

## アセチレン架橋構造をもつ二層グラフェンの 第一原理計算による電子状態

### Ab Initio Study of the Electronic States of Layered Graphene with Acetylenic Linkage Structures

熊本大院先端科学 横井 裕之

Kumamoto Univ., Hiroyuki Yokoi

E-mail: yokoihr@kumamoto-u.ac.jp

グラフェンの六角格子構造にさまざまな変調構造を付与することにより、グラフェンにバンドギャップや磁性などの新たな特性を発現させる試みが理論的にも実験的にも活発に進められている。われわれは、グラフェン層間を炭素鎖でつなげた新しい架橋構造をもつ二層グラフェンの結晶構造を考案し、その電子状態を第一原理計算によって調査している。昨年度の秋季学術講演会では、グラフェン基面中の一つの六角リングを囲む 6 個の六角リングの外輪に位置する炭素原子にエチレン鎖が結合する構造を提案し、6 本のエチレン鎖で架橋した構造（図 1）では磁気モーメントが発生することを報告した（7a-C16-8）。磁気モーメントの大きさは、6 本のエチレン鎖架橋単位につき  $2\mu_B$  であった。スピン密度分布がエチレン鎖の炭素原子と架橋により囲まれたグラフェン基面の炭素原子に局在していたので、 $sp^2$  ネットワークがエチレン鎖の架橋部で囲まれて局在化したことが磁性発現に寄与していると考えた。

本研究では、二層グラフェンをアセチレン鎖で架橋した構造について、その電子状態を第一原理計算により調査した。 $sp^2$  ネットワークを局在化するために一つの六角リングを囲む 6 個の炭素原子にアセチレン鎖を結合して架橋したところ、磁気モーメントが発生しなかった。一方、6 本のアセチレン鎖のうち、グラフェン基面の A サイトあるいは B サイトの一方に結合する架橋のみを 3 本残した構造（図 2）では磁気モーメントが発生した。グラフェンでは両方のサイトの炭素原子に変調構造を付与すると磁性が発現しないという計算結果になるのが通例であり、アセチレン鎖による架橋構造ではそれと同様のふるまいが得られた。その観点からすれば、エチレン鎖における磁性発現は特異的なふるまいであるといえる。

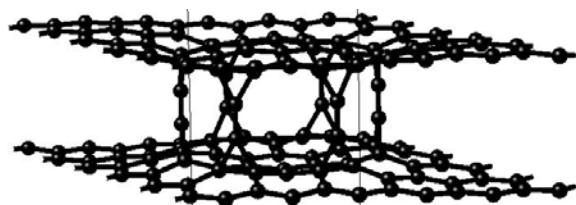


図 1 6 本のエチレン鎖で架橋した二層グラ  
フェンの構造モデル

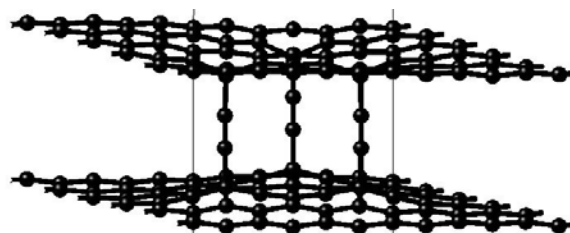


図 2 3 本のアセチレン鎖で架橋した二層グ  
ラフェンの構造モデル