

計算科学手法によるナノカーボン素子の設計と物性予測

Physical Properties of Nano-Carbon Devices and Materials

物材機構 MANA¹, JST さきがけ² ◯若林 克法^{1,2}

NIMS/MANA¹, JST/PRESTO², ◯Katsunori Wakabayashi^{1,2}

E-mail: WAKABAYASHI.Katsunori@nims.go.jp

2004年にカーボンからなる一原子層シート(グラフェン)が発見されて以降、グラフェンについて基礎および応用の観点から爆発的に研究が進められている。グラフェンの電子移動度は、 $100,000\text{cm}^2/\text{Vs}$ 以上という従来の電子材料に比して驚異的に大きな値をもち、極めて高い伝導性を示す。そのため、次世代ナノエレクトロニクス素子のキーマテリアルとして大きな注目を集めている。このことは、グラフェンの電子構造が、半導体2次元電子系とは違って、質量のないディラック方程式で記述されることに起因している[1]。

しかし、フェルミ準位近傍の電子状態は、グラフェンの端の存在によって大きな影響を受ける。特に、ジグザグ端が存在すると、非結合性分子軌道の性質を有したエッジ局在状態が形成される[2-4]。ナノスケールのグラフェンでは、エッジ状態は、非常に大きな状態密度のピークをフェルミ準位近傍に与える。したがって、ナノグラフェンの電子物性は、グラフェンあるいは炭素ナノチューブとは、非常に異なったものになる。さらに、エッジ状態に由来してジグザグ端近傍に磁性が可能性もあり、特異な電気伝導特性の起源となる。この特異なナノスケール効果を生かした電子デバイスと新規物性の探索は、大きな潮流となっている。

さらに最近では、半導体微細加工技術あるいは化学的な手法によって、ナノスケールの幅をもつリボンのグラフェン(グラフェンナノリボン)の作製も可能になってきており[5]、エッジ形状を制御する試みも行われている[6]。本講演では、グラフェンナノリボンの電子状態および電子輸送特性について、最近のナノグラフェン研究の動向を紹介しつつ、ナノグラフェンにおける特異な電子物性について紹介する。不純物を有するグラフェンナノリボンにおける完全伝導チャンネル[7]、さらにナノグラフェン接合系を介した電子伝導特性[8]、エッジ修飾による磁性発現の可能性[10]について紹介する。

参考文献:

- [1] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. 74, 777(2005). [2] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 65, 1920 (1996). [3] K. Wakabayashi et.al., Phys. Rev. B59, 8271(1999). [4] 若林克法, 草部浩一, 日本物理学会会誌 vol. 63, 344(2008). [5] M. Y. Han et.al. Phys. Rev. Lett. 98, 206805 (2007); X. Li et.al. Science 319, 1229(2008). [7] X. Jia, et.al., Science 323, 1701 (2009). [8] K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. 99, 036601(2007); New J. Phys. 11, 095016 (2009). [9] M. Yamamoto, and K. Wakabayashi, Appl. Phys. Lett. 95, 082109 (2009). [10] K. Wakabayashi et.al., J. Phys. Soc. Jpn. vol. 79, 034706 (2010).