

弱く結合したジグザグ端ナノリボン列の電子状態解析

Electronic states of weakly coupled zigzag-edge nanoribbon arrays

阪大工 ○橋本 風渡, 森 伸也, 久保 理, 片山 光浩

Osaka Univ. ○F. Hashimoto, N. Mori, O. Kubo, and M. Katayama

E-mail: hashimoto@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

グラフェンやシリセンなどの六方格子2次元結晶を細いリボン状にすると、電子状態が大きく変調される。一方、近年、多数のナノリボンが周期的に並んだ構造が実験的に実現されている [1, 2]。実現されているナノリボン列において、隣接リボン間相互作用の有無は明らかにされてはいないが、弱く結合したナノリボン列の電子状態を調べることは興味深い。本研究では、隣同士結合したジグザグ端ナノリボンが、周期的に並んだ系の電子状態を計算した。

図1に示したように、 x 軸に沿ったナノリボン (灰色部分) が、 y 方向に周期的に並んだ横方向超格子構造を考えた。本研究では、 p_z 軌道のみを考慮した最近接強結合近似法を用いて電子状態を解析した。その際、ナノリボン内原子間の移動積分を t 、隣接するナノリボン間の移動積分を γ とした。 γ を 0 から t まで変化させることにより、孤立したナノリボン ($\gamma = 0$) から、バルク2次元結晶 ($\gamma = t$) まで連続的に系を変化させることができる。

図1に示した系におけるバンド構造を図2に示す。計算は、図1に示した、 $L_x \times L_y$ の矩形単位胞を用いて行なった。孤立したナノリボンの場合 ($\gamma = 0$)、端原子に局在した電子状態に起因するフラットなバンドが $E = 0$ に現れる (図2(a))。一方、バルク2次元結晶の場合 ($\gamma = t$)、折り返されたディラック点が、 $(k_x, k_y) = (\pm 2\pi/3L_x, 0)$ に現れる (図2(c))。これらの中間の弱く結合した系では ($0 < \gamma < t$)、ほぼフラットなバンドとディラック点とが同時に現れることを見いだした (図2(b))。ほぼフラットなバンドは、 $k_x = \pm\pi/L_x$ のとき、 $E = \pm\gamma$ に現れ、波動関数は端原子に局在した。ディラック点の波数 k_x は、 γ を t から 0 まで変化させると、バルク2次元結晶の値から、バンド端へと移動した。同時に、バルク2次元結晶の等方的なフェルミ速度に異方性が現れた。

[1] A. Kara *et al.*, Surf. Sci. Rep. **67**, 1 (2012). [2] P. De Padova *et al.*, Nano Lett. **12**, 5500 (2012).

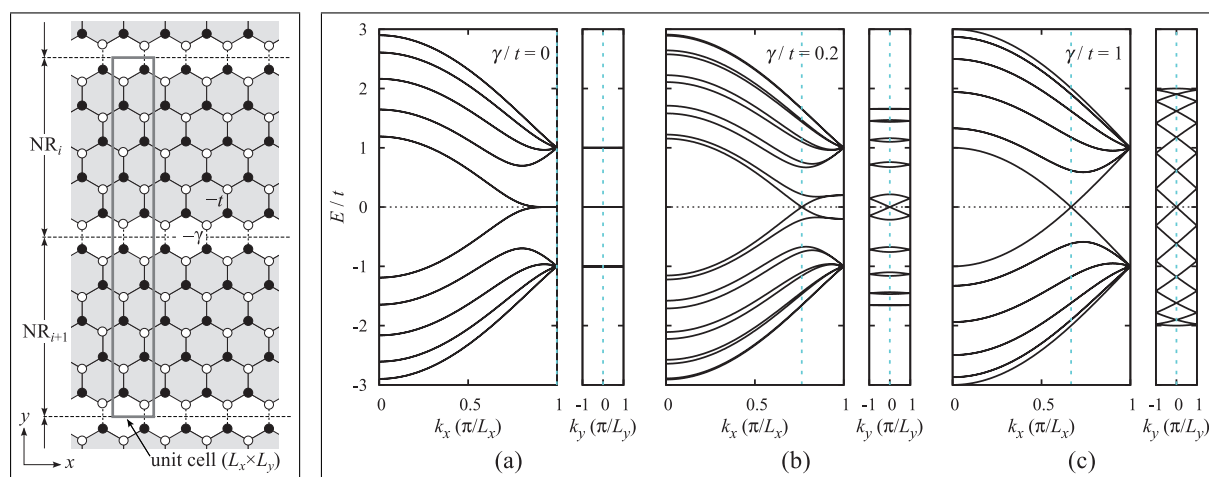


Fig. 1 [left]: Lateral-superlattice (LSL) structure. Zigzag-edge nanoribbons (NRs) along the x -axis are coupled to the neighboring NRs with interaction strengths γ , which can be different from the transfer integral of t between nearest-neighbor atoms in a NR. The thick gray rectangle defines the unit cell.

Fig. 2 [right]: E - k_x and E - k_y relations for the zigzag-edge NR LSL shown in Fig. 1 for (a) $\gamma = 0$, (b) $0.2t$, and (c) t . Vertical cyan lines pass through the same (k_x, k_y) for each γ/t .