

平成 31 年 3 月 29 日

金属状態に潜む不安定性を可視化！金属 - 絶縁体スイッチの仕組み解明へ

◆発表のポイント

- ・ 金属状態から絶縁体へのスイッチ機能を示す二酸化バナジウム (VO_2) 薄膜について、その電子構造^{*1} を初めて実験で決定し、可視化することに成功しました。
- ・ 金属状態の不安定性に結晶中の電子と格子の間の相互作用が寄与していることを明らかにしました。
- ・ 40 年以上続くスイッチ機構の論争を鎮め、その仕組みの解明を加速することが期待されます。

岡山大学異分野基礎科学研究所の村岡准教授、脇田高德特任講師、寺嶋健成特任講師、横谷尚睦教授、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) の組頭広志教授、東京大学の尾嶋正治教授らの共同研究グループは、室温付近で急峻な金属 - 絶縁体スイッチ機能を示す VO_2 薄膜について、その電子構造の実験結果を初めて示し、形状を可視化することに成功しました。加えてその形状より、 VO_2 金属状態の不安定性が結晶中の電子と格子の間の相互作用によって引き起こされていることを明示しました。研究成果は、2018 年 12 月 17 日、英国の科学雑誌「*Scientific Reports*」電子版に掲載されました。

VO_2 の金属状態の不安定性に電子 - 格子相互作用が関与していることは、電子構造の理論研究によって提案されていました。しかし、電子構造の実験結果が得られていないために提案の妥当性が判定できず、その相互作用の関与は 40 年以上にわたり論争の的になっていました。今回、 VO_2 薄膜を用いた放射光角度分解光電子分光^{*2} を行うことで金属状態の電子構造を可視化することに成功し、加えて、その形状が理論予想と一致していることを見いだしました。これより VO_2 金属状態の不安定性に電子 - 格子相互作用が関係していることを強く証拠づけました。

本研究成果は、40 年以上続く金属 - 絶縁体スイッチ機構の論争を解決し、そのメカニズム解明を加速することが期待されます。また、 VO_2 のスイッチ機能を制御する基礎原理になることが期待されます。

◆研究者からのひとこと

10 年がかりの成果です。電子構造の形状を決定したとき、そして、その形状に理論で予言されている特徴（直線部分）を見つけたときには、研究室の学生たちと大喜びしました。実験には苦勞が付きものですが、そんなことも吹き飛んだうれしい瞬間でした。



村岡准教授

PRESS RELEASE

■発表内容

＜現状＞

VO₂は室温付近で電気抵抗が3ケタ以上急峻に変化し、金属状態から絶縁体状態にスイッチします(図1)。これを、金属-絶縁体転移といいます。金属-絶縁体転移が室温付近で起きる物質は数少ないため、VO₂は発見(1959年)以来、基礎・応用の両観点からその転移機構に多大な興味が持たれています。転移機構、つまり、金属状態の不安定性の起源に電子-格子相互作用が関係していると提案したのは電子構造の理論研究(1977年)で、この提案以来、電子構造を直接観測、かつ可視化できる角度分解光電子分光の研究が強く望まれていました。しかし、3次元結晶のVO₂単結晶では化学的に安定な面を得られないため、試料表面を観測する角度分解光電子分光の実施は難しい状況にありました。

＜研究成果の内容＞

村岡准教授、脇田特任講師、寺嶋特任講師、横谷教授、組頭教授、尾嶋教授らの共同研究グループは、実験にVO₂単結晶ではなく、TiO₂基板の上にエピタキシャル成長^{*3}したVO₂薄膜を用いることで、単結晶でみられた表面の問題を回避しました。また、電子構造を観測するために、光エネルギーを連続的に変えられる放射光を活用しました。VO₂薄膜の安定表面と放射光角度分解光電子分光を組み合わせた実験を行うことで、VO₂薄膜金属状態の電子構造を実験的に初めて決定、その可視化に成功しました。さらに、決定した電子構造形状には理論予想のとおり、電子-格子相互作用の寄与を特徴づける、平行移動により重なり合う部分があることを見いだしました(図2)。これによりVO₂の金属-絶縁体転移のメカニズムに電子-格子相互作用が関係していることを明らかにしました。予測から40年、実験による電子構造の結果は理論計算の妥当性を示す強い証拠となりました。

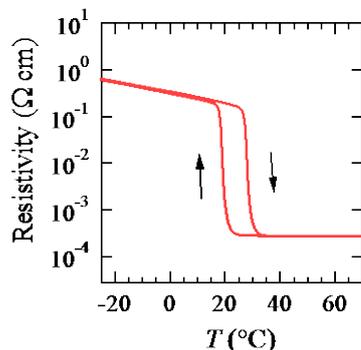


図1. VO₂/TiO₂(001)膜の電気抵抗の温度依存性。室温付近で電気抵抗率の値が3ケタ近く急峻に変化しています。高温側が金属、低温側が絶縁体状態。

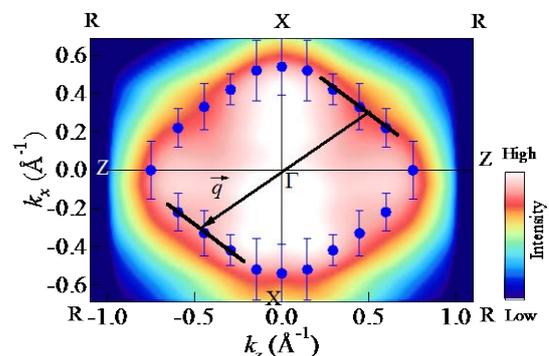


図2. VO₂薄膜金属状態の電子構造。図中青点は電子が存在する境界を示しています。青点より内側には電子が存在し、外側には存在していません。存在する電子によってつくられた(青点をつなげてできる)構造には平行移動により重なり合う(直線)部分(黒線)が見えます。



PRESS RELEASE

<社会的な意義>

本研究成果は、40年以上続くVO₂の金属-絶縁体スイッチ機構に関する論争を解決し、そのメカニズム解明を加速することが期待されます。今後は、転移機構を詳細に調べ、その知見をスイッチ動作温度の制御や転移を利用した応用材料の開発に向けて活用できるよう研究を進めていきます。

■論文情報

論文名：Fermi surface topology in a metallic phase of VO₂ thin films grown on TiO₂(001) substrates

邦題名「TiO₂(001)基板上に成長させたVO₂薄膜の金属相におけるフェルミ面形状」

掲載紙：Scientific Reports

著者：Yuji Muraoka, Hiroki Nagao, Yuichiro Yao, Takanori Wakita, Kensei Terashima,

Takayoshi Yokoya, Hiroshi Kumigashira, Masaharu Oshima

DOI：10.1038/s41598-018-36281-8

発表論文はこちらからご確認できます。

URL：<https://www.nature.com/articles/s41598-018-36281-8>

■研究資金

本研究は、独立行政法人日本学術振興会（JSPS）「科学研究費助成事業」と国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）の支援を受けて実施しました。

■補足・用語説明

- 1) 電子構造：物質内の電子がもつ運動量の分布構造のことです。本研究では伝導に寄与する電子の電子構造を調べています。
- 2) 放射光角度分解光電子分光：放射光とは光速近くまで加速された電子が磁場中で進路を曲げられたときに放射する光のことです。角度分解光電子分光は、固体内部の電子構造を実験で直接観測する実験方法です。固体表面に高エネルギー光を照射した際に放出される光電子の運動エネルギーを測ることで、電子構造を決定します。光源に放射光を用いると、光のエネルギーを連続的に変化できたり、高強度のため高精度での計測が可能になったりします。
- 3) エピタキシャル成長：単結晶基板上に薄膜を成長させたときに、基板の結晶方位に合わせて、ある特定の方位の膜が結晶成長する様子をいいます。



＜お問い合わせ＞

岡山大学異分野基礎科学研究所

准教授 村岡 祐治

(電話番号) 086-251-7898

(FAX) 086-251-7903

(メール) ymuraoka@cc.okayama-u.ac.jp



岡山大学は、国連の「持続可能な開発目標 (SDGs)」を支援しています。