

平成22年 4月 12日現在

研究種目：特定領域研究

研究期間：2007～2011

課題番号：19054005

研究課題名（和文） ナノチューブ新物質のデザインと電子構造・物性解明

研究課題名（英文） Electronic Properties and Design of Nanotube-Based New Materials

研究代表者

斎藤 晋 (SAITO SUSUMU)

東京工業大学・大学院理工学研究科・教授

研究者番号：00262254

研究代表者の専門分野：物性物理学理論

科研費の分科・細目：複合新領域 ・ ナノ・マイクロ科学

キーワード：カーボンナノチューブ・半導体ナノチューブ・ホウ素ドーピング・窒素ドーピング・密度汎関数理論・不純物準位

1. 研究計画の概要

ナノメートルスケールでの顕著な量子効果は、今世紀の新物質開発・新デバイス設計の鍵とされている。本計画研究は、ナノチューブ・フラーレン複合系を含むナノチューブ新物質系に対して、伝導現象の詳細解明研究、密度汎関数法に基づく第一原理電子構造・全エネルギー研究による安定性予言、さらには新機能炭素ナノネットワーク物質の設計研究を展開することにより、ナノエレクトロニクス素材としてのカーボンナノチューブ系に対して定量的かつ総合的な理論研究を推進することを目標とするものである。

2. 研究の進捗状況

半導体ナノチューブに着目し、デバイスに用いた際に最も重要となる不純物によるキャリアドーピングについて、電子構造からの定量的予測研究を展開した。その結果、ホウ素を置換型不純物として用いることによりホールドーピングが可能であること、ホウ素ドーピングの際に必要なエネルギーは、細いチューブの方が小さくて済むこと、また、ナローギャップ半導体に分類されているカーボンナノチューブにドーピングの方が、置換に必要なエネルギーが小さいこと、さらに、ドーピングされたホウ素原子は、チューブ壁よりも外側に変位すること等、非常に興味深い結果がえられた。そして、(10,0)ナノチューブという、典型的な半導体ナノチューブに対して、置換型ホウ

素ドーピングにより得られる不純物レベルについてドーピング濃度依存性から定量的な予測研究を展開した結果、約 0.2eV のイオン化エネルギーを持つレベルが出現することを見出した。

他方、窒素ドーピングでは、細いチューブの伝導帯を構成する電子状態の特異性から、その不純物状態が空間的に大きく広がる場合があることが判明した。これは、細いチューブにおいて、自由電子的状態のエネルギーが大きく低下し、ギャップ中にまで下りてくることが原因である。その様な場合、不純物準位がギャップ中の浅い位置に現れることも判明した。カーボンナノチューブにおいて電子をキャリアとする n 型半導体を構築する際、その直径により多様な性質が現れることを示す結果であり、大変興味深い。さらに、ナノデバイスの配線材料として着目される金属ナノチューブの典型であるアームチェアナノチューブに関して、その電子物性の基本物理量である仕事関数の予測研究を展開した。そして、グラフェンの仕事関数値よりも、アームチェアナノチューブの仕事関数の値の方が、直径によらず常に少し大きな値を取ることを見出した。

3. 現在までの達成度

① 当初の計画以上に進展している。

上述の通り、カーボンナノチューブのエレクトロニクス応用に非常に重要となる、半導

体ナノチューブにおけるドーピングの電子構造変化を解明したことから、上記①の達成度と判断される。

4. 今後の研究の推進方策

最近、カーボンナノチューブと並んで、炭素一原子層からなるグラフェン系の研究が内外で精力的に進められている。ナノカーボン系として、グラフェンとナノチューブの比較研究が非常に重要となっており、当計画研究でも、その点に着目した上で、デバイス応用に向けた両者の比較研究の展開を進める。

さらに、ナノカーボン系特有の新たな原理に基づくデバイスの可能性探索も、今後の重要な推進課題と位置づけられる。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 15 件)

① K. Umemoto, R. M. Wentzcovitch, S. Saito, and T. Miyake, “Body-Centered Tetragonal C₄: A Viable sp³ Carbon Allotrope”, *Physical Review Letters* **104** (2010) 125504.

② M. Sakurai and S. Saito, “Constant-Pressure Molecular-Dynamics Study of Carbon Nanotubes and Electronic Structure of New Phases”, *Japanese Journal of Applied Physics* **49** (2010) 02BB05.

③ Y. Tanaka, Y. Hirana, Y. Niidome, K. Kato, S. Saito and N. Nakashima, “Experimentally Determined Redox Potentials of Individual (n,m) Single-Walled Carbon Nanotubes”, *Angewandte Chemie* **121** (2009) 7791.

④ T. Koretsune and S. Saito, “Electronic structure of boron-doped carbon nanotube”, *Physical Review B* **77** (2008) 165417.

⑤ P. Zhang, S. Saito, S. G. Louie, and M. L. Cohen, “Theory of the electronic structure of alternating MgB₂ and graphene layered structures”, *Physical Review B* **77** (2008) 052501.

[学会発表] (計 61 件)

① S. Saito: Detailed and Systematic Study of Geometries, Energetics, and Electronic Properties of Thin Carbon Nanotubes; 6th Korea-Japan Symposium on Carbon Nanotube (Ginowan, Japan, October 25-28, 2009).

② S. Saito: Energetics and Electronic Properties of Doped Carbon Nanotubes; CECAM/Psi-k Workshop on Computational Studies of Defects in Nanoscale Carbon Materials (DNC09) (Lausanne, Switzerland, May 11-13, 2009).

③ 是常隆、斎藤晋: キャリアドーピングしたカーボンナノチューブの電子格子相互作用 (日本物理学会 2008 年秋季大会、盛岡市、平成 20 年 9 月 23 日)

④ T. Koretsune and S. Saito: Electronic Structure of Boron-Doped Carbon Nanotube; Materials Research Society 2007 Fall Meeting (Boston, November 27, 2007).

⑤ S. Saito: Electronic Structure and Structural Phase Transformation of Nanostructured Materials; Yukawa International Seminar 2007 (Kyoto, November 12, 2007).

[図書] (計 1 件)

S. Saito and A. Zettl: Carbon Nanotubes: Quantum Cylinders of Graphene (Elsevier, Amsterdam, 2008). ●頁