

半導体量子ドット列を用いた物質設計
 Material Design Based on Semiconductor Quantum Dots

N T T 物性科学基礎研究所 高柳英明

Hideaki Takayanagi, NTT Basic Research Laboratories

2002/09/25 **NTT**

京都大学低温物質科学研究センター
 開設記念シンポジウム

**基礎科学
 ナノサイエンス**

**半導体量子ドット列を用いた
 物質設計**

NTT物性基礎部 NTT物性科学基礎研究所
 赤崎直志 田村浩之 高柳英明
 原田剛一 松田健一
 A. Richter 白石賢二(筑波大物理)

あらすじ


- ドット列を用いて設計した人工結晶
 - 量子ドット系 (人工原子, 分子, 結晶)
 - 平坦バンドを持ったリープおよびかごめ(亀目)格子の設計
 - ドット列を平坦バンド系に使うことの利点
- 量子ドット列における平坦バンド強磁性
 - 強磁性状態の安定性
 - かごめ格子における磁場効果
 - 量子結線ネットワークによるかごめ格子の設計
- 量子ドット列における超伝導性
- 試料・実験
- まとめ

半導体ドットを用いた人工材料

単一ドット
 “人工原子”における原子としての性質
 → 殻構造, フント則, 近藤効果

結合ドット
 “人工分子”における分子としての性質
 → 結合, 反結合状態によるレベル分裂

ドット列
 ドットをブロック材として使う“人工結晶”
 → 様々な格子設計
 → 平坦バンド強磁性



平坦バンドを持つ格子構造

リープ格子 Bipartite lattice かごめ格子 Line graph

単一粒子のバンドダイアグラム

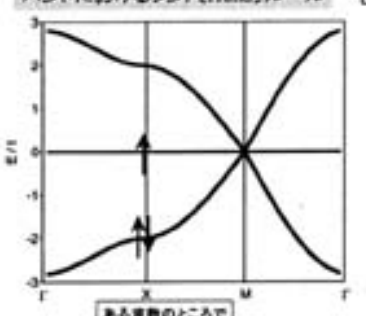
強く結ばれた電子の近似 Tight-binding approximation

2D Lieb lattice 2D Kagome lattice

平坦バンドが半分充填された時、強磁性が出現する。

E. H. Lieb, PRL 62, 1201 ('89) A. Mielke, J. Phys. A 24, L63 ('91)

バンドにおけるフント(Hund)ルール (弱相関領域)



ある波数のところで

平坦バンド強磁性の探索

炭素ネットワーク
 Shima and Aoki, PRL 71, 4389 ('93)
 Fujita, Umeda, and Yoshida, PRB 51, 13778 ('95)

グラファイトシート(ナノグラファイト)
 Fujita, Wakabayashi, Nakada, and Kusakabe, JPSJ 65, 1930 ('94)
 Kusakabe, Wakabayashi, Igami, Nakada, and Fujita, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 369, 443 ('97)

Ga あるいは As 原子結線
 Arita, Karaki, Aoki, Yajima, Tsukada, Watanabe, Ichimaru, Onogi, and Hashizume, PRB 57, R6854 ('98)
 Yajima, Tsukada, Watanabe, Ichimaru, Sewa, Onogi, and Hashizume, PRB 60, 1456 ('99)
 Okada and Oshiyama, JIAP 39, 415 ('00)

ドット列における平坦バンド強磁性の提案

Tamura, Shiraiishi, and Takayanagi, Jpn. J. Appl. Phys. 39 (2000) L241.

平坦バンド強磁性の証拠は見つかっていない。

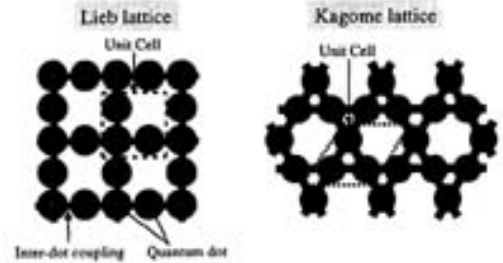
- 合成あるいは作製の困難さ。
- 充填は自由には変えられない。
- ヤーン・テラー効果は通常平坦バンドの縮重をとく。

ドット列を用いた平坦バンド強磁性の可能性

- 超微細加工技術の進展。
- 様々な格子設計が可能。
- 充填は自由に変えられる。
- ヤーン・テラー効果は無い。

John-Teller effect: 電子のエネルギー準位の縮重がとけて、安定化された状態が実現すること。

2次元(2D)リーブ、かごめドット列



最近接ドット間の電子遷移

Origin of Word "Kagome"

kago-me
kago (籠) = basket
me (目) = mesh (or pattern)



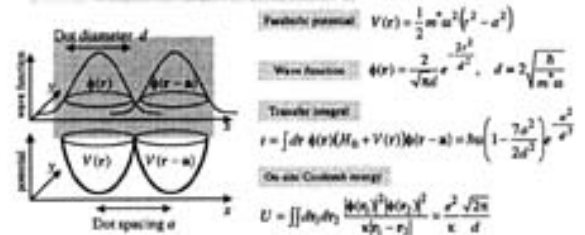
ドット列に対するハバードモデル

ハバードハミルトニアン

$$H = -t \sum_{(i,j), \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

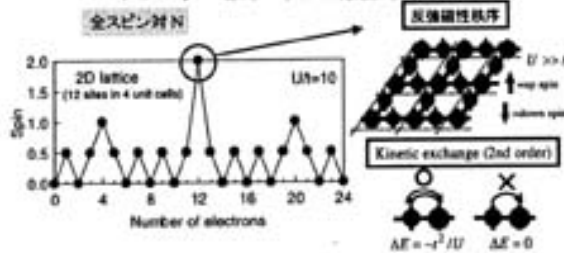
(i,j) is a pair of the nearest-neighbor sites
 U is the on-site Coulomb repulsion
 $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$

放物線ポテンシャル中のドットモデル



リーブ格子における高いスピン状態

ハバードハミルトニアンの厳密対角化



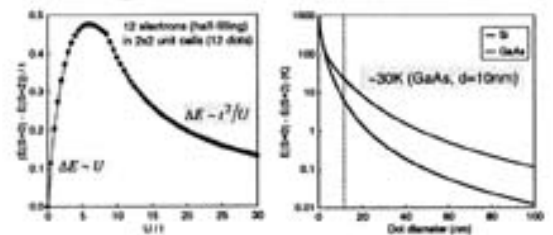
リーブの定理 Lieb's theorem [E.H. Lieb: PRL 62 (1989) 1201]

2粒子格子のバンドが半充填のとき(1サイトに1電子)、基底状態は $S = |N_\uparrow - N_\downarrow|/2$ (N_α は α サイト数)の大きさのスピンを持つ。

高スピン状態の安定性

Tamura, Shiraiishi, and Takayanagi, (unpublished)

Energy difference $\Delta E = E(S=0) - E(S=2)$ at half-filling



(Interdot spacing a) / (diameter d) = 1.5

GaAs: $m^* = 0.07, \kappa = 12$

Si: $m^* = 0.2, \kappa = 13$

ドット列における平坦バンド強磁性の提案

Tamura, Shiraiishi, and Takayanagi, Jpn. J. Appl. Phys. 39 (2000) L241.

平坦バンド強磁性の証拠は見つかっていない。

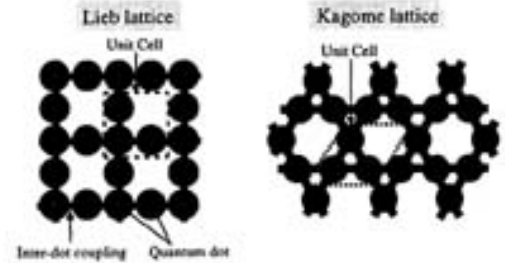
- 合成あるいは作製の困難さ。
- 充填は自由には変えられない。
- ヤーン・テラー効果は通常平坦バンドの縮重をとく。

ドット列を用いた平坦バンド強磁性の可能性

- 超微細加工技術の進展。
- 様々な格子設計が可能。
- 充填は自由に変えられる。
- ヤーン・テラー効果は無い。

John-Teller effect: 電子のエネルギー準位の縮重がとけて、安定化された状態が実現すること。

2次元(2D)リーブ、かごめドット列



最近接ドット間の電子遷移

Origin of Word "Kagome"

kago-me
kago (籠) = basket
me (目) = mesh (or pattern)



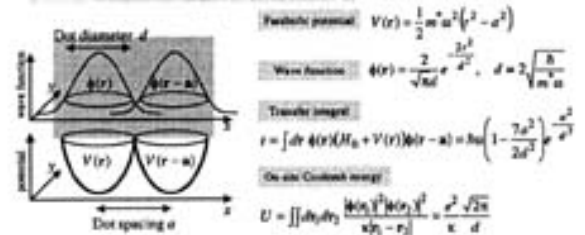
ドット列に対するハバードモデル

ハバードハミルトニアン

$$H = -t \sum_{(i,j),\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

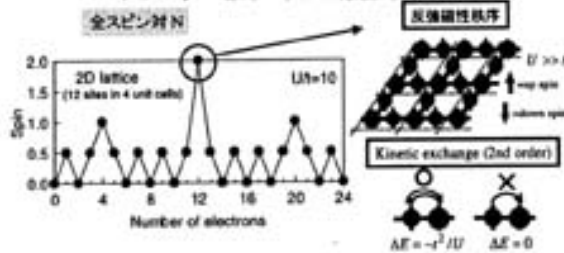
(i,j) is a pair of the nearest-neighbor sites
 U is the on-site Coulomb repulsion
 $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$

放物線ポテンシャル中のドットモデル



リーブ格子における高いスピン状態

ハバードハミルトニアンの厳密対角化



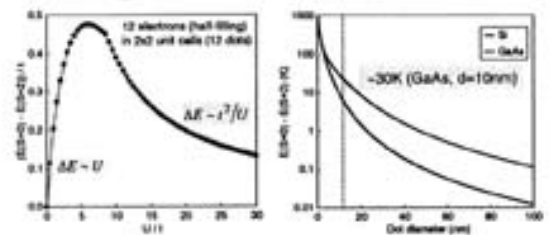
リーブの定理 Lieb's theorem [E.H. Lieb: PRL 62 (1989) 1201]

2粒子格子のバンドが半充填のとき(1サイトに1電子)、基底状態は $S = |N_\uparrow - N_\downarrow|/2$ (N_α は α サイト数)の大きさのスピンを持つ。

高スピン状態の安定性

Tamura, Shiraiishi, and Takayanagi, (unpublished)

Energy difference $\Delta E = E(S=0) - E(S=2)$ at half-filling

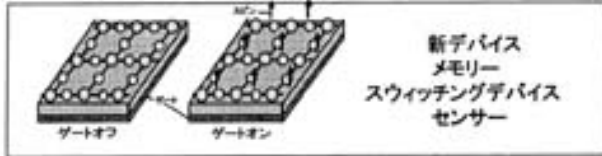


(Interdot spacing a) / (diameter d) = 1.5

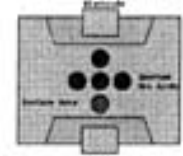
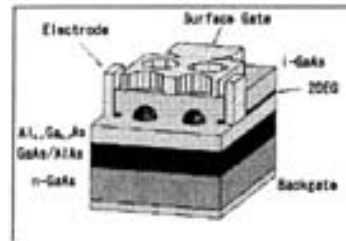
GaAs: $m^* = 0.07$, $\kappa = 12$

Si: $m^* = 0.2$, $\kappa = 13$

半導体マグネット



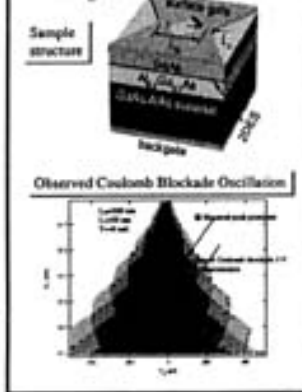
従来のLSI技術との高い整合性



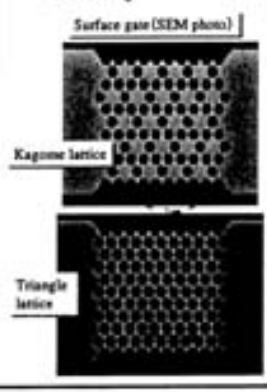
	Thickness
Ti/Al	(Surface Gate)
i-GaS	300 nm
Al _x O _y /Al _x	20 nm
GaAs/AlAs	2.5nm(2.5nm x10)
n-GaS	(Substrate)
AuGeNiAu	(Back Gate)

初期状態で、2次元電子ガス(2DEG)には、電子が無い。バックゲートにかかる電圧を増やして行くと、電子数は増加し、ドットあたり1個の電子が入る。

Single Dot



Dot Array



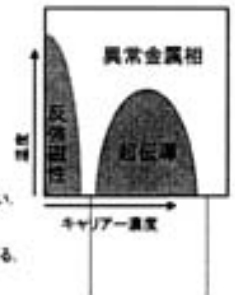
電子機構による超伝導

通常のBCS超伝導体

1. 欠配アライメント
2. 超伝導体の近くに反強磁性相が存在
⇒ 反強磁性スピン揺らぎの影響を反映
3. 異常金属相
電気伝導、磁気的性質、スピンギャップ等

電子機構による超伝導の可能性
⇒しかし、フォノン機構の可能性も完全に無視出来ない。
量子ドット超格子では、フォノンの影響は小さいと思われる。
⇒より確率的な電子機構の超伝導

銅酸化物高温超伝導体の相図

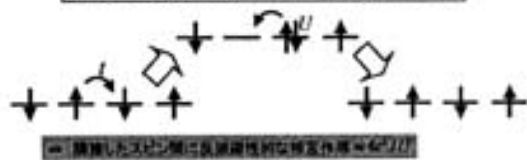


ハバード模型における超伝導

ハバード模型

- ・銅酸化物の低エネルギー動紀を表現
- ・逆向きのスピンをもつ2電子間のオンサイト相互作用を取り入れた基本的な模型。

ハーフフィリング状態でのハバード模型における超伝導プロセス



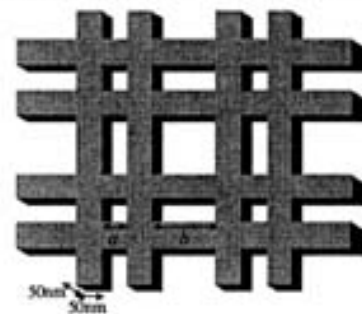
⇒1隣接したスピン間に反強磁性的相互作用⇒SU(2)

- ハバード模型に対する揺らぎ交換(FLEX)近似(自己無撞着なRPAに対応)
- ・強いスピン揺らぎを取り扱うのに優れている。
- ・超伝導転移温度に対する良い近似(銅酸化物に対して100K程度の値)

Winkler et al., PRL 82, 961 (1999)

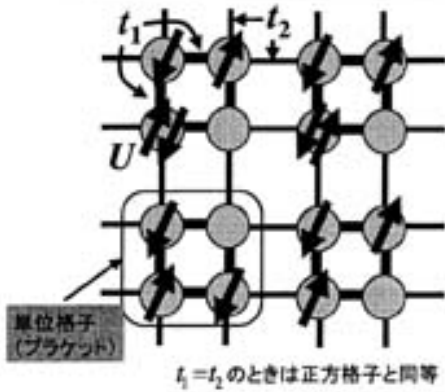
量子細線ネットワークを用いた設計

In_{0.95}Ga_{0.05}As中に埋められたInAs量子細線(ノリアーの高さ:0.17eV)

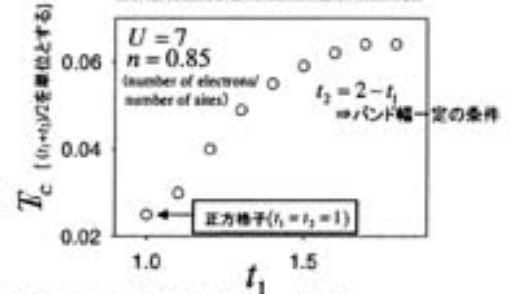


50nm
50nm
正方格子の場合a=b=61.1nm
ブラケット格子の場合a=38.8nm and b=83.4nm

ブラケット格子上のハバードモデル



超伝導転移温度の格子依存性



我々の InAs 量子細線ネットワークでは:
 $T_c \approx 40 \text{ mK}$ (正方格子)
 $T_c \approx 90 \text{ mK}$ (ブラケット格子) \Rightarrow 十分実現可能な温度

ハバード模型の T_c はどのように決まるか?

1. FLEX近似を用いたセルフコンシステント計算
 \rightarrow 温度グリーン関数 $G(\vec{k})$ とスピン感受率 $\chi(\vec{k})$ の決定

2. エリアシュベルグ方程式を解く
 $\rightarrow T_c$ と超伝導のギャップ関数 $\phi(\vec{k})$ の決定

エリアシュベルグ方程式

$$\phi(\vec{k}) = - \sum_{\vec{k}'} \frac{V_{\sigma}(\vec{k}-\vec{k}')}{2\xi(\vec{k})} \tanh\left(\frac{\xi(\vec{k}')}{2k_B T}\right) \phi(\vec{k}')$$

$$V_{\sigma} \approx - \frac{\langle \chi(\vec{k}-\vec{k}') \phi(\vec{k}) \phi(\vec{k}') \rangle}{\langle \phi(\vec{k})^2 \rangle} \quad (\dots) : \text{フェルミ面までの期待値}$$

一般に、大きい T_c を得るには大きい V_{σ} が必要。

まとめ

- 半導体ドット列を用いた材料設計。
- ドット列における平坦バンド強磁性を議論した。
- 半導体材料をドット列強磁性に使う利点を指摘した。
- ドット列を用いた他の人工材料を提案した。