

酸化物半導体の謎“伝導電子が伝導しない”機構を解明 —金属の原子軌道と酸素の原子軌道の結合が、そのメカニズムだった—



ダイヤモンドに近い光の屈折率を持つため人造宝石として用いられ、また高い誘電率を持つためセラミックコンデンサに広く活用されている、ありふれた酸化物「チタン酸ストロンチウム」は、近年、新たな性質が次々と発見され、次世代のデバイス材料として注目を集めています。透明電極や高効率の熱電変換材料などとさまざまな応用が可能で、機能性材料として日増しに期待が高まり続けています。

この材料は、高温超伝導材料として注目されている遷移金属酸化物と同じ「ペロブスカイト結晶構造」を持ち、結晶を構成するそれぞれの元素の役割・機能を解明することが、特異な性質の謎解きに必要とされています。とくに、この材料に電子を加えると“伝導する電子”と“伝導しない電子”が観察されてしまう不思議な現象が起こり、謎のひとつとなっています。

理化学研究所放射光科学総合研究センター量子秩序研究グループは、高輝度光科学研究センター、名古屋大学らと共同で、この電子状態の二面性を生み出している原因が結晶を構成している酸素原子の軌道成分であることを明らかにしました。大型放射光施設SPring-8の高輝度軟X線ビームラインの単色性とエネルギー安定性を利用し、さらにパルスレーザ堆積法により作製された高品質の単結晶薄膜試料(名古屋大学)を用いた「軟X線共鳴光電子分光法」という手法による成果です。軟X線を照射して光電子スペクトルを測定した結果、伝導しない電子の軌道成分にチタンだけでなく酸素の軌道成分も現れました。

チタン酸ストロンチウムは、次世代のエレクトロニクスデバイス材料として期待される遷移金属酸化物の一つです。この成果は、多彩な性質を示す遷移金属酸化物の電子状態をモデル化して理解し、実用化へ向けて重要な指針を示すものとなりました。

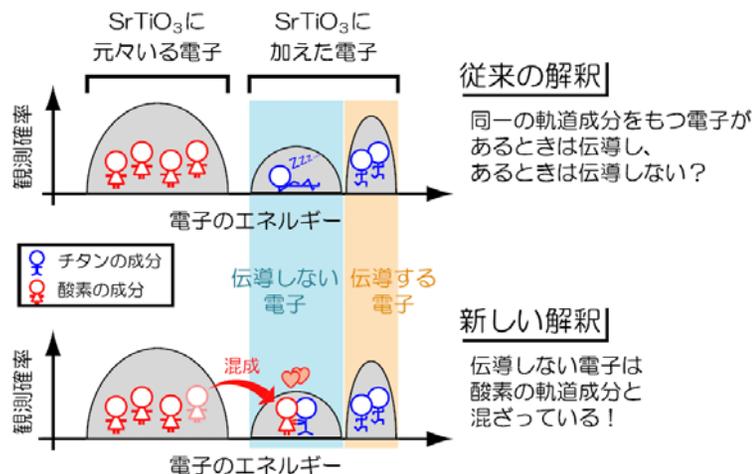


図 電子を加えたSrTiO₃の電子状態