

「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」  
平成27年度採択研究代表者

H29 年度  
実績報告書

一杉 太郎

東京工業大学物質理工学院  
教授

界面超空間制御による超高効率電子デバイスの創製

## § 1. 研究実施体制

### (1) 「一杉」グループ

- ① 研究代表者: 一杉 太郎 (東京工業大学物質理工学院 教授)
- ② 研究項目
  - ・微小極限における電気化学の妥当性の検証

### (2) 「渡邊」グループ

- ① 主たる共同研究者: 渡邊 聡 (東京大学大学院工学系研究科 教授)
- ② 研究項目
  - ・第一原理計算による、電圧記憶不揮発性メモリーの動作原理解明と材料最適化
  - ・量子力学に基づくナノ固体電気化学の構築

### (3) 「白木」グループ

- ① 主たる共同研究者: 白木 将 (日本工業大学基幹工学部 教授)
- ② 研究項目
  - ・電子デバイスの実用化に向けた研究、動作原理の検証

## § 2. 研究実施の概要

「固体/固体界面におけるイオンの移動」を電場により制御する技術は、エネルギーデバイス(全固体リチウム電池、燃料電池)において非常に重要である。それに加え、センサーや ReRAM(抵抗変化メモリー)、アトムスイッチ等エレクトロニクス分野においてもその重要性が増している。そして、さらなる高機能化に向けて、イオン移動を精緻に制御した新デバイス創成が望まれている。これらの研究分野を総称して、“イオントロニクス”、あるいは、“Ionotronics”と呼び、新型メモリー、薄膜電池、ニューロモルフィックデバイス、磁性の電圧制御デバイス、新型センサーなどへの期待が高まっている。

本研究チームは薄膜作製技術と計算技術を駆使し、原子レベルで制御された表面や界面を構築する技術を有している。その技術を活用し、従来は探ることが難しかった複合酸化物表面の電子状態評価や、全固体 Li 電池の固体電解質-電極における界面抵抗に関する研究を展開してきた。本プロジェクトでは、そのような知見を活用し、新たな電子デバイス創製を目指している。

本年度、本プロジェクトでは三つの柱を立てて研究を展開した。

### 1. リチウム薄膜電極、固体電解質 $\text{Li}_3\text{PO}_4$ 薄膜、金属薄膜電極を積層したメモリーデバイス

抵抗変化を検出する通常の半導体メモリーではなく、電圧を記憶するという点に特徴がある。その原理は微小な電池であると考えればよい。電池はそれ自体がメモリーである。充電状態と放電状態を 1 と 0 に対応させれば 2 つの情報を記憶する二値メモリーであると理解できる。通常の電池応用としては大きな容量が望まれるが、メモリーとしてみると、1 と 0 の記録に要する電力が小さい、つまり、容量が極めて小さい電池を作ることが重要になる。そこで、イオンを電極の中に溜め込むのではなく、固体電解質と電極界面だけに溜めることができれば、極めて低い消費電力で情報記憶できると考えた。

そこで本年度、リチウムイオンと反応しないニッケルを用いたデバイスを作製し、その動作について詳細に検討した。その結果、3 つの値を記憶できるということを実証した。第一原理計算からも、界面において原子レベルで何が起きているのかほぼ明らかにした。

### 2. 全固体リチウム電池の固体電解質/電極界面研究

$\text{LiNi}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{O}_4$  エピタキシャル薄膜の作製に成功し、薄膜電池動作に成功した。さらに、 $\text{LiTi}_2\text{O}_4$  を用いた薄膜電池において、リチウムイオンの自発的な移動を見出した。本チームの強みである、「モデル界面を作製し、計算科学を駆使してその界面特性を解明する」ことを今後押し進める。

### 3. AI/Robot-driven Materials Research への挑戦

研究の進め方自体を刷新し、「実験室の産業革命」を起こすべく、新実験装置システムを構築している。スパッタ装置と金属電極成膜装置を立ち上げ、電池動作やメモリー動作する試料の作製に成功した。このシステムにソフトウェアを組み込み、材料探索時間の短縮と物質探索範囲の拡大を狙う。それにより、新材料を見出すと共に、新しい化学観、物質観の涵養を目指す。

- 1) Yoshinori Okada, Yasunobu Ando, Ryota Shimizu, Emi Minamitani, Susumu Shiraki, Satoshi Watanabe, and Taro Hitosugi, "Scanning tunneling spectroscopy of superconductivity on surfaces of  $\text{LiTi}_2\text{O}_4(111)$  thin films"  
Nature Communications, 8, 15975 (2017)
- 2) Issei Sugiyama, Ryota Shimizu, Tohru Suzuki, Kuniko Yamamoto, Hideyuki Kawasoko, Susumu Shiraki, and Taro Hitosugi, "A Nonvolatile Memory Device with Very Low Power Consumption Based on the Switching of a Standard Electrode Potential"  
APL Materials, 5, 046105 (2017)