

ハニカム格子中での電子状態の制御

Control of Electronic States in Honeycomb Lattice

和歌山大学システム工学研究科 °中村 浩基, 篠塚 雄三

Wakayama Univ. °Koki Nakamura and Yuzo Shinozuka

E-mail s173043@center.wakayama-u.ac.jp

[背景] グラフェンの電子状態は K 点でゼロバンドギャップを持ち、電子の有効質量がゼロという特異な性質を持っており、高速デバイスへの応用が期待されている。もし、このグラフェン系物質の電子状態を自在に制御することができれば、さらに多様な物性を持つ材料を開発することが期待できる。本研究では、ハニカム格子の構成原子を二成分混晶にしたときの電子状態を計算し、その特性と制御可能性を調べる。

[方法] タイトバインディングモデルを採用し、波動関数の局在振幅を構成原子それぞれについて変動させる IQB(Interacting Quasi Band)理論[1]を使用した。今回はこのハニカム格子での擬ハミルトニアンは Fig1 のようになる。ここで $\varepsilon_A, \varepsilon_B$ は各原子のポテンシャル

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_A & 0 & C_A t_{AA} f(k) & C_B t_{AB} f(k) \\ 0 & \varepsilon_B & C_A t_{BA} f(k) & C_B t_{BB} f(k) \\ C_A t_{AA} f^*(k) & C_B t_{AB} f^*(k) & \varepsilon_A & 0 \\ C_A t_{BA} f^*(k) & C_B t_{BB} f^*(k) & 0 & \varepsilon_B \end{bmatrix}$$

エネルギー、 t_{nm} 原子間のトランスファーエネルギー、 $f(k)$ は構造因子、 C_A, C_B は各原子の占有率($C_A + C_B = 1$)を表す。

Fig1. ハニカム格子での擬ハミルトニアン

[結果] 擬ハミルトニアンの対角化から得られたバンド図を Fig2,3 に示す。

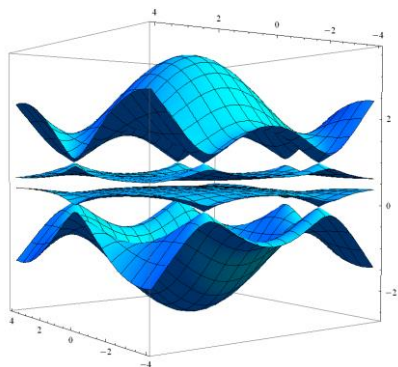


Fig2. 軌道エネルギー差 1.0eV での 3D バンド図

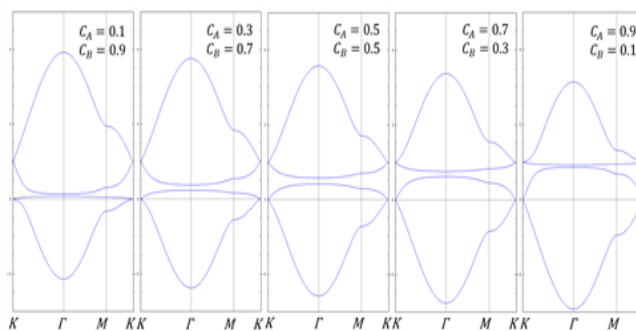


Fig3. 軌道エネルギー差 1.0eV でのバンド図

($C_A = 0.5, C_B = 0.5$)

混晶では、IQB モデル特有の疑似局在状態である QLS と主バンドの混成から電子状態が作られていることが分かる。ハニカム格子を構成している 2 原子の軌道のポテンシャルエネルギー差の違いや組成比によってバンドエネルギーが連続的に変化しているため、混晶化によって電子状態の制御が可能であることが分かった。ただし、フラットな分岐と K 点付近の振舞いについては注意が必要である。

[1] Y. Shinozuka, Applied Physics Express 7, 071201(2014)