

二次元の各種ブラベー格子の周期で構造修飾されたグラフェンの電子構造 Electronic structure of periodically modified graphene with various 2D Bravais lattices

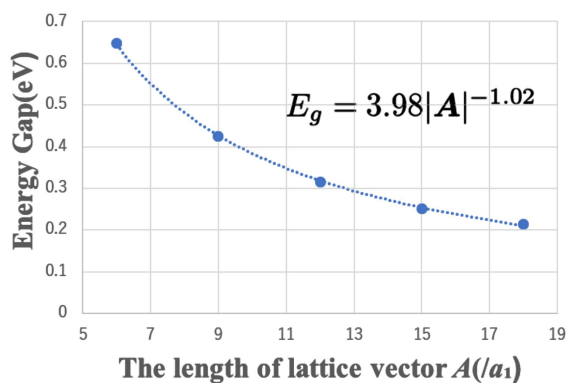
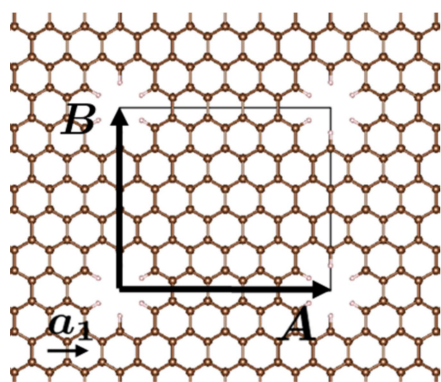
東工大 理 〇伊藤 智哉, 斎藤 晋

Department of physics, Tokyo Institute of Technology, 〇Tomoya Ito, Susumu Saito

E-mail: ito@stat.phys.titech.ac.jp

グラフェンは、高い導電性と熱伝導度を持ち、かつ強靱であることから次世代のナノデバイスへの応用が強く期待されている。しかし、実用化に向けていくつかの課題がある。その一つが通常のグラフェンはバンドギャップを持たず、金属としての性質を示すため、そのままでは半導体として用いることができない点である。当研究室の M.Sakurai らによる先行研究で、グラフェンを六方晶の周期で構造修飾して系の対称性を崩すことにより、大きなダイレクトギャップを持つ系となることが第一原理計算で示された[1]。さらに、最近、我々は二次元の各種ブラベー格子の周期で構造修飾されたグラフェンの電子構造の定性的な予測を行い、その結果、周期的に構造修飾されたグラフェンの電子構造が金属となるか、あるいは半導体となるかに関する一般的な判定法を得た。

本研究では、グラフェンを様々な周期で構造修飾した系について、第一原理計算により電子構造を調べ、バンドギャップ制御の可能性を探索した。下図に長方形周期で半導体と予測される構造の一边を変化させた系と、そのバンド構造の計算結果を示す。M.Sakurai らによる六方晶周期の先行研究と同様、バンドギャップが周期系の面積に反比例するという結果が得られている。講演では、構造修飾の周期や穴の大きさを変化させた様々な系に関する第一原理計算や強束縛近似による結果を比較し、バンドギャップが開く原理についても議論する。



Periodically modified graphene with rectangular patterns and bandgap value as a function of the cell length A

[1]M.Sakurai, Y. Sakai, and S. Saito, J. Phys.: Conf. Ser. **302**, 012018 (2011).