

グラフェンナノリボンの炭素空孔によるヤーンテラー変形と磁性

太田 憲雄
(筑波大数理物質)

Jahn-Teller distortion and magnetism of carbon void defect on graphene-nano-ribbon

Norio Ota

Pure and applied sciences, University of Tsukuba

はじめに

グラフェンやグラファイトで報告されている室温強磁性¹⁾ やリチウムイオン電池における触媒反応の起因は炭素の抜けた空孔が一因ではないかと考えられている。最近STMを用いた炭素配置の観察がなされるようになってきた²⁻³⁾。しかし、安定炭素配置やそれにとまなう多重スピン配置の計算によりさらに詳細なメカニズム解明が必要である。ここでは第一原理計算による予測をおこないSTM実験との照合を行った。無限長のABスタック2層グラフェンリボンを対象に、ガウシアンパッケージでの密度汎関数法計算をおこなった。GGA近似で6-31Gd基底関数系を用いた。

Yahn-Teller 変形と安定スピン配置

図1の初期の空孔配置は、まわりの3個の炭素が正三角形(一辺2.48Å)である。6個の不安定電子をもつが交換相互作用によるエネルギー上昇を避けるため、Yahn-Teller変形を引き起こす。図2が計算結果で、空孔のまわりの炭素は2等辺三角形(長辺2.59Å, 短辺2.14Å)となって安定する。多重スピン状態として S_z が6/2から0/2にいたる4個が可能であるが、安定なスピン状態は $S_z = 2/2$ であった。スピン密度を見ると、長辺端の炭素にUp-Spinが最も密に集中する。シグマ電子とパイ電子が混合した形状である。

サイトと安定スピン配置

ABスタック2層グラフェンでは、格子ベクトルに対応し2種(アルファ、ベータ)の位置の炭素がある。アルファ位置空孔での安定スピン配置は図3となった。またベータ位置の場合は図4である。この二つの空孔付近の電荷およびスピン密度配置をくらべると互いに60度異なる回転対称となった。

実験との比較

M. Ziatdinovらによる最近のSTM観察³⁾では、ABスタックグラファイトの最表面をアルゴンでたたいた空孔で互いに60度配置が異なる2種の欠陥が見出されている。今回の計算でのふたつの安定スピン配置に対応すると推測される。ただし、欠陥中心の詳細(Yahn-teller変形)やスピン密度分布はまだ観察されていない。今後の実験に期待したい。

参考文献

- 1) J. Cervenka et al, Nature Physics, **5**, 840 (2009)
- 2) T. Kondo et al, Phys. Rev. B, **86**, 035436(2012)
- 3) M. Ziatdinov et al, Phys. Rev. B, **89**, 155045(2014)

