

人為構造を利用した新奇光機能材料に関する理論的研究

学位論文内容の要旨

材料に人為構造を導入してその性質を制御し新奇な機能を与えるという研究は、これまでに盛んに行われてきた。これらの人為構造材料の研究は学術的な意義のみならず応用上も多くの成果を挙げ、様々なデバイスに結実している。しかしながら、人為構造研究の目的の一つである「材料における新しい機能の創生および高機能化」についての研究は未だ限定的であり、人為構造の持つ可能性が十分生かされていないという問題点がある。本研究では人為構造材料の多彩な光機能を引き出し、従来になく新奇光機能材料を理論的に提案する。

人為構造導入の最も大きな特徴は結晶の持つ周期性の変調である。これにより周期性が作り出していた結晶特有の性質に変化がもたらされる。超格子構造は結晶の周期的ポテンシャルをより大きな周期で変調した構造であり、量子井戸構造は結晶の周期的ポテンシャルを狭い空間領域に限定した構造であるといえることができる。これらの構造は、エネルギーバンドの細分化やエネルギー準位の離散化をもたらす。このような物性変化に基づいた人為構造の新奇機能は多方面から期待されている。例えば、材料の選択則は人為構造の導入により変化することが期待される。選択則は、遷移前後で同一の波数(運動量)を持った状態間でしか光遷移が起こらないという、結晶の並進対称性の帰結であり、光遷移の自由度を強く制限する。人為構造の導入は結晶の並進対称性を変調するため、この選択則を制御することが可能となる。また、一対の電子・正孔から構成される励起子は単一光子生成源となり得るが、励起子特性も人為構造の導入により制御しうる。単一光子は量子通信や量子情報処理において極めて重要であるため、励起子制御および励起子を利用した光機能は今後重要な意義を持つ。

本研究では、次の3点に着目することで人為構造材料の多様な光機能を引き出し、従来になく新奇光機能材料を理論的に提案する。すなわち、(1) 超格子構造による選択則の変更、(2) 誘電性量子井戸構造の提案とその利用、(3) トポロジ概念に基づく新奇人為構造材料の提案である。これらに関する理論的な考察・検討を進め、これにより得られる新物性を解明するとともに、それらを利用した光機能を提案する。(1) では、超格子構造がつくる静電ポテンシャルの周期的変化が特定の電子波数を供給するという点に着目し、間接遷移型半導体において発光再結合確率を高めるという可能性について検討した。(2) では、誘電性量子井戸という新構造を提案し、この系の励起子特性を定量的に議論した。この構造においては、量子井戸構造による閉じ込め効果に加え、障壁領域をクーロン相互作用の制御を行う領域として利用することで、励起子特性の増強が期待できる。(3) では、励起子波動関数のトポロジー制御に注目し、ナノチューブの構造パラメータや環境誘電率を変化させることにより励起子状態のトポロジーを制御する可能性について理論的に検討した。

本論文は、全8章から構成され、各章の概要は以下のとおりである。

第1章は序論であり、本研究の背景と目的について概説する。

第2章では、人為構造による光機能の生成について解説する。最初に人為構造の導入が材料の性質をどのように変えるかについて説明し、それに続き構造導入の効果を利用することにより得られる光機能について概観する。最後に本論文で提案する3つの研究方針について、その着眼点とそれにより期待される結果について解説する。

第3章では、人為構造における電子状態の解析方法について説明する。バンド計算の代表的な方法である有効質量近似法および、強結合近似法の説明を行うとともに、これらを用いて異なる半導体から形成される接合を有する人為構造の解析法について解説する。

第4章では、人為構造における励起子状態の解析方法について説明する。励起子状態は通常一粒子状態としての電子と正孔の複合状態として記述される。ここでは、励起子状態の解析法として多用される直交関数展開による解析方法と変分法を用いた解析方法の2つの方法について解説し、それぞれの特徴について比較を行う。

第5章では、間接遷移型半導体における発光再結合の増強に関する試みについて説明する。間接遷移型半導体は選択則により発光遷移が起こりにくいという問題を有している。この問題に対する一つの解決策として、間接遷移型半導体超格子構造を提案するとともに、その光学的特性が構造の設計によってどのように制御できるか、およびこの構造の最大の特徴である間接遷移型から直接遷移型への転移がどのような構造において起こるかについて理論的に検討した結果について述べる。また、間接遷移型→直接遷移型転移を圧力の印加によって促進することができることを示し、最適な圧力の種類についても述べる。

第6章では、誘電性量子井戸構造という新しいタイプの人為構造の提案を行い、そこで期待される励起子過程の増強について理論計算に基づいた検討結果について述べる。井戸層材料に比べ誘電率の小さい障壁層材料を用いた誘電性量子井戸構造(DQW構造)を提案し、この構造における励起子過程が大きく増強されることを理論的に明らかにした。理論計算の結果、井戸層に約2nm厚のGaAs(誘電率12.6)を用い、障壁層にAl_{0.3}Ga_{0.7}As(誘電率11.8)、AlAs(誘電率10.1)、ZnSe(誘電率7.6)を用いた誘電性量子井戸構造の励起子束縛エネルギーは、それぞれバルクGaAsの3.2、4.4、8.4倍となり、AlAs、ZnSeを障壁層に用いた場合については2次元限界(4倍)を超える束縛エネルギーの増強が得られることを示した。更に、励起子遷移の振動子強度、非線形感受率についてもこの構造の導入により大きく増強されることを示した。

第7章では、人為構造を考える上でこれまであまり考慮されてこなかったトポロジという数学的概念が、人為構造の電子状態・励起子状態を制御する上で果たす役割について理論的に考察する。章の前半では人為構造における一電子状態のトポロジについて考察し、後半で励起子状態のトポロジについて検討することでトポロジ制御のデバイスへの応用に関する提案を行う。具体的には、ナノチューブ構造における励起子波動関数のトポロジ制御について理論解析し、ナノチューブの径と長さを変化させることで励起子波動関数のトポロジが制御できることを示した。また、モデル計算を用いてチューブ内外を埋める材料の誘電率を変化させることにより、励起子の束縛エネルギーや励起子遷移の振動子強度の増強が行えることを明らかにした。更にこれらの結果を踏まえて、誘電率制御を利用した励起子の空間制御デバイスを提案した。

第8章は結論である。本論文で行った研究について総括するとともに、得られた結果のもたらす意義、今後の展望について述べる。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 矢久保 考 介

副 査 教 授 丹 田 聡

副 査 教 授 武 藤 俊 一

副 査 准教授 戸 田 泰 則

副 査 客員教授 畠 中 憲 之 (トポロジー理工学

教育研究センター)

学 位 論 文 題 名

人為構造を利用した新奇光機能材料に関する理論的研究

材料に人為構造を導入してその性質を制御し新奇な機能を与えるという研究は、これまでに盛んに行われてきた。これら人為構造材料の研究は、学術的な意義を有するのみならず応用上も多くの成果を実らせ、様々なデバイスに結実している。しかし、人為構造研究の目的の一つである「材料における新たな機能の創生と高機能化」に関し言えば、依然その展開は限定的であり、人為構造の持つ可能性が十分生かされていないという問題点がある。人為構造導入の最も大きな特徴は結晶の持つ周期性の変調であり、周期性に起因した結晶特有の多くの性質が人為構造材料では変化することになる。例えば、結晶の並進対称性の変調により、量子遷移に関する選択則を制御することが可能となる。また、一対の電子・正孔から構成される励起子は単一光子生成源となり得るが、励起子特性も人為構造の導入により制御しうる。単一光子は量子通信や量子情報処理において極めて重要であるため、励起子制御および励起子を利用した光機能は今後重要な意義を持つ。本論文は、(1) 超格子構造による遷移則の変更、(2) 誘電性量子井戸構造の提案とその利用、(3) トポロジーの概念に基づく新奇人為構造材料の提案、の3点に着目することで人為構造材料から多様な光機能を引き出し、従来になかった新奇光機能材料を理論的に提案している。また、これらに関する理論的な考察・検討を進め、これにより得られる新物性を解明している。(1) では、超格子構造がつくる周期的静電ポテンシャルの空間的振動がもたらす特定の電子波数の供給を利用し、間接遷移型半導体において発光再結合確率を高めるという可能性について検討している。(2) では、誘電性量子井戸という新構造を提案し、この系の励起子特性を定量的に検討している。この構造においては、量子井戸構造による閉じ込め効果に加え、障壁領域をクーロン相互作用の増強領域として利用することで、励起子特性の向上が期待できることを示している。(3) では、励起子波動関数のトポロジー制御に注目し、ナノチューブの構造パラメータや環境誘電率を変化させることにより励起子状態のトポロジーを制御する可能性について理論的に検討している。

本研究により、以下の事実が明らかとなった。(1) 間接遷移型半導体材料で超格子構造を構成することにより、光遷移の強度が飛躍的に上昇する。またこの超格子構造に対して適当な方向

に圧力を加えることにより、光遷移強度の更なる増強が可能となる。(2) 誘電性量子井戸 (DQW) 構造の導入により、励起子の束縛エネルギーは大きく増大し、GaAs/AlAs-DQW 構造、および GaAs/ZnSe-DQW 構造においては室温で安定な励起子が実現できるとともに、励起子の光学特性が向上する。(3) ナノチューブ構造において、チューブ長およびチューブ径を変化させることにより励起子波動関数のトポロジー制御が実現できる。更にナノチューブを埋め込む材料の誘電率を変化させることによっても励起子波動関数のトポロジー制御が可能となる。

本論文は以下のように構成されている。第 1 章は序論であり、人為構造材料に関する研究の背景および問題点を概説している。第 2 章では、人為構造の導入が材料の性質をどのように変化させるかについて説明し、その効果を利用することにより得られる光機能について概観している。第 3 章では、バンド計算の代表的な方法である有効質量近似法および、強結合近似法の説明を行うとともに、これらを用いて異なる半導体から形成される接合を有する人為構造の解析法について解説している。第 4 章では、人為構造における励起子状態の解析方法、特に直交関数展開による解析方法と変分法について解説している。第 5 章では、間接遷移型半導体超格子構造を提案するとともに、その光学的特性の構造設計および圧力印加による制御について理論的に検討している。第 6 章では、誘電性量子井戸構造という新しいタイプの人為構造の提案を行い、そこで期待される励起子過程の増強について理論計算に基づいた検討結果について述べている。第 7 章では、ナノチューブ構造における、励起子波動関数のトポロジー制御について理論検討した結果について解説するとともに、この結果を利用した励起子デバイスの提案についても述べている。第 8 章では本論文の結果、およびそれがもたらす意義と今後の展望について述べている。

これを要するに著者は、人為構造における新奇光機能の創生に関する新知見を与え、材料物性における新たな可能性を示すとともに新奇光機能デバイスの実現に向けた多くの有用な提案を行ったものであり、応用物理学に対して貢献するところ大なるものがある。

よって著者は北海道大学博士 (工学) の学位を授与される資格あるものと認める。