

コラニュレンとグラフェンからなる積層ヘテロ系の構造と電子状態

Geometric and Electronic Structures of vdW Heterostructure Consisting of Corannulene and Graphene

筑波大数理 [○]丸山 実那, 岡田 晋

Univ. of Tsukuba, [○]Mina Maruyama, Susumu Okada

E-mail: mmaruyama@comas-tsukuba.jp

グラフェン層の間に原子や分子が挿入されたグラファイト層間化合物は、グラフェン間のナノ空間に閉じ込められた挿入物質の織りなす新奇なネットワーク構造や、グラフェンと挿入物質との間の電荷移動が誘起する特異な電子状態の発現が期待される化合物である[1]。本研究では、密度汎関数理論を用いて、コラニュレンからなる三角格子分子膜と二層グラフェンとのヘテロ系のエネルギー論と電子状態の解明を行った (図 1)。

コラニュレンは湾曲したボウル構造を基底状態に、平坦構造を遷移状態にとり得る炭化水素分子である。孤立したコラニュレンでは、ボウル構造が平坦構造と比較して 400 meV だけ安定であるのに対し、二層グラフェンの間に挿入すると、ボウル構造と平坦構造のエネルギー差が 70 meV まで小さくなる。さらに、ボウル構造が挿入された二層グラフェンは、二つのディラックコーンがフェルミレベルを境に上下に分裂し、上側グラフェンにホール、下側グラフェンに電子が分布することを明らかにした。また、面鉛直方向に 139 MPa の圧力を印加すると、二層グラフェン中のコラニュレンがボウル構造から平坦構造に構造変調する可能性を示した。したがって、コラニュレンが挿入された二層グラフェンは、面鉛直方向の圧力によって上下のグラフェンへのキャリアの分布の制御が可能であることを示した。

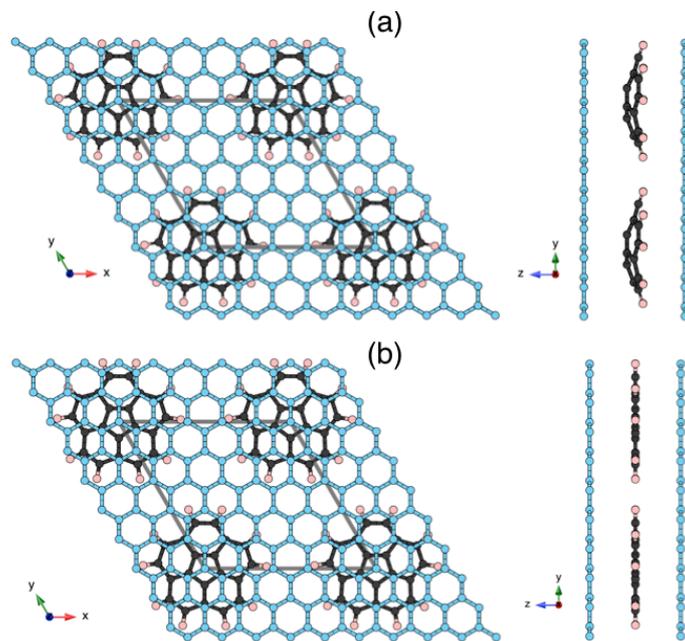


図 1: (a)ボウル型コラニュレン内包二層グラフェン、(b) 平坦型コラニュレン内包二層グラフェンの構造。

[1] M. S. Dresselhaus & G. Dresselhaus, *Adv. Phys.* **30**, 130 (1981).