

# 单壁 $\text{BC}_3$ 纳米管晶格动力学研究

王 冯 敏 曹学伟 王玉芳<sup>†</sup> 金庆华 丁大同 蓝国祥

(南开大学物理科学学院, 天津 300071)

(2007 年 8 月 1 日收到, 2008 年 4 月 2 日收到修改稿)

基于力常数模型计算了一系列扶手椅型、锯齿型和手性单壁  $\text{BC}_3$  纳米管的声子色散关系, 描述了单壁  $\text{BC}_3$  纳米管结构的表征方式, 比较详细地给出了其结构、对称性和晶格动力学分析. 基于数值计算结果, 讨论了拉曼活性模和红外活性振动模的频率与管径的关系. 由分析结果做出推断,  $\text{BC}_3$  纳米管的拉曼光谱和红外光谱比单壁碳纳米管更为复杂.

关键词:  $\text{BC}_3$  纳米管, 声子色散关系, 晶格动力学

PACC: 6146, 6320D

## 1. 引言

纳米管的结构和性质的多样性, 使其成为当今比较热门的研究领域之一. 纳米管主要分为单壁和多壁两大类. 自从碳纳米管发现至今<sup>[1]</sup>, 它已经逐步形成一个日益完善的研究领域. 有关纳米管的相关研究也不仅仅局限于碳材料, 其中还包括氮化硼<sup>[2]</sup>、氮化镓<sup>[3,4]</sup>、碳化硼<sup>[5]</sup>以及金属硫化物、金属氧化物的一维管状纳米材料<sup>[6-11]</sup>. 在众多的一维管状纳米材料中, 单独由 C 或由 B, N 和 C 三种元素组成的 BCN 复合纳米管<sup>[5,12-17]</sup>受到了更多的关注. 因为这类复合纳米管的结构与碳纳米管的结构非常相似, 有关碳纳米管的相关理论基础和实验方法已经比较成熟, 可以用于 BCN 复合纳米管的研究中.

理论和实验研究表明, 对于具有类石墨层状结构的材料, 一般均有相应的一维纳米线或管状结构存在. 理论上在描述它们的结构时, 均可采用与碳纳米管类似的方法<sup>[18]</sup>, 即由二维平面按照一定的方式卷曲而成.  $\text{BC}_3$  体材料的结构与石墨相似, 每一个二维  $\text{BC}_3$  平面具有六次旋转对称性.  $\text{BC}_3$  体材料是金属性的, 而其二维平面却呈现半导体性<sup>[19]</sup>. 1995 年, Chopra 等<sup>[2]</sup>采用电弧放电法获得了  $\text{BC}_3$  纳米管. 理论计算表明  $\text{BC}_3$  纳米管是一种窄带隙半导体材料, 其带隙与纳米管的直径基本无关<sup>[20]</sup>, 因此  $\text{BC}_3$  纳

管更适合进行量子效应的研究, 在电子器件和纳米复合材料领域具有很好的应用前景. 详细准确的晶格动力学分析是  $\text{BC}_3$  纳米管性能和应用研究的理论基础. Guo 等<sup>[14]</sup>采用经验力常数模型计算了扶手椅型和锯齿型  $\text{BC}_3$  纳米管的声子色散关系, 目前还没有关于  $\text{BC}_3$  纳米管晶格振动模对称性分析的报道.

本文给出了单壁  $\text{BC}_3$  纳米管的结构、对称性和晶格振动模的对称性分类, 基于力常数模型计算了不同直径  $\text{BC}_3$  纳米管拉曼活性模和红外活性振动模的频率与管径的关系, 并与单壁碳纳米管的结果进行了比较.

## 2. 单壁 $\text{BC}_3$ 纳米管的结构和对称性

由于二维  $\text{BC}_3$  平面结构的对称性与石墨平面非常相似, 因此可以采用与碳纳米管相同的方法来描述  $\text{BC}_3$  纳米管的结构和对称性, 并可与碳纳米管的相关结果进行比较. 图 1 给出了  $\text{BC}_3$  平面的结构示意图,  $\mathbf{a}_1$  和  $\mathbf{a}_2$  为两个基矢, 原胞内包含 8 个原子, 2 个 B 原子和 6 个 C 原子. 与碳纳米管类似, 理论上可以将  $\text{BC}_3$  纳米管看成是由单层  $\text{BC}_3$  平面卷曲而成, 采用一对整数  $(n, m)$  代表不同类型的纳米管, 其结构参数表达式与碳纳米管完全相同. 图 1 中  $\mathbf{T}$  为平移矢量,  $\mathbf{C}_h = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$  是手性矢量. 关于单壁碳纳

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: yfwang@nankai.edu.cn

米管的对称性以及声子谱已有较多的研究报道<sup>[21-26]</sup>,相应的研究碳纳米管性质的理论和实验方法均可用于  $BC_3$  纳米管的研究之中. 由于  $BC_3$  平面与石墨平面的对称性相同, 单壁碳纳米管的对称元素可能全部或部分保留于单壁  $BC_3$  纳米管中. 我们经过数值计算发现, 单壁  $BC_3$  纳米管的对称性与单壁碳纳米管的相同, 这一结论与文献<sup>[27]</sup>的结果一

致. 因此, 描述  $BC_3$  纳米管的空间群均为非点式空间群.  $(n, n)$  扶手椅型纳米管和  $(n, 0)$  锯齿型纳米管的对称点群为  $D_{2nh}$ , 手性纳米管的对称点群为  $D_N$ , 其中  $N = 2 \times (n^2 + m^2 + nm) / d_R$ ,  $d_R$  是  $2n + m$  和  $2m + n$  的最大公约数. 然而,  $BC_3$  纳米管原胞中包含的原子数是相应碳纳米管的 4 倍, 因此晶格振动模的数目将多于碳纳米管.

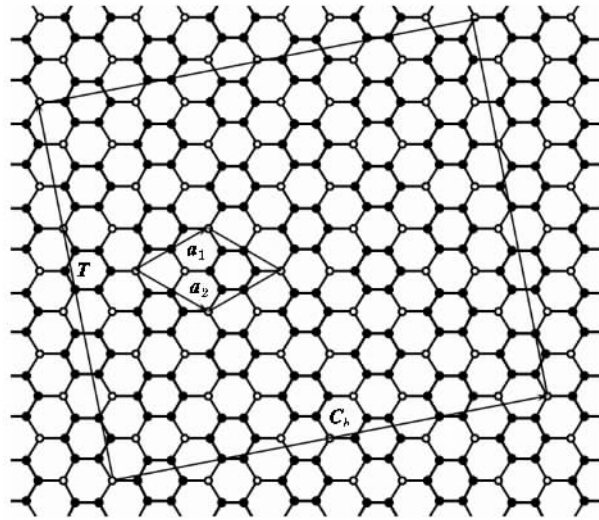


图1  $BC_3$  平面原子分布、基矢  $a_1, a_2$  和  $(4, 2)$  管单胞示意图  
○代表 B 原子, ●代表 C 原子

### 3. 单壁 $BC_3$ 纳米管的晶格动力学分析

#### 3.1. 晶格振动模的对称性分析

由于动量守恒的限制, 一阶拉曼光谱和红外光谱只涉及布里渊区  $\Gamma$  点附近的晶格振动模, 因此  $\Gamma$  点附近晶格振动模的对称性分类对理论分析和相关的实验研究非常重要. 可以采用因子群分析方法<sup>[28]</sup>获得各种类型的  $BC_3$  纳米管振动模的对称性. 对于扶手椅型、锯齿型和手性纳米管的振动模分别按照  $D_{2nh}$ ,  $D_{2nh}$  和  $D_N$  点群的不可约表示进行分类. 虽然单壁  $BC_3$  纳米管的结构对称性与单壁碳纳米管的对称性相同, 由于原胞内原子数目和种类不同, 必将导致振动模总数以及拉曼活性模和红外活性模数目不同.

我们对  $BC_3$  纳米管布里渊区中心  $\Gamma$  点晶格振动模进行了分类.  $(n, n)$  扶手椅型纳米管单胞中包含的原子数为  $16n$ , 共计  $48n$  个振动模. 当  $n$  为偶数时,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{arm}}^{\text{vib}} = & 7A_{1g} + 5A_{1u} + 7A_{2g} + 5A_{2u} + 5B_{1g} \\ & + 7B_{1u} + 5B_{2g} + 7B_{2u} + 10E_{1g} \\ & + 14E_{1u} + 14E_{2g} + 10E_{2u} + \dots \\ & + 10E_{(n-1)g} + 14E_{(n-1)u}. \end{aligned}$$

当  $n$  为奇数时,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{arm}}^{\text{vib}} = & 7A_{1g} + 7A_{1u} + 7A_{2g} + 7A_{2u} + 5B_{1g} \\ & + 5B_{1u} + 5B_{2g} + 5B_{2u} + 10E_{1g} \\ & + 14E_{1u} + 14E_{2g} + 10E_{2u} + \dots \\ & + 14E_{(n-1)g} + 10E_{(n-1)u}. \end{aligned}$$

上述两式中扣除 3 个平移模  $A_{2u} + E_{1u}$  和 1 个绕管轴的转动模  $A_{2g}$  后, 其余的为光学模. 无论  $n$  为奇数还是偶数, 拉曼活性模和红外活性模的数目分别是 31 和 17. 对于  $(n, 0)$  锯齿型纳米管, 振动模的总数也为  $48n$ ,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{zigzag}}^{\text{vib}} = & 7A_{1g} + 5A_{1u} + 5A_{2g} + 7A_{2u} + 7B_{1g} \\ & + 5B_{1u} + 5B_{2g} + 7B_{2u} + 12E_{1g} \\ & + 12E_{1u} + 12E_{2g} + 12E_{2u} + \dots \\ & + 12E_{(n-1)g} + 12E_{(n-1)u}, \end{aligned}$$

其中三个声学模为  $A_{2u} + E_{1u}$ , 一个转动模为  $A_{2g}$ .

( $n, m$ )手性纳米管的单胞中包含  $8N$  个原子, 有  $24N$  个振动模,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{chiral}}^{\text{vib}} = & 12A_1 + 12A_2 + 12B_1 + 12B_2 \\ & + 24E_1 + 24E_2 + \dots + 12E_{N/2-1}. \end{aligned}$$

应扣除 3 个平移模  $A_2 + E_1$  和 1 个旋转模  $A_2$ . 表 1 列出了三种类型纳米管的拉曼活性振动模和红外活性振动模数目及对称性. 为了便于比较, 在表 1 中同时列出了单壁碳纳米管振动模的对称性分类结果. 从表 1 可以看出, 由于 BC<sub>3</sub> 纳米管原胞中的原子数较多, 因此拉曼活性模和红外活性模的数目明显多于单壁碳纳米管. 可以预计 BC<sub>3</sub> 纳米管的拉曼光谱可能更复杂.

3.2. 单壁 BC<sub>3</sub> 纳米管的声子色散关系

我们采用力常数卷曲法<sup>[18-21]</sup>计算了不同直径和手性的 BC<sub>3</sub> 纳米管声子色散关系. 通过拟合 BC<sub>3</sub> 二

维平面的声子色散谱获得 B-C 以及 C-C 之间的相互作用力常数. 表 2 给出了第一至第四近邻原子间的相互作用力常数<sup>[14]</sup>, 其中  $\phi_r$ ,  $\phi_{ii}$  和  $\phi_{io}$  分别表示面内伸缩、面内弯曲和面外弯曲力常数. 从文献 [14] 的图 1 可以看出, BC<sub>3</sub> 二维平面声子色散的理论计算值与实验观测值基本符合. 图 2 和图 3 给出了 (5, 5) 管和 (5, 0) 管的声子色散关系以及相应的态密度. (5, 5) 管和 (5, 0) 管的声子色散支的数目是 144, 其中非简并的 48 支, 简并的 96 支. 通过分析本征矢量, 我们可以获得各声子色散支的对称性等重要信息. 例如, 简并和非简并色散支的数目、布里渊区中心点拉曼活性振动模和红外活性振动模的数目以及对称性等. 数值计算结果与对称性分析一致, 从而验证了上述关于 BC<sub>3</sub> 纳米管对称性分析的结论. 对于单壁纳米管, 在布里渊区中心点存在如下四个频率为零的声学模: 非简并的纵声学模 (LA)、

表 1 单壁 BC<sub>3</sub> 和 C 纳米管拉曼活性振动模和红外活性振动模的对称性和数目

纳米管类型	拉曼活性模	红外活性模
扶手椅型 BC <sub>3</sub> 纳米管	$7A_{1g} + 10E_{1g} + 14E_{2g}$	$4A_{2u} + 13E_{1u}$
扶手椅型 C 纳米管	$2A_{1g} + 2E_{1g} + 4E_{2g}$	$3E_{1u}$
锯齿型 BC <sub>3</sub> 纳米管	$7A_{1g} + 12E_{1g} + 12E_{2g}$	$6A_{2u} + 11E_{1u}$
锯齿型 C 纳米管	$2A_{1g} + 3E_{1g} + 3E_{2g}$	$A_{2u} + 2E_{1u}$
手性 BC <sub>3</sub> 纳米管	$12A_1 + 23E_1 + 24E_2$	$11A_2 + 23E_1$
手性 C 纳米管	$3A_1 + 5E_1 + 6E_2$	$A_2 + 5E_1$

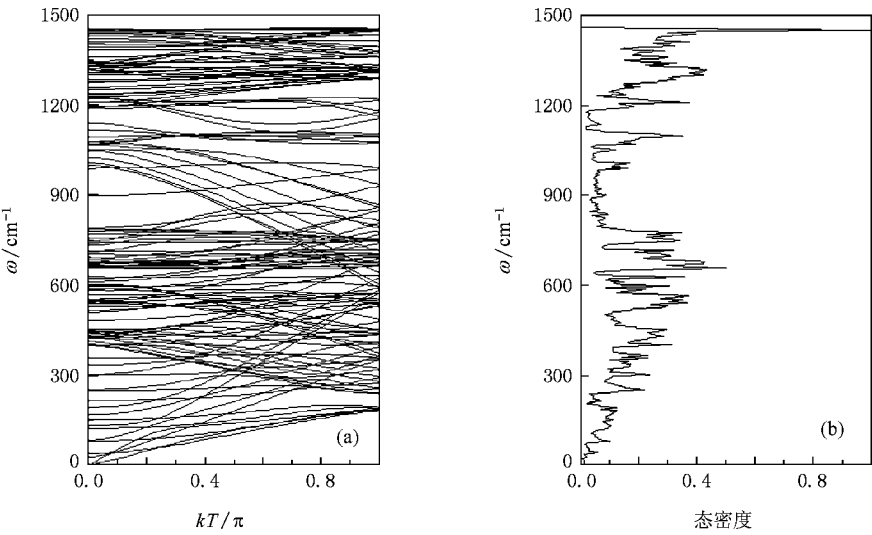


图 2 (5, 5) 扶手椅型纳米管声子色散关系和态密度曲线 (a) 色散曲线 (b) 态密度

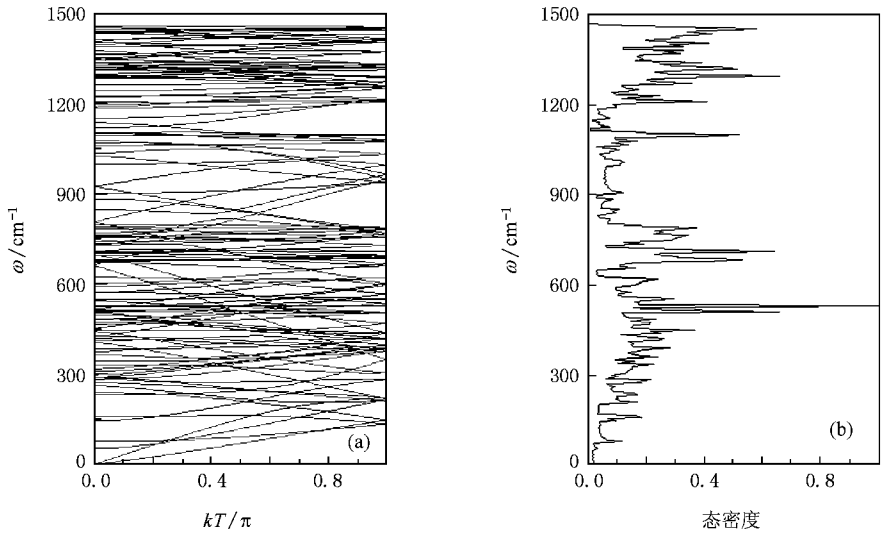


图 3 (5,0) 锯齿型纳米管声子色散关系和态密度曲线 (a) 色散曲线 (b) 态密度



双重简并的横声学模(TA)以及绕管轴的旋转模(TW).从图 2 和图 3 可以看出,在布里渊区中心点 LA 和 TA 模的频率为零,而 TW 模频率不为零.这主要是由于计算中所使用的力常数源于二维平面,没有考虑卷曲效应所产生的影响<sup>[18]</sup>,这种效应对于直径较小的纳米管尤其明显.按照文献<sup>[18,29]</sup>所给出的方法,可以对二维平面原子间的相互作用力常数进行修正,使得布里渊区中心点 TW 模的频率为零.

例如,考虑卷曲效应后(10,10)碳纳米管布里渊区  $\Gamma$  点 TW 模的频率由原先的  $6\text{ cm}^{-1}$  变为零,其他振动模的频率变化最大约为  $6\text{--}7\text{ cm}^{-1}$ .然而,这种修正对于直径较小的纳米管效果并不理想.例如,对于 LA 声子色散支,当波矢  $k$  较小时( $k < 0.1/T$ )频率为零.基于以上考虑,我们将表 2 所列的力常数直接用于  $\text{BC}_3$  纳米管的晶格动力学计算,没有对力常数进行相应的修正.

表 2  $\text{BC}_3$  二维平面原子间的相互作用力常数

近邻次序	$\phi_r/\text{N}\cdot\text{cm}^{-1}$	$\phi_{ii}/\text{N}\cdot\text{cm}^{-1}$	$\phi_{io}/\text{N}\cdot\text{cm}^{-1}$
第一近邻	$\phi_r^{\text{C-C}} = 3.20$	$\phi_{ii}^{\text{C-C}} = 2.30$	$\phi_{io}^{\text{C-C}} = 0.85$
	$\phi_r^{\text{B-C}} = 2.80$	$\phi_{ii}^{\text{B-C}} = 1.80$	$\phi_{io}^{\text{B-C}} = 0.58$
第二近邻	$\phi_r^{\text{C-C}} = 0.80$	$\phi_{ii}^{\text{C-C}} = -0.30$	$\phi_{io}^{\text{C-C}} = -0.03$
	$\phi_r^{\text{B-C}} = 0.50$	$\phi_{ii}^{\text{B-C}} = -0.35$	$\phi_{io}^{\text{B-C}} = -0.04$
	$\phi_r^{\text{C-C}} = 0.700$	$\phi_{ii}^{\text{C-C}} = -0.280$	$\phi_{io}^{\text{C-C}} = -0.025$
第三近邻	$\phi_r^{\text{C-C}} = 0.25$	$\phi_{ii}^{\text{C-C}} = -0.50$	$\phi_{io}^{\text{C-C}} = 0.03$
	$\phi_r^{\text{B-B}} = 0.10$	$\phi_{ii}^{\text{B-B}} = -0.35$	$\phi_{io}^{\text{B-B}} = 0.07$
	$\phi_r^{\text{C-C}} = 0.20$	$\phi_{ii}^{\text{C-C}} = -0.45$	$\phi_{io}^{\text{C-C}} = 0.05$
第四近邻	$\phi_r^{\text{B-C}} = -0.180$	$\phi_{ii}^{\text{B-C}} = 0.100$	$\phi_{io}^{\text{B-C}} = -0.022$
	$\phi_r^{\text{C-C}} = -0.190$	$\phi_{ii}^{\text{C-C}} = 0.200$	$\phi_{io}^{\text{C-C}} = -0.055$

3.3. 振动频率与管径的关系

图 4 和图 5 给出了扶手椅型纳米管和手性纳米管红外活性振动模和拉曼活性振动模的频率与管径的关系,其中横坐标是振动模的频率,纵坐标是纳米管的直径(限于篇幅没有给出锯齿型纳米管的数

据).从图 3 和图 4 可以看出, $\text{BC}_3$  纳米管拉曼活性振动模和红外活性振动模的频率与管径的依赖关系比碳纳米管更加复杂.对于碳纳米管,高频区和中频区振动模的频率与管径的依赖关系不太明显,低频区振动模的频率随管径增大而减小.图 4 中较低频率区间( $\omega < 300\text{ cm}^{-1}$ )振动模的频率随管径  $d$  增加

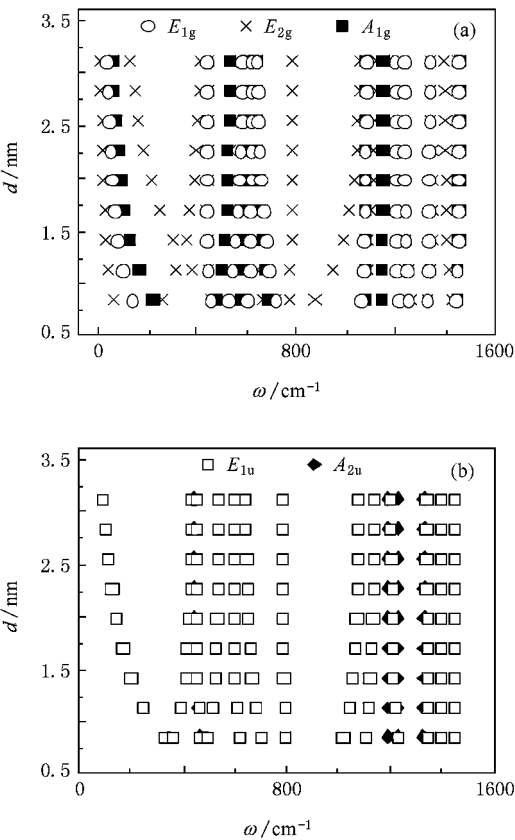


图4 扶手椅型纳米管拉曼活性模和红外活性模的频率与管径  $d$  的关系 (a)拉曼活性模 (b)红外活性模

而减小,呼吸模  $A_{1g}$  和  $E_{2g}$  模对直径的依赖比较明显. 振动模的频率与管径成反比,呼吸模的频率  $\omega$  与管径  $d$  的关系为  $\omega = 189/d$ ;  $E_{2g}$  模振动频率随管径的变化比较明显. 无论是在低频区还是高频区,对于红外活性模,只有低频区  $E_{1u}$  模的频率对管径的变化较为敏感,其振动频率与管径  $d$  的关系近似为  $\omega = 273/d$  ( $\omega$  的单位为  $\text{cm}^{-1}$ ,  $d$  的单位为  $\text{nm}$ ). 据此可由红外光谱获得纳米管的结构参数.

对于锯齿型纳米管,拉曼活性振动模和红外活性振动模的频率与管径的关系与扶手椅型纳米管类似,这里不再赘述. 手性管原胞中包含的原子数较多,拉曼活性振动模和红外活性模的数目也有所增加. 尤其是在  $400\text{--}800\text{ cm}^{-1}$  和  $1200\text{--}1500\text{ cm}^{-1}$  区间,振动模比较集中. 可以预计  $\text{BC}_3$  纳米管的振动光谱可能更为复杂.

3.4. 拉曼活性模的振动模式

根据动力学矩阵的本征矢可以给出晶格振动模的振动示意图. 扶手椅型纳米管具有 31 个拉曼活性模,其中 6 个振动模的对称性与同类型单壁碳纳米管相同,如图 6 所示. 为了清楚地表明原胞中原子的振动方向,原胞中的原子沿径向分布开. 从图 6 可以看出,原胞中原子的位移方向或沿切向,或沿径向,

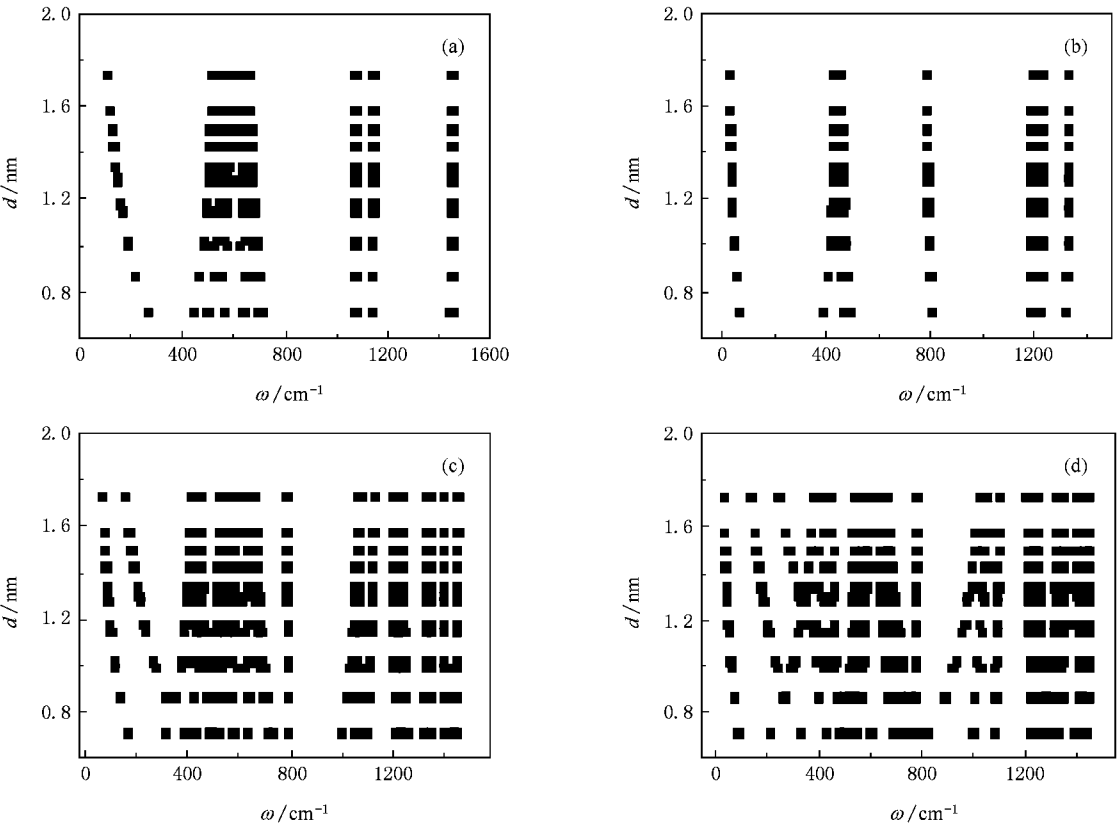


图5 手性纳米管拉曼活性振动模和红外活性振动模的频率与管径  $d$  的关系 (a) $A_1$  模 (b) $A_2$  模 (c) $E_1$  模 (d) $E_2$  模

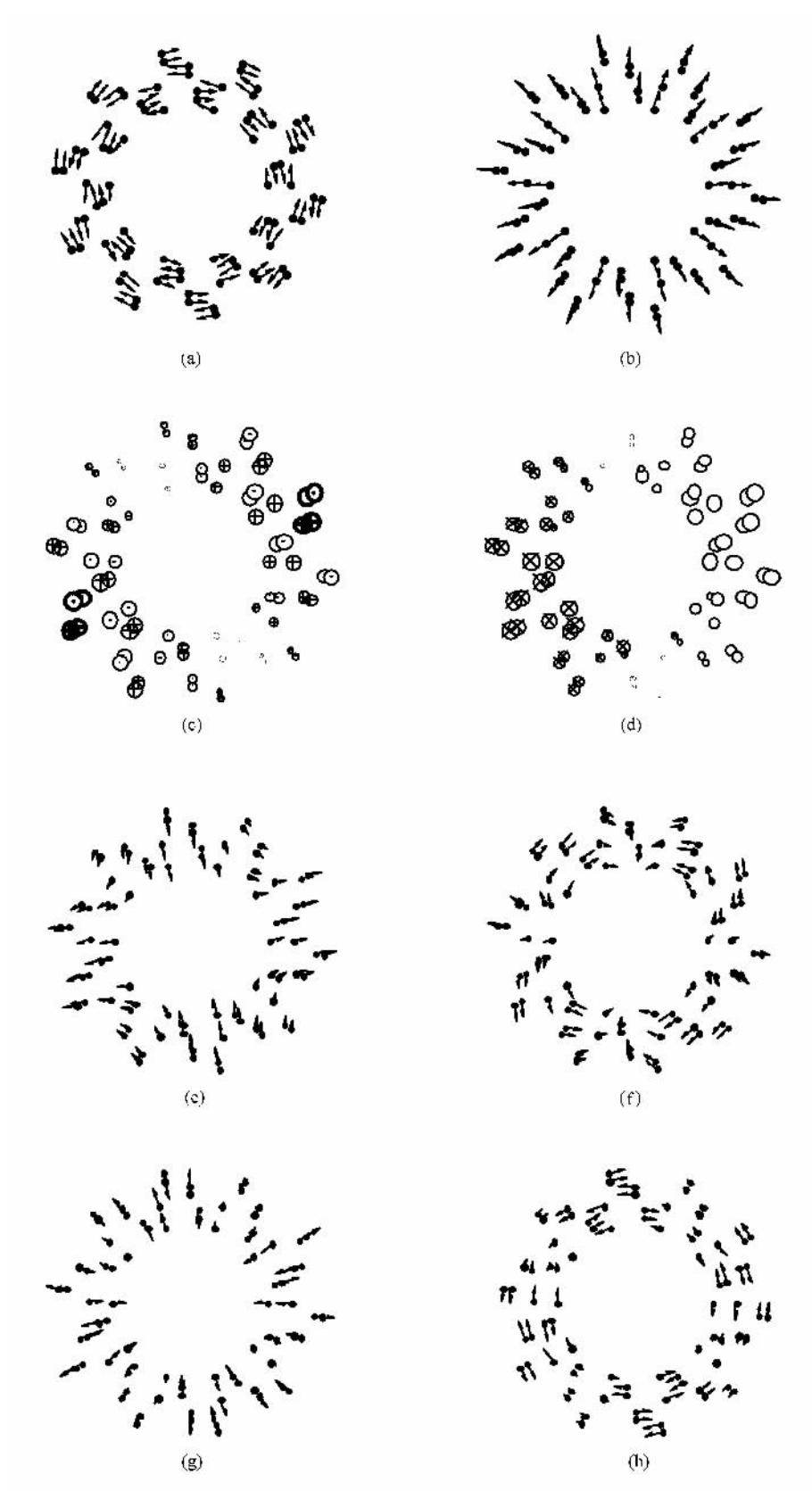


图 6 (5,5) 扶手椅型  $\text{BC}_3$  纳米管部分拉曼活性模的振动模式和振动频率 (a)  $A_{1g}$ ,  $1445 \text{ cm}^{-1}$ ; (b)  $A_{1g}$ ,  $133 \text{ cm}^{-1}$ ; (c)  $E_{1g}$ ,  $1443 \text{ cm}^{-1}$ ; (d)  $E_{1g}$ ,  $84 \text{ cm}^{-1}$ ; (e)  $E_{2g}$ ,  $40 \text{ cm}^{-1}$ ; (f)  $E_{2g}$ ,  $303 \text{ cm}^{-1}$ ; (g)  $E_{2g}$ ,  $780 \text{ cm}^{-1}$ ; (h)  $E_{2g}$ ,  $1450 \text{ cm}^{-1}$

或沿轴向.沿切向振动的  $E_{2g}$  模来源于  $BC_3$  平面的  $E_{2g}$  面内振动,振动频率为  $1448\text{ cm}^{-1}$ .对于  $BC_3$  纳米管的其他拉曼活性振动模,振动模式要复杂得多,原胞中部分原子是沿切向振动,部分原子沿轴向振动.

## 4. 结 论

本文分析了单壁  $BC_3$  纳米管的结构对称性和晶格振动模的对称性分类.对于单壁  $BC_3$  纳米管,其拉曼活性振动模和红外活性振动模的数目较多.力常

数的计算结果表明,某些振动模的频率与管径有明显的依赖关系,大多数的振动模频率基本不随管径变化, $E_2$  振动模的频率对管径的变化比较敏感.相对于碳纳米管而言, $BC_3$  纳米管的拉曼光谱可能要复杂些,将影响拉曼光谱在其结构表征方面的应用.但是,由于  $BC_3$  纳米管的带隙与管径基本无关,因而共振增强效应的影响较小.通过拉曼光谱和红外吸收光谱强度的计算,可更进一步促进振动光谱在  $BC_3$  纳米管结构表征中的应用.

[ 1 ] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56

[ 2 ] Chopra N G , Luyken J , Cherry K , Crespi V H , Cohen M L , Louie S G , Zettl A 1995 *Science* **269** 966

[ 3 ] Deepak F L , Govindaraj A , Rao C N R 2001 *J. Nanosci. Nanotechnol.* **1** 303

[ 4 ] He M Q , Minus I , Zhou P Z , Mohammed S N , Halpem J B , Jacobs R , Sarney W L , Salamance-Riba L , Vispute R D 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 3731

[ 5 ] WengSieh Z , Cherrey K , Chropa N G , Blase X , Miyamoto Y , Rubio A , Cohen M L , Louie S G , Zettl A , Gronsky R 1995 *Phys. Rev. B* **51** 11229

[ 6 ] Tenne R , Margulis L , Genut M , Hodes G 1992 *Nature* **360** 444

[ 7 ] Harris P J F 1999 *Carbon Nanotubes and Related Structures* ( Cambridge : Cambridge University Press )

[ 8 ] Nath M , Rao C N R 2002 *Angew. Chem.* **114** 3601

[ 9 ] Wu J J , Liu S C , Wu C T , Chen K H , Chen L C 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 1312

[ 10 ] Pu L , Bao X , Zou J P , Feng D 2001 *Angew. Chem.* **113** 1538

[ 11 ] Rao C N R , Govindaraj A , Deepak F L , Gunari N A , Nath M 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 1853

[ 12 ] Chen S C , Chen I Y , Ho Y H , Lin M F 2006 *J. Vac. Sci. Technol. B* **24** 46

[ 13 ] Miyamoto Y , Rubio A , Cohen M L , Louie S G 1994 *Phys. Rev. B* **50** 4977

[ 14 ] Guo Z X , Xiao Y , Ding J W , Yan Y H 2006 *Phys. Rev. B* **73** 045405

[ 15 ] Pan H , Feng Y P , Lin J Y 2006 *Phys. Rev. B* **73** 035420

[ 16 ] Hu Q K , Wu Q H , Ma Y M , Zhang L J , Liu Z Y , He J L , Sun H , Wang H T , Tian Y J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 214116

[ 17 ] Xiao Y , Yan X Y , Cao J X , Mao Y L , Xiang J 2004 *Chin. Phys.* **13** 1526

[ 18 ] Saito R , Dresselhaus G , Dresselhaus M S 1998 *Physical Properties of Carbon Nanotubes* ( London : Imperial College Press ) p35

[ 19 ] Tománek D , Wentzcovitch R M , Louie S G , Cohen M L 1988 *Phys. Rev. B* **37** 3134

[ 20 ] Miyamoto Y , Rubio A , Louie S G , Cohen M L 1994 *Phys. Rev. B* **50** 18360

[ 21 ] Zhang B , Wang Y F , Jin Q H , Li B H , Ding D T 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1325 ( in Chinese ) [ 张 滨、王玉芳、金庆华、李宝会、丁大同 2005 物理学报 **54** 1325 ]

[ 22 ] Wu Y Z , Wang Y F , Jin Q H , Ding D T , Lan G X 2003 *J. Light Scatt.* **15** 284 ( in Chinese ) [ 吴延昭、王玉芳、金庆华、丁大同、蓝国祥 2003 光散射学报 **15** 284 ]

[ 23 ] Zhang H P , Jin Q H , Wang Y F , Li B H , Ding D T 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4279 ( in Chinese ) [ 张慧鹏、金庆华、王玉芳、李宝会、丁大同 2005 物理学报 **54** 4279 ]

[ 24 ] Peng Y J , Zhang H P , Jin Q H , Wang Y F , Li B H , Ding D T 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2860 ( in Chinese ) [ 彭永进、张慧鹏、金庆华、王玉芳、李宝会、丁大同 2006 物理学报 **55** 2860 ]

[ 25 ] Xiao Y , Yan X H , Cao J X , Ding J W 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1720 ( in Chinese ) [ 肖 杨、颜晓红、曹觉先、丁建文 2003 物理学报 **52** 1720 ]

[ 26 ] Li H N , Xu Y B , Li H Y , He P M , Bao S N 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 273 ( in Chinese ) [ 李宏年、徐亚伯、李海洋、何丕模、鲍世宁 1999 物理学报 **48** 273 ]

[ 27 ] Damnjanović M , Vuković T , Milošević I , Nilolić B 2001 *Acta Cryst.* **A 57** 304

[ 28 ] Zhang G Y , Lan G X , Wang Y F 2001 *Lattice Vibration Spectroscopy* ( Beijing : Higher Education Press ) p232 ( in Chinese ) [ 张光寅、蓝国祥、王玉芳 2001 晶格振动光谱学 ( 北京 : 高等教育出版社 ) 第 232 页 ]

[ 29 ] Dobardzic E , Milosevic I , Nilolić B , Vukovic T , Damnjanović M 2003 *Phys. Rev. B* **68** 045408

# Lattice dynamics of single wall BC<sub>3</sub> nanotubes

Wang Hui   Feng Min   Cao Xue-Wei   Wang Yu-Fang<sup>†</sup>   Jin Qing-Hua

Ding Da-Tong   Lan Guo-Xiang

( *Institute of Physics , Nankai University , Tianjin 300071 , China* )

( Received 1 August 2007 ; revised manuscript received 2 April 2008 )

## Abstract

The structures of single wall BC<sub>3</sub> nanotubes are described in the present paper. The symmetry and lattice dynamics of single wall BC<sub>3</sub> nanotubes are analyzed in detail. Based on the force constant model we calculate the phonon dispersion relations of single wall BC<sub>3</sub> nanotubes with different diameters and chiralities. For Raman and infrared active modes , the diameter-dependence of vibrational frequency has been established. It can be inferred that the Raman and infrared spectra of BC<sub>3</sub> nanotubes would be more complex than those of single carbon nanotubes .

**Keywords :** BC<sub>3</sub> nanotubes , phonon dispersion relation , lattice dynamics

**PACC :** 6146 , 6320D

---

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : yfwang@nankai.edu.cn