

領域略称名：特異構造の科学
領域番号：2801

平成30年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る中間評価報告書

「特異構造の結晶科学」

(領域設定期間)

平成28年度～平成32年度

平成30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

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要	6
2. 研究の進展状況	8
3. 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	11
4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	13
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	16
6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	21
7. 若手研究者の育成に関する取組状況	23
8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	24
9. 総括班評価者による評価	25
10. 今後の研究領域の推進方策	27

研究組織 (総：総括班, 支：国際活動支援班, 計：総括班及び国際活動支援班以外の計画研究, 公：公募研究)

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
X00 総	16H06413 総括班	平成28年度～ 平成32年度	藤岡 洋	東京大学・生産技術研究所・教授	6
Y00 支	16K21722 国際活動支援班	平成28年度～ 平成32年度	藤岡 洋	東京大学・生産技術研究所・教授	2
A01 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～ 平成32年度	藤岡 洋	東京大学・生産技術研究所・教授	2
A01 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～ 平成32年度	三宅 秀人	三重大学・地域イノベーション学研究科・教授	3
A01 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～ 平成32年度	上山 智	名城大学・理工学部・教授	4
A01 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～ 平成32年度	熊谷 義直	東京農工大学・工学(系)研究科(研究院)・教授	4
A01 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～ 平成32年度	伊藤 智徳	三重大学・工学研究科・教授	5
A02 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～ 平成32年度	小出 康夫	国立研究開発法人物質・材料研究機構・技術開発・共用部門・部門長/理事	4
A02 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～ 平成32年度	平山 秀樹	国立研究開発法人理化学研究所・平山量子光素子研究室・主任研究員	2
A02 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～ 平成32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・教授	3

A02 計	16H06422 (廃止) 酸化物/窒化物へテロ特 異構造を制御した酸化還 元デバイスの開発	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 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 ～ 平成 32 年度	酒井 朗	大阪大学・基礎工学研究科・教 授	2
B01 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 ～ 平成 32 年度	上殿 明良	筑波大学・数理物質系・教授	5
B01 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 ～ 平成 32 年度	石谷 善博	千葉大学・大学院工学研究院・ 教授	3
B02 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	平成 28 年度 ～ 平成 32 年度	川上 養一	京都大学・工学研究科・教授	3
B02 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 ～ 平成 32 年度	秩父 重英	東北大学・多元物質科学研究 所・教授	2
B02 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 ～ 平成 32 年度	山田 陽一	山口大学・創成科学研究科・教 授	2
総括・支援・計画研究 計 17 件					
A01 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 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・関西光科学研究 所放射光科学研究センター・グ ループリーダー(定常)	1

A01 公	17H05324 自己形成ポイドを用いた 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 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 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 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 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 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 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 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 公	17H05326 完全結晶に存在する空間 自由度が創出する非調和 性と熱電変換へ応用	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
B01 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 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・レーザーエネルギー 学研究センター・准教授	1
B01 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・教授	1
B01 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 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 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 公	17H05340 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・准教授	1
公募研究 計 18 件					

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ以内）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

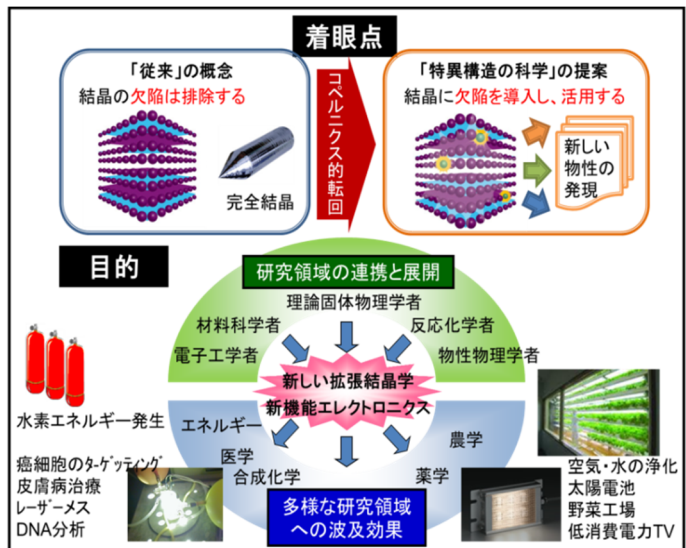
【要約】結晶は周期配列した原子から構成されており、その周期性を乱す領域は、従来欠陥として結晶中から無条件で排除されるべきものと考えられてきた。しかしながら、最近になり完全性を乱す領域（特異構造）を導入することの有用性が我が国の複数の研究グループから見出されはじめてきた。本提案では、これらの成果をさらに一歩進め特異構造を意図的に導入した結晶の物性を詳細に解析し、理解することにより、非完全性と完全性が共存する特異構造の結晶科学（拡張された結晶学）を構築する。さらに、これを積極的に利用することで現在のエレクトロニクス技術を超える特異構造を活用した新機能エレクトロニクスを創出する。具体的には、LEDや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結晶を主な研究対象として、従来の照明、通信、情報処理、電力制御応用に加え、創エネルギー、農学、医学、薬学、合成化学など様々な分野へ波及効果を及ぼす結晶科学と工学を創出する。以下より詳細に目的と概要を説明する。

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マテリアル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持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、窒化物半導体にまず注目した。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 AIN 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



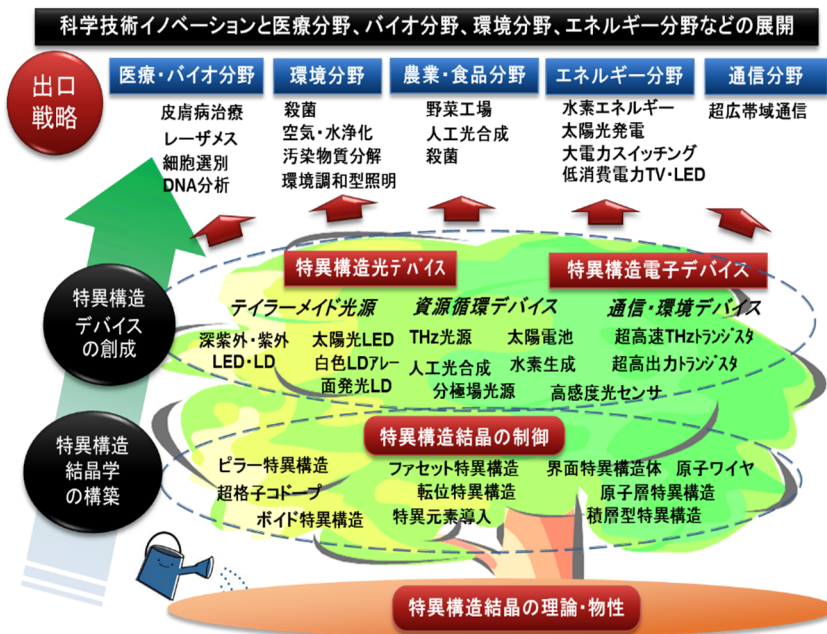
ートランジスタ等の素子の実用化と産業創出に至っている。基礎光物性的な観点からは、1996年頃に、我が国のグループから、ポテンシャル揺らぎによって局在中心が自然形成され、貫通転位があっても高効率発光し得るというモデルが提唱された。さらに、1997年に結晶の対称性・歪に起因したピエゾ・自発分極制御による発光再結合確率の増強の提案がなされるなど、結晶の特異構造における物理機構の解明とその応用への萌芽となった。

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。



2. 研究の進展状況【設定目的に照らし、研究項目又は計画研究ごとに整理する】（3ページ以内）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、現在までにどこまで研究が進展しているのか記述してください。また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らして、どのように発展したかについて研究項目又は計画研究ごとに記述してください。

以下に研究進捗状況を研究項目順に分類して述べる。尚、領域内の異なる研究資源を持つグループ間の共同研究によって実現し分類の難しい成果も多いが、1つのグループに代表させた。

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）では、高エネルギー粒子照射の時間ドメイン制御技術を用いて非平衡下で行う結晶成長の新技术を開発し、任意の形状の特異構造を結晶中に形成する技術の開発を目指している。平成29年度までに、非平衡条件を用いることによって従来手法よりも高濃度まで欠陥導入が可能になることを確認し、最も比抵抗値の低い GaN 結晶を得た。高エネルギー粒子の照射によって欠陥の擬フェルミレベルを変化させ欠陥の濃度を個別に制御できる可能性を見出した。A01-2（計画・三宅）では、平衡状態に近い条件下でのトップダウン法による特異構造の創製技術を開発している。意図的にファセット構造、ボイド、ヘテロ界面などの特異構造を導入して完全性が大きく破れた構造を持つ結晶の物性を解析することにより、結晶中の歪みや欠陥制御の実現をめざしている。平成29年度までに、ステップ構造の制御や結晶の応力制御、窒素プラズマ照射効果の確認、レーザー誘起周期構造の作製などに成功している。A01-3（計画・上山）では、成長中の窒化物半導体特異構造に X 線や多波長のレーザー光などのその場観察技術を用いることによって、その形成機構を解明し、新たな特異構造の作製・新領域エレクトロニクス創出に向け研究を進めている。平成29年度までに、X 線その場観察の有効性が確認され、窒化物系量子殻・ナノワイヤ結晶の結晶成長機構が徐々にわかってきた。またホモ接合 GaN 中のピット型特異構造の制御も可能になってきた。A01-4（計画・熊谷）では、非熱平衡下成長で出現する特異構造である準安定相の発現条件を解明し、それを利用した上位の特異構造（相混在面、相整合混晶）のボトムアップ創製技術を目指している。また、これを利用してヘテロ界面制御やバンドエンジニアリングの実現を図る。平成29年度までに、準安定相の発現相は非熱平衡下成長において基板結晶の格子引き込みと原料分子の拘束によって決定されることを解明した。A01-5（計画・伊藤）では、窒化物半導体を含む混晶系を中心に、成長条件を考慮した理論的検討にボンドエンジニアリング概念を適用することで、ヘテロボンドを生成する点欠陥（特異構造基）を活用した新奇特異構造形成予測とその支配因子の抽出を行う。さらに1次元以上の欠陥（転位、表面、界面、ナノ構造）を新奇特異構造形成の場（特異構造場）としてそこでの原子、電子の振る舞いの特異性から最終的な新奇特異構造創成に至る新たな物理を開拓する。平成29年度までに、実験グループとの連携研究促進を念頭に、計算手法開発に重きを置いて研究を進めた。具体的には、界面エネルギー計算手法の開発、マクロ成長様式理論、非平衡量子熱力学の結晶成長解析への初適用により、特異構造創成に関する以下の成果を挙げた。採択時の所見において「研究領域全体としての分野バランスについては、応用工学分野の研究者に対し、理論・基礎物理分野の研究者が不足していると思われるため、これを強化することが望まれる。」との指摘をいただいた。これに対応すべく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ている。また、公募研究を採択時に理論・基礎物理分野の研究者採択をし、この分野の強化をはかっている。公募研究では、片山（阪大）が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。また、高橋（量研）は SPring-8 を用いた窒化物特異構造の詳細評価を行っており、AlN 超薄膜や Ga 吸着層などの構造解析で新しい知見を得ている。出浦（東大）は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ている。原田（名大）は SiC 中の積層欠陥を X 線トポグラフィーその場観察を利用して解析し、その拡張・収縮挙動のモデル化を試みている。これまでに積層欠陥の拡張・収縮の定式化やキャリア寿命の解析などに成功している。田畑（東大）は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ている。これまでにガーネット型鉄酸化物に傾斜歪を導入し、空間反転対象性の破れを実現している。海外に転出した大川グループの担当した光触媒分野を補強する吉田（京大）は、光触媒活性と歪、酸素欠陥、不純物などの特異構造の相関解明を目指しており、これまでに、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ている。

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) では、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を進め、立上げた ALD-MOVPE 成長装置を使った TMAI と NH₃ を用いた AlN の ALD モード MOVPE 成長の可能性の確認と AlN 膜堆積温度の最適化を進めた。また酸化膜シングル層および酸化膜 2 層スタック層をそれぞれゲートに用いた 2 種類のダイヤモンド MOSFET をダイヤモンドオンチップ上で組み合わせる論理集積回路の作製を試みた。また米国テキサス大ダラス校との共同研究にも着手し、領域の若手研究者海外派遣事業を利用して共同分担者を先方に派遣して窒化物ナノラミネートゲート構造を作製する連携研究を開始した。A02-2 (計画・平山) では、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を展開し、Si 加工基板を用いることによってクラックの無い AlN の製膜を試み、AlN バッファ上に波長 325nm で発光する AlGaIn 量子井戸 UVA-LED を作製した。GaN 系 DMW-QCL の実現を目指し、Si/AlGaIn テンプレート上に GaN/AlGaIn-QCL 構造を MOCVD 法及び MBE 法で作製し、断面 TEM および X 線評価により微細構造を探索した。A02-3 (計画・橋詰) では、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を目指し、MOS 構造の詳細 CV 解析により、GaN 表面近傍に存在する離散的電子捕獲準位を界面準位と分離して解析できることを実証するとともに、m 面 GaN に形成した Al₂O₃-MOS 構造で極めて良好な界面特性を実現できることを見出した。また独自に開発した電気化学プロセスにより AlGaIn/GaN 異種構造の選択的エッチングを行い、平坦性・低損傷性に優れた結果を得るとともに、デバイスプロセスとして非常に有望であることを示した。

公募研究の本久 (北大) は、窒化ガリウム系ナノワイヤによる縦型 FET の作製と評価を進め、RF-MBE 法を用いた選択成長法による GaN ナノワイヤの形成に最適な成長条件の探索を行い、目標サイズのナノワイヤを形成することを試みた。谷川 (東北大) は、分極効果の能動的作用による窒化物半導体の伝導制御を進め、N 極性 InGaIn/AlGaIn/GaN 高電子移動度トランジスタ構造を作製し、InN モル分率と二次元電子ガス濃度の関係を調べた。関口 (豊橋技科大) は、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を進め、GaN の集積回路の実現に向けて、イオン注入法により導入される特異構造(欠陥構造)の理解と制御および回路の基本構成となるエンハンスメント(ノーマリオン)型/ディプレッション(ノーマリオフ)型 GaN-MOSFET を試みた。小林 (阪大) は、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を進め、大量製造可能な酸化グラフェンから反応性雰囲気での超高温処理により低欠陥・乱層・多層グラフェン薄膜を形成し、物性測定に適した乱層グラフェン形成法の確立を進めた。谷垣 (東北大) は、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へ応用を進め、有機半導体結晶における分子秩序の乱れによるエネルギー準位の広がりを利用して、両極性(電子と正孔)電極を創出すると共に、電界発光素子および電界効果型トランジスタ型有機半導体レーザ実現へ向けた研究を進めた。

研究項目 B01：特異構造の局所結晶評価と欠陥物性

計画研究では、ナノビーム X 線回折、陽電子消滅、フォノン分光等の独自手法を開発・駆使し、各種半導体結晶中の 1~3 次元の格子欠陥や、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評価を行っている。特異構造誘起の格子形態・歪分布、キャリア放出・捕獲を伴う光学・電気的特性、キャリア-励起子-フォノン相互作用等を多元・多角的に掌握し、特異構造の機能とその制御機構を見出すことで拡張結晶学の構築に寄与すると同時に、結晶・デバイス性能の飛躍的向上に結び付ける。

B01-1 (計画・酒井) のナノビーム X 線回折では、3 次元逆格子マッピング分析により AlN 中ナノボイドの格子面揺らぎ抑制効果を観測し、特異構造のポジティブ効果を実証すると同時に、組成傾斜バッファ層の深さ分解結晶性相互相関の定量解析ができる 3 次元断層マッピング法を新たに開発した。また、万能型の深さ分解評価法である回折ビームプロファイラ法を立ち上げ、今後の X 線検出機構の改良により断層マップ解析を実現する。特異構造の時間分解ダイナミクス計測では、ポンプ&プローブシステムを SPring-8 BL13XU に新設した。GaN 試料の予備評価で検出信号パルス重複の問題が生じたが、機器配置の改善で解決できる目処をつけた。B01-2 (計画・上殿) は陽電子消滅 γ 線ドップラー広がり・寿命測定により GaN-on-Si 等種々の GaN 結晶を評価した。光照射で励起された電子が空孔型欠陥で捕獲・放出される過程を観測した結果、キャリア捕獲機構や欠陥準位に関する詳しい知見が得られた。また、0.1 mm 以下陽電子ビーム形成装置や欠陥構造を多数含む(AlInGa)N 等多元系結晶での陽電子消滅シミュレーションの計算手法を改良した。また、光熱偏向分光法を新たに開発し、発光と非発光を網羅した過程で空孔型欠陥が担う役割やその機構を評価していく準備を整えた。AlN 中空孔型欠陥の特性も明らかにし、今後の共

同研究に展開するための有効なノウハウを蓄積した。B01-3（計画・石谷）のフォノン物性特異構造評価では、赤外分光において、金属/半導体ストライプ構造形成により表面・界面フォノンポラリトン測定に多様性が生じることを見出し、本評価法の拡張性を向上させた。また、2波長ラマン分光により、発熱状態のサブ μm 分解能 2次元マッピング解析に成功した。結晶欠陥におけるエネルギーダイナミクス解析も進め、エネルギー局在状態の減衰時間、励起子輻射寿命へのフォノン関与等の物性を解明し、深い準位での電子-欠陥格子系振動状態の解析評価に大きな進展が得られた。さらに、金属/半導体複合構造において、600K 以上で 8.5THz の狭帯域発光が起こることを発見し、フォノン場-輻射場の相互作用に関わる、予測を上回る新たな知見が得られた。

その他、上記の計画研究グループ間では、A01-2（三重大）から供給された同一サンプルに対するラウンドRobin方式の結晶・欠陥物性評価も進めた。一方、公募研究では、木口（東北大）によりマルチスケール電子顕微鏡観察により極性材料の微細組織形成機構が解明され、川山（阪大）によってテラヘルツ放射を用いて特異構造誘起の電荷・分極電場の超高感度計測がなされた。西堀（筑波大）の X線結晶構造解析では、精緻・高度化により極弱化学結合等、既存解析の限界を超えた精密観測に成功した。さらに、渡邊（東大）は特異構造におけるイオンダイナミクスの高信頼・高速シミュレーションのために、第一原理計算とニューラルネットワーク（NN）を組み合わせた計算・解析法を開発し、汎用性ある NN ポテンシャルの構築に成功した。

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、混晶不均一系および低次元不均一系などの構造不完全性に起因した結晶特異構造における励起子の再結合過程に着目し、近接場光学顕微鏡（SNOM）分光装置、時間空間同時分解カソードルミネッセンス（STRCL）分光装置、強励起フォトルミネッセンス（PL）分光装置などを駆使して、局在励起子や励起子分子などの素励起の輻射及び非輻射再結合過程を詳細に評価している。このことによって、高効率発光デバイス設計への指針を明らかにするとともに、新光機能性を探索している。

B02-1（計画・川上）の SNOM 分光では、InGaN 量子井戸の発光マッピングを行い、緑色発光の試料では強励起の際に発光局在中心から非発光中心への励起子拡散が起こっており、これが Droop 現象の起源であることを解明した。また、InGaN 系特異構造として新奇基板を用いた In リッチ InGaN 量子井戸、極性面フリー 3次元 InGaN 量子井戸、AlGaIn 系特異構造として AlGaIn 量子細線や深紫外多波長発光 3次元 AlGaIn 量子井戸構造などを試作し、新たな特異構造における光機能性を探索した。さらに、AlGaIn 系特異構造の物性解明のために、オプティクスの開発や励起光源開発など深紫外 SNOM 分光技術の確立に取り組んだ。B02-2（計画・秩父）の STRCL 分光では、光電子銃の光電子発生用 Au と SEM 鏡筒への光電子導入光学軸の調整を行い、時間分解能を失わずに試料直上への電子透過率を従前より高くすることに成功した。また、人為形成特異構造の発光特性の理解・制御のために、GaN の非輻射再結合中心（連携：B01-2 上殿、三菱ケミカルなど）、全方位 PL 法による物性評価（連携：A01-2 三宅、三菱ケミカル）、AlGaIn 量子井戸の発光効率改善（連携：A01-2 三宅、A01-5 平松）、非混和性 m 面 $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$ ナノ構造形成と電子線励起表示素子への応用（連携：B01-2 上殿、双葉電子（組織外））などの連携研究を推進した。B02-3（計画・山田）の強励起 PL 分光では、不均一系局在系における励起子多体効果の基礎物性評価として、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 混晶および $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子井戸構造に対して励起子共鳴と励起子分子の 2光子共鳴を観測し、励起子分子結合エネルギーを導出するとともに、高温領域における $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 量子井戸構造の励起子多体効果の挙動を評価した。また、輻射・非輻射再結合ダイナミクスと内部量子効率の評価として、非輻射再結合過程の飽和を反映した励起子レート方程式を用いた解析を行い、発光内部量子効率の温度依存性や励起強度依存性をフィッティングする手法を開発した。

その他、上記の計画研究では、励起子の非輻射再結合中心への捕獲過程を研究する上で、配位座標モデルを用いた理論への理解が重要であり、実験的なサイドからも、発光の内部量子効率を精密に評価するための手法について統一的な理解を得ることが求められていた。そこで、これら二つのテーマについて領域内研究会を開催し緊密な議論を重ねた。一方、公募研究では、山口（金沢工大）が発光再結合と非発光再結合の機構を解明するため、この 2つの過程を同時計測する光音響・発光同時計測法を開発した。また、小田（和歌山大）は第一原理計算によって GaN 中の最も基本的な特異構造である点欠陥を対象として、電子状態解析、および振動モード解析を行った。さらに、富田（徳島大）によってフェムト秒レーザによる特異構造の制御のための装置開発が行われた。

3. 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（2 ページ以内）

審査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、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

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た。これまでに、イオンダイナミクスのシミュレーション手法においては信頼性と高速性が不十分であり、本公募研究は、この問題を解決することを目的に、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・解析法の開発を担っている。現時点において、多元化合物としてのアモルファスリン酸リチウムをモデルに、その中におけるイオン挙動を記述できる NN ポテンシャルを構築した。その結果、約 100 原子スーパーセルにおいて、約 5 meV/atom の誤差で密度汎関数法計算の結果を再現できることを確認し、約 1000 原子セルではリチウムイオンの拡散係数の温度依存性から求まる活性化エネルギー値が、既報告の実験値と非常に良い一致を見せている。本手法による NN ポテンシャルの導出は、他の物質系にも適用でき、その中では異なる密度や組成でも扱える汎用性を有することも確認済みである。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する効果が大きいだけでなく、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る成果である。また、本公募研究では、今後、電場化でのイオン挙動やフォノン特性の記述も視野に入れた NN ポテンシャルの構築を図る計画となっており、特異構造を作り込んだ種々の素子の背景にあるデバイス物理に関わる学理構築へも門戸を開いている。今後、本公募研究を核の一つとして、結晶成長、欠陥導入と構造物性評価、新規エレクトロニクスデバイス創製の研究者との戦略的な連携促進を領域全体で進めていく。

また、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ている。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し、基礎物理の強化を図っている。

(2) 指摘を受けたように、当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、これまでに8回の総括班会議を開催した。(第1回：大阪，2016年7月，第2回：東京，2016年11月，第3回：名古屋，2017年1月，第4回：東京，2017年4月，第5回：豊橋，2017年7月，第6回：福岡，2017年11月，第7回：東京，2018年3月，第8回：那覇，2018年4月) また、領域研究者を集めたインフォーマルミーティング(2016年9月)，キックオフミーティング(2016年11月)を開催し、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4回開催し(2016年9月，2017年3月，2017年9月，2018年3月)，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。2017年4月には公募研究18件採択直後に「公募研究連絡会」を開催し、迅速に計画研究と公募研究の連携および共通理解の醸成に着手した。それ以降定期的な領域全体会議(2017年7月，2018年4月)を通じて、計画研究と公募研究の研究者間の理解が進み連携がより強固なものとなっている。(公募研究を含む共同研究実績：14件) さらに、領域ホームページ(<http://tokui.org>)やニュースレター(第6号まで発行)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ている。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ている。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ている(現在までの連絡会開催実績：69回)。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)の主催を予定しており(予定参加者数：1,100名程度)、運営方法やプログラム編成等の準備を進めている。このようなメンバーが顔を突き合わせて議論し理解を深める機会の設定を続けていく。今後とも共通理解の構築に努めていき、新しい結晶学の構築に向かって進んでいく。

(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1040万円の内、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。平成30年度以降は、研究推進のフロントに立つ大学院生等の若手研究者の参加を推進するため、国内・外国旅費を多く計上(当初計画の約700万円)するとともに、メモリ増設、ハードディスク拡張を中心に“物品費”として約160-200万円、“その他”として、理論研究強化の一環として海外研究協力者招聘、大学院生の海外研究協力機関への派遣を含めて平成30年度約180万円、平成31年度以降140万円を計上している。

4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）[研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する]

（3 ページ以内）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

以下に主な研究成果を研究項目順に分類して箇条書きで述べる。尚、研究資源を持つグループ間の共同研究によって初めて実現した分類が難しい成果も多いが、1つのグループに代表させた。

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）

- ・ 非平衡条件を用いることによって従来手法よりも高濃度まで欠陥導入が可能になることを確認し、GaN 結晶の比抵抗値として最も低い値を得た。APL Materials 5, 126102 (2017)
- ・ 高エネルギー粒子の照射によって欠陥の擬フェルミレベルを変化させ欠陥の濃度を個別に制御できる可能性を見出した。

A01-2（計画・三宅）

- ・ ステップ構造の制御や結晶の応力制御、窒素プラズマ照射効果の確認、レーザー誘起周期構造の作製などに成功した。

A01-3（計画・上山）

- ・ X 線その場観察の有効性を確認し、窒化物系量子殻・ナノワイヤ結晶の結晶成長機構の理解が進んだ。またホモ接合 GaN 中のピット型特異構造の制御も可能になってきた。

A01-4（計画・熊谷）

- ・ 準安定相の発現相は非熱平衡下成長において基板結晶の格子引き込みと原料分子の拘束によって決定されることを解明した。（ズズ1）

A01-5（計画・伊藤）

- ・ 実験グループとの連携研究促進を念頭に、計算手法開発に重きを置いて研究を進めた。具体的には、界面エネルギー計算手法の開発、マクロ成長様式理論により、特異構造創成に関する成果を挙げた。
- ・ 非平衡量子熱力学の結晶成長学への応用に世界で初めて成功した。（図2）

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）：自己形成ポイド構造の応用を目指し、核生成のメカニズムを解析している。

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。

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）

- ・ 酸化膜シングル層および酸化膜 2 層スタック層をそれぞれゲートに用いた 2 種類のダイヤモンド MOSFET をダイヤモンドオンチップ上で組み合わせることによって、ノーマリオン/オフモードのしきい値制御させるプロセスとメカニズム解明し、更なるそのプロセッシング技術を利用したトランジスタから成る論理集積回路の作製に初めて成功するとともに、300°Cまでの熱安定性を実証した。本成果は論文出版社

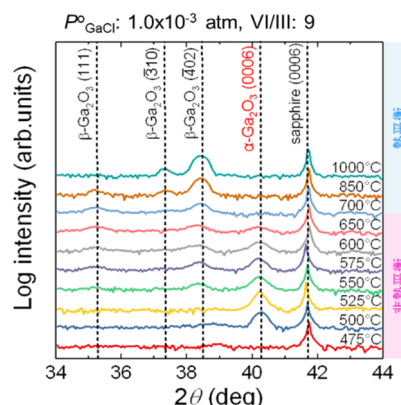


図1 サファイア基板上へ成長した Ga₂O₃ 層の X 線回折

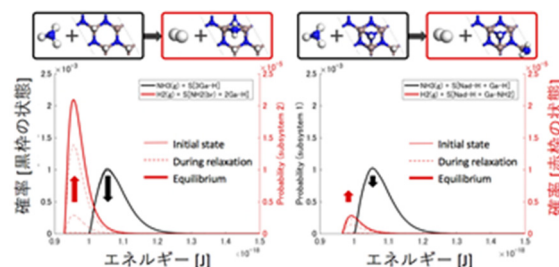


図2 非平衡量子熱力学の結晶成長への適用に初めて成功

AIP Publishing のプレスリリースとして発信された^{1,2}。

A02-2 (計画・橋詰)

- ・ MOS 構造の詳細 CV 解析から GaN 表面近傍に存在する離散的電子捕獲準位を界面準位と分離して解析する手法をイオン注入層およびエッチング層を含む異種接合に適用し、GaN 表面近傍に導入された電子捕獲準位の特性を明らかにした。
- ・ 独自に開発した電気化学プロセスにより AlGaIn/GaN 異種構造の選択的エッチングを行い、平坦性・低損傷性に優れた結果から HEMT 素子プロセスとして非常に有望であることを示した。

A02-3 (計画・平山)

- ・ Si 加工基板を用いることによって、クラックの無い AlN の製膜を行い、AlN の上層において $2 \times 10^8 \text{cm}^{-2}$ 程度の貫通転移密度が実現された。同時に AlN バッファ層上に、波長 325nm で発光する外部量子効率 (EQE) は 0.03% の AlGaIn 量子井戸 UVA-LED の試作に成功した。
- ・ GaN 系 DMW-QCL の実現を目指し、Si 基板上への高品質 GaN/AlGaIn-QCL 構造を得るために Si/AlGaIn テンプレート上に GaN/AlGaIn-QCL 構造を MOCVD 法及び MBE 法で作製し、断面 TEM および X 線評価により良好な構造を確認した。

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。

A2-17-3 (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。

A02-17-5 (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。

1. AIP Publishing News, “Engaging Diamond for Next-Era Transistors,” May 16, 2017.
2. AIP Publishing News, “Diamond-Based Circuits Can Take the Heat for Advanced Applications,” April 10, 2018.

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)

- ・ 結晶内特異構造間及び特異構造内格子欠陥間の構造相関の定量解析を可能とする回折ビームプロファイラ法を開発した。
- ・ 3次元逆格子マッピング分析法を開発し、AlN 厚膜の位置依存ナノビーム X 線回折測定を行った。独立に抽出された格子面傾斜揺らぎ $\Delta\omega$ 、回転揺らぎ $\Delta\phi$ はナノボイド位置で減少し、構造揺らぎを効果的に減少させる機能が実証された。[A01-2 計画・三宅と連携]

B01-2 (計画・上殿)

- ・ 陽電子消滅法により GaN-on-Si 中の空孔のキャリア捕獲を評価した。欠陥の陽電子捕獲を表す S パラメータを照射エネルギーの関数として測定することにより(図 3)、空孔型欠陥のキャリア捕獲機構や欠陥準位に関する知見が得られた。
- ・ Mg イオン注入した GaN 中の空孔型欠陥が、照射により導入された電子を捕獲・放出する過程や対応するエネルギーを確定した。

B01-3 (計画・石谷)

- ・ フォノン生成とプロービングを役割分担させた 2 波長顕微ラマン分光法を用いて、 $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$ 試料の $10 \mu\text{m}$ 角領域の温度上昇を $0.3 \mu\text{m}$ 分解能で 2 次元マッピングすることに成功した(図 4)。(2018)
- ・ 金属/半導体ストライプ構造の形成によって赤外分光測定の拡張性を高め、SiC 上 AlN 薄膜において界面フォノンポラリトンが閉じ込め状態にあることを明らかにした。

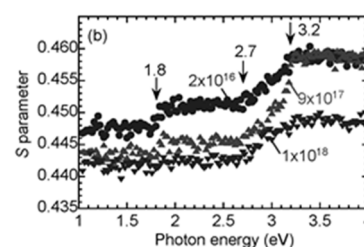


図 3 GaN on Si の S 値の照射エネルギー依存性

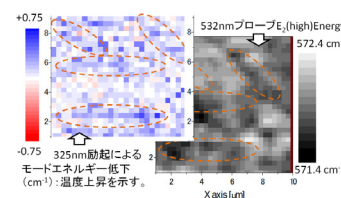


図 3 2波長顕微ラマン分光による $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$ の熱分布評価

B01-17-1 (公募・木口) : 電子顕微鏡マルチスケール解析によって、窒化物(GaN/InGaN MQW)及び酸化物(Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃, ε-(Ga,Fe)₂O₃)極性材料に着目し、特異構造に関する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、特に后者で、0.1 程度の屈折率の小差が及ぼすポテンシャル変化を高感度に検出することができた。

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、信頼性と高速性を兼ね備えた計算・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 (図 5) 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を精密に観測することに成功した。

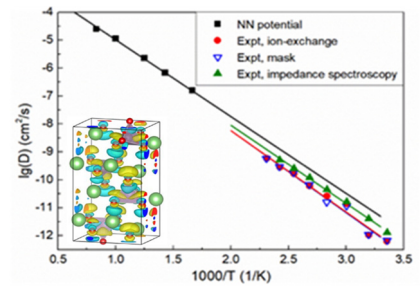


図 5 電場下でのニューラルネット・ポテンシャルの利用に目処

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)

- ・ 緑色発光 InGaN 量子井戸の SNOM による PL マッピングを行い、強励起の際には、PL 強領域から PL 弱領域 (非輻射再結合中心が多い領域) への励起子拡散が促進されるため発光の内部量子効率の低下 (Droop 現象) を招いていることが明らかにされた[Phys. Rev. Appl. **6**, 044018 (2016).]
- ・ 従来プローブ形状の制御が困難であった深紫外用純粋石英ファイバーの 2 段階テーパ化に成功し、透過光の高スループット化 (0.1%→1%に向上) を実現し、深紫外 SNOM 開発の礎とした[図 6]。

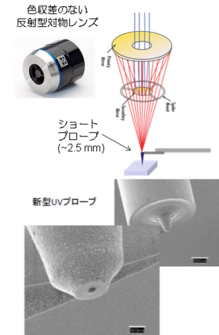


図 6 深紫外ファイバークラウドと結合光学系

B02-2 (計画・秩父)

- ・ AlGaIn 量子井戸と障壁双方の AlN モル分率を面外方向に対し 2 次関数的に変調 (QCM) を施し、閉じ込めポテンシャルを最適化し電子と正孔の波動関数の重なりを増加させる計算と実験を行った。その結果、4~10 nm の厚い井戸でも 80% 以上の重なりを実現できる事[図 7]を示した[Appl. Phys. Express **10**, 015802 (2017).]
- ・ *m* 面 GaN 基板に Al_{1-x}In_xN エピタキシャルナノ構造を成長させ、蛍光表示管 (VFD) ユニットに搭載することにより深紫外線から緑色までの小型偏光光源を実現した[Adv. Mater. **29**, 1603644 (2017).] [プレスリリース 2 件]。

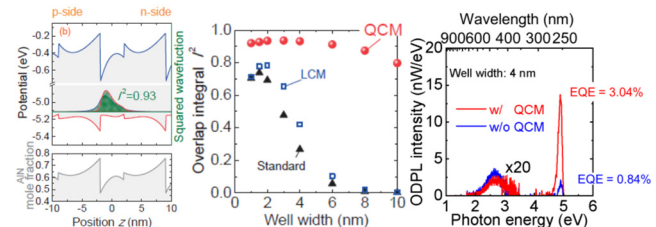


図 7 (a) QCM を行った量子井戸, (b) 重なり積分値の井戸幅依存性, (c) AlGaIn 量子井戸の外部量子効率 (EQE)

B02-3 (計画・山田)

- ・ A01-2 が作製した試料の障壁層 Al 組成比 (*y*) 依存性を精査し、井戸幅が 1.5 nm の量子井戸では、*y*=0.70 から 0.84 に増加すると励起子分子の結合エネルギーは 146 meV から 174 meV に増大した。これは、励起子分子の量子閉じ込め増強効果を実証する成果である[Appl. Phys. Express **10**, 051003 (2017).]
- ・ Al_{0.6}Ga_{0.4}N/Al_{0.7}Ga_{0.3}N 量子井戸 (井戸層幅 2nm, 障壁層幅 7nm) を対象として、極低温から高温領域 (4~750K) における発光および発光励起分光測定を行い、励起子分子が 750K まで安定に存在することや励起子と励起子分子間の非弾性散乱などの多体効果を観測した[Appl. Phys. Express **10**, 021002 (2017).]

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**, 16502 (2018).]

5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5 ページ以内）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果の公表の状況（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

- 論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に*印を付してください。
- 別添の「(2) 発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付してください。
- 補助条件に定められたとおり、本研究課題に係り交付を受けて行った研究の成果であることを表示したもの（論文等の場合は謝辞に課題番号を含め記載したもの）について記載したもののについては、冒頭に▲を付してください（前項と重複する場合は、「◎▲・・・」と記載してください。）。
- 一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。

<発表論文>（各グループ毎に代表的な論文と延べ件数を記す）

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 15 件（全て査読有り）

◎▲ K. Ueno, T. Fudetani, Y. Arakawa, A. Kobayashi, J. Ohta, and *H. Fujioka, “Electron transport properties of degenerate n-type GaN prepared by pulsed sputtering”, APL Materials, 査読有, 5, 126102-1-6 (2017)

◎▲ Atsushi Kobayashi, Jitsuo Ohta, and *Hiroshi Fujioka, “Pulsed sputtering epitaxial growth of m-plane InGaN lattice-matched to ZnO”, Scientific Reports, 査読有, 7, 12820-1-6 (2017)

◎▲ Kohei Ueno, Yasuaki Arakawa, Atsushi Kobayashi, Jitsuo Ohta, and *Hiroshi Fujioka, “Highly conductive Ge-doped GaN epitaxial layers prepared by pulsed sputtering”, Applied Physics Express, 査読有, 10, 101002-1-4 (2017)

A01-2（計画・三宅） 計 17 件（全て査読有り）

◎▲ *R. Yoshizawa, H. Miyake, and K. Hiramatsu, “Effect of thermal annealing on AlN films grown on sputtered AlN templates by metalorganic vapor phase epitaxy”, Jpn. J. Appl. Phys., 査読有, 57, 01AD05-1-4 (2018)

◎▲ *D. Khan, S. Takeuchi, Y. Nakamura, K. Nakamura, T. Arauchi, H. Miyake, K. Hiramatsu, Y. Imai, S. Kimura, and A. Sakai, “Study on the influence of different trench-patterned templates on the crystalline microstructure of AlN epitaxial films by X-ray microdiffraction”, Jpn. J. Appl. Phys., 査読有, 56, 25502-1-5 (2017)

◎▲ *S. Okada, H. Iwai, H. Miyake, and K. Hiramatsu, “Selective area growth of GaN on trench-patterned nonpolar bulk GaN substrates”, J. Cryst. Growth, 査読有, 468, 851-855 (2017)

A01-3（計画・上山） 計 15 件（全て査読有り）

◎▲ *J. Hakamata, Y. Kawase, L. Dong, S. Iwayama, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, H. Miyake, I. Akasaki, “Growth of High-Quality AlN and AlGaIn Films on Sputtered AlN/Sapphire Templates via High-Temperature Annealing”, Phys. Status Solidi B, 査読有, 255, 1700506-1-5 (2018)

◎▲ *N. Hayashi, J. Ogimoto, K. Matsui, T. Furuta, T. Akagi, S. Iwayama, T. Takeuchi, S. Kamiyama, M. Iwaya, I. Akasaki, “A GaN-Based VCSEL with a Convex Structure for Optical Guiding”, Physica Status Solidi A, 査読有, 215, 1700648-1-4 (2018)

◎▲ *D. Jinno, S. Otsuki, S. Sugimori, H. Daicho, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, I. Akasaki, “Characterization of nonpolar a-plane GaN epi-layers grown on high-density patterned r-plane sapphire substrates”, Journal of Crystal Growth, 査読有, 484, 50-55 (2018)

A01-4（計画・熊谷） 計 3 件（全て査読有り）

◎▲ Konishi K, Goto K, Togashi R, Murakami H, Higashiwaki M, Kuramata A, Yamakoshi S, Monemar B, *Kumagai Y, “Comparison of O₂ and H₂O as oxygen source for homoepitaxial growth of β-Ga₂O₃ layers by halide vapor phase epitaxy”, J. Cryst. Growth, 査読有, 492, 39-44 (2018)

◎▲ Togashi R, Kisanuki Y, Goto K, Murakami H, Kuramata A, Yamakoshi S, Monemar B, Koukita A, *Kumagai Y, “Thermal and chemical stabilities of group-III sesquioxides in a flow of either N₂ or H₂”, Jpn. J. Appl. Phys., 査読有, 55(12),

1202BE- 1-6 (2016)

A01-5 (計画・伊藤) 計 30 件 (全て査読有り)

◎▲*T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito, “Effects of lattice constraint on structures and electronic properties of BAlN and B GaN alloys: A first-principles study”, Applied Physics Express, 査読有, 11, 025501-1-4 (2018)

◎▲*H. Nakane, T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito, “Structures and stability of polar GaN thin films on ScAlMgO₄ substrate: An ab initio study”, Journal of Crystal Growth, 査読有, 468, 93-96 (2017)

◎▲*A. Kusaba, G. Li, M. R. von Spakovsky, Y. Kangawa, K. Kakimoto, “Modeling the non-equilibrium process of the chemical adsorption of ammonia on GaN(0001) reconstructed surfaces based on steepest-entropy-ascent quantum thermodynamics”, Materials, 査読有, 10, 948-1-13 (2017)

A01-17-1 (公募・片山) 計 1 件 (全て査読有り)

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

A01-17-2 (公募・高橋) 計 0 件

A01-17-3 (公募・出浦) 計 0 件

A01-17-4 (公募・原田) 計 0 件

A01-17-5 (公募・田畑) 計 2 件 (全て査読有り)

◎*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., 査読有, 7, 8715-1-7 (2017)

A01-17-6 (公募・吉田) 計 1 件 (全て査読有り)

◎Akihiko Anzai, Naoto Fukuo, Akira Yamamoto, *Hisao Yoshida, “Highly selective photocatalytic reduction of carbon dioxide with water over silver-loaded calcium titanate”, Catal. Commun, 査読有, 100, 134-138 (2017)

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 13 件 (全て査読有り)

◎*J. W. Liu, H. Oosato, M. Y. Liao, M. Imura, E. Watanabe, Y. Koide, “Annealing effects on hydrogenated diamond NOR logic circuits”, Appl. Phys. Lett., 査読有, 112, 153501-1-4 (2018)

◎▲R. G. Banal, *M. Imura, H. Ohata, M. Y. Liao, J. W. Liu, Y. Koide, “Effect of Sputter Deposition Atmosphere of AlN on the Electrical Properties of Hydrogen-Terminated Diamond Field Effect Transistor with AlN/Al₂O₃ Stack Gate”, Physica Status Solidi A – applications and materials science., 査読有, 214 [11], 1700463-1-6 (2017)

◎*M. Imura, S. Tsuda, T. Nagata, R. G. Banal, H. Yoshikawa, A. L. Yang, Y. Yamashita, K. Kobayashi, Y. Koide, T. Yamaguchi, M. Kaneko, N. Uematsu, K. Wang, T. Araki, Y. Nanishi, “Surface and bulk electronic structures of heavily Mg-doped InN epilayer by hard X-ray photoelectron spectroscopy”, J. Appl. Phys., 査読有, 121, 095703-1-5 (2017)

A02-2 (計画・平山) 計 12 件 (全て査読有り)

◎*T. T. Lin and H. Hirayama, “Variable Barrier Height AlGaAs/GaAs Quantum Cascade Laser Operating at 3.7 THz”, physica status solidi (a), 査読有, 215, 1700424-1-4 (2018)

◎*B. T. Tran and H. Hirayama, “Growth and fabrication of high-external quantum efficiency AlGaN-based deep-ultraviolet light-emitting diode grown on patterned Si substrate”, Scientific Report, 査読有, 7, 12176-1-6 (2017)

◎*M. Jo, I. Oshima, T. Matsumoto, N. Maeda, N. Kamata and H. Hirayama, “Structural and electrical properties of semipolar (11-22) AlGaN grown on m-plane (1-100) sapphire substrates”, Phys. Status Solidi (c), 査読有, 14, 1600248-1-3 (2017)

A02-3 (計画・橋詰) 計 6 件 (全て査読有り)

◎▲*T. Hashizume, K. Nisigiguchi, S. Kaneki, J. Kuzmik and Z. Yatabe, “State of the art on gate insulation and surface passivation for GaN-based power HEMTs”, Materials Science in Semiconductor Processing, 査読有, 78, 85-95 (2018)

◎▲*H. Ohta, S. W. Kim, S. Kaneki, A. Yamamoto and T. Hashizume, “High thermoelectric power factor of high-mobility two-dimensional electron gas”, Advanced Science, 査読有, 5, 1700696-1-6 (2018)

◎▲K, Nishiguchi, S. Kaneki, S. Ozaki and *T. Hashizume, “Current linearity and operation stability in Al₂O₃-gate AlGaN/GaN MOS-HEMTs”, Japanese Journal of Applied Physics, 査読有, 56, 101001-1-8 (2017)

A02-17-1 (公募・本久) 計 0 件

A02-17-2 (公募・谷川) 計 4 件 (全て査読有り)

◎▲*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, 査読有, 11, 031004-1-4 (2018)

A02-17-3 (公募・関口) 計 0 件 (全て査読有り)

A02-17-4 (公募・小林) 計 2 件 (全て査読有り)

◎*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., 査読有, 110, 201901-1-4 (2017)

A02-17-5 (公募・谷垣) 計 9 件 (全て査読有り)

◎*Thangave Kanagasekaran, *Hidekazu Shimotani, Ryota Shimizu, Taro Hitosugi, *Katsumi Tanigaki, “A new electrode design for ambipolar injection in organic semiconductors”, Nature Communications, 査読有, 8: 999-1-7 (2017)

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 5 件 (全て査読有り)

◎▲Hamachi T, *Takeuchi S, Tohei T, Imanishi M, Imade M, Mori Y, *Sakai A, “Leakage current analysis for dislocations in Na-flux GaN bulk single crystals by conductive atomic force microscopy”, J. Appl. Phys., 査読有, 123, 161417-1-6 (2018)

◎▲Shida K, *Takeuchi S, Tohei T, Miyake H, Hiramatsu K, Sumitani K, Imai Y, Kimura S, *Sakai A, “Microstructural analysis in the depth direction of a heteroepitaxial AlN thick film grown on a trench-patterned template by nanobeam X-ray diffraction”, J. Appl. Phys., 査読有, 123, 161563-1-7 (2018)

◎▲*Takeuchi S, Mizuta Y, Imanishi M, Imade M, Mori Y, Sumitani K, Imai Y, Kimura S, *Sakai A, “Control of dislocation morphology and lattice distortion in Na-flux GaN crystals”, J. Appl. Phys., 査読有, 122, 105303-1-6 (2017)

B01-2 (計画・上殿) 計 7 件 (全て査読有り)

◎▲*A. Uedono, T. Nabatame, W. Egger, T. Koschine, C. Hugenschmidt, M. Dickmann, M. Sumiya, and S. Ishibashi, “Vacancy-type defects in Al₂O₃/GaN structure probed by monoenergetic positron beams”, J. Appl. Phys., 査読有, 123, 155302-1-8 (2018)

◎▲*A. Uedono, S. Takashima, M. Edo, K. Ueno, H. Matsuyama, W. Egger, T. Koschine, C. Hugenschmidt, M. Dickmann, K. Kojima, S. F. Chichibu, and S. Ishibashi, “Carrier trapping by vacancy-type defects in Mg-implanted GaN studied using monoenergetic positron beams”, Phys. Stat. Sol. B, 査読有, 255, 1700521-1-9 (2017)

B01-3 (計画・石谷) 計 7 件 (全て査読有り)

◎▲H. Sakamoto, E. Takeuchi, K. Yoshida, K. Morita, B. Ma, *Y. Ishitani, “Electric-dipole absorption resonating with longitudinal optical phonon-plasmon system and its effect on dispersion relations of interface phonon polariton modes in metal/semiconductor-stripe structures”, Journal of Physics D: Applied Physics, 査読有, 51, 15105-1-10 (2018)

◎▲*K. Oki, B. Ma, and Y. Ishitani, “Population decay time and distribution of exciton states analyzed by rate equations based on theoretical phononic and electron-collisional rate coefficients”, Phys. Rev. B, 査読有, 96, 205204-1-15 (2017)

B01-17-1 (公募・木口) 計 3 件 (全て査読有り)

◎*T. Kiguchi, C. Fan, T. Shiraishi, T.J. Konno, “Strain- induced nanostructure of Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃ on SrTiO₃

epitaxial thin films with low PbTiO₃ concentration”, Jpn. J. Appl. Phys., 査読有, 56, 10PB12-1-7 (2017)

B01-17-2 (公募・川山) 計 0 件

B01-17-3 (公募・渡邊) 計 2 件 (全て査読有り)

◎W. Li, Y. Ando, and *S. Watanabe, “Cu diffusion in amorphous Ta₂O₅ studied with a simplified neural network potential”, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 86, 104004-1-7 (2017)

B01-17-4 (公募・西堀) 計 3 件 (全て査読有り)

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

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 13 件 (全て査読有り)

◎▲T. Ozaki, M. Funato, and Y. Kawakami, “Origin of temperature-induced luminescence peak shifts from semipolar (11-22) In_xGa_{1-x}N quantum wells”, Phys. Rev B, 査読有, 96, 125305-1-13 (2017)

◎▲Y. Matsuda, M. Funato, and *Y. Kawakami, “Polychromatic emission from polar-plane-free faceted InGaN quantum wells with high radiative recombination probabilities”, Appl. Phys. Exp., 査読有, 10, 071003-1-4 (2017)

◎▲K. Kataoka, M. Funato, and *Y. Kawakami, “Development of polychromatic ultraviolet light-emitting diodes based on three-dimensional AlGaN quantum wells”, Appl. Phys. Exp., 査読有, 10, 121001-1-4 (2017)

B02-2 (計画・秩父) 計 9 件 (全て査読有り)

◎▲K. Kojima, H. Ikeda, K. Fujito, and *S. F. Chichibu, “Demonstration of omnidirectional photoluminescence (ODPL) spectroscopy for precise determination of internal quantum efficiency of radiation in GaN single crystals”, Appl. Phys. Lett., 査読有, 111, 032111-1-4 (2017)

◎▲*S. F. Chichibu, K. Kojima, A. Uedono, and Y. Sato, “Defect-resistant radiative performance of *m*-plane immiscible Al_{1-x}In_xN epitaxial nanostructures for deep-ultraviolet and visible polarized-light emitters”, Adv. Mater., 査読有, 29, 1603644- 1-9 (2017)

B02-3 (計画・山田) 計 7 件 (全て査読有り)

◎▲*S. Kurai, N. Imura, L. Jin, H. Miyake, K. Hiramatsu, and Y. Yamada, “Cathodoluminescence study on local high-energy emissions at dark spots in AlGaN/AlGaN multiple quantum wells”, Jpn. J. Appl. Phys., 査読有, 57, 060311-1-4 (2018)

◎▲*H. Murotani, K. Ikeda, T. Tsurumaru, R. Fujiwara, S. Kurai, H. Miyake, K. Hiramatsu, and Y. Yamada, “Temperature dependence of Stokes shifts of excitons and biexcitons in Al_{0.61}Ga_{0.39}N epitaxial layer”, Phys. Status Solidi B, 査読有, 255, 1700374-1-5 (2018)

B02-17-1 (公募・山口) 計 0 件

B02-17-2 (公募・小田) 計 1 件 (全て査読有り)

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

B02-17-3 (公募・富田) 計 2 件 (全て査読有り)

◎▲*Tatsuya Okada, Takuro Tomita, Tomoyuki Ueki, Takuya Hashimoto, Hiroki Kawakami, Yuki Fuchikami, Hiromu Hisazawa, and Yasuhiro Tanaka, “Low-temperature diffusion assisted by femtosecond laser-induced modifications at Ni/SiC interface”, Appl. Phys. Express, 査読有, 11, 016502-1-4 (2018)

<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). DOI: 10.1007/978-3-319-76641-6

<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>

- OIST-Singularity Project Joint Workshop, 沖縄科学技術大学院大学, 2018年4月23日, 参加者数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, 参加者数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, 参加者数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, 参加者数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, 参加者数300名

<アウトリーチ活動>

イベント参加・出展：6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：14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。

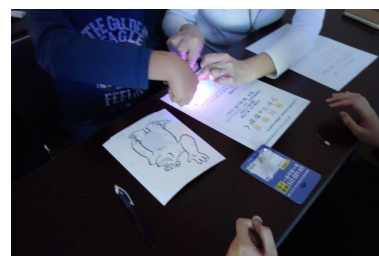
B01-2 (2017年2月22日)

小中高生向け授業・実験・実習：13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)



小学生を対象とした理科教室



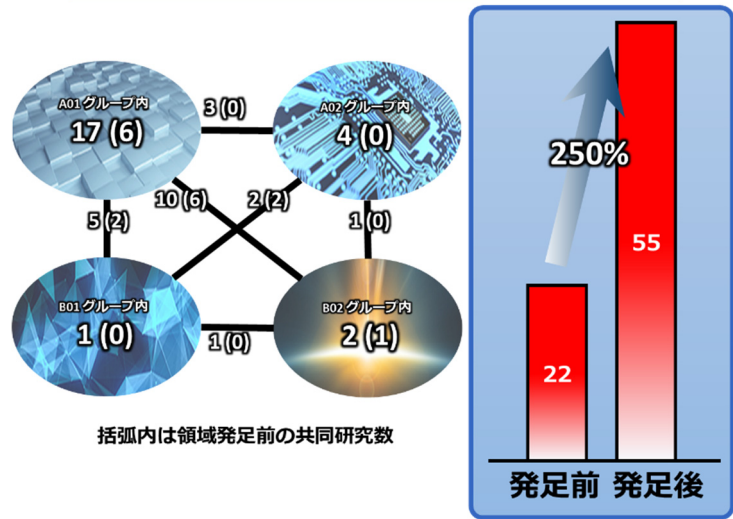
理科教室について取材を受ける藤岡(領域代表)と三宅(A01-2)

6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2 ページ以内）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、研究組織間の連携状況について組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

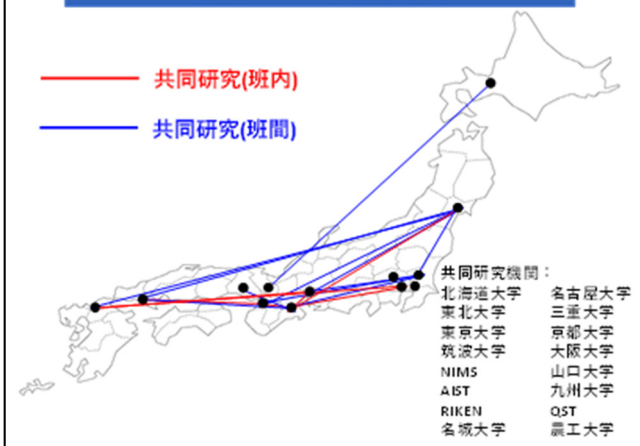
前述の様に、各グループで特異構造に關する興味深い顕著なデータが多数でつあり、2年間という短期間の成果としては目を見張るものがある。この様な、短期間での成功の要因は、領域内グループ間や領域外との連携が進んでいるためと考えられる。研究グループ内の特に領域内の連携状況を見返してみると、右図に示す様に領域発足前から比べると領域発足によって共同研究数が250%に増加している。この数字は新学術領域研究発足が当該領域に与えたインパクトの大きさを如実に物語っている。また、成長グループ A01 と、評価グループ B01,B02

領域内共同研究数（公募研究を含む）

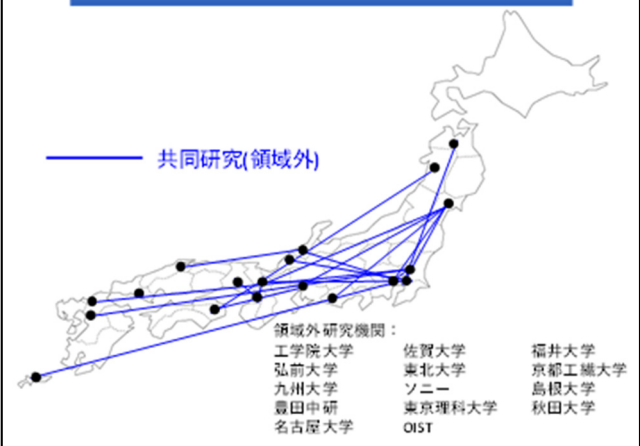


やデバイスグループ A02 との共同研究数が顕著に多いことがわかる。これは A01 で作製された新しい特異構造の試料が B01,B02 で評価され A02 でデバイス化されていると解釈できる。この様な連携への取り組みは今後、各グループの研究の実験・理論解析の進展に伴い増加していくものと考えている。

領域内での共同研究



領域外部との共同研究



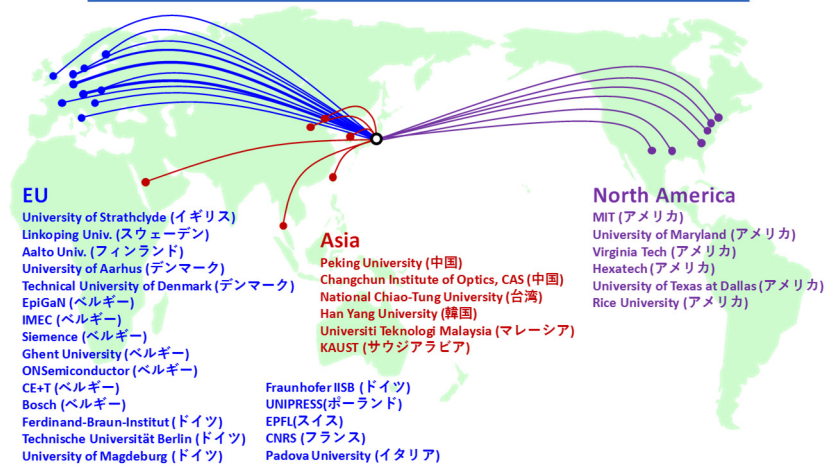
この領域内共同研究の地勢的な概要を日本地図上にマッピングしたものが上左図である。班内、班外とも協力関係の構築が順調に進み、共同研究が盛んになっていることがわかる。詳細は別項目に記載されているので割愛するが、この中から個別の研究成果に記載した数多くの興味深い成果がでてい

上左図は領域内部の共同研究のマッピングであったが、本領域メンバーと国内の領域外研究者との共同研究も順調に進んでいる。上右図は領域の研究者が領域外の研究者と共同で行った研究の様子をプロットしたものである。領域内でカバー出来なかった地域の研究機関とも連携が進んでおり、この二つの図を重ね合わせると、本領域では、北海道から沖縄まで、くまなく共同研究のネットワークが出来上がっており、本領域に関しての取り組みがオールジャパンで進んでいることが理解できる。

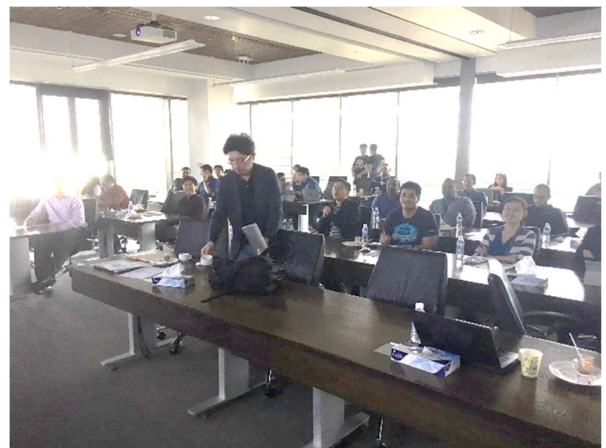
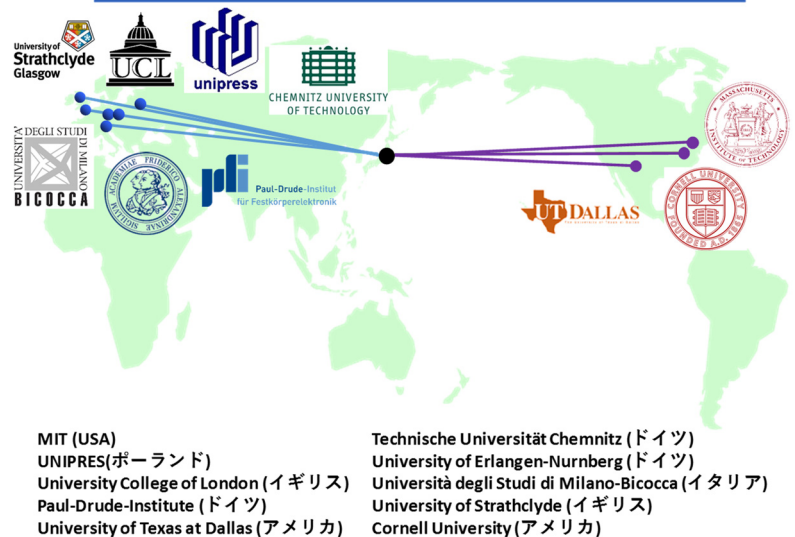
さらに、視点を海外に移し、海外との共同研究の進捗の様子を世界地図にマッピングしたものが右図となる。ヨーロッパ・アジア・アメリカと全世界との共同研究がバランス良く始まっていることがわかる。これらの共同研究はサンプルの受け渡しをベースとするものが多いが、本領域では、若手研究者が実際に数ヶ月海外の研究グループに滞在し海外拠点形成を行う派遣事業も実施し、順調に進んでいる。過去2年の間に若手研究者を海外に派遣した派遣先のマッピングを右図に示す。現時点までの派遣先を見ると、欧米諸国が多く、アジア地域の派遣数が少なく偏りがみえるが、今後アジア諸国との関係構築にも積極的に取り組んでいく。世界に向けて若手を派遣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時点では、世界中をカバーするネットワークの構築が期待できる。

尚、詳細は別項目で記載するが、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の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をおこなった。しかしながら、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てくれている。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ている。

海外共同研究数



若手研究者海外派遣先



サウジ KAUST における特異構造の議論の様子

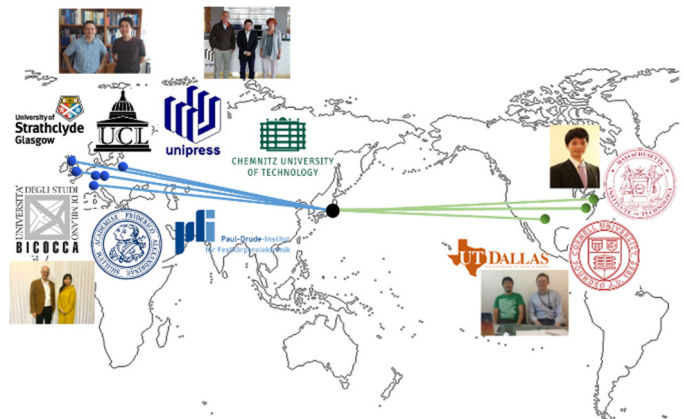
7. 若手研究者の育成に係る取組状況（1ページ以内）

領域内の若手研究者の育成に係る取組状況について記述してください。

領域内では、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2~3ヶ月の期間で派遣し、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ている。さらに、本事業は、この領域の国際共同研究を推進している。図に示すように、平成29年度は5名の若手研究者の派遣を実施し、平成30年度にも5名の海外派遣を予定している。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、共同研究としての成果が上がりつつある。



若手研究者海外派遣事業(平成29-30年度)

(2) 国際会議と連携したスクールの開催

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を開催した。スクールの校長は、小島一信准教授（B02-2, 東北大学）で石井良太助教（B02-1, 京都大学）が委員として協力を行った。海外からはDebdeep Jena教授（Cornell大学）、Michael Kneissl教授（TU-Berlin）を招待し、領域からは平山秀樹主任研究員（A02-2）、熊谷義直教授（A01-4）、山口敦史教授（B02-17-1）が登壇し、深紫外LEDデバイス開発の最前線の解説、熱平衡に関する講義、光部性とバンド構造に関する講義を行った。世界から若手研究者を中心に129名が参加した。

	派遣先	
	国名	研究機関
H29年度	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
H30年度 (予定を含む)	イギリス	University College London
	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

(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

計画研究間の有機的な連携によって領域全体の強力関係がシナジー効果を発揮することを狙って、共同研究プラットフォームを開設し、若手教員、博士学生の受け入れを開始する。これは若手研究者が数週間から1ヶ月程度の国内留学を行う制度で、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狙っている。この様な試みは単に、共同研究による一時的な成果を生み出すだけでなく、知識や技能の共有化による次世代に向けた永続的な日本の研究レベルの底上げにつながるものと期待できる。この試みは計画研究間のみならず、公募研究との間でも積極的に展開する。具体的には、三重大学を結晶成長・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として、千葉大学、大阪大学、山口大学などから助教や博士課程学生を受け入れて共同研究を行う。また京都大学を光物性評価の共同研究プラットフォームとして、ナノ構造発光特性などを評価する取り組みを進めている。



(4) 博士（後期）課程への積極的支援

博士（後期）課程学生の交流、国内留学、海外派遣等の支援を通して、博士（後期）課程への積極的な進学を勧誘し、計画研究全体で約30名（約2名/大学）の学生を教育・支援している。

8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）（1 ページ以内）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

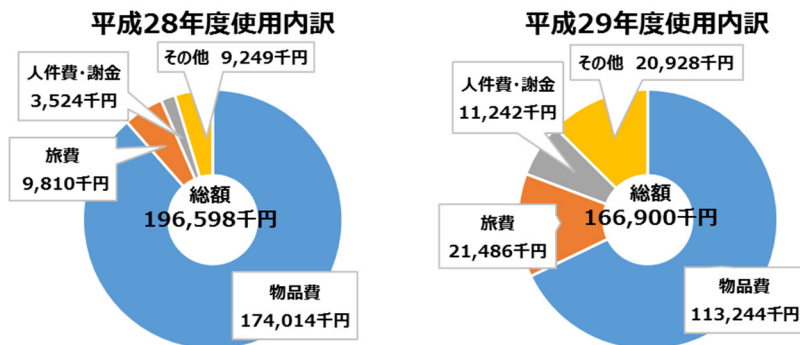
下表に本領域で導入した設備のうち主要なもの（単体で500万円以上のもの）をリスト化した。また、研究領域内で共同研究の実施実績も併せて記載した。本研究課題では、種々の特異構造を実験的に作製するA班および評価を担当するB班があるが、整備した装置によって多くの共同研究での活動実績があることを確認している。詳細はここでは割愛するが、例えば平成28年度に整備した真空搬送装置（東大）を用いて作製した特異構造結晶は4つの領域内機関で活用されつつあり、評価版でも広く研究が進められている。平成29年度に整備した薄膜X線装置（三重大）は、三重大で作製した特異構造結晶を7つの連携先に提供し密接な連携をはかることによって新たな学理の開拓を進めつつある。他の装置に関しても同様に多くの領域内活用が進められており導入した装置は適切に有効活用されている。また、平成30年度から総括版が進めている研究プラットフォーム事業において、京大や三重大に整備した装置を活用する予定であり総括班研究課題にも有効に活用されつつある。

また、平成28・29各年度の領域全体の研究費の割合を右下図に示す。こちらより分かるように初年度は、物品費、特に特異構造結晶の作製・評価に関する装置備品の購入に充てている費用が大半を占めて

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
A01-1	真空搬送装置	1	7,056	平成 28	東大	三重大, 名城大 筑波大, 千葉大
A01-3	ICP エッチング装置	1	30,996		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
B01-1	走査型プローブ顕微鏡 システム	1	9,493		阪大	三重大, 北大, 東北大
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
B02-2	ストリークカメラ用周 辺機器一式	1	7,171		東北大	山口大, 金沢工大, 三重大 筑波大, 名大, 九大, 名城大
A01-1	小型プローブ顕微鏡	1	9,936		平成 29	東大
A02-2	薄膜X線回折装置	1	15,120	三重大		名大, 阪大, 物材機構, 筑波 大, 東北大, 山口大, 名城大

いることが分かる。一方、2年目から研究を発展させること、さらには若手研究者を養成するための人件費・謝金に関する支出が増え、領域内共同研究に関する旅費、さらには研究成果を発表するための費用が大幅に増大（人件費は約4倍、旅費は約2倍となっている）していることが分かる。すなわち、初年度に整備した設備が有効に活用され、研究が順調に

推移していると考えられる。また研究費の有効活用に関しては、若手研究者海外派遣事業やシンポジウム、アウトリーチ活動など様々な取り組みを実施しており着実に実績を残していると考えられる。



9. 総括班評価者による評価（2ページ以内）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

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。計画研究は順調に成果が出ているが、公募研究はこれから研究が軌道に乗るものが多く、成果が待たれる。特に指摘できるのは領域内外での共同研究が盛んに行なわれていることで、領域代表および各研究班班長のリーダーシップに負うと思われるが、ぜひ充実・発展していただきたい。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は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。その意味で、今まで報告されてい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①成長原子の表面拡散現象、特に結晶に取り込まれるまでの拡散距離、②ナノロッドなど微細構造を形成する際に出現する面を決定する面間表面拡散、③微傾斜面でのマクロステップの形成機構、④成長丘（ヒロック）及び成長穴（ピット）の形成と不純物導入機構などにも踏み込んで研究していただくと一層新しい展開が可能になるのではないかと考える。

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ており、窒化物を中心に様々な材料系を含め、実験的・理論的な検討を有機的・能動的に進めることができるような研究班の構成となっている。領域内外での共同研究の増加に加え、研究成果の共有のための会議（学会シンポジウム、インフォーマルミーティング、総括班会議など）を随時開催している点は高く評価できる。また、若手研究者を海外派遣することにより、国際的に活躍できる人材の育成を促進する施策がなされていることも評価したい。個別にみると、例えば、A02では、ダイヤモンドFET、UV LEDや有機発光素子で社会的にもインパクトの高い研究がなされ、加えて、界面電子物性評価、3次元ナノ領域構造評価、ナノFET、イオン注入などデバイスの基礎を支える研究も進展している。今後、領域内外での連携をさらに進めることにより、研究の加速が期待されるとともに、所期の目的である特異構造結晶の学理の確立に向け十分な成果が期待される。

吉川 明彦（千葉大学・工学研究科・名誉教授）

結晶の完全性を追い求めるだけでなく、不完全性をむしろ積極的に活用することによる新機能の創出とそれの光・電子デバイスへの展開を図ることを趣旨としている。全体的には、計画班の策定時点では、窒化物にやや偏った研究班の構成となっており、また、採択時の審査所見にもあったように理論研究が不足しているように見受けられたが、公募と共同研究によりそれらをうまく補っていることを評価したい。また、領域研究組織内外での共同的研究が、本領域の発足とともに増加しており、例えば、A01からB01内への試料の提供とB01内での総合的な構造評価や、B02における企業との連携による緑色発光する小型偏光光源の創出は特筆に値する。A01とB01の取り組みがB02にも広がり、特異構造を光学的にも多様に評価することができれば、構造の持つポテンシャルがさらに明らかになると期待される。B02の各グループは、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、高いレベルで研究が推移していることが論文、発表などから推察される。これらのことから、B02のグループ間、あるいはA01、A02、B01

との連携をこのまま進めることにより、この領域のさらなる進展に寄与することができると考えられる。

纈纈 明伯（東京農工大学・工学研究院・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、結晶成長、デバイス、構造評価、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により短い期間において多くの研究成果を挙げているものと判断する。

例えば、結晶成長グループでは高エネルギー粒子照射というユニークな結晶成長場における高濃度点欠陥導入制御や、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。また、理論計算アプローチ (A01-5) により、異種基板(種結晶)上のヘテロ成長における界面エネルギー計算手法を確立し、他研究グループ (A01-2) や多くの海外研究協力者と連携し、新たな物理構造モデルを実験および理論解析の協調で構築した点は、平成 30 年度以降の特異構造の意図的制御を行う際の有力なツールとなり得ると評価する。その他、A01-3 が構築した結晶成長中のその場 X 線回折測定によるミスフィット転位をはじめとする特異構造発現の機構解明や、新規ワイドバンドギャップ材料として注目される酸化物半導体の準安定相の基板結晶構造による格子引き込みや原料分子の特異的な吸着挙動が明らかになるなど、新しい結晶成長の物理が見出されている点も評価できる。

今後、本新学術領域の研究者間での試料提供や結晶評価手法の活用等、他グループとの連携強化を図ることによってさらなる進展が期待されることから本学術領域の今後が楽しみである。

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。このまま引き続き研究プロジェクトを推し進めて行けば、期間内に新たな学理が構築されて行くものと考え。総括班のマネジメント、取り纏めに期待する。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。その中で光デバイスの開発を担う A02-2 班の活動を紹介しよう。未だレーザー発振が確認されていない GaN 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、(1)レーザー発振に必要な十分な光利得が室温でも得られること、(2)サフィア基板上に窒化物バッファ層を挿入することで、シングルメタル導波路で 70%以上、ダブルメタル導波路で 99%以上の光閉じ込め係数と低い導波路ロスが得られることを確認している。研究が順調に進展しており、世界初の GaN 系 THz-QCL レーザー発振が期待できる状況にある。また、公募研究 18 件の四分の一以上の 5 件、若手海外派遣実績/予定 10 件の四分の一以上の 3 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る。

10. 今後の研究領域の推進方策（2 ページ以内）

今後どのように領域研究を推進していく予定であるか、研究領域の推進方策について記述してください。また、領域研究を推進する上での問題点がある場合は、その問題点と今後の対応策についても記述してください。また、目標達成に向け、不足していると考えているスキルを有する研究者の公募研究での重点的な補充や国内外の研究者との連携による組織の強化についても記述してください。

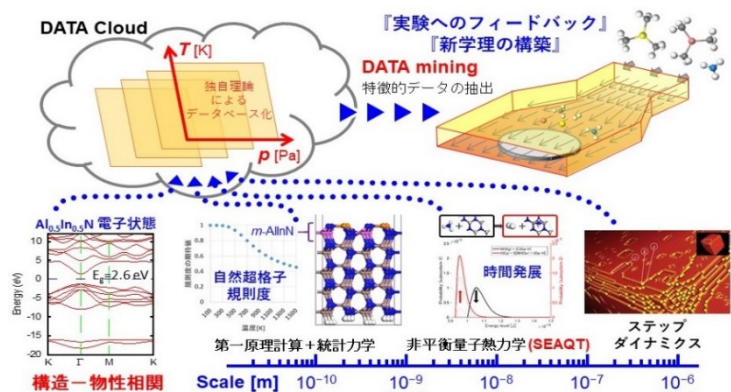
これまでの2年間で各グループ間の協力関係ネットワークの骨組みがおおよそ出来上がってきた。さらに若手研究者海外派遣事業や国際学会・国際シンポジウムを開催することによって海外との共同研究実績も25件と本新学術領域発足前の約3倍まで向上するなどの実績を残した。今後はこのネットワークをより強固なものにしていくとともに、実際に特異構造のネットワークを効率よく利用して研究成果を生み出していく。

ここでは詳細に立ち入らないが、この中間評価報告書に記載したように、各グループで特異構造に関する興味深い研究成果がでてくる。今後は各グループの独自の研究を支援していくとともに、グループ間、あるいは、外部との連携によって、成果をより大きなものにしていく。この様に連携の強化に注力するとともに各項目でも強化を進めていく。具体的には以下のような取り組みを行う予定である。

まず理論の構築においては、半導体成長プロセスでは種々のスケールにおいて様々な物理・化学現象（成長素過程）が進行している。これまでの研究では各スケールにおける物理モデルを作成し、成長条件（ガス分圧 p 、成長温度 T ）との相関解析を行ってきた。しかし、複雑に関係し合う各スケールの物理現象は時にはトレードオフの関係にもなり得て、個別の現象の理解だけでは適切に成長プロセスすなわち特異構造を制御することはできない。今後の研究では、上図に示すように、各スケールにおける物理現象の解析結果を p と T をパラメータとしてデータベース化し、データマイニングにより特徴的データの抽出を行う。以上を融合して世界に類を見ないマルチスケール統合解析手法を確立する。得られた知見を実験にフィードバックし、特異構造の制御と構造-物性相関に関する学理の構築を行う。

ボンドエンジニアリングに基づくマルチスケール統合解析のプラットフォームを構築するには、(1)構造-物性相関の解析スキーム、(2)Åスケール（原子スケール）の物理・化学現象の解析スキーム、(3)~10nmスケールの解析スキーム、(4)sub- μm スケールの解析スキーム、(5)(1)~(4)を統合するためのデータ科学に基づく解析スキームが必要である。これらを包括的に解決するために、国際共同研究の一環として I. Gorczyca 教授（ポーランド科学アカデミー高圧物理学研究所）の研究分担者への招聘、博士学生を M. R. von Spakovsky 教授（Virginia Tech, USA）の研究室に短期派遣など、(1)~(3)の解析スキームの補強・拡充を図っている。特に、量子力学と連続体力学の狭間のスケール領域(3)は学問的にも極めて興味深く、また計算機性能の向上、新たなスキーム開発により最近になって漸く解析可能となった、いま注目を集めている研究対象領域であるので、領域としてもこの分野の研究をサポート・強化していく。具体的には、公募研究（B01班）の渡邊聡教授（東京大学）を中心としたニューラルネットワークを利用した理論結晶科学における特異構造の導入法の開発および計画研究（A01班）の非平衡量子熱力学による結晶成長素過程の解明と制御に関する研究を領域として重点的に支援する。一方で(4)、(5)については今後、補強が必要な課題である。(4)については、ステップダイナミクス理論の分野で著名な A. Pimpinelli 教授（Rice University, USA）および T. L. Einstein 教授（University of Maryland, USA）との連携を H30 年度より開始する。さらに(5)を開発するために、データ科学の分野で著名な久保山哲二教授（学習院大学）の元に領域の若手研究者を派遣する準備を進めている。また、データ科学分野の公募研究を積極的に募り、この研究分野の研究者の拡充を図る予定である。(1)~(5)の研究を融合し、マルチスケール統合解析手法を確立する。

一方、実験系においては、結晶作製技術・評価手法の整備が整いつつある。計画班ごとには、A01



マルチスケール統合解析の概略図

においては非平衡成長法、MOVPE法、HVPE法など様々な結晶成長技術をもちいることによって、種々の特異構造結晶を作製することが可能となった。さらに、特異構造を用いたデバイス提案などもされつつあり、新しい学問分野としての下地は構築されつつある。材料的な広がりにおいても酸化物材料などが計画研究として加わっており分野の拡大がみられるが、SiCなどの無機材料や有機材料・タンパク質などへの拡張も可能であると期待される。それらの研究者を公募研究者とし連携をすることによって学問分野の広がりを目指す。またA02に関して、紫外LEDや窒化物半導体ラミネート構造を用いたダイヤモンドデバイス、縦型窒化物半導体FETにおいて優れた成果を残しつつあり、GaNナノワイヤや有機物を用いたレーザに関する研究においても優れた成果を得ている。また、未だその学術的評価が可能ではないレベルだが、東北大の谷垣グループでは有機物で世界初のレーザ動作の可能性もある結果が平成29年度の領域内会議で報告された。本結果は、同一層に電子・正孔を形成するという新しい概念を取り入れ、それによってレーザ発振の振る舞いに近い現象が確認されたというものである。一方で、動作機構やこれが正しいレーザ発振動作なのかなど不明確な点もあるため、本領域のデバイス研究者や物性研究者が共同で実証実験等を行うなど領域全体でサポートをしていく。さらに、紫外LEDや窒化物半導体FETなどは産業的にも重要な分野であることから、実用化に向けた動きを加速する必要があると同時に、物理を理解することが重要であることから、B01・B02との連携をさらに強化することによって学理の構築を進めていく予定である。また、B01やB02の物性評価グループにおいても、B01-1におけるnanoXRDのポンプ&プローブ法、B01-3における多波長ラマン測定、B02-1における深紫外SNOM、B02-2における時空間分解CLなどがそれにあたる。今後はこれらの評価方法が本格的に稼働すると期待され、A01,あるいはA02班で作製したサンプルや領域外の共同研究先のサンプルも含め、多角的に評価することにより、特異構造ならではの特性が明らかになると期待される。加えて、公募班の研究との連携も深めることにより、材料的な広がりや理論と実験の融合による新機能性の探求を進める。

さらに若手研究者の頭脳循環もさらに活性化させる。具体的には、平成30年度からは領域内から共同研究プラットフォームと呼ばれる新組織の利用を募集し、総括班による審査を経て、国内留学による頭脳循環への支援を開始する。これは博士学生等の若手研究者が1ヶ月程度の国内留学を行う制度で、従来の試料のやり取りをベースとした浅く緩やかな連携研究ではなく、深いレベルでの真の共同研究活動の実現を図る。もし、1ヶ月程度の留学では計画どおり成果がでない場合に関しては、弾力的に予算を運用し、その延長も受け付けることとする。この様な試みは単に、共同研究による一時的な成果を生み出すだけでなく、知識や技能の共有化による次世代に向けた永続的な日本の研究レベルの底上げにつながるものと期待できる。さらに平成30年度はこの取り組みは国内を中心に進めるが、最終的には国際的なプラットフォームへ発展させることを視野に入れ活動を進める。また、平成30年度までの研究成果の発信場として、平成30年11月には約1100名の窒化物半導体研究者が一堂に集まるIWN2018の開催し特異構造の重要性を発信していく。平成31年(2019年)度は引き続きプラットフォームの整備、研究活動の整備、APWS2019の開催などを進める。2020年度は最終年度でもあり、蓄積したデータをまとめ外部に向けて発信していくことに重点を置く。特に、CGCT9やICNS-14を日本に誘致し、この会議を通して世界中の結晶成長学研究者や窒化物半導体研究者と特異構造プロジェクトの成果と今後の発展について議論していく。また、本領域で蓄積された研究成果は、理論科学・応用成果とも書物としてまとめていく。この他これまでに行ってきた、年3回程度の総括班会議、領域会議、年2回の大型公開シンポジウム、各種インフォーマル会議の開催もこれまで以上にサポートしていく。領域会議についてはポスターセッションの枠を拡大し、学生が参加できるように工夫し、特異構造に関する学習・理解ができるように教育に配慮する。さらに、アウトリーチ活動に関して、理科教室・サイエンスカフェなどを継続的に実施していくことによって本新学術の研究内容や活動が国民に正しく理解され、信頼され、支持されることをはかっていく。さらに、IWUMDの理科教室で実施したテレビの取材などマスコミの活用なども引き続き進める。また、領域内外の情報交換の場として定着した感のある領域HPやニュースレターなどにも改良を加えながら、領域内外の協力関係の構築を促進していく。