

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⁽¹⁾、牧野浩二⁽¹⁾、南一生⁽¹⁾、大淵真理⁽²⁾、宮本良之⁽³⁾、中村壽⁽¹⁾

(1)財団法人 高度情報科学技術研究機構

(2)富士通

(3)NEC

カーボンナノチューブシミュレーション研究会

目次

- (1) 目的、研究テーマ
- (2) シミュレーション成果
 - [1] CNTの機械特性
 - [2] 構造探索 -GSW変換法-
 - [3] CNT/金属接合の電子特性
 - [4] 電子・格子エネルギー緩和現象
- (3) まとめ
- (4) 成果の公開

(1) 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→現実的な空間、時間スケール条件下での大規模高速シミュレーションが必要である

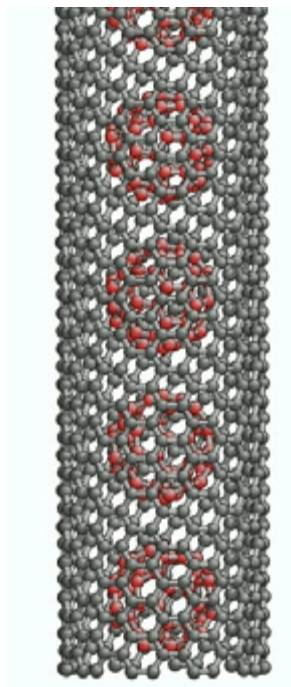
	着手済み研究テーマ	本年度研究テーマ	次年度以降
コード作成 ベクトル化、 並列化	タイトバインディング 時間依存DFT	高精度第一原理 GSW法	多原子版タイトバインディング
基礎特性	CNTの熱伝導、熱安定 内包CNT(ピーポット)の 機械特性:	内包CNT機械特性 バンドルCNT準備 CNT金属接合の電子特性	バンドルCNT機械特性 CNT金属接合のV-I特性
物質創製	スーパージャングルシム	GSW(構造探索)	巨大スーパージャングルシム GSW継続 触媒反応
応用	ピーポット安定性 CNT汚染酸素摘出法 CNT選択的抽出法 チューブ内チャリア緩和	チューブ内チャリ ア緩和温度依存	緩和温度依存の継続

[1] 単一CNTの機械特性(軸方向座屈)

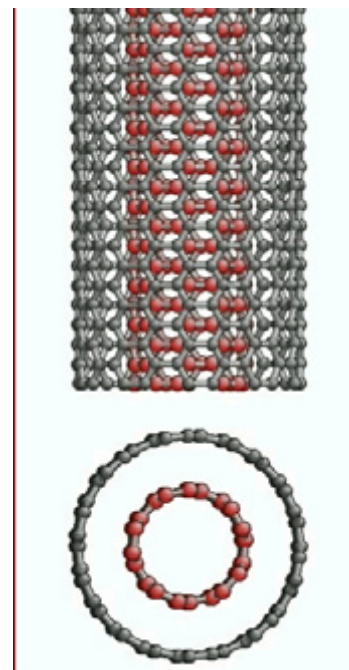


壊れないCNT探線
が必要。内包CNT探
線は強くなるか？

(10,10)CNT
は9%圧縮可能。



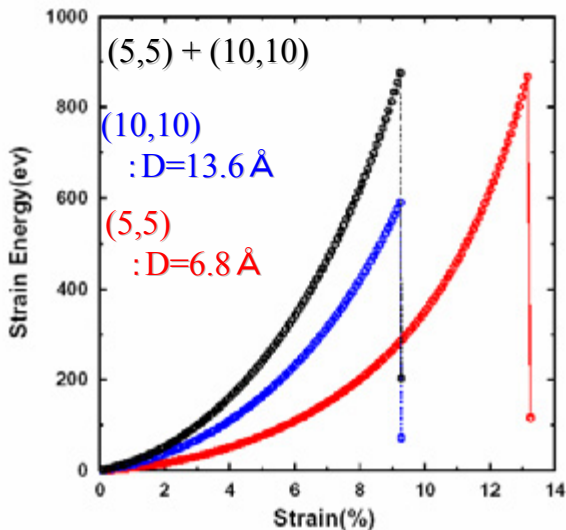
座屈: 4% 圧縮



座屈: 9% 圧縮
(外側の座屈で中側がつぶされる)

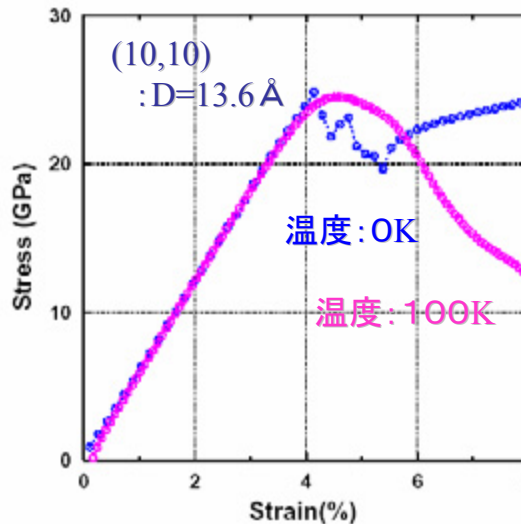
内包CNTは強くはない！

なぜピーポットは壊れやすいか？

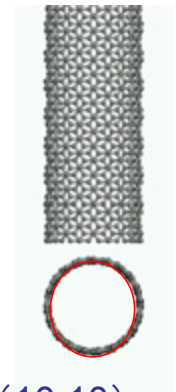


歪 V.S. エネルギー

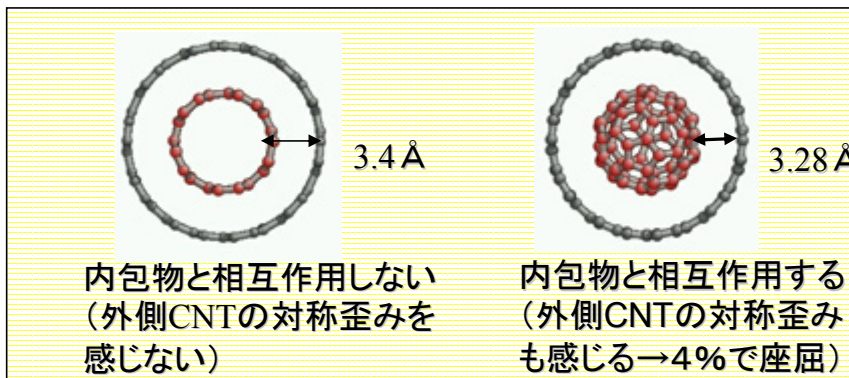
$-\frac{dU}{dx}$



歪 V.S. ストレス

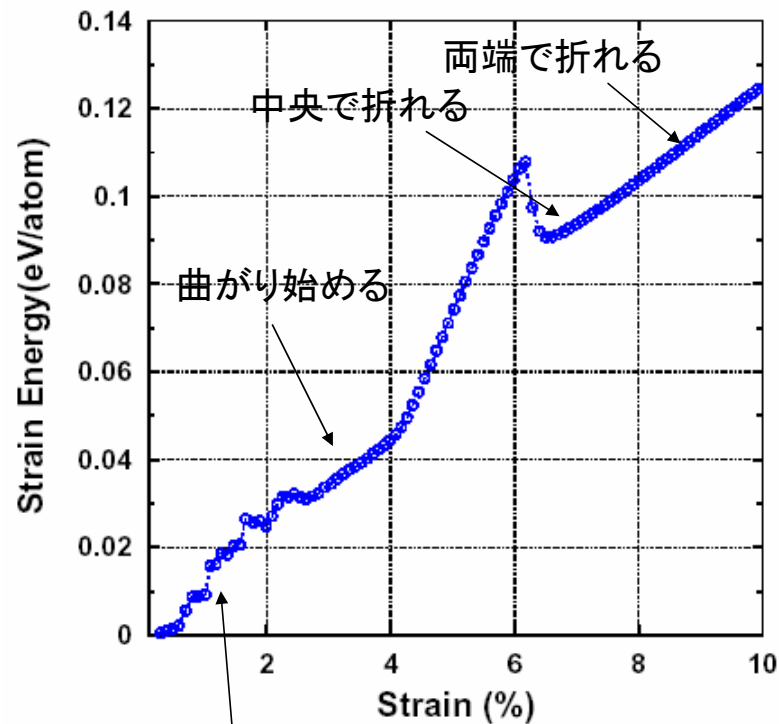


(10,10)
: 対称歪み4%



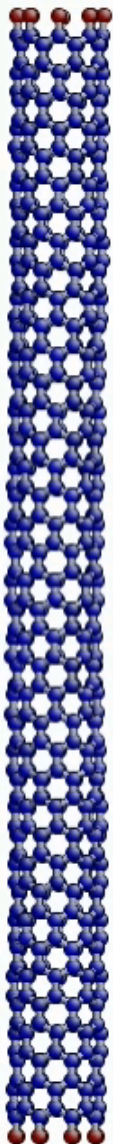
長尺単一CNTの機械特性 (オイラー座屈: 曲げ)

温度100Kの熱揺らぎ

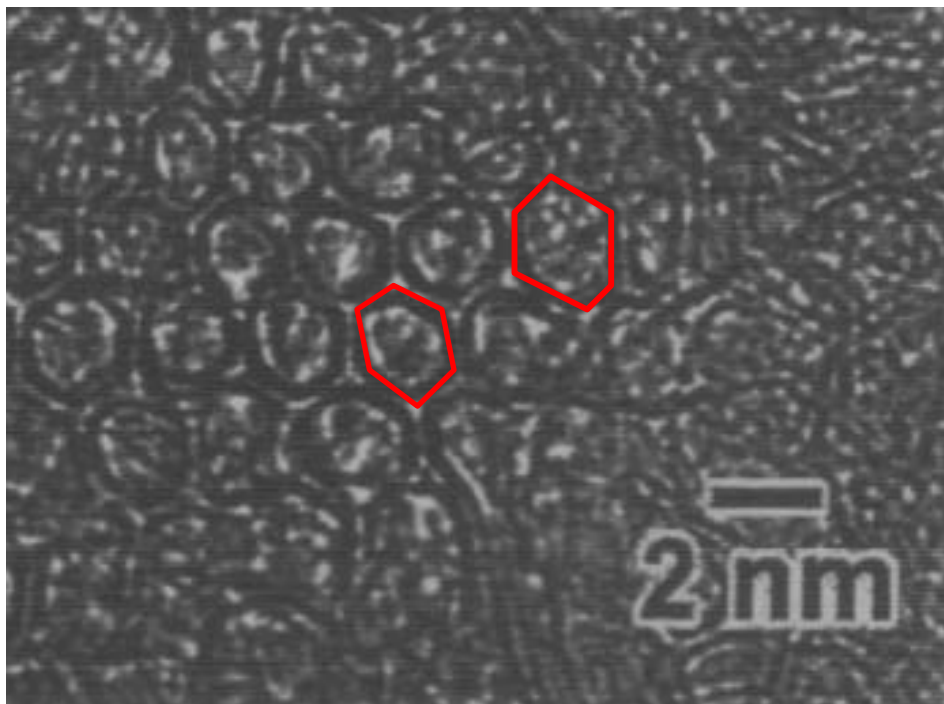


横方向に揺れやすい

一端固定、一端自由
(AFM)の計算を計画中



バンドルCNTの機械特性 (超硬度複合材材料への応用)



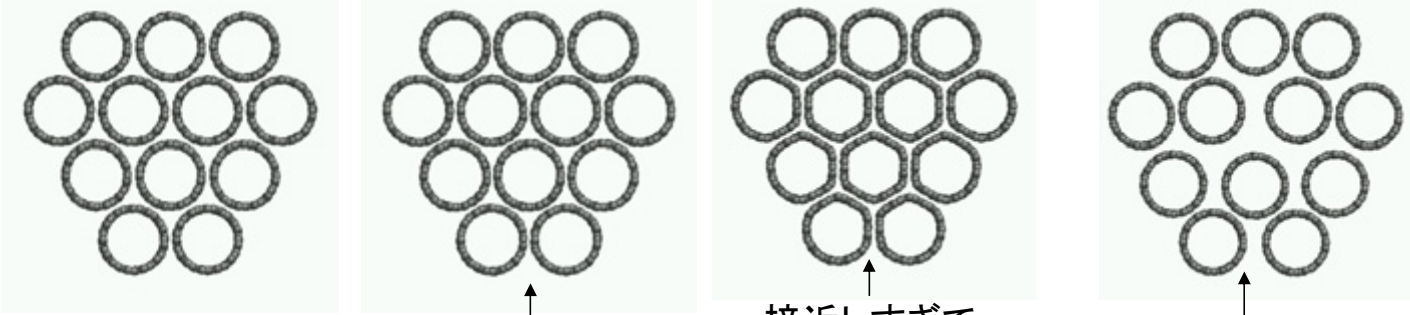
実験では6角形が見える

単一CNTと異なる
バンドル機械特性が
予想される。

特徴:

- (1) 6角形チューブが混じる → (シミュレーションで実証した)
- (2) チューブ側壁が他に囲まれている
- (3) CNT間にファンデルワールス結合が発生 (コードの改良。高速化)

現在バンドルCNTの初期状態作成段階

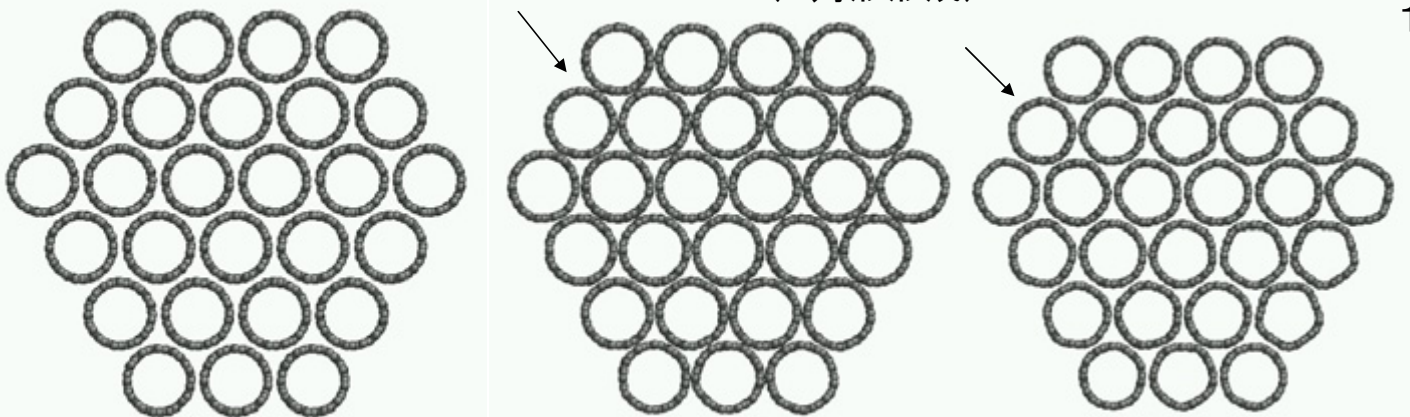


より接近する

接近しすぎて
接面が平坦になる
(六角形形成)

反動で離れていく

100K



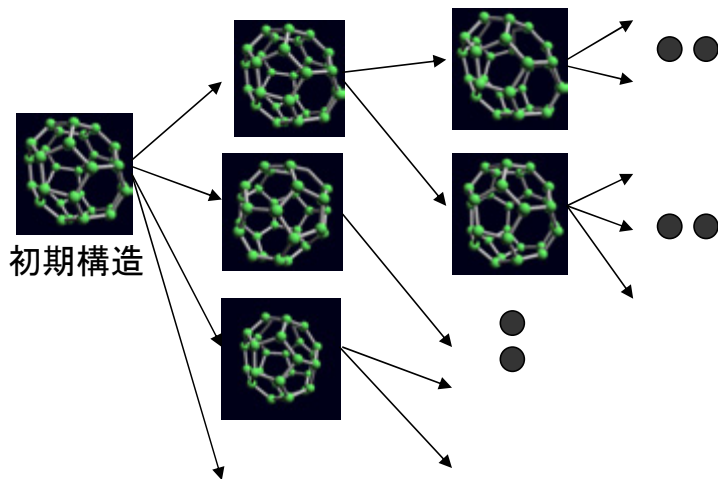
現在は有限個のクラスター。原子個数が多くなれば、六角形で凝縮すると予想している。現在計算中。

バンドルCNTの量子計算は世界最初。

[2] 構造遷移による新規ナノカーボン探索法

目的

ある構造から構造変化を開始し、遷移エネルギーパスを網羅し、構造変化の方向を探る



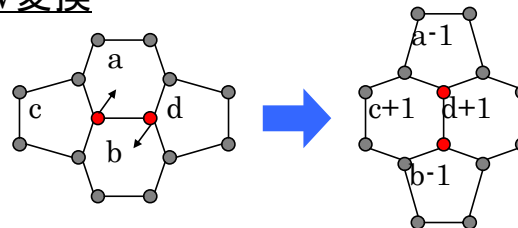
手法

マスター・スレーブ型で並列化

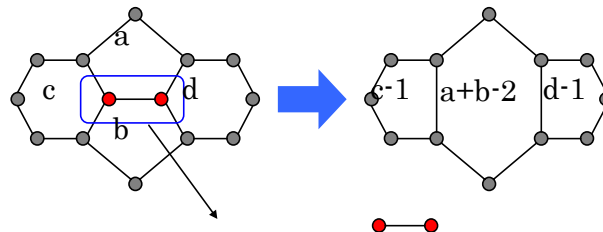
現在数百原子まで探索が可能

探索ルール

GSW変換

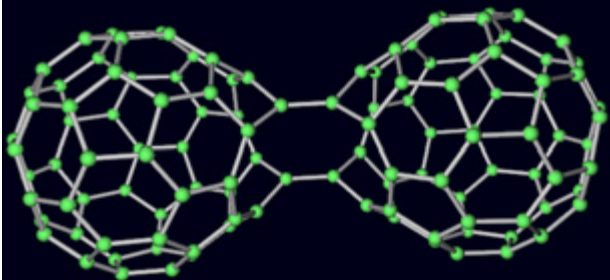


C2L変換



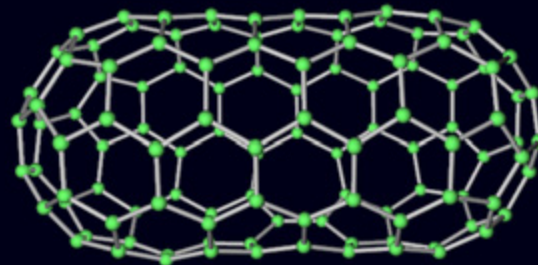
フラーレンからナノチューブへの遷移パス

初期構造

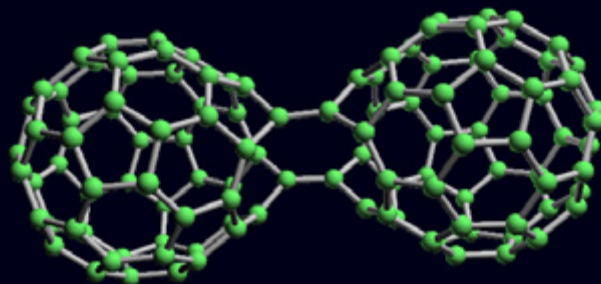
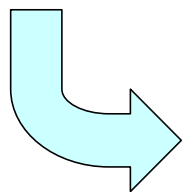


hinge-opened [2+2] C60

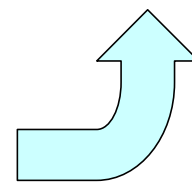
目的構造



short carbon nano tube

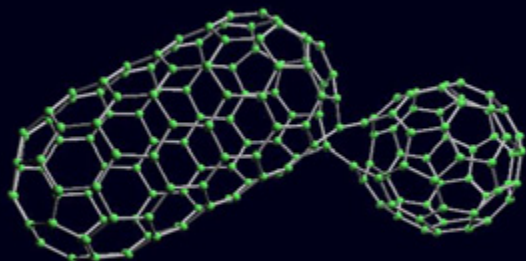


変換過程



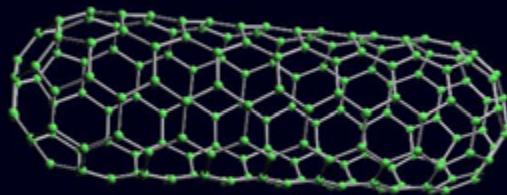
フラーレンからナノチューブへの遷移パス

初期構造

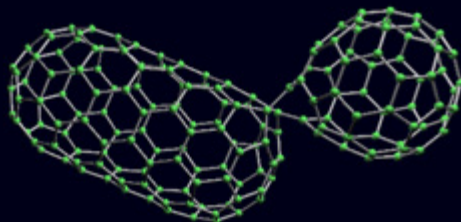
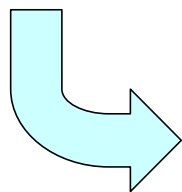


short carbon nano tube
+ C60

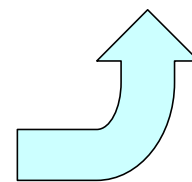
目的構造



carbon nano tube

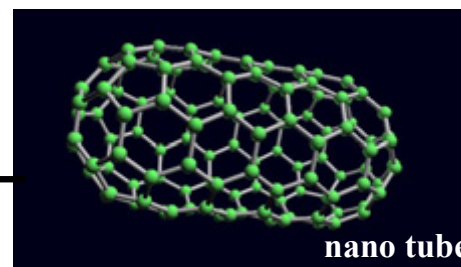
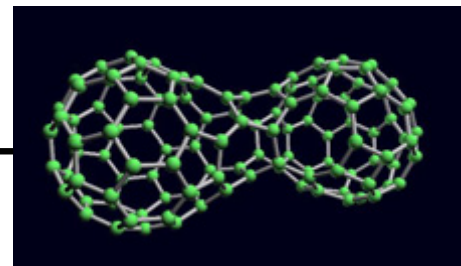
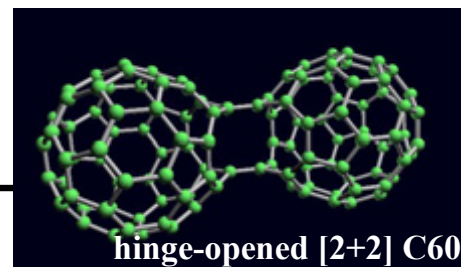
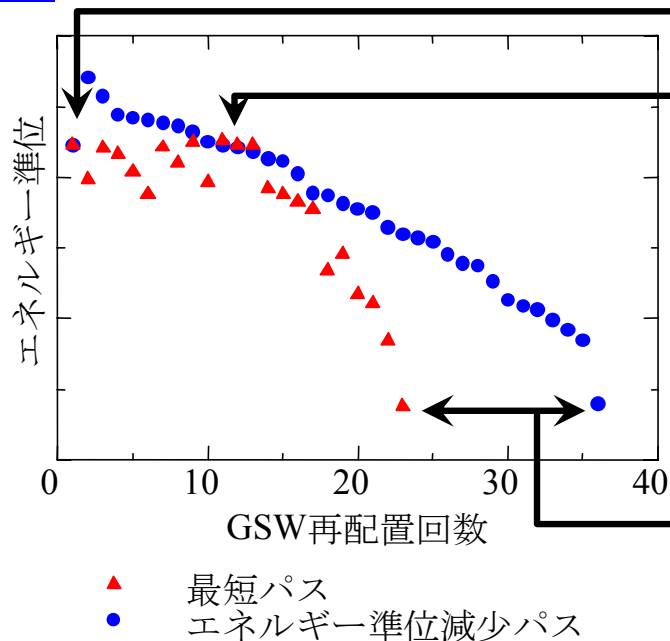


変換過程



C₆₀からCNTへの遷移経路

成果



今後

炭素原子を付加させて成長
繰り返し構造を利用したコード最適化

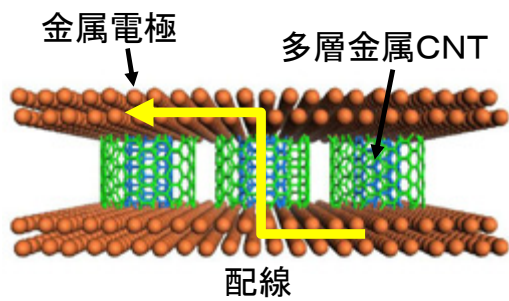
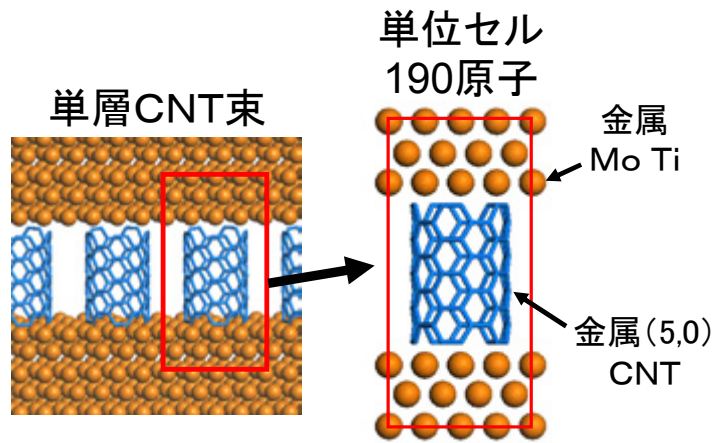
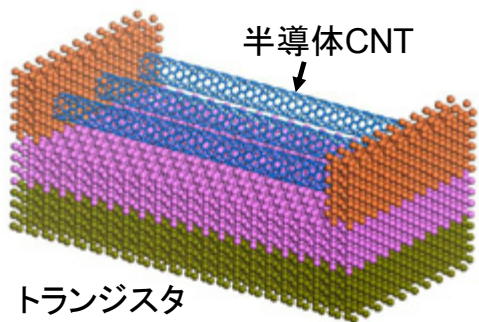
hinge-opened [2+2] C60からnano tubeへ至る複数のパスを確認

[3] CNT/金属接合

背景 将来のエレクトロニクス応用

構造模型

CNT/金属接合



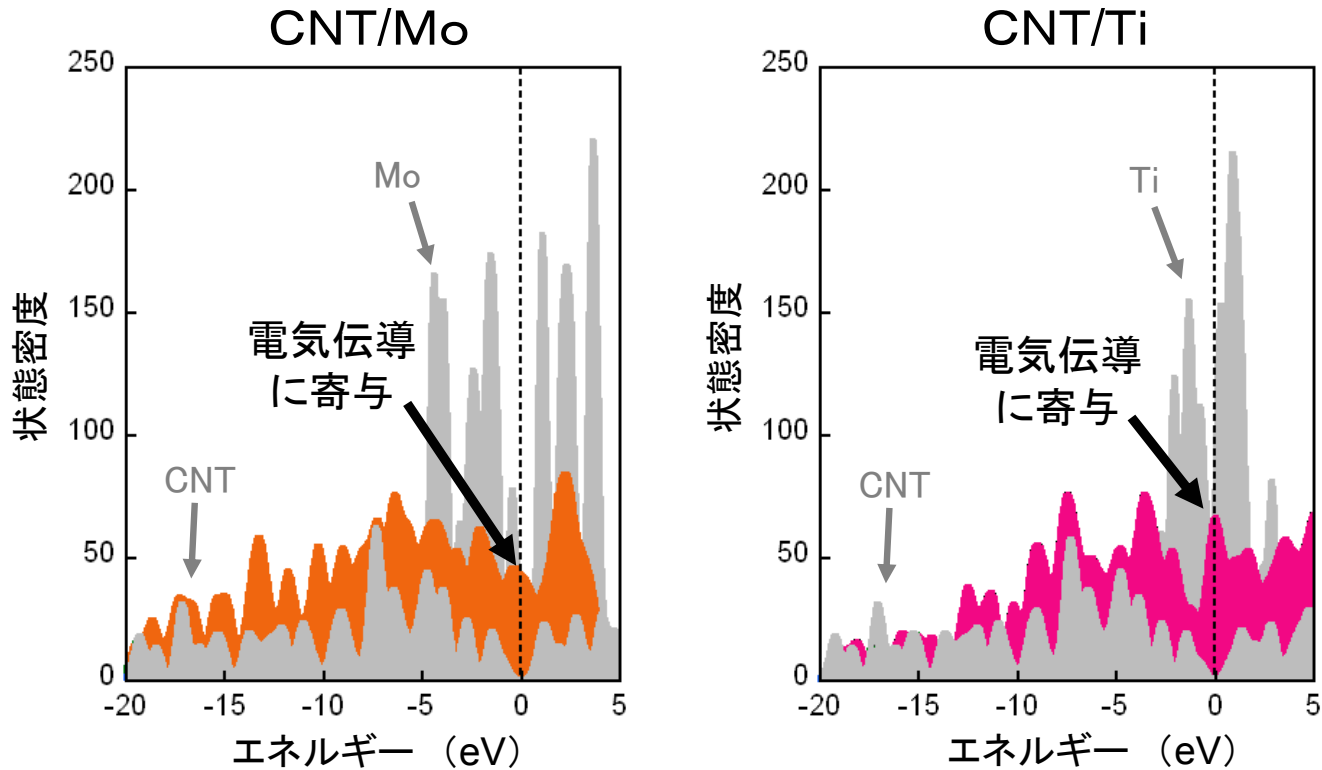
手法

- 高精度第一原理分子動力学法
- ・密度汎関数理論
- ・擬ポテンシャル
- ・平面波展開

電気伝導度・構造安定性が重要

現段階で300原子の大規模計算可能

電子特性

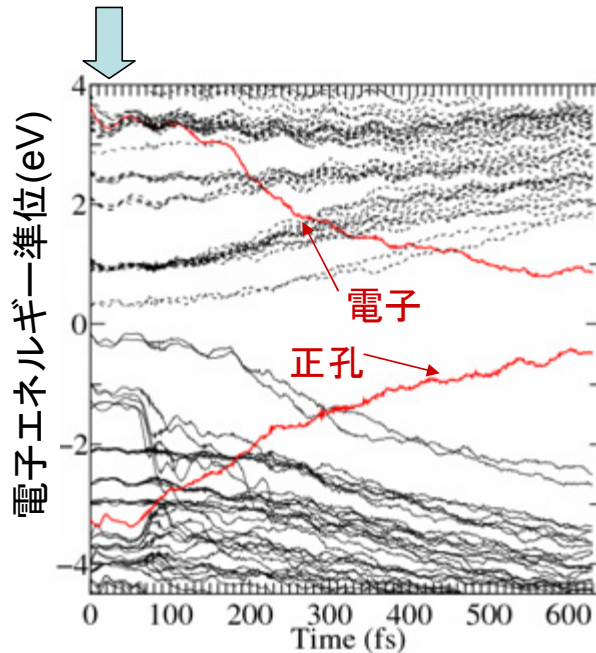


期待される電極材料(Ti, Mo)で良好な伝導の可能性

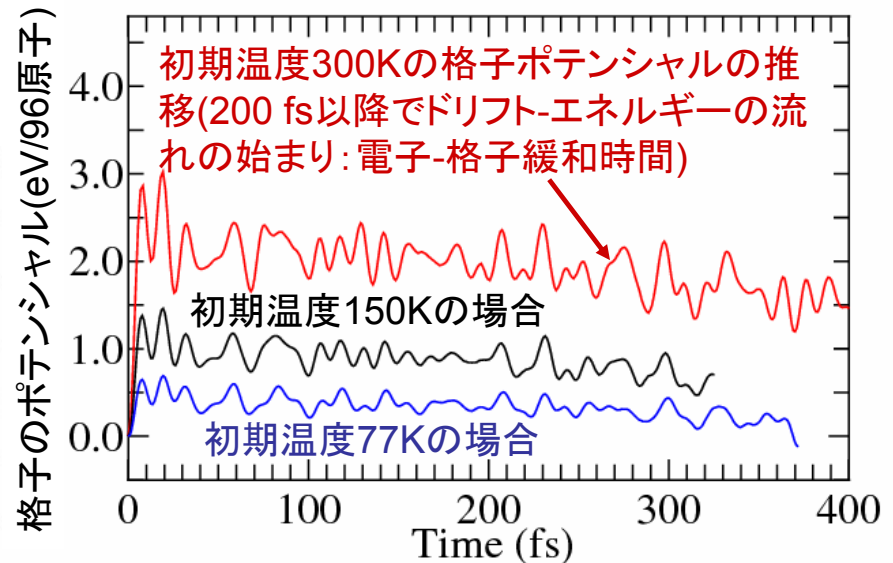
今後 電気伝導度、構造安定性の詳細な比較
多層CNT、半導体CNTへ展開

[4] ナノチューブ内キャリアー緩和

初期温度300Kの電子-正孔ギャップ減少が高速に起きることを発見(昨年より長時間のシミュレーションに成功)



電子-格子緩和の温度依存性



低温になるほど、ポテンシャルのドリフトが遅くなる: 温度に依存した電子-格子緩和

(3) まとめ

基礎特性

CNTの機械特性

30~50(Max435)PN

- ★先端計測機能(AFMチップ等)
- ★複合材料設計(超強度、多機能性等)

- 軸方向座屈の把握
(パイポット、2重ナノチューブ)
- 軸垂直方向(オイラー座屈)過程把握。
- サイズ依存するバンドルCNTを開始
(量子計算では世界最初)

- ★バンドルCNT特性
- ★多原子版タイトバインディング

CNT金属結合の電子特性

10(Max10)PN

- ★CNT回路電子特性

- 300原子の大規模計算可能
- CNTの状態密度導出

- ★電気伝導度の特性

物質創製

使用(最大)ノード数PE

構造探索

10(Max10)PN

- ★ナノカーボン機能創製

- GSW転移法による並列プログラム(マスター・スレイブ法)完成。
- C60+C60→CNTの実証

- ★CNTジャンクション創製
- ★巨大ジャングルジム構造創製
- ★触媒反応

応用

CNT内キャリア緩和

12(Max12)PN

- ★光デバイス動作速度

- 温度の依存した電子・格子緩和の発見

- ★緩和の温度依存特性

- ★応用、○本年度成果、★次年度

(4) 成果の公開

発表:

- | | | |
|------------------------------------------------------------------|--------------|---------|
| * CIMTEC (COMPUTATIONAL MODELING AND SIMULATION...) | (招待講演) | H16・5月 |
| * TDDFT2004 | (招待講演) | H16・6月 |
| * NT04 (Nanotube...) | (招待講演) | H16・7月 |
| * HPCAsia2004 | (一般講演) | H16・7月 |
| * SISPAD2004 (International Conference on Simulation ...) | (招待講演) | H16・9月 |
| * ナノテクフェア | (出展) | H16・9月 |
| * 情報処理学会セミナー | (講義) | H16・10月 |
| * Asian Workshop on First-Principles ... | (招待講演) | H16・11月 |
| * SC2005 | (出展、ワークショップ) | H16・11月 |
| * NanoCarbon2004 | (招待講演) | H16・11月 |

記事:

- *「計算工学」Vol9、No4 特集記事 日本計算工学会

論文:

昨年の計算結果(光励起酸素脱離反応)がPhysical Review Bに受理。

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
- 齊藤 晋 東京工業大学大学院
- 齊藤 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
- 塚田 捷 早稲田大学
- 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