

## 潰れたカーボンナノチューブの第一原理計算

Title: A first principles study of collapsed carbon nanotubes

京極真也、岩田潤一、押山淳

Shinya Kyogoku, Jun-Ichi Iwata, and Atsushi Oshiyama

東京大学工学系研究科物理工学専攻

Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-8656

実験において、直径の大きなカーボンナノチューブ (CNT) は潰れたり、捻れたりしていることが数多く報告されている[1]。理論的にもその原子構造、エネルギー安定性、及び電子状態が報告されている[2-4]。特に、潰れる事によって金属から半導体への遷移やその逆の遷移が生じる事から、将来のデバイス応用が期待されている[3,4]。

我々は密度汎関数理論に基づく第一原理計算によって、図1に示すような直径が 2.7 nm から 6.2 nm のアームチェア型 CNT とそれが潰れた構造について、原子構造、エネルギー安定性、及び電子状態を明らかにした。図2に、局所密度近似(LDA)、及び一般化された密度勾配近似(GGA)に van der Waals を組み込んだ(GGA+vdW)、2つの交換相関ポテンシャルを用いて計算した、潰れた後の CNT のエネルギーと円形の CNT のエネルギーの差の直径依存性を示してある。これから潰れた方が安定となる臨界直径が存在することがわかり、その値は GGA+vdW においては約 5.2 nm、LDA においては約 6.0 nm である事を発見した。これらの値は共に、過去の経験ポテンシャルを用いた結果(4.0 nm)よりも大きい事がわかり[2]、これは経験ポテンシャルが CNT の曲げ剛性を過小評価している事に起因すると考えられる。本計算で得られた原子構造は、経験ポテンシャルによって得られた構造と比較して、端の構造は平たくなりやすく、楕円よりも円形に近くなる事が明らかになった。さらに、アームチェア型 CNT は潰れる際に金属から半導体へ遷移する事が報告されているが[4]、我々は、その遷移の発現は直径に依存し、直径が約 3 nm 以下においては潰れてもディラックコーンが存在し続け、金属から半導体への遷移が生じない事を発見した。また、潰れた際に生じるグラフェン層同士のスタッキング構造の違いによるエネルギー安定性や電子状態の影響についても解明した。

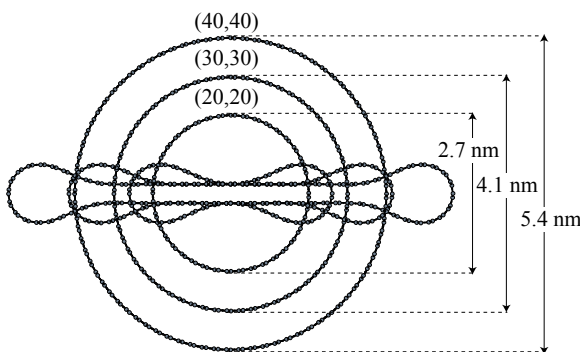


図1 アームチェア型 CNT 及びそれが潰れた構造の断面図

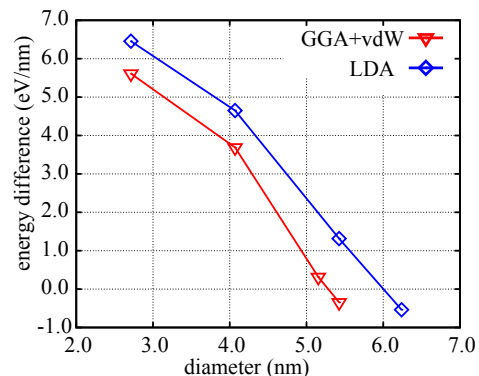


図2 LDA 及び GGA+vdW の交換相関ポテンシャルを用いて計算された潰れる前と潰れた後のエネルギー差

- [1] M.-F. Yu, *et. al.*, Phys. Rev. B **64**, 241403(R) (2001).
- [2] W. Lu, *et. al.*, Phys. Rev. B **83**, 134113 (2011).
- [3] J. -Q. Lu, *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 156601 (2003).
- [4] B. Shan, *et. al.*, Appl. Phys. Lett. **87**, 173109 (2005).