●H23年度採択課題　　長谷川　哲也（東京大学大学院 理学系研究科　教授）

軽元素を活用した機能性電子材料の創出

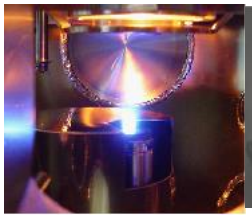
全体計画（H23年10月～H29年3月）

窒素やフッ素などの軽元素を含んだ金属酸化物の合成と新奇電子機能発現、デバイスへの応用

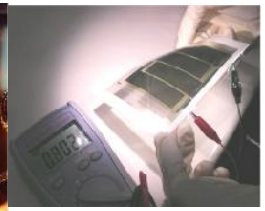
◎軽元素を含んだ電子機能材料の第1原理計算に基づく設計と気相合成

◎有機ELや有機太陽電池への応用

→「軽元素によるバンドエンジニアリング」、「軽元素/酸素の秩序配列による分極制御」、「各有機デバイスに合わせたテーラーメイド材料設計」といった新概念に基づく機能性電子材料の創製を行い、エネルギー変換デバイスへの貢献を目指す。



パルスレーザー蒸着



有機薄膜太陽電池

H25年度の代表的な研究成果

◆酸窒化物$SrTaO_2N$における局所強誘電特性の解明

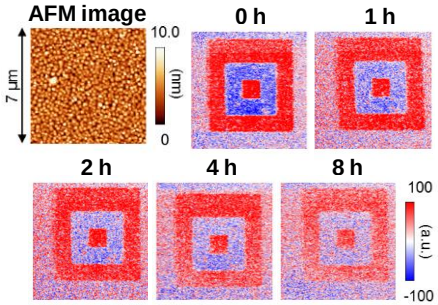
✓圧電応答顕微鏡(PFM)により、電場誘起強誘電領域と自発分極をもつ古典的強誘電領域を観測。

✓第一原理計算との比較から、それぞれO/Nがcis配列、trans配列した相であると同定。

✓$CaTaO_2N$との比較から、エピタキシャル歪によりtrans配列が安定化したことを検証。

光電変換デバイスとしての期待

Cryst. Growth & Design, 14, 87 (2014).　***Sci. Rep***., 4, 4987 (2014).



電場により誘起された分極の緩和過程

◆高移動度透明導電体TaONの光学特性制御

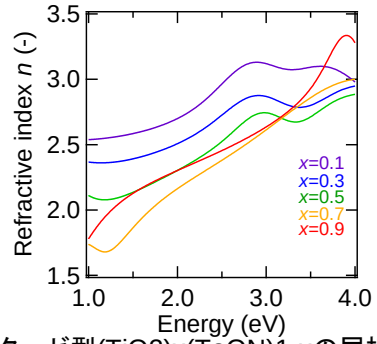
✓高移動度透明導電体アナターゼ型TaONとアタナーゼ型TiO_2との混晶をパルスレーザー堆積(PLD)法により合成。

✓TiO_2/TaON組成比により光学特性やバンドギャップを系統的に制御。

✓TiO2シード層の利用により、ガラス上へのアナターゼTaONの堆積に成功。

有機デバイス用の透明電極として期待

Chem. Mater. 26, 976 (2014).



アナターゼ型(TiO2)x(TaON)1-xの屈折率