

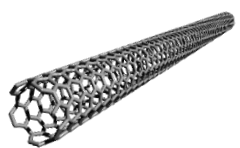
# カーボンナノチューブ-分子間における電荷移動の理論的検討

大阪大学 工学研究科 赤井恵

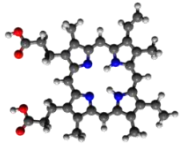
**目的:** 我々は最近, カーボンナノチューブ (CNT) 素子においてCNT表面に吸着した分子 1 個とCNT間の電荷移動に起因する電流雑音の計測に成功した. 室温大気圧下でこのような計測に成功した例は未だかつてなく, そのメカニズムについては分かっていないことが多い. 本研究では, CNT-分子間の電荷移動についてより深い知見を得るために密度汎関数理論 (DFT) に基づく理論検討を行うことを目的とした.

**内容:** 検討にあたり, まず実験に使用した種々の分子 (図 1) の構造最適化をGaussian09により行った. 更に, 孤立した分子の電子状態計算をDFT計算により行った.

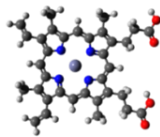
**結果:** DFT計算による分子のHOMO-LUMOレベルは図 2 の通りである. 実験結果および計算結果の比較から電荷移動は分子の酸化還元反応によるものと考えられる.



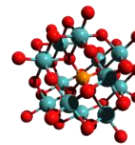
Carbon nanotube



Protoporphyrin



Protoporphyrin IX zinc(II)



Phosphomolybdic acid

図1. 分子のモデル

利用した計算機

- ノード時間
- 使用メモリ

VCC

約2000時間(合計)  
20GB

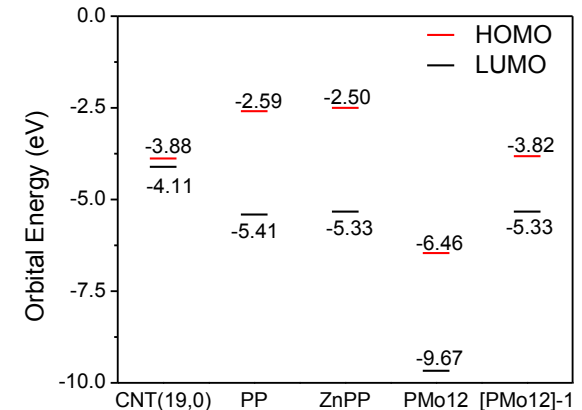


図2. 分子軌道計算結果