ナノグラフェンの STM 像中での超構造に関するバイアス電圧依存性の第一原理計算 Bias Dependence of STM Images Exhibiting Superstructures on Nanographene by First-principles Calculations 阪大院エ ⁰李 君寰, 川合 健太郎, 稲垣 耕司, 山村 和也, 有馬 健太

Osaka Univ., °J. Li, K. Kawai, K. Inagaki, K. Yamamura, K. Arima

E-mail: j-li@pm.prec.eng.osaka-u.ac.jp

グラフェン中の局所欠陥に由来する特異な電子状態は、様々な工学分野で重要な役割を持つ。 我々は、グラファイト上に形成されたナノグラフェンを走査型トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscopy:STM)により観察し、長方形状の周期を持つ電子状態が存在することを明らかにした [1]。そこで、この起源を解明するため、エッジ欠陥を持つグラフェンナノリボンの電子状態を第 一原理計算により解析した。



FIGURE 1. (a) Schematic of the model for simulations. (b) Simulated STM images (bias = -50 mV).

Fig. 1(a)において、アームチェア型のエッジが対向したグラフェンナノリボン(Armchair-edged Graphene Nanoribbons : AGNRs)について、STM 像をシミュレーションした。従来、AGNRs の電気 的な性質が、リボンの幅に依存することはよく知られている[2]。Fig. 1(b)から、リボンの STM 像 においても、3 倍周期 (W=3a-2, 3a-1, 3a ; a は定数) で変化することが分かった。すなわち、W=3a-2 と W=3a-1 において、リボン内部の電子状態は同じでは無いが、共に $\sqrt{3}$ × $\sqrt{3}$ の周期を示した[3]。

一方で、リボン幅 W が 3a である場合 では、予想される STM 像が他の 2 種 類とは大きく異なり、長方形状の輝点 配列が示唆される興味深い結果を得 た[1]。さらに、この W=3a での STM 画像が、バイアス電圧に大きく依存す ること(Fig. 2 を参照)を見出し、そ の理由を考察した。



FIGURE 2. Simulated STM images of an AGNR with different sample biases (*W*=39, *W*=3*a*).

〔参考文献〕

[1] J. Li et al., Phys. Rev. B, 103 245433 (2021).
[2] L. Yang et al., Phys. Rev. Lett., 99 186801 (2007).
[3] W. Zhang et al., Phys. Rev. B, 100 115120 (2019).