修士学位論文要約（平成29年３月）

グラフェン内電子間相互作用のモデリングと
その非平衡キャリアダイナミクスへの影響に関する研究

小松　竜大

指導教員：尾辻　泰一，　研究指導教員：佐藤　昭

Study on a Numerical Model for Energy Dispersion Correction by Electron-Electron Interaction in Doped Graphene and Its Influence of Non-Equilibrium Carrier Dynamics

Tatsuhiro KOMATSU

Supervisor: Taiichi OTSUJI,　Research Advisor: Akira SATOU

To investigate the Auger scatterings in graphene terahertz (THz) lasers based on the interband population inversion in its linear, gapless energy dispersion, a numerical model which calculates both the band renormalization and the band broadening due to the electron-electron interaction in doped graphene at finite temperature is developed. This model is based on the Hartree-Fock approximation and random phase approximation for the electron-electron interaction, and the width of the band broadening is represented as the spectral function of electrons. The increasing of the band broadening as the carrier temperature increases is observed by numerical calculation. This result indicates that the electron-electron interaction in clean graphene induces the Auger scatterings and their rates have a strong temperature dependence. Conversely, to suppress the Auger scatterings in graphene THz lasers, the carrier temperature must be kept as low as possible.

1. はじめに

テラヘルツ波は光波と電波の中間に位置し、直進性と透過性をあわせもった電磁波である。現在、この特性を利用してテラヘルツ波のイメージング、非破壊検査、超高速無線通信への応用研究が活発に行われている。テラヘルツ波技術実用化のためには室温動作、高出力かつ小型化が可能なデバイスの実現が不可欠であり、そのための新材料としてグラフェンが注目を集めている。グラフェンは六員環構造を有する２次元材料であり、ギャプレスかつ線形な分散関係を有する。この特異な性質によって、グラフェン中のキャリアがテラヘルツ帯光子エネルギー領域においてバンド間反転分布を形成することが可能となり、テラヘルツ帯でのレーザー発振が期待できる [1)2)]。このようなグラフェン・テラヘルツレーザーを実現するうえで最も重要な課題は、Auger 散乱現象と呼ばれる非発光のキャリア再結合および増倍過程を抑制することである。Auger 散乱現象はグラフェンキャリアの反転分布形成を阻害する。Auger 散乱現象は、線形分散においてはキャリアのエネルギーと運動量の保存則によって禁制される [3)]。しかし、欠陥や不純物によってエネルギー分散がブロードニングした場合、エネルギーと運動量保存則の成立条件が緩和され、Auger 散乱の発生が無視できないものとなる [4)]。また、高品質なグラフェンの場合であっても、高強度の光ポンピングによって光生成キャリア密度が大きい場合、多体効果を伴う電子間相互作用によってバンドの補正とブロードニングが起こりうる。従って、グラフェンのAuger 散乱現象を解明するためにはキャリアの相互作用を考慮したバンド分散モデルの構築が必要となる。本研究では、完全な反転分布状態に対する評価に先立ち、モデル化がより単純な電子ドープされたグラフェンに対しモデル構築を行った。加えてキャリアの擬平衡化過程においてキャリア温度が数千Kに増加することを考慮し、温度依存性を評価した。それらの結果をもとに反転分布下の Auger 散乱現象について議論を行った。

2. 線形分散補正モデル

本研究では電子ドープされたグラフェンに対して電子間相互作用を考慮したモデル構築を行い、そのキャリア温度に対する依存性を検討した。構築したモデルは Hartree-Fock 近似および乱雑位相近似(RPA)を採用し、有限温度に拡張した。この近似手法では、電子間のクーロンポテンシャルは動的に遮蔽され、その大きさは誘電関数によって表現される。また、電子間相互作用の影響は自己エネルギー項によって記述される。自己エネルギーの実部はバンド分散の補正を、虚部はバンド分散のブロードニング

をそれぞれ表す。本モデルの評価では、擬フェルミ準位を 107 meV、背景比誘電率を 2.5 に設定した。

3. 誘電関数と自己エネルギー虚部の温度依存性

はじめに、図1に誘電関数の逆数の虚部をキャリア温度 77K および 800K に対して示した。縦軸、横軸はそれぞれ擬フェルミ準位で規格化した電子の波数 q、周波数 ω である。図 1 中の輝線の領域はプラズモン分散に由来する鋭いピークである。このプラズモン分散は温度の増加によってブロードニングしていることが確認できる。

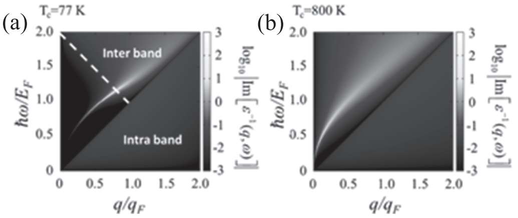

図 1　(a) T_c = 77 K と(b) T_c = 800K での誘電関数逆数の虚部.

図 2 では擬フェルミ準位で規格化した電子の周波数 ω に対する、自己エネルギーの虚部の結果を 77K および 800K ついて示した。自己エネルギー虚部はプラズモンの影響によって温度の増加とともにブロードニングしていることが確認できる。特にプラズモン励起に由来する鋭いピークの位置と幅は強い温度依存性を持っている。

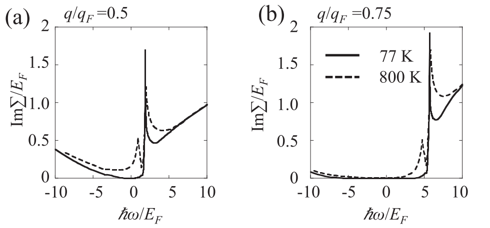

図 2　(a) q/q_F = 0.5(a)および(b) 0.75 における T_c = 77 K(破線)と T_c = 800 K(実線)での自己エネルギー虚部（伝導帯）.

4. スペクトル関数の温度依存性

図 3 に伝導帯のスペクトル関数を示した。ここで自己エネルギー実部は無視できるものと仮定した(On-Shell 近似)。図 3 からバンド分散のブロードニングがキャリアの温度増加によって増大していることが確認できる。また、このようなバンド分散のブロードニング効果は運動量保存則の成立条件を緩和し、Auger 散乱の発生を促進する。以上の結果から、高品質グラフェンであっても電子間相互作用の影響で Auger 散乱が発生すること、そしてその確率はキャリア温度が増加することによって劇的に増加する事が示唆される。今回の結果はドープグラフェンに対しての評価だが、このモデルは反転分布グラフェンにも拡張することが可能である。

本研究の結果をもとに反転分布グラフェンでの Auger 散乱を考えた場合、散乱確率を抑制するためにはキャリア温度を可能な限り低く抑えることが必要不可欠であることが導かれる。そのためには、光学励起の場合はフォトンエネルギーの弱い光源を使う事が必要である。また、より効果的にキャリア温度を抑制 [1]する方法は、p-i-n 構造によるキャリア注入構造の導入である。この構造の場合、注入するキャリアのエネルギーは p、n 領域のゲートバイアスを操作することにより、meV オーダーで制御可能である。

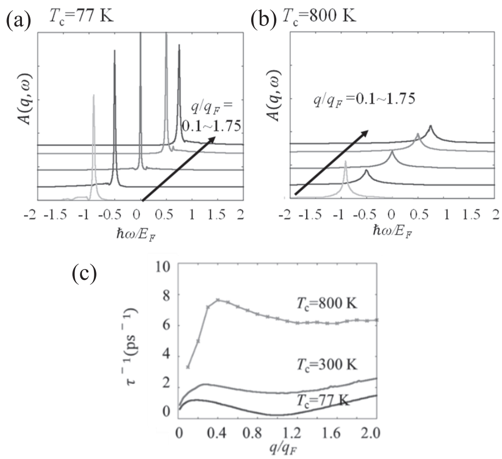

図 3　(a)T_c = 77 K と(b) T_c = 800K のスペクトル関数および(c)バンド幅の温度依存性（伝導帯）.

5. まとめ

ドープグラフェンの線形エネルギー分散に対し、電子間相互作用によるバンド補正のモデルの構築を行い、バンドブロードニングの温度依存性を定量的に評価した。その結果、温度増加に伴ってバンドブロードニングが増大することが明らかになった。この結果から、温度増加に伴って Auger 散乱レートが増大することが示唆される。Auger 散乱を抑制するためには、光学励起の場合は低エネルギーフォトンでの励起によってキャリア温度を抑制することが必要であり、さらには電流注入がより効果的である。

文献

1)　M. Ryzhii and V. Ryzhii, *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 46, no. 8, pp. L151–L153, 2007.

2)　V. Ryzhii, M. Ryzhii, and T. Otsuji, *J. Appl. Phys.*, no. 8, pp. 083114-1-4, 2007.

3)　M. S. Foster and I. L. Aleiner, *Phys. Rev. B*, vol. 79, no. 8, pp. 1–14, 2009.

4)　D. Brida, *et al.*, *Nat. Commun.*, vol. 4, no. May, p. 1987, 2013.