

CNT ピーポッド内部における C₆₀・C₇₀ 分子安定配置のエネルギー解析

薄膜・表面物性研究室 西尾 駿

S111112 Shun NISHIO

背景と目的

C₆₀・C₇₀ 混合フラーレンは 500 円/g と安価であるが、高純度の C₆₀ フラーレンの価格は 320,000 円/g、高純度の C₇₀ フラーレンの価格は 400,000 円/g と非常に高価格である。したがって、フラーレンを用いる研究機関やメーカーにおいて、高純度フラーレンを安価で得ることが強く望まれている。これまでに我々は、C₆₀ (球形) と C₇₀ (楕円形) の形状の違いを利用し、カイラル数(9,10)のカーボンナノチューブ(CNT)2本で T 字構造を作り、混合フラーレンから高純度のフラーレンを分離できる可能性を示唆した[1]。本研究では、CNT の直径範囲に着目し、カイラル数(9,10)以外の CNT で C₆₀・C₇₀ をふるい分けできるかを全エネルギー計算で調査した。

計算モデルと手法

CNT のモデルとしては、表 1 に示すカイラル数・直径で構造安定化した 15 種類 (カイラル数(9,10)を含む) を用いた。この CNT の中心軸に沿って、C₆₀、C₇₀ (図 1) を 70 Å 走査させ、各点において L-J ポテンシャルを用いた全エネルギー計算を行った。CNT 内部・外部のエネルギー差から、C₆₀、C₇₀ の挿入しやすさを判定した。なお C₇₀ 分子は、長軸が CNT の長さ方向に対して平行 (横) と垂直 (縦) になる 2 通りの状態で計算を行った。

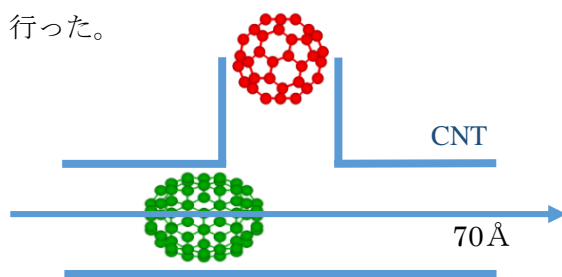


図 1. CNT の T 字構造の概念図

表 1. 使用した CNT モデル(CNT の長さ: 約 50 Å)

カイラル数	直径(Å)	C ₆₀	C ₇₀ (横)	C ₇₀ (縦)
(7,11)	12.69	×	×	×
(3,14)	12.69	×	×	×
(6,12)	12.82	×	×	×
(0,16)	12.92	○	○	×
(5,13)	13.00	○	○	×
(2,15)	13.00	○	○	×
(4,14)	13.22	○	○	×
(9,10)	13.30	○	○	×
(8,11)	13.34	○	○	×
(1,16)	13.34	○	○	×
(7,12)	13.44	○	○	×
(3,15)	13.49	○	○	×
(6,13)	13.58	○	○	×
(0,17)	13.73	○	○	×
(2,16)	13.80	○	○	○

挿入しやすい: ○ 挿入しにくい: ×

結果および考察

結果は表 1 に示した。CNT2本で T 字構造を作り、C₆₀、C₇₀ をふるい分けするための条件は、C₆₀ および C₇₀ (横) が挿入しやすく、C₇₀ (縦) が挿入しにくいことである。この条件を満たす CNT の直径は、12.92 Å以上 13.80 Å以下であることがわかった。また、この直径範囲の CNT は、カイラル数(9,10)の CNT を含め 11 種類存在することがわかった。

[1] 橋谷田優花 2013 年度成蹊大学卒業論文