

## St Microelectronics社での カーボン ナノチューブ成長の研究

St Microelectronics社の研究者たちはカーボンナノチューブの成長メカニズムの研究にBIOVIA Materials Studioを活用しました。この研究により、ナノチューブ構造の末端へのカーボン二量体の付加の際に放出される大きな自由エネルギーが、カーボンナノチューブの成長のドライビングフォースであることが明らかになりました。

カーボンナノチューブ (CNTs) は分子エレクトロニクス分野で最も有望な材料です。このユニークな導電物性により、電界効果トランジスターや電界放射ディスプレイ、単電子トランジスターなどのデバイスの製造が可能になります。マイクロエレクトロニクス業界では通常、CNTsは遷移金属のナノ粒子 (TMNP) の存在下、化学蒸着成長法によって作成されます。

CNTsの簡単な成長プロセスは図1に示したようなもので、支持表面から遷移金属触媒表面への炭素原子の拡散過程を含んだものです。アーク放電やレーザーアブレーションによるCNTsの成長ではCNT端への炭素ダイマーの付加が起こります。St Microelectronics社の研究者たちはこのモデルの解析にMaterials Studioの表示機能と密度汎関数理論によるDMol<sup>3</sup>コードを利用しました。

CNTsは安定な分子でその生成は非常に発熱的です。Francesco BuonocoreとVincenzo VinciguerraはDMol<sup>3</sup>を活用し、SWNTの成長端モデルへの炭素ダイマー付加について自由エネルギー変化を温度の関数として解析しました (図2)。炭素の付加で放出される大きな自由エネルギーが押し出し状の成長過程を駆動します。

成長したナノチューブの物性は、炭素原子が円筒状に配列されるグラフェン構造によって決定されます。最終的なグラフェン構造にあたるTMNP触媒表面のテンプレート効果は、BIOVIA Materials Studioの表示機能と表面作成ツールによって検討されました。鉄 (Fe) とコバルト (Co) の (111) 面、およびニッケル (Ni) の (1-10) 面の格子定数と対称性がSWNTグラフェン構造とマッチするということが示されました。これにより、(111) 表面がFeとCoナノ粒子領域を、そして(1-10) 面がNi領域を含むこと、さらにキラリティが性格にきまったSWNTsの成長が可能であることが示されました。

さらにFe, Co, Niの劈開結晶構造がCNT構造の格子と対称性にマッチしている可能性があります。これは図4に、FeおよびNiナノ粒子上に成長する(10, 10)、(5, 5) アームチェア型ナノチューブとして示されています。

## 参考文献

1. V. Vinciguerra, F. Buonocore, G. Panzera, and L. Occhipinti, *Nanotechnology*, 14, 655 (2003).2.
2. R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London, 1998.

## Organization

St Microelectronics, Italy

## Products

BIOVIA Materials Studio

BIOVIA Materials Studio Materials Visualizer

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