

研究種目：若手研究（スタートアップ）

研究期間：2008～2009

課題番号：20840011

研究課題名（和文） グラフェンにおけるナノエレクトロニクスとスピントロニクス

研究課題名（英文） Nanoelectronics and Spintronics on Graphene

研究代表者

江澤 雅彦 (Ezawa Motohiko)

東京大学大学院工学系研究科 助教

研究者番号：10504805

研究成果の概要（和文）：グラフェン及びグラフェン派生物質に付随する物理現象は、現在の物性物理で最も注目を集めている物の一つである。特に、グラフェンを一次元状に切り出したグラフェン・ナノリボンに関しては多くの研究がなされている。同様に重要な物質として、グラフェン・ナノディスクがある。これは閉じた境界を持つグラフェン派生物である。このナノディスクという新しい物理系の豊かな電磁的性質を明らかにし、バンド構造などの基礎的物性から、スピントロニクスなどの応用まで論じた。

研究成果の概要（英文）：The study of graphene and graphene-related materials is one of the most attractive areas of condensed-matter physics. Many studies have been done on graphene nanoribbons, which are one-dimensional derivatives of graphene. The other important graphene derivatives are graphene nanodisks, which have closed edges. I have explored rich physics of the electronic and magnetic properties of nanodisks starting from basic properties such as the band structure to applications to spintronics.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,110,000	333,000	1,443,000
2009年度	1,180,000	354,000	1,534,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,290,000	687,000	2,977,000

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：物性 I

キーワード：グラフェン・半導体・ナノエレクトロニクス・スピントロニクス・量子ドット

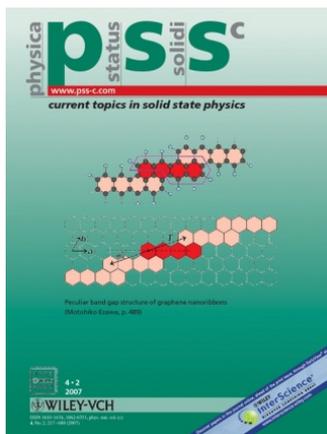
## 1. 研究開始当初の背景

国内・国外の研究動向及び位置づけを述べる。2004年にマンチェスター大学の A.K.Geim [Science, 306, 666 (2004)] とコロロニア大学の P.Kim [Nature, 438, 201

(2005)] のグループにより、新しいタイプの量子ホール効果がグラフェンで発見された。続いて、これに関する多くの理論的研究が発表されていた。特に、安藤恒也東工大教授 [J.Phys.Soc.Jpn., 74, 777 (2005)] やテキサス大学の MacDonald [Phys.Rev.Lett. 96,

256602 (2006)]のグループの仕事がよく知られていた。申請者はこの現象をディラック電子特有の超対称に基づいて解析し、日本物理学会誌他幾つかの国際的学術誌に発表していた。この量子ホール効果の発見によりグラフェン上の物理現象の面白さが世界的に認知された。また、グラフェンから細い線状に切り出したナノリボンというグラフェン派生物の電気的性質を研究していた。この研究に関する先駆的工作は1996年に藤田光孝筑波大教授のグループ[ J.Phys.Soc.Jpn., 65, 1920 (1996)]によってなされていたが、グラフェンの実験が行われて以降、この研究を進展させたのは申請者の論文が初めてである。アメリカ物理学会誌に発表したが、この論文は国際的に非常に高く評価されている。関連するナノリボンに関する仕事は、図1に示すように国際学術誌の表紙を飾っていた。なお、申請者の研究成果を確認する解析計算がインディアナ大学の Fertig 等[Phys.Rev.B 73, 235411 (2006)]によって、第一原理計算がカリフォルニア大学の Louie 等[Phys.Rev.Lett., 97, 216803 (2006)]によりなされていた。現在も、ナノリボンの研究は世界中で活発に行われている。

申請者は更にナノディスクというグラフェン派生物をアメリカ物理学会誌に提唱していた。第一原理計算はライス大学の Scuseria[Phys.Rev.B 77, 035411 (2008)]によってなされたが、これは申請者の研究結果を再現している。世界的にみてグラフェンの研究者が急速に増えつつあり、グラフェン・ブームともいえる状況だった。この中で申請者は最初期から参入して業績を上げてきていた。



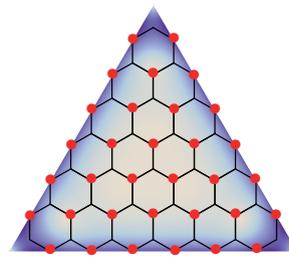
(図1)

## 2. 研究の目的

グラフェンに関する理論的・実験的研究が爆発的な増加を見せている。事実、現在の半導体物理の主要トピックとなっている。グラフェンは純理論的に美しい構造を持つだけ

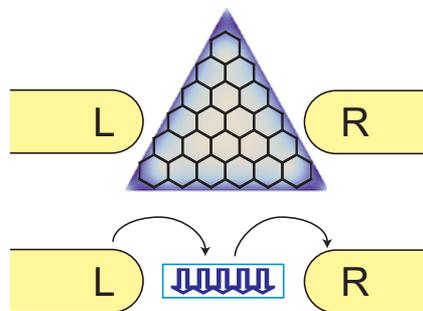
でなく、将来的にシリコンに代わる次世代の半導体ナノデバイスの有力な基本物質として応用の期待がなされている。

本研究の目的は、グラフェンを用いたナノエレクトロニクスとスピントロニクスの実現に必要な基礎理論を、物理、工学、化学などの見地から構築することにある。グラフェンの電磁的性質について基礎理論からデバイスへの応用を視野に入れながら研究を遂行する。そのために必要なグラフェン派生物(ナノディスク、ナノリボン等々)の電磁気的性質を解析計算および数値計算を用いて明らかにする。グラフェン・ナノリボンはグラフェンの量子細線、グラフェン・ナノディスクはグラフェンの量子ドットと考えることが出来る。将来的にはグラフェンを切り出すことで電気回路を設計出来る所まで持って行きたいので、そのための予備的考察を行う。特にスイッチ・論理演算回路などをグラフェンで実現する機構の提案を行う。特に、三角グラフェン・ナノディスク(図2)の物性と応用を考察する。



(図2)

まず、はじめに、グラフェン・ナノディスクのゼロエネルギー状態の電子間相互作用効果を調べる。特に比熱などの熱力学的性質を調べる。ナノディスクのサイズによって比熱等の物理量がどのように変化するかを計算する。次にナノディスクにリードをつけた系を量子ドットと見なすことにより、クーロン・ブロッケード・近藤効果について研究する(図3参照)。通常の量子ドットとどのような違いがあるのか明らかにする。



(図3)

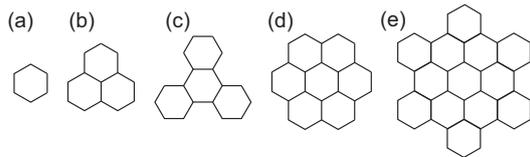
また、グラフェン・ナノディスクのナノエレクトロニクスとスピントロニクスへの応用の可能性を提案する。特に、スピンフィルター、スピンバルブやスピントランジスタがナノディスクを用いて構成できないか検討する。また新しいスピントロニック・デバイスを提案する。

### 3. 研究の方法

1) グラフェン・ナノディスクの零エネルギー状態における相互作用は直接積分と交換積分を評価することにより導出する。基底状態の磁化は Lieb の定理を用いて決定する。グラフェン・ナノディスクのクーロン・ブロックードは量子ドットのクーロン・ブロックードを解析する際に用いられる Green 関数の運動方程式法を多重縮退した系に拡張した方法を用いる。

2) 熱力学的性質を調べる際には経路積分を用いて有効作用を計算することにより、分配関数を決定する。Heisenberg-Hubbard 模型をトランスファーに関して Schrieffer-Wolff 変換を用いて二次摂動を行うことにより多スピン近藤ハミルトニアンを導出する。零エネルギー状態に対するトランスファーエネルギーやサイトエネルギーの乱雑さの影響を調べる際には厳密対角化を用いる。

3) ナノディスクがスピン・フィルターになることを示す際には、量子 Master 方程式を用いる。その他のスピントロニック・デバイスの動作特性を計算する際には Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式を用いて解析する。

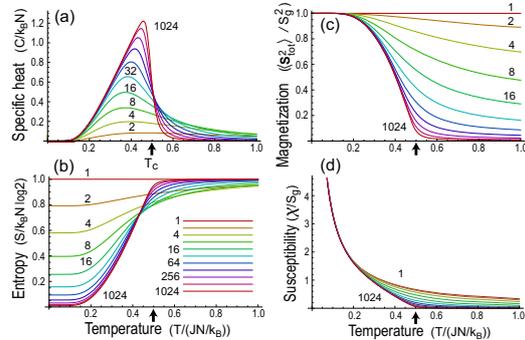


(図 4)

### 4. 研究成果

1) 申請者はグラフェンを切り出したグラフェン・ナノディスクという新しい物質群を提唱した (図 4 参照)。この中でも特に、ジグザグエッジを持つ三角グラフェン・ナノディスクに  $N$  重縮退した零エネルギー状態が存在する事を発見している。この零エネルギー状態に射影された相互作用を導出した。この系では交換相互作用がクーロン相互作用に匹敵する大きさであることを発見した。グラフェンナノディスクにリードをつけることにより、クーロン・ブロックード現象をグリ

ーン関数の運動方程式を用いて解析した。相互作用のないときはナノディスクの零エネルギー状態には  $SU(N)$  対称性が存在する。しかし零エネルギー状態に射影された相互作用は  $SU(N)$  対象性を持たない。この為に特異なクーロンブロックードが発生することを発見した。

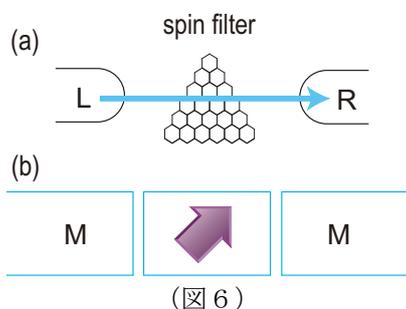


(図 5)

2) 次にグラフェン・ナノディスクの磁性を論じた。この系では交換相互作用がクーロン相互作用に匹敵する大きさであることを発見した。ナノディスクの基底状態はスピンの  $N/2$  の磁性を示す。交換相互作用は強いので、有限系であるにも関わらず、スピンは強磁性類似の性質 (擬強磁性) をもつ。この擬強磁性は 1 スピンと強磁性の中間の性質を持っている。この擬強磁性の熱力学的性質を調べた。温度の関数として、比熱に鋭いピークが現れ、擬強磁性相と擬常磁性相の擬相転移が存在する事を発見した (図 5 参照)。ナノディスクにリードをつけた系は Heisenberg-Hubbard 模型で記述されることを示した。トランスファーに関して Schrieffer-Wolff 変換を用いて二次摂動を行うことにより多スピン近藤ハミルトニアンを導出した。またナノディスクの零エネルギー状態に対するトランスファーエネルギーやサイトエネルギーの乱雑さの影響を調べた。その結果零エネルギー状態はこの種の摂動に対してロバストであることを発見した。格子欠陥が存在する場合について零エネルギー状態の数はどう変化するかも Lieb の定理と数値計算を用いることで解析した。格子欠陥の零エネルギー状態数に与える公式を提唱した。

3) またグラフェン・ナノディスクが擬強磁性である性質を利用したスピントロニクスへの応用の可能性についても数々の提案を行った。ナノディスクスピンは小さなサイズでもスピン緩和時間は長く情報を保持しやすく、かつ外場や電流で容易に制御できるという良い性質を持っている。グラフェンナノディスクの基底状態は擬強磁性である為、グラフェンナノディスクにリードを接合し、電流

を流すとナノディスクのスピンの同じ向きの電子のみが通過できる。この結果グラフェンナノディスクはスピフィルターとして働く事が確認出来た (図6参照)。またグラフェンナノディスクをスピンメモリーとして使えることも議論した。グラフェンナノディスクに不完全分極したスピン流を入力すると完全分極したスピン流が出力される。この性質を用いてスピアンプリファイアを提案した。これはノイズで分極が不完全になったスピン流をまた完全に戻すための装置として有力である。更にナノディスク2つを直列に並べることにより、スピンバルブ・スピントランジスターを作成できることも提案した。2つの違うサイズのナノディスクを接続することでスピンの回転速度の違いを用いてスピンドायオードを作成できることも提案した。またスピンスイッチも提案した。



## 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 5件)

1) M. Ezawa, Coulomb Blockade in Graphene Nanodisks,  
Physical Review B 77, 155411 (1-9) (2008).

2) M. Ezawa, Spin filter, spin amplifier and spin diode in graphene nanodisk,  
European Physical Journal B 67, 543-549 (2009)

3) M. Ezawa, Quasi-Phase Transition and Many-Spin Kondo Effects in Graphene Nanodisk,  
Phys. Rev. B 79, 241407(R) (2009)

4) M. Ezawa, Quasi-ferromagnet spintronics in the graphene nanodisc-lead system,  
New Journal of Physics 11, 095005 (2009).

5) M. Ezawa, Generation and Manipulation of Spin Current in Graphene Nanodisks,  
Physica E 42, 703 (2010)

[学会発表] (計 3件)

1) M. Ezawa, Generation and Manipulation of Spin Current in Graphene Nanodisks,  
18th International Conference on Electronic Properties of Two-dimensional Systems and 14th Modulated Semiconductor Structures, Kobe, July 19-24 2009

2) M. Ezawa, Quasiferromagnetism and Spintronics in Graphene Nanodisks,  
International Symposium on Quantum Nanostructures and Spin-related Phenomena,  
March 9-11, 2010 Komaba Campus, University of Tokyo, Komaba, Tokyo, Japan

3) M. Ezawa, Electronic and Magnetic Properties of Graphene Nanodisks: Application to Spintronic Devices,  
14回 半導体スピン工学の基礎と応用 PASPS - 14(半導体スピントロニクス)の展開  
2009年12月21日(月) - 22日(火)  
慶應義塾大学日吉キャンパス「来往舎」

## 6. 研究組織

(1) 研究代表者

江澤 雅彦 (Motohiko Ezawa)  
東京大学大学院工学系研究科 助教  
研究者番号: 10504805