

DFT・MD法による単層カーボンナノチューブに内包された ヨウ化セシウムの局所構造および物性評価

○横倉 瑛太¹、片岡 洋右¹、緒方 啓典^{1, 2}

¹法政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)

²法政大学マイロ・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)

E-mail: hogata@hosei.ac.jp

【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、内包により多様な機能の発現が期待されている。
これまでにアルカリハライドを内包した SWNT についての報告がなされている。しかしながら、内包
されたイオンの詳細な局所構造解析およびイオン電導性、融点など諸物性の SWNT 直径(カイラリテ
ィ)依存性など、系統的な報告はされていない。本研究では、ヨウ化セシウム内包 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および諸物性の関係を系統的に
調べることを目的として分子動力学計算(MD)を行った。また、内包ヨウ化セシウムの局所構造を調べる
ための一手法として、固体 NMR 分光法に着目し、第一原理 DFT 計算により ¹³³Cs および ¹²⁷I NMR
スペクトルパラメーター(化学シフトテンソルおよび電場勾配テンソル)の評価を行った。

【方法】

MD 計算は SCIGRESSVer.2.6.1(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
ヤル、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 は剛体とし速度
を 0 に設定した。NTV アンサンブルを用いてヨウ化セシウムの融解に十分な 1000K 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 300K まで降温後、緩和計算し安定構造を求めた。
その後、100K ごとに昇温し二体相関関数から融点を算出した。DFT 計算は Quantum ESPRESSO の
QE-GIPAW を用いて行った。擬ポテンシャルを用い、K 点は 1×1×5 として計算を行った。

【結果】

図1に SWNT に内包された CsI の 400 K および 500 K における局所構造の一例を示す。詳細な温度
依存性について調べた結果、410K で構造相転移が起こることが分かった。

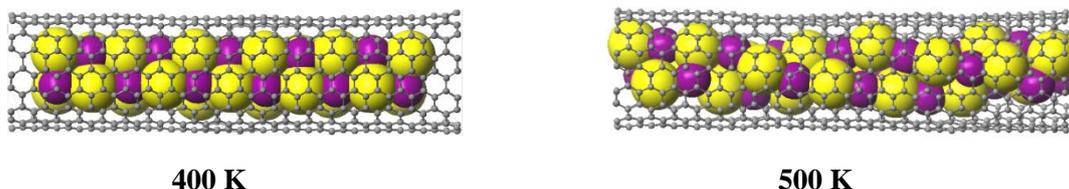


図1, CsI@SWNT の内包 CsI の局所構造の温度依存性の一例

その他の詳細な計算結果については当日発表する。

【参考文献】

- (1) M. Wilson, *J. Chem. Phys.* **116**, 3027 (2002)
- (2) M. Wilson and P. A. Madden, *J. Am. Chem. Soc.* **123**, 2101 (2001)
- (3) J. Sloan *et al*, *Chem. Phys. Lett.* **61**, 329 (2000).
- (4) M. J. L. Sangster and M. Dixon, *Adv. Phys.* **23**, 247 (1976).
- (5) D J Adams and I R McDonald, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **7**, 2761(1974).
- (6) Ryosuke Senga *et al.*, *Nature Materials*, 13(2014)1050.