

反応前駆体制御によるナノ物質構造制御合成

Structure Design of Nanomaterials via Control of Reaction-Precursors

東京大学 ○澁田 靖

Univ. Tokyo, °Yasushi Shibuta

E-mail: shibuta@material.t.u-tokyo.ac.jp

カーボンナノチューブ(CNT)やグラフェンなどの炭素ナノ材料の大量合成に触媒 CVD 法が幅広く用いられてきた。特に CNT 合成に関しては、触媒 CVD に用いる炭素源分子の種類や添加物により、合成量や質が大きく変化することが経験上良く知られている。カイラリティや直径を制御した CNT 大量合成のためには、反応前駆体としての”触媒金属+炭素源分子”の反応素過程の理解と最適条件探索が強く求められている。講演者らはこれまで、電子状態計算から原子間力を求めて動力学を追跡する第一原理分子動力学(MD)法により、触媒 CVD による CNT 生成中における炭素源分子解離の解析を行い、例えば Ni 微粒子表面上での CH_xCO 分子の C-C 結合解離選択性[1]や反応前駆体中の炭素溶解濃度が反応素過程反応および CNT 生成に与える影響[2]などを明らかにしてきた。また、第一原理 MD で得られた座標データを階層的クラスタリング(教師なし機械学習の一種)により反応に有為な前駆体構造および特徴量を抽出するなど、情報科学手法を取り入れた解析も行っている。さらに、当該分野の課題である MD 法解析と実際の CVD 合成プロセスの時間スケール乖離に関して、講演者らは Collective variable-driven hyperdynamics (CVHD)法[3]を用いた MD シミュレーションの時間加速化を試みている。本講演では、第一原理 MD による炭素源分子解離解析および炭素拡散シミュレーションの時間加速化の事例を紹介するとともに、反応前駆体制御による CNT 合成について原子論的立場から議論したい。

[1] T. Oguri, K. Shimamura, Y. Shibuta, F. Shimojo, S. Yamaguchi: J. Phys. Chem. C 117 (2013) 9983.

[2] S. Fukuhara, F. Shimojo, Y. Shibuta: Chem. Phys. Lett. 679 (2017) 164.

[3] K.M. Bal, E. Neyts: J. Chem. Theory Comput. 11 (2015) 10.