

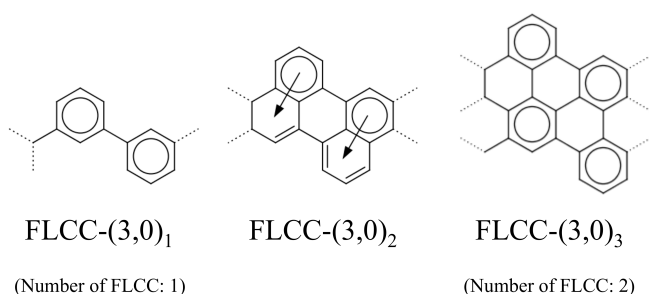
## ジグザグ型 CNT の電子構造のチューブ長依存性とチューブ径依存性

○森川 大<sup>1</sup>、野村 泰志<sup>1</sup>、溝口 則幸<sup>2</sup><sup>1</sup>信州大学 繊維学部 (〒386-8567 上田市常田 3-15-1)<sup>2</sup>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)

## 【緒言】

有限の長さを持つアームチェア型のカーボンナノチューブ (carbon nanotube: CNT) は、その長さの増大に伴って、HOMO-LUMO gap [1]や NBMO の有無[2]が周期的に変化する事が知られている。我々は以前、このアームチェア型 CNT のチューブ長依存性について、トポロジカル共鳴エネルギー (topological resonance energy: TRE) [3]と符号付きケクレ構造の代数和 (algebraic structure count: ASC) [4]を用いてその熱力学的安定と化学的安定性を調べる事で、HOMO-LUMO gap に見いだされていた周期3の変化が TRE にも存在する事、その周期的な振動は ASC が周期3で0となることによるものである事を示した[5]。

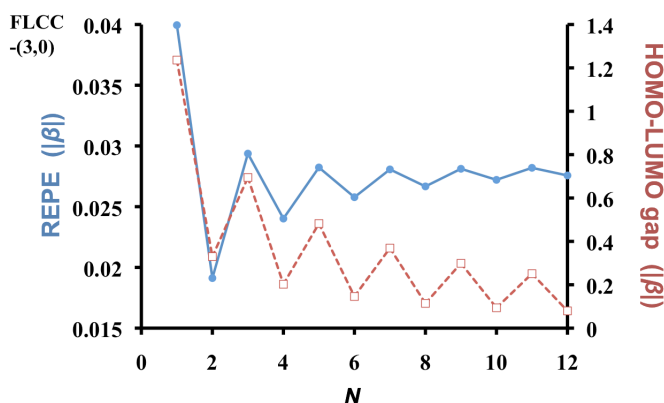
この ASC が 0 となる構造の出現はエッジ形状に由来するものであり、さらにそれは Clar 構造の周期的な変化とも対応している。そこで本研究では、Clar 構造を有する Finite-length Clar cell (FLCC) [6]を持つジグザグ CNT を用いて、そこに同様のチューブ長依存性が存在するかを TRE、HOMO-LUMO gap、ASC を用いて検討する。さらに、FLCC を持つジグザグ型 CNT においては、chiral-indices によって Clar 構造も変化するため、チューブ径依存性についても合わせて検討する。なお、異なる分子間の比較の為に、TRE の指標としては  $\pi$  電子一個あたりの TRE である REPE を、ASC の指標としては全 Kekulé 構造数に対する正の Kekulé 構造の割合である  $K(+)/SC$  を用いた。計算対象には  $(3,0)_N \sim (5,0)_N$  CNT を用いた ( $N$  は層の数)。 $N=1\sim 3$  までの FLCC- $(3,0)_N$  CNT を Fig. 1 に示す。

Figure 1. FLCC- $(3,0)_{N=1-3}$  CNT. (Opened-up cube)

## 【結果】

$N=12$  までの FLCC- $(3,0)_N$  CNT の REPE 及び HOMO-LUMO gap (ヒュッケル MO レベル)の結果を Fig. 2 に示す。双方共にチューブ長の増加に伴い周期2で振動が見られた。この振動は、 $N$  が偶数となる際に熱力学的、化学的安定性の低下が生じる事を意味する。さらに、ASC もその低下に合わせて振動するという結果が得られた。この結果は FLCC- $(6,0)_N$  CNT についても同様であった。

これに対し FLCC- $(4,0)_N$ ,  $(5,0)_N$  CNT においては HOMO-LUMO gap や ASC に周期的な振動は見られず、さらに  $ASC=SC$  となる事も分かった。より詳しい結果については当日報告する。

Figure 2. REPE and HOMO-LUMO gap of FLCC- $(3,0)_N$  CNT

## 参考文献

- [1] Y. Matsuo, K. Tahara, E. Nakamura, *Organic Letters* **5**, 3181, (2003).
- [2] 溝口則幸, 日本コンピュータ化学会 2013 年秋季年会 要項集, 2P27, (2013).
- [3] J. Aihara, *J. Am. Chem. Soc.* **98**, 2750, (1976).
- [4] C. F. Wilcox, Jr., *J. Am. Chem. Soc.* **91**, 2732, (1969).
- [5] D. Morikawa, Y. Nomura, N. Mizoguchi, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **13**, 293, (2014).
- [6] M. Baldoni, A. Sgamellotti, F. Mercuri, *Organic Letters* **9**, 4267-4270, (2007).