窒化ホウ素ナノチューブに内包された単層カーボンナノチューブのエネルギー論と電子状態

Energetics and electronic structure of single walled carbon nanotubes encapsulated in BN nanotubes

東大工 [1]，筑波大数理 [2]，産総研 [3] ○ 久間 馨 [1], 岡田 晋 [2], 千足 昇平 [1], 丸山 茂夫 [1,3]
The Univ. of Tokyo[1], Univ. of Tsukuba[2], AIST[3] ○Kaoru Hisama[1], Susumu Okada[2], Shohei Chiashi[1] and Shigeo Maruyama[1,3]
E-mail: hisama@photon.t.u-tokyo.ac.jp

2 次元物質からなる van der Waals (vdW) ヘテロ系の合成をうけて，チューブ状物質を凝集，特に内包構造を形成させることにより実現される，1 次元の vdW ヘテロ系が今日注目されている．これらの 1 次元 vdW は，チューブ壁を構成する物質の違いに応じて，その安定性や物性の多様性が期待される．今日，そのようなヘテロ系として，窒化ホウ素ナノチューブ (BNNT) によりコートされたカーボンナノチューブ (CNT) の合成がなされている [1]．この構造は，金属もしくは半導体である CNT を絶縁体である BNNT でコートした究極の被膜導線構造とみなすことが可能であり，広い分野での応用が期待される．しかし，その構造のエネルギー安定性や電子構造に対する知見は未だ明らかになっていない．そこで，本研究では，CNT 内包 BNNT のエネルギー論と電子構造の解明を目的として，当該ヘテロ系に対する密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算を行った．計算には局所密度近似とウルトラソフト擬ポテンシャルを用いた．

本研究では，共にジグザグ型のカイラリティを持つ内層 CNT$(n,0)$ と外層 BNNT$(m,0)$ を組み合わせた vdW ヘテロ構造，CNT$(n,0)$@BNNT$(m,0)$ に着目した．計算の結果，最安定な内外層のカイラル指数差は 9 となり，その下で層間距離が 0.35 nm となる．また，層間の凝集エネルギーは原子あたり 10 meV で，チューブ直径に依存せずほぼ一定であることが明らかになった．他方，凝集エネルギーは層間の相対原子配置に弱く依存し，局所的にホウ素原子と炭素原子が重なる AB(B) 壁間配置が最も安定であることが明らかになった [Fig. 1(a)]．また，内包 CNT のバンドギャップに着目すると，再安定な AB(B) 壁間配置において優位なギャップ変調がみられることを明らかにした [Fig. 1(b)]．

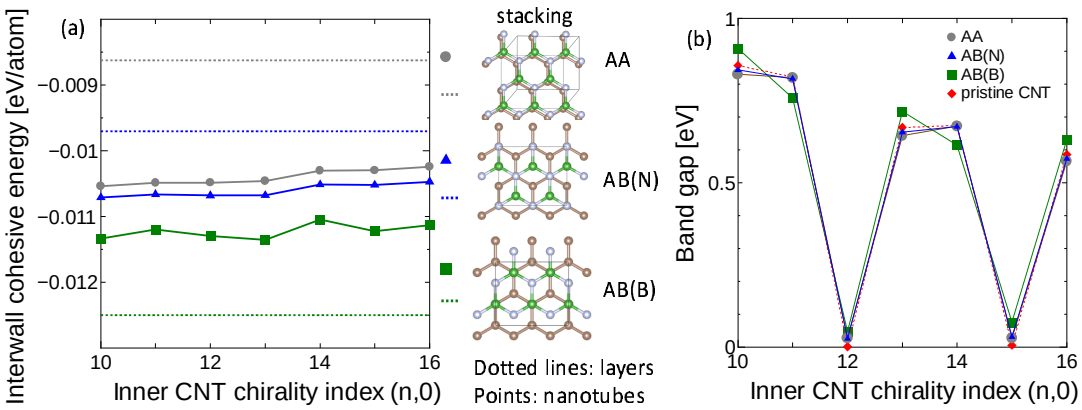

Figure 1: (a) Interwall cohesive energy and (b) band gap of CNT$(n,0)$@BNNT$(n+9,0)$ as a function of CNT index n. Dotted lines in (a) indicate the cohesive energy of hBN and graphene with AB(B), AB(N), and AA stacking arrangements.

[1] R. Xiang, et al., arXiv preprint arXiv:1807.06154.

© 2019年 応用物理学会