

グラフェン／金属電極複合構造の電気伝導特性

Electronic transport properties of hybrid structures of graphene/metal electrodes

○實宝 秀幸^{1,2}、岡田 晋²、大淵 真理¹ (1. 富士通研、2. 筑波大)

○Hideyuki Jippo^{1,2}, Susumu Okada², Mari Ohfuchi¹ (1. Fujitsu Labs. Ltd., 2. Univ. of Tsukuba)

E-mail: jippo.hideyuki@jp.fujitsu.com

グラフェンデバイス実現における深刻な問題の一つが、金属電極接合における高い接触抵抗である。接触抵抗は、金属の種類に依存してその値が変化することも報告されている。本研究では、Au 電極間及び Ti 電極間に架橋されたグラフェンチャンネルについて、第一原理計算による電気伝導特性予測を行い、その金属種依存性を議論する。

計算に用いた構造モデルを図 1 に示す。2 つの Au 電極間にチャンネル長 L_{ch} が約 10nm のアームチェア型グラフェンナノリボン(AGNR)が架橋されている。グラフェンと金属表面の安定な層間距離は、Au: 0.37nm、Ti: 0.20nm である。これは、Au ではグラフェンとの間に弱い π -s 軌道相互作用が、Ti では強い π -d 軌道相互作用があることを示している。コンタクト長は 0.86nm で固定した。 $V_b =$

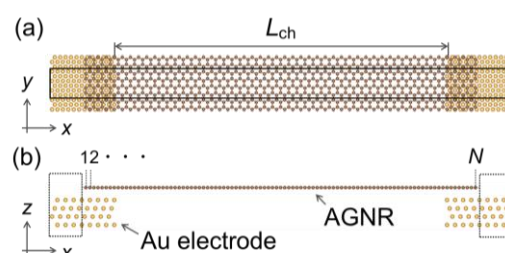


図 1. 構造モデルを(a)上と(b)横から見た図。リボン幅 $N = 97$ の AGNR が Au 電極間を架橋している。実線、点線で囲った領域は、それぞれ構造モデルとリードのユニットセル。

$(\mu_L - \mu_R)/e = 0.1$ V のバイアス印加時の電流密度 I をチャンネル長 L_{ch} を横軸として図 2 に示す。非平衡グリーン関数法に基づいて計算した。ここで、 μ_L, μ_R はそれぞれ左右の電極リードの化学ポテンシャルである。Ti 電極における電流密度は、 $L_{ch} \sim 10$ nm 付近では L_{ch} や N によらず Au 電極の約 10 倍の値を示すことが分かった。図 3(a)に示すように、Au 電極では、透過率ピークが孤立 AGNR のバンド構造を反映し、更に π 状態の対称性によって交互にピークが現れる。一方、Ti 電極では、図 3(b)に示すように、AGNR のバンドの波数 k_y とエネルギー固有値 E の周辺の広い範囲で透過する。これは、強い π -d カップリングのために、グラフェンの電子状態が大きく変調されるためである。このように、今回我々は、グラフェンと金属電極間の電気伝導特性は両者の軌道混成に依存して決定されることを見出した。

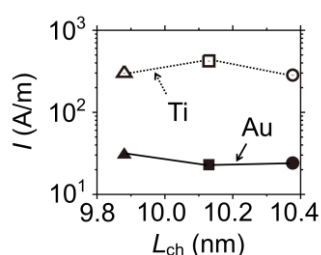


図 2. バイアス電圧 0.1 V における電流密度。左から順に $N = 95, 97, 99$ の AGNR の結果。

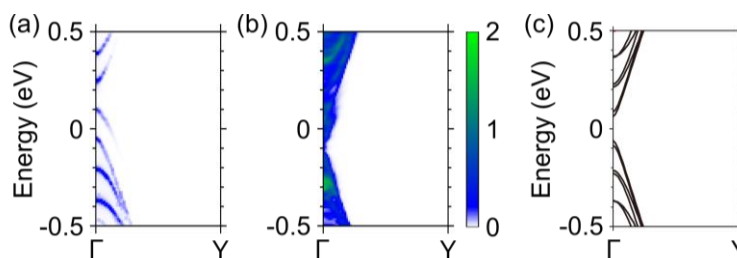


図 3. (a)Au 電極、(b)Ti 電極間に架橋された $N = 97$ の AGNR における透過率スペクトル $T(k_y, E)$ 。 μ_L を 0eV とした。(c) $N = 97$ の孤立 AGNR のバンド構造。