

エチレン架橋構造をもつ二層グラフェンの第一原理計算による電子状態

Ab Initio Study of the Electronic States of Layered Graphene

with Ethylenic Linkage Structures

熊本大院先端科学 横井 裕之

Kumamoto Univ., Hiroyuki Yokoi

E-mail: yokoihr@kumamoto-u.ac.jp

グラフェンはエネルギーギャップを持たないために半導体素子としての応用には不利であるが、電気伝導性や熱伝導性、機械的強度といった多方面で優れた特性を持っているため、さまざまな分野への応用が期待されている物質である。電子状態についてもグラフェンをリボン状に整形したり、規則的な穴あき構造にしたりすることでエネルギーギャップが形成されることが理論的研究により示されてきた。また、空孔構造や水素原子付加構造による磁性の発現についても理論と実験の両面から調査されてきた。このように、六角格子構造にさまざまな変調構造を付加することにより、新たな機能をもったグラフェン基物質を創製できる可能性がある。本研究では、グラフェン層間を炭素 2 原子でつなげた新しい架橋構造の二層グラフェンの結晶構造を考案し、その電子状態を第一原理計算によって調査した。計算に用いたスーパーセルのサイズと形状は六角格子数で 6×6 の六方晶型とした。架橋部分の炭素原子はグラフェン基面の炭素原子 2 個と結合することとして、スーパーセルの中心部の六角格子を囲む 6 個の六角格子の外輪に位置する炭素原子と結合させて、1 スーパーセルあたり 1 ～ 6 本の架橋をもつ二層グラフェンを設計した (Fig. 1)。第一原理計算(VASP)により構造を最適化して電子状態を調査したところ、一部の架橋数については予備的であるが Table 1 に示すように架橋数によって違いが生じるという結果が得られた。特に、架橋数 6 の構造では 1 スーパーセルあたり $2\mu_B$ の磁気モーメントが発現することがわかった。スーパーセルの形状を正方晶型としても同様に磁気モーメントが発現するという結果が得られた。このような構造はテトラクロロエチレンなどを用いて作製できる可能性があるので、炭素だけで構成された磁性原子層物質として興味を持たれる。

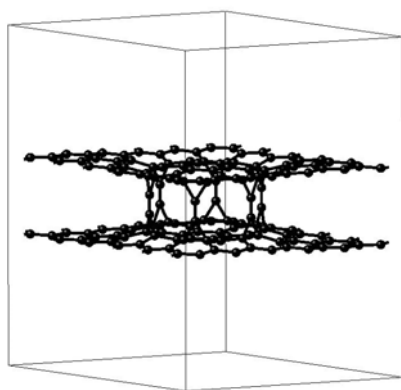


Figure 1. Optimized structure of double-layered graphene with a six-fold ethylenic linkage structure.

Table 1. The relationship between the linkage number and the electronic states in ethylenically linked double-layered graphene (preliminary).

Link. #	Electronic states
1	Narrow-gap (0.03 eV) semicond.
2	Narrow-gap (0.01 eV) semicond.
3	Indirect-gap (0.66 eV) semicond.
4	Indirect-gap (0.63 eV) semicond.
5	Direct-gap (0.49 eV) semicond.
6	Metal, Magnetic ($2\mu_B$)