

氏 名	Yuanzhao Yao
学 位 の 種 類	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	博 乙 第 2873 号
学位授与年月日	平成 30年 4月 30日
学位授与の要件	学位規則第4条第2項該当
審 査 研 究 科	数理物質科学研究科
学 位 論 文 題 目	Theoretical Study of the Electronic and Optical Properties of Low-dimensional Semiconductor Nanostructures with Complex Geometries (複雑な形状の低次元半導体ナノ構造の電子的および光学的特性の理論的研究)

主 査	筑波大学 教授(連係大学院)	工学博士	迫田 和彰
副 査	筑波大学 教授(連係大学院)	理学博士	胡 暁
副 査	筑波大学 准教授	博士(理学)	池沢 道男
副 査	筑波大学 准教授	博士(理学)	野村 晋太郎

論 文 の 要 旨

審査対象論文は、量子リング・量子ドット複合構造やナノテトラポッドなどの比較的複雑な形状を有する半導体ナノ構造について、有効質量近似に基づく数値計算，ならびに，群論や摂動論に基づく解析計算を行って，電子準位と励起子準位の特性，および，それらに起因する光学特性を理論的に検討したものである。

まず，第1章では，本論文で考察する半導体ナノ構造の従来の研究状況について述べている。具体的には，ナノテトラポッド，量子リング，および，量子リング・量子ドット複合構造の作製に関する実験研究を紹介し，また，アハラノフ・ボーム効果とバンド構造のディラックコーンを紹介している。

第2章では，本論文で用いた数値計算法について説明している。電子準位については，閉じ込めポテンシャルを導入した有効質量近似を用いて有限要素法による数値計算を行っている。これに加えて，半導体ヘテロ構造の解析では，結晶格子定数の差に起因する構造歪みを考慮し，さらに，変形ポテンシャルを用いて電子準位を解析したと述べている。配置間相互作用の方法による励起子準位の解析で必要な，クーロンエネルギーと交換エネルギーの算出にはモンテカルロ法を用い，計算速度向上のために重点サンプリング法を採用している。励起子による光吸収スペクトルの計算は，電気双極子近似とフェルミの黄金律に基づいて行っている。その際，吸収スペクトルの均一広がりと不均一広がりを考慮して， δ 関数的な吸収線をローレンツ曲線で置き換えたと述べている。

第3章では、ナノテトラポッドの解析結果について詳述している。前章に記された手法にしたがって電子準位と励起子準位、および、吸収スペクトルを計算し、モスクワ大学等の測定結果と良い一致が得られたことを報告している。これに加えて、群論による解析を行って、光吸収に寄与する励起子準位(いわゆる bright exciton)の同定も行っている。

第4章では、コア・シェル型ナノテトラポッドヘテロ構造の解析結果について述べている。構造歪みの算出に加えて、変形ポテンシャルの電子準位への影響を考察し、さらに、励起子吸収スペクトルを計算して、モスクワ大学等の測定結果と比較的良好一致が得られたことを報告している。

第5章では、GaAs2重量子リングの励起子発光で観測された、大きなシュタルクシフトについて理論的に考察している。原子間力顕微鏡による試料構造の実測データを使って、2重量子リングの電子準位を外部静電場の存在の下、有限要素法で算出した。試料サイズが比較的大きく、配置間相互作用の方法でクーロン相互作用を取り込むことが難しいため、クーロン相互作用を無視した近似計算ではあるが、実測値に近いシュタルクシフトが得られている。これに加えて、エネルギーの高い電子準位では、同じ空間対称性をもつ準位間の反交差に伴って、電子エネルギーや電気分極の非単調な電場依存性を見出している。

第6章では、量子リング・量子ドット複合構造について励起子アハラノフ・ボーム効果を考察している。量子リング面に垂直に静電場と静磁場を印加することを仮定し、円筒対象な試料構造を想定して計算を進め、実験観測が可能と考えられる、比較的緩い実験条件の仮定の下で、励起子アハラノフ・ボーム効果の実現が期待できると結論している。具体的には、まず、2次元リング構造モデルについて解析計算と数値計算を行い、想定した磁場強度の範囲(30テスラ以下)において、磁場に関する一次摂動計算がたいへん良い近似値を与えることを示した。その上で、配置間相互作用の方法による励起子エネルギーの数値計算結果と解析計算を比較することにより、同じ軌道角運動量をもつ電子・ホール対のクーロン相互作用による混成と、これに伴う励起子準位間の反交差が、従来、励起子アハラノフ・ボーム効果が観測できなかった原因であることを明らかにしている。この知見に基づいて、量子リング・量子ドット複合構造のリング面に垂直に電場を印加することで、電子・ホール間の距離を大きくしてクーロン相互作用を弱め、また、電子とホールの軌道半径の差を大きくすることで、励起子アハラノフ・ボーム効果が達成できることを発見している。その際に必要な電場は120kV/cm、磁場は4テスラであることから、十分に実験観測が可能であると結論している。

第7章では、量子ドットと量子リングについて励起子と荷電励起子を考察している。まず、球形量子ドットについて、前章までの励起子を対象とした配置間相互作用による計算手法を、正または負に帯電した励起子(トリオン)に拡張し、トリオンの結合エネルギーのドット半径依存性を算出して、既に報告された量子モンテカルロ法による計算値とよく一致することを示すことで、計算精度を確認している。その上で、量子リング中の励起子とトリオン準位の磁場依存性を計算して、励起子については従来の報告と同様、アハラノフ・ボーム効果が見られないこと、および、トリオンについては単体の荷電粒子と同じく、基底状態についてアハラノフ・ボーム効果が実現されることを明らかにしている。

第8章では、周期的に膜厚が変調された半導体量子井戸について、電子準位のサブバンドにディラックコーンが形成可能であることを解析計算と数値計算で明らかにしている。具体的には、群論と $k \cdot p$ 摂動法を用いて、電子準位の偶然縮退によるディラックコーン形成の必要十分条件を導出し、これを有限要素法による数値計算で確認している。計算では正方格子状と3角格子状の周期変調を仮定し、後者の場合

にはディラックコーンに加えて、2重ディラックコーンも形成できることを見出している。また、サブバンドの電子の有効質量が、縮退するべき2つのサブバンドのエネルギー差に比例することから、たいへん小さな有効質量や大きな易動度が実現できることを明らかにしている。

最後に、第9章では本論文の主要な結論について総括するとともに、将来の実験研究による検証の見通しや理論研究の発展の見通しについて述べている。

審 査 の 要 旨

〔批評〕

本学位論文の研究は、近年作製が可能になってきた複雑な形状をもつ半導体ナノ構造について、電子構造と光学特性の解明を目指す意欲的な研究である。有効質量近似と有限要素法による電子準位の数値解析に加えて、配置間相互作用の方法によりクーロン相互作用を解析することで、実測値と比較可能な励起子のエネルギーと遷移双極子モーメントを算出した点が評価される。また、群論を用いて構造の対称性から励起子の対称性を導き、電気双極子遷移の選択則を導出することで、光吸収スペクトルと励起子遷移の関係を明瞭に解明した点も評価される。これによって、共同研究先のモスクワ大学等で得られた、ナノテトラポッドの実測データと良い一致を示す光吸収スペクトルが理論計算によって再現され、それぞれの吸収ピークが帰属できた点が高く評価される。

また、長年の懸案であった量子リングの励起子アハラノフ・ボーム効果について、これが観測されない理由がクーロン相互作用による電子・ホール対状態の混成であることを、解析計算と数値計算を組み合わせることで明瞭に示した点が評価される。さらに、ごく最近、物質・材料研究機構で作製に成功した量子ドット・量子リング複合体を利用することで、実験観測可能な条件下で励起子アハラノフ・ボーム効果の実現が期待できることを理論計算で示し、将来の実験観測に向けて明瞭な指針を与えた点が高く評価される。

さらに、フォトニック結晶やメタマテリアルで発見された電磁波のバンド構造のディラックコーンについて、これが電子系のバンド構造でも達成できることを解析計算と数値計算で解明したことが高く評価される。電子系のディラックコーンでは小さな有効質量と大きな易動度の実現が期待されることから、将来の高性能デバイス開発の端緒に成り得る研究成果である。

〔結論〕

平成30年 3月 9日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において、審査委員全員の出席のもと、本論文について著者に説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって合格と判定された。

よって、著者は博士(工学)の学位を受けるのに十分な資格を有するものと認める。