

関西学院大学 研究成果報告

2019 年 4 月 2 日

関西学院大学 学長殿

所属： 理工学部
職名： 教授
氏名： 若林 克法

以下のとおり、報告いたします。

研究制度	<input type="checkbox"/> 特別研究期間 <input type="checkbox"/> 自由研究期間 <input type="checkbox"/> 大学共同研究 <input checked="" type="checkbox"/> 個人特別研究費 <input type="checkbox"/> 博士研究員 ※国際共同研究交通費補助については別様式にて作成してください。
研究課題	原子膜物質の電子物性における境界面効果と光学的機能制御の理論
研究実施場所	関西学院大学神戸三田キャンパス・理工学部
研究期間	2018 年 4 月 1 日 ～ 2019 年 3 月 31 日 (12 ヶ月)

◆ 研究成果概要 (2,500字程度)

上記研究課題に即して実施したことを具体的に記述してください。

一原子層の炭素原子膜であるグラフェンの発見以来、グラフェンの物理・化学の研究が爆発的な勢いで展開している。グラフェンの低エネルギー電子構造は、質量のないディラック方程式で記述されるため、電子は相対論的粒子として振る舞い、自由電子系で記述される通常の半導体2次元電子系とは大きく異なった電子物性が期待される。実際ディラック電子系の特徴である半整数量子ホール効果などが、相次いで確認されており、理論と実験が一体となって研究が展開している。

最近では、グラフェンのみならず、MoS₂、WS₂などの遷移金属ダイカルコゲナイド系層状物質(TMD)においても、一原子膜が容易に作成できることが実験的に報告されており、その工学的な応用が検討されている。

原子膜物質の特徴は、機能設計を行う上で、その高い自由度と柔軟性にある。たとえば、同じグラフェンであっても、層の枚数や形状を変えるだけで、その電子状態を変調させ、機能を付加することが可能である。さらに、異なる種類の原子膜を、人工的に積層することで、天然素材では実現できない新しい物性や機能の発現および設計が期待されている。

そこで、本研究課題では、原子膜物質の電子物性を、光学的に制御し、バレートロンクス素子実現に有用な新しい知見を得ることを目的として、研究を進めた。

今回の研究課題では、図1(a)に示すようなトリプチセン分子から構成される二次元分子膜物質に着目し、その電子状態および光学応答を理論数値計算によって解析した。トリプチセン分子膜は、三員環と六員環からなる格子構造を持つため、 π 電子のネットワークは、カゴメ格子構造となることが、第一原理計算からわかっている。我々は、トリプチセン分子膜の π 電子構造を、より簡単に記述できるTight-binding model(TBM)を構築した。図1(b)は、TBMによって得られたエネルギーバンド構造である。複数の平坦バンドとグラフェンバンドからなる、特徴的なエネルギーバンド構造を再現できた。

この系は空間反転対称性が破れているため、円偏光電磁場照射によってKまたはK'点付近のいずれかの状態にいる電子を選択的に励起させることができる。図1(c)は、円偏光照射時の光吸収強度を波数空間でプロットしたものである。左回りの円偏光に対してはK'点近傍の状態の電子に対して強い光吸収を示し、右回りの円偏光に対してはK点近傍の電子が強い光吸収を示すことがわかる。

以上のことから、二次元分子膜では、従来の半導体物質には見られない特異な光応答が起きることを解明した。今後、超消費電力光素子の設計などについて考察を進め、応用の可能性を展開したい。

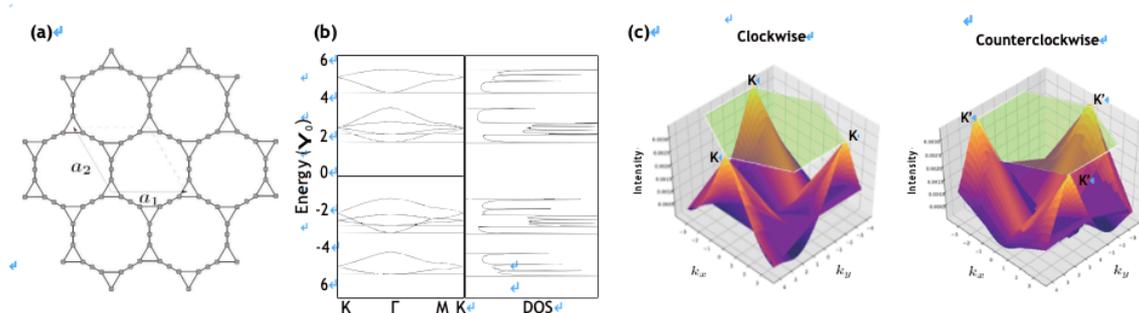


図1 (a)トリプチセン分子膜の格子構造。(b)トリプチセン分子膜のエネルギーバンド構造。(c):円偏光照射時の価電子帯のディラック点から伝導帯のフラットバンド間遷移における光吸収強度を1stBZ内に示した。右回りの円偏光に対してはK点近傍の状態で強い光吸収を示す(左図)、左回りの円偏光に対してはK'点近傍の状態の電子に対して強い光吸収を示す(右図)ことから、円偏光照射によって分極状態を生成できることがわかる。

[論文成果]

- [1] S. R. Das, K. Wakabayashi, M. Yamamoto, K. Tsukagoshi and Sudipta Dutta, "Layer-by-layer Oxidation Induced Electronic Properties of Transition-Metal-Dichalcogenides", J. Phys. Chem. C 122, 17001 (2018).
 [2] D. Obana, F. Liu, K. Wakabayashi, Analytic properties of 2D SSH model, in preparation.

[学会発表]

- [1] 出発材料比較による高品質SnS薄膜の作製, 川元 颯巳¹, 東垂水 直樹¹, 中村 優², 若林 克法³, 長 汐 晃輔¹, 1.東大マテリアル, 2.NIMS, 3.関学, 応用物理学会春季大会、2019年3月11日(月), 東京工業大学。
 [2] トリプチセン分子膜における光吸収の理論的計算, 秋田将志, 藤井康丸^A, 丸山実那^A, 岡田晋^A, 若林克法, 関学理工, 筑波大数理物質^A, 日本物理学会年次大会、2019年3月, 九州大学。

以上

提出期限：研究期間終了後2ヶ月以内

※個人特別研究費：研究費支給年度終了後2ヶ月以内 博士研究員：期間終了まで

提出先：研究推進社会連携機構(NUC)

※特別研究期間、自由研究期間の報告は所属長、博士研究員は研究科委員長を経て提出してください。

◆研究成果概要は、大学ホームページにて公開します。研究遂行上大学ホームページでの公開に支障がある場合は研究推進社会連携機構までご連絡ください。