

第一原理分子動力学シミュレーションによる窒素内包フラーレンの動的形成メカニズムの解明

Dynamical formation mechanism of nitrogen endohedral fullerene

by ab-initio molecular dynamics simulation

核融合研¹, 東北大院工², 名大院工³

○伊藤 篤史¹, 金子 俊郎², 小田 泰丈¹, 斎藤 誠紀³, 高山 有道¹, 中村 浩章^{1,3}

NIFS¹, Tohoku Univ.², Nagoya Univ.³,

○Atsushi M. Ito¹, Toshiro Kaneko², Yasuhiro Oda¹, Seiki Saito¹, Arimichi Takayama¹, Hiroaki Nakamura^{1,3}

E-mail: ito.atsushi@nifs.ac.jp

窒素内包フラーレン ($N@C_{60}$) の生成に関しては多くの研究がなされてきたが、プラズマ技術を用いた $N@C_{60}$ の生成法[1]は生成率を大幅に向上させる画期的な方法である。しかし、依然として $N@C_{60}$ の生成率は低く、ミクロなメカニズムに基づいた原因解明が望まれている。本研究では第一原理分子動力学シミュレーション（後述）を用いて、フラーレンに窒素原子が内包される様子を計算し、窒素内包の動的メカニズムの解明に取り組む。

さて、我々は核融合研究として、プラズマと壁材料の接点での物質挙動(プラズマ-壁相互作用)を対象に、理論シミュレーションによる研究を行ってきた。分子動力学法 (MD)、二体散乱近似法 (BCA)、密度汎関数法 (DFT)、動的モンテカルロ法 (KMC) などの理論手法・コードの開発を行い、特にナノスケールのプラズマ-物質相互作用現象の扱いを得意としている。これらの技法を今後はプラズマエレクトロニクス分野において積極的に応用していきたい[2]。

本研究で窒素内包の動的過程を扱うには MD が適しているが、炭素-窒素系の相互作用の精度の良いモデル化は困難である。そこで、原子間相互作用を DFT による量子力学計算から求めた上で、原子の運動方程式を MD によって数値的に解く第一原理分子動力学法を用いる。これにより、静止した C_{60} に向けて窒素原子もしくは分子を入射し、窒素が内包される動的挙動を再現する (図 1)。さらに、「京」コンピュータ向け OpenMX コードによる高速な DFT 計算の利点を生かし、入射エネルギーや入射位置・方位を変えた数千ケースの試行を行うことで、実験と比較可能な統計的な情報を得る。講演では、具体的な内包メカニズムを解析し $N@C_{60}$ 生成率向上の可能性を議論する。

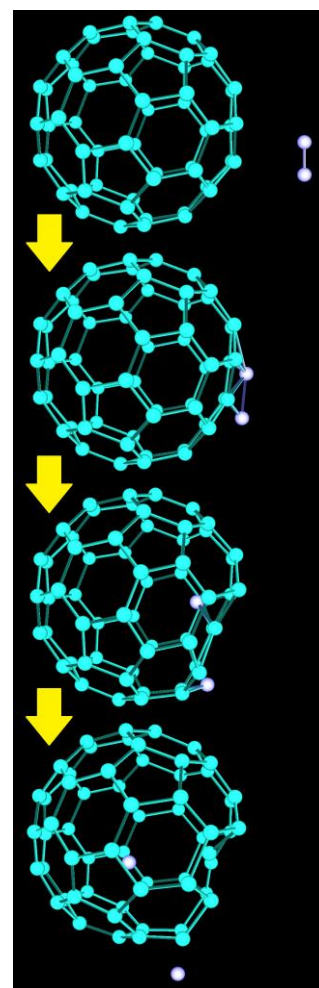


図 1 : C_{60} への N_2 入射シミュレーション

[1] S. C. Cho, T. Kaneko, H. Ishida, and R. Hatakeyama, Appl. Phys. Exp. 5 (2012) 026202.

[2] A. M. Ito, A. Takayama, S. Saito, and H. Nakamura, Jpn. J. Appl. Phys. 52(2013) 01AL04.