

炭素および窒化ホウ素ナノチューブの物性の理解

MS Modelingの量子力学ツールであるCASTEPとDMol³を用いて、炭素および窒化ホウ素ナノチューブの物性（構造的、機械的、振動的、および電子的物性）についての研究が行われてきました。

もしナノチューブ技術が十分な商業的可能性に到達した場合には、これらの物性を制御し微調整できると言うことはテラードバイスの製造にとって不可欠なことです。

カーボン ナノチューブは、炭素原子が結合してできている長くて薄いシリンダ状のもので、人間の髪の毛と比べるとおよそ10000倍細く、シングルウォールまたはマルチウォールのもので作ることができます。カーボンナノチューブは際立った電子物性と機械的物性を備えていますが、これらの物性は原子構造によって、さらに正確に言うと、ナノチューブが形成されるときにグラフェンシートがどのようにして巻かれるか（キラリティ）によって決まります。また、金属性または半導体性のどちらかになります。

カーボンナノチューブは、新規な物性を備えているためにホットな研究領域であり、こうした研究は画期的な実験結果によってさらに盛んになっています。これらの実験結果によって、多くの商業的なナノ電子の応用分野（電解放出をベースにしたフラット パネル ディスプレイ、マイクロエレクトロニクス新しい半導体デバイス、水素貯蔵デバイス、化学センサ、そしてごく最近では超高感度の電子機械的センサ）で、カーボンナノチューブを活用できる現実的な可能性が得られています。その結果、カーボンナノチューブによって、ナノテクノロジーの実生活での応用が示されるようになりました。

さらに、カーボンナノチューブは強度が大きいため、有望な応用範囲を複合強化材料にまで広げています。

窒化ホウ素のナノチューブもまた同様の応用が有望視されていますが、耐熱性が高く、チューブの直径やキラリティと関係なくバンドギャップが一定であるため、カーボン ナノチューブの性能よりも高い性能をもつ可能性があります。また、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もすぐれた電界放出効果を示すことがわかりました。

Airforce Base Research Laboratory (Wrights-Patterson)とRice University, Houston, TXの研究者たちは、MS Modeling の密度汎関数論 (DFT) コードであるCASTEPとDMol³を用いて、シングルウォールのカーボンナノチューブと窒化ホウ素のナノチューブの物性（構造的、機械的、振動的、および電子的物性）を研究し比較して、ナノチューブ間のカップリングの効果（もしあるとすれば）を調べました。

本研究では次のように結論付けています。

- 共鳴ラマン分光法が、ナノチューブの光学的および電子的物性を研究するための主要な実験法となった一方で、理論とモデルも、観察結果の詳細な分析と同様に、予測を行う際に重要です。本研究では、いかにDFT法がこの点にインパクトをあたえるかについて次のようなさまざまな場合を示しています：

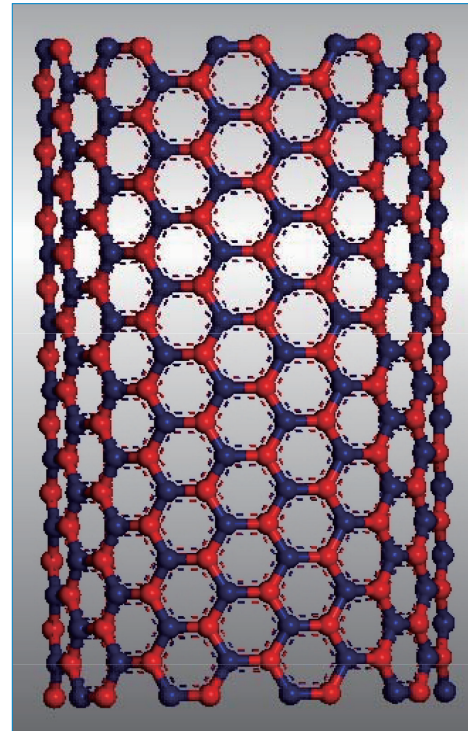
(a) ナノチューブの構造とラジアルブリージングモード (RBM) との関係の簡単なモデルのテストおよび立証 (b) チューブの相互作用の定量化と、それによって生じる単一のチューブ材料と複数のチューブ材料との相違の定量化 (c) カーボンナノチューブ以外の系でのRBMの予測。ここでは窒化ホウ素ナノチューブも含まれます。たとえば、この研究では、Bachiloらによって提案された単一の半導体チューブのRBMを予測するモデルが、直径の大き

Organization

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

Products

BIOVIA Materials Studio CASTEP
BIOVIA Materials Studio DMol³



(10, 10) BN ナノチューブ。B 原子は赤、N原子は青。

いチューブには当てはまらないことが明らかになっています。

- DFT法によって、半径、キラリティおよび相互作用の関数としての、CおよびBNの両ナノチューブの構造的、機械的、および電子的物性の変化について、詳細な説明を得ることができます。これによって、応用に際して潜在的に重要な影響を与える機能が明らかになります。たと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、Fermiエネルギーに関して、チューブの相互作用によって必ずしも外側への拡張が生じるわけではなく、小さな半径のチューブに対しては内側への移動も生じることがわかりました。

参考文献

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