

平成 22 年 3 月 20 日現在

研究種目：特定領域研究

研究期間：2007～2010

課題番号：19054004

研究課題名（和文） ナノチューブの光・電子デバイスの基礎理論

研究課題名（英文） Theory of optical and electronic nanotube devices

研究代表者

安藤 恒也 (ANDO TSUNEYA)

東京工業大学・大学院理工学研究科・教授

研究者番号：90012725

研究代表者の専門分野：物性物理学理論

科研費の分科・細目：物理学・物性 I

キーワード：グラファイト，グラフェン，励起子，光学フォノン，ニュートリノ，トポロジカル欠陥，完全導体，ベリー位相

1. 研究計画の概要

カーボンナノチューブは、通常の量子細線とはトポロジカルに異なっており、さらにグラフェン上で電子が自由電子とは異なった運動をするために、興味深い性質を示す。この特徴は、グラフェンを連続体とみなし、有効質量近似で扱うことにより、はっきりする。すなわち、ナノチューブ上の電子の運動はニュートリノに対する 2 行 2 列のワイル方程式で記述される。ただし、円筒を一周したときに波動関数に余分の位相がつく。この位相はナノチューブの螺旋構造により決まり、ナノチューブが金属になるか半導体になるのかが決まる。この研究では、カーボンナノチューブや新しいナノチューブ物質の興味深い特異な伝導現象と光応答を理論的に解明し予言することを目的とする。

本研究で理論的に明らかにしたい問題は、(1) 金属的なナノチューブに存在する完全透過チャンネルの及ぼす効果、(2) 多層ナノチューブの層間相互作用の効果、(3) ナノチューブ先端の電子状態特にトポロジカル欠陥に伴う局在状態、(4) バンド構造に対する多体効果と光スペクトルに対する励起子効果である。

2. 研究の進捗状況

平成 19 年度には、プローブ 2 個の走査顕微鏡像のモデル計算、電子-格子相互作用による光学フォノンの変調効果の予言、不純物効果による多層ナノチューブの層間伝導の予言、軸垂直電場による励起子吸収の予言と金属的チューブにおける励起子効果の解

明などを行った。

平成 20 年度には、K 点と K' 点の間の谷間散乱を引き起こすブリュアン境界フォノンの有効相互作用ハミルトニアンを導出し、強電場下での電気伝導での重要性を明らかにし、多層ナノチューブの電場と磁場に対する応答の研究を行い、2 光子吸収スペクトルの計算を行い、励起子の励起状態が観測されること、励起準位のエネルギーが相互作用強度に敏感なために、実験との比較により、電子間相互作用強度が精密に決定できることを示した。

平成 21 年度には、有限長金属ナノチューブのテラヘルツ波吸収共鳴条件を決定し、2 層ナノチューブのバンド間電子間相互作用と励起子効果についての定式化を行い、励起子吸収スペクトルに対するファミリー効果をワイル方程式に高次項を取り入れる手法で再現できることを示し、さらに、ナノチューブを取り囲む誘電媒質による環境効果についての計算を開始した。

3. 現在までの達成度—①当初計画以上に進展している。

電気伝導現象に関しては、(1) プローブ 2 個の走査顕微鏡像に K 点と K' 点近傍の波の干渉による 3 倍周期構造が現れること、(2) K 点と K' 点の間の谷間散乱を引き起こすブリュアン境界フォノンと電子の相互作用ハミルトニアンを導出と、強電場下での電気伝導での境界フォノンの重要性の明確化、(3) 有限長金属ナノチューブのテラヘルツ波吸収の理論、(4) 光学フォノンが電子-格子相互作用で金

属・半導体に依存した特徴的な電子濃度依存性を示すことの予言, など, 新しく重要な概念を確立することができた. 金属ナノチューブの完全導体性と完全透過チャネルに対する対称性の効果については, むしろグラフェン系の対称性クロスオーバがより重要な課題となった.

多層ナノチューブの層間は格子が非整合である. そのため, 層間のコヒーレントな電子移動はK点とK'点のブロッホ関数の位相のためにほぼ完全に相殺することを確立した. その結果を用いると多層ナノチューブのさまざまな物性が理論的に予言できる. 実際, (1) チューブ軸に垂直方向の電場応答では印加電場が1~2層で遮蔽されること, (2) 磁場の中では大きな反磁性磁界分布が生じ, それが核磁気共鳴の共鳴形状として観測可能であること, (3) 2層ナノチューブのバンド間電子間相互作用と励起子効果についての定式化, などを行った.

ナノチューブの光スペクトルに関しては, (1) 電場が軸垂直方向の偏光の場合でも強い励起子効果のため, 反電場効果があっても励起子吸収が観測されること, (2) 金属的なナノチューブにおいても励起子効果が大きいこと, (3) 2光子吸収スペクトルで励起子の励起状態が観測されること, (4) 1次元性にも関わらず, そのエネルギー準位が比較的水素原子に近いことを示した. さらに, (5) 励起準位のエネルギーが相互作用強度に敏感なために, 実験との比較により, 電子間相互作用強度が精密に決定できることを示した. (6) 半導体ナノチューブの励起子吸収スペクトルに対するファミリー効果を有効質量近似でも十分再現できることを示した. (7) ナノチューブの回りを囲む, あるいは内部に挿入した誘電物質による環境効果についても定式化が完成した.

4. 今後の研究の推進方策

平成21年度までの研究の結果, 多層ナノチューブの層間相互作用効果の本質を解明することができた. したがって, 特定研究発足当時に掲げた3課題, (1) ナノチューブの電気伝導現象, (2) 多層ナノチューブにおける層間相互作用, (3) 光吸収と発光における電子間相互作用と励起子効果の中で, 課題(2)と(3)を総合して行うことが可能となった. そのため, 平成22年度以降の研究では, 申請者が開発した励起子の微細構造の理論などと組み合わせ, 単層及び多層ナノチューブの光応答を, 環境・構造・偏光依存性や磁束によるアハラノフ・ボーム効果も含めて詳細に議論することが可能となった. さらに, 電子-格子相互作用の理論と組み合わせ, 励起子のフォノン・サイドバンドの理論へも発展させることが可能である. 過去3年間の領域内で発展し

つつある実験とより密接な議論の上に, ダイナミックにこれからの研究を遂行する.

5. 代表的な研究成果

[雑誌論文] (計37件, すべて査読有り)

① T. Ando, "Family effects on excitons in semiconducting carbon nanotubes", *J. Phys. Soc. Jpn.* **78** (2009) 104703-1~9.

② S. Uryu, H. Ajiki, and T. Ando, "Excitonic two-photon absorption in semiconducting carbon nanotubes within an effective-mass approximation", *Phys. Rev. B* **77** (2008) 115414-1~6.

③ S. Uryu and T. Ando, "Excitons in metallic carbon nanotubes with Aharonov-Bohm flux", *Phys. Rev. B* **77** (2008) 205407-1~9.

④ H. Suzuura and T. Ando, "Zone-boundary phonon in graphene and nanotube", *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** (2008) 044703-1~11.

⑤ T. Nakanishi and T. Ando, "Conductance between two scanning-tunneling-microscopy probes in carbon nanotubes", *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** (2008) 024703-1~6.

⑥ T. Ando, "Optical phonon tuned by Fermi level in carbon nanotubes", *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** (2008) 014707-1~9.

⑦ S. Uryu and T. Ando, "Electronic intertube transfer in double-wall carbon nanotubes with impurities: Tight-binding calculation", *Phys. Rev. B* **76** (2007) 155434-1~8.

⑧ S. Uryu and T. Ando, "Cross polarized absorption in carbon nanotubes with Aharonov-Bohm flux", *Phys. Rev. B* **76** (2007) 115420-1~6.

⑨ M. Koshino and T. Ando, "Orbital diamagnetism in multilayer graphenes: Systematic study with the effective mass approximation", *Phys. Rev. B* **76** (2007) 086425-1~11.

[学会発表] (計76件)

① T. Ando, Theory of quantum transport in graphene and nanotubes, ICTP Conference Graphene Week 2008, Trieste, Italy, August 25--29, 2008 (Invited, 50 minutes)

[図書] (計1件)

① 安藤恒也, 中西毅, カーボンナノチューブと量子効果, 岩波講座「物理の世界」, 2007年, 74頁.

[その他]

ホームページ

<http://www.stat.phys.titech.ac.jp/ando/>