

## 有限長 pentaheptite ナノチューブの量子化学的研究

(明治薬大) 溝口 則幸

## Quantum Chemical Study of Finite-length Pentaheptite Nanotubes

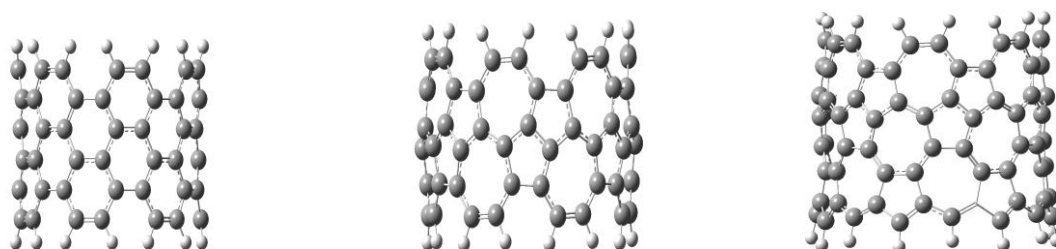
(Meiji Pharmaceutical University) Noriyuki Mizoguchi

## 1 序論

有限長のアームチェア炭素ナノチューブにおける HOMO-LUMO ギャップは、6員環の層の数(ナノチューブの長さ)の増大と共に周期 3 で振動することが知られている。我々は、先に、符号を考慮したケクレ構造の総数(ASC)を使って、アームチェア炭素ナノチューブは 6 員環の層の数の増大と共に周期 3 で非結合分子軌道を持つことを示し、これが HOMO-LUMO ギャップの振動が生じる原因であるあることを示した。[1] 炭素ナノチューブのすべての 6 員環を 5 員環と 7 員環で置き換えたナノチューブは pentaheptite ナノチューブといわれる。π電子の 6 員環のネットワークから、5 員環と 7 員環のネットワークへの変換が、有限長のナノチューブの HOMO-LUMO ギャップの振動にどのような影響を与えるかは興味ある問題である。ここでは、ナノチューブの長さを伸ばしたときに、pentaheptite ナノチューブの電子状態がどのように変化するかを調べた。計算には半経験的方法の一つである PM3 を用いて、制限無しの構造最適化を行った。

2 (7,7)<sub>m</sub> pentaheptite ナノチューブの HOMO、LUMO、HOMO-LUMO ギャップ

図 1 に(7,7)<sub>2</sub>アームチェア炭素ナノチューブと(7,7)<sub>2</sub>と(7,7)<sub>3</sub> pentaheptite ナノチューブを示した。ここで、(7,7)<sub>m</sub> の添え字 m は六員環の層の数(ナノチューブの長さ)を表す。pentaheptite ナノチューブの端はアームチェア型とジグザグ型の 2 種類がある。図 1 に示した pentaheptite ナノチューブの一つの端は常にアームチェアであり、もう一方の端は層の数 m が偶数のときは、アームチェアとなり、層の数 m が奇数のときは、ジグザグとなる。

図 1 (7,7)<sub>2</sub>アームチェア炭素ナノチューブと(7,7)<sub>2</sub>と(7,7)<sub>3</sub> pentaheptite ナノチューブ

5 員環と 7 員環の導入はナノチューブを不安定化させると予想される。実際、筒の長さにかかわらず、pentaheptite ナノチューブのエネルギーの計算値は対応するナノチューブのエネルギーの計算値よりも高い。つまり、pentaheptite ナノチューブは対応するナノチューブよりもエネルギー的に不安定であることがわかった。

図 2 に(7,7)<sub>m</sub> pentaheptite ナノチューブの HOMO と LUMO ののエネルギーのチューブ長依存性を

示した。(7,7)<sub>m</sub> pentaheptite ナノチューブの HOMO のエネルギーは長さの増大と共に、周期 2 で振動しながら、増大する。(7,7)<sub>m</sub> pentaheptite ナノチューブの LUMO のエネルギーは周期 2 で振動しながら、減少している。HOMO のエネルギーは層の数  $m$  が偶数のときは、より低い値をとり、層の数  $m$  が奇数のときは、より高い値をとる。ジグザグ型エッジを持つグラフェンやナノチューブの HOMO のエネルギーはより高くなることが知られている (エッジにより効果)。上にみた HOMO のエネルギーの周期 2 の振動は、pentaheptite ナノチューブにおけるエッジ効果によるものであると説明できる。一方、LUMO のエネルギーは層の数  $m$  が偶数のときは、より低い値をとり、層の数  $m$  が奇数のときは、より高い値をとる。

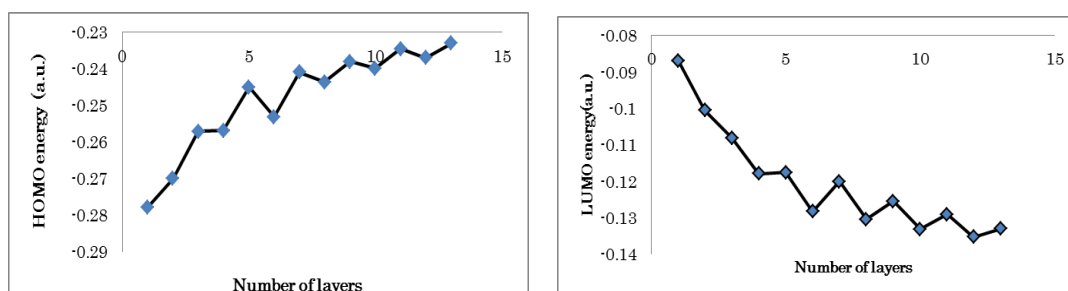


図 2 (7,7)<sub>m</sub> pentaheptite ナノチューブの HOMO と LUMO のエネルギーのチューブ長依存性

図 3 に(7,7)<sub>m</sub> pentaheptite ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップのチューブ長依存性を示した。

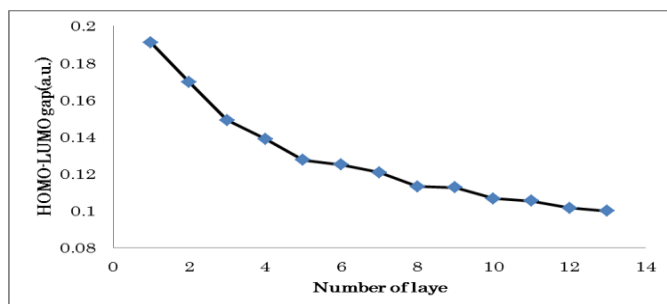


図 3 (7,7)<sub>m</sub> pentaheptite ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップのチューブ長依存性

(7,7)<sub>m</sub> pentaheptite 型ナノチューブの HOMO-LUMO ギャップはチューブの層の数 (長さ) の増加と共に、非常に小さな振幅であるが周期 2 で振動しながら、減少している。この振幅の減少は奇数員環の導入により、分子軌道に対する対定理が成り立たないことによるものである。