが示された。また、ナノロッドなど微細構造を形成する際、どのような面が出現しどのように成長するかなどの実験的知見も多く得られている。さらに、微傾斜面でのマクロステップの形成の振る舞いや不均一組成の形成など重要な知見が得られた。これらの豊富な実験的成果をもとに結晶成長のメカニズムと関連させ解析することにより、今後、結晶成長の理解がより一層進むものと期待される。

名西 徳之（立命館大学・理工学部・名誉教授）

結晶の完全性を追い求めるこれまでの方法論から、特異構造に機能を持たせるようなパラダイムシフトを目指した新学術領域の構築を目指した研究を多方面から展開し、目的に即した世界最高水準の重要な研究成果を多数得ている。例えば A01-1 グループでは、プラズマ変調技術を開発し、非平衡下で生成される膜中の多くの点欠陥を制御して、導入の避けられない補償欠陥を抑制しながら従来法では難しい低抵抗 p 型 GaN 層を実現している。また A01-2 グループでは、非平衡下で製膜した高濃度の欠陥を含むスパッタ膜を、その後高温でアニールすることにより、格子不整合率の大きなサファイア基板上に世界最高品質の AlN 膜を作成する技術を開発するなど、従来技術では得られない成果を次々と発表し、世界の注目を集めている。これらはいずれも非平衡状態で形成した欠陥を多く含む特異構造を過渡的に利用して、従来技術では得られない優れた特性を実現したものと解釈できる。

このようにして創出された多くの特異構造に対し、領域代表者らの卓越したリーダーシップにより、グループ間を跨いだ多くの共同研究を展開し、特異構造の制御や機能発現に対する科学的理解も大きく進展した。特異構造の3次元極微構造や光学的、電気的評価は、放射光 X 線マイクロビームや陽電子、フォノンなどを利用した新規性の高い評価技術により解析が進められた。特に B01 グループでは放射光 X 線ナノビームを利用した実時間直接観察により、電界印加後の GaN の格子変形に関するナノ秒オーダーのダイナミクスを解析し、興味深い科学的知見を得ている。非平衡状態を介しての反応ダイナミクスをナノ秒オーダーで理解する上で興味深い研究成果である。これらの成果は、低価格、高スループットの実用性の高い技術開発とも直結しており、社会的にも大きな貢献が期待できる。また公募研究からは、有機、無機、2次元物質、それらのヘテロ界面などの新規特異構造と創出される新機能に関し、新規性の高い興味深い成果も得ており、将来の発展が期待される。

吉川 明彦（千葉大学・工学研究科・名誉教授）

本新学術領域研究では、結晶の不完全性を特異構造として理解し、制御・活用する新しい結晶学を提案し、結晶成長などの作製、光・電子デバイス作製、結晶評価と欠陥物性、光物性解明と機能性探索の4分野に体系化して研究は進められ、世界的に高く注目される革新的な成果を多くあげた。これは領域代表の卓越したリーダーシップと総括班メンバーを中心とした研究者の努力の結果であり、敬意を表したい。また、領域研究組織内外での共同研究が積極的に進められ、シナジー効果が発揮されたことも特徴である。例えば、A01のAlNテンプレートは、A01内でデバイス用基板として活用され、B01、B02で物性評価などの研究が行われ、さらに国内外でも共同研究が進められた。光デバイスではAlGaInのUV-B,CレーザやGaInNナノワイヤ量子殻レーザの実現、世界最短波長で分光可能なSNOM開発、緑色発光する小型

偏光光源の創出は特筆に値する。また、B02 にフォーカスしても、近接場光学顕微鏡の紫外領域への展開、時空間分解 CL、AlGaIn の光物性評価、内部量子効率の定量評価、欠陥の理論解析、SiC への単一光子源の形成など多様な分野で研究が展開され、多くの論文等の発表がなされた。なお、多くの若手教員を海外派遣したことも本領域の特徴であり、領域代表のリーダーシップが発揮された大きな成果といえる。彼らの貴重な経験と交流実績は、彼ら自身には勿論のこと、我が国の将来にとっても極めて有益な資産となったといえる。そして、最終年度である 2020 年度は新型コロナ禍で研究制限され、多くの国際会議が中止または延期された中で、派遣先の研究機関から著名な研究者を招待講演者として開催されたオンラインワークショップ“Virtual Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity”は、領域成果の発信ばかりでなく、若手教員海外派遣の成果を顕在化する優れた試みであった。

以上のように、特異構造の新しい結晶学の構築とそのエレクトロニクス応用を目的に展開された本領域は、当初提案を超えるアウトカムが達成されたと評価できるので、領域終了後にも継続・発展されることを期待したい。

額 明伯（東京農工大学・特別招へい教授）

本新学術領域は結晶の非完全性と完全性が共存する特異構造の結晶科学を拡張結晶学と位置づけて、A01 結晶成長、A02 デバイス、B01 構造評価、B02 物性評価のグループの有機的な連携、さらには海外研究者との国際共同研究の推進により多くの研究成果を挙げているものと認められる。

例えば、結晶成長グループではフェルミレベル制御による高濃度点欠陥導入や、高温アニール AlN 結晶表面のクリーニングおよび成長中表面ポテンシャル制御による特異構造形成など、これまで予測されてきた成長モデルとは異なる機構での成長過程を明らかにしている点は本新学術領域研究における顕著な業績と評価する。B01 構造評価班においては、ナノビーム X 線回折・放射光 X 線回折を使ったユニークかつ新たな構造解析技術を開発し、各種顕微鏡観察との組み合わせにより、窒化物半導体や IV 族半導体の結晶・デバイスにおける転位やナノボイド等の特徴抽出や発生機構の解明し、結晶性やデバイス特性に影響する特異構造の物性・機能を明らかにした点は学術的に重要な知見を与えている。さらに、デバイス特性に大きな影響を与える 0 次元特異構造の空孔型欠陥の非破壊評価を可能とする陽電子消滅を、薄膜結晶、バルク結晶、ナノワイヤ等の多様かつ特異な構造へ適用し、点欠陥評価の手法としての応用範囲を拡張させた点も本研究を推進した意義として大きなものであると認められる。

公募研究については、第 1 期、第 2 期ともに適切な課題が選定され、計画研究の内容を補完かつ補強する成果が得られており、特異構造の拡張結晶学のさらなる発展に貢献したと評価できる。

岸野 克巳（上智大学・特任教授）

本研究プロジェクトでは、結晶中の特異構造を光・電子デバイスに応用し、既存デバイスの特性向上および新機能の発現を目指している。また、その開発を通じて特異構造の結晶科学に関する学理を構築することも目標としている。文部科学省の研究プロジェクトであるので学問分野の深化・拡張の観点から新たな学理構築が重要であると考え。共同研究論文を見ると、結晶成長学と電子工学、デバイス工学、物性物理学、光物性学との融合を中心とした連携が順調に進展している。また、若手研究者を欧州や米国の大学に多数派遣しており、学問分野の深化に向けた取り組みも進めている。活発な研究活動により、新たな学理「拡張結晶学」の構築が進んだと考える。一方で、今日の社会通念に照らして考えると社会実装に向けた方向性を示すこともやはり重要である。本プロジェクトの 4 つの計画研究の内、A02 班が社会実装に向けた革新的デバイス開発を進めている。A02-1 班では、[AlN(0.2nm)/GaIn(0.04nm)] (250 対) のナノラミネート膜を成長し、同程度膜厚の AlN 単層膜に比べて 3.6 倍の誘電率増加を観測している。窒化物半導体ナノラミネート膜における誘電率増大の世界初の実証であり、今後 FET のゲート酸化膜への適応が期待される。A02-2 班では、GaIn 系 THz-QCL の実現に向けて、非平衡グリーン関数を用いた信頼性の高い光利得解析を開発し、レーザ発振に必要な十分な光利得が室温でも得られる構造の設計指針を確立している。設計に基づき、202 K での THz-QCL 動作が確認されている。世界初の GaIn 系 THz-QCL 室温レーザ発振が期待できる状況にある。A02-3 班では、レーザプロセスを施した GaIn 表面を電気的手法で評価し、ハフニウムシリケート膜ゲートとした AlGaIn/GaIn 高電子移動度トランジスタにおいて極めて小さなしきい値電圧変動を見出した。GaIn 系電子デバイスの飛躍的な特性向上につながる結果である。また、公募研究延 43 件の四分の一以上の 13 件が A02 班に関するものであり、プロジェクトとして革新的デバイスの開発に力を入れている様子が伺えた。