コルゲートしたグラフェンナノリボンのエネルギー論と電子状態

Energetics and electronic structure of corrugated graphene nanoribbons

筑波大学 [1]，高度情報科学研究機構 [2]，○(M1C)米山 和文 [1]，山中 綾香 [2]，岡田 晋 [1]
Univ. Tsukuba [1], Research Organization for Information Science and Technology. [2],
°Kazufumi Yoneyama[1], Ayaka Yamanaka[2], Susumu Okada[1]
E-mail: kyoneyama@comas.frsc.tsukuba.ac.jp

グラフェンの安定性や電子構造は境界条件やリップリングやコルゲーションなどの構造の変化に対して敏感であるとされている。これらの構造に対する変調は、デバイス構造中に埋め込まれたグラフェンナノ構造においては本質であり、その物性の解明は喫緊の課題である。グラフェンナノリボンの電子構造は、多くの理論研究によって明らかとなっているが、グラフェンナノ構造の端の化学修飾、端の不整、コルゲーションといった局所的な構造変調が、グラフェンナノ構造の物性に及ぼす影響はあまり明らかになっていないのが現状である。そこで、本研究では、密度汎関数理論に基づいた第一原理電子状態計算の手法を用いて、グラフェンナノリボンの物性が、リボン方向に形成されたコルゲーションにより、どのように変調されるかを解明する。

Fig. 1 にコルゲートしたグラフェンナノリボンの構造模型を示す。本研究では、コルゲーションのリボン形状に及ぼす影響を明らかにするため、水素終端された、アームチェア、カイラル、ジグザグの 3 種類の端形状を有する、幅 1.5 nm のグラフェンナノリボンに着目した。

Fig. 2 にジグザググラフェンナノリボンにおけるトータルエネルギーのコルゲーション角度依存性を示す。この結果から、コルゲーション角が約 9° まで、トータルエネルギーはほぼ一定の値を保ち、コルゲーションによるエネルギーの損失がないことが明らかになった。このことは、ジグザグリボンは、容易にコルゲーション構造を有することを示している。一方、アームチェアリボンではコルゲーション角の増加に伴い、速やかにエネルギーの増加見られることが明らかになった。また、電子構造についても、リボン端の形状に依存し、コルゲーションに対する応答が異なることが明らかになった。

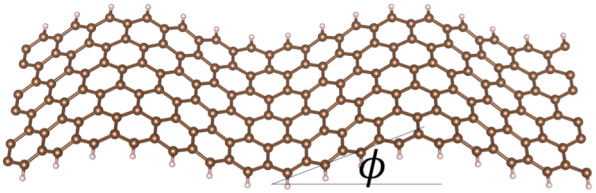

Fig. 1, A structural model of a corrugated graphene nanoribbon.

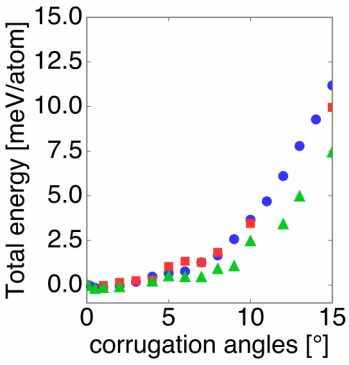

Fig. 2, Corrugation energies of graphene nanoribbons with armchair (circles), chiral (squares), and zigzag (triangles) edges as functions of corrugation angle.

© 2018年 応用物理学会