層間相互作用が多層グラフェンの電子輸送特性に及ぼす影響

Effect of inter-layer coupling on electron transport in multilayer graphene

阪大工　○橋本 風渡，　森　伸也

Osaka Univ.　○Futo Hashimoto and Nobuya Mori

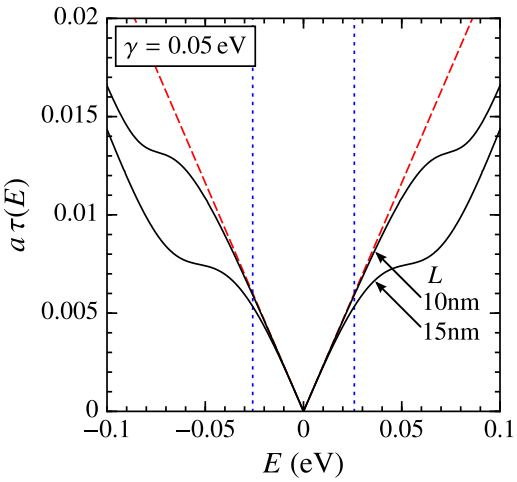
E-mail: {hashimoto, mori}@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

近年，乱層構造を持つ多層グラフェンが実現され，乱層構造の存在により輸送特性が向上することが報告されている [1]．しかし，その詳しい機構は明らかにされておらず，多層構造において，層間相互作用が，電子状態や輸送特性に与える影響を調べることは興味深い．本研究では，強束縛近似 (TB) 法および非平衡グリーン関数 (NEGF) 法を用いて，グラフェンを積層した系の電子輸送特性を解析した．そして，層間相互作用が電子輸送特性に及ぼす影響について調べた．

x 方向の長さが L，y 方向には十分大きい，3 層の AB 積層多層グラフェンを考察した（図 2 の挿入図）．最上層の左右および最下層の左右に，半無限の単層グラフェン電極を接続し，p_z 軌道のみを考慮した最近接 TB 法と NEGF 法とを用いて，右上電極から左上電極への弾道積分透過関数 $\tau(E)$ を計算した．その際，層内の原子間の移動積分を 3.16 eV，隣接する層間の移動積分を γ とし，γ の値を変化させ，層間相互作用が多層グラフェンの輸送特性に及ぼす影響を調べた．なお，グラファイトの場合，層間移動積分の値はおよそ $\gamma = 0.39$ eV である．

$L = 10$ nm，15 nm の系における $\tau(E)$ のエネルギー依存性を図 1 に示す（$\gamma = 0.05$ eV とした）．層間相互作用が存在しないとき，$\tau(E)$ は単層グラフェンにおける積分透過関数と等しくなり，$E = 0$ 付近では線形に変化する（図 1 の赤破線）．有限の層間相互作用が存在すると，下電極への透過が生じ，$\tau(E)$ の値が小さくなる．しかし，$E = 0$ 付近における $\tau(E)$ は，線形性を保っており，層間相互作用の影響をほとんど受けないことが分かった．図より，層間相互作用の影響を受けないエネルギー範囲は L に依存することが分かる．その様子を詳しく調べるため，室温の熱エネルギー（図 1 の青点線）における $\tau(E)$ の値が，単層グラフェンでの値の 95% となる γ の値を臨界値 γ_c と定義し，γ_c の L 依存性を調べた．結果を図 2 に示す（赤矢印はグラファイトの層間相互作用を示す）．層間相互作用が十分小さい場合，線形領域を保ったまま活性層を長くできることが分かる．

[1] R. Negishi *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **51**, 06FD03 (2012).



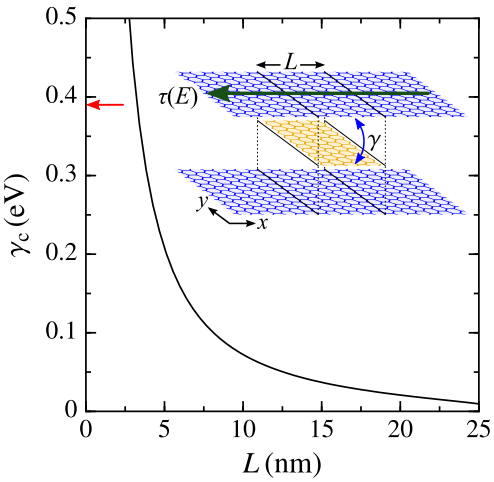


Fig. 1 [left]: Integrated transmission function $\tau(E)$ of $L = 10$ and 15 nm for $\gamma = 0.05$ eV (a is the lattice constant). Red dashed lines show $\tau(E)$ for $\gamma = 0$. Blue dotted line represents the thermal energy at 300 K.
Fig. 2 [right]: Critical inter-layer coupling strength γ_c versus L. Inset shows the device model.

© 2017年 応用物理学会