

平成 26 年 5 月 20 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2013

課題番号：22740191

研究課題名(和文) ナノチューブのスピニコヒーレンス

研究課題名(英文) Spin coherence of carbon nanotubes

研究代表者

泉田 渉 (Izumida, Wataru)

東北大学・理学(系)研究科(研究院)・助教

研究者番号：20372287

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,000,000円、(間接経費) 600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、ナノチューブの低エネルギー電子状態を、チューブ表面の曲率やスピン軌道相互作用の効果を取り込んだ数値的および解析的な手法により調べた。同一谷内の左右進行波に速度差が生じること、有限長ナノチューブの離散準位には、境界条件によってノギスの様なスペクトル構造やスピン軌道分裂がみられることなど、従来の谷縮退描像では捉えられない電子状態が明らかとなった。ナノチューブにおいてスピンのように運動し緩和するのか、スピン状態が伝導特性にどう現れるのか、さらにはどのようにスピン制御できるか、といった諸問題を考える上で、本研究によって得られた知見は不可欠と考えられる。

研究成果の概要(英文)：Electronic states in the carbon nanotubes have been investigated by numerical and analytical methods which take into account the curvature of tube surface and the spin-orbit interaction. Velocity difference between the left- and right-going waves in the same valley, vernier-like spectrum and spin-orbit splitting in finite-length carbon nanotubes have been shown. These features uncover the electronic states in low temperature which are not able to be captured by the conventional picture of the valley degeneracy. The knowledge given in this research will give important aspect to understand the dynamics of spin, relaxation of spin, effect of spin in transport properties, and the controlling of the spin in the carbon nanotubes.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性I

キーワード：メソスコピック系 ナノチューブ スピン

1. 研究開始当初の背景

ナノチューブにおける電子スピン状態の定量的な理解は、ナノチューブの低エネルギー領域における物性の理解やスピントロニクスへの応用の観点から重要である。しかしナノチューブにおいてスピンに働く相互作用は小さいと考えられており、ナノチューブにおけるスピンの性質はあまり調べられていなかった。このような状況において、2008年にナノチューブのスピン軌道相互作用の観測が報告され、スピンに関して見逃されていた重要な効果の存在が認識されるようになってきた。申請者らはスピン軌道相互作用の効果を定量的計算により示していた。しかし、どのような状況下でスピン軌道分裂が観測されるのかなどは明らかではなかった。また、スピン状態が電気伝導にどのように現れるのか、スピンの散乱されるメカニズムなど、ナノチューブのスピン状態に関しては解明すべき諸問題があった。

2. 研究の目的

ナノチューブにおいて、特に低エネルギー領域において、電子がどのような状態をとるのかを、ナノチューブ表面の曲率やスピン軌道相互作用など、これまで見逃されていた効果も取り込んだ定量的な計算により示し、これによりナノチューブのとりスピン状態を明らかにする。また、関連物質で観測がすすんでいる半導体量子ドットのスピンと伝導の関連を調べることや、半導体チューブ構造の振動の様子を調べることにより、スピン状態の観測やスピン散乱要因に関しての知見を得る。

3. 研究の方法

本研究は数値的および解析的手法を用いた理論計算により実行された。申請者らが開発してきた拡張タイトバインディング法により、スピン自由度を考慮したナノチューブの電子状態計算を数値的に行った。得られた計算結果の物理的な解釈を行うため、摂動計算などによる解析的計算手法も並行して行った。局所領域のスピン状態を反映した電気伝導に対しては、マスター方程式の方法により定式化を行い数値プログラムを作成することで、伝導度の計算を数値的および解析的に実行した。半導体チューブ構造の振動解析に関しては、変分法による振動解析プログラムを作成して数値計算を行い、また各振動モードの有効運動方程式の導出および解析的な計算を行った。各課題の数値計算は、当研究費により購入したコンピュータおよびソフトウェアにより実行した。関連研究者との研究討論や成果発表のために、国内外の学会に参加した。

4. 研究成果

(1) カーボンナノチューブにおいて、ナノチューブ表面の曲率によりエネルギーバンドが傾斜する効果、すなわち左右進行波の速度の違いがあることを指摘した。様々な螺旋度のナノチューブに対する計算を行い、バンド傾斜は、直径が小さい、また、アームチェア型に近いカイラル角を有するナノチューブに対して大きくなることを数値的に示した(図1)。またバンド傾斜はフェルミエネ

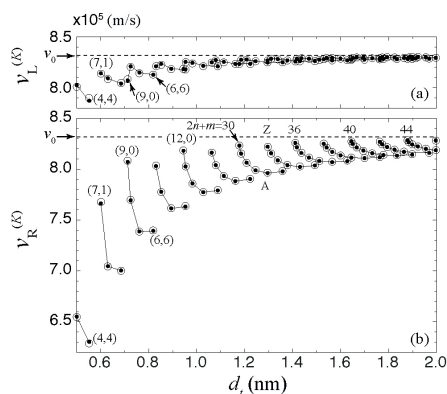


図1 様々な螺旋度(n,m)の左右進行波の速度.

ルギーの上下1電子ボルト程度のエネルギー領域において見られることを示した。さらに有効質量近似に基づき有効解析モデルを構築し、螺旋度依存性を明らかにした。左右進行波の速度の違いは、有限長ナノチューブ(ナノチューブ量子ドット)においてノギスの様なエネルギー準位として現れうることを指摘した。

(2) 半導体量子ドットにおいて、ドット内のスピン状態によって電流が大きく閉塞される現象、スピンプロケード現象が知られている。しかし2重及び3重量子ドットにおいて近年観測されたプロケード現象は、従来のプロケードとは全く異なるエネルギー領域で観測されるなど、未解明の点が多かった。この問題に対して、様々なパラメータ領域にわたって計算を行い、ドットとリード線の障壁の高さに非対称性があることによりプロケード領域に電子正孔の非対称性が表れることや、初めて明瞭に観測された4重項状態におけるスピンプロケードを定量的計算により示した。これらはスピンプロケード現象の観測を通して局所領域のスピン状態を特定できる可能性を示唆する。

(3) 半導体ナノスクロール構造は微細加工技術により作成される半導体薄膜のチューブ構造である。機械振動の理解は、電子状態に対する影響を理解する上でも欠かせない。そこで、チューブ構造の振動モード解析を行

った。研究は変分法に基づく数値的手法に加え、各モードに対する有効的な運動方程式を導出およびこの解析を解析的手法により行った。振動振動モードは、軸方向の振動の有無で2種類に分類でき、曲率依存性が2種類の異なるスケール則に従うことを見いだした。軸方向の振動モードは電子系と強く結合することを指摘した。

(4) 従来のナノチューブの電子状態に対する理解は、系は並進対称性を有すると仮定するバンド計算によっている。しかし現実のナノチューブは有限の長さで終端している。ナノチューブ中の電子は端で散乱され、電子状態は左右進行波の重ね合わせとして定在波を形成すると考えられる。しかし、フェルミエネルギー近傍のエネルギーバンドは2つの谷自由度を有するため、どのような定在波が形成されるのかは自明でない。この問題点に対し、拡張タイトバインディング法に基づき有限長ナノチューブの電子状態を計算する数値計算プログラムを開発し、電子状態を調べた。金属ナノチューブに分類されるカイラル型ナノチューブは、回転対称性の観点から2種類に分類できることを見いだした。ナノチューブ終端がバルクと同じ回転対称性を有する場合、上記2種類のナノチューブはそれぞれ異なる電子状態を有する。特に、ジグザグ型と同じ種類に分類されるナノチューブにおいては、端における谷内散乱のため、谷縮退がおこることが示された。一方アームチェア型に分類されるナノチューブでは、散乱が端の形状に敏感であり、谷間散乱が主要な場合には、一般には縮退がないことがわかった。この場合、すでに指摘していた同一谷内における左右進行波の速度差により2重縮退と4重縮退を交互に繰り返すノギスペクトルが現れることが示された。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 18 件)

① S. Amaha, W. Izumida, T. Hatano, S. Tarucha, K. Kono, K. Ono, Spin blockade in a double quantum dot containing three electrons, *Physical Review B*, 89 巻, 085302-1-10 (2014), 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevB.89.085302.

② S. Amaha, W. Izumida, T. Hatano, S. Teraoka, S. Tarucha, J. A. Gupta, and D. G. Austing, Two- and Three-Electron Pauli Spin Blockade in Series-Coupled Triple Quantum Dots, *Physical Review Letters*, 110 巻, 016803-1-5 (2013), 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.016803.

③ W. Izumida, A. Vikstroem, R. Saito, Asymmetric velocities of Dirac particles and Vernier spectrum in metallic single-wall carbon nanotubes, *Physical Review B*, 85 巻, 165430-1-8 (2012), 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevB.85.165430.

④ W. Izumida, Y. Hirayama, H. Okamoto, H. Yamaguchi, K.-J. Friedland, Mechanical vibration of a cylindrically rolled-up cantilever shell in microelectromechanical and nanoelectromechanical systems, *Physical Review B*, 85 巻, 075313-1-10 (2012), 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevB.85.075313.

[学会発表] (計 23 件)

① 泉田 渉, 辰巳由樹, 齋藤理一郎, ナノチューブ量子ドットにおける縮退準位の分裂, 日本物理学会第 69 回年次大会, 2014 年 3 月 29 日, 東海大学湘南キャンパス.

② 泉田 渉, 辰巳由樹, 齋藤理一郎, 有限長の金属単層ナノチューブにおけるディラックコーン傾斜とノギスペクトル, 第 43 回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 2012 年 9 月 6 日, 東北大学.

③ 泉田 渉, Anton Vikstroem, 齋藤理一郎, ナノチューブ量子ドットのバンド傾斜による 2 重・4 重縮退遷移, 日本物理学会第 67 回年次大会, 2012 年 3 月 24 日, 関西学院大学.

④ 泉田 渉, 天羽真一, 直列多重ドットで誘起される電子スピン状態とスピンプロックード, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 2011 年 9 月 23 日, 富山大学.

⑤ 泉田 渉, 岡本 創, 山口浩司, 平山祥郎, 半導体微細ロール構造の機械振動における曲率依存性, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 23 日, 大阪府立大学.

⑥ W. Izumida, H. Okamoto, H. Yamaguchi, Y. Hirayama, Curvature dependence of vibrational modes in rolled-up semiconductor layer, *International Symposium: Advanced functionality with three-dimensionally controlled quantum structures*, August 30, 2010, Potsdam, Germany.

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]
ホームページ等
<http://flex.phys.tohoku.ac.jp/~izumida/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

泉田 渉 (IZUMIDA, Wataru)
東北大学・大学院理学研究科・助教
研究者番号：20372287