

有限長アームチェアナノチューブのNBMOの組み立てと

HOMO-LUMOギャップ振動

○溝口 則幸

明治薬科大学 薬学教育研究センター

(〒204-8588 東京都清瀬市野塩 2-522-1)

1 序論

非結合性分子軌道(NBMO)は共役化合物の電子状態の研究において重要な量である。アームチェアナノチューブは長さが増大すると共に、周期3でHOMO-LUMOギャップが振動することが知られている。このHOMO-LUMOギャップの振動はNBMOが周期3で出現することによるものである。HMOレベルにおいて、sum ruleを使うことにより、計算なしに、NBMOの各サイトにおける係数を組み立てられる。ここでは、sum ruleを用いて、有限長 $(n,n)_L$ アームチェアナノチューブのNBMOを組み立てる。ここで、添え字Lはチューブの長さ（ベンゼンベルトの数）を表す。

2 アームチェアナノチューブのNBMOの組み立て

HMOレベルにおいて、sum ruleを使うことにより、有限長 $(n,n)_L$ アームチェアナノチューブのNBMOの各サイトにおける係数を組み立てる。sum ruleによると、点jにおけるNBMOの係数は次の式を満たす。

$$\sum_{j \rightarrow k} C_{0j} A_{jk} = 0 \quad (1)$$

ここで、行列Aは隣接行列であり、和は点jに隣接しているすべての点kについてとる。

図1に示した $(1,1)_1$, $(1,1)_2$, $(1,1)_3$ アームチェアナノチューブに式(1)を適用する。Lが1,2のときは、式(1)をみたす係数は得られなかった。つまり、これらのアームチェアナノチューブはNBMOを持たない。Lが3のときは、式(1)をみたすNBMOの係数が得られた。このNBMOを図1に示した。しかし、MOは規格化していない。

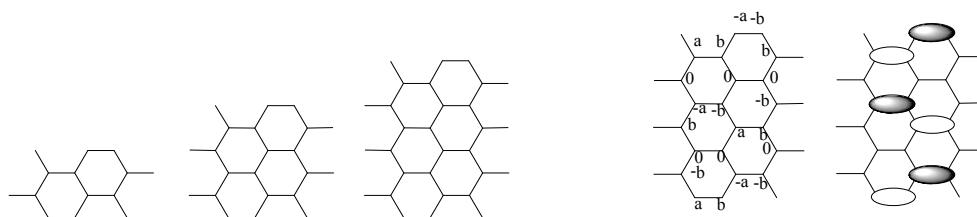


図1 $(1,1)_1$, $(1,1)_2$, $(1,1)_3$ アームチェアナノチューブと $(1,1)_3$ アームチェアナノチューブのNBMO

同様にして求めた、 $(1,1)_6$ と $(2,2)_6$ アームチェアナノチューブのNBMOを図2に示した。図2からわかるように、ナノチューブの周囲の長さに依らず、チューブの長さLが3の倍数のときは、NBMOが得られた。これらのNBMOの係数は図1に示した $(1,1)_3$ アームチェアナノチューブのNBMOの図を単位として、これらの繰り返したものである。同様にして、 $(1,1)_3$ アームチェアナノチューブのNBMOの図を単位にして、任意の長さや直径を持つ $(n,n)_{L=3k}$ アームチェアナノチューブのNBMOを得ることができる。ただし、長さについては、 $L=3k$ の条件を満たすものである。

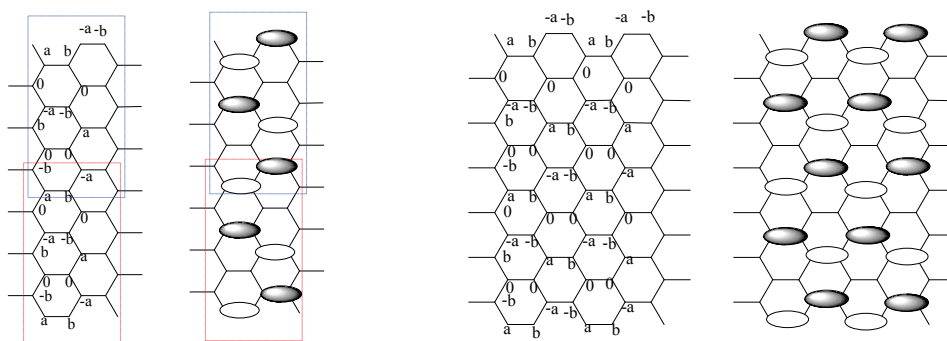


図2 $(1,1)_6$ と $(2,2)_6$ アームチェアナノチューブのNBMO

上で考えたアームチェアナノチューブは長さが同一のものであったが、長さが同一ではないアームチェアナノチューブもある。このようなアームチェアナノチューブを $(n,n)_{LB}$ と表すことにする。例えば、図3に示したアームチェアナノチューブは $(1,1)_{1B}$ 、 $(1,1)_{4B}$ となる。式(1)を使って得られた $(1,1)_{1B}$ アームチェアナノチューブのNBMOを図3に示した。 $(1,1)_{4B}$ アームチェアナノチューブのNBMOは $(1,1)_{1B}$ アームチェアナノチューブのNBMOの図に図1に示した $(1,1)_3$ アームチェアナノチューブのNBMOの図を付け加えたものになっている。このようにして、図1に示した $(1,1)_3$ アームチェアナノチューブのNBMOの図を付け加えていくことにより、任意の長さや直径を持つ $(n,n)_{L=3k+1B}$ アームチェアナノチューブのNBMOを得ることができる。ただし、長さについては、 $L=3k+1$ の条件を満たすものである。

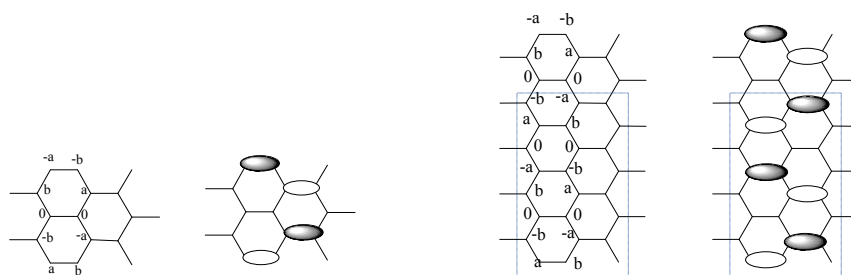


図3 $(1,1)_{1B}$ 、 $(1,1)_{4B}$ アームチェアナノチューブのNBMO

3 アームチェアナノチューブのHOMO-LUMOギャップ振動

アームチェアナノチューブのNBMOは二重に縮退しているので、NBMOを持つアームチェアナノチューブのHOMO-LUMOギャップは0になる。したがって、上で得た結果は有限長 $(n,n)_L$ アームチェアナノチューブのHOMO-LUMOギャップがナノチューブの長さの増大と共に、周期3で振動することを説明するものである。