

機関番号：10101

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2008～2010

課題番号：20540307

研究課題名 (和文) 特異な電子状態に起因する量子輸送現象の理論的研究

研究課題名 (英文) Theoretical study on quantum transport phenomena originating from unusual electronic states

研究代表者

鈴浦 秀勝 (SUZUURA HIDEKATSU)

北海道大学・大学院工学研究院・准教授

研究者番号：10282683

研究成果の概要 (和文) : スピン軌道相互作用を有する半導体やグラフェンなどで実現する、有効質量がゼロの特異な伝導電子が示す電気伝導の量子効果を理論的に評価した。任意の不純物密度における数値計算の結果から、電極を付けた 2 次元半導体において有限のスピンホールコンダクタンスが残る事、グラフェンにおいて散乱が弱い場合は質量ゼロのディラック電子の特徴が見られるのに対して、散乱が強い場合は通常の 2 次元電子系と同様のアンダーソン局在が起きる事を、それぞれ、明らかにした。

研究成果の概要 (英文) : Quantum transport phenomena due to the massless Dirac particles have been studied in semiconductors with spin-orbit interaction and graphene. In the former case, non-zero spin-Hall conductance survives for a finite system with contacts for any impurity density. In the latter, peculiar conduction is given for systems of low impurity density, while Anderson localization takes place for high impurity density as is the case with normal two-dimensional electronic systems.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	2,000,000	600,000	2,600,000
2009 年度	700,000	210,000	910,000
2010 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
年度			
総計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究代表者の専門分野：物性理論

科研費の分科・細目：物理学・物性 I

キーワード：グラフェン、カーボンナノチューブ、スピン軌道相互作用、低次元電子系、スピンホール効果、電気伝導

1. 研究開始当初の背景

黒煙の積層構造における基本要素である、炭素原子により構成される 2 次元蜂の巣格子平面はグラフェンと呼ばれる。その電気伝導測定が可能となり、既存の半導体量子井戸で得られる擬 2 次元電子系とは異なる振る舞いが数多く観測された。厚みの無い 2 次元平面に閉じ込められた電子の運動はそれだけでも興味深い。伝導に寄与する電子が、結晶の周期ポテンシャル効果を有効質量に繰り込んだシュレディンガー方程式ではな

く、有効質量ゼロのディラック方程式に従う事がそれらの特徴的な電気伝導を示す原因だとされている。

グラフェンの単離が実現される以前に、グラフェンを円筒状に丸め繋げた構造を持つカーボンナノチューブに対する研究が広くなされており、研究代表者も擬一次元系における質量ゼロのディラック粒子に起因した特異な電気伝導性を理論的に明らかにしてきた。しかしながら、実験的測定は高度な技術が要求され、特異な電気伝導性が広く認め

られたとは言い難い状況であった。

時期を同じくして、電子系のスピン軌道相互作用に起因した内因性のスピンホール効果が理論的に予言され、制御の難しい磁性体との接合を必要としない、非磁性半導体スピントロニクスの実現が期待された。さらに、蜂の巣格子上でスピン軌道相互作用を考慮した有効模型における量子スピンホール効果が提案され、トポロジカル絶縁体の研究の発展への端緒となった。

両者に共通するのは、特異な電子構造に起因した量子輸送現象である。グラフェンでは蜂の巣格子の持つ副格子構造による擬スピン、スピンホール効果では真のスピンを持ちながら、電子が特定のエネルギーバンドに拘束されて運動することによりベリー位相と呼ばれる量子力学的位相を獲得する。これが有効的な磁場を生じ、輸送現象に影響を及ぼす。それらの現象は、微細加工技術の進展により実現した半導体量子構造や、制御法が確立されつつあるグラフェンに対する電気伝導測定により検証可能と思われ、不純物散乱や電極との接合の影響など、基本的な事象の理解が急務とされていた。

2. 研究の目的

特異な電子状態に起因した輸送現象における、不純物散乱、電極との接合などの現実には避け難い影響を考慮し、量子力学的散乱問題を有限系において厳密に解く事により、電気伝導に対する量子干渉効果を定量的に評価することを目的とする。大きく分類して、以下の3つのテーマに取り組む。

- (1). スピンホールコンダクタンスに対する不純物散乱と電極接合の存在による影響の評価
- (2). スピンホール効果による試料端におけるスピン蓄積の理論的評価
- (3). グラフェン・カーボンナノチューブにおける不純物散乱とフォノン散乱

3. 研究の方法

研究目的で挙げた3つのテーマについて、それぞれ、研究方法を具体的に述べる。

- (1). 強束縛模型によりスピン軌道相互作用を考慮した電子状態を記述する。長方形試料の4辺に電流測定用のリード線を電極として取り付けた4端子測定配置を考える。量子力学的な散乱問題を数値的に解き、ランダウアー・ビュッティカー公式を用いてコンダクタンスを計算する。不純物は試料内にランダムな対

角ポテンシャルとして導入し、配置平均を取る。

- (2). 有限幅を持つ擬一次元系におけるスピン蓄積に関する理論計算を実行する。スピンホール効果により、電流と垂直方向にスピン流が生じるが、系が端を持ち、そこにリード線を接続しない場合は、スピン流がせき止められてスピン蓄積が起こると期待される。スピン軌道相互作用が存在する系ではスピンが保存量でないために、スピン蓄積の理論的評価法が非自明であった。本研究では局所電位を求めるビュッティカーの方法を拡張し、アップとダウンのスピンを持つ電子に対して独立に電位を計算することにより、その電位差からスピン蓄積を評価する。

- (3). グラフェンにおける任意の不純物密度に対する量子干渉効果を調べるために、周長が大きい極限のカーボンナノチューブのコンダクタンスをランダウアー公式により数値計算する。

高温、あるいは、強電場極限で重要となる光学フォノン散乱の効果調べるために、有効相互作用を導出し、様々なモードの寄与の大きさを評価する。

また、カーボンナノチューブにおける光学伝導度に対する不純物散乱効果を有効質量理論の範囲で評価する。

4. 研究成果

研究の目的と方法に列挙した3つのテーマに関する成果を、それぞれ、列挙する。

- (1). 先行研究では一辺が40サイトの正方形の試料で、最近接サイト間のホッピングのみを考慮した計算が行われた。不純物が無い清浄極限において、有限個の特別な点を除き、全てのフェルミエネルギーにおいて、スピンホールコンダクタンスは有限となり、不純物密度が上昇にともない、単調減少を示す結果が得られていた。しかし、サイズ依存性の議論が十分になされていなかった。

本研究では、再帰的計算法を用いる事により扱えるサイズを格段に大きくし、一辺が500サイト程度、つまり、全サイト数が250000もの系に対するスピンホールコンダクタンスの計算を可能にした。ところが、サイズを大きくすると現れるはずの量子干渉に起因する局在効果が全く見られず、拡散的な伝導を示した。スピンホールコンダクタンスを求める試料と

接続する理想的なリード線の配置を様々に変えることにより、その原因は試料の隅を通り抜ける経路の存在によることが明らかになった。つまり、一般に用いられる、試料とリードの幅を同じにするという設定は不純物散乱の効果を正しく反映しておらず、リードの幅を狭くするか、リードの試料に繋がる部分にも不純物を導入する必要があることがわかった。このような配置での既存の計算結果は再検討を要することになる。

この結果を踏まえて、試料と接続するリード内にも不純物を導入したところ、不純物散乱を強くすると局在傾向が見られた。拡散伝導領域におけるスピホールコンダクタンスは不純物散乱に起因する弾性散乱時間とスピン軌道相互作用のエネルギーの積の2乗に比例する事が明らかになった。また、次近接サイト間のホッピングを取り入れたが、定性的な違いは見られなかった。

本研究で用いたモデルは有効質量近似による連続体モデルでは、いわゆる、ラシュバ模型に対応し、内因性のスピホールコンダクタンスはゼロであるとされている。しかしながら、今回の成果によれば、4端子測定配置ではその限りではなく、不純物散乱を考慮した場合でも、小さくはなるものの、スピホールコンダクタンスは有限であることが明らかになった。

- (2). 2端子測定配置において直流電流が流れている状態を考える。スピン蓄積を定量的に議論するために、仮想的な一次元リードを局所的に接続し、電流とスピン流が、どちらも、ゼロとなるようにスピアップとダウンの電位を独立に調整する事で、その電位差を計算した。図1は一辺が100サイトの正方形試料におけるスピン依存電位(アップとダウンの電位差を)の位置依存性を2次元平面上に密度表示した結果である。ただし、電流と平行な方向をy軸とした。フェルミエネルギーはバンドの下端に近く、連続体極限のラシュバ模型に近いエネルギーバンドとなるように選んだ。また、電位測定用のリードにより生じる散乱が出来る限り小さくなるように設定した。電流を与えるリードは試料と同じ系であるとした事から、電極の接合による散乱は無くy方向に並進対称性を示す結果が得られた。

右にある色付きのスケールと比較すると、スピン依存電位は電流と垂直方向

に振動することがわかるが、図2の断面図から明らかなように、試料の端近傍で値が大きくなっている。この結果から、スピン軌道相互作用に起因する内因性のスピホール効果によりスピン蓄積が生じ、スピン偏極が試料の端付近で有限となる事が明らかになった。

近年、ガリウムヒ素半導体量子井戸に対する光カー効果による実験で試料端におけるスピン蓄積が確認されている。その報告では、外因性のスピホール効果によるとされているが、本研究の結果から、内因性効果によるスピン蓄積の可能性も検討する必要があるだろう。

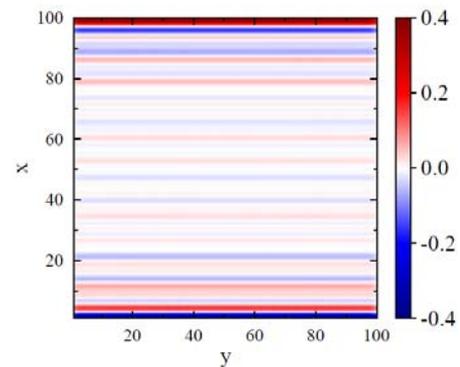


図1: スピン依存電位の2次元空間分布

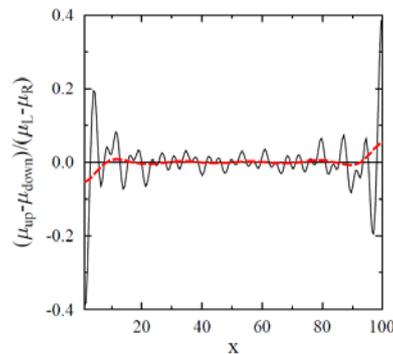


図2: スピン依存電位の断面図。破線は振動の周期程度で空間平均した結果。

- (3). グラフェンにおける不純物散乱による量子干渉効果を明らかにするために、電子系に周期的境界条件を課すことにより、周長の大きなカーボンナノチューブのコンダクタンスを計算した。アームチェア構造とジグザグ構造を対象とし、周長が800サイト程度まで計算を実行した。長距離不純物を一定密度でランダムに配置した系のコンダクタンスを数値計算により得た。平均自由行程より

系が大きければ、散乱が弱い場合は線形応答理論によるボルン近似の結果と振る舞いは一致し、ナノチューブのコンダクタンスから計算される2次元伝導率により、等方的なバルクグラフェンの伝導が十分に議論できることが明らかになった。散乱強度を上げた場合、アンダーソン局在の効果が見られ、伝導率はサイズに依存し、指数関数的現象に転じた。

ただし、不純物ポテンシャル強度の最大値が飛び移り積分の値と同程度になると急激に散乱が増大し、局在が起きた。これは、ディラック点から飛び移り積分程度エネルギーが離れたところに存在する、分散が非常に小さく有効質量の大きな状態と伝導電子が混成することによる。また、ディラック点近傍では平均自由行程が増大するため、上記の混成を回避しながらディラック点近傍の伝導率を議論するにはより大きなサイズで計算を行う必要があることが明らかになった。

グラフェン・カーボンナノチューブにおける光学フォノン散乱を議論するために、電子と光学フォノンの相互作用に対する有効モデルを構築した。一般の電子・格子散乱ではガンマ点近傍のフォノンが支配的だが、特異な電子状態を反映し、K点近傍のフォノンが支配的な役割を果たし、輸送現象や光学応答において電子の谷間散乱を考慮する必要があることを明らかにした。

ナノチューブの光学伝導度において支配的な役割を担う励起子状態は、電子・正孔間クーロン相互作用の短距離成分により多谷構造に起因する電子状態の縮退が解け、励起子微細構造を形成する。不純物散乱により微細構造の最低エネルギー状態にある暗励起子が、ただ一つの光学活性な明励起子状態と混成し、光学活性化することを期待したが、その混成は生じない事を明らかにした。つまり、ナノチューブの光学伝導度に対する不純物散乱の影響は非常に小さい。

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6件)

- ① Y.Tomio and H.Suzuura: “Impurity induced valley mixing of excitons in semiconducting carbon nanotubes”, *Physica E* (査読有) **42**, 783-786 (2010).
- ② H.Suzuura and T.Ando: “Electron lifetime

due to optical-phonon scattering in a graphene sheet”, *J. Phys. Conf. Ser.* (査読有) **150**, 022081 (2009).

- ③ H.Suzuura and N.Yonezawa: “Numerical study on spin Hall effect for the Rashba model in a dirty limit”, *J. Phys. Conf. Ser.* (査読有) **150**, 022080 (2009).

[学会発表] (計15件)

- ① Y.Tomio and H.Suzuura: “Aharonov-Bohm effect on impurity-bound excitons in semiconducting carbon nanotubes”, International Symposium “Nanoscience and Quantum Physics 2011” (nanoPHYS'11), International House of Japan, Tokyo, Japan, January 26–28 (2011), P2-21.
- ② T.Oshima and H.Suzuura: “Chirality dependence of the energy splitting between bright and dark excitons in semiconducting carbon nanotubes”, 30th International Conference on the Physics of Semiconductors, COEX, Seoul, Korea, July 25-30 (2010), P1-207.
- ③ Y.Tomio and H.Suzuura: “Potential range dependence of impurity-bound exciton states in semiconducting carbon nanotubes”, 11th International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Hilton Bonaventure, Montréal, Canada, June 27 – July 2 (2010), Poster Session 3 (Poster Board 159).

[図書] (計3件)

- ① 新井正男, 井上純一, 鈴浦秀勝, 田中秋広, 谷口伸彦 (共同翻訳): 吉岡書店, 凝縮系物理における場の理論上, 2009年, 1-260.

[その他]

ホームページ等

<http://zsg1-ap.eng.hokudai.ac.jp/sg/index.html> (鈴浦グループのホームページ)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

鈴浦 秀勝 (SUZUURA HIDEKATSU)
北海道大学・大学院工学研究院・准教授
研究者番号: 10282683