

SWNT への金属蒸着の分子動力学

A molecular dynamics study of metal coating on SWNT

松尾哲平¹⁾, 塩見淳一郎¹⁾, 丸山茂夫¹⁾
(工学系研究科・機械工学専攻¹⁾)

Abstract : Metal coating process on single-walled carbon nanotube (SWNTs) was investigated using molecular dynamics simulations. The simulations were performed for various metals and the metal dependent morphologies were observed reflecting the differences in the metal-SWNT binding energies. Influence of deposition conditions such as initial cluster size and temperature highlight the roles of molecular dynamics on the resulting metal morphologies.

カーボンナノチューブの電子デバイスや熱デバイス応用に向けて重要となる要素技術として、カーボンナノチューブへの金属蒸着技術が挙げられる。その重要性から、これまでに様々な種類の金属を用いた蒸着実験が報告されており、金属の種類に依存した蒸着膜構造が確認されている[1]が、その構造形成メカニズムは未だに明らかになっていない。そこで、本研究では、古典分子動力学法を用いて単層カーボンナノチューブ(以下 SWNT)への金属蒸着のシミュレーションを行う。

本研究では炭素間の共有結合を表すポテンシャルとして Brenner ポテンシャルを用い、炭素間の分子間力及び炭素と金属の間の相互作用に Lennard-Jones(LJ)ポテンシャルを、金属間の相互作用に Zhou らの EAM (Embedded atom method)ポテンシャル[2]を用いた。金属の種類は Au, Ti, Fe の3種類とし、金属が原子単位で SWNT に吸着する場合(制御温度 T_c は 300K と 900K)と、金属原子 27 個からなるクラスタの状態で吸着する場合($T_c=900K$)の2通りに関して計算を行った。さらに、3本の SWNT が束になった状態についても同様に2通りの吸着条件(ともに $T_c=900K$)で計算した。

温度 300K で1本の SWNT に蒸着した結果を Fig.1 に示す。Au では金属クラスタが点在し球形に近いが Fe, Ti では連続的に SWNT 全体を覆うような構造が形成されることがわかる。これは、金属と SWNT との結合エネルギーが Au, Ti, Fe で異なることによって、金属原子の表面拡散の起こりやすさが異なることが原因であると考えられる。一方、温度 900K で3本の SWNT の束に金属を蒸着した結果を Fig.2 に示す。これを Fig.1 と比較すると、SWNT が束になることで Au クラスタは SWNT の軸方向に連続的になり、クラスタに異方性が生じることが分かる。これは、2本の SWNT の隙間で金属原子のポテンシャルが安定になるためであると考えられる。

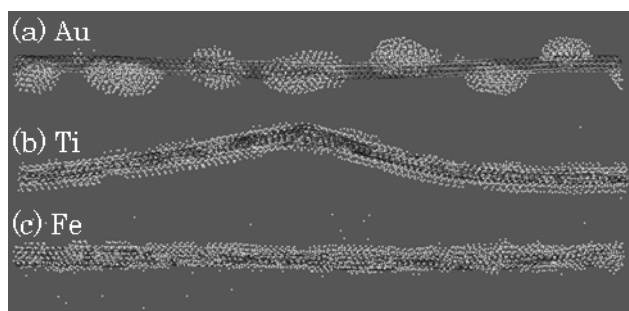


Fig. 1 Deposition of isolated metal atoms on an SWNT at 300K. (a)Au (b)Ti, and (c)Fe.

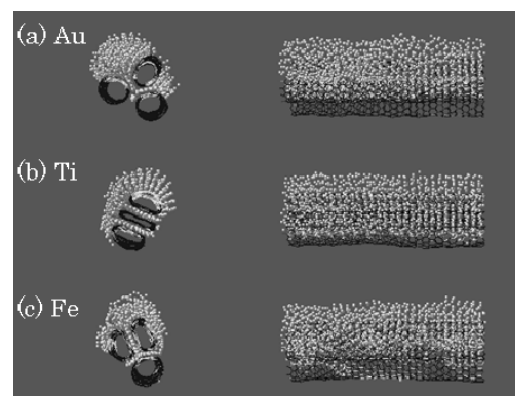


Fig. 2 Deposition of isolated metal atoms on SWNT bundle at 900K. (a)Au (b)Ti (c)Fe.

参考文献

- [1] Y. Zhang et al., Chem. Phys. Lett., 331 (2000) 35.
[2] X. W. Zhou et al., Phys. Rev. B, 69 (2004) 144113.

¹⁾ Tepei Matsuo, Junichiro Shiomi, Shigeo Maruyama: Dept. of Mechanical Engineering, The Univ. of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656