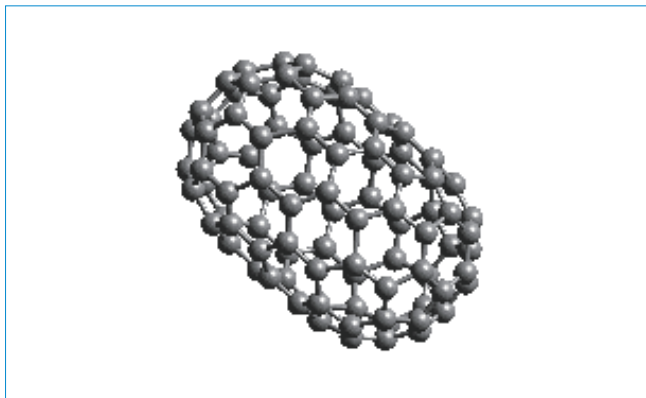


DMol³によるカーボンナノチューブのシミュレーション

モトローラ研究所の研究者達は、ナノスケールの電子デバイスの評価をするためにカーボンナノチューブの研究をしています。ナノチューブは多数（数百）の原子を含んでおり、その研究のためには高度の数値計算ツールが必要です。DMol³は、そのような研究のために必要とされる有効性と正確さを兼ね備えています。



最近、カーボンナノチューブの工業用途に対して関心が高まっています。ナノチューブの電子的性質は、その構造に、より正確には、グラフェン（graphene）シートがナノチューブ（キラリティー）を形成するための包み込みの様式に依存します。基本的なタイトバインディング計算は、ナノチューブが金属結合的であるか、非常に小さいエネルギーギャップ（2、3mev）をもった半導体的であるか、または中程度のエネルギーギャップ（0.2~0.3eV）をもった半導体的であることを示しました。状態密度を探る実験によりこれらの予測を確認し、単一ナノチューブの伝導度測定により、あるナノチューブに対しては整流効果が、および別のナノチューブに対してはオームコンダクタンスが示されました。これらの特性は、ナノチューブが新世代のナノスケール電子デバイスにつながることを示唆しています。そのようなデバイスのプロトタイプを造るための実験が、モトローラ研究所を含むいくつかの企業の研究所で進行中です。

ナノチューブはまた、電界放射（FE）に関する応用に非常に注目されました。金属ナノチューブはナノスケールチップにたとえることができ、その大きな高さ対直径のアスペクト比は、中程度の印加電圧によって電子の電界放射を可能にし非常に大きい電界増強因子を生じさせます。効率的な電界エミッターは、ナノスケールリソグラフィ、電子顕微鏡、マイクロ波デバイスおよびフラットパネルディスプレイなどの非常に多くの工業用途にとって大いに有望です。プロトタイプは、いくつかの企業研究所ですでに開発されました。

上に挙げた用途の全てにおいて、ナノチューブの電子状態の完全な理解を必要とします。ナノチューブは多数（数百）の原子を含み、高度の数値計算ツールがその研究のために必要です。DMol³は、そのような研究にとって必要とされる有効性と正確さを兼ね備えています。特に新しい多重k点サンプリング機能は無限大サイズのナノチューブの効率的な研究を可能にし、遷移状態探索機能は表面化学の研究を促進しこれはコンダクタンス並びに電界放射特性を改良することで知られています。計算精度並びに効率実空間カットオフ半径を用いてうまく調整することができ、これにより非常に大きい構造のシミュレーションを可能にします。

Organization

Motorola

Products

BIOVIA Materials Studio DMol³

参考文献

1. Paul von Allmen, Ramamurthy Ramprasad and Leonardo Fonseca, Motorola Flat Panel Display Division Tempe, Arizona, USA