

一般研究B(2022年度)

「非結合軌道を有する新規発光半導体の探索と物性」

研究代表者：飯村壮史(物質・材料研究機構)

共同研究対応教員：平松秀典

— 研究目的 —

固体内に周期的に並ぶ電子軌道間の化学結合に着目することで新しい電子・光機能半導体の設計が可能である。例えば固体中の特定の波数空間において生ずる電子軌道間の非結合性を利用すればエネルギー準位の深い伝導帯を作り、絶縁体を半導体化することができる。本年度は、「点において非結合性のd軌道配列を持つ前周期遷移金属基の蛍石型構造に着目し、それらの合成と電子、光機能物性を調べた。

— 研究成果・効果 —

探索を行った中で、RFスパッタリングを用いて室温で製膜することができる蛍石型の酸水素化イットリウム $\text{YH}_{3-2x}\text{O}_x$ という化合物を見出した。水素リッチ組成の試料は、室温で 10^{-5}Scm^{-1} のヒドリドイオン伝導度を示し、初めての薄膜のヒドリドイオン伝導体であることが分かった。第一原理計算から八面体隙間を占める過剰のヒドリドイオンが欠損しやすいことが分かり、金属電極で100nmの薄膜を挟み1V以上の電圧を印加することでn型半導体化することも分かった。そこで本薄膜を水素を透過しないモリブデン電極と水素を吸蔵するチタン電極で挟み、抵抗変化メモリとしての動作を評価した。作成したセルは1桁以上の電気伝導度変化を1000回以上維持することが分かった。

