

原子・分子の自在配列と特性・機能
2020 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

原田 尚之

物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクニクス研究拠点
独立研究者

準 2 次元金属の層配列制御による界面機能の創出

研究成果の概要

現代社会では、通信、制御、センシング技術が様々な場所で用いられており、これらの技術は半導体デバイスによって支えられている。半導体デバイスには、例えばダイオードやトランジスターなどがあり、これらの機能は異種化合物の界面において発現する。界面の特性を決める重要なファクターの1つが電気分極である。界面での電気分極は界面近傍のイオンの配列で決まる。本研究では、面内方向の金属結合と面直方向のイオン結合を合わせ持った層状結晶であるデラフォサイト型酸化物に着目する。この物質群では、異方的な結合に由来して、面内方向・面直方向で電気伝導度が数桁異なる。また、イオン結合性に由来して、デラフォサイト型酸化物の表面では層配列に応じた表面分極が現れ、非常に大きな仕事関数や特徴的な表面磁気秩序が生じる。デラフォサイト型酸化物と半導体などのヘテロ構造を作製することで、表面分極を利用した新しい機能性界面の開発に取り組む。

今年度は、デラフォサイト型酸化物と各種半導体の接合作製とデバイス応用を進めた。並行して、スパッタリングによるデラフォサイト型酸化物薄膜作製に成功した。応用上重要となる薄膜大面積化を実現するために重要な成果と位置付けており、特許申請・論文発表を行った¹⁾。

表面の電子状態の理解についても進展があった。表面磁気秩序の発現には、表面分極を安定化するために電子状態が再構成することが必要である。表面分極が打ち消されるような、陽イオン、陰イオンの混ざった終端面においては、電子状態の再構成が抑制されることが角度分解光電子分光から明らかになった。この結果は密度汎関数法でも再現することができた²⁾。

また、デラフォサイト型酸化物表面の密度汎関数法による計算結果や、デバイス応用に向けた展望をまとめたパースペクティブ論文を出版した³⁾。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Sputter-grown c-axis-oriented PdCoO₂ thin films”, [Takayuki Harada](#), Takuro Nagai, Makoto Oishi, and Yasushi Masahiro, *Journal of Applied Physics* 133, 085302 (2023)
- 2) “Visualization of robust two-dimensional bulk states with suppressed surface state on epitaxial PdCoO₂ thin films with bipolar surfaces”, Tomoki Kawamoto, Anjana Krishnadas, Chia-Hsiu Hsu, Markel Pardo-Almanza, Yuita Fujisawa, Guoqing Chang, [Takayuki Harada](#), and Yoshinori Okada, *Physical Review Materials* 7, 024001 (2023)
- 3) “Metallic delafossite thin films for unique device applications”, [Takayuki Harada](#), and Yoshinori Okada, *APL Materials* 10, 070902 (2022)