サブ 2 次元ナノカーボン系における折れ曲がり効果が及ぼすエッジフォノンへの影響

Numerical Study on Phonon Properties of Edge of Sub 2-dimensional Nano-carbon System with Bending angle

福井大院工, °大八木 晋, Md. Sherajul Islam, 南部卓也, 橋本 明弘
Depertment 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 Dimensinal Nano-carbon: S2DN）系として、SiC 基板の(0001)面上 $6\sqrt{3}\times6\sqrt{3}$ バッファ層と$(1\bar{1}02)$面上グラフェンが周期的に交互に並んだ構造を考えることができる。S2DN 系は、グラフェンナノリボン(Graphene Nano Ribbon: GNR) が持つようなエッジが存在せずカーボンナノチューブ(Carbon Nano Tube: CNT)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、従来の擬 1 次元的とも異なる新しい系であると考えられる[1]。

このような S2DN 系は、CNT や GNR において問題となる高密度配列制御やエッジ構造制御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。また、この系の格子振動は、グラフェン領域とバッファ層領域の境界における折れ曲がりの効果により、Radial Breathing Mode(RBM)や Radial Breathing Like Mode(RBLM)などの、GNR や CNT のフォノン物性を併せ持つことが予想される。本研究では、S2DN 系における、RBM 及び RBLM について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]を用いて解析した。

原子数約 15000 個を用いて、図 1 の様なバッファ層領域の Si-C の結合点を無くした S2DN 系の一周期分の 2 次元近似モデルを作製した。このモデルについて GNR 幅・角度を変化させ、強制振動子法を用いて各々のフォノン物性の解析を行った。

図 2 は S2DN 系(GNR 幅 15Å,60deg)における、GNR 領域面に沿った x 軸の方向のモードパターンである。GNR エッジ付近において、拡がったり縮んだりしている振動をしていることが分かる。これは GNR の持つ固有の振動モードと類似している。

以上のことから、S2DN 系において、折れ曲がりが急峻になることによって GNR のフォノン物性を持つことが示唆された。CNT と類似するような振動モードについては当日議論する。

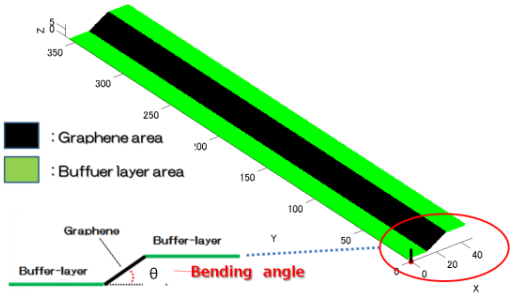

図 1. S2DN 系の二次元近似モデル

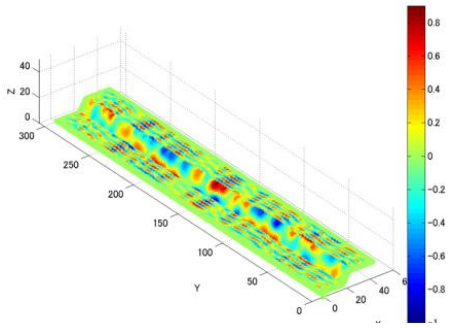

図 2： S2DN 系(GNR 幅 15Å,60deg)のにおける GNR 面に沿った x 軸のモードパターンである。

[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).