

ナノチューブ成長のシミュレーション

東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻

まるやま しげお はたえ ひさお やまくち やすたか
丸山 茂夫, 畑江 尚郎, 山口 康隆

はじめに

最近, 単層カーボンナノチューブ(SWNT)に関して, 高収率での生成の成功例が相次いで報告されているが⁽¹⁾, その生成機構に関しては未だ明らかにされていない. 単層ナノチューブは理論的に半径, helicity などを変化させることにより, 様々な物性をもつことが予測され, 工学的応用に向けて生成過程の制御による構造の選択的生成が重要課題である. 本研究では, 単層カーボンナノチューブの成長の様子を分子動力学法を用いてシミュレートすることを試みた.

計算手法

周期境界条件を施したセル中に単層ナノチューブを配置し, 周辺に分布させた孤立炭素原子が, チューブ端部に付着しチューブが成長する過程をシミュレートしている. 炭素原子間相互作用については前報⁽²⁾と同様に, Brenner⁽³⁾のポテンシャルを用いている.

Ni-C 間相互作用に関しては, 実際には暗中模索という状態であり, 最初に, 炭素原子間で用いているのと同様の Brenner⁽³⁾のポテンシャルで, 結合エネルギー D_e , 距離 R_e について, Ni-C, Ni-Ni 間値の平均値付近で, 適当に値を変化させた. さらに, 現実的に炭素の結合状態が変化する様子を表現するために, Ni と C の混合クラスターに関する密度汎関数法による計算に基づいて静電荷分布と近距離反発を複合して金属原子・炭素原子間のポテンシャルの表現を試みている.

Brenner 型金属・炭素間ポテンシャルによる結果

前報に続き, 金属触媒の作用として Smalley ら⁽¹⁾の Scouting モデルをイメージし, 最初に Ni 原子をチューブ端部に付着させて計算を行った. Ni-C, Ni-Ni 間相互作用も前報の計算と同様であるが, 金属原子に関しては, π 共役結合系に関する補正を除外した. チューブは金属がない計算では, 端部に付着した炭素原子が五員環を作り, 内側に閉じて行ってしまふ. 金属触媒は, この五員環を作るのを妨げる, 或いはできてしまった五員環を六員環に変えるという作用を期待して加えているが, Fig. 1 に示すようにこれまでの計算では, 金属自体がチューブの内側に結合し, 逆に閉じるのを早めるような結果になってしまい, 期待した効果は見られなかった.

上記のような作用を金属が果たすためには,

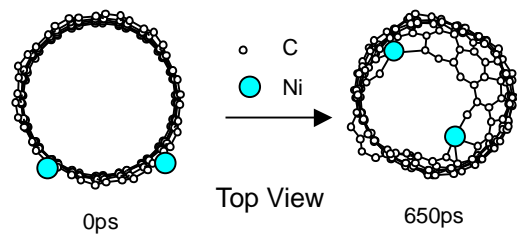


Fig. 1 Failure to grow

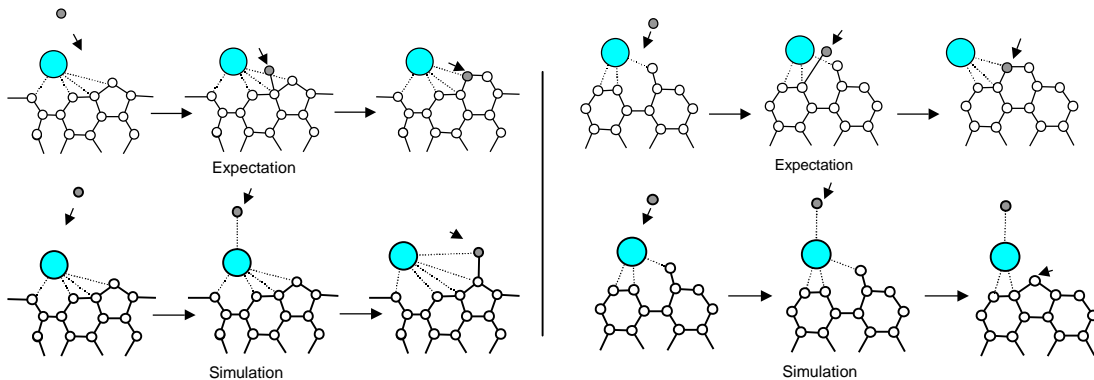


Fig. 2 Our expectations & simulated patterns

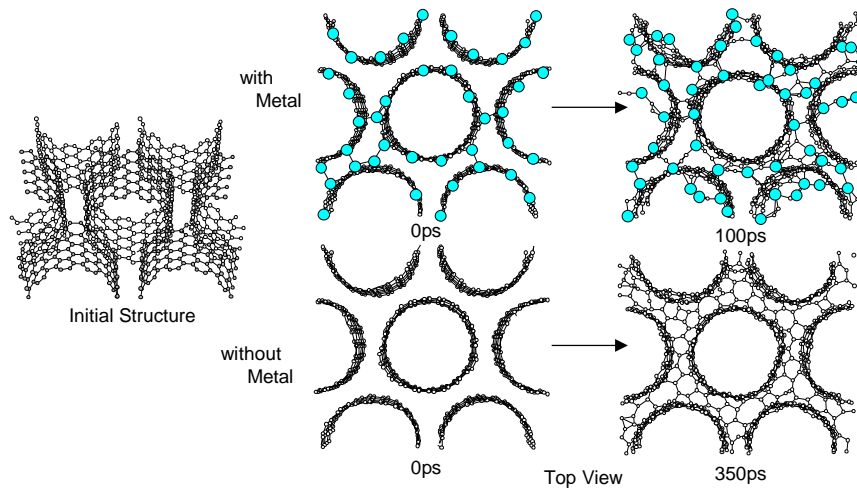


Fig. 3 Simulation of a bundle of SWNTs

五員環のそばで金属が待っている時に次にやってきた炭素が、この金属の根元に結合するという過程が必要になると思われる。しかし、実際には新しい炭素は金属の上や横にしか付かない (Fig. 2) ことが、このような失敗の原因であると考えられ、炭素-金属間の相互作用をより現実的なものとした場合に結果が期待される。

また、現実の単層ナノチューブはほとんどの場合、束状になって存在していると報告されており⁽¹⁾、その様な状態でのチューブ間の干渉の効果がチューブが内側に閉じていくのを妨げるか否かを検討する計算を行ってみたが、Fig. 3 に示すように、炭素のみの計算ではチューブの間に炭素が詰まり、新たな炭素が付着する余地を残さない。或いは Ni を加えた計算では、やはり周囲の炭素が金属の間や上に付着することがチューブを閉じる方向に向かわせている。

参考文献

- (1) A. Thess et al., *Science*, vol. **273**, p. 483 (1996).
- (2) 丸山 et al., 第 13 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集, p. 12 (1997).
- (3) D. W. Brenner, *Phys. Rev.B*, vol. **42-15**, p. 9458 (1990).

連絡先

〒113 東京都文京区本郷 7-3-1 東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻 丸山茂夫
 TEL: 03-3812-2111 (内線 6421) FAX: 03-5800-6983 E-Mail: maruyama@photon.t.u-tokyo.ac.jp