

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

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、BIOVIA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。

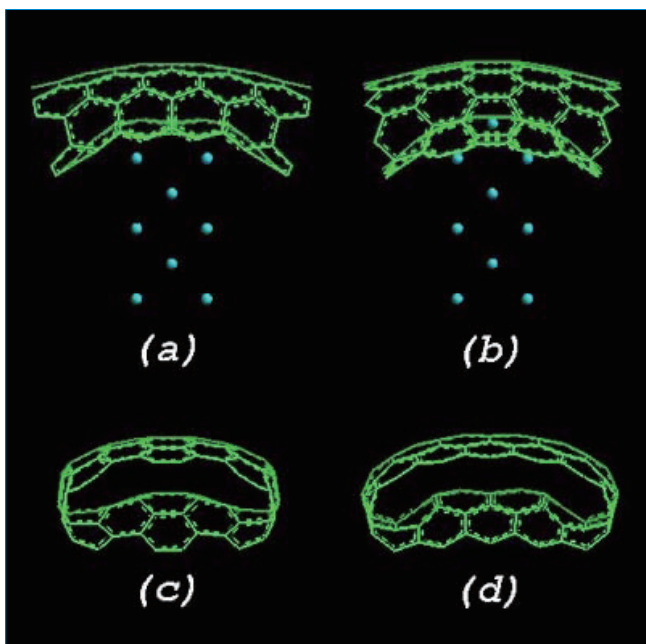


図1 DMol³で緩和させた(a): (6, 6)アームチェアー(1 3 2炭素原子)、および(b): (1 2, 0)ジグザグ型(1 4 4炭素原子)のLiチップで変形させたクラスター。変形角はどちらも25°。(c)、(d)はナノチューブの軸方向からの図。sp³配位が無いことを明確に示している。チューブの他の部分は古典的力場計算で表現されているが、ここでは分かり易くするために表示していない。

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600nm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Products DMol³ Organization NASA原子間力顕微鏡 (AFM) の先端で押し、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sp³配位になると言うことを示したものでした。これはn-電子を局在化したσ-状態にするということで、電気伝導率の大きな低

Organization

NASA

Products

BIOVIA Materials Studio DMol³

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sp³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.