

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】

・ 卒研究生

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

【炭素材料】

3 26

同じアルカリ金属なのに Na だけ低ステージの黒鉛層間化合物を作らない理由は？

作成日： 2018 年 11 月 13 日

担当者： 中村 元海

黒鉛層間化合物(GIC)は黒鉛(ホスト)にインターカラントとして原子や分子(ゲスト)がインターカレーションした化合物である。インターカラントが黒鉛層(グラフェンシート)の何層ごとに存在するかを示すのがステージという概念であり、Na 以外のアルカリ金属(Li,K,Rb,Cs)をインターカラントとした GIC では黒鉛層 1 層ごとにインターカラント層が存在するステージ 1 構造をとる。一方、Na では高圧下でもない限りステージ 6 構造までしか生成しないことが知られている。

そもそも、何故黒鉛層間に原子や分子がインターカレーションするかを考える。層間はファンデルワールス力により結合している。もしインターカラントが層間のファンデルワールス力より強く黒鉛層と相互作用するのであれば、そのインターカラントはインターカレーションする余地があるといえる。アルカリ金属は GIC においてドナー分子であり、黒鉛層と電荷移動に由来するクーロン力が主だった相互作用になる。これを踏まえてインターカレーションを有利となるであろう相互作用と、逆に不利となるであろう相互作用を列挙する。

有利

- 1) インターカラント層と黒鉛層のクーロン力
- 2) 黒鉛層が電子を捕まえるエネルギー
- 3) 炭素とインターカラントのファンデルワールス力

不利

- 1) 層間を引き剥がすエネルギー
- 2) 金属のイオン化エネルギー

この考えから、インターカレーションが如何ばかり起こるのかはこれらの項のバランスによるものだと思う。Na は多分そこらへんがあんまりよくない。

これだけだとあまり答えになっていないと思うので、別の考えも紹介する。次の考え方はアルカリ金属とグラファイト、それぞれの結晶構造からの考察である。アルカリ金属のうち Li は LiC_6 、K,Rb,Cs は MC_8 という組成でステージ 1 構造をとる。それぞれの構造を Fig.1 に示す。次に各アルカリ金属が作る bcc 格子の(111)面に沿って黒鉛層に重ねたものを Fig.2 に示す。Fig.2 より K,Rb,Cs は大体合う。Li は少しずれてるが Na ほどではない。Na はズレすぎているので C_6 でも C_8 でもあまり合わない説。

現在では、高圧下においてはナトリウムもステージ 1 構造をとることが知られている。

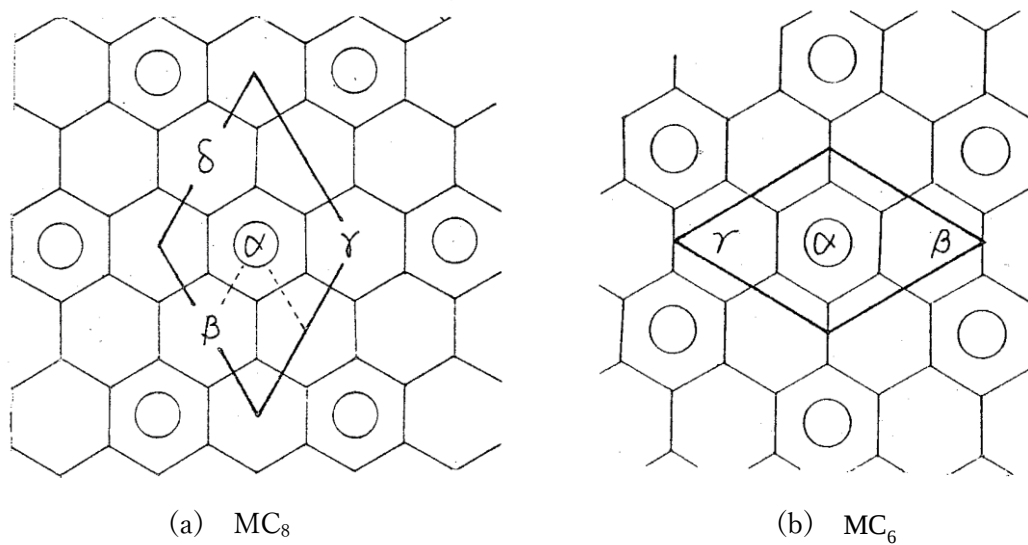


Fig.1 ステージ 1 構造^[1]

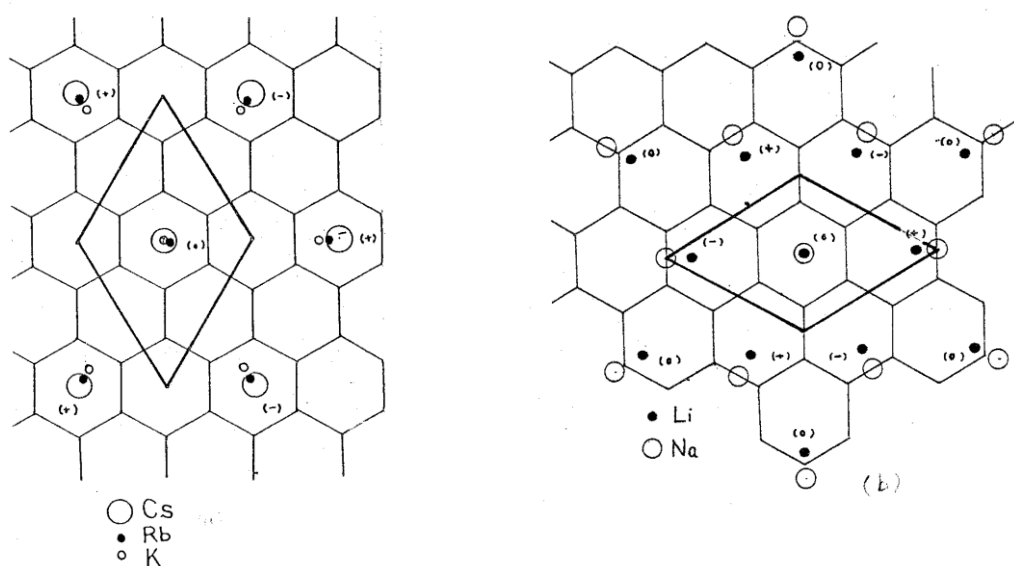


Fig.2 アルカリ金属 bcc 格子+黒鉛層^[1]

参考

- [1] https://repository.kulib.kyoto-u.ac.jp/dspace/bitstream/2433/90767/1/bsk03805_277.pdf
- [2] https://www.jstage.jst.go.jp/article/tanso1949/1990/145/1990_145_311/_pdf
- [3] https://www.jstage.jst.go.jp/article/tanso1949/1995/170/1995_170_298/_pdf