

Theoretical investigation on surface/interface optimization and property analysis of novel 2D materials

その他のタイトル	新奇2次元材料の表面 / 界面最適化と物性解析に関する理論研究
学位授与年月日	2017-09-15
URL	http://doi.org/10.15083/00077603

審査の結果の要旨

氏名 倪 澤遠

二次元物質の物性に関する研究は、新奇な物理発現の可能性と高性能電子素子実現の可能性という基礎・応用の両面から重要である。電子素子は基板上に作製されることから基板による物性変調の影響を理解することは重要であるが、ゲルマネンやスタネンといった新奇な二次元物質については、この点の理解は進んでいない。また、数層からなる二次元物質の場合にはその表面と内部とでの状態の違いが重要となる場合があるが、新奇二次元物質についてはこの点の理解も十分ではない。本論文は、第一原理計算を用い、新奇二次元系物質における基板との相互作用や表面構造緩和による物性変調を解明すること、さらにはこれらを考慮した上で電子素子に適した基板材料を系統的に探索することを目指したものである。本論文は6章からなる。

第1章は緒言であり、シリコン電子デバイスの微細化が限界に直面しつつあることを踏まえて他の材料を用いた電子デバイスの可能性が探索されていること、中でも二次元物質は高移動度等の優れた特性を示すことから注目されていることを述べた後、新規な二次元物質であるゲルマネン、スタネン、二テルル化タングステン (WTe_2) 等に関するこれまでの実験的・理論的研究について概観している。ゲルマネンやスタネンに適した半導体基板が見出されておらず、また基板による物性変調について理解が進んでいないこと、 WTe_2 については表面構造が明らかになっていないこと等を指摘して、本研究の目的を明確にした。

第2章では、本研究で用いられている計算手法について述べている。原子構造及び電子状態の第一原理計算に用いた密度汎関数法の概説に加え、トポロジカルな性質を特徴づける Z_2 指数の計算方法およびデータベース中から最適な基板材料の候補を抽出するアルゴリズムの概略を述べている。

第3章では、基板を III 族モノカルコゲナイドに限定し、その上にゲルマネンを載せた場合の物性を調べている。孤立したゲルマネンが持つ、バックルした原子構造とディラックコーンを有する電子状態が III 族モノカルコゲナイド基板上でもおおむね保持されることを明らかにした。さらに GaTe および InSe 上のゲルマネンについては、 $0.14\sim 0.16\text{eV}$ (ハイブリッド汎関数での計算値) のエネルギーギャップを持つ半導体となること、および有効質量が小さいことから高い移動度が期待できることを明らかにした。加えて、スピン軌道相互作用によるバンド分裂の大きさが 42meV と大きく、室温で量子スピンホール効果を示す可能性があることを指摘した。

第4章では、基板材料の探索範囲をより広範囲の2次元物質に広げ、ゲルマネンおよびスタネンに適した基板材料候補を抽出するとともに、その上にゲルマネン・スタネンを載せた系の電子状態を調べた。格子定数のマッチング等の基準により **Inorganic Crystal**

Structure Database に含まれる 18,5000 個のデータから候補を抽出し、さらにフォノン計算等で構造の安定性を確認した上で、ゲルマネンについては CdI_2 、 ZnI_2 、 GeI_2 、 MgI_2 および GaGeTe 、スタネンについては PbI_2 および CaI_2 が、孤立状態のゲルマネン、スタネンの原子構造と電子状態の特徴をおおむね保持する基板材料となることを明らかにした。また、これらの系の Z_2 指数は同じではなく、 CuI 上のゲルマネンおよび CaI_2 上のスタネンのみがトポロジカルに非自明な性質を有することを明らかにした。さらに、得られた基板候補材料上のゲルマネンの状態について、タイトバインディングハミルトニアンによる包括的な理解を試み、ゲルマネンの電子状態に対する基板の効果が実効的な電場（擬電場）の印加の形で記述できること、そしてこの擬電場の大きさとラッシュバ係数および基板 - ゲルマネン間電荷移動との間に強い相関があることを見出した。

第 5 章では、 WTe_2 の表面緩和について考察している。7 層から成る WTe_2 の安定構造の計算結果から、表面層のみ大きな構造緩和が見られること、その構造緩和の様子が低エネルギー電子線回折実験結果を解析した結果と一致することを明らかにした。さらに、エネルギーバンド構造がこの構造緩和に敏感であり、構造緩和に伴ってフェルミ面の形状の特徴や電子キャリアと正孔キャリアの数の比が変わることを明らかにした。以上に加え、2 バンドモデルを用いた解析により、このようなエネルギーバンド構造の変化が磁気抵抗効果の大きさにも影響することを示した。

第 6 章は総括である。

以上のように、本論文は、ゲルマネン・スタネンに及ぼすに及ぼす基板の影響、および WTe_2 に及ぼす表面緩和の影響を理論計算により解析した。ゲルマネン・スタネンについては、電子素子に適した基板材料候補を見出すことに成功し、これらの基板材料上にゲルマネンを置いた場合に基板がゲルマネンの電子状態に及ぼす影響を擬電場の印加という形で記述できることを明らかにした。 WTe_2 については表面緩和の様子が実験解析から提案されているものと一致し、また表面緩和がフェルミ面の形状、電子・正孔キャリア数比、磁気抵抗効果の大きさに大きく影響することを明らかにした。以上のようにナノスケール電気特性を理解する上で有用な知見を得た。よって本論文のナノスケール電子物性学、計算マテリアル工学への寄与は大きい。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。