

## 水素付加によるピリジン型の端を有するグラフェンの電子物性制御

### Electronic structure control of graphene with pyridinic edges by hydrogenation

筑波大学 <sup>○</sup>安間 愛莉, 丸山 実那, 岡田 晋

Univ. Tsukuba, <sup>○</sup>Airi Yasuma, Mina Maruyama, Susumu Okada

E-mail: ayasuma@comas.frsc.tsukuba.ac.jp

グラフェンやグラフェン誘導体のピリジン化は、それらに高い触媒活性を付与することが実験的に示されている[1]。他方、ピリジンやジピリジンといった、窒素を包含する六角形分子はベンゼンとほぼ等価な電子状態を有していることが知られている[2]。このことは、グラフェンやナノグラフェンの端や欠陥のピリジン化は、母物質の電子物性に対して大きな変調を誘起しないことを示している。すなわち、ピリジン化による、グラフェンやナノグラフェンの高い触媒活性の起源は、単純な端の炭素原子の窒素による置換ではないことが示唆されている。しかしながら、現状では、ピリジン型のグラフェン端の高い反応性の発現機構はもちろん、ピリジン化がグラフェンやナノグラフェンの電子物性に及ぼす影響は未解明である。そこで、本研究では、密度汎関数理論を用いて、端がピリジン化されたアームチェアグラフェンナノリボンの電子物性の解明を行った。特に、窒素置換サイトへの水素吸着による物性変調の可能性の探索を行った。

計算の結果、ピリジン化されたアームチェアグラフェンリボンの電子構造は、フェルミレベル直下に出現する、完全占有された窒素の $\sigma$ 状態を除いて、非置換のグラフェンリボンのそれと定性的に等価であり、ピリジン化による電子物性の変調は存在しない[図 1(a)]。他方、端の窒素置換サイトへの水素吸着は、フェルミレベル近傍の電子状態の著しい変調を誘起する。すなわち、端の窒素原子への水素吸着により、フェルミレベルに部分占有された分散の小さなバンドが出現する[図 1(b)]。つまり、ピリジン端の水素化により、リボン上の端近傍の反応性の向上が期待される。

#### 引用文献

- [1] D. Guo, et al. *Science* **351**, 361 (2016).
- [2] D. Chen, et al. *J. Mater. Chem C* **2**, 9565 (2014).

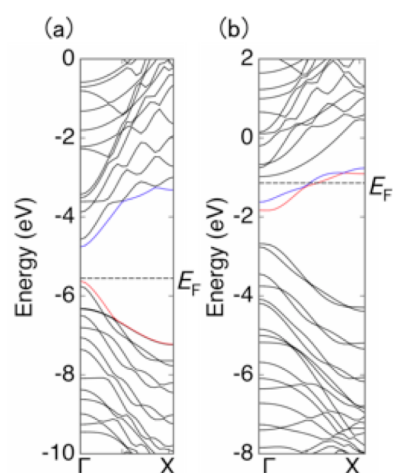


図 1 (a)ピリジン化アームチェアリボンと(b)水素化窒素端を有するアームチェアリボンの電子構造。