

グラフェンの歪み/無歪み遷移領域におけるガウス波束の伝播に関する
量子ダイナミクスシミュレーション

Quantum dynamics simulation of the propagation of the Gaussian wave
packet in the area of graphene / strained graphene

神戸大院工 ○迫田翔太郎, 笹岡健二, 小川真人, 相馬聡文

○Shotaro Sakoda, Kenji Sasaoka, Matsuto Ogawa, and Satofumi Souma

Department of Electrical and Electronic Engineering, Faculty of Engineering, Kobe University

E-mail: 158t234t@stu.kobe-u.ac.jp

従来の半導体素子の微細化に伴って深刻化するリーク電流の増大、またそれによる消費電力の増大が素子の更なる微細化、高集積化を妨げる大きな要因となっている。そこで、シリコンに代わる新素材としてグラフェンやシリセンのような二次元原子膜材料が注目されている。それらをチャネル材料として用い、ゲート電界効果によるチャネル電荷の制御性を向上させる事がその打開策として期待される。

グラフェンはギャップレスで電流をオフに出来ない事が問題となるため、これまで原子膜をナノリボン化する事や層間効果の利用が検討されてきた。また、面内歪みを加えることでバンドギャップを開かせる事も理論上可能であるが、これには20%程度以上の大きな歪みが必要であり実験的には困難である。一方、最近の研究において、グラフェンに局所的な歪みを加えてやることで、バンドギャップを開かせることなく、歪み/無歪み領域の界面における擬似磁場効果によって電気伝導を変化させる可能性が示唆されている[1]。この場合10%以下の歪みで電気伝導に影響が出るため、デバイスとして応用しやすいと考えられる。

本研究では、局所歪みが印加されたグラフェンの歪み/無歪み遷移領域における波束の伝播が、擬似磁場効果の観点からどのように理解されるかの解明を目的とした解析を行っている。空間について2次元差分化した場合での入射ガウス波束の時間発展計算を行い、歪み領域での電子の確率密度を示し、不均一な歪みやポテンシャルを印加し検証した。また、グラフェンの格子欠陥が波束の透過に与える影響についての考察を行った。更に、波束の群速度の式より求めた歪み遷移領域における波束の軌跡と擬似磁場効果の観点から求めた波束の軌跡の比較検証を行った。本講演では、これらの計算結果と考察を報告する。

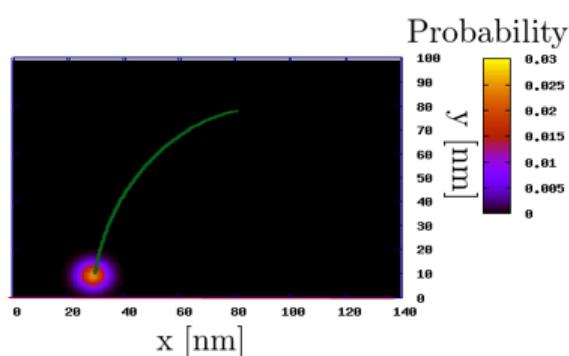


Fig.1 歪み遷移領域が 0-100[nm]の場合
の時間発展計算結果

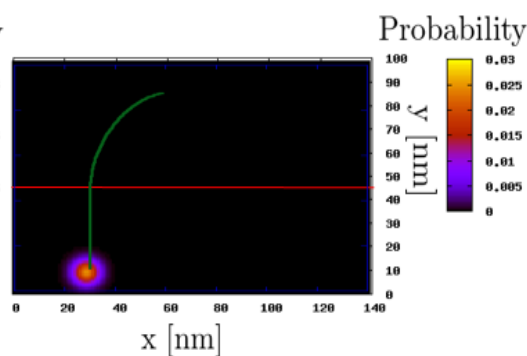


Fig.2 歪み遷移領域が 45-100[nm]の場合の
時間発展計算結果

[1] S. Souma, M. Ueyama, and M. Ogawa, Appl. Phys. Lett. **104**, 213505 (2014).