

科学研究費助成事業（基盤研究（S））研究進捗評価

課題番号	17H06153	研究期間	平成29(2017)年度 ～令和3(2021)年度
研究課題	電子化物のコンセプトと応用の新展開	研究代表者 (所属・職) (令和4年3月現在)	細野 秀雄 (東京工業大学・元素戦略研究 センター・特命教授)

【令和2(2020)年度 研究進捗評価結果】

評価		評価基準
○	A+	当初目標を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる
	A	当初目標に向けて順調に研究が進展しており、期待どおりの成果が見込まれる
	A-	当初目標に向けて概ね順調に研究が進展しており、一定の成果が見込まれるが、一部に遅れ等が認められるため、今後努力が必要である
	B	当初目標に対して研究が遅れており、今後一層の努力が必要である
	C	当初目標より研究が遅れ、研究成果が見込まれないため、研究経費の減額又は研究の中止が適当である
(意見等)		
本研究は、エレクトライド（電子化物）のコンセプトをバルクイオン結晶以外の物質系へ拡張し、新物性・新機能の探索、応用展開を図ることを目的としたものである。金属間化合物でエレクトライドを探索するための指針や遺伝的アルゴリズムを利用した方法論を確立しつつあり、その結果として、アニオン電子が様々な次元の空間に閉じ込められた物質群の合成に成功している点は高く評価できる。また、物性・機能に関しても、Mott 絶縁状態や超伝導の発現、 $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$ 結晶での H^+ イオンビームの発生といった予期せぬ発見が相次いでいる。さらに、応用面においても、エレクトライド薄膜を電子注入層として用いる有機 EL の試作やアンモニア合成をはじめとする触媒への展開など着実に進展している。		

【令和4(2022)年度 検証結果】

検証結果	当初目標に対し、期待以上の成果があった。
A +	第一に、極めて広い範囲の電子化物の発見、開発に成功している。従来の電子不足型のイオン結晶に加えて、中性・電子過剰型、金属間化合物、表面、アモルファスと、一挙に範囲を拡大している。第二に、経験的知見や化学的直観に加え、遺伝的アルゴリズムと DFT 計算を結合した手法で候補を絞り込み、実験的検証を行うなど、電子化物発見の方法論を初めて確立している。また、正電荷に囲まれた空隙での波動関数の安定化とアニオンの VBM の関係から電子化物を予測・設計する描像を得ている。第三に、様々な次元の電子化物の発見と物性測定を通じて、電子化物の電子相関と次元の関わり、次元に依存したトポロジカル物質や超伝導性の発現など、新規の物性や現象を見いだしている。第四に、アモルファス電子化物薄膜が低仕事関数と透明性において有機 EL の電子注入層として優れていることの実証に加え、電子化物の電子供与性に着目した触媒設計で、ルテニウム不要の優れたアンモニア合成触媒の開発に成功し、触媒開発における新しい可能性を切り開いている。これらは、電子化物の学術と応用において極めて高いレベルの達成であるとともに、世界的にも新しい領域を先導して拓いており、様々な分野にインパクトを持つものであり、当初目標の期待をはるかに超えた成果である。