

## VASP を用いた多角柱型炭素一次元周期構造の構造最適化

○沖 卓人<sup>1</sup>、高田谷 吉智<sup>2</sup>、山門 英雄<sup>1</sup>、時子山 宏明<sup>3</sup>、大野 公一<sup>3,4</sup>

(<sup>1</sup>和歌山大システム工、<sup>2</sup>和歌山大院システム工、<sup>3</sup>量子化学探索研究所、<sup>4</sup>東北大院理)

**[序]** 多角柱型炭素分子を軸方向へ周期的に成長させた構造を持つ prism-carbon tube の存在が、2015 年に大野らの量子化学計算によって明らかにされている。[1]本研究では VASP プログラム[2]を用いた DFT 計算により、構造最適化をより高い精度で行うことでその構造の確かさについて議論する。

**[計算方法]** prism- $C_n$  tube ( $n=3-8,10,12,14,16,18,20$ )を構造最適化するにあたり 3次元周期的境界条件下で、周期性の初期値を軸方向に 1.6 Å( $C_4$ のみ 1.5 Å)に設定した。隣り合うチューブ間の相互作用を無視して 1本のチューブについて計算できるように、軸間の周期性は軸方向に対して十分大きな距離を取るようにした。各 prism- $C_n$  tube の  $C_n$  多角形の初期構造は 1片 1.4-1.7Å の正多角形とした。逆格子空間の  $k$  点には、Monkhorst-pack 法で  $16 \times 2 \times 2$  の合計 64 点を取った。DFT 計算は全て VASP プログラムを用い、平面波のカットオフエネルギーを 400 eV に設定した。擬ポテンシャル法での内殻軌道の近似に PAW 法[3]を用いている。交換相関汎関数は一般化密度勾配近似を用い、PBE 汎関数を選択した。

**[計算結果]** 今回の計算結果から得られた prism- $C_n$  tube の構造を図 1 に示す。最もエネルギーの低い値を基準とした時の 1 原子当たりの相対全エネルギー、炭素-炭素間の結合長を表 1 にまとめた。

これらの結果から  $C_5$  のチューブが最安定構造であることがわかった。この結果は先行研究の内容と一致している。そこから  $n$  の値が大きくなるにつれて構造は不安定になっていき、 $n=18$  では軸方向の結合距離が約 2 Å へと伸びている。 $n=20$  ではチューブ状の構造が得られなかった。

**[結論]** VASP を用いた DFT 計算によって、以前に報告されていた prism-carbon tube の構造最適化をより高い精度で追試することができた。最安定構造は prism- $C_5$  tube である。

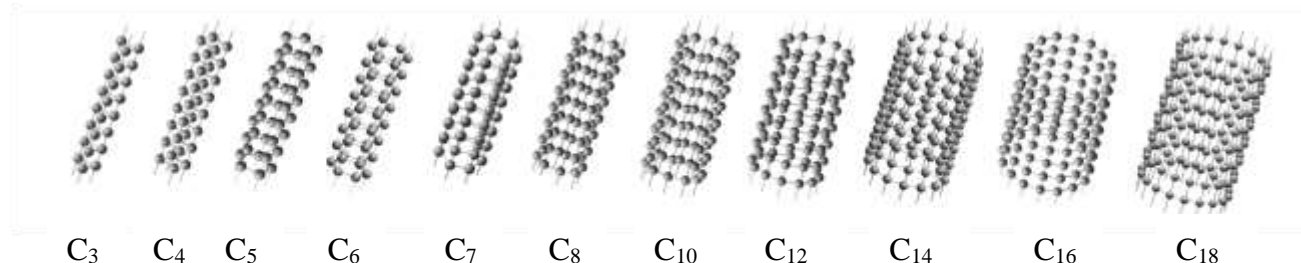


図 1 prism- $C_n$  tube ( $n = 3-8,10,12,14,16,18$ ) の構造

表 1 prism- $C_n$  tube ( $n = 3-8,10,12,14,16,18$ ) の相対全エネルギーと結合長

	1 原子当たりの相対全エネルギー (kJ/mol atom)	A: 環状構造内の炭素-炭素間の結合長(Å)	B: 軸方向の炭素-炭素間の結合長(Å)		1 原子当たりの相対全エネルギー (kJ/mol atom)	A: 環状構造内の炭素-炭素間の結合長(Å)	B: 軸方向の炭素-炭素間の結合長(Å)
$C_3$ tube	29.439	1.541	1.606	$C_{10}$ tube	26.350	1.537	1.640
$C_4$ tube	27.026	1.585	1.612	$C_{12}$ tube	36.485	1.612	1.639
$C_5$ tube	0.000	1.571	1.613	$C_{14}$ tube	41.601	1.570	1.638
$C_6$ tube	3.957	1.574	1.613	$C_{16}$ tube	45.654	1.581	1.643
$C_7$ tube	9.749	1.547	1.632	$C_{18}$ tube	105.690	1.570	1.998
$C_8$ tube	14.285	1.572	1.624				

### [文献]

[1] K. Ohno, H. Tokoyama, H. Yamakado, *Chem. Phys. Lett.*, 2015, **635**, 180.

[2] G. Kresse, J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, 1996, **54**, 11169.

[3] P.E.Blöchl, *Phys. Rev. B*, 1994, **50**, 17953.