

修士論文

## 2層グラフェンを用いた電子の閉じ込め

東北大学大学院理学研究科

物理学専攻

井上 裕哉

平成 27 年



# 謝辞

本研究を行うにあたり、熱心にご指導していただきました齋藤理一郎教授(東北大学大学院 理学研究科)に厚く御礼申し上げます。また、泉田渉助教(東北大学大学院 理学研究科)には、セミナー等において多くの助言をいただきましたことを感謝いたします。Ahmad Ridwan Tresna Nugraha 助教(東北大学大学院 理学研究科)には、研究室の計算機環境等の整備において多くのことを教えていただきましたことを感謝いたします。研究室のスタッフ・学生の皆様には、研究が行き詰まった際によく議論をしていただきました。秘書の若生洋子様、佐藤眞理様、隅野節子様には研究を進める際、事務手続きをはじめ、日常の様々な場面でお世話になりました。心より感謝申し上げます。

最後になりますが、私を常に支えてくださっている家族、友人に感謝いたします。

井上 裕哉



# 目次

謝辞	i
目次	iii
<b>第1章 研究背景</b>	<b>1</b>
1.1 本研究の目的	1
1.2 グラフェンとは	2
1.3 グラフェンにおけるクライントネル効果	4
1.4 2層グラフェン	5
1.4.1 2層グラフェンにおけるバンドギャップの生成	5
1.4.2 2層グラフェンを用いたFETの作成	6
1.5 本論文の構成	8
<b>第2章 グラフェンの電子物性</b>	<b>9</b>
2.1 単層グラフェンの電子状態	9
2.1.1 単層グラフェンの結晶構造と分散関係	9
2.1.2 K点近傍での波動関数	13
2.2 2層グラフェンの電子状態	16
2.3 クライントネル効果	19
2.3.1 1層グラフェンの場合	19
2.3.2 2層グラフェンの場合	23
<b>第3章 計算方法</b>	<b>26</b>
3.1 透過率の計算	26
3.2 電流の on/off 比の評価	26
3.3 波束の時間発展	27

<b>第4章 結果</b>	<b>30</b>
4.1 垂直入射の場合 . . . . .	30
4.2 共鳴トンネル条件 . . . . .	31
4.2.1 $\phi = 0^\circ$ 近傍で起こる共鳴 . . . . .	31
4.2.2 共鳴トンネルを電流の on/off に利用する場合 . . . . .	33
4.3 波束の時間発展 . . . . .	36
<b>第5章 まとめ</b>	<b>40</b>
<b>付録A 2層グラフェンの有効ハミルトニアンの導出</b>	<b>41</b>
<b>付録B クライン透過率の計算詳細</b>	<b>43</b>
B.1 単層グラフェンの透過率の導出 . . . . .	43
<b>付録C プログラム</b>	<b>46</b>
C.1 2層グラフェンの透過率計算 . . . . .	46
C.1.1 ポテンシャル障壁が1つの場合 . . . . .	46
C.1.2 ポテンシャル障壁が2つある場合 . . . . .	52
<b>参考文献</b>	<b>65</b>
<b>発表実績</b>	<b>67</b>

---

# 第1章 研究背景

近年注目を集めている次世代材料の一つに、ナノカーボンがある。これは、ナノメートルサイズの炭素原子の同素体の総称あり、従来の半導体材料をはるかにしのぐ性質を持つことが知られている。ナノカーボンの一つであるグラフェンも、その特異な電氣的性質を生かしたデバイス作成に注目が集まっているが、そのままではゲート電圧による電流の制御ができないという問題を抱えている。これが、グラフェンの応用に関する最も重要な課題の一つとして知られている。この問題を解決するための方法としては、質量を持った電子を有する2層グラフェンを用いることが有効である。この章では、従来取られてきたバンドギャップの生成による電流の制御とともに、本研究ではどのような点に注目してこの課題を解決していくかを述べる。

## 1.1 本研究の目的

グラフェン上の電子は、質量をゼロとしたディラック方程式で記述される。この質量のない電子は”止めることができない”という著しい性質を持っているために、高い移動度を実現するなどの特異な物性を示す。このため、応用の面からも多くの注目を集めているが、”止めることができない”という性質は、電流が電圧の印加で制御できないことを意味し、デバイス作成においては大きな弱点となっている。

一般に電界効果トランジスタ (FET) で行う電流の制御は、半導体のバンドギャップを利用しゲート電圧の調整で行う。しかし、グラフェンはギャップのない半金属であるため、この方法を用いる場合はグラフェンにおいてもバンドギャップを作成する必要がある。2層グラフェンにおいては、面に垂直にゲート電圧をかけることでバンドギャップを生成することができ、このことを利用した FET の作成が既に行われている。この方法で、室温での電流のオンオフ比を 100 程度に実現できることが報告されている<sup>[1]</sup>。しかし、FET が示す電流のオンオフ比は  $\sim 10^5$

程度であることが求められ、まだ実用的であるとは言えない。

本研究の目的は、2層グラフェン上の電子をポテンシャルで閉じ込めることである。2層グラフェンの場合、フェルミ面近傍で有効質量のあるカイラル粒子として振る舞うため、1層のときとは異なるトンネリングを示す<sup>[2]</sup>。このトンネル確率を再考察することで、バンドギャップを生成しなくても電子の閉じ込めが可能であることを示し、さらに電流のオンオフの切り替えに利用できることを提案する。

## 1.2 グラフェンとは

グラフェンは、炭素原子が蜂の巣格子状に配置した原子1層の2次元物質である(図1.1)。炭素の同素体の中で最も安定とされているのがグラファイト(黒鉛)であり、これは炭素原子の層が積み重なった層状物質である。各層の中では、炭素原子の3つの価電子が $sp^2$ 混成軌道をとって蜂の巣格子を組み、互いに共有結合で結びついて平面のシートを形成する。残りの1つが、ファンデルワールス結合に寄与するが、これは共有結合と比べて弱い結合である。そのため、グラファイトは層状に剥がれる性質を持っている。そして、この原子層1層がグラフェンである。

グラフェンは、グラファイトが層状に剥がれるという性質を利用して作成される。具体的には、スコッチテープを用いて単層になるまで剥離を続けるというものである。グラフェンは1層で可視光を約2.3%吸収するという性質を持っているため、層の数を光学顕微鏡での濃淡で直接観察することができる。この方法で2004年に A. Geim と K. Novoselov は単層のグラフェンを作成し、 $SiO_2$  表面上に移しとってからその電気伝導特性を測定することに成功した<sup>[3]</sup>。グラフェンは、伝導を担うフェルミエネルギー近傍の電子( $\pi$ 電子)が質量のないディラック方程式で記述されることに起因して、通常の2次元電子系とは異なった電子物性が実現している。このため、この発見以後、グラフェンは2次元の全く新しい物質としてあらゆる分野からのアプローチで研究が爆発的に進められている。

一方で、グラフェンの電子状態に関する研究はこの発見よりも50年近く前から行われている。グラフェンの電子の特殊性については1947年にすでに P. Wallace が見出しており<sup>[4]</sup>、1998年には安藤らがグラフェンの電気伝導に特殊性を指摘している<sup>[5]</sup>。A. Geim と K. Novoselov はこの発見の6年後にあたる2010年にノーベル物理学賞を受賞している。

応用上の観点からは、グラフェンを半導体の材料として使う試みが世界中で行わ



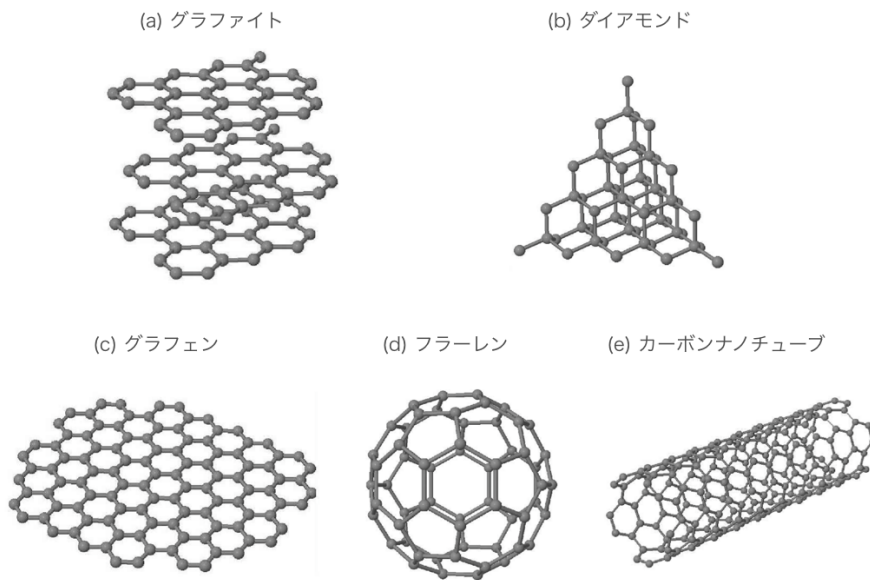


図 1.1: 炭素の同素体。炭素は 4 個の価電子を持ち  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$  などの様々な結合軌道を作るため多くの同素体が存在する。(a) グラファイトは炭素原子が  $sp^2$  混成軌道により共有結合で平面を構成し、層間をファンデルワールス結合でゆるく積層したもの。(b) ダイヤモンドは  $sp^3$  混成軌道により 3 次的に結合しており、天然で最も硬い物質として知られている。(c) グラフェンはグラファイトの原子層 1 層の 2 次元物質であり、これらを球状、円筒状に丸めたものがそれぞれ (d) フラーレン、(e) カーボンナノチューブと呼ばれている。特に、(c)(d)(e) の 3 つを総称してナノカーボンと呼び、次世代材料としての注目を集めている。

れている。グラフェンは厚さが、たった原子 1 つ分であるため、ほとんど透明でかつ柔軟な材料という特性を持っている。また、グラフェンは室温で  $\sim 10^5$  [ $\text{cm}^2/\text{Vs}$ ] という極めて高い電子移動度を持つ。これは、従来の半導体材料であるシリコンの約 100 倍に相当する。これらの特徴を生かして、グラフェンを利用した透明電極材料<sup>[6]</sup> や高周波電子デバイス (THz 領域) の開発<sup>[7]</sup> などが行われている。

また、本研究では直接扱わないが、グラフェン以外にも同じく炭素の同素体であるフラーレンやカーボンナノチューブが次世代材料として近年多くの研究が行われている (図 1.1)。カーボンナノチューブは、1991 年に飯島によって発見された、グラフェンシートを円筒状に丸めた物質である<sup>[8, 9]</sup>。直径が数ナノメートルに対し、長さがマイクロメートルからミリメートル程度までを持つため、カーボ

図 1.1: chap1/img/nanocarbon.eps

ンナノチューブは準 1 次元物質と呼ばれる。さらに、物性が円筒状にする巻き方 (ナノチューブの直径と螺旋度を定めるカイラルベクトル) によって決まり、これにより金属にも半導体にもなるという性質がある。このため、半導体のカーボンナノチューブを用いた FET の作成も行なわれている<sup>[10]</sup>。

### 1.3 グラフェンにおけるクライントネル効果

電子のポテンシャル障壁に対する透過率を考えたとき、通常の電子ではポテンシャル中で波動関数が指数関数的に減少して、ある一定の確率で電子は障壁を通り抜けることが可能になる。こうした波動関数の染み出しがあることをトンネル効果と呼び、透過率はポテンシャルの幅と高さに依存する。ところが、ディラック電子では、ポテンシャルが電子の質量程度の大きさのときポテンシャル中を反粒子として自由に通り抜けることが分かった。これは、ポテンシャル障壁の高さや幅に依存せずに、完全に電子が透過できること意味する。このことを 1929 年にクラインは発見した<sup>[11]</sup>。これが、クラインパラドックス (クライントネル効果) と呼ばれるものである。しかし、実際にこの現象を直接測定することはできていない。実現するためには、電子の波長程度で急峻なポテンシャルを用意する必要があり、通常物質ではそれを作り出すことができないからである。こうしてクライントネル効果は、高エネルギーな系で起こると予測されるものとして捉えられていただけであった。

一方、グラフェンの電子の伝導に関しては、1998 年に金属カーボンナノチューブで後方散乱が消失することが安藤らによって報告されている<sup>[5]</sup>。さらに、2006 年には、グラフェンの電子もディラック方程式に従うため、もともと相対論的量子力学の問題であったクライントネル効果がグラフェンの電子によっても起きることを Katsnelson らが示した<sup>[2]</sup>。これを受け、いくつかの実験グループが実際に電子の完全透過を測定することに成功した<sup>[12, 13]</sup>。これらはすべて単層グラフェンを用いた実験である。2 層グラフェンは有効質量を持つがカイラル粒子であるため、垂直入射に関して特徴的な透過率を示すことが予測されている<sup>[2]</sup>が、測定した実験はまだ行われていない。

## 1.4 2層グラフェン

本研究では2層グラフェンに着目する。その理由は、伝導に寄与するフェルミ面近傍の電子が、有効質量を持つカイラル粒子として振る舞うからである。単層グラフェンに特徴的な線形分散は、層間の相互作用を加えることで放物線分散に変わる。こうして、単層グラフェンの電子が持つ最大の特徴である止まらないという性質は失われる。しかし、2層グラフェンは単層グラフェンと似た多くの性質を引き継ぎ、室温における移動度も  $4 \times 10^4 \text{cm}^2/\text{Vs}$  と報告されている<sup>[14]</sup>。

また、2層グラフェンを用いることで、バンドギャップを生成することができる。これは、単層グラフェンでは電流のオンオフを制御することができなかったのに対し、デバイスの作成に関して大きな利点となる。そのため、2層グラフェンでいかにギャップを生成し測定するかということが盛んに研究されてきた。

本研究では、2層グラフェンの持つ透過率の特異性に着目する。これは、ポテンシャル障壁に垂直に入射した電子は完全に反射されるというもので、単層グラフェンの場合と真逆の結果になる。そのため、2層グラフェンのバンドギャップ生成に関することは扱わないが、2層グラフェンによる FET 作成の背景として、これまでに行われてきた取り組みを以下に示す。

### 1.4.1 2層グラフェンにおけるバンドギャップの生成

バンドギャップを生成するには2つの面間の反転対称性を壊し、上下の層の原子が非等価なものとなればよい。広く用いられている方法としては、2層グラフェンの面に垂直に電圧をかける方法である。これによって、上の層と下の層でかかるエネルギーが変化し、加えた電場の大きさに依存するようなバンドギャップを生成することができる。

このような方法で2009年に Zhang らは、それまでコントロールの難しいと考えられてきたバンドギャップの生成に成功した<sup>[15]</sup>。図 1.2 のようなデバイスを作成し、2層グラフェンに垂直に電場をかけ、赤外線光学吸収によってバンドギャップを測定した。実験ではゲートを2つ用意することで、トップゲートとボトムゲートによって誘起される電束密度  $D_t, D_b$  をそれぞれ独立に変化させることができる。これにより、バンドギャップの大きさ  $\bar{D} = \bar{D} = (D_b + D_t)/2$  とフェルミ面の位置に対応する電荷のドーピング密度  $\delta D = D_b - D_t$  を独立に変化させることができる。こうして、バンドギャップはゲート電圧を変えることによって0から250meVまで連

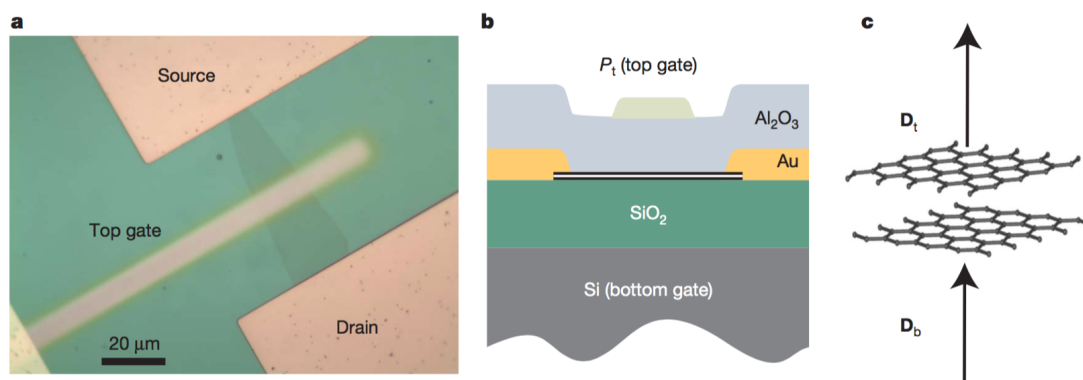


図 1.2: Zhang らが実験に使用したデバイス図 [15]。a, 光学顕微鏡によるデバイスを上から見た図。b, デバイスの断面図を描いたイメージ図。ゲートチャンネル部は、2層グラフェンを2つのゲートで挟む構造を取っている。c, 2層グラフェンに対して垂直にゲート電圧をかけ、トップとボトムに電束密度  $D_t, D_b$  を誘起することを示している。

続的に変化させられることを示した (図 1.3)。さらに、この結果を理論計算と比較を行い、ゲート電圧が大きくなるほどグラフェンの中で電荷の配置換えが起こり、自己遮蔽効果が大きく効いてくることを示している。このため、生成できるバンドギャップの大きさには上限があることが分かる。

#### 1.4.2 2層グラフェンを用いた FET の作成

2層グラフェンを用いると、前述の電圧の印加でギャップを生成する方法で FET を作成することができる。2010 年に Xia らは前述の Zhang らの実験とほぼ同じ構造のデバイスを考え、ドレイン電流のオンオフ比を測定した [1]。Zhang らも抵抗を測定して同様の結果を得ているが、Xia らは電流を測定してオンオフ比を評価した。これらによると、電流が最低の値をとるとき電荷が中性となる ( $\delta D = 0$ )。このようなトップゲートとバックゲートの組み合わせの中で ( $D_b = D_t$ ) バンドギャップが大きくなる時抵抗が最大となり、このとき、電流のオンオフ比が室温で最大 100 程度であることを示した。さらに、20K のときオンオフが 2000 程度になることも示している。しかし、従来の FET の示すオンオフ比が  $10^5$  程度であることを考えると、この値はまだ実用的であるとは言えない。

図 1.2: chap1/img/exp\_bilayer\_gap\_img.eps

図 1.3: chap1/img/exp\_bilayer\_gap\_img.eps

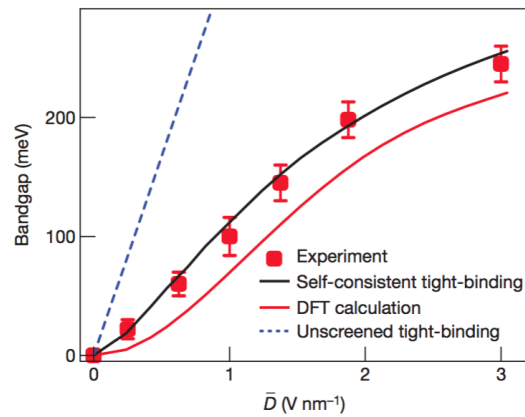


図 1.3: 2層グラフェンにおける実験により得られたバンドギャップの大きさと、かけたゲート電圧 ( $\bar{D} = (D_b + D_t)/2$ ) の関係 [15]。さらに、実験結果を理論計算の結果と比較を行っている。

なお、単層グラフェンにおいても2つのゲートを用いて同様の測定を行っており、電流のオンオフ比は4程度しか得られないことが示されている (図 1.4(c))。

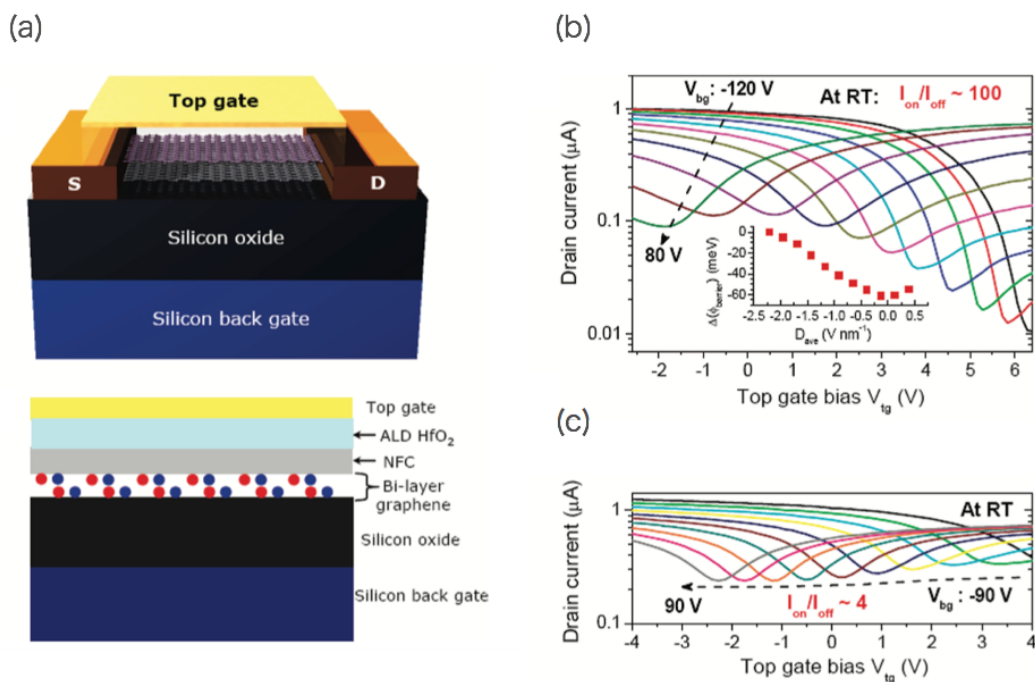


図 1.4: (a) Xia らが実験に使用したデバイスのイメージ図。Zhang らの実験と同じく、2 層グラフェンを 2 つのゲートで挟んだ構造をしている。(b) 室温における、バックゲートを固定しトップゲートを変化させたときのドレイン電流の変化。それぞれ色の異なる線が固定したバックゲートの大きさに対応する。バックゲート電圧は-120V から 80V まで 20V 刻みで測定されている。挿入図はバンドギャップを生成する電束密度の平均に対して、ショットキー障壁の高さを評価している。(c) 室温において同様の実験を単層グラフェンを用いて行った結果 [1]。

## 1.5 本論文の構成

本論文では、2 層グラフェン上の電子をバンドギャップを開けずにポテンシャル障壁で閉じ込める方法を明らかにする。そのために、まずは第 2 章において、1 層及び 2 層グラフェン上の電子の持つ基本的な性質を示す。特に、電子の 1 次元的なポテンシャル障壁に対するトンネル確率の計算から、クラインパラドックスと呼ばれるグラフェン特有の現象を説明する。これが 1 層の場合と 2 層の場合で全く異なる結果になる、というところが本研究で利用したいと考える 2 層グラフェンの性質である。第 3 章において、計算に使用したポテンシャル障壁の形状と計算手法を示す。そして、第 4 章で得られた結果を示し、どのような条件で電子の閉じ込めが可能であるかということと、この方法で電子のオンオフ制御が可能かどうかという議論を行う。最後に第 5 章でこれらをまとめる。

---

## 第2章 グラフェンの電子物性

本章では、まず単層グラフェンの結晶構造について述べ、タイトバインディングモデルと有効質量近似を用いて波動関数を導出する。さらに、この波動関数はディラック方程式の解になっていることから、クライントンネリング効果と呼ばれる特異な伝導現象が現れることを確認する。また、2層グラフェンについても同様の考察から波動関数が導くことができるが、これが質量ゼロのディラック電子でなくともやはり特異なトンネル効果を示すことを述べる。

### 2.1 単層グラフェンの電子状態

#### 2.1.1 単層グラフェンの結晶構造と分散関係

グラフェンは図 2.1 に示すように、炭素原子が蜂の巣格子上に敷き詰められた構造をしている。炭素原子は、1つの  $2s$  軌道と3つの  $2p$  軌道 ( $2p_x, 2p_y, 2p_z$ ) からなる、合計4つの価電子を持つ。このうち  $2s$  と  $2p_x, 2p_y$  の3つの軌道が  $sp^2$  混成軌道を構成し、それぞれが隣の炭素原子との間で  $\sigma$  結合を作る。これらは平面内にお互いの間の角度が  $120^\circ$  をなすように配向し、蜂の巣状の構造が実現する。 $\sigma$  結合に寄与するこれらの軌道は炭素原子間に強く局在していて、エネルギー的にも深く、フェルミエネルギー近傍には現れてこない。フェルミエネルギー近傍に現れるのは、 $p_z$  軌道が  $\pi$  結合することによって作られる電子状態、 $\pi$  バンドである。 $\pi$  バンドは、純粋に各炭素原子上に  $p_z$  軌道だけがあると考えて導出することができる ( $2p_z$  軌道は平面に対して垂直に存在し、空間的に異なる対称性を持つため)。

グラフェンの単位胞には、幾何学的に非等価な2つの原子がある (片方だけでブライヤー格子を作ることはできない)。これらを区別してA原子、B原子と呼び、それぞれの原子からなる副格子をA副格子、B副格子と呼ぶ。後に見るように、グラフェンが他の2次元電子と異なる性質を持つのは、このように蜂の巣格子を組んだために単位胞に異なる原子が含まれたためと表現することができる。

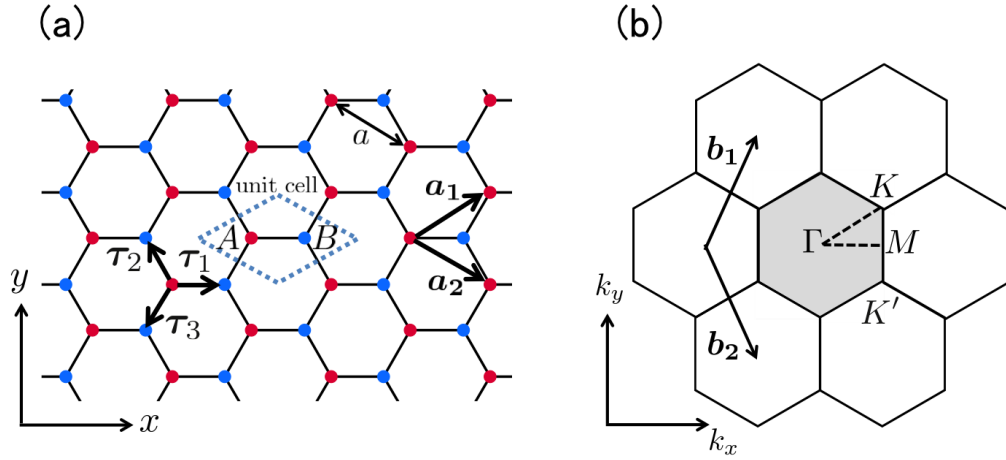


図 2.1: (a) グラフェンの蜂の巣格子。ひし形の単位胞の中に非等価な炭素原子 (A 原子と B 原子) が 2 つ含まれる。(b) グラフェンの逆格子。影をつけた 6 角形の部分がブリルアンゾーンである。対称性の高い  $\Gamma, K, M$  点に囲まれた 3 角形での電子状態が分かれば、他の点の状態を対称性から知ることができる。

今、実空間で基本格子ベクトルを以下のように定義する (図 2.1)。

$$\mathbf{a}_1 = a \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2 = a \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) \quad (2.1)$$

ここで、 $a$  は基本格子ベクトルの長さで、 $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = 2.46 \text{ \AA}$  である。なお、炭素原子間の距離は  $a_{C-C} = 1.42 \text{ \AA}$  である。単位胞は  $\mathbf{a}_1$  と  $\mathbf{a}_2$  で作られるひし形となる。これに対応する逆格子ベクトルは、

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, -1 \right) \quad (2.2)$$

である。ブリルアンゾーンも同様に  $\mathbf{b}_1$  と  $\mathbf{b}_2$  で作られるひし形であるが、元の結晶の対称性を考えて図 2.1 のように 6 角形でとる。このブリルアンゾーンの頂点を  $K$  点、 $K'$  点と呼び、それぞれの波数は

$$\mathbf{K} = \frac{\pi}{a} \left( 1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right), \quad \mathbf{K}' = \frac{\pi}{a} \left( 1, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad (2.3)$$

で与えられる。

今、 $\pi$  バンドの電子状態は A 原子と B 原子それぞれの  $2p_z$  軌道のみを考慮すればいいので、結晶中での電子状態はこれらの原子の  $2p_z$  軌道の線形結合で表さ

図 2.1: chap2/img/single\_lattice.eps



れる。

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = c_A \Phi_A(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + c_B \Phi_B(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.4)$$

$$\Phi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_i}^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (2.5)$$

ここで、 $\varphi(\mathbf{r})$  は炭素原子の  $2p_z$  軌道の波動関数であり、 $\mathbf{R}_i$  ( $i = A, B$ ) は A 原子と B 原子の位置ベクトル、 $N$  は単位胞の数である (ただし、A 原子と B 原子は並進操作でつながっていないので、個別に扱う必要がある)。 $\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  はブロッホの定理を満たすブロッホ軌道である。ここで、A 原子または B 原子に対して  $|\mathbf{R}_i\rangle = \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  とすると、

$$|\Psi_i\rangle = \sum_{\mathbf{R}_i} d_i(\mathbf{R}_i) |\mathbf{R}_i\rangle \quad (2.6)$$

$$d_i(\mathbf{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} c_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (2.7)$$

と表せる ( $i=A, B$ )。シュレーディンガー方程式に左から  $\langle \mathbf{R}_i |$  をかけ、

$$\sum_{\mathbf{R}'_i} d_i(\mathbf{R}'_i) \langle \mathbf{R}_i | H | \mathbf{R}'_i \rangle = E \sum_{\mathbf{R}'_i} d_i(\mathbf{R}'_i) \langle \mathbf{R}_i | \mathbf{R}'_i \rangle \quad (2.8)$$

ここで、 $\langle \mathbf{R}_i | \mathbf{R}'_i \rangle = \delta_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}'_i}$  を仮定し、異なる原子間の重なり積分がないとする。さらに、飛び移り積分 (ホッピング) を  $t(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}'_i) = -\langle \mathbf{R}_i | H | \mathbf{R}'_i \rangle$  とおけば、タイトバインディングモデルの関係式が求まる。

$$-\sum_{\mathbf{R}_i} t(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}'_i) d_i(\mathbf{R}'_i) = E d_i(\mathbf{R}_i) \quad (2.9)$$

これを、A 原子と B 原子の両方に対して適用する。ここでは、最近接のホッピング  $\gamma_0$  のみを考慮すると ( $\gamma_0$  は実験的に得られるパラメータで  $\gamma_0 \sim 3\text{eV}$ )、

$$-\gamma_0 \sum_{l=1}^3 d_B(\mathbf{R}_A + \boldsymbol{\tau}_l) = E d_B(\mathbf{R}_A), \quad -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 d_A(\mathbf{R}_B - \boldsymbol{\tau}_l) = E d_A(\mathbf{R}_B) \quad (2.10)$$

式(2.7)より、

$$-\gamma_0 \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix}, \quad f(\mathbf{k}) = \sum_{l=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_l} \quad (2.11)$$

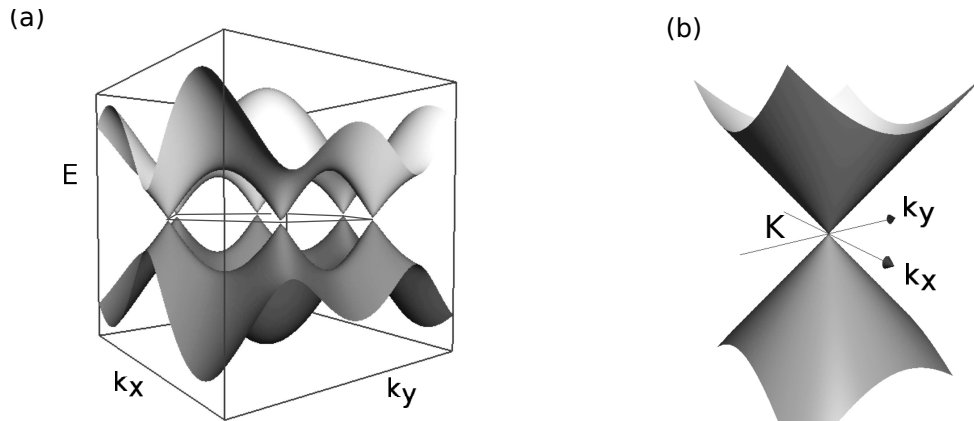


図 2.2: (a) 単層グラフェンのバンド構造。ブリルアンゾーンの端(K,K' 点)で  $\pi$  バンドと  $\pi^*$  バンドが線形に交わる。フェルミエネルギーはちょうどこの交点(ディラック点)に位置する ( $E = 0$ )。 (b) K 点、K' 点近傍での円錐型の線形分散(ディラックコーン)。

と書ける。エネルギー固有値はこの行列を対角化して得られる。

$$E(\mathbf{k}) = \pm\gamma_0|f(\mathbf{k})| = \sqrt{1 + 4\cos\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2} + 4\cos^2\frac{k_y a}{2}} \quad (2.12)$$

これを波数空間でプロットしたものが図 2.2(a) である。これより、K 点と K' 点で  $E = 0$  を対称に上下 2 枚のバンドがギャップなしに触れ合っていることが分かる。この接する点をディラック点と呼ぶ。さらに、各炭素原子は平均で 1 つの  $\pi$  電子を持つので、基底状態では下側のバンドには完全に電子が詰まっており、上側のバンドは空になっている。したがって、フェルミエネルギーはちょうどこのバンドの接する点 ( $E = 0$ ) に位置することが分かる。

実験でアクセス可能なエネルギー領域はディラック点近傍 1eV 程度であるから、グラフェンの電子物性は K 点周りの電子構造でほぼ決まるといえることができる。また、グラフェンが持つ 2 つの副格子を反映して、2 つの非等価な点 (K と K' 点) が存在する (この自由度をバレーと呼ぶ)。以後、この 2 つの違いを区別するためにバレーのインデックスを  $\xi = \pm 1$  とする (K 点が  $\xi = 1$ , K' 点が  $\xi = -1$  に対応)。

そこで次に、K 点近傍の電子状態を計算する。これは、式 (2.11) を K 点の周りで展開することで得られる。まず、 $K_\xi$  点から測った運動量を  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} - \hbar\mathbf{K}_\xi$  と定

図 2.2(a): chap2/img/single-dispersion.eps

図 2.2(b): chap2/img/cone.eps

義すると、 $pa/\hbar \ll 1$  のとき

$$f(\mathbf{k}) \approx -\frac{\sqrt{3}a}{2\hbar}(\xi p_x - ip_y) \quad (2.13)$$

と展開することができる。こうして、有効ハミルトニアン of 行列が

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_A & v\pi^\dagger \\ v\pi & \epsilon_B \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

と書ける。ここで、 $\pi = \xi p_x + ip_y$ ,  $v = \sqrt{3}a\gamma_0/2\hbar$  である。 $v$  は電子の速度で、運動量によらず  $v \sim 1 \times 10^6 \text{m/s}$  となり、光速の  $1/300$  程度である。 $\epsilon_A = \epsilon_B = 0$  のとき、

$$E = \pm v|\mathbf{p}| \quad (2.15)$$

となって線形分散となることが分かる (図 2.2 (b))。

### 2.1.2 K 点近傍での波動関数

タイトバインディングモデルを用いて A 原子と B 原子の振幅に関する関係式 (2.11) を導出し、さらに K 点近傍で展開することで有効ハミルトニアンを導出することができた。しかし、各炭素原子の位置  $\mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B$  が不連続であるため式 (2.11) の  $c_A, c_B$  は本来連続量ではない。このため、有効質量近似を用いて K 点周りの振幅を包絡関数を使って評価する必要がある。しかしこの結果は、式 (2.11) で示した K 点近傍での有効ハミルトニアンに対して、 $\mathbf{p}$  を微分演算子とみなすことで包絡関数を連続関数としてそのまま定義することができることを示す。つまり、 $\epsilon_A = \epsilon_B = 0$  のとき K 点近傍での波動関数は

$$v \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_A^K(\mathbf{k}) \\ F_B^K(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} F_A^K(\mathbf{k}) \\ F_B^K(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

を解くことで得られる。ここで、K 点近傍での A 原子、B 原子における波動関数を  $\mathbf{F}(\mathbf{r})^K = (F_A^K, F_B^K)$  と置き直した。この有効質量方程式は、パウリのスピン行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

を用いて

$$v(\sigma_x \hat{p}_x + \sigma_y \hat{p}_y) \mathbf{F}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = E \mathbf{F}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

と書くことができる。K' 点の周りの電子状態も、式 (2.13) より  $p_x$  を  $-p_x$  をすることで同様に求めることができる。

$$-v(\sigma_x \hat{p}_x + \sigma_y \hat{p}_y) \mathbf{F}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) = E \mathbf{F}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

ここで、グラフェンの電子がディラック方程式で記述されるディラック電子であるということを確認する。ディラック方程式はシュレーディンガー方程式に相対論的な効果を取り入れたものである。このうち、スピン 1/2、質量 0 のフェルミオンを記述するワイル方程式は、4 成分波動関数を 2 成分  $\psi = (\psi_L, \psi_R)$  と分けると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_L = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi_L, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_R = -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi_R \quad (2.20)$$

と表される。ここで、 $c$  は光速、 $\psi_L$  と  $\psi_R$  は左巻き、右巻きの状態に対応している。ワイル方程式のエネルギーは、

$$E = \pm cp \quad (2.21)$$

と書かれる。これを K 点周りの単層グラフェンの電子と比較すると、光速  $c$  とフェルミ速度  $v$  が対応して、確かに同じ方程式で表されることが分かる。このときの波動関数の成分はスピンに対応するが、グラフェンの場合、A 原子と B 原子の 2 つの成分の確率振幅を表しているだけで、電子の持つ本当のスピンのことではない(これを擬スピンと呼ぶ)。また、K 点と K' 点の関係が右巻き、左巻きに対応していることも分かる(これをカイラリティという)。このように、グラフェンの電子がフェルミエネルギー近傍でディラック方程式に従う電子であるということが、グラフェンに特異な性質を与える理由となっている。

以下に、具体的に波動関数の形を求める。式 (2.16) の解は平面波  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) \propto \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  を仮定することで求まる(ただし、このときの波数の原点は K 点である)。

$$\mathbf{F}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi_k} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.22)$$

図 2.3: chap2/img/sigma.eps

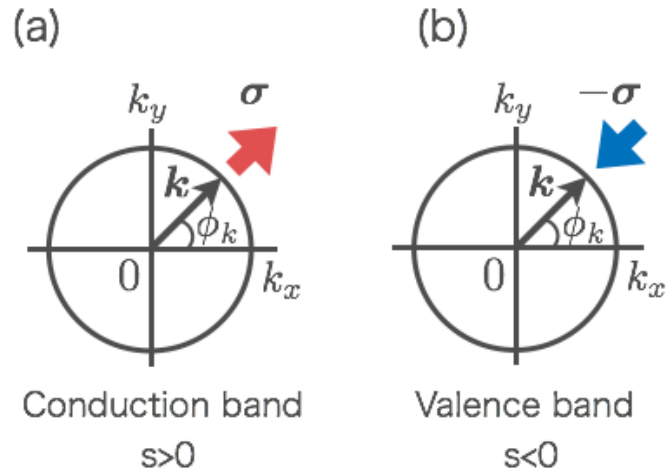


図 2.3: (a) 赤い矢印は伝導バンド ( $s > 0$ ) における擬スピン  $\sigma$  の向きを表す。このとき、擬スピンと波数ベクトルの向きは同じ。(b) 青い矢印は価電子バンド ( $s < 0$ ) における擬スピン  $\sigma$  の向きを表す。このとき、擬スピンと波数ベクトルの向きは反対になる。

ただし、 $s = \pm 1$ ,  $\phi_k = \tan^{-1}(k_y/k_x)$  である。また、この波動関数と式 (2.17) を使って擬スピンの期待値を求めると、

$$\langle \sigma \rangle = (\langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle) = s(\cos \phi_k, \sin \phi_k) \quad (2.23)$$

となって、擬スピンの向きは伝導バンド ( $s > 0$ ) のとき波数ベクトルと平行、価電子バンド ( $s < 0$ ) のときは反平行となる (図 2.3)。

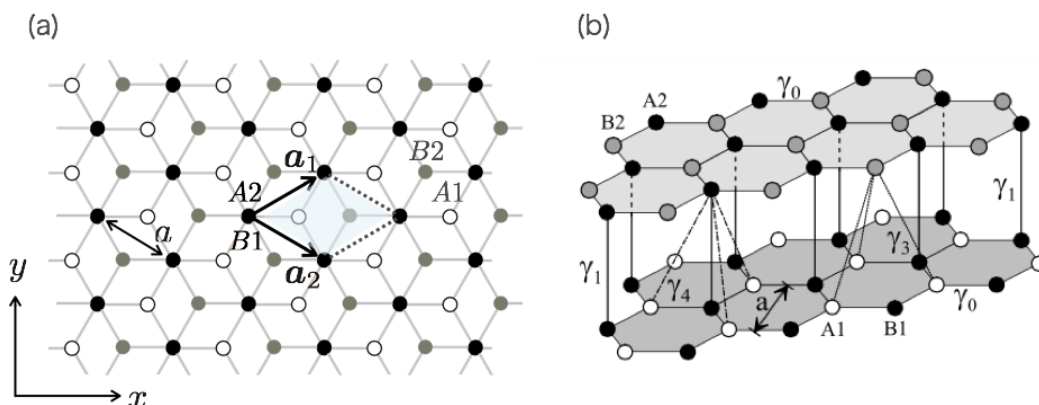


図 2.4: AB 積層グラフェンの結晶構造。(a) 平面図と (b) 横から見た図。下の層にある  $A_1$  原子と  $B_1$  原子がそれぞれ白と黒で、上の層にある  $A_2$  原子と  $B_2$  原子がそれぞれ黒と灰色で示されている。単位胞は (a) に記されたひし形のようにとることができ、上下のそれぞれの A,B 原子が含まれている (図は <sup>[16]</sup> の FIG. 2. から転載)。

## 2.2 2層グラフェンの電子状態

ここでは最も安定な積層である、AB 積層のグラフェンを考える。この積層では六角形がずれて積層しており、上の層の  $A_2$  原子の真下に下の層の  $B_1$  原子が位置するような結晶構造をとる (図 2.4(a))。層間の距離は  $3.35\text{\AA}$  である。基本格子ベクトルは単層グラフェンの場合と同じであるが、上下の層にそれぞれ A 原子と B 原子が存在するため、単位胞の中には 4 つの原子が含まれる。

2層グラフェンにおいて、ホッピングは面内の  $\gamma_0$  と層間の  $\gamma_1, \gamma_3, \gamma_4$  が存在する (図 2.4(b))。既に述べたように、 $A_2$  原子の真下に  $B_1$  原子が位置しており、これらの電子軌道は他の層間の相互作用よりも強く結びついている (“dimer” 原子と呼ばれる)。このため、 $\gamma_1$  が層間の相互作用で最も重要になる。 $\gamma_1$  の値は面内の  $\gamma_0$  よりも 1 桁小さく、実験的に  $\gamma_1 \sim 0.3\text{eV}$  程度であることが知られている。一方で  $A_1$  原子と  $B_2$  原子は直上もしくは直下に原子が存在しないため、比較的弱く結びついている (“non-dimer” 原子と呼ばれる)。

単層グラフェンのときと同様にして、タイトバインディングモデルでハミルト

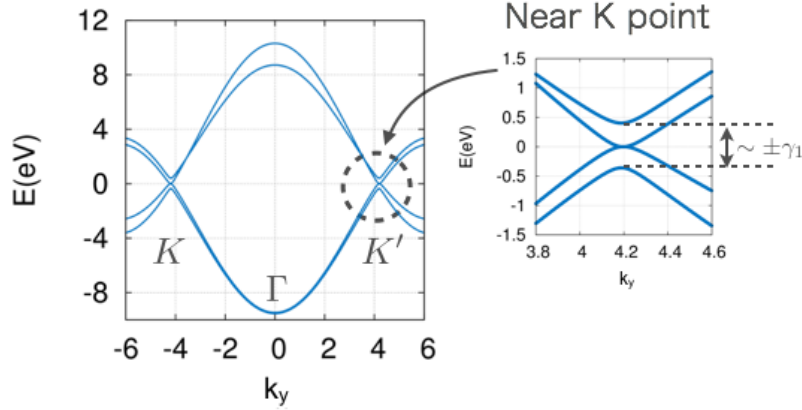


図 2.5: 2層グラフェン (AB 積層) の分散関係。K 点近傍でもはや線形分散ではなく、放物線分散となることが分かる。また、フェルミ面近傍の低エネルギーでは non-dimer 原子に関わる放物線バンドが  $E = 0$  で接している。

ニアン行列は以下のように表される。

$$H_b = \begin{pmatrix} \epsilon_{A1} & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f(\mathbf{k}) & -\gamma_3 f^*(\mathbf{k}) \\ -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & \epsilon_{B1} & \gamma_1 & \gamma_4 f(\mathbf{k}) \\ \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & \gamma_1 & \epsilon_{A2} & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) \\ -\gamma_3 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & \epsilon_{B2} \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

ここで、ホッピングエネルギーは以下のように定義される

$$\gamma_0 = -\langle \phi_{A1} | \mathcal{H} | \phi_{B1} \rangle = -\langle \phi_{A2} | \mathcal{H} | \phi_{B2} \rangle \quad (2.25)$$

$$\gamma_1 = \langle \phi_{A2} | \mathcal{H} | \phi_{B1} \rangle \quad (2.26)$$

$$\gamma_3 = -\langle \phi_{A1} | \mathcal{H} | \phi_{B2} \rangle \quad (2.27)$$

$$\gamma_4 = \langle \phi_{A1} | \mathcal{H} | \phi_{A2} \rangle = \langle \phi_{B1} | \mathcal{H} | \phi_{B2} \rangle \quad (2.28)$$

式 (2.24) の  $H_b$  における左上と右下の  $2 \times 2$  の部分行列は同一層内の項であり、式 (2.11) に対応している。 $\gamma_3$  と  $\gamma_4$  はどちらも non-dimer 原子に関するホッピングであるが、 $\gamma_3$  が non-dimer 原子間のホッピングであり、 $\gamma_4$  が dimer 原子と non-gimer 原子間のホッピングであるという違いがある。このハミルトニアン  $H_b$  を対角化することで、2層グラフェンの分散関係を求めることができる (図 2.5)。ただし、計算に使用したパラメータは、 $\gamma_0 = 3.16\text{eV}$ ,  $\gamma_1 = 0.381\text{eV}$ ,  $\gamma_3 = 0.38\text{eV}$ ,  $\gamma_4 = 0.14\text{eV}$ ,  $\epsilon_{B1} = \epsilon_{A2} = 0.022\text{eV}$ ,  $\epsilon_{A1} = \epsilon_{B2} = 0$  である。また、単層グラフェンと同様に、K 点近傍で式 (2.24) を展開すると、K 点周りの有効ハミルトニアンを導く

ことができる。

$$H_b = \begin{pmatrix} \epsilon_{A1} & v\pi^\dagger & -v_4\pi^\dagger & v_3\pi \\ v\pi & \epsilon_{B1} & \gamma_1 & -v_4\pi^\dagger \\ -v_4\pi & \gamma_1 & \epsilon_{A2} & v\pi^\dagger \\ v_3\pi^\dagger & -v_4\pi & v\pi & \epsilon_{B2} \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

ここで、 $v_3 = \sqrt{3}a\gamma_3/2\hbar$ ,  $v_4 = \sqrt{3}a\gamma_4/2\hbar$  である。

ここまで、単位胞の中に含まれる 4 つの原子を考えて K 点周りの有効ハミルトニアンを作ることができたが、フェルミ面近傍の低エネルギーに関係があるのは non-dimer 原子のみである。このため、このハミルトニアンから non-dimer 原子を基底に抽出して、層間相互作用として  $\gamma_1$  のみを残すと、低エネルギーでの 2 バンド有効ハミルトニアンを作ることができる (付録 A)。

$$H_0 = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ (\pi)^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

ここで、有効質量は  $m = \gamma_1/2v^2$  となる。この解は、平面波とエバネッセント波の 4 つが固有状態として選べる。

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \alpha e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, e^{\pm i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.31)$$

ただし、基底は A1 原子と B2 原子である。また、エネルギーの表式は、

$$E = \pm \frac{1}{2m} |\mathbf{p}|^2 \quad (2.32)$$

となる (図 2.6(a))。こうして、層間の相互作用を加えたことで単層グラフェンの持つ線形分散は大きく変更を受ける。

また、2 層グラフェンの大きな特徴として、ハミルトニアンの対角項にエネルギーの変化を入れることで簡単にギャップを空けることができるという点が挙げられる。これは、2 つの層間を非等価なものにすることで実現できる。例えば、2 層グラフェンの面に垂直に電場  $\Delta$  を印加した場合、式 (2.33) は、

$$H_0 = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} \Delta & (\pi^\dagger)^2 \\ (\pi)^2 & -\Delta \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

図 2.5: chap2/img/bilayer\_dispersion.eps

図 2.6: chap2/img/bilayer\_band\_el.eps



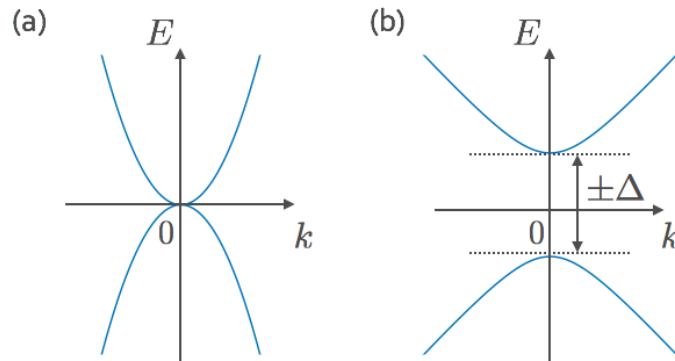


図 2.6: (a)2層グラフェンのK点近傍における低エネルギーのバンド構造。有効質量を持って放物線が  $E = 0$  で接している。(b)面に垂直に強さ  $\Delta$  の電場を加えた場合。大きさ  $2\Delta$  だけバンドギャップが開く。

となる。エネルギーは

$$E = \pm \sqrt{\left(\frac{p^2}{2m}\right)^2 + \Delta^2} \quad (2.34)$$

となって、図 2.6(b) のように大きさ  $2\Delta$  のギャップが開く。

## 2.3 クライントンネル効果

### 2.3.1 1層グラフェンの場合

前述の通り、グラフェンの電子はディラック方程式に従う。このため、クライントンネル効果と呼ばれる、相対論的量子力学で議論されてきたポテンシャル障壁に対する完全透過が実現する。ここでは、1次元的なポテンシャル障壁に対する電子の透過率を計算する。

今、図 2.7 のような 1 次元的なポテンシャルを考える (ただし、y 方向には無限であるとする)。

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (0 < x < D) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (2.35)$$

式 (2.22) の単層グラフェンの波動関数を用いて、各領域に対する波動関数を以下

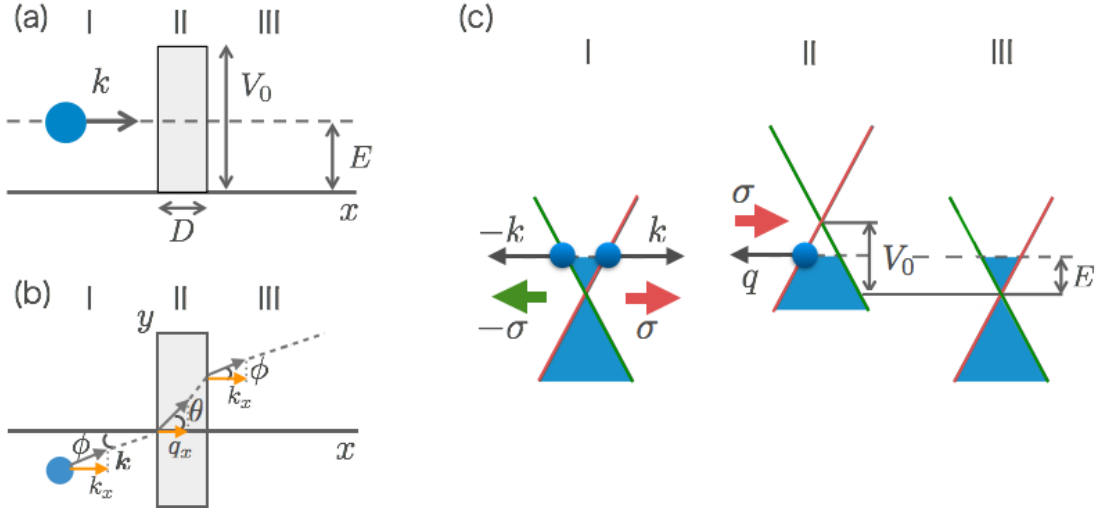


図 2.7: (a)1次元的なポテンシャルを横から見た図と (b) 上から見た図。ポテンシャル障壁の高さを  $V_0$ 、幅を  $D$  とし、 $y$  方向には無限に広がっているとする。このため、トンネルの過程で  $y$  方向の波数は変わらない。 $\phi$  は障壁に対する入射角、 $\theta$  はポテンシャル中における屈折角を表す。(c) 各領域におけるバンド図のイメージ。ポテンシャル中においても価電子帯のホールが伝導を担え、かつトンネル過程全体で擬スピンの向きが保存されている。

のようにおくことができる。

$$\psi_1(x, y) = \begin{cases} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y} & (x < 0) \\ (a e^{iq_x x} + b e^{-iq_x x}) e^{ik_y y} & (0 < x < D) \\ t e^{ik_x x + ik_y y} & (x > D) \end{cases} \quad (2.36)$$

$$\psi_2(x, y) = \begin{cases} s (e^{ik_x x + i\phi} - r e^{-ik_x x - i\phi}) e^{ik_y y} & (x < 0) \\ s' (a e^{iq_x x + i\theta} - b e^{-iq_x x - i\theta}) e^{ik_y y} & (0 < x < D) \\ s t e^{ik_x x + ik_y y + i\phi} & (x > D) \end{cases} \quad (2.37)$$

ここで、 $\psi_1, \psi_2$  はそれぞれ、A 原子、B 原子の波動関数とする。 $\phi$  は障壁に対する入射角、 $q_x, \theta$  はそれぞれポテンシャル中における波数、屈折角に対応するもで、

$$q_x = \sqrt{\left(\frac{E - V_0}{\hbar v}\right)^2 - k_y^2}, \quad \theta = \tan^{-1}\left(\frac{k_y}{q_x}\right) \quad (2.38)$$

となる。また、第 2 成分の符号に関しては  $s = \text{sgn}(E)$ 、 $s' = \text{sgn}(E - V_0)$  である。なお、領域 III において  $x = \infty$  からの入射はないとし、入射の係数を 1 と規格化し

図 2.7: chap2/img/single\_klein.eps

た。この波動関数を A 原子、B 原子それぞれについて領域の境界 ( $x = 0$  と  $x = D$ ) で接続すれば係数  $a, b, r, t$  を求めることができる (付録 B)。この結果、

$$\begin{aligned} T(\phi) &= |t|^2 \\ &= 1 - |r|^2 \\ &= \frac{\cos^2 \theta \cos^2 \phi}{\cos^2(q_x D) \cos^2 \theta \cos^2 \phi + \sin^2(q_x D) (1 - ss' \sin \theta \sin \phi)^2} \end{aligned} \quad (2.39)$$

と求まる。この式を用いて、透過率を入射角の関数としてプロットしたものが図 2.8(a) である。さらに、 $V_0 \gg E$  ( $\theta \rightarrow 0$ ) のとき、

$$T(\phi) \approx \frac{\cos^2 \phi}{1 - \cos^2(q_x D) \sin^2 \phi} \quad (2.40)$$

となる。これを見ると、以下の場合に  $T = 1$  が実現することが分かる。

- (1)  $q_x D = N\pi$  ( $N = 0, \pm 1, \dots$ ) のとき
- (2)  $\phi = 0$  のとき

(1) はポテンシャル障壁の高さ  $V_0$  と幅  $D$  に依存して  $T = 1$  となる条件が変わる。このため、これを「共鳴トンネリング」と呼ぶ。一方で (2) の条件はどんなポテンシャルに対しても成り立つ。つまり、障壁に対して垂直に入射した電子は必ず完全透過する。これを「クライントンネリング」と呼ぶ。

この現象は、擬スピンの保存を用いて理解することができる。図 2.7(c) はトンネル過程でのバンド図のイメージを示したのである。式 (2.23) で示した通り、擬スピンの向きは伝導帯で波数ベクトルと平行、価電子帯で反平行になる。擬スピンの反転が起こらないとき、図 2.7(c) でバンド図の赤のブランチのキャリアは同じ赤のブランチのキャリアとだけ散乱でき、緑のブランチの状態へは移ることができない。つまり、右向きに進む電子は、同じく右向きに進む電子か左向きに進むホールとだけ散乱を起こす。こうして、ポテンシャル障壁の外側と内側で擬スピンの方向が一致したことで、完全透過が起こる。

グラフェン最大の特徴は、K 点近傍で線形分散を持つことである。しかし、このような点でクライントンネリングにおいては、これが本質的な原因となっている訳ではない (後述するように、放物線分散を持つ 2 層グラフェンにおいても特徴的な透過が現れる)。

通常の固体物理で扱う電子とホールには直接的な関係はなく、基本的には異なる有効質量を含む個別のシュレーディンガー方程式で表される。しかし、グラフェ

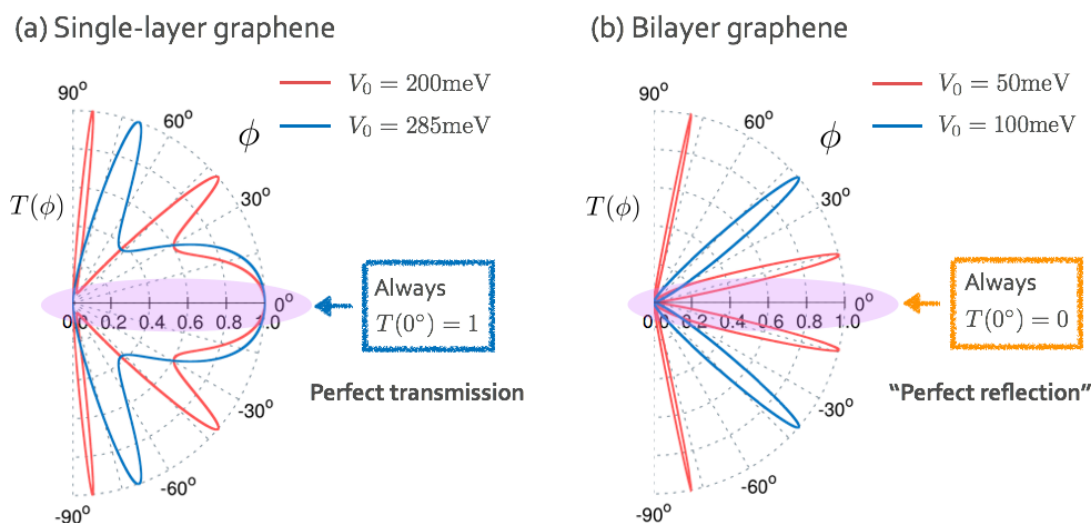


図 2.8: (a) 単層グラフェン、(b)2 層グラフェンにおける透過確率の入射角依存性。赤と青の線はポテンシャル障壁の高さを変化させたものである。障壁の幅は  $D = 100\text{nm}$ 、入射電子の波長を  $\lambda \approx 50\text{nm}$  とした。これは、波数で  $k \approx 0.125\text{nm}^{-1}$  に対応し、電子のエネルギーは単層グラフェン、2 層グラフェンのそれぞれで  $E \approx 80\text{meV}$ 、 $17\text{meV}$  に対応する。

ンはディラック方程式で記述できるので、電子とホールは同じスピノールの異なる成分で表される。このため、2つの状態は独立ではない。これが相対論的量子力学で電荷共役対称と呼ばれるもので、この対称性の要求する波動関数が互いに実現できるときに高い透過が可能となる。

最後に補足として、式 (2.38) における  $q_x$  のルートの中の符号について考える。先の計算では  $q_x$  が実数になることを仮定して、固有状態はすべて平面波になるとして計算を進めてきた。しかし、

$$|ky| > \frac{|E - V_0|}{\hbar v} \quad (2.41)$$

となるとき、ポテンシャル中の固有状態は減衰波となり得る。これは、図 2.7(b) で屈折角  $\theta$  が定義できないことを意味し、全反射の条件が成立していると考えられることができる。これを用いると単層グラフェンでも局在状態を作ることができる可能性があるが、障壁に対して非常に浅い角度で入射した場合のみ実現できる条件であり、本研究ではこのような状況は考えていない。

### 2.3.2 2層グラフェンの場合

次に、2層グラフェンで同様の計算を行い、透過率が1層の場合と比べてどのように変化するかを調べる。K点近傍の2層グラフェンの電子は、通常非相対論的な電子と同様に有効質量を持った放物線バンドで表される。一方で、単層のグラフェンと同様に擬スピンを持つカイラル粒子である。

計算には式(2.33)で示した有効ハミルトニアンを用いる。これはギャップのない放物線バンドを生成し、固有状態は以下のように書かれる。

$$\begin{aligned} \Psi_{sk}^i(\mathbf{r}) &= \left[ a_i \begin{pmatrix} \Psi_1^1 \\ \Psi_2^1 \end{pmatrix}_i e^{ik_{ix}x} + b_i \begin{pmatrix} \Psi_1^2 \\ \Psi_2^2 \end{pmatrix}_i e^{-ik_{ix}x} + c_i \begin{pmatrix} \Psi_1^3 \\ \Psi_2^3 \end{pmatrix}_i e^{\kappa_{ix}x} + d_i \begin{pmatrix} \Psi_1^4 \\ \Psi_2^4 \end{pmatrix}_i e^{-\kappa_{ix}x} \right] e^{ik_y y} \end{aligned} \quad (2.42)$$

ここで、 $i = \text{I, II, III}$  はトンネル過程の各領域を表す。各固有状態の成分を表す  $\Psi$  で、上の添え字が固有状態に対応する数(1~4)で、下の添え字が基底に考えている原子(1,2)を表している。また、4つの固有状態をそれぞれの領域で代入して解くと、係数が以下のように求まる。

$$\begin{pmatrix} \Psi_1^1 \\ \Psi_2^1 \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} 1 \\ s_i e^{2i\phi_i} \end{pmatrix} \Psi_{1i}^1 \quad (2.43)$$

$$\begin{pmatrix} \Psi_1^2 \\ \Psi_2^2 \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} 1 \\ s_i e^{-2i\phi_i} \end{pmatrix} \Psi_{1i}^2 \quad (2.44)$$

$$\begin{pmatrix} \Psi_1^3 \\ \Psi_2^3 \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} 1 \\ -s_i h_i \end{pmatrix} \Psi_{1i}^3 \quad (2.45)$$

$$\begin{pmatrix} \Psi_1^4 \\ \Psi_2^4 \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} 1 \\ -s_i/h_i \end{pmatrix} \Psi_{1i}^4 \quad (2.46)$$

ここで、 $s_i = \text{sgn}(V_i - E)$ ,  $k_i = \sqrt{2m|E - V_i|/\hbar}$ ,  $k_{ix} = k_i \cos \phi_i$ ,  $k_y = k_i \sin \phi_i = \text{const.}$ ,  $\kappa_{ix} = \sqrt{k_{ix}^2 + 2k_y^2}$ ,  $h_i = \left( \sqrt{1 + \sin^2 \phi_i} - \sin \phi_i \right)^2$  である。接続条件は、この波動関数とその微分の接続を各境界に課すことで得られる。ここで、変数の数は4つの固有状態に対して領域が3つなので12個である。一方式の数、境界が2か所で1の原子と2の原子があり、さらに波動関数とその微分が接続するので、

図 2.8: chap2/img/klein.t\_phi.eps

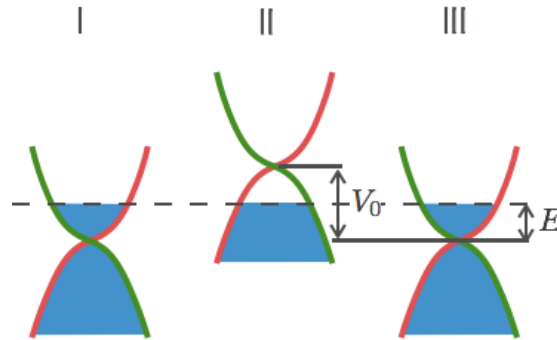


図 2.9: 2層グラフェンにおけるトンネル過程でのバンド図のイメージ。

計 8 個作ることができる。そこで、境界条件として、 $d_1 = 0$ ,  $b_3 = c_3 = 0$ ,  $a_1 = 1$  を仮定する。 $a_1$  と  $b_3$  に関しては単層のときと同じ条件である。 $d_1$  と  $c_3$  に関しては、エバネッセント波が  $x = \pm\infty$  で発散しないように決める。この波動関数とその微分を各境界で接続することで、各係数を求めることができる (2層の場合は波動関数の微分も接続することに注意)。

これを解析的に解くことは困難なため、数値的に解いて透過率を求めると図 2.8(b) のようになる。単層グラフェンと比較すると、共鳴トンネリングが現れることは共通であるが、 $\phi = 0$  では必ず  $T = 0$  となって完全反射が起こり、正反対の結果となる。

また特に、 $\phi = 0$  に関しては解析的に解くことができ、

$$t = \frac{4ik_1k_2}{(k_2 + ik_1)^2e^{-k_2D} - (k_2 - ik_1)^2e^{k_2D}} \quad (2.47)$$

となる。波数の添え字の 1 と 2 はそれぞれ、領域 I と II に対応している。こうして、2層グラフェンの垂直入射に対する透過率は指数関数的に減少し、 $D > \lambda$  で  $T = 0$  となることが分かる。

最後に、グラフェンの結果をカイラル粒子でない通常の電子と比較する。もしポテンシャル障壁中で電子状態がなかった場合、よく知られているように、障壁の高さと幅の増加に対して指数関数的に透過率は減少する。グラフェンの場合と比較するためには、ギャップレスの半導体を考えた方がよい。この場合、

$$t = \frac{4ik_xq_x}{(q_x + k_x)^2e^{-iq_xD} - (q_x - k_x)^2e^{-iq_xD}} \quad (2.48)$$

となる。ここで、 $k_x, q_x$  は領域 I、II における波数の  $x$  成分である。単層グラフェンや 2層グラフェンに現れたように、共鳴条件  $q_xD = \pi N$ ,  $N = 0, \pm 1, \dots$  が確認

図 2.9: chap2/img/bilayer\_klein.eps

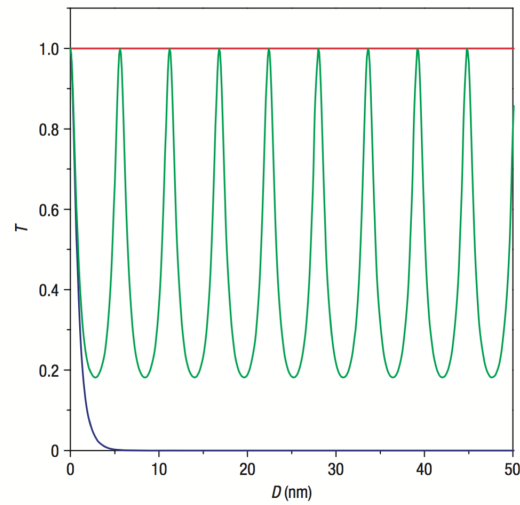


図 2.10:  $\phi = 0$  におけるグラフェンのトンネリングと通常の電子のトンネリングの比較。赤線が単層グラフェン、青線が2層グラフェン、緑線が通常の電子の透過率を示す。ポテンシャル障壁の高さは、単層グラフェンで  $\sim 450\text{meV}$ , それ以外の2つは  $\sim 240\text{meV}$  である。2層グラフェンの場合、障壁の中に空いている電子状態があっても障壁の幅に対して指数関数的に減少していることが特徴的である。(図は<sup>[2]</sup>の Figure 3 より転載)。

できる。垂直入射 ( $\phi = 0$ ) の場合、透過率は障壁の高さや幅に依存して振動する(図 2.10)。1層グラフェンでは常に  $T = 1$  であり、2層グラフェンでは  $D$  が  $\lambda$  よりも十分大きいとき  $T = 0$  となったことと比較すると、グラフェンの持つカイラリティの特異性を理解することができる。

## 第3章 計算方法

本研究では、2層グラフェンの透過率の特異性を利用して、FETの高いon/off比が実現できるか、ということ調べる。電流の比の評価は、コンダクタンスが透過率に比例することを利用する。そのため、透過率の計算を行う。また、波束の時間発展を追うことで、電流のon/off制御について詳しく調べた。この章では、これらの2点に関して、どのような計算を行ったかを述べる。

### 3.1 透過率の計算

第2章のクライントネル効果で、1次元的なポテンシャル障壁に対する透過率を計算を示した。本研究でも同じ形のポテンシャルを用いて調べる。透過率は、波動関数とその微分の接続条件から連立方程式を数値的に解いて、固有状態の各係数を求めることで得られる。境界条件等の設定は、第2章と同じである。

### 3.2 電流のon/off比の評価

本研究では、FETにおける電流のon/off比を評価することが目的の一つである。3.1で透過率が計算できるので、ランダウアーの公式を利用してコンダクタンスを評価することができる。これは、1次元的なリード線と電子溜めを考え、電子間相互作用や比弾性散乱のない場合に、試料におけるコンダクタンス $G$ が透過率 $T$ に比例することを示す。

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} T \quad (3.1)$$

グラフェンにおいても、弾性散乱が支配的であると考えられるので、この公式を利用する。



### 3.3 波束の時間発展

第2章のクライントネル効果で示した通り、2層グラフェンでのトンネル効果は、主に以下の2つに分けられる。

- (1) 障壁に対して垂直入射 ( $\phi = 0^\circ$ ) で、常に完全反射 ( $T = 0$ ) する。
- (2) 障壁の高さ  $V_0$  と幅  $D$  に依存して、ある角度で共鳴トンネル ( $T = 1$ ) を起こす。

そこで、ある時刻  $t$  で (1) の条件を満たし、別の時刻  $t' = t + \Delta t$  の瞬間に (2) の条件を満たすようにポテンシャル障壁を変化させることで、電流の制御ができることを示したい。そのために、波束の時間発展を計算する。

シュレーディンガー方程式は、ポテンシャルが時間に依存する場合、

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y, t) \right\} \psi(x, y, t) \quad (3.2)$$

である。ポテンシャルが時間に依存しないとき、変数分離を行い定常状態のシュレーディンガー方程式が導かれる。この解は、定常状態における固有状態を  $\varphi(x, y)$  として

$$\psi(x, y, t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \varphi(x, y) \quad (3.3)$$

と書ける。一般解はこの線形結合で、

$$\psi(x, y, t) = \int dk_x \int dk_y C(k_x, k_y) e^{-\frac{iE_{k_x, k_y}}{\hbar}t} \varphi_{k_x, k_y}(x, y) \quad (3.4)$$

係数  $C(k_x, k_y)$  は  $t = 0$  における状態を  $g(x, y)$  とすると、左から  $\varphi_{k_x, k_y}$  をかけることで得られる。

$$C(k_x, k_y) = \langle \varphi_{k_x, k_y} | \psi(t = 0) \rangle = \int dx \int dy \varphi_{k_x, k_y}^*(x, y) g(x, y) \quad (3.5)$$

本研究では初期状態として、以下のガウス関数を用いた。

$$g(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} e^{-\frac{(x-\mu_x)^2 + (y-\mu_y)^2}{2\sigma^2}} \quad (3.6)$$

これは、運動量  $\hbar\mathbf{k}_0$  を持ち、 $\sigma$  の広がり度で  $(\mu_x, \mu_y)$  に局在した状態を表す。

次に、 $t' = t + \Delta t$  でポテンシャルの大きさを瞬間的に変化させることを考える。変化前後でシュレーディンガー方程式は定常状態と同じ形になるため、時刻  $t = t'$

で前後の波動関数を接続できることが考えられる。つまり、 $\psi(t = t')$  の状態を初期条件として係数  $C(k_x, k_y)$  を

$$C'(k_x, k_y) = \langle \varphi_{k_x, k_y} | \psi(t = t') \rangle \quad (3.7)$$

と再定義すれば、 $t = t'$  以後の時間発展を計算することができる。

なお、この計算では電子の閉じ込めやデバイスとしての応用を考えたいので、 $y$  方向に関しては固定端の境界条件 ( $y = \pm L_y$  で  $\psi = 0$ ) を課した。そのため、 $k_y$  は量子化され  $k_y = n\pi/2L_y$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) となる。今回の計算では、 $L_y = 1\mu\text{m}$  としたので、 $k_y$  の刻み幅としては  $dk_y \sim 1\mu\text{m}^{-1}$  である。そして、 $y$  方向の波動関数は領域によらず

$$e^{ik_y y} - \alpha e^{-ik_y y}, \quad \alpha = e^{2ik_y L_y} \quad (3.8)$$

となる。

今、2層グラフェンの固有状態が式 (2.42) のように書かれ、さらに初期条件としてガウス関数を用いたことで、 $t < t'$  のときの係数  $C(k_x, k_y)$  は解析的に計算することができる。初期条件として入れるガウス関数は領域 I にのみ局在させるので、積分は領域 I のみの積分に置き換えることができる。

$$C(k_x, k_y) = \int dx \int dy \varphi_{k_x, k_y}^*(x, y) \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} e^{-\frac{(x-\mu_x)^2 + (y-\mu_y)^2}{2\sigma^2}} \quad (3.9)$$

ただし、

$$\varphi_{k_x, k_y}(x, y) = (e^{ik_x x} + b_1 e^{-ik_x x}) (e^{ik_y y} - \alpha e^{-ik_y y}) \quad (3.10)$$

この積分はガウス関数の積分の形をしており、波数空間で  $(\pm k_{0x}, \pm k_{0y})$  を中心としたガウス関数が 4 つ出てくる。ただし、 $k_{0x}, k_{0y}$  はそれぞれ初期条件のガウス関数の持つ波数  $\mathbf{k}_0$  の  $x$  成分と  $y$  成分である。今、 $k_x, k_y$  は共に正の領域で定義されているのでこのうち 3 つが寄与してくるので、

$$C(k_x, k_y) = C_1 + C_2 + C_3 \quad (3.11)$$

$$C_1 = e^{-\frac{(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2}{2\Delta_k^2}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0) \cdot \boldsymbol{\mu}} \quad (3.12)$$

$$C_2 = b_1 e^{-\frac{(k_x+k_{0x})^2}{2\Delta_k^2}} e^{-i(k_x+k_{0x})\mu_x} e^{-\frac{(k_y-k_{0y})^2}{2\Delta_k^2}} e^{-i(k_y-k_{0y})\mu_y} \quad (3.13)$$

$$C_3 = -\alpha e^{-\frac{(k_x-k_{0x})^2}{2\Delta_k^2}} e^{-i(k_x-k_{0x})\mu_x} e^{-\frac{(k_y+k_{0y})^2}{2\Delta_k^2}} e^{-i(k_y+k_{0y})\mu_y} \quad (3.14)$$

ただし、 $\Delta_k = 1/\sigma$ 、 $\boldsymbol{\mu} = (\mu_x, \mu_y)$  とした。このため、時間発展の  $k_x, k_y$  に関する和の部分は、 $k_x > 0, k_y > 0$  の領域のうち、この3つのガウス関数の  $\Delta_k$  程度よりも内側のみを選んで足しあげれば良いことが分かる。

## 第4章 結果

本章では、ポテンシャル障壁が1つある場合の透過率を計算した結果を示す。これにより、バンドギャップを生成しなくても、2層グラフェンの透過率の特異性を利用することで、FETの高いon/off比が得られる可能性があることを示す。ここで、onの場合はポテンシャル障壁を $V_0 = 0$ にすることで、透過率 $T = 1$ を実現できるため、どのような条件でoff電流を小さくすることができるか、ということを考える。なお、障壁が2つある場合に、その内側に閉じ込められた状態があるかどうか、に関して行ったことは付録に載せる。

### 4.1 垂直入射の場合

クライントネル効果によると、2層グラフェンの電子は入射角 $\phi = 0^\circ$ のとき完全反射が実現する。特に、 $\phi = 0^\circ$ の透過率は解析的に求められており(式(2.47))、障壁の幅 $D$ に対して指数関数的に減少することが分かる。したがって、off電流に相当する透過率を非常に小さくすることができると予想される。そこで、図4.1(a)のような装置を考え、水色で示したリード線が十分細い状態を考えて、電子が垂直入射すると仮定してoff電流を評価する。図4.1(b)は、異なる障壁の高さ $V_0$ に対する $\phi = 0^\circ$ の透過率 $T$ を片対数でプロットしたものである。障壁の厚さが入射電子の波長に比べて大きいとき、どのような障壁の高さに対しても従来のFETの持つオンオフ比 $\sim 10^5$ を実現できることが分かる。

このように、すでに指摘されていたように、2層グラフェンの垂直入射の電子は高いon/off比が期待できるということが確認できた。しかし、実際にこのような装置を作成する場合、すべての電子の入射角を $\phi = 0^\circ$ にするというのは難しいと予想される。もし、角度をわずかに変えたときに障壁を透過する確率が敏感に上がる場合、このような装置を作るのは難しくなる。そこで、次に、 $\phi = 0^\circ$ 以外の角度で入射した電子の透過率を考える。

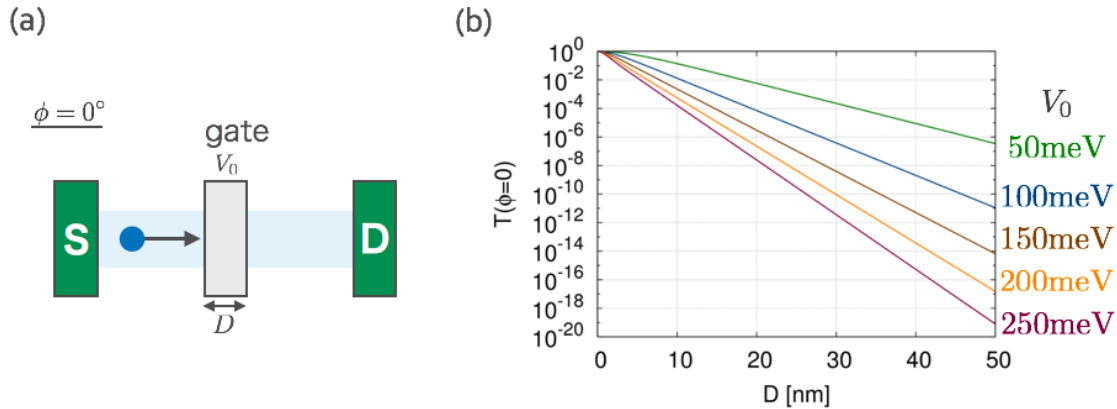


図 4.1: (a) 垂直入射 ( $\phi = 0^\circ$ ) を実現するような FET のイメージ図。リード線が十分細く、電子が障壁に対して垂直に入射するような場合を考える。(b)  $\phi = 0^\circ$  における透過率を、異なる障壁の高さ  $V_0$  に対してプロットしたもの。入射電子の波長は  $\lambda = 50\text{nm}$  で、エネルギーは  $E = 19\text{meV}$  に対応する。

## 4.2 共鳴トンネル条件

入射角  $\phi = 0^\circ$  以外の角度で入射した電子は、共鳴トンネリングが残ることが分かっている。共鳴トンネリングは、ポテンシャル障壁の高さ  $V_0$  と幅  $D$  に依存する (図 2.7)。そこでまずは、1次元のポテンシャルに対する透過率を計算し、共鳴トンネルが起こる条件を調べた。

### 4.2.1 $\phi = 0^\circ$ 近傍で起こる共鳴

図 4.2 は、2層グラフェンの透過率が  $T = 1$  になる点を障壁の高さ  $V_0$  と幅  $D$  の関数でプロットしたものである。図の赤で示した点では、ある入射角  $\phi$  で共鳴トンネリング  $T = 1$  が実現しており、青で示した点では、すべての角度  $\phi$  で  $T = 0$  となり、どの入射角に対しても共鳴が起こっていないことを表す。点が打たれていない部分は、 $0 < T < 1$  となる角度があることを示す。しかし、図中のほとんどの領域で赤か青の点があることから、2層グラフェンにおいては共鳴条件を満たさなければ透過できる角度がないことが分かる。

図 4.1: chap4/img/phi0-d.eps

図 4.2: chap4/img/v0-d.eps

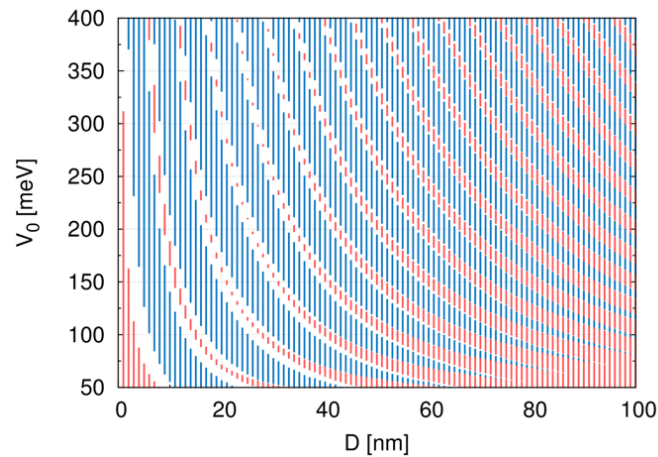


図 4.2: 2層グラフェンの共鳴トンネル条件。 $V_0$  はポテンシャル障壁の高さ、 $D$  は障壁の幅である。電子のエネルギーは  $18\text{meV}$  とした。赤でプロットした点は、ある入射角  $\phi$  で共鳴トンネル  $T = 1$  が起きた点で、青でプロットした点は、すべての角度  $\phi$  からの入射で  $T = 0$  となった点である。プロットされていない空白の領域は、この間  $0 < T < 1$  となる角度がある点であるが、図中のほとんどの領域で  $T = 1$  か  $T = 0$  に分けられることが分かる。

そこで次に、 $\phi = 0^\circ$  近傍で起こる共鳴について調べる。図 4.3 (a) は  $-10^\circ < \phi < 10^\circ$  の範囲で透過率を積分したものを障壁の幅  $D$  と高さ  $V_0$  を変化させて調べた結果である。図中で赤からオレンジ色で示された領域では  $-10^\circ < \phi < 10^\circ$  の範囲で共鳴が起きており (図 4.3 (b))、青い点で示された領域では共鳴が起きていないことを表す。したがって、共鳴が起きないように障壁の幅  $D$  と高さ  $V_0$  を選択することで、図 4.1 (a) のような装置で  $\phi = 0^\circ$  の完全反射の性質をうまく利用して、高い on/off 比を得ることができる。このとき、共鳴が起これなくてもわずかに透過する確率が存在するが、その積分値が  $10^4$  程度であることを考えると、この値程度の on/off 比は実現できる可能性が高いと考えられる。

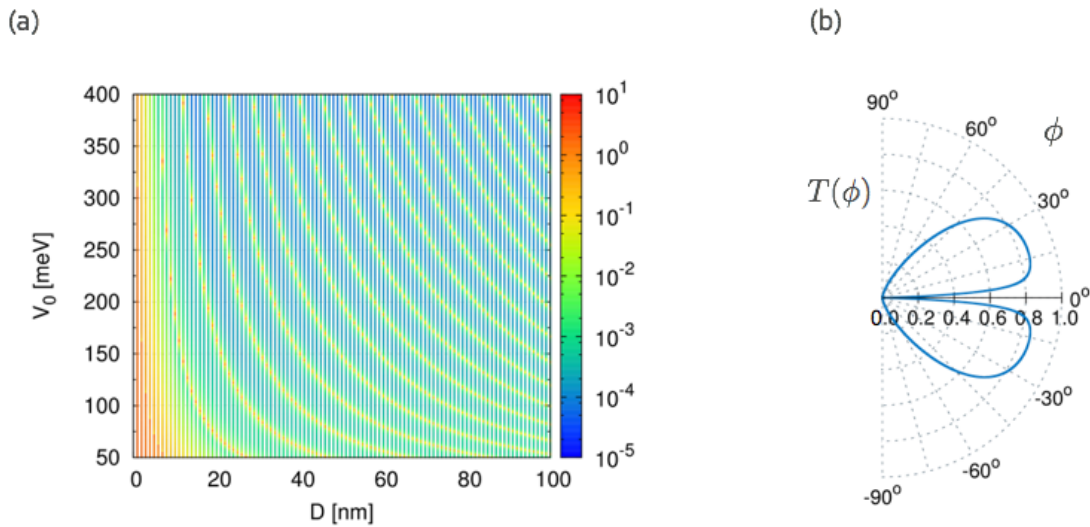


図 4.3: (a)  $-10^\circ < \phi < 10^\circ$  の範囲で透過率を積分したものを、障壁の幅  $D$  と高さ  $V_0$  を変化させてカラープロットした結果。積分は  $-10^\circ < \phi < 10^\circ$  の範囲で規格化を行った。(b)  $V_0 = 150\text{meV}$ 、 $D = 40\text{nm}$  における、透過率  $T$  を入射角  $\phi$  の関数としてプロットした結果。このとき、共鳴条件を満たし、 $\phi = 0^\circ$  近傍で高い透過率を持つことが分かる。

#### 4.2.2 共鳴トンネルを電流の on/off に利用する場合

次に、 $\phi = 0^\circ$  近傍以外の角度における共鳴トンネリングを調べる。ここでは、まずは障壁の幅は  $D = 40\text{nm}$  に固定し、障壁の高さを変化させることを考える。幅を  $40\text{nm}$  と選んだ理由は、図 4.2 において  $\phi = 0^\circ$  での完全反射を実現し、かつ、 $V_0$  の変化によって急激に共鳴が変わることを防ぐためである ( $D$  を大きくすると、共鳴条件を満たす  $V_0$  の間隔が狭くなる)。

図 4.4 は、障壁の高さ  $V_0$  を変化させたときの透過率の  $\phi$  依存性を調べたものである。(a) の赤で示された点では  $T = 1$  となる共鳴条件を満たす。また、(b) は特定の  $V_0$  における透過率を示しているが、これを見ると、共鳴トンネルを電流の on/off にそのまま利用することができることが期待できる。そこで、この場合の off 電流に対応する透過率がどの程度小さくなるかを調べる。図 4.5 (b) は、入射角を  $\phi = 30^\circ$  とした場合のコンダクタンスを透過率から評価した結果である。 $V_0 = 217.8\text{meV}$  のときに  $T = 1$  が実現しており、これを on 電流に使用することができる。透過率が最小となっているのは、この図で  $V_0 = 180\text{meV}$  のときである。このときの透過率が  $T \sim 0.01$  程度であるため、on/off 比は 100 程度となることが分かった。この値は、ギャップ生成の方法と同程度である。しかし、ギャップ生成

図 4.4: chap4/img/phi.v0.eps

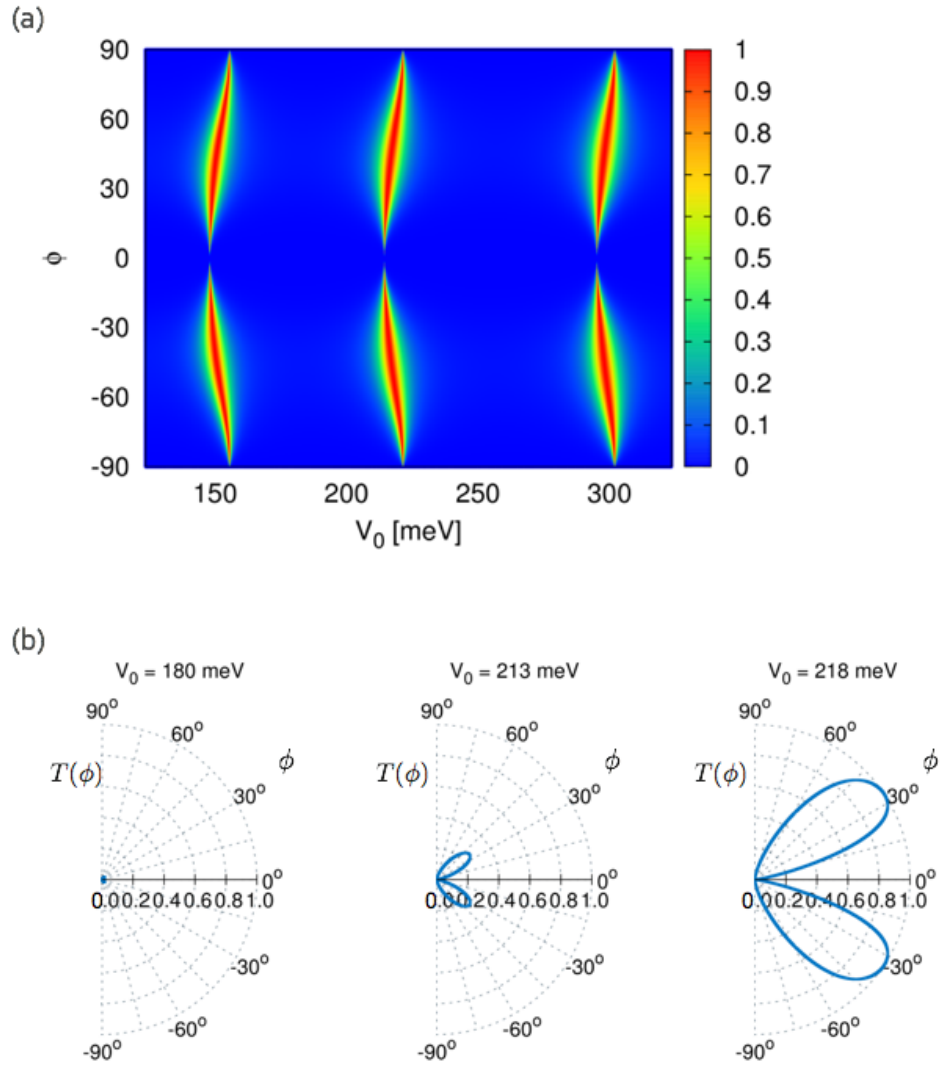


図 4.4: ポテンシャル障壁の幅を  $D = 40\text{nm}$  に固定した場合の、(a) 透過率  $T$  を障壁の高さ  $V_0$  と入射角  $\phi$  の関数でカラープロットした結果、(b) 特定の  $V_0$  における透過率  $T$  の入射角  $\phi$  依存性 (図の左から、 $V_0 = 180\text{meV}$ ,  $213\text{meV}$ ,  $218\text{meV}$ )。障壁の高さ  $V_0$  を調節することで、特定の角度で、共鳴トンネルを起こすかどうかを選択することができる。



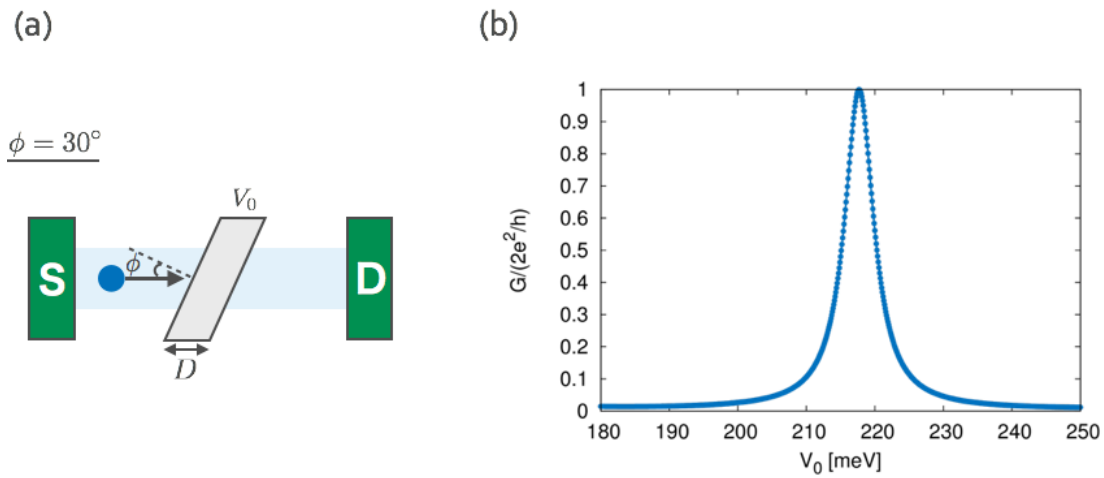


図 4.5: (a)  $\phi = 30^\circ$  となるようにポテンシャル障壁を配置した FET のイメージ図。(b)  $\phi = 30^\circ$  におけるコンダクタンス  $G$  の  $V_0$  依存性。障壁の幅は  $D = 40\text{nm}$  とした。 $V_0 = 217.8\text{meV}$  のときに  $T = 1$  が実現しているため、これを on 電流に使用することができる。

の方法と比較して、温度の影響を受けにくい、バンド分散を変化させることがないため移動度が変化しない、実験的に作成がしやすい、といったメリットが考えられる。こうして、 $\phi = 0^\circ$  以外の角度における共鳴トンネリングも FET に利用できる可能性があることが分かった。

### 4.3 波束の時間発展

ポテンシャル障壁に対して局在した波束をガウス関数として入射した場合の波束の時間発展を調べ、FET への応用可能性を考える (ポテンシャルが時間に対して変化するような場合は、今回は計算していない)。まず、1 層グラフェンの場合は入射角が  $\phi = 0^\circ$  のとき障壁に対して完全に透過してしまうため、電流オフの状態を作ることができない (図 4.6)。このとき、初期条件で入れた波束は壁を透過する前後で全く影響を受けない。これに対し 2 層グラフェンの場合、 $\phi = 0$  では完全に反射されることが確認できる (図 4.7)。このとき波束は壁に到達した時点で壁の中に侵入することができず、規格化を満たすように高さが増加していることが分かる。

次に、垂直入射以外の場合を考える図 4.8 は入射角  $\phi = 30^\circ$  の場合の結果である。先ほどの共鳴条件の結果を使用し、障壁が共鳴を起こす場合と起こさない場合を比較した。初期条件として使用したガウス関数は垂直入射の場合と同様である。(a) と (b) は共鳴が起こらないと予想された条件で計算した結果である。垂直入射の場合と同様に、壁に対して侵入することができないことが分かる。一方共鳴が存在する場合、入射波の一部が透過して残りが反射される様子が確認できた。以上のことから、ポテンシャル障壁の高さを変化させることで電流のオンオフを調節できる可能性があることが分かる。なお、この仕組みで FET を作成する場合、バンドギャップを生成せずにバンド全体を持ち上げるようにポテンシャルを加えれば良い。したがって、トップゲートとバックゲートに同じ大きさの電圧を印加することで実現できる。

---

図 4.6: chap4/img/t\_single.eps

図 4.7: chap4/img/t\_bilayer\_phi0.eps

図 4.8: chap4/img/t\_bilayer\_phi30.eps

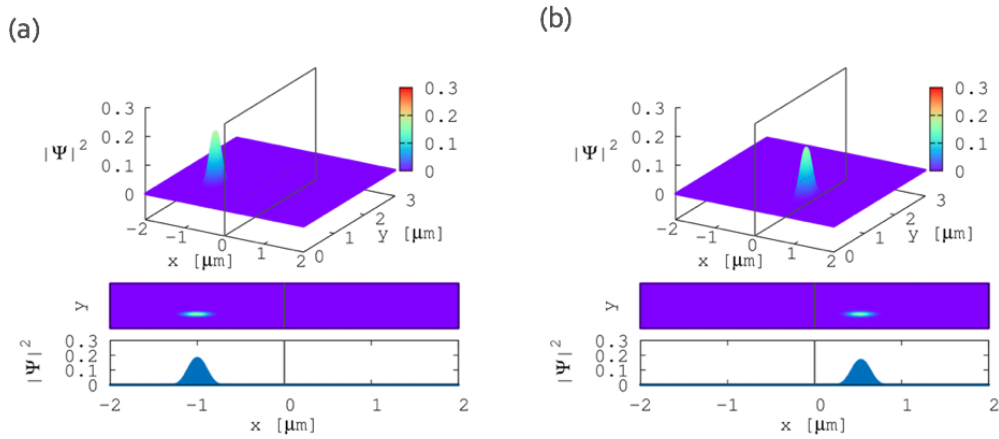


図 4.6: 1層グラフェンにおける波束の時間発展の計算。入射角は  $\phi = 0^\circ$ 。図の上から、確率密度の3次元プロット、その平面プロット、 $x$ の関数として横から見た図である。(a) 初期条件として使用した  $t = 0$  sにおけるガウス関数。(b)  $t = 1.5 \times 10^{-12}$  sにおける波動関数。ポテンシャル障壁は厚さが  $D = 100\text{nm}$ 、高さが  $V_0 = 250\text{meV}$  入射電子の波長は  $\lambda = 50\text{nm}$  とした。

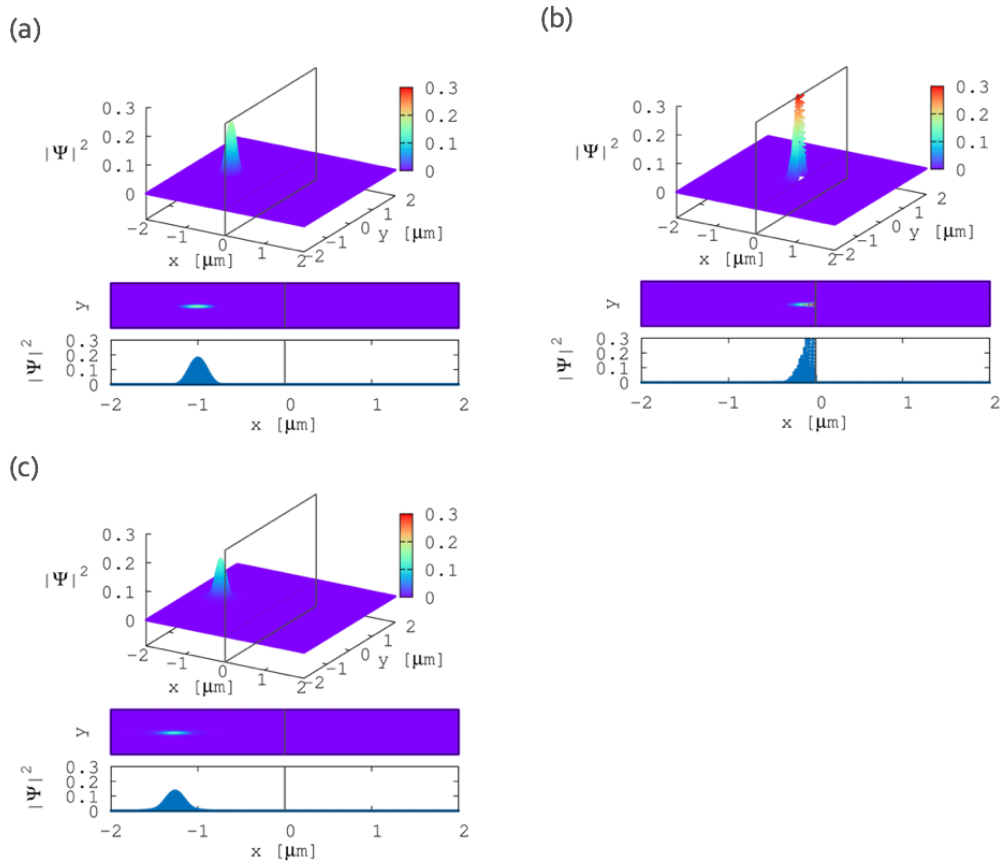


図 4.7: 2層グラフェンにおける波束の時間発展の計算。入射角は  $\phi = 0^\circ$ 。(a) 初期条件として使用した  $t = 0$  s におけるガウス関数。(b)  $t = 2 \times 10^{-12}$  s、(c)  $t = 5 \times 10^{-12}$  s における波動関数。ポテンシャル障壁は厚さが  $D = 40$  nm、高さが  $V_0 = 180$  meV 入射電子の波長は  $\lambda = 50$  nm とした。

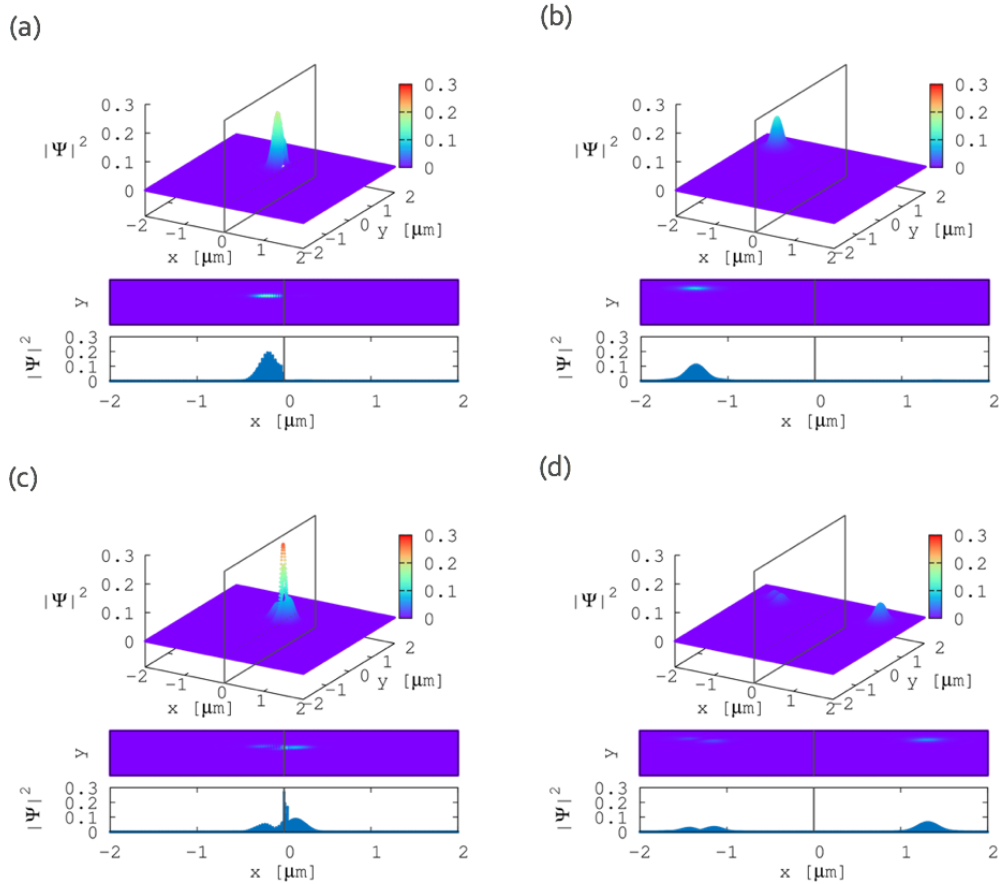


図 4.8: 2層グラフェンにおける波束の時間発展の計算。入射角は  $\phi = 30^\circ$ 。(a), (b) ポテンシャル障壁の高さを  $V_0 = 180\text{meV}$  としたとき (c), (d) ポテンシャル障壁の高さを  $V_0 = 218\text{meV}$  としたときの結果。時刻は (a),(c) が  $t = 3 \times 10^{-12}\text{ s}$ 、(b),(d) が  $t = 6 \times 10^{-12}\text{ s}$  である。ポテンシャル障壁は厚さが  $D = 40\text{nm}$ 、入射電子の波長は  $\lambda = 50\text{nm}$  とした。(b), (d) の障壁では共鳴トンネリングが存在する。

## 第5章 まとめ

グラフェンのデバイス応用を考える上で、FETの作成が困難である点が大きな課題となっている。本研究では、2層グラフェンの1次元的なポテンシャル障壁に対する電子の透過率を計算することで、電流のオンオフの制御が可能であるかどうかを考えてきた。従来取られていたバンドギャップを生成する方法では、自己遮蔽効果によって開けられるギャップに上限が存在することで、on/off比が実用的な値とならない問題があった。そこで、2層グラフェンが本来持つ透過率の特異性に着目し、ギャップを生成しなくても電子が障壁を透過できない状況を作ることができると示し、特に $0^\circ$ 入射の電子が高いon/off比を実現できる可能性があることが分かった。また、ポテンシャル障壁の条件を変更することで共鳴トンネリングを選択することができるため、これがそのままFETにおける電流のオンオフ制御に利用できることが分かった。なお、今回の計算では、ポテンシャルが存在する領域とそうでない領域の境界の情報を考慮していないため、境界の取り扱いを考慮する必要があると考える。

# 付録 A 2層グラフェンの有効ハミルトニアン の導出

ここでは、低エネルギーにおける K 点近傍の有効ハミルトニアンを導出を示す。第 2 章で述べた通り、2 層グラフェンは単位胞に 4 つの原子を含み、ここから 4 つのバンドが作られる。K 点近傍で、このうち 2 つは  $E = 0$  で接する放物線バンドとなり、残りの 2 つのバンドが  $E \sim \pm\gamma_1$  程度開いた位置に存在する (図 2.5)。そこで、 $|E| \ll \gamma_1$  のフェルミエネルギー近傍では、dimer 原子の軌道を取り除いた有効ハミルトニアンを用いることができる。

まず、波動関数を低エネルギーに対応する non-dimer 原子の部分  $\theta$  と、dimer 原子を要素に持つ部分  $\chi$  に分ける。

$$\theta = \begin{pmatrix} \psi_{A1} \\ \psi_{B2} \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \psi_{A2} \\ \psi_{B1} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

K 点近傍でのシュレーディンガー方程式は、式 (2.29) を並び替えて

$$\begin{pmatrix} h_\theta & u \\ u^\dagger & h_\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \theta \\ \chi \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

と表される。ここで、

$$h_\theta = \begin{pmatrix} \epsilon_{A1} & v_3\pi \\ v_3\pi^\dagger & \epsilon_{B2} \end{pmatrix}, \quad h_\chi = \begin{pmatrix} \epsilon_{A2} & \gamma_1 \\ \gamma_1 & \epsilon_{B1} \end{pmatrix},$$

$$u = \begin{pmatrix} -v_4\pi^\dagger & v\pi^\dagger \\ v\pi & -v_4\pi \end{pmatrix}, \quad u^\dagger = \begin{pmatrix} -v_4\pi & v\pi^\dagger \\ v\pi & -v_4\pi^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

とおいた。式 (A.2) の 2 行目から、

$$\chi = (E - h_\chi)^{-1} u^\dagger \theta \quad (\text{A.4})$$

これを式 (A.2) の 1 行目に代入すると、

$$[h_\theta + u(E - h_\chi)^{-1} u^\dagger] \theta = E\theta \quad (\text{A.5})$$

$(E - h_\chi)^{-1}$  を  $E$  の 1 次まで展開すれば、

$$(E - h_\chi)^{-1} = -h_\chi^{-1} \left( 1 - \frac{E}{h_\chi} \right)^{-1} \approx -h_\chi^{-1} \left( 1 - \frac{E}{h_\chi} \right) \quad (\text{A.6})$$

より、

$$[h_\theta - uh_\chi^{-1}u^\dagger] \theta \approx ES\theta \quad (\text{A.7})$$

ただし、 $S = 1 + uh_\chi^{-2}u^\dagger$  とした。さらに、 $\Phi = S^{1/2}\theta$  とおくと、この変換は元の波動関数と規格化を変えず、

$$\Phi^\dagger \Phi = \theta^\dagger (1 + uh_\chi^{-2}u^\dagger) \theta \approx \theta^\dagger \theta + \chi^\dagger \chi \quad (\text{A.8})$$

こうして、

$$[h_\theta - uh_\chi^{-1}u^\dagger] S^{-1/2} \Phi \approx ES^{1/2} \Phi \quad (\text{A.9})$$

$$S^{-1/2} [h_\theta - uh_\chi^{-1}u^\dagger] S^{-1/2} \Phi \approx E\Phi \quad (\text{A.10})$$

となって、低エネルギーの有効ハミルトニアンを抽出することができた。

$$H^{(\text{eff})} \approx S^{-1/2} [h_\theta - uh_\chi^{-1}u^\dagger] S^{-1/2} \quad (\text{A.11})$$

これを用いて、具体的に式 (A.3) を代入すれば、non-dimer 原子を基底にした低エネルギーの有効ハミルトニアンが得られる。ここでは、 $\gamma_0$  と  $\gamma_1$  のホッピングエネルギーが他のエネルギーよりも大きいとして、 $\epsilon_{A1} = \epsilon_{A2} = \epsilon_{B1} = \epsilon_{B2} = 0$  と  $v_3 = v_4 = 0$  を仮定し、さらに展開の最低次を取ってくれば、

$$uh_\chi^{-1}u^\dagger = -\frac{v^2}{\gamma_1} \begin{pmatrix} 0 & \pi^\dagger \\ \pi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \pi^\dagger \\ \pi & 0 \end{pmatrix} = -\frac{v^2}{\gamma_1} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ (\pi)^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

より、

$$\hat{h}_0 = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ (\pi)^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

が得られる。



## 付録B クライン透過率の計算詳細

第2章で述べたクライントンネル効果における計算過程をこちらに示す。

### B.1 単層グラフェンの透過率の導出

単層グラフェンの場合は、接続条件から各係数を連立方程式を解いて解析に求めることができる。接続条件は以下の通り。

$$\begin{aligned}\psi_1^I(0, y) &= \psi_1^II(0, y), & \psi_2^I(0, y) &= \psi_2^II(0, y) \\ \psi_1^II(D, y) &= \psi_1^III(D, y), & \psi_2^II(D, y) &= \psi_2^III(D, y)\end{aligned}$$

ここで、波動関数の2成分がそれぞれ接続するため、波動関数の微分の接続は必要がない(ディラック方程式は空間に対して1階の微分のみを含むため、波動関数の微分は一般に接続しない)。解くべき連立方程式は、

$$\begin{cases} 1 + r = a + b & \text{(B.1)} \\ s(e^{i\phi} - re^{-i\phi}) = s'(ae^{i\theta} - be^{-i\theta}) & \text{(B.2)} \\ ae^{iq_x D} + be^{-iq_x D} = te^{ik_x D} & \text{(B.3)} \\ s'(ae^{iq_x D + i\theta} - be^{-iq_x D - i\theta}) = ste^{ik_x D + i\phi} & \text{(B.4)} \end{cases}$$

となる。方針としては、 $a, b$ を用いて $r$ を書いて、 $T = 1 - |r|^2$ で透過率を求める。そこでまずは、式(B.3)と(B.4)より、

$$\begin{aligned}s'(ae^{iq_x D + i\theta} - be^{-iq_x D - i\theta}) &= se^{i\phi}(ae^{iq_x D} + be^{-iq_x D}) \\ s'(ae^{i\theta}e^{2iq_x D} - be^{-i\theta}) &= se^{i\phi}(ae^{2iq_x D} + b) \\ (se^{i\phi} + s'e^{-i\theta})b &= (-se^{i\phi} + s'e^{i\theta})ae^{2iq_x D} \\ b &= -\frac{se^{i\phi} - s'e^{i\theta}}{se^{i\phi} + s'e^{-i\theta}}ae^{2iq_x D}\end{aligned}\tag{B.5}$$

次に、式 (B.2) より、

$$\begin{aligned}
 a &= 1 + r + \frac{se^{i\phi} - s'e^{i\theta}}{se^{i\phi} + s'e^{-i\theta}} ae^{2iq_x D} \\
 \left(1 - \frac{se^{i\phi} - s'e^{i\theta}}{se^{i\phi} + s'e^{-i\theta}} e^{2iq_x D}\right) a &= 1 + r \\
 \left\{e^{-iq_x D} - \frac{(se^{i\phi} - s'e^{i\theta}) e^{iq_x D}}{se^{i\phi} + s'e^{-i\theta}}\right\} a &= (1 + r)e^{-iq_x D}
 \end{aligned}$$

ここで、左辺の  $a$  の係数部分は

$$\begin{aligned}
 e^{-iq_x D} - \frac{(se^{i\phi} - s'e^{i\theta}) e^{iq_x D}}{se^{i\phi} + s'e^{-i\theta}} \\
 &= \frac{se^{i(\phi - q_x D)} + s'e^{-i(\theta + q_x D)} - se^{i(\phi + q_x D)} + s'e^{i(\theta + q_x D)}}{se^{i\phi} + s'e^{-i\theta}} \\
 &= \frac{-2ise^{i\phi} \sin(q_x D) + 2s' \cos(\theta + q_x D)}{se^{i\phi} + s'e^{-i\theta}}
 \end{aligned}$$

こうして、

$$a = \frac{se^{i\phi} + s'e^{-i\theta}}{-2ise^{i\phi} \sin(q_x D) + 2s' \cos(\theta + q_x D)} (1 + r)e^{-iq_x D} \quad (\text{B.6})$$

これを、式 (B.5) に代入して、

$$b = -\frac{se^{i\phi} - s'e^{-i\theta}}{-2ise^{i\phi} \sin(q_x D) + 2s' \cos(\theta + q_x D)} (1 + r)e^{iq_x D} \quad (\text{B.7})$$

こうして、 $a$  と  $b$  が  $r$  のみで表現できたので、式 (B.2) に代入する。この左辺はまず、

$$s' \frac{1 + r}{-2ise^{i\phi} \sin(q_x D) + 2s' \cos(\theta + q_x D)} \left\{ (se^{i(\phi + \theta)} + s') e^{-iq_x D} + (se^{i(\phi - \theta)} - s') e^{iq_x D} \right\}$$

となるが、ここで、

$$\begin{aligned}
 &s' \left\{ (se^{i(\phi + \theta)} + s') e^{-iq_x D} + (se^{i(\phi - \theta)} - s') e^{iq_x D} \right\} \\
 &= ss' \left( e^{i(\theta - q_x D)} + e^{-i(\theta - q_x D)} \right) e^{i\phi} + \left( -e^{iq_x D} + e^{-iq_x D} \right) \\
 &= ss' e^{i\phi} 2 \cos(\theta - q_x D) - 2i \sin(q_x D)
 \end{aligned}$$

より、

$$\begin{aligned}
 s(e^{i\phi} - re^{-i\phi}) &= A(1 + r) \\
 r &= -\frac{A - se^{i\phi}}{A + se^{-i\phi}}
 \end{aligned}$$

ただし、

$$A = \frac{ss'e^{i\phi}2\cos(\theta - q_x D) - 2i\sin(q_x D)}{-2ise^{i\phi}\sin(q_x D) + 2s'\cos(\theta + q_x D)}$$

まとめると、

$$r = \frac{ie^{i\phi}\sin(q_x D)(\sin\phi - ss'\sin\theta)}{\sin(q_x D) - ss'[\sin\phi\sin\theta\sin(q_x D) - i\cos\phi\cos\theta\cos(q_x D)]} \quad (\text{B.8})$$

こうして、最終的には

$$\begin{aligned} T(\phi) = |t|^2 &= 1 - |r|^2 \\ &= \frac{\cos^2\theta\cos^2\phi}{\cos^2(q_x D)\cos^2\theta\cos^2\phi + \sin^2(q_x D)(1 - ss'\sin\theta\sin\phi)^2} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

が得られた。

## 付 録 C プログラム

この付録では、本研究で使用したプログラムについて述べる。特に、2バンドの有効ハミルトニアンに対し、波動関数とその微分が接続するという条件から、連立方程式を解くための行列を作成する部分を載せる。なお、本論文の結果で示したのは、ポテンシャル障壁が1つある場合の透過率の計算のみであるが、障壁が2つある場合の固有状態の計算も行ったので、そのプログラムも示す。

### C.1 2層グラフェンの透過率計算

連立方程式を解くための行列を作成し、LAPACK を用いて解を得る。これが波動関数の係数になるため、固有状態と透過率を求めることができる。さらに、この固有状態で時間に依存する波動関数を展開することで、波束の時間発展を計算することができる(各時刻  $t$  における計算は完全に独立であることから、MPI を用いて並列化を行った)。そこでここでは、連立方程式を解くために必要な行列を作成し、ライブラリを呼び出す部分のソースコードを記す。

#### C.1.1 ポテンシャル障壁が1つの場合

以下のプログラムでは、障壁の厚さ  $d$ , 高さ  $v_0$ , 初期条件として入射電子の波数  $k$ (波長  $\text{lmd}$ ) と角度  $\text{phi}$  をパラメータとして、固有状態の係数を求める作業を行っている。

```
implicit none
integer,parameter:: dbl=selected_real_kind(p=12)
real(kind=dbl):: trans,phi,theta,ky,qx
real(kind=dbl),parameter:: pi=4.0_dbl*atan(1.0_dbl),&
    hbar=1.0_dbl,&          ! natural unit (eV & nm)
    gamma0=3.16_dbl,&      ! [eV]
```

```

gamma1=0.381_dbl,&
vf=3.0_dbl/2.0_dbl*gamma0/hbar*0.142,&
m=gamma1/(2.0_dbl*vf**2.0_dbl),&
lmd=50.0_dbl,&          ! [nm]
d=40.0_dbl,&
k=2.0_dbl*pi/lmd,&
phi=0.0_dbl,&
e= (hbar**2.0_dbl*k**2.0_dbl) / (2.0_dbl*m),&
v0= 0.1495_dbl          ! [eV]
complex(kind=dbl),parameter:: ci=(0.0_dbl,1.0_dbl)

! for simultaneous equations(LAPACK)
integer:: info
integer,parameter:: n=8, nrhs=1, lda=n, ldb=n
complex(kind=dbl):: a1,a2,a3,b1,b2,b3,c1,c2,c3,d1,d2,d3,&
    s1,s2,s3,h1,h2,h3,phi1,phi2,phi3,&
    k1x,k2x,k3x,kap1x,kap2x,kap3x
complex(kind=dbl),dimension(lda,n):: a
complex(kind=dbl),dimension(ldb,nrhs):: b
integer,dimension(n):: ipiv

!-----
! set up the problem
s1=cplx( sign(1.0_dbl,-e),kind=dbl )
s2=cplx( sign(1.0_dbl,v0-e),kind=dbl )
s3=cplx( sign(1.0_dbl,-e),kind=dbl )

ky=k*sin(phi)
! just for check
if( 2.0_dbl*m*abs(e-v0)/(hbar**2.0_dbl) - ky**2.0_dbl < 0.0d0 ) then
    write(*,*) 2.0_dbl*m*abs(e-v0)/(hbar**2.0_dbl) - ky**2.0_dbl
    stop " V_0 is not correct."
end if

```

```

qx=sqrt( 2.0_dbl*m*abs(e-v0)/(hbar**2.0_dbl) - ky**2.0_dbl )
theta=atan(ky/qx)

phi1=cmplx(phi,kind=dbl)
phi2=cmplx(theta,kind=dbl)
phi3=cmplx(phi,kind=dbl)

k1x=cmplx(k,kind=dbl)*cos(phi1)
k2x=cmplx(qx,kind=dbl)
k3x=cmplx(k,kind=dbl)*cos(phi3)

kap1x=sqrt( k1x**2.0_dbl + 2.0_dbl*cmplx(ky,kind=dbl)**2.0_dbl )
kap2x=sqrt( k2x**2.0_dbl + 2.0_dbl*cmplx(ky,kind=dbl)**2.0_dbl )
kap3x=sqrt( k3x**2.0_dbl + 2.0_dbl*cmplx(ky,kind=dbl)**2.0_dbl )

h1=( sqrt(1.0_dbl+sin(phi1)**2.0_dbl) - sin(phi1) )**2.0_dbl
h2=( sqrt(1.0_dbl+sin(phi2)**2.0_dbl) - sin(phi2) )**2.0_dbl
h3=( sqrt(1.0_dbl+sin(phi3)**2.0_dbl) - sin(phi3) )**2.0_dbl

!-----
! making matrix for simultaneous equations

! initialization
a=(0.0_dbl,0.0_dbl)
b=(0.0_dbl,0.0_dbl)

! 1st eq.
a(1,1)= (-1.0_dbl,0.0_dbl)
a(1,3)= (1.0_dbl,0.0_dbl)
a(1,4)= (-1.0_dbl,0.0_dbl)
a(1,5)= (1.0_dbl,0.0_dbl)
a(1,6)= (-1.0_dbl,0.0_dbl)
a(1,7)= (-1.0_dbl,0.0_dbl)

```

$$b(1,1) = -(1.0\_dbl, 0.0\_dbl)$$

! 2nd eq.

$$a(2,1) = -s2 * \exp( ci * 2.0\_dbl * \phi_2 )$$

$$a(2,3) = s1 * \exp( -ci * 2.0\_dbl * \phi_1 )$$

$$a(2,4) = -s2 * \exp( -ci * 2.0\_dbl * \phi_2 )$$

$$a(2,5) = -s1 * h1$$

$$a(2,6) = s2 * h2$$

$$a(2,7) = s2 / h2$$

$$b(2,1) = -s1 * \exp( ci * 2.0\_dbl * \phi_1 )$$

! 3rd eq.

$$a(3,1) = -ci * k2x$$

$$a(3,3) = -ci * k1x$$

$$a(3,4) = ci * k2x$$

$$a(3,5) = \text{kap}1x$$

$$a(3,6) = -\text{kap}2x$$

$$a(3,7) = \text{kap}2x$$

$$b(3,1) = -ci * k1x$$

! 4th eq.

$$a(4,1) = -s2 * k2x * ci * \exp( ci * 2.0\_dbl * \phi_2 )$$

$$a(4,3) = -s1 * k1x * ci * \exp( -ci * 2.0\_dbl * \phi_1 )$$

$$a(4,4) = s2 * k2x * ci * \exp( -ci * 2.0\_dbl * \phi_2 )$$

$$a(4,5) = -s1 * \text{kap}1x * h1$$

$$a(4,6) = s2 * \text{kap}2x * h2$$

$$a(4,7) = -s2 * \text{kap}2x / h2$$

$$b(4,1) = -s1 * k1x * ci * \exp( ci * 2.0\_dbl * \phi_1 )$$

! 5th eq.

$$a(5,1) = \exp( ci*k2x*d )$$

$$a(5,2) = -\exp( ci*k3x*d )$$

$$a(5,4) = \exp( -ci*k2x*d )$$

$$a(5,6) = \exp( kap2x*d )$$

$$a(5,7) = \exp( -kap2x*d )$$

$$a(5,8) = -\exp( -kap3x*d )$$

$$b(5,1) = (0.0\_dbl, 0.0\_dbl)$$

! 6th eq.

$$a(6,1) = s2*\exp( ci*k2x*d+ci*2.0\_dbl*\phi2 )$$

$$a(6,2) = -s3*\exp( ci*k3x*d+ci*2.0\_dbl*\phi3 )$$

$$a(6,4) = s2*\exp( -ci*k2x*d-ci*2.0\_dbl*\phi2 )$$

$$a(6,6) = -s2*h2*\exp(kap2x*d)$$

$$a(6,7) = -s2/h2*\exp(-kap2x*d)$$

$$a(6,8) = s3/h3*\exp(-kap3x*d)$$

$$b(6,1) = (0.0\_dbl, 0.0\_dbl)$$

! 7th eq.

$$a(7,1) = ci*k2x*\exp( ci*k2x*d )$$

$$a(7,2) = -ci*k3x*\exp( ci*k3x*d )$$

$$a(7,4) = -ci*k2x*\exp( -ci*k2x*d )$$

$$a(7,6) = kap2x*\exp(kap2x*d)$$

$$a(7,7) = -kap2x*\exp(-kap2x*d)$$

$$a(7,8) = kap3x*\exp(-kap3x*d)$$

$$b(7,1) = (0.0\_dbl, 0.0\_dbl)$$

! 8th eq.

$$a(8,1) = ci*s2*k2x*\exp( ci*k2x*d+ci*2.0\_dbl*\phi2 )$$

$$a(8,2) = -ci*s3*k3x*\exp( ci*k3x*d+ci*2.0\_dbl*\phi3 )$$



```
a(8,4)= -ci*s2*k2x*exp( -ci*k2x*d-ci*2.0_dbl*phi2 )
a(8,6)= -s2*kap2x*h2*exp(kap2x*d)
a(8,7)= s2*kap2x/h2*exp(-kap2x*d)
a(8,8)= -s3*kap3x/h3*exp(-kap3x*d)
```

```
b(8,1)= (0.0_dbl,0.0_dbl)
```

```
!-----
```

```
! call LAPACK
```

```
call ZGESV( N,NRHS,A,LDA,IPIV,B,LDB,INFO )
```

```
if( info/=0 ) then
```

```
  write(*,*) " i = ",i," info = ",info
```

```
  stop " info is not correct. "
```

```
end if
```

```
!-----
```

```
! output
```

```
a2=b(1,1)
```

```
a3=b(2,1)
```

```
b1=b(3,1)
```

```
b2=b(4,1)
```

```
c1=b(5,1)
```

```
c2=b(6,1)
```

```
d2=b(7,1)
```

```
d3=b(8,1)
```

```
trans=abs(a3)**2.0_dbl
```

```
!-----
```

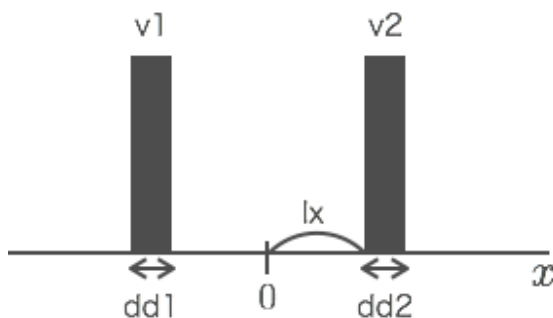


図 C.1: 1次元的な2つのポテンシャル障壁のイメージ図。

### C.1.2 ポテンシャル障壁が2つある場合

図 C.1 のようなポテンシャルを考える。この障壁の間に閉じ込められた状態が存在するかどうかを調べるために、この系の固有状態を調べる。接続に用いる領域が増えるために、解くべき連立方程式の数が増えているが、行っていることは障壁が1つの場合と同じである。条件として与えられるパラメータは、電子のエネルギー以外に、それぞれの障壁の幅 ( $dd1$ ,  $dd2$ ) と高さ ( $v1$ ,  $v2$ )、そして障壁間の距離 ( $2*lx$ ) である。

```
implicit none
integer,parameter:: dbl=selected_real_kind(p=12)
real(kind=dbl):: x,y,k,phi
real(kind=dbl),parameter:: &
    pi=4.0_dbl*atan(1.0_dbl), rad=pi/180.0_dbl,&
    hbar=1.0_dbl,&
    gamma0=3.16_dbl,&          ! [eV]
    gamma1=0.381_dbl,&
    vf=3.0_dbl/2.0_dbl*gamma0/hbar*0.142,&
    m=gamma1/(2.0_dbl*vf**2.0_dbl),&
    ! ***
    dd1=40.0_dbl,&
    dd2=40.0_dbl,&
    ly=real(j0,kind=dbl),&
    lx=50.0_dbl,&
```

図 C.1: appendix/ap4/img/2bar.eps

```

l1=lx+dd1,&
l2=lx+dd2,&
v1=0.180_dbl,&
v2=0.180_dbl
! ***
kx=2.0_dbl*pi/50.0_dbl,&
ky=0.0_dbl
complex(kind=dbl),parameter:: ci=(0.0_dbl,1.0_dbl)
complex(kind=dbl):: &
    a1,b1,c1,d1,a2,b2,c2,d2,a3,b3,c3,d3,a4,b4,c4,d4,a5,b5,c5,d5
logical:: cnd

! for simultaneous equations(LAPACK)
integer:: info
integer,parameter:: n=20, nrhs=1, lda=n, ldb=n
complex(kind=dbl):: s1,s2,s3,s4,s5,&
    h1,h2,h3,h4,h5,&
    phi1,phi2,phi3,phi4,phi5,&
    k1x,k2x,k3x,k4x,k5x,&
kap1x,kap2x,kap3x,kap4x,kap5x
complex(kind=dbl),dimension(lda,n):: a
complex(kind=dbl),dimension(ldb,nrhs):: b
integer,dimension(n):: ipiv

!-----
! set up the parameters
call condition_qx(kx,ky,v1,v2,cnd)
if( cnd .eqv. .false. ) stop " V_1 or V_2 is not correct. "

q1x=sqrt( 2.0_dbl*m*abs(e(kx,ky)-v1)/(hbar**2.0_dbl) - ky**2.0_dbl )
q2x=sqrt( 2.0_dbl*m*abs(e(kx,ky)-v2)/(hbar**2.0_dbl) - ky**2.0_dbl )

phi=atan(ky/kx)

```

```

theta1=atan(ky/q1x)
theta2=atan(ky/q2x)

s1=cmplx( sign(1.0_dbl,-e(kx,ky)),kind=dbl )
s2=cmplx( sign(1.0_dbl,v1-e(kx,ky)),kind=dbl )
s3=cmplx( sign(1.0_dbl,-e(kx,ky)),kind=dbl )
s4=cmplx( sign(1.0_dbl,v2-e(kx,ky)),kind=dbl )
s5=cmplx( sign(1.0_dbl,-e(kx,ky)),kind=dbl )

phi1=cmplx(phi,kind=dbl)
phi2=cmplx(theta1,kind=dbl)
phi3=cmplx(phi,kind=dbl)
phi4=cmplx(theta2,kind=dbl)
phi5=cmplx(phi,kind=dbl)

k1x=cmplx(kx,kind=dbl)
k2x=cmplx(q1x,kind=dbl)
k3x=cmplx(kx,kind=dbl)
k4x=cmplx(q2x,kind=dbl)
k5x=cmplx(kx,kind=dbl)

kap1x=sqrt( k1x**2.0_dbl + 2.0_dbl*cmplx(ky,kind=dbl)**2.0_dbl )
kap2x=sqrt( k2x**2.0_dbl + 2.0_dbl*cmplx(ky,kind=dbl)**2.0_dbl )
kap3x=sqrt( k3x**2.0_dbl + 2.0_dbl*cmplx(ky,kind=dbl)**2.0_dbl )
kap4x=sqrt( k4x**2.0_dbl + 2.0_dbl*cmplx(ky,kind=dbl)**2.0_dbl )
kap5x=sqrt( k5x**2.0_dbl + 2.0_dbl*cmplx(ky,kind=dbl)**2.0_dbl )

h1=( sqrt(1.0_dbl+sin(phi1)**2.0_dbl) - sin(phi1) )**2.0_dbl
h2=( sqrt(1.0_dbl+sin(phi2)**2.0_dbl) - sin(phi2) )**2.0_dbl
h3=( sqrt(1.0_dbl+sin(phi3)**2.0_dbl) - sin(phi3) )**2.0_dbl
h4=( sqrt(1.0_dbl+sin(phi4)**2.0_dbl) - sin(phi4) )**2.0_dbl
h5=( sqrt(1.0_dbl+sin(phi5)**2.0_dbl) - sin(phi5) )**2.0_dbl

```

```

!-----
! making matrix for simultaneous equations
! initialization
a=(0.0_dbl,0.0_dbl)
b=(0.0_dbl,0.0_dbl)

! *** I & II ***
! 1st eq.
a(1,1)= exp( ci*k1x*(-l1) )      ! a1
a(1,2)= exp( -ci*k1x*(-l1) )    ! b1
a(1,3)= exp( kap1x*(-l1) )      ! c1
a(1,4)= exp( -kap1x*(-l1) )     ! d1
a(1,5)= -exp( ci*k2x*(-l1) )    ! a2
a(1,6)= -exp( -ci*k2x*(-l1) )   ! b2
a(1,7)= -exp( kap2x*(-l1) )     ! c2
a(1,8)= -exp( -kap2x*(-l1) )    ! d2

! 2nd eq.
a(2,1)= s1*exp( ci*k1x*(-l1)+ci*2.0_dbl*phi1 ) ! a1
a(2,2)= s1*exp( -ci*k1x*(-l1)-ci*2.0_dbl*phi1 ) ! b1
a(2,3)= -s1*h1*exp( kap1x*(-l1) )              ! c1
a(2,4)= -s1/h1*exp( -kap1x*(-l1) )             ! d1
a(2,5)= -s2*exp( ci*k2x*(-l1)+ci*2.0_dbl*phi2 ) ! a2
a(2,6)= -s2*exp( -ci*k2x*(-l1)-ci*2.0_dbl*phi2 ) ! b2
a(2,7)= s2*h2*exp( kap2x*(-l1) )              ! c2
a(2,8)= s2/h2*exp( -kap2x*(-l1) )             ! d2

! 3rd eq.
a(3,1)= ci*k1x*exp( ci*k1x*(-l1) )      ! a1
a(3,2)= -ci*k1x*exp( -ci*k1x*(-l1) )    ! b1
a(3,3)= kap1x*exp( kap1x*(-l1) )        ! c1
a(3,4)= -kap1x*exp( -kap1x*(-l1) )      ! d1

```

```

a(3,5)= -ci*k2x*exp( ci*k2x*(-l1) )      ! a2
a(3,6)= ci*k2x*exp( -ci*k2x*(-l1) )     ! b2
a(3,7)= -kap2x*exp( kap2x*(-l1) )       ! c2
a(3,8)= kap2x*exp( -kap2x*(-l1) )       ! d2

! 4th eq.
a(4,1)= s1*ci*k1x*exp( ci*k1x*(-l1)+ci*2.0_dbl*phi1 ) ! a1
a(4,2)= -s1*ci*k1x*exp( -ci*k1x*(-l1)-ci*2.0_dbl*phi1 ) ! b1
a(4,3)= -s1*kap1x*h1*exp( kap1x*(-l1) ) ! c1
a(4,4)= s1*kap1x/h1*exp( -kap1x*(-l1) ) ! d1
a(4,5)= -s2*ci*k2x*exp( ci*k2x*(-l1)+ci*2.0_dbl*phi2 ) ! a2
a(4,6)= s2*ci*k2x*exp( -ci*k2x*(-l1)-ci*2.0_dbl*phi2 ) ! b2
a(4,7)= s2*kap2x*h2*exp( kap2x*(-l1) ) ! c2
a(4,8)= -s2*kap2x/h2*exp( -kap2x*(-l1) ) ! d2

! *** II & III ***
! 5th eq.
a(5,5)= exp( ci*k2x*(-lx) ) ! a2
a(5,6)= exp( -ci*k2x*(-lx) ) ! b2
a(5,7)= exp( kap2x*(-lx) ) ! c2
a(5,8)= exp( -kap2x*(-lx) ) ! d2
a(5,9)= -exp( ci*k3x*(-lx) ) ! a3
a(5,10)= -exp( -ci*k3x*(-lx) ) ! b3
a(5,11)= -exp( kap3x*(-lx) ) ! c3
a(5,13)= -exp( -kap3x*(-lx) ) ! d3

! 6th eq.
a(6,5)= s2*exp( ci*k2x*(-lx)+ci*2.0_dbl*phi2 ) ! a2
a(6,6)= s2*exp( -ci*k2x*(-lx)-ci*2.0_dbl*phi2 ) ! b2
a(6,7)= -s2*h2*exp( kap2x*(-lx) ) ! c2
a(6,8)= -s2/h2*exp( -kap2x*(-lx) ) ! d2
a(6,9)= -s3*exp( ci*k3x*(-lx)+ci*2.0_dbl*phi3 ) ! a3

```

$$\begin{aligned} a(6,10) &= -s3 \cdot \exp(-ci \cdot k3x \cdot (-lx) - ci \cdot 2.0\_dbl \cdot \phi3) & ! b3 \\ a(6,11) &= s3 \cdot h3 \cdot \exp(kap3x \cdot (-lx)) & ! c3 \\ a(6,12) &= s3/h3 \cdot \exp(-kap3x \cdot (-lx)) & ! d3 \end{aligned}$$

! 7th eq.

$$\begin{aligned} a(7,5) &= ci \cdot k2x \cdot \exp(ci \cdot k2x \cdot (-lx)) & ! a2 \\ a(7,6) &= -ci \cdot k2x \cdot \exp(-ci \cdot k2x \cdot (-lx)) & ! b2 \\ a(7,7) &= kap2x \cdot \exp(kap2x \cdot (-lx)) & ! c2 \\ a(7,8) &= -kap2x \cdot \exp(-kap2x \cdot (-lx)) & ! d2 \\ a(7,9) &= -ci \cdot k3x \cdot \exp(ci \cdot k3x \cdot (-lx)) & ! a3 \\ a(7,10) &= ci \cdot k3x \cdot \exp(-ci \cdot k3x \cdot (-lx)) & ! b3 \\ a(7,11) &= -kap3x \cdot \exp(kap3x \cdot (-lx)) & ! c3 \\ a(7,12) &= kap3x \cdot \exp(-kap3x \cdot (-lx)) & ! d3 \end{aligned}$$

! 8th eq.

$$\begin{aligned} a(8,5) &= s2 \cdot ci \cdot k2x \cdot \exp(ci \cdot k2x \cdot (-lx) + ci \cdot 2.0\_dbl \cdot \phi2) & ! a2 \\ a(8,6) &= -s2 \cdot ci \cdot k2x \cdot \exp(-ci \cdot k2x \cdot (-lx) - ci \cdot 2.0\_dbl \cdot \phi2) & ! b2 \\ a(8,7) &= -s2 \cdot kap2x \cdot h2 \cdot \exp(kap2x \cdot (-lx)) & ! c2 \\ a(8,8) &= s2 \cdot kap2x/h2 \cdot \exp(-kap2x \cdot (-lx)) & ! d2 \\ a(8,9) &= -s3 \cdot ci \cdot k3x \cdot \exp(ci \cdot k3x \cdot (-lx) + ci \cdot 2.0\_dbl \cdot \phi3) & ! a3 \\ a(8,10) &= s3 \cdot ci \cdot k3x \cdot \exp(-ci \cdot k3x \cdot (-lx) - ci \cdot 2.0\_dbl \cdot \phi3) & ! b3 \\ a(8,11) &= s3 \cdot kap3x \cdot h3 \cdot \exp(kap3x \cdot (-lx)) & ! c3 \\ a(8,12) &= -s3 \cdot kap3x/h3 \cdot \exp(-kap3x \cdot (-lx)) & ! d3 \end{aligned}$$

! \*\*\* III & IV \*\*\*

! 9th eq.

$$\begin{aligned} a(9,9) &= \exp(ci \cdot k3x \cdot (+lx)) & ! a3 \\ a(9,10) &= \exp(-ci \cdot k3x \cdot (+lx)) & ! b3 \\ a(9,11) &= \exp(kap3x \cdot (+lx)) & ! c3 \\ a(9,12) &= \exp(-kap3x \cdot (+lx)) & ! d3 \\ a(9,13) &= -\exp(ci \cdot k4x \cdot (+lx)) & ! a4 \\ a(9,14) &= -\exp(-ci \cdot k4x \cdot (+lx)) & ! b4 \end{aligned}$$

```

a(9,15)= -exp( kap4x*(+lx) )      ! c4
a(9,16)= -exp( -kap4x*(+lx) )    ! d4

! 10th eq.
a(10,9)= s3*exp( ci*k3x*(+lx)+ci*2.0_dbl*phi3 )    ! a3
a(10,10)= s3*exp( -ci*k3x*(+lx)-ci*2.0_dbl*phi3 ) ! b3
a(10,11)= -s3*h3*exp( kap3x*(+lx) )              ! c3
a(10,12)= -s3/h3*exp( -kap3x*(+lx) )             ! d3
a(10,13)= -s4*exp( ci*k4x*(+lx)+ci*2.0_dbl*phi4 ) ! a4
a(10,14)= -s4*exp( -ci*k4x*(+lx)-ci*2.0_dbl*phi4 ) ! b4
a(10,15)= s4*h4*exp( kap4x*(+lx) )              ! c4
a(10,16)= s4/h4*exp( -kap4x*(+lx) )             ! d4

! 11th eq.
a(11,9)= ci*k3x*exp( ci*k3x*(+lx) )      ! a3
a(11,10)= -ci*k3x*exp( -ci*k3x*(+lx) )   ! b3
a(11,11)= kap3x*exp( kap3x*(+lx) )       ! c3
a(11,12)= -kap3x*exp( -kap3x*(+lx) )     ! d3
a(11,13)= -ci*k4x*exp( ci*k4x*(+lx) )   ! a4
a(11,14)= ci*k4x*exp( -ci*k4x*(+lx) )   ! b4
a(11,15)= -kap4x*exp( kap4x*(+lx) )     ! c4
a(11,16)= kap4x*exp( -kap4x*(+lx) )     ! d4

! 12th eq.
a(12,9)= s3*ci*k3x*exp( ci*k3x*(+lx)+ci*2.0_dbl*phi3 ) ! a3
a(12,10)= -s3*ci*k3x*exp( -ci*k3x*(+lx)-ci*2.0_dbl*phi3 ) ! b3
a(12,11)= -s3*kap3x*h3*exp( kap3x*(+lx) ) ! c3
a(12,12)= s3*kap3x/h3*exp( -kap3x*(+lx) ) ! d3
a(12,13)= -s4*ci*k4x*exp( ci*k4x*(+lx)+ci*2.0_dbl*phi4 ) ! a4
a(12,14)= s4*ci*k4x*exp( -ci*k4x*(+lx)-ci*2.0_dbl*phi4 ) ! b4
a(12,15)= s4*kap4x*h4*exp( kap4x*(+lx) ) ! c4
a(12,16)= -s4*kap4x/h4*exp( -kap4x*(+lx) ) ! d4

```



! \*\*\* IV & V \*\*\*

! 13th eq.

$a(13,13) = \exp( ci \cdot k4x \cdot (+l2) )$  ! a4  
 $a(13,14) = \exp( -ci \cdot k4x \cdot (+l2) )$  ! b4  
 $a(13,15) = \exp( kap4x \cdot (+l2) )$  ! c4  
 $a(13,16) = \exp( -kap4x \cdot (+l2) )$  ! d4  
 $a(13,17) = -\exp( ci \cdot k5x \cdot (+l2) )$  ! a5  
 $a(13,18) = -\exp( -ci \cdot k5x \cdot (+l2) )$  ! b5  
 $a(13,19) = -\exp( kap5x \cdot (+l2) )$  ! c5  
 $a(13,20) = -\exp( -kap5x \cdot (+l2) )$  ! d5

! 14th eq.

$a(14,13) = s4 \cdot \exp( ci \cdot k4x \cdot (+l2) + ci \cdot 2.0\_dbl \cdot phi4 )$  ! a4  
 $a(14,14) = s4 \cdot \exp( -ci \cdot k4x \cdot (+l2) - ci \cdot 2.0\_dbl \cdot phi4 )$  ! b4  
 $a(14,15) = -s4 \cdot h4 \cdot \exp( kap4x \cdot (+l2) )$  ! c4  
 $a(14,16) = -s4/h4 \cdot \exp( -kap4x \cdot (+l2) )$  ! d4  
 $a(14,17) = -s5 \cdot \exp( ci \cdot k5x \cdot (+l2) + ci \cdot 2.0\_dbl \cdot phi5 )$  ! a5  
 $a(14,18) = -s5 \cdot \exp( -ci \cdot k5x \cdot (+l2) - ci \cdot 2.0\_dbl \cdot phi5 )$  ! b5  
 $a(14,19) = s5 \cdot h5 \cdot \exp( kap5x \cdot (+l2) )$  ! c5  
 $a(14,20) = s5/h5 \cdot \exp( -kap5x \cdot (+l2) )$  ! d5

! 15th eq.

$a(15,13) = ci \cdot k4x \cdot \exp( ci \cdot k4x \cdot (+l2) )$  ! a4  
 $a(15,14) = -ci \cdot k4x \cdot \exp( -ci \cdot k4x \cdot (+l2) )$  ! b4  
 $a(15,15) = kap4x \cdot \exp( kap4x \cdot (+l2) )$  ! c4  
 $a(15,16) = -kap4x \cdot \exp( -kap4x \cdot (+l2) )$  ! d4  
 $a(15,17) = -ci \cdot k5x \cdot \exp( ci \cdot k5x \cdot (+l2) )$  ! a5  
 $a(15,18) = ci \cdot k5x \cdot \exp( -ci \cdot k5x \cdot (+l2) )$  ! b5  
 $a(15,19) = -kap5x \cdot \exp( kap5x \cdot (+l2) )$  ! c5  
 $a(15,20) = kap5x \cdot \exp( -kap5x \cdot (+l2) )$  ! d5

! 16th eq.

```

a(16,13)= s4*ci*k4x*exp( ci*k4x*(+12)+ci*2.0_dbl*phi4 ) ! a4
a(16,14)= -s4*ci*k4x*exp( -ci*k4x*(+12)-ci*2.0_dbl*phi4 ) ! b4
a(16,15)= -s4*kap4x*h4*exp( kap4x*(+12) ) ! c4
a(16,16)= s4*kap4x/h4*exp( -kap4x*(+12) ) ! d4
a(16,17)= -s5*ci*k5x*exp( ci*k5x*(+12)+ci*2.0_dbl*phi5 ) ! a5
a(16,18)= s5*ci*k5x*exp( -ci*k5x*(+12)-ci*2.0_dbl*phi5 ) ! b5
a(16,19)= s5*kap5x*h5*exp( kap5x*(+12) ) ! c5
a(16,20)= -s5*kap5x/h5*exp( -kap5x*(+12) ) ! d5

```

```

! *** Boundary Condition ***

```

```

! 17th eq.

```

```

a(17,4)= 1.0_dbl ! d1=0

```

```

b(17,1)= 0.0_dbl

```

```

! 18th eq.

```

```

a(18,19)= 1.0_dbl ! c5=0

```

```

b(18,1)= 0.0_dbl

```

```

! ***

```

```

! 19th eq.

```

```

a(19,1)=1.0_dbl ! a1=b5

```

```

a(19,18)=-1.0_dbl

```

```

b(19,1)= 0.0_dbl

```

```

! *** Normalization Condition ***

```

```

! 20th eq.

```

```

a(20,9)= 1.0_dbl ! a3=1

```

```

b(20,1)= 1.0_dbl

```

```

!-----

```

```

! call LAPACK

```

```

call ZGESV( N,NRHS,A,LDA,IPIV,B,LDB,INFO )

```

```
if( info/=0 ) then
write(*,*) " info = ",info
!stop " info is not correct. "
end if
```

```
! output
```

```
a1=b(1,1)
```

```
b1=b(2,1)
```

```
c1=b(3,1)
```

```
d1=b(4,1)
```

```
a2=b(5,1)
```

```
b2=b(6,1)
```

```
c2=b(7,1)
```

```
d2=b(8,1)
```

```
a3=b(9,1)
```

```
b3=b(10,1)
```

```
c3=b(11,1)
```

```
d3=b(12,1)
```

```
a4=b(13,1)
```

```
b4=b(14,1)
```

```
c4=b(15,1)
```

```
d4=b(16,1)
```

```
a5=b(17,1)
```

```
b5=b(18,1)
```

```
c5=b(19,1)
```

```
d5=b(20,1)
```

```
!-----
```

```
! eigen states
```

```
fy = exp( ci*cplx(ky*y,kind=dbl) )
```

```
if( rx < -l1 ) then          ! region I
```

```

varphi=&
( a1*exp( ci*k1x*x ) + &
  b1*exp( -ci*k1x*x ) + &
  c1*exp( kap1x*x ) + &
  d1*exp( -kap1x*x ) &
) * fy

else if( rx < -lx ) then      ! region II
varphi=&
( a2*exp( ci*k2x*x ) + &
  b2*exp( -ci*k2x*x )+ &
  c2*exp( kap2x*x ) + &
  d2*exp( -kap2x*x ) &
) * fy

else if( rx < lx ) then      ! region III
varphi=&
( a3*exp( ci*k3x*x ) + &
  b3*exp( -ci*k3x*x )+ &
  c3*exp( kap3x*x ) + &
  d3*exp( -kap3x*x ) &
) * fy

else if( rx < l2 ) then      ! region IV
varphi=&
( a4*exp( ci*k4x*x ) + &
  b4*exp( -ci*k4x*x )+ &
  c4*exp( kap4x*x ) + &
  d4*exp( -kap4x*x ) &
) * fy

else                          ! region V
varphi=&
( a5*exp( ci*k5x*x ) + &
  b5*exp( -ci*k5x*x )+ &
  c5*exp( kap5x*x ) + &

```

```

        d5*exp( -kap5*x*x ) &
    ) * fy
end if

!-----
contains

!-----
! energy
function e(kx,ky)

    implicit none
    real(kind=dbl):: e
    real(kind=dbl),intent(in):: kx,ky

    e=hbar**2.0_dbl*(kx**2.0_dbl+ky**2.0_dbl) / (2.0_dbl*m)

end function e

!-----
! condition about qx
subroutine condition_qx(kx,ky,v1,v2,cnd)

    implicit none
    real(kind=dbl),intent(in):: kx,ky,v1,v2
    logical,intent(out):: cnd
    logical:: cnd1,cnd2

    if( &
        2.0_dbl*m*abs(e(kx,ky)-v1)/(hbar**2.0_dbl) - ky**2.0_dbl < 0.0d0 )&
    then

```

```
      cnd1 = .false.
    else
      cnd1 = .true.
    end if

    if( &
      2.0_dbl*m*abs(e(kx,ky)-v2)/(hbar**2.0_dbl) - ky**2.0_dbl < 0.0d0 )&
    then
      cnd2 = .false.
    else
      cnd2 = .true.
    end if

    ! output
    if( cnd1 .eqv. .false. .or. cnd2 .eqv. .false. ) then
      cnd = .false.
    else
      cnd = .true.
    end if

end subroutine condition_qx
```

## 参考文献

- [1] Fengnian Xia, Damon B. Farmer, Yu ming Lin, and Phaedon Avouris, *Nano Letters* **10**, 715 (2010).
- [2] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
- [3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
- [4] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [5] T. Ando, T. Nakanishi, and R. Saito, *Journal of the Physical Society of Japan* **67**, 2857 (1998).
- [6] Sukang Bae, Hyeongkeun Kim, Youngbin Lee, Xiangfan Xu, Jae-Sung Park, Yi Zheng, Jayakumar Balakrishnan, Tian Lei, Hye Ri Kim, Young Il Song, Young-Jin Kim, Kwang S. Kim, Barbaros Ozyilmaz, Jong-Hyun Ahn, Byung Hee Hong, and Sumio Iijima, *Nat Nano* **5**, 574 (2010).
- [7] Lei Liao, Yung-Chen Lin, Mingqiang Bao, Rui Cheng, Jingwei Bai, Yuan Liu, Yongquan Qu, Kang L. Wang, Yu Huang, and Xiangfeng Duan, *Nature* **467**, 305 (2010).
- [8] Sumio Iijima, *Nature* **354**, 56 (1991).
- [9] Sumio Iijima and Toshinari Ichihashi, *Nature* **363**, 603 (1993).
- [10] V. Derycke, R. Martel, J. Appenzeller, and Ph. Avouris, *Nano Letters* **1**, 453 (2001).
- [11] O. Klein, *Z. Phys.* **53**, 157 (1929).
- [12] N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 026807 (2009).

- [13] Andrea F. Young and Philip Kim, *Nat Phys* **5**, 222 (2009).
- [14] Dean C. R., Young A. F., Meric I., Lee C., Wang L., Sorgenfrei S., Watanabe K., Taniguchi T., Kim P., Shepard K. L., and Hone J., *Nat Nano* **5**, 722 (2010).
- [15] Yuanbo Zhang, Tsung-Ta Tang, Caglar Girit, Zhao Hao, Michael C. Martin, Alex Zettl, Michael F. Crommie, Y. Ron Shen, and Feng Wang, *Nature* **459**, 820 (2009).
- [16] Edward McCann and Mikito Koshino, *Reports on Progress in Physics* **76**, 056503 (2013).



# 発表実績

## 学会発表

1. **Y. Inoue**, R. Saito

Electron confinement in graphene-based junction

第49回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム

北九州国際会議場 平成27年9月7日 - 9日

2. **Y. Inoue**, R. Saito

Electron confinement in bilayer graphene

第50回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム

東京大学 平成28年2月20日 - 22日