

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

物理学専攻 源馬 和行

Department of Physics, Kazuyuki Gemma

1 はじめに

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、SiO₂ 基盤に貼り付けるという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。

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。グラフェン面に対して平行に磁場を印加すると、表面のリップルによる影響で垂直方向にランダム磁場成分が生成されることが知られている。Lundeberg と Folk はランダム磁場による磁気抵抗効果を研究し、グラフェンの磁気抵抗を表す公式を示した [3]。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、実験との比較を行っている。しかし、磁気抵抗の理論式の導出については非常に短く詳細は省略されている。

本修士論文では、Lundeberg-Folk 公式の導出の仕方を詳しく述べた。また、リップルの相関関数として (i) 指数関数型と (ii) ガウシアン型を仮定し、Lundeberg-Folk 公式を用いて平行磁場下グラフェンの磁気抵抗を計算した。その結果、平行磁場 B_{\parallel} の下で磁気抵抗が超幾何関数などの特殊関数を用いて表せることを導いた。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（図 3 の直線）を見つけた。それらの計算結果と中大若林グループの実験データ [4] との比較を行った。本修士論文では第 I 部でグラフェンの基礎的な物性について述べ、第 II 部でグラフェンの磁気抵抗効果に関する研究結果を取り上げた。

2 グラフェンの磁気抵抗効果

図 1 のように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、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。

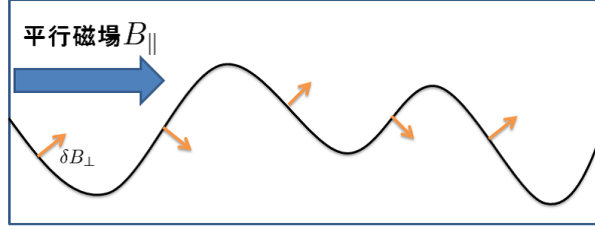


図 1: 平行磁場 B_{\parallel} の中でリップルにより生成される垂直磁場成分 δB_{\perp}

3 磁気抵抗に対する Lundeberg-Folk 公式

$x-y$ 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

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

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．

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

ここで

$$g(k) = \int_0^{\infty} r W(rk) c(r) dr \quad (3)$$

$$W(z) = \int_0^{2\pi} J_0\left(2z \sin \frac{\phi}{2}\right) \sin^2 \frac{\phi}{2} d\phi \quad (4)$$

であり， $J_0(z)$ はベッセル関数である．

$\Delta\rho = \rho(B_{\parallel}) - \rho(0)$ 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 [3] では，平行磁場下グラフェンに対する磁気抵抗を

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) = \frac{\pi B_{\parallel}^2}{2\hbar} (\sin^2 \theta + 3 \cos^2 \theta) g(k(n)) \quad (5)$$

と報告している．ここで平行磁場と電流の成す角を θ ，キャリア密度を n ，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

$$k = k(n) = \sqrt{\pi|n|} \quad (6)$$

と書け [5]，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) 式を Lundeberg-Folk 公式と呼ぶ．

4 相関関数の仮定

グラフェン表面におけるリップルの高さ相関は距離に応じて弱くなると考えられるので，以下の二種類の相関関数 $c(r)$ を仮定して Lundeberg-Folk 公式 (5) の計算を行った．

$$(i) \quad c(r) = Z^2 e^{-r/R} \quad (\text{指数関数型})$$

$$(ii) \quad c(r) = Z^2 e^{-(r/R)^2} \quad (\text{ガウシアン型})$$

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．

(i) 指数関数型相関関数

指数関数型相関関数を用いて計算した (3) 式を示す .

$$g(k) = \pi(ZR)^2 F\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 2; -(2kR)^2\right) \quad (7)$$

ここで $F(\alpha, \beta, \gamma; z)$ はガウスの超幾何関数である . また , この結果は第一種楕円積分 $K(z)$ と第二種楕円積分 $E(z)$ の超幾何関数表示を用いて

$$g(k) = \frac{Z^2}{k^2} \left[K(2ikR) - \frac{1}{1 + (2kR)^2} E(2ikR) \right] \quad (8)$$

と表せる .

- 高キャリア密度領域 ($|n| \gg 1$) での展開

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) \simeq \frac{1}{2}(\sin^2 \theta + 3 \cos^2 \theta) \frac{(ZB_{\parallel})^2}{\sqrt{\pi}\hbar R} |n|^{-3/2} \log(R|n|^{1/2}) \quad (9)$$

論文 [3] 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 .

- 低キャリア密度領域 ($|n| \simeq 0$) での展開

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) \simeq \frac{1}{2}(\sin^2 \theta + 3 \cos^2 \theta) \frac{(\pi ZR B_{\parallel})^2}{\hbar} \left(1 - \frac{9}{2}\pi R^2 |n|\right) \quad (10)$$

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 .

(ii) ガウシアン型相関関数

ガウシアン型相関関数を用いて計算した (3) 式を示す .

$$g(k) = \frac{\pi Z^2 R^2}{2} F\left(\frac{3}{2}, 2; -(kR)^2\right) \quad (11)$$

ここで $F(\alpha, \gamma; z)$ は合流型超幾何関数である . また , 変形ベッセル関数 $I_{\nu}(z)$ の超幾何関数表示により

$$g(k) = \frac{\pi(ZR)^2}{2} \left[I_0((kR)^2/2) - I_1((kR)^2/2) \right] e^{-(kR)^2/2} \quad (12)$$

と表せる .

- 高キャリア密度領域 ($|n| \gg 1$) での展開

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) \simeq \frac{1}{4}(\sin^2 \theta + 3 \cos^2 \theta) \frac{(ZB_{\parallel})^2}{\hbar R} |n|^{-3/2} \quad (13)$$

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

- 低キャリア密度領域 ($|n| \simeq 0$) での展開

$$\Delta\rho(n, \theta, B_{\parallel}) \simeq \frac{1}{4}(\sin^2 \theta + 3 \cos^2 \theta) \frac{(\pi ZR B_{\parallel})^2}{\hbar} \left(1 - \frac{3}{4}\pi R^2 |n|\right) \quad (14)$$

指数関数型相関関数 (i) による展開 (10) 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 ($\Delta\rho \propto -|n|$) が得られた .

5 実験データとの比較

図2では $\Delta\rho = aB_{\parallel}^2$ として, グラフェンのキャリア密度 n と係数 a の関係を中大若林グループの実験値 [4] と比較した. 赤い曲線は (ii) ガウシアン型相関関数により得られた合流型超幾何関数 $F(\alpha, \gamma; z)$ を用いた表式

$$a = \frac{3(\pi ZR)^2}{4\hbar} F\left(\frac{3}{2}, 2; -\pi R^2|n|\right) \quad (15)$$

を示し, ここでリップルの高さの二乗平均平方根を $Z = 0.376[\text{nm}]$, 相関長を $R = 17.0[\text{nm}]$ とした. また, 実験において平行磁場と電流は平行である ($\theta = 0$). 図3は図2の電荷中性点付近を拡大した図である. $|n|^{-3/2}$ 依存性 (図3の緑色の破線) では $n = 0$ の電荷中性点で発散してしまうが, 今回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繋ぐことができ, 全キャリア密度領域においてよい一致が見られる.

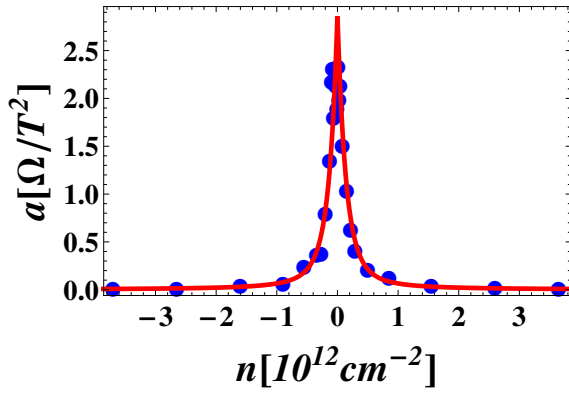


図 2: 実験値との比較

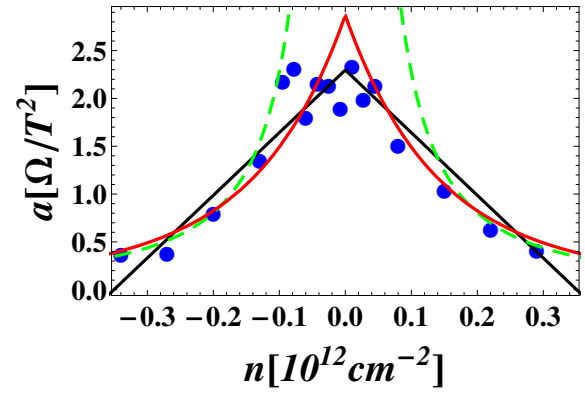


図 3: 電荷中性点付近の拡大図

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. Gregorieva and A. A. Firsov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, Science. **306**, 666 (2004).
- [3] M. B. Lundberg and J. A. Folk, *Rippled Graphene in an In-Plane Magnetic Field: Effects of a Random Vector Potential*, Phys. Rev. Lett. **105**, 146804 (2010).
- [4] S. Shiraishi, *Magnetoresistance of graphene in parallel magnetic fields*, Master thesis, Chuo University (2012).
- [5] 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).