

## 【基盤研究(S)】

理工系(工学)



### 研究課題名 電子化物のコンセプトと応用の新展開

東京工業大学・科学技術創成研究院・教授

ほその ひでお  
細野 秀雄

研究課題番号: 17H06153 研究者番号: 30157028

研究分野: 無機材料・物性

キーワード: 無機材料創成、電子化物、エレクトライド

#### 【研究の背景・目的】

電子がアニオンとして振る舞うエレクトライド(電子化物)は、溶媒和電子が結晶化した化合物とも捉えられ、1983年にJ. Dyeによって初めて合成された。エレクトライドは、新概念の物質としてかなりの関心を集め、標準的な無機化学の教科書類に記載されるまでに至っている。しかしながら、これらの物質は環状有機エーテル分子で活性な電子を包接するために、極めて不安定なため(-100°C以下かつ不活性雰囲気下でのみで安定)、その材料研究はもとより物性研究も殆ど進展していなかった。

本研究者は有機分子の代わりにサブナノのケージから成る無機結晶  $12\text{CaO}\cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$  (C12A7) を用いることで、2003年に室温・空气中で安定な初めての電子化物 C12A7:e を実現した。これによって電子化物の物性研究が可能になった。さらに、2次元電子ガスのバルク結晶とも見做せる2次元エレクトライド物質  $\text{Ca}_2\text{N}$  の発見や触媒活性や超伝導などの興味深い物性や応用の可能性を明らかにするにつれて、電子化物の新物質探索と材料研究が世界中で活発化してきている。中国のY. Maらによる金属ナトリウムを高圧にすると透明な絶縁相が生成し、この構造はエレクトライドとなっているという報告(Nature 2009)やCornell大学のR. Hoffmannらによるエレクトライド

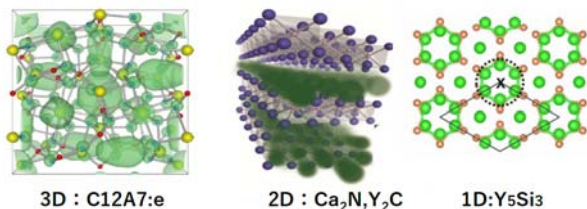


図1. これまで見出した代表的電子化物

は典型金属の高圧相として共通であるという理論的指摘(Accounts of chemical research, 2014)がその例として挙げられる。

しかしながら、これまでの電子化物の研究は電子過剰型のバルク結晶に限定されており、アモルファス系や表面、および化学量論組成の結晶系については、物質の存在も含め未開拓のままである。最近、本研

究者は初めて電子化物ガラスの合成に成功した。また、化学量論組成の結晶系でアニオン電子が隙間に存在する物質を発見した。本研究では、これらの成果を足場にして、エレクトライド物質の概念の拡張を図り、かつその本性に起因する物性を解明することで、材料への応用の可能性を明らかにする。

#### 【研究の方法】

学術のフォーカス: 電子アニオンが存在する物質系を、これまでの電子過剰型バルク結晶から、中性バルク結晶、アモルファス、そして表面に拡張して物質探索を行う。そして、新たに見出された物質群に対して構造・電子状態の解明と電子化物ならではのユニークな電子物性の発掘に集中する。

応用のフォーカス: 前期では、仕事関数が金属リチウムやカルシウム並みに小さく、化学的・熱的に安定で、室温形成が可能なアモルファス C12A7:e に着目し、薄膜化を行う。そして、得られた薄膜試料の電気特性を明らかにしつつ、有機ELディスプレイで重要な技術課題となっている電子注入層への応用を検討する。後期には新電子化物の電子物性と電子放出源となどデバイス応用を検討する。

#### 【期待される成果と意義】

電子化物はこれまで極めて特殊な物質系だと捉えられてきたが、本研究で提唱する概念が具体的物質で見出せれば、普遍性が得られる。また、アモルファスエレクトライドは、既存のアモルファス半導体と全く異なるクラスの物質系であり、物質科学と応用に新領域が拓けることが期待される。

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- H.Hosono et al. Superconductivity in room-temperature stable electride and high-pressure phases of alkali metals; Phil. Trans. R. Soc. A373, 20140450-62(2015).
- E. Johnsona, P.V. Sushko, Y.Tomota, and H.Hosono: Electron anions and the glass transition temperature; Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 113, 10007-10012(2016).

#### 【研究期間と研究経費】

平成29年度-33年度 134,600千円

#### 【ホームページ等】

<http://www.msl.titech.ac.jp/~hosono/>