

分子動力学法を用いた単層カーボンナノチューブへの 環境汚染気体分子の吸着特性

○関根亮典、井上和美、片岡洋右、緒方啓典

法政大生命科学部環境応用化学科(184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

【緒言】 単層カーボンナノチューブ(SWCNTs)は均一性の高いナノ細孔構造を有することから、優れた選択的分子吸着能力を持つことが報告されている[1]。また、多層カーボンナノチューブ(MWCNTs)は環境汚染の原因とされているNO_xおよびSO_x分子に対して高い吸着能力を示すことが実験的に示されている[2]。SWNTsへのSO₂分子の吸着特性の分子シミュレーションに関してはモンテカルロ法による研究が報告されている[3]のみで、NO_xに関しては報告がなく、吸着挙動は十分に明らかにされていない。本研究では、SWNTsへの環境汚染分子の吸着特性の詳細を明らかにすることを目的として、SO₂のSWCNTsの吸着特性を分子動力学法を用いて考察した。

【方法】 SWCNTsはカイラルベクトル(10,10)のものを使用し、チューブ長30 Å、チューブ間距離3.15 Åに固定した7本の束を用い、剛体とした。初期配置として図.1に示すようにSWCNTsを囲う

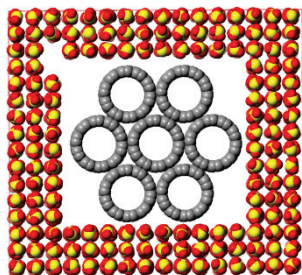


図.1 シミュレーションセルの初期配置図

表.1 Lennard-Jones パラメーター

ようにSO₂分子を配置した。SO₂分子はS-O結合長を1.432 Å、O-S-O結合角を119.3°に固定し、ポテンシャル関数としてBeth等の文献[4]を参考にして(1)式を用いた。Lennard-Jonesパラメーターを表.1に示す。

$$U(r_{ij}) = 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (1)$$

Atom	$\epsilon/k_b(K)$	$\sigma(\text{\AA})$
S	73.8	3.39
O	79.0	3.05
C(SWCNTs)	28.0	3.40

SO₂内の3原子それぞれに電荷(S:+0.59[e],O:-0.295[e])を与え、異種原子間ではローレンツ・ベルテロー則を適用した。計算ソフトはSCIGRESS 2.3.0を用いた。アンサンブルはNTV(温度調整:速度スケール法)、時間刻み幅は1 fs、運動方程式の数値計算法は次数5のGearの予測子-修正子法、カットオフ距離はセル長さの半分で周期境界条件を与えエwald法を用いて計算を行った。

【結果】 二体相関関数、拡散係数、吸着熱、活性化エネルギーを求め、さらにSO₂のSWCNTsへの吸着特性を考察した。詳細は当日発表する。

【参考文献】

- [1] Y. Maniwa, *et al.*, *Nature Mater.* **6**(2007)135.
- [2] Richard Q. Long, Ralph T. Yang. *Ind. Eng. Chem. Res.* **40**(2001)4288.
- [3] Wenjuan Wang, Xuan Peng, Dapeng Cao. *Environ. Sci. Technol.* **45**(2011)4832.
- [4] Mary Beth H. Ketko, Ganesh Kamath, Jeffrey J. Potoff. *J.Phys. Chem. B* **115**(2011)4949.