

## 窒素不純物を使用したカーボンナノチューブの制御

MS ModelingのCASTEPを使用して、単層カーボンナノチューブの電子特性での窒素による置換型不純物の効果について研究が行われました。

kの様な知見によりカーボンナノチューブの電子特性の調整が可能になります。これによってナノテクノロジーおよび分子エレクトロニクスにおけるカーボンナノチューブの利用が可能になり、より優れた電子デバイスの設計につながります。

カーボンナノチューブは長く細い円筒状に炭素原子が結合したもので、人の毛髪よりも10000分の1の細さで、単層にも多層にもあります。カーボンナノチューブは特殊な電子特性、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を巻きつけてナノチューブ（キラリティー）を形成する構造によって異なる特性を持ちます。金属性から半導体性まで変化することができます。

カーボンナノチューブは、新しい特性を獲得するために激しい競争が行われている研究領域です。カーボンナノチューブを商業的ナノエレクトロニクスアプリケーションに実用化する大きな可能性が開かれたことによって、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の領域で、実験が飛躍的に進展しています。その結果、ナノテクノロジーの現実的な応用例が提示されました。

しかしナノチューブに基づくナノテクノロジーと電子デバイスの完全な商業化には、まだ2つの課題が障害として残されています。

- 各チューブの取り扱いが、その大きさのゆえに困難であること
- アプリケーションに適するナノチューブの特性を制御出来るようにならないこと

Physical Review Letters (2003, 91(10), 105502)に報告しているように、Michael Payne教授とthe Cavendish Laboratory (Cambridge大学, UK) の研究チームは、MS ModelingのCASTEPを使用して、ジグザグ型半導体とアームチェア型金属単層ナノチューブに窒素不純物を入れたときの効果について研究を進めました。

半導体性ナノチューブにおいて、ドーピングとして知られている不純物を入れるプロセスは、電子デバイスを製造するための特性チューニングの主要な方法です。ドーピングはまた、化学的に活性な不純物サイトをつくる一つの方法です。

CASTEPを使用することによって、窒素不純物が低濃度（1 atom%以下）な領域で、不純物サイトは化学的、電気的活性となります。さらに研究チームは、互いに不純物サイトが向き合った隣接ナノチューブ間で、チューブ間共有結合が形成できることを発見しました。

これらの発見により、適当にドーピングされたナノチューブ間のトンネル接合の形成によってナノチューブを制御できる可能性への扉が開かれます。ナノチューブ特性は、不純物サイトで生じたリガンド結合により、選択的な機能化によってコントロールが可能になります。

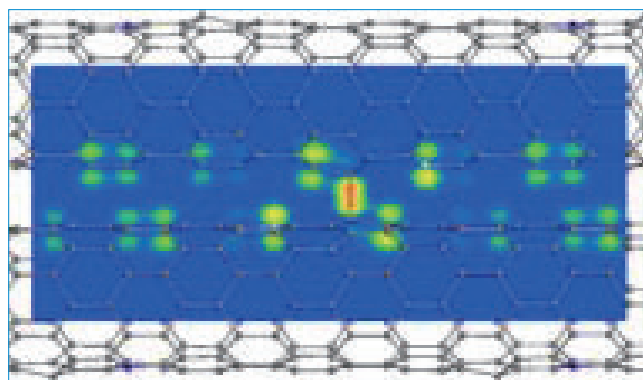
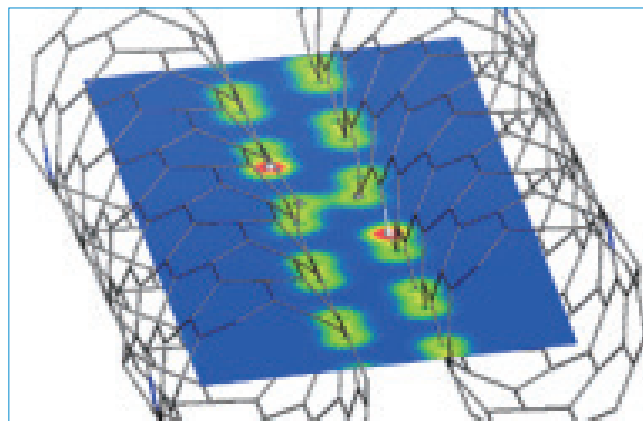
Michael Payne教授は「チューブ間の共有結合と孤立した不純物はその電子状態が非常にゆっくりと減衰し、その相互作用を研究するうえで必要な何百もある原子系を、CASTEPを使用することにより研究対象にすることができました。」と述べています。

## Organization

Cavendish Laboratory, University of Cambridge, UK

## Products

BIOVIA Materials Studio DMol<sup>3</sup>



2つのジグザグ型ナノチューブの窒素ドーピング効果。左のイメージは電荷密度、右のイメージはHOMO 軌道密度（赤色は最高密度、青色は最低密度）を示しています。化学結合は、最高スピン密度（赤色）をもつ2つの炭素原子間で形成されます。

さらにPayne教授は「ab initioレベルから系を扱うことで、この構造を合成するのに役立つであろう実験的観測を予測することができました。」「将来、トンネルジャンクションや改良されたガスセンサーのような、ドーピングされたナノチューブのアプリケーションについて研究を進めたいと考えています。これには最新の量子メカニズムモデリングである、非平衡的電子構造の計算が必要になるでしょう。」と述べています。