

半導体物理学 第 14 回

勝本信吾

東京大学物性研究所

2011 年 7 月 15 日

2.5 ホール電場による運動

前副節で、ランダウ準位で y 方向に広がった状態をつくっても、そのままでは y 方向に運動できない(群速度ゼロ)と述べた。しかし、 x 方向にホール電場 E_x が現れると調和振動の中心位置 X によってエネルギーが変化するため縮退が解けて y 方向に分散が生じ、電流が流せる。

電子の速度の期待値 v_y は、

$$\begin{aligned} v_y &= \left\langle \psi(x, y) \left| \frac{1}{m}(p_y + eBx) \right| \psi(x, y) \right\rangle \\ &= \left\langle \phi(x) \left| \frac{1}{m}eB(-X + x) \right| \phi(x) \right\rangle = \langle u | \omega_c(x - X) | u \rangle \\ &= \frac{-1}{eB} \left\langle u(x) \left| \frac{\partial \mathcal{H}_X}{\partial X} \right| u(x) \right\rangle = \frac{-1}{eB} \frac{\partial}{\partial X} E(X) \end{aligned} \quad (9.29)$$

となるので、 $\partial E / \partial X = eE_x$ 、 $j_y = \sigma_{yx} E_x$ より、 $\sigma_{xy} = -ne/B$ となってホール抵抗が磁場に比例するという古典論の結果を再現する。従って、IQHE を説明するにはランダウ量子化だけでは不足である。

2.6 電子の局在

大変重要な部分なので残念なのですが、講義では ppt での説明に限ることにします。

Landauer の 2 端子公式を導いた際に、試料を散乱ポテンシャルを 1 次元導体でつないだ系、すなわち多数の S 行列の集合体と捉え、全体を 1 つの S 行列で表すことを考えた。この見方を、電気伝導ばかりでなく、波動関数の空間分布そのもの考えることにも適用してみる。

ある点 P を出発して伝導チャンネル $1, 2, \dots, N$ を経由して点 P に戻るループ経路を考える。伝導チャンネルはユニタリ性により振幅が変化しないので獲得する位相シフトにのみ着目する。従って i 番目の伝導チャンネルを表す S 行列は非対角要素 σ_i^{nd} のみを持つ。散乱ポテンシャルで

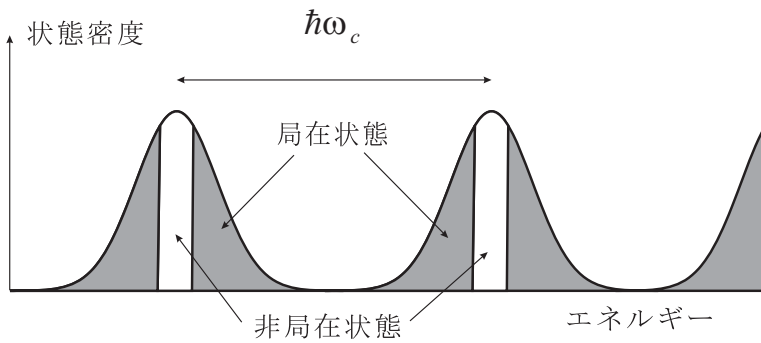


図 9.5 ランダウ量子化した離散準位がポテンシャル乱れによって広がり，更に局在 (灰色部分) する様子を模式的に示した．ランダウ準位の中心付近には広がった状態が存在する．

のチャネル $i \rightarrow j$ の S 行列要素を s_{ij} と書くと，ループ経路を流れる複素確率密度流は，単純に

$$\alpha_{\text{loop}} = \prod_{i=1}^N \sigma_i^{\text{nd}} s_{i,i+1} \quad (s_{N,N+1} = 1) \quad (9.30)$$

である．ここで，(9.30) のループを逆に回る経路を考えると，反転経路を考えるには転置行列要素を取れば良く，

$$\alpha_{\text{antiloop}} = \prod_{i=N}^1 \sigma_i^{\text{nd}} s_{i+1,i} = \prod_{i=1}^N \sigma_i^{\text{nd}} s_{i,i+1} = \alpha_{\text{loop}} \quad (9.31)$$

で，全く同じ位相を獲得して P に戻る．これには，Onsager の相反定理 (8.29) で $B = 0$ とした場合を使用している．

同じ位相を獲得するという事は，これら互いに反対向きに回るループ間の干渉効果は常に強め合う方向に働くということである．このように，ランダムポテンシャルによる散乱によって生じる干渉効果は，磁場ゼロでは電子波動関数の空間的局在を強める方向に働く．この結果，波動関数が空間的に局在してしまうことをアンダーソン (Anderson) 局在と呼ぶ．「逆回りループ」は時間反転ループと考えることもできるので，アンダーソン局在は時間反転対称性と密接に関係している．上の逆回りループの議論で B を有限にしたときのことを考えると， $s_{i,i+1}$ と $s_{i+1,i}$ を等しくするには磁場反転が必要となるので，磁場はアンダーソン局在を緩和する方向に働くことがわかる．これはもちろん，磁場によって時間反転対称性が破れるため，と表現することもできる．

ランダウ準位が下から丁度 ν 個まで詰まった状態を考えると，(??) で $L_x L_y$ を単位面積にとって $n = \nu\eta$ である．従ってこの時は $\sigma_{xy} = -\nu \times G_q$ となり，IQHE のプラトー条件となっている．すると問題は，なぜ有限の幅の磁場においてこのような条件が満たされるのか，ということになる．このような方向の IQHE の説明の一例については次節で紹介する．

重要なことは，現実の 2DEG では，不純物ポテンシャルによって頻繁に散乱が起き，図 9.5 のようにランダウ準位はエネルギー軸上で広がり，かつその裾をひいた部分では強い散乱のために波動関数が局在していることである．

3 整数量子ホール効果

IQHE の発見直後、「なぜ量子化が生じているのか」、「なぜこれほど精確な値が得られるのか」という2つの疑問に答えようということに、多くの理論的実験的努力が払われた。その結果、まず現れたのが、これまで述べてきた局在の議論を土台とした説明である。更にそこへ、トポロジカル不変量という革新的なアイデアが生まれ、IQHE については一通りの決着がついたかに思われた。

ところが、そこへ現れたのが、すでに述べてきた量子ポイントコンタクトの実験から始まる Landauer 公式に基づく電気伝導の理論の発達である。理論構築の第一人者であった Büttiker が提唱し始めたのが端状態による IQHE の説明である。これは、mm~cm もの大きな試料を測定しているにもかかわらず、電流は試料の端から磁気長程度従って数十 nm 程度の領域に存在する1次元的な状態によって運ばれているというものである。一見大変驚くべきことであるようにも思われるし、また一部の人には、常に無限系を考え、端の影響を排除する努力をしている物性物理学の精神にも反するようにも感じられた。しかし、物性物理学では van Leeuwen の定理(あるいは Bohr の定理)として古典電子系で軌道磁性が消滅してしまうということの証明に端状態が使われ、試料の端の効果の場合によっては消しようがなく、全体の性質に影響を与えることが明らかにされている。Landau の軌道磁性の量子論ではこれが消える。しかし皮肉なことに、Landau 量子化が顕著になる強力な磁場では場合によってはバルクの方が消えてしまい、端の効果のみになる、というわけである。しかも、この「端状態描像」では量子化と精確さの両方を同時に説明できる。

両者の見方は一見非常に異なっており、どちらが現実に近いのか、論争に近い状況にもなった。現在では、実験条件によってどちらの描像が良く成立するかは変化すると考える人が多いと思う。しかし、現在でも完全にすっきり、とはいかない問題でもある。

3.1 端のない試料

これは大変重要な考察であるが、時間の都合でここも飛ばすことにします。

IQHE 発見直後において、「なぜ精確な測定結果が得られるのか」という疑問にいち早く答えた理論は、奇しくも「端のない」試料における思考実験であった。もちろん、端状態を意識したものではない。Laughlin が考えたのは、図 9.6(a) のように 2DEG をぐるりと半径 R の円筒状に丸め、円筒の端に円状の電極をつける、という試料である。磁場は円筒の芯から外部に向かって出ており、2DEG に垂直に印加されている。図のように x, y 軸を取ると、電流は x 方向に流れ、 y 方向は閉じてしまっているため、「端」が存在しない。更に、円筒の中心に細長いソレノイドを通し、電流を流すことでこの中に磁束 Φ を通す。この磁束は直接 2DEG に触れることはないが、2DEG 上、円筒を一周する軌道に対しては AB 位相を与える。垂直磁場、およびソレノイ

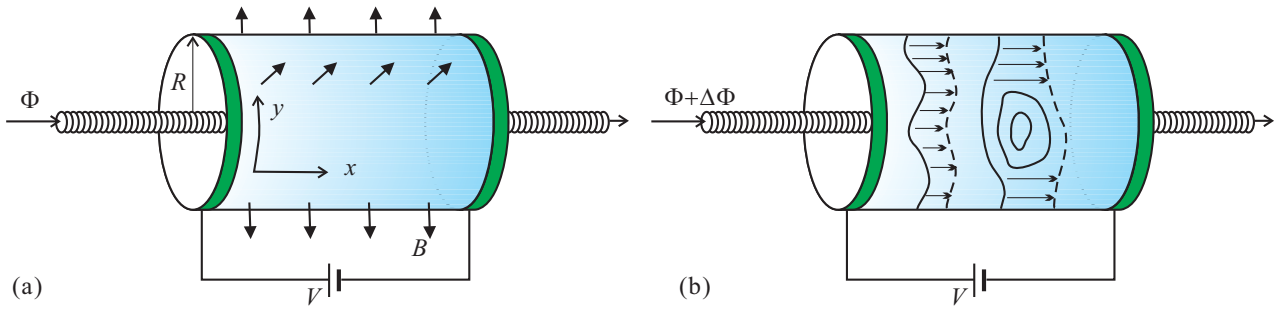


図 9.6 (a) Laughlin の思考実験で使用された「丸められた」2次元系．2DEG は半径 R の円筒状に丸められ，2DEG への磁場 B は放射状になって垂直に印加されている．これに，AB 位相を与えるための無限に細長いソレノイドが円筒中心を通っている．電場は円筒長手方向 (x 方向) にかかる．(b) ソレノイド中の磁束を Φ から $\Delta\Phi$ だけ増加させたときの波動関数の変化を模式的に描いたもの．

で磁場を与えるベクトルポテンシャルは，ランダウ・ゲージを用いて，

$$\mathbf{A} = (0, Bx), \quad \mathbf{A}_\Phi = \left(0, -\frac{\Phi}{2\pi R}\right) \quad (9.32)$$

と書く．この場合，波動関数系として，式 (??) のように y 方向に伸び， x 方向はサイクロトロン半径程度に局在したものが考え易い．

磁束 Φ を $\Delta\Phi$ だけ増加させたとする (図??(b)) と，波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}) \longrightarrow \psi(\mathbf{r}) \exp\left(i\frac{e\chi(\mathbf{r})}{\hbar}\right), \quad \chi(\mathbf{r}) = \frac{\Delta\Phi}{2\pi R}y \quad (9.33)$$

だけの位相変化を生じる．

Case I: ψ が y 方向に十分広がり円筒を 1 周している場合． ψ の空間的 1 価性より，磁束が Φ の時

$$\psi(x, y + 2\pi R) = \psi(x, y) \quad (9.34)$$

である．これは，結局 y 方向の波動関数変調 (k) に量子化条件を与え，これより x 位置が量子化する． $\Phi + \Delta\Phi$ になると

$$\psi(x, y + 2\pi R)e^{ie\chi(x, y + 2\pi R)/\hbar} = \psi(x, y)e^{ie\chi(x, y)/\hbar} \quad (9.35)$$

であるから，(9.33) より

$$\Delta\Phi = n\Phi_0 \quad (n : \text{integer}) \quad (9.36)$$

となり，磁束変化の量子化 (?) が生じてしまう．(連続的ゲージ変換ができない．)

Case II: 局在により，波動関数が円筒を 1 周していない場合．連続的ゲージ変換ができる．

特に Case I が問題となる．まず，ポテンシャル乱れのない系を考えると，すべて Case I である．

$$\mathbf{A} + \mathbf{A}_\Phi = \left(0, B\left(x - \frac{\Phi}{2\pi RB}\right)\right) \quad (9.37)$$

であるから，式 (??) の波動関数形からもわかるように， Φ が $\Delta\Phi$ だけ増加することは，波動関数が x 方向に $\Delta x = \Delta\Phi/2\pi RB$ だけ移動することを意味する．(9.36) の量子化条件では，もともと許されていた状態を n 個移動する変化を与える．

乱れが入ると，Case II も生じ，このような波動関数は移動しない．Case I の波動関数は図 9.6(b) のようにこれらを飛び越えながら移動する．ランダウ量子化の下では，ランダウ準位中心の非局在状態が Case II となり， $\Delta\Phi = \Phi_0$ あたり電極を出入りする電子数は，Fermi 準位より下にあるランダウ準位数 N である．系にかかっている電圧を V とすると，これによるエネルギー変化は $\Delta E = eVN$ である．このエネルギー変化は，電圧が x 方向にかかり，Hall 電流が y 方向に流れてソレノイド方向に磁場をつくっており，この磁場とソレノイド磁場との相互作用によると考えることもできる．

y 方向電流を次のように計算する．

$$\begin{aligned} J &= \left\langle \sum_i \frac{-e}{m} [p_{yi} + eA_y(r_i)] \right\rangle \frac{1}{2\pi RL} \\ &= \left\langle \frac{\partial}{\partial\Phi} \left\{ \sum_i \frac{1}{m} [p_{xi}^2 + (p_{yi} + eA_y)^2] + V_{\text{imp}}(r_i) \right\} \right\rangle \frac{1}{L} \\ &= \frac{1}{L} \left\langle \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\Phi} \right\rangle = \frac{1}{L} \frac{\partial}{\partial\Phi} \langle E \rangle. \end{aligned} \quad (9.38)$$

ここで， Φ による微分を $\Delta\Phi = \Phi_0$ による差分で代用すると，

$$J = \frac{\Delta E}{L\Delta\Phi} = N \frac{e^2 V}{h L} = N \frac{e^2}{h} E_x, \quad (9.39)$$

すなわち，

$$\sigma_{xy} = N \frac{e^2}{h}. \quad (9.40)$$

3.2 端状態

現実の多くの系では端が存在するため，Laughlin のきれいな議論がそのまま成立するわけではない．むしろ，端のある試料では端状態 (edge states) が IQHE の真の原因である，ということを出したのは Büttiker であり，その論文では「現実の (端がある) 試料では，バルクの美しい理論ではなく，ここに示した泥臭い理論が成立している」と述べている．「泥臭い理論」と呼ばれた端状態の理論は，確かに即物的な印象はあったが，やがて電子間相互作用が取り入れられてカイラル・ラッティンジャー流体理論が生まれ，更にはベリー位相に端を発したトポロジカル電流理論が生まれ，トポロジカル絶縁体やマヨラナ粒子理論など，極めて高踏的な理論の礎となったのは，皮肉というか不思議なめぐり合わせである．

2次元電子を y 方向に細長く切り出して y 方向に電流を流す状況を考え，ポテンシャルとしては x 方向で2次元電子を閉じ込める幅の広い「樋」のようなものを考える．

図??は，幅 W (ほぼ試料の幅) の樋型のポテンシャルの中で更に磁場による閉じ込めポテンシャルを電子が感じる場合の有効ポテンシャルを描いたものである．試料の端から十分離れた所

では $V(x) = 0$ で、電子は磁場による放物線形のポテンシャルを感じている、として良い。一方、端近傍では、 $V(x)$ の影響で、固有値は上昇し図 9.7 のようになる。この時、外部から電流を流し込まなくても $\partial E/\partial X$ が有限であるから、(9.29) より $\langle v_y \rangle$ は有限になり、端に沿って電流が流れる。これは、古典的には端にぶつかりながら走るスキッピング軌道による電流に対応しており、サイクロトロン軌道は円として閉じずに試料を一周し、電流を生じる。ただし、これは平衡状態では単に試料を回っているだけであり、電極から流れ出す電流ではなく、試料の断面で積分すると零になる。このように、平衡状態で試料全体を回って閉じるサイクロトロン軌道に対応する状態を端状態と呼ぶ。

次に、試料に電流が流れている非平衡状態について考える。この端近傍の試料の y 方向の長さを L_y として L_y で規格化すれば、この状態の運ぶ電流は $j = (e/L_y)v_y$ であるから、適当なエネルギー基準値 E_0 をとって、これより上の状態の運ぶ、ランダウ準位あたりの電流は

$$\begin{aligned} J &= \sum_X \frac{e}{L_y} v_y = \frac{L_y}{2\pi l^2} \int dX \frac{e}{L_y} v_y = \frac{|e|}{h} \int dX \frac{dE}{dX} \\ &= \frac{|e|}{h} (\mu - E_0) \end{aligned} \quad (9.41)$$

ここで、(??)、(??) より

$$\sum_X = \frac{L_y}{2\pi} \int dk = \frac{L_y}{2\pi l^2} \int dX$$

を用いた。この基準値以下の状態はすべて満たされているとすると、それらが運ぶ電流を試料断面で積分すると、電流密度が $(e/h)\partial E/\partial X$ で表されることから零になる。したがって、(9.41) の電流のみ考えればよい。

図 9.8 のような状況を考え、電極 A, B の化学ポテンシャルをそれぞれ μ_A, μ_B とする。左右の端電流の差が全体に流れる電流となると考える。すなわち、(9.41) で $\mu = \mu_A, E_0 = \mu_B$ と置くと、 $J = (e/h)(\mu_A - \mu_B)$ となるので、

$$\sigma_{xy} = \frac{eJ}{\mu_A - \mu_B} = \frac{e^2}{h} \quad (9.42)$$

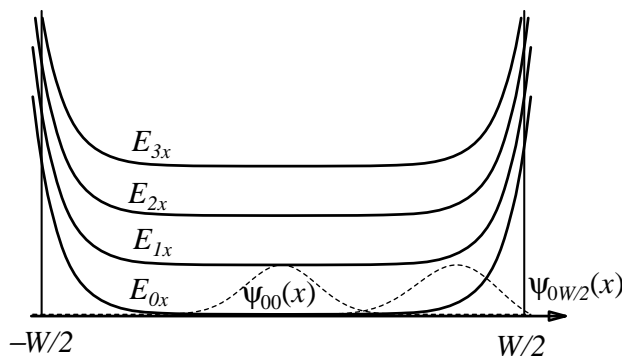


図 9.7

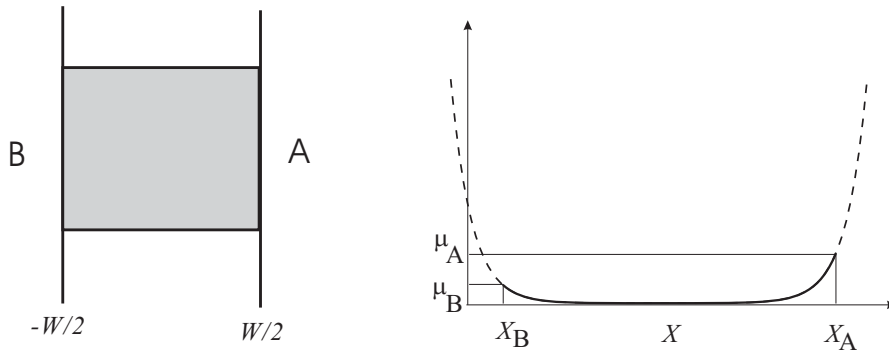


図 9.8

これはランダウ準位が1つの時の伝導度であるから，ランダウ準位が ν 個あれば σ_{xy} はこの ν 倍になり，IQHEが説明された．

これは， x と y がクロスしている部分があるだけで，ランダウアー公式の導出とほとんど同じである．あたかも端に向きを持った1次元的な伝導チャンネルが存在してそこだけ電流が流れているかのである．すなわち，ランダウアー公式は量子細線を左右に流れるチャンネルがあり，その化学ポテンシャルの差が全体の電流になるとして導かれた．今の場合，それが試料の両端に分かれ，ホール電圧分だけの化学ポテンシャル差を持っているとしている点が違っているだけである．ただし，QPCの時はそれ程正確な量子化が得られなかったのに，IQHEでは極めて正確になるのはこの違いが原因である．すなわち，QPCでは左右方向のチャンネルが空間的に重なっているため，電子の向きを反転させる散乱が容易に起こってこれは透過率 T を1からずらしてしまう．それに対し，IQHEの場合，端状態間にはマクロな空間的隔たりがあって散乱は全くないと考えて良く，ランダウアー公式流に言えば透過率は完全に1である．従って，逆に試料幅を狭めて端状態間の散乱を起こりやすくするとIQHEの量子化も正確でなくなると考えられ，実験でも確かめられている．

上のような伝導チャンネルを端（エッジ）チャンネルと称し，実際に1次元状態があるかのように考えて様々な実験が行われ，多くは端チャンネル描像を支持している．ただし，上の(9.42)にいたるIQHEの導出には決して端状態のみ電流が流れるというようなことを仮定していないことには注意しておく必要がある．すなわち，試料内部にホール電場がかかっているならば電流はもちろん流れる．しかし(9.41)を導いた時に断ったように，「 E_0 以下の状態」のように指定した場合これらの電流は試料断面で積分すると相殺してしまう．端チャンネルモデルは，最初からこのような試料全体として相殺する電流は考えないというものである．端チャンネルモデルで考える「電流」を，小宮山らに従ってフェルミ面電流と呼ぼう．

また，端チャンネル描像の成立のためには試料内部の局在状態もやはり必要である．これは，ランダウ準位が乱れにより図9.5のように広がって裾のほう局在化されていないと，例えば図9.8のようにフェルミ準位が第1ランダウ準位と第2ランダウ準位の間にある状況はほとんど1点の磁場（ないしゲート電圧）でしか現れなくなり，量子ホールプラトーがなくなってしまうからである．

以上の端チャンネル描像に対して、前副節で簡単に触れた久保公式による説明などが扱っている電流は外部の境界条件を変化させて電流を流した際の平衡状態の電流からの変化分である。これは主にバルクを流れる。したがって、見かけは非常に異なっているが、2つのモデルは結局同じことを見ているというのがひとつの見解である。

4 グラフェンと量子ホール効果

単層グラフェンは、炭素の安定構造結晶であるグラファイトの層状構造から1原子層だけを取り出したものであり、上部原子層の剥離(劈開)やエピタキシャル成長など様々な方法で作製することができる。その結晶構造からグラフェン内の電子は2次的となるが、同時に、真性グラフェンはフェルミ準位がバンドが円錐状にクロスしている点(ディラック点)の所にあり、バンド分散が直線的で質量のない構造をしている。これまでの議論ではすべて有効質量が有限であることを前提としていたので、これがゼロになるとこれまでと異なる現象が現れる可能性がある。以下これを見ていこう。

4.1 グラフェンのバンド構造

講義では時間の都合で、バンド構造は与えられたものとして議論します。

単層グラフェンの結晶は、図 9.9(a) のように、炭素原子が六角格子を組んだ単純な構造をしている。図に示した菱形が単位胞で、単位格子ベクトルおよび逆格子ベクトルは、

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}a/2 \\ a/2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 4\pi/\sqrt{3}a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix} -2\pi/\sqrt{3}a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} \quad (9.43)$$

と書くことができる。

以下、最も簡単な近似の下、グラフェンの電子状態を計算してみる。大変粗い近似であるから、実験と比べるような精度はないが、真性グラフェンにおいて、フェルミ準位位置にディラック点があることが結晶構造から結論されることは理解できる。C 原子は IV 族で、最外殻電子は $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ に詰めることになるが、結晶構造からもわかるように、これらは1次結合を作ることで、 sp^2 混成の σ 電子と π 電子に別れ、 σ 電子は共有結合を作って六角格子を形成しており、そのエネルギー帯は低い位置にある。従って、フェルミ準位付近で問題となるのは π 電子の方である。そこで、六角格子上の π 電子系について Schrödinger 方程式を考える。

これを

$$\psi = \mathcal{H}\psi \quad (9.44)$$

とし、図 9.9(a) のように、格子上のサイトを A サイトと B サイトとに分け、強束縛近似で考え

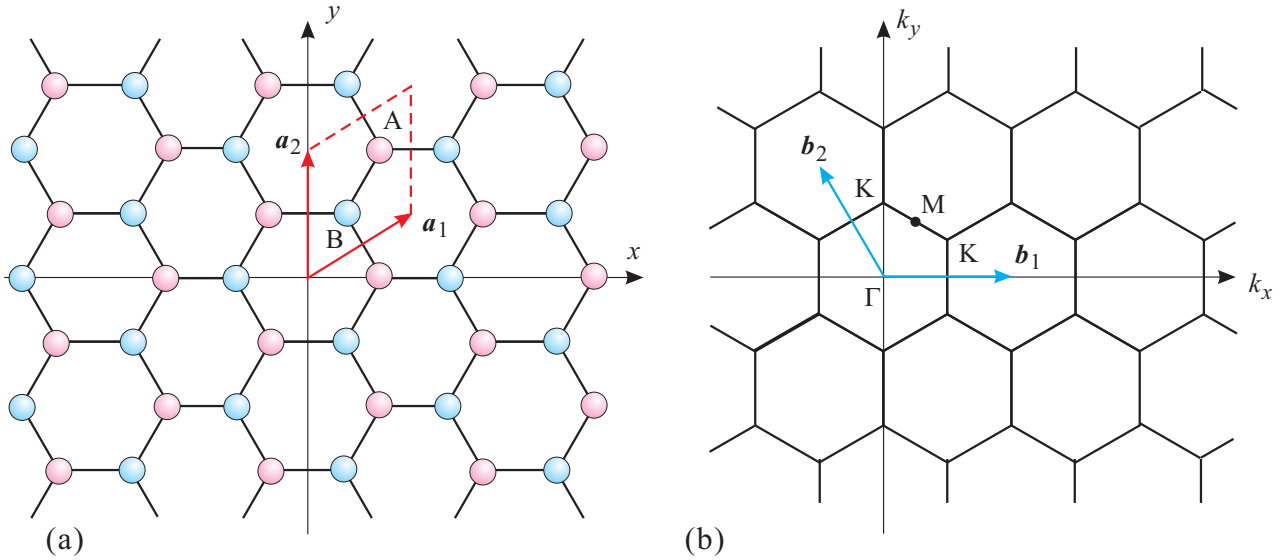


図 9.9 (a) グラフェンの 2 次元結晶構造．炭素原子が蜂の巣的な 6 角格子構造を組んでいる．A 位置と B 位置の 2 種類の面心平方格子を重ねたものと見ることもできる．(b)(a) の逆格子． a_1, a_2 に対応する逆格子ベクトルは b_1, b_2 である．第一ブリルアンゾーンの中心を Γ 点，対称性の良い点としては，図に示した K 点，M 点がある．

る．すなわち，

$$\psi = \zeta_A \psi_A + \zeta_B \psi_B, \quad (9.45)$$

$$\psi_A = \sum_{j \in A} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (9.46a)$$

$$\psi_B = \sum_{j \in B} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (9.46b)$$

$\phi(\mathbf{r})$ は π 電子の原子波動関数， \mathbf{r}_j は格子位置である．ここで各部分格子波動関数間のハミルトニアン行列要素を

$$H_{AA} = \langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_A \rangle, \quad H_{BB} = \langle \psi_B | \mathcal{H} | \psi_B \rangle, \quad H_{AB} = H_{BA}^* = \langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_B \rangle, \quad (9.47)$$

とする．また，系内の原子数を $2N$ ，すなわち

$$\langle \psi_A | \psi_A \rangle = \langle \psi_B | \psi_B \rangle = N \quad (9.48)$$

とする．強結合近似で $\langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_B \rangle = 0$ とすると，式 (9.45) を (9.44) に代入してトリビアルでない (ζ_A, ζ_B) が存在する条件から，永年方程式

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - NE & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} - NE \end{vmatrix} = 0 \quad (9.49)$$

が得られ，結局

$$E = (2N)^{-1} \left(H_{AA} + H_{BB} \pm \sqrt{(H_{AA} - H_{BB})^2 + 4|H_{AB}|^2} \right) \equiv h_{AA} \pm |h_{AB}|. \quad (9.50)$$

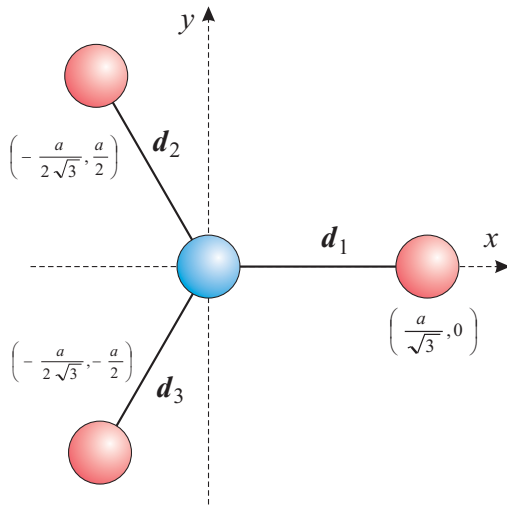


図 9.10 3つの炭素原子最近接間結合を表すベクトル.

ただし, 対称性より, $H_{AA} = H_{BB}$ であることを用い, また, $(2N)^{-1}$ で原子あたりにした量を小文字で表した.

$$H_{AB} = \sum_{l \in A, j \in B} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l)] \langle \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | \mathcal{H} | \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \rangle_r. \quad (9.51)$$

ここで更に, \mathcal{H} の行列要素は最近接波動関数にしかない, と近似する. 計算するための中心原子を図 9.9(a) の A と書かれた原子に取ると, A から最近接原子 1, 2, 3 までの3つのベクトルを $\mathbf{d}_i (i = 1, 2, 3)$ とすると, 図から明らかなように,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_1 = \frac{k_x a}{\sqrt{3}}, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_2 = \left(-\frac{k_x}{2\sqrt{3}} + \frac{k_y}{2} \right) a, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_3 = \left(-\frac{k_x}{2\sqrt{3}} - \frac{k_y}{2} \right) a \quad (9.52)$$

である ($a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$). また, $\langle \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | \mathcal{H} | \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \rangle_r$ の項については, 対称性から全て等しく, これを ξ と置く. 結局結晶構造から残りの共鳴積分はこの繰り返しであるから,

$$h_{AB} = \left(\sum_{j=1}^3 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j) \right) \xi. \quad (9.53)$$

である.

式 (9.52), (9.53) を式 (9.50) へ代入することで, 次のエネルギー表式が得られる.

$$E = h_{AA} \pm \xi \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}}. \quad (9.54)$$

第2項が隣接原子共鳴積分による摂動項であるが, 逆格子空間で K 点と呼ばれる

$$(k_x, k_y) = \left(0, \pm \frac{4\pi}{3a} \right), \quad \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a} \right), \quad \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a} \right) \quad (9.55)$$

でゼロとなることがわかる. $k_y = 4\pi/3a$ とすると, $k_x = 0$ (K 点の1つ) の周りで (9.54) は

$$E \left(k_x, \frac{4\pi}{3a} \right) \approx h_{AA} + \frac{\sqrt{3}\xi a}{2} |k_x| \quad (9.56)$$

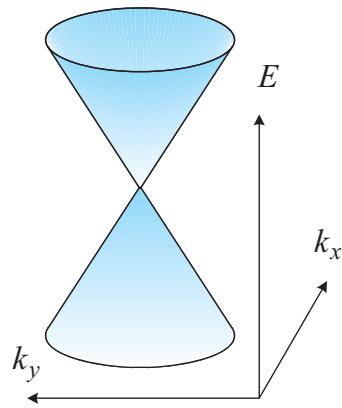
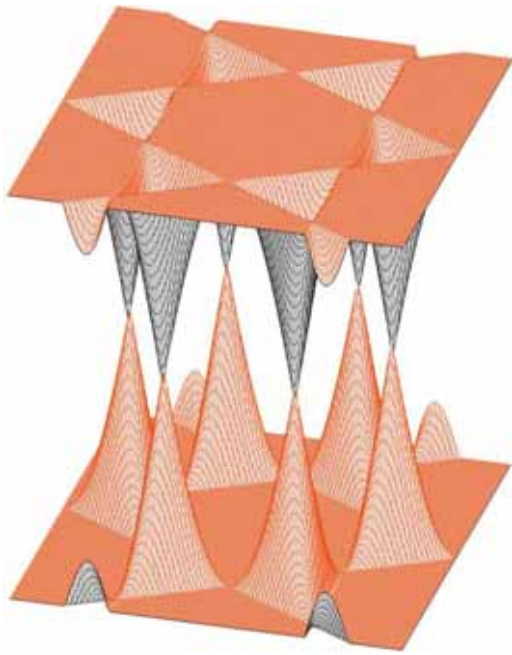


図 9.11 左図：グラフェンのエネルギーバンド表式 (9.54) をプロットし、K 点にコーンの頂点が一致した、ディラック点が見える様子を示したもの。上図：ディラック・コーンを模式的に描いた。

と表される。すなわち、K 点では上側のバンドは下側にリニアな尖った形になっている。下側も同様であるから、結局、K 点では図 9.11 のようにディラック点と呼ばれる、エネルギーギャップと有効質量がないバンド構造が生じる。

式 (9.54) 自身は、1 次元結晶の強束縛近似で余弦バンドが現れるのと同様で余り現実的なものではないが、上の議論で K 点にディラック点が見えた理由を考えると、式 (9.53) で 2π を 3 等分する方向に等しい共鳴積分が存在することが挙げられ、このことは、近似の精度を上げて同じ対称性が成立するため、同じようにバンド構造に現れる。すなわち、K 点は現実的にディラック点と考えて良い。

4.2 グラフェンでの実験

グラフェンを実際に作る試みは、様々に行われていたが、電気伝導において目覚ましい結果を得たのは、シリコン基板上にグラファイトを圧着し、スコッチテープで上部層を剥ぎとって、最後に残った単原子層に微細加工電極を付けて測定するという方法で行われた。シリコン基板は低温でも金属的な伝導が可能な程度に高濃度ドーピングされ、上側表面は酸化膜で覆っており、したがって、グラフェンとの間で一種の MOS(ただし、今の場合、Si 基板が「M」の役割を果たしている) トランジスタを形成しており、グラフェンの電子(正孔)濃度をゲート電圧によって制御できるようになっている。

4.3 整数量子ホール効果

この試料に現れた量子ホール効果が図 9.12 である。磁場は固定して、ゲート電圧によりキャリア数従って充填率を変化させることで IQHE を生じさせている。正ゲート電圧が電子キャリア

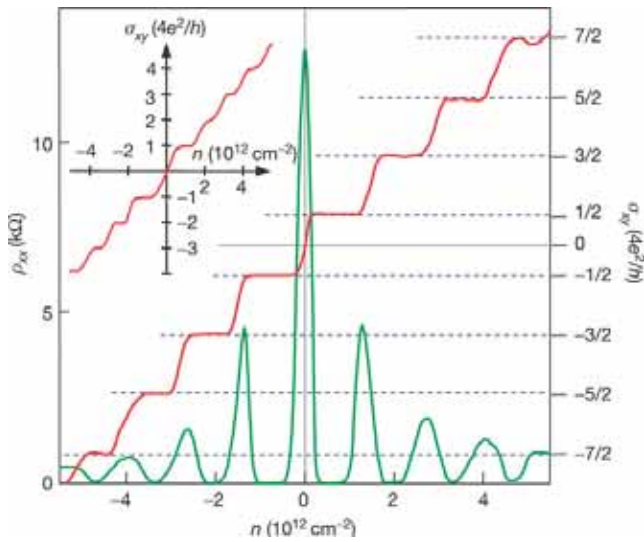


図 9.12 単相グラフェンで測定された整数量子ホール効果 .

ア, 負ゲート電圧が正孔キャリアに対応する . 通常の IQHE とは異なり ,

$$\sigma_{xy} = 4 \left(n + \frac{1}{2} \right) G_q \quad (9.57)$$

の位置に量子化プラトーが現れている . 係数 4 の内 , 2 はバンド計算の時に見たように , A 部分格子と B 部分格子とがあり (この自由度を擬スピン (pseudo-spin) と呼ぶ) この自由度が縮退しているためである . 残りの 2 は , 図 9.9(b) からわかるように , 第一ブリルアンゾーンの中に , K 点が 2 つ縮退して存在しているためである . このようにバンドの縮退によって量子化値が縮退度分だけ大きくなることは他の半導体系でも普通に見られることで , 特に異常ではない .