

はじめにお読みください

この文章は、研究室に所属する学生が研究活動の一環として作成してくれたものです。研究室セミナーの時間に輪番で発表してもらい、研究に関連した事項の基礎知識の向上をはかりました。内容・文章ともに未だ不完全なものもありますが、2018 年度に調査してくれたものを公開いたします。

※学生の作成してくれたファイルをそのまま公開しております。ところどころ誤った記述もあるため、内容については保証いたしかねます。ご注意ください。
(2019 年度以降、少しずつ改訂していく予定です。)

2018 年 3 月 名古屋工業大学 川崎・石井研究室
<http://kawasaki.web.nitech.ac.jp/jp/tips/index.shtml>

【執筆者一覧】

・ 卒研生

伊達 怜実、堀之内 理紗、山田 えみり、吉谷 駿、渡邊 裕介

・ M1

浅井 七海、亀岡 真祐子、近藤 航平、長谷川 毅、横井 和真、高橋 実夏子

・ M2

石亀 弘基、久野 潤也、中村 元海、林 遼治、松下 一樹、眞鍋 駿

・ D3

李 蒼昊

【X 線回折 (XRD) 】

SWCNT バンドルのシミュレーションでどうやるんですか？

作成日： 2018 年 11 月 6 日

担当者： 眞鍋 駿

本来、実際の SWCNT 内には一本のバンドル内に様々なカイラルや直径を有する SWCNT が混在しているが、シミュレーションでは SWCNT の平均の電子密度を用いてバンドルの平均構造を表す。^[1]つまり、各 SWCNT は均一な電子密度を有する同一系の円筒シリンダーと仮定する。

X 線の散乱ベクトルを $\vec{Q}$ とすると、X 線回折強度 $I(\vec{Q})$ は

$$\begin{aligned} I(\vec{Q}) &\propto \sum_i |\int \rho(\vec{r}) \exp(-i\vec{Q} \cdot \vec{r}) dV|^2 \\ &\approx \sum_i |F_i|^2 \sum_{all} \exp(-i\vec{Q} \cdot \vec{r}_{all})|^2 \\ &= \sum_i |F_i|^2 (P_{G(i)}(Q) N_{G(i)}) \cdots \textcircled{1} \end{aligned}$$

$\rho(\vec{r})$: SWCNT の電子密度、 F_i : 形状因子 (一本の SWCNT についてのフーリエ関数)、

$N_{G(i)}$: 多重度因子 (等価な逆格子ベクトルの数)

$P_{G(i)}$: すべての格子点についてのラウエ関数を用いることにより、三角格子の逆格子 G を中心に持つピーク関数)

と表される。

チューブの形状因子 F_i は十分に長い中空チューブにおいて、 $\vec{Q}$ がチューブ軸に垂直な平面からずれると急速にゼロになり、その大きさは円筒ベッセル関数 $J_0(QR)$ に比例する。したがって、SWCNT の半径 R 、SWCNT 中心 軸からの位置ベクトル $\vec{r}$ 、チューブ側壁の面電子密度 σ から、SWCNT の形状因子 F_{tube} は

$$\begin{aligned} F_{tube} &= \int \rho_{tube}(\vec{r}) \exp(-i\vec{Q} \cdot \vec{r}) dV \\ &= 2\pi R \sigma \int_0^{2\pi} \exp(-iQr \sin\theta) d\theta \end{aligned}$$

と表される。

実際の試料では SWCNT 直径に分布がある。よってガウス関数を使い、平均 SWCNT 直径 $2R_A$ 、直径分布の半値全幅を $2\Delta R_A$ とする。隣接する SWCNT 間のギャップ g はバンドルの種類によらず一定、4 種類のバンドルの太さを S_1, S_2, S_3, S_4 、四種類のバンドルの太さの存在割合 $u_1 : u_2 : u_3 : u_4 = (1-u_1-u_2-u_3)$ とする。全体のピーク関数 P は、

$$P(\vec{Q}) = u_1 S_1 P_1 + u_2 S_2 P_2 + u_3 S_3 P_3 + (1-u_1-u_2-u_3) S_4 P_4 \cdots \textcircled{2}$$

となり、各バンドル由来のピーク関数の和で表される。

ピーク関数として、 $G=Q$ のとき極大値をもつ半値全幅 $2\pi/S$ のガウス関数を用いると、X 線回折強度 $I(Q)$ は、

$$I(Q) \propto \exp(AQ^2)L(Q) \times \int \frac{1}{\Delta R_A} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp\left(-\ln 2 \frac{(R-R_A)^2}{(\Delta R_A)^2}\right) \times |F_{\text{tube}}| \sum_i (P_G(Q) N_G) dR + BG \cdots \textcircled{4}$$

($\exp(AQ^2)$: バンドル内の SWCNT の直径分布の作用、 $L(Q)$: ローレンツ作用)

で表される。また、バックグラウンドとして、

$$BG = B_1 \exp\left(-\frac{Q^2}{B_2^2}\right) + B_3 \cdots \textcircled{5}$$

を用いる。

④、⑤式を使い、横軸を Q 、縦軸を $I(Q)$ とすることによって、SWCNT の XRD のシミュレーションが可能となる。

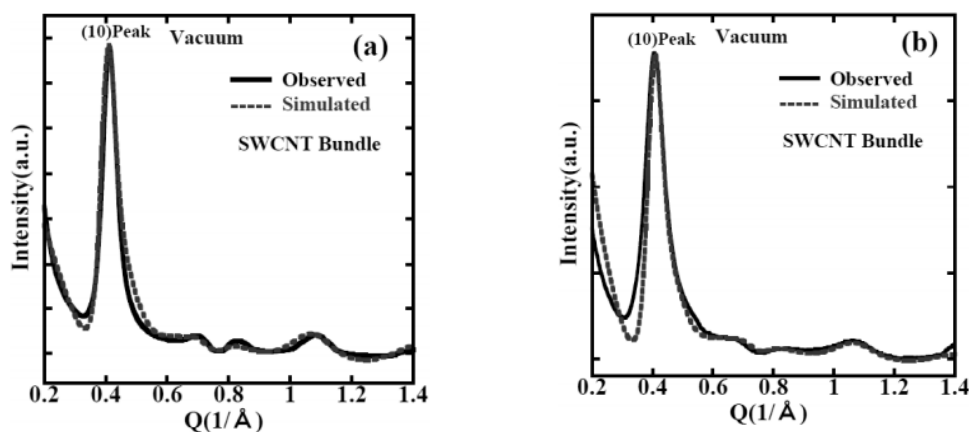


Fig.1 SWCNT 試料の X 線回折パターン(実線)とシミュレーション結果 (点線)。

(a) 未分離試料 (b)金属型試料

上記の方法で行った解析結果を Fig.1 に示す。Fig.1 では、平均直径 $2R=14.4 \text{ \AA}$ 、平均直径の分布 $\pm 1.0 \text{ \AA}$ 、バンドルの太さ $S_1: 266.82 \text{ \AA}$ 、 $S_2: 88.94 \text{ \AA}$ 、 $S_3: 44.47 \text{ \AA}$ 、 $S_4: 20.52 \text{ \AA}$ 、 $u_1 = 40 \%$ 、 $u_2 = 5 \%$ 、 $u_3 = 40 \%$ 、 $u_4 = 15 \%$ 、さらにバンドル内のチューブの直径分布の作用定数 A は未分離試料では 0.05 、金属試料では 0.5 とすることで、実験結果をよく再現できた。

[1] 神奈川大学 カーボンナノチューブに内包された水の構造物性 松田和之 その他

file:///C:/Users/Owner/Desktop/%E3%83%9D%E3%83%86%E3%83%88Tips/3CNT%E3%82%B7%E3%83%9F%E3%83%A5%E3%83%AC%E3%83%BC%E3%82%B7%E3%83%A7%E3%83%B3.pdf