

## 論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博 士 ( 理 学 )	氏名	Muhammad Abdur Rashid
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 Ⅱ・2 項該当		
論 文 題 目			
Theoretical Study of the Quantized Hall Conductivity in Graphene by using Nonperturbative Magnetic-Field-Containing Relativistic Tight-Binding Approximation Method (非摂動的磁場を含んだ相対論的強束縛近似法によるグラフェンの量子化されたホール伝導度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	
審査委員	准 教 授	田 中 新	
審査委員	教 授	松 村 武	
審査委員	准 教 授	黒 田 健 太	
〔論文審査の要旨〕			
<p>グラフェンは炭素原子の単原子層物質である。グラフェン中の電子は、Dirac コーンと呼ばれる線形バンド分散を示すという特異な性質を持つ。そのため、磁場が印加されたグラフェン（磁場下グラフェン）では、通常の二次元電子系とは異なった半整数量子ホール効果が観測されている。これまで、グラフェンにおける半整数量子ホール効果は線形バンド分散を用いたモデルで記述がなされてきたが、磁場下グラフェンに対する第一原理計算に基づく半整数量子ホール効果の詳細な記述はされていなかった。</p> <p>量子ホール効果は、磁場によって離散的なエネルギー準位が形成されることによって生じる。エネルギー準位は、スピンによるゼーマン効果やスピン軌道相互作用などの相対論的効果によって変化すると考えられる。そこで著者は、磁場下固体に対する第一原理計算手法である非摂動的磁場を含んだ相対論的強束縛近似法(Nonperturbative Magnetic-Field-Containing Relativistic Tight-Binding Approximation Method, 以下、非摂動 MFRTB 法)を用いて、磁気的エネルギーバンド構造に基づいたホール伝導度の解析を行った。その結果、ホール伝導度のフェルミエネルギー依存性において、二種類の量子化されたホール伝導度が現れることを明らかにした。一つはエネルギー幅が広いプラトーで、もう一つはエネルギー幅が狭いプラトーである。前者はグラフェンに特有な磁場の平方根に比例したエネルギー準位に起因し、実験でも観測されている半整数量子ホール効果に対応する。後者はその狭いエネルギー幅のため実験では観測されていないプラトーである。著者は、後者のプラトーはスピンによるゼーマン効果とスピン軌道相互作用の両方の効果によって生じるエネルギー分裂に起因していることを明らかにした。</p>			

第一章では、研究背景として、グラフェンにおける半整数量子ホール効果に関する先行研究、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、本研究で用いた手法である非摂動 MFRTB 法の基礎となっている相対論的強束縛近似法について解説している。本章で説明している相対論的スレーター・コスターの表は、非摂動 MFRTB 法でも使用されている。第三章では、本研究で用いた非摂動 MFRTB 法を説明している。特に本手法の特徴である磁場の効果と相対論的効果がどのように取り込まれているかを詳述している。さらに第四章では、ホール伝導度を計算する際に用いた Streda の公式について解説している。

第五章では、非摂動 MFRTB 法をグラフェンに適用している。特に並進対称性を反映して、グラフェン中の電子状態が磁気的ブロッホ関数で記述されること、また磁場によって収縮した磁気的ブリルアンゾーン内の点によって電子状態が分類されることを説明している。

第六章では、磁場下グラフェンの磁気的エネルギーバンド構造、およびそれを用いたホール伝導度の解析を行い、上述の成果を説明している。最後に第七章では、本研究での結論を述べている。

著者は、磁場下固体の電子構造を計算する第一原理的手法である非摂動 MFRTB 法を用いて、グラフェンにおいて観測されている量子ホール効果を詳細に記述した。実験で観測されている半整数量子効果に加え、実験では未観測の量子化されたホール伝導度の存在を予言した。そして実験では未観測の量子化されたホール伝導度は相対論的効果によって引き起こされることを明らかにした。本研究は磁場下固体で観測される種々の現象に対する第一原理的記述への道を拓き、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。