

電気機械センサーとしてのカーボンナノチューブの応用

Products
DMol3
Company
NASA

NASA エイムズ研究センターの研究者達は、原子的レベルで鋭い先端を持つ AFM チップによるナノチューブの2種類の変形:(1)曲げと(2)押しでの結合性の違いを調べるために、アクセルリス社 MS Modeling の DMol3 を使用しました。

このような研究は、最小の機械的変化も検出できる超高感度なセンサーのより良い設計を可能にすると同時に、カーボンナノチューブをベースとした新しいタイプの歪みゲージのデザインを可能にします。

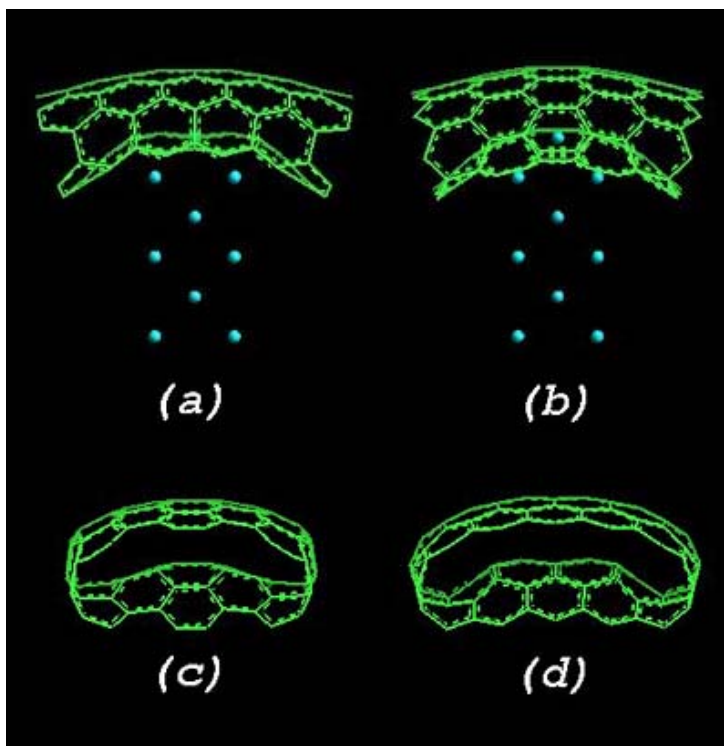


図1 DMol3で緩和させた(a):(6,6)アームチェア(132炭素原子)、および(b):(12,0)ジグザグ型(144原子)のLiチップで変形させたクラスター。変形角はどちらも25°。(c)、(d)はナノチューブの軸方向からの図。sp3配位が無いことを明確に示している。チューブの他の部分は古典的力場計算で表現されているが、ここでは分かり易くするために表示していない。

近年カーボンナノチューブは、商業用途での利用を現実的に可能にするような多くの実験上の革新的成果に支えられ、ホットな研究活動対象になりました。例えば、電界放射型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分野における新しい半導体デバイス、水素貯蔵デバイス、化学センサー、そしてごく最近になって注目されはじめた超高感度電気機械センサーなどへの応用です。

電気化学センサーの開発に関する重要な実験には、長さが 600 nm の溝の上方に吊した金属ナノチューブが使われました。このような懸垂ナノチューブの中心部を

原子間力顕微鏡(AFM)の先端で押すと、伝導率がほぼ 2 桁低下することが分かりました[1]。この伝導率低下は、機械的な拘束下で曲げられたチューブに対して、以前に計算によって予測されていた値より、はるかに大きなものでした。O(N) - タイトバインディング計算により興味ある説明がなされましたが、それはある臨界変形量を超えるとAFMチップ近傍の数個の炭素原子が sp^3 配位になることを示したものでした。これは n - 電子を局在化した π - 状態にするということで、電気伝導率の大きな低下を説明するものでした。

この考えを検討するために、第一原理DFTコードのDMol3を用いて、原子レベルで鋭い先端をもつ AFM チップによる (1) 曲げと(2)押しでのナノチューブの変形での結合状態の違いが検討されました。このようなシミュレーションでは、最小のモデルでも数千原子が必要となり単純なDFT計算では容易ではありません。このため、研究者達はDFTと古典的分子力場計算を組み合わせて使用しました[2,3]。結合の組み替えが起こるとすれば、チューブ中央部の大変形領域でのみ起こるだろうと考えられ、この原子(AFM チップの原子を含め、およそ100 - 150原子)については DFT を適用、また、中央部分から離れた長く、ほぼ直線と考えられる部分は Universal 力場(UFF)により正確に記述されました。

この計算により解ったことは非常に興味深いものです:AFM で押したチューブでは sp^3 配位は起こりませんでした(図1)チューブは伸長され、ある種のキラリティー、例えば金属的なジグザグ型チューブではエネルギーギャップを発生させます[3,4]。この説明は非平衡 Green 関数表式(NEGF)に基づく、タイトバインディング電子移動計算によって支持されました[3]。

その後の実験[5]により上記の理論的解釈は確認され、ナノ技術によるカーボンナノチューブを使った新しいタイプの歪みゲージや圧力センサーの設計探索が促進されました[6]。

NASA エイムズ研究センター(米国カリフォルニア州モフェット・フィールド)のナノテクノロジーグループと現在進行中の共同研究は、近い将来、もっと興味深い結果をもたらすものと期待されています。

この計算科学の成果(参考文献[3])は、2002年度、NASA-CAC の応用科学部門、最優秀論文賞を受賞しました。

参考文献

1. T. W. Tombler et al., Nature, 2000, **405**, 769.
2. A. Maiti, Phys. Stat. Sol. B, 2001, **226**, 87.
3. A. Maiti, A. Svizhenko, and M. P. Anantram, Phys. Rev. Lett., 2002, **88**, 126805.
4. A. Maiti, Nature Materials (London), 2003, **2**, 440.
5. E. D. Minot et al., Phys. Rev. Lett., 2003, **90**, 156401.
6. J. Cao, Q. Wang, and H. Dai, Phys. Rev. Lett., 2003, **90**, 157601.

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/

