

平成21年 6月 1日現在

研究種目：基盤研究(C)
 研究期間：2005-2008
 課題番号：17510085
 研究課題名（和文） 中間サイズ・ナノワイヤーの非一様伝導の理論的研究
 研究課題名（英文） Theoretical study on inhomogeneous conduction
 in medium-sized nanowires
 研究代表者
 小林 功佳 (KOBAYASHI KATSUYOSHI)
 お茶の水女子大学・大学院人間文化創成科学研究科・教授
 研究者番号：80221969

研究成果の概要：

原子のサイズよりは大きく、一様な物質と見なせるサイズよりは小さな、中間のサイズのナノワイヤーの非一様な伝導現象に関する理論的研究を行った。特に、コアシェル型ナノワイヤーの電気伝導に関する研究では、コアとシェルの部分を構成する物質のエネルギーバンドとは全く異なる、ほとんど分散をもたないバンドが存在する場合があります、それが電気伝導に大きな影響を及ぼす可能性があることが理論的に予測された。また、半導体ヘテロ接合ナノワイヤーの電気伝導に関する研究では、時間反転的な現象が見られ、これにより、パルス的な波の減衰を抑えることが可能であることが理論的に示された。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2005年度	1,200,000	0	1,200,000
2006年度	600,000	0	600,000
2007年度	600,000	180,000	780,000
2008年度	700,000	210,000	910,000
総計	3,100,000	390,000	3,490,000

研究分野： 表面物理、ナノスケールの物理

科研費の分科・細目： ナノ・マイクロ科学、ナノ構造科学

キーワード： ナノ材料、輸送現象、表面・界面物性、ナノコンタクト、計算物理

1. 研究開始当初の背景

1990年代からナノチューブやナノワイヤーに関する研究が盛んに行われるようになった。これは、原子のレベルから、これらの物質の性質を研究し解明しようとするものである。一方、半導体を用いた量子細線の研究は1980年代から行われている。そこでは、主に有効質量近似を用いたモデルによるアプローチから研究が行われていた。しかし、これらの中間のサイズのナノワイヤーに関

する研究はあまり行われていなかった。本研究を申請する直前の2003年には、直径が2nm程度のシリコン・ナノワイヤーが作成されたことが初めて報告された(Ma *et al.*: Science **299** (2003) 1874)。このような状況で中間サイズのナノワイヤーを研究することは、時宜にかなない意義あるものと思われる。以上のような背景から本研究を開始した。

2. 研究の目的

中間サイズのナノワイヤーに関する理論的研究を行い、そのサイズのナノワイヤーに特有な物性を理論的に明らかにする。本研究で対象とする中間サイズのナノワイヤーでは、そのサイズが原子スケールに比べて大きい場合、例えば、表面とバルク部分が明確に区別される。このため、その電気伝導等の現象では非一様性が現れると予想される。そこで特に、ナノワイヤーの伝導現象において非一様性がどのように表れるかを調べる。本研究では、中間サイズ・ナノワイヤーの非一様な伝導現象を理解することを目的とする。

3. 研究の方法

本研究は理論的研究である。その研究方法は主に数値計算による。ナノスケールの電気伝導の研究では、量子力学を用いた計算を行った。ただし、原子スケールよりもかなり大きなサイズである中間サイズのナノワイヤーを対象とするため、密度汎関数法に基づく第一原理計算は行わず、強結合法（タイト・バインディング法）による計算を行った。InAs-GaSb 界面の計算では、そのタイト・バインディングのパラメータは、文献(Wei and Razeghi: Phys. Rev. B **69** (2004) 085316)に掲載されているものを用いた。また、InAs のバンドと GaSb のバンドの相対的な位置は、文献(Van de Walle: Phys. Rev. B **39** (1989) 1871)の値を用いて決めた。波束の時間発展は、時間に依存するシュレディンガー方程式を数値的に積分することにより求めた。計算は、主に東京大学物性研究所および同大学情報基盤センターのスーパーコンピュータを用いて行った。

4. 研究成果

(1) コアシェル型ナノワイヤーの電気伝導

コアシェル型ナノワイヤーとは、コア部分を構成するナノワイヤーとそれを覆うチューブ状のシェルの部分からなる2層構造をもつナノワイヤーのことである。これまでにSi-Ge コアシェル・ナノワイヤー(Lauhon *et al.*: Nature **420** (2002) 57)、InP-InAs コアシェル・ナノワイヤー(P. Mohan *et al.*: Appl. Phys. Lett. **88** (2006) 133105)などの作成の報告があり、様々な物質の組み合わせによるナノワイヤーが作成されるようになりつつある。本研究では、半導体コアシェル型ナノワイヤーの計算を行った。

半導体ヘテロ構造には、さまざまなタイプがあるが、本研究では特にタイプIIIのヘテロ構造を対象とした。これは、2種類の半導体のエネルギーバンドのバンドギャップの位置がお互いにずれて重なりを持たないヘテ

ロ構造であり、特定のエネルギー領域で、一方の半導体中では電子的な分散をもち、他方の半導体中ではホール的な分散をもち状態が存在する。このようなヘテロ構造をもつコアシェル型ナノワイヤーのワイヤー軸に沿った電気伝導を考えると、正の群速度をもつ部分と負の群速度をもつ部分とが共存するため、キャリアが電子として振舞うか、それとも、ホールとして振舞うかは自明ではない。おそらく、ナノワイヤーを構成するコアとシェルの部分の体積比率等に依存すると思われる。特に、体積比率が同程度の場合は、電気伝導がほとんど起こらないことが予想される。このことを確かめるために、自由電子的なモデルを用いて、タイプIIIコアシェル型ナノワイヤーのエネルギーバンドを計算した。

図1は、コアが電子的、シェルがホール的な分散をもつコアシェル型ナノワイヤーのエネルギー分散である。簡単のため、電子の有効質量とホールの有効質量の絶対値は同じにしてある。コアの半径は $10a_B^*$ 、シェルの外径は $20a_B^*$ とした。ここで、 a_B^* はボーア半径に電子質量と有効質量の比をかけた有効ボーア半径である。

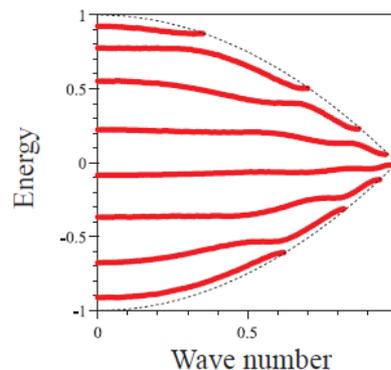


図1 計算より得られたコアシェル型ナノワイヤーのエネルギー分散。赤い線がエネルギーバンドを示す。点線は、電子的なバンドとホール的なバンドが両方とも存在する領域の境界を示す。

比較のため、一様な媒質からなるナノワイヤーのエネルギー分散を図2に示す。図には電子的バンドとホール的なバンドの両方を示してあるが、どちらのナノワイヤーの半径も、コアシェル型ナノワイヤーのコアの部分の半径と同じく $10a_B^*$ とした。

図1と図2を比較すると、コアシェル型ナノワイヤーのバンドは、一様なナノワイヤーのバンドの単なる重ね合わせでは理解できないことがわかる。エネルギーの中心($E=0$)から離れ、状態が存在する境界(図1の点線)付近にあるバンドは、電子的なバンドとホー

ル的なバンドが交差する点でバンドギャップが開いていると見ることが出来る。しかし、エネルギーの中心の部分では、電子的バンドともホールのバンドとも全く異なる、ほとんど分散をもたないバンドが存在する。フェルミ・エネルギーがこの中心エネルギーに近いバンド中にある場合は、予想されたように電気伝導率が著しく低下することが考えられる。このようなヘテロ構造をもつコアシェル型ナノワイヤーは現在まだ作成されていないが、今後、作成されれば、本研究で得られたような物性が見られることが期待される。

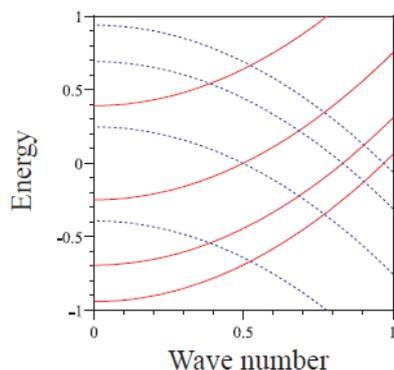


図2 計算より得られたナノワイヤーのエネルギー分散。赤い実線は電子的分散をもつナノワイヤーの分散、青い点線はホールの分散をもつナノワイヤーの分散を示す。

(2) 半導体ヘテロ接合ナノワイヤーの電気伝導

本研究代表者は、相補媒質の概念を電子系へ拡張した(Kobayashi: J. Phys. Condens. Matter **18** (2006) 3703)。本研究は、電子系の動的相補媒質をナノワイヤーに適用したものである。

波が媒質中を移動すると、一般にはその位相と振幅が変化する。相補媒質とは、変化した位相と振幅を回復する媒質のことである。媒質とその相補媒質のペアの中を通過した波は、通過する以前と同じ状態に戻る。このため、空間が実効的に対消滅したと見做すこともできる。

相補媒質の概念は、初め、電磁場に導入されたが、その後、電子系に拡張された。自由電子の相補媒質とは、正孔系であることを示すことができる。現実の物質で電子と正孔が存在する系の一つとして、半導体ヘテロ接合界面が考えられる。そこで、電子・正孔系からなる半導体ヘテロ接合中の電子波の透過に関する理論的な研究を行い、相補系が現実実現できるか否かについて、その可能性を調べた。電子・正孔系の半導体ヘテロ界面として InAs と GaSb の界面を考え、界面を透過

する電子波束の時間発展を、時間に依存するシュレディンガー方程式を数値的に解くことにより求めた。電子波の透過の計算は1次元の計算を行った。これより、ナノワイヤー中の電気伝導を議論した。

図3は、計算した波束の時間発展を示す。初め InAs 中を運動していた波束が InAs と GaSb との界面に衝突し、GaSb へ透過する部分と InAs に反射される部分に分かれる様子が見られる。

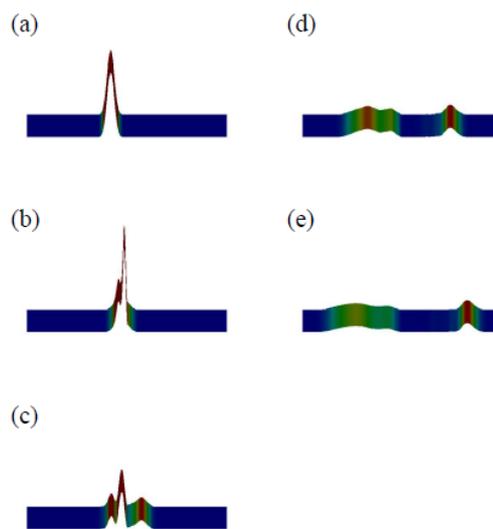


図3 波束の時間発展。(a), (b), (c), (d), (e)の順に時間が経過する。各図の中心が InAs と GaSb との界面の位置で、左側が InAs、右側が GaSb である。横軸の長さは 600nm。

図4は、波束が InAs-GaSb 界面に衝突した後、十分に時間が経った時刻での波束の様子を示す。比較のため、同じ初期状態から始めて、GaSb との界面がなく InAs のみの様な媒質中を運動した波束の様子も示してある。どちらも初期の波束のピークの高さを1としてある。二つの図を比較すると、界面を通った波束のピークの振幅はおよそ0.3であるのに対して、界面のない様系を運動した波束はおよそ0.2であり、界面を通った方が波束のピークの高さが高いことがわかる。

波束とは、多数の平面波の重ね合わせの状態であるが、電子のような分散をもつ波の場合は、各平面波成分の速度が一定でないため、初めは位相が揃い、ある位置に鋭いピークをもつ波束も時間の経過とともに位相が不揃いになり、波束のピークの高さは一般に減少する。図4の結果は、電子-正孔界面を通過した波束は、一様媒質中を運動する波束よりもピークの高さの減少が少ないことを示している。波は界面を透過する際に散乱される

ため、ピークの高さも減少する。したがって、通常は、界面を透過した波は、透過しない波よりもピークの高さが低いはずである。図4は、通常とは逆の結果を示している。このような結果が得られる理由は、相補媒質による波の回復作用である。

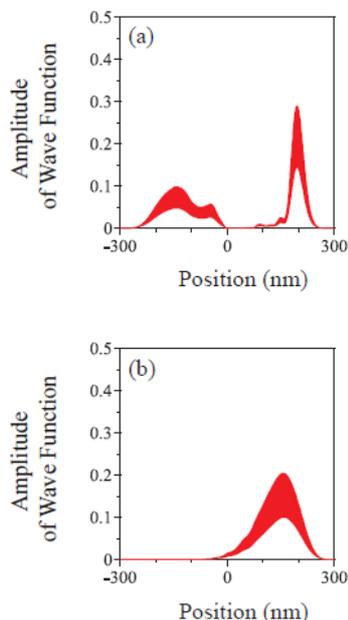


図4 (a) InAs-GaSb 界面に衝突した後の波束の様子。界面はゼロの位置にある。(b) InAs のみからなる一様な媒質中を運動した波束の様子。

波が回復する様子を直接見るために、波束のピークの位置と高さとの関係を図5に示す。InAs-GaSb 界面を透過した波束は、界面での散乱により、透過直後、ピークの高さが著しく減少する。しかし、その後ピークの高さは減少せず、逆にやや増加する。一方、一様な InAs 中を運動する波束は、単調に変化し、ピークの高さも単調減少する。このため、界面からおおよそ 90nm の位置で、両者の高さが逆転し、その後は通常とは異なり、界面を透過した波束の方がピークの高い。

以上の結果より、初め電子系にあった波束は、その相補媒質である正孔系中に入ると波束の回復が起こり、その回復の度合いは電子-正孔界面を透過する際に生ずる反射損失を補うのに十分であり、その結果、波束は一様な媒質中を進む場合に比べてより長く生き残ることがわかった。この結果は1次元系の計算により得られたものであり、InAs と GaSb のナノワイヤーのヘテロ接合系では、以上のような現象が期待される。このような相補的半導体ナノワイヤー・ヘテロ接合系では電子波のパルスの振幅の減衰が抑えられ、よ

り遠くへシグナルを送ることができるものと思われる。

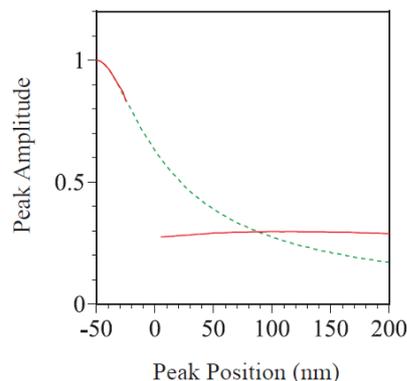


図5 波束のピーク位置とその強度との関係。赤い実線は InA-GaSb 界面を透過する波束、緑の点線は InAs 一様な媒質中を運動する波束を表す。ゼロの位置が InA-GaSb 界面である。

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)

[学会発表] (計6件)

- ① Katsuyoshi Kobayashi, Dynamical properties of electrons in complementary media, The 15th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, 19.12.6-8, Atagawa.
- ② Katsuyoshi Kobayashi, Electron transmission through complementary semiconductor interfaces, 9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures, 19.11.11-15, Tokyo.
- ③ 小林功佳, 相補的な半導体界面の電子透過, 日本物理学会第62回年次大会, 19.9.21-24, 北海道大学.
- ④ Katsuyoshi Kobayashi, Electron transmission through complementary semiconductor junctions, 17th International Vacuum Congress, 19.7.2-6, Stockholm.
- ⑤ Katsuyoshi Kobayashi, Complementary media of electrons, The 10th ISSP International Symposium on Nanoscience at Surfaces, 18.10.9-13, Kashiwa.
- ⑥ 小林功佳, 相補媒質系における波束の運動, 日本物理学会秋季大会, 18.9.23-26, 千葉大学.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小林 功佳 (KOBAYASHI KATSUYOSHI)
お茶の水女子大学・
大学院人間文化創成科学研究科・教授
研究者番号:80221969