

## 研究内容、方法、期待される成果

グラフェンのナノ構造体の構造は 2 つの独立な幾何学構造であるジグザグ端とアームチェア端により記述され、電子構造は大きな幾何学構造依存性を有する。ジグザグ端では、端に局在したエッジ状態が形成され、非結合性  $\pi$  電子状態として、その高い状態密度とスピン分極状態は、ジグザグ端型グラフェンナノ構造の電子的、磁氣的、化学的活性の起源となる。本研究では、このようなグラフェンナノ構造の電子的・磁氣的活性に興味の焦点を当て、ジグザグ端でのエッジ状態形成による特異な電子・磁気現象の発現を課題として以下の研究を推進する。本研究は、グラフェンナノ構造の磁性の包括的な理解に重要な貢献をすることが期待される。

### 1. ナノグラフェンの熱処理による端の電子状態変化

活性炭素繊維は大きさ 2-3 nm のナノグラフェンシートが 3 次元的無秩序ネットワークを組んだ構造を有する多孔性炭素である。我々は今まで活性炭素繊維をナノグラフェンのモデル物質として、エッジ状態の電子構造、磁気構造の解明を行ってきた。この中で、ナノグラフェンのジグザグ端に局在スピンを有するエッジ状態が存在することを明らかにし、ナノグラフェンのスピンのフェリ磁性構造を有し、超常磁性的振舞をすることを解明した。また、真空加熱処理により、1300°C 以上で、グラファイト化の進行により、ナノグラフェンが互いに融合し、大きなグラフェンへと成長し、エッジ状態が消失して行くことを明らかにするとともに、1300°C の融合開始温度付近では、特異なスピングラス状態が形成されることを見いだしてきた。このような研究の中で、熱処理による融合過程において、ナノグラフェン端でどのような化学的変化とそれに伴う電子・磁気構造の変化が進行しているのかについては、未解明の問題として、未だに十分な理解がなされていない。本研究においては、ナノグラフェンの端の官能基の離脱とそれに伴う端構造の変化、 $\sigma$  ダングリングボンド状態の形成、非結合  $\pi$  電子起源のエッジ状態の変化の詳細とナノグラフェンの融合への発展を X 線吸収分光(NEXAFS)測定、磁性測定により解明する。

### 2. ナノダイヤモンド表面上のグラフェンナノ構造の界面効果と特異な磁気現象の発現

表面を水素化したナノダイヤモンドを真空加熱して行くと、次第に水素が表面から離脱し、表面欠陥が形成される。800°C 以上では、水素の集団的離脱が起こり、生成する欠陥がナノグラフェン構造へと成長し、その端には局在スピンを有するエッジ状態が生じる。今までの我々の予備実験からは、その局在スピンのフェリ磁性構造を示し、極めて遅い特異な磁気緩和(数 10 min)を起こすことを見いだされている。孤立スピンでは、長時間緩和は説明できないことから、フェリ磁性構造でのスピン集団の磁気緩和現象であることが推定され、また、磁気緩和現象には磁気異方性の存在が本質的に必要である。エッジ状態スピンの量子特性、界面効果を踏まえて、磁気測定、NEXAFS 測定、理論構築からこの slow dynamics の解明を行う。