

## グラフェンが結合したカーボンナノチューブの振動特性

## Vibration characteristics of graphene junctioned carbon nanotubes

兵庫県大 院・工 吉本 正敏, 乾 徳夫, 持地 広造, 盛谷 浩右

Univ. of Hyogo, Masatoshi Yoshimoto, Norio Inui, Kozo Mochiji, and Kosuke Moritani

E-mail: es12z071@steng.u-hyogo.ac.jp

カーボンナノチューブ(CNT)とグラフェンは共に炭素原子からできた六角形格子構造を有するが, グラフェンの曲げ剛性は CNT と比較して極めて小さい[1]. そこでこれらの特徴を活かしたナノマテリアルとして, 図 1 に示すような複合梁を考えた. これは単層 CNT (ジグザグ型) からグラフェンへ連続的に変化した形状になっている. CNT はすでに STM や AFM のプローブとして市販されており, これにグラフェンの柔軟性を付加することにより新たなセンサーへの応用が開かれると期待される. 本研究ではこの複合梁のインパルス応答を分子動力学法により調べた.

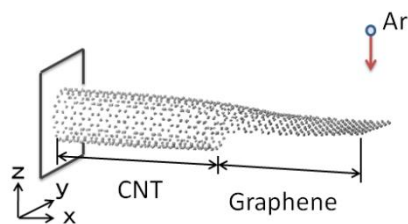


Fig.1. CNT-Graphene beam

まず, 複合梁のポテンシャルエネルギーが極小になるように初期位置を定めた. 次に, CNT の端 (図 1 の左端) を固定し, グラフェンの先端 (図 1 の右端) に運動エネルギーが 50 eV のアルゴン原子を CNT に対して垂直に衝突させた. 炭素間のポテンシャルエネルギーとしてターソフポテンシャルを用いた. 炭素とアルゴン間のポテンシャルはレナードジョーンズポテンシャルを用いた. 図 2 (a) は CNT の長さ  $L$  とし, グラフェンの長さが共に 1.2 nm である複合梁の先端の変位を時間の関数として示したものである. 計算開始後 0.3 ps でグラフェンとアルゴンは衝突し下側へ大きく変形する. その後, グラフェンは安定位置

より上側に反り振動を続ける. グラフェン部分の曲げ剛性は下向きと上向きでは異なり, 下に曲がりやすい構造となっており, そのため下向きの変位量が大きくなっている. 図 2 (b) は CNT の長さを 35 nm まで伸ばした場合の結果である. 衝突直後の変位量が大きいのは CNT の部分がたわんだためである. 図 2 (a) と大きく異なる点としてグラフェンの振動が著しく減衰する点が挙げられる. この減衰の主因は, CNT の断面形状が変形することで固定端へ向かって伝搬する振動によるエネルギー散逸であると考えられる. 講演ではグラフェンの長さ依存性についても言及する.

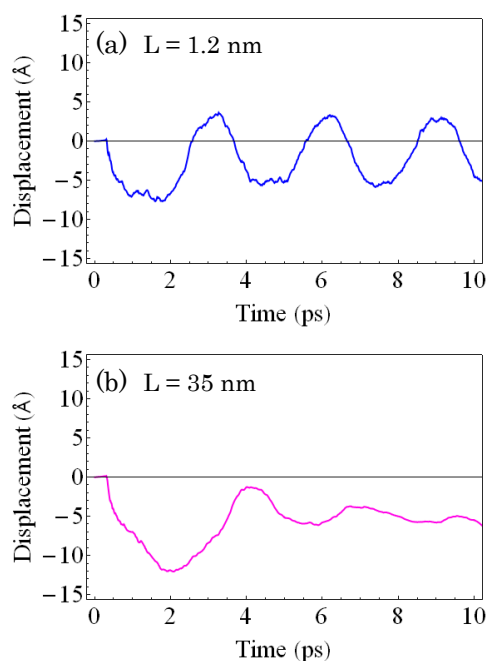


Fig.2. The vertical displacement of the tip of the CNT-Graphene beam.

[1] V. Parvaneh and M. Shariati, Acta Mech, **216**, 281-289 (2011).