

カーボンおよび窒化ホウ素ナノチューブの理解

MS Modelingの量子力学ツールCASTEPとDMol³を活用し、カーボンおよび窒化ホウ素ナノチューブの特性（構造的、機械的、分子振動的、電子的）について研究が進められました。

もしナノチューブテクノロジーが商業的可能性に完全に到達することになれば、コントロール可能で微調整できるこれらの特性は、テラードデバイスを製造するうえで極めて重要になります。

カーボンナノチューブは、炭素原子結合の長く細い円筒状をしており、人の毛髪の約10000分の1の細さで、単層にも多層にもなります。カーボンナノチューブは特殊な電気特性と機械特性をもっていますが、それは原子構造、より正確に言えばグラフェンシートが筒を巻きナノチューブを形成する様式（キラリティー）、によって異なる特性を持ちます。これらは金属性、半導体性のどちらかの性質を持つこととなります。

カーボンナノチューブは、その新奇な物性の故に激しい競争が行われている研究領域ですが、商業的ナノエレクトロニクスアプリケーション、例えばフィールドエミッションによる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における新型半導体デバイス、水素貯蔵デバイス、化学センサー、最新の超高感度電気機械センサーなどの領域へ利用できる現実的な可能性を実験的なブレークスルーが開いたことによってますますその競争は激化しています。

加えて、カーボンナノチューブの高い強度は、複合強化材料を含めた潜在応用領域にまでその可能性を拡大しています。

窒化ホウ素ナノチューブも同様の高い応用可能性を示し、耐熱性や、チューブ直径やキラリティーに依存しない一定バンドギャップを持ちえることから、カーボンナノチューブのパフォーマンスを上回るかもしれません。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良いフィールドエミッション挙動を示すということが提示されました。

Airforce Base Research Laboratory (Wrights-Patterson)とRice大学 (Houston, TX) の研究グループは、MS Modelingの密度汎関数論 (DFT) コードCASTEPとDMol³を用いて、単層のカーボンと窒化ホウ素ナノチューブの特性（構造的、機械的、振動的、電子的）を研究、比較し、ナノチューブ間の相互効果（もしあれば）について検討しています。

研究は以下を結論しています：

- 共鳴ラマン分光は、ナノチューブの光学特性および電子特性研究における主要な実験技術となりましたが、一方理論とモデルも、観測結果の詳細分析のみならず、予測のためには重要なものです。この研究は、DFTによる方法が与えるさまざまなインパクト、例えば、(a)ナノチューブ構造とRBMの関係の単純モデルをテスト、検証する、(b)チューブの相互作用効果を定量化し、それにより単層および多層チューブ材料の相違を定量化する、(c)窒化ホウ素ナノチューブを含め、カーボンナノチューブを超えるRBMsを予測する。例えば、BACHILOらのモデルに提示されている、孤立した半導体チューブのRBMsの予測は、大きな直径のチューブでは適用できないことを明らかにする、などである。
- DFT法によって、半径、キラリティー、相互作用の関数として、CおよびBNナノチューブの構造的、機械的、電子的特性の変化の様子が詳細に描かれました。アプリケーションに将来重大な影響を与える特性であることを明らかに

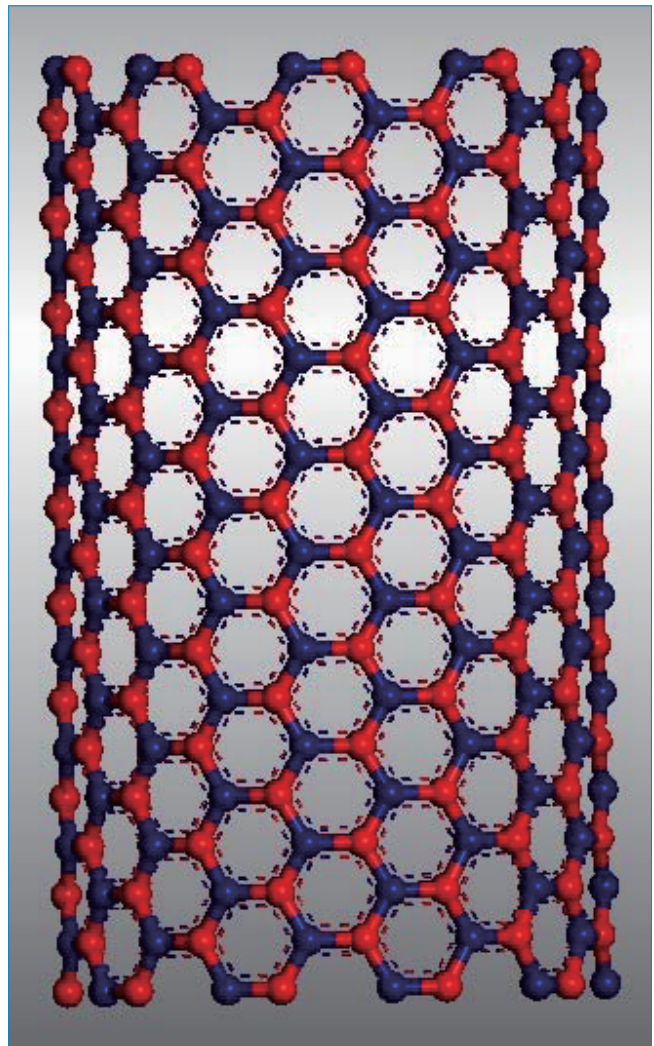
Organization

Airforce Base Research Laboratory (Wrights-Patterson) Rice University, Houston, TX

Products

BIOVIA Materials Studio CASTEP

BIOVIA Materials Studio DMol³



しました。例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、チューブの相互作用はフェルミ・エネルギーに関して必ずしも外部拡大しないこと、一方小さな半径のチューブには内部移動をもたらすことが明らかにされました。

参考文献

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