

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 26 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2013

課題番号：23760300

研究課題名(和文) グラフェン内テラヘルツプラズモンの理論解析とそのテラヘルツ波素子への応用

研究課題名(英文) Theoretical study of terahertz plasmons in graphene and their application to terahertz devices

研究代表者

佐藤 昭 (Satou, Akira)

東北大学・電気通信研究所・助教

研究者番号：70510410

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円、(間接経費) 990,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、グラフェン内プラズモンのTHz波発振・検出素子応用に向けた基礎理論の確立を目的とした。THz波とグラフェン内プラズモンの結合原理および直流電流注入によるプラズモン不安定性原理の解明を目指し、グラフェン固有の非線形キャリア輸送を取り入れたボルツマン方程式に基づくシミュレータを開発した。また、電子散乱、コンタクト、高ドーブ基板がグラフェン内プラズモンに及ぼす影響を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：The purpose of this research is to develop a fundamental theory of graphene plasmons for their applications to THz emitters and detectors. To investigate the coupling mechanisms of THz waves and graphene plasmons as well as plasmon instabilities associated with the DC current injection, we developed a simulator based on the Boltzmann equation taking into account the nonlinear carrier transport in graphene. We also investigated the effects of electron scatterings, contacts, and heavily-doped substrates on the graphene plasmons.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：電気電子工学・電子デバイス・電子機器

キーワード：グラフェン プラズモン テラヘルツ波

1. 研究開始当初の背景

高電子移動度トランジスタ (HEMT) 内の二次元プラズモン共鳴を THz 波発振・検出に応用する研究が注目を集めている。二次元プラズモンは、チャンネル長とゲート電圧によって周波数を制御することができ、HEMT 中での弱い電子散乱のため、THz 周波数での共鳴が可能である。また、直流電流注入による自己励起メカニズムも存在する。現在、電流注入型二重格子ゲート HEMT (図 1) での室温における THz 波発振が観測されている。

申請者は、プラズモン周波数の構造依存性の解明 (Ryzhii, Satou, et al., J. Appl. Phys. 2006)、走行時間効果による不安定性の解明 (Ryzhii, Satou, et al., J. Phys.: Cond. Matt. 2008) など、THz 二次元プラズモンの基礎理論を確立してきた。不安定性の理論では、非対称境界条件によって引き起こされる Dyakonov-Shur (DS) 不安定性 (Dyakonov and Shur, PRL 1993) と、空乏チャンネル領域での走行時間効果による Ryzhii-Satou-Shur (RSS) 不安定性を同時に発現させ、より強い不安定性が得られることを明らかにした (Ryzhii, Satou, Shur, IEICE Trans. Electron. 2006)。

一方、炭素原子の二次元結晶であるグラフェンにおいては、電子・ホールが線形分散・質量ゼロの相対論的粒子として振る舞い、室温の移動度が $200,000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を超える。申請者はすでに、グラフェンにおけるプラズモン周波数のゲート電圧依存性とプラズモン共鳴 Q 値の算出を行ない、周波数 1THz ・移動度 $200,000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ で 20 程度の Q 値が得られることを明らかにしている (Ryzhii, Jpn. J. Appl. Phys. 2006; Ryzhii, Satou, et al., J. Appl. Phys. 2007)。これは、従来の InP や GaAs による HEMT の Q 値が 1 以下であることを考慮すると、格段に優れている。また、線形分散・質量ゼロ効果によるキャリア輸送の強い非線形性から、DS 不安定性と RSS 不安定性の相乗効果によって、従来の半導体材料では実現できなかった巨大プラズモン不安定性を発現させることを見出している。

上記のことから、申請者は、グラフェン内プラズモンを利用することにより、通常の半導体材料より桁違いに高い性能を持つ、室温におけるコヒーレント THz 波発振・検出素子を実現できると考え、本研究計画を立案するに至った。

2. 研究の目的

上記の背景をもとに、グラフェンをチャンネルに導入したトランジスタ構造を基本として、そこに励起される二次元プラズモンの、THz 波との結合原理、および直流電流注入による巨大プラズモン不安定性の原理を明らかにするとともに、THz 波発振・検出素子構造におけるプラズモンの物性を明らかにし、これら素子応用への基礎理論を確立するこ

とが本研究の目的である。研究期間中には、以下のことを行なう：

(1) グラフェン固有の非線形キャリア輸送を半古典ボルツマン方程式で定式化し、ポアソン方程式あるいはマクスウェル方程式との連立でセルフコンシステントに解くシミュレータを開発する。これを用いて、キャリアの線形分散・ゼロ質量を考慮し、時間発展キャリア分布関数・電磁場を高精度に計算することが可能になる。開発したシミュレータを用いて、いくつかのデバイス構造における THz 波・プラズモンの結合原理およびプラズモン不安定性発現の条件を明らかにする。

(2) グラフェン内キャリア散乱 (音響フォノン散乱、点欠陥散乱、長距離不均一性散乱、キャリア間散乱) がプラズモンに及ぼす影響を明らかにする。

(3) グラフェン内反転分布形成によるプラズモン THz 巨大利得を THz 波発振素子に応用するため、いくつかのポンピング方法による反転分布形成メカニズムを解明する。

(4) 実際のグラフェンデバイスで広く用いられている高ドーピングシリコン基板のグラフェン内プラズモンへの影響を明らかにする。

3. 研究の方法

(1) ボルツマン方程式の解法には Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO) スキームを用いる。他の手法と比して、電子密度が数桁違う領域であっても精度よく分布関数を計算できる。さらに時間発展解法である Total-Variation-Diminishing (TVD) 法と組み合わせることにより、時間発展による数値ノイズを抑えて精度よくプラズモンのシミュレーションが出来る。ポアソン・ソルバにはフリーの有限要素法ライブラリ libmesh を用いる。一方、マクスウェル方程式の解法には二次元時間領域有限差分 (FDTD) 法を用いる。WENO スキームおよび FDTD 法は自製コードを新たに作成し、これらを統合してシミュレータを開発する。

開発したシミュレータを用いて、図 1 (a) の格子ゲート構造および (b) のソース・ドレインコンタクト付構造におけるプラズモンのシミュレーションを行なう。第一に、これらの構造におけるプラズモン周波数分散を明らかにするため、ボルツマン・ポアソン・ソルバを用い、初期条件としてグラフェン内の定常電子分布に摂動を加えた分布を設定し、その時間発展をシミュレーションする。(2) 音響フォノン散乱、点欠陥散乱、長距離不均一性散乱、キャリア間散乱を考慮できるようなボルツマン・ソルバを拡張し、個々の散乱過程に関してシミュレーションを行なう。前者 3 つに関しては、これらに起因するプラズモンの減衰レートをシミュレーションから抽出する。キャリア間散乱に関しては、散乱積分評価に計算量がかかるため、積分評価コードの並列化・最適化を図った後、キャリア間散乱によって生じる非線形性およびプラ

ズマ不安定性への影響を解析する。

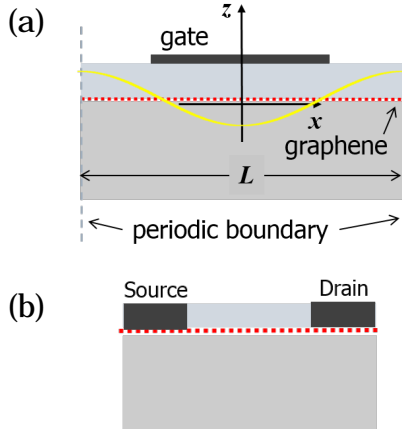


図 1: (a)格子ゲート構造、(b)ソース・ドレインコンタクト付構造の模式図。

(3) グラフェン内反転分布形成のためのポンピング方法として、図 2 (a) の p-i-n 構造における定常的電流注入、および (b) の p-n 周期構造における急峻なゲート電圧 OFF 後の過渡的ドリフト拡散を用いたキャリア注入を考え、それらによる反転分布形成のメカニズムを解析する。前者は流体力学方程式、後者はドリフト拡散方程式に基づくシミュレータを用いて解析を行なう。

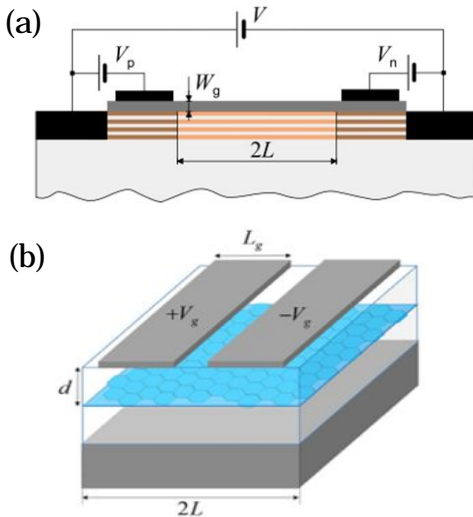


図 2: (a) グラフェン p-i-n 構造、(b) p-n 周期構造の模式図。

(4) 高ドーパシリコン基板中の表面プラズモンとグラフェン中プラズモンの結合を解明するため、流体力学方程式から分散方程式を導出し、グラフェン中プラズモンの周波数分散および減衰レートの基板ドーパ密度依存性ならびにデバイス構造パラメータ依存性を明らかにする。

4. 研究成果

(1) ボルツマン - ポアソン・ソルバを開発し、

図 1 (a) の格子ゲート構造におけるプラズモン周波数の解析を行なった。図 3 に示すように、ゲート電圧によって広範囲に周波数が可変であることを明らかにした。また、図 1 (b) のソース・ドレインコンタクト付構造においては、図 4 に示すようにプラズモンのエネルギーがコンタクトにリークすることによる強い減衰が起こることを明らかにした。現在、格子ゲート構造におけるプラズモン不安定性の解明に向け、現在、シミュレーション結果の解析を進めている。また、THz 波・プラズモン結合の解明に向け、ボルツマン - マクスウェル・ソルバの開発を進めている。

(2) 室温における音響フォノン散乱、点欠陥散乱、長距離不均一性散乱によるプラズモンの減衰レートの電子密度依存性を図 5 に示す。音響フォノン散乱による減衰レートは 10^{11} s^{-1} に近いことが分かる。また、点欠陥散乱による減衰レートは点欠陥密度がある程度低ければ抑制されることが分かる。一方、長距離不均一性散乱による減衰レートは電子密度・相関長に大きく依存するが、相関長が長く、かつ電子密度がある程度高ければ 10^{11} s^{-1} 近くまで抑制されることが明らかになった。以上のことから、電子散乱によるプラズモン減衰を最小限に抑えるためには、点欠陥密度が 10^{12} cm^{-2} 以下、不均一性相関長が 100 nm 以上の高品質グラフェンを用いる必要があること、同時に電子密度を 10^{12} cm^{-2} 以上にして不均一性散乱の影響を抑制する必要があることが明らかになった。

また、キャリア間散乱の散乱積分評価コードの大規模並列化・最適化を行なった。現在、これをボルツマン - ポアソン・ソルバに統合するコード拡張を進めている。

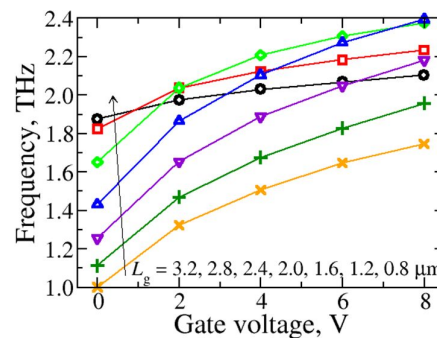


図 3: 格子ゲート構造における周波数のゲート電圧依存性。

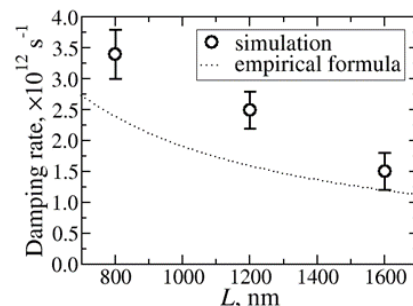


図 4: ソース・ドレインコンタクト付構造におけるプラズモン減衰レート。

(3) 図 2 (a) の p-i-n 構造における定常的電流注入による反転分布形成の解析では、擬フェルミ準位のドレイン電圧依存性を明らかにした(図 6)。パラメータ q は電子・ホール散乱レート、非放射再結合レート、チャンネル長の二乗に比例し、これが大きいほど擬フェルミ準位のドレイン電圧による上昇が鈍くなることが明らかになった。

また、図 2(b) の p-n 周期構造においては、急峻にゲート電圧を OFF にした後の過渡的反転分布形成の解析を行なった。この系ではゲート電圧によって形成された p 領域のホール、n 領域の電子がゲート電圧が OFF になった直後からドリフト・拡散によって擬平衡状態に移るが、OFF 直後は電子・ホール自身が作る電場によるドリフトが支配的であることが明らかになった。

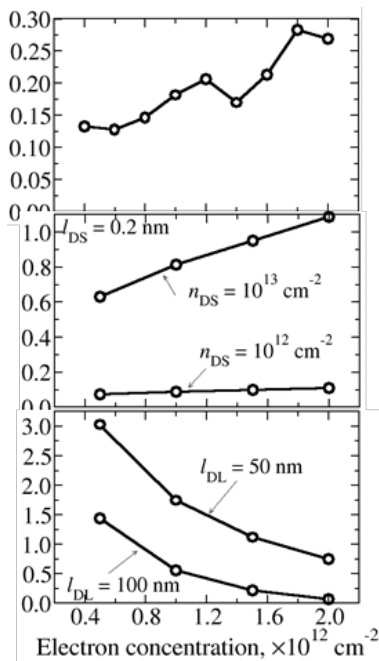


図 5：室温下での音響フォノン散乱(上)、点欠陥散乱(中)、長距離不均一性散乱(下)によるプラズモン減衰レート。

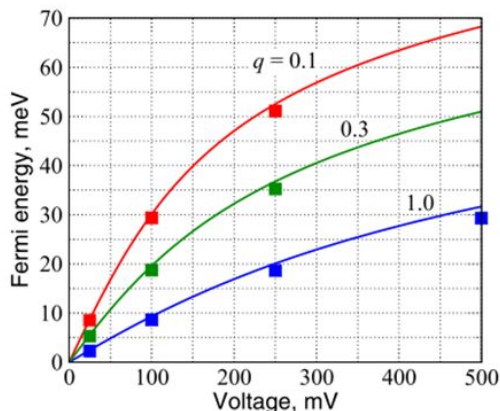


図 6：グラフェン p-i-n 構造での電流注入による擬フェルミ準位のドレイン電圧依存性。

(4) 高ドーパシリコン基板中の表面プラズモンとグラフェン中プラズモンの結合によるプラズモン減衰レートの基板ドーパ密度およびプラズモン波数依存性を図 7 に示す。基板中表面プラズモンとグラフェン中プラズモンの周波数が一致するとき、これらの結合が強くなり、基板中の強い電子散乱に起因してプラズモン減衰レートが大きくなる。基板ドーパ密度、絶縁層材料の誘電率、基板・グラフェン距離、ゲート・グラフェン距離を適切に選定することによりこの減衰機構の影響を最小限に抑え、音響フォノン散乱による減衰レートよりも低くできることを明らかにした。

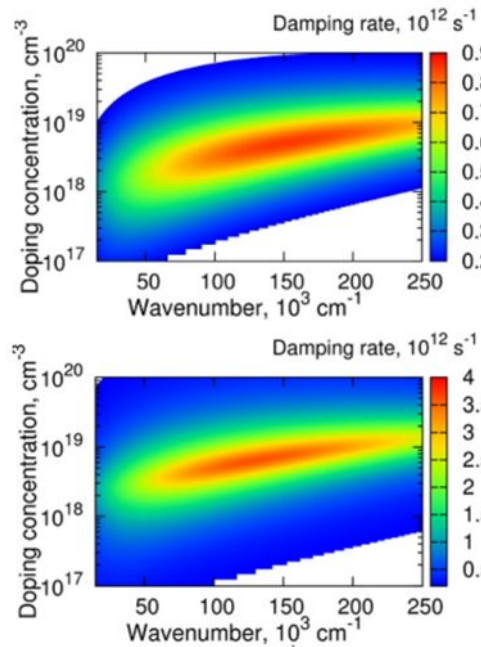


図 7：高ドーパシリコン基板上グラフェンにおけるプラズモン減衰レートの基板ドーパ密度およびプラズモン波数依存性(上：Al₂O₃/graphene/SiO₂系、下：Diamond-like-carbon/graphene/3C-SiC系)。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 16 件)

- (1) A. Satou, Y. Koseki, V. Ryzhii, V. Vyurkov, and T. Otsuji, Damping mechanism of terahertz plasmons in graphene on heavily-doped substrate (査読有), J. Appl. Phys., vol. 115, no. 10, pp. 104501 1-7, Mar. 2014.
DOI:10.1063/1.4867971
- (2) 佐藤昭, 尾辻泰一, グラフェン中プラズモンの THz 波デバイスへの応用 (査読有), 日本画像学会誌総説, vol. 53, pp. 53-60, 2014 年 2 月.
- (3) A. Satou, F. T. Vasko, T. Otsuji, and V. V. Mitin, Transient stimulated emission from multi-split-gated graphene structure (査読有), J. Phys. D: Appl.

- Phys., vol. 47, no. 5, pp. 055103 1-8, Jan. 2014.
DOI:10.1088/0022-3727/47/5/055103
- (4) A. R. Davoyan, M. Yu. Morozov, A. Satou, V. V. Popov, and T. Otsuji, Graphene surface emitting terahertz laser: diffusion pumping concept (査読有), Appl. Phys. Lett., vol. 103, no. 25, pp. 251102 1-5, Dec. 2013.
DOI:10.1063/1.4850522
- (5) 佐藤昭, Victor Ryzhii, 尾辻泰一, 二次元プラズモンの THz 波デバイス応用 (査読無) 応用電子物性分科会誌, vol. 19, pp. 141-147, 2013 年 10 月.
- (6) V. Ryzhii, I. Semenikhin, M. Ryzhii, D. Svinstov, V. Vyurkov, A. Satou, and T. Otsuji, Double injection in graphene p-i-n structures (査読有), J. Appl. Phys., vol. 113, no. 24, pp. 244505 1-9, Jun. 2013.
DOI:10.1063/1.4812494
- (7) V. Ryzhii, M. Ryzhii, V. Mitin, M. S. Shur, A. Satou, and T. Otsuji, Terahertz photomixing using plasma resonances in double-graphene layer structures (査読有), J. Appl. Phys., vol. 113, no. 17, pp. 174506 1-7, May 2013.
DOI:10.1063/1.4804063
- (8) 佐藤昭, Victor Ryzhii, Vladimir Mitin, Fedir Vasko, 尾辻泰一, グラフェンにおけるテラヘルツ二次元プラズモンのシミュレーションによる解析 (査読無), 進学技報 EST2013, vol. 113, pp. 15-20, 2013 年 5 月.
- (9) A. Satou, V. Ryzhii, Y. Kurita, and T. Otsuji, Threshold of terahertz population inversion and negative dynamic conductivity in graphene under pulse photoexcitation (査読有), J. Appl. Phys., vol. 113, no. 14, pp. 143108 1-7, Apr. 2013.
DOI:10.1063/1.4801916
- (10) A. Satou, V. Ryzhii, F. T. Vasko, V. V. Mitin, and T. Otsuji, Numerical simulation of terahertz plasmons in gated graphene structures (査読無), Proc. SPIE, vol. 8624, pp. 862412 1-8, Feb. 2013.
DOI:10.1117/12.2003611
- (11) T. Otsuji, S. Boubanga Tombet, A. Satou, M. Ryzhii, and V. Ryzhii, Terahertz-wave generation using graphene -toward new types of terahertz lasers (査読有), IEEE J. Selected Topics in Quantum Electron., vol. 19, no. 1, pp. 8400209 1-9, Jan.-Feb. 2013.
DOI:10.1109/JSTQE.2012.2208734
- (12) T. Otsuji, T. Watanabe, S. Boubanga Tombet, A. Satou, W. Knap, V. Popov, M. Ryzhii, and V. Ryzhii, Emission and detection of terahertz radiation using two-dimensional electrons in III-V semiconductors and graphene (査読有), IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol., vol. 3, no. 1, pp. 63-72, Jan. 2013.
DOI:10.1109/TTHZ.2012.2235911
- (13) T. Otsuji, S. A. Boubanga Tombet, A. Satou, H. Fukidome, M. Suemitsu, E. Sano, V. Popov, M. Ryzhii, and V. Ryzhii, Graphene materials and devices in terahertz science and technology (査読有), MRS Bulletin, vol. 37, no. 12, pp. 1235-1243, Dec. 2012.
DOI:10.1557/mrs.2012.241
- (14) 佐藤昭, 光パルス励起によるグラフェン内テラヘルツ反転分布形成 (査読無), 信学技報 ED2012, vol. 112, pp. 29-33, 2012 年 12 月.
- (15) 佐藤昭, 二重格子ゲート HEMT 内二次元電子ガスにおけるプラズマ不安定性 (査読有), 信学技報 R2012, vol. 112, pp. 1-4, 2012 年 7 月.
- (16) T. Otsuji, S. A. Boubanga Tombet, A. Satou, H. Fukidome, M. Suemitsu, E. Sano, V. Popov, M. Ryzhii, and V. Ryzhii, Graphene-based devices in terahertz science and technology (査読有), J. Phys. D: Applied Physics, vol. 45, no. 30, pp. 303001-1-10, Jul. 2012.
DOI:10.1088/0022-3727/45/30/303001
- [学会発表] (計 23 件)
- (1) 佐藤昭, V. Ryzhii, 尾辻泰一, 二次元プラズモンの THz 波デバイス応用, 応用電子物性分科会研究例会 (招待講演), 2013 年 10 月 1 日, 東京
- (2) A. Satou, Terahertz population inversion in optically pumped graphene: dependence on pumping photon energy, The 2013 JSAP-MRS Joint Symposium: Symposium C, 2013 年 9 月 16 日 ~ 20 日, 京都
- (3) A. Satou, Y. Koseki, V. Ryzhii, and T. Otsuji, Damping of terahertz plasmons in graphene by heavily-doped substrate, RPGR 2013, 2013 年 9 月 9 日 ~ 13 日, 東京
- (4) A. Satou, V. Ryzhii, F. T. Vasko, V. V. Mitin, and T. Otsuji, Simulation of terahertz plasmons in graphene with grating-gate structures, SISPAD 2013, 2013 年 9 月 3 日 ~ 5 日, イギリス・グラスゴー
- (5) A. Satou, Frequency dispersion and damping mechanisms of terahertz plasmons in graphene transistor structures, EDISON 18, 2013 年 7 月 22 日 ~ 26 日, 松江
- (6) A. Satou, V. Ryzhii, F. T. Vasko, V. V.

- Mitin, and T. Otsuji, Frequency dispersion and damping mechanisms of terahertz plasmons in graphene transistor structures, CLEO 2013, 2013年6月9日~14日, アメリカ・サンノゼ
- (7) A. Satou, Frequency dispersion and damping mechanisms of terahertz plasmons in graphene transistor structures, The 2nd Russia-Japan-USA Symposium: The Fundamental & Applied Problems of Terahertz Devices & Technologies, 2013年06月03日~06日, ロシア・モスクワ
- (8) 佐藤昭, V. Ryzhii, V. V. Mitin, F. T. Vasko, 尾辻泰一, グラフェンにおけるテラヘルツ二次元プラズモンのシミュレーションによる解析, 電気通信情報学会 2013年エレクトロニクスシミュレーション研究会, 2013年5月10日, 東京
- (9) 佐藤昭, グラフェンを用いたテラヘルツ素子応用, 日本真空学会 2013年5月研究例会・日本表面学会第77回表面科学研究会(招待講演), 2013年5月9日, 東京
- (10) A. Satou, Graphene terahertz lasers: injection versus optical pumping, 6th GSMM, 2013年4月21日~23日, 仙台
- (11) A. Satou, Terahertz population inversion and negative dynamic conductivity in optically pumped graphene: dependence on pumping photon energy, OTST 2013, 2013年4月1日~5日, 京都
- (12) 佐藤昭, ヴィクトール リズィー, ウラジミール ミチン, フェデル バスコ, 尾辻泰一, グラフェンにおけるテラヘルツ二次元プラズモンの周波数分散および減衰機構, 第60回応用物理学会春季学術講演会, 2013年3月27日~30日, 厚木
- (13) A. Satou, Numerical simulation of terahertz plasmons in gated graphene structures, Photonics West 2013, 2013年2月2日~7日, アメリカ・サンフランシスコ
- (14) 佐藤昭, ヴィクトール リズィー, 栗田裕記, 尾辻泰一, 光パルス励起によるグラフェン内テラヘルツ反転分布形成, 信学会電子デバイス研究会, 2012年12月17日~18日, 東京
- (15) A. Satou, Numerical study of plasmons in gated graphene structures, 3rd International Symposium on Terahertz Nanoscience, 2012年12月10日~12日, アメリカ・ホノルル
- (16) A. Satou, Theoretical study of THz plasma instability in asymmetric double-grating-gate transistor structures, ICMNE 2012, 2012年10月01日~05日, ロシア・モスクワ
- (17) 佐藤昭, 志田広海, Viacheslav V. Popov, 尾辻泰一, 二重格子ゲートHEMT内二次元電子ガスにおけるプラズマ不安定性, 信学会レーザー量子エレクトロニクス研究会, 2012年8月23日~24日, 仙台
- (18) A. Satou, Simulation of THz graphene and heterostructure 2D electron gas, 2nd International Symposium on Terahertz Nanoscience, 2012年7月2日~4日, 沖縄
- (19) A. Satou, H. Shida, T. Otsuji, and V. V. Popov, Plasma instability of two-dimensional electron gas in double-grating-gate transistor structure, 15th IWCE, 2012年5月22日~25日, アメリカ・ウィスコンシン
- (20) A. Satou, Terahertz negative dynamic conductivity in optically pumped graphene, 31th PIRS(招待講演), 2012年3月27-30日, マレーシア・クアラルンプール
- (21) 佐藤昭, 志田広海, Viacheslav V. Popov, 二重格子ゲートトランジスタ構造における二次元プラズマ不安定性, 第59回応用物理学会春季学術講演会, 2012年3月15日, 東京
- (22) A. Satou, T. Otsuji, V. Ryzhii, and F. T. Vasko, Population inversion in optically pumped graphene: effect of carrier-carrier scattering, 1st International Symposium on Terahertz Nanoscience, 2011年11月24日~29日, 大阪
- (23) A. Satou, T. Otsuji, V. Ryzhii, and F. T. Vasko, The effect of carrier-carrier scattering on population inversion in optically pumped graphene, 19th EP2DS, 2011年7月25日~29日, アメリカ・タラハシー
- 〔図書〕(計2件)
- (1) 監修: 尾辻泰一、著者: 尾辻泰一他、フロンティア出版、「グラフェンの最先端技術と広がる応用」, 2012, 223-232ページ(全242ページ)
- (2) 榎敏明他、NTS社、「グラフェンが拓く材料の新領域—物性・作製法から実用化まで—」, 2012, 178-184ページ(全268ページ)
- 〔その他〕(計2件)
- (1) 宮城産業科学振興基金・研究奨励賞受賞, 2013年5月
- (2) 1st International Symposium on Terahertz Nanoscience, Young Researcher Award 受賞, 2011年11月
6. 研究組織
- (1) 研究代表者
佐藤 昭 (SATOU, AKIRA)
東北大学・電気通信研究所・助教
研究者番号: 70510410