

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新  
2018 年度採択研究代表者

2020 年度 年次報告書
------------------

長谷川 達生

東京大学 大学院工学系研究科  
教授

実験・計算・データ科学融合による 塗布型電子材料の開発

## § 1. 研究成果の概要

第三年次にあたる本年度も、昨年度に続き、実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料高度化の研究開発に取り組んだ。

データ科学による材料探索では、擬対称性にもとづく強誘電体探索を網羅的に実施した。候補集約・新物質発見に成功し、本手法の有効性を実証した。半導体探索では、データ登録された物質の HOMO/LUMO エネルギーとバンド構造を網羅的に計算し、高性能 N 型半導体の候補を複数得た。計算科学による機能予測では、自由エネルギー極小化 (FEM) 法による有機分子の構造予測を実施し、従来法に比べ予測精度向上を確認した。対称性・層状性の仮定の下、量子計算により安定構造を探索する手法開発を進め、ペンタセンの予測構造と実験で得られた各多形構造の一致を確認した。また量子計算により強誘電体の正／逆圧電定数を予測する手法を開発した。半導体実材料開発では、拡張パイ骨格を非対称アルキル置換した分子開発を進め、非対称骨格からなる材料で最高の移動度を得た。回転自由度を持つ置換基のパイ骨格への連結による多彩な層状構造発現と、これらの制御可能性を見出した。強誘電体開発では、静電エネルギー貯蔵に向けた相変化原理を考案・実証した。また水酸基の回転により分極反転する強誘電体を新たに見出した。放射光による構造解析法開発では、パターン関数をもとに少数回折点から構造特定する手法高度化を進めた。電子線回折による構造解析法開発では、微小結晶の回折測定／解析技術高度化と、標準試料の構造解析に成功した。半導体デバイス開発では、清浄界面を有する塗布型 TFT を構築できる拡張メニスカス塗布法を開発し、理論限界に迫るスイッチング性能確認に成功した。また塗布型半導体を用いた実用的製膜手法で良好な結果を得た。強誘電体デバイスでは、透明強誘電体薄膜でもドメイン壁を可視化できる複屈折電界変調イメージング法開発に成功した。

## § 2. 研究実施体制

### (1) 長谷川グループ

① 研究代表者:長谷川 達生 (東京大学 大学院工学系研究科、教授)

② 研究項目

・実験科学による塗布型電子材料の開発

### (2) 堀内グループ

① 主たる共同研究者:堀内 佐智雄 (産業技術総合研究所 電子光技術研究部門、上級主任研究員)

② 研究項目

・塗布型有機強誘電体材料の開発

### (3) 松井グループ

① 主たる共同研究者:松井 弘之 (山形大学 大学院有機材料システム研究科、准教授)

② 研究項目

・機械学習と計算科学による塗布型電子材料の構造・機能予測

(4) 都築グループ

① 主たる共同研究者: 都築 誠二 (産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター、上級主任研究員)

② 研究項目

・計算科学による塗布型電子材料の精密電子構造解析

(5) 熊井グループ

① 主たる共同研究者: 熊井 玲児 (高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所、教授)

② 研究項目

・塗布型電子材料の高度結晶構造解析

(6) 米倉グループ

① 主たる共同研究者: 米倉 功治 (理化学研究所 放射光科学研究センター、グループディレクター / 東北大学 多元物質科学研究所、教授)

② 研究項目

・クライオ電子顕微鏡を用いた塗布型電子材料の電子線結晶構造解析  
・高精度測定・解析の手法の開発  
・電子回折の特性を利用した構造多形解析や電荷情報の取得

【代表的な原著論文情報】

- [1] Sachio Horiuchi, Shoji Ishibashi, Rie Haruki, Reiji Kumai, Satoshi Inada, and Shigenobu Aoyagi, "Metaelectric multiphase transitions in a highly polarizable molecular crystal", *Chemical Science* 11, 6183-6192 (2020).
- [2] Yohei Uemura, Satoshi Matsuoka, Jun'ya Tsutsumi, Sachio Horiuchi, Shunto Arai, and Tatsuo Hasegawa, "Birefringent field-modulation imaging of transparent ferroelectrics", *Physical Review Applied* 14, 024060:1-8 (2020).
- [3] G. Kitahara, S. Inoue, T. Higashino, M. Ikawa, T. Hayashi, S. Matsuoka, S. Arai, and T. Hasegawa, "Meniscus-controlled printing of single-crystal interfaces showing extremely sharp switching transistor operation", *Science Advances* 6, eabc8847:1-10 (2020).
- [4] Satoru Inoue, Toshiki Higashino, Shunto Arai, Reiji Kumai, Hiroyuki Matsui, Seiji Tsuzuki, Sachio Horiuchi, and Tatsuo Hasegawa, "Regioisomeric control of layered crystallinity in solution-processable organic semiconductors", *Chemical Science* 11, 12493-12505 (2020).
- [5] Kiyofumi Takaba, Saori Maki-Yonekura, Satoru Inoue, Tatsuo Hasegawa, and Koji Yonekura, "Protein and organic-molecular crystallography with 300kV electrons on an active pixel sensor"

*Frontiers in Molecular Biosciences* 7, 612226:1–12 (2021).