

物質探索空間の拡大による未来材料の創製
2021 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

金正煥

東京工業大学 元素戦略 MDX 研究センター
特任准教授

ヨウ素アニオンの性質を生かした新機能の開拓

研究成果の概要

本研究では、ヨウ化銅(CuI)とヨウ化セシウム(CsI)を2重に積層した薄膜を作製すると、室温付近で保持するだけで固相反応が促進され、2つの層の膜厚比に応じてCs-Cu-I(CCI)や類似化合物である黄色発光体CsCu₂I₃の良質な薄膜を得られることを発見した。この二層膜実験から、CsIとCuIの間でCu⁺、Cs⁺、I⁻イオンの急速な相互拡散が起きていることが明らかとなった。この相互拡散過程を通じたCCIの生成機構の調査過程で、第一原理計算による点欠陥の生成エネルギーの比較と走査透過電子顕微鏡(STEM)による界面の観察から、CsCl型構造をもつCsIの結晶中にアンチサイト欠陥(I_{Cs})と格子間サイトを占めるCu(Cu_{ix})の複合欠陥が導入されることでCCIが生成していることが示唆された。本研究を通して、CCIはハライドの柔らかさ、Cu⁺イオンの大きさと拡散性、CsI型構造の充填密度の低さなどの元素ごとの長所がうまくマッチングしていることが明らかとなった。また、従来の溶液法で作製した薄膜はパターンニングが不可能で、膜の表面が粗いために、CCIデバイス特性の向上が阻まれていた。今回、室温での固相反応法を用いて、CuI半導体薄膜の狙った箇所だけをCsCu₂I₃やCCI発光体へと転化が可能になり、しかも生成した薄膜は表面が平坦で、75%の高い発光効率を示すCCI薄膜を得ることができた。本手法は溶液プロセスとの親和性も高く、透明で良質な薄膜を作製可能であることから、今後のEL素子、透明エレクトロニクス、フレキシブルデバイスへの応用に向けた大きな一歩になると確信している。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Room-Temperature Solid-State Synthesis of Cs₃Cu₂I₅ Thin Films and Formation Mechanism for Its Unique Local Structure”, J. Am. Chem. Soc. 2023,