

報告番号	甲 第 12761 号
------	-------------

主 論 文 の 要 旨

論文題目 新規 2 次元材料シリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンのエッジ状態の理論的研究

(Theoretical studies of edge states of novel two dimensional materials: silicene, germanene and stanene nanoribbons)

氏 名 服部 綾実

論 文 内 容 の 要 旨

本論文では、新規 2 次元材料シリセン・ゲルマネン・スタネンの電子状態を多軌道タイトバインディングモデルを用いて解析した。そして、シリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンのタイトバインディングモデルによるエッジ状態の理解には、多軌道モデルが必要であることを明らかにした。

シリセン・ゲルマネン・スタネンは 14 族元素であるシリコン・ゲルマニウム・スズ原子が 2 次元構造をとった物質である[1,2]。同じ 14 族元素である炭素が 2 次元構造をとったグラフェンは 2 次元物質の代表的な物質でありこれまで基礎的な研究から応用研究まで多岐にわたって行われてきた。しかし、グラフェンはスピン軌道相互作用が小さいため、バンドギャップが非常に小さく、半導体としての応用が難しい。そのため、注目されたのがシリセン・ゲルマネン・スタネンである。これらの物質はグラフェンよりも大きなスピン軌道相互作用を持ち、バンドギャップが存在する。また、グラフェンと同様に高い伝導度や移動度を示すことも期待されている。さらに、2 次元のトポロジカル絶縁体の候補物質であり、量子スピンホール状態を実験で可能な温度で観測できると言われている[3,4]。

グラフェンがナノメートルスケールになったとき、端にある炭素原子がフェルミエネルギー付近の電子状態に大きく関わってくる。特に、端の形によって電子状態は大きく異なり、ある一定の端に切り取った形、ナノリボン構造を考慮すると端の形に応じて電子状態

が大きく変わることが知られている。具体的には、ジグザグ端を持つジグザグナノリボン、アームチェアナノリボン、クラインナノリボン（実在しないが理論的には記述可能）がある[5,6]。このとき、フェルミエネルギーを支配するのが、炭素の最外殻電子の p_z 軌道である。そのため、 p_z 軌道を基底にとった 1 軌道のタイトバインディングモデルを用いてそれぞれのリボンのエネルギー分散を見ると、ジグザグナノリボン・クラインナノリボンにはフェルミエネルギーにフラットなバンド、ゼロエネルギーエッジ状態が現れ、アームチェアナノリボンには現れない。このとき、ジグザグナノリボンとクラインナノリボンの端の炭素原子には p_z 軌道が局在しており、アームチェアナノリボンには局在状態が見られない。

シリセン・ゲルマネン・スタネンもジグザグナノリボンになったとき、エッジ状態が見られる。さらに、グラフェンよりも大きなスピン軌道相互作用をとるため、フラットな分散はスピン分裂を起こす。このとき、ジグザグナノリボンの端の原子にはアップスピンとダウンド спинが等量・逆向きに流れヘリカルスピニ偏極を起こす。エネルギー分散は、バルクのエネルギーギャップ内にヘリカルエッジ状態が現れる形となる。このエッジ状態を利用したチャネルデバイスが考案されている[7]。また、シリセン・ゲルマネン・スタネンは sp_2 構造を安定構造とするグラフェンと異なり、 sp_2 と sp_3 の間をとった構造である低バックル構造（副格子間で高さが異なる構造）を持つ[1,2]。このため、バンドギャップ内のエッジ状態を外部電場で制御でき、トポロジカル量子電界効果トランジスタ (TQFET) としての応用が期待されている。先行研究において[7]、ジグザグシリセンナノリボンのエッジ状態の電場依存性が計算されており、面直方向の外部電場 E_z がある臨界値 E_{cr} でバルクのバンドギャップが閉じてトポロジカル相転移を起こし、 $E_z < E_{cr}$ で 2 次元トポロジカル絶縁体 (ON 状態)、 $E_z > E_{cr}$ (OFF 状態) でバンド絶縁体となることが示されている。エッジ状態は不純物や乱れに対して強いため安定性が高く、1 原子層に電流が凝縮されているので超高密度なデバイスとして期待されている。

最初に、この TQFET 機能は 1 軌道タイトバインディングモデルを用いて提案された[5]。1 軌道モデルは最外殻電子の s, p_x, p_y, p_z 軌道の多軌道タイトバインディングモデルから軌道の自由度を落とした有効モデルであり、バルクシリセンの低エネルギー分散は正しく記述できる[8]。このような 1 軌道モデルに基づいて、シリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンのエッジ状態は線形分散になると理解され、実際にグラフェンは 1 軌道モデルのみでエッジ状態を表すことができる。しかし、シリセン・ゲルマネン・スタネンは低バックル構造を取るため、軌道混成を生じるはずである。すなわち、この系のエッジ状態を表現するには 1 軌道モデルでは不十分と予想される。実際に、1 軌道モデルと第一原理計算によつて計算されたゲルマネンナノリボンのエッジ状態のエネルギー分散を比較すると、第一原理計算結果ではエッジ状態が非線形な分散を示しており、全く異なることが明らかになつた[9]。そのため、前述の TQFET が実現可能かどうかは定かではない。さらに、シリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンはエッジに磁化を持つような状態が安定構造にもなると言われ、Kane-Mele ハバードモデル (1 軌道ハバードモデル) によって、磁化構造によつ

てエッジ状態も大きく変化することが分かっている[10]. しかし、低バックル構造を考慮したタイトバインディングモデルによる計算はこれまでに行われなかった.

そこで、本論文では自由度を落とさない多軌道タイトバインディングモデルを用いて、ジグザグシリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンのエッジ状態やエッジ磁化が存在するとき、垂直電場を印加したときのエッジ状態のエネルギー分散を調べ、TQFET の実現可能性も調べた[11,12].

2 章では、多軌道タイトバインディングモデルやナノリボンの構造について説明をした. ナノリボン構造はダングリングボンドの影響を考慮してエッジに水素終端を行った. タイトバインディングモデルでは Slater-Koster 公式を用いており、軌道間のホッピングや低バックル構造を考慮できるモデルとなっている. また、パラメータの決定法を説明した.

3 章では、まず非磁性状態におけるシリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンのエッジ状態を示した. 第一原理計算の結果との比較により、多軌道モデルは非線形性なエッジ状態を表し、第一原理計算結果とも定性的によく合うことを示した.

4 章ではエッジ磁化や電場が存在するときのエッジ状態の結果を示した. エッジ磁化によって様々なエッジ状態を見せること、ゲルマネン・スタネンナノリボンでは 1 軌道モデルでは示せないバンド反交差が現れることを示した.

3・4 章の結果から、低バックル構造を持つシリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンのエッジ状態のタイトバインディングモデルによる解析には多軌道タイトバインディングモデルが重要であることを明らかにした. また、1 軌道モデルによって提案された TQFET の実現は簡単ではなくエッジ状態の非線形性を考慮する必要がある. 一方で、垂直電場によってスピン分極を制御できるためスピンポラライザーの候補物質として提案できる. 最後に、面内磁化を取り入れた計算によって、スピン軌道相互作用の強い系ほど面内方向に磁化が向きやすいことが分かった. シリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンのエッジ状態を理解するためには、エッジに誘起される磁化の効果などもとりいれたより詳細な解析が必要であることを今後の展望としてまとめている.

参考文献

- [1] K.Takeda and K.Shiraishi,Phys. Rev. B **50**, 14916 (1994).
- [2] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Şahin, and S. Ciraci, Phys. Rev. Lett. **102**, 236804 (2009).
- [3] C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, Phys. Rev. Lett. **107**, 076802 (2011).
- [4] Y. Xu, B. Yan, H.-J. Zhang, J. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **111**, 136804 (2013).
- [5] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada and K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1920 (1996).
- [6] S .Ryu, and Y. Hatsugai,Phys. Rev. Lett. **89**, 077002 (2002).

- [7] M. Ezawa, Appl. Phys. Lett, **102**, 172103 (2013)
- [8] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, Phys. Rev. B **84**, 195430 (2011).
- [9] L. Matthes and F. Bechstedt, Phys. Rev. B **90**, 165431 (2014).
- [10] J. L. Lado and J. Fernández-Rossier, Phys. Rev. Lett. **113**, 027203 (2014).
- [11] A. Hattori, S. Tanaya, K. Yada, M. Araida, M. Sato, Y. Hatsugai, K. Shiraishi and Y. Tanaka, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 115302 (2017).
- [12] A. Hattori, K. Yada, M. Araida, M. Sato, K. Shiraishi and Y. Tanaka, J. Phys.: Condens. Matter **in press**.