

セミナーのお知らせ

『電界下におけるキャップ付きカーボンナノチューブの電子物性』

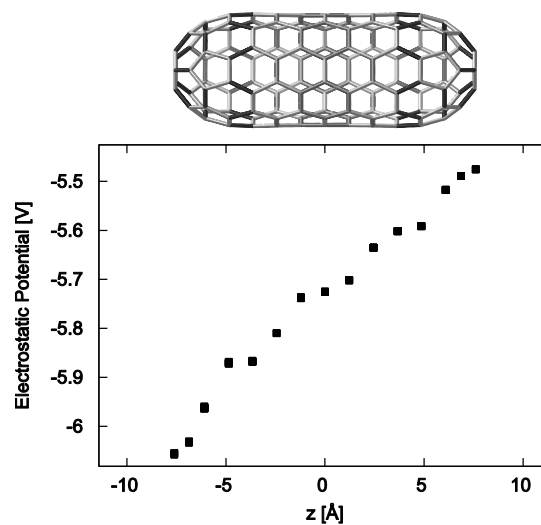
山中 綾香 (筑波大学・数理物質科学研究科)

2012年8月6日(月) 15:30-17:00
東京理科大学 九段校舎北棟3階 共同研究室2

近年、カーボンナノチューブの半導体電子デバイスへの応用が注目されている。このような半導体電子デバイスでは、その機能制御に電界の印加が必須であるため、カーボンナノチューブの電界下でのふるまいを知る必要がある。そこで、本研究では、電界下でのカーボンナノチューブの電子物性の理論的解明を第一原理電子状態計算の手法を用いて行った。

全ての計算は、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算の手法を用いた。電子間の交換相関ポテンシャルには局所密度近似、電子-イオン間の相互作用の記述にはウルトラソフト擬ポテンシャル法を適用した。また、電界下でのカーボンナノチューブの振る舞いを第一原理的に調べるために、有効遮蔽媒質(ESM)法を用いた。

我々はキャップを有する直径 7\AA の有限長 zigzag、armchair ナノチューブに対して、チューブ軸に平行方向に電界を印加し、電界に対するナノチューブの電子物性の変調を調べた。電界下での静電ポテンシャルを計算した結果、チューブ内において、外部電界に対する遮蔽の強弱が存在していることがわかった(図)。強い遮蔽は C-C 結合長の短い部位で起こっており、これは、C-C 結合長の短いボンドは二重結合性を有しており、一重結合に比べ電子過剰であるためである。



図：Armchair チューブの静電ポテンシャル

問い合わせ：山本貴博 (工学部第一部・教養教室/工学系研究科・電気工学専攻)