

基板上グラフェンの磁性と伝導特性

Magnetism and Transport Property of Graphene on Substrates

澤田啓介¹, 石井史之², 斎藤峯雄², 尾崎泰助³

K. Sawada¹, F. Ishii², M. Saito², and T. Ozaki³

¹金沢大自然

²金沢大理工

³北陸先端大学融合院

¹*Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University,
Kanazawa, 920-1192, Japan*

²*Faculty of Mathematics and Physics, Institute of Science and Engineering,
Kanazawa University, Kanazawa, 920-1192, Japan*

³*Research Center for Integrated Science (RCIS), Japan Advanced Institute of Science
and Technology (JAIST),
1-1 Asahidai, Nomi, 923-1292, Japan*

グラフェンは実験的にスピン輸送特性を示すことが観測され、スピントロニクス材料としての応用が期待されており盛んに研究されている[1]。近年、Ni(111)上グラフェンにおける炭素原子において、磁気モーメントが誘起されることが実験的に報告されている[2]。グラフェンと磁性電極・基板との間の相互作用を理解することは、グラフェンのスピントロニクスデバイス応用に関して重要である。また、グラフェンと磁性電極・基板との間の相互作用がグラフェンの電子構造、輸送特性に大きな影響を与えることが期待される。

本研究では、第一原理計算によってNi基板上ジグザググラフェンナノリボン(ZGNR)の電子状態、磁性を調べた。ZGNRをNi基板上にのせることによって、端の炭素原子での磁気モーメントが大幅に減少して、ZGNRの磁性が消滅することが分かった。またNi基板上にグラフェンを引いて、その上にZGNRをのせた系については、ZGNRの端の炭素原子における磁気モーメントが孤立したZGNRの場合とほぼ同等となることを示した。孤立したZGNRの基底状態は二つの端で反平行なスピン秩序を持つ一方、Ni基板グラフェンシート上ZGNRでは、ZGNRの二つの端でスピンが平行となる事が分かった。電子状態を解析することによって、ZGNRとNi基板の軌道混成による磁気的な相互作用と、Ni基板からZGNRへの電荷移動による自発的なキャリアドーピングが、磁気的安定性に寄与していると結論付けられた。

また現実のデバイス特性を評価するために電気伝導特性を調べる必要がある。これまでの電気伝導計算はスピンが α 、 β 成分のみのコリニア磁性のみ考慮されていたが、ノンコリニア磁性を考慮することでより詳細なスピン伝導を調べることが出来る。ノンバイアス下ではあるがノンコリニア磁性を考慮した電気伝導計算コードを開発し、そのコードを用いてノンコリニア磁性状態のZGNRの透過率等を調べた。

[1] M. Ohishi et al., Jpn. J. Appl. Phys. **46**, L605 (2007).

[2] M. Weser et al., Appl. Phys. Lett. **96**, 012504 (2010).