

令和 5 年 6 月 16 日現在

機関番号：82626

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K05201

研究課題名（和文）遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるスピン・フォノン制御の理論研究

研究課題名（英文）Theoretical study of spin-phonon control in transition metal dichalcogenides

研究代表者

植田 暁子 (Akiko, Ueda)

国立研究開発法人産業技術総合研究所・エレクトロニクス・製造領域・主任研究員

研究者番号：70453537

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：遷移金属ダイカルコゲナイド半導体において、スピン・フォノンの電氣的、磁氣的制御を目指した理論研究を行っている。遷移金属ダイカルコゲナイド半導体として二硫化硫黄を考え、スピン軌道相互作用、電子格子相互作用が磁気特性に与える影響を考察した。スピン帯磁率をケルディッシュグリーン関数法を用いて計算し、g因子の温度依存性の説明に成功した。また、遷移金属ダイカルコゲナイドを用いた新規デバイスを提案するため、デバイスシミュレーターの開発を行なった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

遷移ダイカルコゲナイド(TMDC)は、優れたゲート制御性によりショートチャネルを抑えて微細化することが可能であることから、ナノシート型の次のサブ10nmノードプロセスの候補として注目を浴びている。本研究は、最終的にフォノンやスピンの自由度の制御を目指しており、新規ロジックデバイスの性能向上のための知見を与える。また、スピンやフォノンを制御することにより、スピントランジスタや熱電デバイスへの応用が期待できる。また、開発したシミュレータを用いた新規デバイスを設計することが可能なため、新機能デバイスの実用化を加速できると考えている。

研究成果の概要（英文）：We have theoretically studied transitional metal dichalcogenides (TMDCs) to achieve magnetic and electrical control of spins and phonons. We have considered MoS2 and studied the effect of spin-orbit interaction and electron-phonon interaction on the magnetic properties. We calculated the spin susceptibility using Keldysh-Green functions and succeeded in explaining the temperature dependence of the g-factor reported in experiments. In addition, we have developed the device simulator to design and propose novel devices using TMDCs.

研究分野：デバイス物理

キーワード：二次元層状物質 二硫化硫黄 電子格子相互作用 ケルディッシュグリーン関数法 スピン帯磁率 スピン軌道相互作用 スピン・フォノン相互作用

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

蜂の巣構造をした2次元単原子層は、電気的な制御のしやすさや多様な物性を示すことから次世代のエレクトロニクス、スピントロニクスデバイスの舞台として盛んに研究されてきた。特にMoS₂などの遷移金属ダイカルコゲナイド(TMDC)系の半導体はトランジスタに適した大きさのバンドギャップを持ち、電気的な制御性が良いことから低消費電力デバイスとして注目されている。また、TMDCの単層膜(図1)は、反転対称性の破れからバンド構造のKバレーとK'バレーにおいて異なる光学遷移則を持ち、KバレーとK'バレーの直接ギャップから放出される光子は円偏光2色性を示す。さらに、スピン軌道相互作用が大きいことから価電子帯、伝導体ともにスピン分裂を引き起こすが、そのスピンの向きがK点とK'点で異なることが知られている。このようなTMDCに特徴的な物性を用いたバレートロニクス、スピントロニクス、フォトニクスデバイスが多数提案されている。申請者もCrをドーピングすることによりMoS₂のバンドギャップ操作するバンドエンジニアリングや、2次元原子層膜に強磁性体を接合した系におけるスピンフィルターの研究を行ってきた。

上記で述べたようにTMDCはバレー、スピンの自由度を操作することにより様々な物性を示す魅力的な物質である。しかしながら、これまでフォノンの自由度とスピン、バレーの自由度の相関はあまり注目されてこなかった。近年のTMDCの研究において、フォノンのバンド構造も特異な性質を持つことが報告されている。遷移金属ダイカルコゲナイド単層膜のフォノンモードの一部は、軌道部分とスピン部分の角運動量を持つが、全角運動量は、右回りに回転する角運動量を持つフォノンと左回りに回転する角運動量を持つフォノンの重ね合わせになる。特にフォノンモードのK点とK'点では、それぞれ逆向きに円偏極する。従って、フォノンは(スピン軌道相互作用を介した)スピン・フォノン相互作用により、電子スピンと結合することが予測される。さらに、フォノン・スピンのそれぞれ、電気的な特性、磁気的な特性へ影響を与えると考えられる。

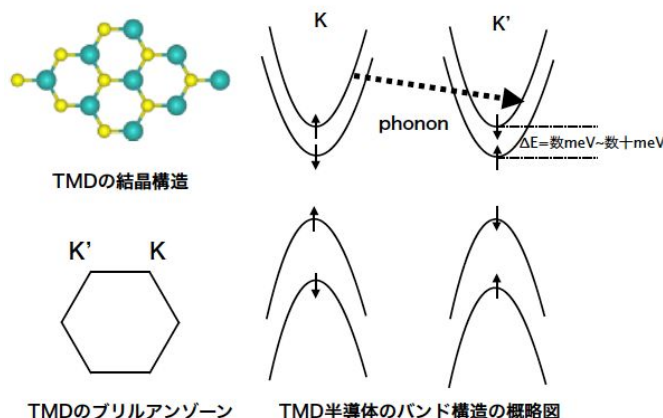


図1: 単層遷移金属ダイカルコゲナイド(TMDC)半導体の結晶構造とバンド構造の概略図

2. 研究の目的

本研究では、理論解析を通して、遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるスピン・フォノン相互作用を理解し、電気的、磁気的にスピン、フォノンを制御する方法を考案する。

また、フォノン、スピンを制御した新規デバイスを考案するために、デバイスシミュレータの開発を行う。

3. 研究の方法

遷移金属ダイカルコゲナイドの系のハミルトニアンを考え、フォノンとスピンの間の相互作用として、スピン軌道相互作用と電子フォノン相互作用を考慮した。スピン軌道相互作用として、Dyakonov-Perel 緩和と Elliot-Yafet 緩和を考えた。この系でのスピン帯磁率の温度依存性を考慮するため、Mori-Kawasaki formula とケルディッシュグリーン関数法を用いてスピン帯磁率を計算した。数値計算は、本科研費で購入した Mathematica を用いて行なった。

また、新規デバイスの理論設計のためのデバイスシミュレータの開発を行なった。電気的な制御を考慮するために、ドリフト拡散法とポアソン方程式を用いたドリフト拡散シミュレータを採用した。シミュレーションモデルにショットキーコンタクトを実装するため、障壁を通り抜ける電子を電流保存式の生成再結合項を通して取り入れた。遷移金属ダイカルコゲナイドのスピン自由度を制御するために、イオン液体を用いた強電界のデバイスシミュレーター、スピンの自由度も取り入れたデバイスシミュレーターのためのドリフト拡散シミュレータモデルを構築し、Fortran を用いたシミュレーションプログラムの開発を行なった。開発したシミュレータを用いた数値計算を行うために、本科研費で購入した計算サーバーを用いた。

4. 研究成果

2の研究目的のために主に(1)~(3)の研究を行った。

(1) 遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるスピン・フォノン相互作用の磁気特性への影響

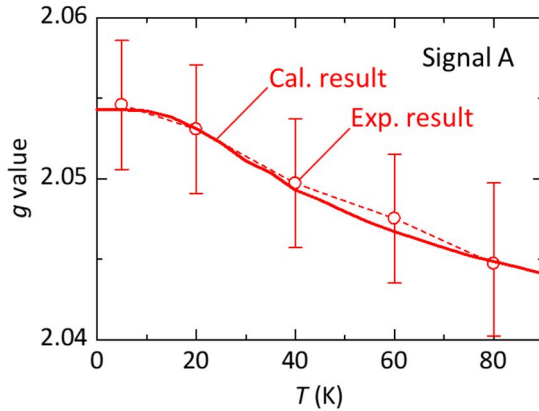


図 2 : MoS₂ の g 因子の温度依存性。実験とよく一致していることが分かる [1]

スピン・フォノン相互作用が磁気特性にどのような影響を与えているかを理論的解析により考察した。

遷移金属ダイカルコゲナイド半導体の単層 MoS₂ の K バレー、K' バレーの 2 つのバレーのスピン状態を示すハミルトニアンをモデル化し、ケルディッシュグリーン関数法を用いてスピン帯磁率を計算した。

図 3 のように、g 因子を計算し、温度に依存して g 因子が減少する実験の説明に成功した。また、Elliot-Yafet 相互作用は低温で、Dyakonov-Perel 相互作用は高温で、支配的になることを示した。電子格子相互作用のスピン帯磁率への影響を議論した。フォノン緩和によるスピン帯磁率の減少を確認し、フォノンとスピンが電子格子相互作用、スピン軌道相互作用を介して結合することを明らかにした。この成果を実験の結果とともに、Communications materials にて発表した [1]。

(2) 遷移金属ダイカルコゲナイドを用いた新規デバイス設計をするための物理的な指針

二次元半導体デバイスにおけるデバイ長とポテンシャルを理論的に議論した。酸化膜中の 2 次元半導体のポテンシャルの解析解を求め、酸化膜の厚さ、2 次元層状膜の厚さとデバイ長の関係を考察した。本研究の成果を Journal of Applied Physics に掲載した。本研究の解析解を用いて、スピン緩和、フォノン緩和のデバイス構造依存性を議論した。

(3) 遷移金属ダイカルコゲナイドトランジスタのデバイスシミュレータの開発

新規デバイスを設計するために、2 次元層状物質特有の特性、ショットキーコンタクトの特性を反映したドリフト拡散モデルを構築した。さらに、スピンの自由度を操作するためには、強電場によるゲート制御が必要である。そこでイオン液体をゲート膜に用いた場合のドリフト拡散・ポアソン方程式のシミュレーションモデルの構築も行った。開発したシミュレータを用いて、実験で報告されていたイオン液体ゲート WSe₂ トランジスタの両極性伝導の説明に成功した [図 3]。本成果を npj computational materials にて発表した [3]。

また、数値シミュレーションを行い、トランジスタにおけるチャネル領域とコンタクト領域の役割を考察した。これまで、ショットキーコンタクトの場合、電流-電圧特性のサブスレシールド領域 (オフ状態) では、コンタクト領域の抵抗が支配的であると考えられてきた。しかしながら、本研究において構築したデバイスシミュレーションと解析モデルを用いることにより、長チャネルの 2 次元層状物質トランジスタにおいては、チャネル領域の抵抗が支配的であることを明らかにした。このことにより、実験におけるショットキー障壁の見積りに利用する電流モデルに問題があり、本来のショットキー障壁の高さより低く見積もられることを示した。本研究の成果を Applied Physics Express に掲載した [4]。また、応用物理学会にて講演を行った。

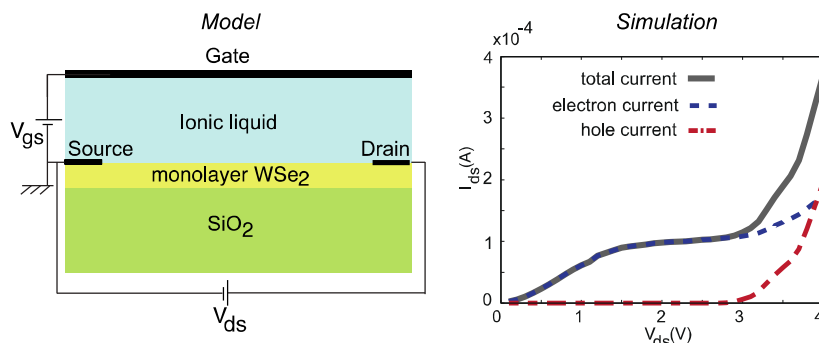


図 3 : イオン液体ゲート遷移金属ダイカルコゲナイドトランジスタの模式図とシミュレーション結果 [3]

Naho Tsunetomo, Shohei Iguchi, Małgorzata Wierzbowska, Akiko Ueda, Yousang Won, Sinae Heo, Yesul Jeong, Yutaka Wakayama, Kazuhiro Marumoto,” Spin-states in MoS₂ thin-film transistors distinguished by operando electron spin resonance,” Communications materials, Vol. 2, 27/pp.1-10 (2021).

Adina R. Bechhofer, Akiko Ueda, Ankur Nipane, James. T. Teherani, “The 2D Debye length: An analytical study of weak charge screening in 2D semiconductors,” Vol.129, 024301/pp.1-10 (2021)

Ankur Nipane, James T. Teherani, Akiko Ueda, “Demystifying the role of channel region in two-dimensional transistors”, Applied Physics Express, Vol.14, 044003/pp.1-5 (2021).

Akiko Ueda, Yijin Zhang, Nobuyuki Sano, Hiroshi Imamura, Yoshihiro Iwasa, “Ambipolar device simulation based on the drift-diffusion model in ion-gated transition metal dichalcogenide transistors,” npj computational materials, Vol. 6, 24/pp.1-9 (2020).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Nipane Ankur, Teherani James T., Ueda Akiko	4. 巻 14
2. 論文標題 Demystifying the role of channel region in two-dimensional transistors	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 044003 ~ 044003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/abf0e1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Bechhofer Adina R., Ueda Akiko, Nipane Ankur, Teherani James T.	4. 巻 129
2. 論文標題 The 2D Debye length: An analytical study of weak charge screening in 2D semiconductors	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 024301/pp.1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0032541	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tsunetomo Naho, Iguchi Shohei, Wierzbowska Malgorzata, Ueda Akiko, Won Yousang, Heo Sinae, Jeong Yesul, Wakayama Yutaka, Marumoto Kazuhiro	4. 巻 2
2. 論文標題 Spin-states in MoS2 thin-film transistors distinguished by operando electron spin resonance	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 27/pp.1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-021-00129-y	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ueda Akiko, Zhang Yijin, Sano Nobuyuki, Imamura Hiroshi, Iwasa Yoshihiro	4. 巻 6
2. 論文標題 Ambipolar device simulation based on the drift-diffusion model in ion-gated transition metal dichalcogenide transistors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-020-0293-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 植田 暁子、Ankur Nipane、James Teherani
2. 発表標題 2次元半導体トランジスタにおけるコンタクト、チャネル領域の役割
3. 学会等名 応用物理学会春季講演会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------