

分子動力学計算によるチオフェンオリゴマー内包 単層カーボンナノチューブ内の分子配向

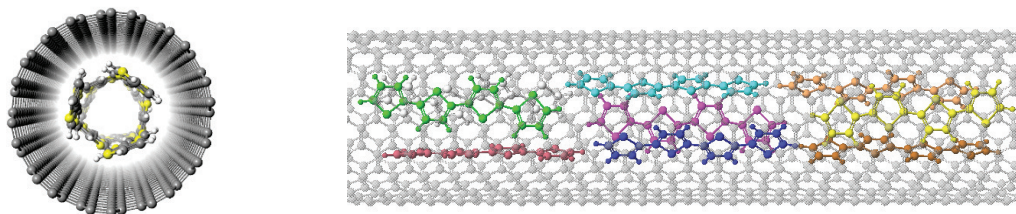
(法政大院) ○田畑 裕夢, 井上 和美, 片岡 洋右, 緒方 啓典

【緒言】単層カーボンナノチューブ(Single-Walled Carbon Nanotubes, SWNTs)¹⁾は優れた機械的強度、電気特性を持つことから、次世代のナノテクノロジー材料として期待されている物質である。SWNTsは直径数ナノメートル程度の中空空間を有し、この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を発現することが期待される。最近、チオフェンオリゴマー内包 SWNTs が合成され、特異な光学的性質についての報告がなされている^{2), 3)}。この系の光学特性は内包チオフェンオリゴマーの分子配向に大きく依存すると考えられる。チオフェンオリゴマー自体の分子配向に関してはヘリングボーン型やパイスタッキング型が報告されているものの、内包空間における分子配向に関しては十分な知見が得られていない。特に、チューブ直径およびカイラリティがチオフェンオリゴマーの分子配向にどのような影響を与えるかに興味もたれる。本研究では、チオフェンオリゴマー内包 SWNTs において、SWNTs のチューブ直径およびカイラリティとチオフェンオリゴマー分子の分子配向の関連性を明らかにすることを目的として分子動力学計算を行い、チューブ内でのチオフェンオリゴマー分子の分子配向に関して考察を行った。

【方法】長方形のセル内に、カイラルベクトル(10,10)の SWNT1 本およびチオフェン 4 量体(4T)を任意の数配置し 1 K で緩和計算を行うことにより初期配置を設定し、NVT アンサンブルを用いて 298 K において内包シミュレーションを行った。セルサイズは 4T 分子数により変更した。さらに、SWNT の速度を固定し、周期境界条件は必要に応じて適用した。SWNT は剛体とし、相互作用ポテンシャルは 4T 分子内に Dreiding、4T-4T 間および 4T-SWNT 間に OPLS、ナノチューブ-ナノチューブ間に UFF をそれぞれ適用した。

【結果】図 1 に (10,10)チューブに内包された 4T 分子の分子配向の構造を示す。(10,10)チューブの場合、4T 分子はチューブの長軸方向に平行に 3 分子を単位として配向していることが分かる。当日は、SWNTs のチューブ直径およびカイラリティとチオフェンオリゴマー分子の分子配向の関連性について系統的に調べた結果について報告する。

図 1. (10,10)SWNT 内での 4T 分子の安定配置構造



【参考文献】

- 1) S. Iijima and T. Ichihashi, *Nature* **363** (1993) 603.
- 2) Loi, M. A. et al. *Adv. Mater.* **2010**, 22, 1635.
- 3) Gao, J et al. *Small* **2011**, 7, 1807.
- 4) Yamashita, H.; Yumura, T. *J. Phys. Chem. C* **2012**, 116, 9681