

ナノチューブ内部での触媒金属による単層ナノチューブ成長 –DWNT 成長の分子動力学–

Nucleation of an SWNT from a catalytic metal cluster inside a carbon nanotube: MD simulations of DWNT formation

東大工 〇丸山 茂夫, 伊豆 好史, 塩見 淳一郎

The University of Tokyo, Dept. Mech. Eng., °Shigeo Maruyama, Yoshifumi Izu, Junichiro Shiomi

E-mail: maruyama@photon.t.u-tokyo.ac.jp

ピーポッド内部のフラーレンの融合による 2 層カーボンナノチューブ(DWNT)生成は以前からよく知られているが、最近では、単層カーボンナノチューブ(SWNT)に内包したフェロセンなどからの DWNT の合成が報告され、詳細なラマン散乱の測定の結果、同一の外層 SWNT に対して、フェロセン由来の内層の SWNT の方がフラーレン由来の SWNT よりも直径が小さくなることが明らかとされている[1]. 本研究で

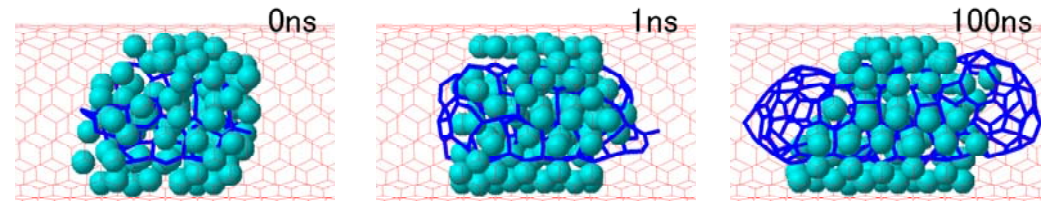


図 1 単層 CNT 内部におけるナノチューブの核生成の分子動力学

は、SWNT 内部でのフェロセンが触媒金属クラスターを形成すると考え、これによる内層 SWNT の合成を分子動力学法で検討した。計算手法は、既報[2]とほぼ同様であるが、計算時間の短縮のために既報で観察された炭素・金属クラスターの構造を初期条件として SWNT 内部に配置し、炭素原子を供給して内層 SWNT の核生成過程を計算した。図 1 に一例を示すように、様々なカイラリティの外層に対応して触媒金属のサイズが適当であれば容易に内層 SWNT の合成が確認された。また、外層と内層の SWNT の間には金属原子がチューブ上に挟まれる構造が安定で、フラーレン由来の内層合成のシミュレーション[3]と比較して内層 SWNT の直径が小さくなることが明らかとなった。 [1] H. Shiozawa, et al., phys. stat. sol. (b) 244 (2007) 4102., [2] Y. Shibuta and S. Maruyama, Chem. Phys. Lett., 382 (2003) 381. [3] 澁田・丸山, 機論 B, 71 (2005) 2117.