

## 分子動力学法による単層カーボンナノチューブに内包された アルカリハライドの構造と物性評価

○横倉 瑛太<sup>1</sup>、片岡 洋右<sup>1</sup>、緒方 啓典<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>法政大学大学院理工学研究科応用化学専攻(〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

<sup>2</sup>法政大学マイクロナノテクノロジー研究センター(〒184-0003 東京都小金井市緑町 3-11-15)

### 【緒言】

単層カーボンナノチューブ (Single-Walled Carbon Nanotubes, SWNTs)は直径数ナノメートル程度の中空空間に様々な分子を内包することが可能であり、分子内包により多様な機能の発現が期待されている。アルカリハライドを内包した SWNT において内包アルカリハライドの局所構造についての報告がなされている。本研究では、各種アルカリハライド内包 SWNT において、チューブ直径およびカイラリティと内包アルカリハライドの局所構造及びイオン電導性、融点の関係を系統的に調べることを目的として分子動力学計算を行った。

### 【方法】

本計算は SCIGRESSVer.2.5.0 および Ver.2.6.0(富士通株式会社)を用いて行った。直方体セル中央に1本の SWNT を配置し、SWNT の周囲に任意の数のアルカリハライドイオン(KI, CsI, LiI)を配置したものを初期配置とした。相互作用ポテンシャルとして、アルカリハライドであるイオン間に Born-Mayer-Huggins-Tosi-Fumi ポテンシャル、イオン-炭素間及び炭素-炭素間に Lennard-Jones ポテンシャルを用い、SWNT は分子内ポテンシャルの Dreiding ポテンシャルを用いた。

また、内包されたアルカリハライドの融解挙動を調べるため、イオン-炭素間の Lennard-Jones ポテンシャルパラメーターには希ガスの値を割当てた。NTV アンサンブルを用いてアルカリハライドの融点で緩和計算を行うことによりアルカリハライドを内包させ、さらに 298K まで降温後、緩和計算を行い安定構造を求めた。その後、100K ごとに昇温し各温度での二体相関関数を求めた。

表1 本研究で用いた L-J パラメーター

	イオン	E	K	$\sigma$	
				Å	
He型	Li			16.9	2.975
Ne型	F/Na			31.7	3.08
Ar型	Cl/K			57.9	3.4025
Kr型	Br/Rb			66.6	3.525
Xe型	I/Cs			79.4	3.735

### 【結果】

図1に KI@(9,9)SWNT および KI@(10,10)SWNT の 298 K における安定構造を示す。

(9,9)チューブに内包された KI においては、2×2 構造を取っているもの、(10,10)チューブに内包されたものについては 2×2 構造を取らず、チューブ軸方向にねじれが生じていることが分かる。

本発表では、詳細なカイラルベクトル依存性、二体相関関数の解析結果および他のアルカリハライドの結果についても詳細に報告する。

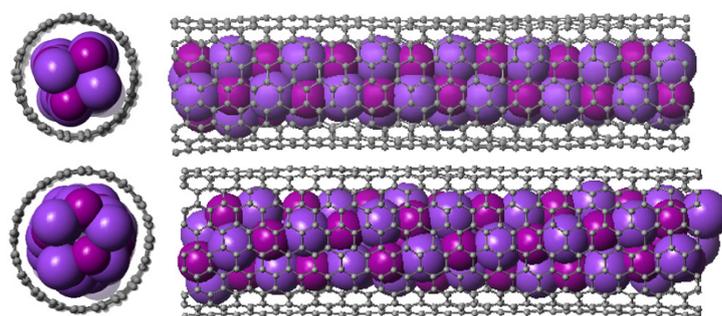


図1 (a) (9, 9)および (b) (10, 10)SWNT に内包された KI の 298 K における安定構造のスナップショット

参考文献:

- (1) M. Wilson, *J. Chem. Phys.* **116**, 3027 (2002)
- (2) J. Sloan, M.C. Novotny, S.R. Bailey, G. Brown, C. Xu, V.C. Williams, S. Freidrichs, E. Flahaut, R.L. Callendar, A.P.E. York, K.S. Coleman, M.L.H. Green, R.E. Dunin-Borkowski, J.L. Hutchison, *Chem. Phys. Lett.* **61**, 329 (2000).