

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 13 日現在

機関番号：12611

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2010～2013

課題番号：22560019

研究課題名(和文) ナノスケールで制御された界面構造を利用した新たな電子物性の探索

研究課題名(英文) Search for new electronic properties using the interface structures controlled on nano scales

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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円、(間接経費) 840,000円

研究成果の概要(和文)：最近数年間に新たに生成されたナノスケールの物質を対象に、特にその界面構造の電子物性に焦点を当てて理論的研究を行い、新奇な物質の電子的性質を明らかにし、新たな機能を探索することを目的として研究を行った。双晶超格子ナノワイヤー、GaInP2双晶界面、トポロジカル絶縁体と金属の界面について電子状態および輸送現象に関する研究を行い、新たな知見を得た。

研究成果の概要(英文)：In this project we have theoretically studied the electronic properties of nanoscale materials that have been recently produced. We focused on the electronic states of their interface structures, and purposed to clarify the electronic properties of new materials and to search their new functions. We have studied the electronic structures and transport properties of twinning superlattice nanowires, GaInP2 twinning interfaces, and the interfaces between topological insulators and metals, and obtained new knowledge about these materials.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎、薄膜・表面界面物性

キーワード：表面界面物性 電子物性 ナノ構造 新物質 計算物理学 双晶 超格子 トポロジカル絶縁体

1. 研究開始当初の背景

最近数年間に初めて生成された新たなナノスケールの構造をもつナノワイヤー・薄膜等の報告がある。また、光の分野では負の屈折・スーパーレンズ等を実現するメタマテリアルの研究が盛んであるが、その電子系版に関する理論的研究がある。これらに共通することの一つは、ナノスケールで制御された界面構造であり、後者はそれを積極的に利用して新たな物性を発現させようとするものである。

2. 研究の目的

本研究では、ナノスケールで制御された界面構造の電子物性に関する理論的研究を行い、新奇な構造をもつ物質の性質を明らかにし、新たな機能を探索することを目的とした。

3. 研究の方法

本研究は、理論的な方法により遂行した。物質の電子状態を精度良く計算する方法である密度汎関数法を用いて数値的に計算を行った。原子数の大きな系などの密度汎関数法を用いて計算することが困難な場合については、より簡便な計算方法であるタイト・バインディング法を併用した。電気伝導等の電子の輸送特性については、ランダウアー的な立場にたち、透過率の計算を行い、物性を議論した。

4. 研究成果

本研究では、次に示すように様々な系において理論的な研究を行った。

(1) 双晶超格子ナノワイヤーおよび双晶界面の電子状態に関する研究

ナノワイヤーの現実的な応用を考える際に、その結晶構造・欠陥分布の制御は重要である。最近 InP および InAs のナノワイヤーで、結晶構造を制御して、双晶界面を周期的に導入した双晶超格子ナノワイヤーが作成された。このような双晶界面が周期的に入ったことによるナノワイヤーの電子状態への影響を調べるため、図1に示すような Ag 双晶超格子ナノワイヤーの電子状態をタイト・バインディング法を用いて計算した。その結果、図1に示すようなエネルギー・バンドが得られた。これは、バルクの Ag 双晶超格子のエネルギー・バンドとは異なり、微細な構造をもつ。この微細な構造が生ずる原因はナノワイヤーのジグザクな形状であることが推測された。このため、ナノワイヤーのジグザクな形状が電子状態に及ぼす効果を調べるために、シュレディンガー方程式を斜交座標で表し、サブバンド間の有効的な行列要素を解析的に求めた。その結果、ナノワイ

ヤーの半径と超格子の周期が同程度のときに、境界のジグザクな形状効果が大きいことがわかった。

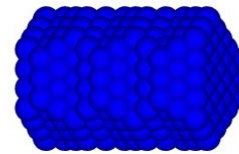
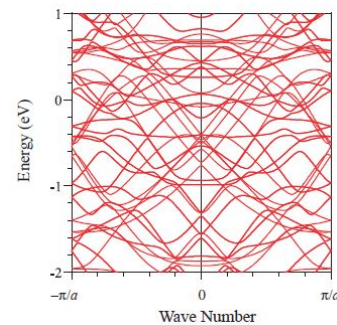


図1: Ag 双晶超格子ナノワイヤーのエネルギー・バンド(上)と原子構造(下)

(2) GaInP₂ 双晶界面の電子状態

CuPt 型の結晶構造をとる GaInP₂ などの三元化合物半導体は、一軸性の構造をとる、電子の有効質量、誘電率等も一軸性の異方性をもつ。この双晶界面に入射する弾道的な電子を考えると、界面での反射が起こらず全透過すること、および、特定の入射角では負の屈折が起こることが理論的に示されていた。しかし、この理論は有効質量近似による議論であり、原子レベルから研究は行われていなかった。本研究では、密度汎関数法を用いた第一原理計算により GaInP₂ 双晶界面の電子状態の計算を行った。その結果、この系のエネルギー・バンドは、有効質量を用いてあらわした単純なものとは異なり、異方性がエネルギー依存性をもつことがわかった。すなわち、伝導体の底では、ほとんど異方性がみられないが、そこからエネルギーが上昇するにつれて異方性が表れ、負の屈折が生ずる可能性が示された。

(3) Bi₂Te₃ および Bi₂Se₃ の表面ステップでの電子透過

Bi₂Te₃ および Bi₂Se₃ はトポロジカル絶縁体である。本研究では、トポロジカル絶縁体表面の原子ステップの電子透過に関する研究を行った。トポロジカル絶縁体とは、2005年に導入された物質の電子的な性質に関する新しい概念である。従来の金属・絶縁体の分類に加えて、絶縁体を2種類に分類することができる。一つは自明な絶縁体であり、もう一つが非自明なトポロジカル絶縁体である。トポロジカル絶縁体の表面には、スピン分極した表面状態バンドが奇数存在する。この表面状態は質量ゼロのディラック方程式で記述され、非磁性の散乱体に対して後方散乱が起こらない、という性質をもつ。2009年に

Bi_2Te_3 および Bi_2Se_3 が単一のディラック・コーンをもつ 3 次元トポロジカル絶縁体であることが理論的および実験的に示され、これらの物質に関する研究が非常に活発になった。本研究では、これらの表面での原子ステップの電子透過特性を理論的に研究した。表面の原子ステップは、物質表面に必ず存在するものであり、トポロジカル表面状態の電子の輸送特性を決める一つの重要な要因である。計算にはタイト・バインディング法を用いた。タイト・バインディングのパラメータは、密度汎関数法による計算結果を再現するように定めた。計算結果を図 2 に示す。得られた結果から新たにわかったことは、ステップの透過特性が Bi_2Se_3 と Bi_2Te_3 とで大きく異なることである。前者は、単純なディラック・ハミルトニアンを用いたモデルで理解できるのに対して、後者は hexagonal warping 効果が本質的に重要であることがわかった。特に、hexagonal warping 項に含まれるエヴァネッセント状態により完全反射が生ずることが、新たにわかった。このような現象は、2 層グラフェンの系でも見られることが予想されている。

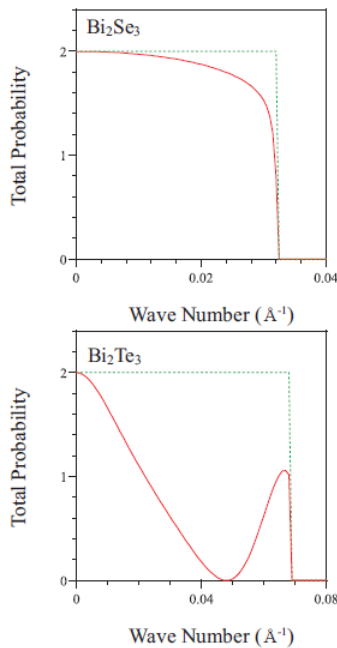


図 2 : Bi_2Se_3 および Bi_2Te_3 表面の単原子ステップでの電子透過特性

(4) 金属から Bi_2Te_3 への電子注入に関する研究

トポロジカル絶縁体と金属との界面に関する理論的研究を行った。トポロジカル絶縁体はバンドギャップ中にスピン分極した表面状態が存在する絶縁体である。金属からトポロジカル絶縁体に電子を注入するとスピンホール効果が生じ、スピン分極した電流がトポロジカル絶縁体表面を流れる。本研究では、トポロジカル絶縁体として Bi_2Te_3 、金属

として Bi を考え、Bi から Bi_2Te_3 に電子を注入した際に Bi_2Te_3 表面を流れるスピン分極した電流の空間分布の様子を理論的に調べた。金属として半金属である Bi を選んだ理由は、 Bi_2Te_3 と Bi の (111) 面の格子定数の値は近く、格子整合性が良いので、電子の界面での散乱が比較的小さく、Bi から Bi_2Te_3 へと電流を注入しやすいと考えられるからである。実際、 Bi_2Te_3 基板上に Bi 薄膜を成長させてその電子状態を調べる実験的研究がすでに報告されており、このような系は現実に存在する。計算は、 Bi_2Te_3 および Bi の電子状態を表すためにタイト・バインディング模型を用い、量子力学における弾性散乱計算により電子の透過率および波動関数を求めた。スピンの分極度を知るために、散乱状態の波動関数のスピン期待値の空間分布を計算した。計算結果を図 3 に示す。この結果より、 Bi_2Te_3 の表面付近に局在して電流が流れ、その電流のスピン分極度は比較的大きいことがわかった。この計算結果より、現実の Bi_2Te_3 と Bi の系においてもスピン分極した電流を得られることが期待される。

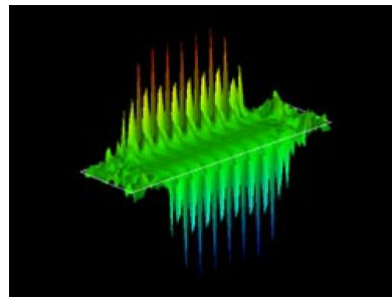


図 3 : Bi から Bi_2Te_3 へ注入された電子の空間分布。赤は上向きスピン、青は下向きスピンをもつ電子の分布が大きい領域を示す。

(5) エッジを水素終端した単原子層 Bi ワイヤの電子状態

これまで行われた単原子層ピスマスの電子状態の密度汎関数法による計算からは、バンドギャップ中にトポロジカルなエッジ状態が存在することが示されている。しかし、このエッジ状態の分散は単純ではなく、フェルミエネルギーに状態が複数存在する。このため、単純な分散をもつトポロジカルなエッジ状態では起こらない後方散乱が生じてしまう。このことは、単原子層ピスマスをスピントロニクスに応用する場合に障害となる。本研究では、後方散乱が生じない単純な分散をもつエッジ状態を実現するために、単原子層ピスマスの端に水素を吸着させた構造を考案した。単原子層ピスマスのエッジとしてジグザク端を考え、密度汎関数法を用いた全エネルギーの計算から水素原子の最適配置を決定した。その結果得られた構造でこの系の電子状態の計算を行ったところ、図 4 に示すエネルギー・バンドが得られた。この結果よりバンドギャップ中にディラック・コーン

状の単純な分散をもつエッジ状態が生ずることがわかった。この系のエッジに欠陥を導入した構造で、電子の透過確率の計算を行ったところ、後方散乱が生じず、完全透過が起こることが確かめられた。この結果から、水素がエッジに吸着した単原子層ビスマスには、後方散乱の生じない理想的な分散をもつトポロジカルエッジ状態が存在し、この系がスピントロニクスへの応用に適していることが理論的に示された。今後は、この理論的結果を確認する実験が期待される。

図4：端を水素で終端して単原子層 Bi ワイヤのエネルギー・バンド

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3件)

T. Hirahara, N. Fukui, T. Shirasawa, M. Yamada, M. Aitani, H. Miyazaki, M. Matsunami, S. Kimura, T. Takahashi, S. Hasegawa, and K. Kobayashi, Atomic and electronic structure of ultrathin Bi(111) films grown on Bi₂Te₃(111) substrates: Evidence for a strain-induced topological phase transition, *Physical Review Letters*, 109, 227401 (5 pages) (2012), 査読有

N. Fukui, T. Hirahara, T. Shirasawa, T. Takahashi, K. Kobayashi, and S. Hasegawa, Surface relaxation of topological insulators: Influence on the electronic structure, *Physical Review B*, 85, 115426 (4 pages) (2012), 査読有

K. Kobayashi, Electron transmission through atomic steps of Bi₂Se₃ and Bi₂Te₃ surfaces, *Physical Review B*, 84, 205424 (14 pages) (2011), 査読有

[学会発表](計20件)

小林功佳, 原子吸着したエッジをもつ 1BL Bi 薄膜のエッジ状態, 日本物理学会第 69 回年次大会, 東海大学, 26.3.27-30

Hikari Nogami, Hiromi Nakao and Katsuyoshi Kobayashi, Calculation of electronic transmission properties of single layer and bilayer silicene, 12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces,

Interfaces and Nanostructures, Tsukuba, 25.11.4-8

Katsuyoshi Kobayashi, Edge states of Bi and Sb thin films on 3D topological insulator substrates, 12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures, Tsukuba, 25.11.4-8

小林功佳, Sb₂Te₃ 基板上的 Sb 薄膜の電子状態計算, 日本物理学会秋季大会, 徳島大学, 25.9.25-28

中尾裕美、野上陽加里、小林功佳, 2 層シリセンの電子透過特性の計算, 日本物理学会秋季大会, 徳島大学, 25.9.25-28.

小林功佳, Bi₂Te₃ 基板上的 1BL-Bi のエッジ状態, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 25.3.26-29

Katsuyoshi Kobayashi, Atomistic calculation of electron injection into the surface states of Bi₂Te₃ from Bi, The 20th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, Naha, 24.12.17-19

小林功佳, Bi から Bi₂Te₃ 表面状態への電子注入の原子スケールでの計算, 第 32 回表面科学会学術講演会, 東北大学, 24.11.20-22

Katsuyoshi Kobayashi, Transmission properties of electrons in topological surface states through atomic steps of Sb surfaces, The 10th Japan-Russia Seminar on Semiconductor Surfaces, Tokyo, 24.9.26-28

小林功佳, Bi-Bi₂Te₃ 界面の電子透過の計算, 日本物理学会秋季大会, 横浜国立大学, 24.9.18-21

Katsuyoshi Kobayashi, Electron transmission through atomic steps of Sb surfaces, The 29th European

Conference on Surface Science,
Edinburgh, 24.9.3-7

小林功佳, Sb表面ステップの電子透過特性, 日本物理学会年次大会, 関西学院大学, 24.3.24-27

福居直哉、平原徹、白澤徹郎、高橋敏男、
小林功佳、長谷川修司, Bi_2Te_3 超薄膜および 1BLBi の LEEDIV 構造解析, 日本物理学会年次大会, 関西学院大学, 24.3.24-27

平原徹、福居直哉、白澤徹郎、相谷昌紀、
山田学、宮崎秀俊、松波雅治、木村真一、
高橋敏男、小林功佳、長谷川修司,
 Bi_2Te_3 上の Bi 超薄膜の電子状態と原子構造, 日本物理学会年次大会, 関西学院大学, 24.3.24-27

Katsuyoshi Kobayashi, Electron transmission through surface steps of Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 , The 6th International Symposium on Surface Science, Tokyo, 23.12.11-15

小林功佳, Bi_2Te_3 および Bi_2Se_3 表面ステップの電子透過特性, 日本物理学会秋季大会, 富山大学, 23.9.21-24

Katsuyoshi Kobayashi, Electron transmission through surface steps of topological insulators, The 28th European Conference on Surface Science, Wroclaw, 23.8.28-9.2

Katsuyoshi Kobayashi, Electron transmission through steps of Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 surfaces, The 18th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, Atagawa, 22.12.9-11

小林功佳, Bi_2Te_3 および Bi_2Se_3 表面ステップの電子状態, 日本物理学会秋季大会, 大阪府立大学, 22.9.23-26

Katsuyoshi Kobayashi, Electronic states of twinned-superlattice nanowires, The 27th European

Conference on Surface Science,
Groningen, 22.8.29-9.3

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

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし