L-50

カーボンナノコイルの電気伝導特性

The effect of curvatures on the transport properties of carbon nanocoils

○佐々木善瑛 [1]，胡桃聡 [2]，松田健一 [2]，畠中憲之 [3]，須田善行 [4]，鈴木薫 [2]
Yoshiaki Sasaki[1], Satoshi Kurumi[2], Ken-ichi Matsuda[2], Noriyuki Hatakenaka[3], Yoshiyuki Suda[4], and Kaoru Suzuki[2]

Abstract: 本研究では，カーボンナノコイルのような変形した量子細線の電気伝導特性について，理論的に考察した．細線の曲率は，そこを通過する電子に対して引力的なポテンシャルとなることや，それによって電子の運動が量子力学的な透過と反射の影響を受けることがわかった．一方，ある特定の曲げ方をする場合には，よく知られた無反射ポテンシャルと一致する状態となるため完全透過条件となることも示された．いくつかの曲げ方について，曲率を連続的に変化させた場合の透過率の計算も行い，量子細線の変形を利用した力学的変位センサーへの応用について提案する．

1.　はじめに

現在，半導体ナノワイヤーやカーボンナノチューブなどの量子細線は，次世代のナノ電子デバイスにおける配線技術や，それ自体を発光・受光素子として用いることへの応用など，基礎と応用の両面から注目されている．

これら量子細線の電気伝導に関する研究は，これまでも精力的に行われてきたが，量子細線の変形の効果はあまり考慮されてこなかった．つまり，変形の空間的尺度が電子の波動関数の広がりに比べて十分に大きいため，電気伝導への影響が無視できるほど小さかったためである．しかし実際に量子細線の変形が波動関数の空間的尺度と同程度になってくる状況では，積極的に考慮すべき状態になると考えられる．

本研究では，図１に示すような，カーボンナノチューブをコイル形状にしたカーボンナノコイルについて，その曲率が電気伝導特性に及ぼす影響を，理論的に検討した．

2. 理論

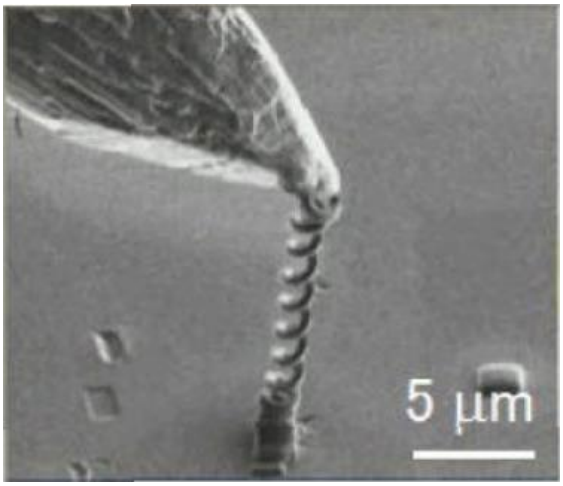

図 1: カーボンナノコイルの走査型電子顕微鏡像.

2.1 曲率の効果とシュレーディンガー方程式

量子細線の曲率をどのように量子力学的に扱うのかは，多くの先行研究がある[1]．今回は，量子細線を一次元系とみなし，曲率の効果のみを考慮するモデルを採用する[2]．それによると，量子細線の曲率を $\kappa(x)$ とすると，その効果はシュレーディンガー方程式のポテンシャルエネルギー $u(x)$ として次式のようにあらわされる．

$$u(x) = -\frac{\hbar^2}{8m}\kappa^2(x) \tag{1}$$

ここでxは曲線の弧に沿った長さのパラメーターである．そうすると，ここで解くべき問題は，通常のシュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + u\,(x)\right]\psi(x) = E\psi(x) \tag{2}$$

における１次元のポテンシャル問題と同じ形式となる．ここで $\psi(x)$ は電子の波動関数である．

2.2 曲がった量子細線の例

図２(a) には，曲がった量子細線の実際の形状の例を示す．量子細線に沿った曲率で表現すると，

$$\kappa(x) = \frac{2\sqrt{2}}{\cosh(x)} \tag{3}$$

となる．この形状によって形成されるポテンシャルエネルギーは

$$u(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{\cosh^2(x)} \tag{4}$$

となる．またそのポテンシャルエネルギーの空間分布を，(b) に示す．このように，量子細線の曲率は，このモデルの範囲内では電子に対する引力ポテンシャルとして作用することがわかる．通常，このような引力ポテンシャル中には束縛状態が形成される可能性があり，実際にそのような状態があることが計算によって明らかになっているが，ここでは，それには立ち入らずに，電気伝導特性に関与する連続状態について考察する．

1:日大理工・学部・電気，2:日大理工・教員・電気，3:広島大学大学院総合科学研究科，4:豊橋技術科学大学大学院工学研究科

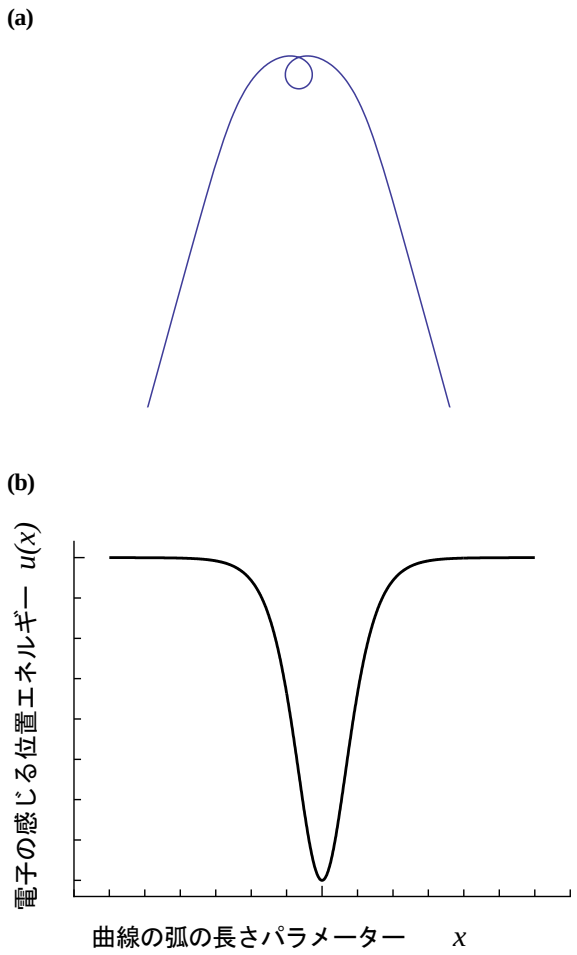

図 2: (a) 曲がった量子細線の例(s = 1 のとき). 式(3)の曲率をもつ場合. (b) 前述の曲率から生じるポテンシャルエネルギーのプロファイル.

3. 結果と考察

ここでは曲率が作り出すポテンシャルエネルギーを

$$u(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2(x)} \tag{5}$$

と一般化して, 形状変化の自由度を V_0 というパラメーターに持たせた場合を考察する. 曲がっている部分に, 無限遠から入射する電子を考える. またその電子の波数を k とすると, この曲がった部分での電子の透過確率 T は

$$T = \frac{\sinh^2(\pi k)}{\sinh^2(\pi k)+\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{1+\frac{8mV_0}{\hbar^2}}\right)} \tag{6}$$

と与えられる[1,4]. この透過確率 T の V_0 依存性を示したのが図３である.

横軸は, （５）式のコサイン項の一部を

$$\sqrt{1+\frac{8mV_0}{\hbar^2}} = s \tag{7}$$

として, パラメーターs の関数としてプロットしている.

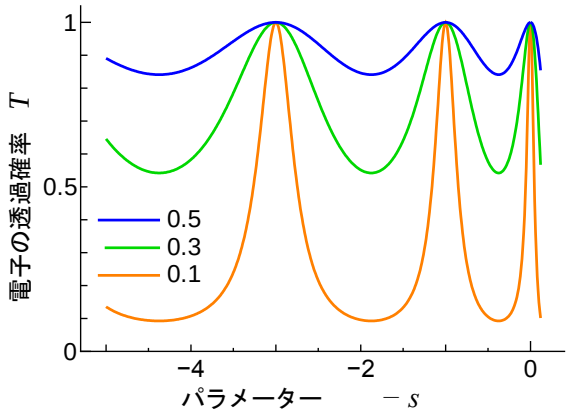

図 3: 式 (7) で定義された s に対する電子の透過確率 T の依存性, $s = 2n + 1$ ($n = 0, 1, 2, \ldots$) の条件を満たすとき, 透過確率が 1 となる. 赤線は $k = 0.1$, 緑線は $k = 0.3$, 青線は $k = 0.5$ である.

一見してわかるように, $s = 2n + 1$, ($n = 0, 1, 2, 3, \ldots$)の条件を満たすところで, 透過率が 1 となり, 細線の曲率に全く関係なく完全透過する状態があることがわかる. さらに, 完全透過条件から外れたところでは, 入射電子の波数 k に依存して透過率が急激に小さくなることがわかる.

このことから, 量子細線の曲げは一般的に電子の電気伝導を妨げる方向に働くが, 特定の曲率をもつ曲げ方をすると, 電子の状態にかかわらず完全透過する状況が有り得ることが示された.

4. まとめ

今回, 量子細線の曲率が電子の運動に与える影響を理論的に考察した. シュレーディンガー方程式より求めた電子の透過確率は曲率に依存して変化するが, ある特定の曲率に対しては, 電子の状態にかかわらず完全透過状態となることが示された. 細線の変形の自由度が, その電気伝導率に敏感に反映されるという結果から, 非常に微小な力学的センサーとしての応用が期待される.

参考文献

[1] S. Matsutani, and H. Tsuru, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 3640 (1991).
[2] R. C. T. da Costa, Phys. Rev. A **23**, 1982 (1981).
[3] E. Abbena, S. Salamon, A. Gray, "*Modern Differential Geometry of Curves and Surfaces with Mathematica*" (3rd. ed.), Chapman and Hall/CRC, (2006).
[4] L. D. Landau, and E. M. Lifshitz, “Quantum Mechanics”, (Pergamon Press, New York), 1976.