

平成15年度 地球シミュレータ利用報告会
平成15年1月10日

研究課題テーマ
カーボンナノチューブの特性に関する
大規模シミュレーション

報告者

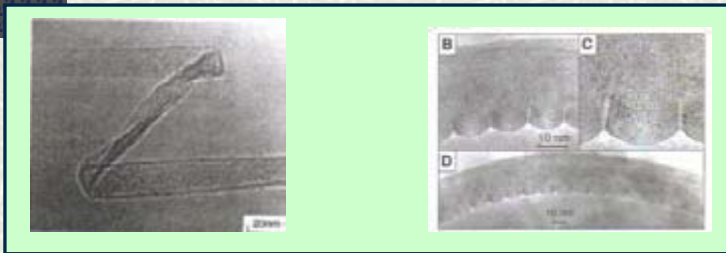
○手島正悟、朴 魯政、宮本良之、南一生、中村壽
財団法人 高度情報科学技術研究機構、NEC

カーボンナノチューブシミュレーション研究会

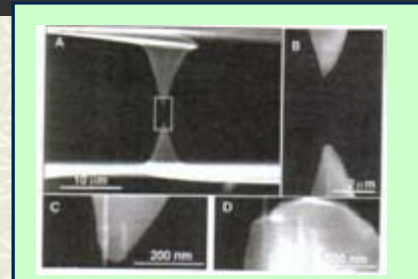
目的と研究テーマ

- (目的) ナノ構造物質、特にナノ炭素類においてノーブルな現象、特性を発見し、新しい機能、性質をもつ材料、デバイスの開発につなげる。
- (背景) 原子の数を1, 2, 3個...と増やして、外挿した結果から、多原子系の性質は予想できない。多原子系は少数粒子系とは異なる性質が発現する→**現実の空間、時間スケールの大規模高速シミュレーションが必要である**
- (研究テーマ: **赤**: 本年度研究テーマ、**青**: 次年度以降)
 - 理論モデル(コード)のベクトル化、並列化
 - 基本特性評価→CNTの熱伝導度、フラーレンの熱分解、**機械特性**、**電子特性**
 - 物質創製→スーパーダイヤモンド(高融点)、スーパージャングルシム(硬く、軽く、導電性あり)、**ナノ構造複合体**
 - 応用→CNT汚染酸素摘出法、**CNT選択的抽出法**、**CNT電子緩和(スイッチングスピンド)**、**ドラッグデリバリー**など

CNT機械特性に関する 研究、開発の現状と期待

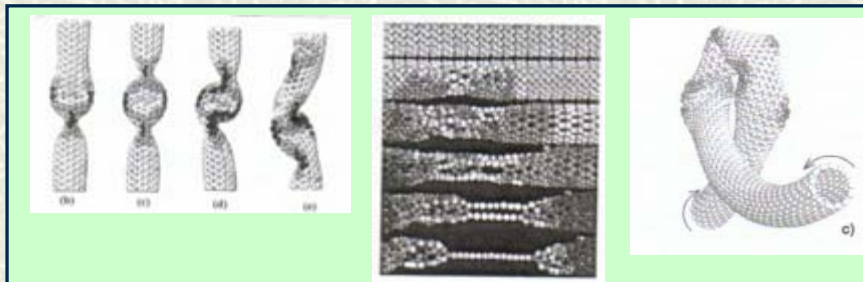


実験: 硬く曲げに強い材料(バンドル)



ナノテク応用: AFMのtip(1本)

CNTの優れた機械性質(硬くしなやか弾力性に富む)を利用して、高機能材料、原子との接触材が開発されてきている。



シミュレーション:(B.Yakobson:1997)

多数原子が必要なため、計算量が少ない経験ポテンシャルを用いている。破壊過程はこのポテンシャルの適用範囲外であり、結果は疑問？

本研究の目的:
大規模量子シミュレーションにより、新奇な基礎機械特性、変形機構を把握し、材料、デバイス開発に生かす。

機械特性の評価法

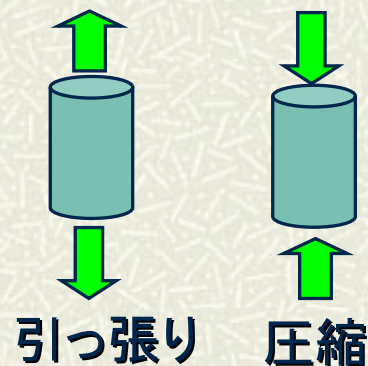
ヤング率

座屈点、構造変形

基本格子内原子
(数十原子)の計算

数千原子
を使う大規模計算

地球シミュレータ
で初めて可能に



原子当たりの計算量
は大きい

原子当たりの計算量は
比較的小さい

精度がよい
第一原理計算法

大規模計算に有効な
タイトバインディング法



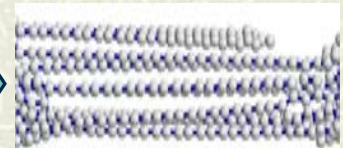
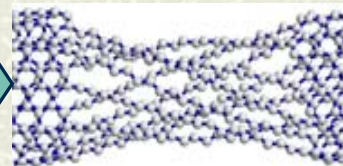
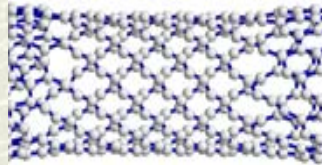
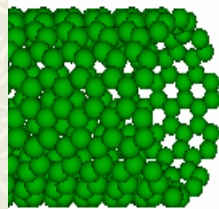
引っ張りシミュレーション

計算法

- ① CNTを引っ張り両端を固定する
- ② 原子を安定状態に移動させる
- 安定状態になってから、再び①、②を繰り返す



Yakobsen等の結果

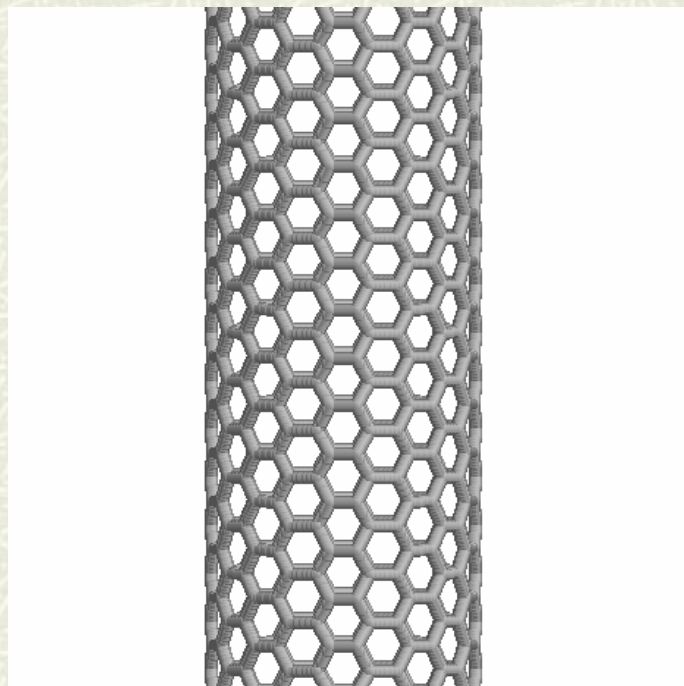


本研究の結果

本研究の結果は六員環の結合が切れる様子が正確に見える。
高速計算により十分な収束精度がとれる。

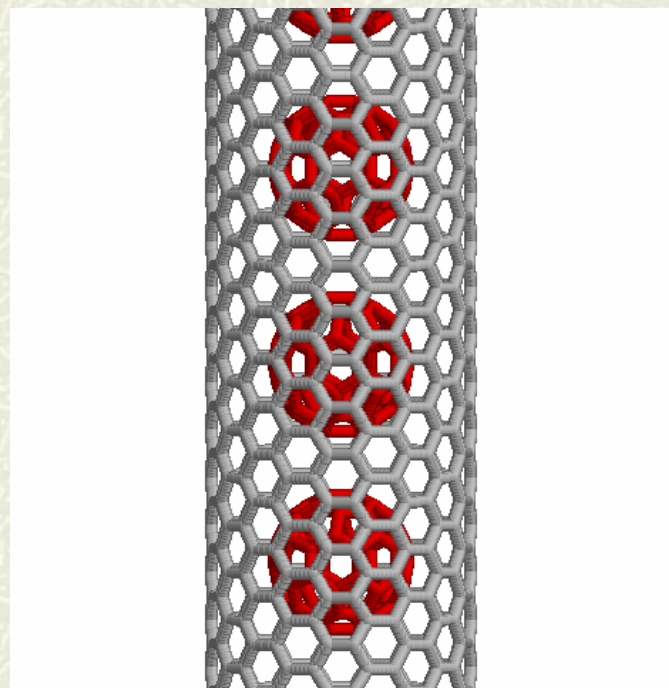
CNTとピーポットの圧縮シミュレーション

伴に(10,10) CNT



CNT

2200原子

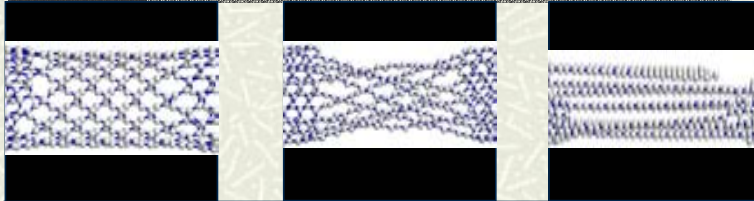


Peapod

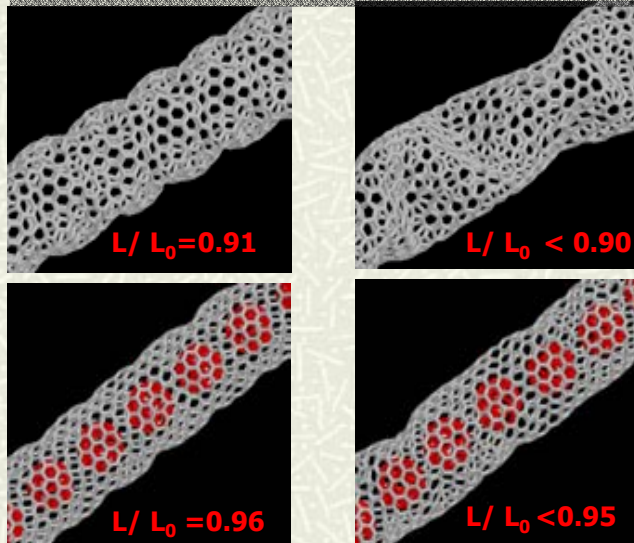
2980原子

CNTとピーポットの機械特性結果

引っ張り



圧縮(座屈構造)

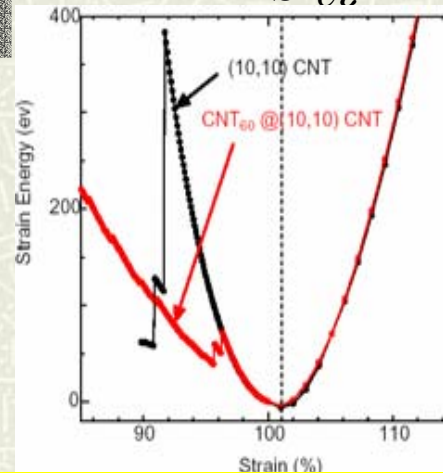
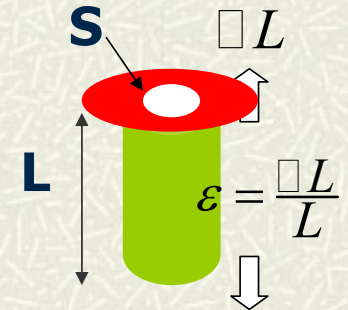


ヤング率

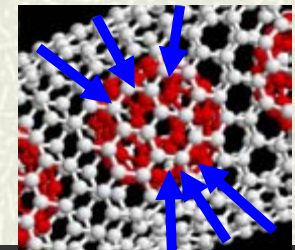
■ フックの法則

$$\frac{F}{S} = Y \frac{\Delta L}{L}$$

$$Y = \frac{1}{L \Delta S} \frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon^2}$$



ヤング率
 ≒ 1.1 Tera Pa
 ダイヤモンドの
 2倍

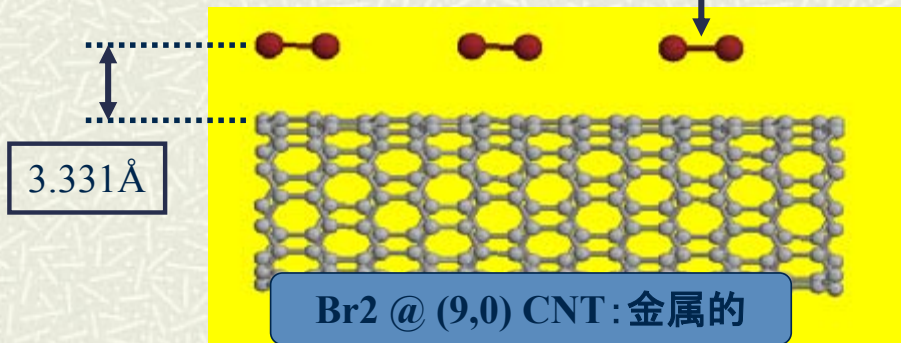


数千原子規模で構造変化
 (座屈など)を確かめた
 世界最初の結果

キラリティーの異なるCNTとBr₂の吸収反応(金属、半導体CNTの選別法)

$$\Delta E = 0.201 \text{ eV}$$

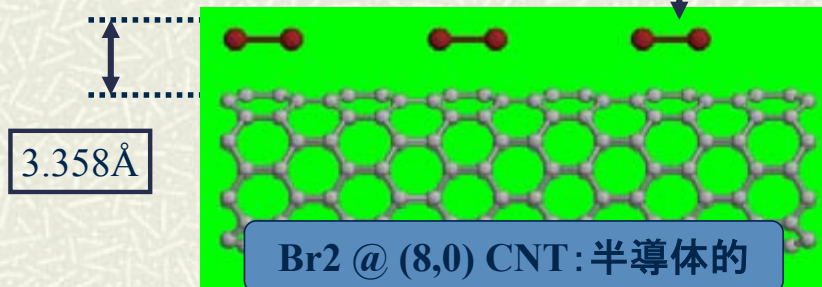
$$d = 2.374 \text{ \AA}$$



第一原理計算によるバンド構造解析から金属CNTのフェルミ面の電子はBr₂分子に移動し、両者の間に電子、ホールで引力が生じるため、Br₂は金属CNTに吸着しやすい。

$$\Delta E = 0.130 \text{ eV}$$

$$d = 2.331 \text{ \AA}$$



金属、半導体CNTが混ざった状態から、これらを選別できる可能性を示した。(世界で初めて)

カーボンナノチューブ内ホットキャリアー(電子・正孔)のエネルギー緩和

目的: 光デバイスの動作速度(時定数)を決定する

電子の運動

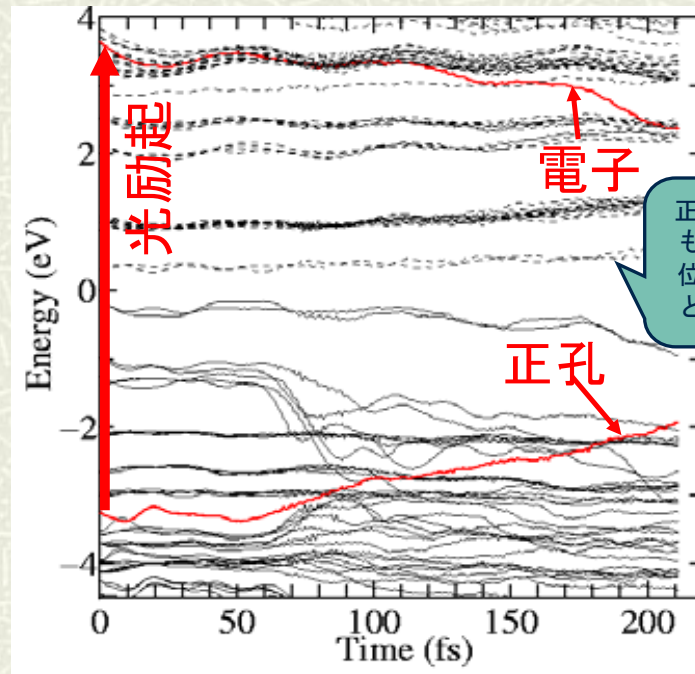
(時間依存密度汎関数理論) $i\dot{\psi}_n = H\psi_n$

炭素原子の運動

(室温でのMaxwell-Boltzmann分布を
仮定したNewton運動方程式)

時間依存シュレディンガー方程式を解いた
応用計算では世界最高記録

結果: 電子-正孔ギャップは210fsの間に
6.5eVから4.5eVに急激に減少。
高速スイッチングが期待できる。



光励起後の電子と正孔のエネルギーの時間変化

まとめ

■ 基礎特性：CNTの機械特性の把握

- ヤング率の評価
- 2次座屈の発見
(応用スケールでの座屈モードの発見は世界最初)
- Peapodの座屈機構の解明(世界最初)

■ 応用：CNT光励起電子の緩和時間測定

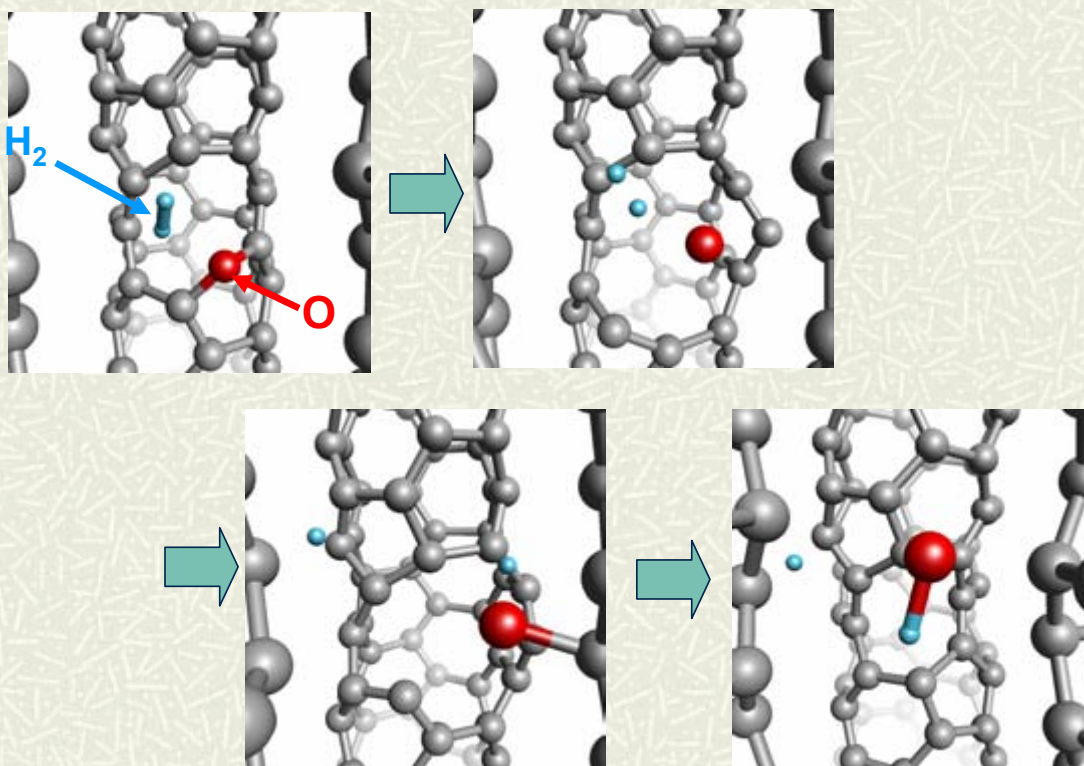
- → CNT光スイッチング特性
(実時間200fシミュレーションは世界最初)

現実の近い規模でノーブルな結果、振る舞いを見ることができた。

成果の公開

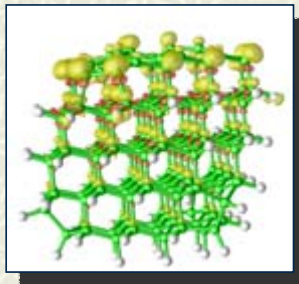
論文投稿中:前期の成果 (光励起酸素脱離のシミュレーション)

招待講演予定:2004年春の米国物理学会のカーボンナノチューブのセッション



成果の公開

論文投稿中 (PRB):前期の成果 (ナノダイヤ安定性の電荷効果)



ナノダイヤを安定させる
表面電子分布

論文 (PRL):前期の成果(負のガウス曲線をもつカーボン構造の磁性)

発表:

- * 米国物理学会 (H14・3月)
- * NTO3 (H14・6月)
- * ナノテクフェア出展 (H14・11月)
- * SC2003 (H14・11月)
- * フラーレンナノチューブ研究会 (H15・1月予定)
- * ナノテク2004 (H15・3月予定)
- * 米国物理学会 (H15・3月予定)

カーボンナノチューブ・シミュレーション 研究会会員

■ 遠藤 守信	信州大学
■ 大澤 映二	豊橋技術科学大学名誉教授
■ 押山 淳	筑波大学
■ 金田 康正	東京大学 情報基盤センター
■ 斉藤 晋	東京工業大学大学院
■ 斉藤 理一郎	電気通信大学
■ 篠原 久典	名古屋大学大学院
■ David Tomanek	ミシガン州立大学
■ 平野 恒夫	お茶の水女子大学
■ 丸山 茂夫	東京大学大学院
■ 渡辺 一之	東京理科大学
■ 宮本 良之	NECラボラトリーズ
■ 大淵 真理	富士通研究所
■ 大野 隆央	独立行政法人 物質・材料研究機構
■ 中村 壽	財団法人 高度情報科学技術研究機構