Press Release

2026 年 11 月 25 日
東京科学大学
神奈川県立産業技術総合研究所

ワイドギャップ半導体として有望な新しい 4 元系複合アニオン化合物を発見

－実験と理論計算の連携により複雑な新物質の開拓を実現－

【ポイント】

○電子・光電子デバイスのための新しいワイドギャップ半導体材料を発見
○複雑な化学組成と結晶構造を持つ未知物質の開拓を理論計算により効率化
○材料設計自由度の高い多元系複合アニオン化合物の応用拡大に期待

【概要】

東京科学大学（Science Tokyo）総合研究院 フロンティア材料研究所の大場史康教授（神奈川県立産業技術総合研究所プロジェクトリーダー兼任）、平松秀典教授、半沢幸太助教、物質理工学院 材料系の我毛智哉博士後期課程学生（研究当時）、大砂滉志郎修士課程学生（研究当時）らの研究チームは、電子・光電子デバイスのためのワイドギャップ半導体として有望な新しい 4 元系の酸カルコゲン化物を発見しました。

酸カルコゲン化物は、ワイドギャップ半導体の新たな候補として注目されていますが、p 型と n 型の両極性に伝導性を制御することが困難です。そこで研究グループは、両極性に制御できる新しいワイドギャップ酸カルコゲン化物の開拓を目指しました。

本研究では、的確な材料設計、合成・評価実験、**第一原理計算**（用語 1）を行うことで、複雑な化学組成と結晶構造を持つ 2 種類の未知物質（$BaZn_2OS_2$ および $SrZn_2OSe_2$）の開拓を効率的に実現しました。このうち $SrZn_2OSe_2$ は、電子と正孔の輸送や吸光・発光に適した**バンド構造**（用語 2）を持つだけでなく、p 型と n 型の両極性に伝導性を制御できることが、第一原理計算により予測されました。

この成果は、化学組成と結晶構造の設計・選択の自由度が非常に高い多元系酸カルコゲン化物のワイドギャップ半導体への応用可能性を広げるものであり、類縁の**複合アニオン化合物**（用語 3）の探索を促進することが期待されます。

本成果は、11 月 24 日付（現地時間）の米国化学会誌「*Journal of the American Chemical Society*」に掲載されました。

配信先：文部科学記者会、科学記者会、神奈川県政記者クラブ

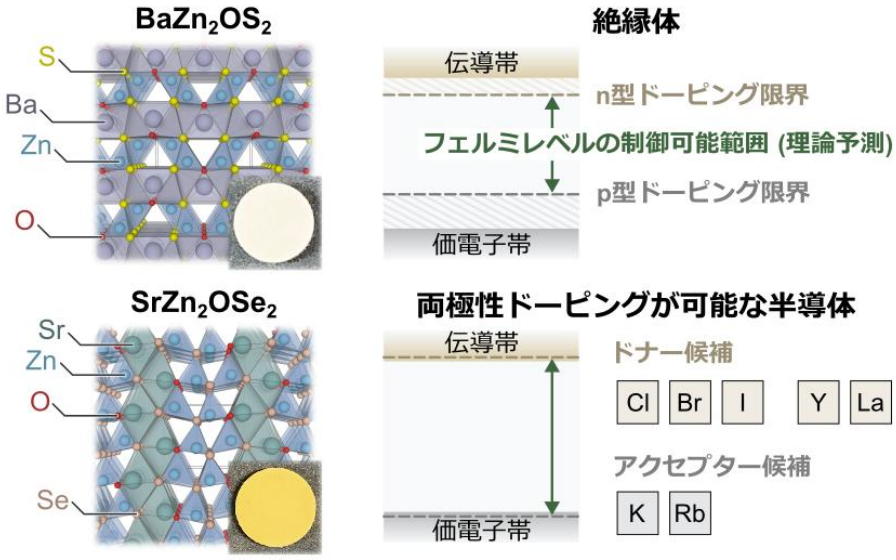


図 1 本研究において開拓した 2 種類の新しい 4 元系酸カルコゲン化物の結晶構造および試料の写真（左）とキャリアドーピングに関する理論予測（右）

●背景

広い**バンドギャップ**（用語 4）を持つワイドギャップ酸化物半導体は、有機 EL ディスプレイ等の駆動用の IGZO 薄膜トランジスタや、酸化ガリウムを用いたパワーデバイスなど、近年応用範囲が拡大しています。より多様な電子デバイスや光電子デバイスの実現に向けて、以前から高性能な p 型ワイドギャップ酸化物半導体の開拓が望まれてきましたが、多くの酸化物では p 型へのキャリア制御が困難であることが知られています。

そこで、ワイドギャップ半導体の新たな候補として、酸素（O）に加えてカルコゲン（S、Se など）の陰イオンを含む複合アニオン化合物である酸カルコゲン化物が検討されています。酸カルコゲン化物は、カルコゲンの存在により**価電子帯**（用語 5）の上端のエネルギーが高いことから正孔の導入が比較的容易であるだけでなく、正孔が移動しやすいバンド構造を持つ p 型ワイドギャップ半導体になることが予想されます。また、**伝導帯**（用語 6）の構造を適切に設計することで、n 型半導体としての利用も期待できます。しかし、LaCuOSe のような銅（Cu）を含む酸カルコゲン化物では、p 型半導体は実現しているものの、n 型半導体にすることが困難であるという課題があります。一方で、$La_2SnO_2S_3$ のような銅を含まない非銅系酸カルコゲン化物では、p 型半導体にすることが困難であり、十分な n 型伝導性も報告されていません。

こうした背景から、p 型と n 型の両方に伝導性を制御する「両極性ドーピング」が可能な、新しいワイドギャップ酸カルコゲン化物の開拓が求められていました。

●研究成果

研究グループはこれまで、多種多様な無機化合物を対象に、電子・光学物性や点欠陥の性質、異種元素（ドーパント）の添加によって p 型・n 型ドーピングが可能かどうかを、第一原理計算と機械学習による予測や合成・物性評価実験を通して検討してきました［参考文献 1］。その知見に基づいて材料設計・探索の指針を検討したところ、アルカリ土類金属（Ca、Sr、Ba のいずれか）、亜鉛（Zn）、酸素（O）、カルコゲン（S、Se のいずれか）からなる、未報告の 4 元系酸カルコゲン化物が存在し、この化合物がワイドギャップ半導体の有望な候補になるという着想を得て、本研究を実施しました。

その結果、新しい 4 元系酸カルコゲン化物である $BaZn_2OS_2$ と $SrZn_2OSe_2$ の合成に初めて成功しました（図 1 左）。具体的には、固相反応法によって作製した試料に対して、粉末 X 線回折を行い（図 2 上）、結晶構造を特定しました（図 1 左）。また、**拡散反射**（用語 7）測定からそれぞれ 3.51 eV および 2.55 eV の光学バンドギャップを持ち、吸光・発光に適した**直接遷移型**（用語 8）のバンド構造を持つことを明らかにしました（図 2 下）。

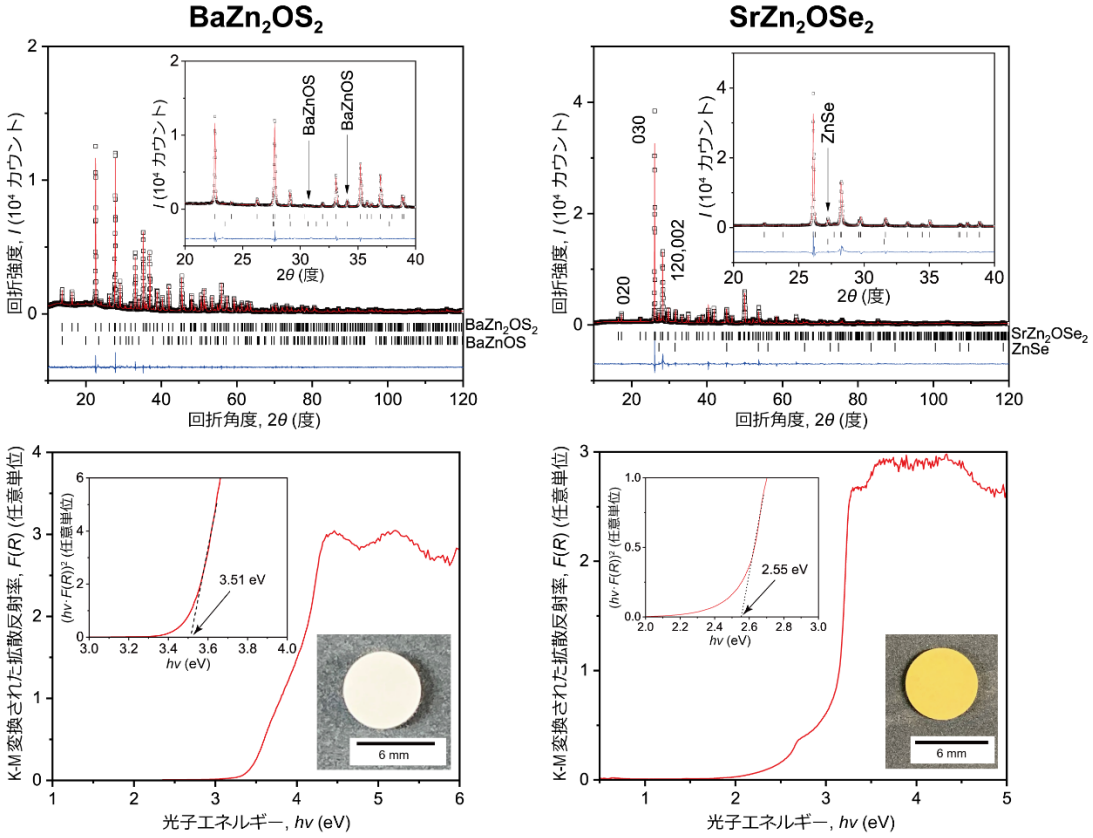


図 2 $BaZn_2OS_2$ および $SrZn_2OSe_2$ の多結晶試料の粉末 X 線回折パターン（上）と拡散反射スペクトルおよび試料の写真（下）

こうした実際の試料についての実験結果は、第一原理計算による結晶構造探索の結果や、バンド構造、光吸収特性の予測結果とよく一致しました（図 3 左）。さらに、どちらの物質も電子と正孔の**有効質量**（用語 9）が小さいことから、優れたキャリア輸送能を持つことが示唆されました。特に $SrZn_2OSe_2$ では、実用化されている n 型酸化物半導体と比べて、電子の有効質量が同程度に小さいだけでなく、特徴的な Se の配置と電子状態により、正孔の有効質量も特定の方向において非常に小さな値を示すことが分かりました（図 3 右）。このような結果から、$BaZn_2OS_2$ と $SrZn_2OSe_2$ は新しいワイドギャップ半導体の候補になると考え、より踏み込んだ理論的検討を行いました。

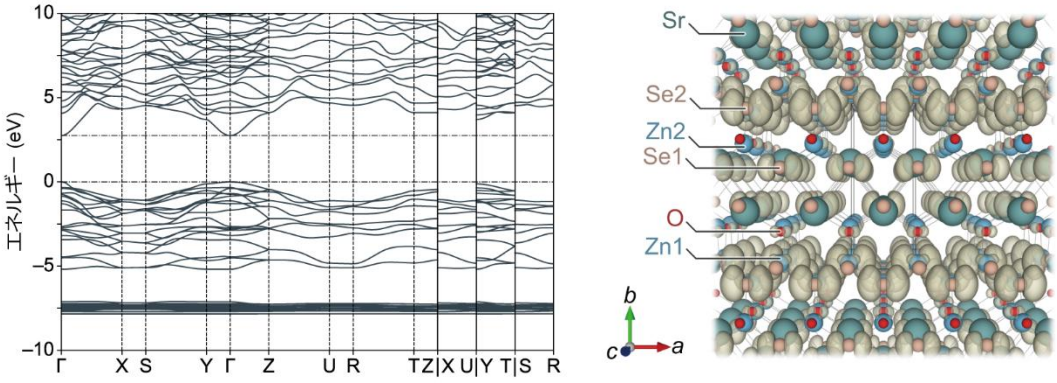


図 3 第一原理計算により予測された $SrZn_2OSe_2$ のバンド構造（左）と価電子帯上端の電子状態（右）。主に Se2 の 4 p 軌道が *a* 軸方向に連なった電荷密度の分布をベージュで示す。

まず、原子空孔、格子間原子、アンチサイト原子といった各物質に固有の点欠陥の形成エネルギーと電子準位を網羅的に計算したところ、$BaZn_2OS_2$ は点欠陥によるキャリアの補償が著しく、バンドギャップの中央付近でしか**フェルミレベル**（用語 10）が制御できないことが予測されました（図 1 右上）。このため、たとえ異種元素によるキャリア添加を試みたとしても、$BaZn_2OS_2$ は絶縁体であると考えられます。一方で $SrZn_2OSe_2$ では、合成時のガス雰囲気等を適切に制御することで、点欠陥によるキャリアの補償を十分に抑制でき、フェルミレベルをバンドギャップの全域において制御可能という結果が得られました（図 1 右下）。

そこで、$SrZn_2OSe_2$ への異種元素添加（ドーピング）の系統的な計算を行いました。その結果、イットリウム（Y）、ランタン（La）や塩素（Cl）、臭素（Br）、ヨウ素（I）などを添加することで n 型半導体に、カリウム（K）やルビジウム（Rb）などを添加することで p 型半導体にすることが可能と予測されました（図 1 右下）。こうしたことから最終的に、$SrZn_2OSe_2$ が両極性のキャリア制御が可能なワイドギャップ半導体の有望な候補であるという結論にいたりました。

$SrZn_2OSe_2$ へのドーピングについては、現段階では試料の純度等の問題により実験に

よる検証ができていません。しかし、関連した化合物について報告されている実験と第一原理計算の整合性を踏まえると、本研究の理論予測には、上記の結論を裏付けるのに十分な信頼性があると考えています。

●社会的インパクト

本研究では、$SrZn_2OSe_2$ を具体例として、ワイドギャップ半導体として有望な非銅系酸カルコゲン化物が存在することを示しました。また、材料設計の観点では、4 元系複合アニオン化合物における構成元素と結晶構造の多様性を活かすことで、広いバンドギャップと電子および正孔の輸送に適した性質を備え、さらに伝導キャリアの補償を抑えつつ、ドナーやアクセプターとして有効に働くドーパントが添加可能であるという、多元系酸カルコゲン化物ならではの明確な優位性を提示しました。この成果は、化学組成と結晶構造の設計・選択の自由度が非常に高い多元系複合アニオン化合物のワイドギャップ半導体への応用可能性を広げるものであり、類縁化合物の探索を促進することが期待されます。

●今後の展開

次の段階では、実験および理論計算からワイドギャップ半導体としての高いポテンシャルが示された $SrZn_2OSe_2$ について、試料の高純度化や p 型および n 型ドーピングの実験的検証を進めていきます。その上で、高品質な単結晶や薄膜の作製技術を確立し、pn 接合ダイオードや発光デバイスなどの試作・動作検証へと展開します。

また、本研究において有効性を示した材料設計指針に基づいて、ワイドギャップ半導体として有望な新しい複合アニオン化合物をさらに探索していく予定です。その際には、本研究の理論計算グループが構築している約 9 万種類規模の半導体候補材料の第一原理計算データベースや、機械学習に基づいた材料探索手法［参考文献 2］を活用することで、より網羅的かつ効率的な新材料の提案を目指します。

●付記

本研究は日本学術振興会 科学研究費助成事業（JP20J23137、JP24H00376）、科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 CREST（JPMJCR17J2）、文部科学省 データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業（JPMXP1122683430）、神奈川県立産業技術総合研究所 脱炭素化対策事業の助成を受けて行われました。

本研究内容に関連して特許第 7919695 号（発明の名称：4 元系酸カルコゲン化物および電子素子、発明者：大場史康、平松秀典、我毛智哉、半沢幸太、特許権者：東京科学大学）が登録されています。

本研究で合成した $BaZn_2OS_2$ および $SrZn_2OSe_2$ の詳細な結晶構造データは、CCDC 2576934 および CCDC 2576935 として Cambridge Crystallographic Data Centre に登

録済みです。

【参考文献】

[1] Y. Hinuma, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, L. A. Burton, H. Sato, Y. Muraba, S. Iimura, H. Hiramatsu, I. Tanaka, H. Hosono, and F. Oba, “Discovery of Earth-Abundant Nitride Semiconductors by Computational Screening and High-Pressure Synthesis”, *Nature Communications* 7, 11962 (2016); K. Hanzawa, T. Nagai, R. Nagasawa, T. Katase, H. Hosono, and H. Hiramatsu, “d^0 Cation-Based Spinel-Type Sulfide Semiconductors with Color-Tunable Direct-Gap and Ambipolar Dopability”, *Journal of the American Chemical Society* 147, 35935 (2025).

[2] S. Kiyohara, Y. Hinuma, and F. Oba, “Band Alignment of Oxides by Learnable Structural-Descriptor-Aided Neural Network and Transfer Learning”, *Journal of the American Chemical Society* 146, 9697 (2024); F. Oba, T. Nagai, R. Katsube, Y. Mochizuki, M. Tsuji, G. Deffrennes, K. Hanzawa, A. Nakano, A. Takahashi, K. Terayama, R. Tamura, H. Hiramatsu, Y. Nose, and H. Taniguchi, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Semiconductors and Dielectrics: From Prediction to Experiment”, *Science and Technology of Advanced Materials* 25, 2423600 (2024).

【用語説明】

(1) **第一原理計算**：量子力学の基本原理に基づいた理論計算。物質の性質を支配する電子の状態だけでなく、安定性や構造を決定する際の指標となる全エネルギーが得られ、結晶・分子、表面・界面などの構造を予測できる。

(2) **バンド構造**：結晶中の電子のエネルギーの分布を波数空間で表したもの。後述のバンドギャップの他、吸光・発光の効率、電子や正孔の動きやすさに関する情報を与える。

(3) **複合アニオン化合物**：複数の陰イオンにより構成される無機化合物。本研究の対象である酸カルコゲン化物では、酸素とカルコゲン（硫黄やセレンなど）の 2 種類の陰イオンを含む。

(4) **バンドギャップ**：固体中で電子が占有できないエネルギー範囲。さまざまな電子・光電子デバイスの特性を決める最も基本的かつ重要なパラメーター。

(5) **価電子帯**：半導体や絶縁体において、バンドギャップのすぐ下に位置する、電子が占有した状態からなるエネルギー帯。p 型半導体では、価電子帯に導入された正孔が電気伝導の主な担い手となる。

(6) **伝導帯**：半導体や絶縁体において、バンドギャップのすぐ上に位置する、電子が占有していない状態からなるエネルギー帯。n 型半導体では、伝導帯に導入された伝導電子が電気伝導の主な担い手となる。
(7) **拡散反射**：物質からの光の反射に基づいて光学特性を測定する手法。
(8) **直接遷移型**：価電子帯の上端と伝導帯の下端の電子状態が、同じ波数ベクトルを持つバンド構造。多くの場合、発光や吸光に適している。
(9) **有効質量**：物質中の伝導電子や正孔の見かけ上の質量であり、値が小さいほど高い輸送特性が期待できる。
(10) **フェルミレベル**：電子の占有確率が 1/2 になるエネルギーに相当し、n 型半導体では伝導帯の下端付近、p 型半導体では価電子帯の上端付近に位置する。

【論文情報】

掲載誌：*Journal of the American Chemical Society*
論文タイトル：Experimental and Computational Identification of Wide-Gap Quaternary Oxychalcogenides $BaZn_2OS_2$ and $SrZn_2OSe_2$（実験と計算により発見したワイドギャップ 4 元系酸カルコゲン化物：$BaZn_2OS_2$ および $SrZn_2OSe_2$）
著者：Tomoya Gake, Koshiro Osuna, Kota Hanzawa, Nobuya Sato, Akira Takahashi, Hidenori Hiramatsu*, and Fumiyasu Oba*（我毛智哉、大砂滉志郎、半沢幸太、佐藤暢哉、高橋亮、平松秀典*、大場史康*：*は責任著者）
DOI：10.1021/jacs.6c17075

【研究者プロフィール】

大場 史康（オオバ フミヤス） Fumiyasu Oba
東京科学大学 総合研究院 フロンティア材料研究所／元素戦略 MDX 研究センター／新産業創成研究院 AI-Science Nexus センター 教授
神奈川県立産業技術総合研究所 プロジェクトリーダー（兼任）
研究分野：第一原理計算による無機電子材料の設計・探索

平松 秀典（ヒラマツ ヒデノリ） Hidenori Hiramatsu
東京科学大学 総合研究院 フロンティア材料研究所／元素戦略 MDX 研究センター 教授
研究分野：多元系無機電子材料の機能発現・高度化

半沢 幸太（ハンザワ コウタ） Kota Hanzawa
東京科学大学 総合研究院 フロンティア材料研究所 助教
研究分野：超伝導体や半導体の無機固体化学

高橋 亮（タカハシ アキラ） Akira Takahashi
東京科学大学 総合研究院 フロンティア材料研究所　准教授
研究分野：マテリアルズインフォマティクス手法による無機材料の探索と特性予測

【お問い合わせ先】

（材料設計・理論計算に関すること）
東京科学大学 総合研究院 フロンティア材料研究所／元素戦略 MDX 研究センター／
新産業創成研究院 AI-Science Nexus センター　教授
神奈川県立産業技術総合研究所　プロジェクトリーダー（兼任）
大場 史康
Email：oba.f@msl.iir.isct.ac.jp

（実験に関すること）
東京科学大学 総合研究院 フロンティア材料研究所／元素戦略 MDX 研究センター
教授
平松 秀典
Email：hiramatsu@msl.iir.isct.ac.jp

（報道取材申し込み先）
東京科学大学 総務企画部 広報課
取材申し込みページ：https://www.isct.ac.jp/ja/001/media
Email：media@adm.isct.ac.jp
TEL：03-5734-2975　FAX：03-5734-3661

地方独立行政法人 神奈川県立産業技術総合研究所 研究開発部
Email：rep-kenkyu@kistec.jp
TEL：044-819-2034　FAX：044-819-2026