

令和3(2021)年度学術変革領域研究(A)

2.5次元物質科学：
社会変革に向けた物質科学のパラダイムシフト

公募班メンバー特別対談 8

A02班

集積化班 公募班

(2次元層状物質表面場を利用した
良質異種結晶の創製と機能集積)

田中 秀和

特別対談がきっかけとなり共同研究が進行中
と伺いました。どのような研究でしょうか？

田中 小野さんとの共同研究は第5回領域会議で報告したもので、吾郷グループ(A01)がCVDで合成した大面積六方晶窒化ホウ素(hBN)上に我々が二酸化バナジウム(VO_2)を成膜し、優先配向する様子を観察しています。二次元層状物質と酸化物を組み合わせることで見られる新奇物性を明らかにしていくことが目標です。

小野 私の方では VO_2/hBN 界面安定構造の第一原理計算から、一部の原子はピンどめされるが、その他の界面接合部分は弱いファンデルワールス結合となる界面モデルを提案しました。このモデルによると、従来の酸化物薄膜の物性は薄膜化と共に劣化して使えなくなりますが、hBN上の VO_2 の物性は膜の厚さが薄くとも維持できることがわかってきました。ファンデルワールス界面の特徴ではないかと考えています。

田中 この共同研究のきっかけになったのはニューズレター用のインタビューです。小野さんが説明していたスライドの中に「界面の束縛が弱い」とあり、自分の研究の中で気になっているキーワードだなと思って。実際何が結合してるのか、そうでないのかよくわからないって話しをしたところ、結合距離について詳しく聞くことができました。実は特別対談より前に、第3回領域会議で「理論相談会」があり、そこで小野さんのお話をお聞きしたのですが、その時はいきなり「こんなことができますか」ってお声がけしにくく、お話ができなかったんです。材料系が異なるので、マッチしてなかったらと思うとハードルが高くて。

小野 田中さんが計算に興味を持って下さったことが第一歩としてあったと思います。それを受けて、さらに対談という機会があつてよかったです。私も界面原子構造

A05班

機能創出班 公募班

(計算科学手法による2次元ナノ空間でのキャリア伝導予測と
高機能デバイスデザイン)

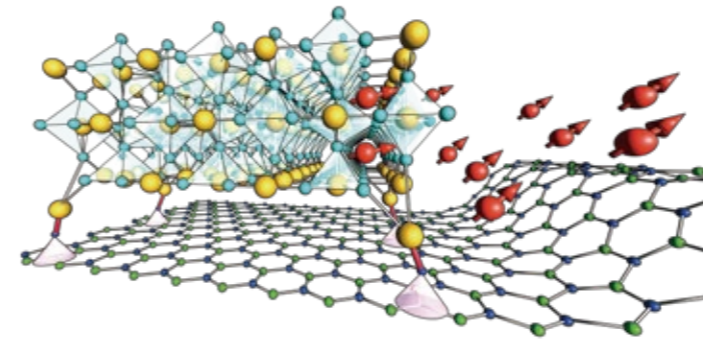
小野 倫也

に興味をお持ちの方と一緒に進めていきたいと考えていて、共同研究を探していました。原子構造をモデリングするときに計算があると楽できる場合もあり、私たちも予測した構造に関して実験があると嬉しいものです。田中さんとの共同研究は現在進行中のため、今後の成果についても後日報告していきたいと思います。

共同研究にもつながった、先生方それぞれの
研究について教えてください。

小野 電力変換などの用途で使われるパワーデバイスをシリコン以外の材料に置き換えて省エネ化を図る研究は、いろいろなところで進められています。しかし電力変換で最も重要な材料界面についてよくわかってない部分があります。その界面の原子構造は材料によって異なるので、原子同士がきれいに結びついてない欠陥が必ずできるので。機能を発する部分は界面で、そこに未解明なものがあると機能予測の妨げになります。何があると機能劣化するか、特に今問題としているのは大幅に劣化するものです。例えばシリコンカーバイドと絶縁膜の界面では、電子デバイスを作ったときに電子の走る速度、電流がかなり少なくなります。シリコンでは期待された値が出ていたが、それをシリコンカーバイドに置き換えると10%、あるいは5%しか出ない。界面を電子が走るので、結合がうまく結びついてない、欠陥があるということが考えられます。そこで私たちの研究では、どういう欠陥があると悪さをするか予測し、それを修復する方法、プロセス、それらについて提案しています。中でも特に、電子状態を計算することと、キャリアの電子の流れを予測することを進めているところです。

田中 僕の研究の出発点は、光で磁性的制御をやりたいということ。そこで光機能の遷移金属ダイカルコゲナイドなどを半導体と組み合わせています。他にもスピ



金属酸化物/二次元物質の異種ヘテロ界面 (田中)

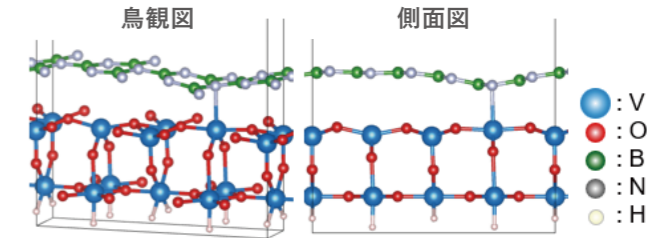
ンを持つ酸化物と二次元層状の半導体でダイオードを作ったり。あとは二次元材料で誘電体のhBNと酸化物を組み合わせ、誘電体で酸化物のスピンを制御して磁性をスイッチングし、スピントロニクスに使うことも試しています。以前は酸化物の薄膜を作り、上から貼り付けてトランジスタなどを作っていました。今はそれを逆に、最初に二次元層状材料を基板に置き、上に酸化物の薄膜を成長させています。例えば下が誘電体で、その上に酸化物を乗せてスピンを制御する、そういう界面を持ったヘテロ接合を作りたいと考えています。逆にした理由は、酸化物を成長させるとき、酸化物同士だと結合が強く、ペタッとくっついてしまうから。そのため酸化物を使うとき、この酸化物にはこの単結晶を選ぶというように組み合わせが決まってしまうのです。その点、二次元層状物質はファンデルワールス結合のため、結合が非常に弱くあまり相互作用がない。この特徴を活かせば、結晶構造が違って成長させていけるのではと考え、研究を進めています。

公募班にご応募された理由と
2.5次元ポイントを伺いたいです。

小野 昔は電子デバイスのシリコン/シリコン酸化物の界面制御が重要でしたが、今はパワーデバイス用のシリコンカーバイドなどの新しい材料界面がターゲットです。スピントロニクスデバイスでは、磁性金属/絶縁体界面での電気伝導など、それらを第一原理計算で明らかにするという研究に取り組んでいます。特にスピントロニクスのような材料の設計がこの2.5次元科学に近いテーマと思い、応募させていただきました。

2.5次元については、半導体の界面や、界面遷移層である2つの材料において、それぞれは明瞭に分離してはならず、どちらの材料とも言えない領域が出てきます。界面というのはきちり二次元ということはできなくて、垂直方向にも何かある、それが私にとっての".5"の解釈です。

田中 これまで薄膜合成の研究分野で、マンガンやバナジウムなど色々な酸化物を組み合わせました。酸化物同士でも面白いのですが、他の材料も試したいと考えていたところでグラフェンが出てきました。二次元材料は薄く、ぺらっとしており、薄膜と貼り合わせるのにちょうどよいと感じたことが出発点です。機能性酸化物と二次元材料など化学的性質の異なる材料で、組み合わせる範囲をもっと広げて新しい機能発現を狙いたいとい

第一原理計算で求めた $\text{VO}_2/\text{h-BN}$ 界面の原子構造 (小野)

う思いがあり、今回の応募につながりました。

僕にとって2.5次元の".5"は二次元そのものではなく、その上の空間という解釈です。その空間はあまり束縛がないので、宇宙空間のように合成が何でもできる空間になっているのではないかと。いわば薄膜の中にあるナノの宇宙空間のような場所。そこで期待するのは、1番目はその二次元の上にある束縛のない空間を利用して結晶性成長させること、2番目が二次元層状物質の光や電気機能と酸化物のスピンの機能を合体させたら新しいデバイスができるのではないかと、3番目が作ったあと剥いてあちこちに貼り付けられたら嬉しいなということ。一石三鳥になることを期待しています。

領域の皆様へメッセージをお願いします。

小野 理論計算では予想が実現することに醍醐味があります。この領域内ではいろいろな実験の方がいらっしやるので一緒に組んで様々な解析を行ったり、逆に私たちが予測した構造の機能実証をしていただいたり、これからも相互に進めていけたら嬉しいです。

田中 酸化物と二次元材料を組み合わせ、そこで初めてみられる特性を出していきたい。さらに界面で何が起きているか分からないところを明らかにしていきたいです。今回は領域活動の中でこれまでネットワークが広がり、お互いに成果も得られました。これからもそれぞれが専門を深めながら、全体として次の段階に上がっていけるように活動していきたいですね。

Interviewees



田中 秀和

大阪大学
産業科学研究所
教授

小野 倫也

神戸大学
工学研究科
教授

(活動班順、五十音順 敬称略)

ライター：柏田 百代 (広報担当)

領域ホームページ <https://25d-materials.jp>

(ニュースレター公開日：2023年12月7日)