

スマネン分子が挿入された二層グラフェンのエネルギー論と電子状態

Energetics and electronic structure of sumanene-intercalated bilayer-graphene

筑波大数理 [○]丸山 実那, 岡田 晋

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

E-mail: mmaruyama@comas.frsc.tsukuba.ac.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との間の電荷移動由来の特異な電子状態の発現が特徴的な化合物である [1]。本研究では、挿入される分子として炭化水素分子に着目し、密度汎関数理論を用いて、スマネン分子 (図 a) が挿入された二層グラフェンのエネルギー論と電子状態の解明を行った。

スマネン分子は湾曲したボウル構造と平坦構造をとり得る炭化水素分子である [2]。孤立したスマネン分子では、ボウル構造が平坦構造と比較して 800meV 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 400meV まで小さくなることを明らかにした。さらに、双極子モーメントを有する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再分布することを明らかにした (図 b)。また、面鉛直方向に 0.8GPa の圧力を印加すると、二層グラフェン中のスマネン分子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、スマネン分子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再分布を制御することが可能な系であることを示した。

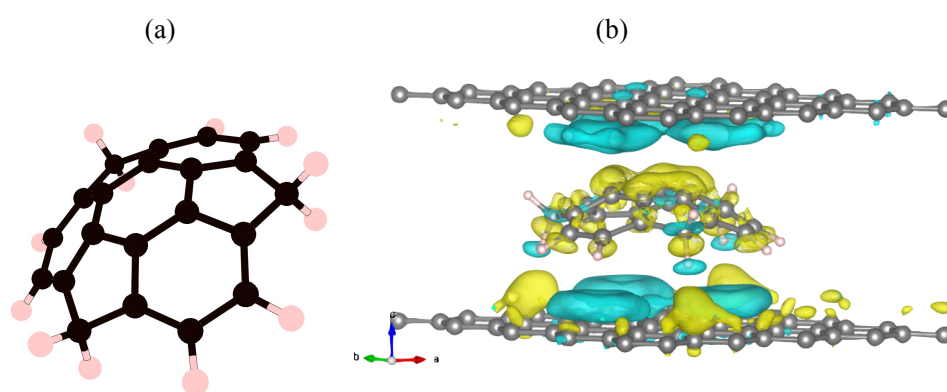


図 : (a) ボウル型構造のスマネン分子. (b) ボウル型スマネン分子が挿入された二層グラフェンの電荷密度分布. 黄色が電子, 青がホールの再分布を示す.

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

[2] H. Sakurai, et al., Science 301, 1878 (2003).