

2012年度 修士論文

リップルのあるグラフェンの磁気抵抗に対する理論的研究

Theoretical Study on Magnetoresistance of Rippled Graphene

中央大学大学院 理工学研究科  
博士課程前期課程 物理学専攻  
源馬 和行

# 目次

<b>第 I 部</b>	<b>グラフェンの基礎物性</b>	<b>3</b>
<b>第 1 章</b>	<b>グラフェン</b>	<b>4</b>
1.1	六角形格子構造 . . . . .	4
<b>第 2 章</b>	<b>タイトバインディング法</b>	<b>6</b>
2.1	ハミルトニアン . . . . .	6
2.2	バンド構造 . . . . .	6
2.3	ディラックコーン . . . . .	8
2.4	グラフェンの波動関数 . . . . .	9
<b>第 3 章</b>	<b>量子ホール効果</b>	<b>11</b>
3.1	荷電粒子のハミルトニアン . . . . .	12
3.2	磁場中のシュレーディンガー方程式 . . . . .	13
3.3	磁場中のディラック方程式 . . . . .	14
3.4	磁場中グラフェンの量子ホール効果 . . . . .	15
<b>第 II 部</b>	<b>グラフェンの磁気抵抗効果</b>	<b>17</b>
<b>第 4 章</b>	<b>グラフェンの磁気抵抗効果</b>	<b>18</b>
4.1	ランダム磁場効果 . . . . .	18
4.1.1	グラフェン表面のリップル . . . . .	18
4.1.2	ランダム磁場効果 . . . . .	19
<b>第 5 章</b>	<b>磁気抵抗に対する Lundeberg-Folk 公式</b>	<b>20</b>
5.1	Lundeberg-Folk 公式の導出 . . . . .	21
5.1.1	幾何学的ベクトルポテンシャル . . . . .	21
5.1.2	散乱行列 . . . . .	22
5.1.3	ボルツマン方程式 . . . . .	24

5.1.4	Lundeberg-Folk 公式 . . . . .	25
<b>第 6 章</b>	<b>相関関数の仮定</b>	<b>27</b>
6.1	指数関数型相関関数 . . . . .	27
6.1.1	高キャリア密度領域での展開 . . . . .	28
6.1.2	低キャリア密度領域での展開 . . . . .	29
6.2	ガウシアン型相関関数 . . . . .	29
6.2.1	高キャリア密度領域での展開 . . . . .	30
6.2.2	低キャリア密度領域での展開 . . . . .	31
<b>第 7 章</b>	<b>実験データとの比較</b>	<b>32</b>
7.1	リップルの高さと同相長の算出 . . . . .	35
<b>付 録 A</b>	<b>特殊関数の定義</b>	<b>36</b>
<b>付 録 B</b>	<b>電気抵抗 <math>\rho</math> と緩和時間 <math>\tau</math> の関係式</b>	<b>38</b>

## 第I部

# グラフェンの基礎物性

# 第1章 グラフェン

グラフェンはさまざまな炭素同素体の一つであり，キャリアが質量を持たない相対論的粒子として振る舞うことが理論物理で注目されている．グラフェンは炭素原子が二次元平面に六角形蜂の巣格子に共有結合している層状構造をもつ．その厚さは原子一個分であり，キャリアの運動は二次元面内に制限されている．グラフェン中のキャリア移動度は非常に高く，高速デバイスなどへの応用が期待されている．グラフェンの存在は1947年にWallaceにより予言されていた [1] が，単層グラフェンの分離は長い間不可能であると考えられていた．しかし2004年に，マンチェスター大学のNovoselov, Geimらは粘着テープでグラファイト（黒鉛）を層方向に劈開し，SiO<sub>2</sub> 基盤に貼り付けるといったシンプルな手法でグラフェンの剥離に成功した [2]．この業績により二人は2010年にノーベル物理学賞を受賞した．これを機に，より盛んに世界中でグラフェンの研究が行われている．

## 1.1 六角形格子構造

グラフェンは六角形構造の炭素原子から作られるシート状の物質である．炭素原子間の結合は  $2s, 2p_x, 2p_y$  が混成した  $sp^2$  混成軌道をつくり結合している．そのため，結合に寄与していない  $2p_z$  軌道の電子が電気伝導に関わってくる．

図1.1のように，この六角形格子は三角形の部分格子  $A, B$  の重ね合わせとして表せる．同じ炭素原子間を結ぶ格子ベクトルはそれぞれ

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}) \quad (1.1)$$

となる．ここで炭素原子間の距離  $a \simeq 0.142\text{nm}$  である．これらの逆格子ベクトルは

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}) \quad (1.2)$$

となる．ブリルアンゾーンは  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, -\mathbf{b}_1, -\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2, -\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2$  の六つのベクトルに垂直であり，それぞれの中点を通る線分に囲まれた六角形である．その内，二つの

角がディラック点と呼ばれる．

$$\mathbf{K} = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \mathbf{K}' = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \quad (1.3)$$

実空間において三つの最近接ベクトルは

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2} (1, \sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2} (1, -\sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = -a(1, 0) \quad (1.4)$$

のように書け，同じ部分格子の原子の位置を表す第二近接ベクトルは

$$\boldsymbol{\delta}'_{\pm 1} = \pm \mathbf{a}_1, \quad \boldsymbol{\delta}'_{\pm 2} = \pm \mathbf{a}_2, \quad \boldsymbol{\delta}'_{\pm 3} = \pm (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \quad (1.5)$$

となる．

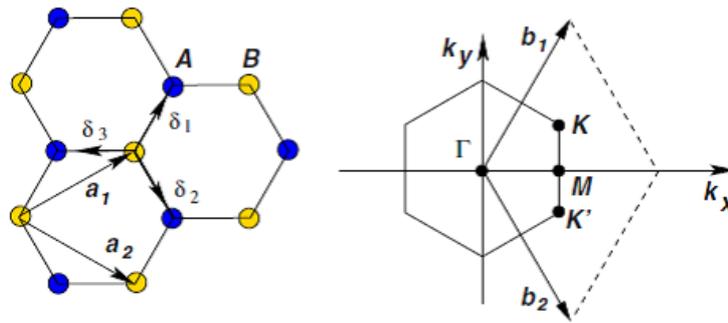


図 1.1: 左図はグラフェンの六角形格子構造であり，格子ベクトル  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  と最近接ベクトル  $\boldsymbol{\delta}_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  を示す．右図は波数空間中のブリルアンゾーンおよびディラック点  $K$ ,  $K'$  を示す．

## 第2章 タイトバインディング法

物質中の電子は原子核に強く束縛されているという考え方から，結晶中の原子の波動関数を用いて記述する方法をタイトバインディング法という．

### 2.1 ハミルトニアン

$a^\dagger(\mathbf{r}), a(\mathbf{r})$  および  $b^\dagger(\mathbf{r}), b(\mathbf{r})$  をそれぞれ対応する部分格子中の炭素原子  $A, B$  の位置  $\mathbf{r}$  に電子を生成および消滅させる演算子とする．最近接原子のホッピングハミルトニアン  $\mathcal{H}_1$ ，第二近接ホッピングハミルトニアン  $\mathcal{H}_2$  は以下のように書ける．

$$\mathcal{H}_1 = -t \sum_{\mathbf{R} \in A} \sum_{i=1}^3 [a^\dagger(\mathbf{R}) b(\mathbf{R} + \boldsymbol{\delta}_i) + b^\dagger(\mathbf{R} + \boldsymbol{\delta}_i) a(\mathbf{R})] \quad (2.1)$$

$$\mathcal{H}_2 = -t' \left[ \sum_{\mathbf{R} \in A} \sum_{i=-3}^3 a^\dagger(\mathbf{R} + \boldsymbol{\delta}'_i) a(\mathbf{R}) + \sum_{\mathbf{R} \in B} \sum_{i=-3}^3 b^\dagger(\mathbf{R} + \boldsymbol{\delta}'_i) b(\mathbf{R}) \right] \quad (2.2)$$

したがって，第二近接ホッピングまで考慮したハミルトニアン  $\mathcal{H}$  は

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 \quad (2.3)$$

となる．ここで  $t$  は最近接ホッピングエネルギー， $t'$  は第二近接ホッピングエネルギーである．

### 2.2 バンド構造

まず最初に最近接ホッピングハミルトニアン  $\mathcal{H}_1$  のエネルギー固有値を考える．最近接ホッピングハミルトニアン (2.1) に生成消滅演算子のフーリエ変換

$$a(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} a(\mathbf{k}), \quad b(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} b(\mathbf{k}) \quad (2.4)$$

を用いて運動量空間で記述する .

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a^\dagger(\mathbf{k}) & b^\dagger(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \phi_1(\mathbf{k}) \\ \phi_1^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}) \\ b(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

ここで  $\phi_1(\mathbf{k}) = -t \sum_{j=1}^3 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j)$  とした . エネルギー固有値は  $E_1(\mathbf{k}) = \pm |\phi_1(\mathbf{k})|$  であり ,  $\alpha_1 = \frac{1}{2}k_x a$  ,  $\beta_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}k_y a$  として次のように展開できる .

$$\begin{aligned} E_1(\mathbf{k}) &= \pm t \left| \sum_{j=1}^3 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j) \right| \\ &= \pm t \left| [\exp(-i\alpha_1 - i\beta_1) + \exp(-i\alpha_1 + i\beta_1) + \exp(2i\alpha_1)] \right| \\ &= \pm t \left| [\cos(\alpha_1 + \beta_1) - i \sin(\alpha_1 + \beta_1) + \cos(\alpha_1 - \beta_1) \right. \\ &\quad \left. - i \sin(\alpha_1 - \beta_1) + \cos 2\alpha_1 + i \sin 2\alpha_1] \right| \end{aligned}$$

ここで右辺の実部を  $X$  , 虚部を  $Y$  とする .

$$\begin{aligned} E_1(\mathbf{k}) &= \pm t \sqrt{X^2 + Y^2} \\ &= \pm t \sqrt{X^2 + Y^2} \end{aligned} \quad (2.6)$$

$X^2$  と  $Y^2$  はそれぞれ加法定理を用いて

$$\begin{aligned} X^2 &= \{ \cos(\alpha_1 + \beta_1) + \cos(\alpha_1 - \beta_1) + \cos 2\alpha_1 \}^2 \\ &= 4 \cos^2 \alpha_1 \cos^2 \beta_1 + 4 \cos 2\alpha_1 \cos \alpha_1 \cos \beta_1 + \cos^2 2\alpha_1 \\ Y^2 &= \{ -\sin(\alpha_1 + \beta_1) - \sin(\alpha_1 - \beta_1) + \sin 2\alpha_1 \}^2 \\ &= 4 \sin^2 \alpha_1 \cos^2 \beta_1 - 4 \sin 2\alpha_1 \sin \alpha_1 \cos \beta_1 + \sin^2 2\alpha_1 \end{aligned}$$

と書け , これらの和は

$$\begin{aligned} X^2 + Y^2 &= 4 \cos^2 \beta_1 + 4 \cos \beta_1 (\cos 2\alpha_1 \cos \alpha_1 - \sin 2\alpha_1 \sin \alpha_1) \\ &= 3 + 2 \cos 2\beta_1 + 4 \cos 3\alpha_1 \cos \beta_1 \end{aligned}$$

となる . 以上より (2.6) 式は

$$\begin{aligned} E_1(\mathbf{k}) &= \pm t \sqrt{3 + 2 \cos 2\beta_1 + 4 \cos 3\alpha_1 \cos \beta_1} \\ &= \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})} \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos \sqrt{3}k_y a + 4 \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2}k_y a \right) \cos \left( \frac{3}{2}k_x a \right) \quad (2.8)$$

と表せる．同様に，第二近接ホッピングハミルトニアン (2.2) にフーリエ変換 (2.4) を用いる．

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a^\dagger(\mathbf{k}) & b^\dagger(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_2(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \phi_2^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}) \\ b(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

ここで  $\phi_2(\mathbf{k}) = -t' \sum_{j=-1}^3 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}'_j)$  であり，エネルギー固有値は  $E_2 = \phi_2$  となる． $\alpha_2 = \frac{3}{2}k_x a$  ,  $\beta_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}k_y a$  を用いて

$$\begin{aligned} E_2(\mathbf{k}) &= -t' \sum_{j=-1}^3 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}'_j) \\ &= -t' [\exp(-i\alpha_2 - i\beta_2) + \exp(i\alpha_2 + i\beta_2) + \exp(-i\alpha_2 + i\beta_2) \\ &\quad + \exp(i\alpha_2 - i\beta_2) + \exp(-2i\beta_2) + \exp(2i\beta_2)] \\ &= -t' [2 \cos(\alpha_2 + \beta_2) + 2 \cos(\alpha_2 - \beta_2) + 2 \cos 2\beta_2] \\ &= -t' [4 \cos \alpha_2 \cos \beta_2 + 2 \cos 2\beta_2] \\ &= -t' f(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.10)$$

(2.7) 式と (2.10) 式の結果を用いると第二近接サイトまでのホッピングを考慮したハミルトニアン (2.3) のエネルギー固有値は

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})} - t' f(\mathbf{k}) \quad (2.11)$$

と書ける．このエネルギーバンド構造を図 2.1 に示す．

## 2.3 ディラックコーン

(2.11) 式で与えられるエネルギー固有値について，最近接ホッピングエネルギー  $t$  は約 2.8eV，第二近接ホッピングエネルギー  $t'$  は約 0.1eV であると見積もられている [9]．ここでは最近接ホッピングのみを考え， $t' = 0$  とする．

微小なベクトル  $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$  ,  $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}|$  を用いてディラック点 (1.3) 近傍でエネルギー固有値を展開する．

$$\begin{aligned} E_{\pm}(\mathbf{K} + \mathbf{q}) &= \pm t \left[ 3 + 2 \cos \left( \frac{2}{3}\pi + \sqrt{3}aq_y \right) + 4 \cos \left( \frac{1}{3}\pi + \frac{\sqrt{3}}{2}aq_y \right) \cos \left( \pi + \frac{3}{2}aq_x \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= \pm t \left[ 3 - \cos 2\beta - \sqrt{3} \sin 2\beta - 2 \cos \alpha \left( \cos \beta - \sqrt{3} \sin \beta \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= \pm t \left[ 3 - \cos^2 \beta + 1 - 2\sqrt{3} \sin \beta \cos \beta - 2 \cos \alpha \cos \beta + 2\sqrt{3} \cos \alpha \sin \beta \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

ここで  $\alpha = \frac{3}{2}q_x a$  ,  $\beta = \frac{\sqrt{3}}{2}q_y a$  とした .  $\theta \ll 1$  のとき  $\sin \theta \simeq \theta - \frac{1}{6}\theta^3$  ,  $\cos \theta \simeq 1 - \frac{1}{2}\theta^2$  と近似できる .

$$\begin{aligned} E_{\pm}(\mathbf{K} + \mathbf{q}) &\simeq \pm t [\alpha^2 + 3\beta^2]^{1/2} \\ &= \pm t \left[ \frac{9}{4}a^2 q_x^2 + \frac{9}{4}a^2 q_y^2 \right]^{1/2} \\ &= \pm \hbar v_F |\mathbf{q}| \end{aligned} \quad (2.12)$$

$v_F = \frac{3ta}{2\hbar}$  であり , フェルミ速度と呼ばれる . (2.12) 式はディラック点を頂点とする円錐を示し , それをディラックコーンと呼ぶ .

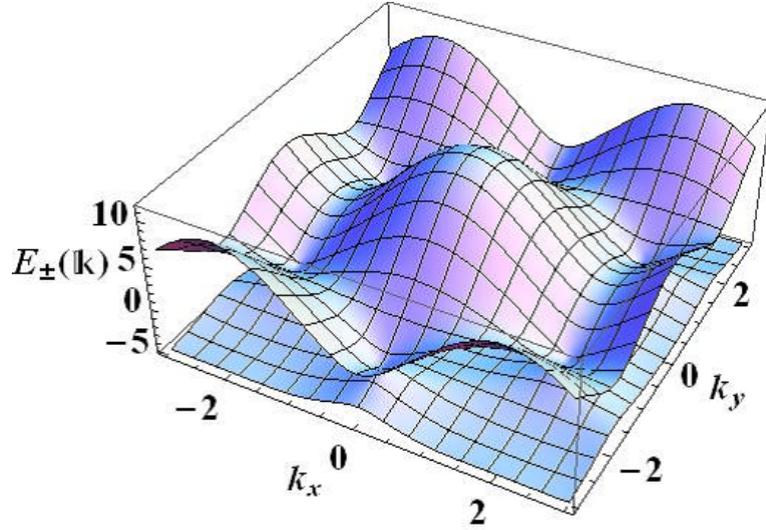


図 2.1: (2.11) 式で表されるエネルギーバンドの図 . 上下のバンドはディラック点で接し , その近傍では分散関係が (2.12) 式で示される円錐形となる .

## 2.4 グラフェンの波動関数

生成消滅演算子のフーリエ変換 (2.4) を用いてハミルトニアン (2.3) を次のように書き換える [8, 9] .

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\simeq -i\hbar v_F \int dx dy \left[ \hat{\Psi}_1^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \hat{\Psi}_1(\mathbf{r}) + \hat{\Psi}_2^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla \hat{\Psi}_2(\mathbf{r}) \right] \\ &= \langle \hat{\Psi}_1 | \mathcal{H}_{\mathbf{K}} | \hat{\Psi}_1 \rangle + \langle \hat{\Psi}_2 | \mathcal{H}_{\mathbf{K}'} | \hat{\Psi}_2 \rangle \end{aligned} \quad (2.13)$$

$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  ,  $\boldsymbol{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$  であり , 以下のパウリ行列を用いて表される .

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

また  $\hat{\Psi}_i^\dagger = (a_i^\dagger, b_i^\dagger)$  ,  $i = 1, 2$  であり ,  $K$  点と  $K'$  点近傍でのハミルトニアンを

$$\mathcal{H}_K = -i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \quad (2.15)$$

$$\mathcal{H}_{K'} = -i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla \quad (2.16)$$

とした . したがって ,  $K$  点近傍でのシュレーディンガー方程式は

$$-i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

と表せる . これをディラック方程式

$$(-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

と比較すると , 質量が 0 で光速  $c$  がフェルミ速度  $v_F$  である系の粒子 ( massless Dirac Fermion ) を表すディラック方程式とみなせる . エネルギー固有値は行列式  $\det(\mathcal{H}_K - EI) = 0$  を解くことによって求められる . 波数演算子 ( $\mathbf{k} = -i\nabla$ ) を用いて

$$\det \left[ \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} - E \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] = 0$$

$$E^2 - \hbar^2 v_F^2 (k_x^2 + k_y^2) = 0$$

$$E = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}| \quad (2.19)$$

と表せ , これは (2.12) 式の結果と一致する .  $\psi(\mathbf{r})$  は粒子の位置  $\mathbf{r} = (x, y)$  における二成分平面波であり

$$\psi_\pm(\mathbf{k}; \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_k/2} \\ \pm e^{i\theta_k/2} \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

と表せ ,  $\pm$  の符号はエネルギー固有値  $E = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|$  に対応する . ここで  $V$  は系の体積であり

$$\theta_k = \arctan \left( \frac{k_y}{k_x} \right) \quad (2.21)$$

は波数空間中の角度である .

## 第3章 量子ホール効果

量子ホール効果とは、低温において二次元電子系に対し強い磁場を印加すると電子の軌道運動が量子化され、明瞭なプラトーを示す離散的なランダウ準位が形成される現象である。1985年に Klitzing は量子ホール効果の実験的発見によりノーベル物理学賞を受賞した。(2.18) 式で見たようにグラフェン中でキャリアは質量ゼロディラックフェルミオン (massless Dirac Fermion) として振る舞い、通常の二次元系とは異なるランダウ準位を形成する。その結果、キャリアの不純物散乱が少ない高移動度のグラフェンにおいて、通常の量子ホール効果に比べてホール伝導度が  $1/2$  だけ異なる半整数量子ホール効果が観測されている [7, 9]。

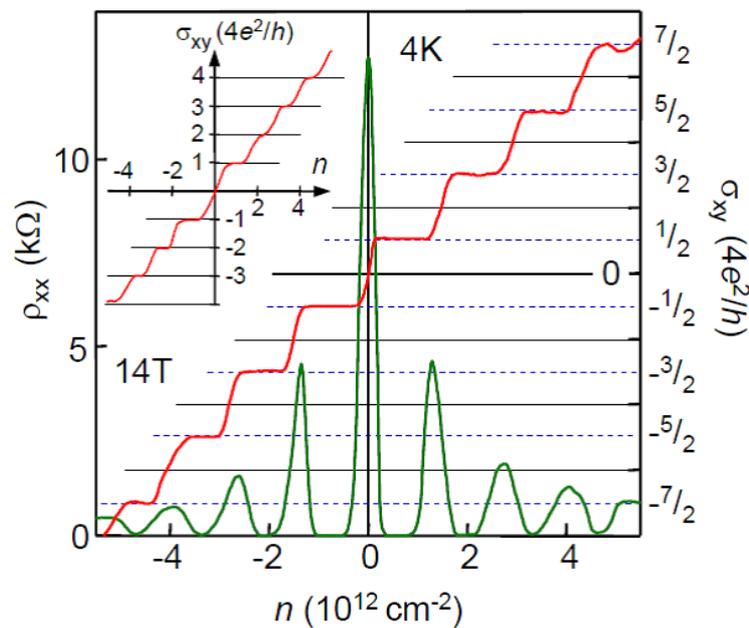


図 3.1: グラフェンにおける量子ホール効果。ホール伝導度  $\sigma_{xy}$  が半整数でプラトーを示す。

### 3.1 荷電粒子のハミルトニアン

電磁場中を運動する電荷  $q$  の荷電粒子は

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + q\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}\right)$$

のローレンツ力を受ける．ただし  $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r})$  ,  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{r})$  はそれぞれ粒子の位置  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  での電場と磁場を意味する．次のような電磁ポテンシャル

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A}\end{aligned}$$

を導入する． $\phi$  ,  $\mathbf{A}$  はそれぞれスカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルであり，粒子が受ける力は

$$\mathbf{F} = q\left(-\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\right) + q\left\{\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times (\nabla \times \mathbf{A})\right\}$$

と表せる．ここで，ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  の時間微分は  $x$  方向について

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial x}$$

と書ける．この微分の書き換えとベクトル三重積の公式を用いると電磁場中で荷電粒子の受ける力は

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= q\left(-\nabla\phi - \frac{d\mathbf{A}}{dt} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \nabla\mathbf{A}\right) + q\left\{\nabla\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \mathbf{A}\right) - (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A}\right\} \\ &= q\left(-\frac{d\mathbf{A}}{dt} - \nabla\phi\right) + q\nabla\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \mathbf{A}\right)\end{aligned}\tag{3.1}$$

となる．

ラグランジアン  $\mathcal{L}$  と位置  $\mathbf{r}$  の時間微分  $\dot{\mathbf{r}}$  を用いたラグランジュ方程式に (3.1) のローレンツ力を次のように適用する．

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{r}} + q\left\{-\frac{d\mathbf{A}}{dt} - \nabla\phi + \nabla\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \mathbf{A}\right)\right\} = 0$$

ここでポテンシャル  $U = -q\phi + q(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$  を導入してラグランジュ方程式を書き直すと

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{r}} - \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial\dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial U}{\partial\mathbf{r}}\right) &= 0 \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial(\mathcal{L} - U)}{\partial\dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial(\mathcal{L} - U)}{\partial\mathbf{r}} &= 0\end{aligned}$$

となり，ローレンツ力によってラグランジアン  $\mathcal{L}$  が  $\mathcal{L}' = \mathcal{L} - U$  に変更される．したがって，磁場中の荷電粒子のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  は次のように書ける．

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \mathcal{L}' \\ &= \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi\end{aligned}\quad (3.2)$$

ここで粒子の質量を  $m$ ，運動量を  $p$  とした．

### 3.2 磁場中のシュレーディンガー方程式

運動が二次元方向に制限されている場合の磁場中における電子の運動を考える．電子の電荷は  $-e$  であり，ベクトルポテンシャルをランダウゲージ  $\mathbf{A} = B(-y, 0)$  とする．電子に対するシュレーディンガー方程式は (3.2) 式より次のように書ける．

$$\frac{1}{2m} \left\{ \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - eBy \right)^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\} \psi(x, y) = E\psi(x, y)$$

波動関数は， $x$  方向の固有状態と  $y$  の関数の積である

$$\psi(x, y) = e^{ikx} \phi(y) \quad (3.3)$$

という変数分離された形の定常解を持つ．この解を用いるとシュレーディンガー方程式は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 (y^2 - 2l_B^2 k y + l_B^4 k^2) \right\} \phi(y) = E\phi(y)$$

と書ける．ここでサイクロトロン振動数  $\omega = \frac{eB}{m}$ ，磁気長  $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$  とした．長さの次元を持つ量として  $y_0 = l_B^2 k$  を定義すると

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 (y - y_0)^2 \right\} \phi(y) = E\phi(y)$$

と表される．この式は  $y_0$  を平衡位置とする  $y$  方向の一次元調和振動子に対するシュレーディンガー方程式と見ることができる．したがって，エネルギー固有値は  $N$  を整数として

$$E = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) \quad (3.4)$$

となる．この離散的な固有状態をランダウ準位という．

### 3.3 磁場中のディラック方程式

磁場中の質量零ディラックフェルミオンに対するディラック方程式は(2.17)式に(3.2)式の磁場効果を加えた次の式のように表すことができる．

$$v_F \{ \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\hbar \nabla + e\mathbf{A}) \} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

同様に，この式に(3.3)式の定常解を代入すると

$$v_F \begin{bmatrix} 0 & \hbar k - eBy - \hbar \partial_y \\ \hbar k - eBy + \hbar \partial_y & 0 \end{bmatrix} \phi(y) = E\phi(y)$$

となる．ここでディラックフェルミオンに対するサイクロトロン振動数  $\omega_c = \sqrt{2} \frac{v_F}{l_B}$ ，無次元量  $\xi = \frac{y}{l_B} - l_B k$  を定義するとディラック方程式は

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar\omega_c}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & \partial_\xi + \xi \\ -\partial_\xi + \xi & 0 \end{bmatrix} \phi(\xi) &= E\phi(\xi) \\ -\hbar\omega_c \begin{bmatrix} 0 & \Lambda \\ \Lambda^\dagger & 0 \end{bmatrix} \phi(\xi) &= E\phi(\xi) \end{aligned} \quad (3.5)$$

と書ける．ただし，一次元調和振動子の生成消滅演算子を以下のように定義した．

$$\Lambda^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\partial_\xi + \xi), \quad \Lambda = \frac{1}{\sqrt{2}} (\partial_\xi + \xi)$$

これらの演算子は交換関係  $[\Lambda, \Lambda^\dagger] = 1$  を満たし，数演算子  $\hat{N} = \Lambda^\dagger \Lambda$  の固有値  $N$  は粒子数を表す．また，パウリ行列(2.14)で表される行列  $\boldsymbol{\sigma}^\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$  を用いると

$$(\Lambda \boldsymbol{\sigma}^+ + \Lambda^\dagger \boldsymbol{\sigma}^-) \phi(\xi) = -\frac{2E}{\hbar\omega_c} \phi(\xi) \quad (3.6)$$

となる．(3.6)式はゼロエネルギー解を持つので

$$(\Lambda \boldsymbol{\sigma}^+ + \Lambda^\dagger \boldsymbol{\sigma}^-) \phi_0 = 0$$

と書け， $\Lambda$  は消滅演算子であるので以下が成り立つ．

$$\begin{aligned} \Lambda \phi_0 &= 0 \\ \boldsymbol{\sigma}^- \phi_0 &= 0 \end{aligned}$$

部分格子  $A, B$  に存在する炭素原子と二種類のディラック点を考慮すると (3.5) 式の解は

$$\phi_{N,\pm}(\xi) = \begin{pmatrix} \psi_{N-1}(\xi) \\ \pm\psi_N(\xi) \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

と表せる．ここで  $\psi_N(\xi)$  は規格化されている一次元調和振動子の解であり，粒子数  $N$  は正の整数である．(3.7) 式を (3.5) 式に代入し，次のエネルギー固有値を得る．

$$E = \pm\hbar\omega_c\sqrt{N} \quad (3.8)$$

ここで，消滅生成演算子は

$$\begin{aligned} \Lambda\psi_N &= \sqrt{N}\psi_{N-1} \\ \Lambda^\dagger\psi_N &= \sqrt{N+1}\psi_{N+1} \end{aligned} \quad (3.9)$$

の関係を満たすことを用いた．グラフェン中でのエネルギー固有値 (3.8) 式を通常の二次元系でのエネルギー固有値 (3.4) 式と比較すると， $N$  ではなく  $\sqrt{N}$  に比例するためにランダウ準位が等間隔ではないという特徴がある．

### 3.4 磁場中グラフェンの量子ホール効果

Laughlin によるホール伝導度の量子化を考える [3]．図 3.2 の配置において磁束  $\Phi$  を断熱的に  $\delta\Phi$  だけ変化させ，その過程で変化した系のエネルギーを  $\delta E$  とする．そのときシリンダーに流れる電流  $I$  は

$$I = c\frac{\delta E}{\delta\Phi} \quad (3.10)$$

となる．系が十分大きいとき，磁束の微小変化  $\delta\Phi$  は磁束量子  $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$  とみなせる．したがって，エネルギーの変化  $\delta E$  はシリンダーの端から端へ整数個の電子の移動によるものであると考えることができる．シリンダー両端の電位差（ホール電圧）を  $V_H$  とすると  $N = 0$  のランダウ準位を考慮して  $\delta E = \pm 4(N + 1/2)eV_H$  となる．ここで現れた因子 4 はスピンとディラック点の二重縮退に由来する．これらを (3.10) 式に代入すると

$$I = 4\left(N + \frac{1}{2}\right)\frac{e^2}{h}V_H \quad (3.11)$$

と書け，ホール伝導度は

$$\sigma = \frac{I}{V_H} = \pm 4\left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{e^2}{h} \quad (3.12)$$

となり， $N = 0$ でのプラトーを持たない．したがって，グラフェンは通常の量子ホール効果とはホール伝導度のプラトーが  $1/2$  だけずれた半整数量子ホール効果を示す．

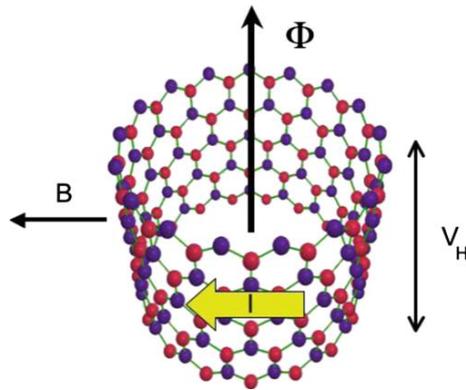


図 3.2: グラフェンのシリンダーを用いた Laughlin の配置．磁場  $B$  は表面に垂直であり，電流  $I$  は円形電流．誘起されたホール電圧は  $V_H$  で示され  $\Phi$  はシリンダーを貫く磁束である．

## 第II部

# グラフェンの磁気抵抗効果

## 第4章 グラフェンの磁気抵抗効果

リップルのあるグラフェン表面に対して平行に磁場を印加すると、ランダムなベクトルポテンシャルの分布が生成される。グラフェン上のディラックフェルミオンはそのベクトルポテンシャルによって散乱され、平行磁場の二乗  $B_{\parallel}^2$  に比例した磁気抵抗効果が現れる。近年、Lundeberg と Folk はグラフェンの磁気抵抗効果を研究し、磁気抵抗を表す公式を示した [10, 11]。また、高キャリア密度領域において磁気抵抗  $\Delta\rho$  とキャリア密度  $n$  には  $\Delta\rho \propto |n|^{-3/2}$  の関係があることを報告している。本修士論文では、リップルの相関関数  $c(r)$  に指数関数型とガウシアン型の相関関数を想定し、厳密に計算した。計算の結果、グラフェンの磁気抵抗を超幾何関数などの性質のよく知られた特殊関数によって表現することができた。特殊関数の漸近展開により、低密度領域でのキャリア密度に対する線形依存性を見つけた。 $|n|^{-3/2}$  依存性では  $n = 0$  の電荷中性点で発散してしまうが、計算の結果より得られた超幾何関数による表式ではホール領域と電子領域を結ぶことができた。ただし、グラフェンには電子 - ホールパドルと呼ばれる密度不均一性が存在する [14] ため、電荷中性点付近では慎重な議論が必要である。

本論文にて得られた式と実験データとの数値フィッティングも行った。ガウシアン型の相関関数により得た形式が、正負のキャリア密度における実験データによくフィットしていることを示した。また、フィッティングパラメータよりリップルの高さの二乗平均平方根  $Z$  と相関長  $R$  を算出し、実験による測定値との比較を行った。

### 4.1 ランダム磁場効果

#### 4.1.1 グラフェン表面のリップル

グラフェンの表面は平坦ではなく、リップルと呼ばれるランダムな凹凸が存在する。主なリップルの生成原因は二つあり、一つはグラフェンが貼り付けられた  $\text{SiO}_2$  基盤などによるものである [4]。もう一つはグラフェン自身が熱力学的安定性を保つためにリップルを生成しているためであり、基盤に貼り付けられていない宙ぶりのグラフェンにおいてもリップルが観測されている [5]。走査型トンネル顕微鏡 (S T

M) や非接触型原子間力顕微鏡 (NC - AFM) によるリップルの観測 (図 4.2) では, 数 nm の幅につき 1nm 程の振幅で揺らいている [6] .

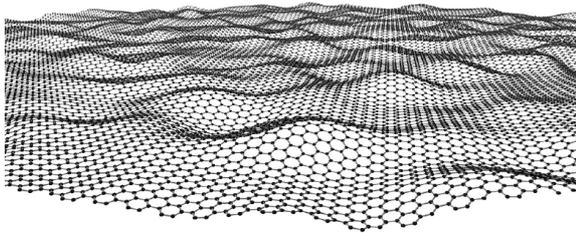


図 4.1: グラフェン表面のリップルのイメージ .

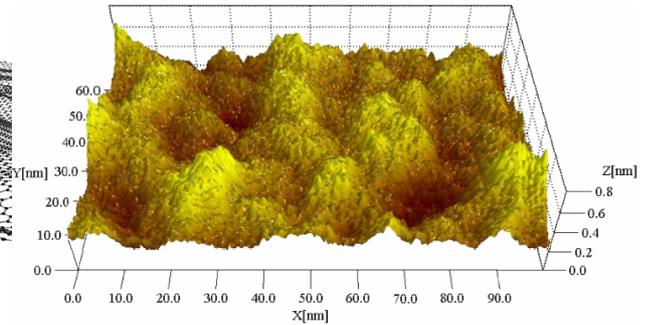


図 4.2: 走査型トンネル顕微鏡 (STM) によるリップルの観測 [6] .

#### 4.1.2 ランダム磁場効果

リップルのあるグラフェン面に対して平行に磁場を印加する場合を考える . 電荷キャリアに作用するのはキャリアの移動方向に対して垂直な成分だけである . したがって, グラフェン表面の勾配により垂直磁場成分の分布が生成される . リップルが表面にランダムに分布していると考えると, この磁場成分分布もランダムであると考えることができる .

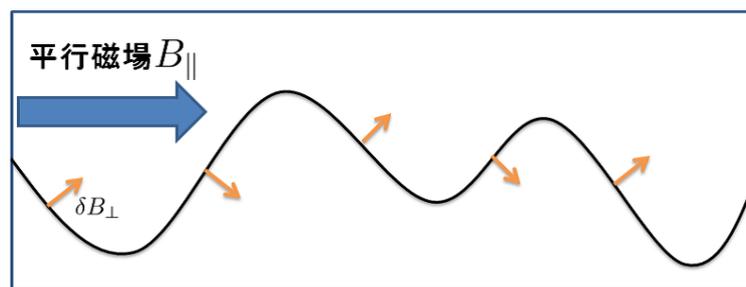


図 4.3: 平行磁場  $B_{\parallel}$  の中でリップルにより生成される垂直磁場成分  $\delta B_{\perp}$  .

## 第5章 磁気抵抗に対する Lundeborg-Folk 公式

Lundeborg と Folk はグラフェンにおける磁気抵抗効果を研究した [10, 11] . ボルツマン輸送理論から磁気抵抗  $\Delta\rho$  を計算し, 実験値との比較を示した.  $x-y$  平面に広がったグラフェン表面の位置  $\mathbf{r} = (x, y)$  におけるリップルの平均の高さからの変位を  $h(\mathbf{r})$  とする. 系の面積を  $V$  として, 位置  $\mathbf{r}_0$  より  $\mathbf{r}$  だけ離れた地点におけるリップルの高さの二点相関関数を

$$c(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r}_0 h(\mathbf{r}_0) h(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}) \quad (5.1)$$

と定義する. リップルの高さの変位  $h(\mathbf{r})$  の変化は一定で等方的なガウシアンリップルであるとする,  $c(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = c(r)$  と考えることができる. 平行磁場  $B_{\parallel}$  のもとで次のように抵抗が表せる.

$$\rho_{\parallel}(k) = \frac{\pi B_{\parallel}^2}{\hbar} g(k) \quad (5.2)$$

ここで

$$g(k) = \int_0^{\infty} r W(rk) c(r) dr \quad (5.3)$$

$$W(z) = \int_0^{2\pi} J_0\left(2z \sin \frac{\phi}{2}\right) \sin^2 \frac{\phi}{2} d\phi \quad (5.4)$$

であり,  $J_0(z)$  はベッセル関数 (A.3) である.

$\Delta\rho = \rho(B_{\parallel}) - \rho(0)$  と定め, 平行磁場  $B_{\parallel}$  によって抵抗が変化する現象を磁気抵抗効果と呼ぶ. 論文 [10] では, 平行磁場下グラフェンに対する磁気抵抗を

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) = \frac{\pi B_{\parallel}^2}{2\hbar} (\sin^2 \theta + 3 \cos^2 \theta) g(k(n)) \quad (5.5)$$

と報告している. ここで平行磁場と電流の成す角を  $\theta$ , キャリア密度を  $n$ , 図 5.1 のようにリップルの平均の高さからの変位の二乗平均平方根を  $Z$ , リップルの相関長

を  $R$  としている．また，二つのディラック点とスピン自由度を考慮した波数  $k$  とキャリア密度  $n$  の関係式は

$$k = k(n) = \sqrt{\pi|n|} \quad (5.6)$$

と書け [9]，Lundeberg と Folk は高キャリア密度領域 ( $k \gg 1/R$ ) において  $\Delta\rho \propto |n|^{-3/2}$  であると報告している．本論文において (5.5) 式を Lundeberg-Folk 公式と呼ぶ．

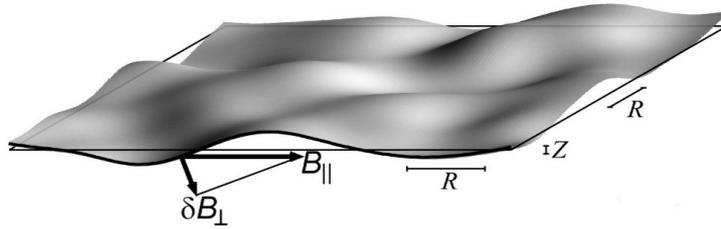


図 5.1: リップルのあるグラフェン表面におけるパラメータ．リップルの平均の高さからの変位の二乗平均平方根を  $Z$ ，リップルの相関長を  $R$  とする．

## 5.1 Lundeberg-Folk 公式の導出

Lundeberg-Folk 公式 (5.5) はリップルの高さ相関関数  $c(r)$  の関数として，グラフェン上における磁気抵抗効果を示す．この公式は (5.3) 式と (5.4) 式と共に論文 [11] で報告されている．しかし，式の導出については非常に短く詳細は省略されている．今後の議論のために，Lundeberg-Folk 公式 (5.5) の導出の仕方を詳しく述べることにする．使用した特殊関数の定義は付録 A に述べる．

### 5.1.1 幾何学的ベクトルポテンシャル

$x - y$  平面のもとで  $x$  方向に面内平行磁場

$$\mathbf{B}_{\parallel} = (B_{\parallel}, 0) \quad (5.7)$$

が印加されている場合，Berry による幾何学的ベクトルポテンシャル [12] は以下のように計算できる [13]．

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = i\frac{\hbar}{e} \langle \phi_g(z; \mathbf{r}) | \nabla | \phi_g(z; \mathbf{r}) \rangle \quad (5.8)$$

ここで  $\phi_g(z; \mathbf{r})$  は基底状態の波動関数であり，磁場が印加されていない場合の規格化された解  $\xi_g(z; \mathbf{r})$  を用いて

$$\phi_g(z; \mathbf{r}) = \exp\left(i\frac{e}{\hbar}B_{\parallel}yz\right)\xi_g(z; \mathbf{r}) \quad (5.9)$$

と与えられる．したがって，幾何学的ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (A_x(\mathbf{r}), A_y(\mathbf{r}))$  は

$$A_x(\mathbf{r}) = 0, \quad A_y(\mathbf{r}) = -B_{\parallel}h(\mathbf{r}) \quad (5.10)$$

となり，電荷  $-e$  のディラックフェルミオンに対するポテンシャルは

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= -ev_F\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= ev_FB_{\parallel}h(\mathbf{r})\sigma_y \\ &= ev_FB_{\parallel}h(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.11)$$

と表せる．ここで  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  はパウリ行列 (2.14) である．

### 5.1.2 散乱行列

フェルミの黄金律により，散乱行列は相互作用演算子  $\mathcal{U}$  を用いて次のように計算される．

$$\begin{aligned} S_{\text{ripple}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2\pi V}{\hbar} \langle \mathbf{k}' | \mathcal{U} | \mathbf{k} \rangle^2 \delta(E(k') - E(k)) \\ &= \frac{2\pi V}{\hbar^2 v_F} \langle \mathbf{k}' | \mathcal{U} | \mathbf{k} \rangle^2 \delta(k' - k) \end{aligned} \quad (5.12)$$

ただし  $E(k) = \hbar v_F k$  であり，相互作用演算子  $\mathcal{U}$  は

$$\langle \mathbf{k}' | \mathcal{U} | \mathbf{k} \rangle = \int d^2r' \int d^2r \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \mathcal{U} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \quad (5.13)$$

$$\langle \mathbf{r}' | \mathcal{U} | \mathbf{r} \rangle = U(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.14)$$

となる．ポテンシャル  $U(\mathbf{r})$  は (5.11) 式で与えられる．二成分平面波 (2.20) を用いると (5.13) 式は

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | \mathcal{U} | \mathbf{k} \rangle &= \int d^2r \frac{e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2V}} (e^{i\theta_{k'}/2} e^{-i\theta_k/2}) \left\{ ev_FB_{\parallel}h(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right\} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2V}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_k/2} \\ e^{i\theta_k/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{ev_FB_{\parallel}}{V} \sin \frac{\theta_k + \theta_{k'}}{2} \hat{h}^*(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (5.15)$$

と表される．ここで  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  であり， $\widehat{h}^*(\mathbf{q})$  は  $h(\mathbf{r})$  のフーリエ変換により

$$\widehat{h}^*(\mathbf{q}) = \int d^2r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} h(\mathbf{r}) \quad (5.16)$$

と与えられる．(5.16) 式の二乗  $|\widehat{h}(\mathbf{q})|^2 = \widehat{h}(\mathbf{q})\widehat{h}^*(\mathbf{q})$  は次のように計算される．

$$\begin{aligned} |\widehat{h}(\mathbf{q})|^2 &= \int d^2r \int d^2r' e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} h(\mathbf{r})h(\mathbf{r}') \\ &= V \int d^2r e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{V} \int d^2r_0 h(\mathbf{r}_0)h(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (5.17)$$

ここで積分において変数変換  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_0$  ,  $\mathbf{r}' - \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}$  を行った．二点相関関数 (5.1) とそのフーリエ変換

$$\widehat{c}(q) = \int d^2r e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} c(r), \quad q = |\mathbf{q}| \quad (5.18)$$

を用いると (5.17) 式は

$$|\widehat{h}(\mathbf{q})|^2 = V\widehat{c}(q) \quad (5.19)$$

となる．したがって，散乱行列 (5.12) は

$$S_{\text{ripple}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi e^2 v_F B_{\parallel}^2}{\hbar^2} \sin^2 \frac{\theta_k + \theta_{k'}}{2} \widehat{c}(q) \delta(k' - k), \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad q = |\mathbf{q}| \quad (5.20)$$

と表せ，論文 [11] の (A.2) 式と一致する．

(2.21) 式で定義される  $\theta_k$  と同様に， $\mathbf{k}' = (k'_x, k'_y)$  に対して  $\theta_{k'}$  を定める．ここで  $k' = k$  ,  $q_x = k'_x - k_x = k(\cos \theta_{k'} - \cos \theta_k)$  ,  $q_y = k'_y - k_y = k(\sin \theta_{k'} - \sin \theta_k)$  であることを用いると

$$\begin{aligned} q &= |\mathbf{q}| = \sqrt{q_x^2 + q_y^2} \\ &= 2k \sqrt{1 - \cos(\theta_k - \theta_{k'})} \\ &= 2k \sin \frac{\theta_k - \theta_{k'}}{2} \end{aligned} \quad (5.21)$$

となる．したがって，(5.18) 式は

$$\begin{aligned} \widehat{c}(q) &= \int_0^{\infty} dr r \int_0^{2\pi} d\varphi c(r) e^{iqr \cos \varphi} \\ &= \int_0^{\infty} dr r c(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \exp \left[ 2ikr \sin \frac{\theta_k - \theta_{k'}}{2} \cos \varphi \right] \end{aligned} \quad (5.22)$$

と与えられる．

### 5.1.3 ボルツマン方程式

波数ベクトル  $k$  が確率分布  $f(k)$  で記述される二次元系において，Lundberg と Folk はボルツマンの輸送論に基づく半古典的な方法を導入した．ボルツマン方程式に従い，外部電場  $E$  の中で確率分布  $f(k)$  の時間微分は

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_k \right) f(k) = \left[ \frac{\partial f(k)}{\partial t} \right]_S \quad (5.23)$$

と与えられる．分布  $f(k)$  において空間的に一様であると想定し，ボルツマン方程式左辺の空間微分項  $v \cdot \nabla_r f(k)$  を無視した．右辺の衝突項は，リップルに起因するランダムベクトルポテンシャルによるキャリアの散乱に対応し，

$$\left[ \frac{\partial f(k)}{\partial t} \right]_S = D[S, f](k) \quad (5.24)$$

と表せる．ここで  $S = S_0 + S_{\text{ripple}}$  は全散乱行列であり，演算子

$$D[S, f](k) = \int \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} S(k, k') [f(k') - f(k)] \quad (5.25)$$

を用いた． $S_0$  は，等方的な形式  $S_0(k, k') = s_0(k, q)\delta(k-k')$  を持つ磁場が印加されていない場合の散乱行列であり， $S_{\text{ripple}}$  は (5.12) 式で与えられる  $S(k, k') = \tilde{S}(k, k')\delta(k-k')$  と定めると (5.25) 式は

$$D[S, f](k) = \frac{k}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_{k'} \tilde{S}(k, k') [\tilde{f}(\theta_{k'}) - \tilde{f}(\theta_k)] \quad (5.26)$$

となり，ここで  $\tilde{f}(\theta_k)$  は  $f(k)$  の波数空間角  $\theta_k$  依存性を示す関数である． $x$  方向に印加された平行磁場  $B_{\parallel}$  による散乱の  $\theta_k$  依存性を見るために，次の直交基底を導入する．

$$\tilde{f}_x(\theta_k) = \frac{\cos \theta_k}{\sqrt{\pi}}, \quad \tilde{f}_y(\theta_k) = \frac{\sin \theta_k}{\sqrt{\pi}} \quad (5.27)$$

(5.27) は直交条件

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta_k \tilde{f}_\alpha(\theta_k) \tilde{f}_\beta(\theta_k) = \delta_{\alpha,\beta}, \quad \alpha, \beta = x, y \quad (5.28)$$

を満たす．直交基底 (5.27) を用いて，平行磁場  $B_{\parallel}$  による散乱の緩和時間の逆数は

$$\Delta\tau_{\alpha,\beta}^{-1}(k) = - \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_k \tilde{f}_\alpha(\theta_k) D[\tilde{S}_{\text{ripple}}, \tilde{f}_\beta](\theta_k) \quad (5.29)$$

と与えられる．

(5.29) 式に (5.20) 式，(5.22) 式，(5.26) 式を用いると，複数の積分を持つ形式で  $\Delta\tau_{\alpha,\beta}^{-1}$  を表現できる．積分の変数変換  $\theta_k + \theta_{k'} \rightarrow \theta_+$  と  $\theta_k - \theta_{k'} \rightarrow \theta_-$  を行い， $\Delta\tau_{\alpha,\beta}^{-1}$  は

$$\Delta\tau_{\alpha,\beta}^{-1}(k) = -\frac{e^2 v_F B_{\parallel}^2}{4\pi \hbar^2} k \int_0^{\infty} dr r c(r) \int_0^{2\pi} d\theta_- L_{\alpha,\beta}(k, r, \theta_-) \quad (5.30)$$

$$\begin{aligned} L_{\alpha,\beta}(k, r, \theta_-) &= \int_0^{4\pi} d\theta_+ \int_0^{2\pi} d\varphi \exp \left[ 2ikr \sin \frac{\theta_-}{2} \cos \varphi \right] \sin^2 \frac{\theta_+}{2} \\ &\quad \times \tilde{f}_{\alpha} \left( \frac{\theta_+ + \theta_-}{2} \right) \left[ \tilde{f}_{\beta} \left( \frac{\theta_+ - \theta_-}{2} \right) - \tilde{f}_{\beta} \left( \frac{\theta_+ + \theta_-}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.31)$$

と表せる．ボルツマンの輸送論により，抵抗  $\Delta\rho_{\alpha,\beta}(k)$  と散乱の緩和時間  $\Delta\tau_{\alpha,\beta}(k)$  の関係式は

$$\Delta\rho_{\alpha,\beta}(k) = \frac{2\pi\hbar}{e^2 v_F k} \Delta\tau_{\alpha,\beta}^{-1}(k), \quad \alpha, \beta = x, y \quad (5.32)$$

となる（付録 B を参照）．(5.30) 式において積分を実行すると次のようになる．

$$L_{xx}(k, r, \theta_-) = 3L_{yy}(k, r, \theta_-) = -3\pi J_0 \left( 2kr \sin \frac{\theta_-}{2} \right) \sin^2 \frac{\theta_-}{2} \quad (5.33)$$

$$L_{xy}(k, r, \theta_-) = -\frac{1}{3}L_{yx}(k, r, \theta_-) = -\pi J_0 \left( 2kr \sin \frac{\theta_-}{2} \right) \sin \theta_- \quad (5.34)$$

ここで  $J_0(z)$  はベッセル関数 (A.3) である．

緩和時間の逆数 (5.30) に関係式 (5.32) を用いると

$$\Delta\rho_{xx}(k) = 3\Delta\rho_{yy}(k) = \frac{3\pi B_{\parallel}^2}{2\hbar} g(k) \quad (5.35)$$

$$\Delta\rho_{xy}(k) = \Delta\rho_{yx}(k) = 0 \quad (5.36)$$

となる．ここで  $g(k)$  は (5.3) 式で与えられ， $\Delta\rho_{xx}$  は  $\Delta\rho_{yy}$  の 3 倍の大きさである．

#### 5.1.4 Lundeberg-Folk 公式

二次元面内で電場  $\mathbf{E} = (E_x, E_y)$  が存在する場合，電流密度  $\mathbf{J} = (J_x, J_y)$  と電気抵抗  $\Delta\rho_{\alpha,\beta}$ ， $\alpha, \beta = x, y$  の関係は次の式で定義される．

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta\rho_{xx} & \Delta\rho_{xy} \\ \Delta\rho_{yx} & \Delta\rho_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

(5.36) 式より  $\Delta\rho_{xy} = \Delta\rho_{yx} = 0$  であり  $E_x = \Delta\rho_{xx}J_x$ ,  $E_y = \Delta\rho_{yy}J_y$  となる。  $x$  方向の面内平行磁場  $B_{\parallel}$  は (5.7) 式で表され, 平行磁場  $B_{\parallel}$  と電流密度  $\mathbf{J} = (J_x, J_y)$  の成す角を  $\theta$  とする。 平行磁場  $B_{\parallel}$  により現れる電気抵抗  $\Delta\rho$  は

$$\begin{aligned}\Delta\rho &= \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{J}}{J^2} \\ &= \frac{1}{J^2}(\Delta\rho_{xx}J_x^2 + \Delta\rho_{yy}J_y^2) \\ &= \Delta\rho_{xx} \cos^2 \theta + \Delta\rho_{yy} \sin^2 \theta\end{aligned}\tag{5.38}$$

と得られる。ここで  $J = |\mathbf{J}|$ ,  $J_x = J \cos \theta$ ,  $J_y = J \sin \theta$  であることを用いた。(5.35) 式で示したように  $\Delta\rho_{xx}$  は  $\Delta\rho_{yy}$  の 3 倍であり, Lundeberg-Folk 公式 (5.5) が得られる。

## 第6章 相関関数の仮定

本修士論文では(5.3)式におけるリップルの高さ相関関数  $c(r)$  を定め, Lundeberg-Folk 公式(5.5)の計算を行った. 以下の二種類の相関関数を仮定した.

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad c(r) &= Z^2 e^{-r/R} && \text{(指数関数型)} \\ \text{(ii)} \quad c(r) &= Z^2 e^{-(r/R)^2} && \text{(ガウシアン型)} \end{aligned}$$

ここで  $Z^2 = c(0) = \langle h(\mathbf{r}_0)^2 \rangle = \langle h^2 \rangle$  はリップルの高さの二乗平均である.

### 6.1 指数関数型相関関数

(5.3)式と(5.4)式に対し, ベッセル関数を定義式(A.3)に戻して指数関数型相関関数(i)を代入すると

$$g(k) = Z^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-k^2)^n}{(n!)^2} M_r(n) M_\phi(n) \quad (6.1)$$

となる. ただし

$$\begin{aligned} M_r(n) &= \int_0^{\infty} dr r^{2n+1} e^{-r/R} = R^{2n+2} \Gamma(2n+2) \\ M_\phi(n) &= \int_0^{2\pi} d\phi \sin^{2n+2} \frac{\phi}{2} = \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(n+3/2)}{\Gamma(n+2)} \end{aligned} \quad (6.2)$$

とした. ガンマ関数の倍数公式(A.2)とポツホハンマー記号(A.5)を用いると次のように書ける.

$$\begin{aligned} g(k) &= (ZR)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\{2\Gamma(n+3/2)\}^2}{n! \Gamma(n+2)} (-2kR)^{2n} \\ &= \pi (ZR)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\{(3/2)_n\}^2}{(2)_n} \frac{(-2kR)^{2n}}{n!} \end{aligned} \quad (6.3)$$

ここでガウスの超幾何関数 (A.6) を用いて

$$g(k) = \pi(ZR)^2 F\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 2; -(2kR)^2\right) \quad (6.4)$$

と表せる．また，超幾何関数の漸化式 (A.8) より次の二つの関係式が導ける．

$$\begin{aligned} F\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 2; -(2kR)^2\right) &= \frac{1}{2(kR)^2} \left[ F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; -(2kR)^2\right) - F\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, 1; -(2kR)^2\right) \right] \\ F\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, 1; -(2kR)^2\right) &= \frac{1}{1 + (2kR)^2} F\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; -(2kR)^2\right) \end{aligned} \quad (6.5)$$

これらの関係式より

$$\begin{aligned} &F\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 2; -(2kR)^2\right) \\ &= \frac{1}{2(kR)^2} \left[ F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; -(2kR)^2\right) - \frac{1}{1 + (2kR)^2} F\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; -(2kR)^2\right) \right] \end{aligned} \quad (6.6)$$

となり，楕円積分  $K(z)$ ， $E(z)$  の超幾何関数表示 (A.12) を用いて

$$g(k) = \frac{Z^2}{k^2} \left[ K(2ikR) - \frac{1}{1 + (2kR)^2} E(2ikR) \right] \quad (6.7)$$

と表せる．

### 6.1.1 高キャリア密度領域での展開

指数関数型相関関数より得た  $g(k)$  に対し高キャリア密度領域 ( $|n| \gg 1$ ) での展開を行う． $g(k)$  のガウスの超幾何関数による表示 (6.4) に対してオイラーの積分表示 (A.10) を用いると次のようになる．

$$F\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 2; -(2kR)^2\right) = \frac{1}{4\pi(kR)^3} \int_1^{1+(kR)^2} dw (w-1)^{1/2} \left(1 - \frac{w-1}{4(kR)^2}\right)^{-1/2} w^{-3/2} \quad (6.8)$$

ただし積分変数を  $u = (w-1)/(4(kR)^2)$  とした． $w$  について積分を行うと

$$\begin{aligned} &F\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 2; -(2kR)^2\right) \\ &= \frac{1}{\pi(kR)^3} \left(4 + \frac{1}{(kR)^2}\right)^{-1/2} \left[ K\left(\sqrt{\frac{(2kR)^2}{1 + (2kR)^2}}\right) - E\left(\sqrt{\frac{(2kR)^2}{1 + (2kR)^2}}\right) \right] \end{aligned} \quad (6.9)$$

と書ける．これらの楕円積分は  $z \rightarrow 1$  の極限で次のようになる [15] ．

$$\begin{aligned} K(z) &\simeq \log\left(\frac{4}{\sqrt{1-z^2}}\right) \\ E(z) &\simeq 1 \end{aligned} \quad (6.10)$$

したがって，ガウスの超幾何関数は  $k \rightarrow \infty$  の極限において

$$F\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 2; -(2kR)^2\right) \simeq \frac{1}{\pi(kR)^2} \left[ \log(4\sqrt{1+(2kR)^2}) - 1 \right] \quad (6.11)$$

となる．(5.6) 式で表される波数  $k$  とキャリア密度  $n$  の関係式と (6.4) 式より，Lundeberg-Folk 公式 (5.5) は

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) \simeq \frac{1}{2}(\sin^2\theta + 3\cos^2\theta) \frac{(ZB_{\parallel})^2}{\sqrt{\pi}\hbar R} |n|^{-3/2} \log(R|n|^{1/2}) \quad (6.12)$$

となる．高キャリア密度領域での展開では，論文 [10] の (3) 式に報告されている磁気抵抗のキャリア密度依存性 ( $\Delta\rho \propto |n|^{-3/2}$ ) に対数関数の修正を加えた結果が得られた．

### 6.1.2 低キャリア密度領域での展開

低キャリア密度領域 ( $|n| \simeq 0$ ) における磁気抵抗  $\Delta\rho$  の振る舞いを考える．ガウスの超幾何関数の定義式 (A.6) より最初の二項を取り出し，(6.4) 式を展開する．

$$g(k) = \pi(ZR)^2 \left[ 1 - \frac{9}{2}(kR)^2 + \mathcal{O}((kR)^4) \right] \quad (6.13)$$

したがって，磁気抵抗  $\Delta\rho$  は

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) \simeq \frac{1}{2}(\sin^2\theta + 3\cos^2\theta) \frac{(\pi ZR B_{\parallel})^2}{\hbar} \left( 1 - \frac{9}{2}\pi R^2 |n| \right) \quad (6.14)$$

となる．この結果は  $|n| = 0$  の電荷中性点付近における磁気抵抗の急激な上昇を表し，その付近でのキャリア密度に対する線形依存性 ( $\Delta\rho \propto -|n|$ ) を示す．

## 6.2 ガウシアン型相関関数

(5.3) 式と (5.4) 式に対し，ベッセル関数を定義式 (A.3) に戻してガウシアン型相関関数 (ii) を代入すると

$$g(k) = Z^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-k^2)^n}{(n!)^2} \widetilde{M}_r(n) M_{\phi}(n) \quad (6.15)$$

となる．ただし

$$\widetilde{M}_r(n) = \int_0^\infty dr r^{2n+1} e^{-r^2/R^2} = \frac{1}{2} R^{2n+2} n! \quad (6.16)$$

とした．指数関数型相関関数 (i) と同様の計算を行って

$$g(k) = \frac{\pi(ZR)^2}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(3/2)_n}{(2)_n} \frac{-(kR)^2}{n!} \quad (6.17)$$

を得る．ここで合流型超幾何関数 (A.7) を用いて

$$g(k) = \frac{\pi Z^2 R^2}{2} F\left(\frac{3}{2}, 2; -(kR)^2\right) \quad (6.18)$$

となる．合流型超幾何関数の漸化式 (A.9) より次の関係式が与えられる．

$$F\left(\frac{3}{2}, 2; -(kR)^2\right) = F\left(\frac{1}{2}, 1; -(kR)^2\right) - \frac{(kR)^2}{4} F\left(\frac{3}{2}, 3; -(kR)^2\right) \quad (6.19)$$

これを用いると

$$g(k) = \frac{\pi(ZR)^2}{2} \left[ F\left(\frac{1}{2}, 1; -(kR)^2\right) - \frac{(kR)^2}{4} F\left(\frac{3}{2}, 3; -(kR)^2\right) \right] \quad (6.20)$$

となり，変形ベッセル関数  $I_\nu(z)$  の超幾何関数表示 (A.13) により

$$g(k) = \frac{\pi(ZR)^2}{2} \left[ I_0((kR)^2/2) - I_1((kR)^2/2) \right] e^{-(kR)^2/2} \quad (6.21)$$

と表せる．

### 6.2.1 高キャリア密度領域での展開

$k \rightarrow \infty$  の極限における (6.18) 式の合流型超幾何関数について，次の漸近展開式を用いる．

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma; z) &\simeq \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} (-z)^{-\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\alpha)_n (\gamma - \alpha)_n}{n!} z^{-n} \\ &\quad + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha - \gamma} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1 - \alpha)_n (\gamma - \alpha)_n}{n!} z^{-n} \end{aligned} \quad (6.22)$$

この漸近展開公式は  $iz$  が負の実数でなく  $|z|$  が十分大きいときに成り立つ．これを用いると

$$F\left(\frac{3}{2}, 2; -(kR)^2\right) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}(kR)^3} + \mathcal{O}((kR)^{-5}) \quad (6.23)$$

となり，ガウシアン型相関関数による磁気抵抗は

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) \simeq \frac{1}{4}(\sin^2\theta + 3\cos^2\theta) \frac{(ZB_{\parallel})^2}{\hbar R} |n|^{-3/2} \quad (6.24)$$

と表せる．この結果は論文 [10] の (3) 式に報告されている結果と一致している．

### 6.2.2 低キャリア密度領域での展開

合流型超幾何関数の定義式 (A.7) より最初の二項を取り出し，(6.18) 式を次のように展開する．

$$g(k) = \frac{\pi(ZR)^2}{2} \left[ 1 - \frac{3}{4}(kR)^2 + \mathcal{O}((kR)^4) \right] \quad (6.25)$$

したがって，磁気抵抗  $\Delta\rho$  は

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) \simeq \frac{1}{4}(\sin^2\theta + 3\cos^2\theta) \frac{(\pi ZR B_{\parallel})^2}{\hbar} \left( 1 - \frac{3}{4}\pi R^2 |n| \right) \quad (6.26)$$

となる．指数関数型相関関数 (i) の展開 (6.14) と同様に，低キャリア密度領域ではキャリア密度に対する線形依存性 ( $\Delta\rho \propto -|n|$ ) が得られる．

## 第7章 実験データとの比較

キャリア密度  $n$  がゼロである電荷中性点近傍では，電子 ホールパドルと呼ばれる密度不均一性の影響が電子輸送に現れることが予測される [14]．加えて  $|n| \simeq 0$  である低キャリア密度領域では，半古典的なボルツマン輸送理論が破綻する恐れがある．電荷中性点近傍での磁気抵抗を議論するには，より精度の高い近似を行うか量子論を含めた理論の構築を行わなければならない [14, 16, 17]．しかし，電荷中性点から離れた高キャリア密度領域では，グラフェンの電子輸送特性をボルツマン輸送理論により正確に記述できている．本論文では，半古典的な輸送理論を用いた Lundeberg-Folk 公式 (5.5) を全キャリア密度領域について適用できるように修正を試みた．論文 [10, 11] の (3) 式では電荷中性点において磁気抵抗が発散してしまう．二種類の相関関数 (i) と (ii) から得られた磁気抵抗では，電荷中性点近傍での線形依存性を示し，発散を抑えることができた．

平行磁場  $B_{\parallel}$  によるグラフェンの磁気抵抗を表す Lundeberg-Folk 公式 (5.5) は  $B_{\parallel}^2$  に比例する．

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) = a(n, \theta)B_{\parallel}^2 \quad (7.1)$$

ここで係数  $a(n, \theta)$  は

$$a(n, \theta) = \frac{\pi}{2\hbar}(\sin^2 \theta + 3 \cos^2 \theta)g(\sqrt{\pi|n|}) \quad (7.2)$$

と与えられる．本論文で計算した磁気抵抗  $\Delta\rho$  はリップルの高さの標準偏差  $Z = \sqrt{\langle h^2 \rangle}$  とリップルの相関長  $R$  の二つのパラメータを含んでいる．グラフェンにおける磁気抵抗効果の実験データと，(6.4) 式と (6.18) 式のフィッティングから  $Z$  と  $R$  を算出することができる．係数  $a(n, \theta)$ (7.2) のキャリア密度依存性を，中大若林グループの実験データ [18] と計算結果のフィッティングによって示す (図 7.1 7.3)．青い点は実験データであり，赤線はそれぞれ指数関数型相関関数 (i) より得られた (6.4) 式とガウシアン型相関関数 (ii) より得られた (6.18) 式である．実験では，平行磁場と電流は平行である ( $\theta = 0$ )．指数関数型相関関数 (i) (図 7.1) よりもガウシアン型相関関数 (ii) (図 7.2) が実験データによくフィットしている．

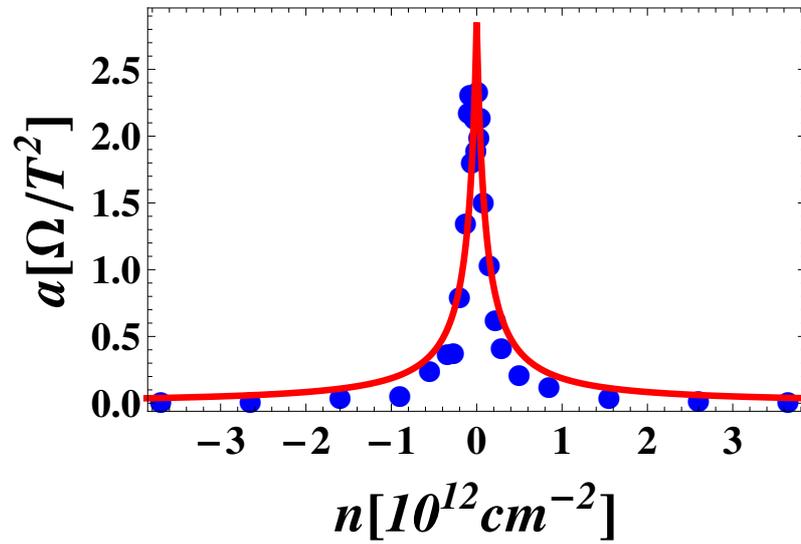


図 7.1: 指数関数型相関関数 (i) より得た (6.4) 式と実験データ [18] のフィッティング.  $Z = 0.531$  [nm] と  $R = 8.51$  [nm] になるようにフィッティングパラメータを選んだ.

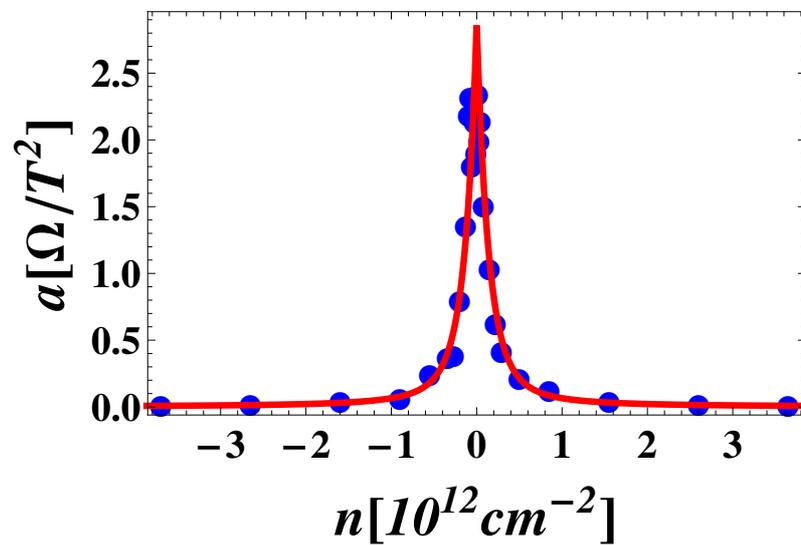


図 7.2: ガウシアン型相関関数 (ii) より得た (6.18) 式と実験データ [18] のフィッティング.  $Z = 0.531$  [nm] と  $R = 8.51$  [nm] になるようにフィッティングパラメータを選んだ.

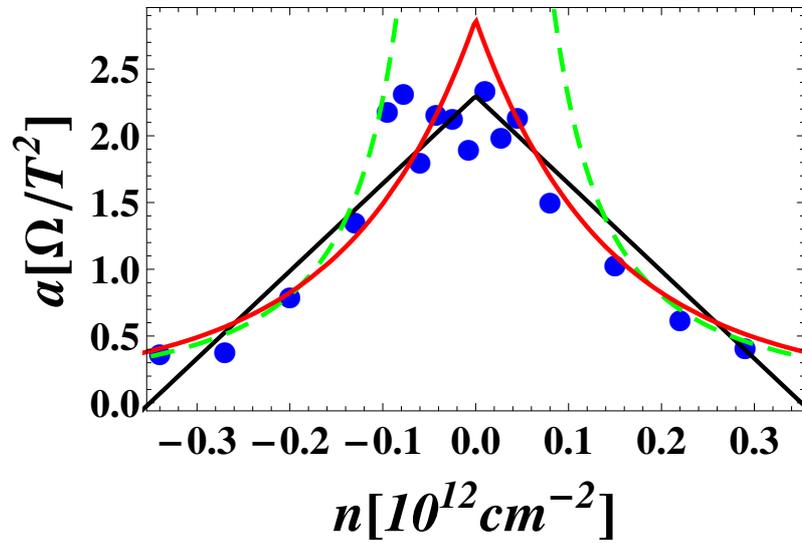


図 7.3: 図 7.2 の電荷中性点付近での拡大図 .

図 7.3 では図 7.2 の電荷中性点付近を拡大した . 低キャリア密度領域での  $|n|^{-3/2}$  依存性を緑の破線で示し , 黒線は  $|n| \rightarrow 0$  の漸近展開により得られた線形依存性 (6.26) を示す .  $|n|^{-3/2}$  依存性とは異なり , (6.18) 式では電荷中性点での発散を抑えることができた .

## 7.1 リップルの高さと同相長の算出

指数関数型相関関数 (i) とガウシアン型相関関数 (ii) について行ったフィッティングを行い、リップルの高さの標準偏差  $Z$  と相関長  $R$  を算出した。フィッティングにより得られたリップルのパラメータと原子間力顕微鏡 (AFM) による測定値 [18] との比較を示す。測定はグラフェンの表面を  $500[\text{nm}] \times 500[\text{nm}]$  の領域で異なる 3ヶ所を選び、測定された。リップルパラメータはこの 3ヶ所の平均値を用いた。

### (i) 指数関数型相関関数

	AFM 測定値	$\propto  n $	$\propto F(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 2; - n )$
$Z$	0.118[nm]	0.901[nm]	0.531[nm]
$R$	15.2[nm]	4.49[nm]	8.51[nm]

### (ii) ガウシアン型相関関数

	AFM 測定値	$\propto  n $	$\propto F(\frac{3}{2}, 2; - n )$
$Z$	0.118[nm]	0.520[nm]	0.376[nm]
$R$	15.2[nm]	11.0[nm]	17.0[nm]

ここでも指数関数型相関関数 (i) よりもガウシアン型相関関数 (ii) において、測定値に近い値を算出することができた。近年、より高精度な測定と解析も行われている [19]。

## 付録 A 特殊関数の定義

本修士論文において使用した特殊関数の定義をここで示す．関数の定義は [20] を参考にした．ガンマ関数  $\Gamma(z)$  は

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-u} u^{z-1} du, \quad \Re z > 0 \quad (\text{A.1})$$

と定義されている．ここで  $n \in \mathbb{N}_0 \equiv \{0, 1, 2, \dots\}$  ,  $\Gamma(n+1) = n!$  であり ,  $0! \equiv 1$  とした．次の公式はガンマ関数の倍数公式と呼ばれるものである．

$$\Gamma(2z) = \frac{2^{2z}}{2\sqrt{\pi}} \Gamma(z) \Gamma(z + 1/2) \quad (\text{A.2})$$

指数  $\nu \in \mathbb{R}$  の第一種ベッセル関数  $J_\nu(z)$  は

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (z/2)^{2n}}{n! \Gamma(\nu + n + 1)} \quad (\text{A.3})$$

と定義され ,  $z$  は負の実数をとらない．第一種変形ベッセル関数  $I_\nu(z)$  は次のように定義される．

$$\begin{aligned} I_\nu(z) &= \begin{cases} e^{-\nu\pi i/2} J_\nu(ze^{\pi i/2}) & (-\pi < \arg z \leq \pi/2) \\ e^{3\nu\pi i/2} J_\nu(ze^{-3\pi i/2}) & (\pi/2 < \arg z \leq \pi) \end{cases} \\ &= \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2n}}{n! \Gamma(\nu + n + 1)} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$n \in \mathbb{N}_0$  の下で , ポツホハンマー記号は

$$\begin{aligned} (\alpha)_n &= \alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\cdots(\alpha+n-1), \quad n \in \mathbb{N} \equiv \{1, 2, 3, \dots\} \\ (\alpha)_0 &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

と定義される．ガウスの超幾何関数はポツホハンマー記号 (A.5) を用いて次のように定義される．

$$F(\alpha, \beta, \gamma; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (\text{A.6})$$

合流型超幾何関数は

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma; z) &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} F(\alpha, \beta, \gamma; z/\beta) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n z^n}{(\gamma)_n n!} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

と定義される．超幾何関数  $F(\alpha, \beta, \gamma; z)$  に関して，以下の漸化式が知られている．

$$\begin{aligned} \gamma[F(\alpha, \beta + 1, \gamma; z) - F(\alpha, \beta, \gamma; z)] &= \alpha z F(\alpha + 1, \beta + 1, \gamma + 1; z), \\ \alpha(1 - z)F(\alpha + 1, \beta, \gamma; z) + [\gamma - 2\alpha + (\alpha - \beta)z]F(\alpha, \beta, \gamma; z) \\ &\quad + (\alpha - \gamma)F(\alpha - 1, \beta, \gamma; z) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

超幾何関数  $F(\alpha, \beta; z)$  に対しては

$$\begin{aligned} zF(\alpha + 1, \gamma + 1; z) &= \gamma[F(\alpha + 1, \gamma; z) - F(\alpha, \gamma; z)], \\ \alpha F(\alpha + 1, \gamma + 1; z) &= (\alpha - \gamma)F(\alpha, \gamma + 1; z) + \gamma F(\alpha, \gamma; z) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

が成り立つ．ガウスの超幾何関数は次の積分表示を持つ．

$$F(\alpha, \beta, \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma - \beta)} \int_0^1 du u^{\beta-1} (1-u)^{\gamma-\beta-1} (1-uz)^{-\alpha} \quad (\text{A.10})$$

ここで  $z$  は 1 より大きな実数であり， $u \rightarrow 0$  のとき  $(1-uz)^{-\alpha} = 1$  となる．

第一種楕円積分  $K(z)$  と第二種楕円積分  $E(z)$  は

$$\begin{aligned} K(z) &= \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - z^2 \sin^2 \theta}} = \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{(1-u^2)(1-z^2u^2)}}, \\ E(z) &= \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - z^2 \sin^2 \theta} d\theta \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

と定義される．また，これらはガウスの超幾何関数 (A.6) を用いて

$$K(z) = \frac{\pi}{2} F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; z^2\right), \quad E(z) = \frac{\pi}{2} F\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; z^2\right) \quad (\text{A.12})$$

と書ける．同様に，変形ベッセル関数 (A.4) は合流型超幾何関数 (A.7) を用いて

$$I_\nu(z) = \frac{(z/2)^\nu}{\Gamma(\nu + 1)} e^z F\left(\nu + \frac{1}{2}, 2\nu + 1; -2z\right) \quad (\text{A.13})$$

と書ける．

## 付録B 電気抵抗 $\rho$ と緩和時間 $\tau$ の関係式

文献 [21] を参考にして，本論文で用いた電気抵抗  $\rho$  と緩和時間  $\tau$  の関係式の導出を示す．ボルツマン方程式

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{k}) + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \right) f(\mathbf{k}) = \left[ \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_S \quad (\text{B.1})$$

に対して以下の二つの近似を用いる．

- 定常状態を考えるので左辺の時間微分項は考えなくてよい
- 空間的に一様な系に対しては左辺の位置に関する微分が無視できる

また，右辺の散乱項に対して緩和時間  $\tau(k)$  を次のように導入する．

$$\left[ \frac{\partial f(k)}{\partial t} \right]_S = -\frac{\delta f(k)}{\tau(k)}, \quad \delta f(k) = f(k) - f_0(k) \quad (\text{B.2})$$

ここで  $f_0(k)$  は平衡状態における分布関数であり，フェルミ分布関数で与えられる．

$$f_0(k) = \frac{1}{e^{(E(k)-\mu)/(k_B T)} + 1} \quad (\text{B.3})$$

ここで温度を  $T$ ，化学ポテンシャルを  $\mu$  とした．したがって，分布関数の変化量  $\delta f(k)$  は

$$\begin{aligned} \delta f(k) &= -\frac{e}{\hbar} \tau(k) \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(k) \\ &\simeq -\frac{e}{\hbar} \tau(k) \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_0(k) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

となる．ただし，存在する電場  $\mathbf{E}$  が小さいものとした．低温極限においては， $E = \hbar v_{\text{F}} k$  であり  $\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_0(k) \simeq \hbar v_{\text{F}} |\mathbf{E}| \partial f_0(k) / \partial E \simeq |\mathbf{E}| \delta(k - k_{\text{F}})$  となる．ここで  $k_{\text{F}}$  は

フェルミ波数を表す．電流が二次元であり電流密度  $J$  と電場  $E$  が平行であるとき，次のように計算できる．

$$\begin{aligned}
 J = |\mathbf{J}| &= \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (-ev_F) \delta f(k) \\
 &\simeq \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} k (-ev_F) \left( -\frac{e}{\hbar} \tau(k) |\mathbf{E}| \delta(k - k_F) \right) \\
 &= \frac{e^2 v_F k_F \tau(k_F)}{2\pi \hbar} |\mathbf{E}| \tag{B.5}
 \end{aligned}$$

抵抗  $\rho$  は  $J = \rho^{-1} |\mathbf{E}|$  と定義されているので，抵抗  $\rho$  と緩和時間  $\tau$  の関係は係数  $c = 2\pi \hbar / (e^2 v_F k_F)$  を用いて  $\rho = c\tau^{-1}$  と書ける．

# 謝辞

研究を進めて本修士論文をまとめるにあたり，多くの方々にお世話になりました．指導教官である香取眞理教授には熱心に研究指導して頂き，多くのことを学ばせて頂きました．多くのセミナーに参加する機会を与えて下さり，物理学に対する興味が広がりました．心より感謝致します．

若林研究室の若林淳一教授と白石沙代氏には，本研究を進めるにあたり実験データを提供して頂きました．深く感謝しております．若林教授と米満賢治教授には修士論文の副査を担当して頂きました．本修士論文をご精読頂き有益な助言を頂きました．深く感謝致します．東邦大学の河原林透教授とプリティッシュコロンビア大学の Mark Lundeberg 氏には本研究に関して有用なコメントを頂き，感謝しております．

香取研究室の小林奈央樹氏，河原陽明氏，錦織志菜氏，多田紘樹氏，山田泰之氏，高橋優太氏には多くのことでお世話になり，充実した研究生生活を過ごすことができました．

最後に，大学院まで進学させて頂き，生活を支えて頂いた家族に深く感謝致します．

## 参考文献

- [1] P. R. Wallace, *The Band Theory of Graphite*, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva and A. A. Firsov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, Science. **306**, 666 (2004).
- [3] R. B. Laughlin, *Quantized Hall conductivity in two dimensions*, Phys. Rev. B **23**, 5632 (1981).
- [4] V. Geringer, M. Liebmann, T. Echtermeyer, S. Runte, M. Schmidt, R. Rückamp, M. C. Lemme and M. Morgenstern, *Intrinsic and extrinsic corrugation of monolayer graphene deposited on SiO<sub>2</sub>*, Phys. Rev. Lett. **102**, 076102 (2009).
- [5] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. Booth, and S. Roth, *The structure of suspended graphene sheets*, Nature **446**, 60 (2007).
- [6] E. Stolyarova, K. T. Rim, S. Ryu, J. Maultzsch, P. Kim, L. E. Brus, T. F. Heinz, M. S. Hybertsen and G. W. Flynn, *High-resolution scanning tunneling microscopy imaging of mesoscopic graphene sheets on an insulating surface*, Proc. Nat. Acad. Sci. **104**, 9209 (2007).
- [7] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, Nature. **438**, 197 (2005).
- [8] G. W. Semenoff, *Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly*, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984).
- [9] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).

- [10] M. B. Lundeberg and J. A. Folk, *Rippled Graphene in an In-Plane Magnetic Field: Effects of a Random Vector Potential*, Phys. Rev. Lett. **105**, 146804 (2010).
- [11] M. B. Lundeberg and J. A. Folk, *Rippled Graphene in an In-Plane Magnetic Field: Effects of a Random Vector Potential*, e-print arXiv:0910.4413.
- [12] M. V. Berry, *Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes*, Proc. R. Soc. London, Ser. A **392**, 45 (1984).
- [13] H. Mathur and H. U. Baranger, *Random Berry phase magnetoresistance as a probe of interface roughness in Si MOSFET 's*, Phys. Rev. B **64**, 235325 (2001).
- [14] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang and E. Rossi, *Electronic transport in two-dimensional graphene*, Rev. Mod. Phys. **83**, 407 (2011).
- [15] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, (Dover, New York, 1972).
- [16] E. Rossi and S. Das Sarma, *Ground State of Graphene in the Presence of Random Charged Impurities*, Phys. Rev. Lett. **101**, 166803 (2008).
- [17] E. Rossi, S. Adam, and S. Das Sarma, *Effective medium theory for disordered two-dimensional graphene*, Phys. Rev. B **79**, 245423 (2009).
- [18] S. Shiraishi, *Magnetoresistance of graphene in parallel magnetic fields*, Master thesis, Chuo University (2012).
- [19] W. G. Cullen, M. Yamamoto, K. M. Burson, J. H. Chen, C. Jang, L. Li, M. S. Fuhrer and E. D. Williams, *High-Fidelity Conformation of Graphene to SiO<sub>2</sub> Topographic Features*, Phys. Rev. Lett. **105**, 215504 (2010).
- [20] G. E. Andrews, R. Askey, and R. Roy, *Special Functions* (Cambridge University Press, 1999).
- [21] 井上順一郎, 伊藤博介, 「スピントロニクス 基礎編」, 共立出版 (2010).