

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年04月20日現在

機関番号：11301

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2011～2012

課題番号：23840004

研究課題名（和文）ハイブリッド量子井戸のスピン g 因子の特異性に関する研究研究課題名（英文）Research on the spin g -factor singularity of a hybrid quantum well

研究代表者

文 泌景 (Moon Pilkyung)

東北大学・大学院理学研究科・助教

研究者番号：00610619

研究成果の概要（和文）：(1) 基盤より格子定数が長い物質と短い物質を接合し、バンド（電子、軽い正孔、重い正孔）ごとに異なるタイプの整合（タイプ I またはタイプ II）を持つ量子輪構造を考案した。構造の変化によりバンド達の割合と分布が大きく変わることを示す。(2) 2枚のグラフェンを回転欠陥を持つように積層した二次元超格子構造で、格子ポテンシャルと磁場の影響が競合する領域が現れることを示し、独特なフラクタルバンド構造と量子ホール効果が現れることを見せた。また光吸収スペクトルが面内の回転角に大きく依存することを見せた。

研究成果の概要（英文）：(1) I proposed a hybrid quantum ring structure which is composed of compressively strained material and tensile strained material, and showed that each band (electron, light hole, heavy hole) exhibits quite different band alignment (type-I and type-II). I showed that the band probability and distribution are very sensitive to geometric change. (2) I showed that the effects of lattice potential and magnetic field compete in graphene-based two-dimensional superlattices. I investigated the fractal band structures and quantum Hall effect in these structures, and also showed that the optical absorption spectra strongly depend on the in-plane rotation angle.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2011年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2012年度	1,200,000	360,000	1,560,000
総計	2,500,000	750,000	3,250,000

研究分野：物理系科学

科研費の分科・細目：物性 I

キーワード：ハイブリッドナノ構造、バンド構造工学、グラフェン、超格子、フラクタルバンド構造、量子ホール効果

1. 研究開始当初の背景

(1) ハイブリッド量子構造の研究

III-V 族の半導体物質は、面内方向の応力の符号によって価電子帯のバンドの順序が変わる。圧縮されている場合は重い正孔が、伸張されている場合は軽い正孔がそれぞれ価

電子帯のバンド端になる。電荷の様々な性質はその電荷が分布する物質の種類や物質内のバンドの種類（電子、重い正孔、軽い正孔）に大きく影響を受けるため、面内方向に圧縮応力を持つ構造と伸張応力を持つ構造を接合させることで、物性をよりフレキシブルに

調整する方法を考案し、先行研究で一部の物性に対しその効果を確認した。

(2) Twisted bilayer graphene の磁場中電子構造及び量子ホール効果

二枚のグラフェンを回転欠陥を持つように積層した twisted bilayer graphene は、通常のグラフェンより遥かに長い周期を持つ二次元超格子構造になる。この構造に垂直に磁場をかけると、単位胞の周期と磁場長が同程度になり、ブラッグ散乱とランダウ量子化が競合する領域に到達できることが示唆された。

(3) Twisted bilayer graphene の光学特性
Twisted bilayer graphene のエネルギースケールは面内回転角が小さくなるにつれ減少することが知られている。これは構造パラメータを変えることで光吸収スペクトルを大幅に変化できることを示す。様々な実験研究が行われる中、まだ理論による分析は行われていなかった。

2. 研究の目的

(1) ハイブリッド量子構造の研究

本研究では、基盤より長い格子定数を持つ物質で量子輪を、基盤より短い格子定数を持つ物質で輪の周囲を覆うサポート構造を構成するハイブリッド量子構造を考案し、その電子構造を理論的に調べた。このハイブリッド量子構造の原型は先行研究で実験グループとの共同研究により実現可能だということを確認している。エピタキシャル法で作られる量子構造は縦より横幅が大きいので、量子輪は面内方向に圧縮応力を、サポート構造は伸張応力を持つ。一般的な量子構造は圧縮される構造か伸張される構造のどちらか一つのみで構成されるため、電荷はよりエネルギーが低い種類のバンドのみによってその性質が決まる。しかし本研究で考案したハイブリッド量子構造では、電子と重い正孔は量子輪の中に、軽い正孔はサポート構造の中にと、別々に分布するため、電荷の状態に応じて様々な物性が大幅に変化することが期待できた。

(2) Twisted bilayer graphene の磁場中電子構造及び量子ホール効果

本研究では一般的な固体結晶より遥かに長い周期を持つ二次元超格子構造に磁場をかけたときに現れる電子構造を調べた。様々な磁場の値で一貫した分析を可能とさせるため、ブラッグ散乱とランダウ量子化を同等に扱える（不当な仮定を使わない）計算方法を考案し、様々な回転角を持つ twisted bilayer graphene 構造について計算と分析を行う。

(3) Twisted bilayer graphene の光学特性
様々な面内回転角を持つ twisted bilayer graphene に対して光吸収スペクトルを分析する。光学遷移に重要な対象性について議論

する。

3. 研究の方法

(1) ハイブリッド量子構造の研究

上記ハイブリッド量子構造でサポート構造の厚さを変えながら様々は物性の変化を理論的に計算し分析した。物質の電気的特性は電荷の波動関数を解くことで求めることができる。そして、応力を受けている固体結晶の中の電荷の波動関数は格子歪みに大きく影響を受けるため、valence force field を使って構造ごとの正確な応力分布を計算し、歪による圧電ポテンシャルを求めた。応力がバンド端に与える影響を deformation potential から計算し、eight-band k·p 法で量子化されたエネルギー状態とその波動関数を求めた。構造の変化に伴ってエネルギー準位、状態内のバンドの割合、バンドごとに基盤からの平均距離などの変化を分析した。

(2) Twisted bilayer graphene の磁場中電子構造及び量子ホール効果

磁場があるときの波動関数は磁場が無いときに比べ遥かに長い周期を持つため、通常の tight-binding 法などでは有限時間内に解を得ることができない。そこで本研究では各層の固有状態に magnetic translation 条件を加え、それらを基底状態として使って層間のハミルトニアンを対角化する方法を開発した。この方法は非常に効率的で、同じ磁場の条件で tight-binding 法の 1/40 程度の基底でほぼ同等の計算を行えることを確認した。

(3) Twisted bilayer graphene の光学特性
有効ハミルトニアン法を開発し、tight-binding 法の結果と比較、分析してその正確度を確認した。モアレ縞が顕著になってくる回転角 10 度以下の構造ではこの二つの結果がほぼ一致することを示した。この方法で様々な回転角を持つ twisted bilayer graphene のバンド構造を計算し、久保公式を使って光吸収スペクトルを求めた。

4. 研究成果

(1) ハイブリッド量子構造の研究

図 1 に半導体ギャップ付近の 4 つのバンドのエネルギーが基盤の格子定数によってどう変わっていくかを示す。この図から InP 基板上に InAs と GaAs の構造をエピタキシャルに成長した場合、InAs では HH が、GaAs では LH が価伝道帯バンド端になることが分かる。InAs で量子輪を、GaAs で輪を覆うサポート構造を構成するハイブリッド量子構造で、サポート構造の厚さが構造の応力分布に与える影響を計算し、分析した（図 2）。これによって電子とホール状態のエネルギーが大きく変化し、また磁気的特性などの物性に大きな影響を与えるバンド割合も大幅に変わることを見せた（図 3）。

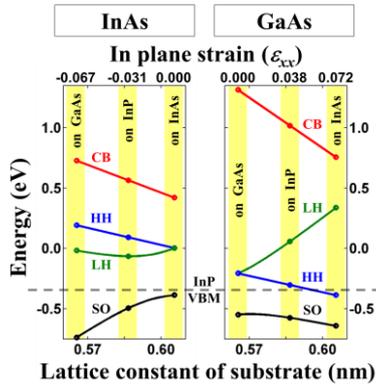


図1 : InAs (左) と GaAs (右) の4つのバンド (CB : 電子バンド、HH : 重い正孔バンド、LH : 軽い正孔バンド、SO : スピナー軌道相互作用で現れるバンド) のエネルギーの応力及び基盤格子定数依存性。

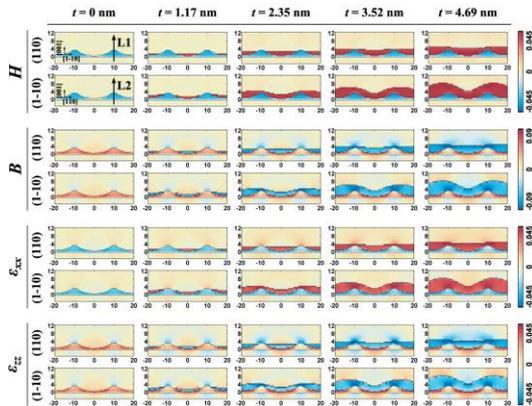


図2 : サポート構造の厚さ (t) が応力分布に与える影響。H は等方応力、B は異方応力、 ϵ_{xx} と ϵ_{zz} はそれぞれ面内と垂直方向への応力を示す。

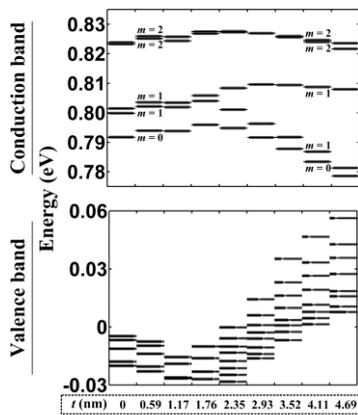


図3 : サポート構造の厚さの変化に伴う電子とホール状態のエネルギー及びバンド割合の変化。

(2) Twisted bilayer graphene の磁場中電

子構造及び量子ホール効果

本研究では図4に示す、面内回転角が異なる4つの構造について計算を行った。回転角が小さくなるにつれ格子定数が長くなり、モアレ縞が顕著になることが確認できる。単位胞が大きくなるにつれブリュアンゾーンが折りたたまれ、エネルギースケールはより小さくなっていく。回転角が大きい構造では格子がまだ小さく、磁場中のバンド構造は普通のランダウ準位を見せる(図5上)。しかし回転角が小さくなると、格子定数が磁場長と比べられるくらい大きくなりブラッグ散乱とランダウ量子化の競合が起こる。これによってバンド構造は、小さな磁場の変化でも大きく変わる、フラクタルバンド構造(ホフスタッターの蝶)を見せる。エネルギーを上げるにつれ量子化されたホール伝導度は正と負の値を目まぐるしく変わる。一般の固体結晶ではこの領域に達するために数万テスラという途方もない磁場が必要だが、3.89度の回転角を持つ構造では100テスラ、1.47度の構造では20テスラと、格子が大きくなるにつれ実現可能な磁場でこの領域に達することができることを示した。それとともに、弱磁場領域でエネルギーを上げるにつれ電子の軌道が重なり、ブリュアンゾーンに二つあった電子の軌道が一つの正孔のような軌道に変わることを見せ、その影響がホール伝導度のステップに現れることを示した。

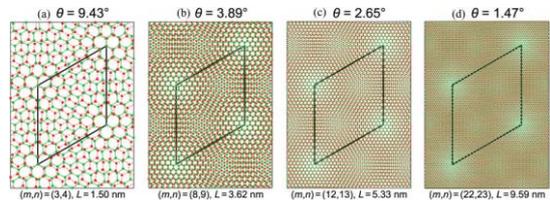


図4 : 様々な回転角 θ での格子構造。

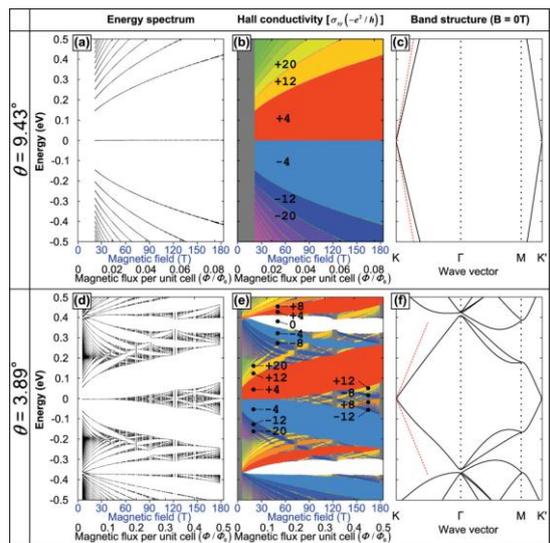


図5 : 大きな回転角を持つ構造 (上) と小さな回転角を持つ構造 (下) のエネルギースペ

クトル (左) とギャップごとの量子化されたホール伝導度 (中央) 及び同じエネルギー領域での無地場のバンド構造 (右)。

(3) Twisted bilayer graphene の光学特性
Twisted bilayer graphene の吸収スペクトルを図6に示したバンド構造の模式図で説明することができた。ディラック点付近では単層グラフェンの線形分散が現れるが、ディラックコーンが交差する(i)と(ii)ではバンド反交差と van Hove 特異性が現れる。回転角が小さくなるとK(1)とK(2)、K'(1)とK'(2)が近くなり、(i)のエネルギーはディラックポイントに近づくが、(ii)のエネルギーは遠ざかることが説明できる。(iii)は単層グラフェンの van Hove 特異点であるため回転角の影響をほぼ受けない。図7に実際に計算した光吸収スペクトルを示す。回転角が小さくなるにつれ(i)のエネルギーは0 eVに近づき、(ii)のエネルギーは遠ざかり、(iii)はほぼ変わらないことが確認できる。それとともに、twisted bilayer graphene ではM点での光吸収が禁じられていることを見つけ、その原因を有効ハミルトニアンの対象性を使って説明することができた。

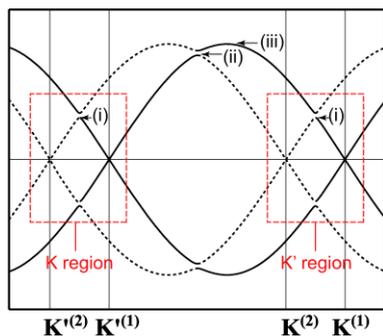


図6：バンド構造の模式図。K(1)とK'(1)は二つの層(1=1, 2)のバレーを示す。

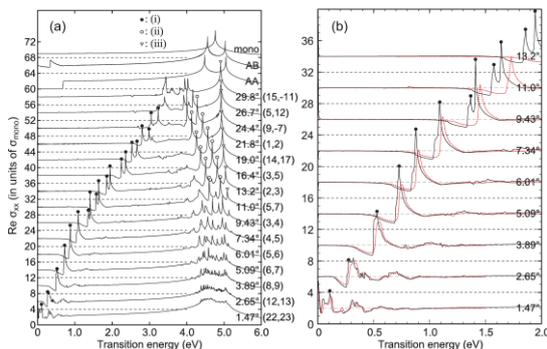


図7：様々な回転角での光吸収スペクトル。左は広いエネルギー領域、右は低エネルギー領域を示す。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計2件)

- ① Pilkyung Moon and Mikito Koshino, Optical Absorption in Twisted Bilayer Graphene, Physical Review B 87, 205404, 査読有, 2013年 (doi: 10.1103/PhysRevB.87.205404)
- ② Pilkyung Moon and Mikito Koshino, Energy spectrum and quantum Hall effect in twisted bilayer graphene, Physical Review B 85, 195458, 査読有, 2012年 (doi: 10.1103/PhysRevB.85.195458)

[学会発表] (計10件)

- ① Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Energy spectrum, quantum Hall effect, and valley splitting in graphene on hexagonal boron nitride”, Korean Physical Society Spring Meeting, 2013年4月26日, デジョン, 韓国
- ② Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Optical absorption in twisted bilayer graphene”, Korean Physical Society Spring Meeting, 2013年4月26日, デジョン, 韓国
- ③ Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Electronic structure of bilayer graphene on hexagonal Boron Nitride in magnetic field”, 日本物理学会春季大会, 2013年3月26日, 広島
- ④ Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Fractal energy spectrum and quantum Hall effect in graphene-based two-dimensional superlattice”, 5th Korean Graphene Research Society Meeting, 2012年12月21日, ソウル, 韓国 (招待講演)
- ⑤ Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Optical spectra and selection rules of twisted bilayer graphene”, 2012 A3 Symposium of Emerging Materials: Nanomaterials for Energy and Environments, 2012年10月29日, 仙台 (招待講演)
- ⑥ Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Optical Absorption Spectrum in Twisted Bilayer Graphene”, 日本物理学会秋季大会, 2012年9月18日, 横浜
- ⑦ Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Energy Spectrum and Quantum Hall Effect in Twisted Bilayer Graphene”, The 31th International Conference on the Physics of Semiconductors, 2012年7月29日, チューリッヒ, スイス
- ⑧ Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Hofstadter butterfly and quantum

Hall effect in twisted bilayer graphene”, The 6th International Conference on the Fundamental Science of Graphene and Applications of Graphene-Based Devices, 2012年6月4日, デルフト, オランダ

- ⑨ Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Energy Spectrum and Quantum Hall Effect in Twisted Bilayer Graphene”, Korean Physical Society Spring Meeting, 2012年4月25日, デジョン, 韓国
- ⑩ Pilkyung Moon and Mikito Koshino, “Landau level structures of twisted bilayer graphene”, 日本物理学会春季大会, 2012年3月24日, 大阪

[図書] (計1件)

- ① Pilkyung Moon, Euijoon Yoon, Won Jun Choi, Jaedong Lee, Jean-Pierre Leburton, Springer 社, 「Physics of Quantum Rings」, 発刊決定, 2013年, Chapter 13 「Strained quantum rings」 (ISBN 978-3-642-39196-5)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

文 泌景 (Moon Pilkyung)
東北大学・大学院理学研究科・助教
研究者番号: 00610619