OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	2次元材料結合系の電子状態および量子輸送解析に関する研究
Author(s)	橋本, 風渡
Citation	大阪大学, 2020, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/77458
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名　（　橋　本　風　渡　）	
論文題名	2次元材料結合系の電子状態および量子輸送解析に関する研究

論文内容の要旨

本論文は，2次元材料結合系における電子状態および量子輸送特性の解析に関する研究成果をまとめたもので、以下の6章で構成した．

第1章では，研究背景，研究目的について述べた．まず，半導体微細化の現状と2次元材料が注目される背景について説明し，代表的な2次元材料の特徴について説明した．次に，2次元材料結合系について説明し，シミュレーション解析が求められる背景について説明した．最後に，本研究の目的，本論文の構成について説明した．

第2章では，電子状態および量子輸送解析の計算手法について説明した．まず，電子状態計算の手法として用いた強結合近似法について，単層グラフェンのバンド構造の計算を例にして説明した．次に，輸送計算の手法として用いた非平衡グリーン関数法について，単層グラフェンの透過関数の計算を例にして説明した．

第3章では，グラフェンナノリボンが隣同士弱く結合し，周期的に並んだ系であるグラフェンナノリボン列の電子状態を解析した結果を記述した．ジグザグ端ナノリボン列およびアームチェア端ナノリボン列の2種類の端形状の異なるナノリボン列について電子状態の計算を行った．ジグザグ端ナノリボン列では，ナノリボンが隣同士弱く結合した時，孤立したジグザグ端ナノリボンの特徴であるほぼ平らな分散とバルクグラフェンの特徴である線形の分散とが同時に現れることを見出した．ほぼ平らな分散は，ナノリボン端の原子のみに起因する状態であり，リボンの幅に依存せず現れることを示した．次に，フェルミ速度の計算を行い，リボン間結合強度が比較的大きい時，リボンに沿った方向のフェルミ速度がバルクグラフェンのフェルミ速度より若干大きくなることを見出した．アームチェア端ナノリボン列では，リボンの幅を決める原子数Nによって，電子状態のリボン間結合強度依存性が異なることを示した．Nが3の倍数となるアームチェア端ナノリボン列は，リボン間結合強度の値に関わらず常に半導体となり，リボン間結合強度の値を大きくすると，バンドギャップの値は単調に減少していくことを示した．Nが3の倍数＋1となるアームチェア端ナノリボン列は，リボン間結合強度の値がリボン内原子間結合強度の値の半分になる時，リボンに沿った方向に線形のエネルギー分散を持つ一方，リボンが結合する方向には2次の分散を持つことがわかった．Nが3の倍数＋2となるアームチェア端ナノリボン列は，リボン間結合強度の値に関わらず常に金属となることがわかった．

第4章では，グラフェンを積層した系である多層グラフェンの輸送特性を解析した結果を記述した．層間結合が多層グラフェンの輸送特性に及ぼす影響を調べた．比較的強い層間結合が存在しても，ディラック点付近における透過関数は，単層グラフェンの輸送特性の特徴である線形性を保ち，層間結合の影響をほとんど受けないことを見出した．中間層がジグザグ端ナノリボンで構成されていることを考慮することにより，この線形性が保たれるエネルギー領域が現れる物理的機構を理解できることを示した．また，室温の熱エネルギーまで単層グラフェンの輸送特性を保つことができる層間結合強度の臨界値のチャネル長依存性を計算し，層間結合が弱いほど，単層グラフェンの輸送特性を保ったままチャネル長を長くできるということがわかった．

第5章では，トンネル電界効果トランジスタ応用を目的として，遷移金属ダイカルコゲナイドが積層された系におけるバンド間トンネル電流を解析した結果を記述した．チャネル長を長くしていくと，チャネル領域の電子状態が反交差ギャップを持つバンド構造で表される電子状態に近づき，透過エネルギー領域の中間付近に低透過領域が生じることを示した．次に，遷移金属ダイカルコゲナイドが積層された構造におけるバンド間トンネルの最大電流密度を様々な材料について計算した．いずれの材料も，チャネル長を長くすると最大電流密度は一定値に近づくことがわかった．また，ヘテロ構造のほうがホモ構造よりも最大電流密度が平均的に高い値を示すことを示した．また，二セレン化タングステンをドレイン側の材料とした構造が最も高い最大電流密度の値を示すことがわかった．二セレン化タングステンをドレイン側の材料とした構造において高い最大電流密度が得られた理由が，Q点にある衛星谷を介したトンネル効果であることを明らかにした．

第6章では，本論文を通して得られた結果をまとめ，結論を述べた．

様式 7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名	（　橋本　風渡　）

	（職）	氏　名
論文審査担当者		
主 査	教授	森　伸也
副 査	教授	尾﨑　雅則
副 査	准教授	久保　理
副 査	教授	森　勇介
副 査	教授	片山　光浩
副 査	教授	片山　竜二
副 査	教授	近藤　正彦
副 査	教授	廣瀬　哲也
副 査	教授	八木　哲也

論文審査の結果の要旨

本論文では，(1) ナノリボンが隣同士弱く結合し周期的に並んだ系，(2) グラフェンが積層された系，(3) 遷移金属ダイカルコゲナイドが積層された系の 3 種類の 2 次元材料結合系において電子状態および輸送特性解析を行い，得られた知見を述べている．その主要な成果は以下の通りである．

(1) ナノリボンが隣同士弱く結合し，周期的に並んだ系であるナノリボン列の電子状態を解析し，隣接リボン間の結合が電子状態に与える影響を明らかにしている．ジグザグ端ナノリボン列では，ナノリボンが隣同士弱く結合した時，ほぼ平らなエネルギー分散と線形のエネルギー分散とが同時に現れることを見出している．また，リボン間結合強度が比較的大きい時，リボンに沿った方向のフェルミ速度がバルクグラフェンのフェルミ速度より大きくなることを見出している．アームチェア端ナノリボン列では，リボンの幅を決める原子数 N によって，電子状態のリボン間結合強度依存性が異なることを示している．以上の電子状態解析の結果から，ジグザグ端およびアームチェア端ナノリボン列のそれぞれに対して，バルクグラフェンを用いたデバイスの性能を超えるデバイスの設計指針を与えている．

(2) グラフェンが積層された系である多層グラフェンの輸送特性を解析し，比較的強い層間結合が存在しても，ディラック点付近のエネルギー領域では，単層グラフェンの輸送特性を保つことを見出している．また，単層グラフェンの輸送特性を保つ要因は，中間層がジグザグ端ナノリボンで構成されているためであることを明らかにしている．以上の輸送特性解析の結果から，3 層の多層グラフェンの上層と下層のみに電極を取り付けることで，単層グラフェンの高い移動度を保ったまま，単層グラフェンを用いたデバイスより大きな電流を扱うことができるというデバイス設計の指針を与えている．

(3) 遷移金属ダイカルコゲナイドが積層された系におけるバンド間トンネル電流を様々な材料組み合わせにおいて解析し，二セレン化タングステンをドレイン側の材料とした構造が最も高い最大電流密度の値をもつことを示している．また，二セレン化タングステンをドレイン側の材料とした構造において高い最大電流密度が得られた理由が，Q 点にある衛星谷を介したトンネル効果であることを明らかにしている．以上の解析結果より，Q 点の谷と K 点の谷のエネルギー差が小さい材料をトンネル電界効果トランジスタのドレイン側の材料として選択することで，大きなバンド間トンネル電流を得ることができるというデバイス設計の指針を与えている．

以上のように，本論文はこれまで詳細な電子状態および輸送特性が明らかにされていなかった 2 次元材料結合系に着目し，隣接する 2 次元材料間の結合が系の電子状態および輸送特性に与える影響をシミュレーションにより解明している．加えて，解析により得られた知見から，2 次元材料結合系を用いた電子デバイスの設計指針を提供しており，従来の電子デバイスの性能限界を超えるデバイスの実用化に貢献するところが大きい．よって本論文は博士論文として価値あるものと認める．