

コイル状炭素材料の電子状態に対するコイル引き伸ばしの影響

Effect of extension on electronic properties of carbon nanocoils

○松下大輝¹, 茂木智大¹, 青戸達輝¹, 池田昌樹², 胡桃聡³, 鈴木薫³, 松田健一³

D. Matsushita¹, T. Mogi¹, T. Aoto¹, M. Ikeda², S. Kurumi³, K. Suzuki³, K. -i. Matsuda³

Abstract : ナノメートルスケールの炭素材料であるカーボンナノコイルについて, コイル部分の電子状態と, コイルの引き伸ばしの効果を理論的に検討した. ナノコイル自体は金属的導体と想定し, コイルの曲率による影響を評価した. その結果, コイル部分に束縛準位が形成されることを見出した. また, その状態数と束縛準位はコイルの引き伸ばしの影響を受けることもわかった.

1. 研究背景と目的

カーボンナノチューブなどのナノ材料は, 将来のマイクロマシン等の配線材料として期待されている. これらの材料は, 容易に屈曲する自由度を持つが, ナノメートル程度の尺度で生じる材料の変形は, その電気伝導特性に影響する可能性がある. 実際, da Costa によって, 変形効果の存在が理論的に指摘されている[1]. このことから本研究の目的は, 実際のカーボンナノコイルの形状に対する曲率の効果を評価すること, またコイルを伸縮させた場合の変化について, 理論的に評価することとした.

2. 計算モデル

幾何学的に定義されるコイルの曲率は以下のように定義される. すなわち, コイルの半径を r , ピッチを p とすると曲率 C_0 は以下の式で表すことができる.

$$C_0 = \frac{r}{r^2 + p^2}$$

da Costa によると, コイルの曲率は電子に対して引力的ポテンシャルとして作用し, 以下ようになる.

$$U = -\frac{\hbar^2}{8m} C_0^2 = -\frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{r}{r^2 + p^2} \right)^2 \quad (1)$$

すなわち, コイル部分は, 電子束縛状態を形成する可能性があることがわかる.

3. カーボンナノコイルに形成される束縛準位

まず, (1)式に基づいてカーボンナノコイルの実際の形状から曲率と, ポテンシャルエネルギー U を計算した. コイル長は $5 \mu\text{m}$, コイル半径 r は 40 nm と仮定している[2].

図1の実線はピッチが 100 nm の場合のコイル形状によって誘起されたポテンシャルエネルギーである. 併せて電子束縛状態の準位と波動関数も示す. この場合は, 3つの電子状態が存在するが, 図2のようにピッチを 130 nm まで引き伸ばすと, ポテンシャルの

深さが変化し, それによって束縛準位の数も2つに減少した. このことから, 電子束縛状態はコイルの引き伸ばしの影響を受けることが示唆された.

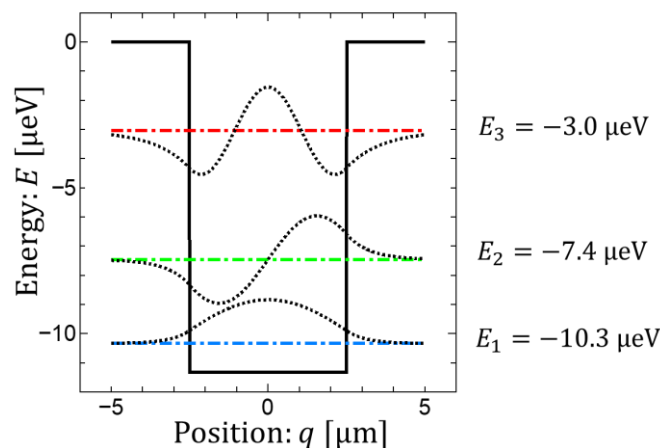


図1 ピッチ= 100 nm の場合の電子状態.

実線はポテンシャル形状, E_1, E_2, E_3 はコイル内の束縛準位, 点線は, それぞれの束縛準位に対する波動関数.

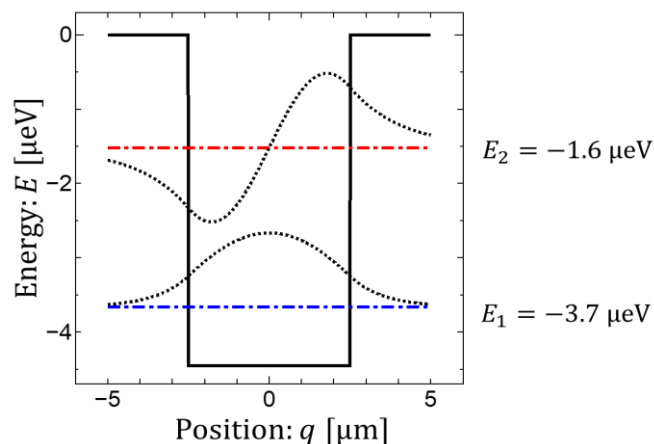


図2 ピッチ= 130 nm の場合の電子状態

4. 参考文献

[1] R.C.T da Costa, Phys.Rev.A 23,1982(1981)

[2] Y.Suda, et al, AIP Conf.Proc.1709,020008(2016)