

学位申請論文公開講演会

日 時：2009年1月20日 17:00～

申請者：熊崎 秀樹

場 所：理学館506講義室

題 目：Vacancy-induced Magnetism and Spin-Polarized Current in Graphene
(グラフェン上の空孔が引き起こす磁性とスピン偏極電流)

(主論文の要旨)

グラフェンとは単層のグラファイトのことであり、フラーレンやカーボンナノチューブなどの炭素系同素体の基礎となる物質である。鉄の数百倍という強固さ・既存の半導体を上回る高移動度のキャリア・比較的安価で大量生産できる可能性などの性質から次世代のデバイスの素材として大きな注目を集めている。

本研究の目的はグラフェン上の空孔が系の電子状態、特に磁氣的性質に与える効果を明らかにすることである。具体的には強束縛模型でフェルミ準位付近の電子状態を近似して、空孔は局所的な非常に強い散乱ポテンシャルとして導入する。また電子間のクーロン斥力 U もオンサイトの効果のみを考慮し、平均場近似によって取り扱う。手法としては解析的な計算に加えて、有限サイズの系の対角化を用いる。

最初に空孔が作り出す局在状態について調べる。一格子点を除いてできる単空孔の周囲には強く局在する状態が生じる。この状態はちょうどフェルミ準位上に出現するため、グラフェンの様々な物性において顕著な効果を示すことが予測される。さらに、複数の空孔を導入した場合には、空孔の副格子配置によって大きな違いが生じることを明らかにする。また、空孔の効果とグラフェン端の構造による効果の関連性を見出すことが出来た。

次に空孔が作る磁気モーメントについて調べる。クーロン斥力を導入すると単空孔の周囲には局在状態に起因したフェリ磁性的な磁気モーメントが出現する。更にいくつかのパターンの空孔について計算した結果、磁気モーメントの形成について次の2つのルールが分かった。(1) この磁気モーメントは除かれた各副格子に属する格子点の数が異なると必ず出現する。これは Lieb の定理とも一致している。(2) 局所的にジグザグ型の構造を作ることによって、より強い磁気モーメントを出現させることができる。

最後にこの空孔による磁気モーメントがもたらすスピン偏極した電流が印加される可能性について議論する。再帰グリーン関数法とランダウアー公式を用いてスピン依存したコンダクタンスを計算した結果、系中の磁気モーメントを透過する電流はスピン偏極することが分かった。更に特定のチャンネルを流れる電流を空孔によって遮断することによって、効果的にスピン偏極した電流を印加する事が可能になることを明らかにする。