

研究種目： 特定領域研究

研究期間： 2007～2011

課題番号：19054002

研究課題名（和文） ナノチューブ複合構造体の物性解明と物質設計

研究課題名（英文） Design and study of nanotube hybrid structure

研究代表者

岡田 晋 (OKADA SUSUMU)

筑波大学・大学院数理物質科学研究科・准教授

研究者番号：70302388

研究分野：複合新領域

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ化学・ナノ材料・ナノバイオサイエンス

キーワード：ナノチューブ

### 1. 研究計画の概要

本研究では、量子論に基づく全エネルギー計算の手法を用いて、新奇ナノチューブの物質設計と物性解明、ならびにナノチューブ/異種物質界面の物性解明を目的としている。特に、ネットワーク形状の制御による、ナノチューブ状物質における新奇物性発現の可能性探索と、種々のナノチューブハイブリッド構造の安定性と物性解明を行う

### 2. 研究の進捗状況

当該特定領域研究の実験グループとの密なコラボレーションのもと、実験的に示された種々のCNT電子物性変調、新奇CNT構造体に対する基礎物性の解明を行った。また、新奇ナノ構造体の理論的設計も併せて行い、実験的に目指すべきナノ構造の提示をした。とりわけ、デバイス応用において本質である絶縁体基板上的CNTに対して精密な電子状態計算を行い、吸着による電子状態の変調が生じることを明らかにし、デバイス応用において、基板の影響が決して無視できないことを明らかにした。また、種々の分子のCNT内空隙への挿入により、CNTのバンドギャップが変調されることを示し、その機構を明らかにした。この事はCNTの内部空間の制御によりCNTデバイス特性の制御が可能であることを示したものである。さらに、キャップ構造を有するCNTにおいては、そのキャップに存在する5員環により、本質的にキャップ近傍において電気双極子モーメントが誘起され、その大きさが水の分極と比して決して無視できない大きさであることを示した。以上の結果は何れも、CNTと広義な異種物質との複合構造体であり、複合構造故に生じる新奇物性で

あることから、デバイス応用においてこれら広義複合構造体の物性解明、制御が重要であることを示したものである。

### 3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。

(理由)

平成21年度までの研究期間においては、当初の研究目的、研究計画・方法からの大幅な逸脱、遅延もなく、ほぼ計画通り研究遂行がなされた。当初実施計画にありながら、実施に至らなかったテーマとして、ナノチューブ/金属複合構造体の物性解明と新奇ナノチューブ状物質の電子伝導特性の解明がある。前者に関しては、絶縁体/ナノチューブ複合構造体の物性解明に当初見積もりより多くの時間を割かれたために実施が出来なかった。

### 4. 今後の研究の推進方策

金属/ナノチューブ複合構造体の電子物性の解明を行う。特に、金属/ナノチューブ界面の基礎物性の知見の蓄積を行う。また、ナノチューブ、ナノチューブ複合構造体における熱伝導、電子伝導に対するシミュレーションを行い、電子伝導チャンネルとしてのナノチューブの総合的特性の解明をする。

### 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26件)

① Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Naoki Kishi, Susumu Okada, Shunji Bandow, and

Sumio Iijima ``Effect of Fullerene Encapsulation on Radial Breathing Mode Frequencies of Single-Wall Carbon Nanotubes” Physical Review Letters, Vol. 103, art. no. 027403 (2009). 査読有

- ② Minoru Otani, Susumu Okada, and Yasuharu Okamoto ``Intrinsic Dipole Moment on the Capped Carbon Nanotubes” Physical Review B Vol. 80, art. no. 153413 (2009). 査読有

[学会発表] (計 18 件)

- ① 岡田 晋 ``ナノチューブ新奇物性：複合構造体とネットワーク制御”ナノ学会第 5 回大会(つくば市エポカルつくば), 2007 年 5 月 21 日--23 日(招待講演)