



神谷利夫 教授



片瀬貴義 准教授

新しい電子機能材料・デバイスを創る

神谷・片瀬研究室

<https://www.msl.titech.ac.jp/~tkamiya/>



kamiya.t.aa@m.titech.ac.jp, katase@mces.titech.ac.jp

◆研究目的

当研究室は、**今まで使われてきた電子材料とは全く違った材料系を自ら見出し、今までは実現できなかった光・電子・エネルギーデバイス**に挑戦しています。計算科学、情報科学を利用し、太陽電池・トランジスタ・パワーデバイス・熱電変換素子・発光素子などのありとあらゆる環境デバイスの劇的な能力向上に挑戦しています。

◆研究テーマ

新無機半導体

低温形成可能な情報端末用高移動度半導体や、パワーデバイス用超ワイドギャップ半導体の新材料とデバイスの開発に取り組んでいます。バンドギャップ 4.12 eV のアモルファス酸化物半導体 a-Ga-O を開発し、希土類イオンを添加することで**無機蛍光体薄膜の室温形成**に成功し、電流駆動の**フレキシブル発光デバイス**を実証しました（図 1）。また、バンドギャップが 5.0 eV 以上の酸化物への新しいドーピング手法の開発に取り組んでおり、新パワー半導体材料群の開拓に挑戦しています。

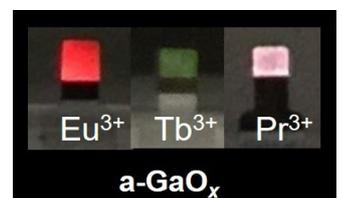


図 1: 希土類添加 a-GaO 発光デバイス

熱電変換材料

従来の熱電変換材料は、希少で毒性のある重元素が主に使われており、大規模な熱電発電の普及の妨げになっています。当研究室では、**全く新しい材料設計により、環境調和元素からなる高性能熱電材料の開発**に挑戦しています。最近では、SrTiO₃ の多結晶体に水素を添加することで、高性能熱電材料に必要な低い熱伝導率と高い電気出力を両立させ、熱電変換効率を向上させることに成功しました（図 2）。

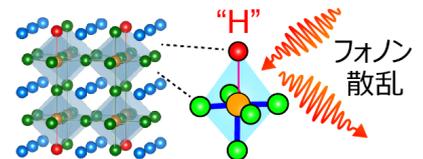


図 2: 水素添加 SrTiO₃ 熱電材料

熱流制御材料

日本における一次供給エネルギーのうち約 1/3 は電力や動力などに利用されていますが、残りの約 2/3 は廃熱として環境中に排出されています。このため、廃熱エネルギーの削減と有効利用は、深刻化するエネルギー問題を解決する重要な課題です。このような背景のもと、当研究室では、結晶構造の次元性が温度変化によって可逆的に変化し、**低温で断熱して高温で放熱する熱伝導制御材料**を開発しました（図 3）。今後、さらに熱伝導率を大きく制御できる材料を開発し、温度管理が重要な自動車の触媒やバッテリー等に应用すれば、デバイスの温度が自発的に調整され、効率のよい熱利用が期待できます。

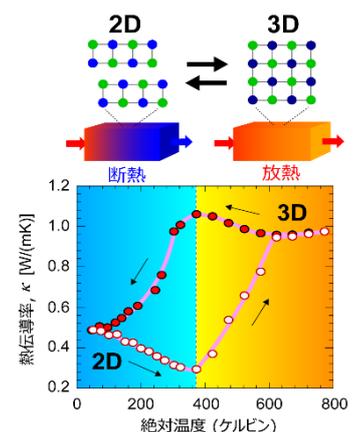


図 3: 熱流制御材料

計算科学・情報科学の利用

最先端の計算科学・情報科学を利用した新無機半導体の材料設計・探索に取り組んでいます。例えば、第一原理非調和フォノン計算により、SrTiO₃ に水素を添加することで結合力の強い Ti-O と弱い Ti-H を混在させ、熱伝導率を低減するというメカニズムを明らかにしました。また、熱電材料で最高性能をもつ SnSe 半導体に対して、Se²⁻を同原子価の Te²⁻で置換すると、高い電気伝導度と低い熱伝導率を両立できることを発見し、そのメカニズムを第一原理欠陥計算により明らかにしました。弱い Sn-Te 結合が形成されることで Sn 空孔が形成されやすくなり、正孔濃度が増加して同時に熱伝導率が下がるという仕組みを解明し、熱電材料を高性能化させる新しいドーピング手法の提案に繋がっています。