

1 目的

次のことを数値的に検証することを目的とする.

1. フェルミエネルギーがバンドギャップの中にある時に絶縁体（半導体）となること、及び、ギャップの外にある時に導体になること.
2. バンドギャップの中の電子状態密度がゼロ（外がノンゼロ）になること.
3. 一次元物質の場合、電子状態密度が、エネルギー分散の傾きに反比例すること.

2 実験概要

グラフェンナノリボン（GNR）の電子状態を、強束縛（タイトバインディング）近似法に基づいて求める. その際、炭素原子の $2p_z$ 軌道にのみを扱い、他の軌道は無視する. さらに、エネルギー分散、電子状態密度（DOS）、電気伝導度（コンダクタンス）、及び電流分布を求める. 以上の全てを数値計算で求める.

3 理論

3.1 グラフェンナノリボン（GNR）

グラフェンとは、炭素原子が蜂の巣状に並んだ二次元シート状物質のこと. GNRとは、その一部を切り取って出来る一次元ワイヤー状物質のこと. GNRの電子状態は、グラフェンの切り取り方に依存して変化するため、電気伝導特性も切り取り方に依存する.

ここでは、アームチェア型のGNRを使用する. アームチェア型の GNR とは、図1*1のように、ワイヤー断面の両端（エッジ）がアームチェアの形をしている GNR のことである. アームチェア型GNRは、ワイヤー幅に依存して、絶縁体（半導体）になったり、導体になったりすることが知られている.

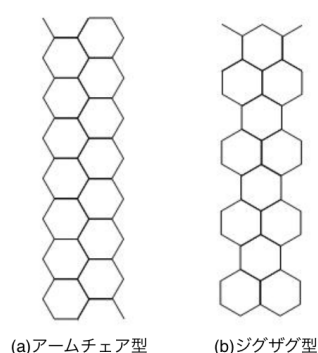


図1 グラフェン・ナノリボンの構造：アームチェアとジグザグ

3.2 GNRの電子状態

GNRは二次元シート状のグラフェンを切り取って出来る一次元ワイヤーである. エネルギー分散 $E(k)$ は、次のようになる.

*1 カーボンナノチューブの構造, <http://www.center.shizuoka-c.ed.jp/>, 2019-4-11閲覧

$$E(k) = \pm \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{n}{N+1}\pi\right) \cos\left(\frac{k}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{n}{N+1}\pi\right)} \quad (3.1)$$

ただし、 N は、ワイヤーに平行で、なおかつ炭素原子上を通る直線の本数である。すなわち、ワイヤー幅は N に比例する。

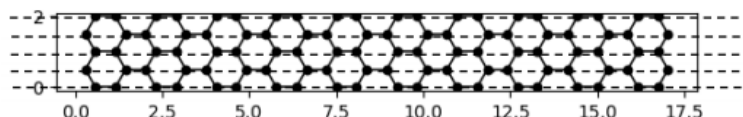


図2 グラフェン・ナノリボンの構造：アームチェアとジグザグ

$N=5$ に対する $E(k)$ を図示すると、図3が得られる。これは、グラフェンのエネルギーのグラフにおいて、縦軸(E)に平行で等間隔な平面の集合によって $E(k)$ を切断したときに、それらの断面上に生じる曲線の集合である。その様子を図4に示す。

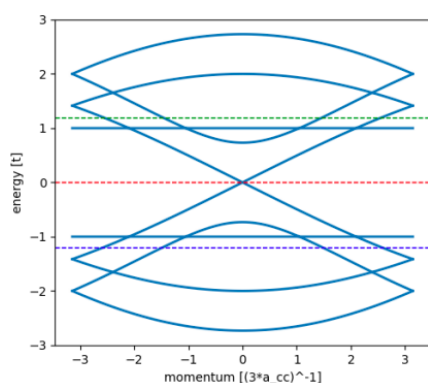


図3 $N = 5$ に対する $E(k)$

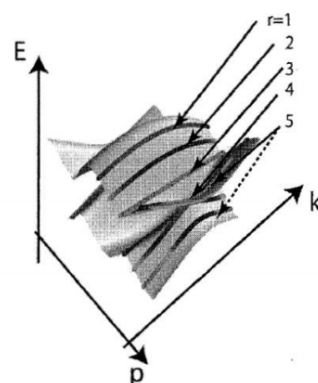


図4 グラフェンとGNRのエネルギーバンドの関係

もし切断平面集合の中に、 K 点や K' 点を通る平面が含まれている場合は、バンドギャップが形成されない。一方、集合内に、 K 点や K' 点を通る平面が存在しない場合は、バンドギャップが形成される。

4 実験方法

図5のような4種類の太さのGNRを作成し、それらのエネルギー分散、電子状態密度 (DOS)、電気伝導度 (コンダクタンス)、および電流分布を求める。

計算には、タイトバインディング計算用のpythonライブラリ「KWANT」を使用して記述されたソースコードを使用する。ソースコード、および計算環境は、担当教員によって、あらかじめ用意されている。

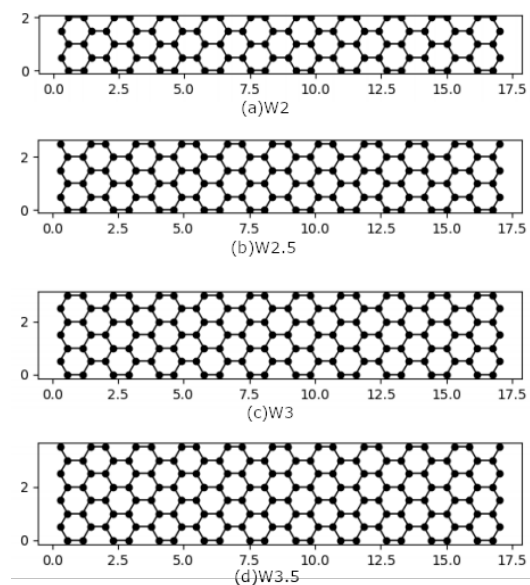


図5 GNRの結晶構造

5 考察の方針

4種類のGNRのエネルギー分散，電子状態密度（DOS），電気伝導度（コンダクタンス），および電流分布を比較し，以下の検証を中心に考察する．

1. フェルミエネルギーがバンドギャップの中にある時に絶縁体（半導体）となること，及び，ギャップの外にある時に導体になること．
2. バンドギャップの中の電子状態密度がゼロ（外がノンゼロ）になること．
3. 一次元物質の場合，電子状態密度が，エネルギー分散の傾きに反比例すること．

さらに，エネルギー分散の傾きがゼロのところでは DOS が発散している理由や，コンダクタンスがステップ構造をとる理由について考察して正しい結論を導く．

6 実験結果

6.1 エネルギー分散

4種類 ($w=2.0$, $w=2.5$, $w=3.0$, $w=3.5$) のGNRのエネルギー分散をそれぞれ図6から図9に示す。

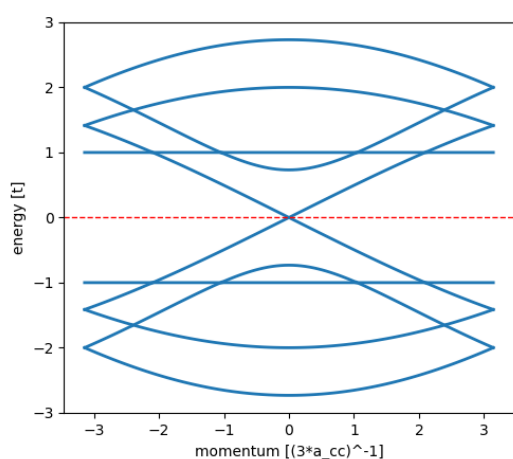


図6 $w=2.0$ のエネルギー分散

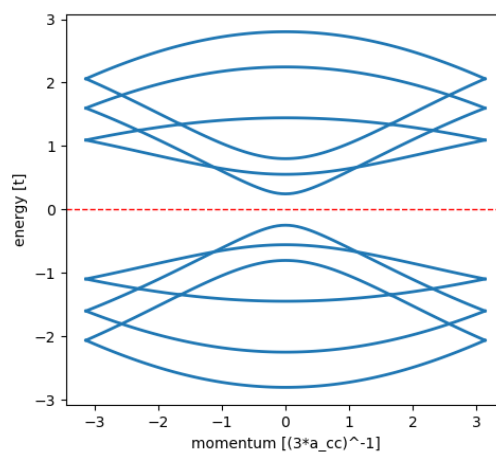


図7 $w=2.5$ のエネルギー分散

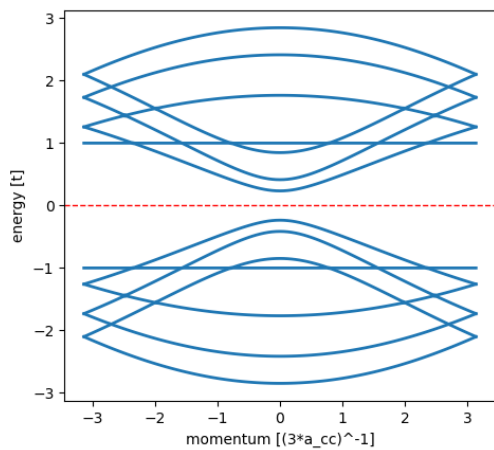


図8 $w=3.0$ のエネルギー分散

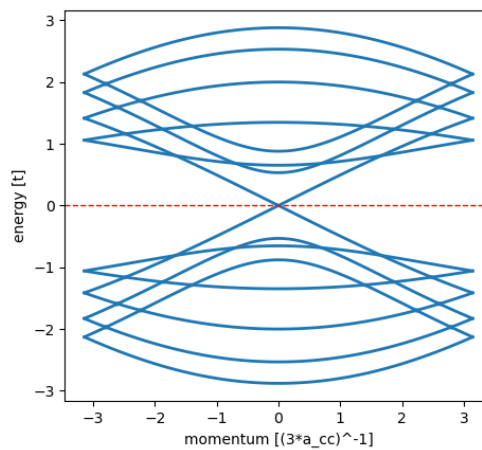


図9 $w=3.5$ のエネルギー分散

6.2 電子状態密度 (DOS)

4 種類 ($w=2.0$, $w=2.5$, $w=3.0$, $w=3.5$) の電子状態密度 (DOS) をそれぞれ図10から図13に示す.

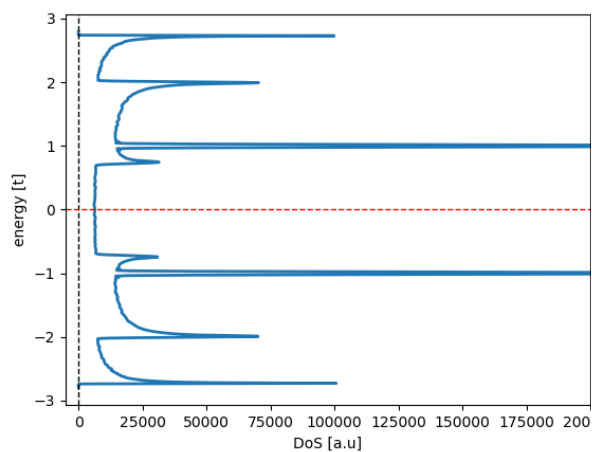


図10 $w=2.0$ の電子状態密度

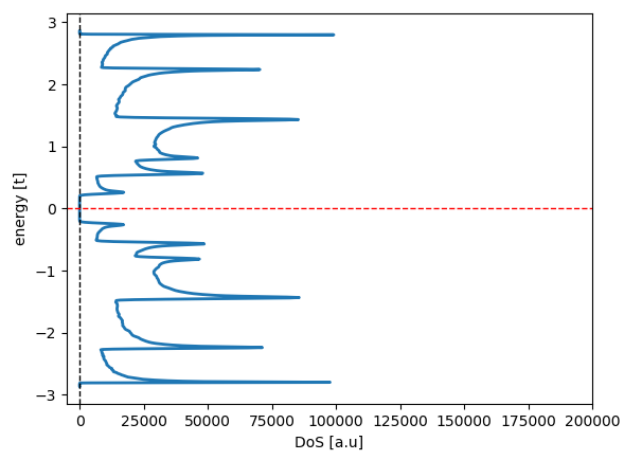


図11 $w=2.5$ の電子状態密度

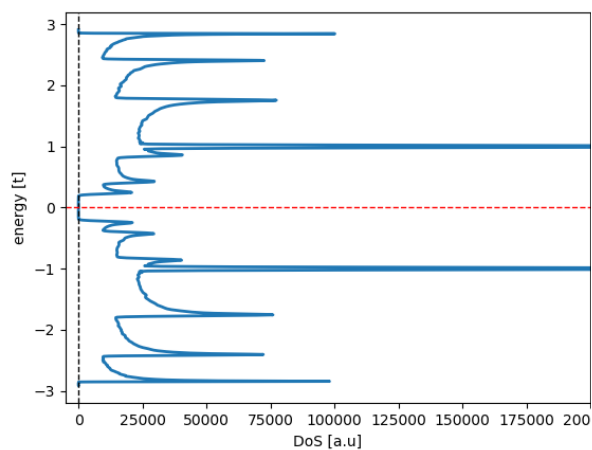


図12 $w=3.0$ の電子状態密度

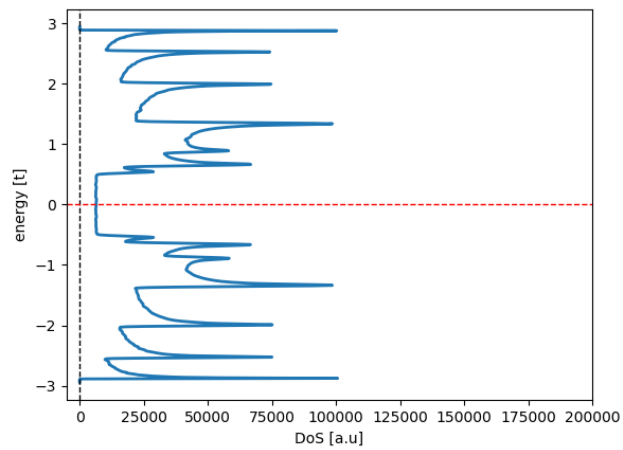


図13 $w=3.5$ の電子状態密度

6.3 コンダクタンス

4種類 ($w=2.0$, $w=2.5$, $w=3.0$, $w=3.5$) のコンダクタンスをそれぞれ図14から図17に示す。

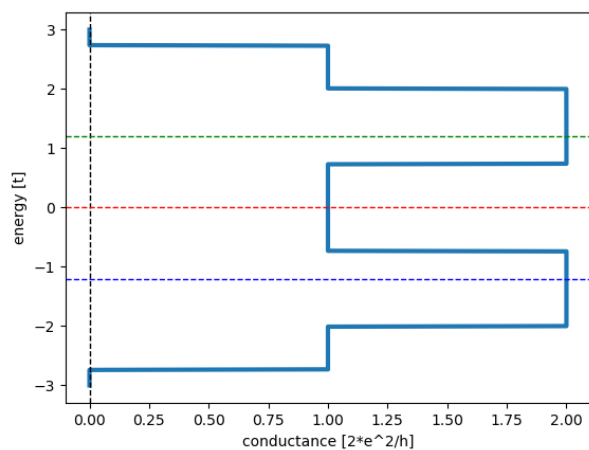


図14 $w=2.0$ のコンダクタンス

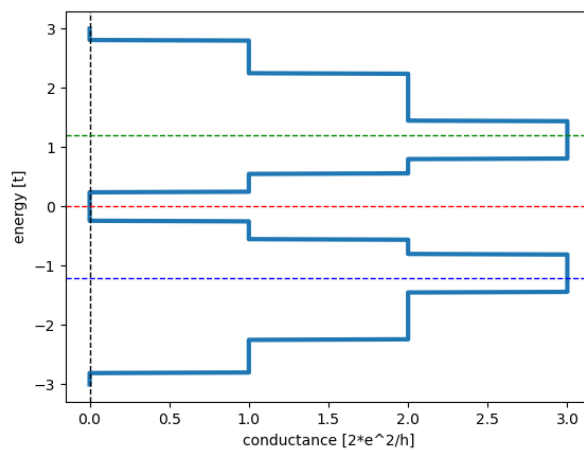


図15 $w=2.5$ のコンダクタンス

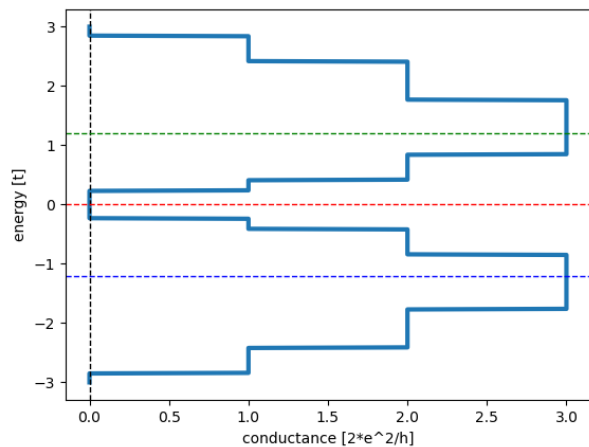


図16 $w=3.0$ のコンダクタンス

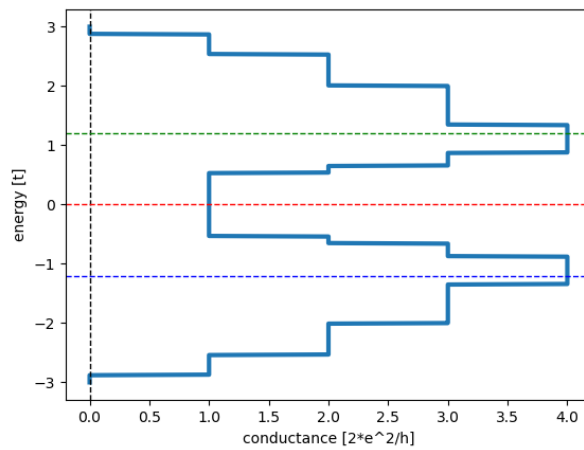


図17 $w=3.5$ のコンダクタンス

6.4 電流分布

$w=2.0$ のGNRでエネルギーが -1.2 , 1.2 , 0 における（図14での青，緑，赤に対応する）電流分布をそれぞれ図18，図19，図20に示す．

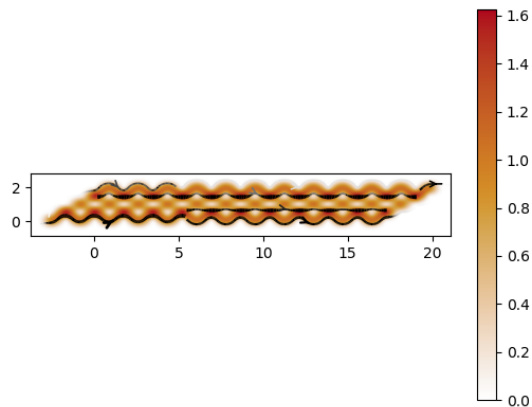


図18 エネルギーが -1.2 での電流分布

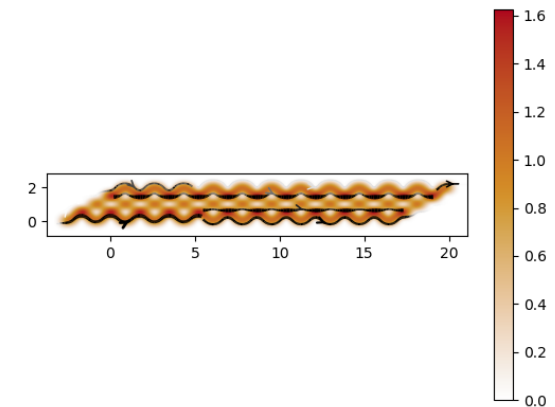


図19 エネルギーが 1.2 での電流分布

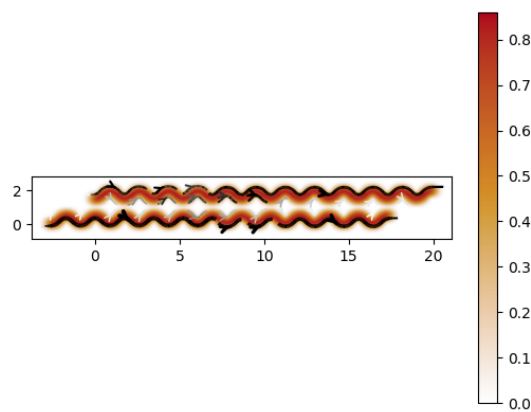


図20 エネルギーが 0 での電流分布