

The Materials Research Society of Japan

発行 © 一般社団法人 日本 MRS  
〒 231-0023 横浜市中区山下町 2  
産業貿易センタービル B123  
E-mail general-inf@mrs-j.org  
http://www.mrs-j.org/ Tel. 045-263-8538

||||| やあ こんにちは |||||

物質科学が直面している課題に多様性を大切にして取り組む



しげさと ゆうぞう  
重里 有三 氏

青山学院大学 大学院 理工学研究科 機能物質創成コース 教授 <sup>しげさと ゆうぞう</sup> 重里 有三

今日まで物質科学は幅広い分野で様々な課題に取り組み、多くの方々の独創的な研究や粘り強い研究開発によってたくさんの問題を克服してきました。しかし高度に発展してきた科学技術が生み出した多くの切実な、そして深刻な問題に私達は直面しています。カーボンニュートラルや SDGs (Sustainable Development Goals: 持続可能な開発目標) を実現するために果たさなければならない様々な研究テーマへの取り組みは、現在、待ったなしの状態です。より効果的に研究・開発を進めていく体制として、筆者は様々な意味での「多様性」に配慮し大切にしていくということが重要であると考えています。

液晶パネルや有機 EL パネルを駆動するための薄膜トランジスタ (TFT) 材料として、東京工業大学の細野・神谷教授らによって提案されたインジウム (In)、ガリウム (Ga)、亜鉛 (Zn) の複合酸化物のアモルファス薄膜 (a-IGZO) が実用化されています。従来はアモルファスシリコン (a-Si) の薄膜が使用されていましたが、a-IGZO は a-Si よりも電子の移動度が 20 ~ 50 倍も大きく TFT 回路の小型化や配線の微細化が可能になり、より高精細で、高開口率の平面型ディスプレイを作製することができます。これは、それぞれ In, Ga, Zn の元素としての異なる「個性」により、アモルファスの酸化物中で助け合い、補い合い、融合して理想に近い半導体特性を実現している、と考えることができます。酸化インジウム (In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) は錫 (Sn) をドーピングした ITO などの最も高性能な透明導電膜材料として有名ですが、これは伝導帯が主として In の 5S 軌道からできており、実空間で球対称に広がって重なり合っているため電子の「高速道路」が形成され移動度が大きくなると考えられています。これに Zn が数十%混ざると、アモルファスの In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> の結晶化温度が 160℃から 500℃以上に上がり、アモルファス状態で非常に安定な物質となります。酸化インジウム亜鉛 (IZO) はアモルファスの透明導電膜としても実用化されています。IZO の場合はアモルファスであり、Sn 等の不純物ドーピングが効かないため、酸素空孔がすべてのキャリア (ドナー) を出していると考えられます。これを TFT の半導体として活用するためには、電界が OFF の状態でキャリア濃度ができるだけ小さくなる必要がありますが、酸素との結合エネルギーが大きな Ga をさらに加えることで酸素空孔によるキャリア生成を抑制することができ、安定な n 型のアモルファス酸化物半導体薄膜である a-IGZO が完成されました。この様に考えると、a-IGZO はまさに各元素の異なる個性による多様性を十全に生かしたダイバーシティ材料と呼ぶことができそうです。

様々な新聞やニュースで、日本からパブリッシュされた注目度の高い論文の数がここ 10-20 年では海外の先進国と比較し減少しており、その他国際的な科学技術成果の発信力も低下してきているという記事が散見されます。これは、様々な理由が絡み合った「複雑骨折」だと考えられますが、日本において科学技術の研究開発の場での多様性が失われてきているのも原因の一つだろうと感じます。例えば、運営費交付金を減らし競争的資金を増やすなど、研究・教育予算に関する偏った、行き過ぎた「選択と集中」などは、研究の場の多様性を大きく損なってきたのではないのでしょうか。

それでは、なぜ研究・開発、そして教育の場で多様性を担保することが大切なのか。その本質について、筆者は自己懐疑性を持つためだと考えます。自分自身の存在する意味や自分という存在の価値を疑うことは、哲学や文学が生まれる最も基本的な要素ですが、自然科学においても自己を相対化することは本質的に大切なことです。自己懐疑性が失われると、少し古い言葉ですが「無謬性の神話」に陥って、硬直化してしまいます。これは多様性の欠如によって引き起こされます。アインシュタインは以下のような言葉を残しています。「想像力は知識より重要である。知識には限界がある。想像力は世界を包み込む。」多様性の中の葛藤や刺激の中で想像力が育まれます。

日本 MRS は理学・工学にまたがる材料科学の共通基盤としての役割を果たしてきています。応用分野は多岐にわたっており、多様な方々と出会うことができる素晴らしい場です。この学会での様々な方々との出会いは刺激に満ちており、想像力を刺激してくれます。日本 MRS が多様性を大切にしながらますます発展していくことを祈念しています。

目次

- 01 やあ こんにちは  
物質科学が直面している課題に多様性を大切にして取り組む  
重里 有三
- 02 研究所紹介  
地方独立行政法人  
神奈川県立産業技術  
総合研究所 (KISTEC)  
電子デバイス系グループ  
金子 智
- 04 研究トピックス  
第一原理計算と機械学習  
による無機材料の設計・  
探索  
大場 史康
- 07 ご案内
- 08 To the Overseas  
Member of MRS-J
- 08 編集後記

■ 研究所紹介

地方独立行政法人 神奈川県立産業技術総合研究所 (KISTEC)  
電子デバイス系グループ

地方独立行政法人神奈川県立産業技術総合研究所 電子技術部 統括専門研究員 かねこ さとる 金子 智

1. はじめに

神奈川県立産業技術総合研究所は昭和4年4月に設立された神奈川県工業試験場が始まりです。昭和24年12月に神奈川県工業試験所として改称され、平成7年4月には工業試験所、工芸指導所、繊維工業指導所、家具指導センターの4機関を統合し、海老名に産業技術総合研究所として発足しました。平成18年4月に産業技術センターに改称し、平成29年公益財団法人神奈川県立産業技術アカデミーとの統合により地方独立行政法人神奈川県立産業技術総合研究所 (KISTEC) となりました。職員数は200名ほどの組織です。

KISTECの電子デバイス系グループは、電子技術部電子材料Gと電子デバイスGの2つグループの兼務を含む10名で構成され、薄膜作製・評価、熱処理、微細加工技術、マイクロマシニング技術に関する研究開発、技術支援、及び人材育成を行っています。



図1 KISTEC 全景

2. デバイス系グループ紹介

機能性薄膜合成では、酸化超伝導体の人工格子や酸化マグネシウムのエピタキシャル成長、最近では平坦なグラフェン成長などを行っています。コーティング膜としてダイヤモンドライクカーボン膜の合成、また、ナノインプリントや電子線ビームを用いた微細加工、実装関係の研究グループの立ち上げなども行っています。

成膜装置として、イオンプレーティング装置、スパッター装置、真空蒸着装置などに加え、用途に応じてはアークプラズマ成膜やレーザー蒸着装置などが対応可能です。微細加工のためのフォトリソグラフィ工程を通せる設備と電子線ビーム描画装置、ナノインプリント装置も導入しています。評価装置では電子線顕微鏡 (SEM)、透過電子線顕微鏡 (TEM)、X線光電子分光法 (XPS)、電子線マイクロアナライザー (EPMA)、ラマン分光などをはじめとして、非接触形状測定であるレーザー顕微鏡、原子間力顕微鏡や、実装関係では、超音波顕微鏡、ボールボンダー、フリップチップボンダー、サーマルショック試験機なども揃っています。モノシランやジボランなど半導体特殊材料ガスを用いたサービスも行なっていましたが、2017年から利用を停止しています。保有装置の詳細はHPに掲載があります。

3. 研究トピックス紹介

• 超平坦なグラフェン膜

レーザー蒸着法による超平坦なグラフェン成膜を行っています。酸化物超伝導体など酸化物を主に成膜していましたが、最近では炭素系を成膜しています。二酸化炭素雰囲気中での成膜では、非常に平坦なグラフェン膜の成長を報告しています<sup>[1,2]</sup>。この成膜のユニークな点はカーボンを二酸化炭素中で成膜していることです。二酸化炭素は安定な特性を持つと思われませんが、真空中、それも低真空中でも500度近くで酸化剤として作用します。これは1860年代の古い論文<sup>[3]</sup>にあるブードア反応です。

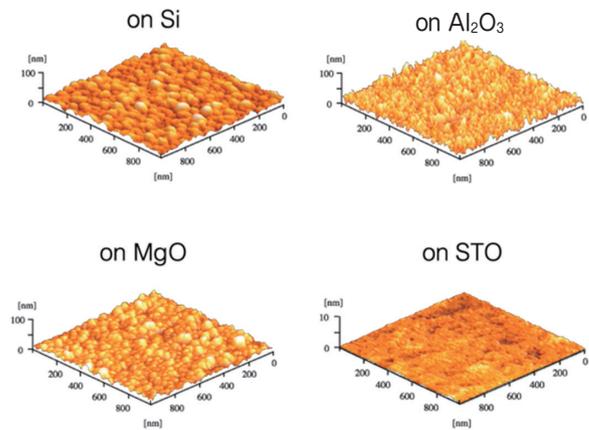


図2 各種基板上での炭素膜成膜のAFM像。  
STO基板上でのみ平坦な膜成長が確認された。

また、分子動力学計算により基板と炭素クラスターの吸着エネルギーを見積もることで基板選択をしています。酸化マグネシウム、サファイア、シリコン、チタン酸ストロンチウム (STO) を候補基板としたところ、STOで平坦な膜成長が予想されました。実際の成膜でもSTOでの超平坦な膜成長を確認しています。酸素雰囲気では強すぎた酸化雰囲気が二酸化炭素中での優しい酸化と適切な基板選択により、グラフェンのレイヤーバイレイヤー成長が可能になりました。吸着エネルギーに注目した手法を酸化物の結晶成長にも応用し、シリコン基板上でのエピタキシャル成長の結晶方向を予測しています。シリコン基板上の酸化マグネシウムのエピタキシャル成長の予測では、結晶配向が実験的にも確認されました。

[1] ACS Omega 2 (2017) 1523.

[2] Sci. Repo.12 (2022) 15809.

[3] Compt. Rend. 59 (1864) 873.

• パワー半導体実装評価技術

パワー半導体は、高電圧・大電流を制御するために使用される半導体素子であり、電力変換や電動機制御など、産業において重要な役割を果たしています。パワー半導体の実装技術においては、素子自体の性能だけでなく、実際の動作環境を考慮して信頼性や耐久性なども評価する必要があります。近年SiCやGaNなど新

たな半導体材料が登場しパワー半導体に適用されています。これらの新しいデバイスは従来のSiデバイスと比較して高速・高耐電圧・高周動作という長所を持っていますが、このようなデバイスに対応するために実装技術としてもより高度な性能を求められています。

そのような先端パワー半導体に対応する実装評価技術として、以下のような評価設備を保有しています。パワー半導体の電気特性を評価するために半導体パラメータアナライザやカーブトレーサー、ダイボンディング部やワイヤーボンディング部の接合強度を評価するためにボンドテスター、試作サンプルの放熱性能を評価するために熱抵抗測定システム、信頼性を評価するためにパワーサイクル試験機、その他サンプルの試作を行うためにダイボンダや太線ワイヤーボンダなども保有しています。

・**微細加工**

県内企業や大学と連携して、ナノ周期構造を用いた光学素子やマイクロ流体チップの研究開発に不可欠な微細加工技術の開発に取り組んでいます。その一例として、電子線により架橋反応が起こる水素シルセスキオキサン (HSQ) 利用した事例があります。

HSQ はシロキサン結合を有するため、架橋反応により石英に近い組成に変化します。この特性を利用して、電子線描画によりナノサイズの HSQ パターンを形成し、非晶質カーボンのドライエッチングマスクに用いて、非晶質カーボンのナノ金型を作製しました。そして、非晶質カーボンのナノ金型を用いて、硼珪酸ガラスに対して、熱ナノインプリントによりナノ周期を転写した事例があります。また、最近では、HSQ を熱ナノインプリントのテスト金型に使用可能か検討しました。具体的には、図3左の電子線顕微鏡(SEM)像に示すようにシリコン基板上にHSQの400 nm周期のナノパターンを形成しました。そして、図3右に示すようにシクロオレフィンポリマー (COP) にパターン転写できることを確認しています。50回の熱ナノインプリントにHSQ金型が耐えられることを確認していて、研究開発段階であれば、熱ナノインプリントにHSQ金型は十分に使用できると考えられます。今後、これらの技術を応用して、企業の研究開発を支援します。

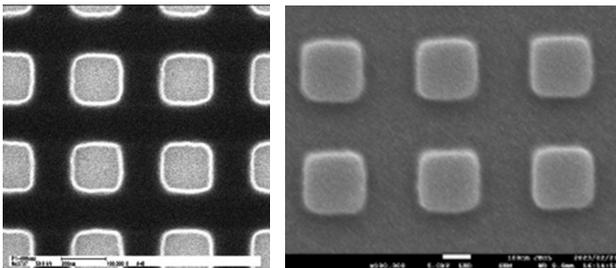


図3 水素シルセスキオキサン (HSQ) 金型上のパターン例 (左) とシクロオレフィンポリマー (COP) に転写した 400 nm 周期パターンの SEM 像。

・**技術研究会主催**

次世代実装技術の開発のため、次世代電子実装システム技術研究会を立ち上げました。熊本大学・青柳昌宏 卓越教授を招聘し、2022年4月に設立しました。昨年度は実施する研究計画を議論し、今年度から研究計画に基づき、各社の材料、装置、加工、評価に関して Test Element Group (TEG) を活用して、チップレット技術 (図4) を中心とした研究開発を推進します。

本研究会の目的は、国内外の学会への参加による情報の発信と様々な企業と連携し、次世代半導体分野において TEG の作製から実装および評価まで一貫して研究開発を実施し、新たなイノ

ベーションを起こすことです。また、本研究会の各プロジェクトが終了した際には、確立した TEG 及び評価方法が活用出来るように整備を進めます。企業においては新規参入のハードルを低くすることが可能になり、これら活動を通じて日本半導体産業の活性化を目指していきます。

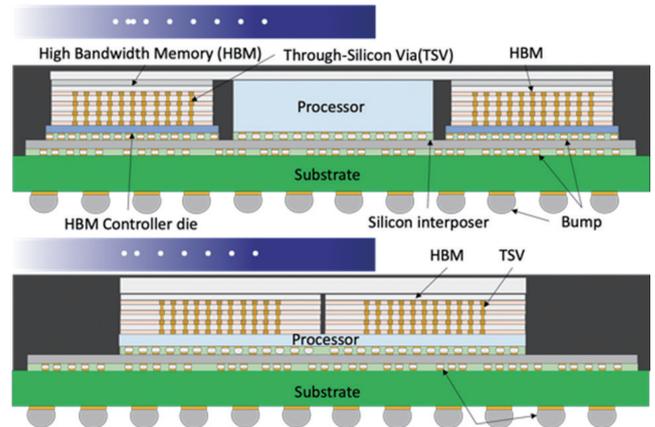


図4 2.5次元および3次元積層実装技術。

・**ファブラボの運営**

デバイス系だけではなく全所を網羅してファブラボβの運営を行なっています。ファブラボは米国マサチューセッツ工科大学を発祥として全世界に広がった「開かれた工房」です。ファブラボは、デジタルからアナログまでの多様な工作機械を備えた、実験的な市民工房のネットワークです。個人による自由なものづくりの可能性を拡げ、「自分たちの使うものを、使う人自身がつくる文化」を醸成することを目指しています。当ファブラボでは、CO<sub>2</sub> レーザー加工機、半導体レーザー加工機、3D プリンター、エアブラシなどを揃えています。内閣府戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) での成果として 3D 光造形機もファブラボに設置されています。

4. おわりに

KISTEC の電子デバイス系グループについて活動トピックスを紹介しました。更に産業界のニーズに応えられるような研究開発・技術支援・人材育成を行なっていきたいと考えます。

**■ 連絡先**

地方独立行政法人神奈川県立産業技術総合研究所  
電子技術部 統括専門研究員 金子 智  
〒 243-0435 海老名市下今泉 705-1  
Email:satoru@kistec.jp  
電話：046-236-1500

■ 研究トピックス

第一原理計算と機械学習による無機材料の設計・探索

おおば ふみやす

東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料研究所 大場 史康

1. はじめに

現代の材料開発に要求されるような多様なニーズを満たす新材料を開拓するという難題に対して、計算科学手法やデータ科学手法の利用が期待されている。いわゆる、マテリアルズインフォマティクスによるアプローチであり、データ科学手法、計算科学手法、実験により候補物質の段階的なスクリーニングを行うことで、材料探索を効率化できると考えられる。まず、設計・探索指針に基づいて探索空間を決めた後、機械学習により構築した予測モデルや第一原理計算を用いて、ターゲットとする基礎物性・格子欠陥特性や安定性の観点から候補物質を計算機中 (*in silico*) でスクリーニングし、有望な候補を実験対象として提案する。これを図1に模式的に示す。このように、データ科学、計算、実験を密接に連携させたアプローチにより、物質・材料の探索を加速できる可能性があるだけでなく、膨大なデータを解析することで、設計・探索指針に関する新たな視点の発見や普遍的な学理の構築につながることも期待できる。

以上のようなマテリアルズインフォマティクスに立脚した物質・材料探索において、計算科学手法により信頼性の高い理論予測を行うため、また機械学習のための信頼性の高いデータを系統的に生成するためには、高精度と高速を両立させた手法や計算実行・結果解析の自動化が不可欠である。本稿では、半導体の例を中心に、基礎物性及び格子欠陥特性の第一原理計算による予測とデータ駆動での新物質探索への展開に関する筆者らの取り組み<sup>1)–6)</sup>を紹介する。

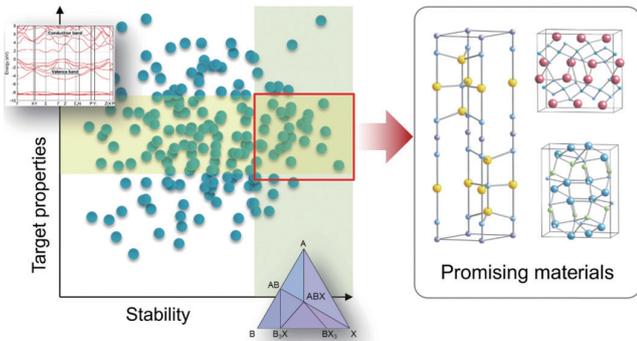


図1. 第一原理計算及び機械学習による予測モデルを用いた候補物質の *in silico* スクリーニングの概念図。ターゲットとする基礎物性・格子欠陥特性や安定性の観点から、有望物質を選定し、実験の対象として提案。文献[1]より転載 (Creative Commons Attribution 4.0 license)。

2. 第一原理計算による基礎物性・格子欠陥特性の予測と計算データの機械学習

第一原理計算の精度は、計算に用いる近似に大きく依存することが知られている。密度汎関数理論の枠組みにおいて、標準的な近似である局所密度近似 (local density approximation: LDA)<sup>7), 8)</sup> や一般化勾配近似 (generalized gradient approximation: GGA)<sup>9), 10)</sup> を用いると、多くの物質についてバンドギャップが過小評価される。また、空間的に局在した軌道を適切に表現できないため、局在軌道のオンサイト・クーロン相互作用を簡便に補正した LDA +  $U$ /GGA +  $U$ 法<sup>11)</sup>、LDA/GGA にフォック交換項を混合したハ

イブリッド汎関数<sup>12)–15)</sup>、多体摂動論に基づいた  $GW$  近似<sup>16), 17)</sup> 等が提案されている。ハイブリッド汎関数や  $GW$  近似による計算は、LDA/GGA の数十倍から数百倍、場合によってはそれ以上のコストを要するが、近年の計算手法やプログラムの発展とコンピュータの演算性能向上により、各論的な研究には比較的手軽に使えるようになってきた。しかし、物質探索の場合のように多くの候補物質を対象とするのは困難である。そこで、著者らはハイブリッド汎関数による計算を摂動的に行うなど、高精度と高速をバランスよく両立させるための手法の開発に取り組んでいる<sup>3)</sup>。

半導体表面におけるバンド位置 (イオン化ポテンシャル、電子親和力) は、表面機能を考える上で重要であるだけでなく、ヘテロ界面でのバンドオフセットの概算にも利用できる。そこで、第一原理計算によりイオン化ポテンシャル及び電子親和力を精確かつ高速に予測するための手法開発を進めている<sup>3), 5), 6), 19)</sup>。図2に典型的な半導体表面を対象としたバンドアライメントの多体摂動論に基づいた高精度計算の例を示す<sup>1), 5), 6)</sup>。実験値がよく再現されており、本手法により未知物質についてもそのバンド位置の高精度な予測が可能と考えられる。一方、本手法は膨大な計算コストを要するため、高精度計算によるベンチマークテストとしては有効であるが、物質探索に利用するためには、精度をできる限り確保しつつ、高速化した手法が必要である。これについても、上述の摂動的なハイブリッド汎関数計算が有効であることを示している<sup>3), 19)</sup>。

他にも、半導体中の希薄な点欠陥の特性予測のための高精度計算手法を開発し<sup>4)</sup>、 $ZnSnP_2$ <sup>20)</sup>、 $SnS$ 、 $Sn_2S_3$ 、 $SnS_2$ <sup>21)</sup>、 $Zn_3N_2$ <sup>22)</sup>、 $ScN$ <sup>23)</sup>、 $ZnSnN_2$ <sup>24)</sup>、 $Cu_3N$ <sup>25)</sup>、ペロブスカイト酸化物<sup>26)</sup>等の様々な半導体中の点欠陥の理解を進めている。また酸化物等で重要となるスモールポーラロンについても、類似手法でモデル化し、 $Ga_2O_3$ の多形等へ応用している<sup>27)</sup>。

以上のような基礎物性や格子欠陥特性の計算の全プロセスを自動化することで、計算によるハイスルーブットスクリーニングに利用するだけでなく、機械学習のための系統的なデータ生成が可能となる。そのため計算手法とプログラムの開発、近似の系統的なベンチマークテスト、機械学習による予測モデルの構築を進めている<sup>3), 4), 28)–30)</sup>。

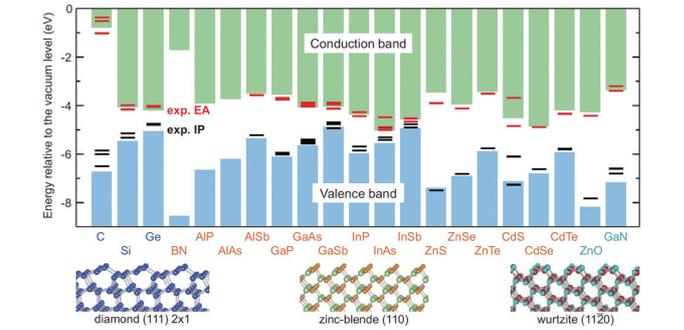


図2. 半導体のバンドアライメント<sup>1), 5), 6)</sup>。下図に示した各半導体の無極性表面について、多体摂動論に基づいた  $GW$   $G^0$  近似 (HSE06 からの摂動) による真空準位基準での価電子帯上端及び伝導帯下端の計算結果を、横線で示したイオン化ポテンシャル及び電子親和力の実験値<sup>18)</sup>と比較している。文献[1]より転載 (Creative Commons Attribution 4.0 license)。

### 3. ハイスループットスクリーニングによる新物質探索

上述のような基礎物性や格子欠陥特性の第一原理計算やその結果の機械学習により構築した予測モデルを用いることで、物質探索が効率化できる可能性がある。とくに第一原理計算に基づいた半導体のスクリーニングを、米国コロラド大の Zunger ら<sup>31), 32)</sup>、NREL の Zakutayev と Lany ら<sup>32)</sup>、ベルギー IMCN の Hautier ら<sup>33), 34)</sup> が先導的に行っており、スクリーニングにより提案された物質を合成した例も報告されている<sup>31), 32), 34)</sup>。筆者らも第一原理計算や機械学習による予測モデルを用いて様々な物質の探索を進めており、その一例として、第一原理計算による新しい3元系亜鉛窒化物半導体の探索結果を報告している<sup>2)</sup>。

電子・ホール輸送に有利なバンド構造の観点から、3元系亜鉛窒化物に着目し、無機結晶構造データベース (ICSD) に報告されている様々な窒化物の結晶構造中の元素を他の元素で置換することで、約 600 種類の候補物質を作成した。これらを対象に、競合相や格子振動に対して安定であること、バンドギャップを持つこと、電子またはホールの有効質量が GaN と同程度あるいはそれ以下であることを条件として、スクリーニングを行った。その結果、図 3 (a) に示す 3 つのカテゴリーに分類される計 21 種類の有望な物質を選出した。このうち、左側に示すカテゴリーの 6 つは、過去に半導体として実験あるいは理論予測の報告がある物質であり、これらが的確に選ばれたことは本スクリーニングの手法や基準が妥当であることを示している。また、中央のカテゴリーの 4 つの物質については、合成の報告はあるが半導体としての応用が未開拓である。そして、残りの 11 つは、探索当時 ICSD に掲載されておらず、新物質と呼べる。

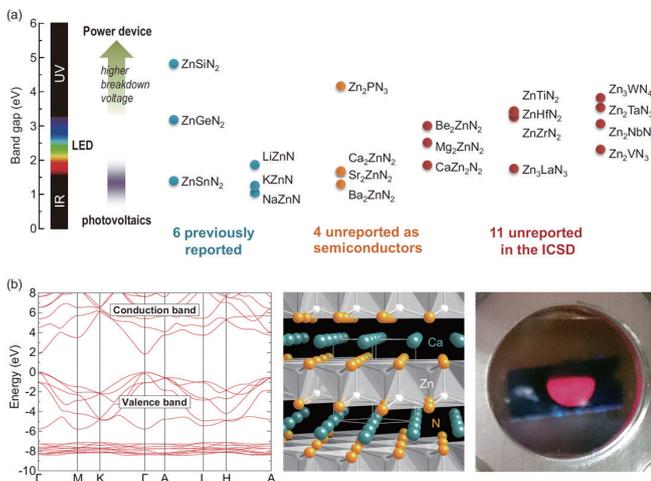


図 3. (a) 第一原理計算を用いたスクリーニングにより選出された 3 元系亜鉛窒化物<sup>2)</sup>。(b) 予測された新物質の一つである  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  のバンド構造 (左)、結晶構造 (中)、高圧合成 (1200 °C、5.0 GPa、1h) により得られた多結晶試料からの赤色フォトルミネッセンス (右)。文献 [1] より転載 (Creative Commons Attribution 4.0 license)。

これらの新物質の中でも、図 3 (b) に示す  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  は、その構成元素が地球上に豊富に存在し、GaN と同程度の電子・ホール有効質量、赤色発光に適した直接遷移型のバンド構造 (バンドギャップ 1.8 eV) といった理論予測結果から、とくに有望な新物質といえる。そこで、この  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  を合成実験の対象として、連携している東京工業大学の平松・細野グループに提案した。相平衡の計算により  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  が高い窒素化学ポテンシャル下で安定なことが予測されたことと、平松・細野グループの合成経験に基づいて、高圧合成法を選択した。様々な合成条件の検討の結果、1200 °C、

5.0 GPa、1h の条件下で、理論予測と等しい結晶構造を有する新物質  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  が得られた<sup>2)</sup>。さらに直接遷移型を示唆する光吸収スペクトルや図 3 (b) に示すバンド端からの赤色発光も観測された。そのバンドギャップは 1.9 eV と、理論予測 1.8 eV とほぼ一致する値であり、発光特性についても実験により実証された。

第一原理計算からは、この  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  は高圧相ではなく、高圧合成以外でも高い窒素化学ポテンシャルが実現できる手法であれば、合成可能と予測されている。実際に、平松・細野グループが窒素ラジカルを用いた MBE による  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  のエピタキシャル薄膜成長を報告している<sup>35)</sup>。また、状態図計算及び固溶体モデル計算により、 $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  は典型的な合成温度で類縁物質の  $\text{CaMg}_2\text{N}_2$  と全率固溶体を形成し、直接遷移型のバンド構造を保ったままバンドギャップを可視光ほぼ全域に対応する範囲で制御できることを予測している<sup>2)</sup>。これについても、平松・細野グループが幅広い組成域での固溶体の形成と発光の観測に成功している<sup>36)</sup>。また、更なる物質探索を進めることで、新物質である  $\text{SrZn}_2\text{N}_2$  及び  $\text{YZn}_3\text{N}_3$  の結晶構造・光学特性の予測と実験による実証に至っている<sup>37), 38)</sup>。

このような第一原理計算を主体としたスクリーニングにおいて、高い計算コストがボトルネックとなり、検討できる物質数が制限される。そこで、機械学習による物性等の予測モデルの活用や機械学習による推薦に基づいて第一原理計算の対象物質を選択し、自動的に探索を行うシステムの開発を進めている<sup>39), 40)</sup>。

### 4. おわりに

第一原理計算による半導体の基礎物性・格子欠陥特性の予測とデータ科学手法との連携、物質・材料探索に向けた *in silico* スクリーニングについて紹介した。本稿で述べたように、近年の計算手法・プログラムの進展とコンピュータの演算性能の向上により、実用レベルでの物性予測や物質・材料探索が現実的になってきた。今後、計算手法を高度化し、データ科学手法との連携を強化することで、物質・材料の設計・探索と俯瞰的な理解に広く貢献したいと考えている。

本稿で紹介した研究は、主に東京工業大学の熊谷悠氏、高橋亮氏、Lee A. Burton 氏、畠山泰典氏、平松秀典氏、細野秀雄氏、千葉大学の日沼洋陽氏、京都大学の田中功氏、ウィーン大学の Andreas Grüneis 氏、Georg Kresse 氏と共同で行った (所属は研究当時)。ここに謝意を表する。

### 文献

- 1) F. Oba and Y. Kumagai, *Appl. Phys. Express*, **11**, 060101-1-30 (2018).
- 2) Y. Hinuma, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, L. A. Burton, H. Sato, Y. Muraba, S. Iimura, H. Hiramatsu, I. Tanaka, H. Hosono, and F. Oba, *Nat. Commun.*, **7**, 11962-1-10 (2016).
- 3) Y. Hinuma, Y. Kumagai, I. Tanaka, and F. Oba, *Phys. Rev. B*, **95**, 075302-1-10 (2017).
- 4) Y. Kumagai and F. Oba, *Phys. Rev. B*, **89**, 195205-1-15 (2014).
- 5) A. Grüneis, G. Kresse, Y. Hinuma, and F. Oba, *Phys. Rev. Lett.*, **112**, 096401-1-5 (2014).
- 6) Y. Hinuma, A. Grüneis, G. Kresse, and F. Oba, *Phys. Rev. B*, **90**, 155405-1-16 (2014).
- 7) S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, *Can. J. Phys.*, **58**, 1200-1211 (1980).
- 8) J. P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B*, **23**, 5048-5079 (1981).
- 9) A. D. Becke, *Phys. Rev. A*, **38**, 3098-3100 (1988).
- 10) J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3865-3868 (1996).

- 11) V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B*, **44**, 943-954 (1991).
- 12) A. D. Becke, *J. Chem. Phys.*, **98**, 1372-1377 (1993).
- 13) J. P. Perdew, M. Ernzerhof, and K. Burke, *J. Chem. Phys.*, **105**, 9982-9985 (1996).
- 14) J. Heyd, G. Scuseria, and M. Ernzerhof, *J. Chem. Phys.*, **118**, 8207-8215 (2003).
- 15) A. V. Krukau, O. A. Vydrov, A. F. Izmaylov, and G. E. Scuseria, *J. Chem. Phys.*, **125**, 224106-1-5 (2006).
- 16) L. Hedin, *Phys. Rev.*, **139**, A796-A823 (1965).
- 17) M. S. Hybertsen and S. G. Louie, *Phys. Rev. B*, **34**, 5390-5413 (1986).
- 18) W. Mönch, *Semiconductor Surfaces and Interfaces* (Springer, Heidelberg, 2001).
- 19) Y. Hinuma, Y. Kumagai, I. Tanaka, and F. Oba, *Phys. Rev. Mater.*, **2**, 124603-1-20 (2018).
- 20) Y. Kumagai, M. Choi, Y. Nose, and F. Oba, *Phys. Rev. B*, **90**, 125202-1-12 (2014).
- 21) Y. Kumagai, L. A. Burton, A. Walsh, and F. Oba, *Phys. Rev. Applied*, **6**, 014009-1-14 (2016).
- 22) Y. Kumagai, K. Harada, H. Akamatsu, K. Matsuzaki, and F. Oba, *Phys. Rev. Applied*, **8**, 014015-1-12 (2017).
- 23) Y. Kumagai, N. Tsunoda, and F. Oba, *Phys. Rev. Applied*, **9**, 034019-1-10 (2018).
- 24) N. Tsunoda, Y. Kumagai, A. Takahashi, and F. Oba, *Phys. Rev. Applied*, **10**, 011001-1-6 (2018).
- 25) 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**, 1801968-1-8 (2018).
- 26) N. Tsunoda, Y. Kumagai, M. Araki, and F. Oba, *Phys. Rev. B*, **99**, 060103(R)-1-5 (2019).
- 27) T. Gake, Y. Kumagai, and F. Oba, *Phys. Rev. Mater.*, **3**, 044603-1-11 (2019).
- 28) Y. Hinuma, G. Pizzi, Y. Kumagai, F. Oba, and I. Tanaka, *Comput. Mater. Sci.*, **128**, 140-184 (2017).
- 29) Y. Hinuma, Y. Kumagai, F. Oba, and I. Tanaka, *Comput. Mater. Sci.*, **113**, 221-230 (2016).
- 30) Y. Hinuma, H. Hayashi, Y. Kumagai, I. Tanaka, and F. Oba, *Phys. Rev. B*, **96**, 094102-1-24 (2017).
- 31) R. Gautier, X. Zhang, L. Hu, L. Yu, Y. Lin, T. O. L. Sunde, D. Chonl, K. R. Poepplmeier, and A. Zunger, *Nat. Chem.*, **7**, 308-316 (2015).
- 32) A. Zakutayev, X. Zhang, A. Nagaraja, L. Yu, S. Lany, T. O. Mason, D. S. Ginley, and A. Zunger, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 10048-10054 (2013).
- 33) G. Hautier, A. Miglio, G. Ceder, G.-M. Rignanese and X. Gonze, *Nat. Commun.*, **4**, 2292-1-7 (2013).
- 34) A. Bhatia, G. Hautier, T. Nilgianskul, A. Miglio, J. Sun, H. J. Kim, K. H. Kim, S. Chen, G.-M. Rignanese, X. Gonze, and J. Suntivich, *Chem. Mater.*, **28**, 30-34 (2016).
- 35) M. Tsuji, K. Hanzawa, H. Kinjo, H. Hiramatsu, and H. Hosono, *ACS Appl. Electron. Mater.*, **1**, 1433-1438 (2019).
- 36) M. Tsuji, H. Hiramatsu, and H. Hosono, *Inorg. Chem.*, **58**, 12311-12316 (2019).
- 37) R. Kikuchi, K. Ueno, T. Nakamura, T. Kurabuchi, Y. Kaneko, Y. Kumagai, and F. Oba, *Chem. Mater.*, **33**, 2864-2870 (2021).
- 38) R. Kikuchi, T. Nakamura, T. Kurabuchi, Y. Kaneko, Y. Kumagai, and F. Oba, *Chem. Mater.*, **33**, 8205-8211 (2021).
- 39) A. Takahashi, Y. Kumagai, J. Miyamoto, Y. Mochizuki, and F. Oba, *Phys. Rev. Mater.*, **4**, 103801-1-13 (2020).
- 40) A. Takahashi, Y. Kumagai, H. Aoki, R. Tamura, and F. Oba, *Sci. Tech. Adv. Mater. Methods*, **2**, 55-66 (2022).

■ 連絡先



東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料研究所・教授 大場 史康  
〒226-8503 横浜市緑区長津田町 4259 R3-7  
E-mail: oba@msl.titech.ac.jp

ご 案 内

■ MRM2023/IUMRS-ICA2023

第24回 IUMRS-ICA が、第3回 MRM と合同で、それぞれの特徴を融合し新たな価値を創造する大規模な会議 (Grand Meeting) MRM2023/IUMRS-ICA2023 として 2023 年 12 月に京都で開催されます。世界中から材料科学・工学に関連するあらゆる分野で活躍されている科学者、技術者、学生のご参加を募ります。

主 催：日本 MRS

日 時：2023 年 12 月 11 日 (月) ~ 16 日 (土)

会 場：国立京都国際会館 (京都市左京区岩倉大鷲町 422)

詳 細：<https://mrm2023.jmru.org>

Call for Symposia：現在、シンポジウム提案を上記のサイトで受け付け中です。

問合せ：MRM2023/IUMRS-ICA2023 運営事務局

(Team MRM&ICA2023) E-mail：info\_mrm@jmru.org

■ 第33回日本MRS年次大会

—マテリアルイノベーションの最前線

—基礎学理の深化と環境調和材料・プロセスの創成に向けて—

主 催：日本 MRS (<http://www.mrs-j.org/>)

日 時：2023 年 11 月 14 日 (火) ~ 16 日 (木)

会 場：産業貿易センタービル (横浜市中区山下町) 他

形 態：対面形式で実施予定

シンポジウム (13 件)

A：計算機シミュレーションによる先端材料の解析・機能創成

B：遷移金属化合物の探索・計測・計算科学における新展開

C：ナノカーボンマテリアルの機能と応用

D：エキゾチック強誘電体・極性材料の新機能

E：高温過酷環境に耐えうる材料革新～セラミックスおよびセラミックス基複合材料の材料科学～

F：イオンビーム技術によるマテリアルイノベーションの躍進

G：有機イオントロンクス — 持続可能な次世代エネルギー・環境 & バイオデバイス —

H: ソフトマテリアルサイエンス  
 I: プラズマライフサイエンス  
 J: デジタルヘルスマネジメントのためのバイオセンシングシステム  
 K: エコものづくりセクション  
 L: 社会実装材料研究シンポジウム  
 S: マテリアルズ・フロンティア

詳細: <https://www.mrs-j.org/meeting2023/jp/>

現在、講演申込を上記のサイトで受付中です。

重要期日: 講演申込 締切: 7月31日(月)  
 参加登録 開始: 8月10日(木)  
 早期参加登録締切: 9月20日(水)  
 事前参加登録: 10月20日(金)  
 Abstract WEB 公開: 11月10日(金)

問合せ: 日本 MRS 年次大会事務局  
 〒231-0023 横浜市中区山下町2  
 産業貿易センタービル B123  
 E-mail: [meeting2023@mrs-j.org](mailto:meeting2023@mrs-j.org)

#### ■共催・協賛・公募

▽「医工学シンポジウム 2023」— 医工連携の現在そして未来 —  
 主 催: 日本学術会議生体医工学分科会及びバイオマテリアル分科会  
 共 催: 日本 MRS 他  
 日 時・場所: 2023年7月22日(土) 13:00 ~ 16:30  
 場 所: 東北大学青葉山キャンパスサイエンスキャンパスホール  
 (ハイブリッド開催予定)  
 詳細 URL: <https://forms.gle/c14YkwzoauTqqZuj6>

#### ■日本MRS組織・役員等(2023年6月~2024年6月定時総会最終)

##### 代表理事・会長

重里 有三 青山学院大学 理工学部 教授

##### 理事・副会長

有沢 俊一 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 経営企画  
 部門 部門長  
 高井まどか 東京大学大学院工学系研究科 バイオエンジニアリン  
 グ専攻 教授  
 中野 貴由 大阪大学大学院 工学研究科マテリアル生産科学専攻  
 教授  
 松下 伸広 東京工業大学 アドバンスメントオフィス/物質理工  
 学院 材料系 副学長・学長特別補佐/教授

##### 理事

青木 学聡 名古屋大学 情報連携推進本部 情報戦略室 教授  
 井口雄一朗 東レ株式会社 研究本部上席執行役員/研究本部長  
 岩崎 峰人 昭栄化学工業株式会社 開発部 部長  
 岩田 展幸 日本大学 理工学部 電子工学科 教授  
 内田儀一郎 名城大学 理工学部 教授  
 岡 伸人 近畿大学 産業理工学部 教授  
 岡部 敏弘 神奈川大学 理学部 非常勤講師  
 折茂 慎一 東北大学 材料科学高等研究所 所長  
 加藤 和広 三菱マテリアル株式会社 イノベーションセンター  
 主任研究員  
 加藤 拓也 出光興産株式会社 次世代技術研究所 主任研究員  
 久保 貴哉 東京大学 先端科学技術研究センター 特任教授  
 嶽本あゆみ 沖縄工業高等専門学校 生物資源工学科 教授

手嶋 勝弥 信州大学 先鋭材料研究所 教授  
 豊田 裕介 株式会社本田技術研究所 材料研究センター  
 執行役員 材料研究センター長  
 永元 公市 リンテック株式会社 研究開発本部 研究所  
 新素材研究部 部長  
 西本 右子 神奈川大学 理学部 教授  
 八田 章光 高知工科大学 システム工学群 教授/副学長  
 待永 広宣 日東電工株式会社 研究開発本部 基幹技術研究  
 センター副センター長 兼 第3グループ長  
 松本 佳久 大分工業高等専門学校 機械工学科 教授/副校長  
 山浦 一成 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 ナノアーキ  
 テクトニクス材料研究センター (MANA) グループ  
 リーダー  
 吉矢 真人 大阪大学大学院工学研究科 マテリアル生産科学専  
 攻 教授  
 渡邊 友亮 明治大学 理工学部 教授/副学長

##### 監事

齋藤 永宏 名古屋大学大学院 工学研究科 化学システム工学  
 専攻 教授  
 酒井 均 日本ガイシ株式会社 研究開発本部 アドバイザー

##### 顧問

東 雄一 公益社団法人 自動車技術会 常務理事  
 伊熊 泰郎 神奈川工科大学 名誉教授  
 岸本 直樹 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 名誉監事  
 白谷 正治 九州大学 システム情報科学研究院 高等研究院長/  
 主幹教授  
 鈴木 淳史 横浜国立大学 名誉教授  
 高原 淳 九州大学 ネガティブエミッションテクノロジー研究  
 センター 特任教授  
 細野 秀雄 東京工業大学 元素戦略研究センター センター長/  
 栄誉教授 名誉顧問  
 山本 寛 日本大学 名誉教授

##### 名誉顧問

梶山 千里 公立大学法人 福岡女子大学 理事長・学長  
 岸 輝雄 国立研究開発法人 物質・材料研究機構/東京大学  
 顧問/名誉教授  
 高井 治 関東学院大学 材料・表面工学研究所/名古屋大学  
 教授/名誉教授  
 堂山 昌男 東京大学/帝京科学大学 名誉教授  
 増本 健 公益財団法人 電磁材料研究所 相談役  
 山本 良一 東京大学/東京都公立大学法人 名誉教授/理事長  
 吉村 昌弘 国立成功大学/東京工業大学 招聘講座教授/名誉  
 教授



## To the Overseas Members of MRS-J

### ■Diversity and Self-skepticism of the Material Science..... P.1

*Graduate school of Science and Engineering, Aoyama Gakuin University, Professor, Yuzo Shigesato*

We have developed and innovated various technologies based on the material science, that have been developing our civilization. During the development in progress we are now facing various important issues, such as achievement of SDGs (Sustainable Development Goals). In order to fulfill these complex and interdisciplinary mission, "Diversity" should be quite important in the Material science field that secure Self-skepticism on the science and philosophy.

"Imagination is more important than knowledge. Knowledge is limited. Imagination encircles the world. (Albert Einstein)" Imagination should be nurtured by the diversity in the fields of material science.

### ■Introduction of Electronics Materials and Devices Group at KISTEC ..... P.2

*Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology (KISTEC), Chief Research Specialist, Satoru Kaneko*

KISTEC (Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology) is a local incorporated administrative agency established in April 2017. KISTEC has been founded by merger of public test and research institute (Kanagawa Industrial Technology Center, KITC) and public interest incorporated foundation (Kanagawa Academy of Science and Technology, KAST). We promote regional industry and science and technology, utilizing the mutual advantages of KITC's technical support capability and KAST's research and development capability. And we also try to make the residents' lives more

enriched, and to fulfill the needs of our users, with five main activities; Research and Development, Technical Support, Commercialization Support, Personnel Training, and Collaborative Network. The activity of electronic materials and devices groups are briefly introduced in this issue.

### ■Design and exploration of inorganic materials using first-principles calculations and machine learning..... P.4

*Laboratory for Materials and Structures, Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, Professor, Fumiyasu Oba*

The search for novel inorganic materials is increasingly important as their applications become more prevalent in modern society. This situation has been stimulating not only experimental but also computational exploration of as-yet-unreported inorganic materials, typically using first-principles calculations. In such computational searches, reliable design principles, as well as accurate and efficient computational schemes, are key requirements for the successful identification of target materials and functionalities. In this article, the design and exploration of inorganic materials using first-principles calculations are discussed, alongside relevant computational methods for the prediction of fundamental and defect properties. Examples include the prediction of the novel ternary zinc nitride semiconductors  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$ ,  $\text{SrZn}_2\text{N}_2$ , and  $\text{YZn}_3\text{N}_3$ , the predicted crystal structures and optical properties of which have been verified experimentally. A combination of high-throughput first-principles calculations and machine learning is also discussed, which enables materials exploration in a much wider chemical space than that solely using computationally demanding first-principles calculations.

編集  
後記

はじめに、巻頭言「やあ こんにちは」、「研究所紹介」、「研究トピックス」をご執筆いただきました、日本 MRS 理事副会長 青山学院大学・重里有三先生、神奈川県立産業技術研究所・金子智様、東京工業大学・大場史康先生には、大変ご多忙にも関わらずご寄稿いただきましたこと、厚く御礼申し上げます。今号の編集を進めるなか、Covid-19の5類感染症への切り替わりを迎え、社会はいよいよ活気を取り戻す時期に移ろうとつづつあります。本年は年次大会につぎ師走には MRM2023 および IUMRS-ICA2023 の開催も控えており、先端の研究講演に出会い議論の花を咲かせることは元より、皆様と古都京都にて言葉と盃を交わすことを待ち遠しく思います。最後に、会員の皆様のご活躍とご健勝、ならびに日本 MRS の益々の発展を祈念申し上げます。  
(寺西 義一・松田 晃史)

©日本MRS ©一般社団法人 日本MRS 事務局 〒231-0023 横浜市中区山下町2番地 産業貿易センタービルB123

http://www.mrs-j.org Email: membership@mrs-j.org

2023年日本MRS ニュース編集委員会 第35巻 第2号 2023年6月25日発行

委員長: 岩田 展幸 (日本大学 iwata.nobuyuki@nihon-u.ac.jp)

副委員長: 明石 孝也 (法政大学 akashi@hosei.ac.jp)

委員: 鮫島 宗一郎 (鹿児島大学)、西本 右子 (神奈川大学)、川又 由雄 (芝浦メカトロニクス株式会社)、狩野 旬 (岡山大学)、新國 広幸 (東京工業高等専門学校)、寺迫 智昭 (愛媛大学)、松田 晃史 (東京工業大学)、寺西 義一 (東京都立産業技術研究センター)、籠宮 功 (名古屋工業大学)

顧問: 山本 寛 (日本大学)、岸本 直樹 (物質・材料研究機構)、伊藤 浩 (東京工業高等専門学校)、小林 知洋 (理化学研究所)、寺田 教男 (鹿児島大学)、小椋 理子 (湘北短期大学) 松下 伸広 (東京工業大学)

編集・構成: 一般社団法人日本MRS 印刷・出版: 秋巧社