

ジグザグ炭素ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップ振動と

Stone-Wales 欠陥

(明治薬大) ○溝口 則幸

序論

炭素ナノチューブにおける欠陥は炭素ナノチューブの物理的な性質(電子的性質、力学的強度、光学的性質)に大きな影響を与える。欠陥には空孔、Stone-Wales 欠陥、水素原子やフッ素原子などのヘテロ原子がある。これらの欠陥は成長の途中に生じたり、化学的処理や力学的変形などによっても生じる。

欠陥のないジグザグ炭素ナノチューブは、その HOMO-LUMO ギャップが筒の円周上のベンゼン環の数の増大と共に周期 2 で振動することが知られている。本研究では、半経験的方法の一つである PM3 を用いて、Stone-Wales 欠陥が $(n,0)_m$ ジグザグ炭素ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップの振動にどのような影響を与えるのかを理論的に検討した。ここで、 m は六員環の層の数を表す。

Stone-Wales 欠陥とは六員環の一つの結合が 90 度回転して、4 つの六員環が二つの七員環と二つの五員環となるものである。ジグザグ炭素ナノチューブにおける Stone-Wales 欠陥には図 1 に示す二種類の配置 H 型と V 型がある。

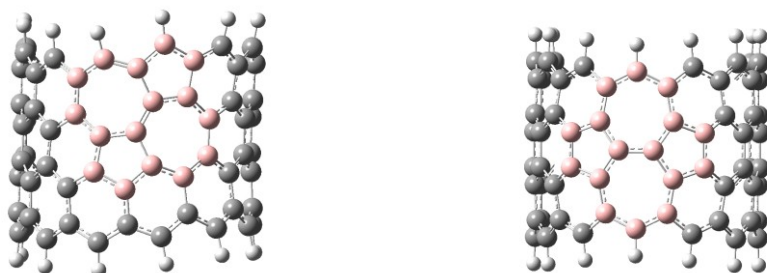


図 1 $(n,0)_3$ ジグザグ炭素ナノチューブにおける Stone-Wales 欠陥の二つの配置 H 型と V 型

不安定性

H 型であるか V 型であるかによらず Stone-Wales 欠陥をもつジグザグ炭素ナノチューブは欠陥をもたないジグザグ炭素ナノチューブよりも、エネルギーが高く、より不安定である。不安定化の度合は Stone-Wales 欠陥の配置により異なり、V 型の方が H 型よりも、不安定化が大きい。この結果はナノチューブの長さ m に依らない。その一例として、 $(n,0)_3$ ジグザグ炭素ナノチューブのエネルギーを図 2 に示した。

HOMO-LUMO ギャップの振動

H 型であるか V 型であるかによらず Stone-Wales 欠陥をもつジグザグ炭素ナノチューブ HOMO-LUMO ギャップは欠陥をもたないジグザグ炭素ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップと同じように、筒の円周上のベンゼン環の数 n の増大と共に周期 2 で振動する。しかし、Stone-Wales 欠陥の存在は HOMO-LUMO ギャップの大きさに影響を与え、その影響の大きさ

は Stone-Wales 欠陥の配置により異なる。H 型の Stone-Wales 欠陥の HOMO-LUMO ギャップの大きさへの影響は無視できるほど小さい、つまり、H 型の Stone-Wales 欠陥は HOMO-LUMO ギャップの大きさに影響を与えない。一方、V 型の場合には、HOMO-LUMO ギャップは欠陥のないジグザグ炭素ナノチューブのそれよりも広くなる。その一例として、 $(n,0)_3$ ジグザグ炭素ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップを図 3 に示した。

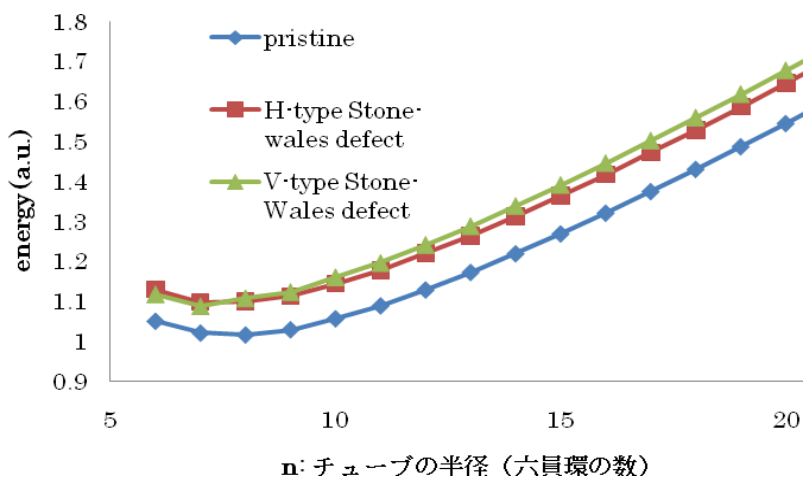


図 2 Stone-Wales 欠陥をもつ $(n,0)_3$ ジグザグ炭素ナノチューブのエネルギー

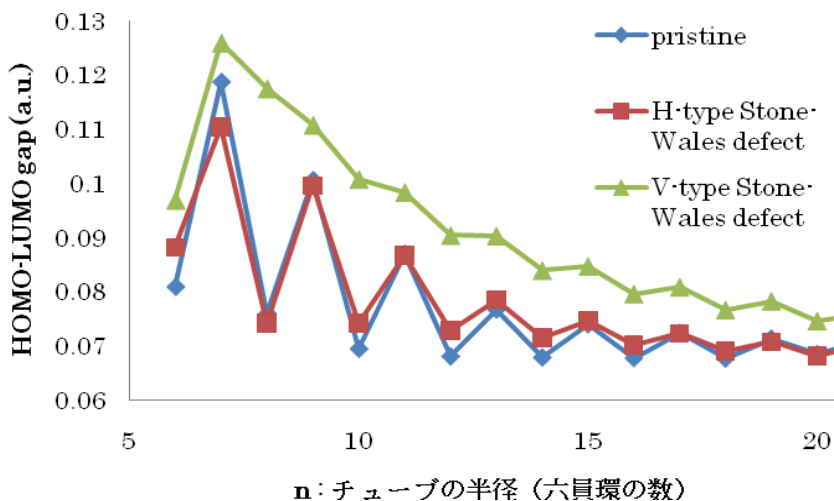


図 3 Stone-Wales 欠陥をもつ $(n,0)_3$ ジグザグ炭素ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップ

結論

Stone-Wales 欠陥の導入により、ジグザグ炭素ナノチューブは不安定化される。対称性の低下にもかかわらず、Stone-Wales 欠陥をもつ $(n,0)_3$ ジグザグ炭素ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップは筒の円周上のベンゼン環の数 n の増大と共に周期 2 で振動する。しかし、V 型の Stone-Wales 欠陥の導入は、エネルギーを増加させるにもかかわらず、欠陥のないジグザグ炭素ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップを広げ、化学的反応性を小さくする。