

水素終端したグラフェンナノリボンの格子振動解析

Lattice vibration analysis of Hydrogen-passivated graphene nano-ribbons

福井大院工¹, 九大院工², °牛田 憲次¹, Md. Sherajul Islam¹, 田中 悟², 橋本 明弘¹University of Fukui¹, Kyushu University²,°K. Ushida¹, Md. Sherajul Islam¹, S. Tanaka², A. Hashimoto¹

E-mail: je110251@u-fukui.ac.jp

【はじめに】 グラフェンナノリボンの格子振動についてはこれまでよく研究されている[1]。しかしながら、それらは欠陥や水素終端されていない場合であり、欠陥や水素終端されていない場合についてはほとんど研究されていない。このような不規則性を有する系の格子振動では、計算量が膨大になるため計算の実行が困難となるからである。そこで、今回このような複雑な系の格子振動の解析に大変有効な手法であると考えられる強制振動子法[2]を用いて、水素終端したアームチェアエッジグラフェンナノリボンの振動解析を行った。

【計算方法】 様々な幅を持つ水素終端したアームチェアエッジグラフェンナノリボンと欠陥を含む水素終端したアームチェアエッジグラフェンナノリボンをサイトパーコレーションと呼ばれる操作によって作成し強制振動子法を用いて振動解析を行った。ここで計算に用いた force constant は R.Saito ら[3]の値を使用している。

【計算結果】 図1に様々な幅を持つ水素終端したアームチェアエッジグラフェンナノリボンのフォノン状態密度を示す。図1より2900cm⁻¹付近に水素終端の影響と考えられるピークが出現した。次に図2にN=21の幅における欠陥の割合を変えた水素終端したアームチェアエッジグラフェンナノリボンのフォノン状態密度を示す。図2より欠陥の割合が増えるにつれてピーク位置が低波数側にシフトしていることが分かった。これは欠陥によって最近接炭素原子と結合を持たない炭素原子が増えることによって引き起こされているものと考えられる。以上のことから水素終端したアームチェアエッジグラフェンナノリボンの格子振動は欠陥の割合に強く依存することが分かった。

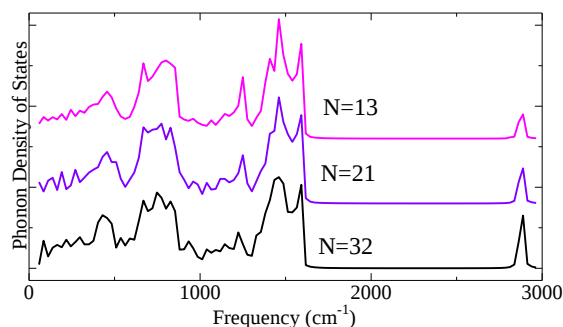


図 1. さまざまな幅を持つ水素終端したアームチェアエッジグラフェンナノリボンのフォノン状態密度

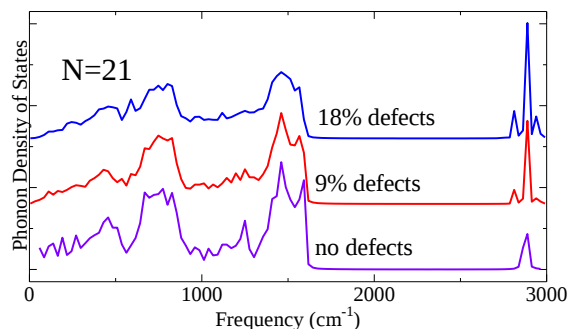


図 2. 欠陥の割合を変えた水素終端したアームチェアエッジグラフェンナノリボンのフォノン状態密度

【参考文献】

- [1] Minggang Xia, Yang Song, Shengli Zhang, *Phys. Lett. A* **375**, 3726 (2011)
- [2] M. L. Williams, H. J. Maris, *Phys. Rev. B* **31**, 4508 (1985)
- [3] R. Saito et al., “Physical Properties of Carbon Nanotubes ” Imperial College Press (1998)