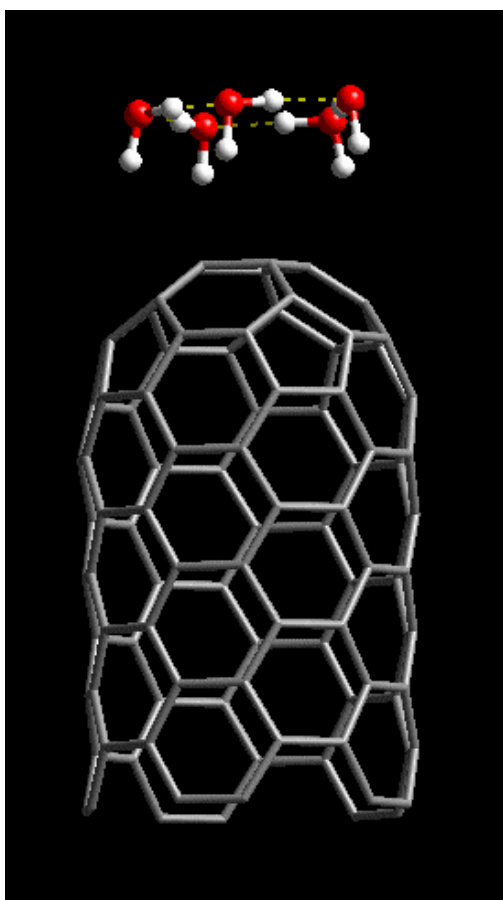


カーボンナノチューブからの電界放射における吸着効果

Products
DMol3

Company
Motorola

Motorola の研究グループは Accelry の Dmol³ を使用し、ナノチューブチップと水の相互作用について研究を行いました。カーボンナノチューブに基づいたフラットパネル・ディスプレイの商業的品質のデザインにおいて重要であるという見解を示しました。



クローズキャップされた(5,5)ナノチューブ上に、電界放射の状況下で安定化された水素結合状態の水クラスター。クラスターはほぼ 0.5eV、チューブのイオン化ポテンシャルを低下させることがわかります。

さまざまなカーボンナノチューブの応用分野のなかで将来性があると考えられるのは、電界放射によるフラットパネル・ディスプレイで、最初の商業アプリケーション実現が最も期待されている分野です。優良なディスプレイ製造のために、動作電圧を下げる試みが続けられています。これを成功させるには、イオン化ポテンシャル(IP)を効果的に下げ、チューブチップからの電子抽出を容易にするような吸着物を導入する方法があります。この方向での重要な実験が最近 Motorola で行われ、カーボンナノチューブから流れるフィールドエミッションを向上させるうえで水の存在が非常に重要であるということが示されました。

原子レベルでの理解を深めるために、Accelrys と Motorola の研究者は、Accelrys の DFT コード DMol³を使用してナノチューブチップと水の相互作用について研究を

進めました[1]。その結果、電圧をかけないと相互作用は弱いことが分かりました。しかし電界放射の条件下では、チューブ先端での大きな電場は；(1) 結合エネルギーを非常に大きくし、吸着物を安定する。(2) IP を下げ、電子の抽出を容易にすることが分かりました。正味の結合と IP 低下は、チップ上に吸着した水分子の数が增加するほど向上しました。反対に、双極子モーメントがゼロあるいは小さい分子は、大きな電場においてさえチューブチップとの間に弱い相互作用しか生じず、フィールドエミッションの特性に影響を与えませんでした。このことは実験でも観測されています。

カーボンナノチューブ内の IP を下げるという上記のアイデアは、M. Grujicic (Clemson University)の研究グループによって、さらに HCl、HCN、LiH のような有極性分子を加えて DMol³ 計算を行い、再確認されました [2]。

参考文献

- [1] A. Maiti, J. Andzelm, N. Tanpipat, and P. von Allmen, *Phys. Rev. Lett.* 87, 155502 (2001).
- [2] M. Grujicic et al., *Appl. Surf. Sci.* 206, 167 (2003).

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/

