

# 8員環欠陥を持つナノカーボン物質のフラットバンド電子状態

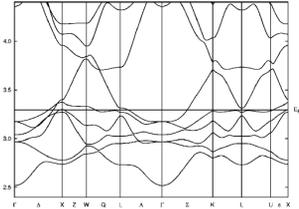
野田 祐輔、小野 頌太\*、大野 かおる

(shota-o@ynu.ac.jp) 横浜国立大学大学院工学府 物理情報工学専攻 物理工学コース

## - 研究目的 -

グラフェンは白金代替材になり得るか？

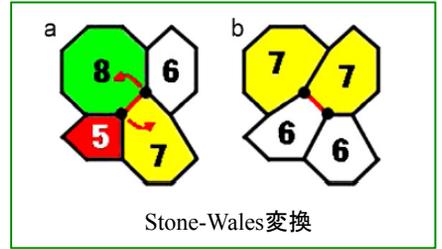
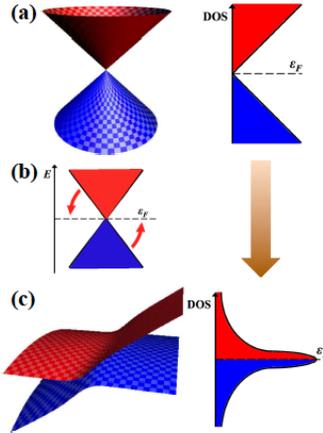
白金のバンド構造



V. Theileis and H. Bross,  
Phys. Rev. B **62**, 13338 (2000).

Fermi準位付近で  
分散の大きなバンドとフラットバンド  
とが共存するようなバンド構造が必要

## - アイデア -



Diracコーンが傾けることで、Fermi準位付近で  
分散の大きなバンドとフラットバンド  
とが共存するようなバンド構造が実現する。

単層グラフェンにStone-Wales変換を施し、  
左図のバンド構造が出現するための特徴的  
な格子構造を探索する。

## - 計算結果 -

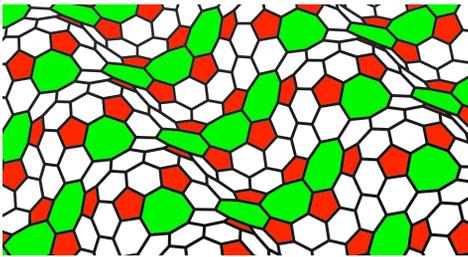


図1: 凹凸構造を示す単層グラフェン (緑=8員環、赤=5員環)。孤立8員環欠陥 (= ミッキーマウス型欠陥) が存在する。

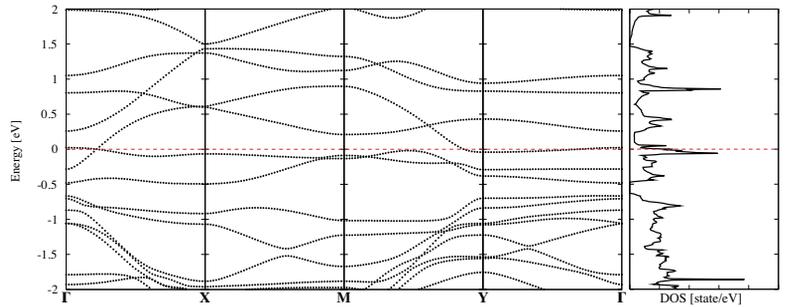


図2: 凹凸構造を示す単層グラフェンの電子バンド構造と状態密度。分散の大きなバンドとフラットバンドがFermi準位付近で共存する。Fermi準位付近で状態密度が大きい。→白金代替材料

## - 考察 -

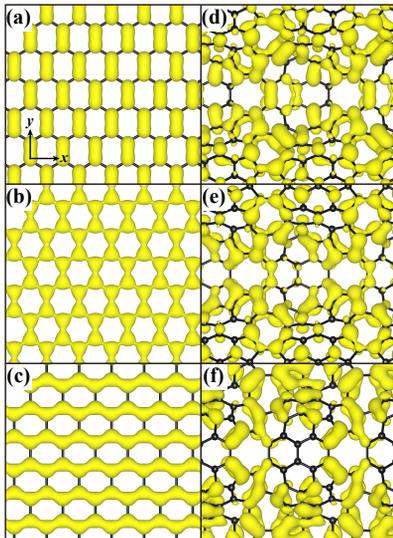


図4:  $k_1, k_2, k_3$ の点(図3)における最高占有準位の部分電荷密度。(a, b, c)単層グラフェン、(d, e, f)凹凸構造を示す単層グラフェン。

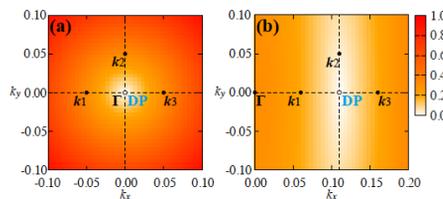


図3: Dirac点(DP)付近の占有バンドと非占有バンドとの間のエネルギーギャップ値。(a)単層グラフェン、(b)凹凸構造を示す単層グラフェン。

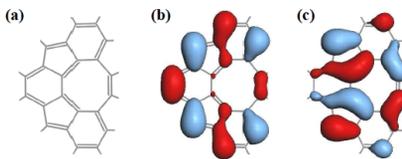


図5: (a)  $C_{22}H_{12}$ の分子構造 (b) HOMO軌道 (c) LUMO軌道 (色の違いはKohn-Sham軌道の位相の違いを表す。)

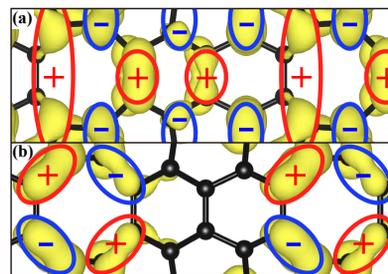


図6: 凹凸構造を示す単層グラフェンの部分電荷密度。(a)分散の大きなバンド、(b)フラットバンド。

(b)ではKohn-Sham軌道に位相不整合があるため、孤立8員環付近に電荷が局在する。  
→フラットバンド形成