

銅炭素複合材料における電子伝導シミュレーション

一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

小野裕己 中村 賢

目的 2013年に産業技術研究所のチームにより、カーボンナノチューブ（CNT）と銅の複合材料（CNT-Cu）が銅と同程度の電気伝導度を有し、かつ銅の約100倍の電流容量を併せ持つ優れた性質を有することが発見された。しかし現在までのところ構造や電気伝導機構の大きな推計に留まっており、今後さらに深い解析が望まれる。本研究では、量子分子動力学法と非平衡グリーン関数法とを併用し、CNT-Cuにおける電気伝導特性を原子レベルで明らかにする。

内容 (5, 5)CNTに2個の銅原子を付着させた系での抵抗値の温度依存性を検討した。この系の模式図を図1に示す。電子状態計算は密度汎関数に基づく自己無撞着電荷拡張ヒュッケル法を用いて分子動力学シミュレーションを実行した。構造緩和をしたのちに時間刻みを1[fs]としてシミュレーションを行い、各時間ステップの原子配置において非平衡グリーン関数法を用いて抵抗値を計算し、その平均値を求めた。その結果から温度に依存する（残留抵抗を除く）抵抗値のみを抜き出したものを表1に示す。

結果 通常の金属と同様に温度の上昇にともない抵抗値が上昇することが確認された。これは温度上昇にともない格子振動が大きくなり、電子が散乱される様子を再現したものと考える。本研究で検討したCNTの長さは約5[Å]（電極部分を除くデバイス領域）と短く、また付着させた銅原子の数も2個と少ない。今後はさらに長いCNTに複数の銅クラスターを付着させた系に対して同様な計算を行い、実験結果と比較可能な抵抗値を求める予定である。

利用した計算機	SX-ACE
使用メモリ	16GB
ベクトル化率	97%
並列化	8並列

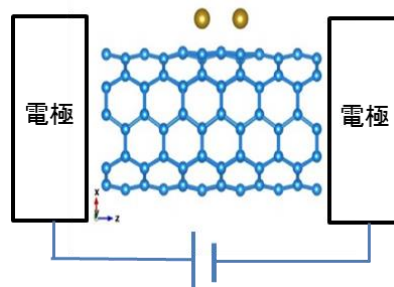


図1 : CNT-Cuの計算モデル

温度[K]	抵抗値[$\times 10^{-17} \Omega$]
300	1.4
800	12.0

表1 : 残留抵抗を除く抵抗値の温度依存性