

BCハイブリッド格子構造の探索

¹和歌山大院・システム工, ²和歌山大・システム工, ³量子化学探索研究所
○沖 卓人¹, 高田谷 吉智¹, 山門 英雄², 大野 公一³

Search for BC hybrid structure

○Takuto Oki¹, Yoshitomo Kodaya¹, Hideo Yamakado², Koichi Ohno³

¹ Graduate school of Systems Engineering, Wakayama University, Japan

² Faculty of Systems Engineering, Wakayama University, Japan

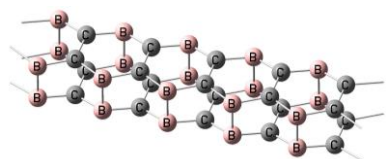
³ Institute for Quantum Chemical Exploration, Japan

【Abstract】 New structures consisting of carbon four-membered rings which are different from carbon nanotubes and fullerenes have been found by quantum chemical calculation. Furthermore, it is known that new CN hybrid structures can be found by incorporating nitrogen atoms into these carbon structures. This kind of search is also possible in the hybrid structure of carbon and boron. Therefore, in this study, we have searched for new BC hybrid structures and confirmed their existence according to structural optimization calculation by VASP.

【序】 近年、カーボンナノチューブやフラーレンとは異なる、炭素の四員環を連ねた新しい構造である Prism-Carbon tube, Prism-Carbon sheet の存在が量子化学計算によって予想されている[1-4]。さらに、これらの炭素構造に窒素原子を組み合わせたような新規の CN ハイブリッド構造が探索されることが知られている[5]。同様のことは炭素とホウ素のハイブリッド構造についても可能であると考えられる。そこで、本研究では VASP を用いた構造最適化計算によって、新規な BC ハイブリッド構造を探索し存在を確認した。

【計算方法】 $[(B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$ 、 $[(C_2B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$ のような周期構造(**Fig.1**)について VASP[6]を用いた構造最適化計算を行い、これらの構造が平衡構造の一つであることを示す。計算には一般化勾配近似型の PBE 汎関数を使用し、内殻軌道の近似に PAW 法[7]を選択した。用いる平面波の設定として k 点を逆格子空間内に Monkhorst-pack $16 \times 2 \times 2$ と取り、エネルギーカットオフを 600 eV とした。今回の計算では VASP で単一のチューブ構造を取り扱うため、複数のチューブ間に十分な距離をとるようにして真空領域を与え、チューブ間の相互作用を無視できるようにした。

$[(B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$



$[(C_2B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$

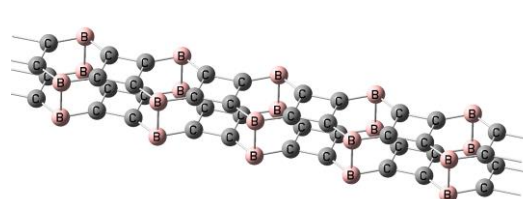


Fig.1 BC hybrid structure

【結果・考察】 $[(B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$ 、 $[(C_2B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$ について構造最適化を行った結果、それぞれの構造は形を崩さずに計算が収束した。よって、これらの構造が平衡構造の一つであることがわかり、これらの構造の存在が示唆される。**Fig.2** に計算から得られた結合長を示す。

通常分子では、C-C 結合長は主に 1.54 Å 程(単結合の場合)、C-B 結合長は主に 1.56 Å 程であるが、今回計算した BC ハイブリッド構造では一部の結合が実験値より長くなる傾向がみられる。特に c, d で示した方向の結合(以下、面間の結合と表記)は、a, b で示される方向の結合(以下、面上の結合と表記)に対して 0.1-0.3 Å ほど長くなっている。これは面間の結合が他の結合手に対して結合角 86-94°をなすため、結合をつくる混成軌道のうち p 軌道の寄与が大きくなり、結合が伸びると考えられる。伸びた結合は本来の長さの結合に比べて結びつく力が弱いことを示しており、 $(B_8C_2)_2$ 、 $[(B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$ 、 $[(C_2B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$ は、自然に存在する物質に比べて高いエネルギーを内包する高エネルギー物質であることが考えられる。

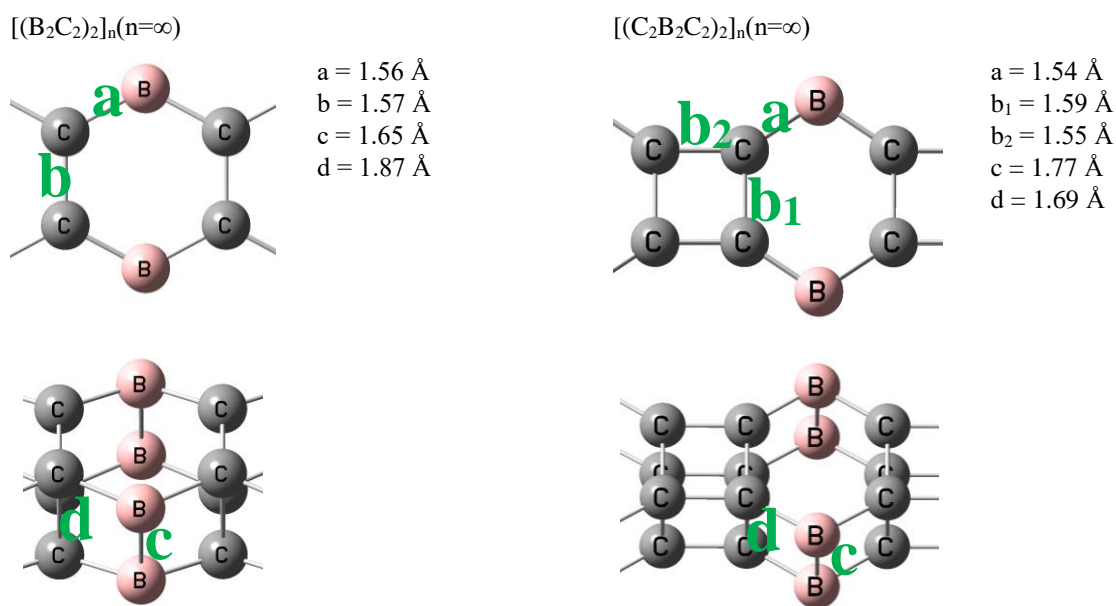


Fig.2 $[(B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$ 、 $[(C_2B_2C_2)_2]_n(n=\infty)$ bond length

【参考文献】

- [1] K. Ohno, H. Satoh, T. Iwamoto, *Chem. Lett.* **44**, 712 (2015).
- [2] K. Ohno, H. Satoh, T. Iwamoto, *Chem. Phys. Lett.* **633**, 120 (2015).
- [3] K. Ohno, H. Tokoyama, H. Yamakado, *Chem. Phys. Lett.* **635**, 180 (2015).
- [4] K. Ohno, H. Satoh, T. Iwamoto, H. Tokoyama, H. Yamakado, *Chem., Phys. Lett.* **639**, 178 (2015).
- [5] 山門 英雄、大野 公一 日本化学会 第 98 回春季年会 2018、2PC-189.
- [6] G. Kresse, J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
- [7] P.E.Blöchl, *Phys. Rev. B*, **50**, 17953, (1994).