

平成22年 5月 31日現在

研究種目：若手研究(B)
研究期間：2007～2009
課題番号：19740180
研究課題名(和文) グラフェンにおける量子輸送現象の理論
研究課題名(英文) Theory of quantum transport in graphenes
研究代表者
越野 幹人(KOSHINO MIKITO)
東京工業大学・大学院理工学研究科 助教
研究者番号：60361797

研究成果の概要(和文)：

グラファイト(黒鉛)の原子層1層をグラフェンと呼ぶ。近年単層また少数層グラフェンが実験的に実現され、その性質に関する研究が世界規模で進められつつある。これらの物質の基礎的な性質である電気伝導特性、光吸収特性、反磁性効果(磁石を反発する効果)について詳細に研究し、層の数や積層様式に依存して様々に異なった性質を系統的に理解するとともに、通常物質とは大きく異なった様々な新しい効果を見出した。

研究成果の概要(英文)：

Graphene is a one layer of graphite, or a one-atom-thick sheet composed of carbon atoms arranged in honeycomb lattice. Recently, single- and multilayer graphenes are experimentally realized, and its unconventional electronic properties have been extensively studied. This research project closely studied basic electronic properties including conductivity, light absorption and diamagnetism (repelling magnet) in graphenes. It achieved a theory which systematically describes different natures depending on the numbers of layers as well as stacking manner, and also found novel features peculiar to graphenes which are markedly different from those in usual materials.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,300,000	0	1,300,000
2008年度	900,000	270,000	1,170,000
2009年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総計	3,100,000	540,000	3,640,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性I

キーワード：半導体、グラフェン

1. 研究開始当初の背景

グラファイトは面状に結合した炭素原子が幾重にも積層した結晶であり、それを構成する一つ一つの層はグラフェンと呼ばれる。グラフェンは単独では不安定で自然界には存在しないとされてきたが、近年一層ないし数層のグラフェンを作成することが可能になり、様々な物性の測定が可能になった。理論的には、グラフェンは通常の金属とは異なった相対論的粒子に類似した電子構造を持つことが知られている。このような特異な系において伝導度、誘電率、磁化率といった基本的な物性がどのようなものなるのかは明らかでなく、理論、実験両面からの研究が始まった段階であった。

2. 研究の目的

グラフェンにおける量子輸送現象に特に焦点を当て、実験事実の理論的解明、また新たな輸送現象の探究を目的とする。

(1) グラフェンにおける電気伝導と局在効果：相対論的粒子に類似した電子構造がもたらす電気伝導、局在効果の特異性を解明する。

(2) バルク伝導と端伝導
試料端における電子状態を明らかにし、それがもたらす電気伝導特性を明らかにする。

(3) 強磁場中のグラフェン：今日磁場中における量子ホール効果と金属絶縁体転移について探求する。

(4) 複数層グラフェン：層数によってさまざまに異なる複数層グラフェンの電子構造を明らかにし、電気伝導現象を系統的に理解する。

3. 研究の方法

(1) 局在効果：不純物を含む有限系の波動関数を厳密対角化によって数値計算を求める。Thouless 数の試料サイズに対する依存性から局在長を決定する。

(2) 強磁場の量子ホール効果：ハミルトニアンの数値対角化によって不純物を含む系での波動関数を求め、これに久保公式を用いてホール伝導度を得る。その試料サイズ依存性より局在長を決定する。

(3) 試料端の状態の解析：
具体的な端の形状における波動関数を数値計算で求める。さらにランダウア公式を適用することで端状態がもたらす伝導を調べる。

(4) 複数層グラフェンの伝導
有効質量近似でバンド構造を求め、その層数依存性を明らかにする。自己無撞着ボルン近似と厳密対角化の方法を併用し、複数層グラフェンの伝導現象の系統的に調べる。

4. 研究成果

(1) 多層グラフェンの電子構造
原子層の数やその積層の様式に依存した多様な電子構造を持つ多層グラフェンについて、その電子物性を系統的に理解することに貢献した。

①多層グラフェンの電子構造の分割
一般のN層のグラフェンの電子構造が、単層または2層グラフェンに類似した小構造に分割できることを示した。これにより多層グラフェンの様々な物理量の計算が単層または2層のそれに帰結され、層数依存性の系統的な議論が可能になった。

②多層グラフェンの軌道反磁性
単層グラフェンはフェルミエネルギー零で大きな反磁性を持つことが知られている。多層グラフェンにおいては、層数が奇数の場合にのみ、単層グラフェンに類似したバンドが存在し、これが大きな軌道反磁性をもたらすことを示した

③多層グラフェンの磁気光学特性
多層グラフェンは上述の通りいくつかの疑似的2層グラフェン構造を持ち、光吸収はそれぞれの和で与えられることを示した。これは光学吸収測定から層数を判定するのに用いることができる重要な発見である。さらに磁場中の電子構造を調べ、磁気光学特性を計算した。吸収エネルギーが磁場の大きさの平方根に比例する特徴的なピークの一群が層数が奇数のものみに現れ、それが単層型バンドからの寄与であることを示した。

(2) 多層グラフェンの電気伝導特性。

①最小伝導度
複数層グラフェンは一般にゼロギャップのバンド構造を持つが、価電子帯と伝導帯が接する点での伝導度（最小伝導度）の値は理論的に興味深く、また実験的にも検出されうる重要な量である。2,3層グラフェンの電気伝導を自己無撞着ボルン近似と呼ばれる手法で計算し、接点直上において電子の速度の期待値がゼロになるのにもかかわらず、最小伝導度は e^2/h に比例する普遍的な値にとどまることを示した。

②2層グラフェンにおける局在効果
一般に不純物ポテンシャルは波動関数に局在効果をもたらす、とくに低温の電気伝導で重要となる。ここでは2層グラフェンにおける局在効果の研究を行った。2層グラフェンでは層と垂直方向に電場を印加することでバンドギャップを与えることができる。ギャップが無い状態では全ての電子状態は局在するが、ギャップを増大していく過程で局在長が発散する量子相転移が存在することを見出した。この現象は、2層グラフェンのバンド構造に非自明な幾何学的位相（ベリ

一位相)が内在することに起因した、一種の量子ホール転移として解釈できる。バンド構造のトポロジカルな側面が電気伝導に顕著に現れる重要な現象である。

(3) グラフェンにおける遮蔽効果

多層グラフェンにゲート電場を印加する場合、バンド構造の変調による電場の遮蔽効果が非常に重要になる。この問題について以下のことを明らかにした。

①2層グラフェンにおける遮蔽効果との格子振動への影響

ゲート電場下の2層グラフェンに対して、クーロン相互作用を取り入れた自己無撞着な計算により電場下でのバンド構造を決定した。これによりゲート電場は遮蔽効果により半分程度に減少することが明らかになった。さらにゲート電場が電子格子相互作用を通して格子振動に及ぼす影響を調べた。電場が上下層の間の対称性を破ることにより、格子振動の対称モード、反対称モードが強く混合することが示された。

(ii) 遮蔽効果の積層様式依存性

グラファイトには通常のABA積層のほかにABC積層と呼ばれる構造が存在し、その電子構造は大きく異なる。ABA, ABC多層グラフェンに対してゲート電場下での遮蔽効果と電子構造への影響について詳しく調べた。通常のABA積層での遮蔽効果はトーマスフェルミ近似によってよく記述され、その強さはおおむね状態密度によって決まることを示した。一方のABCグラフェンでは、表面状態に起因するバンドがフェルミエネルギー近傍で極めて大きな状態密度を持つため非常に強い分極効果をもたらし、外部電場を強く遮蔽することを示した。また電場を印加することにより本来接している価電子バンドと伝導バンドの間にギャップが開き、その幅は外部電場の大きさに対して非線形な依存性を示すことを明らかにした。外部電場によるギャップ制御はエレクトロニクスへの応用の観点から極めて重要である。

(4) グラフェンの巨大な反磁性

単層グラフェンの持つ強大な反磁性の起源を解明するべく、空間的に非一様な磁場の下でのグラフェンの電子応答を計算した。特定の長さスケールを持たない線形バンド構造に起因し、外部磁場と相似な磁場分布を誘起する磁場鏡像効果を見出した。また原子層一層からなる物質にもかかわらずグラフェンと外部の磁石との間は巨視的な力が働くことを示した。

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10件)

(1) Mikito Koshino,
Interlayer screening effect in graphene multilayers with ABA and ABC stacking
Physical Review B, 81, 125304 1-7 (2010).
査読有

(2) Mikito Koshino and Edward McCann,
Parity and valley degeneracy in multilayer graphene
Physical Review B, 81, 115315 1-6, (2010)
査読有

(3) Mikito Koshino, Yasunori Arimura,
and Tsuneya Ando
Magnetic field screening and mirroring in graphene,
Physical Review Letters, 102, 177203 1-4,
(2009)
査読有

(4) Tsuneya Ando and Mikito Koshino,
Optical Absorption by Interlayer Density Excitations in Bilayer Graphene,
Journal of Physical Society of Japan, 78, 104716 1-7, (2009)
査読有

(5) Mikito Koshino and Edward McCann,
Trigonal warping and Berry's phase $N\pi$ in ABC-stacked multilayer graphene,
Physical Review B, 80, 165409 1-8, (2009)
査読有

(6) Tsuneya Ando and Mikito Koshino,
Field Effects on Optical Phonons in Bilayer Graphene,
Journal of Physical Society of Japan, 78, 034709 1-8, (2009)
査読有

(7) Mikito Koshino,
Electron delocalization in bilayer graphene induced by an electric field,
Physical Review B, 78, 155411 1-5 (2008)
査読有

(8) Mikito Koshino and Tsuneya Ando,
Magneto-optical properties of multilayer graphene
Physical Review B, 77, 115313 1-8, (2008)
査読有

(9) Mikito Koshino and Tsuneya Ando,
Orbital diamagnetism in multilayer
graphenes: systematic study with the
effective mass approximation
Physical Review B, 76, 085425 1-11, (2007)
査読有

(10) Mikito Koshino and Tsuneya Ando,
Diamagnetism in disordered graphene
Physical Review B, 75, 235333 1-8, (2007)
査読有

[学会発表] (計 11 件)

(1) 越野幹人, 安藤恒也
グラフェンの反磁性に対するギャップの効果—擬スピン常磁性から3次元ディラック系へ
日本物理学会 2010 年春季大会,
2010 年 3 月 21 日 岡山大学

(2) Mikito Koshino
Giant Diamagnetism in Graphenes
7th International Conference of
Computational Methods in Sciences and
Engineering,
2009 年 10 月 2 日 ギリシャ・ロードス島

(3) 越野幹人
グラフェンにおける磁場の遮蔽効果と鏡像効果
日本物理学会 2009 年秋季大会,
2009 年 9 月 26 日 熊本大学

(4) Mikito Koshino
Parallel and perpendicular optical
absorptions in bilayer graphene,
18th International Conference on
Electronic Properties of
Two-Dimensional Systems,
2009 年 7 月 23 日 神戸国際会議場

(5) Mikito Koshino
Optical properties of multilayer
graphenes
14th International Conference on Narrow
Gap Semiconductors and Systems
2009 年 7 月 16 日 東北大学

(6) Mikito Koshino
Gate-field effect in multilayer graphenes
2009 American Physical Society March
Meeting,
2009 年 3 月 16 日 Pittsburgh, USA

(7) 越野幹人, 安藤恒也
単層・多層グラフェンにおける光学特性
日本物理学会 2008 年秋季大会,
2008 年 9 月 20 日 岩手大学

(8) Mikito Koshino
Electronic properties of graphene
multilayers
ICTP Conference - Graphene Week 2008,
2008 年 8 月 25 日 Trieste, Italy

(9) Mikito Koshino,
Electron localization in gapped bilayer
graphenes with disorder
2008 APS Annual March Meeting
2008 年 3 月 11 日, Morial Convention Center
in New Orleans, USA.

(10) Mikito Koshino,
Diamagnetism in graphene monolayer and
multilayers,
Electronic Properties of Two-Dimensional
Systems (EP2DS-17),
2007 年 7 月 17 日, Magazzini del Cotone in
Genova, Italy

(11) Mikito Koshino,
Orbital magnetization in graphenes,
Narrow Gap Semiconductor (NGS-13),
2007 年 7 月 11 日, University of Surrey

6. 研究組織

(1) 研究代表者
越野 幹人 (KOSHINO MIKITO)
東京工業大学・大学院理工学研究科・助教
研究者番号: 60361797

(2) 研究分担者
なし

(3) 連携研究者
なし