

研究種目：特定領域研究

研究期間：2007～2011

課題番号：19054013

研究課題名（和文） 新型多機能ナノチューブデバイスのデザイン

研究課題名（英文） Design of new type multifunctional device based on nanotubes

研究代表者

安食 博志 (AJIKI HIROSHI)

大阪大学・大学院工学研究科・特任教授

研究者番号：60283735

研究代表者の専門分野：物性理論

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ科学、マイクロ・ナノデバイス

キーワード：カーボンナノチューブ、電磁場応答

1. 研究計画の概要

この研究の目的は、ナノチューブ(CNT)の外場や外的環境が誘起する電子状態変化を調べ、電子状態変化にともなう相互作用変化の活用する戦略により、多入力-多出力型の新型 CNT デバイスを理論的にデザインすることである。また、原子配置は同じであるが、幾何学的構造のみ異なるグラフェンとの比較も適宜行い、場合によってはグラフェンにも研究範囲を拡張する。これまでの研究により、CNTの魅力的な外場応答特性が明らかにされている。この外的環境によるCNTの特性変化に着目し、CNT独自の特性制御の可能性を理論的に調べる。

2. 研究の進捗状況

- (1) 共鳴輻射力による力学的なナノチューブの構造選別の理論について、近似的な表式を導き、輻射力の非輻射緩和依存性について明らかにした。さらに、高次の補正を取り込んだ結果、ナノチューブの直径だけでなくカイラリティにも選択的に強い輻射力がはたらくことを示した。
- (2) 本特定領域内の実験（東大・丸山研）グループと共同研究を行い、垂直偏光の準暗励起子と明励起子の振動子強度比からカイラリティに依存した電子と正孔のバンド非対称性の度合いを定量的に明らかにした。
- (3) ナノチューブのチェーン長 N に対してオーダー N の第一原理計算が可能なグリーン関数法を開発した。この手法を用いてボロンあるいは窒素で不規則にドーブした

ナノチューブの電子状態計算と電気伝導度計算を実施した。

- (4) Fe 原子内包単層ナノチューブには過酸化水素が解離吸着すること、またその結果生じたヒドロキシル基がナノチューブに強く結合し、ナノチューブの炭素間結合を弱めることを明らかにした。
- (5) カーボンナノ構造体の電子輸送特性シミュレーション手法を開発し、グラフェン電極間に挟まれたグラフェンナノフレークのスピン輸送特性を調べ、遷移金属系の材料に匹敵する強いスピン分極を明らかにした。
- (6) 半経験的ファンデルワールス相互作用補正項を含めた有機/金属界面のプログラムを開発し、界面の構造と電子状態を精度よく予測することを可能にした。この手法を用いてナノチューブ/金属界面の研究を開始した。
- (7) カーボンナノチューブ/電極界面での電子状態を調べるためのモデルとして、ベンゼン分子やペンタセンと金属表面との界面での電子状態を調べた。ベンゼン分子については、有機/金属界面の電子準位接続の基板金属依存性は、金属—分子間距離が重要な役割を果たすことが明らかになった。また、ペンタセン分子/金属界面は軌道混成が強く、界面電気二重層は単純な電界移動のみでは見積もることができないことがわかった。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。

本研究では CNT を利用したデバイスの理論的なデザインを最終目標とする。現在までのところ、デザインに必要な各種特性を調べるための理論手法の開発とその応用において、着実な成果を挙げている。進捗状況(1)の成果は、レーザーの振動数を選ぶことで特定の構造をもつ CNT を選択的に捕獲したり、移動できることが示された。進捗状況(4)の成果は、プロトン交換膜燃料電池における鉄原子内包 CNT の触媒作用を念頭に置いている。進捗状況(3)と(5)では第一原理計算に基づく電子輸送の異なる解析手法を開発している。この手法を用いた結果、グラフェンナノフレクによるスピン伝導デバイスの可能性が示唆された。進捗状況(6)と(7)ではデバイス化において重要な CNT と電極界面の基礎研究が進んでいる。さらに、進捗状況(2)に述べられているとおり、実験と理論による本特定領域内の班間研究でも成果を挙げることができた。以上の理由により、研究計画はおおむね順調に進展していると判断した。

4. 今後の研究の推進方策

今後も引き続き、CNT のデバイス化に向けた理論研究を継続して行う。また、CNT だけに限らず、グラフェンもターゲットに加えたい。さらに、領域内の班間連携研究を積極的に行う予定である。

5. 代表的な研究成果

[雑誌論文] (計 32 件)

- ① Y. Miyauchi, H. Ajiki, and S. Maruyama, “Electron-hole asymmetry in single-walled carbon nanotubes probed by direct observation of transverse quasi-dark excitons”, *Phys. Rev. B*, 81, 121415(R)-1-4 (2010), 査読有
- ② K. Toyoda, I. Hamada, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, “Origin of Surface-Band Dispersion at the Pentacene/Cu Interface”, *Appl. Phys. Express*, 3, 025701-1-3 (2010), 査読有
- ③ H. Ajiki, T. Iida, T. Ishikawa, S. Uryu, and H. Ishihara, “Size- and orientation selective optical manipulation of single walled carbon nanotubes: a theoretical study”, *Phys. Rev. B*, 80, 115437-1-11 (2009), 査読有
- ④ M. Ogura and H. Akai, “Full-potential screened Korringa-Kohn-Rostoker method and its application”, *J. Comput. Theor. Nanosci.*, 6, 2483-2498 (2009), 査読有
- ⑤ J. Moreno, K. Kasai, M. David, H. H. Nakanishi, and H. Kasai, “Hydrogen peroxide

adsorption on Fe-filled single-walled carbon nanotubes: a theoretical study”, *J. Phys.: Condens. Matter*, 21, 64219 (2009), 査読有

- ⑥ T. Ono, K. Hirose and H. Goto, “Real-Space Calculation Procedures for Electron Transport Properties of Nanostructures -Overbridging Boundary-Matching Method and Impulse-Response Method-”, *J. Comput. Theor. Nanosci.*, 6, 1789-1807 (2009), 査読有

[学会発表] (計 63 件)

- ① H. Ajiki, T. Iida, T. Ishikawa, S. Uryu, and H. Ishihara, “Theory of radiation force on carbon nanotubes”, *Carbon Nanotubes Nanoelectronics 2009*, Matsushima, Miyagi, 2009/6/11
- ② M. David and H. Kasai, “Understanding SWNT-metal interface via DFT calculations”, *Carbon Nanotubes Nanoelectronics 2009*, Matsushima, Miyagi, 2009/6/11
- ③ K. Kusakabe, “A theoretical analysis on reaction processes of carbon nano-structures with metal oxides”, ISSP ワークショップ「界面パイ電子系における新現象と物理」, 東京大学・柏市, 2009/8/12
- ④ T. Yamashiki, S. Saito, K. Hirose and H. Goto, “A Numerical Calculation Method for Electronic Structures of Few-Body Electronic Systems”, *International Conference on Quantum Simulators and Design 2008*, May 31 - June 3, 2008, 東京, 2008/6/1
- ⑤ 柳澤 将、豊田健治、中野洋輔、濱田幾太郎、Kyuhoo Lee、森川良忠, 「Alq3/Mg 界面及び C6H6/貴金属界面の界面双極子に関する第一原理的研究」, 有機 EL 討論会第 7 回例会, 金沢市, 2008/11/20
- ⑥ T. Asai and H. Akai, “Screened KKR calculation for slabs of micron-order thickness”, *The 10th Asian Workshop on First Principles Electronic Structure Calculations*, 広島大学, 2007/10/29