

論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博士（理学）	氏名	Shrestha Amit
学位授与の要件	学位規則第4条第①・2項該当		
論文題目			
A Theoretical Study on the Mechanism for the Reduction of Effective g-factor in Graphene (グラフェンにおける有効 g 因子の減少のメカニズムに関する理論的研究)			
論文審査担当者			
主査	准教授	樋口 克彦	印
審査委員	教授	高根 美武	印
審査委員	教授	松村 武	印
審査委員	教授	鬼丸 孝博	印
〔論文審査の要旨〕			
<p>グラフェンはその特異な物性からスピントロニクス材料として期待されている。近年、グラフェン中の電子の有効 g 因子が自由電子の g 因子よりも小さくなるのが、電子スピン共鳴の実験から明らかにされた。有効 g 因子はスピン緩和時間など物質の磁氣的性質を決める物理量の一つであることから、この実験事実は大変注目されている。しかし、グラフェンにおける有効 g 因子減少のメカニズムはこれまで解明されていなかった。</p> <p>有効 g 因子減少のメカニズムを解明するために、著者は磁場が印加された固体の電子状態を計算する第一原理計算手法である「非摂動論的手法による磁場を含んだ相対論的強束縛近似法(以下、非摂動 MFRTB 法)」を改良した。著者は、非摂動 MFRTB 法により、グラフェンの大きな軌道反磁性による内部磁場が有効 g 因子を減少させる原因の一つであることを明らかにした。また、スピン軌道相互作用は有効 g 因子の減少には寄与しないことも明らかにした。さらに著者は、グラフェンの表面近傍に形成される非対称表面ポテンシャルが有効 g 因子に与える影響を考察した。その結果、非対称表面ポテンシャルによって引き起こされるラシュバ効果が、実験で観測された有効 g 因子減少の主要因であることを明らかにした。</p> <p>第一章では、研究背景および磁場下固体の電子構造計算に関する先行研究を紹介し、本研究の意義と概要を説明している。第二章では、本研究で用いた非摂動 MFRTB 法の詳細を説明している。特に、これまで無視されてきた重なり積分の効果を考慮に入れた非摂動 MFRTB 法の定式化について説明している。</p> <p>第三章では、磁場が印加されたグラフェン（磁場下グラフェン）に非摂動 MFRTB 法を適用し、磁場下グラフェンのエネルギーバンド計算を実行している。軌道の量子化を反映して、エネルギーバンドは磁氣的ブリルアンゾーン内の波数にほとんど依存せず、平坦なエネルギーバンドになることがわかった。得られたエネルギーバンドから磁化を計算し、グラフェン特有の大きな軌道反磁性が非摂動 MFRTB 法により記述できることを示した。</p>			

反磁性磁化からグラフェンに発生する内部磁場を計算し、その内部磁場が有効 g 因子減少の要因の一つであることを明らかにした。さらに、エネルギーバンドからスピン軌道相互作用は外部磁場依存性を持たないことが示された。その結果、スピン軌道相互作用によって有効 g 因子は減少しないことも明らかにされた。

第四章では、非対称表面ポテンシャルによるラシュバ効果が有効 g 因子に与える影響について考察している。ラングとコーンによる表面ポテンシャルの研究を参考にし、グラフェンに対する非対称表面ポテンシャルを近似的に求めている。磁場下グラフェンを磁場が印加された擬二次元電子として扱い、非対称表面ポテンシャルにより発現するラシュバ効果が有効 g 因子に与える影響を計算している。その結果、ラシュバ効果が有効 g 因子減少の主要因であることを明らかにした。

第五章では、第四章で求めた表面ポテンシャルによるラシュバ効果を、非摂動 MFRTB 法に取り込むための定式化を行っている。最後に第六章では、本研究の結論を述べている。

著者は、非摂動 MFRTB 法を改良し、それによりグラフェンにおける有効 g 因子の減少の原因の一つとして大きな軌道反磁性があることを明らかにした。さらに、著者は非対称表面ポテンシャルによるラシュバ効果が有効 g 因子減少の主要因であることを明らかにした。本研究で開発した計算手法および考察は、グラフェンに限らず、次世代スピントロニクス材料として有望視されている遷移金属カルコゲナイドなどの他の原子層物質にも適用できるものである。これらのことから、本研究は物性物理学の分野における重要な貢献であると高く評価される。

以上のことから、審査の結果、本論文の著者は、博士（理学）の学位を受ける資格が十分あるものと認める。

備考 審査の要旨は、1,500 字程度とする。