

---

## 炭素および窒化ホウ素ナノチューブの物性の理解

---

MS Modeling の量子力学ツールである CASTEP と DMol3 を用いて、炭素および窒化ホウ素ナノチューブの物性(構造的、機械的、振動的、および電子的物性)についての研究が行われてきました。

もしナノチューブ技術が十分な商業的可能性に到達した場合には、これらの物性を制御し微調整できると言うことはテイラードデバイスの製造にとって不可欠なことです。

カーボン ナノチューブは、炭素原子が結合してできている長くて薄いシリンダ状のもので、人間の髪の毛と比べるとおよそ 10000 倍細く、シングルウォールまたはマルチウォールのものを作ることができます。カーボンナノチューブは際立った電子物性と機械的物性を備えていますが、これらの物性は原子構造によって、さらに正確に言うと、ナノチューブが形成されるときにグラフェンシートがどのようにして巻かれるか(キラリティ)によって決まります。また、金属性または半導体性のどちらかになります。

カーボンナノチューブは、新規な物性を備えているためにホットな研究領域であり、こうした研究は画期的な実験結果によってさらに盛んになっています。これらの実験結果によって、多くの商業的なナノ電子の応用分野(電解放出をベースにしたフラット パネル ディスプレイ、マイクロエレクトロニクスの新しい半導体デバイス、水素貯蔵デバイス、化学センサ、そしてごく最近では超高感度の電子機械的センサ)で、カーボンナノチューブを活用できる現実的な可能性が得られています。その結果、カーボンナノチューブによって、ナノテクノロジーの実生活での応用が示されるようになりました。

さらに、カーボンナノチューブは強度が大きいために、有望な応用範囲を複合強化材料にまで広げています。

窒化ホウ素のナノチューブもまた同様の応用が有望視されていますが、耐熱性が高く、チューブの直径やキラリティと関係なくバンドギャップが一定であるため、カーボン ナノチューブの性能よりも高い性能をもつ可能性があります。また、窒化ホウ素をコーティングしたカーボンナノチューブは、コーティングしていないものよりもすぐれた電界放出効果を示すことがわかりました。

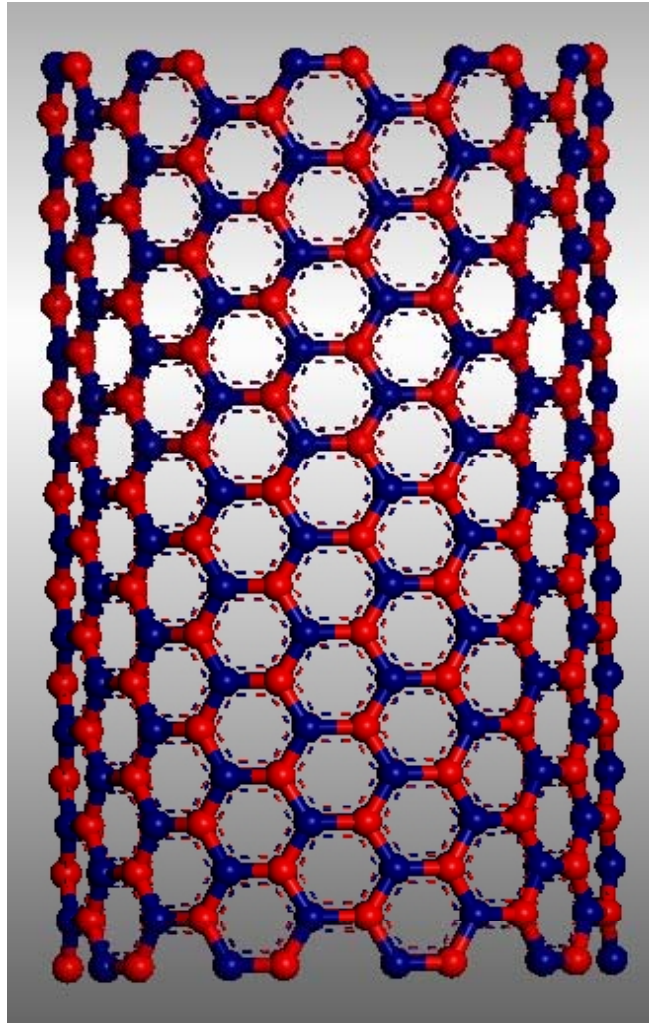
Airforce Base Research Laboratory (Wrights-Patterson)と Rice University, Houston, TX の研究者たちは、MS Modeling の密度汎関数論(DFT)コードである CASTEP と DMol3 を用いて、シングルウォールのカーボンナノチューブと窒化ホウ素のナノチューブの物性(構造的、機械的、振動的、および電子的物性)を研究し比較して、ナノチューブ間のカップリングの効果(もしあるとすれば)を調べました。

Products  
CASTEP  
Dmol3

Company  
Airforce Base  
Research  
Laboratory  
(Wrights-Pat-  
erson)  
Rice  
University,  
Houston, TX

本研究では次のように結論付けています。

・ 共鳴ラマン分光法が、ナノチューブの光学的および電子的物性を研究するための主要な実験法となった一方で、理論とモデルも、観察結果の詳細な分析と同様に、予測を行う際に重要です。本研究では、いかに DFT 法がこの点にインパクトをあたえるかについて次のようなさまざまな場合を示しています：



(10, 10) BN ナノチューブ。B 原子は赤、N 原子は青。

(a) ナノチューブの構造とラジアルブリージングモード(RBM)との関係の簡単なモデルのテストおよび立証 (b) チューブの相互作用の定量化と、それによって生じる単一のチューブ材料と複数のチューブ材料との相違の定量化 (c) カーボンナノチューブ以外の系での RBM の予測。ここでは窒化ホウ素ナノチューブも含まれます。たとえば、この研究では、Bachiloらによって提案された単一の半導体チューブの RBM を予測するモデルが、直径の大きいチューブには当てはまらないことが明らかになっています。

・ DFT 法によって、半径、キラリティおよび相互作用の関数としての、C および BN の両ナノチューブの構造的、機械的、および電子的物性の変化について、詳細な説明を得ることができます。これによって、応用に際して潜在的に重要な影響を与える機能が明らかになります。たとえば光学遷移に影響を与えるファンホープ特異点の位置が研究され、Fermi エネルギーに関して、チューブの相互作用によって必ずしも外側への拡張が生じるわけではなく、小さな半径のチューブに対しては内側への移動も生じることがわかりました。

### 参考文献

1. W. W. Adams, B. Akdim, X. Duan, and R. Pachter, Phys. Rev. B, 2003, 67, 245404.

---

### アクセルリス株式会社

〒105-0003 東京都港区西新橋 3-3-1 西新橋 TS ビル  
Tel: +81 3 3578 3860 Fax: +81 3 3578 3872  
www.accelrys.com/jp/ e-mail: info-japan@accelrys.com

