


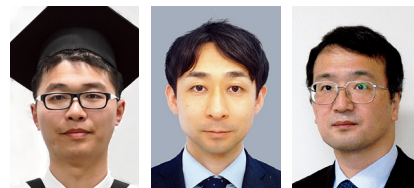
多層グラフェンへのナノダイヤモンドの挿入による層間相互作用制御

工学研究科 物理学系専攻

博士後期課程 丁 明達

助教 井ノ上 泰輝

教授 小林 慶裕

 https://researchmap.jp/inoue_t
 https://researchmap.jp/koba_ap_eng_ou


研究の概要

グラフェンは単層の状態では特異な電子物性を示すが、多層化する
と層間相互作用により線形分散が失われ、物性が変化する。本研究では、
この層間相互作用を制御するため、グラフェン層間にナノスペーサー
としてナノダイヤモンドを挿入した多層グラフェン積層構造を実験的
に構築した。ラマン分光では G'/G 比の増大や G ピーク分裂から層間
結合の抑制を確認し、原子間力顕微鏡により層間距離の拡大を観察した。
さらに分子動力学シミュレーションと連続体モデルを組み合わせた解
析により、ナノダイヤモンド密度と直径が層間距離と最終形態を規定し、
エネルギーが最も低い構造が選択されることを示した。

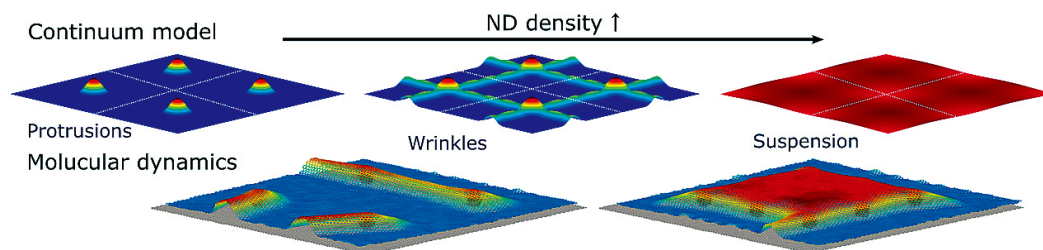
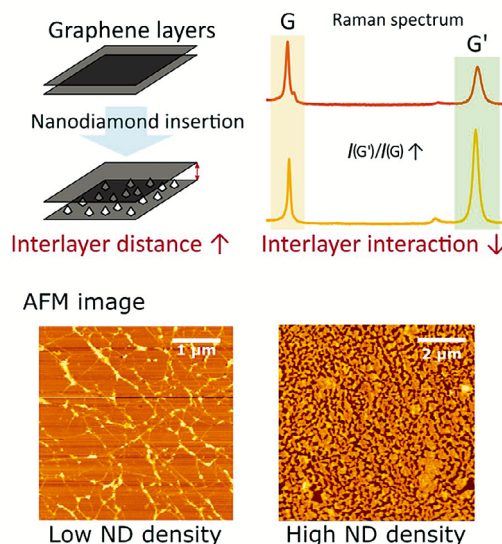
以上より、スペーサー挿入多層グラフェンの特性設計のための、ナノ
スケール構造制御の原理と指針を提示した。

研究の意義と将来展望

本研究は、ナノスケールのスペーサーを導入することで、多層グラフェ
ンの層間構造を設計し、単層の状態に近い特性を多層系で再獲得でき
ることを示した。これはグラフェン応用に向けた大規模化と特性の両
立を可能とする手法である。今後は、スペーサー種、配置制御、外場
印加などと組み合わせることで、光学応答・電気伝導・非線形応答な
どの特性設計へ展開し、応用領域の拡大が期待される。

研究の背景と結果

グラフェンは単層では線形バンドを持つが、多層化に伴い AB 積層が
安定構造として選択され、層間相互作用が増大する結果、電子構造は
単層とは異なる状態に変化する。より大きなスケールで単層グラフェ
ンに類似した特性を得るためには、多層における層間相互作用の能動
的制御が鍵となる。本研究では、ナノダイヤモンドを層間に挿入して
人工的な「ナノスペーサー」として作用させ、層間距離を拡張して相
互作用を抑制した多層グラフェンの積層構造を実験的に作製した。多
層グラフェンとナノダイヤモンドを交互に積層するため、単層グラフェ
ンの転写法とナノダイヤモンドのスピンコートを組み合わせた手法を
用いた。ラマン分光では、G'/G 比の増大と G ピーク分裂により層間
結合の弱体化が明瞭であった。AFM では上層グラフェンの架橋構造の形
成と層間距離の増大を観察した。これらはナノダイヤモンド挿入によ
る相互作用制御の直接的な実験証拠である。また、分子動力学シミュ
レーションにより、ナノダイヤモンドの面密度と粒径が層間距離と最
終形態を決定することが明らかとなった。すなわち、ナノダイヤモンド
密度が高く径が大きいほど、層間距離は大きくなり上層が架橋しや
すい。さらに、二つの安定形態（架橋と付着）のうち、系全体のエネ
ルギーが低い方が最終的に採択されることを、連続体モデルにより示
した。このモデルは閾値密度の存在を予測し、実験観察と整合した。



特許

論文

Ding, Mingda; Inoue, Taiki; Enriquez, John Isaac et al. Experimental and theoretical investigation of nanodiamond insertion on the interlayer interaction in multilayer stacking graphene. Carbon. 2024, 229, 119464. doi: 10.1016/j.carbon.2024.119464
Ding, Mingda; Inoue, Taiki; Enriquez, John Isaac et al. Reduction of interlayer interaction in multilayer stacking graphene with carbon nanotube insertion: Insights from experiment and simulation. The Journal of Physical Chemistry C. 2023, 127, 23768. doi: 10.1021/acs.jpcc.3c06132

参考URL <http://www.ap.eng.osaka-u.ac.jp/nanomaterial/index.html>

キーワード ナノカーボン材料、グラフェン、ナノダイヤモンド、分子動力学