

強制振動子法を用いたサブ2次元ナノカーボンの エッジフォノン解析

Numerical Study on Phonon Properties of Edge of Sub 2-dimensional Nano-carbon System by Force Vibrational Method

福井大院工, °大八木 晋, Md. Sherajul Islam, 南部卓也, 橋本 明弘

Department of Electrical & Electronics Engineering, University of Fukui,

°Shin Oyagi, Md. Sherajul Islam, Takuya Nanbu, Akihiro Hashimoto

サブ2次元ナノカーボン (Sub-2 Dimensional Nano-carbon: S2DN) は SiC 基板の(0001)面上 $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ バッファ層と(1102)面上グラフェンが周期的に交互に並んだ構造を有する。S2DN 系は、グラフェンナノリボンが持つようなエッジが存在せず、カーボンナノチューブのようにシームレスな系であるとともに、バッファ層・グラフェン層と周期的に広がりを持つため、ナノチューブのような擬1次元的な系でもない、新しい系であると考えられる[1]。この S2DN 系は、カーボンナノチューブやグラフェンナノリボンが持つ、高密度配列・エッジ選択制御が困難であるという欠点を克服することが期待されており、グラフェンを用いた次世代の電子デバイス材料系としての可能性を秘めている。しかしながら、このような新しいナノ構造である S2DN 系のフォノン物性の解析は行われていない。本研究では、不規則系の格子振動解析に対して有用な強制振動子法[2]を用いて、S2DN 系の折れ曲がり効果によるフォノン物性の変化を調べた。

原子数約 15000 個を用いて、図1のような S2DN 系の一周期分の2次元近似モデルを作製し、角度が 30deg における S2DN 系のフォノン状態密度を、強制振動子法を用いて計算した。

図2は S2DN(30deg) と Graphene における、in-plane モードのフォノン状態密度の差を求めたものである。Graphene に比べ、S2DN 系の in-plane モードが多く含まれていることが分かる。また、0 から 350cm^{-1} の範囲において、グラフェンナノリボンやカーボンナノチューブが持つ特有の振動モードと類似するような振動パターンも観測している。

以上のことから、S2DN 系において、折れ曲がったことによって特有のモードが発生する。観測されたグラフェンナノリボンやカーボンナノチューブと類似するような振動モードの詳細については当日議論する。

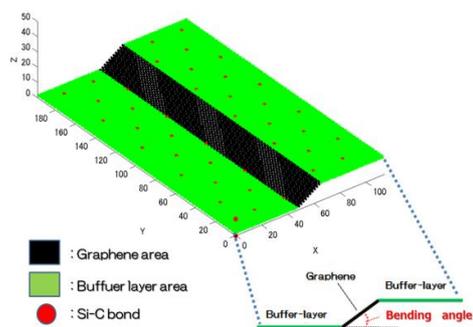


図1. S2DN 系の二次元近似モデル

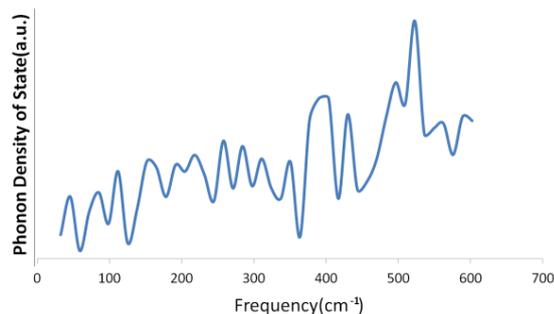


図2: S2DN 系(0deg,30deg)と Graphene の in-plane モードのフォノン状態密度の差分

[1] 田中 悟 et al., 第76回応用物理学会秋季学術講演会 14p-2T-18 (2015).

[2] M. L. Williams, H. J. Maris, *Phys. Rev. B* **31**, 4508 (1985).