

所属・職・氏名	岩手大学工学部 材料物性工学科 物性学 教授・長谷川 正之
シーズ名	炭素系ナノ構造物質における相互作用と構造安定性
シーズの概要	<p>フラーレンとカーボンナノチューブは炭素原子のネットワークが球殻状または円筒状に閉じた一連の分子であり、グラファイト（黒鉛）とダイヤモンドに次ぐ第三の炭素の同素体である。フラーレンの典型はよく知られたサッカーボール状のC₆₀である。これらのナノ構造体はいわゆるナノテクノロジーの分野で主役を演じると期待されているが、それらの集合体（凝集体）の構造とその安定性に関する知見を得ることが重要であり、そのためには、構造体間の相互作用を知ることが必要になる。</p> <p>本研究ではまず、C₆₀の凝集体（C₆₀固体）に対して密度汎関数理論に基づく大規模な第一原理電子構造計算を行い、それを第一原理計算では取り込むことができないファンデルワールズ相互作用で補強するという半経験的な方法を用いてC₆₀分子間の相互作用を求めた¹⁾。この結果から、ファンデルワールズ相互作用はC₆₀固体の凝集に非常に重要な役割を果たしている（凝集エネルギーの約半分を占める）ことが明らかになった。</p> <p>次に、カーボンナノチューブの安定性を解明する第一歩として、同様の方法を用いてグラファイトの層間相互作用の計算を行い、C₆₀分子間相互作用と同様の結果を得た²⁾。この結果は従来考えられていたものと著しく異なる。カーボンナノチューブはグラファイトのシートを1枚（単層ナノチューブ）または多数枚（多層ナノチューブ）を円筒状に丸めたものである。このため、ナノチューブ自身の安定性及びチューブ間の相互作用を知るためには、グラファイトの層間相互作用に対する知見が不可欠である。</p> <p>以上の結果は非常に基礎的なレベルのものであり、直ちに実用的なシーズにはならないが、ナノ構造物質の設計及び新機能発現機構の解明における出発点になると期待される。</p>
その他参考資料	<p>1) M. Hasegawa <i>et al.</i>, J. Chem. Phys. 119, 1386 (2003).</p> <p>2) M. Hasegawa and K. Nishidate, Phys. Rev. B 70 (2004), to be published.</p>
共同研究機関・企業	該当なし
特許(出願)番号	該当なし