

強制振動子法を用いたサブ 2 次元ナノカーボンの 格子振動解析 (II)

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

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

Graduate School of Electrical & Electronics Engineering, University of Fukui,

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

ステップバンチングを利用した SiC 昇華法によるサブ 2 次元ナノカーボン (Sub-2 Dimensional Nano-carbon:S2DN) 系は、(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しており、従来のグラフェンナノリボンとは異なる構造を有している[1]。図 1 は S2DN 系をモデル化した図である。前回、我々は図 1 に示したようなモデルを用いて、S2DN 系の格子振動解析を行った。その結果、屈曲角度が 15° 以下の場合ではフォノンがバッファ層に局在し、 15° を超える場合はグラフェン領域にフォノンが局在することを報告した。今回は、S2DN 系におけるコヒーレントフォノンについて強制振動子法[2]を用いた解析を行ったので報告する。

シミュレーションでは、屈曲角度として 0° と 30° の S2DN 系に対して、グラフェン領域の一部分に対して、位相のそろった強制振動を 1 fs かけた。

図 2 に屈曲角度 0° 、 30° における RBLM(radial breathing like mode : 170cm^{-1})における S2DN 系の 300 fs 後のモードパターンを示す。屈曲角度 0° ではコヒーレントフォノンが伝播していく様子が分かる。しかし、屈曲角度 30° ではフォノンはバッファ層領域に漏れ出さずに、グラフェン領域においてのみフォノンが伝播している様子が分かる。

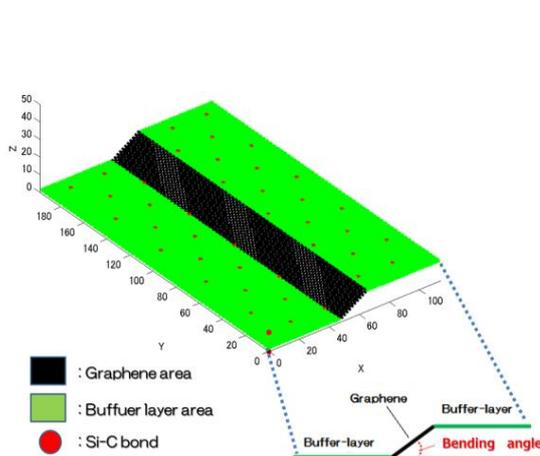


図 1. S2DN モデル

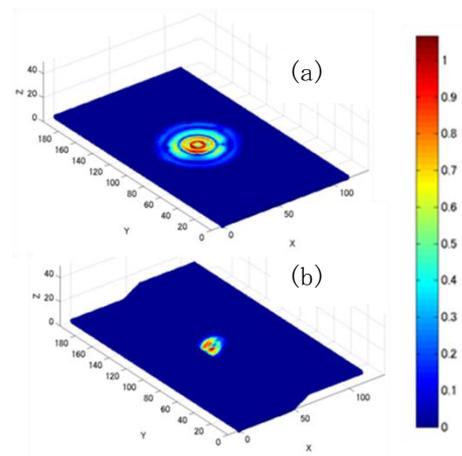


図 2. (a) 0° (b) 30° における RBLM(170cm^{-1}) でのコヒーレントフォノン

[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).