

グラフェンナノリボンにおけるエッジ状態を介した伝導の水素付加による影響

犬塚恒平, 本多周太, 佐野伸行
(筑波大・電物)

Effect of Hydrogenation on Spin Transports via the Edge States in Graphene Nano-Ribbon

Kouhei Inuzuka, Syuta Honda, and Nobuyuki Sano
(Univ. Tsukuba)

はじめに

グラフェンは数 μm 以上の非常に長いスピン緩和長を持つことが実験的に確認されており、スピン伝導素子への利用が提案されている。また、グラフェンのエッジにはスピン分極したエッジ状態に起因する磁性が現れるという結果が計算により報告されている¹⁾。伝導方向にジグザグエッジを持つ幅の狭いグラフェンナノリボン(GNR)ではスピン分極した σ 軌道の少数スピンのエッジ状態($\text{ES}\sigma$)がフェルミエネルギー近傍に形成される。片方のエッジのみ水素化された GNR においては、 $\text{ES}\sigma$ を介した伝導を利用することで大きくスピン偏極した伝導を得られた。しかし、ジグザグエッジが水素化されることにより $\text{ES}\sigma$ は消滅する。部分的に水素化された場合、 $\text{ES}\sigma$ が存在する領域と消滅した領域が混在する。ただし一部でも水素が付加されていない領域があれば、 $\text{ES}\sigma$ を介した電気伝導は起こりうる。そこで、本研究では、微視的理論を用いた伝導計算により、水素付加が $\text{ES}\sigma$ を介した伝導にどのように影響を与えるかを調べる。

計算方法

グラフェンと正方格子の金属リード接合を用いる。グラフェンの幅は 8 chains, 伝導方向の長さ(L)は 50.5 chains であり、金属リードは半無限平面である。グラフェンは伝導方向にジグザグエッジを持っており、アームチェアエッジで金属リードと接合する。また、向かい合ったジグザグエッジのうち片側を完全に水素化し、もう片方をランダムに水素化した場合、部分的に水素化した場合(Fig1)を考慮する。電子状態、電気伝導の計算にはタイトバインディングモデル、線形応答理論に基づく久保公式を用いる²⁾。

計算結果

ランダムに水素化した構造においては、 $\text{ES}\sigma$ のコンダクタンス $\Gamma\sigma$ のサンプル平均は水素付加の量に対し指数関数的に減衰した。また、水素が Fig.1(a)のように中心から連続で N_H 個付加された場合(I)は、水素付加に対して $\Gamma\sigma$ は急峻に減衰した(Fig.2 実線)。Fig.2(b)のように N_H 個の水素付加と一つ空きが連続的になっている構造(II)における $\Gamma\sigma$ は $\Gamma\sigma$ と近い値となった(Fig.2 破線)。つまり、水素が多く付加した場合においても σ 軌道のエッジ状態を介した伝導が起こることが明らかとなった。

参考文献

- 1) N. Ota: J. Mag. Soc. Jpn., **37**, 3 (2013).
- 2) Yamamura, *et. al.*: J. Mag. Soc. Jpn., **34**, 34 (2010).

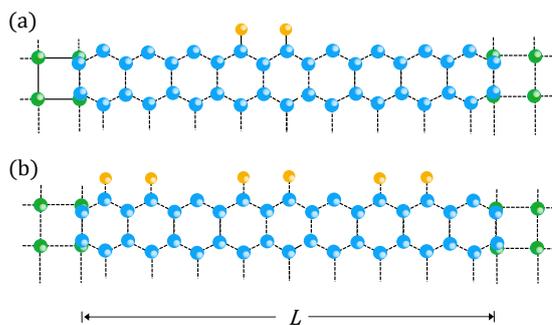


Fig. 1 Structure of one-edge-side of the metal/GNR/metal junction for (a) hydrogenated type I and (b) type II with $N_H=2$ and $L = 9.5$ chains.

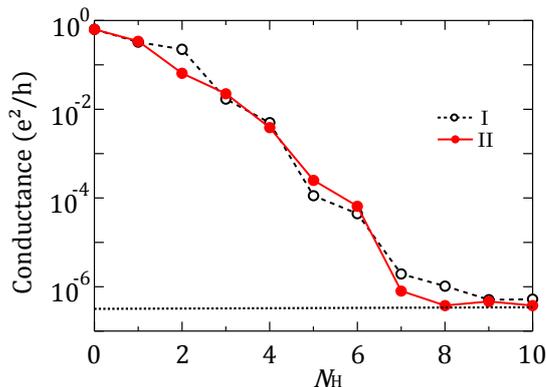


Fig. 2 conductance via $\text{Es}\sigma$ of the junction with $L = 50.5$ chain. Dotted line is the conductance of the junction with all-hydrogenated GNR.