

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 30 日現在

機関番号：34504

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2016

課題番号：15K13507

研究課題名(和文)人工積層された原子膜超構造における量子伝導の理論

研究課題名(英文)Theory for Quantum Transport Properties of Atomically Thin Materials

研究代表者

若林 克法(WAKABAYASHI, Katsunori)

関西学院大学・理工学部・教授

研究者番号：50325156

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、グラフェンなどの原子膜とよばれる新しいナノ材料について、理論モデリングによる電子状態解析と電磁場応答解析、及び第一原理計算による電子状態解析を行うことで、原子膜及び原子膜超構造における特異な新物性の解明と理論予測を行った。具体的な成果として、グラフェンドメインにおける磁気発現機構の解明、層状物質CaSi₂におけるディラックコーンの安定性と運動量シフトの解明、円偏光電磁場照射によるカーボンナノチューブにおけるバレー偏極効果の発見、2次元Zak位相を使った新しいトポロジカル物質相の提案などを行った。

研究成果の概要(英文)：In this research project, we have investigated the electronic and optical properties of atomically-thin materials such as graphene and transition metal dichalcogenide (TMDC) monolayers based on the theoretical modeling methods and first-principles calculations. Main findings in this project is following: [1] unveiling of peculiar emergence mechanism of localized magnetic states at the graphene domain boundaries [Sci. Rep. (2015)], [2] finding of stable Dirac cones in CaSi₂ and their momentum shift [Phys. Rev. B (2015)], [3] valley polarization of carbon nanotubes under circularly-polarized Irradiations [Appl. Phys. Exp. (2016)], [4] theoretical propose of new topological phases without a Berry curvature [Phys. Rev. Lett. (2017)]. Our work will serve for designing new class of electronic devices on the basis of atomically-thin materials.

研究分野：ナノサイエンス

キーワード：原子膜物質 グラフェン 理論 ナノサイエンス トポロジカル物質 円偏光

1. 研究開始当初の背景

炭素原子だけからなる一原子層膜(グラフェン)は、ITRS(International Technology Roadmap for Semiconductors)において、Emerging Research Materialとして注目され、次世代半導体素子における機能性物質の候補として期待されている。実際、グラフェンの物理・化学の基礎研究とデバイスへの応用研究が、世界的な規模で且つ爆発的な勢いで進められている。さらに、トポロジカル絶縁体(バルクは絶縁体だが、表面にスピンの流が現れる物質)と呼ばれる一連の物質も、カルコゲナイド系層状物質である。

最近になり、これら層状物質について、一枚の原子膜を取り出し、デバイスを作製することで電気伝導測定などが可能になってきている。しかし、原子膜系では、その厚みが原子スケールとなるため、従来の半導体物理理論が適用できない。さらに、十分な理論・計算科学的な知見が蓄積されておらず、革新的なナノエレクトロニクスデバイスを創出するための障害となっている。

そこで、本研究課題では、原子薄膜系という新しいクラスのナノ材料について、電子・スピン特性の理論解析を行い、原子膜超構造における電子・スピン伝導に関する微視的理論と現象理論を構築する。これによって、電子スピン素子へ応用するための基礎となる知見および、デバイス設計の指針を獲得することを目指す。

2. 研究の目的

本研究課題の目的は、グラフェン、h-BN(六方晶窒化ホウ素)あるいは酸化物ナノシートなどの原子スケールの厚みをもつ物質(原子膜)を、人工的にエピタキシャル積層した電子デバイス構造における電子・スピン伝導に関する微視的理論と現象理論を構築することで、原子膜系に特有の量子輸送現象を解明することである。さらに、原子膜系を電子スピン素子へ応用するための基礎となる知見および、デバイス設計の指針を獲得することである。特に、原子薄膜超構造におけるスピン伝導の構造依存性と周辺の誘電環境効果を明らかにする。

3. 研究の方法

本研究課題では、原子膜やそれらの人工積層超構造における電子・スピン伝導の機構を、非平衡グリーン関数法に基づく微視的理論(量子輸送理論)および、ボルツマン輸送理論(半古典理論)に基づき、理論解析を行う。これにより、電子・スピン伝導におけるデバイス構造の依存性と誘電環境効果を解明する。また、異種物質間の相互作用を連続体理論あるいは格子模型理論でモデル化し、スピン緩和時間、スピン拡散長等の物理量を解析

することにより、原子薄膜系におけるスピン伝導機構を明らかにする。さらに原子薄膜超構造デバイスの電子移動度など、デバイス動作検証に必要な物理量の評価式を導出・適用することで、最適デバイスの設計を目標とする。

4. 研究成果

本研究課題の目的は、グラフェン、hBN(六方晶窒化ホウ素)あるいは酸化物ナノシートなどの原子スケールの厚みをもつ物質(原子膜)を、人工的にエピタキシャル積層した電子デバイス構造について、電子・スピン伝導および光学的応答とその制御に関する微視的理論、現象理論の基礎を構築することである。特に、原子膜系に特有の新奇量子現象を発見と予測を目指した課題である。

上記の研究目的を達成するべく、強結合モデルによるモデル計算と解析計算、第一原理計算による固体電子状態の解析によって、以下の課題を遂行し、当初の課題設定を達成する十分な成果を得た。ここでは代表的な成果について記す。

(1) 円偏光電磁場照射によるカーボンナノチューブの電子状態制御

一次元炭素物質であるカーボンナノチューブに、円偏光の光を入射させることで電子状態の制御変調させることを提案した。カーボンナノチューブは、筒状の構造をもった物質で、その巻き方によって、電子状態が変わることが知られている。我々は、Floquet-Tight-binding-modelによって、円偏光の効果解析し、アームチェアナノチューブでは、バレーに依存した電子局在が起きることを示した。今後、バレートロニクスへの応用可能性が期待される。

(2) ベリー曲率ゼロのトポロジカル物質相の理論

トポロジカル物質では、物質の表面やエッジなどの境界面において、無散逸な電流やスピン流が現れ、超低消費電力の電子素子や量子計算素子への応用が期待されている。従来の研究では、ベリー曲率とよばれるトポロジカル量が有限になる物質で、トポロジカル状態が発現することが知られていた。しかし、我々は、たとえベリー曲率がゼロであっても、ベリー接続と呼ばれる別のトポロジカル量が有限であれば、トポロジカル特性が発現することを解明した。この理論により、トポロジカル特性をもつ新たな物質群の設計や探索、合成が今後期待される。

(3) グラフェンにおけるプラズマ波の遅延効果

種々の2次元電子系におけるプラズマ波

の遅延効果について解析をした。その結果、非常に清浄なグラフェンでは、プラズマ波の分散関係において、線形からサブリニアへのクロスオーバーが観測される可能性があることを指摘した。

(4) Ca インターカレーションをおこなったシリセン、ゲルマネンの電子状態解析

新しい原子膜物質であるシリセン、ゲルマネンにアルカリ金属をインターカレートした効果を、第一原理計算によって解析した。今後は、超伝導転移の可能性などを考察する。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 10 件)

1. F. Liu, K. Wakabayashi, Novel Topological Phase with a Zero Berry Curvature, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 076803 (2017). (査読有)
doi: [10.1103/PhysRevLett.118.076803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.076803)
2. Y. Imai, K. Wakabayashi and M. Sigrist, Thermal Hall conductivity in the spin triplet superconductor with broken time reversal symmetry, *Phys. Rev. B* **95**, 024516 (2017). (査読有)
doi: [10.1103/PhysRevB.95.024516](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.024516)
3. H.-Y. Deng, K. Wakabayashi, and C. H. Lam, Universal self amplification channel for surface plasma waves, *Phys. Rev. B* **95**, 045428 (2017). (査読有)
doi: [10.1103/PhysRevB.95.045428](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.045428)
4. F. Liu, Y. Nakajima and K. Wakabayashi, Numerical Study of Carbon Nanotubes under Circularly polarized Irradiations, *Applied Physics Express (APEX)*, **9**, 085101(2016). (査読有)
doi: [10.7567/APEX.9.085101](https://doi.org/10.7567/APEX.9.085101)
5. H.Y.Deng, F. Liu and K Wakabayashi, Optical excitation of surface plasma waves without grating structures, *EPL*, **114**, 35002 (2016). (査読有)
doi: [10.1209/0295-5075/114/35002](https://doi.org/10.1209/0295-5075/114/35002)
6. Y. Imai, K. Wakabayashi and M. Sigrist, Thermal Hall conductivity and topological transition in a chiral p-wave superconductor for Sr_2RuO_4 , *Phys. Rev. B* **93**, 024510 (2016). (査読有)
doi: [10.1103/PhysRevB.93.024510](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.024510)
7. M.Yamamoto, R. Suizu, S. Dutta,

P. Mishra, T. Nakayama, K. Sakamoto, K. Wakabayashi, T. Uchihashi and K.Awaga, Self-assembled honeycomb lattice in the monolayer

of cyclic thiazyl diradical BD TDA (= 4,4 bis(1,2,3,5 dithiadiazolyl)) on Cu(111) with a zero bias tunneling spectra anomaly, *Scientific Reports* **5**, 18359 (2015). (査読有)

doi: [10.1038/srep18359](https://doi.org/10.1038/srep18359)

8. H.Y. Deng, K. Wakabayashi, Retardation effects on plasma waves in graphene, topological insulators and quantum wires, *Phys. Rev. B* **92**, 045434 (2015). (査読有)
doi: [10.1103/PhysRevB.92.045434](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.045434)
9. S. Dutta, K. Wakabayashi, Momentum shift of Dirac cone in silicene intercalated compound CaSi_2 , *Phys. Rev. B* **91**, 201410 (R) (2015). (査読有)
doi: [10.1103/PhysRevB.91.201410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.201410)
10. S.Dutta, K. Wakabayashi, Magnetization due to localized states on graphene grain boundary, *Scientific Reports*, vol.5, 11744 (2015). (査読有)
doi: [10.1038/srep11744](https://doi.org/10.1038/srep11744)

[学会発表](計 15 件)

1. Feng Liu, 山本真以, 若林克法, Electronic properties of graphene with topologically nontrivial hopping texture, 日本物理学会, 2017年3月17日, 大阪大学豊中キャンパス(大阪府豊中市)
2. (招待講演) 若林克法, Nanoscale and Edge Effects on Electronic Properties of Graphene and Related Materials, 1st Nippon-Taiwan WS on Innovation of Emergent Materials, 2017年2月20日~21日, 関西学院大学神戸三田キャンパス(兵庫県三田市)
3. (Invited) 若林克法, Nanoscale and Edge Effects on Electronic Properties of Graphene and Related Materials, AIMR Seminar, 2017年1月27日, 東北大学片平キャンパス(宮城県仙台市)
4. F. Liu and K. Wakabayashi, "Valley-polarized States of Carbon Nanotubes under Circularly Polarized Light"

- rially Polarized Light”, CNT 25th, November 16-18, 2016, 東京工業大学 (東京都目黒区)
5. Feng Liu, 中島雄大, 若林克法, Numerical Study of Carbon Nanotubes under Circularly Polarized Light Irradiation, 日本物理学会, 2016年9月13日~16日, 金沢大学角間キャンパス(石川県金沢市)
 6. (招待講演) 若林克法, Sudipta Dutta, Nanoscale and Edge Effects on Electronic Properties of BC3 Nanoribbons, MOST Taiwan Consortium of Emergent Crystalline Materials (TCECM), 2016年5月27~28日, 台湾
 7. F. Liu and K. Wakabayashi, “Novel type of topological photonic crystal”, 17th International Conference on Physics of Light-Matter Coupling in Nanostructures, Mar. 28, 東大寺総合文化センター(奈良県奈良市)
 8. K. Wakabayashi, Nanoscience and technology in carbon materials, lecture, 2016年3月10日, IISER Tirupati, India
 9. (依頼講演) 若林克法, グラフェンの電子物性におけるナノスケール効果とエッジ効果の理論, CAMM フォーラム, 2016年3月4日, 青山学院大学青山キャンパス(東京都渋谷区)
 10. (依頼講演) 若林克法, グラフェンの電子物性におけるナノスケール効果とエッジ効果の理論, 仙台プラズマフォーラム, 2016年1月22日, 東北大学青葉山キャンパス(宮城県仙台市)
 11. (招待講演) K. Wakabayashi, Theoretical Studies on electronic and transport properties of graphene nanostructures, 1st Japan-EU Workshop on Graphene and Related 2D Materials, Oct.31-Nov.2, 2015, 東北大学東京分室(東京都千代田区)
 12. (Oral) Katsunori Wakabayashi, Hai-Yao Deng, Retardation Effect of Plasma Waves in Graphene, Topological Insulators and Quantum Wires, ATI NanoCarbon, Sep 3, 2015, 新世代研究所(東京都千代田区)
 13. (依頼講演) 若林克法(関西学院大学), グラフェンの電子物性におけるナノスケール・エッジ効果の理論, 電子研学術講演会, 平成27年7月17日(金), 北海道大学電子科学研究所(北海道札幌市)
 14. (Poster) Mahito Yamamoto S. Dutta, K. Wakabayashi, FUHRER M. S., UENO

K., K. Tsukagoshi, Tunable surface oxidation of atomically thin WSe₂, P120, NT15, June 29-July 3, 2015, 名古屋大学(愛知県名古屋市)

15. (Oral) M. Yamamoto, S. Dutta, K. Wakabayashi, FUHRER M. S., UENO K., K. Tsukagoshi, Layer-by-layer oxidation of atomically thin WSe₂: Implications for two-dimensional MOSFETs, NT15-Satellite Symposia, June 28, 2015, 名古屋大学(愛知県名古屋市)

[図書](計 0 件)

[産業財産権]

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

[その他]

ホームページ等

<http://www.kg-nanotech.jp/tmd/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

若林 克法 (WAKABAYASHI Katsunori)
 関西学院大学理工学部・教授
 研究者番号: 50325156

(2) 研究協力者

LIU Feng (LIU Feng)
 関西学院大学理工学部・博士研究員