

単層カーボンナノチューブに内包された

アルカリハライドの電子状態および固体 NMR パラメーターの第一原理計算

First-principles calculation of electronic states and solid state NMR parameters of alkali halides encapsulated in single-walled carbon nanotubes○横倉 瑛太¹、片岡 洋右¹、緒方 啓典^{1,2}¹法政大学大学院理工学研究科応用化学専攻(〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)²法政大学マイクロ・ナノテクノロジー研究センター(〒184-0003 東京都小金井市緑町 3-11-15)

○Eita Yokokura, Yosuke Kataoka and Hironori Ogata

¹Grad. School of Sci. and Engin., Hosei Univ., ²Res.Center for Micro-Nano Technol., Hosei Univ.

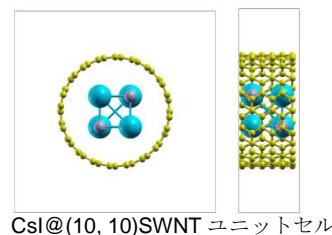
E-mail: hogata@hosei.ac.jp

【緒言】

単層カーボンナノチューブ (Single-Walled Carbon Nanotubes, SWNTs)は直径数ナノメートル程度の中空空間に様々な分子を内包することが可能であり、内包により多様な機能の発現が期待されている。これまでにアルカリハライドを内包した SWNT についての報告がなされている。しかしながら、内包されたイオンの詳細な局所構造解析およびイオン電導性など諸物性の SWNT 直径(カイラリティ)依存性など、系統的な報告はされていない。本研究では、ヨウ化セシウム内包 SWNT において、チューブ直径およびカイラリティと内包アルカリハライドの局所構造および諸物性の関係を系統的に調べることを目的の一手法として、固体 NMR 分光法に着目し、第一原理 DFT 計算により ¹³³Cs および ¹²⁷I NMR スペクトルパラメーター(化学シフトテンソルおよび電場勾配テンソル)の評価を行った。さらに、物性評価としてバンド構造計算を行い、バルク構造との比較を行った。

【方法】

DFT 計算として Quantum ESPRESSO の PWscf および QE-GIPAW を用いて行った。Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) exch-corr 法を用い、PAW 型擬ポテンシャル、K 点は $1 \times 1 \times 5$ として計算を行った。



【結果】

以下に ¹³³Cs-NMR の化学シフトテンソルの等方値および異方値の計算結果を示す。¹³³Cs および ¹²⁷I-NMR 電場勾配テンソルの計算結果、ナノチューブの構造と内包 CsI の電子状態の相関等、詳細な解析結果については当日報告する。

Materials	δ_{iso} (ppm)	$\Delta\delta_{anis}=3/2(\delta_{33}-\delta_{iso})$ (ppm)
bulkCsI	0	0
CsI@CNT(6, 6)	-187.68	786.75
CsI@CNT(8, 8)	-50.41	591.75
CsI@CNT(9, 9)	90±5	119±5
CsI@CNT(10, 10)	9.12	236.75

References:

- (1) M. Wilson, *J. Chem. Phys.* **116**, 3027 (2002)
- (2) M. Wilson and P. A. Madden, *J. Am. Chem. Soc.* **123**, 2101 (2001)
- (3) J. Sloan *et al*, *Chem. Phys. Lett.* **61**, 329 (2000).
- (4) M. J. L. Sangster and M. Dixon, *Adv. Phys.* **23**, 247 (1976).
- (5) D J Adams and I R McDonald, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **7**, 2761(1974).
- (6) Ryosuke Senga *et al.*, *Nature Materials*,13(2014)1050.
- (7) 横倉瑛太, 片岡洋右, 緒方啓典 第 63 回応用物理学会春季学術講演会(21P-S421-20).