## • 研究成果

トップダウン系に対するアンチテーゼとして最近その重要性が認識されてきた一つの流れ は、自律分散型相互作用など内在的ルールにより構造が決まっていくボトムアップ系である。 バイオ系に代表される自律分散系の他、たとえば半導体量子ドットなど無機物のセルフアセ ンブル系を含め、広くボトムアップ系に期待が集まっている。しかしながら、両系は未だに専 ら独立で、トップダウン、ボトムアップ両系の間に橋渡しすることは極めて重要にも係らず、 未だ実現されていない。当研究室では,このような課題を解決しながら、新しい量子機能や 高機能デバイス・システムの創出を目指した研究を実験と理論の両面から進めている。

その際、視点をアトム(Atom)・ビット(Bit)・エネルギー(Energy)/環境(Environment) 空間「ABE<sup>2</sup>空間]において、今後ナノテク・ナノサイエンス分野で得られる新しい効果や機 能を既存の Si ベースの IT インフラ構造と接続し相乗効果を引出し、最終的にナノとマクロ を結合することを目指す。

一般に、ムーアの法則に代表されるロードマップに沿った展開を示しつつも遂に限界が指 摘され始めた Si ベースの LSI は、その構造が外在的ルールで決まるトップダウン型のシス テムの代表格であるが、素子サイズ上、動作パワー上、及び製造設備投資上の限界がいわれ て久しい。従来の「ボトムアップとトップダウンの統合」が両者のいいとこ取りでナノ構造 を作るというものであったのと異なり、当研究室では両者の相互乗り入れを可能とする和集 合の観点から取組んでいる。両者の構成原理が大きく異なるため容易ではないが、もしトッ プダウンーボトムアップの両系を繋ぐことができれば、今後ナノテク・ナノサイエンス分野 で得られる新しい効果や機能を既存の Si ベースの IT インフラ構造と接続し相乗効果を引出 しつつナノとマクロを結合することができる。

## (a) 新型光電変換システムと極限高清浄環境(Clean Unit System Platform: CUSP)の展開

フォトンの進行方向とフォトキャリアの移動方向が直交した、マルチストライプ構造を 有する新しい高効率の光電変換デバイスシステムの実現を目指して、高効率太陽光発電システ ムの第一層目となる、光進行方向変換層の検討を行った。太陽光の吸収とフォトキャリアの収 集効率の最適化を両立可能とし、全太陽光スペクトルに亘って光電変換を行うことを目指して いる。

厚さ 5.0um の 2 次元スラブの光入射面側に幅 w、高さ h の 2 次元放物線状構造を取 り付けて計算を行った。 導波路の材料については透明樹脂を想定し、2次元でのシミュレーシ ョンでは、y 上記構造断面に垂直方向には併進対称性を仮定した。入射角θ。を0度~80度の 10 度刻みで光を入射させた。入射光は平面波に設定し、波長 0.50 µm、1.00 µm、1.50 µm、2.00 μm の 4 種類の波長の光を入射させ、反射率と実効屈折角 θ を調べた。図 1 に w=h=2.00 µm の時の光進行方向変の様子を示す。構造を適宜設定することで、実効屈折角が~0(2次 元スラブ構造の法線方向に進行) となるようコ

ントロールできることが示唆された。

上記太陽電池作製用クリーン環境として、 できるだけ既存のフレームワークを維持しつ つ、居住性能向上を実現することを目指した。 図1に、ダイキン社製の空調機を天井部に設え 新作のガス交換ユニットを備えた CUSP 動作ネ゙ャゥ・ 時の清浄度を示す。と全体図を示す。0.5µm 以上の粒子数総和は、動作開始直後は1立方フ ィート当たり0万個程度を示すが、スイッチオ ンの後、わずか数分で急減少し、クラス 100 近傍にて定常状態に達する。このガス交換ユニ ットを備えた CUSP システムにより、通常の は θo=30.0 度、波長 2.00μm の時の導波、b) θo=60.0



図 1 光進行方向変換層のシミュレーション結果。a) 度、波長 1.50 µm の時の導波の様子。

部屋や教室を、US 209D クラス 100 級の清 浄空間(病院の無塵室・手術室相当の清浄 度)にグレードアップすることができる。単 に半導体デバイスプロセス環境としての みならず、様々な局面で生活水準の向上、 健康維持に役立つと期待される。

## (b)理論:

## C<sub>3v</sub>対称性の下での Dirac Cone のワーピン グに対する任意次数のハミルトニアン

全体の目的としては、物性理論の観点から、トポロジカルな磁性現象の解明を行い 物理学への新しい知見を導入することを 目的としている。その中でトポロジカル絶 縁体の特異なバンド構造を利用した新奇



図 2. ガス交換ユニットを備えた CUSP の清畳度を時間 の関数として示す。内装図は、ガス交換ユニットを備え た本CUSPシステムの写真である。

なスピンデバイスの提案ならびにスピン軌道相互作用の非可換ゲージ場の側面を活かしたデバイスの検討を行うことにより、スピントロニクスなどの工学にも寄与することを目指している。今年度の成果は以下のものである。

Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>のようなテトラジマイトカルコゲナイドの表面の Dirac コーンは、ホスト物質の表面 の点群対称性を反映して、ヘキサゴナルに歪むことが実験的に 2009 年に発見された。その直 後、Fu が*k・p* 摂動を使って、この現象を説明したが、彼は 3 次までの摂動しか考えなかった が、それは我々の研究で不十分であることが判明した。彼の結果は、定性的にも大事なことが 抜け落ちていることがわかった。我々は、任意の点群対称性のもとで、時間反転対称性を有す るハミルトニアンを組織的に構成する方法を編み出した。数学の不変式論を援用すると、C<sub>3v</sub> 対称性と時間反転対称性を有する 2 準位系のハミルトニアンは、以下のように一般的に書ける。

$$H_{sym}(\mathbf{k}) = if_1(u,v)(k_+\sigma_- - k_-\sigma_+) + f_2(u,v)(k_+^3 + k_-^3)\sigma_z + if_3(u,v)(k_+^5\sigma_+ - k_-^5\sigma_-),$$

where 
$$u = k_{+}k_{-}, v = k_{+}^{6} + k_{-}^{6}, f_{1}, f_{2}, f_{3} \in C^{\infty}$$

ここで、 $k_{\pm}=k_x\pm i k_y$ ,  $\sigma_{\pm}=\sigma_x\pm i\sigma_y$ , で、 $f_1, f_2, \geq f_3$  は実数値を取る C<sup>®</sup>級関数である。このハミ ルトニアンは C<sub>3v</sub>対称性と時間反転対称性を満たす任意次数のハミルトニアンである。我々は、 これによって、任意に近似の次数を上げていくことが出来る。Fu の結果を改善するために、5 次と 7 次のハミルトニアンを考える。時間反転対称性から、奇数次しか許されない。図 3(*a*),(*b*),(*c*)は、それぞれ 3 次、5 次そして 7 次のハミルトニアンによる Dirac-Cone の歪みの計 算で、図 3(*f*)の実験結果と比較すると 5 次と 7 次の方が定性的にも実験結果を上手く説明出来 ている。図 3(*d*),(*e*)は 3 次と 7 次そして 5 次と 7 次のエネルギー差を示している。

図 4(*a*)はスピンの z 成分の運動量空間での分布を7次のハミルトニアンで計算した結果である。図 4(*b*)はスピンの z 成分の運動量空間での分布の3次と7次との差である。3次でもスピンが立ち上がることは記述出来ているが、2割程度のずれがあることがわかる。一方、3次では見られない効果として、スピンと運動量とのなす角度が、3次では図 4(*c*)のように90°であるが、次数を上げると図 4(*d*)のように90度から大きくずれることが判明した。



 $\boxtimes$  3: The calculated hexagonal warping energy of (*a*) using the 3<sup>rd</sup> order, (*b*) using the 5<sup>th</sup> order, and (*c*) the 7<sup>th</sup> order Hamiltonian. (*d*) The difference of energy between 3<sup>rd</sup> and 7<sup>th</sup> order. (*e*) The difference of energy between 5<sup>th</sup> and 7<sup>th</sup> order. (*f*) Experimental results of the hexagonal warping.



 $\boxtimes$  4: (*a*) The distribution of  $S_z$  of electron spin up to 7<sup>th</sup> order and (*b*) the difference of  $S_z$  of electron spin between 7<sup>th</sup> order and 3<sup>rd</sup> order perturbation. The angle between momentum and spin under (*c*) 3<sup>rd</sup> order and (*d*) 7<sup>th</sup> order perturbation.