

ゼオライト鋳型炭素の構造は 炭素5,6,7,8員環を含むナノグラフェン骨格

(東北大多元研) 西原洋知、京谷 隆、(京都大) 田中秀樹

Carbon Vol. 129, 854.

Published online: 23 December 2017

DOI: 10.1016/j.carbon.2017.12.055

Graphene-based ordered framework with a diverse range of carbon polygons formed in zeolite nanochannels

Hiroto Nishihara, Hiroyuki Fujimoto, Hiroyuki Itoi, Keita Nomura, Hideki Tanaka, Minoru T. Miyahara, Patrick A. Bonnaud, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Naoto Miyamoto, Nozomu Hatakeyama, Akira Miyamoto, Kazutaka Ikeda, Toshiya Otomo, Takashi Kyotani

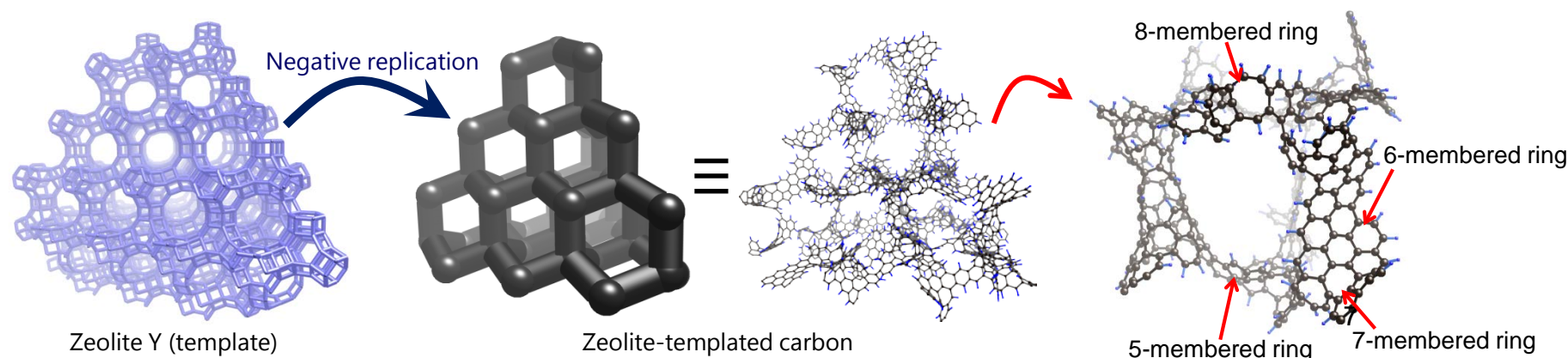


Figure 1. Synthesis scheme of zeolite-templated carbon (ZTC), together with its atomistic framework structure.

ゼオライトを鋳型として得られる規則性マイクロポラスカーボンである「ゼオライト鋳型炭素」の構造モデルを、計算科学を援用して構築しました。得られた構造は、炭素5,6,7,8員環から成る湾曲した単層ナノグラフェンが3次元的に連結しており、X線回折や中性子回折の実験結果に合致しました。また、炭素骨格にはチューブ状の箇所もあり、その内部には窒素などガス分子が侵入できないことが分かりました。仮にチューブ状の箇所が無い骨格を作れば、BET比表面積は最大で4845 m²/gに達することが示唆されました。

We have constructed a realistic structure model of zeolite-templated carbon by using computer simulation. The framework is consisting of a diverse range of carbon polygons, forming curved single-layer nanographene, and its property agrees with those of experimental data such as X-ray diffraction and neutron diffraction. Though ZTC has a very large BET surface area (3935m²/g), the simulation study indicates a possibility to achieve further higher BET surface area up to 4845m²/g.