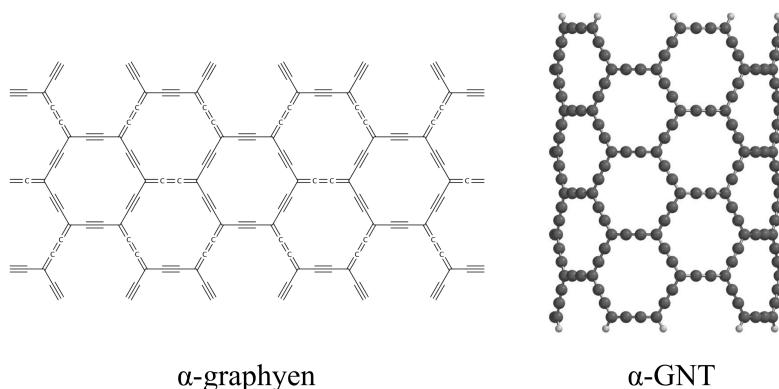


Armchair α -graphyne nanotube の HOMO-LUMO gap のチューブ長依存性○森川 大¹、野村 泰志¹、溝口 則幸²¹信州大学 繊維学部 (〒386-8567 上田市常田 3-15-1)²明治薬科大学 薬学教育研究センター (〒204-8588 東京都清瀬市野塩 2-522-1)

【緒言】

Grahyne は graphene の炭素結合間にアセチレン構造を組み込んだ炭素の同素体の一つであり、この Grahyne シートを carbon nanotube (CNT) と同様に円筒状に巻く事で得られるナノチューブを Grahyne nanotube (GNT) と呼ぶ[1]。この graphyne の内、graphene の全ての炭素結合間にアセチレン構造を組み込んだものを α -graphyne、 α -graphyne をベースとしたナノチューブを α -GNT と呼ぶ (Fig. 1)。この α -GNT は CNT に最も近い構造をしており、対応する CNT と等しいケクレ構造数、及び algebraic structure count (ASC) を持つ。この事は、有限長のアームチェア型 α -GNT の HOMO-LUMO gap が、アームチェア型 CNT と同様のチューブ長依存性[2]を持つ事を示唆している。そこで本研究では、量子化学計算を用いてアームチェア型 α -GNT の HOMO-LUMO gap のチューブ長依存性を検討した。

Figure 1. α -graphyne and (5,5) α -GNT ($C_{300}H_{20}$)

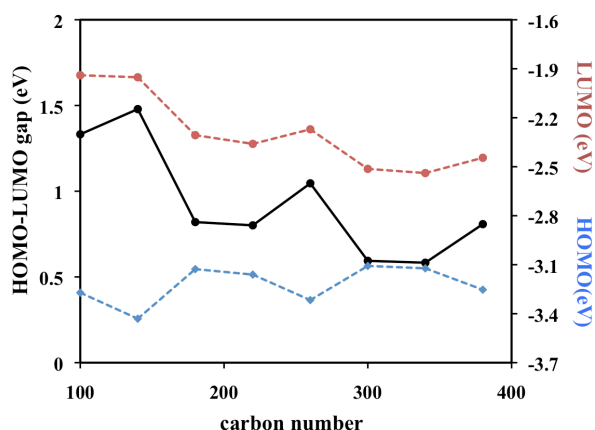
【計算】

計算はヒュッケル MO 法および DFT 法を、計算対象には (4,4) ~ (6,6) α -GNT を用いた。DFT 法は Gaussian09 を用い、B3LYP/STO-3G レベルで構造最適化、及びエネルギー計算を行った。

【結果】

(5,5) α -GNT の HOMO、LUMO エネルギー、及び HOMO-LUMO gap の結果を Fig. 2 に示す。チューブ長の延伸に伴い HOMO-LUMO gap に周期的振動が生じている事が分かる。同様の結果はヒュッケル MO 法での計算においても見られた。

ただし、周期 3 で HOMO-LUMO gap が低下する事によって周期的振動が生じるアームチェア型 CNT と異なり、 α -GNT の振動は周期 3 で HOMO-LUMO gap が増加する事によって生じる事もまた示された。さらにこの結果は、ヒュッケル MO 法によって得られた振動とも異なるものでもあった。

Figure 2. HOMO/LUMO energy and HOMO-LUMO gap of (5,5) α -GNT. (B3LYP/STO-3G)

参考文献

- [1] V. R. Coluci, et al., *Phys. Rev. B* **68**, 035430, (2003).
 [2] Y. Matsuo, K. Tahara, E. Nakamura, *Org. Lett.* **5**, 3181, (2003).