

令和 3 年 6 月 9 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2017～2020

課題番号：17H01318

研究課題名（和文）新規窒化物半導体のインシリコデザインと材料創成・デバイス化への展開

研究課題名（英文）In silico design, synthesis, and device fabrication of novel nitride semiconductors

研究代表者

大場 史康 (Oba, Fumiyasu)

東京工業大学・科学技術創成研究院・教授

研究者番号：90378795

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 29,800,000円

研究成果の概要（和文）：高精度・多角的な第一原理計算並びに機械学習に立脚したインシリコ（計算機中）での材料設計と候補物質のスクリーニングにより、半導体として有望な窒化物を選定することを目指して研究を推進した。既知の窒化物半導体の詳細な理論検討結果に基づいて材料設計の指針を構築し、インシリコスクリーニングを実行することにより、複数の有望物質を提案した。また、バンドギャップ制御及びキャリアドーピングに関する理論予測を実験により実証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では理論計算、機械学習と合成・評価実験の密接な連携により、窒化物半導体の設計・探索・創製を行った。これは、近年注目を集めている計算科学並びにマテリアルズインフォマティクス手法による効率的な材料設計・探索の好例と言え、有効な材料研究手法の提案という観点からも意義深いと言える。また、本研究では窒化物半導体の設計・探索を主題としたが、本アプローチは他の材料系への応用も見込めることから、波及効果が大きいと考えられる。

研究成果の概要（英文）：Promising new nitride semiconductors were proposed by in silico materials design and screening of candidate materials based on accurate and multifaceted first-principles calculations and machine learning. Design and selection guidelines were constructed based on detailed theoretical investigations of known nitride semiconductors, and several promising materials were identified by in silico screening using these guidelines. Moreover, theoretical predictions on bandgap tuning and carrier doping of selected nitride semiconductors were experimentally verified.

研究分野：計算材料科学

キーワード：窒化物半導体 材料設計 第一原理計算

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 計算科学の支援による新物質探索の効率化

昨今のエネルギー・資源情勢や環境問題を背景に、卓越した機能はもちろんのこと、地球上に豊富に存在する元素から構成され無毒で環境調和性が高いことなど、新材料の開発への要望は厳しくなっている。このようなニーズを満たす新材料を見いだすには、材料設計・探索の指針が要となることは言うまでもないが、的確な指針が立てられたとしても、探索空間をいかに広くカバーするか、その中からいかにターゲットを絞り込むかが課題となる。実験のみによる従来の物質探索は多大な物的・人的コストを要し、これが新材料開発におけるボトルネックとなっている。

近年の計算科学の進展とコンピュータの演算能力の向上により、物質の安定性や特性を高精度かつ網羅的に理論予測できるようになってきた。とくに半導体材料の探索においては、第一原理計算により直接予測可能なバンドギャップ、有効質量等の基礎物性や安定性などがよい指標となることから、第一原理計算を用いたインシリコ(計算機中)での材料設計及びスクリーニングが有効である。その先鞭をつけたのが、MIT及びパークレーラボのMaterials Project、Duke大学のafloplib.org、NRELのInverse Designといった米国の大型プロジェクトであり、計算により提案された新規半導体の合成に成功した例も報告されている[1, 2]。

信頼性の高いインシリコデザインと候補物質の的確なハイスループットスクリーニングを実現するためには、密度汎関数理論への標準的な近似を超えた高精度な第一原理計算により、物性をできる限り正確に予測することや、基礎物性や熱力学的安定性のみならず、格子欠陥の特性を考慮した多角的な評価が不可欠である。

(2) 窒化物半導体の開拓と応用の拡張

窒化物は半導体としての応用に適した電子・光学物性だけでなく、地球上に豊富に存在する窒素の化合物というメリットをもつ。しかし、現在実用化されている窒化物半導体は、緑色や青色、紫外線、白色LEDに用いられるGaNとInNまたはAlNとの固溶体にほぼ限定されており、十分に開拓されているとは言い難い。

希少元素を含まず、キャリアの輸送特性に優れ、多様な光の波長領域に対応するバンドギャップをもつ新しい窒化物半導体を見いだすことができれば、赤色発光素子や太陽電池など、窒化物半導体により広範な応用が期待できる。これに関連した研究として、近年、希土類元素添加GaNを用いた赤色発光素子の作製[3]やCu₃Nの太陽電池への応用の検討[4, 5]がなされている。

2. 研究の目的

(1) 理論設計・予測基盤の構築と有望物質の選出

高精度・高速な第一原理計算並びに計算結果の機械学習に基づいた基礎物性や安定性等の予測手法により、多様な窒化物のインシリコスクリーニングを実行し、赤色・緑色発光デバイスや薄膜太陽電池に適した物質を選出する。

(2) 実験的検証とフィードバック

スクリーニングにより選ばれた候補物質の焼結体及び薄膜試料を作製し、電子・光学物性を評価する。これにより、理論予測を実験的に検証するとともに、その結果をフィードバックすることで設計・探索指針やスクリーニング手法・基準を改善する。

(3) 有望物質の選定と材料設計指針の確立

新規窒化物半導体としての有望物質の絞り込み・提案へと展開する。また、欠陥準位の抑制までを視野に入れて窒化物半導体の材料設計に関する指針を構築する。

3. 研究の方法

(1) 高精度第一原理計算に基づいたハイスループットスクリーニング基盤の構築

半導体の評価において、バンドギャップ、有効質量、吸収係数といった基礎物性、熱力学的安定性やドーパント及び固有欠陥により決定されるキャリア密度、欠陥準位密度が重要な指標となる。両性ドーピングが困難な物質については、他の半導体とのヘテロ接合でのバンドオフセットの検討も不可欠である。

このため、本研究代表者らが開発を進めてきた多体摂動論に基づいたバンド構造・オフセット計算法等をベースに、精度と速度を両立させた予測手法を確立する。これを機械学習による予測モデルや標準的な近似での第一原理計算と組み合わせることで、スクリーニングを効率化する。

(2) 候補物質のスクリーニングと設計・探索指針の検証・確立

上記の計算プロセスを統合・自動化し、数万種類の候補物質を対象としたスクリーニングを実行する。無機結晶構造データベース(ICSD)に登録されている結晶構造を網羅し、その構成元素を様々に変えた物質モデルを作成し、構造最適化から物性・安定性評価までの一連の計算を行う。また、遺伝的アルゴリズムによる結晶構造探索も並行して進めることで、未報告の結晶構造をカバーする。

(3) 候補物質の物性の実験的検証と薄膜・デバイス化

スクリーニングにより選ばれた候補物質の焼結体及び薄膜試料を作製し、結晶構造及び組成の評価 (XRD、SEM-EDX、ICP 発光分光等)、電子・光学物性評価 (ホール測定、紫外・可視・近赤外分光、PL 測定等) を行う。薄膜試料の作製には、PLD、MBE、スパッタを用いる。これにより、予測された結晶構造と物性を実験的に検証するとともに、その結果を理論計算にフィードバックする。実験と理論計算に齟齬が見られる場合は、スクリーニングの手法と基準を見直す。

(4) 有望物質の絞り込みと設計指針の構築

スクリーニング及び合成・評価・デバイス化実験の結果を総括することにより、赤色・緑色発光デバイスや薄膜太陽電池に適した有望物質の絞り込みを進める。この際、効率よりも格子欠陥の影響等、効率の向上に関わる諸問題の解明を重視する。以上により、多様な新規窒化物半導体の提案と設計指針の構築を目指す。

4. 研究成果

(1) 窒化物半導体の特性・安定性の予測手法の開発

本研究が目指すインシリコでの窒化物半導体の俯瞰的な理解と材料設計・探索指針の構築に向けて、計算手法及び機械学習予測モデルの開発を進めた。具体的には、バンドギャップ、有効質量、吸収係数等の基礎物性、状態図中での競合相に対する熱力学的安定性、点欠陥、表面、界面等の形成エネルギーや電子状態の第一原理計算に基づいた予測の高精度・高速化により、窒化物半導体の系統的評価を可能とする計算手法の開発を行った。そして、多様な窒化物に関して得られた計算結果を機械学習することで、基礎物性や安定性の予測モデルを構築した。これらの手法の統合により、窒化物半導体の多角的かつ系統的な評価を可能とするための理論設計・予測基盤を確立した。

(2) 窒化物半導体の系統的理解と新物質探索への展開

開発した計算手法を Zn_3N_2 、 ScN 等の既知の 2 元系窒化物半導体のバンド構造、光吸収特性、点欠陥特性の予測に応用した [6, 7]。その結果、これらの窒化物における空孔等の固有点欠陥や水素・酸素不純物の形成・導入挙動と固有点欠陥・不純物由来の電子状態、電子キャリア生成に伴う光学バンドギャップの増加、p 型ドーピングの可能性の予測に関する結果が得られた。

また、太陽電池光吸収層材料として近年注目を浴びている $ZnSnN_2$ のカチオンの不規則化や固有点欠陥形成・不純物混入に関する詳細な理論的検討を行い、その電子構造及び伝導キャリア濃度への影響を明らかにした [8]。

さらに、これまで安定した p 型ドーピングが困難であった Cu_3N について、フッ素化学ドーピングが有効であることを理論的に予測し、実験グループと連携することで高移動度 p 型薄膜の実現につなげた [9]。

また、上述の第一原理計算手法のうち、とくにスピン軌道相互作用を考慮した有効質量の高精度計算手法について、実験値が確立されている既知の窒化物半導体に適用することで、その有効性の確認を行い [10]、その上で実験値が未確定な新興の窒化物半導体や窒化物ベースの複合アニオン化合物への応用を進めた。また、その他の構造・安定性・物性の系統的予測手法と連携させることで、新たな吸光・発光半導体の候補として有望な物質を提案した [11]。これらは、本研究が目指す新規窒化物半導体の設計・探索及び既知窒化物半導体の系統的理解に関する成果である。また、本研究のコンセプトや指針を広く公開するため、窒化物半導体を含めた多様な半導体の設計・探索に関する総説論文を執筆した [12]。

また、上述の既知物質等に関する知見を踏まえて、新規窒化物半導体の探索のためのハイスループットスクリーニングを実施し、赤色・緑色発光デバイスや薄膜太陽電池に適した物質を選出した。

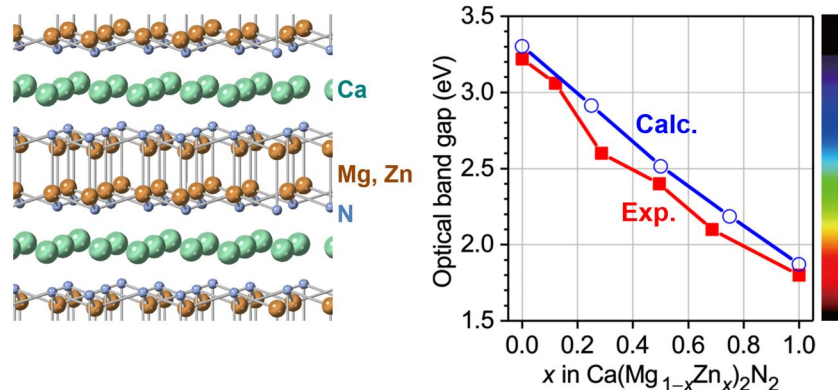


図 1. $Ca(Mg_{1-x}Zn_x)_2N_2$ ($x = 0-1$) のバンドギャップ制御

(3) 窒化物半導体の創製への展開

本研究のターゲットである亜鉛系窒化物並びに比較対象の様々な関連化合物について、焼結体合成及び製膜の条件の検討と半導体物性・電子状態計測を行った。その結果、3元系亜鉛窒化物の固溶体 $\text{Ca}(\text{Mg}_{1-x}\text{Zn}_x)_2\text{N}_2$ ($x = 0-1$) に関して、図 1 に示すように可視光ほぼ全域をカバーしたバンドギャップ制御とバンド端発光が確認できた[13]。また、分子線エピタキシー法によるエピタキシャル薄膜の作製に成功した[14]。

<引用文献>

- R. Gautier et al., Nat. Chem. 7, 308 (2015).
A. Bhatia et al., Chem. Mater. 28, 30 (2016).
M. Ishii, A. Koizumi, and Y. Fujiwara, Appl. Phys. Lett. 105, 171903 (2014).
K. Matsuzaki, T. Okazaki, Y.-S. Lee, H. Hosono, and T. Susaki, Appl. Phys. Lett. 105, 222102 (2014).
A. Zakutayev, J. Mater. Chem. A 4, 6742 (2016).
Y. Kumagai, K. Harada, H. Akamatsu, K. Matsuzaki, and F. Oba, Phys. Rev. Applied 8, 014015 (2017).
Y. Kumagai, N. Tsunoda, and F. Oba, Phys. Rev. Applied 9, 034019 (2018).
N. Tsunoda, Y. Kumagai, A. Takahashi, and F. Oba, Phys. Rev. Applied 10, 011001 (2018).
K. Matsuzaki, K. Harada, Y. Kumagai, S. Koshiya, K. Kimoto, S. Ueda, M. Sasase, A. Maeda, T. Susaki, M. Kitano, F. Oba, and H. Hosono, Adv. Mater. 30, 1801968 (2018).
Y. Kuroiwa, Y. Matsushita, K. Harada, and F. Oba, Appl. Phys. Lett. 115, 112102 (2019).
Y. Mochizuki, H. J. Sung, A. Takahashi, Y. Kumagai, and F. Oba, Phys. Rev. Mater. 4, 044601 (2020).
F. Oba and Y. Kumagai, Appl. Phys. Express 11, 060101 (2018).
M. Tsuji, H. Hiramatsu, and H. Hosono, Inorg. Chem. 58, 12311 (2019).
M. Tsuji, K. Hanzawa, H. Kinjo, H. Hiramatsu, and H. Hosono, ACS Appl. Electron. Mater. 1, 1433 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計29件（うち査読付論文 27件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Kikuchi Ryosuke, Ueno Koki, Nakamura Toru, Kurabuchi Takahiro, Kaneko Yasushi, Kumagai Yu, Oba Fumiyasu	4. 巻 33
2. 論文標題 SrZn ₂ N ₂ as a Solar Absorber: Theoretical Defect Chemistry and Synthesis by Metal Alloy Nitridation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 2864 ~ 2870
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c00075	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kuroiwa Yuichiro, Matsushita Yu-ichiro, Harada Kou, Oba Fumiyasu	4. 巻 115
2. 論文標題 Theoretical prediction of strain-induced carrier effective mass modulation in 4H-SiC and GaN	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 112102 ~ 112102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5122215	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tsuji Masatake, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo	4. 巻 58
2. 論文標題 Tunable Light Emission through the Range 1.8-3.2 eV and p-Type Conductivity at Room Temperature for Nitride Semiconductors, Ca(Mg _{1-x} Zn _x) ₂ N ₂ (x = 0-1)	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 12311 ~ 12316
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b01811	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tsuji Masatake, Hanzawa Kota, Kinjo Hiroyuki, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo	4. 巻 1
2. 論文標題 Heteroepitaxial Thin-Film Growth of a Ternary Nitride Semiconductor CaZn ₂ N ₂	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Applied Electronic Materials	6. 最初と最後の頁 1433 ~ 1438
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.9b00248	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsumoto Jumpei, Hanzawa Kota, Sasase Masato, Haindl Silvia, Katase Takayoshi, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo	4. 巻 3
2. 論文標題 Superconductivity at 48 K of heavily hydrogen-doped SmFeAsO epitaxial films grown by topotactic chemical reaction using CaH ₂	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 103401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.103401	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wu Chia-En, Ide Keisuke, Katase Takayoshi, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo, Lin Chih-Lung, Kamiya Toshio	4. 巻 66
2. 論文標題 New Amorphous In-Ga-Zn-O Thin-Film Transistor-Based Optical Pixel Sensor for Optical Input Signal With Short Wavelength	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Electron Devices	6. 最初と最後の頁 3841 ~ 3846
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/TED.2019.2925091	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sim Kihyung, Jun Taehwan, Bang Joonho, Kamioka Hayato, Kim Junghwan, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo	4. 巻 6
2. 論文標題 Performance boosting strategy for perovskite light-emitting diodes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Reviews	6. 最初と最後の頁 031402 ~ 031402
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5098871	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mochizuki Yasuhide, Sung Ha-Jun, Takahashi Akira, Kumagai Yu, Oba Fumiyasu	4. 巻 4
2. 論文標題 Theoretical exploration of mixed-anion antiperovskite semiconductors M ₃ XN (M = Mg, Ca, Sr, Ba; X = P, As, Sb, Bi)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 44601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.044601	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tsunoda Naoki, Kumagai Yu, Takahashi Akira, Oba Fumiyasu	4. 巻 10
2. 論文標題 Electrically Benign Defect Behavior in Zinc Tin Nitride Revealed from First Principles	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 011001 ~ 011001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevApplied.10.011001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Matsuzaki Kosuke, Harada Kou, Kumagai Yu, Koshiya Shogo, Kimoto Koji, Ueda Shigenori, Sasase Masato, Maeda Akihiro, Susaki Tomofumi, Kitano Masaaki, Oba Fumiyasu, Hosono Hideo	4. 巻 30
2. 論文標題 High-Mobility p-Type and n-Type Copper Nitride Semiconductors by Direct Nitriding Synthesis and In Silico Doping Design	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 1801968 ~ 1801968
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adma.201801968	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Oba Fumiyasu, Kumagai Yu	4. 巻 11
2. 論文標題 Design and exploration of semiconductors from first principles: A review of recent advances	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 060101 ~ 060101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/APEX.11.060101	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ide Keisuke, Futakado Yuki, Watanabe Naoto, Kim Junghwan, Katase Takayoshi, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo, Kamiya Toshio	4. 巻 216
2. 論文標題 Transition Metal-Doped Amorphous Oxide Semiconductor Thin-Film Phosphor, Chromium-Doped Amorphous Gallium Oxide	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 physica status solidi (a)	6. 最初と最後の頁 1800198 ~ 1800198
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssa.201800198	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Naoto, Ide Keisuke, Kim Junghwan, Katase Takayoshi, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo, Kamiya Toshio	4. 巻 216
2. 論文標題 Multiple Color Inorganic Thin-Film Phosphor, RE-Doped Amorphous Gallium Oxide (RE=Rare Earth: Pr, Sm, Tb, and Dy), Deposited at Room Temperature	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 physica status solidi (a)	6. 最初と最後の頁 1700833 ~ 1700833
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssa.201700833	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ide Keisuke, Ishikawa Kyohei, Tang Haochun, Katase Takayoshi, Hiramatsu Hidenori, Kumomi Hideya, Hosono Hideo, Kamiya Toshio	4. 巻 216
2. 論文標題 Effects of Base Pressure on Growth and Optoelectronic Properties of Amorphous In-Ga-Zn-O: Ultralow Optimum Oxygen Supply and Bandgap Widening	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 physica status solidi (a)	6. 最初と最後の頁 1700832 ~ 1700832
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssa.201700832	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hanzawa Kota, Iimura Soshi, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo	4. 巻 141
2. 論文標題 Material Design of Green-Light-Emitting Semiconductors: Perovskite-Type Sulfide SrHfS3	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 5343 ~ 5349
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.8b13622	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hanzawa Kota, Sasase Masato, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo	4. 巻 32
2. 論文標題 Stabilization and heteroepitaxial growth of metastable tetragonal FeS thin films by pulsed laser deposition	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Superconductor Science and Technology	6. 最初と最後の頁 054002 ~ 054002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6668/ab097e	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Haindl Silvia、Kampert Erik、Sasase Masato、Hiramatsu Hidenori、Hosono Hideo	4. 巻 32
2. 論文標題 Low anisotropic upper critical fields in SmO _{1-x} FxFeAs thin films with a layered hybrid structure	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Superconductor Science and Technology	6. 最初と最後の頁 044003 ~ 044003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6668/aafe3d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hanzawa Kota、Yamaguchi Yuta、Obata Yukiko、Matsuishi Satoru、Hiramatsu Hidenori、Kamiya Toshio、Hosono Hideo	4. 巻 99
2. 論文標題 Insulator-like behavior coexisting with metallic electronic structure in strained FeSe thin films grown by molecular beam epitaxy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035148 ~ 035148
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.035148	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tojo Yujiro、Shibuya Taizo、Nakamura Tetsuro、Shoji Koichiro、Fujioka Hirotaaka、Matoba Masanori、Yasui Shintaro、Itoh Mitsuru、Iimura Soshi、Hiramatsu Hidenori、Hosono Hideo、Hirai Shigeto、Mao Wendy、Kitao Shinji、Seto Makoto、Kamihara Yoichi	4. 巻 31
2. 論文標題 Superconducting transition temperatures in the electronic and magnetic phase diagrams of Sr ₂ VFeAsO _{3-x} , a superconductor	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 115801 ~ 115801
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/aaf7e0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Xiao Zewen、Ran Fan-Yong、Liao Min、Hiramatsu Hidenori、Ide Keisuke、Hosono Hideo、Kamiya Toshio	4. 巻 20
2. 論文標題 Multiple states and roles of hydrogen in p-type SnS semiconductors	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 20952 ~ 20956
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cp02261e	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 大場 史康	4. 巻 36
2. 論文標題 第一原理計算による半導体の系統的物性予測と in silicoスクリーニング	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 日本化学会情報化学部会誌	6. 最初と最後の頁 5~8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11546/cicsj.36.5	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kumagai Yu, Tsunoda Naoki, Oba Fumiyasu	4. 巻 9
2. 論文標題 Point Defects and p-Type Doping in ScN from First Principles	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 034019-1~10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevApplied.9.034019	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kumagai Yu, Harada Kou, Akamatsu Hirofumi, Matsuzaki Kosuke, Oba Fumiyasu	4. 巻 8
2. 論文標題 Carrier-Induced Band-Gap Variation and Point Defects in Zn3N2 from First Principles	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 014015-1~12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevApplied.8.014015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hiramatsu Hidenori, Yusa Hitoshi, Igarashi Ryo, Ohishi Yasuo, Kamiya Toshio, Hosono Hideo	4. 巻 56
2. 論文標題 An Exceptionally Narrow Band-Gap (~4 eV) Silicate Predicted in the Cubic Perovskite Structure: BaSiO3	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 10535~10542
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.7b01510	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Kensuke, Nakao Akiko, Maki Sachiko, Yamaura Jun-ichi, Katase Takayoshi, Sato Hikaru, Sagayama Hajime, Kumai Reiji, Kuramoto Yoshio, Murakami Youichi, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo	4. 巻 96
2. 論文標題 Structure determination in thin film Ba _{1-x} LaxFe ₂ As ₂ : Relation between the FeAs ₄ geometry and superconductivity	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125116-1 ~ 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.125116	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wang Junjie, Hanzawa Kota, Hiramatsu Hidenori, Kim Junghwan, Umezawa Naoto, Iwanaka Koki, Tada Tomofumi, Hosono Hideo	4. 巻 139
2. 論文標題 Exploration of Stable Strontium Phosphide-Based Electrides: Theoretical Structure Prediction and Experimental Validation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 15668 ~ 15680
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b06279	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ide Keisuke, Ishikawa Kyohei, Tang Haochun, Katase Takayoshi, Hiramatsu Hidenori, Kumomi Hideya, Hosono Hideo, Kamiya Toshio	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Effects of Base Pressure on Growth and Optoelectronic Properties of Amorphous In-Ga-Zn-O: Ultralow Optimum Oxygen Supply and Bandgap Widening	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 physica status solidi (a)	6. 最初と最後の頁 1700832 ~ 1700832
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssa.201700832	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Naoto, Ide Keisuke, Kim Junghwan, Katase Takayoshi, Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo, Kamiya Toshio	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Multiple Color Inorganic Thin-Film Phosphor, RE-Doped Amorphous Gallium Oxide (RE=Rare Earth: Pr, Sm, Tb, and Dy), Deposited at Room Temperature	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 physica status solidi (a)	6. 最初と最後の頁 1700833 ~ 1700833
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssa.201700833	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 大場史康、日沼洋陽、熊谷悠	4. 巻 56
2. 論文標題 第一原理計算による半導体の物性予測と物質探索	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 まてりあ	6. 最初と最後の頁 554 ~ 559
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計24件 (うち招待講演 21件 / うち国際学会 10件)

1. 発表者名 Oba Fumiyasu
2. 発表標題 Computational design and exploration of nitride semiconductors
3. 学会等名 E-MRS Spring Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大場史康
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスに立脚した新規半導体の開拓
3. 学会等名 PE研究会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大場史康
2. 発表標題 半導体物性の系統的理論予測とデータ駆動型新物質探索
3. 学会等名 第4回固体化学フォーラム (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大場史康
2. 発表標題 半導体物性の系統的理論予測とデータ駆動型新物質探索
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大場史康
2. 発表標題 第一原理計算による窒化物・酸化物半導体の系統的物性予測とデータ駆動型新物質探索
3. 学会等名 固体化学の新しい指針を探る研究会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大場史康
2. 発表標題 第一原理計算による半導体物性の系統的予測と新物質探索
3. 学会等名 レア・イベントの計算科学第3回ワークショップ（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大場 史康
2. 発表標題 半導体物性の理論予測とデータ駆動型新物質探索
3. 学会等名 2018年日本表面真空学会学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 F. Oba
2. 発表標題 Design and exploration of novel semiconductors using first-principles calculations
3. 学会等名 ISS2018 Advanced Lecture Series (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大場 史康
2. 発表標題 半導体物性の理論予測とデータ駆動型新物質探索
3. 学会等名 日本セラミックス協会第31回秋季シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 平松 秀典、飯村 壮史、神谷 利夫、細野 秀雄
2. 発表標題 新半導体物質の探索研究における実験現場での計算科学の活用
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平松 秀典、神谷 利夫、細野 秀雄
2. 発表標題 多元系物質のバルク・薄膜合成と光電子物性
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大場史康
2. 発表標題 第一原理計算による半導体物性の高精度予測と新物質探索
3. 学会等名 日本材料科学会第2回マテリアルズ・インフォマティクス基礎研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大場史康
2. 発表標題 データ駆動型材料探索に立脚した新規半導体の開拓
3. 学会等名 日本金属学会東海支部・日本鉄鋼協会東海支部学術討論会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大場史康
2. 発表標題 第一原理計算による半導体物性の高精度予測と新物質探索
3. 学会等名 第56回セラミックス基礎科学討論会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Oba Fumiyasu
2. 発表標題 In Silico Design and Exploration of Novel Nitride Semiconductors
3. 学会等名 6th TPCRI Workshop（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 大場史康
2. 発表標題 第一原理計算による半導体物性の高精度予測と新物質探索
3. 学会等名 粉体粉末冶金協会平成29年度秋季大会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Oba Fumiyasu
2. 発表標題 In Silico Design and Exploration of Novel Semiconductors
3. 学会等名 Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD) 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Oba Fumiyasu
2. 発表標題 In Silico Design and Exploration of Novel Nitride Semiconductors
3. 学会等名 The International Union of Materials Research Society-International Conference of Advanced Materials (IUMRS-ICAM) 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiramatsu Hidenori, Hosono Hideo
2. 発表標題 Heteroepitaxial growth of complex chalcogenides and pnictides
3. 学会等名 Collaborative Conference on Crystal Growth (3CG) 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiramatsu Hidenori、Hosono Hideo
2. 発表標題 Heteroepitaxial growth, critical current, and electric field-induced phase transition of iron-based layered selenides/pnictides
3. 学会等名 The International Union of Materials Research Society-International Conference of Advanced Materials (IUMRS-ICAM) 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiramatsu Hidenori、Hosono Hideo
2. 発表標題 Electronic Phase Transition at Interface between Solid and Ionic Liquid under Gate Voltage
3. 学会等名 Materials Research Society (MRS) Fall Meeting & Exhibit 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 角田直樹、熊谷悠、大場 史康
2. 発表標題 ZnSnN ₂ 中の点欠陥の第一原理計算
3. 学会等名 日本金属学会2018年春季講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tsunoda Naoki、Kumagai Yu、Oba Fumiyasu
2. 発表標題 Ab Initio Study of Point Defects and p-Type Doping in ScN
3. 学会等名 Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD) 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tsunoda Naoki, Kumagai Yu, Oba Fumiyasu
2. 発表標題 Point Defects in Scandium Nitride: A First-Principles Study
3. 学会等名 The Tenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-10) (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	赤松 寛文 (Akamatsu Hirofumi) (10776537)	九州大学・工学研究院・准教授 (17102)	
研究分担者	田中 功 (Tanaka Isao) (70183861)	京都大学・工学研究科・教授 (14301)	
研究分担者	平松 秀典 (Hiramatsu Hidenori) (80598136)	東京工業大学・科学技術創成研究院・准教授 (12608)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------