

カーボンナノチューブ内部における電場と磁場の遮蔽効果

○三宅 伸尚¹、波田 雅彦^{1,2}

¹ 首都大学東京(〒192-0397 東京都八王子市南大沢 1-1)

² 科学技術振興機構(〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

【緒言】

金属内包フラーレン内包カーボンナノチューブ[1]やカーボンナノチューブ内部におけるアイスナノチューブの発見[2]など、カーボンナノチューブの内部に他の分子をドープする研究は盛んに行われている。しかし、カーボンナノチューブ内部の物理化学的性質についての研究例は多くない。そこで、本研究ではカーボンナノチューブ内部における電場および磁場の遮蔽効果に注目し、その電子状態との関連を検討した。

【方法】

本研究では、カイラルベクトルが (n,n) [$n=7,8,9$]の単層カーボンナノチューブ(SWCNT)について、RHF/STO-3G法を用いて、0.01a.u.の外部静電場を y 軸方向にかけた時のチューブ内部の電場強度および、NICS[3]の計算を行った。

【結果】

図2に誘起された電場強度を示す。これらは図1のようにSWCNTの中心を原点とした時の y 軸上の値である。図3に y 軸上の各点における (n,n) [$n=7,8,9$] SWCNTの磁気遮蔽定数

(NICSに負の符号をつけたもの)を示す。図2から、SWCNTに外部静電場を加えるとチューブ上で電荷の移動が起こり、チューブ内部の電場を遮蔽することが分かる。図3から、チューブ内部では均一な磁場の遮蔽が起こり、外部での遮蔽は速やかに0に近づくことが分かった。また、当日は、SWCNT内部の磁場遮蔽とチューブ上の π 電子系に生じる環電流の効果についても検討する。

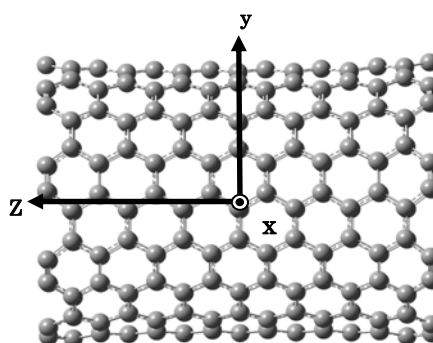


図1. 計算に用いた(9,9) SWCNT

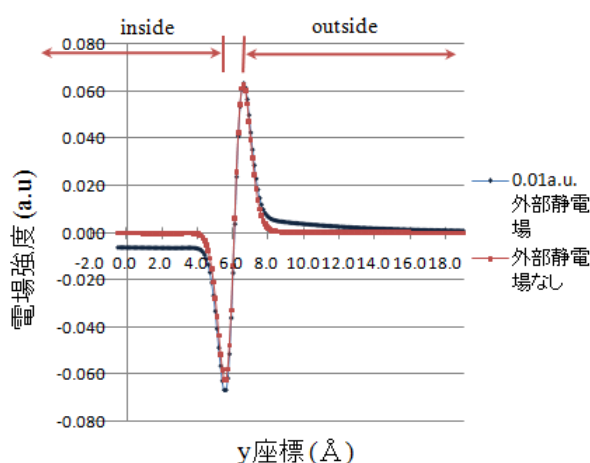


図2. (9,9) SWCNTの分子内電場

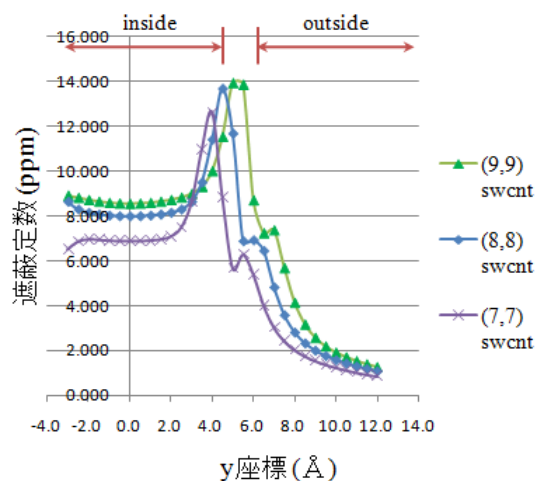


図3. (n,n) [$n=7,8,9$] SWCNTの-NICS

【参考文献】

1. B. W. Smith, M. Monthieux and D.E. Luzzi. *Nature (London)* **396** (1998), p. 323
2. Y. Maniwa et al., *J. Phys. Soc. Jpn.*, 71, 2863-2866 (2002).
3. P. v. R. Schleyer, C. Maerker, A. Dransfeld, H. Jial, N. J. R. van Eikema Hommes, *J. Am. Chem. Soc.*