

平成22年6月25日現在

研究種目：若手研究(B)
 研究期間：2007～2009
 課題番号：19710082
 研究課題名（和文）
 ナノ炭素トポロジ物質における特異な電子・スピン物性の理論的研究
 研究課題名（英文）
 Theoretical Study on Electronic and Spintronic Properties of Nano-Carbon Topology Material
 研究代表者
 若林 克法（WAKABAYASHI KATSUNORI）
 独立行政法人物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 独立研究者
 研究者番号：50325156

研究成果の概要（和文）：

本研究課題では、グラフェンナノリボンの電子輸送特性における不純物の効果、端の形状効果および磁場効果について、数値理論的な解析を行った。ナノリボンのコンダクタンスは端の形状に大きく依存し、不純物の広がり格子定数よりも広い長距離型不純物に対しては、ジグザグナノリボンは完全透過チャンネルを有し、準一次元系にも関わらずAnderson局在が起こらないことを示した。

研究成果の概要（英文）：

In this research program, we have focused the effect of impurity, edge shape and magnetic field on the electronic transport properties of graphene nanoribbons using numerical and analytic techniques. It was shown that the physical quantities characterizing the electronic transport such as conductance and its fluctuation crucially depend on the edge shape and chirality of graphene nanoribbons. Also, we have found that disordered zigzag nanoribbon with long-ranged impurities whose range is larger than the lattice constant possesses a perfectly conducting channel, i.e. absence of Anderson localization in spite of the quasi-one dimensional systems.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,700,000	0	1,700,000
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
2009年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	3,100,000	420,000	3,520,000

研究分野：複合新領域

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ科学・ナノ構造科学

キーワード：メゾスコピック物理

1. 研究開始当初の背景

ナノサイズ炭素系物質は、フラーレンや炭素ナノチューブの発見以来、物性物理学、化学、

材料科学、電子工学の各分野で大きな関心を呼び、ナノテクノロジー/ナノサイエンスを基本物質として脚光を浴びている。これらの物

質では、炭素原子骨格が作り出す π 電子ネットワークのトポロジーが、フェルミ準位近傍の電子状態を支配し、系の電子物性を特徴づける。たとえば、炭素ナノチューブでは、チューブの直径と螺旋度という2つの幾何学的なパラメーターに電子状態が依存し、金属または半導体の性質を示すことが、知られている。

しかし、ナノグラフェン/ナノグラファイトでは、端の環境にある炭素原子とバルクの環境にある炭素原子の数が同等であるため、端の効果を無視することはできず、端の形状がフェルミ準位近傍の電子状態に強い影響を及ぼす。グラファイトには、『アームチェア端』と『ジグザグ端』の2種類の特徴的な端の形状がある。特にジグザグ端は、電子が端に局在した非結合性分子軌道状態(『エッジ状態』)を形成する。そのため、フェルミ準位近傍にほとんどフラットなバンドが現われ、非常に大きな状態密度のピークを与える。バルクのグラファイトや、単層のグラフェンでは、フェルミ準位での状態密度はゼロであることから、ナノグラフェン/ナノグラファイトの電子物性は、バルクグラファイトとは大きくこと異なり、全く新規な電子・スピン物性を有する可能性を持っている。また、それらの機能を活用した新しいデバイスが創製される可能性がある。

2. 研究の目的

ナノグラフェン/ナノグラファイトなどのナノ炭素物質では、炭素原子骨格が作る π 電子ネットワークの幾何学的な構造(トポロジー)が、系の電子・スピン物性を強く支配する。本研究では、炭素ネットワークトポロジーにおける『端』、『欠陥や不純物』の効果を統一的に理解し、『コヒーレント電子輸送現象』、ホール効果や光吸収などの『電磁場応答』に対する効果を理論的に解明する。さらに、将来のナノグラフェンを活用した電子・スピンデバイスを実現するための基盤となる普遍性のある基礎理論を開拓・検証・整備することである。

3. 研究の方法

ナノグラフェンの π 電子状態は、炭素ネットワークのトポロジーに大きく依存する。したがって、炭素原子が作る格子構造を正確に取り扱う事のできる強結合モデルにより解析を進めた。コンダクタンス、電流分布、電子波の振舞を、再帰グリーン関数法によって解析する。

4. 研究成果

ナノグラフェンリボンの量子輸送特性について、大規模数値計算によって解析を行い、ナノカーボン電子スピン素子を設計するた

めに必要となる基礎物性を明らかにした。

(1)ナノグラフェンの電子物性は、端の形状によって大きく変化することが知られている。特に、ジグザグ端があると、エッジ状態がフェルミ準位近傍に形成され、ほとんど分散のない平坦なバンドが現れる。このエッジ状態に起因するサブバンドのため、バレー間散乱が抑制される状況では、ジグザグ端をもつグラフェンナノリボンは、一方通行チャンネルをもつ量子細線となることを指摘した。この一方通行チャンネルの存在によって、ジグザグ型エッジを有するナノリボンでは、長距離型不純物に対して電子伝導の影響を受けにくく、完全伝導チャンネルを有することを示した。

(2)アームチェア型のエッジを有するナノリボンでも、低エネルギー領域で、不純物散乱がほとんど電子輸送に影響を与えない特異な性質を有することを見いだした。これは、ディラック型分散関係に由来する線形バンドに関して、長距離型不純物による散乱では、Born 近似の範囲で後方散乱の行列要素が消えることから理解できることを示した。

(3)任意のエッジ形状での伝導特性についても解析を行い、グラフェン結晶軸と伝導度の相関を数値的に明らかにした。

(4)グラフェン上に電場印加による量子ポイントコンタクトを形成した場合での電子輸送を解析したところ、ディラック点近傍の単チャンネル伝導領域において、ファノ共鳴による完全反射状態に起因して、非常に大きなコンダクタンス揺らぎが現れることを指摘した。

(5)リボンの幅が異なる二つのナノリボンを接合する系について、そのコンダクタンスの振る舞いを調べた。ジグザグ端におきるエッジ状態のために、低エネルギー領域に、コンダクタンスがゼロになる反共鳴状態が現れる。この反共鳴状態の出現条件とジャンクション形状の関係を示した。エッジ形状を制御することによって、低エネルギーでの伝導特性が制御可能であることを示した。

(6)グラフェン量子ポイントコンタクトにおける電子輸送特性とその磁場に対する応答を数値的に解析した。その結果、ポテンシャルバリアーを介した電子伝導の場合と、エッジの幾何学的構造に由来したポテンシャルバリアーを介した電子伝導の場合とでは、その弱磁場でのコンダクタンスの依存性が大きく異なることが分かった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 14 件)

- ① Edge state and flat band of graphene nanoribbons with edge modification, Katsunori Wakabayashi, Susumu Okada, Ryutaro Tomita, Shigeo Fujimoto, and Yuhei Natsume, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 79, No. 3, 034706(7 pages) (2010). 査読有.
- ② Katsunori Wakabayashi, Yositate Takane, and Manfred Sigrist, Electronic transport properties of disordered graphene nanoribbons, J. Phys: Conf. Ser. vol. 150, 022097 (2009). 査読有.
- ③ Katsunori Wakabayashi, Yositate Takane, Masayuki Yamamoto and Manfred Sigrist, Electronic transport properties of graphene nanoribbons, New Journal of Physics, vol. 11, 095016(1)-095016(21) (2009). 査読有.
- ④ Masayuki Yamamoto and Katsunori Wakabayashi, Control of electric current by graphene edge structure engineering, Applied Physics Letters, vol. 95, 082109(1)-082109(3) (2009). 査読有.
- ⑤ Katsunori Wakabayashi, Yositate Takane, Masayuki Yamamoto and Manfred Sigrist, Edge effect on electronic transport properties of graphene nanoribbons and presence of perfectly conducting channel, CARBON(Elsevier), vol. 47 (2009) page. 124-137 査読有.
- ⑥ Masayuki Yamamoto, Yositate Takane, and Katsunori Wakabayashi, Nearly Perfect Single-Channel Conduction in Disordered Armchair Nanoribbons, Phys. Rev. B vol. 79, 125421 (2009). 査読有.
- ⑦ Y. Takane, S. Iwasaki, Y. Yoshioka, M. Yamamoto, and K. Wakabayashi, Conductance Distribution in Disordered Quantum Wires with a Perfectly Conducting Channel, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 78, No. 3, 034717 (2009). 査読有.
- ⑧ Katsunori Wakabayashi, Peculiar Electronic Transport Properties of Nano-Graphenes, J. Phys. Chem. Solid. vol. 69, 1162-1164 (2008). 査読有.
- ⑨ Katsunori Wakabayashi, and Manfred Sigrist, Enhanced conductance fluctuation due to the zero-conductance Fano resonances in the quantum point contact on graphene. J. Phys. Soc. Jpn. (Letters), vol. 77, No. 11, 113708 (2008). 査読有.
- ⑩ Yositate Takane, and Katsunori Wakabayashi, Conductance Fluctuation in Disordered Wires with Perfectly Conducting Channels, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 77, No. 5, 054702(1)-054702(6) (2008). 査読有.
- ⑪ Katsunori Wakabayashi, and Manfred Sigrist, Spin and Charge Transport Properties in Quasi-One Dimensional Anomalous Hall Systems, Proceedings of 28th International Conference on the Physics of Semiconductors, Wien, Austrila, July 24-28 2006. AIP Conf. Proc. vol. 893, 1269 (2007). 査読有.
- ⑫ Yositate Takane, and Katsunori Wakabayashi, Averaged Conductance of the Three-Edge Chalker-Coddington Model, J. Phys. Soc. Jpn. (Letters), vol. 76, 083710 (2007). 査読有.
- ⑬ Yositate Takane, and Katsunori Wakabayashi, Conductance of Disordered Wires with Unitary Symmetry: Role of Perfectly Conducting Channels, J. Phys. Soc. Jpn. (Letters), vol. 76, 053701(1)-053701(4) (2007). 査読有.
- ⑭ Katsunori Wakabayashi, Yositate Takane, and Manfred Sigrist, Perfectly Conducting Channel and Universality Crossover in Disordered Graphene Nanoribbons, Phys. Rev. Lett., 99, 036601(1)-036601(4) (2007). 査読有.
- [学会発表] (計 39 件)
- ① 山本真幸(A), 若林克法(A,B), 物材機構(A), JST さきがけ(B), 「グラフェンポイントコンタクトにおける電気伝導」日本物理学会(2010年3月23日, 岡山大学)
- ② 下村祐司(A), 高根美武(A), 若林克法(B,C), 広大院先端物質(A), 物材機構(B), JST さきがけ(C), 「グラフェンコーナーエッジの電子状態」, 日本物理学会(2010年3月23日, 岡山大学)
- ③ 針谷喜久雄(A), 若林克法(B), 産総研(A), 物材機構(B), 「2層グラフェンの減衰状態」, 日本物理学会(2010年3月20日, 岡山大学)
- ④ 若林克法(A,B), 岡田晋(C,D), 物材機構(A), JST さきがけ(B), 筑波大数理物質(C), JST-CREST(D), 「クラインド構造によるグラフェンナノリボンのエッジ状態と平坦バンド」, 日本物理学会(2010年3月20日, 岡山大学)
- ⑤ K. Wakabayashi, “Peculiar

- Electronic and Transport of Graphene Nanoribbons”, MANA Symposium 2010, 2010年3月3日. つくば国際会議場(茨城県つくば市).
- ⑥ Katsunori Wakabayashi (NIMS), Peculiar Low-Energy Physical Properties of Nanographenes, MANA Seminar, 2010年1月29日. 物質・材料研究機構MANA棟, 茨城県つくば市.
- ⑦ 若林克法 (NIMS), グラフェンナノリボンにおける特異なナノスケール効果と電子物性, 電子情報技術産業協会セミナー, 2010年1月15日, 慶應義塾大学日吉キャンパス(神奈川県横浜市).
- ⑧ 若林克法 (物材機構), グラフェンにおける特異なナノスケール効果と電子物性, 奈良女子大学凝縮系物理セミナー, 2009年12月15日. 奈良県奈良市.
- ⑨ 山本真幸, 若林克法, ナノリボンジャンクションにおける電気伝導, 第二回連携ミニ研究会(筑波大-KEK 連携) グラフェン・グラフィイトとその周囲の物理, 2009年11月27日. 筑波大学第一エリア自然系学系棟(茨城県つくば市).
- ⑩ K. Wakabayashi, “Electronic Transport of Nanographene: Effect of Geometry and Edges”, Indo-Japan Conference on “Graphene”, Jawaharlal Nehru Center for Advanced Scientific Research (JNCASR), 2009年11月18日. インド、バンガロール.
- ⑪ 若林克法 (物材機構), ナノグラフェンの電子物性と輸送特性, 物性研究所短期研究会「ディラック電子系の物性—グラフェンおよび関連物質の最近の研究」, 2009年10月21日 東京大学物性研究所(千葉県柏市).
- ⑫ K. Wakabayashi, Electronic Transport Properties of Graphene Nanoribbons: Effect of Edge and Geometry, ICCMSE2009, 2009年9月30日, ギリシア、ロドス.
- ⑬ 山本真幸, 若林克法, ナノリボンジャンクションにおける電気伝導, 物理学会(2009年9月27日, 熊本大学)
- ⑭ 若林克法 (物材機構), ナノグラフェンの電子物性と輸送特性, 新世代研究所第2回ナノカーボン研究会, 2009年9月11日 新世代研究所(東京都)
- ⑮ K. Wakabayashi, “Electronic Transport of Nanographene: Effect of Geometry and Edges”, KIAS Workshop on Physical Properties of Graphene, Korea Institute for Advanced Science (KIAS), 2009年6月29日. 韓国ソウル市.
- ⑯ K. Wakabayashi, Electronic Transport of Nanographene: Effect of Geometry and Edges, NIMS CMS Seminar, 2009年6月10日. 茨城県つくば市.
- ⑰ K. Wakabayashi, “Edge Shape and Magnetic Field Effects on Electronic Transport Properties of Graphene Nanoribbons”, 15th International Symposium on Intercalation Compounds, 2009年5月12日. 精華大学(中国北京市).
- ⑱ 若林克法, 山本真幸, 「グラフェンナノリボンの電子伝導特性におけるエッジ乱れの効果」, 日本物理学会(2009年3月28日, 立教大学)
- ⑲ 山本真幸, 高根美武, 若林克法, 「乱れのあるアームチェアナノリボンにおける特異なシングルチャネル伝導」, 日本物理学会(2009年3月28日, 立教大学)
- ⑳ 若林克法 (広島大学, JST さきがけ), 科学技術未来戦略ワークショップ「次世代を拓くナノエレクトロニクス」, 計算科学に基づくナノカーボンの電子物性, JST 研究開発戦略センター, 2009年3月9日. 東京都.
- 21 佐々木健一, 若林克法, 齋藤理一郎, 「半導体単層ナノチューブにおける欠陥状態のエネルギー準位」, 第36回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(2009年3月2日, 名城大学)
- 22 K. Wakabayashi, “Electronic Transport Properties of Graphene Nanoribbons”, Okazaki Conference 2009, From Aromatic Molecules to Graphene: Chemistry, Physics and Device Applications. 2009年2月21日. 岡崎コンファレンスセンター(愛知県岡崎市).
- 23 M. Yamamoto, and K. Wakabayashi, Effect of Lattice Vacancies on Perfectly Conducting Channel in Zigzag Graphene Nanoribbons, International Symposium on “Graphene Device: Technology, Physics and Modeling” (ISGD2008), 2008年11月18日. 会津大学(福島県会津若松市).
- 24 K. Wakabayashi, “Peculiar Quantum Transport Properties of Graphene Nanoribbons”, International Symposium on “Graphene Device: Technology, Physics and Modeling” (ISGD2008), 2008年11月18日. 会津大学(会津若松市).
- 25 若林克法 (量子物質科学専攻助教), ナノグラフェンの物理, 広島大学大学院先端物質科学研究科創立10周年記念講演会, 2008年11月6日. 広島県東広島市.
- 26 山本真幸, 若林克法, 「グラフェンナノリボンにおける量子輸送現象への不規則

- なボンディングの影響」日本物理学会 (2008年9月22日, 岩手大学)
- 27 高根美武, 若林克法, 「完全透過チャンネルを持つ乱れた量子細線におけるコンダクタンス」, 日本物理学会 (2008年9月22日, 岩手大学)
- 28 若林克法 (広大院先端物質), 領域7シンポジウム「グラフェン研究の焦点ー新しい挑戦ー」, 日本物理学会 (岩手大学), 2008年9月21日. 岩手県盛岡市.
- 29 若林克法 (広島大学), ナノグラフェンにおけるエッジ状態が担う特異な電子物性, 東北大学理学部物理教室物性コロキウム, 2008年9月4日, 宮城県仙台市.
- 30 K. Wakabayashi, Y. Takane, and M. Sigrist, “Electronic Transport Properties of Disordered Graphene Nanoribbons”, 25th International Conference on Low Temperature Physics (LT25), August 8, 2008, RAI Conference Center, オランダ、アムステルダム.
- 31 K. Wakabayashi, Y. Takane, and M. Sigrist, “Perfectly Conducting Channel of Disordered Nanographene Ribbons”, 29th International Conference on Physics of Semiconductor (ICPS2008), 2008年7月28日. ブラジル、リオデジャネイロ.
- 32 M. Yamamoto, K. Wakabayashi, “Effect of random bonding and flux on perfectly conducting channel in graphene nanoribbons”, Network Models in Quantum Physics, July 21-25, 2008, Jacobs University Bremen, ドイツ、ブレーメン.
- 33 K. Wakabayashi, “Electronic transport properties and perfectly conducting channel of disordered graphene nanoribbons”, Aspen Center for Physics, 2008年6月19日. 米国コロラド州アスペン.
- 34 若林克法, 高根美武, Manfred Sigrist, 「ナノグラフェンリボンのエッジ状態による電子輸送現象」, 日本物理学会 (2008年3月24日, 近畿大学)
- 35 K. Wakabayashi (Hiroshima Univ. and PRESTO/JST), Electronic Properties of Nano-Graphene Ribbons, Seminar at Klaus Ensslin Group in ETH-Zurich. 2007年10月23日. スイス、チューリッヒ市.
- 36 若林克法 (広大院先端物質), 領域4シンポジウム「グラファイトからグラフェンへ」, 日本物理学会 (北海道大学), 2007年9月23日. 札幌市.
- 37 K. Wakabayashi, “Peculiar Electronic Transport and Magnetic Properties of

- Nano-Graphene Ribbons”, International Workshop “Advances in Physics and Applications of Low-Dimensional Systems”, International Center for Condensed Matter Physics, 2007年7月12日. ブラジル、ブラジリア.
- 38 K. Wakabayashi, “Unconventional Electronic Transport Properties of Disordered Nano-Graphenes”, 14th International Symposium on Intercalation Compounds, 2007年6月23日. 韓国ソウル市.
- 39 K. Wakabayashi (Hiroshima Univ.), Unconventional Electronic Transport Properties of Nano-Graphenes: Role of Edges and Impurities, 大阪大学基礎工学研究科グラフェンに関するミニワークショップ, 2007年5月9日. 大阪府豊中市.

〔図書〕 (計1件)

- ① Katsunori Wakabayashi, Low-Energy Physical Properties of Edge States in Nano-Carbon Systems, page 103-149, Physics of Zero- and One-Dimensional Nanoscopic Systems (Springer Series in Solid-State Sciences), Edited by S.N. Karmakar et.al., ISBN: 978-3-540-72631-9. 2007年9月発行. 総ページ数, 334 ページ. 出版社: Springer

6. 研究組織

(1) 研究代表者

若林 克法 (WAKABAYASHI KATSUNORI)
独立行政法人物質・材料研究機構
国際ナノアーキテクトニクス研究拠点
研究者番号: 50325156

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし