

St Microelectronics 社でのカーボン ナノチューブ成長の研究

Products
Materials
Studio:
Materials
Visualizer
Dmol3

Company
St
Microelectro
ics, Italy

St Microelectronics 社の研究者たちはカーボンナノチューブの成長メカニズムの研究に Materials Studio を活用しました。この研究により、ナノチューブ構造の末端へのカーボン二量体の付加の際に放出される大きな自由エネルギーが、カーボンナノチューブの成長のドライビングフォースであることが明らかになりました。

カーボンナノチューブ(CNTs)は分子エレクトロニクス分野で最も有望な材料です。このユニークな導電物性により、電界効果トランジスターや電界放射ディスプレイ、単電子トランジスターなどのデバイスの製造が可能になります。マイクロエレクトロニクス業界では通常、CNTsは遷移金属のナノ粒子(TMNP)の存在下、化学蒸着成長法によって作成されます。

CNTsの簡単な成長プロセスは図1に示したようなもので、支持表面から遷移金属触媒表面への炭素原子の拡散過程を含んだものです。アーク放電やレーザーアブレーションによるCNTsの成長ではCNT端への炭素ダイマーの付加が起こります。St Microelectronics 社の研究者たちはこのモデルの解析にMaterials Studioの表示機能と密度汎関数理論によるDmol3コードを利用しました。

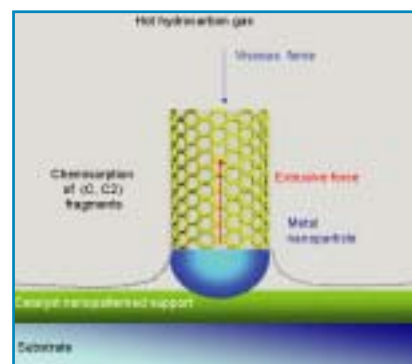


図1. カーボンナノチューブの成長プロセス

CNTsは安定な分子でその生成は非常に発熱的です。Francesco Buonocore と Vincenzo Vinciguerra は Dmol3 を活用し、SWNT の成長端モデルへの炭素ダイマー付加について自由エネルギー変化を温度の関数として解析しました(図2)。炭素の付加で放出される大きな自由エネルギーが押し出し状の成長過程を駆動します。

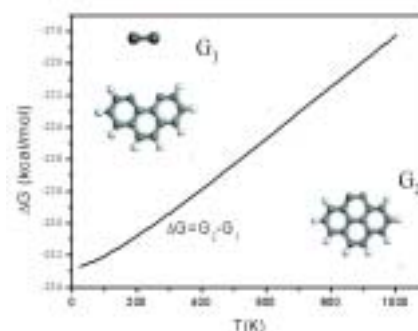


図2. CNT 末端構造への C2 付加自由エネルギー vs. 温度

成長したナノチューブの物性は、炭素原子が円筒状に配列されるグラフェン構造によって決定されます。最終的なグラフェン構造にあたる TMNP 触媒表面のテンプレート効果は、Materials Studio の表示機能と表面作成ツールによって検討されました。鉄(Fe)とコバルト(Co)の(111)面、およびニッケル(Ni)の(1-10)面の格子定数と対称性が SWNT グラフェン構造とマッチするということが示されました。これにより、(111)表面が Fe と Co ナノ粒子領域を、そして(1-10)面が Ni 領域を含むこと、さらにキラリティが性格にきまった SWNTsの成長が可能であることが示されました。

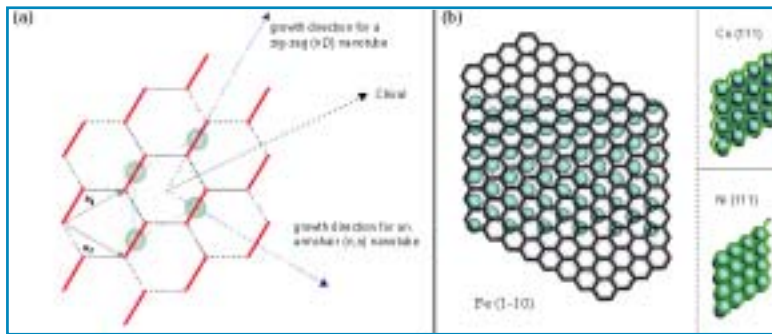


図3 . Fe(111)面、Ni(1-11)面の格子定数、対称性とマッチする SWNT グラフェン構造

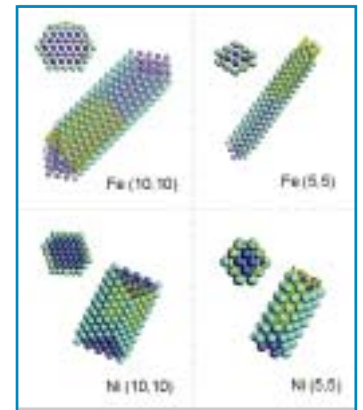


図4 . CNT 構造、対称性とマッチする劈開結晶構造

さらに Fe, Co, Ni の劈開結晶構造が CNT 構造の格子と対称性にマッチしている可能性があります。これは図4に、Fe および Ni ナノ粒子上に成長する(10, 10)、(5, 5)アームチェアー型ナノチューブとして示されています。

参考文献

1. V. Vinciguerra, F. Buonocore, G. Panzera, and L. Occhipinti, Nanotechnology, 14, 655 (2003).
2. R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, London, 1998.