

論文の内容の要旨

論文題目：Generation of Dirac cones in graphene on
superlattices

(超格子上的グラフェンにおけるディラックコーン生成)

氏名 田島 昌征

本論文では超格子ポテンシャル中のグラフェンにおけるディラックコーン生成について報告する。グラフェンは、六角格子状に並んだ炭素原子によってつくられる2次元結晶構造である。グラフェンのエネルギー構造は低エネルギー領域で特徴的な分散を示す。通常の結晶中では二次的である分散関係が、グラフェンでは線形になると報告されている。この構造は質量を持たない相対論的粒子に対比して理解でき、ディラックコーンと呼ばれる。フェルミエネルギーにディラック点(ディラックコーンの中心)を持つため、スペクトルの価電子帯と伝導帯が一点で接して、ギャップレスなエネルギー構造を持つ。

グラフェンは室温において非常に高い電子移動度を示すことが報告されており、高速トランジスタなどの開発に貢献すると期待されている。しかし、バンドギャップを持たないため、グラフェン単体を半導体として用いるのは困難である。そこで超格子構造や外場によりグラフェンのエネルギー構造、特にフェルミエネルギー付近の構造を制御する方法が考えられている。

先行研究で、グラフェンに周期的超格子ポテンシャルを与えたとき、フェルミエネルギー以外にディラックコーンが生成されることが報告されている。超格子ポテンシャルの周期性を反映して、一定のエネルギー間隔で新しくディラックコーンが現れる。本研究では、グラフェンに対して周期ポテンシャルの一種である二重周期関数を与えた際、ディラックコーン生成には報告されていない規則性があること、また非周期関数の一種である準周期ポテンシャルを与えた際は稠密なコーン生成が行われる可能性があることを明らかにする。さらにこの議論をディラック電子系全般へと広げ、ディラックコーンの現れ方の違いによって、超格子ポテンシャル下のディラック電子系を分類する。

二重周期関数は同一方向に印加された2つの正弦波の和からなり、とくに周期比 L_1/L_2 が互いに素な数になる有理数で表される場合を指す。このため二重周期関数の周期 L は $L_1 \times L_2$ になる。一方、準周期関数とは周期比が無理数になる正弦波の重ね合わせによってつくられる。周期比が無理数であるため、準周期関数は明らかに非周期である。量子系では準周期ポテンシャルを主に準結晶の理論モデルとして用いてきた。準結晶はブラッグ反射として8回、12回対称性を示すことが

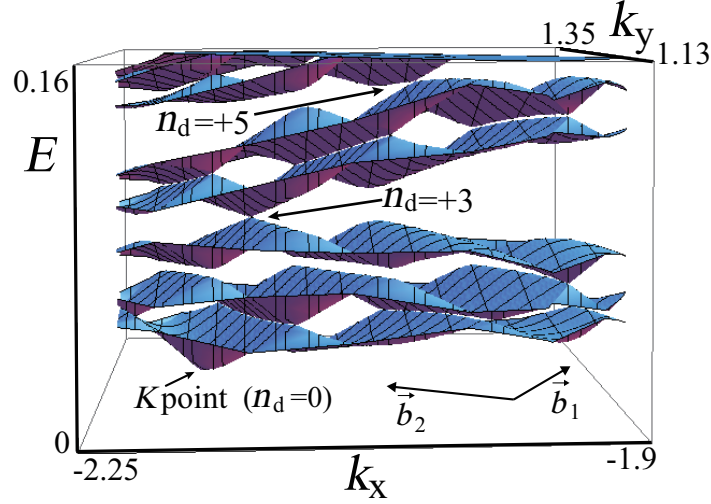


図1 六角格子上の強束縛模型に二重周期的超格子ポテンシャル $L_1 = 13$ 、 $L_2 = 8$ を与えた際のエネルギースペクトル。矢印は新しいディラックコーン $n_d = +3$ と $+5$ を示す。

ら、非周期構造を持った結晶である。そのため周期性（並進対称性）を基礎とした従来の結晶学では理解することが出来なかった。本論文では連分数展開により無理数を有理数で近似することを通して、準周期ポテンシャルの場合を二重周期ポテンシャルの極限として解析した。

はじめに第3章で、二重周期的超格子ポテンシャル下のグラフェンが示すディラックコーン生成について報告する。正弦波のような単周期ポテンシャルの場合、新たに生成されるディラックコーンは一定のエネルギー間隔で現れ、連続的な整数 $n = 1, 2, 3, \dots$ によって表すことができる。ただし、これはスペクトルが線形分散によって近似できる範囲（エネルギーカットオフ ΔE 以下の領域）に限られ、カットオフ ΔE を考慮すると、二重周期ポテンシャルを印加した際は、関数が周期的であるに関わらず、ディラックコーン生成は一定のエネルギー間隔では現れないことを示す。二重周期関数の場合、それぞれの周期 L_1 と L_2 に対応した指数 n_1 と n_2 の組み合わせにより、実際に生成されるディラックコーンの指数 n_d を表すことができる：

$$n_d = L_2 n_1 + L_1 n_2. \quad (1)$$

この式はディオファントス方程式と呼ばれている。外場によるディラックコーン生成は線形分散関係が成立する範囲に限られることから、それぞれの指数 n_1 と n_2 に上限 $N_i = \lfloor (L_i \Delta E) / \pi \rfloor$ ($i = 1, 2$) が設けられる。また二重周期関数の定義より周期 L_1 と L_2 は互いに素な整数になる。以上から、二重周期ポテンシャルは周期的であるに関わらず、ディラックコーンの生成則 (1) より、コーンのエネルギーは非一定の間隔、すなわち離散的に並ぶことが結論される。

さらに、これらの解析結果を強束縛模型の数値対角化によって確認する。例として二重周期ポテンシャル $L_1 = 13$ 、 $L_2 = 8$ を与えた際のスペクトルを図1に示す。単周期ポテンシャルの場合の解析から、それぞれのポテンシャルが示すディラックコーンの指数は $n_1 = 0, \pm 1, \pm 2$ と $n_2 = 0, \pm 1$ である。この制限をコーン生成則 (1) にあてはめると、二重周期的超格子によるディラックコー

ンは指数 $n_d = \pm 3, \pm 5, \pm 8, \pm 13, \pm 16, \pm 21, \pm 29$ で現れると予想される。図 1 のエネルギー範囲では、ディラックコーン $n_d = +3$ と $+5$ のみが現れており、式 (1) と一致する結果である。なお、数値対角化を行う際には、与えるポテンシャルの周期だけではなく強さも重要である。外場が弱すぎるまたは強すぎると、強束縛模型で超格子ポテンシャルの影響を正しく記述できないためと考えられる。

次に第 4 章で、グラフェン以外のディラック電子系におけるディラックコーン生成を調べる。近年グラフェン以外にも有機導体 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ や Bi $_{0.9}$ Sb $_{0.1}$ などがディラック電子系として理解できる事がわかってきた。本論文ではディラック電子系をエネルギーカットオフの値によって区別する。第 4.1 節では、二重周期的超格子ポテンシャル下のディラックハミルトニアン解析から、エネルギーカットオフが異なるときはディラック点が異なる現れ方をすることを示す（図 2 参照）。まずエネルギーカットオフが $\Delta E \geq \pi$ のとき、ディラック点は単周期ポテンシャルの場合と

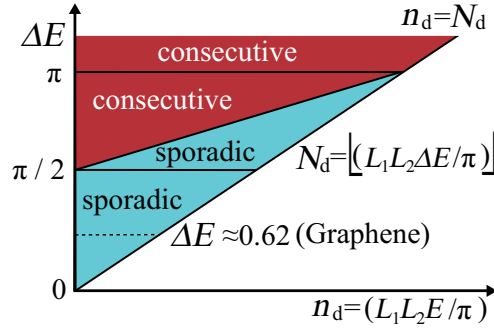


図 2 エネルギーカットオフの違いによるディラック点の異なる現れ方。赤い範囲が連続的生成、青い範囲が離散的生成を表す。破線はグラフェンの場合に対応する。

同様に連続的に現れる。次に $\pi/2 \leq \Delta E < \pi$ のとき、ディラック点はエネルギーにより、連続的な生成をする領域と離散的な生成をする領域に分かれる。最後に $\Delta E < \pi/2$ の場合、ディラック点はすべて離散的に現れ、グラフェンもこの種類に属している。以上のように、ディラック電子系は超格子ポテンシャルによるディラック点生成という観点から 3 種類に分類できる。

第 4.2 節ではディラック電子系に準周期的超格子ポテンシャルを印加した際の振舞を、二重周期関数に対する結果の極限として解析する。最も大きな特徴は、準周期極限ではディラックコーンが稠密に生成されると予想される点である。これは無理数を有理数によって表すには無限次の連分数展開が必要であることに由来する。そこでディラックコーンの密度という観点から稠密なディラックコーン生成の様子を明らかにする。二重周期ポテンシャルを印加したときの結果を引き継ぐことで、準周期な場合もディラックコーン密度はカットオフにより 3 種類に分かれることがわかる（図 3 参照）。ここでディラックコーンの密度は周期的ポテンシャルの場合を用いて規格化してある。エネルギーカットオフ $\Delta E \geq \pi$ のときはディラックコーンの規格化密度はすべて 1 になり、 $\pi/2 \leq \Delta E < \pi$ のときは 1 とそれ以下の領域に分かれる。最後に $\Delta E < \pi/2$ の場合、規格化密度はすべて 1 以下となる。グラフェンは第三の場合に相当する。

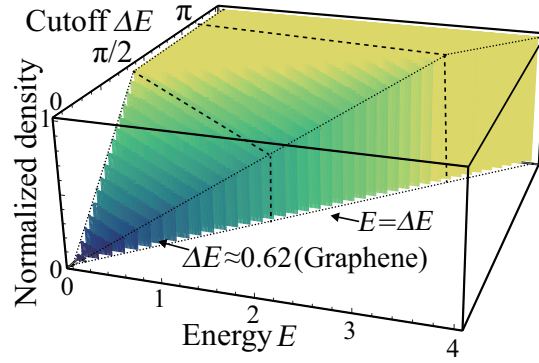


図 3 準周期超格子の場合の規格化密度。黄金比の近似として $L_1/L_2 = 233/144$ の場合を示した。破線はエネルギーカットオフ ΔE が $\pi/2$ と π を表す。点線は解析的に導いた値を示す。

最後に第 5 章で、準周期的超格子ポテンシャル下のディラック電子系におけるディラック点の生成に、自己相似性があるかをマルチフラクタル解析によって調べた。空間に準周期的構造を持つ量子系は、一般にフラクタルなエネルギースペクトルを持つと考えられており、準周期的超格子の場合も同様の性質を示すと期待され。そこで異なるエネルギーカットオフの場合、生成されるディラック点のエネルギー間隔に自己相似性是否存在するかを確認する。マルチフラクタル解析を行い、ディラック点の間隔にはほとんど自己相似性が見られないことが明らかにする。この違いは、グラフェンが線形な分散関係を持っている点によるものであると考えられる。