

「多角柱型炭素構造の反応経路と安定性」
 ○大野公一、佐藤寛子、岩本武明、時子山宏明、山門英雄
 量子化学探索研、国立情報研、東北大、和歌山大

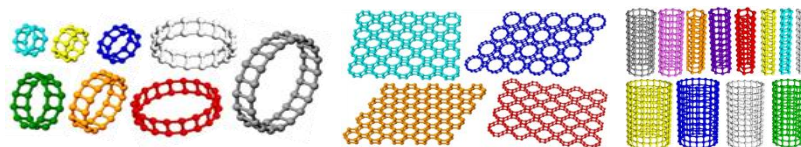
炭素は、古くから黒鉛やダイヤモンドが知られ、さらに近年フラーレンやカーボンナノチューブ (CNT) が加わり、炭素を中心成分とする物質の研究が益々広範に行われている。炭素の結合は、黒鉛・ダイヤモンドでは6員環が基本構造となり、フラーレン・CNT では6員環に加え5員環が含まれる。最近我々は Fig.1 に示すように炭素4員環を連ねて丸めた構造をもつ多角柱型炭素分子 Prism-C_{2n}(n=6-10, 12, 14, 16, 18, 20)[1]、多角柱を2次元で周期的に並べた Prism-C_{2n} sheet(n=6, 8, 12) [2], 多角柱を軸方向に周期的に成長させた Prism-C_n tube [3]が存在しうること量子化学計算によって明らかにした。

Fig.1 Prism 炭素

左: Prism-C_{2n}

中: Prism-sheet

右: Prism-tube



Prism 炭素構造が安定に存在するためには、単に極小構造であるのみならず、周囲に存在する遷移構造のエネルギー障壁が十分に高いことが必要である。本研究では、GRRM 法[4]の ADDF 探索を用いることにより、Prism 炭素構造の周囲のエネルギー障壁を調べた結果について報告する。

Fig.2 に Prism-C₂₀ の D_{10h} 構造 EQ1 (309.2 kJ/mol)の周囲で反応経路探索を行った結果を示す。EQ1 から最低エネルギー障壁 TS0 (467.9 kJ/mol)を介し EQ0 (0.0 kJ/mol)へと移行する。EQ1-TS0 間のエネルギー障壁は ZPE 補正後 157.8 kJ/mol で Prism-C₂₀ は十分安定な構造であることがわかる。EQ0 は Prism-C₂₀ の側面の CC 結合 2つが切断されて8員環を生じた構造であり、途中で側面の CC 結合 1つが切断された構造を経由することがわかった。

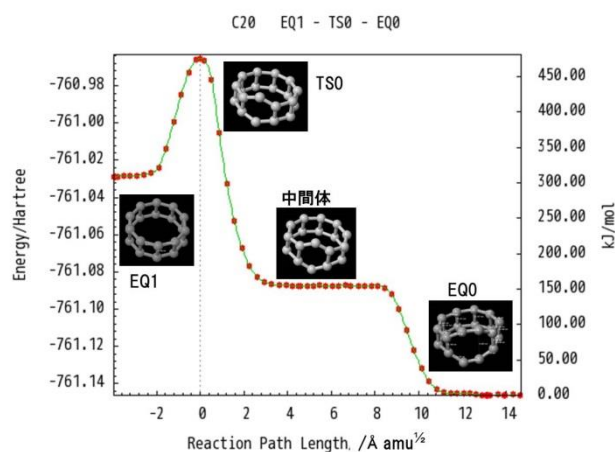


Fig.2 Prism-C₂₀ (EQ1)から TS0 - 中間体を経由し EQ0 へ至る反応経路のエネルギープロファイル

- 1) K. Ohno, H. Satoh, T. Iwamoto, *Chem. Lett.* 44, 712–714 (2015).
- 2) K. Ohno, H. Satoh, T. Iwamoto, *Chem. Phys. Lett.* 633, 120–125 (2015).
- 3) K. Ohno, H. Tokoyama, H. Yamakado, *Chem. Phys. Lett.* 635, 180–184 (2015).
- 4) S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 15 (2013) 3683.