

論文の要旨

氏名 下村 祐司

論文題目 Numerical Study of the Dephasing Effect on a Perfectly Conducting Channel in Graphene Nanoribbons with Zigzag Edges

(ジグザグ端グラフェン・ナノリボンの完全伝導チャンネルに対する位相緩和効果に関する数値的研究)

二次元炭素結晶グラフェンにおける電子状態はエッジの形状に強く依存することが知られている。典型的なエッジ形状であるジグザグ端ではエッジ状態と呼ばれるエッジ近傍に局在した低エネルギー状態が現れる。ジグザグ端グラフェン・ナノリボンとはジグザグ端を持つリボン状の準一次元系である。ジグザグ端グラフェン・ナノリボンでは波数空間においてふたつのエネルギー・バレーが存在し、バレー間の散乱が無視できると仮定した場合、各々を独立した部分系と見なすことができる。各々のバレーに着目すると、左向きの伝導チャンネル数と右向きの伝導チャンネル数が1だけずれている。このチャンネル数のずれにより反射係数行列が非正方形となり、その結果、反射確率が0となるチャンネルがひとつ生じる。流束の保存則より反射確率が0となるチャンネルは透過確率が1となる。このような伝導チャンネルは不純物ポテンシャルによる乱れの存在に関わらず常に透過確率が1になるため完全伝導チャンネルと呼ばれている。完全伝導チャンネルはジグザグ端グラフェン・ナノリボンの電気伝導に極めて大きな影響を与える。乱れが存在する場合、完全伝導チャンネルをひとつ持つ系の無次元コンダクタンスは、系の長さの増大とともに量子化値1に向かって漸近し、無限大の極限でも1より小さくならない。つまり、この系ではアンダーソン局在が生じない。しかし現実的なジグザグ端グラフェン・ナノリボンではバレー間の散乱を完全には無視できず、各バレーを独立とは見なせない。そのため完全伝導チャンネルは系の長さの増大に伴って徐々に不安定化し、無次元コンダクタンスは1を下回り0へと漸近する。また、アンダーソン局在によって無次元コンダクタンスの0への減衰は加速されると予想される。しかし、このような議論では現実的な状況において不可避免的に存在する位相緩和の影響が無視されている。位相緩和とは電子間相互作用や電子格子間相互作用による非弾性散乱によって生じる伝導電子の位相情報の消失を意味し、低温領域における電気伝導に多大な影響を及ぼす。一般に位相緩和は干渉効果等の量子効果の発現を妨害する主因と見なされている。例えば、カーボンナノチューブにおける完全伝導チャンネルは位相緩和によって不安定化することがわかっている。

本研究は、無次元コンダクタンスの数値計算を通して、ジグザグ端グラフェン・ナノリボンの完全伝導チャンネルに対する位相緩和効果の解明を目的とする。無次元コンダクタンスの数値計算では、不純物ポテンシャルを乱雑に配置した強束縛モデルを用いる。不純物ポテンシャルとしては、弱いバレー間散乱をもたらす長距離型不純物と強いバレー間散乱をもたらす短距離型不純物の二種類を仮定する。位相緩和の影響を取り入れるために系をいくつかの小領域に仮想的に等分割する。各々の小領域内では位相情報は完

全に保たれるとし、隣り合う小領域間において波動関数の連続性の代わりに電流の連続性を要請し位相情報を断ち切る。各小領域の長さは位相緩和長に相当し、短いほど位相緩和が強くなる。以上のように構築したモデルにおいて系の透過確率行列を数値的に求めれば、ランダウアーの公式に基づいて無次元コンダクタンスを得ることができる。与えられた位相緩和長のもとで二種類の不純物ポテンシャルのどちらかを配置し、系の長さの関数として無次元コンダクタンスを求めた。さらに、この計算結果とボルツマン輸送理論から解析的に導かれたコンダクタンスの表式との比較も行った。ボルツマン輸送理論は位相情報が完全に失われたインコヒーレント極限に対応する。

長距離不純物を配置した場合の無次元コンダクタンスは、系の長さの増大とともに1に向かって急速に減衰し、1を下回ると非常にゆっくりとした減衰へと移行する。これは完全伝導チャンネルの存在を示している。また位相緩和を強くするほど1以下の領域における0への減衰が緩和され、広い領域において1に近い値を維持する。つまり、位相緩和によって完全伝導チャンネルは安定化されるのである。無次元コンダクタンスの0への減衰はアンダーソン局在によって強められており、その影響が位相緩和によって消失したためと解釈できる。短距離型不純物を配置した系では無次元コンダクタンスは速やかに0へと減衰し、完全伝導チャンネルの存在は認められない。これは短距離型不純物が強いバレー間散乱を引き起こすためである。位相緩和を加えた場合、無次元コンダクタンスは系の長さに逆比例し古典的なオームの法則に従う。これはアンダーソン局在が位相緩和の影響によって消失し、隠れていた古典的な振る舞いが顕在化したためと考えられる。一方、位相緩和が無い場合にはアンダーソン局在に起因する指数関数的な減衰が見られる。位相緩和が強い場合の数値計算結果は、長距離型と短距離型のどちらにおいてもボルツマン輸送理論の表式と非常に良く一致した。この結果は、仮定した位相緩和モデルは単純なものでありながら、その本質的な部分を取り込んでいることを示唆している。

本研究ではジグザグ端グラフェン・ナノリボンの完全伝導チャンネルに対する位相緩和の影響を無次元コンダクタンスの数値計算により検討した。その結果、位相緩和によって完全伝導チャンネルが安定化することを明らかにした。一般に、位相緩和は量子干渉効果を弱めるため、様々な量子現象の実験的観測を妨げると考えられている。しかし、ジグザグ端グラフェン・ナノリボンでは、その働きによって完全伝導チャンネルがより強固になることが明らかとなった。これはジグザグ端グラフェン・ナノリボンが完全伝導チャンネルの実験的な観測に適した系であることを意味する。