

分子動力学シミュレーションによる単層カーボンナノチューブ内 包多環芳香族化合物の局所構造解析

Local structure and properties of polycyclic aromatic compound encapsulated in single-walled
carbon nanotubes studied by molecular dynamics simulations

永井 涼¹, 片岡 洋右², 緒方 啓典^{1,2,3}

(¹法政大生命科学 東京都小金井市梶野町 3-7-2、²法政大院 東京都小金井市梶野町 3-7-2、

³法政大マイナノ研 東京都小金井市緑町 3-11-15)

Grad. Sch. Sci. and Engin., Hosei Univ.^{1,2}, Research Center for Micro-Nano Technology Hosei Univ.³

Ryo Nagai¹, Yosuke Kataoka² and Hironori Ogata^{1,2,3}

E-mail:hogata@hosei.ac.jp

カーボンナノチューブ (carbon nanotubes, CNT) は、優れた電子的、熱的および機械的特性を持っており、幅広い分野への応用が期待される材料の 1 つである。単層カーボンナノチューブ (single-walled carbon nanotubes, SWNT) は直径数 nm 程度の中空空間を持っており、その空間にフラーレンなどの様々な機能性分子を内包させることが可能であり、内包により新たな機能の発現が期待されている。CNT を一次元反応器として、その内部空間で多環芳香族炭化水素 (polycyclic aromatic hydrocarbon, PAH) 分子を反応させ、グラフェンナノリボン (graphene nanoribbons, GNRs) 内包 CNT が合成されることが報告されている[1]が、その生成メカニズムに興味を持たれている。代表的な PAH 分子であるコロネンは、SWNT 内で一次元的な積層構造を示すことが報告されている[3-5]。本研究では、SWNT に内包された様々な対称性を有する PAH 分子の局所構造および物性を系統的に明らかにすることを目的として、分子動力学シミュレーションを行った。図.1 に (a) コロネンおよび (b) ペリレン内包 SWNT の 298 K における緩和構造を示す。その他の PAH 分子内包 SWNT を含めた詳細な結果については当日報告する。

(a)

(b)

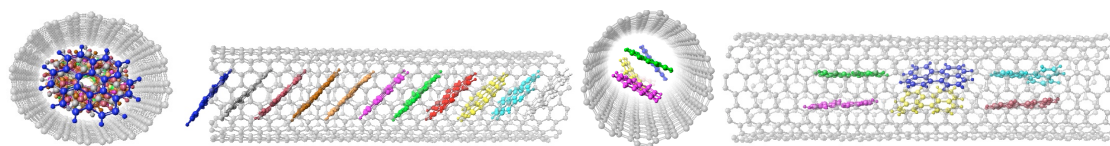


Fig.1: Snapshots of (a)coronene and (b)perylene encapsulated (10,10)SWNT at 298 K.

References:

- [1] A. V. Talyzin *et al.*, *Nano Lett.***11**(2011)4352-4356.
- [2] Miho Fujihara, *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **116**(2012)15141–15145.
- [3] Alexander I. Chernov *et al.*, *Phys. Status Solidi B* **251**(2014)2372–2377.
- [4] Ilya V. Anoshkin *et al.*, *ChemPhysChem.* **15**(2014)1660 – 1665.
- [5] Y. Sakane, *et al.*, *AIP ADVANCES* **5** (2015)117113.
- [6] Y.Joko, *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.***19**(2017)27704-27715.