OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	2次元材料結合系の電子状態および量子輸送解析に関する研究
Author(s)	橋本, 風渡
Citation	大阪大学, 2020, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/77458
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

博士学位論文

2 次元材料結合系の電子状態および量子輸送解析に関する研究

橋本 風渡

2020 年 1 月

大阪大学大学院工学研究科

内容梗概

本論文は，筆者が大阪大学大学院工学研究科電気電子情報工学専攻博士課程において行なった，2 次元材料結合系の電子状態および量子輸送解析に関する研究をまとめたものである．全 6 章から構成されており，以下に各章ごとの概要を述べる．

第 1 章

本章では，研究背景，研究目的について述べる．まず，半導体微細化の現状と 2 次元材料が注目される背景について説明し，代表的な 2 次元材料の特徴について説明する．次に，2 次元材料結合系について説明し，シミュレーション解析が求められる背景について説明する．最後に，本研究の目的，本論文の構成について説明する．

第 2 章

本章では，電子状態および量子輸送解析の計算手法について説明する．まず，電子状態計算の手法として用いた強結合近似法について，単層グラフェンのバンド構造の計算を例にして説明する．次に，輸送計算の手法として用いた非平衡グリーン関数法について，単層グラフェンの透過関数の計算を例にして説明する．

第 3 章

本章では，ナノリボンが隣同士弱く結合し，周期的に並んだ系であるナノリボン列の電子状態を解析した結果を記述する．ジグザグ端ナノリボン列およびアームチェア端ナノリボン列の 2 種類の端形状の異なるナノリボン列について電子状態の計算を行なった．その際，ナノリボン内原子間の相互作用強度を t，隣接するナノリボン間の相互作用強度を γ として，ナノリボン列の電子状態に隣接ナノリボン間相互作用が与える影響の解析を行なった．ジグザグ端ナノリボン列では，隣同士弱く結合したとき（$0 < \gamma < t$），孤立したジグザグ端ナノリボンの特徴であるほぼフラットな分散とバルクグラフェンの特徴であるディラック型の分散とが同時に現れることがわかった．一方，アームチェア端ナノリボン列では，ナノリボンの幅 N によって，電子状態の γ 依存性が異なることがわかった．特に，ナノリボンの幅 N が $N = 3n + 1$（n は整数）を満たす場合，$\gamma = t/2$ において，速い電子速度を意味する線形分散と高い状態密度を意味する放物線分散とを同時に有する特異なバンド構造が得られることがわかった．

第 4 章

本章では，グラフェンを積層した系である多層グラフェンの輸送特性を解析した結果を記述する．層間相互作用が多層グラフェンの輸送特性に及ぼす影響を調べた．比較的強い層間相互作用が存在しても，ディラック点付近における透過関数は，単層グラフェンの輸送特性の特徴である線形性を保ち，層間相互作用の影響をほとんど受けないことがわかった．中間層がジグザグ端ナノリボンで構成されていることを考慮することにより，この線形性が保たれるエネルギー領域が現れる物理的機構を理解できることを示した．

第 5 章

本章では，遷移金属ダイカルコゲナイドが積層された系におけるトンネル電流解析の結果を記述する．遷移金属ダイカルコゲナイドが積層された構造におけるバンド間トンネル電流を様々な材料について計算し，材料依存性を解析した．いずれの材料も，チャネル長を長くすると最大電流密度は一定値に近づくことがわかった．また，WSe_2 をドレイン側の材料とした構造が最も高い最大電流密度の値を示すことがわかった．WSe_2 をドレイン側の材料とした構造において高い最大電流密度が得られた理由が，Q 点にある衛星谷を介したトンネル効果であることを明らかにした．

第 6 章

本章では，本論文を通して得られた結果をまとめ，結論を述べる．

目次

第 1 章　序論　1
1.1　3 次元半導体の微細化限界と 2 次元材料　1
1.2　2 次元材料結合系　2
1.3　研究目的および論文構成　4

参考文献　5

第 2 章　電子状態および量子輸送解析手法　7
2.1　あらまし　7
2.2　強結合近似法　7
2.3　非平衡グリーン関数法　16

参考文献　29

第 3 章　ナノリボン列の電子状態解析　31
3.1　あらまし　31
3.2　電子状態解析モデル　32
3.3　ジグザグ端ナノリボン列の電子状態　34
3.4　アームチェア端ナノリボン列の電子状態の概要　41
3.5　アームチェア端ナノリボン列 $(N = 3n)$ の電子状態　42
3.6　アームチェア端ナノリボン列 $(N = 3n + 1)$ の電子状態　45
3.7　アームチェア端ナノリボン列 $(N = 3n + 2)$ の電子状態　49
3.8　デバイス設計の指針　53
3.9　まとめ　54

参考文献　55

第 4 章　多層グラフェンの輸送特性解析　57
4.1　あらまし　57
4.2　電子状態解析モデル　58
4.3　多層グラフェンの電子状態　61

4.4 輸送特性解析モデル 64
4.5 多層グラフェンの輸送特性 70
4.6 デバイス設計の指針 73
4.7 まとめ 74

参考文献 75

第 5 章 積層 TMD 系の輸送特性解析 77
5.1 あらまし 77
5.2 単層 TMD の強結合近似モデル 77
5.3 周期的 2 層構造の強結合近似モデル 80
5.4 強結合近似パラメータ抽出 82
5.5 輸送特性解析 85
5.6 デバイス設計の指針 94
5.7 まとめ 95

参考文献 97

第 6 章 結論 99

付録 A ナノリボン列におけるディラック点の波数 101
A.1 ジグザグ端ナノリボン列におけるディラック点の波数 101
A.2 アームチェア端ナノリボン列 ($N = 3n + 1$) におけるディラック点の波数 102
A.3 アームチェア端ナノリボン列 ($N = 3n + 2$) におけるディラック点の波数 102

第 1 章

序論

1.1　3 次元半導体の微細化限界と 2 次元材料

現代の高度に発達した情報化社会を支えるエレクトロニクス技術は，半導体デバイスの性能向上によって発展が維持されてきた．代表的な半導体デバイスとして，3 次元半導体材料であるシリコンを用いた電界効果トランジスタ (Metal-Oxied Semiconductor Field-Effect Transistor: MOSFET) が挙げられる．シリコン MOSFET は，「デバイスを微細化するとトランジスタの高集積化，低消費電力化，高速化が同時に達成される」というスケーリング則を指針として，微細加工技術の向上により性能の向上が達成されてきた．しかし，その微細加工技術も現在ではナノスケールに達し，短チャネル効果による性能の低下が問題となっており，単純な微細化のみによる性能向上が限界に達している．この状況の打破を目指し，新構造，新材料，新原理を用いたデバイス技術の研究開発が進められている．そのひとつとして，グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイド (Transition Metal Dichalcogenide: TMD) といった原子 1 層程度の厚さを持つ 2 次元材料が注目されており，従来の MOSFET の理論限界を超える性能を持つ電子デバイスの実現に向けて研究開発が行なわれている．以下に本研究の対象としたグラフェンと TMD の特徴を述べる．

1.1.1　グラフェン

グラフェンは，図 1.1(a) に示すように炭素原子が平面上で 6 角形格子状に並んだ構造をしており，厚さは炭素原子 1 つ分である．グラフェンの理論的研究の歴史は古く，1947 年に Wallace によって強結合近似法を用いたバンド計算が行なわれ，線形のエネルギー分散を持つことが示唆された [1]．そして，2004 年に Geim，Novoselov らが，スコッチテープを用いて高配向性熱分解グラファイトから単層グラフェンを剥離することに成功し [2]，理論および実験の双方の面からの研究が飛躍的に進展することとなった．グラフェンは，ディラック点近傍に線形なエネルギー分散を持つことから，シリコンをはるかに超える高移動度を示す [3, 4]．加えて，高い熱伝導率や，高い機械的強度といった利点を持つことから，電界効果トランジスタなど様々なデバイスへの応用が期待されている [5–9]．また，グラフェン上の電子は，相対論的量子力学に従う質量ゼロのディラック粒子のように振る舞うため，後方散乱の消失効果 [10, 11]，半整数量子ホール効果 [12, 13]，量子スピンホール効果 [14] といった様々な興味深い現象を引き起こす．

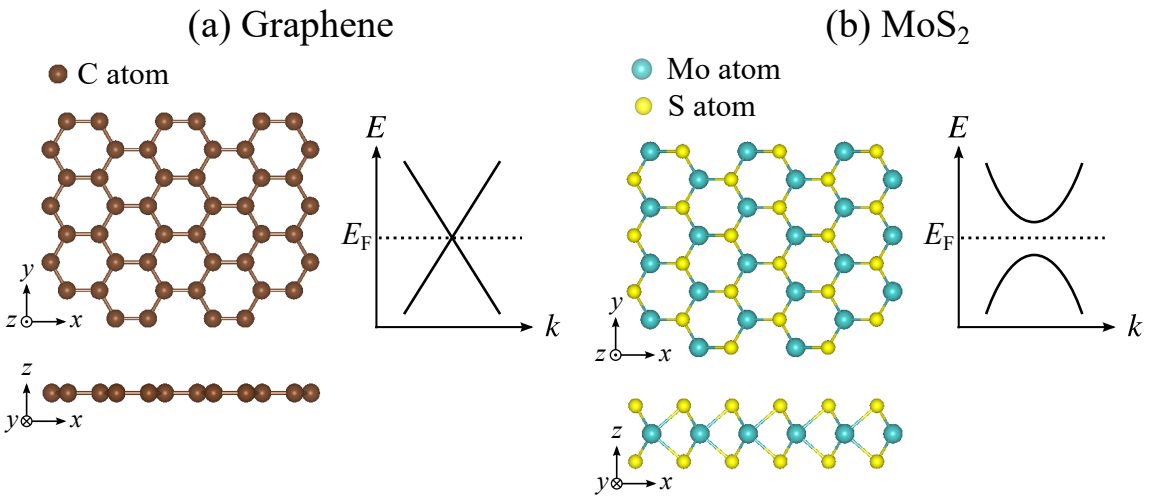


図 1.1: (a) グラフェンの結晶構造およびバンド構造．炭素原子が xy 平面上で 6 角形格子状に並んだ構造をしており，厚さは z 方向に炭素原子 1 つ分である．フェルミ準位を 1 点で交差する線形なエネルギー分散を持つ．(b) MoS_2 の結晶構造およびバンド構造．xy 平面方向には，グラフェンと同様に 6 角形格子状の構造をとる．z 方向には，2 層の S 原子層で Mo 原子層を挟んだ構造を取っている．グラフェンと異なり，バンドギャップを有する．

1.1.2　遷移金属ダイカルコゲナイド

遷移金属ダイカルコゲナイドは，遷移金属原子とカルコゲン原子からなる化合物の総称であり，化学式は，MX_2 で表される．M は，Mo（モリブデン）や W（タングステン）などの遷移金属原子であり，X は S（硫黄），Se（セレン），Te（テルル）などのカルコゲン原子である．TMD の 1 つである 3 角プリズム型の単層 MoS_2 の結晶構造を図 1.1(b) に示す．遷移金属原子層を 2 つのカルコゲン原子層で挟んだ構造をとり，xy 平面方向には，6 角形格子状の構造をとる．単層 MoS_2 は，約 1.8 eV のバンドギャップを有することが，実験で報告されている [15]．金属であるグラフェンと異なり，単層 TMD は半導体であるためデバイス応用の幅が広く，電界効果トランジスタ [16]，光電子素子 [17]，ガスセンサー [18] など，様々な応用が期待されている．

1.2　2 次元材料結合系

近年，図 1.2 に示すように，複数の 2 次元材料を積層・配列させることにより，電子状態を変調させ，デバイス応用に最適な材料を創製する試みがなされている [19–23]．

グラフェンを細いリボン状に切り出したものは，グラフェンナノリボンと呼ばれ，端の形状やリボンの幅に依存して，半導体と金属に分かれる [24–26]．図 1.2(a) に示すように，y 方向に沿ったグラフェンナノリボンが x 方向に周期的に並んだ構造はグラフェンナノリボン列と呼ばれる．チャネルにグラフェンナノリボン列を用いた電界効果トランジスタが実験的に作製されており，バルクグラフェンよりも高い ON/OFF 比を実現している [27]．ナノリボン列が作製された報告例は他にもいくつかあるが，リボン間

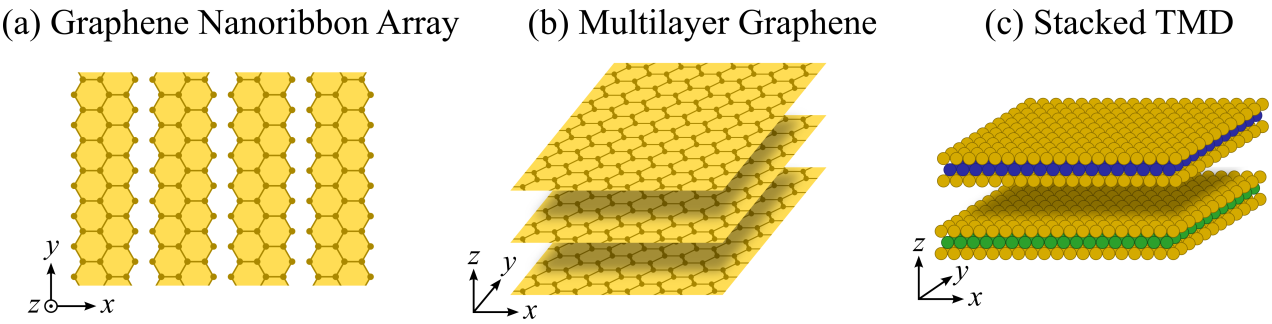


図 1.2: 本研究で考察した 2 次元材料結合系．(a) y 方向に沿ったナノリボンが x 方向に周期的に並んだ構造であるグラフェンナノリボン列．(b) xy 平面に広がるグラフェンが z 方向に積層された構造である多層グラフェン．(c) xy 平面に広がる TMD が z 方向に積層された構造である積層 TMD．

の結合が系の電子状態に与える影響は明らかにされていない [28–30]．リボン間の結合は系の電子状態に大きな影響を与えると考えられるので，リボン間結合が系の電子状態に与える影響を解析し，デバイス応用に最適な電子状態を探索することは重要である．

図 1.2(b) に示すように，xy 平面に広がるグラフェンが z 方向に積層された構造は多層グラフェンと呼ばれる．積層した層数に比例して状態密度が増加すると考えると，単層グラフェンよりも大きな電流を扱うことが可能であるため，デバイス応用に有利である．しかし，AB 積層ではバンド構造が変調され，単層グラフェンの特徴である線形なエネルギー分散が失われ，系全体の移動度は低下すると考えられている [31]．そこで，層間結合が多層グラフェンの系全体の輸送特性に与える影響を解析し，移動度が低下しないデバイス構造を探索することは重要である．

図 1.2(c) に示す積層 TMD は，xy 平面に広がる TMD が z 方向に積層された構造をとる．積層 TMD をチャネルに用いたトンネル電界効果トランジスタ (Tunnel Field-Effect Transistor: TFET) が実験的に作製されている [32–35]．TFET はトンネル効果を用いてスイッチングを行なうため，MOSFET の物理限界を超えた急峻なスイッチング特性が期待できる．チャネルに単層 TMD を用いた TFET や，TMD の面内接合構造を用いた TFET も試作されているが，積層 TMD を用いた場合，それらと異なり電荷トンネルは “面” で生じるため，大きなトンネル電流が得られると考えられている．また，面内接合構造より積層構造のほうが作製が容易であるという利点もあることから，積層 TMD は TFET への応用に優れているといえる．しかし，どのような積層構造や材料の組み合わせが最適かなど明らかにされていないことが多い．

以上のように，2 次元材料結合系は，これまでの 2 次元材料デバイスを超える性能をもつデバイスを実現できる材料として期待されている．そのようなデバイスの実現へ向けて新たなデバイス構造，材料を探求するためには，シミュレーションによる輸送特性の解析や設計が重要な役割を担う．しかし，2 次元材料結合系の幾何構造を原子単位で表現した上で，量子論的な効果を取り入れた輸送計算が困難であったことから，シミュレーション手法は確立されていない．

1.3　研究目的および論文構成

本研究の目的は，2 次元材料結合系を扱うことのできる電子状態および量子輸送シミュレーション技術を開発し，開発したシミュレーション技術によって 2 次元材料結合系の電子状態と輸送特性を解析し，デバイス応用に最適な設計の指針を得ることである．

本論文は本章を含め全 6 章から構成されている．第 2 章では，電子状態および量子輸送解析の計算手法について説明する．第 3 章では，グラフェンナノリボンが隣同士弱く結合し，周期的に並んだ系であるグラフェンナノリボン列の電子状態を解析した結果を記述する．第 4 章では，グラフェンを積層した系である多層グラフェンの輸送特性を解析した結果を記述する．第 5 章では，積層 TMD 系におけるトンネル電流解析の結果を記述する．最後に，第 6 章において，本論文を通して得られた結果をまとめる．

参考文献

[1] P. R. Wallace, Phys. Rev., **71**, 622 (1947).

[2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science, **306**, 666 (2004).

[3] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H. L. Stormer, Solid State Commun., **146**, 351 (2008).

[4] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, Rev. Mod. Phys., **83**, 407 (2011).

[5] T. Enoki and T. Ando, *Physics and Chemistry of Graphene*, (Pan Stanford Publishing, Singapore, 2013).

[6] A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nat. Mater., **6**, 183 (2007).

[7] A. K. Geim, Science, **324**, 1530 (2009).

[8] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys., **81**, 109 (2009).

[9] F. Schwierz, Nat. Nanotechnol., **5**, 487 (2010).

[10] T. Ando and T. Nakanishi, J. Phys. Soc. Jpn., **67**, 1704 (1998).

[11] T. Ando, T. Nakanishi, and R. Saito, J. Phys. Soc. Jpn., **67**, 2857 (1998).

[12] 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).

[13] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, Nature, **438**, 201 (2005).

[14] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett., **95**, 226801 (2005).

[15] A. Splendiani, L. Sun, Y. Zhang, T. Li, J. Kim, C.-Y. Chim, G. Galli, and F. Wang, Nano Lett., **10**, 1271 (2010).

[16] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, and A. Kis, Nat. Nanotechnol., **6**, 147 (2011).

[17] Z. Yin, H. Li, H. Li, L. Jiang, Y. Shi, Y. Sun, G. Lu, Q. Zhang, X. Chen, and H. Zhang, ACS Nano, **6**, 74 (2012).

[18] H. Li, Z. Yin, Q. He, H. Li, X. Huang, G. Lu, D.W.H. Fam, A.I.Y. Tok, Q. Zhang, and H. Zhang, Small, **8**, 63 (2012).

[19] A. K. Geim and I. V. Grigorieva, Nature, **499**, 419 (2013).

[20] Y. Gong, J. Lin, X. Wang, G. Shi, S. Lei, Z. Lin, X. Zou, G. Ye, R. Vajtai, B. I. Yakobson, H.

Terrones, M. Terrones, B. K. Tay, J. Lou, S. T. Pantelides, Z. Liu, W. Zhou, and P. M. Ajayan, Nat. Mater., **13**, 1135 (2014).

[21] Y. Kobayashi, S. Mori, Y. Maniwa, and Y. Miyata, Nano Res., **8**, 3261 (2015).

[22] Y. Kobayashi, S. Yoshida, R. Sakurada, K. Takashima, T. Yamamoto, T. Saito, S. Konabe, T. Taniguchi, K. Watanabe, Y. Maniwa, O. Takeuchi, H. Shigekawa, and Y. Miyata, Sci. Rep., **6**, 31223 (2016).

[23] R. Dong and I. Kuljanishvili, J. Vac. Sci. Technol. B, **35**, 030803 (2017).

[24] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn., **65**, 1920 (1996).

[25] K. Wakabayashi, S. Okada, R. Tomita, S. Fujimoto, and Y. Natsume, J. Phys. Soc. Jpn., **79**, 034706 (2010).

[26] K. Wakabayashi, K. Sasaki, T. Nakanishi, and T. Enoki, Sci. Tech. Adv. Mater., **11**, 054504 (2010).

[27] J. G. Son, M. Son, K.-J. Moon, B. H. Lee, J.-M. Myoung, M. S. Strano, M.-H. Ham, and C. A. Ross, Adv. Mater., **25**, 4723 (2013).

[28] S. Linden, D. Zhong, A. Timmer, N. Aghdassi, J. H. Franke, H. Zhang, X. Feng, K. Müllen, H. Fuchs, L. Chi, and H. Zacharias, Phys. Rev. Lett., **108**, 216801 (2012).

[29] H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, Nature Chem., **9**, 57 (2017).

[30] C. Ma, Z. Xiao, W. Lu, J. Huang, K. Hong, J. Bernholc, and A.-P. Li, Chem. Commun., **55**, 11848 (2019).

[31] E. McCann and M. Koshino, Rep. Prog. Phys., **76**, 056503 (2013).

[32] T. Roy, M. Tosun, X. Cao, H. Fang, D. H. Lien, P. Zhao, Y. Z. Chen, Y. L. Chueh, J. Guo, and A. Javey, ACS Nano, **9**, 2071 (2015).

[33] T. Roy, M. Tosun, M. Hettick, G. H. Ahn, C. Hu, and A. Javey, Appl. Phys. Lett., **108**, 083111 (2016).

[34] A. Nourbakhsh, A. Zubair, M. S. Dresselhaus, and T. Palacios, Nano Lett., **16**, 1359 (2016).

[35] Y. Balaji, Q. Smets, C. J. Lockhart De La Rosa, A. K. A. Lu, and D. Chiappe, IEEE J. Electron Devices Soc., **6**, 1048 (2018).

第 2 章

電子状態および量子輸送解析手法

2.1　あらまし

強結合近似法は系を原子単位で表現できる電子状態計算手法であり，非平衡グリーン関数法は量子力学に基づいた輸送計算方法である [1, 2]．非平衡グリーン関数法で用いるデバイスのハミルトニアンを強結合近似法によって記述することで，2 次元材料結合系の幾何構造を原子単位で表現した上で，量子論的な効果を取り入れた輸送計算が可能となる [3–9] ．

本章では，強結合近似法について，単層グラフェンのバンド構造の計算を例にして説明した．次に，非平衡グリーン関数法について，単層グラフェンの透過関数の計算を例にして説明した．

2.2　強結合近似法

強結合近似法とは，1 電子近似のもと，局在原子軌道の基底を用いて系全体の電子状態を計算する手法である．原子軌道を基底とするため，系の結晶構造を原子単位で表現することが可能であり，ラフネスや歪などの結晶の幾何構造の効果を扱うことができる [10–12]．グラフェンの場合，図 2.1 に示すように，各炭素原子の最外殻電子は，sp^2 混成軌道と p_z 軌道に配置されている．しかし，フェルミエネルギー付近の電子状態は p_z 軌道のみの考慮で十分に表現可能である．このように，注目するエネルギー範囲を絞

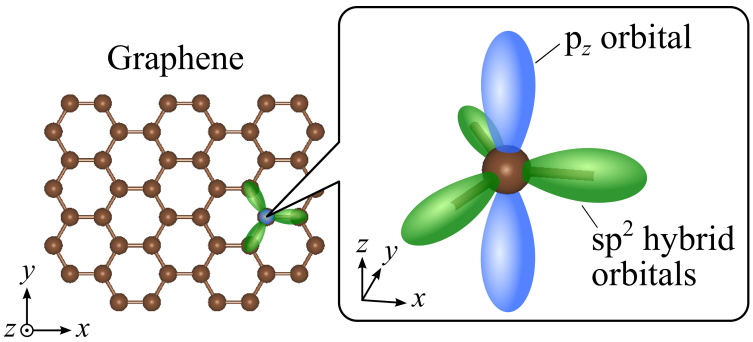


図 2.1: グラフェンの結晶構造と炭素原子がもつ原子軌道．各炭素原子の最外殻電子は，sp^2 混成軌道と p_z 軌道に配置されている．

ることで，基底を少なくすることができるのも強結合近似法の特徴のひとつである．この節では，1 次元鎖のモデルから出発し，グラフェンのバンド構造を求めるまでの流れを説明する．

2.2.1　1 次元結晶のバンド計算

図 2.2 に示すような，格子間隔 a で N 個の格子が並んだ 1 次元鎖を考える．各格子の位置は，以下の式で表せる．

$$x_n = na \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots, N) \tag{2.1}$$

系の電子状態を解析するためには，次の式で表されるシュレディンガー方程式を解く必要がある．

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = H_{\mathrm{op}}\Psi(x,t) \tag{2.2}$$

ここで，$\Psi(x,t)$ は波動関数，H_{op} は次式で表される微分演算子である．

$$H_{\mathrm{op}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + U(x) \tag{2.3}$$

シュレディンガー方程式を偏微分方程式から行列方程式へと変換を行なう．波動関数 $\Psi(x,t)$ を，以下に示すように，時間 t における格子点での値をまとめた列ベクトルへと変換する．

$$\Psi(x,t) \to \{\Psi(x_1,t), \Psi(x_2,t), \ldots, \Psi(x_N,t)\}^{\mathrm{T}} \tag{2.4}$$

この表現は $a \to 0$ の極限でのみ正しい．しかし，$\Psi(x,t)$ の変化する空間のスケールよりも a が小さい限りかなり正確である．また，簡単のため引数を省略して，以下のように書くことにする．

$$\{\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_N\} = \{\Psi(x_1,t), \Psi(x_2,t), \ldots, \Psi(x_N,t)\} \tag{2.5}$$

次に，微分演算子 H_{op} に対応する行列 $[H]$ を求めるため，有限差分法を用いて，次式に示す変換を行なうことにより，微分方程式を差分方程式に変える．

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)_{x=x_n} &\to \frac{1}{a^2}[\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}] \\ U(x)\Psi(x) &\to U_n\psi_n \end{aligned}$$

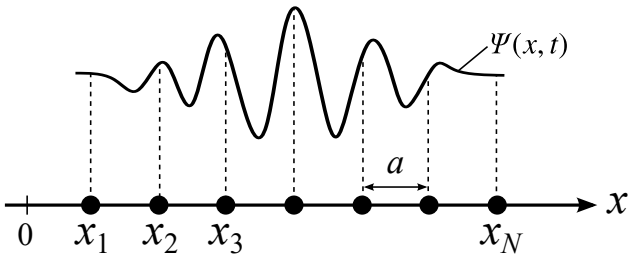


図 2.2: x 方向に格子間隔 a で N 個の格子が並んだ 1 次元鎖．波動関数 $\Psi(x,t)$ を離散格子点上の値によって表現する．

ここで，$U_n \equiv U(x_n)$ とおいた．この変換を用いることにより微分方程式は次のように書ける．

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}t} &= [H_{\mathrm{op}}\psi]_{x=x_n} = (U_n + 2t_0)\psi_n - t_0\psi_{n-1} - t_0\psi_{n+1} \\ &= \sum_m [(U_n + 2t_0)\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} - t_0\delta_{n,m-1}]\psi_m \end{aligned} \tag{2.6}$$

ここで $t_0 \equiv \hbar^2/2ma^2$ とおいた．$\delta_{n,m}$ はクロネッカーのデルタであり，$n = m$ なら 1，$n \neq m$ なら 0 である．以上により，式 (2.6) を行列方程式として書くことができる．

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi(t) = [H]\psi(t) \tag{2.7}$$

このハミルトニアン行列 $[H]$ の要素は次のように与えられる．

$$H_{n,m} = [U_n + 2t_0]\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} - t_0\delta_{n,m-1} \tag{2.8}$$

したがって，ハミルトニアン行列 $[H]$ は次のように表せる．

$$\begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ N-2 \\ N-1 \\ N \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} 1 & 2 & 3 & \cdots & N-2 & N-1 & N \end{array} \\ \left(\begin{array}{ccccccc} 2t_0+U_1 & -t_0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -t_0 & 2t_0+U_2 & -t_0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_0 & 2t_0+U_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2t_0+U_{N-2} & -t_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -t_0 & 2t_0+U_{N-1} & -t_0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -t_0 & 2t_0+U_N \end{array} \right) \end{array}$$

以上の手順により，シュレディンガー方程式を行列方程式に変換することができた．

式 (2.7) から $\psi(t)$ を求めるためには，行列 H の固有値と固有ベクトルを求めればよい．

$$[H]\{\alpha\} = E_\alpha\{\alpha\} \tag{2.9}$$

式 (2.9) から求まる波動関数

$$\{\psi(t)\} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_\alpha t/\hbar}\{\alpha\} \tag{2.10}$$

は式 (2.7) を満たす．また，式 (2.7) は線形であるので，次式で表される式 (2.10) の線形結合も，同様に式 (2.7) の解である．

$$\{\psi(t)\} = \sum_\alpha C_\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_\alpha t/\hbar}\{\alpha\} \tag{2.11}$$

いかなる系を議論するときでも，ハミルトニアン行列 $[H]$ を書き下し，その固有値と固有ベクトルを見つけることでシュレディンガー方程式の解を求めることができる．

次に，図 2.3 に示すように単位胞内に 2 種類の原子が存在する 1 次元結晶を考える．2 種類の原子から

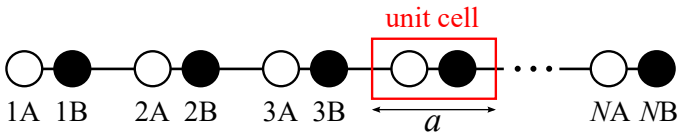


図 2.3: 単位格子に 2 個の原子を含んだ 1 次元結晶.

構成される 1 次元結晶において，1 原子あたり 1 個の s 軌道をもつとすると，ハミルトニアン行列 $[H]$ は

$$[H] = \begin{array}{c} \\ |1_A\rangle \\ |1_B\rangle \\ |2_A\rangle \\ |2_B\rangle \\ |3_A\rangle \\ |3_B\rangle \\ \vdots \\ |N_A\rangle \\ |N_B\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccccccc} |1_A\rangle & |1_B\rangle & |2_A\rangle & |2_B\rangle & |3_A\rangle & |3_B\rangle & \cdots & |N_A\rangle & |N_B\rangle \end{array} \\ \begin{pmatrix} E_0 & E_{\rm ss} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & E'_{\rm ss} \\ E_{\rm ss} & E_0 & E'_{\rm ss} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & E'_{\rm ss} & E_0 & E_{\rm ss} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{\rm ss} & E_0 & E'_{\rm ss} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E'_{\rm ss} & E_0 & E_{\rm ss} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{\rm ss} & E_0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & E_0 & E_{\rm ss} \\ E'_{\rm ss} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & E_{\rm ss} & E_0 \end{pmatrix} \end{array}$$

と書ける．ここで，E_0 は s 軌道の軌道エネルギー，$E_{\rm ss}$ は単位胞内の 2 個の原子の s 軌道間の結合を表す移動積分，$E'_{\rm ss}$ は単位胞を越えて隣接する 2 つの原子の s 軌道間の結合を表す移動積分である．ここでは周期的境界条件を用いた．すなわち，原子の列を丸めて，終わりの N_B 原子を 1_A 原子につなげる．これは，行列要素 $H_{1,2N}$ と $H_{2N,1}$ の値を 0 でないとすることと等しい．十分に大きなバルクの性質を議論する場合，周期的境界条件は十分に有効な近似であると考えられる．

次に，行列要素を (2×2) のブロックごとに分割し，次のように書き換える．

$$[H] = \begin{array}{c} \\ |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \\ \vdots \\ |N\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle & \cdots & |N\rangle \end{array} \\ \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & 0 & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & \cdots & 0 \\ 0 & H_{32} & H_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & 0 & 0 & \cdots & H_{NN} \end{pmatrix} \end{array} \tag{2.12}$$

ここで，

$$H_{nm} = \begin{bmatrix} E_0 & E_{\rm ss} \\ E_{\rm ss} & E_0 \end{bmatrix}, \qquad H_{n,n+1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ E'_{\rm ss} & 0 \end{bmatrix}, \qquad H_{n,n-1} = \begin{bmatrix} 0 & E'_{\rm ss} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

である．式 (2.12) の行列は周期的となり，行列方程式を以下のように書くことができるようになる．

$$E\phi_n = H_{n,n}\phi_n + H_{n,n-1}\phi_{n-1} + H_{n,n+1}\phi_{n+1} \tag{2.13}$$

ここで，ϕ_n は大きさ (2×1) の列ベクトル，また要素 H_{nm} は (2×2) の行列である．連立方程式 (2.13) は次のような形の解を仮定することで解くことができる．

$$\phi_n = \phi_0 {\rm e}^{{\rm i}kna} \tag{2.14}$$

実際に式 (2.14) を式 (2.13) 代入し共通の因子を削除すると

$$E\phi_0 = H_{n,n}\phi_0 + H_{n,n-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\phi_0 + H_{n,n+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\phi_0 \tag{2.15}$$

となる．すなわち

$$E\{\phi_0\} = \begin{bmatrix} E_0 & E_{\mathrm{ss}} + E'_{\mathrm{ss}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} \\ E_{\mathrm{ss}} + E'_{\mathrm{ss}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & E_0 \end{bmatrix}\{\phi_0\} \tag{2.16}$$

である．この行列式を 0 と等しいとすることで固有値を得ることができる．

$$\det\begin{bmatrix} E_0 & E_{\mathrm{ss}} + E'_{\mathrm{ss}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} \\ E_{\mathrm{ss}} + E'_{\mathrm{ss}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & E_0 \end{bmatrix} = 0 \tag{2.17}$$

したがって，

$$E = E_0 \pm [E_{\mathrm{ss}}^2 + {E'_{\mathrm{ss}}}^2 + E_{\mathrm{ss}}E'_{\mathrm{ss}}\cos(ka)]^{1/2} \tag{2.18}$$

式 (2.18) から図 2.4 に示すように 2 本の $E(k)$ が与えられる．

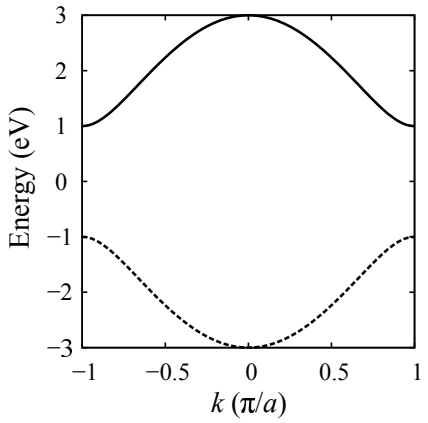


図 2.4: 図 2.3 で示した単位胞が 2 個の原子から構成された 1 次元結晶のバンド図．$E_0 = 0$，$E_{\mathrm{ss}} = -2$，$E'_{\mathrm{ss}} = -1$ として式 (2.18) を用いて計算した．

2.2.2 周期的な結晶のバンド計算

2.2.1 節では 1 次元結晶でのバンド計算を行なった．本節では周期的な結晶のバンド計算の一般化を行なう．図 2.5 に示すように，ある単位胞 n が複数の単位胞 m と $(b \times b)$ 行列を通じて結合されている場合を考える．b は単位胞あたりの軌道関数の個数である．行列方程式全体は次のようになる．

$$\sum_m [H_{nm}]\{\phi_m\} = E\{\phi_n\} \tag{2.19}$$

ここで $\{\phi_m\}$ は $(b \times 1)$ の列ベクトルで，単位胞 m 中の波動関数を表している．ブロッホの定理の離散的なバージョンである

$$\{\phi_m\} = \{\phi_0\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{d}_m} \tag{2.20}$$

を用いることで，式 (2.19) がすべての単位胞 n に対して同じ形式で表すことができ，連立方程式を解くことが可能となる．$\boldsymbol{d}_m$ は，単位胞 m の位置ベクトルである．式 (2.20) を式 (2.19) に代入することで，

$$E\{\phi_0\} = [h(\boldsymbol{k})]\{\phi_0\} \tag{2.21}$$

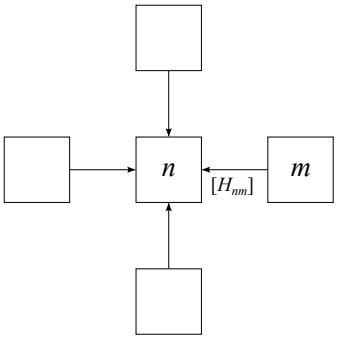


図 2.5: 単位胞 n が隣接する複数の単位胞 m と $(b \times b)$ 行列を通じて結合されている場合の概念図．b は単位胞に含まれる基底関数の個数．結晶の種類によって隣接の構造は異なる．また周期性により 1 つの結晶内でどの単位胞 n を選んでも構造は同じである．

が得られる．ここで，

$$[h(\boldsymbol{k})] = \sum_m [H_{nm}] \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{d}_m - \boldsymbol{d}_n)} \tag{2.22}$$

は単位胞の指数 n に依存しない．また，式 (2.22) の m に対する和は，単位胞 n が相互作用をもつすべての隣接単位胞に対して行なう．

以上より，周期的な境界条件をもつ一般的な結晶のバンド構造は，各 $\boldsymbol{k}$ に対する $(b \times b)$ 行列 $[h(\boldsymbol{k})]$ の固有値を求めることで得られる．

2.2.3　グラフェンのバンド計算

グラフェンの結晶構造を図 2.6 に示す．炭素原子が xy 平面上に 6 角格子を形成しながら敷き詰められた構造をとっている．最近接の炭素原子間距離を a_0 とし，単位格子ベクトルを，$a_1 = (3a_0/2, \sqrt{3}a_0/2)$, $a_2 = (3a_0/2, -\sqrt{3}a_0/2)$ とした．赤い菱形で表された単位胞内には，白丸と黒丸で表された幾何学的に非

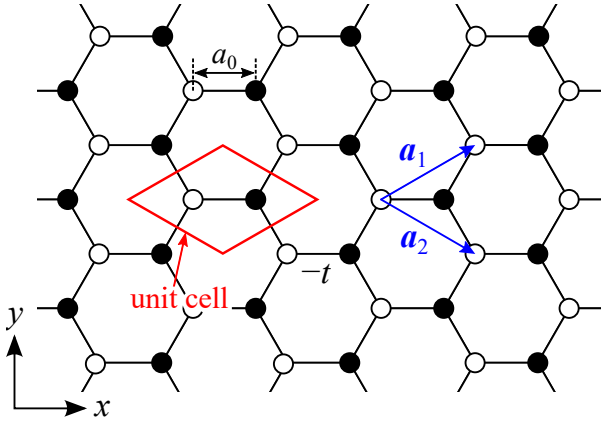


図 2.6: xy 平面上のグラフェンの結晶構造．赤い菱形で表した領域を単位胞とした．赤い菱形で表された単位胞内には，白丸と黒丸で表された幾何学的に非等価な炭素原子が 2 個存在する．青い矢印は単位格子ベクトルを表す．隣り合う原子間の距離を a_0 とおき，隣り合う原子の p_z 軌道間の移動積分を $-t$ とおいた．

等価な炭素原子が 2 個存在する．グラフェンの各炭素原子における最外殻電子は，sp^2 混成軌道と $2\mathrm{p}_z$ 軌道に配置されている．sp^2 混成軌道は，互いに 120 度異なる 3 方向を向き，強い σ 結合を形成しているため，それに起因するエネルギー準位はフェルミエネルギー近傍には現れない．一方，$2\mathrm{p}_z$ 軌道を占める価電子が自由電子となり，グラフェン上を自由に運動するため，フェルミエネルギー近傍のエネルギー準位は，主に $2\mathrm{p}_z$ 軌道より構成されている．したがって，グラフェンのフェルミ準位付近のバンド構造は，最近接炭素原子の $2\mathrm{p}_z$ 軌道間の相互作用のみを考慮した強結合近似で十分に記述できる．最近接炭素原子の $2\mathrm{p}_z$ 軌道間の相互作用のみを考慮した強結合近似ハミルトニアンは，以下の式で表される．

$$[h(\boldsymbol{k})] = \begin{bmatrix} 0 & -t \\ -t & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1} & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2} & 0 \end{bmatrix}$$

ここで，最近接炭素原子の p_z 軌道間の移動積分を $-t$ とした．さらに，

$$h_0 \equiv -t(1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_1} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_2}) = -t\{1 + 2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x 3a_0/2}\cos(k_y\sqrt{3}a_0/2)\} \tag{2.23}$$

と定義すると，

$$[h(\boldsymbol{k})] = \begin{bmatrix} 0 & h_0 \\ h_0^* & 0 \end{bmatrix} \tag{2.24}$$

となる．このハミルトニアンの固有値が，グラフェンのエネルギーバンド構造であり，以下のように求まる．

$$E = \pm|h_0| = \pm t\sqrt{1 + 4\cos(k_y\sqrt{3}a_0/2)\cos(k_x 3a_0/2) + 4\cos^2(k_y\sqrt{3}a_0/2)} \tag{2.25}$$

式 (2.25) で表されたグラフェンのバンド構造を図 2.7 に示す．図 2.7(a) は，グラフェンのバンド構造を立体的に描画した図である．黄色が伝導帯，青色が価電子帯のバンドを表す．図 2.7(b) は，図 2.7(a) の $E = 0$ 付近を拡大した図である．グラフェンは $E = 0$ を 1 点で貫き，等方的な線形分散をもつ．このコーン形状のエネルギー分散はディラックコーンと呼ばれ，$E = 0$ を貫く点はディラック点と呼ばれる [13]．図 2.7(c) は，伝導帯バンドをカラーマップで描画した図である．白線は等エネルギー線を表す．赤破線は第 1 ブリュアン領域を表す．6 角形の第 1 ブリュアン領域の頂点である K 点と K′ 点がディラック点である．図 2.7(c) に示した対称性の高い点を通る線（Γ 点 →K 点 →M 点 →Γ 点）におけるバンド構造を図 2.7(d) に示す．K 点でバンドが $E = 0$ を線形に交差していることがわかる．

2.2.4 状態密度

長さ L の 1 次元結晶に周期的境界条件 $\psi(x + L) = \psi(x)$ を課す．あるバンド $E(k)$ に注目すると，k 空間において，k から $k + \Delta k$ ($\Delta k \gg 2\pi/L$) の間には $g_s\Delta k/(2\pi/L)$ 個の状態がある [14]．$g_s = 2$ はスピンの縮退度である．このように，k 空間では一様に状態がある．次に，エネルギー空間で考える．あるバンド $E(k)$ において，E から $E + \Delta E$ の間にある状態の数は

$$\int_E^{E+\Delta E} D(E)dE \approx D(E)\Delta E \tag{2.26}$$

で与えられる．ここで

$$D(E) = g_s\sum_k \delta(E - E(k)) \tag{2.27}$$

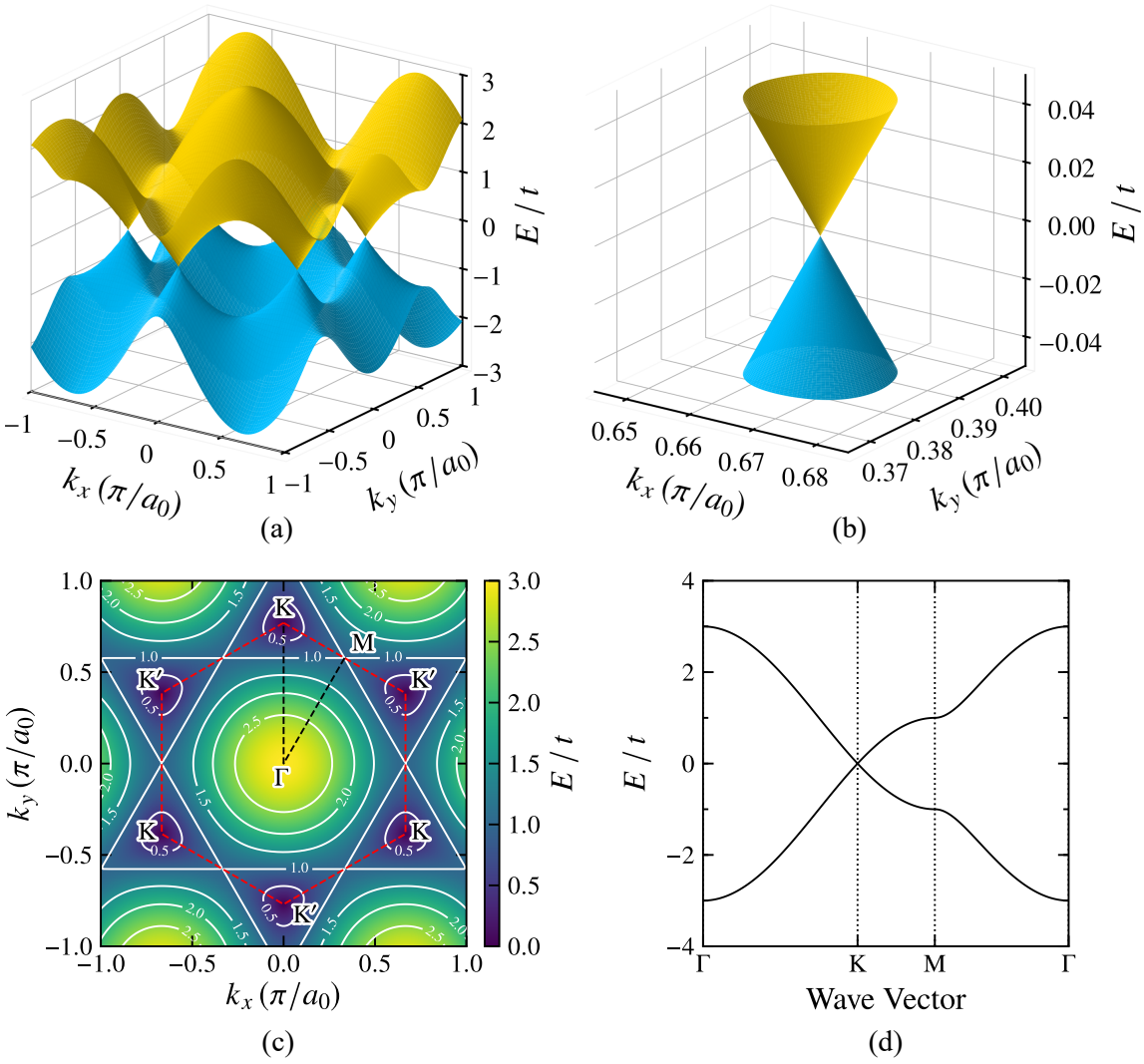


図 2.7: 式 (2.25) を用いて描画したグラフェンのバンド構造．(a) 立体的に描画した図．黄色が伝導帯，青色が価電子帯のバンドを表す．(b) (a) の $E = 0$ 付近を拡大した図．(c) 伝導帯のバンドをカラーマップで描画した図．赤破線は第 1 ブリュアン領域を示す．(d) Γ 点から K 点，K 点から M 点，M 点から Γ 点におけるバンド構造．

は状態密度と呼ばれ，単位エネルギーあたりの状態数を与える．式 (2.27) を式 (2.26) に代入すると

$$\int_E^{E+\Delta E} D(E)dE = \int_E^{E+\Delta E} g_s \sum_k \delta(E - E(k))dE = g_s \sum_k \underline{\int_E^{E+\Delta E} \delta(E - E(k))dE} \tag{2.28}$$

下線部は $E(k)$ が E から $E + \Delta E$ の範囲にあるときのみ 1 を取る．したがって，式 (2.26) は E から $E + \Delta E$ の範囲にある状態の数を表しているといえる．

グラフェンなどの 2 次元材料系を考える．x 方向に長さ a_x，y 方向に長さ a_y の矩形単位胞の中に原子軌道が N 個存在すると仮定する．単位胞内に原子軌道基底が N 個存在するため，N 本のエネルギーバンド $E_i(k_x, k_y)$ $[i = 1, 2, \ldots, N]$ が得られる．結晶のサイズを $L_x \times L_y$ とすると，単位エネルギー当た

り状態密度は次式で表される．

$$D(E) = \sum_{i=1}^{N} g_s \sum_{k_x} \sum_{k_y} \delta(E - E_i(k_x, k_y)) \tag{2.29}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} g_s \int_{-\pi/a_x}^{\pi/a_x} \frac{L_x}{2\pi} dk_x \int_{-\pi/a_y}^{\pi/a_y} \frac{L_y}{2\pi} dk_y \delta(E - E_i(k_x, k_y)) \tag{2.30}$$

単位面積，単位エネルギー当たりの状態密度 $\rho(E)$ は，

$$\rho(E) = \frac{D(E)}{L_x \times L_y} = \sum_{i=1}^{N} g_s \int_{-\pi/a_x}^{\pi/a_x} \frac{1}{2\pi} dk_x \int_{-\pi/a_y}^{\pi/a_y} \frac{1}{2\pi} dk_y \delta(E - E_i(k_x, k_y)) \tag{2.31}$$

と表される．数値計算を行なう際は，デルタ関数の代わりに幅 σ_e のガウス関数を用いる．

$$\rho(E) = \sum_{i=1}^{N} g_s \int_{-\pi/a_x}^{\pi/a_x} \frac{1}{2\pi} dk_x \int_{-\pi/a_y}^{\pi/a_y} \frac{1}{2\pi} dk_y \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_e} \exp\left\{ -\frac{(E - E_i(k_x, k_y))^2}{2\sigma_e^2} \right\} \tag{2.32}$$

本研究では，$\sigma_e = t \times 10^{-3}$ として計算を行なった．t はグラフェンにおける炭素原子間の移動積分である．

局所状態密度とは実空間の特定の位置における局所的な状態密度を表す．l 番目の原子軌道における局所状態密度は，行列方程式を解いて得られる l 番目の固有ベクトル（波動関数）の 2 乗である存在確率をかけて，全波数空間で足し合わせたものとして与えられる．したがって，単位面積，単位エネルギー当たりの局所状態密度 $\rho_l(E)$ は，次式で表せる．

$$\rho_l(E) = \sum_{i=1}^{N} g_s \int_{-\pi/a_x}^{\pi/a_x} \frac{1}{2\pi} dk_x \int_{-\pi/a_y}^{\pi/a_y} \frac{1}{2\pi} dk_y |\psi(l)|^2 \delta(E - E_i(k_x, k_y)) \tag{2.33}$$

ここで，$\psi(l)$ は l 番目の波動関数である．前述の全状態密度の場合と同様に，数値計算を行なう際は，デルタ関数の代わりにガウス関数を用いる．

$$\rho_l(E) = \sum_{i=1}^{N} g_s \int_{-\pi/a_x}^{\pi/a_x} \frac{1}{2\pi} dk_x \int_{-\pi/a_y}^{\pi/a_y} \frac{1}{2\pi} dk_y \frac{|\psi(l)|^2}{\sqrt{2\pi}\sigma_l} \exp\left\{ -\frac{(E - E_i(k_x, k_y))^2}{2\sigma_l^2} \right\} \tag{2.34}$$

全状態密度の場合と同様に，本研究では，$\sigma_l = t \times 10^{-3}$ として局所状態密度の計算を行なった．式 (2.34) では，局所状態密度を l 番目の原子軌道全体に渡って積分した値が求まるため，任意の空間座標における局所状態密度を求めることができない．そこで，任意の空間座標での局所状態密度を表現するために，原子位置から等方的に減衰するガウス関数で表される擬波動関数を掛けて，全軌道で足し合わした．これを，擬局所状態密度と呼ぶ．座標 (x, y) における擬局所状態密度 $\rho_p(x, y, E)$ は，l 番目の原子位置 (x_l, y_l) を用いて，次式で表せる．

$$\rho_p(x, y, E) = \sum_{l=1}^{N} \rho_l(E) \times \exp\left\{ -\frac{(x - x_l)^2 + (y - y_l)^2}{2\sigma_p^2} \right\} \tag{2.35}$$

ここで，σ_p はガウス関数の幅を表しており，本研究では，$\sigma_p = 0.4\, a_0$（a_0 は炭素原子間距離）として計算を行なった．

2.2.5　フェルミ速度

フェルミ準位における電子の群速度はフェルミ速度と呼ばれ，物質の電気伝導の特性を決定する重要な物理量である．フェルミ速度 $\boldsymbol{v}_{\mathbf{F}}$ は，以下の式のように，フェルミ波数 $\boldsymbol{k}_{\mathbf{F}}$ におけるエネルギーバンドの傾きで与えられる．

$$\boldsymbol{v}_{\mathbf{F}} = \frac{1}{\hbar}\Delta_{\boldsymbol{k}} E(\boldsymbol{k})|_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_{\mathbf{F}}} \tag{2.36}$$

グラフェンの場合，エネルギーバンドはフェルミ準位を 1 点（ディラック点）で線形に貫くため，フェルミ速度はディラック点における線形バンドの傾きで与えられる．グラフェンの場合，ディラック点は以下で表される K 点に存在する．

$$\boldsymbol{k}_{\mathbf{D}} = (0,\ \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}) \tag{2.37}$$

式 (2.25) で表されるグラフェンのエネルギーバンドを式 (2.36) に従って $\boldsymbol{k}_{\mathbf{D}}$ で展開し，傾きからフェルミ速度を求めると，グラフェンにおけるフェルミ速度は等方的となり，絶対値 v_0 は以下の式で与えられる．

$$v_0 = \frac{3ta_0}{2\hbar} = \frac{\sqrt{3}ta}{2\hbar} \tag{2.38}$$

$a(=\sqrt{3}a_0)$ はグラフェンの格子定数である．グラフェンの場合，フェルミ速度は等方的であるが，本研究で扱う系では異方性を示す可能性がある．したがって，本研究では，角度成分を有する微小な波数ベクトル $\boldsymbol{q}(\theta) = (q\cos\theta, q\sin\theta)$ を用いて，以下の式よりフェルミ速度の計算を行なった．

$$v_{\mathrm{F}}(\theta) = \frac{E(\boldsymbol{k}_{\mathbf{D}} + \boldsymbol{q}(\theta))}{\hbar q} \tag{2.39}$$

数値計算では，$q = 10^{-10}/a$ とした．

2.3　非平衡グリーン関数法

グラフェンなど 2 次元材料を用いたデバイスでは量子力学的な効果が顕著となり，輸送特性に大きな影響を及ぼす．非平衡グリーン関数法は，量子力学を元にした輸送計算の方法であり，デバイスのハミルトニアンを強結合近似法によって記述することで，原子論的手法に基づいて量子効果を取り入れることができる．本章では，グラフェンを一例にして，強結合近似法を導入した非平衡グリーン関数法の計算手法について説明する．

2.3.1　1 次元モデル

輸送問題を扱うための前段階として，この節では 1 次元モデルについて考察する．2.2.3 節のグラフェンのバンド計算では，図 2.6 に示したように，菱型の単位胞を用いて計算を行なったが，本章では図 2.8 に示す矩形単位胞を用いて輸送計算を行なう．図 2.8 の系において，y 方向は十分大きいとして，周期的境界条件を課し，x 方向には，有限の大きさを仮定する．すると，以下で示すように，k_y ごとに独立な 1 次元モデルが得られる．

y 方向の周期性を仮定して得られる波動方程式は，

$$S^{\dagger}(k_y)\Phi_{l-1,k_y} + H(k_y)\Phi_{l,k_y} + S(k_y)\Phi_{l+1,k_y} = E\Phi_{l,k_y} \tag{2.40}$$

と表せる．ここで $u(k_y) = t(1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}ak_y})$ として，

$$\Phi_{l,k_y} = \begin{bmatrix} \phi_{l,k_y,\mathrm{a}} \\ \phi_{l,k_y,\mathrm{b}} \\ \phi_{l,k_y,\mathrm{c}} \\ \phi_{l,k_y,\mathrm{d}} \end{bmatrix},\ H(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & -t & 0 & 0 \\ -t & 0 & -u^*(k_y) & 0 \\ 0 & -u(k_y) & 0 & -t \\ 0 & 0 & -t & 0 \end{bmatrix},\ S(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -u(k_y) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.41}$$

である．

式 (2.40) は図 2.9(a) のように表せることから，ある k_y に着目すると，グラフェンは図 2.9(b) に示したような 1 次元モデルと見なせることがわかる．各 “単位胞” は最近接の単位胞のみと結合している．各単位胞内には，A, B, C, D の 4 つの “層” があり，各層間も最近接のみ相互作用している．以下では図 2.9(b) の 1 次元モデルを用いて考察を行なう．

2.3.2 周期的境界条件を課した場合

1 次元モデル [図 2.9(b)] を用いて，x 方向に，$l = 1$ から $l = N$ の N 個の単位胞が並んだ系を考える．x 方向に周期的境界条件を課すと，系のハミルトニアン（ある k_y に関するハミルトニアン）$\mathcal{H}(k_y)$ は，

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} H(k_y) & S(k_y) & & S(k_y)^{\dagger} \\ S(k_y)^{\dagger} & H(k_y) & & \\ & & \ddots & \\ S(k_y) & & & H(k_y) \end{bmatrix} \tag{2.42}$$

となる．この $\mathcal{H}(k_y)$ の固有ベクトルと固有値とを

$$\mathcal{H}(k_y)\,|n, k_y\rangle = E_{n,k_y}\,|n, k_y\rangle \tag{2.43}$$

と表す．このとき，状態密度 $\rho(E)$ は，

$$\rho(E) = \frac{g_s}{S}\sum_{n,k_y}\delta(E - E_{n,k_y}) = \frac{g_s}{L_x}\sum_{n}\int\frac{dk_y}{2\pi}\delta(E - E_{n,k_y}) \tag{2.44}$$

となる．S は系の面積，$L_x = N \times \sqrt{3}a$ は x 方向の系の長さである．

ここで，遅延グリーン関数行列 $\mathcal{G}^r_{k_y}(E) = [E - \mathcal{H}(k_y) + \mathrm{i}0]^{-1}$ を導入する．式 (2.43) より，

$$\mathcal{G}^r_{k_y}(E)\,|n, k_y\rangle = [E - \mathcal{H}(k_y) + \mathrm{i}0]^{-1}\,|n, k_y\rangle = \frac{1}{E - E_{n,k_y} + \mathrm{i}0}\,|n, k_y\rangle \tag{2.45}$$

が成り立つので，次の関係が得られる．

$$\mathrm{Im}\,\langle n, k_y|\,\mathcal{G}^r_{k_y}(E)\,|n, k_y\rangle = \mathrm{Im}\frac{1}{E - E_{n,k_y} + \mathrm{i}0} = -\pi\delta(E - E_{n,k_y}) \tag{2.46}$$

さらに，この式と式 (2.44) より，

$$\rho(E) = -\frac{g_s}{\pi L_x}\sum_{n}\int\frac{dk_y}{2\pi}\mathrm{Im}\,\langle n, k_y|\,\mathcal{G}^r_{k_y}(E)\,|n, k_y\rangle = -\frac{g_s}{\pi L_x}\int\frac{dk_y}{2\pi}\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\,\mathcal{G}^r_{k_y}(E) \tag{2.47}$$

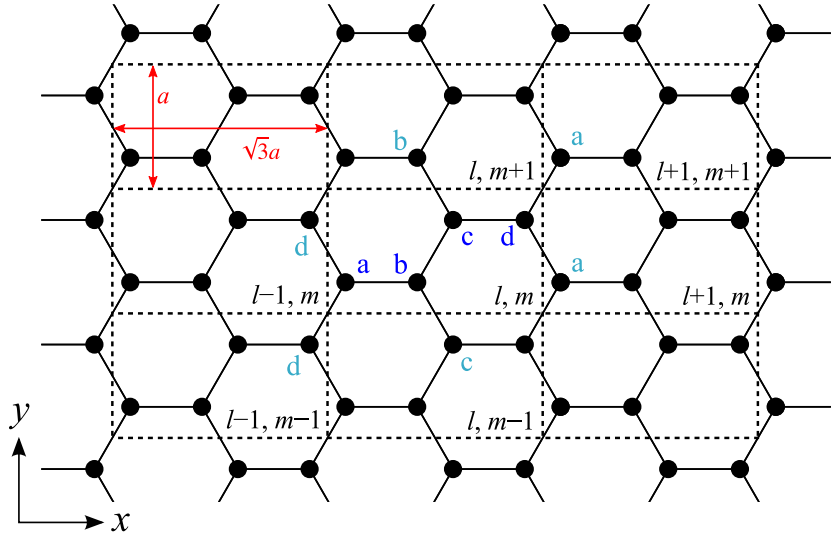


図 2.8: グラフェン格子．点線で示した $\sqrt{3}a \times a$ の矩形を単位胞とする．各単位胞内には，a, b, c, d の 4 つの原子が存在する．

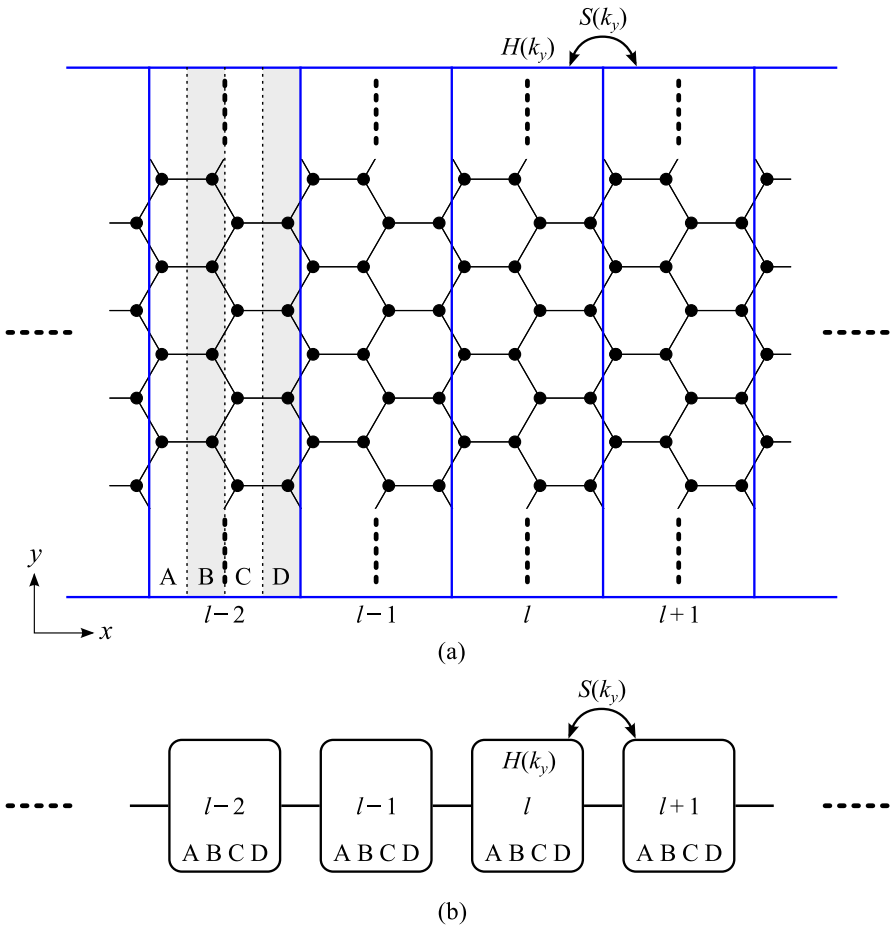


図 2.9: (a) 式 (2.40) を図的に表したもの．(b) ある k_y に対して，グラフェンは，$H(k_y)$ で記述される “単位胞” が，最近接の単位胞と $S(k_y)$ で結合している 1 次元モデルとみなせる．各単位胞内には，A, B, C, D の 4 つの “層” があり，各層間も最近接のみ相互作用をする．

が得られ，遅延グリーン関数から状態密度の計算が可能であることがわかる．なお，ここで，

$$\mathrm{Tr}\,\mathcal{G}^r_{k_y}(E) = \sum_n \langle n, k_y|\,\mathcal{G}^r_{k_y}(E)\,|n, k_y\rangle \tag{2.48}$$

と表した．

数値計算を行なう場合，$\mathcal{G}^r_{k_y}(E) = [E - \mathcal{H}(k_y) + \mathrm{i}0]^{-1}$ の正の微小量 $+\mathrm{i}0$ を小さな有限値 $+i\gamma$ に置き換える近似がある．

2.3.3 開いた系の取り扱い

次に，輸送を扱うため，図 2.10 に示したように中央の N 個の単位胞からなるチャネル領域の左右に，半無限の単位胞が連なる電極が接続された系を考える．

全系の波動方程式 $\mathcal{H}(k_y)\,|\Phi\rangle = E\,|\Phi\rangle$ をブロックごとに定義された行列を用いて（以下，簡単化のため k_y を省略する），以下のように表す．

$$\underbrace{\begin{bmatrix} H_{\mathrm{L}} & H_{\mathrm{LC}} & 0 \\ H^\dagger_{\mathrm{LC}} & H_{\mathrm{C}} & H_{\mathrm{CR}} \\ 0 & H^\dagger_{\mathrm{CR}} & H_{\mathrm{R}} \end{bmatrix}}_{\mathcal{H}} \underbrace{\begin{bmatrix} \Phi_{\mathrm{L}} \\ \Phi_{\mathrm{C}} \\ \Phi_{\mathrm{R}} \end{bmatrix}}_{\Phi} = E \begin{bmatrix} \Phi_{\mathrm{L}} \\ \Phi_{\mathrm{C}} \\ \Phi_{\mathrm{R}} \end{bmatrix} \tag{2.49}$$

ここで，各ブロックの行列は，以下の式で与えられる．

$$H_{\mathrm{L}} = \begin{bmatrix} \ddots & & \\ & H & S \\ & S^\dagger & H \end{bmatrix},\ H_{\mathrm{LC}} = \begin{bmatrix} & & \\ & & \\ S & & \end{bmatrix} \tag{2.50}$$

$$H_{\mathrm{C}} = \begin{bmatrix} H & S & & & \\ S^\dagger & H & S & & \\ & S^\dagger & H & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & S \\ & & & S^\dagger & H \end{bmatrix},\ H_{\mathrm{CR}} = \begin{bmatrix} & & \\ & & \\ S & & \end{bmatrix} \tag{2.51}$$

$$H_{\mathrm{R}} = \begin{bmatrix} H & S & \\ S^\dagger & H & \\ & & \ddots \end{bmatrix} \tag{2.52}$$

ここで，簡単化のため，引数の k_y を省略して，$H(k_y)$ を H，$S(k_y)$ を S として記述した．

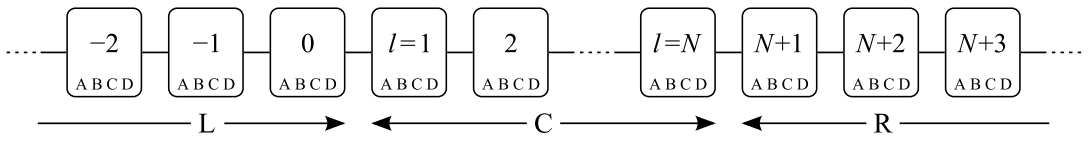


図 2.10: N 個の単位胞からなるチャネル領域 (C) の左右に半無限の一様・周期的な電極 (L, R) が接続された系

全系の遅延グリーン関数行列（以下，簡単化のため，誤解のない場合は，単にグリーン関数と呼ぶ）$\mathcal{G}^r(E)$ は，

$$\mathcal{G}^r(E) = [E - \mathcal{H} + \mathrm{i}0]^{-1} = \begin{bmatrix} E - H_{\mathrm{L}} + \mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{LC}} & 0 \\ -H_{\mathrm{LC}}^{\dagger} & E - H_{\mathrm{C}} + \mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{CR}} \\ 0 & -H_{\mathrm{CR}}^{\dagger} & E - H_{\mathrm{R}} + \mathrm{i}0 \end{bmatrix}^{-1} \tag{2.53}$$

と表せる．ここで，ブロック毎にグリーン関数を定義する．

$$\begin{bmatrix} G_{\mathrm{L}} & G_{\mathrm{LC}} & G_{\mathrm{LR}} \\ G_{\mathrm{CL}} & G & G_{\mathrm{CR}} \\ G_{\mathrm{RL}} & G_{\mathrm{RC}} & G_{\mathrm{R}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E - H_{\mathrm{L}} + \mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{LC}} & 0 \\ -H_{\mathrm{LC}}^{\dagger} & E - H_{\mathrm{C}} + \mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{CR}} \\ 0 & -H_{\mathrm{CR}}^{\dagger} & E - H_{\mathrm{R}} + \mathrm{i}0 \end{bmatrix}^{-1} \tag{2.54}$$

この式より，以下に示すように，チャネル領域のグリーン関数 $G(E)$ は，次のように表せることがわかる．

$$G(E) = [E - H_{\mathrm{C}} - \Sigma_{\mathrm{L}}(E) - \Sigma_{\mathrm{R}}(E)]^{-1} \tag{2.55}$$

ここで，$\Sigma_{\mathrm{L}}(E)$，$\Sigma_{\mathrm{R}}(E)$ は，電極の効果を表す自己エネルギーであり，孤立した電極のグリーン関数 $g_{\mathrm{L}}(E) = [E - H_{\mathrm{L}} + \mathrm{i}0]^{-1}$，$g_{\mathrm{R}}(E) = [E - H_{\mathrm{R}} + \mathrm{i}0]^{-1}$ を用いて，

$$\Sigma_{\mathrm{L}}(E) = H_{\mathrm{LC}}^{\dagger}\, g_{\mathrm{L}}(E)\, H_{\mathrm{LC}}, \quad \Sigma_{\mathrm{R}}(E) = H_{\mathrm{CR}}\, g_{\mathrm{R}}(E)\, H_{\mathrm{CR}}^{\dagger} \tag{2.56}$$

で与えられる．

チャネルが孤立している場合，チャネルのグリーン関数は $g(E) = [E - H_{\mathrm{C}} + \mathrm{i}0]^{-1}$ で与えられる．チャネルが左右の電極に接続された場合，式 (2.55) を見ると，$H_{\mathrm{C}} \to H_{\mathrm{C}} + \Sigma_{\mathrm{L}}(E) + \Sigma_{\mathrm{R}}(E)$ となることがわかる．すなわち，$\Sigma_{\mathrm{L/R}}(E)$ は，チャネルが電極に接続されている効果を表していることがわかる．半無限の孤立した電極のグリーン関数 $g_{\mathrm{L}}(E)$，$g_{\mathrm{R}}(E)$ から，式 (2.56) を通して $\Sigma_{\mathrm{L/R}}(E)$ を求めることができ，その結果より，電極に接続されたチャネルのグリーン関数 $G(E)$ が得られる．

式 (2.54) から式 (2.55) への変形は以下のとおりである．式 (2.54) は，

$$\begin{bmatrix} E - H_{\mathrm{L}} + \mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{LC}} & 0 \\ -H_{\mathrm{LC}}^{\dagger} & E - H_{\mathrm{C}} + \mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{CR}} \\ 0 & -H_{\mathrm{CR}}^{\dagger} & E - H_{\mathrm{R}} + \mathrm{i}0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{\mathrm{L}} & G_{\mathrm{LC}} & G_{\mathrm{LR}} \\ G_{\mathrm{CL}} & G & G_{\mathrm{CR}} \\ G_{\mathrm{RL}} & G_{\mathrm{RC}} & G_{\mathrm{R}} \end{bmatrix} = 1 \tag{2.57}$$

と表される．この式において，左行列の 2 行目と右行列の 2 列目の積より，

$$-H_{\mathrm{LC}}^{\dagger} G_{\mathrm{LC}} + [E - H_{\mathrm{C}} + \mathrm{i}0] G - H_{\mathrm{CR}} G_{\mathrm{RC}} = 1 \tag{2.58}$$

が得られる．同様に 1 行目と 2 列目および 3 行目と 2 列目の積より，

$$\underbrace{[E - H_{\mathrm{L}} + \mathrm{i}0]}_{g_{\mathrm{L}}^{-1}} G_{\mathrm{LC}} - H_{\mathrm{LC}} G = 0, \quad -H_{\mathrm{CR}}^{\dagger} G + \underbrace{[E - H_{\mathrm{R}} + \mathrm{i}0]}_{g_{\mathrm{R}}^{-1}} G_{\mathrm{RC}} = 0 \tag{2.59}$$

が得られる．これらの式より G_{LC} と G_{RC} とは，$G_{\mathrm{LC}} = g_{\mathrm{L}} H_{\mathrm{LC}} G$，$G_{\mathrm{RC}} = g_{\mathrm{R}} H_{\mathrm{CR}}^{\dagger} G$ と表されるので，式 (2.58) に代入すると，

$$-H_{\mathrm{LC}}^{\dagger} g_{\mathrm{L}} H_{\mathrm{LC}} G + [E - H_{\mathrm{C}} + \mathrm{i}0] G - H_{\mathrm{CR}} g_{\mathrm{R}} H_{\mathrm{CR}}^{\dagger} G = 1 \tag{2.60}$$

すなわち，

$$[E - H_{\mathrm{C}} - \underbrace{H_{\mathrm{LC}}^{\dagger} g_{\mathrm{L}} H_{\mathrm{LC}}}_{\Sigma_{\mathrm{L}}} - \underbrace{H_{\mathrm{CR}} g_{\mathrm{R}} H_{\mathrm{CR}}^{\dagger}}_{\Sigma_{\mathrm{R}}}]G = 1 \tag{2.61}$$

となり，式 (2.55) が得られる．ここで，以下で示すように $\Sigma_{\mathrm{L/R}}(E)$ が複素行列となることから，微小量 $+\mathrm{i}0$ を省略した．

2.3.4 電極の自己エネルギー

電極の効果を表す自己エネルギー $\Sigma_{\mathrm{L/R}}$ が求まると，式 (2.55) よりチャネルのグリーン関数 $G(E)$ が求められる．その際，行列 $\Sigma_{\mathrm{L/R}}$ のサイズは，チャネルのハミルトニアン H_{C} と同じサイズであり（図 2.10 の場合，$(4N) \times (4N)$），式 (2.55) は有限サイズの逆行列演算となり，数値計算可能である．しかし，式 (2.56) を用いて自己エネルギーを求めるためには，無次元の行列（g_{L} など）を扱わなくてはならず，数値計算にあたり工夫が必要となる．以下で述べるように，電極部分は一様・周期的であることを利用することにより，数値計算が可能となる．ここでは，初めに一般的な手法を述べる．その後，グラフェンなど，単位胞が複数の層から構成されている場合に有効な計算方法について述べる．

2.3.5 一般的な計算法

右側の電極に関するグリーン関数 $g_{\mathrm{R}}(E) = [E - H_{\mathrm{R}} + \mathrm{i}0]^{-1}$ について考える．$g_{\mathrm{R}}(E)$ を

$$g_{\mathrm{R}} = \begin{bmatrix} g_{N+1,N+1} & g_{N+1,N+2} & \cdots \\ g_{N+2,N+1} & g_{N+2,N+2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{2.62}$$

と表す．ここで，$g_{i,j}$ は，H，S と同じサイズの行列である．以下，$g_{i,j}$，H，S のサイズを，一般的に，$M \times M$ と表す（グラフェンの場合 $M = 4$）．式 (2.51) で示したように，H_{CR} は左下のブロックのみ値があるので，

$$\Sigma_{\mathrm{R}} = H_{\mathrm{CR}} g_{\mathrm{R}}(E) H_{\mathrm{CR}}^{\dagger} = \begin{bmatrix} & & \\ & & \\ & & S g_{N+1,N+1} S^{\dagger} \end{bmatrix} \tag{2.63}$$

となり，Σ_{R} は右下のブロックのみに値があることがわかる．また，$g_{i,j}$ $(i, j \geq N+1)$ のうち，$g_{N+1,N+1}$ のみが Σ_{R} の計算に必要であることもわかる．

一方，H_{R} は式 (2.52) で与えられるので，

$$\begin{bmatrix} E - H + \mathrm{i}0 & -S & \cdots \\ -S^{\dagger} & E - H + \mathrm{i}0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{N+1,N+1} & g_{N+1,N+2} & \cdots \\ g_{N+2,N+1} & g_{N+2,N+2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = 1 \tag{2.64}$$

が得られる．この式から $g_{N+1,N+1}$ に関係する部分を取り出す．

$$[E - H + \mathrm{i}0] g_{N+1,N+1} - S g_{N+2,N+1} = 1 \tag{2.65}$$

$$-S^{\dagger} g_{N+1,N+1} + [E - H + \mathrm{i}0] g_{N+2,N+1} - S g_{N+3,N+1} = 0 \tag{2.66}$$

下側の式 (2.66) は，電極内における波動方程式

$$-S^{\dagger}\Phi_{l-1} + [E - H]\Phi_l - S\Phi_{l+1} = 0 \tag{2.67}$$

と同じ形をしている．このことを利用して式 (2.66) を解く．

電極は一様・周期的なので，ブロッホの定理より，位相因子 $z = \exp(\mathrm{i}a_x k_x)$ を用いて，波動関数は

$$\Phi_{l+1} = z\Phi_l \tag{2.68}$$

と表せる．この式を利用して，式 (2.67) から Φ_{l-1} を消去すると，

$$-z^{-1}S^{\dagger}\Phi_l + [E - H]\Phi_l - S\Phi_{l+1} = 0 \tag{2.69}$$

が得られる．この式と式 (2.68) をまとめると，

$$\underbrace{\begin{bmatrix} S^{\dagger} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} \Phi_l \\ \Phi_{l+1} \end{bmatrix}}_{\chi} = z \underbrace{\begin{bmatrix} E - H & -S \\ 1 & 0 \end{bmatrix}}_{B} \underbrace{\begin{bmatrix} \Phi_l \\ \Phi_{l+1} \end{bmatrix}}_{\chi} \tag{2.70}$$

となり，一般化固有値問題 $A\chi = zB\chi$ が得られる．この一般化固有値問題を解くと，固有値 z_i と固有ベクトル χ_i の組 (z_i, χ_i) が最大 $2M$ 組得られる．ここでは，ちょうど $2M$ 個の組が得られた場合について考える．それら $2M$ 個の組のうち，半分の M 個は電極内を右向きに進む波，残り半分は左向きに進む波を表す．右電極の遅延グリーン関数は，チャネルから外へ流れ出る状態から構成すべきであり，右向きの波のみを取り出し，それらの固有値と固有ベクトルとを

$$z_i, \quad \chi_i = \begin{bmatrix} \psi_i \\ z_i\psi_i \end{bmatrix} \quad (i = 1, 2, \ldots, M) \tag{2.71}$$

と表す（左右の判定には基本的には位相因子 z に基づいて行なうことができる．その具体的な方法についてはこの節の最後で述べる）．式 (2.67) で表した電極内の波動方程式の右向き解 Φ_i は一般的に ψ_i の線形結合で表せる．

$$\Phi_l = \sum_i c_i (z_i)^l \psi_i \tag{2.72}$$

ここで，c_i は Φ_l の展開係数である．いま，

$$\Psi_{\mathrm{R}} = \begin{bmatrix} & & & \\ \psi_1 & \psi_2 & \cdots & \psi_M \\ & & & \end{bmatrix}, \; Z_{\mathrm{R}} = \begin{bmatrix} z_1 & & & \\ & z_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & z_M \end{bmatrix}, \; C = \begin{bmatrix} c_1 & & & \\ & c_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & c_M \end{bmatrix} \tag{2.73}$$

なる正方行列 Ψ_{R}, Z_{R}, C を導入する（z_i, ψ_i が右向きの波であることを示すため添字 R を追加した．）すると，式 (2.72) は，$\Phi_l = \Psi_{\mathrm{R}} Z_{\mathrm{R}}^l C$ と表せる．同様にして，$\Phi_{l+1} = \Psi_{\mathrm{R}} Z_{\mathrm{R}}^{l+1} C$ であるので，これら 2 つの式から C を消去して，

$$\Phi_{l+1} = \Psi_{\mathrm{R}} Z_{\mathrm{R}} \Psi_{\mathrm{R}}^{-1} \Phi_l \tag{2.74}$$

が得られる．以下，この式に現れる $\Psi_{\mathrm{R}} Z_{\mathrm{R}} \Psi_{\mathrm{R}}^{-1}$ のように隣同士の波動関数を結ぶ因子をブロッホ因子と呼ぶ．

式 (2.67) を満たす右向きブロッホ解 Φ_l が式 (2.74) を満たすことから，式 (2.66) を満たす $g_{i,j}$ は，

$$g_{N+2,N+1} = \Psi_{\rm R} Z_{\rm R} \Psi_{\rm R}^{-1} g_{N+1,N+1}, \quad g_{N+3,N+1} = [\Psi_{\rm R} Z_{\rm R} \Psi_{\rm R}^{-1}]^2 g_{N+1,N+1} \tag{2.75}$$

を満たすことがわかる．これらの式を式 (2.65) と式 (2.66) に代入すると

$$[E - H - S\Psi_{\rm R} Z_{\rm R} \Psi_{\rm R}^{-1}] g_{N+1,N+1} = 1 \tag{2.76}$$

$$\{-S^\dagger + [E - H - S\Psi_{\rm R} Z_{\rm R} \Psi_{\rm R}^{-1}] \Psi_{\rm R} Z_{\rm R} \Psi_{\rm R}^{-1}\} g_{N+1,N+1} = 0 \tag{2.77}$$

となり，

$$g_{N+1,N+1} = \Psi_{\rm R} Z_{\rm R} \Psi_{\rm R}^{-1} {S^\dagger}^{-1} \tag{2.78}$$

が得られる．この式を用いることにより，$g_{N+1,N+1}$ を有限サイズの行列演算で求めることができ，右側電極の効果を表す自己エネルギー $\Sigma_{\rm R}$ の右下ブロック成分 $\sigma_{\rm R}$（式 (2.63) 参照）も

$$\sigma_{\rm R} = S g_{N+1,N+1} S^\dagger = S\Psi_{\rm R} Z_{\rm R} \Psi_{\rm R}^{-1} \tag{2.79}$$

のように数値計算可能となることがわかる．

同様にすると，左側電極の効果を表す自己エネルギー $\Sigma_{\rm L}$ の左上ブロック成分 $\sigma_{\rm L}$ は

$$\sigma_{\rm L} = S^\dagger g_{0,0} S = S^\dagger \Psi_{\rm L} Z_{\rm L}^{-1} \Psi_{\rm L}^{-1} \tag{2.80}$$

で与えられることがわかる．ここで，$Z_{\rm L}$, $\Psi_{\rm L}$ は左電極内で左向きに進むブロッホ波に関する固有値，固有ベクトルから構成される行列を表す．

最後にブロッホ波の進行方向の判定法について述べる．ブロッホ波は，大きく，進行波とエバネッセント波とに分けることができる．進行波の位相因子は $|z_i| = 1$ であり，エバネッセント波の位相因子は $|z_i| > 1$ もしくは $|z_i| < 1$ である．数値計算では，適当な余裕 $\epsilon = 10^{-8}$ を用いて $||z_i| - 1| < \epsilon$ を満たす波を進行波と判定した．

エバネッセント波の場合　位相因子 z は $\Phi_{l+1} = z\Phi_l$ のように定義されているので，$|z_i| < 1$ が右向き，$|z_i| > 1$ が左向きの波である．

進行波の場合　x 方向の速度 v_x の正負によって進行方向を判定する．すなわち，$v_x > 0$ が右向き，$v_x < 0$ が左向きの波である．速度 v_x は，ブロッホ波 ψ_i から以下のように求めることができる．

ブロッホ波 ψ_i は，式 (2.67) の波動方程式を満たす．

$$S^\dagger z_i^{-1} \psi_i + H\psi_i + S z_i \psi_i = E\psi_i \tag{2.81}$$

この式の両辺に，左から $\psi_i^\dagger$ を掛けると

$$z_i^{-1} \psi_i^\dagger S^\dagger \psi_i + \psi_i^\dagger H \psi_i + z_i \psi_i^\dagger S \psi_i = E|\psi_i|^2 \tag{2.82}$$

が得られる．すなわち，

$$E = \frac{1}{|\psi_i|^2} \left[z_i^{-1} \psi_i^\dagger S^\dagger \psi_i + \psi_i^\dagger H \psi_i + z_i \psi_i^\dagger S \psi_i \right] \tag{2.83}$$

が得られる．この式の右辺で k_x に依存するのは，位相因子 $z = \exp(i a_x k_x)$ のみであるので，速度 v_x は，

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x} = \frac{i a_x}{\hbar |\psi_i|^2} \left[-z_i^{-1} \psi_i^\dagger S^\dagger \psi_i + z_i \psi_i^\dagger S \psi_i \right] \tag{2.84}$$

となる．ここで $z_i^{-1}\psi_i^\dagger S^\dagger \psi_i = (z_i \psi_i^\dagger S \psi_i)^*$ であるので，括弧内は $i2\mathrm{Im}[z_i\psi_i^\dagger S\psi_i]$ となり，

$$v_x = -\frac{2a_x}{\hbar|\psi_i|^2}\mathrm{Im}[z_i\psi_i^\dagger S\psi_i] \tag{2.85}$$

が得られる．この式より，v_x の正負がわかり，進行方向を判定することができる．

2.3.6　グラフェンの場合

自己エネルギーの計算では，一般化固有値問題（式 (2.70)）の計算がしばしばボトルネックとなる．また，グラフェンの場合，単位胞内の A, B, C, D の 4 個の層が互いに最近接相互作用をしているが，そのような場合，右向き（もしくは左向き）のブロッホ波の数が，M より小さくなり，Z，Ψ の構成に工夫が必要となる．この節では，単位胞内の A, B, C, D の 4 個の層が互いに最近接相互作用をしている場合に，効率的に自己エネルギーの計算を行なう手法について述べる [10].

式 (2.67) において，

$$\Phi_l = \begin{bmatrix} \phi_{l,\mathrm{A}} \\ \phi_{l,\mathrm{B}} \\ \phi_{l,\mathrm{C}} \\ \phi_{l,\mathrm{D}} \end{bmatrix} \tag{2.86}$$

と表し，さらに，

$$H(k_y) = \begin{bmatrix} d_\mathrm{A} & s_\mathrm{AB} & 0 & 0 \\ s_\mathrm{AB}^\dagger & d_\mathrm{B} & s_\mathrm{BC} & 0 \\ 0 & s_\mathrm{BC}^\dagger & d_\mathrm{C} & s_\mathrm{CD} \\ 0 & 0 & s_\mathrm{CD}^\dagger & d_\mathrm{D} \end{bmatrix}, \quad S(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_\mathrm{DA} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.87}$$

とおくと，式 (2.67) は

$$s_\mathrm{DA}^\dagger \phi_{l-1,\mathrm{D}} + d_\mathrm{A}\phi_{l,\mathrm{A}} + s_\mathrm{AB}\phi_{l,\mathrm{B}} = E\phi_{l,\mathrm{A}} \tag{2.88}$$
$$s_\mathrm{AB}^\dagger \phi_{l,\mathrm{A}} + d_\mathrm{B}\phi_{l,\mathrm{B}} + s_\mathrm{BC}\phi_{l,\mathrm{C}} = E\phi_{l,\mathrm{B}} \tag{2.89}$$
$$s_\mathrm{BC}^\dagger \phi_{l,\mathrm{B}} + d_\mathrm{C}\phi_{l,\mathrm{C}} + s_\mathrm{CD}\phi_{l,\mathrm{D}} = E\phi_{l,\mathrm{B}} \tag{2.90}$$
$$s_\mathrm{CD}^\dagger \phi_{l,\mathrm{C}} + d_\mathrm{D}\phi_{l,\mathrm{D}} + s_\mathrm{DA}\phi_{l+1,\mathrm{A}} = E\phi_{l,\mathrm{B}} \tag{2.91}$$

となる．ただし，図 2.8 に表す単位胞を定義したグラフェンの場合，$d_\mathrm{A} = d_\mathrm{B} = d_\mathrm{C} = d_\mathrm{D} = 0$，$s_\mathrm{AB} = s_\mathrm{CD} = -t$，$s_\mathrm{BC} = -u^*$，$s_\mathrm{DA} = -u$ である．すなわち，異なる文字も同じ物理量を表し，$d_\alpha, s_{\alpha,\beta}$ ($\alpha, \beta = \mathrm{A}, \mathrm{B}, \mathrm{C}, \mathrm{D}$) は，数値（複素数）となる．しかし，より一般的な場合にも以下の議論が応用できるよう，ここでは，同じ値の物理量にも異なる記号を割り当て，$d_\alpha, s_{\alpha,\beta}$ を行列として扱う．

簡単化のため，$D_\alpha = d_\alpha - E$ とおくと，式 (2.88) から式 (2.91) は，

$$s_\mathrm{DA}^\dagger \phi_{l-1,\mathrm{D}} + D_\mathrm{A}\phi_{l,\mathrm{A}} + s_\mathrm{AB}\phi_{l,\mathrm{B}} = 0 \tag{2.92}$$
$$s_\mathrm{AB}^\dagger \phi_{l,\mathrm{A}} + D_\mathrm{B}\phi_{l,\mathrm{B}} + s_\mathrm{BC}\phi_{l,\mathrm{C}} = 0 \tag{2.93}$$
$$s_\mathrm{BC}^\dagger \phi_{l,\mathrm{B}} + D_\mathrm{C}\phi_{l,\mathrm{C}} + s_\mathrm{CD}\phi_{l,\mathrm{D}} = 0 \tag{2.94}$$
$$s_\mathrm{CD}^\dagger \phi_{l,\mathrm{C}} + D_\mathrm{D}\phi_{l,\mathrm{D}} + s_\mathrm{DA}\phi_{l+1,\mathrm{A}} = 0 \tag{2.95}$$

と表せる．ここで，位相因子 z を導入して，

$$\phi_{l+1,\alpha} = z\phi_{l,\alpha} \tag{2.96}$$

とすると，式 (2.92) から式 (2.95) は

$$\begin{bmatrix} D_{\mathrm{A}} & s_{\mathrm{AB}} & 0 & z^{-1}s_{\mathrm{DA}}^{\dagger} \\ s_{\mathrm{AB}}^{\dagger} & D_{\mathrm{B}} & s_{\mathrm{BC}} & 0 \\ 0 & s_{\mathrm{BC}}^{\dagger} & D_{\mathrm{C}} & s_{\mathrm{CD}} \\ zs_{\mathrm{DA}} & 0 & s_{\mathrm{CD}}^{\dagger} & D_{\mathrm{D}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{l,\mathrm{A}} \\ \phi_{l,\mathrm{B}} \\ \phi_{l,\mathrm{C}} \\ \phi_{l,\mathrm{D}} \end{bmatrix} = 0 \tag{2.97}$$

となる．この式の 1 行目に z を掛け，z を含む項を右辺に移動させると，

$$\mathcal{H}\Phi_l = -zP\Phi_l \tag{2.98}$$

なる一般化固有値問題が得られる．ここで，$\mathcal{H}$, P は以下の式のように定義した．

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & s_{\mathrm{DA}}^{\dagger} \\ s_{\mathrm{AB}}^{\dagger} & D_{\mathrm{B}} & s_{\mathrm{BC}} & 0 \\ 0 & s_{\mathrm{BC}}^{\dagger} & D_{\mathrm{C}} & s_{\mathrm{CD}} \\ 0 & 0 & s_{\mathrm{CD}}^{\dagger} & D_{\mathrm{D}} \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} D_{\mathrm{A}} & s_{\mathrm{AB}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_{\mathrm{DA}} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.99}$$

式 (2.98) の両辺に $P\Phi_l$ を加えると，

$$\mathcal{H}_{\mathrm{pbc}}\Phi_l = -(z-1)P\Phi_l \tag{2.100}$$

が得られる．ここで，$\mathcal{H}_{\mathrm{pbc}} = \mathcal{H} + P$ は，

$$\mathcal{H}_{\mathrm{pbc}} = \begin{bmatrix} D_{\mathrm{A}} & s_{\mathrm{AB}} & 0 & s_{\mathrm{DA}}^{\dagger} \\ s_{\mathrm{AB}}^{\dagger} & D_{\mathrm{B}} & s_{\mathrm{BC}} & 0 \\ 0 & s_{\mathrm{BC}}^{\dagger} & D_{\mathrm{C}} & s_{\mathrm{CD}} \\ s_{\mathrm{DA}} & 0 & s_{\mathrm{CD}}^{\dagger} & D_{\mathrm{D}} \end{bmatrix} \tag{2.101}$$

であり，A，B，C，D の 4 層からなる系に周期的境界条件を課した場合のハミルトニアンに相当する．$\mathcal{H}_{\mathrm{pbc}}$ の固有値が 0 でない場合，逆行列 $\mathcal{H}_{\mathrm{pbc}}^{-1}$ が存在する．そこで，式 (2.100) の両辺に $\mathcal{H}_{\mathrm{pbc}}^{-1}$ を掛けて，$(z-1)$ で割ると，一般化固有値問題は，

$$M\Phi_l = \lambda\Phi_l \tag{2.102}$$

なる固有値問題に帰着する [10]．ここで，

$$M = \mathcal{H}_{\mathrm{pbc}}^{-1}P = -[\mathcal{H}+P]^{-1}P \tag{2.103}$$

$$\lambda = (z-1)^{-1} \tag{2.104}$$

である．さらに，P の構造 [式 (2.99)] より，行列 M は，次の式のように，1 列目と 2 列目のブロックのみに値をもつことがわかる．

$$M = \begin{bmatrix} M_{\mathrm{AA}} & M_{\mathrm{AB}} & 0 & 0 \\ M_{\mathrm{BA}} & M_{\mathrm{BB}} & 0 & 0 \\ M_{\mathrm{CA}} & M_{\mathrm{CB}} & 0 & 0 \\ M_{\mathrm{DA}} & M_{\mathrm{DB}} & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.105}$$

したがって，式 (2.102) で表される固有値問題は，さらに簡略化され，

$$\begin{bmatrix} M_{\mathrm{AA}} & M_{\mathrm{AB}} \\ M_{\mathrm{BA}} & M_{\mathrm{BB}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{l,\mathrm{A}} \\ \phi_{l,\mathrm{B}} \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \phi_{l,\mathrm{A}} \\ \phi_{l,\mathrm{B}} \end{bmatrix} \tag{2.106}$$

となる．この固有値問題を解くことにより，ブロッホ問題の固有値 $z = \lambda^{-1} + 1$ と，固有ベクトルの A, B 成分とが得られる．固有ベクトルの残りの C, D 成分は，以下の式から計算することができる．

$$\begin{bmatrix} \phi_{l,\mathrm{C}} \\ \phi_{l,\mathrm{D}} \end{bmatrix} = \lambda^{-1} \begin{bmatrix} M_{\mathrm{CA}} & M_{\mathrm{CB}} \\ M_{\mathrm{DA}} & M_{\mathrm{DB}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{l,\mathrm{A}} \\ \phi_{l,\mathrm{B}} \end{bmatrix} \tag{2.107}$$

式 (2.106)，式 (2.107) より，ブロッホ問題に対する位相因子 z とブロッホ波 ψ が得られる．それから，右向きの波もしくは左向きの波を取り出すことにより，左右の電極におけるグリーン関数のチャネルとの接続部分が得られ，左右の電極に関する自己エネルギーが得られる．以下で，その手法について概略を述べる．

はじめに，右側の電極に関するグリーン関数 $g_{\mathrm{R}}(E) = [E - H_{\mathrm{R}} + \mathrm{i}0]^{-1}$ について考える．$g_{\mathrm{R}}(E)$ を

$$g_{\mathrm{R}}(E) = \begin{bmatrix} g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{AB}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{AC}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{AD}} & g_{N+1,N+2,\mathrm{AA}} & \cdots \\ g_{N+1,N+1,\mathrm{BA}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{BB}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{BC}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{BD}} & g_{N+1,N+2,\mathrm{BA}} & \cdots \\ g_{N+1,N+1,\mathrm{CA}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{CB}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{CC}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{CD}} & g_{N+1,N+2,\mathrm{CA}} & \cdots \\ g_{N+1,N+1,\mathrm{DA}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{DB}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{DC}} & g_{N+1,N+1,\mathrm{DD}} & g_{N+1,N+2,\mathrm{DA}} & \cdots \\ g_{N+2,N+1,\mathrm{AA}} & g_{N+2,N+1,\mathrm{AB}} & g_{N+2,N+1,\mathrm{AC}} & g_{N+2,N+1,\mathrm{AD}} & g_{N+2,N+2,\mathrm{AA}} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

と表す．ここで，$g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}}$ などは，d_{A} などと同じサイズの行列である（いま考察しているグラフェンの場合，サイズは 1×1 となり，単なる複素数となる）．$[E - H_{\mathrm{R}} + \mathrm{i}0] g_{\mathrm{R}} = 1$ から，右側の電極を表す自己エネルギーの計算に必要な $g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}}$ に関連する式を取り出す．

$$(E - d_{\mathrm{A}}) g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}} - s_{\mathrm{AB}} g_{N+1,N+1,\mathrm{BA}} = 1 \tag{2.108}$$

$$-s_{\mathrm{AB}}^{\dagger} g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}} + (E - d_{\mathrm{B}}) g_{N+1,N+1,\mathrm{BA}} - s_{\mathrm{BC}} g_{N+1,N+1,\mathrm{CA}} = 0 \tag{2.109}$$

$$-s_{\mathrm{BC}}^{\dagger} g_{N+1,N+1,\mathrm{BA}} + (E - d_{\mathrm{C}}) g_{N+1,N+1,\mathrm{CA}} - s_{\mathrm{CD}} g_{N+1,N+1,\mathrm{DA}} = 0 \tag{2.110}$$

$$-s_{\mathrm{CD}}^{\dagger} g_{N+1,N+1,\mathrm{CA}} + (E - d_{\mathrm{D}}) g_{N+1,N+1,\mathrm{DA}} - s_{\mathrm{DA}} g_{N+2,N+1,\mathrm{AA}} = 0 \tag{2.111}$$

式 (2.111) において，$g_{N+2,N+1,\mathrm{AA}}$ は，ブロッホ因子 $\Psi_{\mathrm{R,A}} Z_{\mathrm{R}} \Psi_{\mathrm{R,A}}^{-1}$ を用いて $g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}}$ で表せる．

$$g_{N+2,N+1,\mathrm{AA}} = \Psi_{\mathrm{R,A}} Z_{\mathrm{R}} \Psi_{\mathrm{R,A}}^{-1} g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}} \tag{2.112}$$

ここで，$\Psi_{\mathrm{R,A}}$ は，式 (2.106) から得られる右向きブロッホ解 $\phi_{l,\mathrm{A}}$ から構成される行列，Z_{R} は対応する位相因子 z_{R} から構成される行列である（グラフェンの場合，$\Psi_{\mathrm{R,A}}$ と Z_{R} とは単なる複素数となるので，$g_{N+2,N+1,\mathrm{AA}} = z_{\mathrm{R}} g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}}$ となる）．式 (2.112) の関係を用いると，式 (2.108) から式 (2.111) は，

$$\begin{bmatrix} E - d_{\mathrm{A}} & -s_{\mathrm{AB}} & & \\ -s_{\mathrm{AB}}^{\dagger} & E - d_{\mathrm{B}} & -s_{\mathrm{BC}} & \\ & -s_{\mathrm{BC}}^{\dagger} & E - d_{\mathrm{C}} & -s_{\mathrm{CD}} \\ -s_{\mathrm{DA}} \Psi_{\mathrm{R,A}} Z_{\mathrm{R}} \Psi_{\mathrm{R,A}}^{-1} & & -s_{\mathrm{CD}}^{\dagger} & E - d_{\mathrm{D}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}} \\ g_{N+1,N+1,\mathrm{BA}} \\ g_{N+1,N+1,\mathrm{CA}} \\ g_{N+1,N+1,\mathrm{DA}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.113}$$

となる．この連立方程式を解くことにより，$g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}}$ を求めることができる．さらに，右側電極の効果を表す自己エネルギー Σ_{R} の右下ブロック成分 σ_{R} は，つぎの式から計算することができる．

$$\sigma_{\mathrm{R}} = s_{\mathrm{DA}} g_{N+1,N+1,\mathrm{AA}} s_{\mathrm{DA}}^{\dagger} \tag{2.114}$$

左側の電極に関するグリーン関数 $g_{\mathrm{L}}(E) = [E - H_{\mathrm{L}} + \mathrm{i}0]^{-1}$ および左側電極の効果を表す自己エネルギー Σ_{L} も同様の議論でもとめることができる．

左側の電極に関するグリーン関数 $g_{\mathrm{L}}(E)$ の右下成分 $g_{0,0,\mathrm{DD}}$ は，次の連立方程式を解くことにより求めることができる．

$$\begin{bmatrix} E - d_{\mathrm{A}} & -s_{\mathrm{AB}} & & -s_{\mathrm{DA}}^{\dagger} \Psi_{\mathrm{L,D}} Z_{\mathrm{L}}^{-1} \Psi_{\mathrm{L,D}}^{-1} \\ -s_{\mathrm{AB}}^{\dagger} & E - d_{\mathrm{B}} & -s_{\mathrm{BC}} & \\ & -s_{\mathrm{BC}}^{\dagger} & E - d_{\mathrm{C}} & -s_{\mathrm{CD}} \\ & & -s_{\mathrm{CD}}^{\dagger} & E - d_{\mathrm{D}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{0,0,\mathrm{AD}} \\ g_{0,0,\mathrm{BD}} \\ g_{0,0,\mathrm{CD}} \\ g_{0,0,\mathrm{DD}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.115}$$

さらに，左側電極の効果を表す自己エネルギー Σ_{L} の左上ブロック成分 σ_{L} は，次の式から計算することができる．

$$\sigma_{\mathrm{L}} = s_{\mathrm{DA}}^{\dagger} g_{0,0,\mathrm{DD}} s_{\mathrm{DA}} \tag{2.116}$$

2.3.7 状態密度

式 (2.55) で示した通り，左右に一様・周期的な電極が接続された，N 個の単位胞からなるチャネルの，ある k_y に関するグリーン関数は，

$$G_{k_y}(E) = [E - H_{\mathrm{C}} - \Sigma_{\mathrm{L},k_y}(E) - \Sigma_{\mathrm{R},k_y}(E)]^{-1} \tag{2.117}$$

で与えられる．ここで，k_y 依存性を示すため，添字に k_y を加えた．また，チャネル部分の単位面積あたりの状態密度は，次の式で計算できる．

$$\rho(E) = -\frac{g_s}{\pi L_x} \int \frac{dk_y}{2\pi} \mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\, G_{k_y}(E) \tag{2.118}$$

2.2.4 節で求めた状態密度の式 (2.30) は，デルタ関数を含んでいるため数値計算の際に，エネルギー方向に幅をもつガウス型関数の導入が必要であるが，式 (2.118) を用いると幅の導入は必要ない．式 (2.118) を用いて求めたグラフェンの状態密度を図 2.11(a) に示す．$E = 0$ 付近では，線形のエネルギー分散に起因して，グラフェンの状態密度は線形となり，$\rho(E) = 2|E|/(\pi\hbar^2 v_0^2)$ で近似できる（図 2.11(a) の赤破線）．ここで，v_0 は，グラフェンのフェルミ速度であり，式 (2.38) で与えられる．

2.3.8 透過関数

チャネルのグリーン関数 $G_{k_y}(E)$ から，次の式で波数 k_y における透過関数 $T_{k_y}(E)$ を求めることができる．

$$T_{k_y}(E) = \mathrm{Tr}[\Gamma_{\mathrm{L},k_y}(E) G_{k_y}(E) \Gamma_{\mathrm{R},k_y}(E) G_{k_y}^{\dagger}(E)] \tag{2.119}$$

ここで，

$$\Gamma_{\alpha,k_y}(E) = \mathrm{i}[\Sigma_{\alpha,k_y}(E) - \Sigma_{\alpha,k_y}^{\dagger}(E)], \quad (\alpha = \mathrm{L}, \mathrm{R}) \tag{2.120}$$

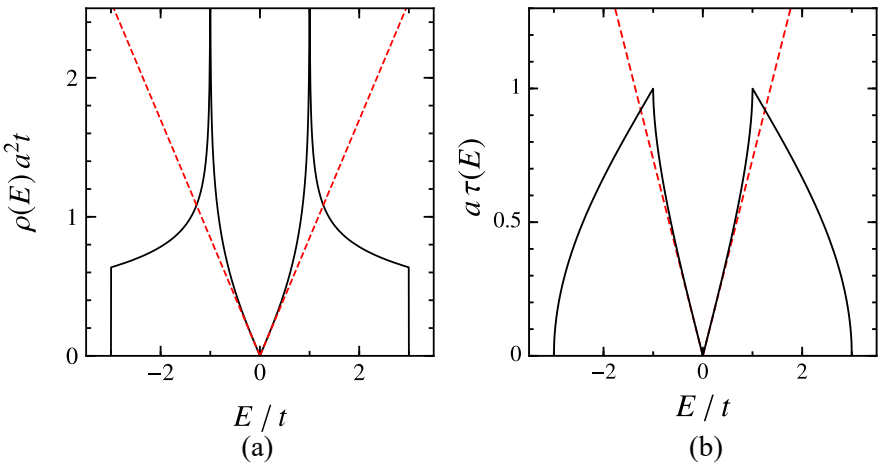


図 2.11: (a) 式 (2.118) を用いて計算したグラフェンの状態密度．$E = 0$ 付近でのグラフェンの状態密度は，線形のエネルギー分散に起因して線形となり，$\rho(E) = 2|E|/(\pi\hbar^2 v_0^2)$ で近似できる（赤破線）．ここで，v_0 は，グラフェンのフェルミ速度である．(b) 式 (2.121) を用いて計算したグラフェンの透過関数 $\tau(E)$．$E = 0$ 付近でのグラフェンの透過関数は，線形のエネルギー分散に起因して線形となり，$\tau(E) = (g_{\rm v}/2\pi)(2|E|/\hbar v_0)$ で近似できる（赤破線）．

である．また，y 方向の単位幅あたりの透過関数 $\tau(E)$ は，

$$\tau(E) = \int \frac{dk_y}{2\pi} T_{k_y}(E) \tag{2.121}$$

で与えられる．本論文では，$\tau(E)$ を単に透過関数と呼び，主に $\tau(E)$ を用いて輸送特性の解析を行なう．チャネルのグリーン関数 $G_{k_y}(E)$ は，再帰グリーン関数法を用いて計算を行なった [15]．式 (2.121) を用いて求めたグラフェンの透過関数 $\tau(E)$ を図 2.11(b) に示す．$E = 0$ 付近では，線形のエネルギー分散に起因して，グラフェンの透過関数は線形となり，$\tau(E) = (g_{\rm v}/2\pi)(2|E|/\hbar v_0)$ で近似できる（図 2.11(b) の赤破線）．

参考文献

[1] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems,* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1995).

[2] 三好旦六，小川真人，土屋英昭，「ナノエレクトロニクスの基礎」，培風館 (2007).

[3] R. Chris, W.R. Frensley, G. Klimeck, and R. Lake, Phys. Rev. B, **52**, 2754 (1995).

[4] C. Rivas and R. Lake, Phys. Stat. Sol. B, **239**, 94 (2003).

[5] T. Xia, L.F. Register, and S.K. Banerjee, IEEE Trans. Electron. Dev., **50**, 1511 (2003).

[6] A. Pecchia and A. Di Carlo, Rep. Prog. Phys., **67**, 1497 (2004).

[7] F. Sacconi, A. Di Carlo, P. Lugli, M.Städele, and J-M.Jancu, IEEE Trans. Electron. Dev., **51**, 741 (2004).

[8] M. Luisier and G. Klimeck Phys. Rev. B, **80**, 155430 (2009).

[9] J. E. Fonseca, T. Kubis, M. Povolotskyi, B. Novakovic, A. Ajoy, G. Hegde, H. Ilatikhameneh, Z. Jiang, P. Sengupta, Y. Tan, and G. Klimeck J. Comput. Electron, **12**, 592 (2013).

[10] M. Luisier, A. Schenk, W. Fichtner, and G. Klimeck, Phys. Rev. B, **74**, 205323 (2006).

[11] A. Svizhenko, P. W. Leu and K. Cho, Phys. Rev. B, **75**, 125417 (2007).

[12] V. M. Pereira, A. H. C. Neto, and N. M. R. Peres, Phys. Rev. B, **80**, 045401 (2009)

[13] 安藤 恒也，中西 毅，「カーボンナノチューブと量子効果」，丸善株式会社 (1983).

[14] 浜口 智尋，森 伸也，「電子物性 ―電子デバイスの基礎―」，朝倉書店 (2014).

[15] R. Lake, G. Klimeck, R.C. Bowen, and D. Jovanovic, J. Appl. Phys., **81**, 7845 (1991).

第 3 章

ナノリボン列の電子状態解析

3.1　あらまし

グラフェンなどの 2 次元材料を細いリボン状に切り出したものは，ナノリボンと呼ばれ [1–3]，端の存在により，電子状態が大きく変調される [3–12] ．代表的な端の形状として，ジグザグ端ナノリボンとアームチェア端ナノリボンが存在する．ジグザグ端ナノリボンは，グラフェンには存在しない平らなバンドがフェルミ準位に現れ，アームチェア端ナノリボンでは，リボン幅に依存して，半導体と金属に分かれるといった特徴がある [4, 10, 11]．トランジスタ応用という観点では，アームチェア端ナノリボンのバンドギャップ形成は，高い ON/OFF 比を実現できるという点で有利である [13, 14]．近年，図 3.1 に示すような多数のナノリボンが横方向に周期的に並んだ構造が実験的に作製されている [15–17]．実現されているナノリボン列において，隣接ナノリボン間の相互作用の有無は明らかにされてはいない．しかし，リボン間相互作用は系の電子状態に大きな影響を与えると考えられるので，電子状態に与える影響を調べることは興味深い．そこで，本章では，強結合近似法を用いてナノリボン列の電子状態を解析し，隣接ナノリボン間相互作用が系の電子状態に与える影響について調べた [18]．

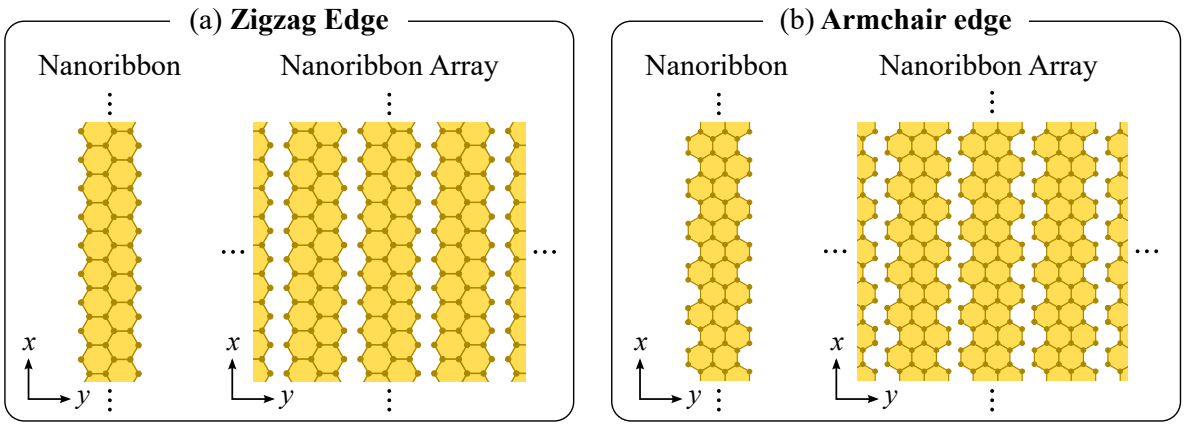


図 3.1: (a) ジグザグ端をもつナノリボンとナノリボン列．(b) アームチェア端をもつナノリボンとナノリボン列．x 方向に沿ったナノリボンが y 方向に並んだ構造をナノリボン列と呼ぶ．

3.2　電子状態解析モデル

ジグザグ端ナノリボン列およびアームチェア端ナノリボン列の電子状態解析モデルをそれぞれ図 3.2(a) および (b) に示す．x 軸に沿ったナノリボン（灰色部分）が，y 方向に周期的に並んだ構造である．ジグザグ端ナノリボン列では，ナノリボン内の x 軸に沿ったジグザグ線の本数をリボン幅 N と定義した．図 3.2(a) は，幅 $N = 5$ のジグザグ端ナノリボン列である．a は格子定数であり，単位胞の大きさは $L_x \times L_y = a \times \sqrt{3}Na$ である．一方，アームチェア端ナノリボン列では，x 方向に結合した 2 量体の線が y 軸に沿って並んだ数をリボン幅 N と定義した．図 3.2(b) は，幅 $N = 9$ のアームチェア端ナノリボン列である．単位胞の大きさは $L_x \times L_y = \sqrt{3}a \times Na$ である．本研究では，最近接原子間の p_z 軌道の相互作用のみを考慮した強結合近似法を用いて電子状態を解析した．その際，ナノリボン内の原子間の移動積分を t，隣接するナノリボン間の移動積分を γ とした．γ を 0 から t まで変化させることにより，孤立したナノリボン（$\gamma = 0$）から，バルクグラフェン（$\gamma = t$）まで連続的に系を変化させることができる．

次に，計算に用いるハミルトニアン行列を示す．ジグザグ端ナノリボン列，アームチェア端ナノリボン列ともに，大きさ $L_x \times L_y$ の単位胞は，上下左右の隣り合う 4 つの単位胞と相互作用をもつ．したがっ

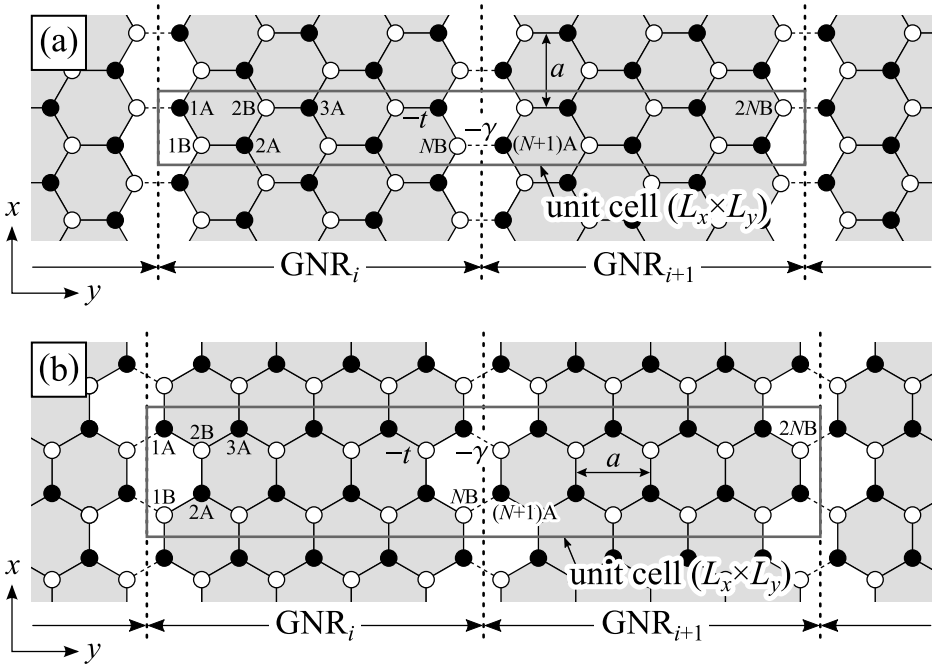


図 3.2: (a) ジグザグ端ナノリボン列と (b) アームチェア端ナノリボン列の電子状態解析モデル．x 軸に沿ったナノリボン（灰色部分）が，y 方向に周期的に並んでいる．両モデルとも，リボン間の移動積分を γ，リボン内の原子間の移動積分を t とおいた．ジグザグ端ナノリボン列では，ナノリボン内の x 軸に沿ったジグザグ線の本数をリボン幅 N と定義した．本図は，$N = 5$ である．a は格子定数であり，単位胞の大きさは $L_x \times L_y = a \times \sqrt{3}Na$ である．一方，アームチェア端ナノリボン列では，x 方向に結合した 2 量体の線が y 軸に沿って並んだ数をリボン幅 N と定義した．本図は，$N = 9$ である．単位胞の大きさは $L_x \times L_y = \sqrt{3}a \times Na$ である．

て，ナノリボン列のハミルトニアン行列は以下の式で表される．

$$H(\boldsymbol{k}) = H_0 + T_{\mathrm{T}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x L_x} + T_{\mathrm{B}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_x L_x} + T_{\mathrm{R}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y L_y} + T_{\mathrm{L}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y L_y} \tag{3.1}$$

ここで，$\boldsymbol{k}$ $[= (k_x, k_y)]$ は波数ベクトルを表す．H_0 は孤立した単位胞のハミルトニアン行列を表す．T_{T}, T_{B}, T_{R} および T_{L} は，それぞれ，孤立した単位胞とそれに隣接する上（$+x$ 方向），下（$-x$ 方向），右（$+y$ 方向）および左（$-y$ 方向）の単位胞との相互作用を表す行列である．1 つの炭素原子に 1 つの p_z 軌道をもつと仮定したので，行列 H_0 および T_m $(m = \mathrm{T}, \mathrm{B}, \mathrm{R}, \mathrm{L})$ の大きさは $4N \times 4N$ である．$4N$ は単位胞内の原子数であり，ジグザグ端ナノリボン列，アームチェア端ナノリボン列ともに $4N$ である．ジグザグ端ナノリボン列における H_0 および T_m の行列要素を以下に示す．指数 (i, j) を用いて i 行 j 列目の行列要素を表した．$i, j = 1, 2, \ldots, 4N$ である．

$$[H_0]_{ij} = \begin{cases} -t & i = j-1 \ (j \neq 2N+1) \\ & \text{または } i = j+1 \ (j \neq 2N) \\ -\gamma & (i,j) = (2N, 2N+1),\ (2N+1, 2N) \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \tag{3.2}$$

$$[T_{\mathrm{T}}]_{ij} = \begin{cases} -t & (i,j) = (4p-2, 4p-3),\ (4p-1, 4p) \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \tag{3.3}$$

$$[T_{\mathrm{B}}]_{ij} = [T_{\mathrm{T}}]_{ji} \tag{3.4}$$

$$[T_{\mathrm{R}}]_{ij} = \begin{cases} -\gamma & (i,j) = (1, 4N) \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \tag{3.5}$$

$$[T_{\mathrm{L}}]_{ij} = [T_{\mathrm{R}}]_{ji} \tag{3.6}$$

ここで，$p = 1, 2, \ldots, N$ とした．同様に，アームチェア端ナノリボン列における H_0 と T_m を以下に示す．$i, j = 1, 2, \ldots, 4N$ である．

$$[H_0]_{ij} = \begin{cases} -t & (i,j) = (4p-1, 4p),\ (4p, 4p-1) \\ & \text{または } i = j-2 \ (j \neq 2N+1,\ 2N+2) \\ & \text{または } i = j+2 \ (j \neq 2N-1,\ 2N) \\ -\gamma & (i,j) = (2N, 2N+2),\ (2N-1, 2N+1) \\ & \text{または } (2N+1, 2N-1),\ (2N+2, 2N) \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \tag{3.7}$$

$$[T_{\mathrm{T}}]_{ij} = \begin{cases} -t & (i,j) = (4p-2, 4p-3) \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \tag{3.8}$$

$$[T_{\mathrm{B}}]_{ij} = [T_{\mathrm{T}}]_{ji} \tag{3.9}$$

$$[T_{\mathrm{R}}]_{ij} = \begin{cases} -\gamma & (i,j) = (1, 4N-1),\ (2, 4N) \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \tag{3.10}$$

$$[T_{\mathrm{L}}]_{ij} = [T_{\mathrm{R}}]_{ji} \tag{3.11}$$

ここで，$p = 1, 2, \ldots, N$ とした．

3.3　ジグザグ端ナノリボン列の電子状態

ジグザグ端ナノリボン列の電子状態を計算し，解析した結果について説明する．

3.3.1　バンド構造

リボン幅 $N = 5$ のジグザグ端ナノリボン列において，$\gamma = 0$，$0.5t$，t におけるバンド構造をそれぞれ図 3.3(a)，(b)，(c) に示す．各図の左パネルは E-k_y 分散，右パネルは E-k_x 分散を表す．各図のシアン色の縦点線は同じ座標 (k_x, k_y) を通る．すなわち，左パネルの E-k_y 分散は，右パネルにシアン色の縦点線で示した k_x における E-k_y 分散である．同様に，右パネルの E-k_x 分散は，左パネルにシアン色の縦点線で示した k_y における E-k_x 分散である．

孤立したジグザグ端ナノリボンの場合（$\gamma = 0$），図 3.3(a) の k_x 方向のバンド構造に示すように，平らなバンドが $E = 0$ に現れる．平らなバンドにおける電子状態は，$k_x = \pi/L_x$ で波動関数が完全に端原子に局在するため，エッジ状態と呼ばれる [10,11]．一方，バルクグラフェンの場合（$\gamma = t$），図 3.3(c) に示すように，折り返されたディラック点が，$(k_x, k_y) = (\pm 2\pi/3L_x, 0)$ に現れる．これらの中間の $\gamma = 0.5t$ で弱く結合した系では，図 3.3(b) に示すように，ほぼ平らな分散とディラック型の分散とが同時に現れることがわかった．$\gamma = 0.5t$ のとき，ほぼ平らな分散は $(k_x, k_y) = (\pm\pi/L_x, 0)$ の $E = \pm 0.5t$ を頂点にして現れることがわかった．ディラック点は，バルクグラフェンと同様に $E = 0$ の $k_y = 0$ 線上に現れるが，k_x 方向にはバルクグラフェンのとき（$k_x = \pm 2\pi/3L_x$）と比べてバンド端方向に移動することがわかった．

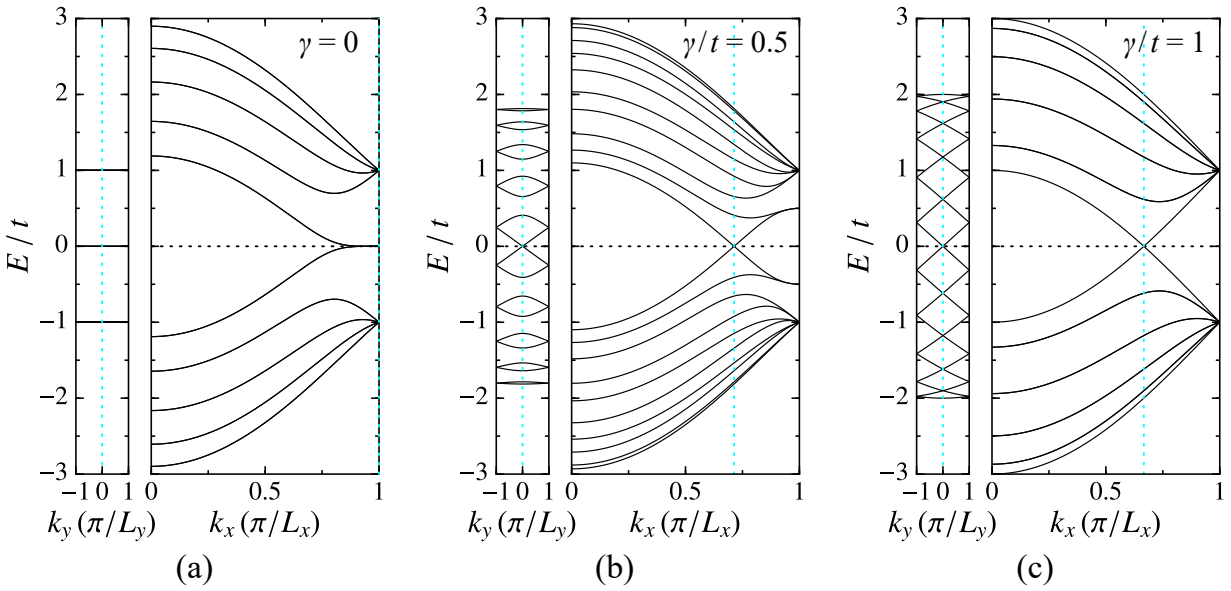


図 3.3: (a) $\gamma = 0$, (b) $0.5\,t$, (c) t のジグザグ端ナノリボン列におけるバンド構造．リボン幅は $N = 5$ とした．各図の左パネルは k_y 方向，右パネルは k_x 方向のバンド構造を表す．各図におけるシアンの縦点線は同じ (k_x,k_y) を通る．

3.3.2　バンド構造のリボン間結合強度依存性

バンド構造のリボン間結合強度 γ 依存性を詳しく調べるために，γ の値を $\gamma/t = 0$，0.25，0.5，0.75，1 と変化させて計算したバンド構造を図 3.4 に示す．リボン幅は $N = 5$ とし，$k_y = 0$ における k_x 方向のバンド構造をプロットした．また，端原子における波動関数の振幅の 2 乗 $|\psi_{\mathrm{edge}}|^2$ の値で線の色を変化させた．端原子とは，各ナノリボンの端の原子であり，$N = 5$ のとき，端原子は 1A，5B，6A，10B の原子である（図 3.2(a) 参照）．赤色は，波動関数が端原子に完全に局在している状態（$|\psi_{\mathrm{edge}}|^2 = 1$）を表している．図 3.4(a) に示すように，孤立したジグザグ端ナノリボン（$\gamma = 0$）において $E = 0$ に現れる平らなバンドでは，波動関数が端原子に局在している様子がわかる（エッジ状態）．一方，図 3.4(e) に示すように，バルクグラフェン（$\gamma = t$）では，波動関数は一様に分布しているため，局在した状態は見られない．波動関数が一様に分布している場合，$|\psi_{\mathrm{edge}}|^2$ は，全原子数に対する端原子数の割合と等しくなるため，$N = 5$ のとき，$|\psi_{\mathrm{edge}}|^2 = 0.2$ で一定となる．図 3.4(b)–(d) に示すように，$0 < \gamma < t$ で弱く結合した系では必ず，ほぼ平らな分散とディラック型の分散とが同時に現れることがわかった．ほぼ平らな分散は必ず，$(k_x, k_y) = (\pm\pi/L_x, 0)$ の $E = \pm\gamma$ を頂点にして出現し，端原子に局在した状態を示すことがわかった．ディラック点は，$\gamma = t$ のとき $k_x = \pm 2\pi/3L_x$ に現れ，γ の値を小さくしていくと，バンド端（$k_x = \pm\pi/L_x$）へ移動していくことがわかった．

3.3.3　局所状態密度

ほぼ平らな分散が端原子に波動関数が局在した状態に起因していることは，端原子における局所状態密度からも確認することができる．$N = 5$，$\gamma = 0.5t$ のジグザグ端ナノリボン列における状態密度を

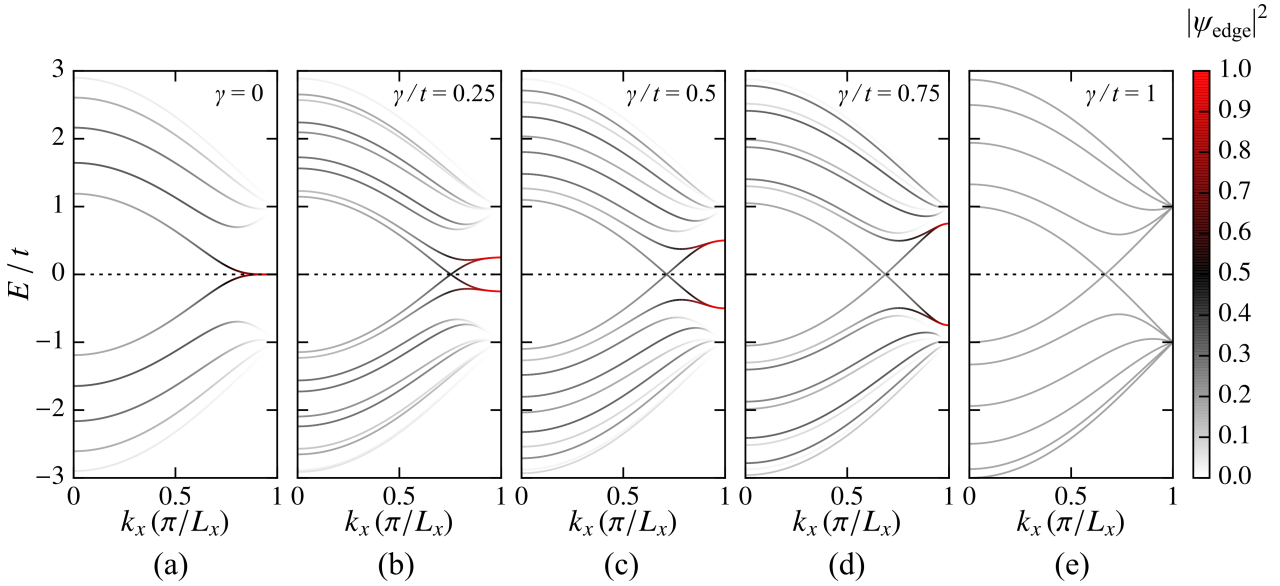


図 3.4: (a) $\gamma/t = 0$，(b) 0.25，(c) 0.5，(d) 0.75，(e) 1 における $N = 5$ のジグザグ端ナノリボン列の k_x 方向のバンド構造．$k_y = 0$ とした．線の色は，端原子における波動関数の振幅の 2 乗（$|\psi_{\mathrm{edge}}|^2$）の値で変化させた．

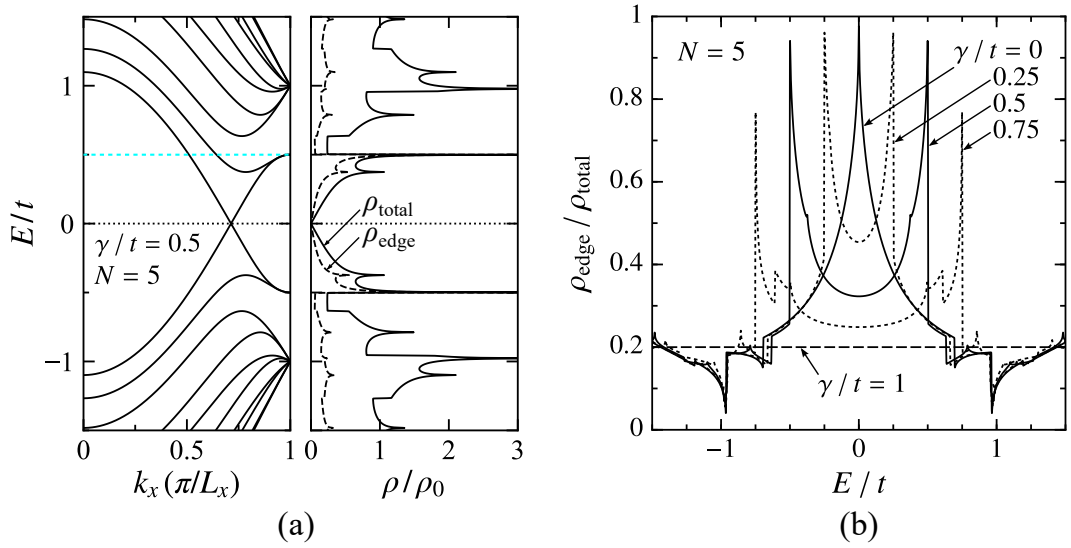


図 3.5: (a) $N = 5$, $\gamma/t = 0.5$ のジグザグ端ナノリボン列におけるバンド構造 [左] と状態密度 [右]．実線が全状態密度 ρ_{total}，破線が端原子における局所状態密度 ρ_{edge} を表す．ρ_{total}，ρ_{edge} ともに $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．(b) 端原子における局所状態密度 ρ_{edge} を全状態密度 ρ_{total} で規格化してプロットした図．$N = 5$ のジグザグ端ナノリボン列において $\gamma/t = 0$，0.25，0.5，0.75，1 と変化させて計算を行なった．

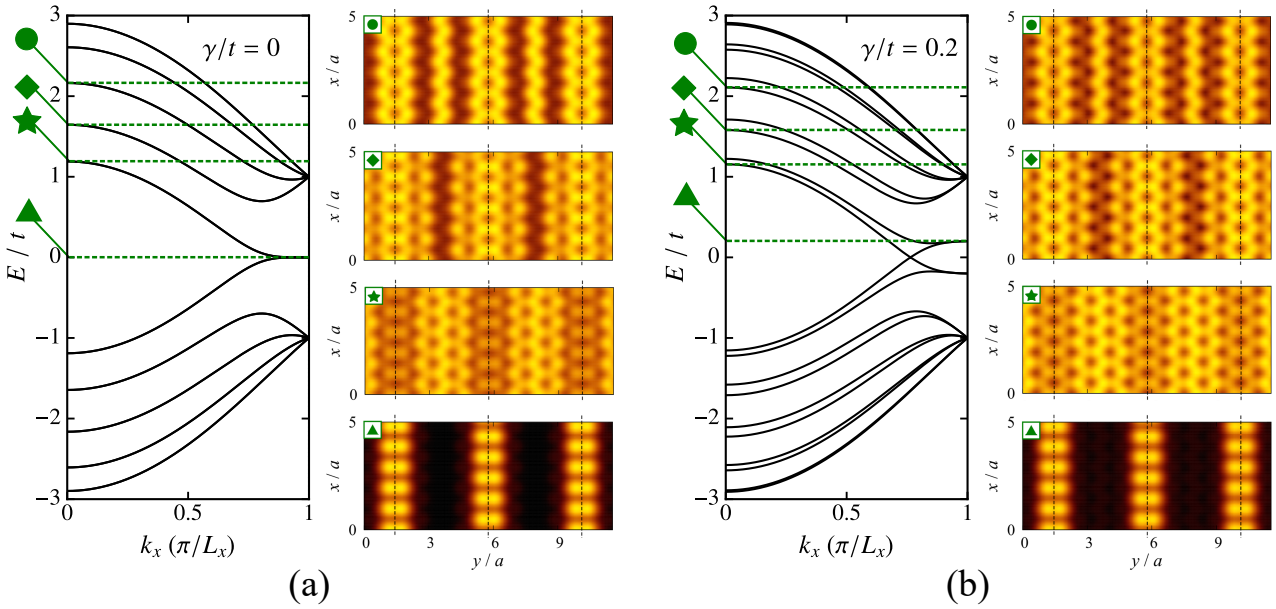


図 3.6: (a) $\gamma = 0$ (b) $\gamma = 0.2t$ のジグザグ端ナノリボン列における擬局所状態密度．$N = 5$ とした．バンド構造に点線で示したエネルギーにおける擬局所状態密度を計算した．

図 3.5(a) に示す．左パネルがバンド構造，右パネルが状態密度を表す．右パネルにおける実線は全状態密度 ρ_{total}，破線は端原子における局所状態密度 ρ_{edge} を表す．ρ_{total} は式 (2.32) を，ρ_{edge} は式 (2.34) を用いて計算を行なった．ρ_{total}，ρ_{edge} ともに $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．ほぼ平らな分散が現れる $E = \pm 0.5t$ における状態密度は，ρ_{total}，ρ_{edge} ともに $3\rho_0$ を超える高いピーク値をもつ．ρ_{edge} を ρ_{total} で規格化してプロットしたものを図 3.5(b) に示す．$N = 5$ のジグザグ端ナノリボン列において，$\gamma/t = 0$,

0.25，0.5，0.75，1 と変化させて計算を行なった．$\gamma/t = 0.5$ における $\rho_{\rm edge}/\rho_{\rm total}$ の値は，図 3.5(a) 右パネルに破線で示された $\rho_{\rm edge}$ を，実線で示された $\rho_{\rm total}$ で割った値を示している．値が 1 に近いほど端原子に波動関数が局在していることを示している．バルクグラフェンのとき（$\gamma = t$），波動関数は一様であるため $\rho_{\rm edge}/\rho_{\rm total} = 1/N$（$N = 5$ のとき $\rho_{\rm edge}/\rho_{\rm total} = 0.2$）となる．$\gamma < t$ のとき，$\rho_{\rm edge}/\rho_{\rm total}$ は $E = \pm\gamma$ でピーク値 (≈ 1) をもっていることがわかる．図 3.4 に示したように，$E = \pm\gamma$ は，ほぼ平らな分散が現れるエネルギーに対応する．したがって，ほぼ平らな分散は端原子に局在した状態に起因していることが局所状態密度から確かめられた．$0 < \gamma < 1$ における $\rho_{\rm edge}/\rho_{\rm total}$ のピーク値は 1 よりも小さい．これは，$E = \pm\gamma$ において，端原子に局在した状態である平らな分散以外の状態が存在するためである．例えば，$\gamma = 0.5t$ のとき，図 3.5(a) 左パネルに示すように，$E = 0.5t$（シアン色点線）のエネルギーには，平らな分散以外にも $k_x = 0.5\pi/L_x$ 付近に状態をもっていることがわかる．

$N = 5$ のジグザグ端ナノリボン列における $\gamma = 0$ および $0.2t$ のときの擬局所状態密度をそれぞれ図 3.6(a) および (b) に示す．式 (2.35) を用いて，擬局所状態密度の計算を行なった．各図のバンド図中に破線で示したエネルギーにおける擬局所状態密度をプロットした．各擬局所状態密度図中の黒縦点線はナノリボン同士の結合部分を表す．$\gamma = 0$ のとき，平らなバンドが現れるフェルミ準位では，ナノリボンの端原子における擬局所態密度の値が高くなっており，平らなバンドにおいて波動関数が端原子に局在していることがわかる（図 3.6(a) の三角印）．$\gamma = 0.2t$ では，$\gamma = 0$ と同様に，平らなバンドで波動関数が端原子に局在していることがわかった（図 3.6(b) の三角印）．

3.3.4　バンド構造のリボン幅依存性

次に，ほぼ平らな分散とディラック型の分散とが同時に現れる特徴のリボン幅 N 依存性を調べるために，リボン幅を変化させて計算を行なったバンド構造を図 3.7 に示す．$\gamma = 0.5\,t$ で固定し，リボン幅を $N = 5$，10，30 と変化させたときの k_x 方向のバンド構造を示している．リボン幅 N を大きくすると，バンドの本数が増加していくことがわかる．しかし，リボン幅によらず，ほぼ平らな分散とディラック型

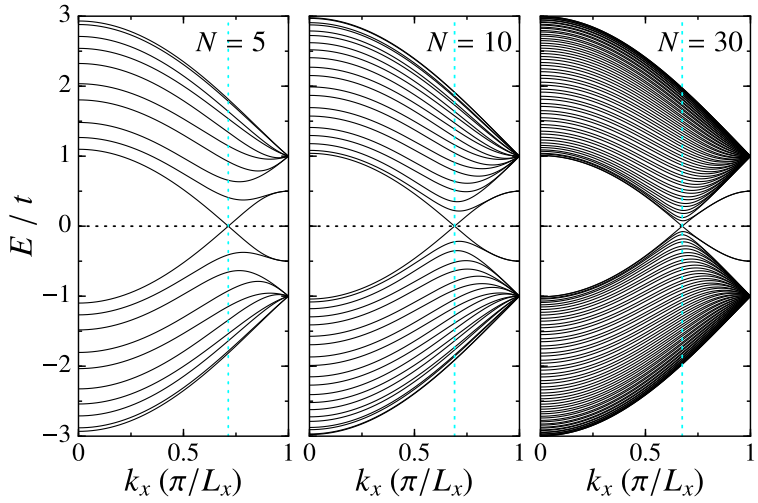


図 3.7: $N = 5$ [左]，10 [中央]，30 [右] の $\gamma = 0.5\,t$ のジグザグ端ナノリボン列における k_x 方向のバンド構造．$k_y = 0$ とした．

の分散が同時に出現することがわかった．ほぼ平らな分散はリボン幅によらず，$E = \gamma = 0.5t$ に現れることがわかった．ディラック点は，リボン幅を大きくしていくとバンド端（$k_x = \pm\pi/L_x$）近くからバルクグラフェンにおけるディラック点（$k_x = \pm 2\pi/3L_x$）へと近づいていくことがわかった．これは，リボン幅が大きいほど系がバルクグラフェンに近づくためである．

3.3.5　平らな分散が $E = \pm\gamma$ に現れる理由

ほぼ平らな分散が $E = \pm\gamma$ に現れる理由は以下のようにして理解できる．孤立したジグザグ端ナノリボンでは，平らな分散は波動関数が端原子に局在した状態（エッジ状態）に起因する [10, 11]．図 3.8 に示すように，ジグザグ端ナノリボン列では，端原子に局在した 2 つの状態間に γ の相互作用が存在することになる．したがって，波動方程式は以下の式で表され，$E = \pm\gamma$ が得られる．

$$\begin{pmatrix} 0 & \gamma \\ \gamma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\mathrm{L}} \\ \phi_{\mathrm{R}} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_{\mathrm{L}} \\ \phi_{\mathrm{R}} \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

このように，ほぼ平らな分散は端原子の 2 量体のみに起因する状態であるため，リボン幅に依存せず，$E = \pm\gamma$ に現れることも理解できる（図 3.7 参照）．

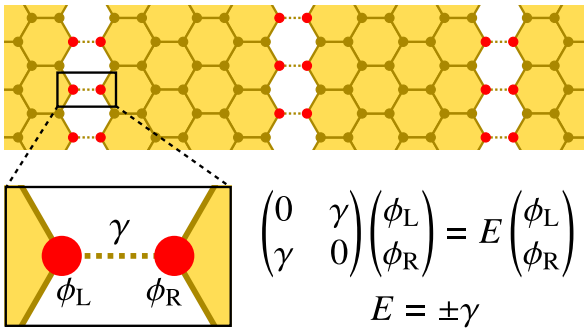


図 3.8: 端原子（赤色）に局在した 2 つの状態間に強さ γ の相互作用が存在すると，エネルギー準位は $E = \pm\gamma$ となる．

3.3.6　ディラック点の γ 依存性

図 3.4 に示したように，$\gamma > 0$ では，必ずフェルミ準位を 1 点（ディラック点）で交差する線形分散をもつ．図 3.4 に示したように，ディラック点の波数は，γ を t から 0 まで変化させると，$k_y = 0$ の k_x 軸上を，バルクグラフェンでの値（$k_x = 2\pi/3a$）から，バンド端（π/a）へと移動することがわかる．また，図 3.7 に示したように，リボン幅を大きくしていくと，ディラック点は，バンド端（$k_x = \pm\pi/L_x$）近くからバルクグラフェンにおけるディラック点（$k_x = \pm 2\pi/3L_x$）へと近づいていく．式 (2.39) で示したように，フェルミ速度の解析には，ディラック点の波数 $\boldsymbol{k}_{\mathbf{D}}$ を厳密に求める必要がある．そこで，$\boldsymbol{k}_{\mathbf{D}}$ の定式化を行なった結果，ディラック点の x 方向の波数 k_{D} は，次の式に従うことがわかった．

$$k_{\mathrm{D}} = \frac{2}{a} \arccos\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\gamma}{t}\right)^{1/N}\right] \tag{3.13}$$

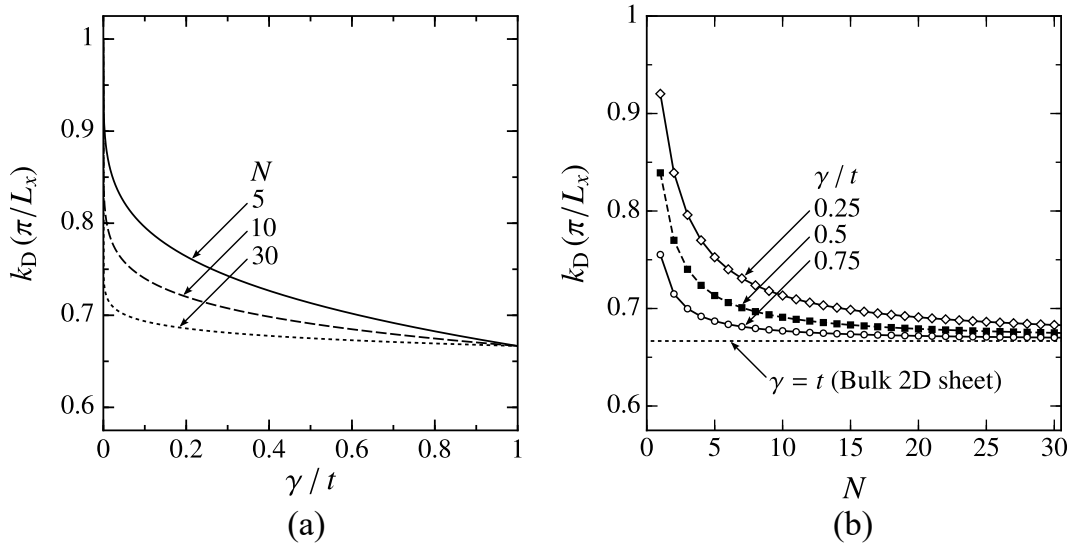


図 3.9: (a) 式 (3.13) から求めたディラック点の波数 $k_{\rm D}$ の γ 依存性．$N = 5$, 10, 30 と変化させた．(b) 式 (3.13) から求めたディラック点の波数 $k_{\rm D}$ の N 依存性．$\gamma/t = 0.25$, 0.5, 0.75, 1 と変化させた．

また，y 方向の波数は，常に 0 であることがわかった．式 (3.13) の導出の過程は付録 A に記した．式 (3.13) を用いて求めた $N = 5$，10，30 のときの γ と $k_{\rm D}$ の関係を図 3.9(a) に示し，$\gamma/t = 0.25$，0.5，0.75，1 のときの N と $k_{\rm D}$ の関係を図 3.9(b) に示す．図 3.9(a) より，ディラック点の位置は γ の値が小さいほど，γ に強く依存することがわかる．また，図 3.9(b) より，リボン幅 N が大きいほど，小さい γ の値でバルクグラフェンでの値 $k_x = 2\pi/3a$ へと移動することがわかる．

3.3.7 フェルミ速度

電気伝導の異方性を探るため，式 (2.39) を用いてフェルミ速度の計算を行なった．式 (2.39) 中のディラック点 $k_{\rm D}$ は，式 (3.13) を用いた．図 3.10 に $\gamma/t = 0.25$，0.5，0.75，1 のジグザグ端ナノリボン列（$N = 5$）おけるフェルミ速度 $\boldsymbol{v}_{\rm F}[= (v_x, v_y)]$ の角度依存性を示す．v_x はナノリボンに沿った x 方向のフェルミ速度，v_y はナノリボンが周期的に並ぶ y 方向のフェルミ速度であり，バルクグラフェンのフェルミ速度 v_0 で規格化した．バルクグラフェン（$\gamma = t$）のとき，等方的なディラックコーンに起因して，速度分散は等方的となる．このとき，$v_x = v_y = v_0 \equiv \sqrt{3}at/2\hbar$ である．γ の値を小さくしていくと，y 方向のフェルミ速度の低下が，x 方向のフェルミ速度の低下よりも大きく，フェルミ速度に異方性が生じることがわかった．フェルミ速度 $\boldsymbol{v}_{\rm F}$ の γ 依存性を図 3.11 に示す．v_y/v_x は異方性の程度を表しており，値が小さいほど異方性が大きい．γ の値を t から 0 まで小さくしていくと，v_y は単調に減少する一方，v_x は $\gamma \gtrsim 0.7\,t$ の領域で僅かに増加し，v_0 より大きくなることがわかった．さらに γ の値を小さくしていくと，v_x の減少に比べ，v_y の減少が早く，v_y/v_x が小さくなっていくことから，γ の値が小さいほど，フェルミ速度 $\boldsymbol{v}_{\rm F}$ の異方性が大きいことがわかった．しかし，比較的リボン間相互作用が小さくても，異方性はそれほど大きくないことがわかった．フェルミ速度の異方性 v_y/v_x のリボン幅 N 依存性を図 3.11(b) に示す．リボン幅 N が大きいほど，リボン間相互作用が小さい領域まで，等方性を保つことがわかった．

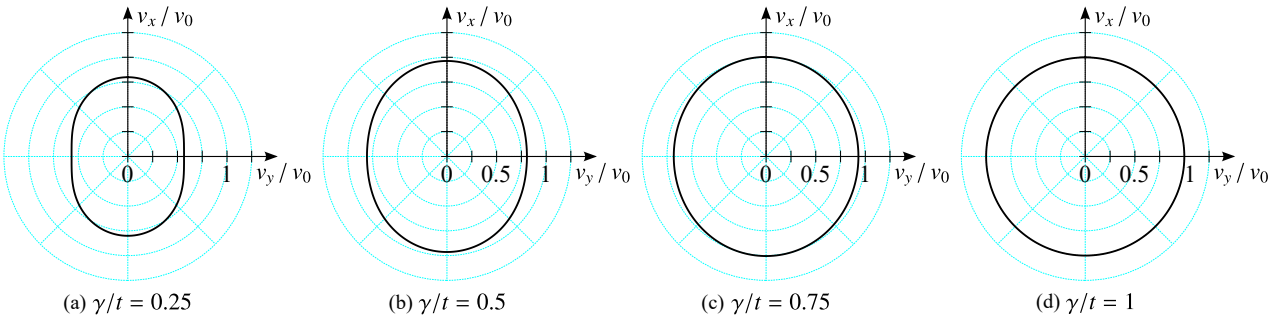


図 3.10: (a) $\gamma/t = 0.25$, (b) 0.5, (c) 0.75, (d) 1 のジグザグ端ナノリボン列におけるフェルミ速度 $\boldsymbol{v}_{\rm F}[= (v_x, v_y)]$ の角度依存性．v_x がナノリボンに沿った方向の速度，v_y がナノリボンが並んだ方向の速度．$v_0 \equiv \sqrt{3}at/2\hbar$ で規格化した．$N = 5$ とした．

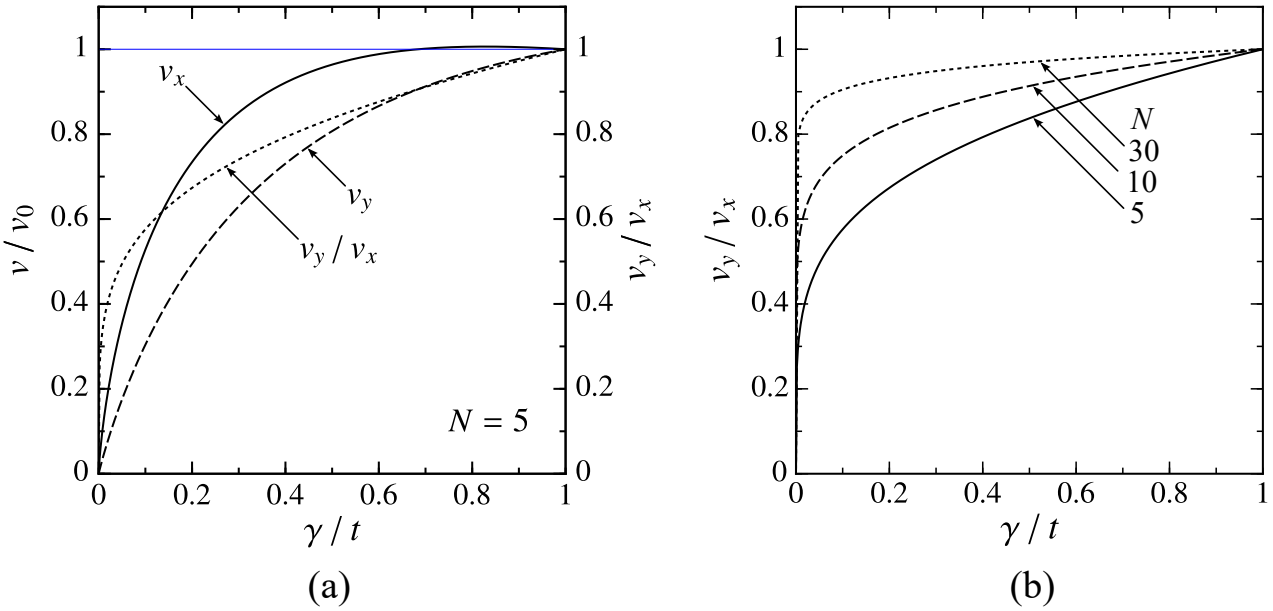


図 3.11: (a) フェルミ速度 v_x, v_y の γ 依存性．v_x がナノリボンに沿った方向の速度，v_y がナノリボンが並んだ方向の速度を表す．$N = 5$ とした．青線はバルクグラフェンにおけるフェルミ速度 v_0 を表す．(b) v_y/v_x の γ 依存性．$N = 5$, 10, 30 において計算を行なった．

3.4　アームチェア端ナノリボン列の電子状態の概要

孤立したアームチェア端ナノリボンでは，リボン幅 N によって，電子状態が異なり，金属や半導体になることが知られている [11, 19]．アームチェア端ナノリボン列の電子状態解析の結果をまとめたものを表 3.1 に示す．孤立したアームチェア端ナノリボンと同様に，アームチェア端ナノリボン列においても，リボン幅 N によって電子状態の γ 依存性が異なることがわかった．また，電子状態の γ 依存性は，$N = 3n$，$N = 3n + 1$，$N = 3n + 2$（n は整数）の 3 種類に分けることができた．$N = 3n$ では，$\gamma = t$ でのみ金属となり，それ以外では半導体となった．$N = 3n + 1$ では，$\gamma < 0.5t$ で半導体，$0.5t \leq \gamma$ で金属となった．$N = 3n + 2$ では，γ の値にかかわらず，常に金属であった．

以上のように，アームチェア端ナノリボン列の電子状態は，リボン幅 $N = 3n$，$N = 3n+1$，$N = 3n+2$ の 3 種類で分けられることがわかった．以下，それぞれのリボン幅について詳細な電子状態を説明する．

表 3.1: アームチェア端ナノリボン列の電子状態をまとめた表．リボン幅 N によって γ 依存性が異なる．γ 依存性は，$N = 3n$，$N = 3n + 1$，$N = 3n + 1$（n は整数）の 3 種類に分類された．“SC” は半導体，“M” は金属であることを表す．伝導帯端のエネルギー E と波数 k_x, k_y の関係を同時に示す．

ribbon width N	$\gamma = 0$	$\gamma = 0.5t$	$\gamma = t$
$N = 3n$ (n is an integer)	SC $E \propto k_x^2$	SC $E \propto k_x^2$ $E \propto k_y^2$	M $E \propto k_x$ $E \propto k_y$
$N = 3n + 1$	SC $E \propto k_x^2$	M $E \propto k_x$ $E \propto k_y^2$	M $E \propto k_x$ $E \propto k_y$
$N = 3n + 2$	M $E \propto k_x$	M $E \propto k_x$ $E \propto k_y$	M $E \propto k_x$ $E \propto k_y$

SC : semiconducting　M : metallic

3.5　アームチェア端ナノリボン列 $(N = 3n)$ の電子状態

リボン幅 $N = 3n$ の電子状態の詳細を説明する．

3.5.1　バンド構造と状態密度

リボン幅 $N = 6$ のアームチェア端ナノリボン列において，γ の値が 0，$0.5t$，t のときのバンド構造と状態密度をそれぞれ図 3.12，図 3.13，図 3.14 に示す．それぞれの図の左のパネルは k_y 方向のバンド構造を表す．中央のパネルは k_x 方向のバンド構造を表す．各バンド図のシアンの縦点線は同じ座標を通る．右のパネルの実線は全状態密度 ρ_{total}，破線は端原子での局所状態密度 ρ_{edge} を表す．リボン幅 $N = 6$ のとき，端原子は 1A，1B，6A，6B，7A，7B，12A，12B 原子である（図 3.2(b)）．状態密度は $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．計算は，図 3.2(b) に示した，$L_x \times L_y = \sqrt{3}a \times 6a$ の矩形単位胞を用いて行なった．

図 3.12 のバンド図に示すように，リボン幅 $N = 3n$ の孤立したアームチェア端ナノリボン $(\gamma = 0)$ は半導体であり，バンドギャップをもつ [11,19]．バルクグラフェン（$\gamma = t$）では金属となり，折り返されたディラック点が，$(k_x, k_y) = (0, 0)$ に現れる (図 3.14)．$0 < \gamma < 1$ では半導体となり，バンドギャップをもち，k_x 方向と k_y 方向のどちらにも 2 次の分散関係をもつことがわかった（図 3.13）．また，γ の値を 0 から t まで増加させると，バンドの曲率が大きくなり，有効質量が小さくなることがわかった．リボン幅 $N = 6$，15，30（$n = 2$，5，10）のアームチェア端ナノリボン列におけるバンドギャップ E_{g} の γ 依存性を図 3.15 に示す．リボン幅を変えても，γ の値を増加させると，バンドギャップが単調に減少する特徴は変わらないが，リボン幅が大きいほどバンドギャップは小さいことがわかった．

γ を大きくしていくと，フェルミ準位付近の状態密度は，1 次元半導体における状態密度の様相から（$\gamma = 0$, 図 3.12 参照），2 次元半導体が示すようなステップ関数の関係となり（$\gamma = 0.5t$，図 3.13），バルクグラフェンのディラック電子における状態密度である線形の関係へと変化する（$\gamma = 0.5t$，図 3.14）．また，ジグザグ端ナノリボン列で見られた端原子に局在した状態は見られなかった．

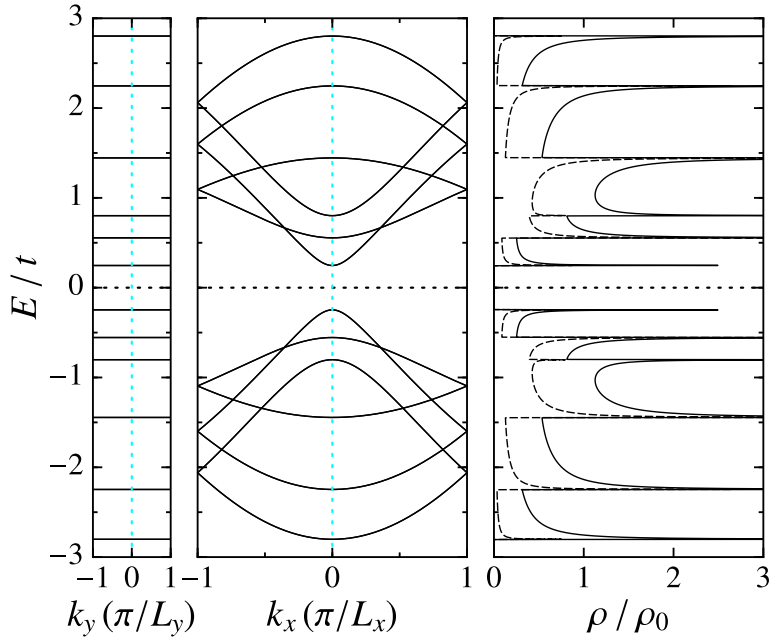


図 3.12: $N = 6$，$\gamma = 0$ のアームチェア端ナノリボン列におけるバンド構造 [左:E-k_y，中央:E-k_x] と状態密度 [右]．各バンド図のシアンの縦点線は同じ (k_x,k_y) を通る．状態密度は $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．実線は全状態密度 ρ_{totoal}，破線は端原子での局所状態密度 ρ_{edge} を示す．

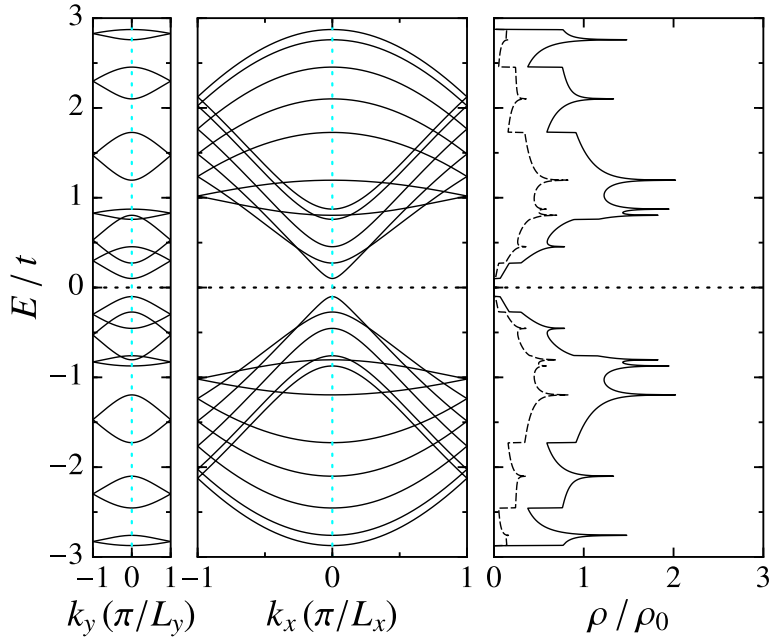


図 3.13: 図 3.12 と同様．ただし，$\gamma = 0.5\,t$ とした．

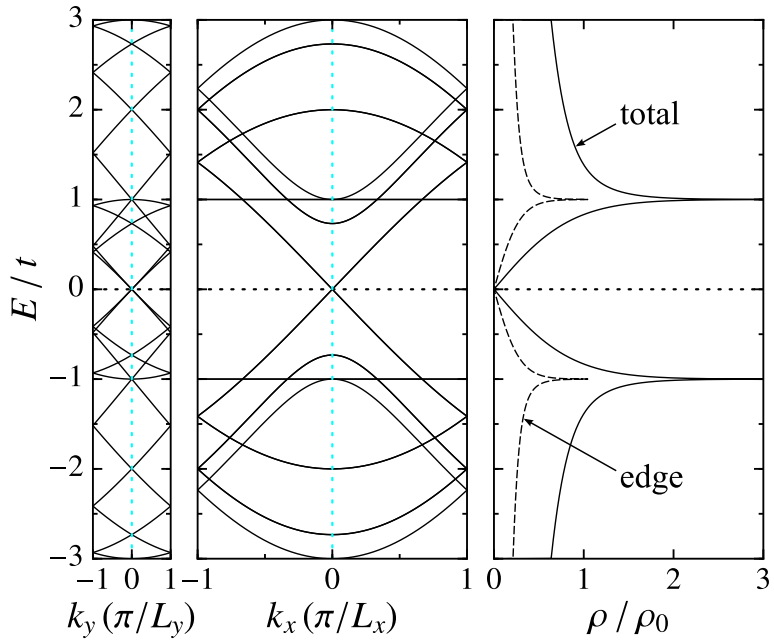


図 3.14: 図 3.12 と同様．ただし，$\gamma = t$ とした．

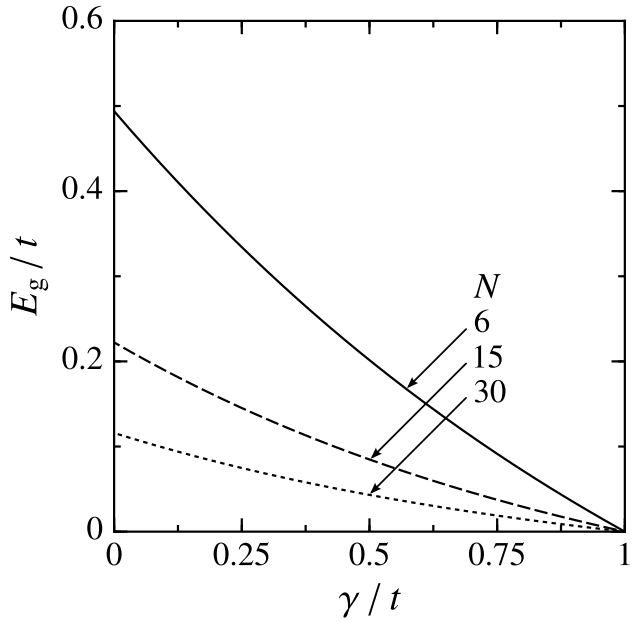


図 3.15: リボン幅 $N = 6$，15，30（$n = 2$，5，10）のアームチェア端ナノリボン列におけるバンドギャップ E_{g} の γ 依存性．

3.6 アームチェア端ナノリボン列 $(N = 3n + 1)$ の電子状態

リボン幅 $N = 3n + 1$ の電子状態の詳細を説明する．

3.6.1 バンド構造と状態密度

リボン幅 $N = 7$ のアームチェア端ナノリボン列において，γ の値が 0，$0.5t$，t のときのバンド構造と状態密度をそれぞれ図 3.16，図 3.17，図 3.18 に示す．それぞれの図の左のパネルは k_y 方向のバンド構造を表す．中央のパネルは k_x 方向のバンド構造を表す．各バンド図のシアンの縦点線は同じ座標を通る．右のパネルの実線は全状態密度 ρ_{total}，破線は端原子での局所状態密度 ρ_{edge} を表す．リボン幅 $N = 7$ のとき，端原子は 1A，1B，7A，7B，8A，8B，14A，14B 原子である（図 3.2(b)）．状態密度は $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．計算は，図 3.2(b) に示した，$L_x \times L_y = \sqrt{3}a \times 7a$ の矩形単位胞を用いて行なった．

図 3.16 のバンド図に示すように，リボン幅 $N = 3n + 1$ の孤立したアームチェア端ナノリボン ($\gamma = 0$) は半導体であり，バンドギャップをもつ [11, 19]．図 3.19(a) に，バンドギャップ E_g の γ 依存性を示す．γ の値を増加させると，バンドギャップは徐々に減少し，$\gamma \geq t/2$ で金属となる（図 3.17，図 3.18）ことがわかった．また $\gamma = t/2$ では，ディラック点が $(k_x, k_y) = (0, 0)$ に現れた．γ の値を $\gamma = t/2$ から $\gamma = t$ まで増加させると，ディラック点はバルクグラフェンの値 $(k_x, k_y) = (0, \pm 2\pi/3L_y)$ へ向かって k_y 軸上を移動した．ディラック点の y 方向の波数 k_{D} は，次の式に従うことがわかった．

$$k_{\mathrm{D}} = \frac{2}{Na} \arccos\left(\frac{t}{2\gamma}\right) \tag{3.14}$$

式 (3.14) の導出の過程は付録 A に記した．

$\gamma/t = 0.5, 0.75, 1$ でのフェルミ速度の角度依存性を図 3.20 に示す．また，フェルミ速度の γ 依存性を図 3.19(b) に示す．v_x はナノリボンに沿った x 方向のフェルミ速度，v_y はナノリボンが周期的に並ぶ y 方向のフェルミ速度，v_0 はバルクグラフェンのフェルミ速度を表す．バルクグラフェン（$\gamma = t$）のとき，等方的なディラックコーンに起因して，速度分散は等方的となる．このとき，$v_x = v_y = v_0 \equiv \sqrt{3}at/2\hbar$ である．γ を t から $0.5t$ まで変化させると，v_x は一定であるのに対し，v_y は減少していき，バルクグラフェンの等方的なフェルミ速度に異方性が現れた．v_y はリボン幅にはあまり依存しないことがわかった．

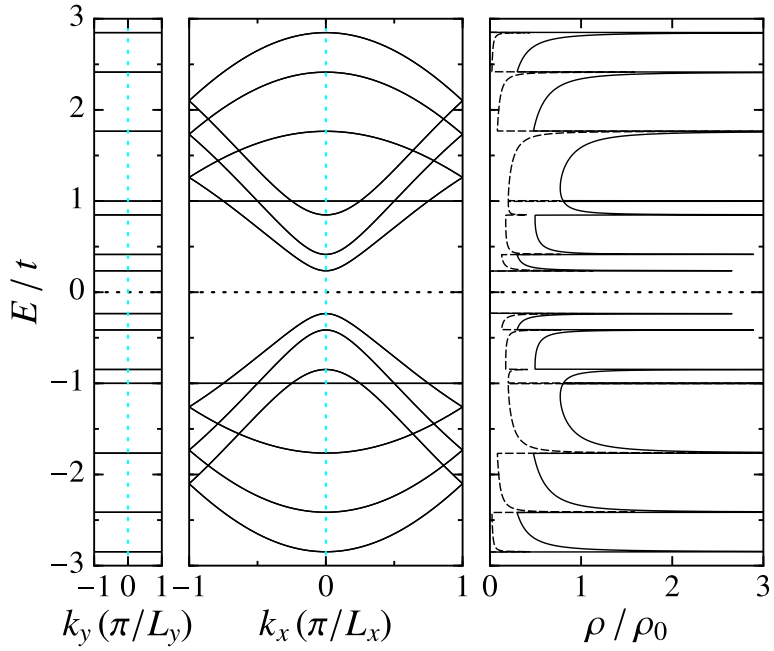


図 3.16: $N = 7$，$\gamma = 0$ のアームチェア端ナノリボン列におけるバンド構造 [左:E-k_y，中央:E-k_x] と状態密度 [右]．各バンド図のシアンの縦点線は同じ (k_x,k_y) を通る．状態密度は $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．実線は全状態密度 ρ_{totoal}，破線は端原子での局所状態密度 ρ_{edge} を示す．

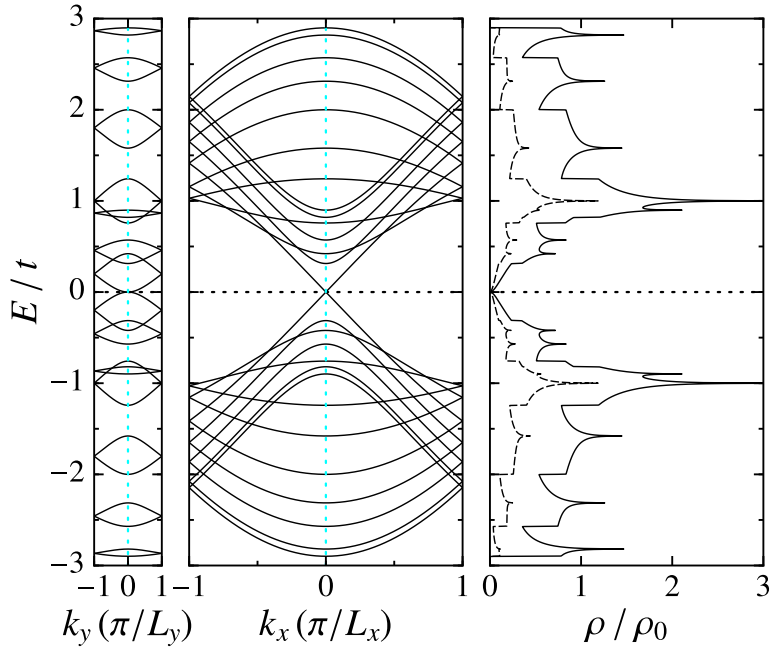


図 3.17: 図 3.16 と同様．ただし，$\gamma = 0.5\,t$ とした．

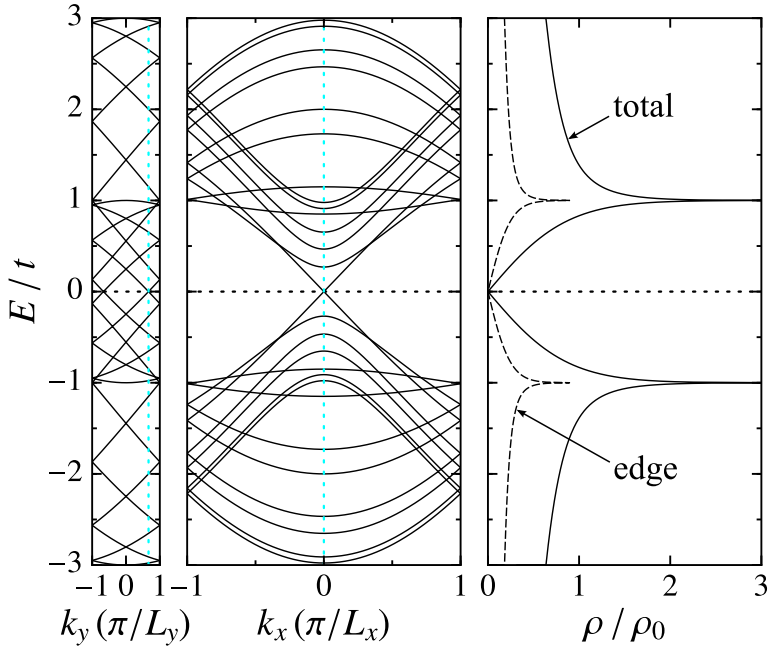


図 3.18: 図 3.16 と同様．ただし，$\gamma = t$ とした．

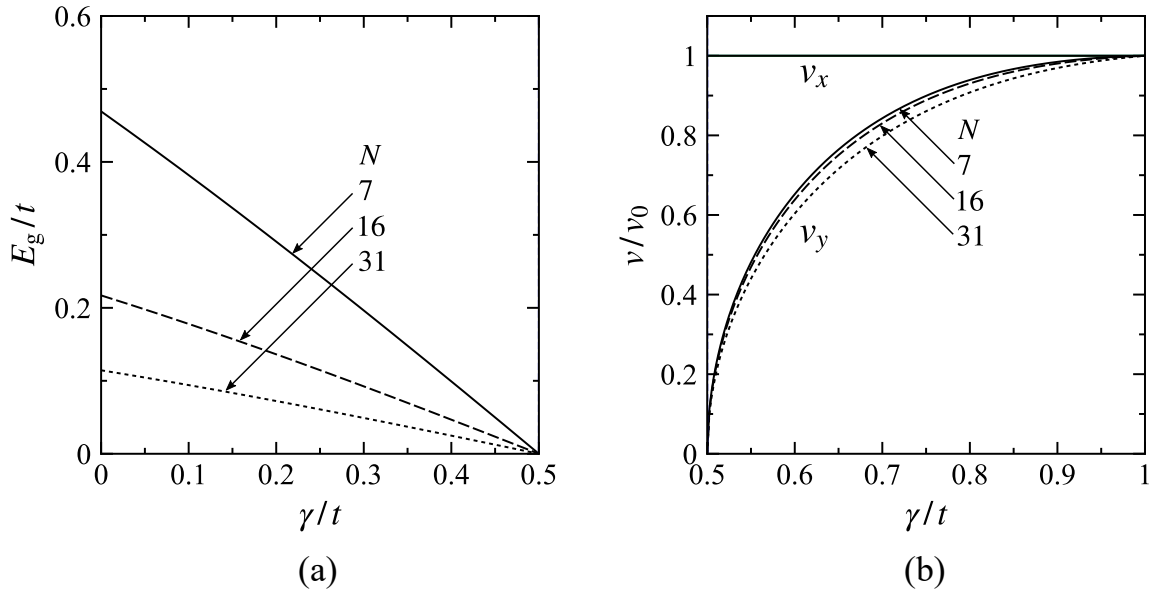


図 3.19: リボン幅 $N = 7$，16，31（$n = 2$，5，10）のアームチェア端ナノリボン列における (a) バンドギャップ E_g の γ 依存性と (b) フェルミ速度の γ 依存性．

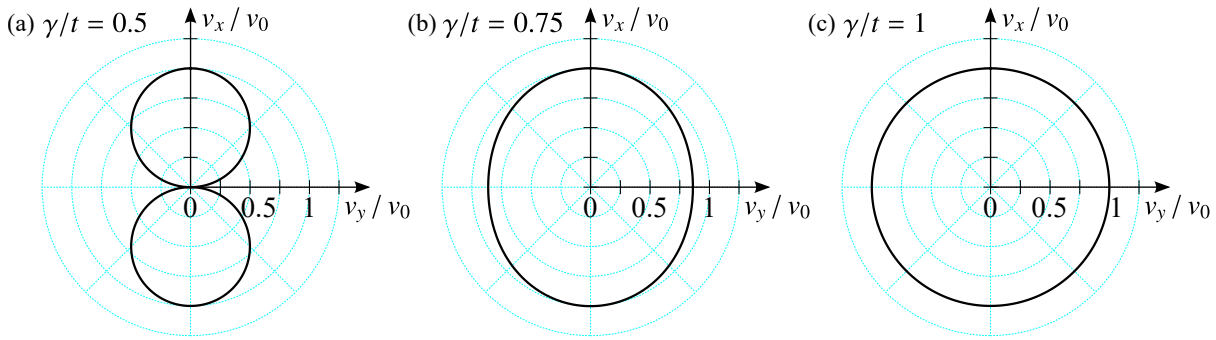


図 3.20: (a) $\gamma/t = 0.5$, (b) 0.75, (c) 1 のときの $N = 7$ のアームチェア端ナノリボン列におけるフェルミ速度の角度依存性.

3.6.2　$\gamma = 0.5t$ における電子状態

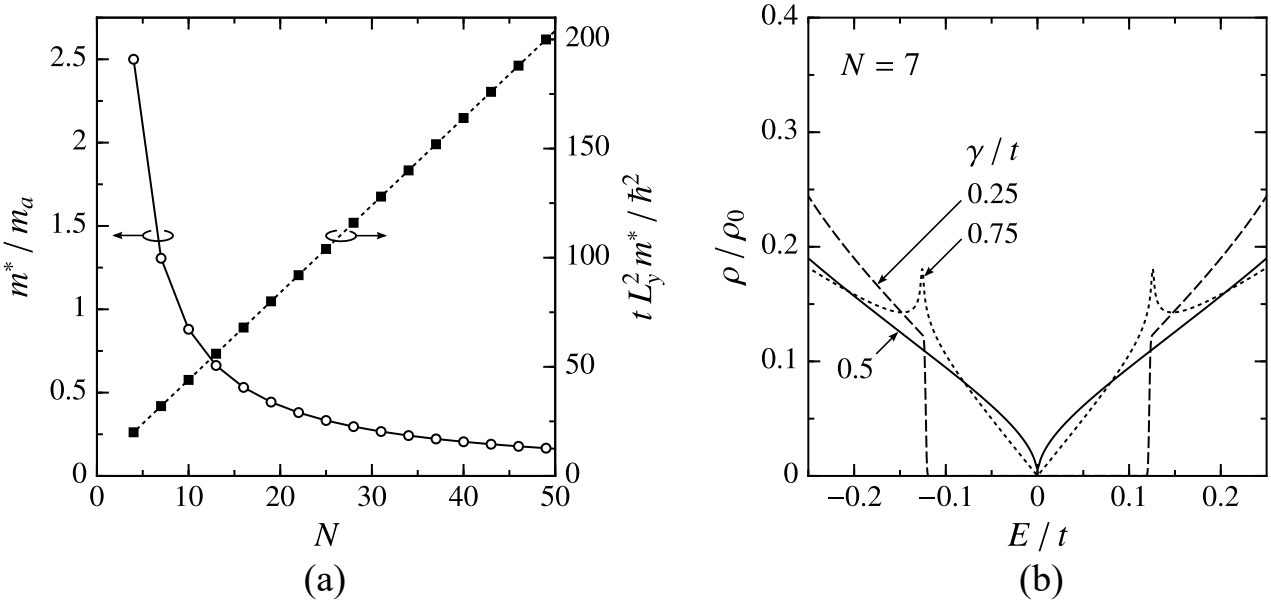


図 3.21: (a)$\gamma = 0.5t$ におけるバンドの曲率 (点線) と有効質量 (実線) のリボン幅依存性．有効質量は $m_a = 2ta^2/\hbar^2$ で規格化した．(b)$N = 7$ のアームチェア端ナノリボン列のフェルミ準位付近における状態密度.

$\gamma = 0.5t$ のとき，k_x 方向に対して 1 次の分散関係をもつ一方，k_y 方向に対しては 2 次の分散関係をもつことがわかった (図 3.17)．フェルミ準位付近の $E_\pm(\boldsymbol{k})$ は以下の式で表される．

$$E_\pm(\boldsymbol{k}) = \pm\left(\hbar v_x|k_x| + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}\right) \tag{3.15}$$

複号 $\pm$ のプラス符号は伝導帯におけるエネルギーを表しており，マイナス符号は価電子帯におけるエネルギーを表している．m^* は y 方向の有効質量を表している．有効質量 m^* の解析式を求めるために，バ

ンドの曲率 $tL_y^2 m^*/\hbar^2$ の数値計算を行なった結果，図 3.21(a) の黒四角に示すように，整数 $4N + 4$ となることがわかった．

$$tL_y^2 m^*/\hbar^2 = 4N + 4 \tag{3.16}$$

したがって，y 方向の有効質量 m^* は以下の式で表されることがわかった．

$$m^* = \frac{8(N+1)}{N^2}\frac{\hbar^2}{2ta^2} \tag{3.17}$$

図 3.21(a) の白丸に有効質量のリボン幅 N 依存性を示す．リボン幅を大きくすると有効質量は小さくなることがわかった．式 (3.15) と式 (3.17) より，フェルミ準位付近の状態密度 ρ_{total} は以下の式で表される．

$$\rho_{\mathrm{total}}(E) = \frac{4g_s}{\pi^2}\frac{1}{a^2 t}\sqrt{\frac{2(N+1)}{3N^2}\frac{|E|}{t}} \tag{3.18}$$

図 3.21(b) に $N = 7$ のアームチェア端ナノリボン列におけるフェルミ準位付近での状態密度を示す．$\gamma/t = 0.25$ のとき，状態密度は 2 次元半導体のステップ関数に似た関係となり，$\gamma/t = 0.75$ では，状態密度はバルクグラフェンの状態密度である線形の関係に近づいた．$\gamma/t = 0.5$ では，式 (3.18) に表したように，$\sqrt{|E|}$ に依存する関係をもつことがわかった．フェルミ準位から離れると非放物線性が現れるため，$|E/t| \gtrsim 0.1$ では，式 (3.18) の関係から離れていくことがわかる．

3.7　アームチェア端ナノリボン列 ($N = 3n + 2$) の電子状態

リボン幅 $N = 3n + 2$ の電子状態の詳細を説明する．

3.7.1　バンド構造と状態密度

リボン幅 $N = 8$ のアームチェア端ナノリボン列において，γ の値が 0，$0.5\,t$，t のときのバンド構造と状態密度をそれぞれ図 3.22，図 3.23，図 3.24 に示す．それぞれの図の左のパネルは k_y 方向のバンド構造を表す．中央のパネルは k_x 方向のバンド構造を表す．各バンド図のシアンの縦点線は同じ座標を通る．右のパネルの実線は全状態密度 ρ_{total}，破線は端原子での局所状態密度 ρ_{edge} を表す．リボン幅 $N = 8$ のとき，端原子は 1A，1B，8A，8B，9A，9B，16A，16B 原子である（図 3.2(b)）．状態密度は $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．計算は，図 3.2(b) に示した，$L_x \times L_y = \sqrt{3}a \times 8a$ の矩形単位胞を用いて行なった．

図 3.22 のバンド図に示すように，リボン幅 $N = 3n + 2$ の孤立したアームチェア端ナノリボン ($\gamma = 0$) は金属であり，バンドギャップをもたない [11, 19]．γ の値を 0 から t まで変化させても，γ の値にかかわらず，系は常に金属であった（図 3.22–図 3.24）．

γ の値を 0 から t まで増加させると，ディラック点は $(k_x, k_y) = (0, \pm\pi/L_y)$ から，バルクグラフェンでの値 $(k_x, k_y) = (0, \pm 2\pi/3L_y)$ へ向かって k_y 軸上を移動した．ディラック点の y 方向の波数 k_{D} は，次の式に従うことがわかった．

$$k_{\mathrm{D}} = \frac{2}{Na}\arccos\left(\frac{\gamma}{2t}\right) \tag{3.19}$$

式 (3.19) で表される γ とディラック点の波数 k_{D} の関係を図 3.25 に示す．式 (3.19) の導出の過程は付録 A に記した．

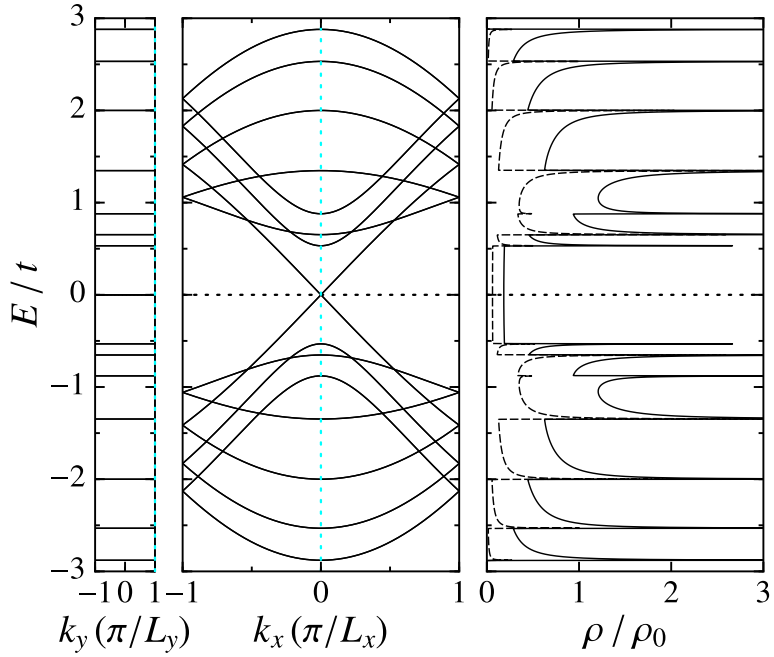


図 3.22: $N = 8$，$\gamma = 0$ のアームチェア端ナノリボン列におけるバンド構造 [左:E-k_y，中央:E-k_x] と状態密度 [右]．各バンド図のシアンの縦点線は同じ (k_x,k_y) を通る．状態密度は $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．実線は全状態密度 ρ_{totoal}，破線は端原子での局所状態密度 ρ_{edge} を示す．

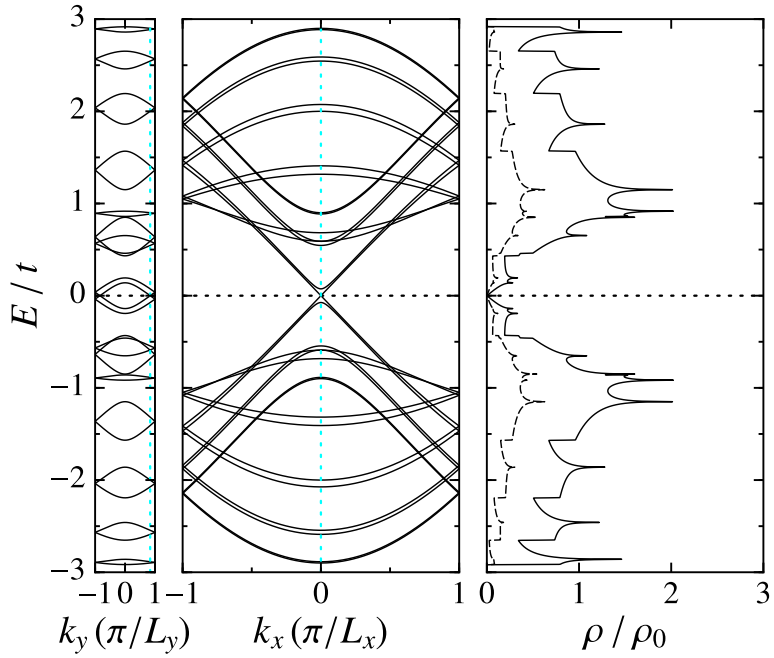


図 3.23: 図 3.22 と同様．ただし，$\gamma = 0.5\,t$ とした．

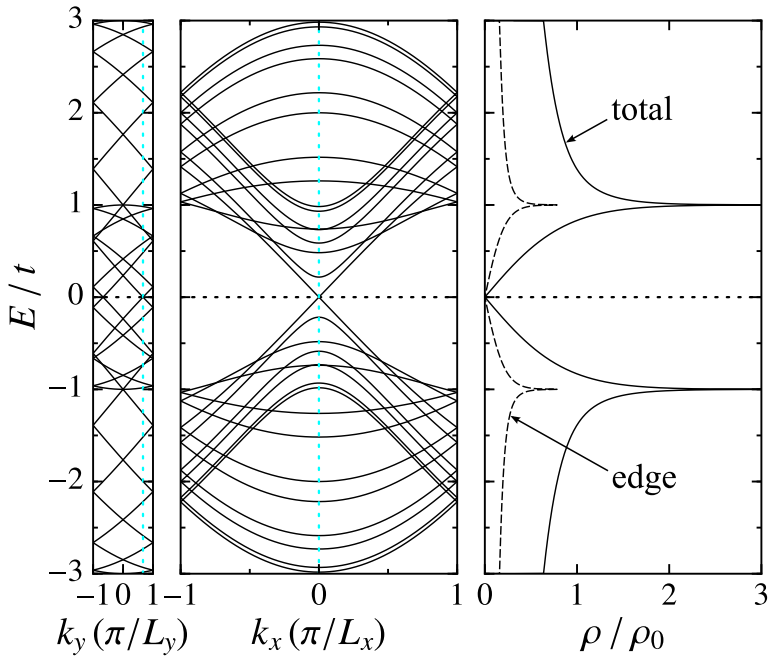


図 3.24: 図 3.22 と同様．ただし，$\gamma = t$ とした．

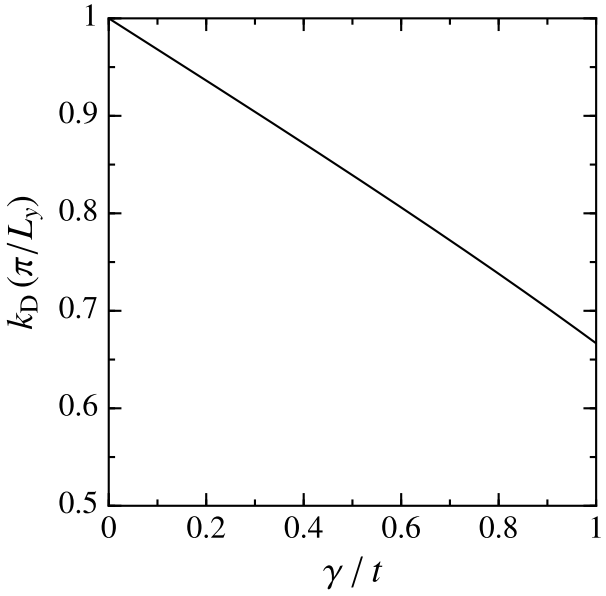


図 3.25: リボン幅 $N = 3n + 2$ のアームチェア端ナノリボン列におけるディラック点の y 方向の波数 k_{D} の γ 依存性．

3.7.2　フェルミ速度

図 3.26 に $\gamma/t = 0$, 0.5, 1 のアームチェア端ナノリボン列 ($N = 8$) におけるフェルミ速度 $\boldsymbol{v}_{\mathrm{F}}[= (v_x, v_y)]$ の角度依存性を示す．v_x はナノリボンに沿った x 方向のフェルミ速度，v_y はナノリボンが周期的に並ぶ y 方向のフェルミ速度であり，バルクグラフェンのフェルミ速度 v_0 で規格化した．バルクグラフェン（$\gamma = t$）のとき，等方的なディラックコーンに起因して，速度分散は等方的となる．このとき，$v_x = v_y = v_0 \equiv \sqrt{3}at/2\hbar$ である．リボン間に相互作用が存在するとき（$0 < \gamma < t$），x 方向と y 方向に異方性が生じ，フェルミ速度に異方性が現れる．$N = 8$，17，32（$n = 2$，5，10）のアームチェア端ナノリボン列におけるフェルミ速度 $\boldsymbol{v}_{\mathrm{F}}$ の γ 依存性を図 3.27 に示す．γ の値を t から 0 まで変化させると，v_y は単調に減少する一方，v_x は γ の値にかかわらず一定であった．また，v_y はリボン幅依存性が小さいことがわかった．

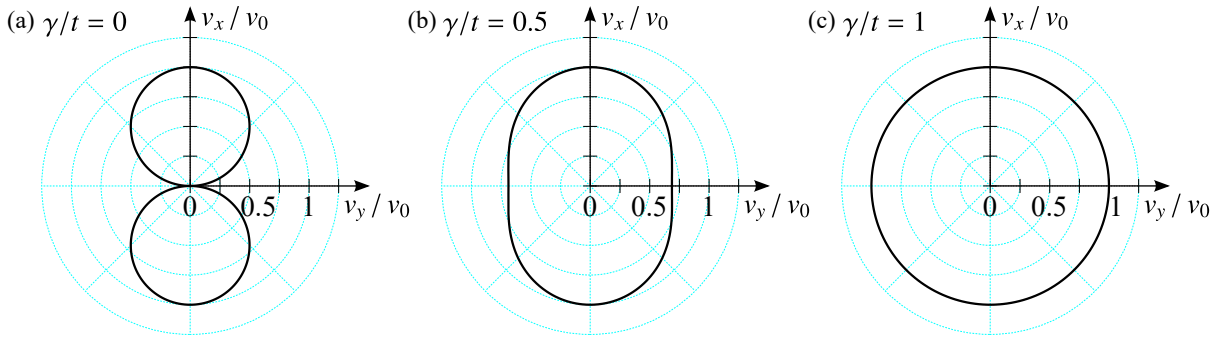


図 3.26: (a) $\gamma/t = 0$, (b) 0.5, (c) 1 のときのリボン幅 $N = 8$ のアームチェア端ナノリボン列におけるフェルミ速度の角度依存性．

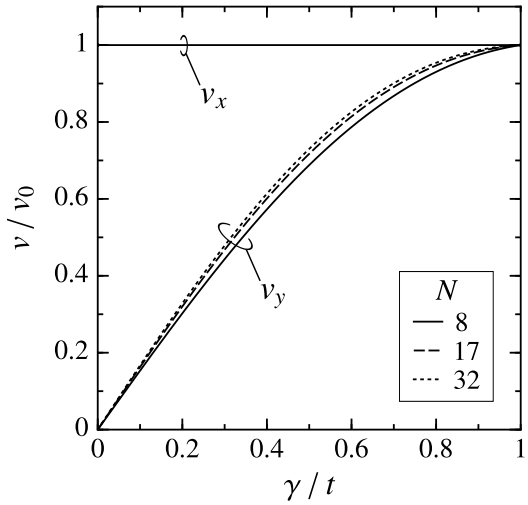


図 3.27: フェルミ速度の γ 依存性．リボン幅を $N = 8$, 17, 32 と変化させ計算を行なった．

3.8　デバイス設計の指針

ナノリボン列の電子状態解析の結果から，ナノリボン列をデバイスに応用する際の設計指針を考える．電子状態解析の結果から，ナノリボン列は端の形状によらず，電子状態に異方性をもつことがわかった．異方性を考慮すると，ナノリボン列を電子デバイスのチャネルとして用いる際には，図 3.28 に示すように，ナノリボンに沿った方向（x 方向）をソース・ドレイン方向とするように作製することで電子状態を最大限に活かすことができると考えられる．具体的に，ジグザグ端とアームチェア端のそれぞれのナノリボン列について，デバイス応用の観点から考察する．

ジグザグ端ナノリボン列では，図 3.11(a) に示したように，x 方向のフェルミ速度 v_x は $\gamma \gtrsim 0.7t$ の領域で僅かに増加し，バルクグラフェンのフェルミ速度より大きくなることがわかった．したがって，ジグザグ端ナノリボン列を電子デバイスのチャネルとして用いる際には，$\gamma \gtrsim 0.7t$ のナノリボン列を作製し，x 方向をソース・ドレイン方向とするように設計することで，バルクグラフェンを超える移動度をもつチャネル材料になると考えられる．

アームチェア端ナノリボン列では，表 3.1 に示したように，ナノリボンの幅によって電子状態の γ 依存性が異なることがわかった．リボン幅 $N = 3n$ のナノリボン列では，$\gamma \neq t$ で常に半導体となった．また，図 3.15 に示したように，γ の値を大きくすると，バンドギャップの値は単調に減少していくことがわかった．γ の値はリボン間の距離に依存し，リボン間距離が近いほど γ の値は大きい．したがって，リボン幅 $N = 3n$ のナノリボン列は，リボン間距離を制御することで，バンドギャップの値を制御できる．これまで，孤立したナノリボンのバンドギャップの値を制御する方法として，リボンの幅を変える方法があった．リボン幅 $N = 3n$ のナノリボン列は，リボンの幅自体を変えなくとも，リボン間距離の制御によりバンドギャップを制御できるという点でデバイス応用に有利である．

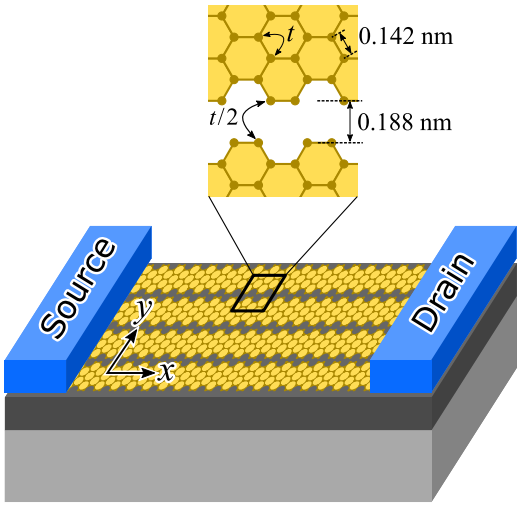


図 3.28: ナノリボン列を電子デバイスのチャネルへ応用する際のデバイス設計例．ナノリボンに沿った方向（x 方向）をソース・ドレイン方向とすることで，ナノリボン列の電子状態を活かしたデバイスが作製できる．一例として，$N = 7$, $\gamma = 0.5t$ のアームチェア端ナノリボン列をチャネルとして用いる際のリボン間距離を拡大図に示す．

リボン幅 $N = 3n + 1$ のアームチェア端ナノリボン列は，γ の値によって半導体 ($\gamma < 0.5t$) と金属 ($\gamma \geq 0.5t$) に分かれることがわかった．$\gamma = 0.5t$ のアームチェア端ナノリボン列は，図 3.17 に示したように，x 方向に線形分散を持つ一方，リボンが結合する方向である y 方向には 2 次の分散を持つ．したがって，図 3.28 に示すように，x 方向を伝導方向としてデバイスを設計することで，線形分散に起因する高速な電子を活かしつつ，y 方向の 2 次分散に起因した高い状態密度により，バルクグラフェンよりも大きな電流を扱うことができると考えられる．

リボン間結合強度 γ の値はリボン間の距離に依存し，リボン間距離が近いほど γ の値は大きい．リボン間結合強度 γ に相当するリボン間距離はハリソン則より見積もることができる．ハリソン則は，原子軌道の結合強度は原子間距離の n 乗に反比例するという法則である [20]．p 軌道間の結合強度の場合は $n = 2$ であり，原子間距離の 2 乗に反比例する．一例として，$\gamma = 0.5t$ となるアームチェア端ナノリボン列のリボン間の距離をハリソン則から見積もった結果を図 3.28 の拡大図に示す．グラフェンの原子間距離を $d = 0.142\,\mathrm{nm}$ と仮定すると，$\gamma = 0.5t$ となるアームチェア端ナノリボン列のリボン間距離は，$\sqrt{7}d/2 = 0.188\,\mathrm{nm}$ と見積もることができる．

3.9　まとめ

本章では，ジグザグ端およびアームチェア端の 2 種類の端形状の異なるナノリボン列について電子状態の計算を行い，ナノリボン列の電子状態に隣接ナノリボン間相互作用が与える影響を解析した結果について記述した．

ジグザグ端ナノリボン列の場合，弱く結合した系では，孤立したジグザグ端ナノリボンの特徴であるほぼ平らな分散とバルクグラフェンの特徴であるディラック型の分散とが共存することがわかった．ほぼ平らな分散は端原子に波動関数が局在した状態に起因していることがわかった．ほぼ平らな分散は，端原子の 2 量体のみに起因する状態であるため，リボン幅に依存せず，$E = \pm\gamma$ に現れることがわかった．ディラック点の解析式を求め，フェルミ速度の計算を行なった．ナノリボンに沿った方向のフェルミ速度は $\gamma \gtrsim 0.7\,t$ の領域で僅かに増加し，バルクグラフェンのフェルミ速度より大きくなることがわかった．

アームチェア端ナノリボン列では，リボンの幅によって，電子状態のリボン間結合強度依存性が異なることがわかった．リボン幅 $N = 3n$ のナノリボン列では，$\gamma \neq t$ で常に半導体となった．また，γ の値を大きくすると，バンドギャップの値は単調に減少していくことがわかった．リボン幅 $N = 3n + 1$ のアームチェア端ナノリボン列は，γ の値によって半導体と金属に分かれることがわかった．特に，$\gamma = 0.5t$ のアームチェア端ナノリボン列は，図 3.17 に示したように，リボンに沿った方向（x 方向）に線形のエネルギー分散を持つ一方，リボンが結合する方向（y 方向）には 2 次の分散を持つことがわかった．リボン幅 $N = 3n + 2$ のアームチェア端ナノリボン列は，γ の値にかかわらず常に金属となることがわかった．

以上の電子状態解析の結果から，ナノリボン列をデバイスに応用する際の設計指針を提案した．ナノリボン列を電子デバイスのチャネルとして用いる際には，ナノリボンに沿った方向をソース・ドレイン方向とするように作製することで，バルクグラフェンを超える移動度を持つチャネル材料になると考えられる．

参考文献

[1] Y. Sugiyama, O. Kubo, R. Omura, M. Shigehara, H. Tabata, N. Mori, and M. Katayama, Appl. Phys. Lett., **105**, 123116 (2014).

[2] H. Zheng, Z. F. Wang, T. Luo, Q. W. Shi, and J Chen, Phys. Rev. B, **75**, 165414 (2007).

[3] L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B, **73**, 235411 (2006).

[4] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn., **65**, 1920 (1996).

[5] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B, **54**, 17954 (1996).

[6] K. Wakabayashi, M. Fujita, H. Ajiki, and M. Sigrist, Phys. Rev. B, **59**, 8271 (1999).

[7] K. Wakabayashi and M. Sigrist, Phys. Rev. Lett., **84**, 3390 (2000).

[8] K. Wakabayashi, Phys. Rev. B, **64**, 125428 (2001).

[9] M. Ezawa, Phys. Rev. B, **73**, 045432 (2006).

[10] K. Wakabayashi, S. Okada, R. Tomita, S. Fujimoto, and Y. Natsume, J. Phys. Soc. Jpn., **79**, 034706 (2010).

[11] K. Wakabayashi, K. Sasaki, T. Nakanishi, and T. Enoki, Sci. Tech. Adv. Mater., **11**, 054504 (2010).

[12] M. Acik and Y. J. Chabal, Jpn. J. Appl. Phys., **50**, 070101 (2011).

[13] F. Schwierz, Nat. Nanotechnol., **5**, 487 (2010).

[14] S. Sato, Jpn. J. Appl. Phys., **54**, 040102 (2015).

[15] A. Kara, H. Enriquez, A. P. Seitsonen, L. C. LewYanVoon, S. Vizzini, B. Aufray, and H. Oughaddou, Surf. Sci. Rep., **67**, 1 (2012).

[16] P. De Padova, O. Kubo, B. Olivieri, C. Quaresima, T. Nakayama, M. Aono, and G. Le Lay, Nano Lett., **12**, 5500 (2012).

[17] M. R. Tchalala, H Enriquez, A. J. Mayne, A. Kara, G. Dujardin, M. A. Ali, and H. Oughaddou, J. Phys. Conf. Ser., **491**, 012002 (2014).

[18] F. Hashimoto, N. Mori, O. Kubo, and M. Katayama, Jpn. J. Appl. Phys., **56**, 045001 (2017).

[19] T. Enoki and T. Ando, *Physics and Chemistry of Graphene*, (Pan Stanford Publishing, Singapore, 2013).

[20] W. A. Harrison, *Electronic Structure and Properties of Solids,* (Freeman, San Francisco, 1980).

第 4 章

多層グラフェンの輸送特性解析

4.1　あらまし

図 4.1(a) に示すように，単層グラフェンは線形のエネルギー分散をもち，シリコンをはるかに超える高移動度を示す [1]．しかし，同時に，状態密度が小さいという特徴をもつため，デバイス応用の観点から考えると大きな電流を扱うことができない [2]．近年，グラフェンを積層することで，積層した層数倍の状態密度を得るという意図のもと，多層グラフェンのデバイス応用を目的とした研究が行なわれている [3–6]．図 4.1(b) に示すような AB 積層構造では，強い層間結合によりバンド構造が変調され，単層グラフェンの特徴である線形なエネルギー分散が失われる [7]．線形なエネルギー分散が失われると，系全体の移動度は低下すると考えられる．したがって，多層グラフェンの各層が単層グラフェンの輸送特性を保つためには，層間結合を弱くする必要があると考えられる．弱い層間結合を実現する方法の 1 つとして，図 4.1(c) に示すような乱層構造 [8–10] が挙げられる．乱層構造は AB 積層のようなきれいな積層ではなく，各層が無秩序に平行移動や回転しているため層間結合が弱い．他にも，各層間に絶縁体層を挟むことで層間結合を弱くする方法がある [11]．このように，層間結合強度を制御することで，多層化により状態密度を増やしつつ，高移動度の起源である線形なエネルギー分散を維持する試みがなされている．しかし，層間結合が多層グラフェンの系全体の輸送特性に与える影響は，詳しく明らかにされていない．また，最も安定した構造である AB 積層多層グラフェンは作製が容易であるため，AB 積層多層グラフェンにおいて単層グラフェンの輸送特性を維持できる構造を探索することは意義深い．そこで，本章では，強結合近似法と非平衡グリーン関数法を用いて，AB 積層多層グラフェンの輸送特性を解析し，層間結合が系の輸送特性に与える影響について調べた [12]．

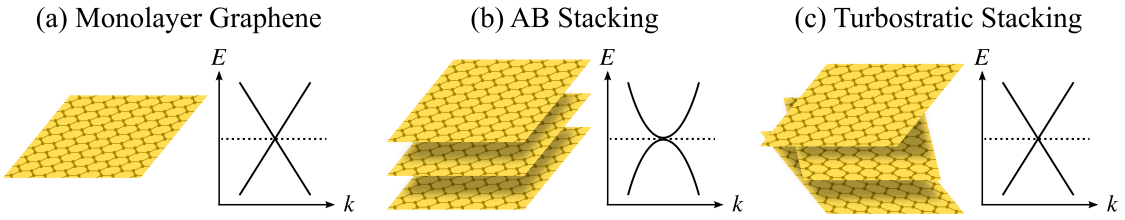


図 4.1: (a) 単層グラフェン，(b) AB 積層多層グラフェン，(c) 乱層構造をもつ多層グラフェンの模式的な構造とバンド構造．

4.2　電子状態解析モデル

本節では，多層グラフェンの輸送特性計算に先立ち，電子状態解析を行なった結果について説明する．電子状態解析では，図 4.2 に示すような，xy 平面内に存在するグラフェンが，z 方向に AB 積層した N_{L} 層の多層グラフェンを考察した．図に示した $\sqrt{3}a \times a$ の大きさの矩形を単位胞として，x，y 方向に周期的条件を課し，p_z 軌道のみを考慮した最近接強結合近似法を用いて電子状態を解析した．その際，層内の原子間の移動積分を t，隣接する層間の移動積分を β とした．AB 積層は最安定構造であるため天然のグラファイト内に最も多く存在し，グラファイトの場合，移動積分の値はおよそ $t = 3.16\,\mathrm{eV}$，$\beta = 0.39\,\mathrm{eV}$ である [5]．本研究では，β の値をパラメータとして変化させ，層間結合強度が乱層構造グラフェンの電子状態に及ぼす影響を調べた．

4.2.1　ハミルトニアン行列

図 4.2 に示した多層グラフェンの計算モデルにおけるハミルトニアン行列を示す．本研究では，p_z 軌道のみを考慮した最近接強結合近似法を用いて，バンド構造 $E(\boldsymbol{k})$ を求めた．以下の計算では，p_z 軌道のオンサイトエネルギーを $E = 0$ とし，計算を行なった．大きさ $L_x \times L_y (= \sqrt{3}a \times a)$ の単位胞は，図 4.3 に示すように隣り合う 6 つの単位胞と結合している．したがって，波動方程式は，

$$H(\boldsymbol{k})|\psi_n\rangle = E_n(\boldsymbol{k})|\psi_n\rangle \tag{4.1}$$

$$H(\boldsymbol{k}) = H_0 + T_{\mathrm{R}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x L_x} + T_{\mathrm{L}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_x L_x} + T_{\mathrm{U}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y L_y} + T_{\mathrm{D}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y L_y} + T_{\mathrm{UR}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x L_x}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y L_y} + T_{\mathrm{DL}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_x L_x}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y L_y} \tag{4.2}$$

となる．単位胞内には $4N_{\mathrm{L}}$ 個の原子が存在する．1 つの原子に 1 つの軌道をもつと仮定したので，行列 H_0 と T の大きさは $4N_{\mathrm{L}} \times 4N_{\mathrm{L}}$ である．同様に，波動関数 $|\psi_n\rangle$ は大きさ $4N_{\mathrm{L}}$ の列ベクトルである．H_0

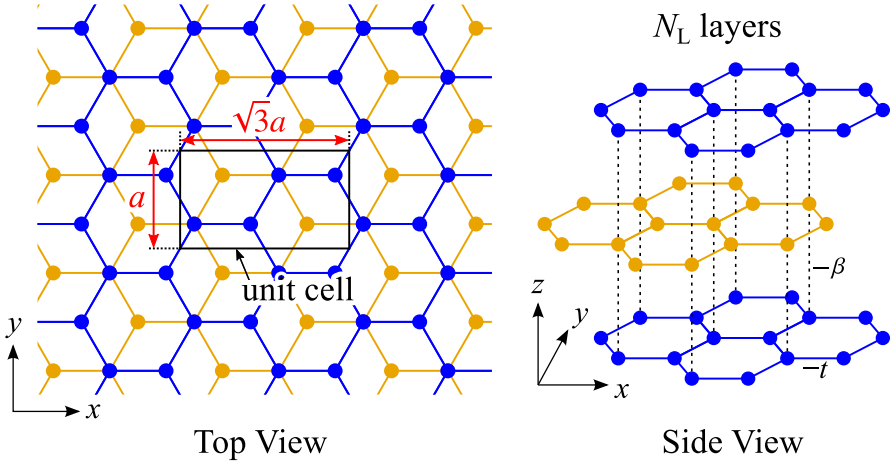


図 4.2: 層数 $N_{\mathrm{L}} = 3$ の AB 積層多層グラフェン．隣接する層間の移動積分を β，層内の移動積分を t とおいた．

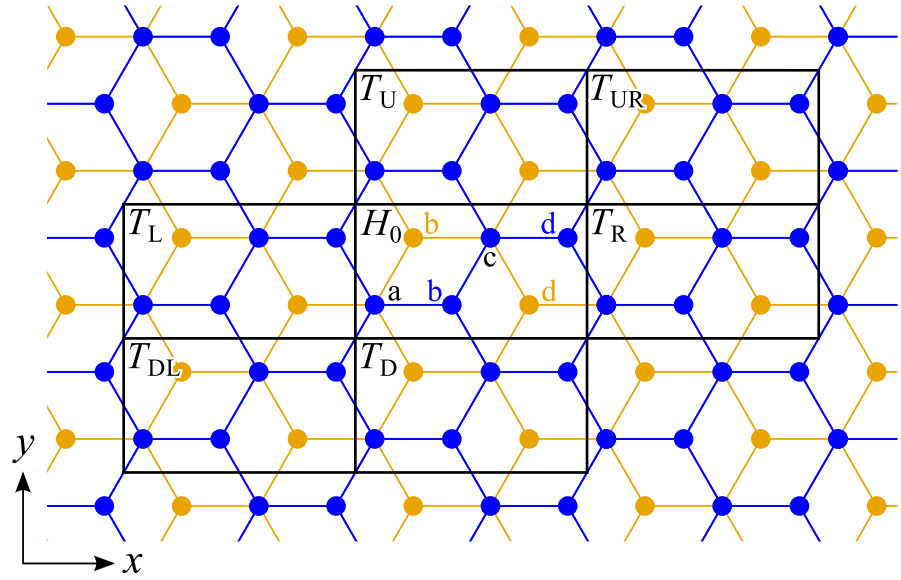


図 4.3: 層数 N_{L} の AB 積層多層グラフェンの単位胞．単位胞 H_0 は隣接する 6 つの単位胞と相互作用がある．単位胞内には $4N_{\mathrm{L}}$ 個の原子が存在する．

と T を以下に示す．

$$H_0 = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & \cdots & N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \\ \begin{pmatrix} h_0 & h_\beta & & & \\ h_\beta & h_0 & h_\beta & & \\ & h_\beta & h_0 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & h_\beta \\ & & & h_\beta & h_0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{4.3}$$

$$h_0 = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & -t & 0 & 0 \\ -t & 0 & -t & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t \\ 0 & 0 & -t & 0 \end{pmatrix} \end{array}, \quad h_\beta = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} -\beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{4.4}$$

$$T_{\mathrm{R}} = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & \cdots & N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \\ \begin{pmatrix} t_{\mathrm{R}} & & & & \\ & t_{\mathrm{R}} & & & \\ & & t_{\mathrm{R}} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & t_{\mathrm{R}} \end{pmatrix} \end{array}, \quad t_{\mathrm{R}} = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{4.5}$$

$$T_{\mathrm{L}} = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & \cdots & & N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \\ \begin{pmatrix} t_{\mathrm{L}} & & & & & \\ & t_{\mathrm{L}} & & & & \\ & & t_{\mathrm{L}} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & t_{\mathrm{L}} & \end{pmatrix} \end{array}, \quad t_{\mathrm{L}} = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -t \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{4.6}$$

$$T_{\mathrm{U}} = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & \cdots & & N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \\ \begin{pmatrix} t_{\mathrm{UO}} & & & & & \\ & t_{\mathrm{UE}} & & & & \\ & & t_{\mathrm{UO}} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \underbrace{t_{\mathrm{UO}} \text{ or } t_{\mathrm{UE}}} & \end{pmatrix} \\ N_{\mathrm{L}}\text{が奇数} \to t_{\mathrm{UO}}, \text{偶数} \to t_{\mathrm{UE}} \end{array} \tag{4.7}$$

$$t_{\mathrm{UO}} = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array}, \quad t_{\mathrm{UE}} = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{4.8}$$

$$T_{\mathrm{D}} = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & \cdots & & N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \\ \begin{pmatrix} t_{\mathrm{DO}} & & & & & \\ & t_{\mathrm{DE}} & & & & \\ & & t_{\mathrm{DO}} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \underbrace{t_{\mathrm{DO}} \text{ or } t_{\mathrm{DE}}} & \end{pmatrix} \\ N_{\mathrm{L}}\text{が奇数} \to t_{\mathrm{DO}}, \text{偶数} \to t_{\mathrm{DE}} \end{array} \tag{4.9}$$

$$t_{\mathrm{DO}} = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array}, \quad t_{\mathrm{DE}} = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & -t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{4.10}$$

$$T_{\mathrm{UR}} = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & \cdots & & N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \\ \begin{pmatrix} t_{\mathrm{UR}} & & & & & \\ & 0 & & & & \\ & & t_{\mathrm{UR}} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \underbrace{t_{\mathrm{UR}} \text{ or } 0} & \end{pmatrix} \\ N_{\mathrm{L}}\text{が奇数} \to t_{\mathrm{UR}}, \text{偶数} \to 0 \end{array}, \; t_{\mathrm{UR}} = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{4.11}$$

$$T_{\mathrm{DL}} = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & \cdots & & N_{\mathrm{L}}\text{層目} \end{array} \\ \begin{pmatrix} t_{\mathrm{DL}} & & & & & \\ & 0 & & & & \\ & & t_{\mathrm{DL}} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \underbrace{t_{\mathrm{DL}}\text{ or }0}_{N_{\mathrm{L}}\text{が奇数}\rightarrow t_{\mathrm{DL}},\text{偶数}\rightarrow 0} & \end{pmatrix} \end{array}, \quad t_{\mathrm{DL}} = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -t \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{4.12}$$

4.3　多層グラフェンの電子状態

図 4.2 に示した系の $\beta = 0$，$0.1\,t$，$0.2\,t$ におけるバンド構造と状態密度を，それぞれ，図 4.4，図 4.5，図 4.6 に示す．$\beta = 0$ の場合，単層グラフェンと等価な系となり，線形なエネルギー分散をもつディラックコーンが，$(k_x, k_y) = (0, 2\pi/3a)$ を頂点にして現れる．状態密度はエネルギーに関して線形に変化する．一方，層間結合が存在する場合，放物線バンドとなり，$E = 0$ でも有限の状態密度となる（図 4.5，図 4.6）．また，β の値を増加させると，バンドの曲率は小さくなり，有効質量が大きくなることがわかる．ディラック点における電子の有効質量 m^* の β 依存性を図 4.7 に示す．m^* は β に比例して増加することがわかった．

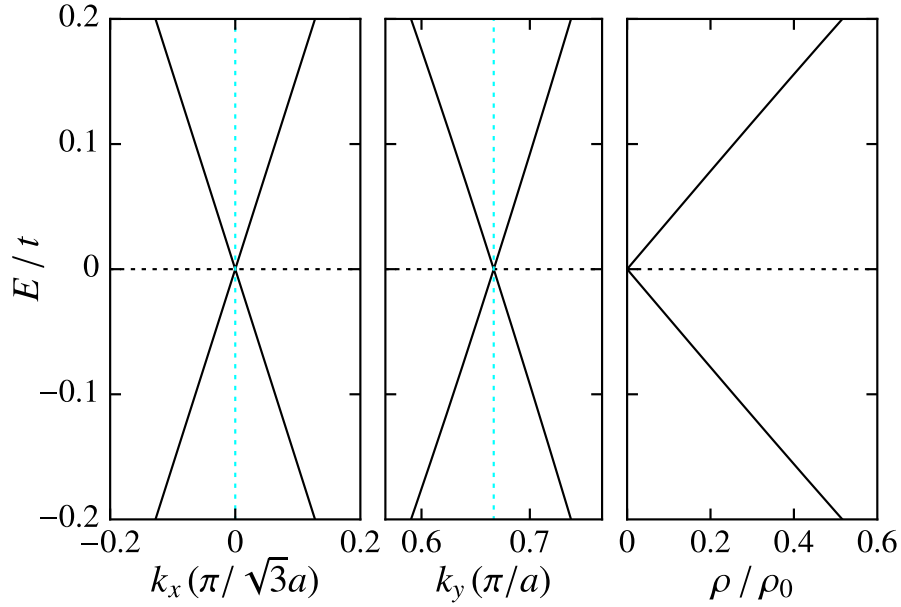


図 4.4: $N_{\mathrm{L}} = 3$，$\beta = 0$ の多層グラフェンおけるバンド構造 [左:E-k_x，中央:E-k_y] と状態密度 [右]．各バンド図のシアンの縦点線は同じ (k_x,k_y) を通る．状態密度は $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．

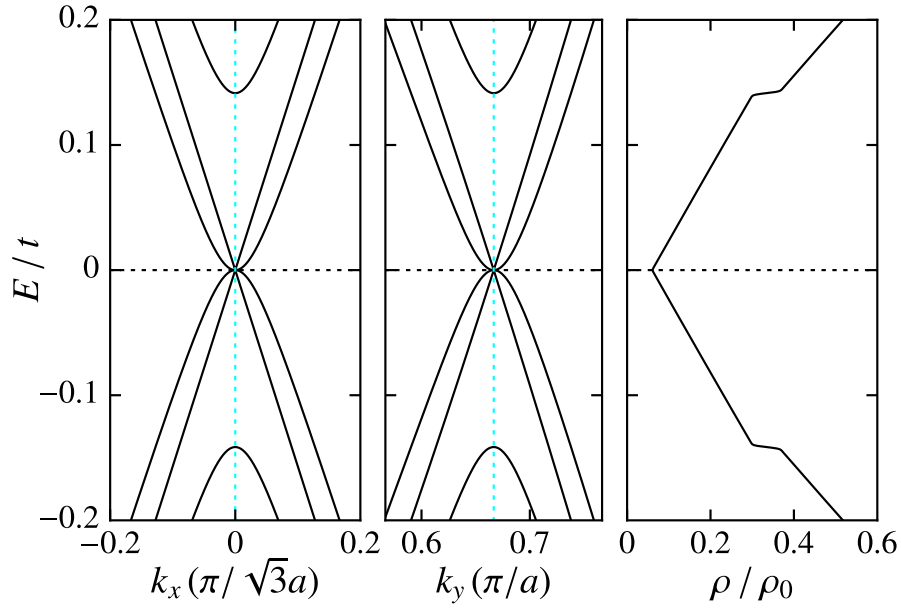


図 4.5: $N_{\mathrm{L}} = 3$，$\beta = 0.1t$ の多層グラフェンおけるバンド構造 [左:E-k_x，中央:E-k_y] と状態密度 [右]．各バンド図のシアンの縦点線は同じ (k_x,k_y) を通る．状態密度は $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．

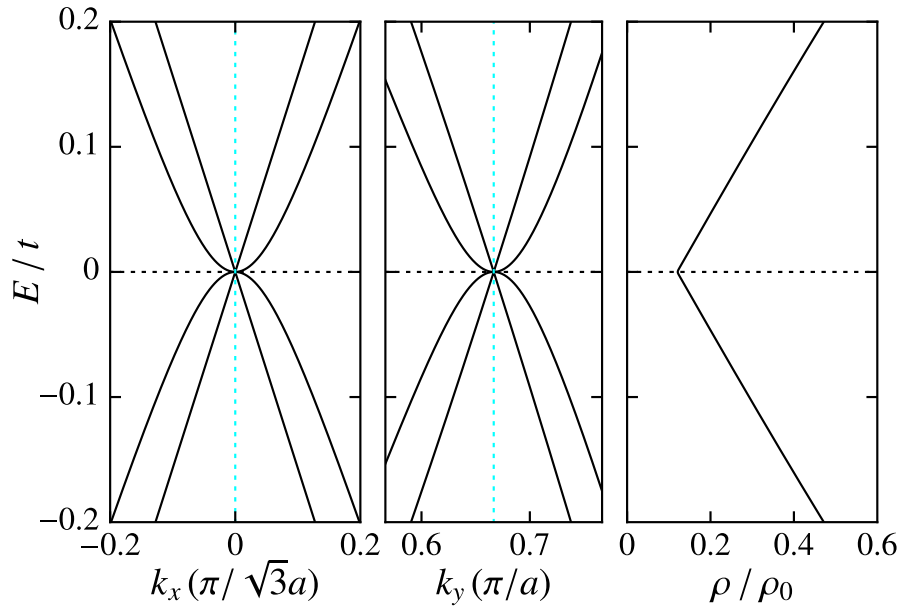


図 4.6: $N_{\mathrm{L}} = 3$，$\beta = 0.2t$ の多層グラフェンおけるバンド構造 [左:E-k_x，中央:E-k_y] と状態密度 [右]．各バンド図のシアンの縦点線は同じ (k_x,k_y) を通る．状態密度は $\rho_0 = (ta^2)^{-1}$ で規格化した．

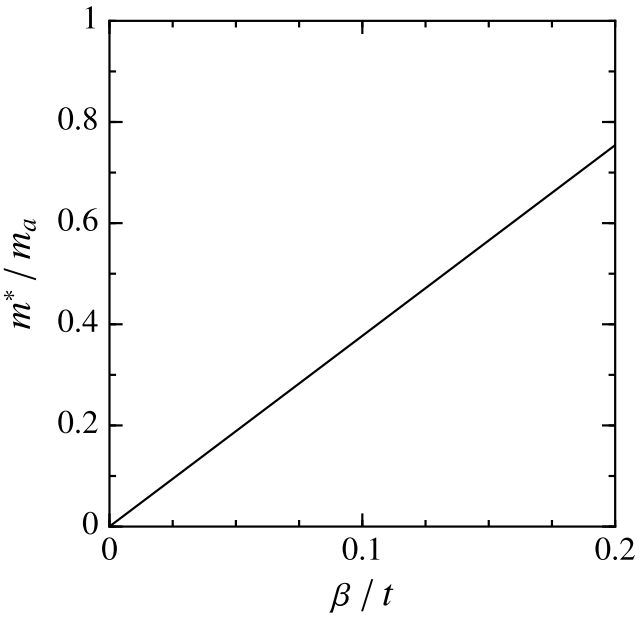


図 4.7: 層数 $N_{\mathrm{L}} = 3$ の多層グラフェンにおける有効質量 m^* の β 依存性．$m_a = \hbar^2/2ta^2$ で規格化した．

4.4　輸送特性解析モデル

輸送解析では，多層グラフェンの透過関数を非平衡グリーン関数法 [13–15] を用いて計算した．図 4.8 に示したように，長さ L の多層グラフェンの最上層の左右および最下層の左右に，半無限の単層グラフェン電極を接続し，電極間の透過関数を計算した．多層グラフェンは図 4.2 に示した AB 積層多層グラフェンを用いて，層内の原子間の移動積分を t，隣接する層間の移動積分を β とした．長さ L は，x 方向の単位胞の数 M を用いて，$L = M \times \sqrt{3}a$ と表せる．y 方向に系は十分大きいと仮定して，周期的境界条件を課した．格子定数を $a = 0.246\,\mathrm{nm}$ とすると，$M = 23$ のとき，チャネル長は約 $L = 10\,\mathrm{nm}$ となる．散乱を考慮しない弾道輸送条件のもと，式 (2.121) で与えられる透過関数 $\tau(E)$ を求めた．本研究では，右上電極から左上電極への透過関数 $\tau_{\mathrm{TL}}(E)$，右上電極から左下電極への透過関数 $\tau_{\mathrm{BL}}(E)$，右上電極から右下電極への透過関数 $\tau_{\mathrm{BR}}(E)$ について解析した．

4.4.1　チャネルのグリーン関数

図 4.8 の計算モデルにおける全系の波動方程式を以下に示す．

$$\begin{bmatrix} H_{\mathrm{TL}} & & H_{\mathrm{TLC}} & & \\ & H_{\mathrm{BL}} & H_{\mathrm{BLC}} & & \\ H_{\mathrm{TLC}}^{\dagger} & H_{\mathrm{BLC}}^{\dagger} & H_{\mathrm{CC}} & H_{\mathrm{CBR}} & H_{\mathrm{CTR}} \\ & & H_{\mathrm{CBR}}^{\dagger} & H_{\mathrm{BR}} & \\ & & H_{\mathrm{CTR}}^{\dagger} & & H_{\mathrm{TR}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_{\mathrm{UL}} \\ \Phi_{\mathrm{LL}} \\ \Phi_{\mathrm{CC}} \\ \Phi_{\mathrm{LR}} \\ \Phi_{\mathrm{UR}} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Phi_{\mathrm{UL}} \\ \Phi_{\mathrm{LL}} \\ \Phi_{\mathrm{CC}} \\ \Phi_{\mathrm{LR}} \\ \Phi_{\mathrm{UR}} \end{bmatrix} \tag{4.13}$$

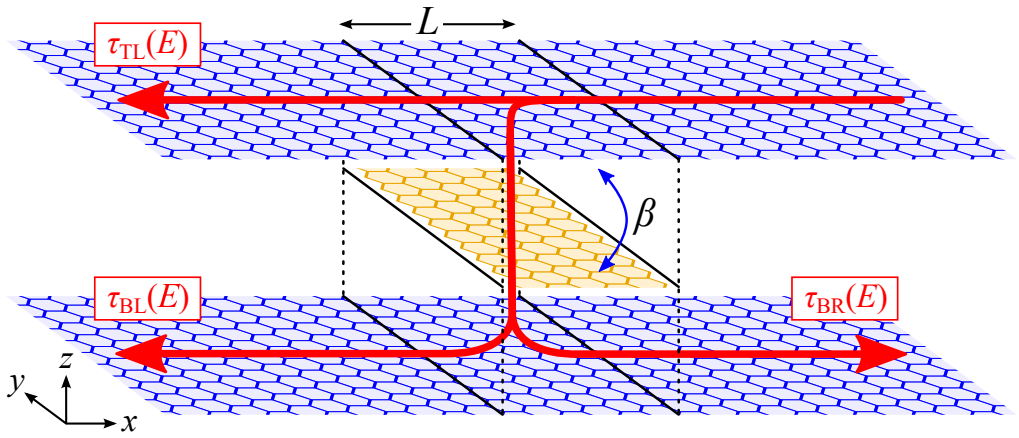


図 4.8: 多層グラフェンの輸送解析モデル．長さ L の AB 積層多層グラフェンの最上層の左右および最下層の左右に，半無限の単層グラフェン電極が接続された構造．y 方向に系は十分大きいと仮定して，周期的境界条件を課した．

ここで，Φ_{UL} は左上電極，Φ_{LL} は左下電極，Φ_{CC} はチャネル領域，Φ_{LR} は右下電極，Φ_{UR} は右上電極における波動関数である．ハミルトニアンの各副行列は，以下の式で与えられる．

$$H_{\mathrm{TL}} = \begin{bmatrix} \ddots & & \\ & H_{\mathrm{T}} & S_{\mathrm{T}} \\ & S_{\mathrm{T}}^{\dagger} & H_{\mathrm{T}} \end{bmatrix},\ H_{\mathrm{TLC}} = \begin{bmatrix} & \\ S_{\mathrm{T}} & \end{bmatrix} \tag{4.14}$$

$$H_{\mathrm{BL}} = \begin{bmatrix} \ddots & & \\ & H_{\mathrm{B}} & S_{\mathrm{B}} \\ & S_{\mathrm{B}}^{\dagger} & H_{\mathrm{B}} \end{bmatrix},\ H_{\mathrm{BLC}} = \begin{bmatrix} & \\ S_{\mathrm{B}} & \end{bmatrix} \tag{4.15}$$

$$H_{\mathrm{CC}} = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ M \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & \cdots & M \end{array} \\ \begin{pmatrix} H_{\mathrm{C}} & S_{\mathrm{C}} & & & \\ S_{\mathrm{C}}^{\dagger} & H_{\mathrm{C}} & S_{\mathrm{C}} & & \\ & S_{\mathrm{C}}^{\dagger} & H_{\mathrm{C}} & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & S_{\mathrm{C}} \\ & & & S_{\mathrm{C}}^{\dagger} & H_{\mathrm{C}} \end{pmatrix} \end{array} \tag{4.16}$$

$$H_{\mathrm{CBR}} = \begin{bmatrix} & \\ S_{\mathrm{B}} & \end{bmatrix},\ H_{\mathrm{CTR}} = \begin{bmatrix} & \\ S_{\mathrm{T}} & \end{bmatrix} \tag{4.17}$$

$$H_{\mathrm{BR}} = \begin{bmatrix} H_{\mathrm{B}} & S_{\mathrm{B}} & \\ S_{\mathrm{B}}^{\dagger} & H_{\mathrm{B}} & \\ & \ddots & \end{bmatrix}, H_{\mathrm{TR}} = \begin{bmatrix} H_{\mathrm{T}} & S_{\mathrm{T}} & \\ S_{\mathrm{T}}^{\dagger} & H_{\mathrm{T}} & \\ & \ddots & \end{bmatrix} \tag{4.18}$$

H_{CC} の大きさは，$4N_{\mathrm{L}}M \times 4N_{\mathrm{L}}M$ である．H_{C}, S_{C}, H_{T}, S_{T}, H_{B}, S_{B} の大きさはすべて $4N_{\mathrm{L}} \times 4N_{\mathrm{L}}$ である．ここで，H_{C}，S_{C} は，H_0 [式 (4.3)]，T_{U} [式 (4.7)]，T_{D} [式 (4.9)]，T_{R} [式 (4.5)]，T_{UR} [式 (4.11)] を用いて，以下の式で与えられる．

$$H_{\mathrm{C}} = H_0 + T_{\mathrm{U}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y L_y} + T_{\mathrm{D}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y L_y} \tag{4.19}$$

$$S_{\mathrm{C}} = T_{\mathrm{R}} + T_{\mathrm{UR}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y L_y} \tag{4.20}$$

H_{T} は H_{C} の N_{L} 層目のブロックのみを残した行列，S_{T} は S_{C} の N_{L} 層目のブロックのみを残した行列，H_{B} は H_{C} の 1 層目のブロックのみを残した行列，S_{B} は S_{C} の 1 層目のブロックのみを残した行列であ

る．H_{T}，S_{T}，H_{B}，S_{B} の (i,j) 要素を以下に示す．（$i,j=1,2,\ldots,4N_{\mathrm{L}}$）

$$[H_{\mathrm{T}}]_{ij}=\begin{cases}[H_{\mathrm{C}}]_{ij} & 4N_{\mathrm{L}}-3\leqq(i,j)\leqq 4N_{\mathrm{L}}\\ 0 & \text{その他}\end{cases} \tag{4.21}$$

$$[S_{\mathrm{T}}]_{ij}=\begin{cases}[S_{\mathrm{C}}]_{ij} & 4N_{\mathrm{L}}-3\leqq(i,j)\leqq 4N_{\mathrm{L}}\\ 0 & \text{その他}\end{cases} \tag{4.22}$$

$$[H_{\mathrm{B}}]_{ij}=\begin{cases}[H_{\mathrm{C}}]_{ij} & 1\leqq(i,j)\leqq 4\\ 0 & \text{その他}\end{cases} \tag{4.23}$$

$$[S_{\mathrm{B}}]_{ij}=\begin{cases}[S_{\mathrm{C}}]_{ij} & 1\leqq(i,j)\leqq 4\\ 0 & \text{その他}\end{cases} \tag{4.24}$$

以上の式を用いて，全系の遅延グリーン関数行列は，

$$\mathcal{G}^r(E)=[E-\mathcal{H}+\mathrm{i}0]^{-1}=$$
$$\begin{bmatrix}E-H_{\mathrm{TL}}+\mathrm{i}0 & & -H_{\mathrm{TLC}} & & \\ & E-H_{\mathrm{BL}}+\mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{BLC}} & & \\ -H_{\mathrm{TLC}}^{\dagger} & -H_{\mathrm{BLC}}^{\dagger} & E-H_{\mathrm{CC}}+\mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{CBR}} & -H_{\mathrm{CTR}} \\ & & H_{\mathrm{CBR}}^{\dagger} & E-H_{\mathrm{BR}}+\mathrm{i}0 & \\ & & -H_{\mathrm{CTR}}^{\dagger} & & E-H_{\mathrm{TR}}+\mathrm{i}0\end{bmatrix}^{-1} \tag{4.25}$$

と表せる．ここで，ブロック毎にグリーン関数を定義する．

$$\begin{bmatrix}G_{\mathrm{TL}} & & G_{\mathrm{TLC}} & & \\ & G_{\mathrm{BL}} & G_{\mathrm{BLC}} & & \\ G_{\mathrm{CTL}} & G_{\mathrm{CBL}} & G_{\mathrm{CC}} & G_{\mathrm{CBR}} & G_{\mathrm{CTR}} \\ & & G_{\mathrm{BRC}} & G_{\mathrm{BR}} & \\ & & G_{\mathrm{TRC}} & & G_{\mathrm{TR}}\end{bmatrix}=$$
$$\begin{bmatrix}E-H_{\mathrm{TL}}+\mathrm{i}0 & & -H_{\mathrm{TLC}} & & \\ & E-H_{\mathrm{BL}}+\mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{BLC}} & & \\ -H_{\mathrm{TLC}}^{\dagger} & -H_{\mathrm{BLC}}^{\dagger} & E-H_{\mathrm{CC}}+\mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{CBR}} & -H_{\mathrm{CTR}} \\ & & H_{\mathrm{CBR}}^{\dagger} & E-H_{\mathrm{BR}}+\mathrm{i}0 & \\ & & -H_{\mathrm{CTR}}^{\dagger} & & E-H_{\mathrm{TR}}+\mathrm{i}0\end{bmatrix}^{-1} \tag{4.26}$$

この式は，

$$\begin{bmatrix}E-H_{\mathrm{TL}}+\mathrm{i}0 & & -H_{\mathrm{TLC}} & & \\ & E-H_{\mathrm{BL}}+\mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{BLC}} & & \\ -H_{\mathrm{TLC}}^{\dagger} & -H_{\mathrm{BLC}}^{\dagger} & E-H_{\mathrm{CC}}+\mathrm{i}0 & -H_{\mathrm{CBR}} & -H_{\mathrm{CTR}} \\ & & H_{\mathrm{CBR}}^{\dagger} & E-H_{\mathrm{BR}}+\mathrm{i}0 & \\ & & -H_{\mathrm{CTR}}^{\dagger} & & E-H_{\mathrm{TR}}+\mathrm{i}0\end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix}G_{\mathrm{TL}} & & G_{\mathrm{TLC}} & & \\ & G_{\mathrm{BL}} & G_{\mathrm{BLC}} & & \\ G_{\mathrm{CTL}} & G_{\mathrm{CBL}} & G_{\mathrm{CC}} & G_{\mathrm{CBR}} & G_{\mathrm{CTR}} \\ & & G_{\mathrm{BRC}} & G_{\mathrm{BR}} & \\ & & G_{\mathrm{TRC}} & & G_{\mathrm{TR}}\end{bmatrix}=1 \tag{4.27}$$

と表される．この式において，左行列の 3 行目と右行列の 3 列目の積より，

$$-H_{\mathrm{TLC}}^{\dagger}G_{\mathrm{TLC}} - H_{\mathrm{BLC}}^{\dagger}G_{\mathrm{BLC}} + [E - H_{\mathrm{CC}} + \mathrm{i}0]G_{\mathrm{CC}} - H_{\mathrm{CBR}}G_{\mathrm{BRC}} - H_{\mathrm{CTR}}G_{\mathrm{TRC}} = 1 \tag{4.28}$$

が得られる．同様に 1 行目と 2 列目および 3 行目と 2 列目の積より，

$$\underbrace{[E - H_{\mathrm{TL}} + \mathrm{i}0]}_{g_{\mathrm{TL}}^{-1}} G_{\mathrm{TLC}} - H_{\mathrm{TLC}}G_{\mathrm{CC}} = 0 \quad \Rightarrow \quad G_{\mathrm{TLC}} = g_{\mathrm{TL}}H_{\mathrm{TLC}}G_{\mathrm{CC}} \tag{4.29}$$

$$\underbrace{[E - H_{\mathrm{BL}} + \mathrm{i}0]}_{g_{\mathrm{BL}}^{-1}} G_{\mathrm{BLC}} - H_{\mathrm{BLC}}G_{\mathrm{CC}} = 0 \quad \Rightarrow \quad G_{\mathrm{BLC}} = g_{\mathrm{BL}}H_{\mathrm{BLC}}G_{\mathrm{CC}} \tag{4.30}$$

$$-H_{\mathrm{CBR}}^{\dagger}G_{\mathrm{CC}} + \underbrace{[E - H_{\mathrm{BR}} + \mathrm{i}0]}_{g_{\mathrm{BR}}^{-1}} G_{\mathrm{BRC}} = 0 \quad \Rightarrow \quad G_{\mathrm{BRC}} = g_{\mathrm{BR}}H_{\mathrm{CBR}}^{\dagger}G_{\mathrm{CC}} \tag{4.31}$$

$$-H_{\mathrm{CTR}}^{\dagger}G_{\mathrm{CC}} + \underbrace{[E - H_{\mathrm{TR}} + \mathrm{i}0]}_{g_{\mathrm{TR}}^{-1}} G_{\mathrm{TRC}} = 0 \quad \Rightarrow \quad G_{\mathrm{TRC}} = g_{\mathrm{TR}}H_{\mathrm{CTR}}^{\dagger}G_{\mathrm{CC}} \tag{4.32}$$

が得られる．これらの式を式 (4.28) に代入すると，

$$-H_{\mathrm{TLC}}^{\dagger}g_{\mathrm{TL}}H_{\mathrm{TLC}}G_{\mathrm{CC}} - H_{\mathrm{BLC}}^{\dagger}g_{\mathrm{BL}}H_{\mathrm{BLC}}G_{\mathrm{CC}} + [E - H_{\mathrm{CC}} + \mathrm{i}0]G_{\mathrm{CC}} \tag{4.33}$$

$$-H_{\mathrm{CBR}}g_{\mathrm{BR}}H_{\mathrm{CBR}}^{\dagger}G_{\mathrm{CC}} - H_{\mathrm{CTR}}g_{\mathrm{TR}}H_{\mathrm{CTR}}^{\dagger}G_{\mathrm{CC}} = 1 \tag{4.34}$$

すなわち，

$$[E - H_{\mathrm{CC}} - \underbrace{H_{\mathrm{TLC}}^{\dagger}g_{\mathrm{TL}}H_{\mathrm{TLC}}}_{\Sigma_{\mathrm{TL}}} - \underbrace{H_{\mathrm{BLC}}^{\dagger}g_{\mathrm{BL}}H_{\mathrm{BLC}}}_{\Sigma_{\mathrm{BL}}} - \underbrace{H_{\mathrm{CBR}}g_{\mathrm{BR}}H_{\mathrm{CBR}}^{\dagger}}_{\Sigma_{\mathrm{BR}}} - \underbrace{H_{\mathrm{CTR}}g_{\mathrm{TR}}H_{\mathrm{CTR}}^{\dagger}}_{\Sigma_{\mathrm{TR}}}]G_{\mathrm{CC}} = 1 \tag{4.35}$$

が得られる．したがって，チャネルのグリーン関数 G_{CC} は

$$G_{\mathrm{CC}}(E) = [E - H_{\mathrm{CC}} - \Sigma_{\mathrm{TL}}(E) - \Sigma_{\mathrm{BL}}(E) - \Sigma_{\mathrm{BR}}(E) - \Sigma_{\mathrm{TR}}(E)]^{-1} \tag{4.36}$$

と表され，4 つの電極の効果を表す自己エネルギー $\Sigma_{\mathrm{TL/BL/BR/TR}}(E)$ を求めることで，$G_{\mathrm{CC}}(E)$ を求めることができる．

4.4.2 電極の自己エネルギー

本研究で考察した輸送特性解析モデルでは，AB 積層の多層グラフェンであるため，層数 N_{L} が偶数か奇数かで計算に用いる自己エネルギーが異なる．N_{L} が奇数の場合，最上層と最下層はどちらとも図 2.8 に示した単位胞の取り方と等しいため，式 (2.114) と式 (2.116) で求めた自己エネルギー $\sigma_{\mathrm{L}}(E)$，$\sigma_{\mathrm{R}}(E)$ を用いる．N_{L} が偶数の場合，最下層は $\sigma_{\mathrm{L}}(E)$，$\sigma_{\mathrm{R}}(E)$ を用いるが，最上層の単位胞は，図 2.8 で示した単位胞より相対的に x 方向に原子間距離だけ平行移動しているので，ハミルトニアン行列が異なり，自己エネルギーの値も異なってくる．したがって，N_{L} が偶数のときは，式 (2.87) を $s_{\mathrm{AB}} = -u^{*}$，$s_{\mathrm{CD}} = -u$，$s_{\mathrm{BC}} = s_{\mathrm{DA}} = -t$，として求めた自己エネルギー $\sigma_{\mathrm{R}}'(E)$ と $\sigma_{\mathrm{L}}'(E)$ を用いる必要がある．

右上電極に関するグリーン関数 $g_{\mathrm{TR}}(E)$ を

$$g_{\mathrm{TR}} = \begin{bmatrix} g_{\mathrm{TR},N+1,N+1} & g_{\mathrm{TR},N+1,N+2} & \cdots \\ g_{\mathrm{TR},N+2,N+1} & g_{\mathrm{TR},N+2,N+2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{4.37}$$

と表す．ここで，$g_{\mathrm{TR},i,j}$ の大きさは，$4N_{\mathrm{L}} \times 4N_{\mathrm{L}}$ である．式 (4.17) で示したように，H_{CTR} は左下のブロック（M ユニット目）のみ値があるので，

$$\Sigma_{\mathrm{TR}} = H_{\mathrm{CTR}} g_{\mathrm{TR}}(E) H_{\mathrm{CTR}}^{\dagger} = \begin{bmatrix} & & \\ & & \\ & & S_{\mathrm{T}} g_{\mathrm{TR},N+1,N+1} S_{\mathrm{T}}^{\dagger} \end{bmatrix} \tag{4.38}$$

となり，Σ_{TR} は右下のブロック（M ユニット目）のみに値があることがわかる．また，式 (4.22) で示したように，S_{T} は右下のブロック（N_{L} 層目）の左下要素（D 層と A 層の結合）にのみ値がある．したがって，Σ_{TR} は右下のブロックのさらに右下のブロックの右下要素のみに値 $\sigma_{\mathrm{TR}}(E)$ をもつ．N_{L} が奇数のとき，$\sigma_{\mathrm{TR}}(E) = \sigma_{\mathrm{R}}(E)$ となり，N_{L} が偶数のとき，$\sigma_{\mathrm{TR}}(E) = \sigma'_{\mathrm{R}}(E)$ となる．

同様に，右下電極の自己エネルギーは

$$\Sigma_{\mathrm{BR}} = H_{\mathrm{CBR}} g_{\mathrm{BR}}(E) H_{\mathrm{CBR}}^{\dagger} = \begin{bmatrix} & & \\ & & \\ & & S_{\mathrm{B}} g_{\mathrm{BR},N+1,N+1} S_{\mathrm{B}}^{\dagger} \end{bmatrix} \tag{4.39}$$

となり，Σ_{BR} は右下のブロック（M ユニット目）のみに値があることがわかる．また，式 (4.24) で示したように，S_{B} は左上のブロック（1 層目）の左下要素（D 層と A 層の結合）のみに値がある．したがって，Σ_{BR} は右下のブロックのさらに左上のブロックの右下要素のみに値 $\sigma_{\mathrm{BR}}(E)$ をもつ．N_{L} が偶数か奇数かにかかわらず，$\sigma_{\mathrm{BR}}(E) = \sigma_{\mathrm{R}}(E)$ である．

同様に，左上電極の自己エネルギーは

$$\Sigma_{\mathrm{TL}} = H_{\mathrm{TLC}}^{\dagger} g_{\mathrm{TL}} H_{\mathrm{TLC}} = \begin{bmatrix} S_{\mathrm{T}} g_{\mathrm{TL},N+1,N+1} S_{\mathrm{T}}^{\dagger} & & \\ & & \\ & & \end{bmatrix} \tag{4.40}$$

となり，Σ_{TL} は左上のブロック（1 ユニット目）のみに値があることがわかる．また，式 (4.24) で示したように，S_{T} は右下のブロック（N_{L} 層目）の左下要素（D 層と A 層の結合）のみに値がある．したがって，Σ_{TL} は左上のブロックのさらに右下のブロックの右下要素のみに値 $\sigma_{\mathrm{TL}}(E)$ をもつ．$\sigma_{\mathrm{TR}}(E)$ のときと同様に，$\sigma_{\mathrm{TL}}(E)$ の値は，N_{L} が奇数のとき，$\sigma_{\mathrm{TL}}(E) = \sigma_{\mathrm{L}}(E)$ となり，N_{L} が偶数のとき，$\sigma_{\mathrm{TL}}(E) = \sigma'_{\mathrm{L}}(E)$ となる．

同様に，左下電極の自己エネルギーは

$$\Sigma_{\mathrm{BL}} = H_{\mathrm{BLC}}^{\dagger} g_{\mathrm{BL}} H_{\mathrm{BLC}} = \begin{bmatrix} S_{\mathrm{B}} g_{\mathrm{BL},N+1,N+1} S_{\mathrm{B}}^{\dagger} & & \\ & & \\ & & \end{bmatrix} \tag{4.41}$$

となり，Σ_{BL} は左上のブロック（1 ユニット目）のみに値があることがわかる．また，式 (4.24) で示したように，S_{B} は左上のブロック（1 層目）の左下要素（D 層と A 層の結合）のみ値がある．したがって，

Σ_{BL} は左上のブロックのさらに左上のブロックの左上要素のみに値 $\sigma_{\mathrm{BL}}(E)$ をもつ．$\sigma_{\mathrm{BR}}(E)$ のときと同様に，N_{L} が偶数か奇数かにかかわらず，$\sigma_{\mathrm{BL}}(E) = \sigma_{\mathrm{L}}(E)$ である．

以上をまとめた，電極の効果を表す自己エネルギーの行列を図 4.9 に示す．

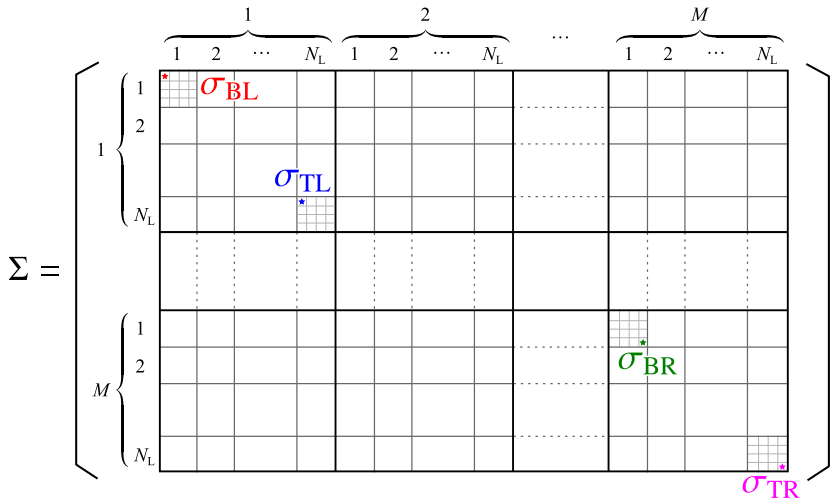


図 4.9: 電極の効果を表す自己エネルギーの行列をまとめたもの．

4.4.3　透過関数

チャネルのグリーン関数 $G_{k_y}(E)$ [式 (4.36)] と電極の自己エネルギー $\Sigma_{\alpha,k_y}(E)$ [式 (4.38)–式 (4.41)] を用いて，透過関数 $T_{k_y}(E)$ を求める．右上電極から左上電極への透過関数 $T_{\mathrm{TL}k_y}(E)$ は，

$$T_{\mathrm{TL}k_y}(E) = \mathrm{Tr}[\Gamma_{\mathrm{TL},k_y}(E) G_{k_y}(E) \Gamma_{\mathrm{TR},k_y}(E) G^{\dagger}_{k_y}(E)] \tag{4.42}$$

ここで，

$$\Gamma_{\alpha,k_y}(E) = \mathrm{i}[\Sigma_{\alpha,k_y}(E) - \Sigma^{\dagger}_{\alpha,k_y}(E)], \quad (\alpha = \mathrm{TL}, \mathrm{TR}, \mathrm{BL}, \mathrm{BR}) \tag{4.43}$$

である．また，y 方向の単位幅あたりの透過関数 $\tau_{\mathrm{TL}}(E)$ は，

$$\tau_{\mathrm{TL}}(E) = \int \frac{dk_y}{2\pi} T_{\mathrm{TL}k_y}(E) \tag{4.44}$$

で与えられる．

同様に，右上電極から左下電極への透過関数 $T_{\mathrm{BL}k_y}(E)$ と，透過関数 $\tau_{\mathrm{BL}}(E)$ は，

$$T_{\mathrm{BL}k_y}(E) = \mathrm{Tr}[\Gamma_{\mathrm{BL},k_y}(E) G_{k_y}(E) \Gamma_{\mathrm{TR},k_y}(E) G^{\dagger}_{k_y}(E)] \tag{4.45}$$

$$\tau_{\mathrm{BL}}(E) = \int \frac{dk_y}{2\pi} T_{\mathrm{BL}k_y}(E) \tag{4.46}$$

で与えられ，右上電極から右下電極への透過関数 $T_{\mathrm{BR}k_y}(E)$ と，透過関数 $\tau_{\mathrm{BR}}(E)$ は，

$$T_{\mathrm{BR}k_y}(E) = \mathrm{Tr}[\Gamma_{\mathrm{BR},k_y}(E) G_{k_y}(E) \Gamma_{\mathrm{TR},k_y}(E) G^{\dagger}_{k_y}(E)] \tag{4.47}$$

$$\tau_{\mathrm{BR}}(E) = \int \frac{dk_y}{2\pi} T_{\mathrm{BR}k_y}(E) \tag{4.48}$$

で与えられる．

4.5　多層グラフェンの輸送特性

4.5.1　層間結合強度依存性

$L = 10\,\mathrm{nm}$ の系における $\beta = 0$，0.1，0.2，0.39 eV のときの，右上電極から左上電極への透過関数 $\tau_{\mathrm{TL}}(E)$ を図 4.10 に，右上電極から左下電極への透過関数 $\tau_{\mathrm{BL}}(E)$ を図 4.11 に，右上電極から右下電極への透過関数 $\tau_{\mathrm{BR}}(E)$ を図 4.12 に示す．各図の (b) は，(a) に示した透過関数の $E = 0$ 付近を拡大した図である．

層間結合が存在しないとき，下電極への透過は起こらず，$\tau_{\mathrm{BL}}(E) = \tau_{\mathrm{BR}}(E) = 0$ である．一方，$\tau_{\mathrm{TL}}(E)$ は単層グラフェンにおける透過関数と等しくなる．単層グラフェンにおける透過関数は，$E = 0$ 付近での線形の分散関係に起因して線形となり，$\tau_{\mathrm{TL}}(E) = (g_{\mathrm{v}}/2\pi)(2|E|/\hbar v_0)$ となる（図 4.10(a) の赤破線）．ここで $g_{\mathrm{v}} = 2$ はバレー縮退度，$v_0 = \sqrt{3}at/2\hbar$ はバルクグラフェンのフェルミ速度である．層間結合が存在すると，下電極への透過が生じ，$|E|$ が大きいエネルギー領域において，$\tau_{\mathrm{BL}}(E)$，$\tau_{\mathrm{BR}}(E)$ の値が大きくなり，$\tau_{\mathrm{TL}}(E)$ の値が小さくなる．しかし，$E = 0$ 付近における $\tau_{\mathrm{TL}}(E)$ は，β の値を大きくしても線形性を保っており（図 4.10(b)），$E = 0$ 付近の透過関数は，層間結合の影響をほとんど受けないことがわかった．

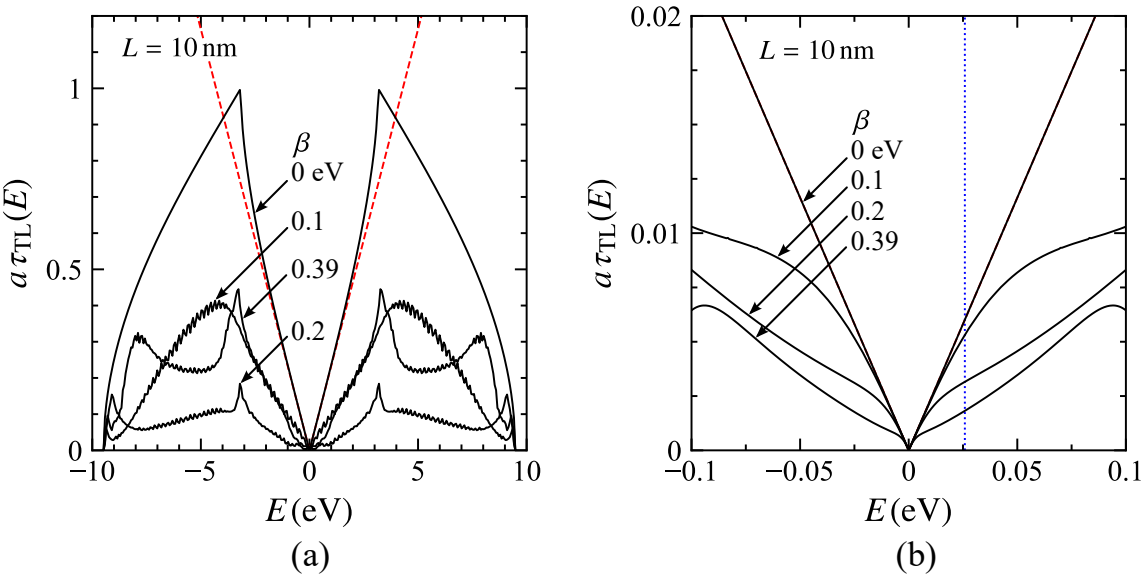


図 4.10: (a) $\beta = 0$, 0.1, 0.2, 0.39 eV の多層グラフェン（$L = 10\,\mathrm{nm}$）における右上電極から左上電極への透過関数 $\tau_{\mathrm{TL}}(E)$．赤破線は $\tau_{\mathrm{TL}}(E) = (g_{\mathrm{v}}/2\pi)(2|E|/\hbar v_0)$ の関係を示す．(b) フェルミ準位付近を拡大した図．青点線は室温 300 K の熱エネルギーを表す．

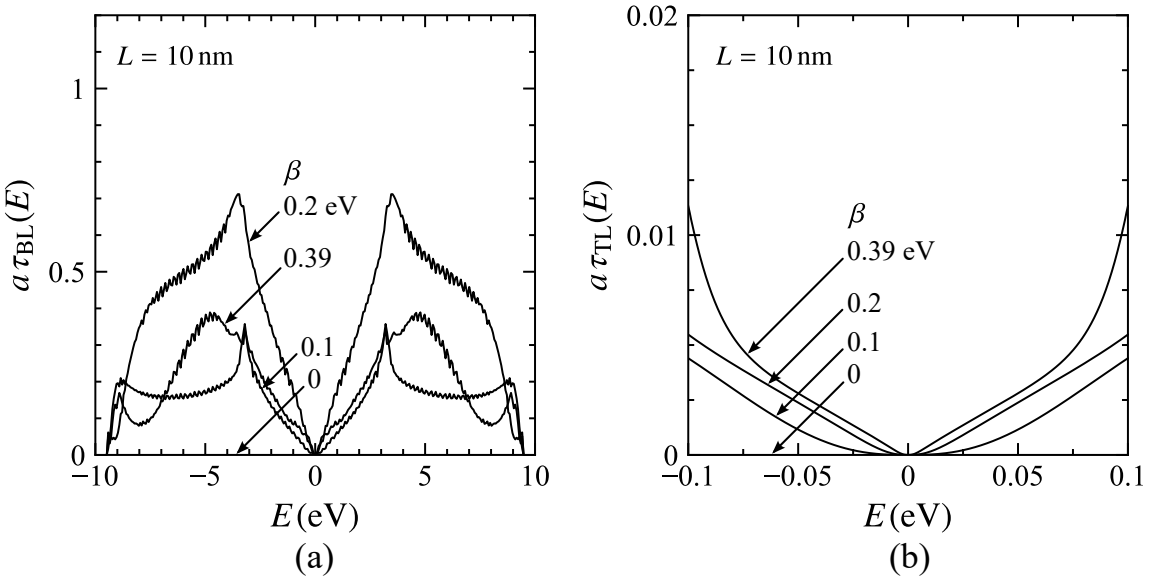


図 4.11: (a) $\beta = 0$, 0.1, 0.2, 0.39 eV の多層グラフェン（$L = 10\,\mathrm{nm}$）における右上電極から左下電極への透過関数 $\tau_{\mathrm{BL}}(E)$. (b) フェルミ準位付近を拡大した図.

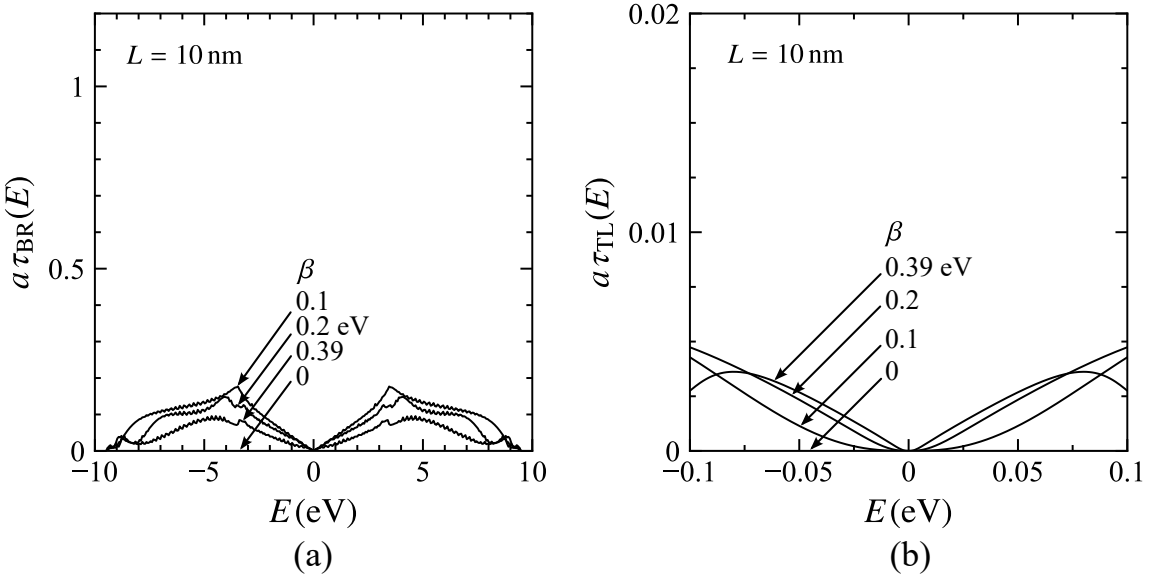


図 4.12: (a) $\beta = 0$, 0.1, 0.2, 0.39 eV の多層グラフェン（$L = 10\,\mathrm{nm}$）における右上電極から右下電極への透過関数 $\tau_{\mathrm{BR}}(E)$. (b) フェルミ準位付近を拡大した図.

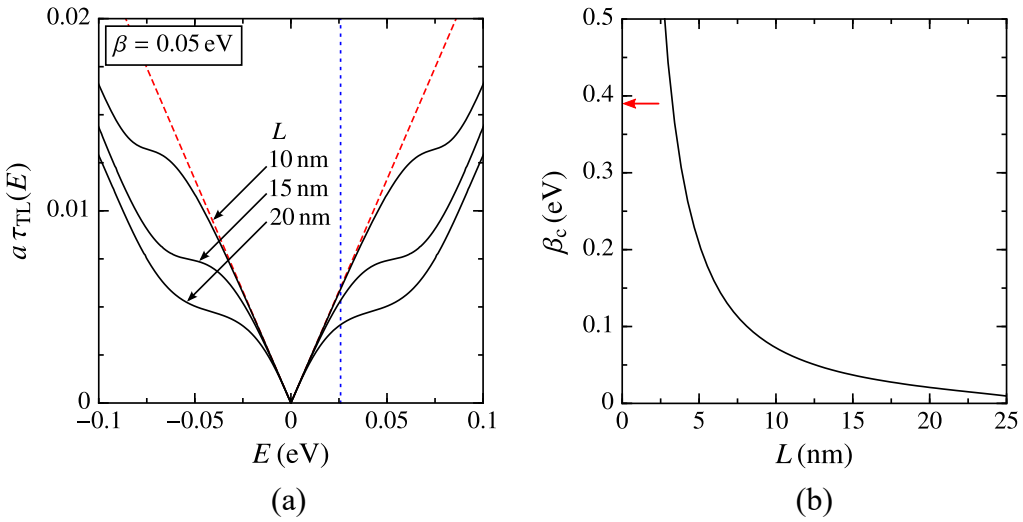


図 4.13: (a) $L = 10, 15, 20$ nm の多層グラフェン（$\beta = 0.05$ eV）における右上電極から左上電極への透過関数 $\tau_{TL}(E)$．(b) 臨界値 β_c の L 依存性．赤い矢印はグラファイトの層間結合強度の値を示す．

4.5.2　チャネル長依存性

$L = 10$ nm，15 nm, 20 nm の系におけるフェルミ準位付近での透過関数 $\tau_{TL}(E)$ のエネルギー依存性を図 4.13(a) に示す（$\beta = 0.05$ eV とした）．チャネル長 L を長くするほど，透過関数の値が小さくなり，層間結合の影響を受けないエネルギー領域が狭くなることがわかった，その様子を詳しく調べるため，室温 300 K の熱エネルギー（図 4.10(b) および図 4.13(a) の青点線）における $\tau_{TL}(E)$ の値が単層グラフェンでの値の 95% となる β の値を臨界値 β_c と定義し，β_c の L 依存性を調べた．β_c は，室温まで線形性を保つことができる限界の層間結合の強さを表している．結果を図 4.13(b) に示す．赤矢印はグラファイトの層間結合強度を示す．グラファイトの場合，約 5 nm が限界であるが，乱層構造などで層間結合強度を弱くすることで，単層グラフェンの輸送特性を保ったままチャネル長を長くできることがわかった．

4.5.3　単層グラフェンの輸送特性を保つ理由

単層グラフェンの輸送特性を保つ理由について説明する．図 4.14(a) に示すように，本研究で考察したモデルでは，上層と下層のバルクグラフェンに挟まれた間の層は，y 方向に沿ったジグザグ端ナノリボンとなっている．図 4.14(b) に，バルクグラフェンとジグザグ端ナノリボンの E-k_y 分散を示す．青線がリボン幅 $N = 4$ のジグザグ端ナノリボン，灰色の領域がバルクグラフェンの E-k_y 分散を表している．本研究で用いたモデルは，y 方向には，並進対称性をもつため y 方向の波数 k_y は保存される．また，散乱を考慮していないためエネルギーも保存される．したがって，バルクグラフェンとジグザグ端ナノリボンに E-k_y 分散の重なりがなければ，透過が生じないことになる．図 4.14(b) に示したように，ジグザグ端ナノリボンは，フェルミ準位付近で線形分散をもたず，平らなバンドをもっている．したがって，フェルミ準位付近でバルクグラフェンとジグザグ端ナノリボンの E-k_y 分散が重ならず，透過が生じないということがわかった．

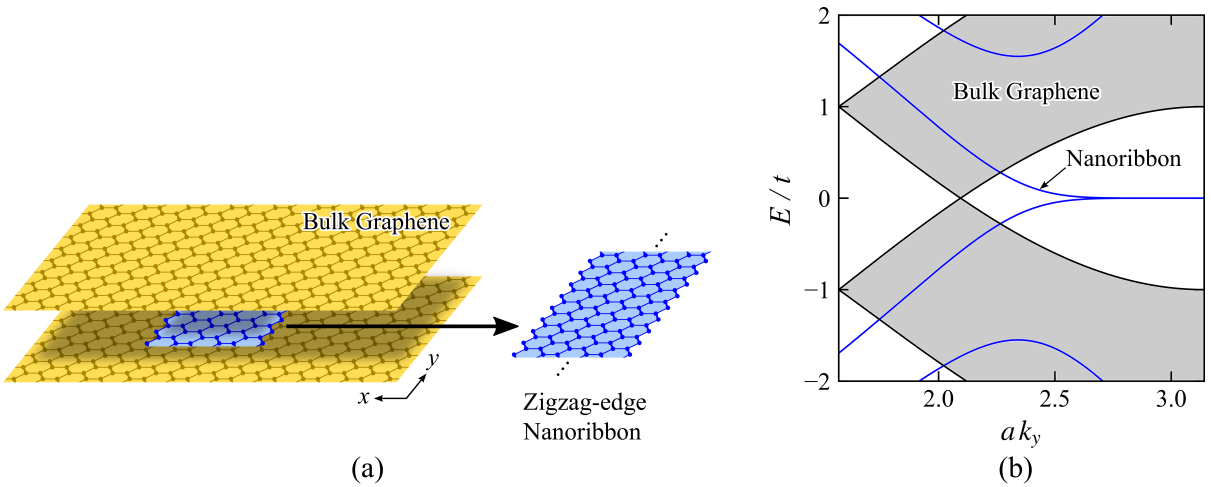


図 4.14: (a) 上層と下層のバルクグラフェンに挟まれた間の層は，y 方向に沿ったジグザグ端ナノリボンとなっている．(b) リボン幅 $N = 4$ のジグザグ端ナノリボン（青線）とバルクグラフェン（灰色）の E-k_y 分散．

4.6　デバイス設計の指針

AB 積層などのきれいに積層された多層グラフェンは線形エネルギー分散を失うため，移動度が低下する問題があった．これまでは，乱層構造を用いることで層間の結合を弱くし，線形分散を失わないようにするという解決策があった．本章の解析結果は，乱層構造による層間結合を弱くする工夫をしなくとも，AB 積層において単層グラフェンの輸送特性を保つことのできる新たな解決策を与えたと考えられる．具体的には，図 4.15 に示すように，3 層の多層グラフェンの上層と下層のみに電極を取り付ける．また，中間層に電極を接続せず，y 方向に沿ったジグザグ端ナノリボンにすることで，上層のソース電極から上層のドレイン電極への電荷輸送は，単層グラフェンの輸送特性を保つ．同様に，下層のソース電極から下層のドレイン電極への輸送特性も単層グラフェンの特性を保つ．したがって，単層グラフェンの高い移動度を保ったまま，2 倍の電流を扱うことができると考えられる．

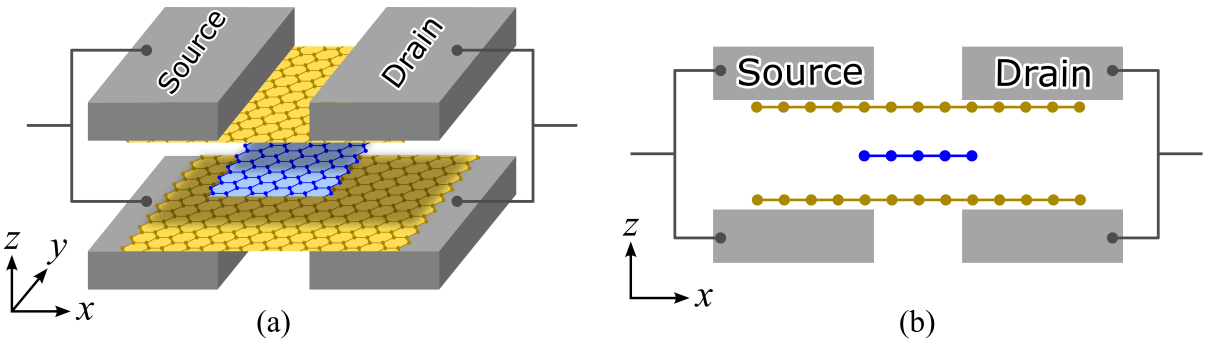


図 4.15: 3 層の多層グラフェンを電子デバイスのチャネルに用いる際の設計例．(a) 斜めから見た図．(b) 横から見た図．

4.7　まとめ

本章では，グラフェンが積層された構造である多層グラフェンにおいて，層間結合が輸送特性に与える影響を解析した結果を記述した．

比較的強い層間結合が存在しても，ディラック点付近における透過関数は，単層グラフェンの輸送特性の特徴である線形性を保ち，層間結合の影響をほとんど受けないことがわかった．これは，最上層と最下層に挟まれた中間層をチャネル幅方向に沿ったジグザグ端ナノリボンとすることで，幅方向の波数保存により，ディラック点付近に透過できないエネルギー領域が生じるためであることがわかった．また，室温の熱エネルギーまで単層グラフェンの輸送特性を保つことができる層間結合強度の臨界値 β_{c} のチャネル長依存性を計算し，層間結合が弱いほど，単層グラフェンの輸送特性を保ったままチャネル長を長くできるということがわかった．

以上の輸送特性解析の結果から，多層グラフェンをデバイスに応用する際の設計指針を提案した．3 層の多層グラフェンの上層と下層のみに電極を取り付けることで，単層グラフェンの高い移動度を保ったまま，単層グラフェンデバイスより大きな電流を扱うことができると考えられる．

参考文献

[1] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H. L. Stormer, Solid State Commun., **146**, 351 (2008).

[2] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, Rev. Mod. Phys., **83**, 407 (2011).

[3] J. Hass, R. Feng, J. E. Millán-Otoya, X. Li, M. Sprinkle, P. N. First, W. A. de Heer, E. H. Conrad, and C. Berger, Phys. Rev. B., **75**, 214109 (2007).

[4] J. Hass, W. A. de Heer, and E. H. Conrad, J. Phys.: Condens. Matter., **20**, 323202 (2008).

[5] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys., **81**, 109 (2009).

[6] S. Z. Butler, S. M. Hollen, L. Cao, Y. Cui, J. A. Gupta, H. R. Gutiérrez, T. F. Heinz, S. S. Hong, J. Huang, A. F. Ismach, E. Johnston-Halperin, M. Kuno, V. V. Plashnitsa, R. D. Robinson, R. S. Ruoff, S. Salahuddin, J. Shan, L. Shi, M. G. Spencer, M. Terrones, W. Windl, and J. E. Goldberger, ACS Nano, **7**, 2898 (2013).

[7] E. McCann and M. Koshino, Rep. Prog. Phys., **76**, 056503 (2013).

[8] S. Latil, V. Meunier, and L. Henrard, Phys. Rev. B., **76**, 201402 (2007).

[9] Y. Ouyang, H. Dai, and J. Guo, Nano Res., **3**, 815 (2010).

[10] R. Negishi, Y. Ohno, K. Maehashi, K. Matsumoto, and Y. Kobayashi, Jpn. J. Appl. Phys., **51**, 06FD03 (2012).

[11] Y. J. Li, Q. Q. Sun, L. Chen, P. Zhou, P. F. Wang, S. J. Ding, and D. W. Zhang, AIP Advances., **2**, 012191 (2012).

[12] F. Hashimoto and N. Mori, J. Phys. Conf. Ser., **906**, 012004 (2017).

[13] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems,* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1995).

[14] H. Haug and A.-P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors,* (Springer, Berlin, 1996).

[15] N. Mori, T. Edagawa, Y. Kamakura, and L. Eaves, Jpn. J. Appl. Phys., **53**, 04EN04 (2014).

第 5 章

積層 TMD 系の輸送特性解析

5.1　あらまし

近年，図 5.1 に示すような遷移金属ダイカルコゲナイド (Transition metal dichalcogenide: TMD) が積層された構造をチャネルに用いたトンネル電界効果トランジスタ (Tunnel Field-Effect Transistor: TFET) が実験的に作製されている [1–4]．チャネルに 2 次元材料を用いることで，オン電流の増加，ゲート制御性の向上，界面にダングリングボンドをもたない，といった様々な利点が存在する．TFET では，ソース側の材料の価電子帯からドレイン側の材料の伝導帯へのバンド間トンネルがデバイスの物理を支配し，デバイス特性を決める要因になる．したがって，大きなバンド間トンネル電流を得るためには，ソースおよびドレイン材料を適切に選択することが重要になる．

本章では，TFET のチャネルとしての利用に最も適した材料を探索することを目的として，非平衡グリーン関数と強結合近似法を用いたバンド間トンネル電流の解析を行なった [5]．

5.2　単層 TMD の強結合近似モデル

近年，単層 TMD の電子状態を解析するための様々な強結合近似モデルが提案されている [6–10]．本研究では，Cappelluti らが考案した 11 バンド強結合近似モデルを選択した．11 バンド強結合近似モデルでは，遷移金属原子の 5 つの d 軌道（d_{z^2}，$d_{x^2-y^2}$，d_{xy}，d_{xz} および d_{yz}）と，カルコゲン原子の 6 つの p 軌

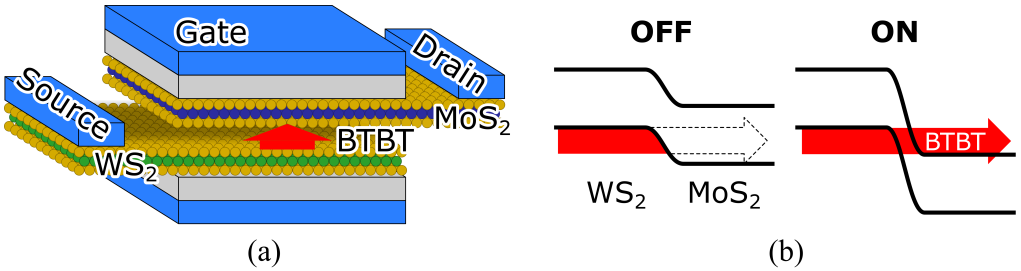


図 5.1: TMD が積層された構造をチャネルに用いた電界効果トンネルトランジスタの (a) 模式図と (b) 動作原理．ソース側の材料の価電子帯からドレイン側の材料の伝導帯へのバンド間トンネルで ON/OFF を切り替える．

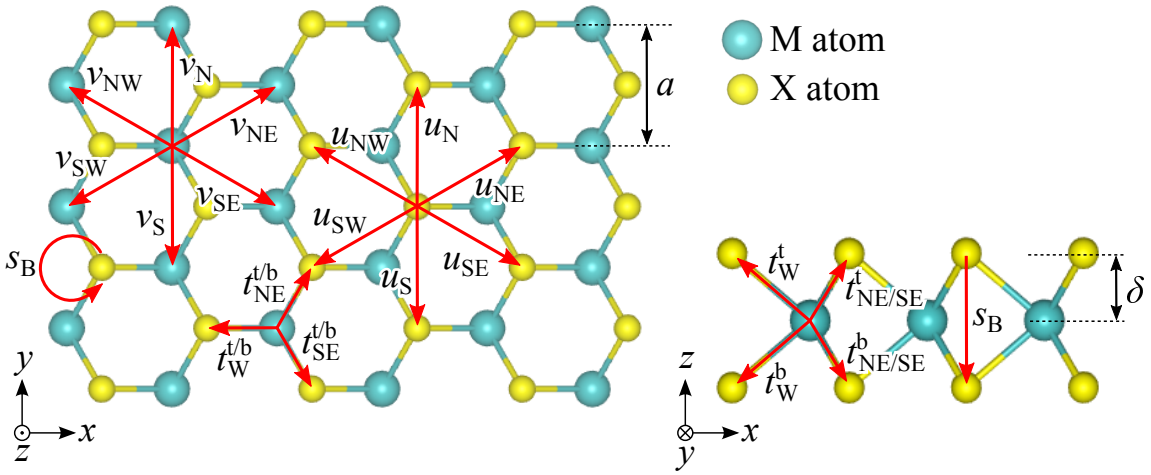


図 5.2: 単層 TMD（MX_2）の結晶構造を上から見た図と横から見た図．M は，モリブデン（Mo）やタングステン（W）などの遷移金属原子を表し，X は，硫黄（S），セレン（Se）テルル（Te）などのカルコゲン原子を表す．a は格子定数を表し，δ は M 層と X 層との距離を表す．11 バンド強結合近似法で用いる原子間ホッピング v_α，u_α $(\alpha = \mathrm{N, NE, NW, S, SE, SW})$，$t^{\mathrm{t}}_\beta$, t^{b}_β $(\beta = \mathrm{W, NE, SE})$ および s_{B} を赤い矢印で示す．

道（上層 X の p_x，p_y および p_z と，下層 X の p_x，p_y および p_z）とを考慮する．組成式 MX_2（M: 遷移金属原子 X: カルコゲン原子）で表される単層 TMD の結晶構造を図 5.2 に示す．格子定数を a，M 層と X 層の距離を δ と定義する．系全体のハミルトニアン H は，以下の 11×11 の大きさの行列で表される．

$$H(\boldsymbol{k}) = \begin{bmatrix} h^{\mathrm{M}} + V & T^{\mathrm{t}} & T^{\mathrm{b}} \\ (T^{\mathrm{t}})^\dagger & h^{\mathrm{X}} + U & S^{\mathrm{b}} \\ (T^{\mathrm{b}})^\dagger & (S^{\mathrm{b}})^\dagger & h^{\mathrm{X}} + U \end{bmatrix}. \tag{5.1}$$

ここで，h^{M}（大きさ 5×5）および h^{X}（大きさ 3×3）は，それぞれ遷移金属原子およびカルコゲン原子の軌道エネルギーを表す行列であり，以下のように表される．

$$h^{\mathrm{M}} = \begin{bmatrix} \epsilon^{\mathrm{M}}_{z^2} & & & & \\ & \epsilon^{\mathrm{M}}_{x^2-y^2} & & & \\ & & \epsilon^{\mathrm{M}}_{xy} & & \\ & & & \epsilon^{\mathrm{M}}_{xz} & \\ & & & & \epsilon^{\mathrm{M}}_{yz} \end{bmatrix} \tag{5.2}$$

$$h^{\mathrm{X}} = \begin{bmatrix} \epsilon^{\mathrm{X}}_{x} & & \\ & \epsilon^{\mathrm{X}}_{y} & \\ & & \epsilon^{\mathrm{X}}_{z} \end{bmatrix} \tag{5.3}$$

ここで，M 原子の d 軌道の対称性を考慮し，$\epsilon^{\mathrm{M}}_{z^2} \equiv D_0$，$\epsilon^{\mathrm{M}}_{x^2-y^2} = \epsilon^{\mathrm{M}}_{xy} \equiv D_2$，$\epsilon^{\mathrm{M}}_{xz} = \epsilon^{\mathrm{M}}_{yz} \equiv D_1$ の関係を用いる．同様に，X 原子の p 軌道に対して $\epsilon^{\mathrm{X}}_{x} = \epsilon^{\mathrm{X}}_{y} \equiv D_p$，$\epsilon^{\mathrm{X}}_{z} \equiv D_{\mathrm{z}}$ の関係を用いる．次に，式 (5.1) 中の V（大きさ 5×5）は，以下の式で表される．

$$V = \sum_\alpha v_\alpha \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_\alpha) \tag{5.4}$$

ここで，v_α $(\alpha = \mathrm{N, NE, NW, S, SE, SW})$ は，最近接 M 原子間の各ホッピングを表す遷移行列であり，図 5.2 中に赤い矢印で表した．$\boldsymbol{R}_\alpha (\alpha = \mathrm{N, NE, NW, S, SE, SW})$ は，最近接の M 原子をつなぐベクトル

であり，以下の式で表される．

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{N}} = (0, a, 0) \tag{5.5}$$
$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{NE}} = (\sqrt{3}a/2, a/2, 0) \tag{5.6}$$
$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{NW}} = (-\sqrt{3}a/2, a/2, 0) \tag{5.7}$$
$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{S}} = (0, -a, 0) \tag{5.8}$$
$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{SE}} = (\sqrt{3}a/2, -a/2, 0) \tag{5.9}$$
$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{SW}} = (-\sqrt{3}a/2, -a/2, 0) \tag{5.10}$$

遷移行列 v_α の各要素は，$\boldsymbol{R}_\alpha$ の方向余弦とスレーター・コスターパラメータ（$V_{dd\sigma}$，$V_{dd\pi}$，$V_{dd\delta}$）を用いて，文献 [11] から求めることができる．次に，式 (5.1) 中の U（大きさ 3×3）は以下の式で表される．

$$U = \sum_\alpha u_\alpha \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_\alpha) \tag{5.11}$$

ここで，u_α ($\alpha = \mathrm{N}, \mathrm{NE}, \mathrm{NW}, \mathrm{S}, \mathrm{SE}, \mathrm{SW}$) は，同層内における最近接 X 原子間の各ホッピングを表す遷移行列であり，図 5.2 中に赤い矢印で表した．$\boldsymbol{R}_\alpha (\alpha = \mathrm{N}, \mathrm{NE}, \mathrm{NW}, \mathrm{S}, \mathrm{SE}, \mathrm{SW})$ は，同層内における最近接の M 原子をつなぐベクトルであり，式 (5.5)–式 (5.10) で表される．遷移行列 u_α の各要素は，$\boldsymbol{R}_\alpha$ の方向余弦とスレーター・コスターパラメータ（$V_{pp\sigma}$，$V_{pp\pi}$）を用いて求める．式 (5.1) 中の T^{t} および T^{b}（大きさ 5×3）は，以下の式で表される．

$$T^{\mathrm{t}} = \sum_\beta t^{\mathrm{t}}_\beta \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}^{\mathrm{Tt}}_\beta), \tag{5.12}$$
$$T^{\mathrm{b}} = \sum_\beta t^{\mathrm{b}}_\beta \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}^{\mathrm{Tb}}_\beta), \tag{5.13}$$

ここで，t^{t}_β および t^{b}_β ($\beta = \mathrm{W}, \mathrm{NE}, \mathrm{SE}$) は，それぞれ，M 原子から上層の X 原子および下層の X 原子への各ホッピングを表す遷移行列であり，図 5.2 中に赤い矢印で表した．$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tt}}_\beta$ および $\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tb}}_\beta$ ($\beta = \mathrm{W}, \mathrm{NE}, \mathrm{SE}$) は，最近接の M 原子と X 原子をつなぐベクトルであり，以下の式で表される．

$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tt}}_{\mathrm{W}} = (-a/\sqrt{3}, 0, \delta), \tag{5.14}$$
$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tt}}_{\mathrm{NE}} = (a/2\sqrt{3}, a/2, \delta), \tag{5.15}$$
$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tt}}_{\mathrm{SE}} = (a/2\sqrt{3}, -a/2, \delta), \tag{5.16}$$
$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tb}}_{\mathrm{W}} = (-a/\sqrt{3}, 0, -\delta), \tag{5.17}$$
$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tb}}_{\mathrm{NE}} = (a/2\sqrt{3}, a/2, -\delta), \tag{5.18}$$
$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tb}}_{\mathrm{SE}} = (a/2\sqrt{3}, -a/2, -\delta). \tag{5.19}$$

遷移行列 t^{t}_β (t^{b}_β) の各要素は，$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tt}}_\beta$ ($\boldsymbol{R}^{\mathrm{Tb}}_\beta$) の方向余弦とスレーター・コスターパラメータ（$V_{pd\sigma}$，$V_{pd\pi}$）を用いて求める．次に，式 (5.1) 中の V（大きさ 5×5）は，以下の式で表される．

$$V = \sum_\alpha v_\alpha \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_\alpha) \tag{5.20}$$

次に，式 (5.1) 中の S^{b}（大きさ 3×3）は，以下の式で表される．

$$S^{\mathrm{b}} = s^{\mathrm{b}} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}^{\mathrm{Sb}}), \tag{5.21}$$

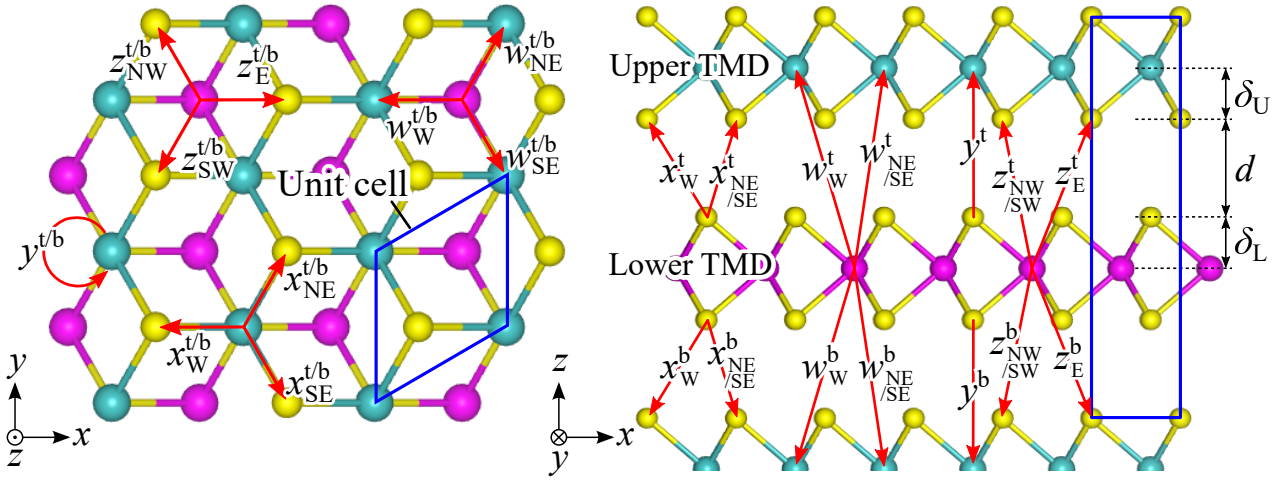


図 5.3: 周期的 2 層構造を上から見た図と横から見た図．2 層の TMD（“上層 TMD” と “下層 TMD”）が共通の単位胞で表現されている．上層 TMD および下層 TMD における M 層と X 層との距離をそれぞれ δ_{U} および δ_{L} と定義し，上層 TMD と下層 TMD の間の距離（層間距離）を d と定義する．赤い矢印は，層間における最近接原子間のホッピングを表す．

ここで，s^{b} は，上層 X 原子から下層 X 原子間のホッピングを表す遷移行列であり，図 5.2 中に赤い矢印で表した．$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Sb}}$ は，上層 X 原子から下層 X 原子へのベクトルであり，以下の式で表される．

$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Sb}} = (0, 0, -2\delta). \tag{5.22}$$

遷移行列 s^{b} の各要素は，$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Sb}}$ の方向余弦とスレーター・コスターパラメータ（$V_{pp\sigma}$，$V_{pp\pi}$）を用いて求める．以上より，5 つの軌道エネルギー（D_0, D_1, D_2, D_p, D_z）と，7 つのスレーター・コスターパラメータ（$V_{pd\sigma}$, $V_{pd\pi}$, $V_{dd\sigma}$, $V_{dd\delta}$, $V_{dd\pi}$, $V_{pp\sigma}$, $V_{pp\pi}$）の計 12 個のパラメータを決定することで，単層 TMD のバンド構造を計算することができる．本研究では，このパラメータを “層内パラメータ” と呼ぶ．

5.3　周期的 2 層構造の強結合近似モデル

5.5 節の輸送特性解析では 2 層の TMD を扱う．この節では，2 層の TMD 間の強結合近似パラメータを求めるために，図 5.3 に示すような 2 層 TMD が z 方向に周期的に積層された構造を考える．本研究では，この構造を “周期的 2 層構造” と呼ぶ．図 5.3(b) に示すように，1 つの単位胞内に 2 層の TMD が AB 積層されており，z 方向の上下関係から本研究ではそれぞれを “上層 TMD” および “下層 TMD” と呼ぶ．上層 TMD および下層 TMD における M 層と X 層との距離をそれぞれ δ_{U}，δ_{L} と定義し，上層 TMD と下層 TMD の間の距離（層間距離）を d と定義する．強結合近似モデルでは，層間の相互作用を原子軌道間の相互作用で表現する必要があるため，図 5.3 中の赤い矢印で示すように，X-X 原子間，M-M 原子間，M-X 原子間の 3 種類の層間ホッピングを考慮した．系全体のハミルトニアン $\mathscr{H}$ は，以下の 22×22 の大きさの行列で表される．

$$\mathscr{H}(\boldsymbol{k}) = \begin{bmatrix} H_{\mathrm{L}} & H_{\mathrm{LU}} \\ (H_{\mathrm{LU}})^{\dagger} & H_{\mathrm{U}} \end{bmatrix} \tag{5.23}$$

ここで，大きさ 11×11 の H_{L} および H_{U} は，それぞれ下層 TMD および上層 TMD の層内のハミルトニアンを表している．H_{L} および H_{U} は，いずれも式 (5.1) で表されるが，H_{L} は下層 TMD におけるパラメータを，H_{U} には上層 TMD におけるパラメータを用いるという点で異なる．次に，大きさ 11×11 の H_{LU} は，層間のハミルトニアンを表しており，以下の行列で与えられる．

$$H_{\mathrm{LU}} = \begin{bmatrix} W^{\mathrm{t}} + W^{\mathrm{b}} & Z^{\mathrm{t}} & Z^{\mathrm{b}} \\ Y^{\mathrm{t}} & 0 & X^{\mathrm{t}} \\ Y^{\mathrm{b}} & X^{\mathrm{b}} & 0 \end{bmatrix} \tag{5.24}$$

ここで，大きさ 3×3 の X^{t} および X^{b} は，以下の式で与えられる．

$$X^{\mathrm{t}} = \sum_{\beta=\mathrm{W,NE,SE}} x_{\beta}^{\mathrm{t}} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Xt}}) \tag{5.25}$$

$$X^{\mathrm{b}} = \sum_{\beta=\mathrm{W,NE,SE}} x_{\beta}^{\mathrm{b}} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Xb}}) \tag{5.26}$$

ここで，x_{β}^{t} および x_{β}^{b} $(\beta = \mathrm{W,NE,SE})$ は，下層 TMD の X 原子から上層 TMD の X 原子へのホッピングを表している．$\boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Xt}}$ および $\boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Xb}}$ $(\beta = \mathrm{W,NE,SE})$ は，層間における最近接の X 原子間をつなぐベクトルであり，以下のように表せる．

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{W}}^{\mathrm{Xt}} = (-a/\sqrt{3}, 0, d), \tag{5.27}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{NE}}^{\mathrm{Xt}} = (a/2\sqrt{3}, a/2, d), \tag{5.28}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{SE}}^{\mathrm{Xt}} = (a/2\sqrt{3}, -a/2, d), \tag{5.29}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{W}}^{\mathrm{Xb}} = (-a/\sqrt{3}, 0, -d), \tag{5.30}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{NE}}^{\mathrm{Xb}} = (a/2\sqrt{3}, a/2, -d), \tag{5.31}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{SE}}^{\mathrm{Xb}} = (a/2\sqrt{3}, -a/2, -d). \tag{5.32}$$

遷移行列 x_{β}^{t} (x_{β}^{b}) の各要素は，$\boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Xt}}$ $(\boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Xb}})$ の方向余弦とスレーター・コスターパラメータ（$P_{pp\sigma}$，$P_{pp\pi}$）を用いて求める．次に，式 (5.24) 中の大きさ 5×5 の W^{t} および W^{b} は次の式で与えられる．

$$W^{\mathrm{t}} = \sum_{\beta=\mathrm{W,NE,SE}} w_{\beta}^{\mathrm{t}} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Wt}}), \tag{5.33}$$

$$W^{\mathrm{b}} = \sum_{\beta=\mathrm{W,NE,SE}} w_{\beta}^{\mathrm{b}} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Wb}}), \tag{5.34}$$

ここで w_{β}^{t} および w_{β}^{b} $(\beta = \mathrm{W,NE,SE})$ は，下層 TMD の M 原子から上層 TMD の M 原子への遷移行列を表し，$\boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Wt}}$ および $\boldsymbol{R}_{\beta}^{\mathrm{Wb}}$ $(\beta = \mathrm{W,NE,SE})$ は，最近接の M-M 原子を結ぶベクトルであり，以下のように表される．

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{W}}^{\mathrm{Wt}} = (-a/\sqrt{3}, 0, d + \delta_{\mathrm{U}} + \delta_{\mathrm{L}}) \tag{5.35}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{NE}}^{\mathrm{Wt}} = (a/2\sqrt{3}, a/2, d + \delta_{\mathrm{U}} + \delta_{\mathrm{L}}) \tag{5.36}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{SE}}^{\mathrm{Wt}} = (a/2\sqrt{3}, -a/2, d + \delta_{\mathrm{U}} + \delta_{\mathrm{L}}) \tag{5.37}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{W}}^{\mathrm{Wb}} = (-a/\sqrt{3}, 0, -(d + \delta_{\mathrm{U}} + \delta_{\mathrm{L}})) \tag{5.38}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{NE}}^{\mathrm{Wb}} = (a/2\sqrt{3}, a/2, -(d + \delta_{\mathrm{U}} + \delta_{\mathrm{L}})) \tag{5.39}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{SE}}^{\mathrm{Wb}} = (a/2\sqrt{3}, -a/2, -(d + \delta_{\mathrm{U}} + \delta_{\mathrm{L}})) \tag{5.40}$$

遷移行列 w_β^{t} (w_β^{b}) の各要素は，$\boldsymbol{R}_\beta^{\mathrm{Wt}}$ ($\boldsymbol{R}_\beta^{\mathrm{Wb}}$) の方向余弦とスレーター・コスターパラメータ（$P_{dd\sigma}$, $P_{dd\pi}$, $P_{dd\delta}$）を用いて求める．次に，式 (5.24) 中の大きさ 5×3 の Z^{t} および Z^{b} は次の式で与えられる．

$$Z^{\mathrm{t}} = \sum_{\gamma=\mathrm{E,NW,SW}} z_\gamma^{\mathrm{t}} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_\gamma^{\mathrm{Zt}}), \tag{5.41}$$

$$Z^{\mathrm{b}} = \sum_{\gamma=\mathrm{E,NW,SW}} z_\gamma^{\mathrm{b}} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_\gamma^{\mathrm{Zb}}), \tag{5.42}$$

ここで z_γ^{t} および z_γ^{b} ($\gamma=\mathrm{E,NW,SW}$) は，下層 TMD の M 原子から上層 TMD の X 原子への遷移行列を表し，$\boldsymbol{R}_\beta^{\mathrm{Zt}}$ および $\boldsymbol{R}_\beta^{\mathrm{Zb}}$ ($\gamma=\mathrm{E,NW,SW}$) は，最近接の M-X 原子を結ぶベクトルであり，以下のように表される．

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{E}}^{\mathrm{Zt}} = (a/\sqrt{3}, 0, d+\delta_{\mathrm{L}}), \tag{5.43}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{NW}}^{\mathrm{Zt}} = (-a/2\sqrt{3}, a/2, d+\delta_{\mathrm{L}}), \tag{5.44}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{SW}}^{\mathrm{Zt}} = (-a/2\sqrt{3}, -a/2, d+\delta_{\mathrm{L}}), \tag{5.45}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{E}}^{\mathrm{Zb}} = (a/\sqrt{3}, 0, -(d+\delta_{\mathrm{L}})), \tag{5.46}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{NW}}^{\mathrm{Zb}} = (-a/2\sqrt{3}, a/2, -(d+\delta_{\mathrm{L}})), \tag{5.47}$$

$$\boldsymbol{R}_{\mathrm{SW}}^{\mathrm{Zb}} = (-a/2\sqrt{3}, -a/2, -(d+\delta_{\mathrm{L}})). \tag{5.48}$$

遷移行列 z_γ^{t} (z_γ^{b}) の各要素は，$\boldsymbol{R}_\gamma^{\mathrm{Zt}}$ ($\boldsymbol{R}_\gamma^{\mathrm{Zb}}$) の方向余弦とスレーター・コスターパラメータ（$P'_{pd\sigma}$, $P'_{pd\pi}$）を用いて求める．次に，式 (5.24) 中の大きさ 3×5 の Y^{t} および Y^{b} は次の式で与えられる．

$$Y^{\mathrm{t}} = y^{\mathrm{t}} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}^{\mathrm{Yt}}) \tag{5.49}$$

$$Y^{\mathrm{b}} = y^{\mathrm{b}} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}^{\mathrm{Yb}}) \tag{5.50}$$

ここで y^{t} および y^{b} は，下層 TMD の X 原子から上層 TMD の M 原子への遷移行列を表し，$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Yt}}$ および $\boldsymbol{R}^{\mathrm{Yb}}$ は，最近接の M-X 原子を結ぶベクトルであり，以下のように表される．

$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Yt}} = (0, 0, d+\delta_{\mathrm{U}}) \tag{5.51}$$

$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Yb}} = (0, 0, -(d+\delta_{\mathrm{U}})) \tag{5.52}$$

遷移行列 y^{t} (y^{b}) の各要素は，$\boldsymbol{R}^{\mathrm{Yt}}$ ($\boldsymbol{R}^{\mathrm{Yb}}$) の方向余弦とスレーター・コスターパラメータ（$P_{pd\sigma}$, $P_{pd\pi}$）を用いて求める．以上より，9 つの SK パラメータ ($P_{pp\sigma}$, $P_{pp\pi}$, $P_{dd\sigma}$, $P_{dd\pi}$, $P_{dd\delta}$, $P_{pd\sigma}$, $P_{pd\pi}$, $P'_{pd\sigma}$, $P'_{pd\pi}$) を決定することで，バルク構造のバンド構造を計算することができる．本研究では，このパラメータを “層間パラメータ” と呼ぶ．

5.4　強結合近似パラメータ抽出

5.4.1　抽出手法

輸送特性解析では，2 つの単層 TMD が積層し結合した 2 層のモデルを用いるため，上層 TMD と下層 TMD のそれぞれの層内パラメータと，層間パラメータの 3 種類のパラメータ群が必要である．すべての強結合近似パラメータは，密度汎関数理論 (Density Functional Theory: DFT) 計算を用いて以下の手順

で抽出を行なう．まず，孤立した上層 TMD について DFT 計算によるバンド構造を求め，強結合近似法によるバンド構造を用いてフィッティングを行ない，上層 TMD の層内パラメータを抽出する．下層 TMD についても同様にフィッティングを行ない，下層 TMD の層内パラメータを抽出する．最後に，周期的 2 層構造を考え，同様の手順で層間パラメータの抽出を行なう．その際，上層と下層の層内パラメータは固定し，層間パラメータのみを変数としてフィッテングを行なうことで，層間パラメータのみを抽出する．DFT 計算は，Projector Augmented Wave 法を用いた Vienna Ab initio Simulation Package [12,13] を用いて行なった．交換相関汎関数には，rev-vdW-DF2 [14] を選択した．カットオフエネルギーは 400 eV とし，スピン軌道相互作用は考慮しないものとした．単層 TMD 構造では，$9 \times 9 \times 1$ Monkhorst-Pack を用い，20 Å の真空領域を用いた．一方，周期的 2 層構造では，$9 \times 9 \times 5$ Monkhorst-Pack を用いた．

DFT 計算によって求めた様々な TMD の格子定数 a および M 層と X 層との距離 δ を表 5.1 に示す．表 5.1 を見ると，MoS_2 と WS_2，$MoSe_2$ と WSe_2，$MoTe_2$ と WTe_2 がほとんど等しい格子定数の値をもっていることがわかる．すなわち，TMD の格子定数 a は主にそれを構成するカルコゲン原子の種類によって決まる．本研究では，AB 積層モデルを用いており，2 つの材料を同じ格子定数で表現するため，歪の少ない組み合わせを選ぶ必要がある．そこで，同じカルコゲン原子から構成される 3 つの組み合わせを考え，上下逆の積層を考慮した MoS_2/WS_2, WS_2/MoS_2, $MoSe_2/WSe_2$, $WSe_2/MoSe_2$, $MoTe_2/WTe_2$ および $WTe_2/MoTe_2$（“上層 TMD/下層 TMD” と表現）の計 6 つのヘテロ接合構造を仮定し，計算を行なった．また，比較のために MoS_2/MoS_2, WS_2/WS_2, $MoSe_2/MoSe_2$, WSe_2/WSe_2, $MoTe_2/MoTe_2$ および WTe_2/WTe_2 の計 6 つのホモ接合に関しても計算を行なった．

5.4.2 層内パラメータ抽出

孤立した単層 MoS_2 についてバンド構造を計算しフィッティングを行なった結果を図 5.4(a) に示す．破線は DFT 計算により求めたバンド構造を表しており，実線は強結合近似法により求めたバンド構造を表している．TFET 応用を目的とした輸送計算においてはバンド端付近の電子状態が最も重要であるため，K 点付近の価電子帯の端と伝導帯の端がよく合うようにフィッティングを行なった．フィッティングにより抽出した MoS_2 の層内パラメータを，他の材料のパラメータとともに表 5.2 に示す．

5.4.3 層間パラメータ抽出

MoS_2/WS_2 の周期的 2 層構造においてバンドフィッティングを行なった結果を図 5.4(b) に示す．破線は DFT 計算により求めたバンド構造を表しており，実線は強結合近似法により求めたバンド構造を表している．層間結合は面外方向のバンド分散に強く影響を及ぼすと予想できるため，面外方向である K 点

表 5.1: DFT 計算より求めた格子定数 a および M 層と X 層との距離 δ.

	MoS_2	WS_2	$MoSe_2$	WSe_2	$MoTe_2$	WTe_2
a (Å)	3.166	3.166	3.298	3.296	3.526	3.527
δ (Å)	1.571	1.577	1.675	1.686	1.811	1.819

表 5.2: バンドフィッティングにより抽出した層内パラメータ．単位はすべて eV．

	MoS_2	WS_2	$MoSe_2$	WSe_2	$MoTe_2$	WTe_2
D_0	−0.6650	−0.6836	−0.8385	−1.105	−0.8146	−1.037
D_1	−2.652	−2.663	−1.732	−2.169	−1.624	−1.625
D_2	−1.149	−0.8125	−0.8536	−0.8918	−0.6052	−0.6193
D_p	−19.82	−24.11	−24.22	−23.20	−24.88	−25.19
D_z	−18.56	−17.59	−21.51	−30.42	−24.27	−23.51
$V_{pp\sigma}$	4.941	5.546	7.693	7.467	11.64	11.01
$V_{pp\pi}$	−1.459	−2.558	−2.772	−4.690	−3.948	−4.971
$V_{pd\sigma}$	−6.223	−6.397	−5.554	−6.929	−5.452	−5.273
$V_{pd\pi}$	2.272	2.599	2.688	2.917	2.691	3.134
$V_{dd\sigma}$	−0.9496	−1.254	−0.8061	−0.9083	−0.6513	−0.8729
$V_{dd\pi}$	0.4724	0.9342	0.5762	0.6119	0.5089	0.7440
$V_{dd\delta}$	0.1638	0.2269	0.09967	0.2067	0.07926	0.1830

から H 点までのバンド分散がよく合うようにフィッティングを行なった．その際，表 5.2 で示した上層と下層の層内パラメータは，バンド端が合うように軌道エネルギーのみを調整したのち固定し，層間パラメータのみを変数としてフィッテングを行なった．面外方向である K 点から H 点までのバンド分散がよく一致していることがわかる．ヘテロ構造に関して抽出した層間パラメータと層間距離 d を表 5.3 に示す．ホモ構造に関しても同様に抽出した層間パラメータと層間距離 d を表 5.4 に示す．

以上より，強結合近似モデルに必要な層内パラメータおよび層間パラメータが求まった．これらのパラメータを用いて輸送特性の解析を行なった．

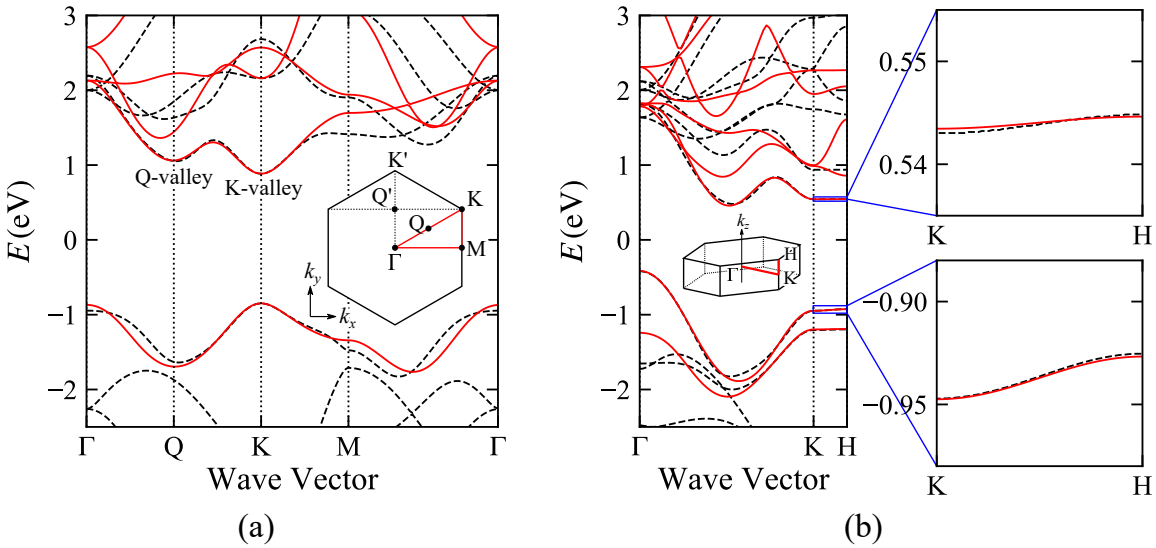


図 5.4: (a) 孤立した単層 MoS_2 および (b) MoS_2/WS_2 の周期的 2 層構造のバンド構造．DFT 計算によるバンド（黒破線）に強結合近似法によるバンド（赤実線）をフィッティングした．挿入図は，第 1 ブリュアン領域を示す．

表 5.3: DFT 計算から抽出したヘテロ接合における層間距離 d と層間パラメータ．d (Å) 以外の単位はすべて eV.

	MoS_2/WS_2	WS_2/MoS_2	$MoSe_2/WSe_2$	$WSe_2/MoSe_2$	$MoTe_2/WTe_2$	$WTe_2/MoTe_2$
d (Å)	3.030	3.025	3.164	3.158	3.460	3.446
$P_{pp\sigma}$	−1.312	−0.6513	−1.127	−1.742	−2.955	−1.448
$P_{pp\pi}$	1.558	1.993	1.987	2.326	2.569	3.009
$P_{pd\sigma}$	0.4734	0.8559	0.5160	0.8598	0.8868	1.411
$P_{pd\pi}$	1.111	1.329	0.9473	0.2843	0.03947	0.9508
$P'_{pd\sigma}$	1.481	0.8425	1.635	1.530	1.498	0.8994
$P'_{pd\pi}$	−0.03535	0.3166	−0.05028	0.6138	0.1557	0.2542
$P_{dd\sigma}$	0.05168	−0.05380	0.05869	−0.01580	0.1192	−0.4425
$P_{dd\pi}$	0.1624	0.1359	0.1434	0.1424	0.1474	0.1897
$P_{dd\delta}$	−0.1194	−0.1272	−0.1174	−0.1258	−0.1782	−0.1110

表 5.4: DFT 計算から抽出したホモ接合における層間距離 d と層間パラメータ．d (Å) 以外の単位はすべて eV.

	MoS_2/MoS_2	WS_2/WS_2	$MoSe_2/MoSe_2$	WSe_2/WSe_2	$MoTe_2/MoTe_2$	WTe_2/WTe_2
d (Å)	3.011	3.044	3.150	3.180	3.436	3.466
$P_{pp\sigma}$	−1.052	−1.443	−2.056	−0.3284	−2.810	−0.9807
$P_{pp\pi}$	1.756	3.024	2.411	1.944	3.683	2.348
$P_{pd\sigma}$	0.5405	0.6504	0.6731	0.4296	0.9711	0.3867
$P_{pd\pi}$	1.030	1.330	0.8079	0.6511	0.2544	0.4150
$P'_{pd\sigma}$	1.509	1.809	1.977	1.833	1.841	1.906
$P'_{pd\pi}$	0.1878	0.3731	0.1950	0.09889	0.3197	0.3422
$P_{dd\sigma}$	0.02442	0.03201	0.08804	0.1229	0.1554	0.1809
$P_{dd\pi}$	0.1440	0.1604	0.1496	0.1906	0.1889	0.2172
$P_{dd\delta}$	−0.1157	−0.1266	−0.1234	−0.1136	−0.2119	−0.1390

5.5 輸送特性解析

5.5.1 計算モデル

輸送特性解析に用いるデバイスモデルを，図 5.5 に示す．2 つの単層 TMD が z 方向に層間距離 d で積層している．電子の輸送方向を x 方向とし，チャネルの幅方向を y 方向とした．x 方向に M 個の単位胞からなるチャネル領域を仮定し，幅方向（y 方向）には周期的境界条件を課した．上層および下層の左右に同物質の半無限電極を接続した．層間相互作用は長さ $L(=M\sqrt{3}a)$ のチャネル領域にのみ存在すると仮定した．計算効率を向上させるため，図 5.5(b) に示すように，単位胞内を A 層と B 層に分割した．単位胞内に存在する原子軌道間の相互作用のみを考慮したハミルトニアン h_{k_y} は，以下で示すような大きさ 44×44 の行列で表される．

$$h_{k_y}=\begin{bmatrix} h^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{AA}} & h^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{AB}} & h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{AA}} & h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{AB}} \\ (h^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{AB}})^\dagger & h^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{BB}} & h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{BA}} & h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{BB}} \\ (h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{AA}})^\dagger & (h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{BA}})^\dagger & h^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{AA}} & h^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{AB}} \\ (h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{AB}})^\dagger & (h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{BB}})^\dagger & (h^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{AB}})^\dagger & h^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{BB}} \end{bmatrix} \tag{5.53}$$

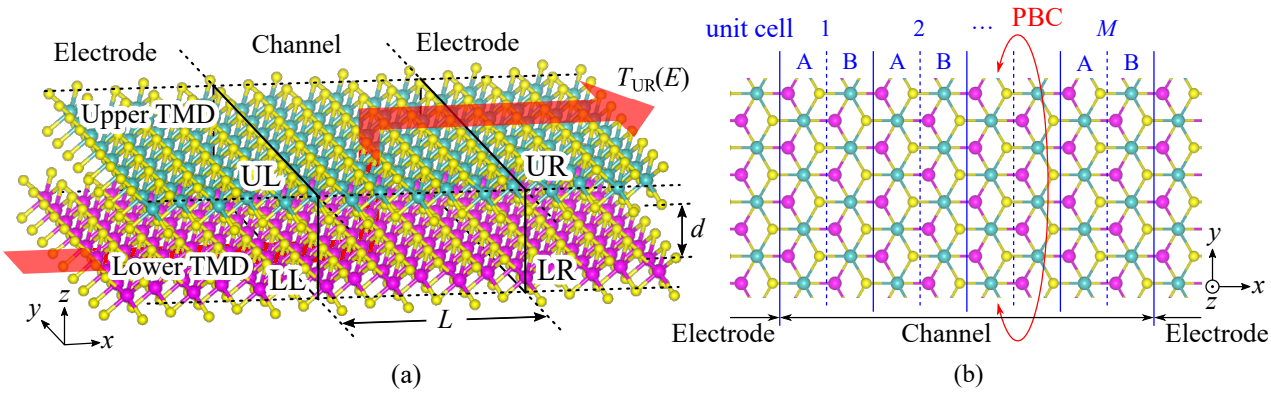


図 5.5: 輸送特性解析に用いるデバイスモデルを (a) 横から見た図と (b) 上から見た図．2 つの単層 TMD が z 方向に層間距離 d で積層している．電子の輸送方向を x 方向とし，チャネルの幅方向を y 方向とした．x 方向に M 個の単位胞からなるチャネル領域を仮定し，幅方向（y 方向）には周期的境界条件を課した．上層および下層の左右に同物質の半無限電極を接続した．層間相互作用は長さ $L(=M\sqrt{3}a)$ のチャネル領域にのみ存在すると仮定した．計算効率を向上させるため，単位胞内を A 層と B 層に分割した．

ここで，大きさ 11×11 の $h^{\eta}_{k_y,\mathrm{AA}}$ $[=h^{\eta}_{k_y,\mathrm{BB}}]$ $(\eta=\mathrm{L},\,\mathrm{U})$ は，以下の式で表される．

$$
\begin{aligned}
&h^{\eta}_{k_y,\mathrm{AA}}=h^{\eta}_{k_y,\mathrm{BB}}= \\
&\begin{bmatrix}
h^{\mathrm{M}}+v_{\mathrm{N}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a}+v_{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a} & t^{\mathrm{t}}_{\mathrm{NE}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2}+t^{\mathrm{t}}_{\mathrm{SE}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2} & t^{\mathrm{b}}_{\mathrm{NE}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2}+t^{\mathrm{b}}_{\mathrm{SE}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2} \\
(t^{\mathrm{t}}_{\mathrm{NE}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2}+t^{\mathrm{t}}_{\mathrm{SE}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2})^{\dagger} & h^{\mathrm{X}}+u_{\mathrm{N}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a}+u_{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a} & s_{\mathrm{B}} \\
(t^{\mathrm{b}}_{\mathrm{NE}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2}+t^{\mathrm{b}}_{\mathrm{SE}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2})^{\dagger} & (s_{\mathrm{B}})^{\dagger} & h^{\mathrm{X}}+u_{\mathrm{N}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a}+u_{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a}
\end{bmatrix} \\
&-E_{\mathrm{shift}}
\end{aligned}
\tag{5.54}
$$

ここで，

$$
E_{\mathrm{shift}}=\begin{cases}E_{\mathrm{VBM}}-\Delta E & (\eta=\mathrm{L})\\ E_{\mathrm{CBM}} & (\eta=\mathrm{U})\end{cases}
\tag{5.55}
$$

である．$h^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{AA}}(=h^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{BB}})$ と $h^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{AA}}(=h^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{BB}})$ は，軌道エネルギーと遷移行列を求めるために用いるパラメータとエネルギーシフトが異なる．$\eta=\mathrm{L}$（$\eta=\mathrm{U}$）のときは，下層（上層）の層内パラメータを用いて軌道エネルギーと遷移行列の計算を行なう．上層 TMD の伝導帯底のエネルギー E_{CBM} をバンド計算から求め，全対角要素から E_{CBM} だけ引くことで，上層 TMD の伝導帯底を 0 eV に合わせる．また，下層 TMD の価電子帯頂上のエネルギー E_{VBM} をバンド計算から求め，全対角要素を $E_{\mathrm{VBM}}-\Delta E$ だけ引くことで，下層 TMD の価電子帯頂上を ΔE に合わせる．ここで定義された ΔE は，下層 TMD の価電子帯と上層 TMD の伝導帯が重なるエネルギー幅を表しており，バンド間トンネルは，0 eV から ΔE までのエネルギー帯で生じることとなる．式 (5.53) 中の大きさ 11×11 の $h^{\eta}_{k_y,\mathrm{AB}}$ $(\eta=\mathrm{L},\,\mathrm{U})$ は次式で表される．

$$
\begin{aligned}
&h^{\eta}_{k_y,\mathrm{AB}}= \\
&\begin{bmatrix}
v_{\mathrm{NE}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2}+v_{\mathrm{SE}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2} & 0 & 0 \\
(t^{\mathrm{b}}_{\mathrm{W}})^{\dagger} & u_{\mathrm{SE}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2}+u_{\mathrm{NE}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2} & 0 \\
(t^{\mathrm{t}}_{\mathrm{W}})^{\dagger} & 0 & u_{\mathrm{SE}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2}+u_{\mathrm{NE}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2}
\end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{5.56}
$$

$\eta = \mathrm{U}$ では上層 TMD のパラメータを用い，$\eta = \mathrm{L}$ では下層 TMD のパラメータを用いる．式 (5.53) 中の大きさ 11×11 の $h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{AA}}$ $(= h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{BB}})$ および $h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{BA}}$ は次式で表される．

$$h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{AA}} = h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{BB}} = \begin{bmatrix} w^{\mathrm{t}}_{\mathrm{NE}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2} + w^{\mathrm{t}}_{\mathrm{SE}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2} & 0 & z^{\mathrm{t}}_{\mathrm{E}} \\ y^{\mathrm{t}} & 0 & x^{\mathrm{t}}_{\mathrm{NE}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2} + x^{\mathrm{t}}_{\mathrm{SE}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.57}$$

$$h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{BA}} = \begin{bmatrix} w^{\mathrm{t}}_{\mathrm{W}} & 0 & z^{\mathrm{t}}_{\mathrm{NW}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2} + z^{\mathrm{t}}_{\mathrm{SW}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2} \\ 0 & 0 & x^{\mathrm{t}}_{\mathrm{W}} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.58}$$

式 (5.57) および式 (5.58) 中の遷移行列は，層間パラメータを用いて計算を行なう．下層 TMD の A 層と上層 TMD の B 層との間には相互作用が存在しないので，式 (5.53) 中の $h^{\mathrm{LU}}_{k_y,\mathrm{AB}}$ は零行列である．以上より，単位胞 1 つ分のハミルトニアン行列 h_{k_y} が求まった．チャネル領域は M 個の単位胞で構成されているので，チャネル領域全体を表す大きさ $(44M) \times (44M)$ のハミルトニアン行列は以下のように表される．

$$H_{k_y} = \begin{bmatrix} h_{k_y} & s_{k_y} & & & \\ s^{\dagger}_{k_y} & h_{k_y} & s_{k_y} & & \\ & s^{\dagger}_{k_y} & h_{k_y} & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & s_{k_y} \\ & & & s^{\dagger}_{k_y} & h_{k_y} \end{bmatrix}, \tag{5.59}$$

s_{k_y} は単位胞間の相互作用を表す遷移行列であり，次式で与えられる．

$$s_{k_y} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ s^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{BA}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ s^{\mathrm{UL}}_{k_y,\mathrm{BA}} & 0 & s^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{BA}} & 0 \end{bmatrix} \tag{5.60}$$

ここで $s^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{BA}}$ と $s^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{BA}}$ は

$$s^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{BA}} = h^{\mathrm{L}}_{k_y,\mathrm{AB}} \tag{5.61}$$

$$s^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{BA}} = h^{\mathrm{U}}_{k_y,\mathrm{AB}} \tag{5.62}$$

である．$s^{\mathrm{UL}}_{k_y,\mathrm{BA}}$ は次式で与えられる．

$$s^{\mathrm{UL}}_{k_y,\mathrm{BA}} = \begin{bmatrix} (w^{\mathrm{t}}_{\mathrm{W}})^{\dagger} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ (z^{\mathrm{t}}_{\mathrm{NW}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y a/2} + z^{\mathrm{t}}_{\mathrm{SW}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y a/2})^{\dagger} & (x^{\mathrm{t}}_{\mathrm{W}})^{\dagger} & 0 \end{bmatrix}. \tag{5.63}$$

電極の効果は，次の式で表される大きさ $(44M) \times (44M)$ の自己エネルギー $\Sigma_{k_y}(E)$ で取り入れる．

$$\Sigma_{k_y}(E) = \Sigma_{\mathrm{LL},k_y}(E) + \Sigma_{\mathrm{UL},k_y}(E) + \Sigma_{\mathrm{LR},k_y}(E) + \Sigma_{\mathrm{UR},k_y}(E), \tag{5.64}$$

ここで，

$$\Sigma_{\eta\mathrm{L},k_y}(E) = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_{\eta\mathrm{L},k_y}(E) & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{bmatrix} \quad (\eta = \mathrm{L}, \mathrm{U}), \tag{5.65}$$

$$\Sigma_{\eta\mathrm{R},k_y}(E) = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 0 & \\ & & & \hat{\sigma}_{\eta\mathrm{R},k_y}(E) \end{bmatrix} \quad (\eta = \mathrm{L}, \mathrm{U}), \tag{5.66}$$

$$\hat{\sigma}_{\mathrm{LL},k_y}(E) = \begin{bmatrix} \sigma_{\mathrm{LL},k_y}(E) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_{\mathrm{UL},k_y}(E) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\mathrm{UL},k_y}(E) \end{bmatrix}, \tag{5.67}$$

$$\hat{\sigma}_{\mathrm{LR},k_y}(E) = \begin{bmatrix} \sigma_{\mathrm{LR},k_y}(E) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_{\mathrm{UR},k_y}(E) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\mathrm{UR},k_y}(E) \end{bmatrix}. \tag{5.68}$$

と表せる．ここで，大きさ 22×22 の副行列 $\sigma_{\mathrm{LL},k_y}(E)$, $\sigma_{\mathrm{UL},k_y}(E)$, $\sigma_{\mathrm{LR},k_y}(E)$, $\sigma_{\mathrm{UR},k_y}(E)$ は，それぞれ，左下電極，左上電極，右下電極，右上電極の自己エネルギーを表しており，これらの自己エネルギーは，文献 [15] の手法を用いて計算を行なった．散乱を考慮しない弾道輸送条件では，左下電極からの透過関数 $T_\zeta(E)$ は，以下の式で与えられる．

$$T_\zeta(E) = \frac{1}{2\pi} \int \mathrm{trace}[\Gamma_{\mathrm{LL},k_y}(E) G_{k_y}(E) \Gamma_{\zeta,k_y}(E) G^\dagger_{k_y}(E)] dk_y \quad (\zeta = \mathrm{UL}, \mathrm{LR}, \mathrm{UR}), \tag{5.69}$$

ここで，$G_{k_y}(E) = [E - H_{k_y} - \Sigma_{k_y}(E)]^{-1}$，$\Gamma_{\zeta,k_y} = \mathrm{i}[\Sigma_{\zeta,k_y}(E) - \Sigma^\dagger_{\zeta,k_y}(E)]$ $(\zeta = \mathrm{LL}, \mathrm{UL}, \mathrm{LR}, \mathrm{UR})$ である．

上層の i 層目 $(i = 1, 2, \ldots, 2M)$ における左下電極からチャネル領域に流入する状態の局所状態密度は，次の式で与えられる．

$$\rho^i_{\mathrm{U}}(E) = \frac{g_s}{2\sqrt{3}a\pi^2} \int d_{k_y} \mathrm{Tr}_{i,\mathrm{U}} A_{\mathrm{LL},k_y}(E). \tag{5.70}$$

ここで，$\mathrm{Tr}_{i,\mathrm{U}} A_{k_y,\mathrm{LL}}(E)$ は，スペクトル関数 $A_{\mathrm{LL},k_y}(E)$ の対角成分を，上層の i 層内に存在する軌道のみについて足し合わせることを意味する．$A_{\mathrm{LL},k_y}(E)$ は，次の式で与えられる．

$$A_{\mathrm{LL},k_y}(E) = G_{k_y}(E) \Gamma_{\mathrm{LL},k_y}(E) G^\dagger_{k_y}(E), \tag{5.71}$$

下層における局所状態密度 $\rho^i_{\mathrm{L}}(E)$ は，式 (5.70) と同様の式で与えられるが，下層に関する軌道について足し合わせることに注意する．

バンド間トンネル電流の材料依存性を調べるために，以下の式で定義される最大電流密度 $J_{\max}$ を用いて解析を行なった．

$$J_{\max} = \frac{2e}{h} \int_0^{\Delta E} T_{\mathrm{UR}}(E)\, dE, \tag{5.72}$$

最大電流密度 $J_{\max}$ は，バンド間トンネル電流の最大値に比例する．

5.5.2　左下電極から右上電極への透過関数

MoS_2/WS_2 ヘテロ構造において，左下 WS_2 電極（価電子帯）から右上 MoS_2 電極（伝導帯）への透過関数 $T_{UR}(E)$ のチャネル長依存性を計算した結果を図 5.6(a) に示す．価電子帯と伝導帯のエネルギー重なりを $\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$ とし，チャネル長を $L = 0.55\,\mathrm{nm}$ $(M = 1)$ から $50\,\mathrm{nm}$ $(M = 91)$ まで変化させ，計算を行なった．バンド間トンネル電流はバンドが重なったエネルギー領域のみを流れるため，透過関数は，$0\,\mathrm{eV}$（MoS_2 伝導帯の底）から $0.1\,\mathrm{eV}$（WS_2 価電子帯の頂上）まで値をもつ．チャネル長 L を長くしていくと，透過エネルギー領域の中間付近 $(E \approx \Delta E/2 = 0.05\,\mathrm{eV})$ に低透過領域が出現することがわかった．また，チャネル長 L を長くしていくほど，低透過領域における値が小さくなり，透過しにくくなることがわかった．図 5.6(b) は，$L = 30\,\mathrm{nm}$ の MoS_2/WS_2 ヘテロ構造において ΔE を $0.02\,\mathrm{eV}$, $0.05\,\mathrm{eV}$, $0.1\,\mathrm{eV}$ と変化させたときの $T_{UR}(E)$ を表す．ΔE がいずれの場合も，透過エネルギー領域の中間付近 $(E \approx \Delta E/2)$ に低透過領域が現れることがわかった．したがって，低透過領域の出現は偶然的な現象ではなく，本質的な現象であると考えられる．低透過領域の出現の要因を調べるために，MoS_2/WS_2 ヘテロ構造のバンド構造を解析した．$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$ のときの非結合 MoS_2/WS_2 および結合 MoS_2/WS_2 のバンド構造をそれぞれ図 5.7(a) および (b) に示す．非結合 MoS_2/WS_2 は，MoS_2 と WS_2 の間に結合がないと仮定した系であり，図 5.5 で示したデバイスモデルのチャネル長を 0 とした系と等しい．したがって，図 5.7(a) のバンド構造の青線および黄線は，それぞれ，孤立した単層 MoS_2 および WS_2 のバンド構造を表している．結合 MoS_2/WS_2 は， 図 5.5 で示したデバイスモデルのチャネル長を無限大の長さにした系と等しい．図 5.7(b) のバンド構造の線色は，波動関数が MoS_2 に局在しているときは青色，WS_2 に局在しているときは黄色となるように，波動関数の値で変化させた．WS_2 の価電子帯と MoS_2 の伝導帯が重なった状態で層間結合が存在すると，反交差によりギャップが出現していることがわかる．

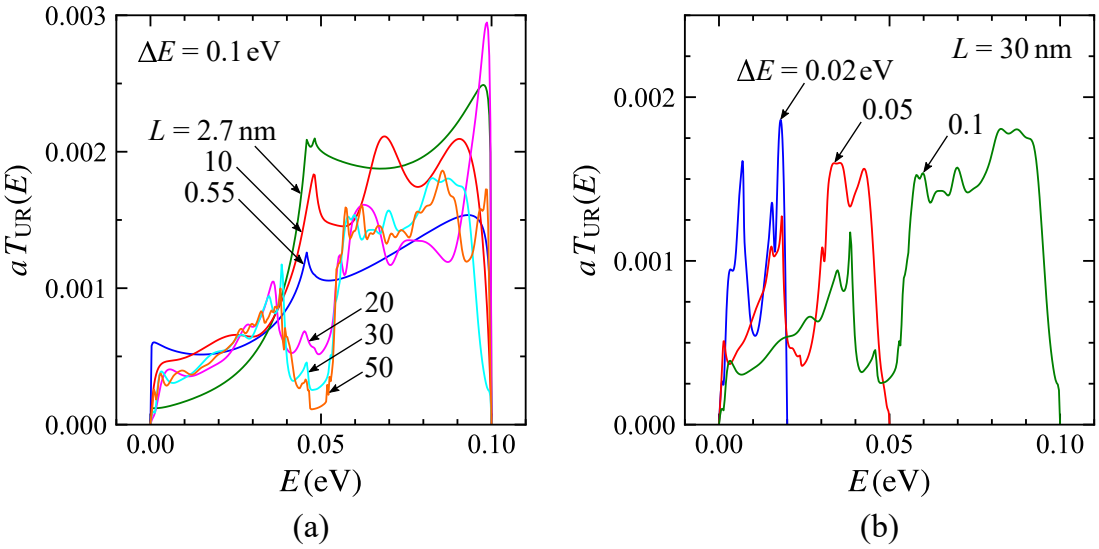


図 5.6: (a) $\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$ のときの MoS_2/WS_2 ヘテロ構造における左下 WS_2 電極から右上 MoS_2 電極への透過関数 $T_{UR}(E)$．a は格子定数．(b) $L = 30\,\mathrm{nm}$ の MoS_2/WS_2 ヘテロ構造において ΔE を $0.02\,\mathrm{eV}$, $0.05\,\mathrm{eV}$, $0.1\,\mathrm{eV}$ と変化させたときの $T_{UR}(E)$.

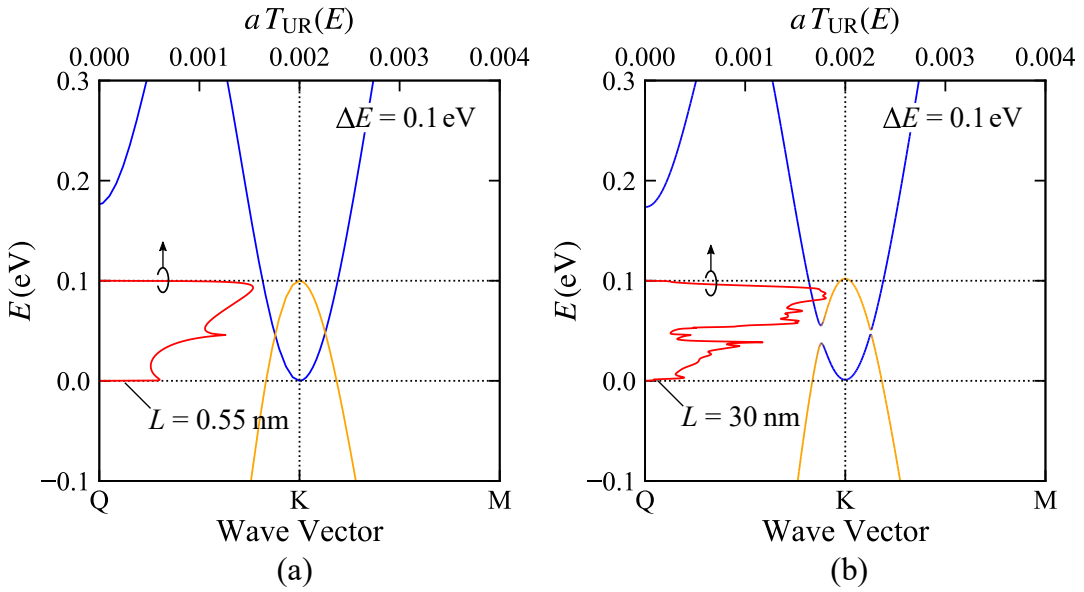


図 5.7: (a) 非結合 MoS_2/WS_2 および (b) 結合 MoS_2/WS_2 のバンド構造．非結合 MoS_2/WS_2 は，MoS_2 と WS_2 の間に結合がないと仮定した系であり，図 5.5 で示したデバイスモデルのチャネル長を 0 とした系と等しい．結合 MoS_2/WS_2 は， 図 5.5 で示したデバイスモデルのチャネル長を無限大の長さにした系と等しい．赤線はそれぞれ (a) $L = 0.55\,\mathrm{nm}$ と (b) $30\,\mathrm{nm}$ の透過関数 $T_{\mathrm{UR}}(E)$ を表す．ここで，$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$ とした．

$L = 0.55\,\mathrm{nm}$ および $30\,\mathrm{nm}$ のときの透過関数 $T_{\mathrm{UR}}(E)$ をそれぞれ図 5.5(a) および (b) 中に示す．チャネル長が比較的短い場合 ($L = 0.55\,\mathrm{nm}$) は，低透過領域が存在せずバンドが重なったエネルギー領域全体で透過が生じている．一方，チャネル長が比較的長い場合 ($L = 30\,\mathrm{nm}$) は，低透過領域が反交差によって生じたギャップ領域と一致していることがわかる．したがって，チャネル長 L を長くしていくと，チャネル領域の電子状態が図 5.7(b) のバンド構造で表されるような結合 MoS_2/WS_2 ($L \to \infty$) における電子状態に近づき，反交差ギャップが出現することで，低透過領域が生じたと理解できる．

5.5.3　他の電極への透過関数

次に，MoS_2/WS_2 ヘテロ構造において，左下 WS_2 電極から他の電極への透過関数について計算した結果について説明する．$L = 30\,\mathrm{nm}$，$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$ ときの左下 WS_2 電極から右下 WS_2 電極への透過関数 $T_{\mathrm{LR}}(E)$，左上 MoS_2 電極への透過関数 $T_{\mathrm{UL}}(E)$，右上 MoS_2 電極への透過関数 $T_{\mathrm{UR}}(E)$ を図 5.8 に示す．$T_{\mathrm{LR}}(E)$ は，下層の価電子帯バンド内における透過を表しているため，下層から上層へのバンド間トンネルである $T_{\mathrm{UL}}(E)$，$T_{\mathrm{UR}}(E)$ よりも平均的に高い値を示すことがわかった．また，$T_{\mathrm{UR}}(E)$ と同様に，透過エネルギー領域の中間付近に低透過領域が出現することがわかった．一方，$T_{\mathrm{UL}}(E)$ は，透過エネルギー領域の中間付近で透過が増強されることがわかった． この要因を調べるため，局所状態密度の計算を行なった．MoS_2/WS_2 ヘテロ構造の上層および下層における局所状態密度をそれぞれ図 5.9(a) および (b) に示す．これらの局所状態密度は，左下電極から流入する状態のみを表している．ここで，$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$，$L = 30\,\mathrm{nm}$ とした．チャネル領域は，$x = 0\,\mathrm{nm}$ から $30\,\mathrm{nm}$ に位置し，破線はチャネル領域と電極領域の境界を示している．透過エネルギー領域の中間付近 ($E \approx \Delta E/2 = 0.05\,\mathrm{eV}$) では，反交

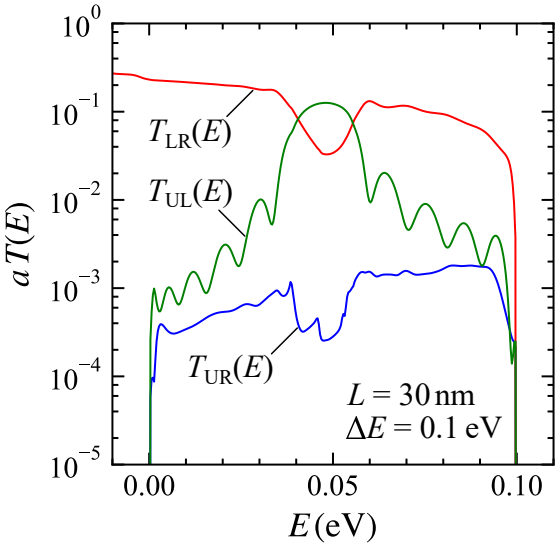


図 5.8: $L = 30\,\mathrm{nm}$，$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$ の MoS_2/WS_2 ヘテロ構造における透過関数 $T_{\mathrm{LR}}(E)$, $T_{\mathrm{UL}}(E)$, $T_{\mathrm{UR}}(E)$.

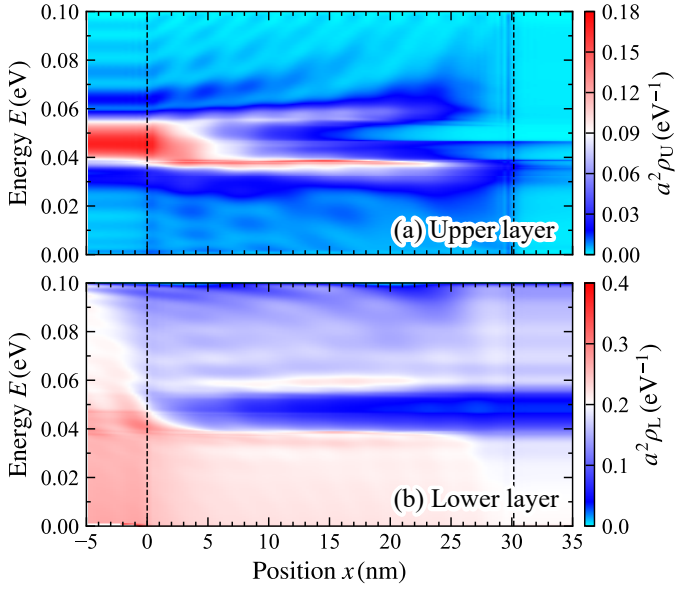


図 5.9: MoS_2/WS_2 ヘテロ構造の上層 (a) および下層 (b) における局所状態密度．$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$, $L = 30\,\mathrm{nm}$ とした．破線はチャネル領域と電極領域の境界を示す．

差ギャップによって局所状態密度の値が小さくなっているのがわかる（青色の領域）．一方，左上電極では，反交差ギャップ領域で局所状態密度の値が高くなっていることがわかる（図 5.9(a) の赤色の領域）．これは，反交差ギャップ領域で電子流が反射し，逆流している状態を表している．この電子流の逆流が，反交差ギャップ領域で $T_{\mathrm{UL}}(E)$ の値が高くなる要因であることがわかった（図 5.8 参照）．また，チャネル領域における局所状態密度には干渉縞が見られる．これは，電子波が散乱されずにチャネルと電極の境界で反射を繰り返している状態を表している．

5.5.4　最大電流密度の材料による比較

左下ソース電極から右上ドレイン電極への最大電流密度の計算を行ない，材料組み合わせによる比較を行なった結果を説明する．様々なヘテロ構造（ドレイン/ソース: MoS_2/WS_2, WS_2/MoS_2, $MoSe_2/WSe_2$, $WSe_2/MoSe_2$, $MoTe_2/WTe_2$ および $WTe_2/MoTe_2$）における最大電流密度 J_{max} のチャネル長依存性を図 5.10(a) に示す．同様に，ホモ構造（MoS_2/MoS_2，WS_2/WS_2，$MoSe_2/MoSe_2$，WSe_2/WSe_2，$MoTe_2/MoTe_2$ および WTe_2/WTe_2）についての結果を図 5.10(b) に示す．ここで，$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$ とした．いずれの材料においても，チャネル長 L を長くしていくと，最大電流密度 J_{max} は，振動しながらほとんど一定の値に近づくことがわかった．これは，散乱を考慮しない弾道輸送であるためだと考えられる．ヘテロ構造のほうがホモ構造よりも平均的に高い値を示すことがわかった．ヘテロ構造では，$WSe_2/MoSe_2$ が最大の値を示し，ホモ構造では，WSe_2/WSe_2 が最大の値を示した．すなわち，WSe_2 が伝導帯（上層）となるように積層した構造が最も大きな最大電流密度の値を示すということがわかった．WSe_2 が伝導帯となるように積層した構造でトンネル電流が強く増強される理由は，Q 点の谷（Q 谷）によって説明できる．単層 TMD は，いずれも Q 点に衛生谷を有しており，そのエネルギー準位 E_Q を表 5.5 に示す．E_Q は，K 点の谷（K 谷）の底から測った Q 谷の底のエネルギー準位であり，この値はそのまま K 谷と Q 谷のエネルギー差の値となる．ヘテロ構造において最も低い電流値を示した MoS_2/WS_2 および最も高い電流値を示した $WSe_2/MoSe_2$ におけるバンド構造と透過関数をそれぞれ図 5.11(a) および (b) に示す．ここで，$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$，$L = 30\,\mathrm{nm}$ とした．$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$ のとき，MoS_2 では $\Delta E < E_Q$

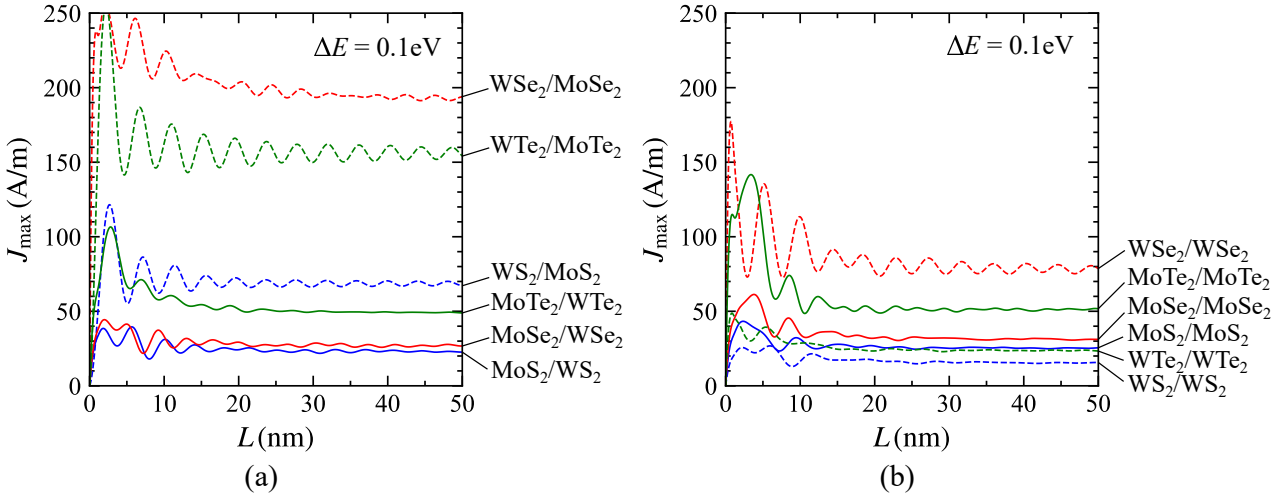


図 5.10: 様々な (a) ヘテロ構造および (a) ホモ構造における最大電流密度 J_{max} のチャネル長依存性．ここで，$\Delta E = 0.1\,\mathrm{eV}$ とした．

表 5.5: K 谷底から測った Q 谷底のエネルギー準位 E_Q．

	MoS_2	WS_2	$MoSe_2$	WSe_2	$MoTe_2$	WTe_2
E_Q (eV)	0.167	0.0989	0.0822	0.0139	0.155	0.188

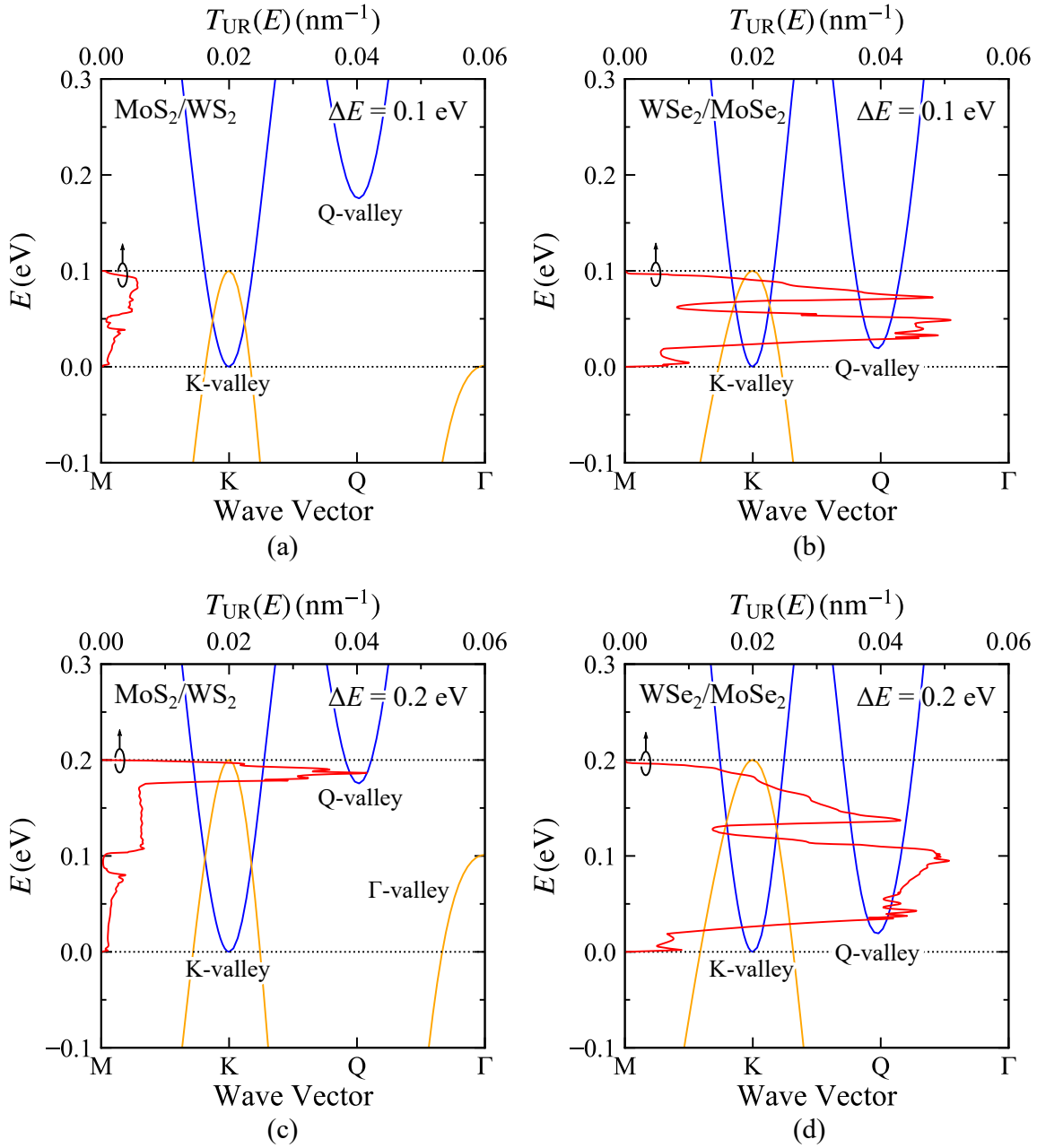


図 5.11: (a)(c) MoS_2/WS_2 および (b)(d) $WSe_2/MoSe_2$ ヘテロ構造におけるバンド構造と透過関数 $T_{UR}(E)$．バンド構造は孤立したそれぞれの層における計算結果．(a) および (b) は $\Delta E = 0.1\,eV$ とし，(c) および (d) は $\Delta E = 0.2\,eV$ として計算を行なった．いずれの場合も，$L = 30\,nm$ として $T_{UR}(E)$ を計算した．

となり，Q 谷は透過エネルギー領域の外に存在するため，Q 谷による増強は見られない．一方，WSe_2 は最も小さい E_Q をもつことから，Q 谷が透過エネルギー領域の深くまで入り込み，Q 谷を介したトンネルによって透過関数の値が増強されている様子がわかる．$\Delta E = 0.2\,eV$ としたときの MoS_2/WS_2 および $WSe_2/MoSe_2$ におけるバンド構造と透過関数をそれぞれ図 5.11(c) および (d) に示す．$\Delta E = 0.1\,eV$ では，MoS_2 の Q 谷は透過エネルギー領域の外に存在するが ($\Delta E < E_Q$)，$\Delta E = 0.2\,eV$ では透過エネ

ルギー領域の中に入り込む ($E_{\mathrm{Q}} < \Delta E$)．その結果，Q 谷が入り込んだエネルギー領域 ($E > E_{\mathrm{Q}}$) で，$T_{\mathrm{UR}}(E)$ が強く増強された．一方，価電子帯における Γ 点の谷も同様に透過エネルギー領域に入り込むが，$T_{\mathrm{UR}}(E)$ は増強されていないことがわかる．この結果から，バンド間トンネルの増強には，Q 谷のみが関与していることがわかった．本研究で用いたモデルでは，x 方向には電極が接続されているため並進対称性をもたず x 方向の運動量は保存されないが，y 方向には並進対称性をもつため y 方向の運動量は保存される．そのため，同じ k_y をもつ状態間でのみトンネルが生じる．図 5.4(a) に示すように，Q 点と K 点は同じ k_y をもつ一方，Γ 点は K 点や Q 点と異なる k_y をもつ．したがって，K 谷-K 谷間と Q 谷-K 谷間のみでバンド間トンネルが生じる．表 5.6 は，単層 MoS_2 における K 点の価電子帯頂上，K 点の伝導帯頂上，および Q 点の谷の底での p 軌道および d 軌道の寄与を表している．p 軌道の寄与の値は，p 軌道に関する波動関数の 2 乗の値のみを足し合わせたものであり，同様に，d 軌道の寄与の値は，d 軌道に関する波動関数の 2 乗の値のみを足し合わせたものである．価電子帯および伝導帯の K 谷は M 原子に由来する d 軌道の寄与が大きい．したがって，K 谷間のトンネルは主に下層 M 原子と上層 M 原子間のトンネルである．一方，Q 谷は X 原子に由来する p 軌道の寄与が比較的大きい．したがって，K 谷から Q 谷へのトンネルには，下層 M 原子から上層 X 原子へのトンネルが含まれている．M 原子と X 原子との空間的距離は，M 原子間の空間的距離よりも短いため，K 谷から Q 谷へのトンネルは，K 谷間のトンネルよりも大きく増強されたと考えられる．

表 5.6: バンド上の特定の点における p 軌道および d 軌道の寄与.

	VB top at K-point	CB Bottom at K-point	Bottom of Q-valley
p-orbitals	0.0000750	0.0422	0.107
d-orbitals	0.999	0.958	0.893

5.6　デバイス設計の指針

積層 TMD 系におけるバンド間トンネル電流の計算結果から，Q 点に存在する衛星谷を介したトンネル効果によって，バンド間トンネル電流が大きく増強されることがわかった．また，図 5.11(c) に示したように，伝導帯の Q 点の谷はトンネル電流を増強する効果をもつが，価電子帯の Γ 点の谷は，y 方向の波数が K 谷や Q 谷と異なることから，トンネル電流の増強に関与しない．また，図 5.10 に示したように，ヘテロ構造のほうがホモ構造よりも平均的に高い値を示すことがわかった．以上の結果より，Q 谷と K 谷のエネルギー差が小さい材料を TFET のドレイン側の材料として選択し，ソース側はドレイン側の材料と異なる材料を選択することで，大きなバンド間トンネル電流を得ることができるというデバイス設計の指針が得られた．

表 5.5 に示したように，単層 TMD では，WSe_2 が最も Q 谷と K 谷のエネルギー差が小さい材料であるため，ドレイン側の材料として WSe_2 を用いた構造が最も高い電流値を示した．実際のデバイス設計の自由度を向上させるために，あらゆる材料で人為的に Q 谷と K 谷のエネルギー差を小さくすることは重要である．Q 谷と K 谷のエネルギー差を小さくする方法として，歪の印加や多層化などが挙げられる．

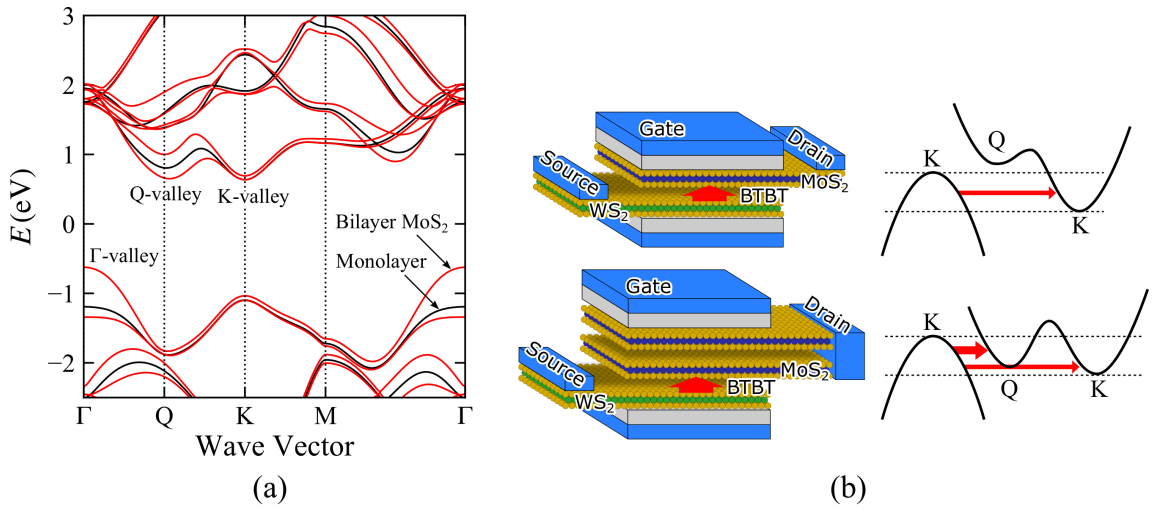


図 5.12: (a) DFT 計算より求めた単層 MoS_2（黒線）と 2 層 MoS_2（赤線）のバンド構造．(b) 2 層 MoS_2 をドレイン側の材料として用いた TFET のデバイス図とバンド構造．2 層 MoS_2 をドレイン側の材料に用いることで Q 谷が透過エネルギー領域に入り込み，単層 MoS_2 を用いた場合よりもバンド間トンネル電流の増強が期待される．

TMD の面直方向に歪を印加することによって，Q 谷と K 谷のエネルギー差が小さくなるという DFT 計算の報告がある [16]．多層化に関しては，図 5.12(a) に，DFT 計算より求めた単層 MoS_2（黒線）と 2 層 MoS_2（赤線）のバンド構造を示す．2 層 MoS_2 では，層間の相互作用の影響により，Q 谷が高エネルギー側と低エネルギー側に分裂していることがわかる．単層 MoS_2 では，0.167 eV（表 5.5 参照）であった Q 谷と K 谷のエネルギー差が，2 層 MoS_2 では 0.0199 eV まで小さくなる．したがって，図 5.12(b) に示すように，ドレイン側の材料として MoS_2 を用いる場合，単層で用いるよりも 2 層にすることで Q 谷のエネルギーが下がり，バンド間トンネル電流の大きな増強が期待できる．

5.7　まとめ

本章では，従来の MOSFET の物理限界を超える性能が期待される積層 TMD を用いた TFET に注目し，TMD が積層された構造におけるバンド間トンネル電流を解析した結果を記述した．

計算モデルを構築する上で必要な強結合近似パラメータは，密度汎関数理論計算から抽出した．層間結合に関するパラメータは，積層方向のエネルギー分散から抽出を行なった．

抽出したパラメータを用いて，左下電極から右上電極への透過関数 $T_{\mathrm{UR}}(E)$ のチャネル長依存性を計算した．チャネル長を長くしていくと，透過エネルギー領域の中間付近に低透過領域が生じることがわかった．これは，チャネル長を長くしていくと，チャネル領域の電子状態が反交差ギャップをもつバンド構造で表される電子状態に近づくためであることがわかった．

次に，左下電極から右上電極への透過関数 $T_{\mathrm{UR}}(E)$ に加えて，右下電極への透過関数 $T_{\mathrm{LR}}(E)$ と左上電極への透過関数 $T_{\mathrm{UL}}(E)$ を計算し，解析を行なった．左下電極から右下電極への透過関数 $T_{\mathrm{LR}}(E)$ は，下層の価電子帯バンド内における透過を表しているため，下層から上層へのバンド間トンネルである $T_{\mathrm{UL}}(E)$，$T_{\mathrm{UR}}(E)$ よりも平均的に高い値を示すことがわかった．また，$T_{\mathrm{UR}}(E)$ と同様に，透過エネル

ギー領域の中間付近に低透過領域が出現することがわかった．一方，$T_{\mathrm{UL}}(E)$ は，透過エネルギー領域の中間付近で透過が増強されることがわかった．この要因を調べるため，局所状態密度の計算を行ない，反交差ギャップ領域での電子流の逆流が，透過エネルギー領域の中間付近で $T_{\mathrm{UL}}(E)$ の値が高くなる要因であることがわかった．

次に，様々なヘテロ構造およびホモ構造において，左下電極から右上電極への最大トンネル電流密度を計算し，比較を行なった．いずれの材料においても，チャネル長を長くしていくと，最大電流密度の値は振動しながらほとんど一定の値に近づくことがわかった．また，ヘテロ構造のほうがホモ構造よりも平均的に高い値を示すことがわかった．ヘテロ構造とホモ構造のいずれの場合においても，WSe_2 が伝導帯（ドレイン材料）となるように積層した構造が最も高い値を示すことがわかった．この要因を解明するため，価電子帯バンドと伝導帯バンドのエネルギー重なりの値を変化させて計算を行なった．その結果，伝導帯バンドの Q 点にある衛生谷がトンネルエネルギー領域に入り込むことで透過関数の値が大きく増強されることがわかった．WSe_2 は TMD 材料の中で最も Q 谷と K 谷のエネルギー差が小さいため，他の材料よりも増強の効果が大きいということがわかった．

以上の輸送特性解析の結果から，積層 TMD を TFET のチャネルとして応用する際の設計指針を提案した．Q 谷と K 谷のエネルギー差が小さい材料を TFET のドレイン側の材料として選択し，ソース側はドレイン側の材料と異なる材料を選択することで，大きなバンド間トンネル電流を得ることができると考えられる．

参考文献

[1] T. Roy, M. Tosun, X. Cao, H. Fang, D. H. Lien, P. Zhao, Y. Z. Chen, Y. L. Chueh, J. Guo, and A. Javey, ACS Nano, **9**, 2071 (2015).

[2] T. Roy, M. Tosun, M. Hettick, G. H. Ahn, C. Hu, and A. Javey, Appl. Phys. Lett., **108**, 083111 (2016).

[3] A. Nourbakhsh, A. Zubair, M. S. Dresselhaus, and T. Palacios, Nano Lett., **16**, 1359 (2016).

[4] Y. Balaji, Q. Smets, C. J. Lockhart De La Rosa, A. K. A. Lu, and D. Chiappe, IEEE J. Electron Devices Soc., **6**, 1048 (2018).

[5] F. Hashimoto, H. Tanaka and N. Mori, Journal of Physics D: Applied Physics, `https://doi.org/10.1088/1361-6463/ab7ca6` (in press).

[6] E. Cappelluti, R. Roldán, J. A. Silva-Guillén, P. Ordejón, and F. Guinea, Phys. Rev. B, **88**, 075409 (2013).

[7] F. Zahid, L. Liu, Y. Zhu, J. Wang, and H. Guo, AIP Adv., **3**, 052111 (2013).

[8] H. Rostami, A. G. Moghaddam, and R. Asgari, Phys. Rev. B, **88**, 085440 (2013).

[9] G. B. Liu, W. Y. Shan, Y. Yao, W. Yao, and D. Xiao, Phys. Rev. B, **88**, 085433 (2013).

[10] E. Ridolfi, D. Le, T. S. Rahman, E. R. Mucciolo, and C. H. Lewenkopf, J. Phys.: Condens. Matter, **27**, 365501 (2015).

[11] J. C. Slater and G. F. Koster, J. Phys.: Phys. Rev., **94**, 1498 (1954).

[12] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B, **47**, 558 (1993).

[13] G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci., **6**, 15 (1996).

[14] I. Hamada, Phys. Rev. B, **89**, 121103 (2014).

[15] M. Luisier, A. Schenk, W. Fichtner, and G. Klimeck, Phys. Rev. B, **74**, 205323 (2006).

[16] L. Fu, Y. Wan, N. Tang, Y. Ding, J. Gao, J. Yu, H. Guan, K. Zhang, W. Wang, C. Zhang, J. Shi, X. Wu, S.-F. Shi, W. Ge, L. Dai, and B. Shen, Sci. Adv., **3**, e1700162 (2017).

第 6 章

結論

本研究の目的は，2 次元材料結合系を扱うことのできる電子状態および量子輸送シミュレーション技術を開発し，開発したシミュレーション技術によって 2 次元材料結合系の電子状態と輸送特性を解析し，デバイス応用に最適な設計の指針を得ることであった．その目的のもと，グラフェンナノリボン列，多層グラフェン，積層 TMD 系の 3 種類の 2 次元材料結合系を対象にし，電子状態と輸送特性の解析を行なった．

第 3 章では，ジグザグ端およびアームチェア端の 2 種類の端形状の異なるナノリボン列について電子状態の計算を行ない，ナノリボン列の電子状態に隣接ナノリボン間相互作用が与える影響を解析した結果について記述した．ナノリボン間の結合強度を γ，ナノリボン内の原子の結合強度を t とおいて計算を行なった．ジグザグ端ナノリボン列の場合，弱く結合した系では，孤立したジグザグ端ナノリボンの特徴であるほぼフラットな分散とバルクグラフェンの特徴であるディラック型の分散とが共存することがわかった．また，γ が比較的強いジグザグ端ナノリボン列のフェルミ速度が，バルクグラフェンのフェルミ速度を超える値をもつことがわかった．アームチェア端ナノリボン列では，リボンの幅によって，電子状態の γ 依存性が異なることがわかった．特に，リボン幅に相当する原子数 N が $N = 3n + 1$（n は整数）を満たす場合，$\gamma = t/2$ において，速い電子速度を意味する線形分散と高い状態密度を意味する放物線分散とを同時に有する特異なバンド構造が得られ，デバイス応用に優位であることがわかった．

第 4 章では，グラフェンが積層された構造である多層グラフェンにおいて，層間相互作用が輸送特性に与える影響を解析した結果を記述した．比較的強い層間相互作用が存在しても，ディラック点付近における透過関数は，単層グラフェンの輸送特性の特徴である線形性を保ち，層間相互作用の影響をほとんど受けないことがわかった．これは，最上層と最下層に挟まれた中間層がチャネル幅方向に沿ったジグザグ端ナノリボンとなっているためであることがわかった．多層グラフェンを電子デバイスのチャネルとして用いる場合，中間層をジグザグ端ナノリボンとして作製することで単層グラフェンの高い移動度を保ったまま，単層グラフェンデバイスより大きな電流を扱うことができるという設計の指針が得られた．また，室温の熱エネルギーまで単層グラフェンの輸送特性を保つことができる層間相互作用の臨界値のチャネル長依存性を計算し，層間相互作用が小さいほど，単層グラフェンの輸送特性を保ったままチャネル長を長くできるということがわかった．

第 5 章では，トンネルトランジスタ応用に適した TMD が積層された構造におけるバンド間トンネル電流を解析した結果を記述した．チャネル長を長くしていくと，透過エネルギー領域の中間付近に低透過

領域が生じることがわかった．これは，チャネル長を長くしていくと，チャネル領域の電子状態が反交差ギャップをもつバンド構造で表される電子状態に近づくためであることがわかった．また，様々なヘテロ構造およびホモ構造におけるトンネル電流を計算し，K 点の谷と Q 点の谷のエネルギー差がもっとも小さい WSe_2 を伝導帯（ドレイン材料）となるように積層した構造が最も大きな値を示すことがわかった．トンネル電流が増強されるのは，Q 点にある衛星谷を介したトンネル効果が要因であることを明らかにした．また，多層化により，Q 谷のエネルギーを下げることでバンド間トンネル電流の増強が期待されることがわかった．

以上の解析により，これまで詳細な電子状態および輸送特性が明らかにされていなかったグラフェンナノリボン列，多層グラフェン，積層 TMD 系の 3 種類の 2 次元材料結合系において，隣接する 2 次元材料間の結合が系の電子状態および輸送特性に与える影響を解明することができた．加えて，解析により得られた知見から，2 次元材料結合系を電子デバイスとして用いる際の設計指針を得ることができた．得られた設計指針は，従来の電子デバイスの性能限界を超えるデバイスの実用化および性能向上に大きく貢献するものであると考えている．

本研究で行なったすべての輸送特性計算は，散乱を考慮しない弾道輸送条件のもと，電荷によるポテンシャルの変化を取り入れていない理想的な条件における計算であった．実際のデバイスではフォノン散乱や不純物散乱などの散乱効果が，輸送特性に大きく影響を与えると考えられる．また，より現実的なシミュレーションを行なうためには，ポアソン方程式と輸送方程式を自己無撞着的に解き，ポテンシャルを決定する必要がある．また，第 5 章で用いた積層 TMD 系の計算モデルでは，AB 積層を仮定したため，異なる格子定数をもつ 2 つの TMD を同じ格子定数を用いて表現する必要があった．格子定数が互いに大きく異なる材料の組み合わせで計算を行なうと，歪の効果が計算結果に大きく影響を与えると考えられるため，本研究では，できる限り歪の影響が小さくなるように，格子定数が近い材料の組み合わせのみを対象として計算を行なった．しかし，実際のデバイスでは格子定数の異なる材料の積層構造は数多く存在する．したがって，そのような格子不整合の積層構造を扱うことができるように計算モデルを改良する必要がある．以上のように，散乱，自己無撞着ポテンシャル，格子不整合などの現実的な効果を取り入れ，より現実的なデバイス特性解析を行なうということが今後の課題である．本研究では，そのような現実的な効果を取り入れるためのシミュレーションの基盤を構築できたといえる．

付録 A

ナノリボン列におけるディラック点の波数

A.1　ジグザグ端ナノリボン列におけるディラック点の波数

リボン幅 $N = 2$ のときのジグザグ端ナノリボン列のハミルトニアンは以下の式で表せる．

$$[H] = \begin{bmatrix} 0 & A & 0 & B \\ A^* & 0 & t & 0 \\ 0 & t & 0 & A^* \\ B^* & 0 & A & 0 \end{bmatrix} \tag{A.1}$$

ここで，$A = -t(1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x a})$，$B = -\gamma \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_y L_y}$ とおいた．A^* (B^*) は，A (B) の複素共役である．ディラック点の波数は，式 (A.1) で与えられたハミルトニアンの固有値（エネルギー）が 0 となる波数である．したがって，行列式 $|H|$ が 0 となる波数を求めればよい．行列式 $|H|$ の余因子展開を行うと，以下のようになる．

$$|H| = (AA^*)^2 - 2AA^*\gamma t + \gamma^2 t^2 \tag{A.2}$$

ここで，数値計算の結果から，ディラック点の y 方向の波数 k_y は常に 0 であるという予想を用いた．同様に様々な N に関して行列式を求めた結果から，N に関して一般化を行うと，行列式 $|H|$ は以下の式で表される．

$$|H| = (AA^*)^N - 2(AA^*)^{N/2}\gamma t^{N-1} + \gamma^2 t^{2(N-1)} \tag{A.3}$$

$(AA^*)^{N/2} \equiv X$，$\gamma t^{N-1} \equiv Y$ とおくと $|H| = 0$ は以下の式になる．

$$|H| = X^2 - 2XY + Y^2 = 0 \tag{A.4}$$

これを解くと，$X = Y$ の解が得られ，以下の関係式が得られる．

$$(AA^*)^{N/2} = \gamma t^{N-1} \tag{A.5}$$

$A = -t(1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x a})$ を代入して，式変形を行うと，

$$k_x = \frac{2}{a} \arccos\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\gamma}{t}\right)^{1/N}\right] \tag{A.6}$$

となり，ジグザグ端ナノリボン列におけるディラック点の波数が求まった．

A.2　アームチェア端ナノリボン列 $(N = 3n + 1)$ におけるディラック点の波数

$N = 3n + 1$ のアームチェア端ナノリボン列では，数値計算の結果から予測を行い，ディラック点の波数 k_{D} の解析式を求めた．数値計算から求めた γ と k_{D} の関係を図 A.1 の白丸に示す．N を変化させても，同じ数値結果が得られた．このことから，$k_{\mathrm{D}}L_y/\pi$ と γ/t が，N に依存しない関係をもつことがわかった．また，式 (A.6) に示したように，ジグザグ端ナノリボン列では，ディラック点の波数 k_{D} がリボン間結合強度 γ の逆三角関数になったことから，k_{D} は次式で表されると予測を行った．

$$k_{\mathrm{D}} = \frac{2}{Na} \arccos\left(\frac{t}{2\gamma}\right) \tag{A.7}$$

この式を図 A.1 に実線でプロットした結果，白丸で表された数値計算の結果と一致することを確認した．

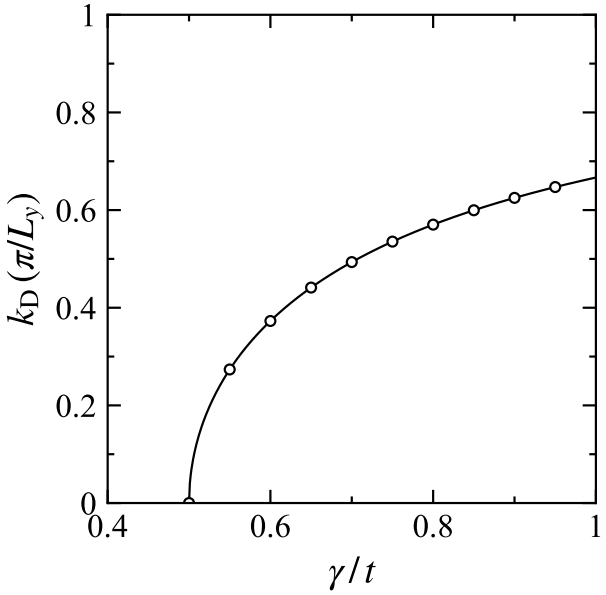


図 A.1: リボン幅 $N = 3n + 1$ のアームチェア端ナノリボン列におけるディラック点の y 方向の波数 k_{D} の γ 依存性．白丸が数値計算の結果，実線が解析式を用いた結果を表す．

A.3　アームチェア端ナノリボン列 $(N = 3n + 2)$ におけるディラック点の波数

$N = 3n + 2$ のアームチェア端ナノリボン列では，$N = 3n + 1$ の場合と同様に数値計算の結果から予測を行い，ディラック点の波数 k_{D} の解析式を求めた．数値計算から求めた γ と k_{D} の関係を図 A.2 の白丸に示す．N を変化させても，同じ数値結果が得られた．このことから，$k_{\mathrm{D}}L_y/\pi$ と γ/t が，N に依存しない関係をもつことがわかった．また，式 (A.6) に示したように，ジグザグ端ナノリボン列では，ディラック点の波数 k_{D} がリボン間結合強度 γ の逆三角関数になったことから，k_{D} は次式で表されると予測

を行った．

$$k_{\mathrm{D}} = \frac{2}{Na} \arccos\left(\frac{\gamma}{2t}\right) \tag{A.8}$$

この式を図 A.2 に実線でプロットした結果，白丸で表された数値計算の結果と一致することを確認した．

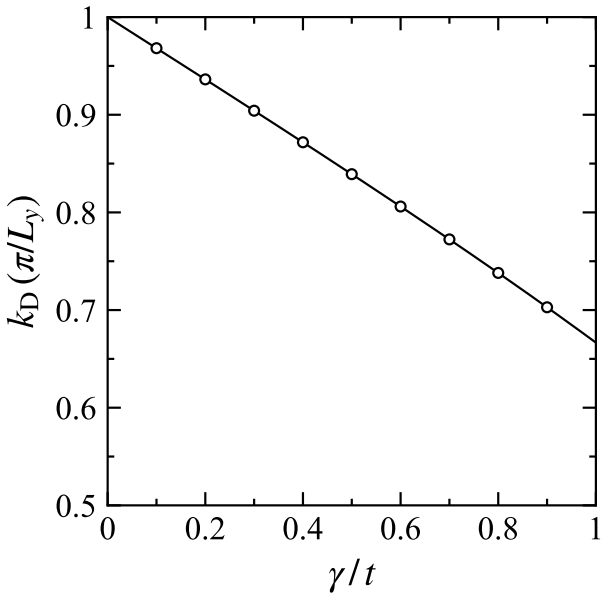


図 A.2: リボン幅 $N = 3n + 2$ のアームチェア端ナノリボン列におけるディラック点の y 方向の波数 k_{D} の γ 依存性．白丸が数値計算の結果，実線が解析式を用いた結果を表す．

謝辞

本研究は大阪大学大学院工学研究科電気電子情報工学専攻 森 伸也教授の御指導の許に行なわれたものであり，本研究を遂行するにあたり，終始変わらず懇切丁寧に御教示，御鞭撻を賜わりましたことに深く感謝致します．

本論文を作成するにあたり，御助言，御指導頂いた大阪大学大学院工学研究科電気電子情報工学専攻 尾崎 雅則教授，片山 光浩教授，久保 理准教授に心から感謝致します．

本論文に関して貴重な御教示を頂きました大阪大学大学院工学研究科電気電子情報工学専攻 伊藤 利道教授，森 勇介教授，栖原 敏明教授，片山 竜二教授，近藤 正彦教授，廣瀬 哲也教授，八木 哲也教授，大岩 顕教授，西 竜治准教授，斗内 政吉教授，宮永 憲明教授，河仲 準二教授，西村 博明教授，山本 和久教授に深く感謝致します．

本研究を遂行する際，非常に多くの知識や示唆を頂きました田中 一研究員に心より感謝致します．また，日常の議論を通じて多くの知識や示唆を頂きました松岡 俊匡准教授，鎌倉 良成教授に心から深く御礼申し上げます．また，第一原理計算に関して有益な議論をさせて頂いた濱田 幾太郎准教授に深く感謝致します．

研究生活の面で大変御世話になった集積量子デバイス領域の方々に心から御礼申し上げます．また，学会参加の際の手続きなど，研究に伴う種々の事務的な面で御手伝い頂いた岩原 加代子秘書，田中 玲子秘書に深く御礼申し上げます．

最後に，生活の面や精神的な面で終始支援して頂いた家族に深く感謝致します．

研究業績

学術発表論文

1. F. Hashimoto, N. Mori, O. Kubo, and M. Katayama, "Electronic states of coupled graphene nanoribbons," Japanese Journal of Applied Physics, **56**, 045001 (2017).
2. F. Hashimoto and N. Mori, "Inter-layer coupling effects on vertical electron transport in multilayer graphene nanoribbons," Journal of Physics: Conference Series, **906**, 012004 (2017).
3. F. Hashimoto, H. Tanaka and N. Mori, "Material dependence of band-to-band tunneling in van der Waals heterojunctions of transition metal dichalcogenides," Journal of Physics D: Applied Physics, `https://doi.org/10.1088/1361-6463/ab7ca6` (in press).

学会発表

国際会議における発表

1. F. Hashimoto and N. Mori, "Effects of internal electric field on efficiency of carrier multiplication solar cells," 2015 International Meeting for Future of Electron Devices, Kansai, Kyoto, Japan, June 4-5, 2015.
2. F. Hashimoto, N. Mori, O. Kubo, and M. Katayama, "Electronic structures of zigzag-edge nanoribbon lateral superlattices," International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, Hawaii, USA, November 29-December 4, 2015.
3. F. Hashimoto, N. Mori, O. Kubo, and M. Katayama, "Electronic states of zigzag-edge nanoribbon lateral superlattices under magnetic fields," The 22nd International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, Hokkaido, Japan, July 24-29, 2016.
4. F. Hashimoto, N. Mori, O. Kubo, and M. Katayama, "Electronic states of coupled armchair-edge nanoribbon arrays," The 33rd International Conference on the Physics of Semiconductors, Beijing, China, July 31- August 5, 2016.
5. F. Hashimoto and N. Mori, "Ballistic transport characteristics of multilayer graphene," Project Meeting on MEXT, "Hybrid Quantum Systems" Project, Saitama, Japan, February 27 - March 2, 2017.
6. F. Hashimoto and N. Mori, "Inter-layer coupling effects on ballistic electron transport in multi-

layer graphene," The 20th International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures, NY, USA, July 17-21, 2017.

7. F. Hashimoto and N. Mori, "Ballistic electron transport in coupled graphene nanoribbons," International Symposium on Hybrid Quantum Systems 2017, Miyagi, Japan, September 10-13, 2017.
8. T. Kuroda, F. Hashimoto and N. Mori, "Self-consistent simulations of transport characteristics in-plane MoS_2/WS_2 heterojunction tunnel transistors," 31st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Sapporo, Japan, November 13-16, 2018.
9. T. Mishima, H. Tanaka, F. Hashimoto, and N. Mori, "Modeling of inter-layer tunneling between semiconductor nanoribbons," Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems, Hawaii, USA, November 25-30, 2018.
10. F. Hashimoto and N. Mori, "Impact of lattice matching condition on the simulation of band-to-band tunneling in MoS_2/Ge van der Waals heterojunctions," Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems, Hawaii, USA, November 25-30, 2018
11. F. Hashimoto and N. Mori, "Study on band-to-band tunneling in van der Waals heterojunctions using NEGF method," International Workshop on Hybrid Quantum Systems, Okinawa, Japan January 8, 2019.
12. T. Kuroda, F. Hashimoto, and N. Mori, "Resonant enhancement of band-to-band tunneling in in-plane MoS_2/WS_2 heterojunction tunnel transistors," Compound Semiconductor Week 2019, Nara, Japan, May 20, 2019.
13. F. Hashimoto and N. Mori, "Effect of stacking order on band-to-band tunneling in van der Waals TMDC Heterojunctions," International Workshop on Computational Nanotechnology, Illinois, USA, May 20-24, 2019.
14. T. Mishima, H. Tanaka, F. Hashimoto, and N. Mori, "NEGF simulation of inter-layer tunneling between semiconductor nanoribbons," International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures, Nara, Japan, July 15, 2019.
15. F. Hashimoto and N. Mori, "Stacking order dependence of inter-layer tunneling in van der Waals TMDC heterostructures," The 21st International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures, Nara, Japan, July 14-19, 2019.
16. F. Hashimoto, H. Tanaka, and N. Mori, "NEGF simulation of band-to-band tunneling in TMD heterojunctions," International Symposium on Hybrid Quantum Systems 2019, Matsue, Japan, December 1-4, 2019.
17. T. Mishima, H. Tanaka, F. Hashimoto, and N. Mori, "Effects of inelastic scattering on inter-layer tunneling between vertically stacked semiconductor nanoribbons," International Symposium on Hybrid Quantum Systems 2019, Matsue, Japan, December 2, 2019.

国内会議における発表

1. 橋本 風渡，森　伸也，久保　理，片山 光浩，“結合したナノリボン列の電子状態解析”，新学術領域「ハイブリッド量子科学」第 2 回領域会議，中之島センター，大阪府，2016 年 3 月 2 日．
2. 橋本 風渡，森　伸也，久保　理，片山 光浩，“弱く結合したジグザグ端ナノリボン列の電子状態解析”，第 63 回応用物理学会春季学術講演会，東京工業大学 大岡山キャンパス，東京都，2016 年 3 月 21 日．
3. 橋本 風渡，森　伸也，久保　理，片山 光浩，“強磁場下に置かれたナノリボン列の電子状態”，ハイブリッド量子科学 第一回若手研究会・第 3 回領域会議，東京理科大学 神楽坂キャンパス，東京都，2016 年 8 月 24 日．
4. 橋本 風渡，森　伸也，久保　理，片山 光浩，“磁場中におけるジグザグ端ナノリボン列の電子状態解析”，第 77 回応用物理学会秋季学術講演会，朱鷺メッセ，新潟県，2016 年 9 月 13 日．
5. 橋本 風渡，森　伸也，“非平衡グリーン関数法を用いた多層グラフェンの輸送特性解析”，第 22 回電子デバイス界面テクノロジー研究会，東レ研修センター，静岡県，2017 年 1 月 20 日．
6. 橋本 風渡，森　伸也，“層間相互作用が多層グラフェンの電子輸送特性に及ぼす影響”，第 64 回応用物理学会春季学術講演会，パシフィコ横浜，神奈川県，2017 年 3 月 15 日．
7. 橋本 風渡，森　伸也，“MoS_2/Ge ファンデルワールスヘテロ接合におけるバンド間トンネル電流”，新学術領域「ハイブリッド量子科学」第 5 回領域会議，I-site なんば，大阪府，2017 年 10 月 12 日．
8. 橋本風渡，森　伸也，“MoS_2/Ge ヘテロ接合におけるバンド間トンネル電流の NEGF 解析”，新学術領域「ハイブリッド量子科学」第 6 回領域会議，NTT 厚木研究開発センタ，神奈川県，2018 年 2 月 15 日．
9. 橋本 風渡，森　伸也，“非平衡グリーン関数法を用いた MoS_2/Ge バンド間トンネル電流解析”，第 65 回応用物理学会春季学術講演会，早稲田大学，東京都，2018 年 3 月 19 日．
10. 橋本 風渡，森　伸也，“ファンデルワールスヘテロ構造におけるバンド間トンネル電流”，新学術領域「ハイブリッド量子科学」第 7 回領域会議，名古屋大学，愛知県，2018 年 8 月 6 日．
11. 堅田 侑汰，橋本 風渡，森　伸也，“弱く結合した多層グラフェンの電子輸送特性解析”，応用物理学会秋季学術講演会，名古屋国際会議場，愛知県，2018 年 9 月 21 日．
12. 三島 嵩也，橋本 風渡，森　伸也，“2 次元材料における層間トンネル過程の非平衡グリーン関数解析”，応用物理学会秋季学術講演会，名古屋国際会議場，愛知県，2018 年 9 月 21 日．
13. 橋本 風渡，森　伸也，“NEGF 法を用いたファンデルワールスヘテロ接合におけるバンド間トンネル電流解析”，新学術領域「ハイブリッド量子科学」第 8 回領域会議，沖縄科学技術大学院大学，沖縄県，2019 年 1 月 9 日．
14. 三島 嵩也，田中　一，橋本 風渡，森　伸也，“半導体ナノリボンの層間トンネル”，新学術領域「ハイブリッド量子科学」第 8 回領域会議，沖縄科学技術大学院大学，沖縄県，2019 年 1 月 9 日．
15. 三島 嵩也，田中　一，橋本 風渡，森　伸也，“有限バイアス下における層間トンネル過程の非平衡グリーン関数解析”，第 66 回応用物理学会春季学術講演会，東京工業大学，東京都，2019 年 3 月

10 日.

16. 三島 嵩也，田中　一，橋本 風渡，森　伸也，“非弾性散乱が層間トンネル過程に及ぼす影響”，新学術領域「ハイブリッド量子科学」第 9 回領域会議，北陸先端学技術大学院大学，石川県，2019 年 8 月 8 日.
17. 橋本 風渡，田中　一，森　伸也，“NEGF 法を用いたファンデルワールスヘテロ接合におけるバンド間トンネル電流解析”，新学術領域「ハイブリッド量子科学」第 9 回領域会議，北陸先端学技術大学院大学，石川県，2019 年 8 月 8 日.
18. 橋本 風渡，田中　一，森　伸也，“ファンデルワールスヘテロ接合におけるバンド間トンネル電流の NEGF 解析”，第 80 回応用物理学会秋季学術講演会，北海道大学，北海道，2019 年 9 月 18 日.
19. 橋本 風渡，森　伸也，“結合した MoS2 ナノリボンの電子輸送特性解析”，新学術領域「ハイブリッド量子科学」第 10 回領域会議，理化学研究所，埼玉県，2020 年 2 月 25 日.