

## 分子動力学シミュレーションによるカーボンナノチューブに 内包されたカルコゲンの構造および物性評価

○佐藤豊<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)は高強度、高熱伝導率、高キャリア移動度などの優れた特性を持っており、幅広い分野への応用が期待される材料である。SWNTsは直径数ナノメートルの制限空間を持ち、その空間に様々な原子・分子を内包することができることが報告され、内包された原子・分子集合体の持つ特異な構造や物性に関心が持たれている。この単層カーボンナノチューブが二層になった構造を持つものを二層カーボンナノチューブ(Double-Walled Carbon Nanotubes, DWNTs)という。近年、硫黄やセレンを内包したSWNTs(DWNTs)の合成が報告がされた。これらの系において、内包された硫黄は一次元の単原子硫黄鎖構造をとり、電気伝導性を有すること、セレンも二重螺旋構造をとるということが報告されており、内包カルコゲンの構造及び物性に興味を持たれている。本研究では、CNTsに内包されたカルコゲン(S, Se)の局所構造を明らかにすることを目的として分子動力学計算(MD計算)を行った。

### 【方法】

直方体セルにあるカイラリティーを持つカーボンナノチューブ(SWNTまたはDWNT)を1本および一定数の硫黄を配置した。硫黄に関しては単原子硫黄鎖構造体をナノチューブ内に配置した。MD計算では、数値積分法には5次のギア法、温度制御法には速度スケール法を用いた。計算条件としては、アンサンブルNVT、周期境界条件を適用した。ポテンシャル関数は分子内CNTsについてはDreiding、CNT-CNT間にはUFF、硫黄に関してはME3ORGANICを使用した。チューブのカイラリティー依存性、温度依存性を評価した。

### 【結果】

硫黄内包(6,6)SWNTの297Kで得られた安定構造を図1に示す。硫黄はSWNT内でジグザグ鎖をとって内包されていることが分かる。二体相関関数から求めたS-S原子間距離は2.06Åであり、実験データから報告されている値に比較的近い値となった。この系での詳しい解析を行った結果(SWNTのカイラルベクトル依存性、二層化効果、温度性等)については当日報告する。

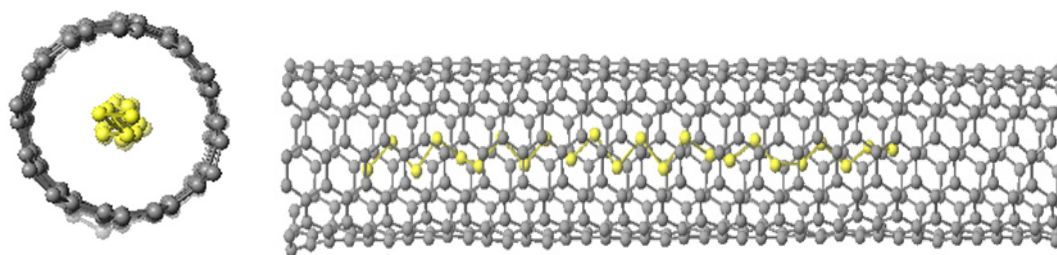


図1 温度297KでのS@SWNTの構造

### 参考文献

- [1] T. Fujimori *et al.* *Nature Commun.*4(2013)2162.
- [2] T. Fujimori *et al.* *ACSNANO* vol.7 No.6(2013)5067.
- [3] F. H.Stillinger *et al.* *J.Phys.Chem.* 85(1986)6460.
- [4] F. H.Stillinger *et al.* *J.Phys.Chem.* 91(1987)4899.