

受入大学名	大阪大学		
Host University	Osaka University		
外国人研究者	グエン ドウイ フイ		
Foreign Researcher	NGUYEN DUY HUY		
受入研究者	森川 良忠	職名	教授
Research Advisor	Yoshitada Morikawa	Position	professor
受入学部/研究科	工学研究科 精密科学・応用物理学専攻		
Faculty/Department	Graduate School of Engineering, Department of Precision Science and Technology		

<外国人研究者プロフィール/Profile>

国籍	ベトナム
Nationality	Vietnam
所属機関	ハノイ科学大学
Affiliation	VNU University of Science
現在の職名	講師
Position	Lecturer
研究期間	令和元年 7月 1日 ~ 令和元年 8月 31日 (62日間)
Period of Stay	62days (7month 1days, 2019year - 8month 31days, 2019year)
専攻分野	物理学
Major Field	Physics



ミーティング/meeting

<外国人研究者からの報告/Foreign Researcher Report>

<p>①研究課題 / Theme of Research</p>
<p>Transition-metal oxide thin films have been drawing enormous attention owing to their fascinating phenomena and applications such as the possibility of stabilizing unusual quantum phases or building interface-controlled devices. In addition, the precise control of epitaxial interfaces of transition-metal oxides allow us with an opportunity to investigate the effects of quantum confinement and epitaxial strain on strongly correlated electron systems. Despite tremendous effort, the nature of electronic phases in thin films and superlattices of transition-metal oxides such as LaNiO₃ remains elusive, although such fundamental knowledge at the nanoscale is important towards the application of these materials in nanoscience and nanotechnology.</p>
<p>②研究概要 / Outline of Research</p>
<p>Among the transition-metal oxides, LaNiO₃ material has become the subject of intense research. LaNiO₃ ultrathin films are known to exhibit various electronic phases and MIT as the film thickness is confined to a few unit cells. Quantum confinement, epitaxial strain and other factors such as growth-induced disorder, cation non-stoichiometry have been evoked as the mechanism. However, the reason for the metal-insulator transition remains unclear. There are much efforts to elucidate the origin of the MIT transition but the reason remains unclear. In previous publication, I pointed out that the MIT could be observed on LaNiO₃ thin films on SrTiO₃ substrate. In this research, I show that oxygen vacancy could be the driving force for MIT under experimental conditions.</p>
<p>③研究成果 / Results of Research</p>
<p>By investigating various models of oxygen deficient LaNiO₃ thin films on SrTiO₃ substrate, I find that oxygen vacancy stabilizes the insulating ground state of NiO₂-terminated LaNiO₃ thin films. The band gap is as large as 1.0 eV, and is formed as the result of the large exchange splitting between 3d electrons of Ni²⁺ ions. The metallic state is recovered as the LaNiO₃ film thickness is increased. In other words, my results point out the metal-insulator transition in LaNiO₃ thin films, and are in good agreements with experimental observations. By plotting the phase diagram, I indicate that, under experimental conditions, only oxygen deficient NiO₂-terminated LaNiO₃ thin film is formed. This finding strongly supports the results of experiments.</p>
<p>④今後の計画 / Further Research Plan</p>
<p>In experiments, Sr segregation process is observed in LaNiO₃ films on SrTiO₃ substrate and is expected to alter the electronic structure of LaNiO₃ thin films. For future study, I plan to investigate the effects and energetics of Sr diffusion in LaNiO₃ films on SrTiO₃. The results will aid in further understanding the electronic structures of thin films at the nanoscale. Since the metal-insulator transition could also be observed for LaNiO₃ thin films on LaAlO₃ substrate, I expect that our current oxygen vacancy mechanism is also valid. However, there maybe substantial differences between the two substrates, as LaAlO₃ is polar material as opposed to the non-polar SrTiO₃, and first-principles calculations are needed to clarify the underlying mechanism.</p>

<受入研究者からの報告/Research Advisor Report>

① 研究課題 / Theme of Research

最新の計算科学的手法により、基礎科学的・応用的に重要な酸化物の研究を行い、計算科学の分野で日本とベトナムとの研究の連携を強化し、固体酸化燃料電池(SOFC)のカソード材料など、今後重要となる物質に関する研究を進めることにより、ベトナムの産業の発展にも寄与することが期待できる。Nguyen氏は我々と第一原理電子状態計算を用いた研究をすでに進めてきており、興味深い結果が得られている。本短期研究制度によって大阪大学に滞在することができれば、この点を一気に加速することが可能となる。また、Nguyen氏はベトナム国家大学の科学大学物理学教室の教授でベトナム理論物理学会の取りまとめ役でもあるCong教授のグループの講師であり、連携を強めることにより、学生や研究者学術交流を益々盛んにすることができると期待できる。

② 研究指導概要 / Outline of Research

遷移金属酸化物は、組成を制御することによって多様な電子構造・磁気構造を示す物質であり、電子デバイスや触媒やその担体、燃料電池電極触媒・固体電解質、など様々な分野への応用が期待されている。組成を制御された薄膜成長技術により、その電子状態が原子層レベルで制御可能になってきている。SrTiO₃はバルクではワイドギャップ半導体であり、LaNiO₃はバルクでは金属的な性質を持っている。SrTiO₃基板にLaNiO₃を1層ずつ成長させた場合、最初の1-2層は半導体的であるが、数層積むことにより金属的に転移することが観測されており、原子層を制御することにより絶縁体-金属転移が観測される興味深い系である。しかしながら、その原子レベルでの構造は不明であり、絶縁体-金属転移の物理的起源を解明し応用していくには超薄膜の原子レベルでの構造解明が重要である。

③ 研究指導成果 / Results of Research

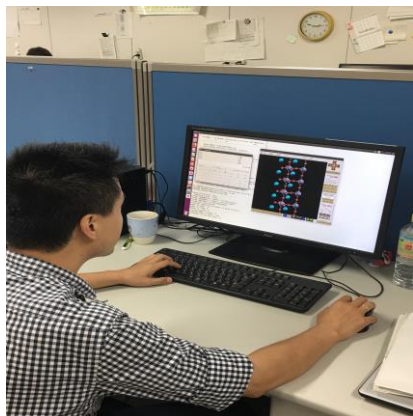
第一原理電子状態計算と熱・統計力学的解析を行うことにより、薄膜の原子レベルでの構造と電子状態の解明を目指した。第一原理電子状態計算により、SrTiO₃のTiO₂終端面にLaNiO₃の超薄膜を成長させた時の構造と電子状態について、系統的に調べた。その結果、TiO₂終端面にLaO-NiO₂-LaOとLaNiO₃を1.5層成長させた場合半導体的な電子状態を持ち、もう一層NiO₂層を成長させると金属層に転移が起こることが明らかとなった。一方、NiO₂終端面においても、酸素欠陥があると半導体的になることも見いだした。これらの二つの構造のうち、どちらが安定であるかは不明であった。そこで、酸素とLaの化学ポテンシャルの関数として安定構造の相図を求めることを試みた。その結果、NiO₂層で終端した面は酸素欠陥が非常にできやすく、それによって半導体的電子構造を保つことが明らかとなった。

④ 留学生交流事業の活動状況 / Activities of International Student Exchange Program

留学生交流事業に関しては、大阪大学大学院工学研究科の精密科学・応用物理学専攻の量子エンジニアリング研究特別プログラムにおいて、博士課程および修士課程の留学生を受け入れ、最先端の研究・教育を行うとともに、東南アジアのトップクラスの大学とダブル・デGREE・プログラムを締結し、学生の共同指導・共同研究を行ってきている。さらに、毎年JASSOの短期留学生受け入れ制度を活用して、5名程度、1年間協定のある大学から大学院生を受け入れ、大阪大学で1年間研究を行なって、帰国後学位を取得させることを行なってきた。これは、その後大阪大学の大学院やDDPに入る良いきっかけとなり、毎年受け入れた学生の中から正規大学院生として進学する者も少なからず出てきている。また、JSTのサイエンスプログラムにより、毎年10名程度10日間受け入れて、大阪大学の研究設備や周辺の文化施設を訪問し、日本留学に意欲を持つ学生を輩出している。

⑤ 今後の計画 / Further Research Plan

今後は今回明らかとなった表面構造と電子構造の関連から、SrTiO₃基板にLaNiO₃超薄膜を成長させた系の金属-絶縁体転移の起源を明らかにする。これが解明されれば、次にLaAlO₃基板にLaNiO₃を成長させた系でも同様な金属-絶縁体転移が観測されているが、これまで、SrTiO₃基板と同じ構造で調べたところ、金属-絶縁体転移は再現されないことがわかった。すなわち、SrTiO₃のTiO₂終端面は中性な面であるが、LaAlO₃のAlO₂面は形式的に電子を一つ他の層に供給する点が異なり、そのために、異なる物理的機構が働いている可能性がある。これらの一連の振る舞いを解明したのち、さらに薄膜中での酸素イオンの拡散過程や表面での反応過程を解明し、燃料電池電極触媒の機能についても解明を行なっていく予定である。



リサーチング/Researching