

分子動力学シミュレーションおよび第一原理計算によるカーボンナノチューブに 内包されたカルコゲンの構造評価

Molecular structure of chalcogen encapsulated in single-walled carbon nanotubes
studied by molecular dynamics simulations and First-Principles calculations

○佐藤 豊¹、横倉 瑛太¹、片岡 洋右¹、緒方 啓典^{1,2}

(¹法政大院、²法政大マイコ・ナノ研)

Grad. Sch. Sci. and Engin., Hosei Univ. ¹,

Research Center for Micro-Nano Technology Hosei Univ. ²

°Yutaka Sato¹, Eita Yokokura², Yousuke Kataoka¹, and Hironori Ogata^{1,2}

E-mail: hogata@hosei.ac.jp

単層カーボンナノチューブ(Single-Walled Carbon Nanotubes, SWNTs)は高強度、高熱伝導率、高キャリア移動度などの多くの優れた特性を持っており、幅広い分野への応用が期待される材料である。SWNTs が二層になった構造を持つものを二層カーボンナノチューブ (Double-Walled Carbon Nanotubes, DWNTs) という。SWNTs(DWNTs)は直径数ナノメートルの制限空間を持ち、その空間に様々な原子・分子を内包することができることが報告され、内包された原子・分子集合体の持つ特異な構造や物性に関心が持たれている。近年、硫黄やセレンを内包した SWNTs(DWNTs)の合成が報告されている。これらの系においては、内包された硫黄は一次元の単原子硫黄鎖構造をとり、電気伝導性を有すること、セレンは二重螺旋構造をとるということが報告されており、内包カルコゲンの構造及び物性に興味を持たれている。本研究では、CNTsに内包されたカルコゲン(S, Se)の局所構造、物性を明らかにすることを目的として分子動力学計算(MD 計算)を行った。硫黄内包(5,5)SWNT の 297K で得られた安定構造を図 1 に示す。硫黄は SWNT 内でジグザグ鎖をとって内包されていることが分かる。二体相関関数から求めた S-S 原子間距離は 2.06 Å であり、実験データから報告されている値に近い値となった。さらに、内包カルコゲンの局所構造を調べるための一手法として、固体 NMR 分光法に着目し、第一原理 DFT 計算により ³³S-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。詳細については当日報告する。

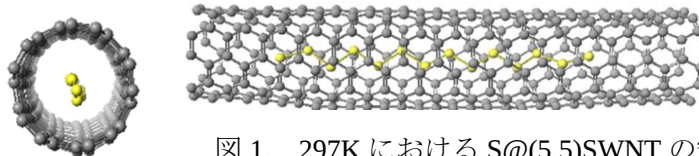


図 1. 297K における S@(5,5)SWNT の安定構造

References:

- [1] T. Fujimori *et al.* *Nature Commun.*4(2013)2162.
- [2] F. H. Stillinger *et al.* *J. Phys. Chem.* 85(1986)6460.
- [3] T. Fujimori *et al.* *ACS Nano* vol.7 No.6(2013)5067-5613.
- [4] T. A. Wagler *et al.* *Journal of Magnetic Resonance* 161 (2003) 191-197.
- [5] L. A. O'Dell, I. L. Moudrakovski. *Journal of Magnetic Resonance* 207 (2010) 345-347.
- [6] P. Giannozzi *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter*, 21(2009)395502