



# カーボンナノチューブの量子輸送解析とそのナノ電極への応用に関する研究

梅垣, 俊仁

---

(Degree)

博士 (工学)

(Date of Degree)

2005-09-25

(Date of Publication)

2009-11-30

(Resource Type)

doctoral thesis

(Report Number)

甲3451

(URL)

<https://hdl.handle.net/20.500.14094/D1003451>

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。



博士論文

カーボンナノチューブの量子輸送解析と  
そのナノ電極への応用に関する研究

平成17年 8月

神戸大学大学院 自然科学研究科

梅垣 俊仁

## 概要

本論文は、著者が神戸大学大学院自然科学研究科構造科学専攻在学中に行ってきた、カーボンナノチューブの量子輸送解析とそのナノ電極への応用に関する研究の成果をまとめたものである。

カーボンナノチューブ (CNT) の発見とその製造技術の発展に伴い、自己組織的ナノ寸法制御性とバリスティック伝導性を用いた様々なデバイス応用が展開されている。高相互コンダクタンスの電界効果トランジスタや、走査型トンネル顕微鏡の探針、電界放出ディスプレイ、スピン波励振高周波フィルタなど、多方面の応用が検討されている。本論文は、今後の発展が予想される CNT の電子デバイス応用を支援するため、CNT の電気伝導特性についての検討とナノ電極への応用の可能性に関する研究成果をまとめたものである。CNT を電子デバイスに応用する場合、カイラリティ等の構造パラメータやフェルミ準位等の材料パラメータによって CNT の電流密度分布や電気伝導率を制御することが重要であり、本論文は、これらの関係を明らかにする観点からまとめられている。

第1章は、本論文の研究の背景と目的を説明し、その後、本論文の構成について述べている。

第2章、第3章は、CNT の量子輸送解析について述べている。これまで、CNT 中の量子輸送解析については数多くの研究がある。田村らは強束縛近似により、2つの異径 CNT の接合体のコンダクタンスが、それらの CNT の直径比で決まる事を明らかにした。また、安藤らは有効質量近似により CNT のコンダクタンスが、格子欠陥がない時とある時で量子コンダクタンスのそれぞれ2倍、0~2倍になることを明らかにした。更に、J. Guo らは非平衡グリーン関数により、チャンネルとして CNT を用いた電界効果トランジスタのデバイス特性を明らかにした。しかし、前者の方法はフェルミレベルが0、温度が0Kの金属的な CNT にしか適用できず、中者はフェルミレベル近傍のエネルギーを持つ電子状態しか反映されておらず、後者は金属的 CNT について評価していない。分散曲線の広帯域な解析、CNT 端における励振依存性を考慮した解析、金属的 CNT の空間電荷を考慮した解析など課題が残されている。

第2章は、CNT の直流伝導特性を評価するため、まず、原子軌道関数の線形結合で波動関数を展開する方法 (LCAO 展開法) により解析・評価する方法について述べており、カイラリティによる CNT のバンド構造変化が議論されている。次に、伝搬行列法 (TM 法) を用いて CNT 内の電子波伝搬特性を解析する手法について述べている。電流電圧特性を評価し、CNT のコンダクタンスとフェルミ準位との関係を明らかにしている。また、CNT 端での電子波の励振法の変化による電子波伝搬特性の変化を検討し、電流密度分布やコンダクタンスが、CNT 端における励振方法によって大きく異なることを明らかにしている。

第3章は、空間電荷の効果を取り入れることのできる非平衡グリーン関数法 (GFM) を用いた CNT の解析法について述べている。第2章の TM 法は、電子波伝搬特性の CNT 端励振依存性を評価できるものの、局所状態密度の定式化が難しいので、CNT 中の電子・正孔密度の評価が困難である。一方、本章の GFM は、CNT を流れる電流だけでなく、CNT 中の電子・正孔密度の評価も可能である。非平衡グリーン関数法による CNT の定常量子輸送

モデルの定式化について述べた後、シミュレーション結果として、CNTの微分コンダクタンスのカイラリティ、フェルミレベル、印加直流電圧依存性を明らかにしている。特に、電子波のモード間遷移、左右電極での電子波群速度の差、減衰電子波のコンダクタンスへの寄与などについて明らかにしている。

第4章では、CNTをナノ電極として利用するデバイスの可能性について検討を行っている。ここではイットリウム・鉄・ガーネット (Yttrium Iron Garnet: YIG) 中のスピン波を用いた超高周波フィルタの電極にCNTを用いることを提案している。これは、YIG中にスピン波を直接励振・検出するナノスケール電極としてCNTを用いるものである。金属電極に比べて、CNTは、 $\mu\text{m}$ 程度の非常に長い平均自由行程をもつため、CNTはスピン波励振・検出に適した電極である。まず、交換相互作用の分子磁場近似法とマクスウェル方程式の静磁近似法を用いてYIG中を伝搬するスピン波の分散関係を評価し、スピン波がTHzの周波数領域で数nmの波長で伝搬することを示した。次に、金属的単層CNTを円筒形電極として用いた場合のYIGデバイスの帯域通過フィルタ (Band Pass Filter: BPF) 特性について検討を行った。続いて、BPFの損失特性を改善するため、バンドルCNTを用いたBPFのフィルタ特性の検討を行った。フィルタ特性をCNT電極のカイラリティやバンドルCNT電極内の単層CNTの本数により制御できること、バンドルCNTを用いたBPFは、単層CNTの場合に比べ、挿入損失を27.5dBから9.0dBに改善できることを明らかにしている。また、これらの結果を利用して、CNTのカイラリティやバンドルCNT内の本数が帯域通過特性により測定可能であることを新たに提案し、特許出願した。

第5章は結論であり、本研究により得られた成果をまとめている。

# 目次

<b>第 1 章 序論</b>	<b>1</b>
1.1 序言	1
1.2 カーボンナノチューブ研究の歴史	1
1.3 高周波フェライトデバイス研究の歴史	1
1.4 本論文の独自性と意義	2
<b>第 1 章の参考文献</b>	<b>3</b>
<b>第 2 章 伝搬行列法を用いたカーボンナノチューブ中の電子波伝搬特性</b>	<b>5</b>
2.1 序言	5
2.2 任意のカイラリティを持つ CNT のバンド構造	5
2.3 CNT 中の電流	10
2.3.1 CUC 間の境界条件	10
2.3.2 CNT の伝搬行列	10
2.3.3 CNT の周方向に関する電流密度分布と電流電圧特性	14
2.4 CNT のコンダクタンスとフェルミ準位との関係	16
2.5 結言	17
<b>第 2 章の参考文献</b>	<b>18</b>
<b>第 2 章の研究業績</b>	<b>21</b>
<b>第 3 章 グリーン関数法を用いたカーボンナノチューブ中の電子波伝搬特性</b>	<b>23</b>
3.1 序言	23
3.2 GFM による定式化	23
3.2.1 輸送方程式の定式化	23
3.2.2 固有値方程式の定式化	26
3.2.3 遅延グリーン関数の定式化	29
3.2.4 CNT の平衡グリーン関数の定式化	32
3.2.5 電荷密度・電流密度	34
3.3 数値計算結果	35
3.3.1 zig-zag 形 CNT の電流電圧特性	35
3.3.2 armchair 形 CNT の電流電圧特性	39
3.4 結言	40
<b>第 3 章の参考文献</b>	<b>40</b>
<b>第 3 章の研究業績</b>	<b>43</b>

第 4 章	カーボンナノチューブによるスピン波励振高周波フィルタの特性解析	45
4.1	序言	45
4.2	GFM を用いた高周波に対する CNT の伝導特性について	46
4.3	単層 CNT を電極として用いるフェライトデバイス	46
4.3.1	理論解析	46
4.3.2	数値計算結果	50
4.4	バンドル CNT を電極として用いるフェライトデバイス	52
4.4.1	バンドル CNT の理論解析	52
4.4.2	数値計算結果	54
4.5	結言	55
第 4 章の参考文献		57
第 4 章の研究業績		59
第 5 章	結論	61
	謝 辞	62
付 録 A	第 2 章の付録	64
A.1	平均確率密度流の定式化	64
A.2	$x$ 方向に関する境界条件の適用	65
A.3	電流密度の定式化	66
A.4	バンド図を使っての電流電圧特性の飽和現象検討結果	67
付 録 B	第 3 章の付録	70
B.1	CNT 中でのポアソン方程式の定式化	70
B.2	数値計算のためのポアソン方程式の差分化	71
B.3	<i>zig-zag</i> 形 CNT 中の各電子波モードの伝導への寄与についての説明	73
B.4	<i>armchair</i> 形 CNT 中の各電子波モードの伝導への寄与についての説明	73
付 録 C	第 4 章の付録	78
C.1	交流電圧を印加したときの GFM による定式化	78
C.1.1	遅延グリーン関数の定式化	79
C.1.2	電荷密度と電流	80
C.1.3	交流電圧を印加した時の $G$ - $f$ 特性	81
C.2	スピン間の相互作用によって生じる周波数の増大項の導出	81
C.3	静磁近似の補足説明	82
C.4	振幅 $D$ の導出	82

# 第1章 序論

## 1.1 序言

カーボンナノチューブ (CNT) の発見とその製造技術の発展に伴い、その自己組織的ナノ寸法制御性とバリスティック伝導性を用いた様々なデバイス応用が展開されている。たとえば、高相互コンダクタンスのトランジスタ [1] や、GHz 帯域低損失絶縁基板 [2]、そして我々のスピン波励振高周波フィルタがあり、それらは従来の材料を用いた場合に比べ、夫々、高相互コンダクタンス (単位ゲート長当たり  $13000\mu\text{S}/\mu\text{m}$ )、低損失、高周波数動作 (GHz から THz 帯域) によりデバイス性能が向上する特徴を持つ。CNT の各種デバイスへの応用技術は今後ますます発展すると予想されるが、他方で多くの研究課題を抱えている。本論文では、CNT の基本伝導特性を解明し、CNT をスピン波励振高周波フィルタの電極として応用するために研究を進めた。

## 1.2 カーボンナノチューブ研究の歴史

カーボンナノチューブ (CNT) の発見 [3] が成されて以来、CNT は、そのユニークな構造と有望な電気特性を持つことで非常に注目されている。例を挙げると、CNT は以下の特徴を持つ [4]。

- 1) 小さな直径 (数 nm)
- 2) 十分な機械強度 (引っ張り強度は、高力鋼合金の 2GPa 程度に対し CNT は数十 GPa である。)
- 3) 高い熱伝導性 (室温で  $6000\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$ )
- 4) 長い弾道性を持つ伝導特性 (平均自由行程は金属の数十 nm に対し CNT は  $\mu\text{m}$  程度である。)

集積回路などの従来のデバイスでは、100nm 程度以下の電極を作成するのは大変困難であった。しかし、一方で、CNT は簡単に小さい寸法で作成でき、その直径を数 nm の大きさに制御することができる。さらに、CNT は、従来の材料と違い自己組織的に直径を制御でき、シリコンなどの従来の物質に比べてバリスティック伝導性が飛躍的に高い。そのような特徴を持つ CNT を電子デバイスに応用する上での課題の 1 つは、カイラリティで CNT の電気伝導率や電流密度分布を制御することである。ここでカイラリティとは、グラフェンシートを円筒形に巻いて CNT に形成する時の構造パラメータで、2 つの整数  $n, m$  を使って成分表示で  $(n, m)$  等と表される [5]。(詳細は第 2 章で述べる)

## 1.3 高周波フェライトデバイス研究の歴史

従来の GHz 帯で動作する金属電極を持つ高周波フィルタ [6, 7] に比べ、直径を小さくできる CNT 電極は、動作周波数を THz 帯域へ広げる可能性がある。ここで、従来の GHz 帯で動作する高周波フィルタの動作原理を説明する。フェライトに直流磁界を印加した状態で、その磁気共鳴周波数に近い周波数の高周波を加えると、静磁波が伝搬する。静磁波の応用として遅延線、フィルタ、発振器等の様々な形でマイクロ波デバイスが報告されてきた。しかし、これらのデバイスの動作周波数は GHz 帯、動作波長は  $10\mu\text{m}$  から 10nm 程度 [6, 7] であった。動作波長及び動作周波数は、スピン波を励振する金属電極の寸法で決まり、その加工精度で制限されるものと考えられる。金属電極は、リソグラ

ファイ技術の発達で作成幅がどんどん狭くなり 100nm 程度以下のものも作成されてきているものの、金属の平均自由行程はおよそ数十 nm である [8] ので、電流の方向が揃わず誘起される磁界が整わずにスピン波励振・検出に悪影響を及ぼす可能性がある。この金属電極の特性に対して、CNT は  $\mu\text{m}$  程度の長い平均自由行程をもつため、CNT 中の電流は方向が揃い磁界が整いスピン波励振・検出に適していると考えられる。これらの特性に着目し、その応用として、我々は静磁波を直接励振・検出する電極として CNT を用いた高周波フィルタにつき研究した [9]。そのデバイスの動作周波数帯域を広げることができれば、多くの情報を取り扱えるデバイスが実現できると考えられる。

## 1.4 本論文の独自性と意義

近年、多くの CNT 中の量子輸送についての解析方法が研究されている。田村らは強束縛近似により、2つの異径 CNT の接合体のコンダクタンスが、それらの CNT の直径比で決まる事を明らかにした [10]。また、安藤らは有効質量近似により CNT のコンダクタンスが、格子欠陥がない時とある時で量子コンダクタンスのそれぞれ 2 倍、0~2 倍になることを明らかにした [11]。更に、J. Guo らは非平衡グリーン関数により、チャネルとして CNT を用いた電界効果トランジスタのデバイス特性を明らかにした [12]。しかし、前者の方法はフェルミレベルが 0、温度が 0K の金属的な CNT にしか適用できず、中者はフェルミレベル近傍のエネルギーを持つ電子状態しか反映されておらず、後者は金属的 CNT について評価していない。分散曲線の広帯域な解析、CNT 端における励振依存性を考慮した解析、金属的 CNT の空間電荷を考慮した解析など課題が残されている。この論文では、CNT の直流基本伝導特性を明らかにし、さらに空間電荷の存在を考慮してより厳密な伝導特性を考察することにより、CNT をナノ電極として高周波デバイスへ応用することを目的に検討を行った。

第 2 章では、CNT の基本伝導特性について明らかにしていくため、原子軌道関数の線形結合で波動関数を展開する方法 (LCAO 展開法) と、伝搬行列法 (TM 法) を用いた CNT 内の電子波伝搬特性を解析する。我々は、CNT 中の電流を量子輸送方程式の枠組みの中で厳密に取り扱う。次節では、CNT の解析モデルについて述べ、LCAO 展開法を用いてバンド構造を解析する。そして、そのバンド構造を詳しく評価し、カイラリティによって CNT のバンド構造がどのように変化するか議論する。次に、TM 法を用いた CNT 内の電子波伝搬特性を解析するための手法について述べ、その手法で電流電圧特性を計算して、CNT のコンダクタンスとフェルミ準位との関係、および CNT 端での電子波の励振法によって伝搬の様子が異なることを議論している。

第 3 章では、グリーン関数法を用いた CNT の基本伝導特性について記述する。その定量評価を行い、金属的で真性状態にある CNT の中で、線形に分布するポテンシャル分布を仮定し、電子、正孔密度とそれらの分布を調べる。半導体的な CNT と金属的な CNT との電流電圧特性を計算し、カイラリティやフェルミレベル、そして印加直流電圧を変化させて、微分コンダクタンス  $G$  の構造パラメータ依存性を評価する。次に、 $GV/I-V$  特性を評価し、実波数を持つモード間遷移について調べる。この GFM の定式化は任意のカイラリティを持つ CNT [13] や欠陥を持つもの [14] などにも適用できるので、金属的な CNT だけでなく、半導体的、絶縁体的 CNT の特性も評価できる。第 2 章の TM 法では、CNT 端での電子波励振方法を変えて電子波伝搬特性を評価できるものの、局所状態密度の定式化が難しいので、CNT 中の電子・正孔密度の評価が困難である。一方、第 3 章の GFM の方法は、CNT を流れる電流だけでなく、CNT 中の電子・正孔密度の評価にも適用できる。従って、GFM の方法は、ポアソン方程式と連立させて自己無撞着に解くのに適用できる。

第 4 章では、交流電圧印加 CNT の伝導特性と CNT がナノ電極として使える事について議論し、次いでイットリウム・鉄・ガーネット (Yttrium Iron Garnet: YIG) 中に、CNT 電極によって励振、検出された静磁波の特性を、高周波フィルタに用いたときのフィルタ特性につき検討を行う。まず、交換相互作用の分子磁場近似法とマクスウェル方程式の静磁近似法を用いて YIG 中を伝搬する静磁

波の分散関係式を定式化し、分散曲線を評価する。そこで、静磁波は THz の周波数領域で数 nm の波長で伝搬することを示す。CNT 電極に、前章で検討した CNT 単体の量子輸送解析の結果を反映させ、かつ CNT を円筒形電極として扱った単層 CNT に高周波電流を流した YIG デバイスの帯域通過フィルタ (Band Pass Filter: BPF) について検討する。

次に、単層 CNT をナノ電極として用いた場合の BPF のフィルタ特性改善のため、バンドル CNT を用いた場合の BPF のフィルタ特性を、単層 CNT の場合と同様に検討する。BPF のフェライト中を伝搬する静磁波の分散曲線は、伝搬し得る周波数帯域が GHz から THz までに及んでおり、波長は  $\mu\text{m}$  から短くて数 nm に及んでいることを示す。この波長の多様性のため、フィルタ特性を解析する BPF の電極には、単層 CNT あるいはバンドル CNT を用いる。CNT を流れる高周波電流で効果的に静磁波を励振・検出するためには、静磁波の減衰と CNT 間の直達電磁気結合を少なくするような実際の構造を構成する必要がある。ここで、直達電磁気結合とは、一方の CNT 電極が生じる電磁界が、静磁波を介さず他の CNT 電極に直接結合する成分のことである。ここでは、CNT を現実的な量子細線として取り扱う。帯域通過特性の挿入損失  $IL$ 、通過中心周波数  $f_0$ 、帯域幅  $BW$  が、CNT 電極のカイラリティやバンドル CNT 電極内の単層 CNT の本数により制御できる事を示し、BPF としての動作特性を明らかにする。これらの結果を利用して、我々は CNT のカイラリティやバンドル CNT 内の本数を弁別できる新しいフェライトデバイスを実現できる可能性がある。このデバイスでは、カイラリティやバンドル CNT 内の単層 CNT の本数を、静磁波の波長を介して帯域通過特性で測定することができると考えられる。

最後の章では、結論をまとめる。

以上本節では、本論文の各章における取り組みに対する独自性や内容についてまとめた。

## 第1章の参考文献

- [1] F. Nihey, et. al. “Top-Gate Carbon-Nanotube Field-Effect Transistors with Very High Intrinsic Transconductance,” Extended Abstract of the 2003 International Conference on Solid State Devices and Materials, Tokyo, 003, pp. 840 - 841 (2003).
- [2] ㈱ KRI ナノデバイス研究部, “カーボンナノチューブによる高周波用ポリマーの低伝送損失化研究,” 提案書 (マルチクライアントプロジェクト), <http://www.kri-inc.jp/ts/mcp/>
- [3] S. Iijima, “Helical Microtubules of Graphitic Carbon,” Nature (London), vol. 354, pp.56-58 (1991).
- [4] NANO-ELECTRONICS.JP, “Carbon Nanotube,” <http://www.nanoelectronics.jp>
- [5] 田中一義, “カーボンナノチューブ ナノデバイスへの挑戦,” 化学同人 (2001).
- [6] P. C. Fletcher, C. Kittel, “Consideration on the Propagation and Generation of Magnetostatic Waves and Spin Waves,” Phys. Rev., vol. 120, pp. 2004-2006 (1960); 中島 将光 「マイクロ波工学-基礎と応用-」 森北出版 (1989).
- [7] S. N. Bajpai, R. L. Carter, and J. M. Owens, “Insertion Loss of Magnetostatic Surface Wave Delay Lines,” IEEE Trans. vol. MTT-36, pp. 132-136 (1988).
- [8] 株式会社 東芝, “ナノで実現する新しいデバイス原理への挑戦,” <http://www.toshiba.co.jp/tech/review/1999/02/a02/>
- [9] T. Umegaki, M. Ogawa, Y. Makino, and T. Miyoshi, “Electronic Transport in Carbon Nanotubes Using the Transfer-Matrix Method,” J. Appl. Phys. vol. 96, no. 11, pp. 6669-6678 (2004).
- [10] R. Tamura and M. Tsukada, “Conductance of Nanotube Junctions and Its Scaling Law,” Phys. Rev. B, vol. 55, no. 8, pp. 4991-4998 (1997).
- [11] T. Ando, T. Nakanishi, and M. Igami, “Effective-Mass Theory of Carbon Nanotubes with Vacancy,” J. Phys. Soc. Jpn. vol. 68, pp. 3994-4008 (1999).
- [12] J. Guo, S. Datta, and M. Lundstrom, “A Numerical Study of Scaling Issues for Schottky-Barrier Carbon Nanotube Transistors,” IEEE Trans. Electron Devices, vol. 51, no. 2, pp. 172-177 (2004).
- [13] 牧野泰幸, “カーボンナノチューブ中の電子の量子輸送解析に関する研究,” 神戸大学大学院修士論文 (2004年3月).
- [14] 梶原正法, “カーボンナノチューブの輸送特性に関する研究,” 神戸大学卒業論文 (2003年3月).

## 第2章 伝搬行列法を用いたカーボンナノチューブ中の電子波伝搬特性

### 2.1 序言

本章では、CNTの基本伝導特性について明らかにしていくため、原子軌道関数の線形結合で波動関数を展開する方法(LCAO展開法)と、伝搬行列法(TM法)を用いたCNT内の電子波伝搬特性を解析する。第2.2節では、CNTの解析モデルについて述べ、LCAO展開法を用いてバンド構造を解析する。そして、そのバンド構造を詳しく評価し、カイラリティによってCNTのバンド構造がどのように変化するか議論する。第2.3節では、TM法を用いたCNT内の電子波伝搬特性を解析するための手法について述べ、その計算結果として、CNT端での励振法によって電子波の伝搬の様子が異なる事や、電流電圧特性について議論する。第2.4節では、CNTのコンダクタンスとフェルミ準位との関係を議論する。最後の節では、結論をまとめる。

### 2.2 任意のカイラリティを持つCNTのバンド構造

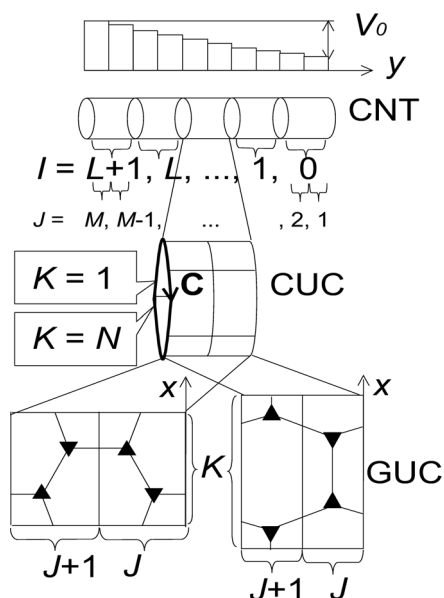


図 2.1: 直流電圧  $V_0$  が加えられた CNT の解析モデル: 左右の GUC はそれぞれジグザグ形、アームチェア形 CNT に対応する。

図 2.1 は直流電圧  $V_0$  が加えられた CNT の解析モデルである。CNT は炭素の六員環で構成されるグラフェンシート(グラファイト)を円筒状に巻いた構造をとる。図 2.1 の左右のグラフェンシートの

単位胞 (Graphene Unit Cell: GUC) は、それぞれジグザグ、アームチェア形の CNT の単位胞 (CNT Unit Cell: CUC) の一部になっている。図 2.1 の最下部にある GUC は、蜂の巣状格子中の '▲' と '▼' の 2 つの炭素原子からなり、それぞれ A サイトと B サイトを表す。図 2.1 の中段は、GUC を巻いて円筒形状に繋げると CUC ができ、更にその CUC を直列に繋げると CNT ができる様子を示した図であり、CNT が 2 次元平面状のグラフェンシートを円筒形状に巻いた構造になっていることと同じ事を示す図である。チューブの周方向のベクトル  $\mathbf{C}$  はカイラルベクトルと呼ばれ、蜂の巣格子中の基本格子ベクトルを  $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$  と置いた時、一般に  $\mathbf{C} = n\mathbf{a} + m\mathbf{b}$  で表される。このカイラルベクトルを持つ CNT は、 $\text{tube}(n, m)$  やカイラル形のナノチューブと呼ばれることが多い。特に、 $\text{tube}(n, 0)$  のナノチューブはジグザグ形、 $\text{tube}(n, n)$  のナノチューブはアームチェア形と呼ばれる。図 2.1 の最上段は、バイアス電圧が加わった CNT の静電ポテンシャル分布を示している。簡単のため、各 CUC 内では静電ポテンシャルは一定と仮定する。

バイアス電圧の加わっていない CNT バンド構造を計算するため、まず我々は炭素原子のオンサイトエネルギー ( $\epsilon_0$ ) と最 (第 1) 近接原子間のホッピングエネルギー ( $\gamma$ ) のみを仮定した強束縛近似の解析モデル [2] を用いる。ここで、本論文では以下の値を用いる： $\epsilon_0 = -2.18$  eV、 $\gamma = 2.31$  eV [3]。

炭素原子のサイト A とサイト B でのブロッホ関数は、原子軌道関数の線形結合で次式の形で表される。

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{A}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{L+2}{NM}} \sum_{\mathbf{r}_A}^{\text{CUC}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_A} \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \\ \phi_{\mathbf{B}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{L+2}{NM}} \sum_{\mathbf{r}_B}^{\text{CUC}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_B} \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B),\end{aligned}\quad (2.1)$$

ここで、 $\mathbf{k}$  は波数ベクトル、 $\Phi$  は炭素原子の  $\pi$  軌道関数、 $N$  は CUC の周りの GUC の個数でジグザグ形とアームチェア形の場合は  $n$  に等しく、 $M$  は CNT の軸に沿った GUC の個数で、 $L$  は CNT の軸に沿った CUC の個数で、 $\mathbf{r}_A$  と  $\mathbf{r}_B$  はそれぞれ A、B サイトの位置ベクトルである。本章では、虚数単位を  $i$  で表記する。波動関数  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は、ブロッホ関数  $\phi_{\mathbf{A}\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  と  $\phi_{\mathbf{B}\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  の線形結合で表される。すなわち、

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = C_A \phi_{\mathbf{A}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + C_B \phi_{\mathbf{B}\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

で表される。シュレディンガー方程式に式 (2.2) を代入してグラフェンシートの分散関係式、即ち  $E$ - $\mathbf{k}$  関係を得ることができる。

$$\begin{aligned}E(\mathbf{k}) &= \epsilon_0 \pm \\ &\pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left( \frac{k'_x a}{2} \right) + 4 \cos \left( \frac{k'_x a}{2} \right) \cos \left( \frac{\sqrt{3} k'_y a}{2} \right)},\end{aligned}\quad (2.3)$$

ここで、 $a$  はグラフェンシートの格子定数、複合の負の記号 (-)、正の記号 (+) はそれぞれボンディング、アンチボンディングのエネルギーバンドに対するものである。式 (2.3) では、 $(k'_x, k'_y)$  を  $(x', y')$  の逆格子空間、 $(x', y')$  をグラフェンシート上の直交座標、座標  $(x', y')$  を図 2.1 左の GUC の座標  $(x, y)$  と同じものにそれぞれ設定した。式 (2.3) の数値計算結果は、グラフェンシートの分散曲線 [2] にちよように一致する。図 2.2 は、グラフェンシートの分散関係の等高線プロットを示す。ボンディング、アンチボンディングのエネルギーバンドは K 点で縮退し、エネルギーは K 点、線分 MM 上、 $\Gamma$  点でそれぞれ  $\epsilon_0$ 、 $\epsilon_0 \pm \gamma$ 、 $\epsilon_0 \pm 3\gamma$  になる [4]。上記で述べたように CNT は平面状のグラフェンシートを円筒形に丸めたものだから、CNT の分散曲線は、CNT のカイラリティで決まる直線に沿ってグラフェンシートの分散曲線の等高線プロットを切った切り口として求められる。CNT の周方向に関する周期

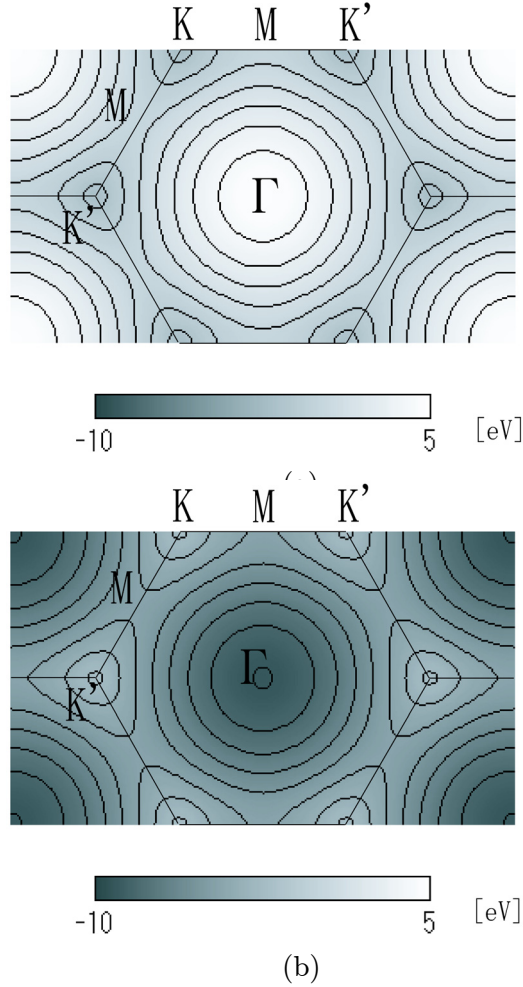


図 2.2: グラフェンシートの分散関係の等高線プロット: (a) アンチボンディングのエネルギーバンド (+ の枝)、(b) ボンディングのエネルギーバンド (- の枝).

境界条件を適用すれば、解析的にカイラリティ  $(n, m)$  の CNT の分散関係を求められる。CNT の周方向に関する周期境界条件は

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{C}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{C}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

で与えられる。ここで、 $\mathbf{C}$  はカイラルベクトルと呼ばれ、 $\mathbf{C}$  の方向を  $x$  軸に設定する。この境界条件から、CNT の周方向に量子化された波数ベクトルが次式で得られる。

$$k^x = \frac{2\pi i^x}{\sqrt{n^2 + nm + m^2 a}}, \quad (i^x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (2.5)$$

式 (2.5) 以降の議論では、CNT の周方向を  $x$  軸、軸方向を  $y$  軸に取り直す。式 (2.3) と (2.5) から、カイラル形 CNT の固有値方程式が次式で得られる。

$$(\epsilon_0 - E)^2 - \gamma^2 [1 + 8 \cos(k^x x_1 + k^y y_1) \times \cos(k^x x_2 + k^y y_2) \cos(k^x x_3 + k^y y_3)] = 0, \quad (2.6)$$

ここで、

$$\begin{aligned}
 x_1 &= \frac{(n-m)a}{4\sqrt{n^2+nm+m^2}}, & y_1 &= \frac{-\sqrt{3}(n+m)a}{4\sqrt{n^2+nm+m^2}}, \\
 x_2 &= \frac{(2n+m)a}{4\sqrt{n^2+nm+m^2}}, & y_2 &= \frac{-\sqrt{3}ma}{4\sqrt{n^2+nm+m^2}}, \\
 x_3 &= \frac{(n+2m)a}{4\sqrt{n^2+nm+m^2}}, & y_3 &= \frac{\sqrt{3}na}{4\sqrt{n^2+nm+m^2}}
 \end{aligned}
 \tag{2.7}$$

と置く。方程式 (2.6) から、任意のカイラリティを持つ CNT の分散曲線を求めることができるが、分かりやすくするために、この論文ではジグザグ形とアームチェア形 CNT の評価に専念する。

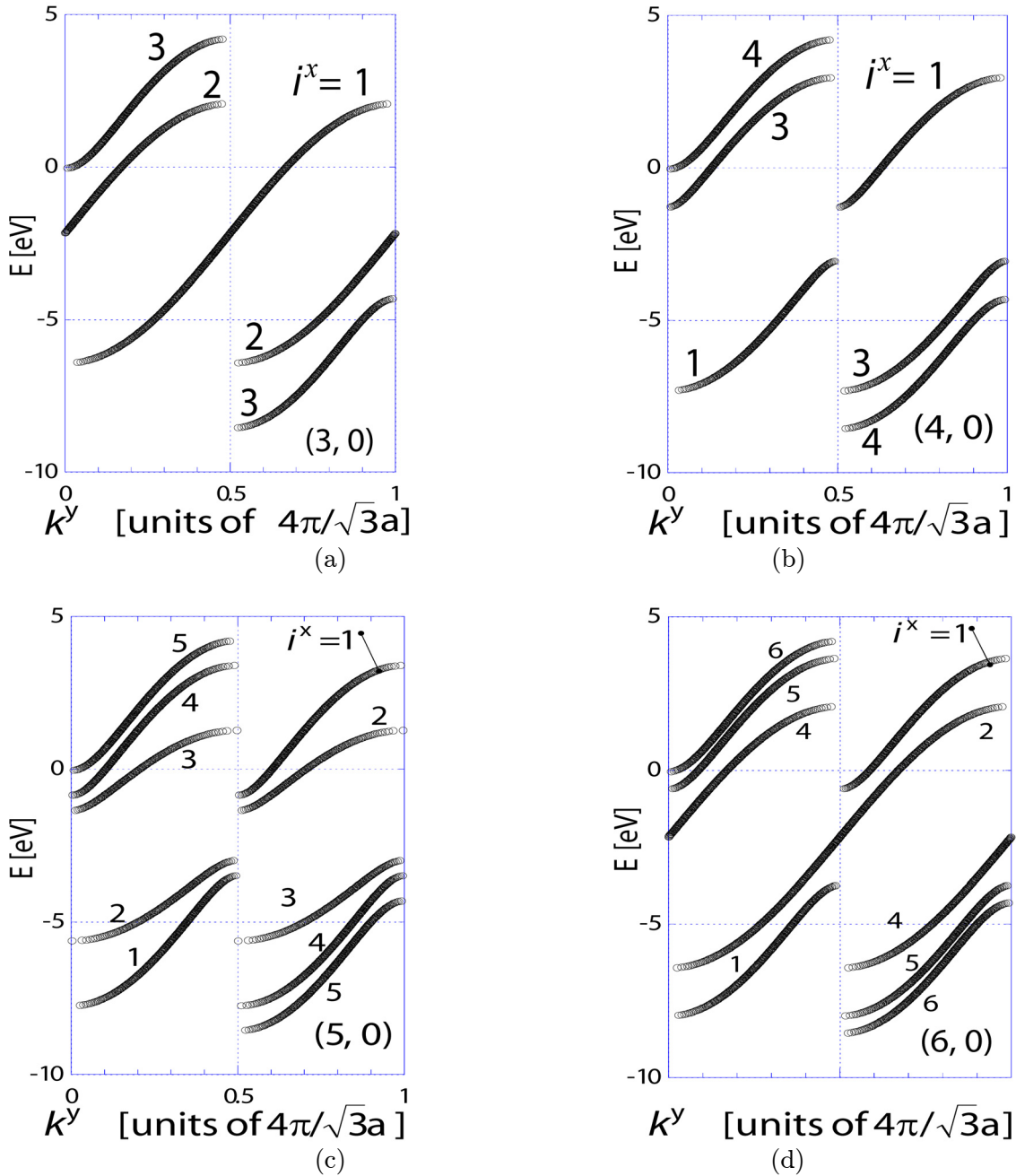


図 2.3: ジグザグ形 CNT のバンド構造: カイラリティ =  $(n, 0)$ ,  $n =$  (a) 3, (b) 4, (c) 5, (d) 6

ジグザグ形 CNT の分散関係は、(2.5) と (2.6) の中の  $m$  を 0 と置くだけで得られる。図 2.3 は、それぞれ、 $n=(a)3$ 、(b)4、(c)5 そして (d)6 の時のジグザグ CNT のバンド構造である。図 2.3 では、正の群速度を持つ曲線のみを表示している。この様に表示する理由は、後に示す CNT 中を伝搬する電子波の電流を計算するとき、群速度を正・負に分けると都合が良いからである。負の群速度をもつ曲線は、グラフェンシートのパンド構造の対称性によりブリリュアンゾーンの中心に関する鏡像をとれば容易に得られる。注目すべき点は、 $n$  が 3 の倍数の時に分散曲線が常に交差する事である。言い換えれば、 $n$  が 3 の倍数の時にエネルギーギャップが消え、ジグザグ形 CNT が金属的になるということである。図 2.3 中の 4 つの中では、(3,0) と (6,0) 形の CNT が金属的になる。

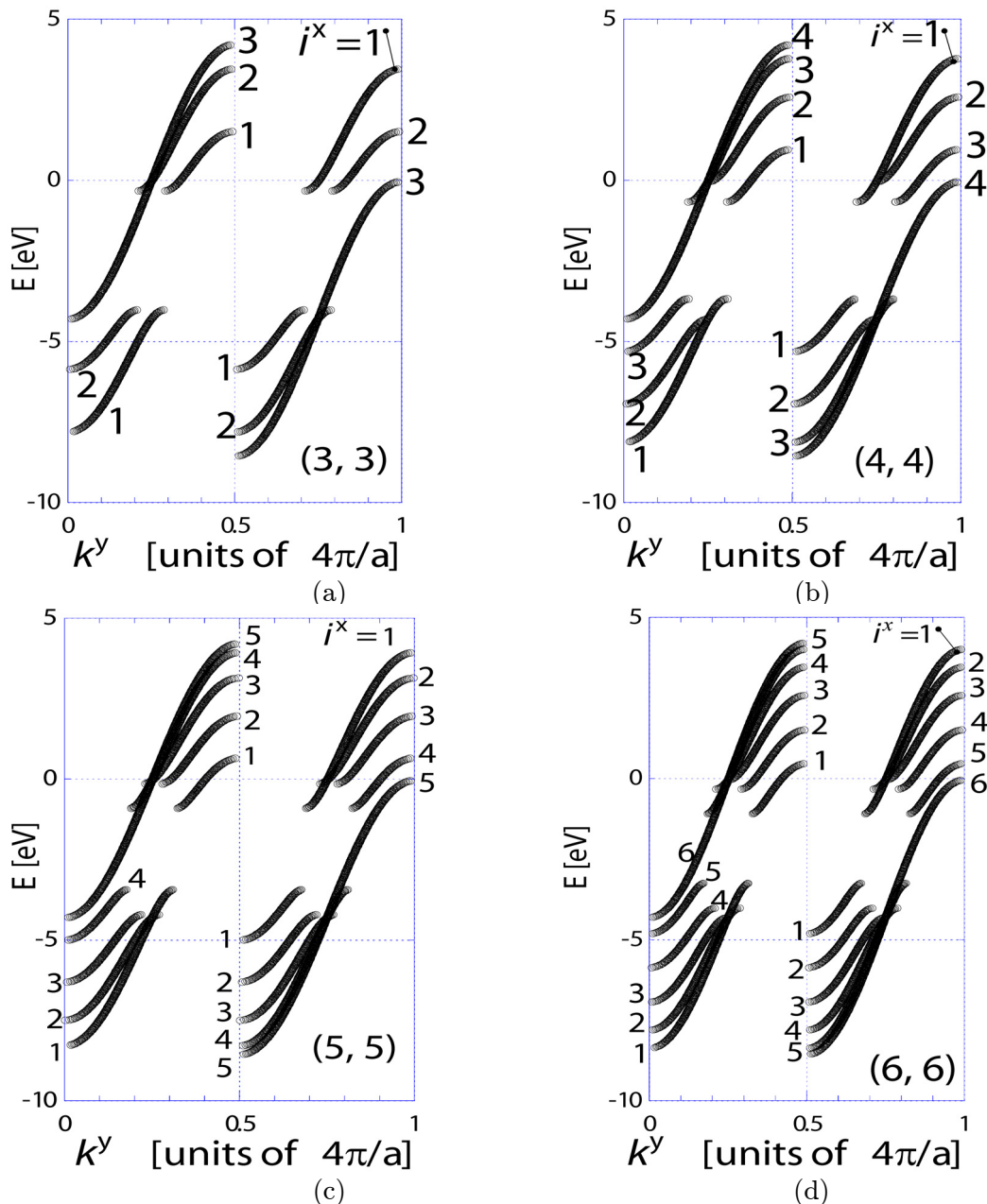


図 2.4: アームチェア形 CNT のバンド構造: カイラリティ =  $(n, n)$ ,  $n = (a) 3$ , (b) 4, (c) 5, (d) 6

他方、アームチェア形 CNT の分散関係は、方程式 (2.5) と (2.6) 中の  $m$  を  $n$  に等しいと置いて求められる。図 2.4 はアームチェア形 CNT のバンド構造である。アームチェア形 CNT は  $n$  によらず

常にエネルギーギャップがなくなり、金属的である。グラフェンシートバンド構造から、ジグザグ、アームチェア形 CNT の場合は式 (2.5) 中の  $i^x$  は、 $-(n-1), -(n-2), \dots, 0, 1, 2, \dots, n$  に範囲が制限される。CNT を流れる電流を計算するときに都合が良いように、CNT の周方向に関して右回りと左回りの 2 つの分散曲線に分ける。ここでは片方の  $i^x = 1, 2, \dots, n$  に関する分散曲線のみをプロットした。

## 2.3 CNT 中の電流

この節では、CNT 中の電流を計算するための量子力学的な方法を述べる。我々は、CNT 中の電子波伝搬特性を解析するため、伝搬行列法 (TM 法)[5] を用いる。第 4 章で述べるような CNT の応用のため、我々は、量子的なコンダクタンスだけでなく CNT の周方向に関する電流密度分布にも興味があるので、TM 法について詳細に述べていく事にする。

### 2.3.1 CUC 間の境界条件

図 2.1 に示すように、外部からバイアス電圧  $V_0$  が CNT に加えられた時、隣接する CUC 内の静電ポテンシャルは異なるが、簡単のため各 CUC 内で一定と仮定する。より正確に CNT 中の電圧降下を決めるためには、ポアソン方程式を解いてポテンシャルを求める必要がある [6]。確率密度だけでなく確率密度の流れをも保存するには、隣接する第  $J$ -CUC と第  $J+1$ -CUC の間の境界面で適切に電子波を接続していく必要がある。 $\mathbf{F}_J$  を第  $J$ -CUC でのブロッホ関数の振幅を 1 組にまとめた振幅ベクトルとする。すると、確率密度の流れ  $\bar{J}_J$  は、ヘルマン-フェインマンの定理 [8] (付録 A.1 参照) より次式で表される。

$$\bar{J}_J = \left[ \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k^y} \right]_J |\mathbf{F}_J|^2. \quad (2.8)$$

ここで、 $E$  は電子のエネルギー、 $k^y$  は電子の波数、 $\hbar$  はプランク定数 ( $1.054 \times 10^{-34}$  Js) である。確率密度と確率密度の流れが保存されるように、有効質量方程式の理論 [9, 10] と同様にして境界条件を次式のように仮定する。

$$\begin{cases} \mathbf{F}_J & \text{が単位胞境界で連続,} \\ \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k^y} \mathbf{F}_J & \text{が単位胞境界で連続.} \end{cases} \quad (2.9)$$

### 2.3.2 CNT の伝搬行列

第  $K$  番目の GUC での振幅は次式で表現できる。

$$\begin{aligned} F_{J,K}(x, y) &= \{ A_{J,K} \exp [ik^x(x - x_{J,K}^C)] \\ &+ C_{J,K} \exp [-ik^x(x - x_{J,K}^C)] \} \exp [ik_J^y(y - y_{J,K}^C)] \\ &+ \{ B_{J,K} \exp [ik^x(x - x_{J,K}^C)] \\ &+ D_{J,K} \exp [-ik^x(x - x_{J,K}^C)] \} \exp [-ik_J^y(y - y_{J,K}^C)], \end{aligned} \quad (2.10)$$

ここで、座標  $x$  と  $y$  は GUC 内を動く。振幅  $F_{J,K}(x, y)$  は右伝搬波 (+) と左伝搬波 (-) との線形結合で次式で表せる。

$$\begin{aligned} F_{J,K}^{y+}(x, y) &= \{A_{J,K} \exp [ik^x(x - x_{J,K}^C)] \\ &+ C_{J,K} \exp [-ik^x(x - x_{J,K}^C)]\} \exp [ik_J^y(y - y_{J,K}^C)], \end{aligned} \quad (2.11a)$$

$$\begin{aligned} F_{J,K}^{y-}(x, y) &= \{B_{J,K} \exp [ik^x(x - x_{J,K}^C)] \\ &+ D_{J,K} \exp [-ik^x(x - x_{J,K}^C)]\} \exp [-ik_J^y(y - y_{J,K}^C)]. \end{aligned} \quad (2.11b)$$

連続条件の式 (2.9) を適用すると、境界面  $y = (y_{J,K}^C + y_{J+1,K}^C)/2$  において次の条件式が得られる。

$$F_{J+1,K}^{y+} + F_{J+1,K}^{y-} = F_{J,K}^{y+} + F_{J,K}^{y-}, \quad (2.12a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial k_{J+1}^y} F_{J+1,K}^{y+} - \frac{\partial E}{\partial k_{J+1}^y} F_{J+1,K}^{y-} \\ = \frac{\partial E}{\partial k_J^y} F_{J,K}^{y+} - \frac{\partial E}{\partial k_J^y} F_{J,K}^{y-}. \end{aligned} \quad (2.12b)$$

条件式 (2.12a) と (2.12b) は、伝搬行列  $M_J$  を用いると次の行列方程式で表せる。

$$\begin{pmatrix} A_{J+1,K} + C_{J+1,K} \\ B_{J+1,K} + D_{J+1,K} \end{pmatrix} = M_J \begin{pmatrix} A_{J,K} + C_{J,K} \\ B_{J,K} + D_{J,K} \end{pmatrix}, \quad (2.13a)$$

$$\text{where } M_J = \begin{pmatrix} \alpha_+^{(J)} P^{(J)} & \alpha_-^{(J)} Q^{(J)} \\ \alpha_-^{(J)}/Q^{(J)} & \alpha_+^{(J)}/P^{(J)} \end{pmatrix}. \quad (2.13b)$$

伝搬行列の中の各要素は、

$$\alpha_{\pm}^{(J)} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\partial E / \partial k_J^y}{\partial E / \partial k_{J+1}^y} \right), \quad (2.14a)$$

$$P^{(J)} = \exp \left[ i (k_{J+1}^y + k_J^y) \frac{y_{J+1}^C - y_J^C}{2} \right], \quad (2.14b)$$

$$Q^{(J)} = \exp \left[ i (k_{J+1}^y - k_J^y) \frac{y_{J+1}^C - y_J^C}{2} \right]. \quad (2.14c)$$

で表せる。全伝搬行列  $M^{\text{tot}}$  は、式 (2.13) より、 $J = 1$  から  $M - 1$  までの CUC での伝搬行列  $M_J$  を掛けていけばよいから、次式のように求められる。

$$M^{\text{tot}} = M_{M-1} \cdots M_J \cdots M_1. \quad (2.15)$$

ここで、式 (2.15) 中の添え字 1 から  $M - 1$  は、それぞれ出力側から入力側に向かって並ぶ CUC に対応している事に注意してほしい。透過係数  $\mathcal{D}_{(M,K') \rightarrow (1,K)}$  は、入出力端での確率密度の流れの比として定義され、行列  $M^{\text{tot}}$  の要素を

$$\begin{pmatrix} M^{\text{tot}}_{1,1} & M^{\text{tot}}_{1,2} \\ M^{\text{tot}}_{2,1} & M^{\text{tot}}_{2,2} \end{pmatrix} = M^{\text{tot}} \quad (2.16)$$

とにおいて、行列  $M^{\text{tot}}$  の  $(1, 1)$  要素  $M^{\text{tot}}_{1,1}$  を使って次式で求められる。

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{(M,K') \rightarrow (1,K)} &= \frac{\partial E / \partial k_1^y |A_{1,K} + C_{1,K}|^2}{\partial E / \partial k_M^y |A_{M,K'} + C_{M,K'}|^2} \\ &= \frac{1}{|M^{\text{tot}}_{1,1}|^2} \frac{\partial E / \partial k_1^y |A_{1,K} + C_{1,K}|^2}{\partial E / \partial k_M^y |A_{1,K'} + C_{1,K'}|^2}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

同様にして、 $x$  方向に関する境界条件を適用すると、次式の透過係数を得ることができる。

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{(M,K') \rightarrow (1,K)} &= \cos^2 [k^x (x_{K'}^C - x_K^C)] \frac{1}{|M^{\text{tot}}_{1,1}|^2} \frac{\partial E / \partial k_1^y}{\partial E / \partial k_M^y}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

電流密度  $\mathcal{J}_{(M,K') \rightarrow (1,K)}$  は、次式で表される。

$$\mathcal{J}_{(M,K') \rightarrow (1,K)} = n_c e v^y, \quad (2.19)$$

ここで、 $n_c$  はキャリア密度、 $e$  は電子の素電荷の絶対値、 $v^y$  は群速度である。電流密度の計算式は、少し整理すると最終的に次式のようになる。

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{(M,K') \rightarrow (1,K)} &= \\ &= \frac{2e}{n x_G h} \sum_{i^x, i^y} \int [f_M(E) - f_1(E)] \mathcal{D}_{(M,K') \rightarrow (1,K)} dE, \end{aligned} \quad (2.20)$$

ここで、 $x_G$  はジグザグ形、アームチェア形の場合でそれぞれ  $a$ 、 $\sqrt{3}a$  に等しい。また、式 (2.20) の  $i^y$  は波数  $k^y$  のある範囲での和を表す指標で、ジグザグ形では  $i^y=1$  ( $0 < k^y [\text{units of } 4\pi/\sqrt{3}a] \leq 1$  の範囲) の 1 回、アームチェア形では  $i^y=1$  ( $0 < k^y [\text{units of } 4\pi/a] \leq 0.5$ ) と  $i^y=2$  ( $0.5 < k^y [\text{units of } 4\pi/a] \leq 1$ ) の 2 回それぞれ和をとる。 $f_M$ 、 $f_1$  はそれぞれ左電極、右電極でのフェルミディラック分布関数である。それらの差は、計算のため双曲線関数を使った形に定式化すると、次式となる。

$$\begin{aligned} f_M(E) - f_1(E) &= \frac{1}{2} \left[ \tanh \left( \frac{E - E^1}{2k_B T} \right) \right. \\ &\quad \left. - \tanh \left( \frac{E - E^M}{2k_B T} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.21)$$

ここで、フェルミレベルを 0 に仮定し、

$$E^1 = \epsilon_0, \quad E^M = \epsilon_0 + V_0, \quad (2.22)$$

と置く。フェルミレベルの位置を変えたときの影響は後ほど議論する。

CNT とその両端に繋がった金属電極との接触部分の特性は、まだ実験的にも理論的にも十分には明らかになっていない。そのため、我々は入力端子  $J = M$  での電子波の励振位置により 3 つの場合に分けて検討する。それらは、

**case 1** CNT の周方向全体に電子波を励振する場合

**case 2** CNT 中の GUC の指標  $K' = 1$  に電子波を注入する場合

**case 3** CNT の周方向全体に均一に電子波を励振し、CNT の各 CUC で平均値として受信する場合

である。case 1 の電子波励振の場合、電流密度  $\mathcal{J}_K$  は

$$\mathcal{J}_K = \sum_{K'=1}^n \mathcal{J}_{(M,K') \rightarrow (1,K)} \quad (2.23)$$

で求められ、左から右へ流れる全電流  $\mathcal{I}$  は、 $\mathcal{J}_K$  を CNT の周方向に関して積分して求められる。

$$\mathcal{I} = \frac{2e}{nh} \sum_{K,K'=1}^n \sum_{i_x, i_y} \int [f_M(E) - f_1(E)] \mathcal{D}_{(M,K') \rightarrow (1,K)} dE \quad (2.24)$$

(ジグザグ形、アームチェア形).

case 2 の電子波励振の場合、 $K'$  に関する和は  $K'=1$  のみについてだから、電子密度は

$$\mathcal{J}_K = \mathcal{J}_{(M,1) \rightarrow (1,K)} \quad (2.25)$$

で求められる。全電流  $\mathcal{I}$  は、 $\mathcal{J}_K$  を CNT の周方向に関して積分して求められる。

$$\mathcal{I} = \frac{2e}{nh} \sum_{K=1}^n \sum_{i_x, i_y} \int [f_M(E) - f_1(E)] \mathcal{D}_{(M,1) \rightarrow (1,K)} dE \quad (2.26)$$

(ジグザグ形、アームチェア形).

case 3 の電子波励振の場合は、透過係数  $\mathcal{D}_K$  は式 (2.17) ではなく、次式で定義される入力端での確率密度の流れと出力端での確率密度の流れとの比で与えられる。

$$\mathcal{D}_K = \frac{\sum_{K'''=1}^n \bar{\mathcal{J}}_{1,K,K'''}^y}{\frac{1}{N} \sum_{K',K''=1}^n \bar{\mathcal{J}}_{M,K',K''}^y}, \quad (2.27a)$$

$$\bar{\mathcal{J}}_{1,K,K'}^y = \frac{\partial E}{\partial k_{1,K}^y} |A_{1,K} + C_{1,K}|^2, \quad (2.27b)$$

$$\bar{\mathcal{J}}_{M,K,K'}^y = \frac{\partial E}{\partial k_{M,K}^y} \left| M_{K' 1,1}^{\text{tot}} (A_{M,K} + C_{M,K}) \right|^2, \quad (2.27c)$$

式 (2.27) では、 $K'$  を 1 から  $n$  まで走らせて和をとって  $n$  で割る事で、入力端での確率密度の流れを CUC について平均をとっている。 $K''$  を 1 から  $n$  まで走らせて  $(M, K'')$  番目の GUC の和をとる事で、入力端での確率密度の流れは、CUC 中の全 GUC についての総和がとられる。また、 $K'''$  を 1 から  $n$  まで走らせて  $(1, K''')$  番目の GUC の和をとる事で出力端での確率密度の流れは、CUC 中の全 GUC についての総和がとられる。このようにして、行列  $M_K^{\text{tot}}$  の  $(1, 1)$  成分から  $\mathcal{D}_K$  を得る事ができる。同様に、 $x$  方向に関する境界条件を適用すれば、透過係数は次式で得られる (付録 B 参照)。

$$\mathcal{D}_K = \frac{\sum_{K'''=1}^n \partial E / \partial k_{1,K}^y |2c(K, K''', k^x)|^2}{\frac{1}{n} \sum_{K',K''=1}^n \partial E / \partial k_{M,K'}^y \left| M_{K' 1,1}^{\text{tot}} \right|^2 |2c(K', K'', k^x)|^2} \quad (2.28a)$$

$$c(K, K', k^x) \equiv \cos [(K - K')k^x x_G] \quad (2.28b)$$

電流密度  $\mathcal{J}_K$  は次式で表される。

$$\mathcal{J}_K = \int_{r_{CNT}}^{r_{CNT} + \delta z} n_c e v^y dz, \quad (2.29)$$

ここで、 $n_c$ はキャリア密度、 $e$ は電子の素電荷（絶対値）、 $v^y$ は群速度、 $r_{\text{CNT}}$ はCNTの半径、そして $\delta z$ はグラフェンシートの厚みである。付録Cに示す定式化を行えば、最終的に次式が得られる。

$$\mathcal{J}_K = \frac{2e}{n x_{\text{GUC}} h} \sum_{i^x, i^y} \int_{-\infty}^{\infty} [f_M(E) - f_1(E)] \mathcal{D}_K dE. \quad (2.30)$$

(ジグザグ形、アームチェア形)

左から右へ流れる全電流 $\mathcal{I}$ は、 $\mathcal{J}_K$ をCNTの周方向に関して積分して求められる。

$$\mathcal{I} = \int_0^{n x_{\text{GUC}}} \mathcal{J}_K dx = x_{\text{GUC}} \sum_{K=1}^n \mathcal{J}_K, \quad (2.31)$$

(ジグザグ形、アームチェア形)

ここで、 $x_{\text{GUC}}$ はGUCの周方向寸法である。式(2.28)と(2.30)を式(2.31)へ代入して、次式を得る。

$$\begin{aligned} \mathcal{I} = & \frac{2e}{h} \sum_{i^x}^{\text{1st-BZ}} \int_{-\infty}^{\infty} \{f_M(E) - f_1(E)\} \\ & \times \frac{\sum_{K, K''=1}^n \frac{\partial E / \partial k_{1,K}^y c^2(K, K''', k^x)}{\sum_{K', K''=1}^n \frac{\partial E / \partial k_{M, K'}^y \left| M_{K' 1, 1}^{\text{tot}} \right|^2 c^2(K', K'', k^x)} dE. \end{aligned} \quad (2.32)$$

### 2.3.3 CNTの周方向に関する電流密度分布と電流電圧特性

CNTを電子デバイスへ応用するには、電流電圧特性だけでなく、CNTの周方向に関する電流密度分布を計算する事も重要である。図2.5にジグザグ形CNTの周方向に関する電流密度分布を、バイアス電圧 $V_0=10\text{mV}$ のときについて示す。図2.5の(a)、(b)、(c)、(d)は、それぞれ $n=3, 4, 5, 6$ の場合の計算結果を示す。記号●、□、▲でプロットされた点は、それぞれ電子波励振のcase 1, 2, 3に対応している。電子波励振のcase 1, 3では、CNTの周方向に関する電流密度分布はカイラリティが金属的なら常に均一になる。これに対して、電子波励振のcase 2ではジグザグ形CNTの周方向に関する電流密度分布は、図2.3の分散曲線が示すように $n=3, 6, 9, \dots$ の場合は $i^x = \frac{1}{3}n$  または  $\frac{2}{3}n$ のときだけ金属的になるので、不均一になる。

他方、アームチェア形CNTの周方向に関する電流密度分布は、同じバイアス電圧で図2.6になる。図2.6の(a)、(b)、(c)、(d)も、それぞれ $n=3, 4, 5, 6$ の場合の計算結果を示す。図2.5とは対照的に、アームチェア形CNTの周方向に関する電流密度分布は、図2.4の分散曲線が $n$ によらずいつも金属的で、式(2.18)中の $\cos$ の偏角が $i^x = n$ で $2\pi(K - K')$ になるから、常に均一になる。ここで、CNTの周方向に関する電流密度分布がカイラリティと電子波を励振する位置の両方で制御できることが明らかになったことを強調したい。図2.7と2.8はそれぞれジグザグ形、アームチェア形CNTの電流電圧特性である。図2.7と2.8の(a)から(d)はそれぞれ $n=3$ から6の電流電圧特性である。記号●、□、▲でプロットされた点は、それぞれ電子波励振のcase 1, 2, 3に対応している。表2.1は、各電子波励振の場合における電流電圧特性から計算した金属的CNTの微分コンダクタンスを示す。微分コンダクタンスは、電子波励振の場合にもCNTの構造にも依存している。

電子波励振のcase 1では、金属的なジグザグ形CNTとアームチェア形CNTのコンダクタンスは、それぞれ $nG_0, 2nG_0$ になる。ここで、 $G_0$ は量子コンダクタンスと呼ばれ、 $G_0 \equiv 2e^2/h$ の値を持つ。どの電子波励振の場合でも、小さなバイアスの下では、 $f_M - f_1$ の変化は一定で伝搬し得るモード数

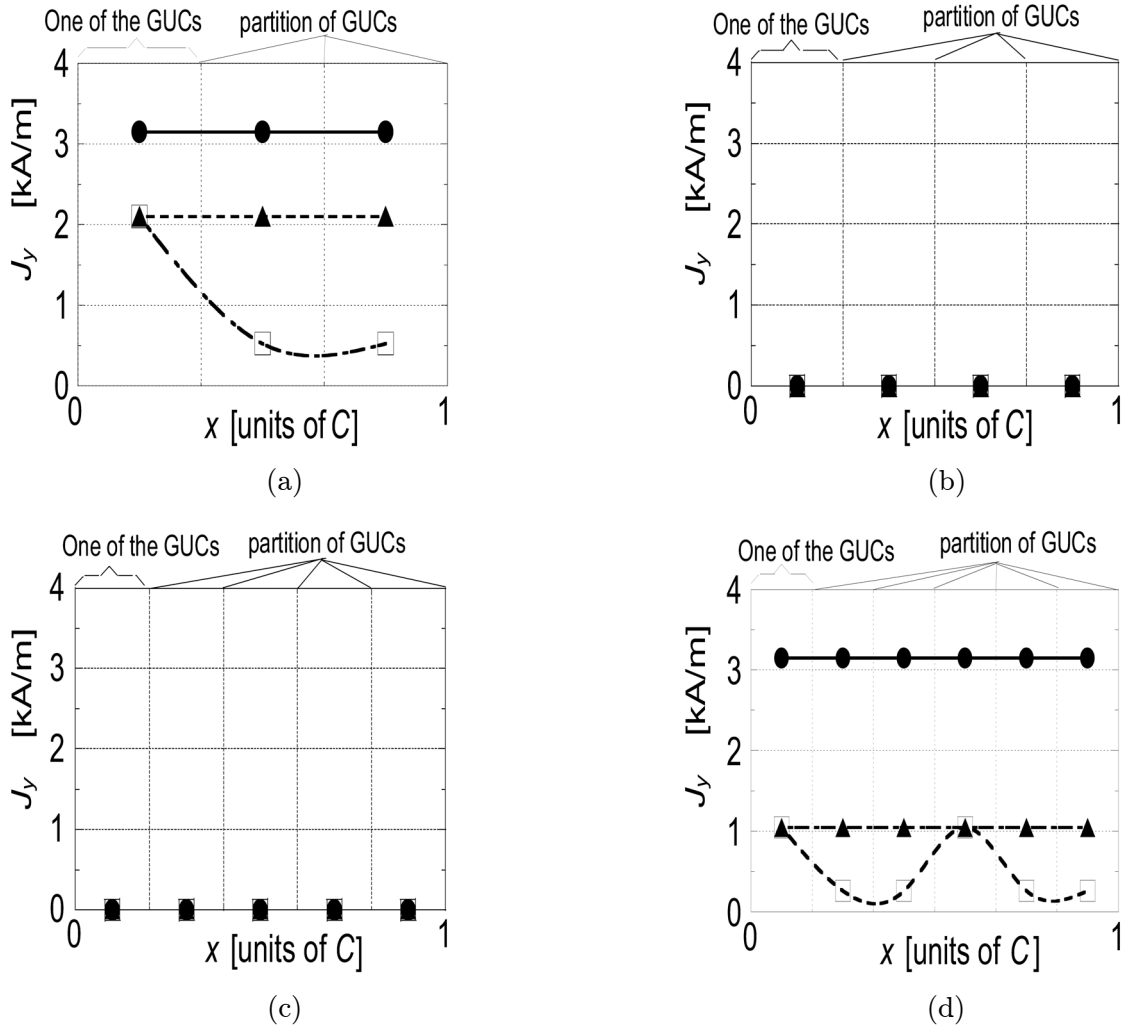


図 2.5: ジグザグ形 CNT の周方向に関する電流密度分布:  $L = 20$ ;  $n =$  (a) 3, (b) 4, (c) 5, (d) 6; ●: case 1, □: case 2, ▲: case 3; 水平軸は図 2.1 の  $x$  軸に相当している。

は常に 2 になるから、各電子波励振の場合に対して透過係数  $D$  を評価すればコンダクタンスの変化が理解できる。電子波励振の case 1 では、式 (2.24) の前に掛かっている項は  $2e/(nh)$  であり、透過係数  $D$  は、ジグザグ形、アームチェア形でそれぞれ正弦波分布、均一分布になるから、 $K$  と  $K'$  に関して足し合わせると、それぞれ  $n^2/2$  と  $n^2$  になる。従って、コンダクタンスはジグザグ形、アームチェア形でそれぞれ  $nG_0$ 、 $2nG_0$  になる。

電子波励振の case 2 では、金属的なジグザグ形とアームチェア形の CNT のコンダクタンスは、それぞれ  $G_0$ 、 $2G_0$  である。これは、式 (2.26) を見れば説明できる。前に付いた因子が  $2e/(nh)$ 、透過係数  $D$  は  $K$  に関して足し合わせると、各 CNT の形で正弦波的、均一になるので、それぞれ  $n/2$ 、 $n$  になる。従って、コンダクタンスはそれぞれ  $G_0$ 、 $2G_0$  になる。

電子波励振の case 3 では、金属的ジグザグ形とアームチェア形の両方の CNT でコンダクタンスは  $2G_0$  になる。このコンダクタンスの値になる理由は、式 (2.32) で前に付いた因子が  $2e/h$ 、透過係数  $D$  が 1 になるからである。

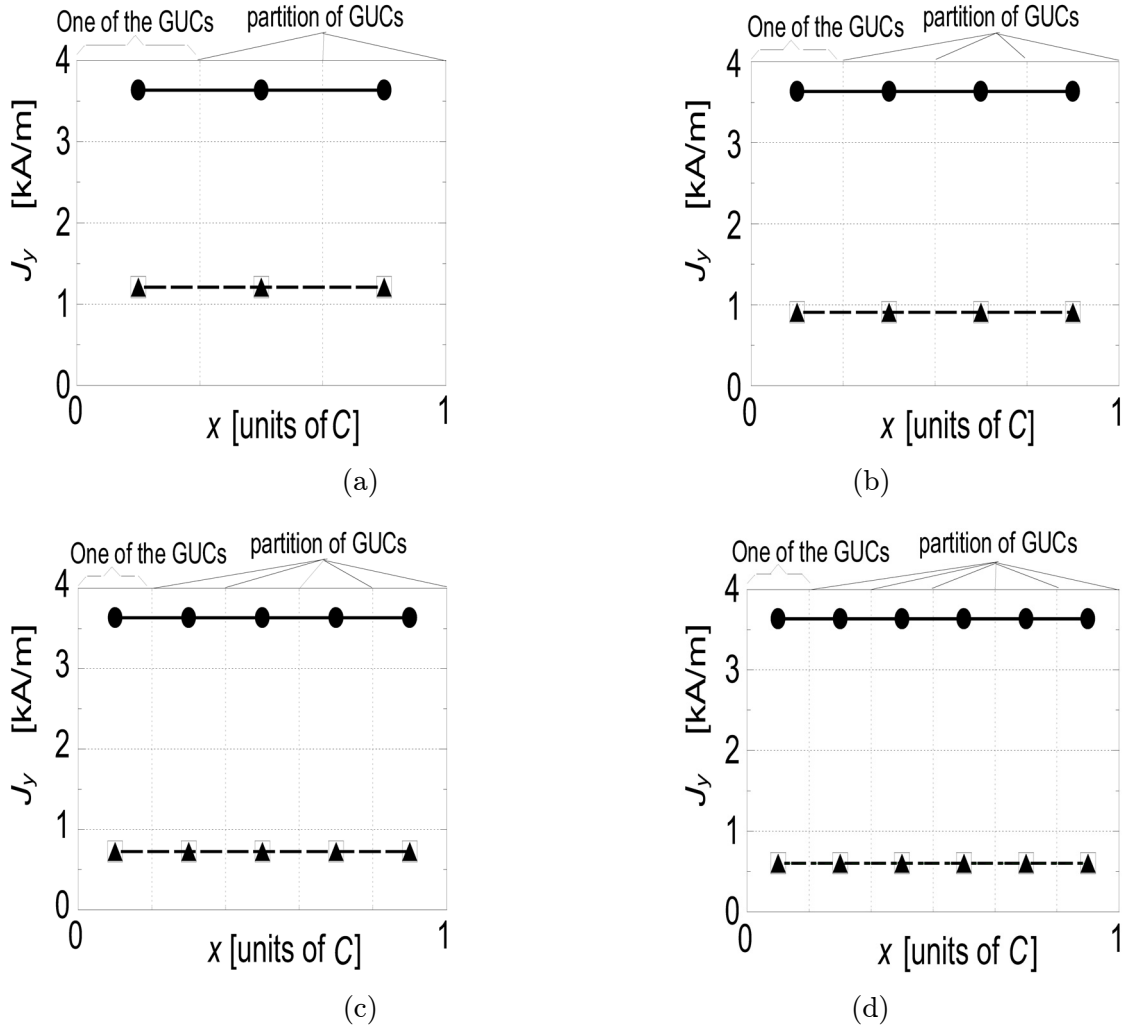


図 2.6: アームチェア形 CNT の周方向に関する電流密度分布:  $L = 20$ ;  $n =$  (a) 3, (b) 4, (c) 5, (d) 6; ●: case 1, □: case 2, ▲: case 3.

## 2.4 CNT のコンダクタンスとフェルミ準位との関係

CNT のコンダクタンスを大きくして電極としての抵抗値を抑えるため、CNT 内のホール濃度を変えて、即ちフェルミレベルを動かして真性 CNT から p 形 CNT にした時の特性を評価する。この特性評価では、式 (2.22) に代わって

$$E^1 = \epsilon_0 + E_f \quad \text{and} \quad E^M = \epsilon_0 + E_f + V_0 \quad (2.33)$$

を仮定して式 (2.21) のフェルミディラック分布関数を用いる。p 形 CNT のフェルミエネルギー  $E_f$  が約  $-0.4\text{eV}$  であることが知られている [14] ので、我々の計算では  $0\text{eV}$  から  $-0.4\text{eV}$  まで変化させる。本来は、ドーピングにより炭素原子がアクセプタに置換されるので、電子波の伝搬が異なってくると予想されるが、ここでは電極内部と CNT 内部のフェルミレベルを仮想的に変化させてドーピング効果を反映させた。

図 2.9(a)、(b)、(c)、(d) は、アームチェア形の p 形 CNT の電流電圧特性を示す。図 2.9(a)、(b)、(c)、(d) は、それぞれ  $n=3$ 、18、72、205 に対する計算結果である。点 ●、□、▲、◇、▼ はそれぞれ  $E_f=0$ 、 $-0.1$ 、 $-0.2$ 、 $-0.3$ 、 $-0.4\text{eV}$  に対する結果である。図 2.10(a)、(b)、(c)、(d) は、微分コ

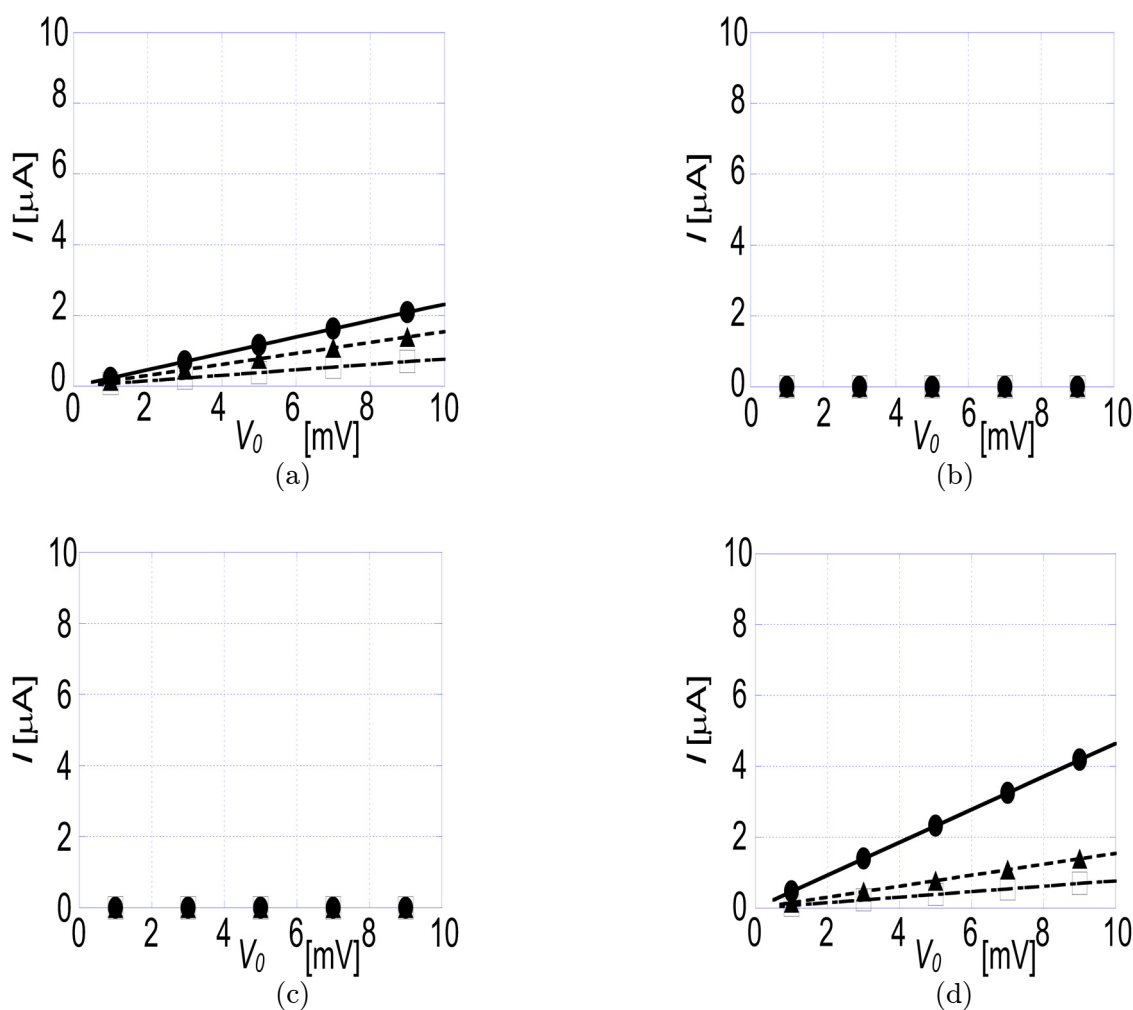


図 2.7: ジグザグ形 CNT の電流電圧特性:  $L = 20$ ;  $n =$  (a) 3, (b) 4, (c) 5, (d) 6; ●: case 1, □: case 2, ▲: case 3.

ンダクタンス  $G = \partial I / \partial V$  の電圧  $V$  特性 ( $G$ - $V$  特性) で、図 2.9 と同じパラメータ条件である。 $E_f$  を上げると小さいバイアス電圧での  $G$  を増やせ、CNT の電極としてのコンダクタンスを改善できる。 $E_f$  が 0 eV の時、電流電圧特性は線形で  $G$  は  $2G_0$  になる。この理由は前章で述べた通りである。それに比べて  $|E_f|$  が 0 eV より大きくなると、電流電圧特性は非線形で  $G$  は伝搬モードの数が増えて  $2G_0$  を超える。 $|E_f| \neq 0\text{eV}$  のときは、 $n$  が増えると図 2.3、2.4 の伝搬に寄与するモード数が増えてくるので、 $G$  は高くなる。我々は  $E_f$  で  $G$  を制御でき、 $E_f$  は CNT 中のホールの数または不純物密度で制御できる。これらの結果から、 $E_f$  や  $n$  によって  $G$  を制御すれば、CNT 電極のコンダクタンスを改善することができる。

## 2.5 結言

我々はグラフェンシートを巻いて円筒形にした CNT の電子波伝搬特性を、LCAO 展開法と TM 法の両方をもとに明らかにした。ジグザグ形とアームチェア形 CNT の周方向に関する電流密度分布と、電流電圧特性を数値的に評価した。我々はその電流密度分布を CNT のカイラリティや、入力端での電子波励振位置で制御できる事を新たに明らかにした。この章では、入力端での電子波励振位置によ

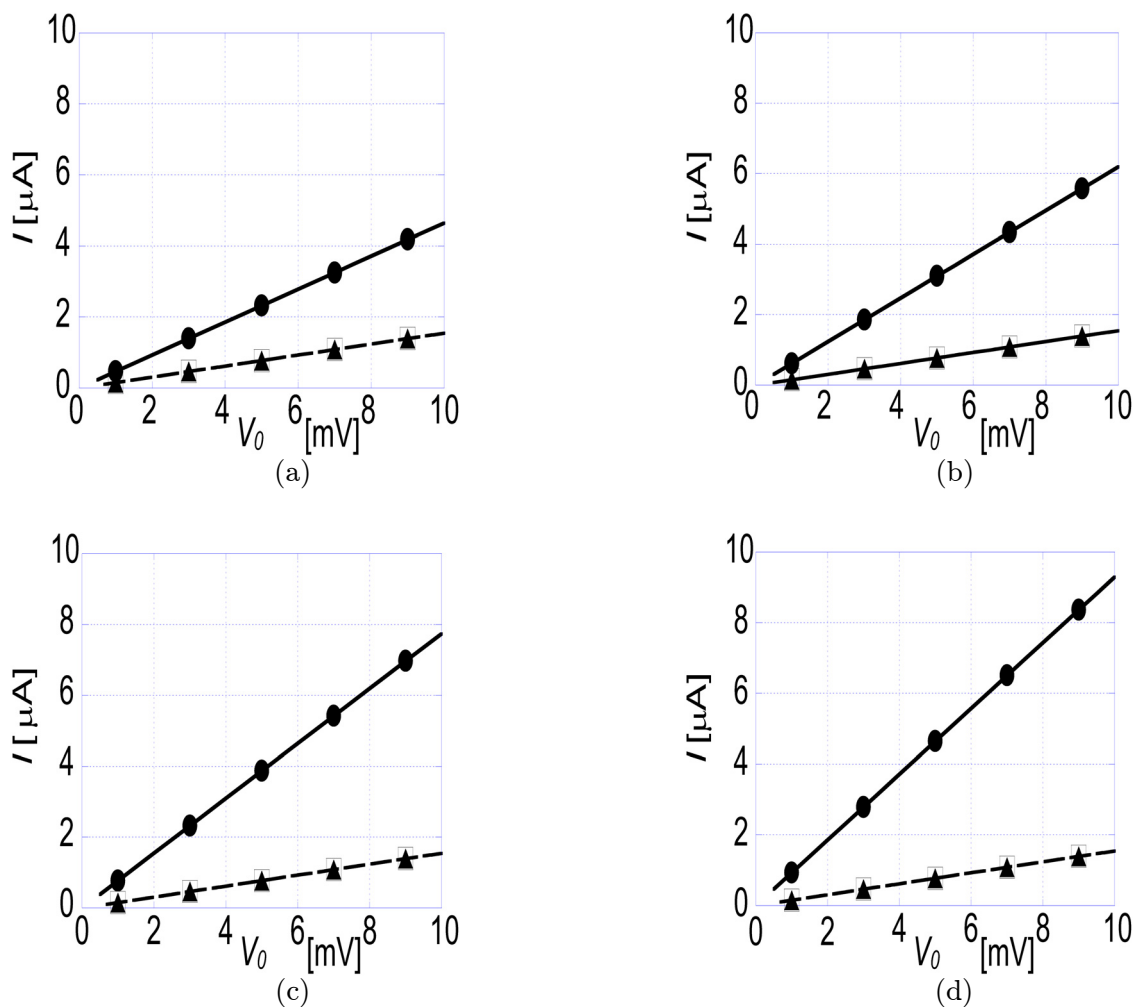


図 2.8: アームチェア形 CNT の電流電圧特性:  $L = 20$ ;  $n =$  (a) 3, (b) 4, (c) 5, (d) 6; ●: case 1, □: case 2, ▲: case 3.

り異なる以下の 3 通りの場合について検討した :

**case 1** CNT の周方向に関して全体に電子波が励振された場合、

**case 2** CNT の単位胞  $K' = 1$  に電子波が励振された場合、

**case 3** CNT の周方向に関して均等に電子波が励振され、各単位胞で平均化された値として電子波が検出された場合。

case 1 と 3 では、CNT の周方向に関する電流密度分布は金属的カイラリティに対して常に均一になる。逆に、case 2 では CNT の周方向に関する電流密度分布は、アームチェア形に対して均一、ジグザグ形に対して不均一になることが夫々分かった。また、CNT 上の電流密度分布はカイラリティや入力端子での電子波励振位置で制御できる。CNT 電極のコンダクタンスを改善するため、真性 CNT の代わりに p 型 CNT を使って電極のコンダクタンスを大きくする事を提案した。 $E_f$  やカイラリティ  $n$  によって  $G$  を制御すれば、CNT 電極のコンダクタンスを改善できることが定量的に判った。

表 2.1: 金属的 CNT のコンダクタンス

excitation	ジグザグ形	アームチェア形
case 1	$nG_0$	$2nG_0$
case 2	$G_0$	$2G_0$
case 3	$2G_0$	$2G_0$

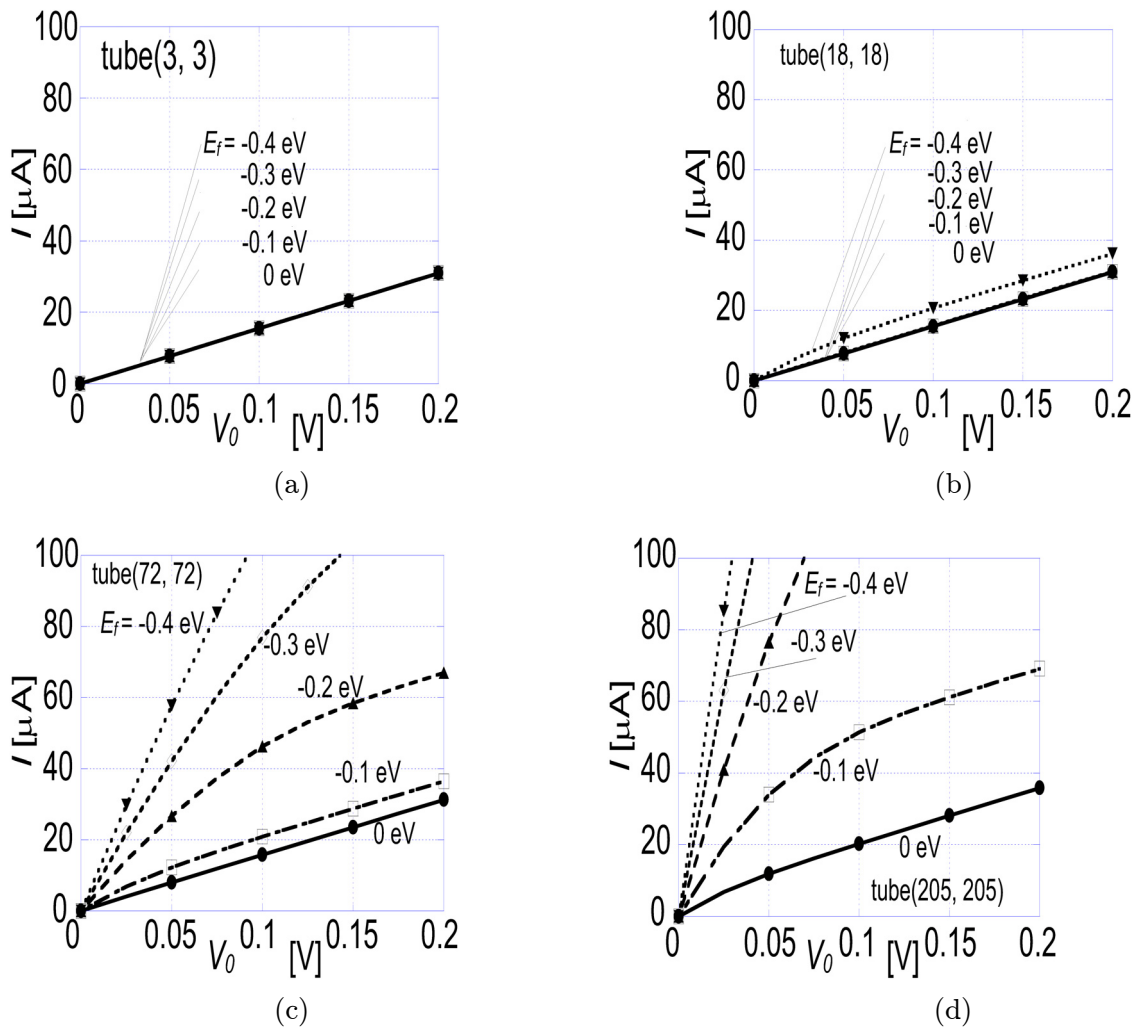
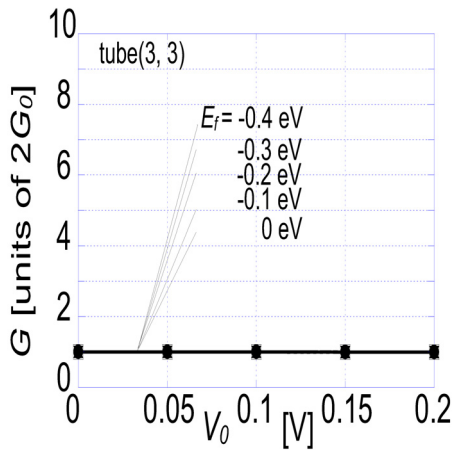
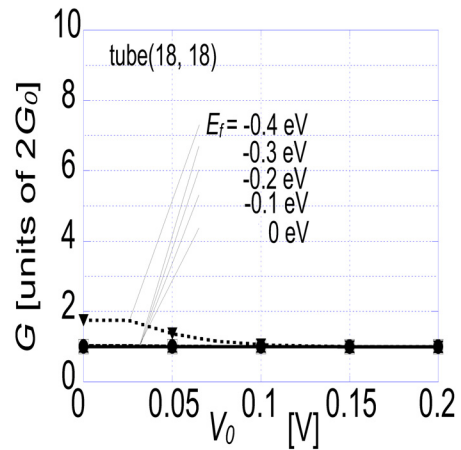


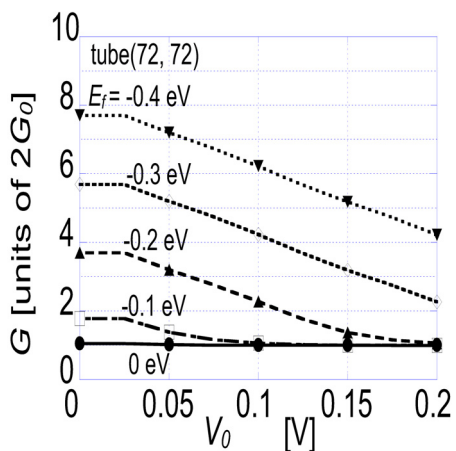
図 2.9: フェルミレベルを変化させた時の p 形 CNT の電流電圧特性:  $L = 20$ ;  $n =$  (a) 3, (b) 18, (c) 72, (d) 205; ●:  $E_f = 0$  eV, □:  $E_f = -0.1$  eV, ▲:  $E_f = -0.2$  eV, ◇:  $E_f = -0.3$  eV, ▼:  $E_f = -0.4$  eV.



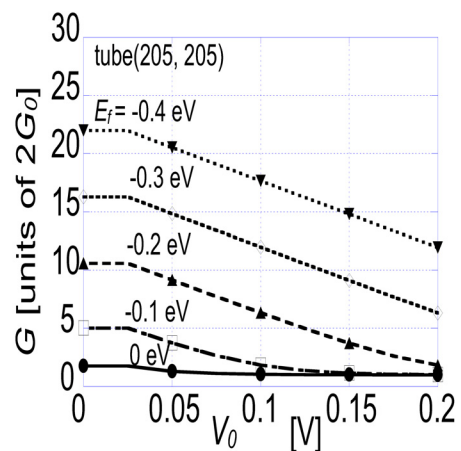
(a)



(b)



(c)



(d)

図 2.10: フェルミレベルを変化させた時の p 形 CNT の  $G$ - $V$  特性:  $G=\partial I/\partial V$ ,  $L=20$ ;  $n =$  (a) 3, (b) 18, (c) 72, (d) 205; ●:  $E_f = 0$  eV, □:  $E_f = -0.1$  eV, ▲:  $E_f = -0.2$  eV, ◇:  $E_f = -0.3$  eV, ▼:  $E_f = -0.4$  eV.

## 第2章の参考文献

- [1] S. Iijima, "Helical Microtubules of Graphitic Carbon," *Nature (London)*, vol. 354, pp.56-58 (1991).
- [2] P. R. Wallace, "The Band Theory of Graphite," *Phys. Rev.*, vol.71, no.9, pp.622-634 (1947).
- [3] D. L. Greenaway, G. Harbeke, F. Bassani, and E. Tosatti, "Anisotropy of the Optical Constants and the Band Structure of Graphite," *Phys. Rev.*, vol.178, no.3, pp.1340-1348 (1969).
- [4] K. Okahara, K. Tanaka, H. Aoki, T. Sato and T. Yamabe, "Band Structure of Carbon Nanotubes with Bond-Alternation Patterns," *Chem. Phys. Lett.*, vol.219, pp.462-468 (1994).
- [5] R. Tsu and L. Esaki, "Tunneling in a Finite Superlattice," *Appl. Phys. Lett.*, vol.22, no. 11, pp.562-564, (1973).; H. Mizuta and T. Tanoue, "The Physics and Applications of Resonant Tunneling Diodes," Cambridge University Press (1995).
- [6] Y. Ando and T. Ito, "Calculation of Transmission Tunneling Current Across Arbitrary Potential Barriers," *J. of App. Phys.*, vol. 61, no. 4, pp. 1497-1502 (1987).
- [7] M. Okamoto, T. Uda, and K. Takayanagi, "Quantum Conductance of Helical Nanowires," *Phys. Rev. B*, vol.64, pp.033303-1 - 033303-4 (2001).
- [8] H. Hellmann, "Einhurung in die Quanten Theorie," (Deuticke, Leipzig) (1937)(in German); R.P. Feynman, "Forces of Molecules," *Phys. Rev.*, vol. 56, pp.340-343 (1939).
- [9] C. Yi-P. Chao and S.L. Chuang, "Resonant Tunneling of Holes in the Multiband Effective-Mass Approximation," *Phys. Rev. B*, vol. 43, no.9, pp.7027-7039 (1991).
- [10] T. Ando, S. Wakahara, and H. Akera, "Connection of Envelope Functions at Semiconductor Heterointerfaces. I. Interface Matrix Calculated in Simplest Models," *Phys. Rev.* vol.40, no.17, pp.11609-11618 (1989).
- [11] 梅垣俊仁, 小川真人, 牧野泰幸, 三好旦六, "任意のカイラリティを持つ Carbon Nanotube の量子輸送解析," 第 22 回 日本シミュレーション学会大会 講演予稿集, 5-9, pp. 137-140 (2003).
- [12] 梅垣俊仁, 小川真人, 三好旦六, "Carbon Nanotube によるスピン波励振特性の解析," 第 64 回応用物理学会学術講演会 講演予稿集, 31a-E-4 (2003).
- [13] C. Hamaguchi, "Basic Semiconductor Physics," Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2001).
- [14] J. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley, and C. Dekker, "Electronic Structure of Atomically Resolved Carbon Nanotubes," *Nature* vol.391, no.1, pp.59-62 (1998).

## 第2章の研究業績

- [1] T. Umegaki, M. Ogawa, Y. Makino, and T. Miyoshi, “Quantum Transport in Carbon Nanotubes with Arbitrary Chirality” *Memoirs Graduate School Science & Technology, Kobe University*, vol. 22 - A: pp. 103 - 114, (2004).
- [2] T. Umegaki, M. Ogawa, Y. Makino, and T. Miyoshi, “Electronic Transport in Carbon Nanotubes Using the Transfer Matrix Method” *J. Appl. Phys.*, vol. 96, no. 11, pp. 6669-6678 (2004).
- [3] T. Umegaki, M. Ogawa, Y. Makino, and T. Miyoshi, “An Analysis of Electronic Propagating Waves in Carbon Nanotubes” *Carbon2004*, 33.4 (E020), held in Providence, R.I., U.S.A., (2004).
- [4] 梅垣俊仁, 小川真人, 牧野泰幸, 三好旦六, “任意のカイラリティーを持つ Carbon Nanotube の量子輸送解析” 第50回応用物理学関係連合講演会講演予稿集, No. 3, 29p - G - 13, p. 1597 (2003).
- [5] 梅垣俊仁, 小川真人, 牧野泰幸, 三好旦六, “任意のカイラリティーを持つ Carbon Nanotube の量子輸送解析” 第22回日本シミュレーション学会, No. 5 - 9, pp. 137 - 140 (2003).

## 第3章

# グリーン関数法を用いたカーボンナノチューブ中の電子波伝搬特性

### 3.1 序言

本章では、グリーン関数法 (GFM) を用いた CNT の基本伝導特性について記述する。前章の TM 法は CNT 端での電子波励振方法を変えての特性と CNT を流れる電流を評価できる利点と、電子・正孔密度の評価がしづらい欠点とを持つ。一方、本章の GFM は、CNT を流れる電流と電子・正孔密度の評価ができる利点を持つ。本章では、この GFM の特徴を利用して、CNT を流れる電流だけでなく、CNT 中の電子・正孔密度の定式化を行い、その数値計算結果を評価する。

解析モデルが 1 次元の場合、グリーン関数法は量子デバイスの解析にうまく適用されてきた [1]。しかし、解析モデルが CNT になると、1 次元と同様の方法では平衡グリーン関数の定式化が難しくなる。そこで、次の 3 段階の方法 [2] で平衡グリーン関数を定式化する。

- 1) 波動関数を強束縛 (Tight-Binding: TB) 基底表現から平面波 (Plane Wave: PW) 基底表現へ変換する。
- 2) CNT の両端に繋がった半無限大の電極中での平面波の波数を求める。ここでは電極が周期構造であることを利用して定式化された固有値方程式を熱平衡状態で解く。
- 3) 波動関数を PW 基底表現から TB 基底表現へ逆変換する。

GFM の定式化は、CNT が任意のカイラリティを持つ [3]、あるいは炭素原子に欠陥がある [4] 場合に対しても適用できるので、金属的 CNT だけでなく半導体的、絶縁体的 CNT の評価にも適用できる。また、GFM の定式化は電流だけでなく、電子・正孔密度の評価にも適用できるので、GFM とポアソン方程式とを連立して自己無撞着に解く事ができる。J. Guo らは非平衡グリーン関数をポアソン方程式と連立させて自己無撞着に解くのに適用し、チャンネルとして CNT を用いた電界効果トランジスタのデバイス特性を明らかにした [5] が、金属的 CNT を評価していない。そこで、本章では、CNT の基本伝導特性の解明と金属的 CNT の空間電荷を考慮した解析を目的に研究した結果をまとめた。

第 1 の段階として、第 3.2 節では GFM を使って CNT 中の電子・正孔密度と電流を定式化する。次に第 3.3 節では、これらの式を定量的に評価し、CNT 中の伝搬電子波のモード間遷移効果や減衰電子波モードについて説明する。最後の節では、結論を述べる。

### 3.2 GFM による定式化

#### 3.2.1 輸送方程式の定式化

最初に、次式の波動関数  $|\Psi\rangle$  に関する定常状態の (時間に依存しない) Schrödinger 方程式から出発する。

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (3.1)$$

図. 3.1 の解析モデルから、CNT の単位胞 (CUC) がデバイス領域で  $N$  個、左右電極で夫々  $N_L, N_R$  個あることと、各 CUC に 12 個の格子点があることから、 $|\Psi\rangle$  を次式で展開できる。

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=-N_L}^{N+N_R} \sum_{k=1}^{12} \langle e_{j,k} | \Psi \rangle |e_{j,k}\rangle \quad (3.2)$$

ここで、完全正規直交基底

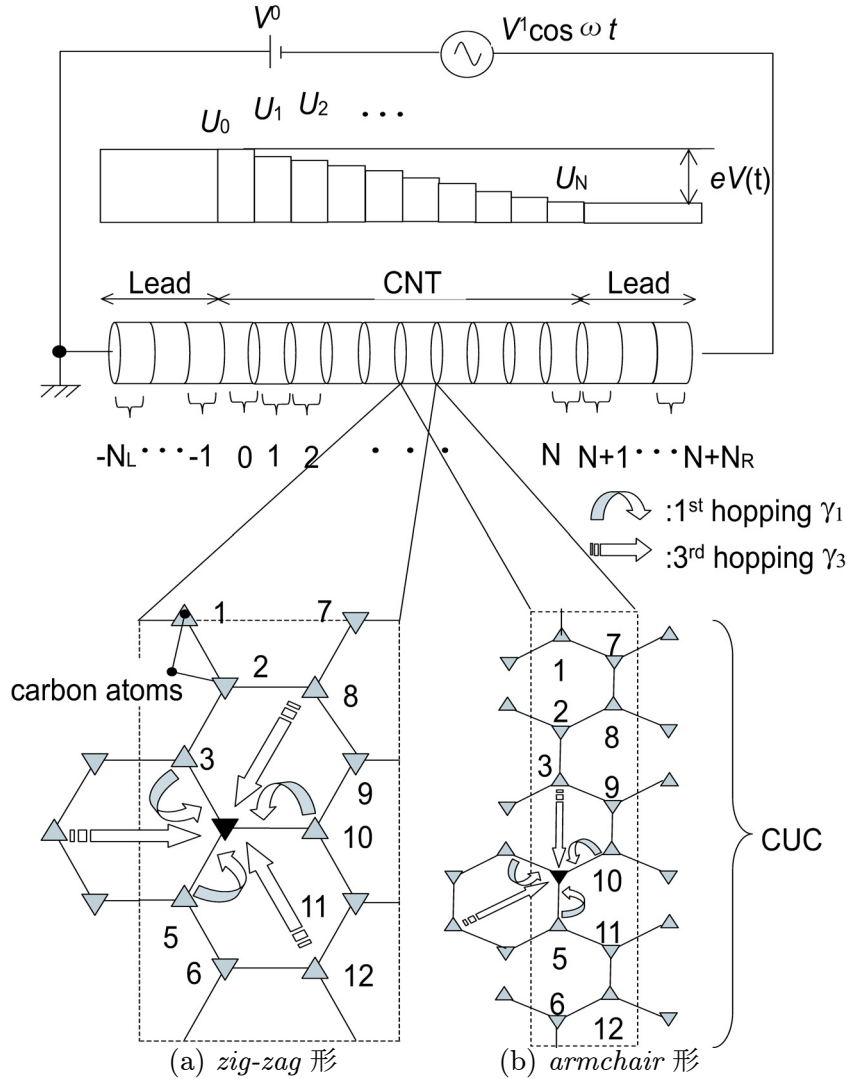


図 3.1: 電圧が印加された CNT の解析モデル

上図の CUC のカイラリティはそれぞれ (a):(3, 0)、(b):(3, 3)。▼印が  $k=4$  の格子点で、▼へ向かう矢印がホッピングをあらわし、曲がって伸びる矢印が第 1 近接、まっすぐが第 3 近接を表す。

$$\{|e_{j,k}\rangle, j = -N_L, \dots, N + N_R, k = 1, 2, \dots, 12\}. \quad (3.3)$$

を用いた。式 (3.2) を式 (3.1) へ代入し、指標  $(j, k)$  を  $(j', k')$  に置き換え、式 (3.1) に左から  $\langle e_{j,k} |$  を掛けると、

$$\sum_{j'=-N_L}^{N+N_R} \sum_{k'=1}^{12} \langle e_{j,k} | \hat{H} |e_{j',k'}\rangle \langle e_{j',k'} | \Psi \rangle = E \sum_{j'=-N_L}^{N+N_R} \sum_{k'=1}^{12} \langle e_{j,k} | e_{j',k'} \rangle \langle e_{j',k'} | \Psi \rangle. \quad (3.4)$$

が得られる。ここで、指標  $(j, k)$  を持つ格子点でのオンサイトエネルギー  $E_j$  とホッピングエネルギー  $\gamma_1$ 、 $\gamma_3$  を考慮する。すなわち、

$$\langle e_{j,k} | \hat{H} | e_{j',k'} \rangle \equiv \begin{cases} E_j, & (j, k) = (j', k') \\ \gamma_1, & (j, k) \text{ と } (j', k') \text{ が最近接} \\ \gamma_3, & (j, k) \text{ と } (j', k') \text{ が第3近接} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (3.5)$$

ここで、 $\gamma_1$  は 2.31eV の値を持つ。また、固有値方程式内の行列を正則化するため、第3近接のホッピングエネルギー  $\gamma_3$  を考慮する。図. 3.1 の解析モデルで、 $\blacktriangledown$  へ向かう矢印がホッピングをあらわし、曲がって伸びる矢印が第1近接、まっすぐが第3近接を表す。式 (3.4) は更に、 $j = -N_L, -N_L+1, \dots, N+N_R$  そして  $k = 1, 2, \dots, 12$  とおくと、次の行列形式で書きかえることができる。

$$\begin{bmatrix} H_L & \tau_{LD} & 0 \\ \tau_{DL} & H_D & \tau_{DR} \\ 0 & \tau_{RD} & H_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_L \\ \psi_D \\ \psi_R \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_L \\ \psi_D \\ \psi_R \end{bmatrix}, \quad (3.6)$$

ここで、

$$H_L = \begin{bmatrix} H_0 & V & & \mathbf{0} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ & V_t & H_0 & V \\ \mathbf{0} & & V_t & H_0 \end{bmatrix}, \quad H_D = \begin{bmatrix} H_0 & V & & \mathbf{0} \\ V_t & H_1 & V & \\ & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{0} & & V_t & H_N \end{bmatrix}, \quad H_R = \begin{bmatrix} H_N & V & & \mathbf{0} \\ V_t & H_N & V & \\ & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{0} & & V_t & H_N \end{bmatrix}, \quad (3.7)$$

$$\tau_{LD} = \begin{bmatrix} & \mathbf{0} \\ V & \end{bmatrix}, \quad \tau_{DR} = \begin{bmatrix} & \mathbf{0} \\ V & \end{bmatrix}, \quad \tau_{DL} = \begin{bmatrix} & V_t \\ \mathbf{0} & \end{bmatrix}, \quad \tau_{RD} = \begin{bmatrix} & V_t \\ \mathbf{0} & \end{bmatrix}. \quad (3.8)$$

$H_j, V, V_t$  は、*zig-zag* 形の場合、

$$H_j = \begin{bmatrix} H_{j,1} & V_{\text{int}} \\ V_{\text{int}} & H_{j,2} \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ V_{\text{mut}} & 0 \end{bmatrix}, \quad V_t = \begin{bmatrix} 0 & V_{\text{mut}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

$$H_{j,1} = \begin{bmatrix} E_j & \gamma_1 & & & \gamma_1 \\ \gamma_1 & E_j & \gamma_1 & & \mathbf{0} \\ & \gamma_1 & E_j & \gamma_1 & \\ \mathbf{0} & & \gamma_1 & E_j & \gamma_1 \\ \gamma_1 & & & \gamma_1 & E_j \end{bmatrix}, \quad H_{j,2} = \begin{bmatrix} E_j & \gamma_1 & & & \gamma_1 \\ \gamma_1 & E_j & \gamma_1 & & \mathbf{0} \\ & \gamma_1 & E_j & \gamma_1 & \\ \mathbf{0} & & \gamma_1 & E_j & \gamma_1 \\ \gamma_1 & & & \gamma_1 & E_j \end{bmatrix}, \quad (3.10a)$$

$$V_{\text{int}} = \begin{bmatrix} 2\gamma_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & 2\gamma_3 & 0 & 2\gamma_3 \\ 0 & 0 & 2\gamma_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\gamma_3 & 0 & \gamma_1 & 0 & 2\gamma_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\gamma_3 & 0 \\ 0 & 2\gamma_3 & 0 & 2\gamma_3 & 0 & \gamma_1 \end{bmatrix}, \quad V_{\text{mut}} = \begin{bmatrix} \gamma_1 & 0 & 2\gamma_3 & 0 & 2\gamma_3 & 0 \\ 0 & 2\gamma_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2\gamma_3 & 0 & \gamma_1 & 0 & 2\gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\gamma_3 & 0 & 0 \\ 2\gamma_3 & 0 & 2\gamma_3 & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\gamma_3 \end{bmatrix}. \quad (3.10b)$$

*armchair* 形の場合、

$$\mathbf{H}_j = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{j,1} & \mathbf{V}_{\text{int}} \\ \mathbf{V}_{\text{int}} & \mathbf{H}_{j,2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \mathbf{V}_{\text{mut}} & \mathbf{V}_{\text{m}2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}_t = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_{\text{m}1} & \mathbf{V}_{\text{mut}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

$$\mathbf{H}_{j,1} = \begin{bmatrix} E_j & \gamma_3 & & & \gamma_1 \\ \gamma_3 & E_j & \gamma_1 & & \mathbf{0} \\ & \gamma_1 & E_j & \gamma_3 & \\ \mathbf{0} & & \gamma_3 & E_j & \gamma_1 \\ \gamma_1 & & & \gamma_1 & E_j & \gamma_3 \\ & & & & \gamma_3 & E_j \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}_{j,2} = \begin{bmatrix} E_j & \gamma_1 & & & \gamma_3 \\ \gamma_1 & E_j & \gamma_3 & & \mathbf{0} \\ & \gamma_3 & E_j & \gamma_1 & \\ \mathbf{0} & & \gamma_1 & E_j & \gamma_3 \\ \gamma_3 & & & \gamma_3 & E_j & \gamma_1 \end{bmatrix}, \quad (3.12a)$$

$$\mathbf{V}_{\text{int}} = \begin{bmatrix} \gamma_1 & & & & \\ & \gamma_1 & & & \mathbf{0} \\ & & \gamma_1 & & \\ \mathbf{0} & & & \gamma_1 & \\ & & & & \gamma_1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}_{\text{mut}} = \begin{bmatrix} \gamma_1 & & & & \\ & \gamma_1 & & & \mathbf{0} \\ & & \gamma_1 & & \\ \mathbf{0} & & & \gamma_1 & \\ & & & & \gamma_1 \end{bmatrix}, \quad (3.12b)$$

$$\mathbf{V}_{\text{m}1} = \begin{bmatrix} & & & & \gamma_3 \\ & \gamma_3 & & & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & & & \gamma_3 & \\ & & & & \gamma_3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}_{\text{m}2} = \begin{bmatrix} & & & & \gamma_3 \\ & \gamma_3 & & & \mathbf{0} \\ & & \gamma_3 & & \\ \mathbf{0} & & & \gamma_3 & \\ & & & & \gamma_3 \end{bmatrix}, \quad (3.12c)$$

となる。

$$\boldsymbol{\psi}_L = \begin{bmatrix} \psi_{-N_L} \\ \vdots \\ \psi_{-2} \\ \psi_{-1} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\psi}_D = \begin{bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\psi}_R = \begin{bmatrix} \psi_{N+1} \\ \psi_{N+2} \\ \vdots \\ \psi_{N+N_R} \end{bmatrix}, \quad (3.13)$$

$$\boldsymbol{\psi}_j = \begin{bmatrix} \psi_{j,1} \\ \psi_{j,2} \\ \vdots \\ \psi_{j,12} \end{bmatrix}, \quad \psi_{j,k} = \langle e_{j,k} | \Psi \rangle, \quad j = -N_L, -N_L + 1, \dots, N + N_R, \quad k = 1, 2, \dots, 12 \quad (3.14)$$

ただし、 $\tau_{LD}$  は  $N_L \times (N + 1)$  行列、 $\tau_{DR}$  は  $(N + 1) \times N_R$  行列である。

### 3.2.2 固有値方程式の定式化

左電極での波動関数をモード基底で展開すると、次式になる。

$$\psi_{j,k} = \sum_{i_x=1}^6 (\kappa_k^{i_x} T_j^{i_x} + \lambda_k^{i_x} R_j^{i_x}), \quad j = \dots, -1, 0, k = 1, 2, \dots, 12 \quad (3.15a)$$

ただし、式 (3.15a) で左から右へ伝搬する波、その逆の波に対して、振幅係数を夫々  $T_j^{i_x}, R_j^{i_x}$  とし、左電極に接する位置  $j = 0$  での波動関数  $\psi_{0,k}$  を夫々  $\kappa_k^{i_x}, \lambda_k^{i_x}, k = 1, 2, \dots, 12, i_x = 1, 2, \dots, 6$  とする。式 (3.6) の  $j = 0$  の行の式

$$V_t \psi_{-1} + H_0 \psi_0 + V \psi_1 = E \psi_0 \quad (3.16)$$

を解けば  $\psi_0$  を求められるが、実際に解くのは困難なので、ここでは固有値問題で解く方法を取り、以下にその固有値方程式を導出する。

左電極では、CUC を単位に周期構造になっていることを利用して、波数  $k_L^{i_x \pm}, i_x = 1, 2, \dots, 6$  を持つ電子波が伝搬していると仮定すると、 $j = -1, 1$  での振幅係数を

$$T_{-1}^{i_x} = e^{-ik_L^{i_x+} T} T_0^{i_x} \quad (3.17a)$$

$$T_1^{i_x} = e^{+ik_L^{i_x+} T} T_0^{i_x} \quad (3.17b)$$

$$R_{-1}^{i_x} = e^{-ik_L^{i_x-} T} R_0^{i_x} \quad (3.18a)$$

$$R_1^{i_x} = e^{+ik_L^{i_x-} T} R_0^{i_x} \quad (3.18b)$$

と置ける。本章では、虚数単位を  $i$  で表記する。

左電極での、左から右へ伝搬する波のモード  $i_x$  に関する方程式は式 (3.17)、(3.18) を使って条件

$$T_j^{j_x} = \delta_{i_x, j_x} \quad (3.19a)$$

$$R_j^{j_x} = 0, \quad (3.19b)$$

$\delta_{i_x, j_x}$  : クロネッカーデルタ関数,  $j = -1, 0, 1, j_x = 1, 2, \dots, 6$

を式 (3.16) に課して、以下のように求められる。

$$\begin{bmatrix} -V_{\text{int}} & EI - H_{0,2} \\ -V_{\text{m1}} & -V_{\text{mut}} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} V_{\text{mut}} & V_{\text{m2}} \\ H_{0,1} - EI & V_{\text{int}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \kappa_A^{i_x} \\ \kappa_B^{i_x} \end{bmatrix} = e^{-ik_L^{i_x+} T} \begin{bmatrix} \kappa_A^{i_x} \\ \kappa_B^{i_x} \end{bmatrix}, \quad (3.20a)$$

$$\kappa_A^{i_x} = \begin{bmatrix} \kappa_1^{i_x} \\ \kappa_2^{i_x} \\ \vdots \\ \kappa_6^{i_x} \end{bmatrix}, \quad \kappa_B^{i_x} = \begin{bmatrix} \kappa_7^{i_x} \\ \kappa_8^{i_x} \\ \vdots \\ \kappa_{12}^{i_x} \end{bmatrix}, \quad (3.20b)$$

逆方向に伝搬する波に関する方程式も同様に条件

$$T_j^{j_x} = 0 \quad (3.21a)$$

$$R_j^{j_x} = \delta_{i_x, j_x} \quad (3.21b)$$

を式 (3.16) に課して以下のように求められる。

$$\begin{bmatrix} -V_{\text{int}} & EI - H_{0,2} \\ -V_{\text{m1}} & -V_{\text{mut}} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} V_{\text{mut}} & V_{\text{m2}} \\ H_{0,1} - EI & V_{\text{int}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_A^{i_x} \\ \lambda_B^{i_x} \end{bmatrix} = e^{-ik_L^{i_x-} T} \begin{bmatrix} \lambda_A^{i_x} \\ \lambda_B^{i_x} \end{bmatrix}, \quad (3.22a)$$

$$\lambda_A^{i_x} = \begin{bmatrix} \lambda_1^{i_x} \\ \lambda_2^{i_x} \\ \vdots \\ \lambda_6^{i_x} \end{bmatrix}, \quad \lambda_B^{i_x} = \begin{bmatrix} \lambda_7^{i_x} \\ \lambda_8^{i_x} \\ \vdots \\ \lambda_{12}^{i_x} \end{bmatrix}, \quad (3.22b)$$

固有値方程式 (3.20a)、(3.22a) を解けば、波数  $k_L^{i_x \pm}$  を求める事ができる。実モードの解  $k_L^{i_x \pm}$  を夫々

$$\frac{\partial E}{\partial(-k_L^{i_x+})} > 0 \quad (3.23a)$$

$$\frac{\partial E}{\partial(-k_L^{i_x-})} < 0 \quad (3.23b)$$

の領域に分類し、それぞれ  $n_l$  個あるとする。隣接 CUC 間での連続性を考慮して、ジグザグ形 CNT の場合、まず実モードの  $|\Re\{-k_L^{i_x \pm}\}|$  の大きい物から、次いで純虚数モード  $\Im\{-k_L^{i_x+}\} < 0$ ,  $\Im\{-k_L^{i_x-}\} > 0$  の  $|\Im\{-k_L^{i_x \pm}\}|$  の小さい物、最後に複素モードの順で並べる。

左電極と同様に、右電極での波動関数も式 (3.15a) と同様にしてモード基底で展開すると、次式になる。

$$\psi_{j,k} = \sum_{i_x=1}^6 (\mu_k^{i_x} T_j^{i_x} + \nu_k^{i_x} R_j^{i_x}), \quad j = \dots, N-1, N, k = 1, 2, \dots, 12 \quad (3.24a)$$

ただし、式 (3.24a) で右電極に接する位置  $j = N$  での波動関数  $\psi_{N,k}$  を左から右へ伝搬する波、その逆の波に対して夫々  $\mu_k^{i_x}, \nu_k^{i_x}, k = 1, 2, \dots, 12, i_x = 1, 2, \dots, 6$  とする。左電極と同様に、右電極では式 (3.6) の  $j = N$  の行の式

$$V_t \psi_{N-1} + H_N \psi_N + V \psi_{N+1} = E \psi_N \quad (3.25)$$

から固有値方程式を以下のように導出する。

左電極と同様に、右電極で波数  $k_R^{i_x \pm}, i_x = 1, 2, \dots, 6$  を持つ電子波が伝搬していると仮定すると、 $j = N-1, N+1$  での振幅係数を

$$T_{N+1}^{i_x} = e^{+ik_R^{i_x+}T} T_N^{i_x} \quad (3.26a)$$

$$T_{N-1}^{i_x} = e^{-ik_R^{i_x+}T} T_N^{i_x} \quad (3.26b)$$

$$R_{N+1}^{i_x} = e^{+ik_R^{i_x-}T} R_N^{i_x} \quad (3.27a)$$

$$R_{N-1}^{i_x} = e^{-ik_R^{i_x-}T} R_N^{i_x} \quad (3.27b)$$

と置ける。右電極での、左から右へ伝搬する波のモード  $i_x$  に関する方程式は、式 (3.26)、(3.27) を使って条件 (3.19) を式 (3.25) に課して、以下のように求められる。

$$\begin{bmatrix} -V_{\text{mut}} & -V_{\text{m}2} \\ EI - H_{N,1} & -V_{\text{int}} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} V_{\text{int}} & H_{N,2} - EI \\ V_{\text{m}1} & V_{\text{mut}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_A^{i_x} \\ \mu_B^{i_x} \end{bmatrix} = e^{+ik_R^{i_x+}T} \begin{bmatrix} \mu_A^{i_x} \\ \mu_B^{i_x} \end{bmatrix}, \quad (3.28a)$$

$$\mu_A^{i_x} = \begin{bmatrix} \mu_1^{i_x} \\ \mu_2^{i_x} \\ \vdots \\ \mu_6^{i_x} \end{bmatrix}, \quad \mu_B^{i_x} = \begin{bmatrix} \mu_7^{i_x} \\ \mu_8^{i_x} \\ \vdots \\ \mu_{12}^{i_x} \end{bmatrix}, \quad (3.28b)$$

逆方向に伝搬する波の方程式は、式 (3.26)、(3.27) を使って条件 (3.21) を式 (3.25) に課して、以下

のように求められる。

$$\begin{bmatrix} -V_{\text{mut}} & -V_{\text{m}2} \\ EI - H_{\text{N},1} & -V_{\text{int}} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} V_{\text{int}} & H_{\text{N},2} - EI \\ V_{\text{m}1} & V_{\text{mut}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nu_{\text{A}}^{i_x} \\ \nu_{\text{B}}^{i_x} \end{bmatrix} = e^{+ik_{\text{R}}^{i_x} T} \begin{bmatrix} \nu_{\text{A}}^{i_x} \\ \nu_{\text{B}}^{i_x} \end{bmatrix}, \quad (3.29a)$$

$$\nu_{\text{A}}^{i_x} = \begin{bmatrix} \nu_1^{i_x} \\ \nu_2^{i_x} \\ \vdots \\ \nu_6^{i_x} \end{bmatrix}, \quad \nu_{\text{B}}^{i_x} = \begin{bmatrix} \nu_7^{i_x} \\ \nu_8^{i_x} \\ \vdots \\ \nu_{12}^{i_x} \end{bmatrix}, \quad (3.29b)$$

固有値方程式 (3.28a)、(3.29a) を解けば、波数  $k_{\text{R}}^{i_x \pm}$  を求める事ができる。実モードの解  $k_{\text{R}}^{i_x \pm}$  を夫々

$$\frac{\partial E}{\partial k_{\text{R}}^{i_x +}} > 0 \quad (3.30a)$$

$$\frac{\partial E}{\partial k_{\text{R}}^{i_x -}} < 0 \quad (3.30b)$$

の領域に分類し、それぞれ  $n_r$  個あるとする。隣接 CUC 間での連続性を考慮して、ジグザグ形 CNT の場合、まず実モードの  $|\Re\{k_{\text{R}}^{i_x \pm}\}|$  の大きい物から、次いで純虚数モード  $\Im\{k_{\text{R}}^{i_x +}\} < 0$ ,  $\Im\{k_{\text{R}}^{i_x -}\} > 0$  の  $|\Im\{k_{\text{R}}^{i_x \pm}\}|$  の小さい物、最後に複素モードの順で並べる。

### 3.2.3 遅延グリーン関数の定式化

CNT の左右電極からの影響を夫々見積もるため、式 (3.6) から、遅延グリーン関数は、デバイス領域の  $G_{\text{D}}$  と、電極領域の  $G_{\text{R}}$ ,  $G_{\text{L}}$ 、デバイス・電極境界領域の  $G_{\text{RD}}$ ,  $G_{\text{DR}}$ ,  $G_{\text{LD}}$ ,  $G_{\text{DL}}$  とからなる行列で記述すると

$$\begin{bmatrix} G_{\text{L}} & G_{\text{LD}} & 0 \\ G_{\text{DL}} & G_{\text{D}} & G_{\text{DR}} \\ 0 & G_{\text{RD}} & G_{\text{R}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E + i\eta)\text{I} - H_{\text{L}} & -\tau_{\text{LD}} & 0 \\ -\tau_{\text{DL}} & (E + i\eta)\text{I} - H_{\text{D}} & -\tau_{\text{DR}} \\ 0 & -\tau_{\text{RD}} & (E + i\eta)\text{I} - H_{\text{R}} \end{bmatrix}^{-1}, \quad (3.31)$$

と書くことができる。ここで、 $\eta$  は正の微小虚数エネルギーである。式 (3.31) から、左辺の  $G_{\text{L}}$ ,  $G_{\text{LD}}$ ,  $G_{\text{DL}}$ ,  $G_{\text{DR}}$ ,  $G_{\text{RD}}$ ,  $G_{\text{R}}$  を消すと、左右の電極の影響が入ったグリーン関数は

$$G_{\text{D}} = [(E + i\eta)\text{I} - H_{\text{D}} - \Sigma_{\text{L}} - \Sigma_{\text{R}}]^{-1}, \quad (3.32)$$

となる。式 (3.32) の内、 $\Sigma_{\text{L}}$  は左電極のデバイスへの影響を表す自己境界エネルギーと呼ばれ、

$$\Sigma_{\text{L}} = \tau_{\text{DL}} g_{\text{L}} \tau_{\text{LD}}, \quad (3.33)$$

$$g_{\text{L}} = [(E + i\eta)\text{I} - H_{\text{L}}]^{-1}, \quad (3.34)$$

の関係を持つ。ここで、 $g_{\text{L}}$  を

$$g_{\text{L}} = \begin{bmatrix} g_{-N_{\text{L}}, -N_{\text{L}}} & g_{-N_{\text{L}}, -N_{\text{L}}+1} & \cdots & g_{-N_{\text{L}}, -1} \\ g_{-N_{\text{L}}+1, -N_{\text{L}}} & g_{-N_{\text{L}}+1, -N_{\text{L}}+1} & \cdots & g_{-N_{\text{L}}+1, -1} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ g_{-1, -N_{\text{L}}} & g_{-1, -N_{\text{L}}+1} & \cdots & g_{-1, -1} \end{bmatrix}, \quad (3.35)$$

$$\mathfrak{g}_{j,j'} = \begin{bmatrix} g_{j,1;j',1} & g_{j,1;j',2} & \cdots & g_{j,1;j',12} \\ g_{j,2;j',1} & g_{j,2;j',2} & \cdots & g_{j,2;j',12} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ g_{j,12;j',1} & g_{j,12;j',2} & \cdots & g_{j,12;j',12} \end{bmatrix}, \quad j, j' = -N_L, -N_L + 1, \dots, -1 \quad (3.36)$$

と置いて、(3.33) へ (3.8)、(3.35)、(3.36) を代入すると、

$$\Sigma_L = \left[ \begin{array}{c|c} V_t \mathfrak{g}_{-1,-1} V & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{array} \right], \quad (3.37)$$

$V_t \mathfrak{g}_{-1,-1} V$  は *zig-zag* 形の場合、

$$V_t \mathfrak{g}_{-1,-1} V = \left[ \begin{array}{cccccc|c} \gamma_1^2 g_{7,7}^L & 0 & \gamma_1^2 g_{7,9}^L & 0 & \gamma_1^2 g_{7,11}^L & 0 & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \gamma_1^2 g_{7,7}^L & 0 & \gamma_1^2 g_{7,9}^L & 0 & \gamma_1^2 g_{7,11}^L & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \gamma_1^2 g_{7,7}^L & 0 & \gamma_1^2 g_{7,9}^L & 0 & \gamma_1^2 g_{7,11}^L & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \hline \mathbf{0} & & & & & & \mathbf{0} \end{array} \right], \quad (3.38)$$

*armchair* 形の場合、

$$V_t \mathfrak{g}_{-1,-1} V = \left[ \begin{array}{cccccc|c} \gamma_1^2 g_{7,7}^L & \gamma_1^2 g_{7,8}^L & \gamma_1^2 g_{7,9}^L & \gamma_1^2 g_{7,10}^L & \gamma_1^2 g_{7,11}^L & \gamma_1^2 g_{7,12}^L & \mathbf{0} \\ \gamma_1^2 g_{8,7}^L & \gamma_1^2 g_{8,8}^L & \gamma_1^2 g_{8,9}^L & \gamma_1^2 g_{8,10}^L & \gamma_1^2 g_{8,11}^L & \gamma_1^2 g_{8,12}^L & \\ \gamma_1^2 g_{9,7}^L & \gamma_1^2 g_{9,8}^L & \gamma_1^2 g_{9,9}^L & \gamma_1^2 g_{9,10}^L & \gamma_1^2 g_{9,11}^L & \gamma_1^2 g_{9,12}^L & \\ \gamma_1^2 g_{10,7}^L & \gamma_1^2 g_{10,8}^L & \gamma_1^2 g_{10,9}^L & \gamma_1^2 g_{10,10}^L & \gamma_1^2 g_{10,11}^L & \gamma_1^2 g_{10,12}^L & \\ \gamma_1^2 g_{11,7}^L & \gamma_1^2 g_{11,8}^L & \gamma_1^2 g_{11,9}^L & \gamma_1^2 g_{11,10}^L & \gamma_1^2 g_{11,11}^L & \gamma_1^2 g_{11,12}^L & \\ \gamma_1^2 g_{12,7}^L & \gamma_1^2 g_{12,8}^L & \gamma_1^2 g_{12,9}^L & \gamma_1^2 g_{12,10}^L & \gamma_1^2 g_{12,11}^L & \gamma_1^2 g_{12,12}^L & \\ \hline \mathbf{0} & & & & & & \mathbf{0} \end{array} \right], \quad (3.39)$$

となる。ただし、 $g_{k,k'}^L \equiv g_{-1,k;-1,k'}$  と置く。式 (3.38)、(3.39) から、 $\mathfrak{g}_L$  のうちデバイスに繋がっている左電極の格子点に対応する成分のみで  $\Sigma_L$  を求めることができる。ただし、式 (3.38)、(3.39) の導出では  $\gamma_3$  を無視した。

左電極の  $\Sigma_L$  と同様に、 $\Sigma_R$  は右電極のデバイスへの影響を表す自己境界エネルギーと呼ばれ、

$$\Sigma_R = \tau_{DR} \mathfrak{g}_R \tau_{RD}, \quad (3.40)$$

$$\mathfrak{g}_R = [(E + i\eta)\mathbf{I} - \mathbf{H}_R]^{-1}, \quad (3.41)$$

の関係を持つ。ここで、 $\mathfrak{g}_R$  は平衡グリーン関数と呼ばれ、

$$\mathfrak{g}_R = \begin{bmatrix} \mathfrak{g}_{N+1,N+1} & \mathfrak{g}_{N+1,N+2} & \cdots & \mathfrak{g}_{N+1,N+N_R} \\ \mathfrak{g}_{N+2,N+1} & \mathfrak{g}_{N+2,N+2} & \cdots & \mathfrak{g}_{N+2,N+N_R} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \mathfrak{g}_{N+N_R,N+1} & \mathfrak{g}_{N+N_R,N+2} & \cdots & \mathfrak{g}_{N+N_R,N+N_R} \end{bmatrix}, \quad (3.42)$$

$$\mathfrak{g}_{j,j'} = \begin{bmatrix} g_{j,1;j',1} & g_{j,1;j',2} & \cdots & g_{j,1;j',12} \\ g_{j,2;j',1} & g_{j,2;j',2} & \cdots & g_{j,2;j',12} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ g_{j,12;j',1} & g_{j,12;j',2} & \cdots & g_{j,12;j',12} \end{bmatrix}, \quad j, j' = N+1, N+2, \dots, N+N_R \quad (3.43)$$

と置いて、(3.40) ～ (3.8)、(3.42)、(3.43) を代入すると、

$$\Sigma_R = \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & V_{g_{N+1,N+1}} V_t \end{array} \right], \quad (3.44)$$

$V_{g_{N+1,N+1}} V_t$  は *zig-zag* 形の場合、

$$V_{g_{N+1,N+1}} V_t = \left[ \begin{array}{c|cccccc} \mathbf{0} & & & & & \mathbf{0} \\ \hline & \gamma_1^2 g_{1,1}^R & 0 & \gamma_1^2 g_{1,3}^R & 0 & \gamma_1^2 g_{1,5}^R & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{0} & \gamma_1^2 g_{3,1}^R & 0 & \gamma_1^2 g_{3,3}^R & 0 & \gamma_1^2 g_{3,5}^R & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & \gamma_1^2 g_{5,1}^R & 0 & \gamma_1^2 g_{5,3}^R & 0 & \gamma_1^2 g_{5,5}^R & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right], \quad (3.45)$$

*armchair* 形の場合、

$$V_{g_{N+1,N+1}} V_t = \left[ \begin{array}{c|cccccccc} \mathbf{0} & & & & & & & \mathbf{0} \\ \hline & \gamma_1^2 g_{1,1}^R & \gamma_1^2 g_{1,2}^R & \gamma_1^2 g_{1,3}^R & \gamma_1^2 g_{1,4}^R & \gamma_1^2 g_{1,5}^R & \gamma_1^2 g_{1,6}^R & \\ & \gamma_1^2 g_{2,1}^R & \gamma_1^2 g_{2,2}^R & \gamma_1^2 g_{2,3}^R & \gamma_1^2 g_{2,4}^R & \gamma_1^2 g_{2,5}^R & \gamma_1^2 g_{2,6}^R & \\ & \gamma_1^2 g_{3,1}^R & \gamma_1^2 g_{3,2}^R & \gamma_1^2 g_{3,3}^R & \gamma_1^2 g_{3,4}^R & \gamma_1^2 g_{3,5}^R & \gamma_1^2 g_{3,6}^R & \\ \mathbf{0} & \gamma_1^2 g_{4,1}^R & \gamma_1^2 g_{4,2}^R & \gamma_1^2 g_{4,3}^R & \gamma_1^2 g_{4,4}^R & \gamma_1^2 g_{4,5}^R & \gamma_1^2 g_{4,6}^R & \\ & \gamma_1^2 g_{5,1}^R & \gamma_1^2 g_{5,2}^R & \gamma_1^2 g_{5,3}^R & \gamma_1^2 g_{5,4}^R & \gamma_1^2 g_{5,5}^R & \gamma_1^2 g_{5,6}^R & \\ & \gamma_1^2 g_{6,1}^R & \gamma_1^2 g_{6,2}^R & \gamma_1^2 g_{6,3}^R & \gamma_1^2 g_{6,4}^R & \gamma_1^2 g_{6,5}^R & \gamma_1^2 g_{6,6}^R & \end{array} \right], \quad (3.46)$$

となる。ただし、 $g_{k,k'}^R \equiv g_{N+1,k;N+1,k'}$  と置く。式 (3.45)、(3.46) から、 $g_R$  のうちデバイスに繋がっている右電極の格子点に対応する成分のみで  $\Sigma_R$  を求めることができる。ただし、式 (3.45)、(3.46) の導出では  $\gamma_3$  を無視した。

平衡グリーン関数  $g_R$ 、 $g_L$  の各要素は、半無限大電極を仮定すると、夫々  $N_R, N_L = \infty$  の極限值として求める必要がある。1次元鎖状格子点モデルの場合、 $g_R$ 、 $g_L$  は無限連分数の形にできた [1] ので、電極の格子点数が無限個の時の値を解析的に、2次方程式の解として求めることができた。一方、CNT の場合は、 $g_R$ 、 $g_L$  は無限連分数の形にするのは難しい。そこで、 $g_R$ 、 $g_L$  を夫々  $N_R, N_L = \infty$  の極限值として解析的に求めるために、

- 1) 波動関数の TB 基底表現からモード基底表現へ変換し、
- 2) 左右の電極が CUC を単位に周期構造になっていることを利用して  $N_R, N_L = \infty$  の極限操作して解を求め、
- 3) モード基底表現から、再び TB 基底表現へ逆変換する、

という方法を用いる。次にその定式化を述べる。



となり、 $g_{-1,k;-1,k'}$  を求める事ができる。式 (3.26a)、(3.27a) を行列表示すると、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{T}_{N+1} \\ \mathbf{R}_{N+1} \end{bmatrix} = \mathbf{P}_R \begin{bmatrix} \mathbf{T}_N \\ \mathbf{R}_N \end{bmatrix}, \quad (3.53a)$$

$$\mathbf{T}_j = \begin{bmatrix} T_j^1 \\ T_j^2 \\ \vdots \\ T_j^6 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}_j = \begin{bmatrix} R_j^1 \\ R_j^2 \\ \vdots \\ R_j^6 \end{bmatrix}, \quad j = N, N+1 \quad (3.53b)$$

$$\mathbf{P}_R = \left[ \begin{array}{c|c} \begin{matrix} e_R^{1+} & & & & & & & \\ & e_R^{2+} & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & \\ & & & e_R^{6+} & & & & \\ \hline & & & & 0 & & & \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \begin{matrix} e_R^{1-} & & & & & & & \\ & e_R^{2-} & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & \\ & & & e_R^{6-} & & & & \\ & & & & & & & e_R^{6-} \end{matrix} \end{array} \right], \quad (3.53c)$$

$$e_R^{i_x \pm} \equiv e^{ik_R^{i_x \pm} T}, \quad (3.53d)$$

ここで、

$$\mathbf{U}_R \equiv \begin{bmatrix} \mu_1^1 & \mu_1^2 & \cdots & \mu_1^6 & \nu_1^1 & \nu_1^2 & \cdots & \nu_1^6 \\ \mu_2^1 & \mu_2^2 & & \mu_2^6 & \nu_2^1 & \nu_2^2 & & \nu_2^6 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \mu_{12}^1 & \mu_{12}^2 & \cdots & \mu_{12}^6 & \nu_{12}^1 & \nu_{12}^2 & \cdots & \nu_{12}^6 \end{bmatrix}, \quad (3.54)$$

と置くと、(3.24a) の行列表現は、

$$\boldsymbol{\psi}_j = \mathbf{U}_R \begin{bmatrix} \mathbf{T}_j \\ \mathbf{R}_j \end{bmatrix}, \quad (3.55)$$

となる。式 (3.25) を (3.55) へ代入すると、

$$E\mathbf{I}\boldsymbol{\psi}_N = \mathbf{V}_t\boldsymbol{\psi}_{N-1} + \mathbf{H}_N\boldsymbol{\psi}_N + \mathbf{V}\mathbf{U}_R \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{N+1} \\ \mathbf{R}_{N+1} \end{bmatrix} \quad (3.56)$$

単一方向に伝搬している実モードの波に対する方程式は式 (3.56) に式 (3.53a) を使うと次式になる。

$$E\mathbf{I}\boldsymbol{\psi}_N = \mathbf{V}_t\boldsymbol{\psi}_{N-1} + \mathbf{H}_N\boldsymbol{\psi}_N + \mathbf{V}\mathbf{U}_R\mathbf{P}_R^+\mathbf{U}_R^{-1}\boldsymbol{\psi}_N \quad (3.57a)$$

$$\mathbf{P}_R^+ = \left[ \begin{array}{c|c} \begin{matrix} e_R^{1+} & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & & e_R^{n_r+} & & & & \\ \hline & & & & 0 & & & \\ & & & & & & & 0 \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} \end{array} \right], \quad (3.57b)$$

式 (3.57a) から、平衡グリーン関数  $g_{N+1,N+1}$  は

$$g_{N+1,N+1} = \{ (E + i\eta)\mathbf{I} - \mathbf{H}_N - \mathbf{V}\mathbf{U}_R\mathbf{P}_R^+\mathbf{U}_R^{-1} \}^{-1} \quad (3.58)$$

となり、 $g_{N+1,k;N+1,k'}$  を求める事ができる。

### 3.2.5 電荷密度・電流密度

左右電極でのスペクトル関数  $A_L, A_R$  は式 (3.32) より得られる  $G_D$  より

$$A_L = G_D \Gamma_L G_D^\dagger, \quad (3.59a)$$

$$A_R = G_D \Gamma_R G_D^\dagger, \quad (3.59b)$$

で定義される。ここで、 $A_L/2\pi, A_R/2\pi$  は物理的には状態密度に相当する。また、(3.59) の中の  $\Gamma_L, \Gamma_R$  は

$$\Gamma_L = i \left[ \Sigma_L - \Sigma_L^\dagger \right] \quad (3.60a)$$

$$\Gamma_R = i \left[ \Sigma_R - \Sigma_R^\dagger \right] \quad (3.60b)$$

で与えられる。左電極接続面から右電極接続面へ伝わる電子波の透過確率  $T$  は

$$T = \Gamma_L G_D \Gamma_R G_D^\dagger \quad (3.61)$$

で与えられる。

左電極が  $E=E_0 \sim \infty$  の電子波を励振するから、フェルミディラック分布関数と  $\{A_L\}_{j,k;j,k}$  の積を、この  $E$  の範囲で積分したものが電子密度の左電極からの寄与になる。右電極からも同様の寄与があるから、格子点  $(j, k)$  での電子密度  $n_{j,k}$  は、これら 2 つの寄与の和

$$n_{j,k} = \int_{E_0}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \{A_L\}_{j,k;j,k} f(E - \mu_L) + \int_{E_N}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \{A_R\}_{j,k;j,k} f(E - \mu_R) \quad (3.62)$$

で表される。正孔密度  $p_{j,k}$  も  $n_{j,k}$  と同様に左右電極からの寄与の和で、

$$p_{j,k} = \int_{-\infty}^{E_0} \frac{dE}{2\pi} \{A_L\}_{j,k;j,k} f(\mu_L - E) + \int_{-\infty}^{E_N} \frac{dE}{2\pi} \{A_R\}_{j,k;j,k} f(\mu_R - E) \quad (3.63)$$

と表される。電流  $I$  は、 $\{T\}$  のトレースとフェルミディラック分布関数の積をエネルギーで積分したものである

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_{k=1}^{4n} \sum_{j=0}^N \{T\}_{j,k;j,k} [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] \quad (3.64)$$

となる。ここで、式 (3.62) の  $\{A_L\}_{j,k;j,k}, \{A_R\}_{j,k;j,k}$  は夫々行列  $A_L, A_R$  の対角項  $\{j, k; j, k\}$  成分を表す。この式の  $n_{j,k}$  の次元は電荷の粒子数 [個] なので、電荷密度を求める場合は距離、面積、或いは体積で割って空間的に占める割合として求める必要がある。

一方、式 (3.64) の  $\{T\}_{j,k;j,k}$  は、行列  $T$  の対角項  $\{j, k; j, k\}$  成分を表している。この式の  $I$  の次元は電流 [A] なので、電流密度を求める場合は距離、或いは面積で割って空間的に占める割合として求める必要がある。

$\{A_L\}_{j,k;j,k}, \{A_R\}_{j,k;j,k}$  と式 (3.64) の  $\{T\}_{j,k;j,k}$  の和は、zig-zag 形の場合、

$$\{A_L\}_{j,k;j,k} = -2\gamma_1^2 \sum_{k',k''=1}^{2n-1,2} \Im \{ \{G_D\}_{j,k;0,k'} g_{k'+2n,k''+2n}^L \{G_D\}_{j,k;0,k''}^* \} \quad (3.65)$$

$$\{A_R\}_{j,k;j,k} = -2\gamma_1^2 \sum_{k',k''=2n+1}^{4n-1,2} \Im \{ \{G_D\}_{j,k;N,k'} g_{k'-2n,k''-2n}^R \{G_D\}_{j,k;N,k''}^* \} \quad (3.66)$$

$$\sum_{k=1}^{4n} \sum_{j=0}^N \{T\}_{j,k;j,k} = \sum_{k,k'=1}^{2n-1,2} \sum_{k'',k'''=2n+1}^{4n-1,2} \gamma_1^A (g_{k+2n,k'+2n}^L - g_{k'+2n,k+2n}^{L*}) \{G_D\}_{0,k';N,k''} \times (-g_{k''-2n,k'''-2n}^R + g_{k'''-2n,k''-2n}^{R*}) \{G_D\}_{0,k;N,k''}^* \quad (3.67)$$

*armchair* 形の場合、

$$\{A_L\}_{j,k;j,k} = -2\gamma_1^2 \sum_{k',k''=1}^{2n} \Im\{\{G_D\}_{j,k;0,k'} g_{k'+2n,k''+2n}^L \{G_D\}_{j,k;0,k''}^*\} \quad (3.68)$$

$$\{A_R\}_{j,k;j,k} = -2\gamma_1^2 \sum_{k',k''=2n+1}^{4n} \Im\{\{G_D\}_{j,k;N,k'} g_{k'-2n,k''-2n}^R \{G_D\}_{j,k;N,k''}^*\} \quad (3.69)$$

$$\sum_{k=1}^{4n} \sum_{j=0}^N \{T\}_{j,k;j,k} = \sum_{k,k'=1}^{2n} \sum_{k'',k'''=2n+1}^{4n} \gamma_1^A (g_{k+2n,k'+2n}^L - g_{k'+2n,k+2n}^{L*}) \{G_D\}_{0,k';N,k''} \times (-g_{k''-2n,k'''-2n}^R + g_{k'''-2n,k''-2n}^{R*}) \{G_D\}_{0,k;N,k''}^* \quad (3.70)$$

となり、デバイスに繋がる電極内の格子点のみについて和をとれば求める事ができる。これらの式 (3.65)~(3.67) の導出では、 $\gamma_3$  を無視した。また、式 (3.62) のフェルミディラック分布関数  $f(E - \mu_L)$ ,  $f(E - \mu_R)$  は、温度を  $T$ 、ボルツマン定数を  $k_B$  として

$$f(E - \mu_L) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_L}{k_B T}\right)} \quad (3.71a)$$

$$f(E - \mu_R) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_R}{k_B T}\right)} \quad (3.71b)$$

で与えられ、フェルミレベルを  $E_F$  として、

$$\mu_L = E_0 + E_F \quad (3.72a)$$

$$\mu_R = E_N + E_F \quad (3.72b)$$

今の解析モデルでは、 $E_j, j = 0, N$  は、第  $j$ -CUC での静電ポテンシャルが  $U_j$  の一定値を仮定しているから、

$$E_j = U_j + \epsilon_0 \quad (3.73)$$

と置く事ができる。ここで、 $\epsilon_0$  は炭素原子のオンサイトエネルギーで、 $\epsilon_0 = -2.18$  eV である。とする。式 (3.71a) と (3.71b) の差は、式 (2.21) と同様に、

$$f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R) = \frac{1}{2} \left\{ -\tanh\left[\frac{E - \mu_L}{2k_B T}\right] + \tanh\left[\frac{E - \mu_R}{2k_B T}\right] \right\} \quad (3.74)$$

と双曲線関数で表せる。

### 3.3 数値計算結果

#### 3.3.1 zig-zag 形 CNT の電流電圧特性

図. 3.2 (a) に金属的な CNT tube(6, 0) の電子密度分布を、図. 3.2 (b) にその正孔密度分布を、そして図. 3.3 にその電流電圧特性を示す。

ここで、電子密度  $n_j$  と正孔密度  $p_j$  を

$$n_j \equiv \frac{1}{2\pi c_0 r_{\text{CNT}} T} \sum_{k=1}^{4n} n_{j,k}, \quad (3.75a)$$

$$p_j \equiv \frac{1}{2\pi c_0 r_{\text{CNT}} T} \sum_{k=1}^{4n} p_{j,k}, \quad (3.75b)$$

と置く。ここで、 $T$  は  $\sqrt{3}a_0$  (*zig-zag* CNT)、 $a_0$  は炭素原子が結合された平面 (基底面) に水平方向の格子定数=0.24612nm [10, 11, 12]、 $c_0$  は基底面に垂直方向の格子定数=0.6707nm [13] である。図.

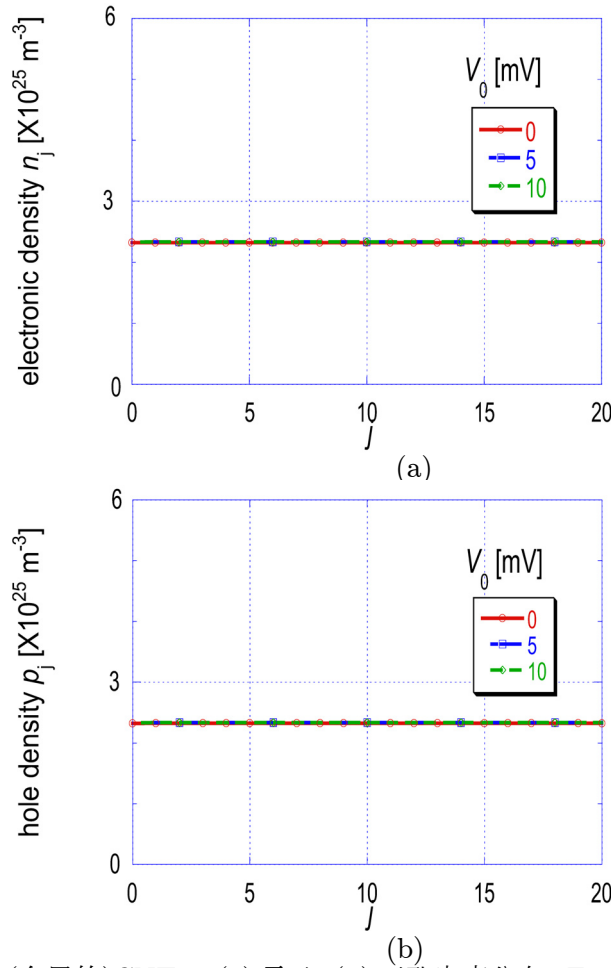


図 3.2: カイラリティ(6, 0)(金属的)CNT の (a) 電子, (b) 正孔密度分布;  $E_F=0\text{eV}$ ,  $\gamma_3=10^{-3}\gamma_1$ ,  $N=20$

3.2 (a), (b) から

- I) 電子密度と正孔密度の差は無い。
- II) 電子・正孔密度分布は平坦である。
- III) 電子・正孔密度は、バイアス電圧  $V_0$  を 0 から 10mV まで上げてても 1% 程度以下しか増加しない。

という結果になった。図. 3.2 は CNT 全体に亘って電荷中性になっていることを示し、ポテンシャル分布を直線近似すればポアソン方程式を既に満たしていること示している。従って、金属的で真性な CNT の場合、ポテンシャル分布を直線で仮定すれば、厳密な電荷密度分布が求まることが判る。一方、半導体的な CNT の場合には、上で述べた量子輸送解析とポアソン方程式とを連立して解けば、

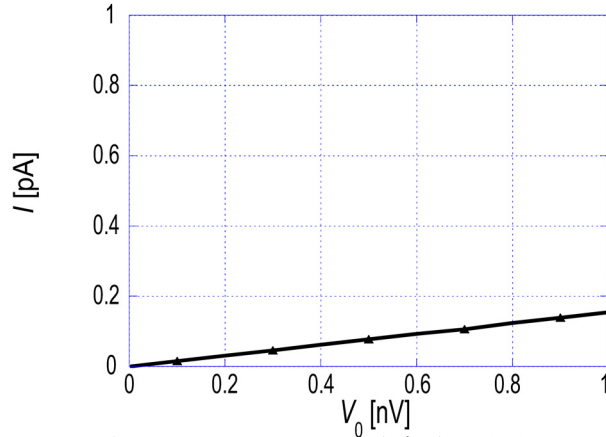


図 3.3: zig-zag 形 CNT tube(6, 0) の電流電圧特性 ;  $E_F=0\text{eV}$ ,  $\gamma_3=10^{-3}\gamma_1$ ,  $N=20$

厳密なポテンシャル分布を求めることができるが、ここではその解法を付録に示すにとどめる。電流電圧特性図. 3.3 は、伝搬行列法で求めた特性 [7] に一致し、妥当な結果を表している。

次に、CNT のどの電子波モードが伝導に寄与するかを調べるため、tube(16, 0) の CNT を例に挙げ、その分散曲線とフェルミディラック分布関数を示し、それらの関係を考察する。この伝導に寄与するモードの考察は分散曲線とフェルミディラック分布関数を個々に示して説明できる (付録参照) が、ここではこれら 1 つの図にまとめた図. 3.4 の分散曲線で説明する。図 3.4 で b1, b2, ... b5, a1,

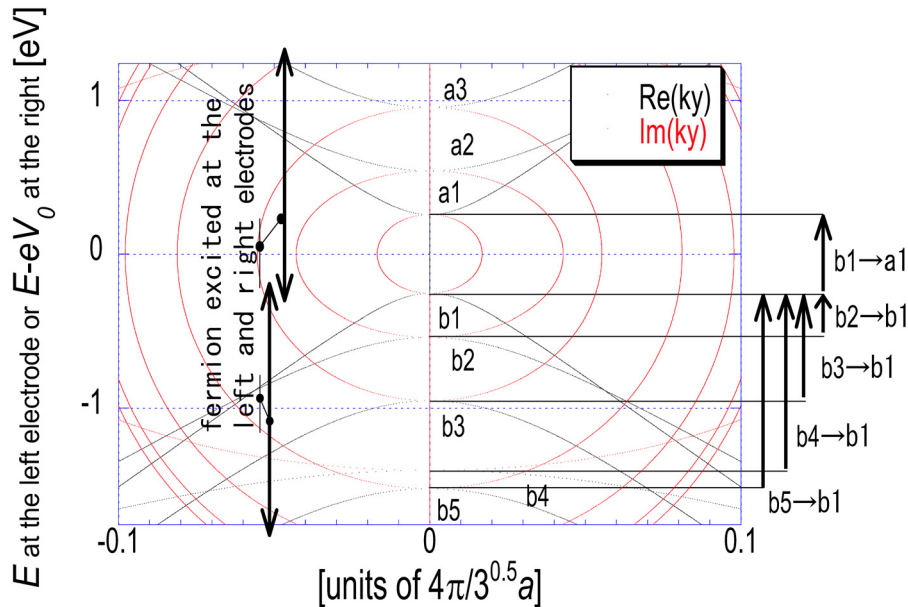


図 3.4: tube(16, 0) CNT の左右電極における分散曲線; “ $\updownarrow$ ” は左右電極から励振される電子・正孔、ここで  $V_0=1.50\text{V}$ 、 $E_F=-0.26\text{eV}$ ; b1, b2, ... b5, a1, a2, a3 は実数の波数を持つ分散曲線を示す。

a2, a3 は実数の波数を持つ分散曲線を示す。2つの “ $\updownarrow$ ” は  $V_0=1.50\text{V}$  が印加された CNT の左右電極から励振される電子・正孔が持つエネルギー範囲である。“ $\up$ ” の長さは、遷移 b1→ b1, b2→ b1, b3→ b1, b4→ b1, b5→ b1, b1→ a1 が始まる  $V_0$  と同じである。図. 3.5 (a) と (b) は夫々電流電圧特性と微分コンダクタンス  $G-V$  特性である。ここで、 $E_F=-0.26\text{eV}$ 、 $G=\partial I/\partial V$  とする。 $G-V$  特性は次の 3 つの領域に分けることができる。

- I) 遷移 b1→ b1 は 電流  $I$  に寄与し、 $V_0$  とともに  $I$  が増大する。
- II) 遷移 b1→ b1 は 電流  $I$  に寄与するが、 $I$  は  $V_0$  に対してほとんど一定である。ある  $V_0$  では、 $V_0$

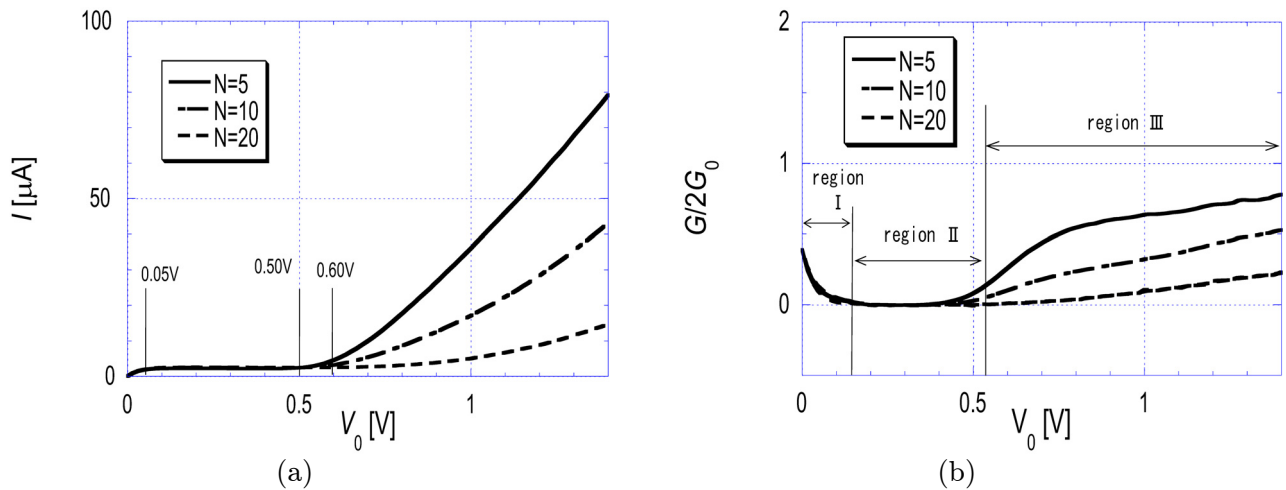


図 3.5: tube(16, 0) CNT の特性: (a) 電流電圧特性、(b)  $G$ - $V$  特性;  $N=5$ (実線),  $10$ (一点鎖線),  $20$ (破線);  $E_F = -0.26\text{eV}$ ,  $T = 300\text{K}$ .

の増加に伴って左右電極での電子波の群速度の違いが増して透過係数が低くなるために、 $G$  が負になる。

Ⅲ) 遷移  $b1 \rightarrow b1$  に加え、遷移  $b1 \rightarrow a1$  が  $I$  に寄与し始める。遷移  $b1 \rightarrow a1$  の電子波は CNT 中で減衰するので、CNT の長さ  $N$  が長くなるとともに  $G$  は減少する

また、tube(16, 0) CNT の  $GV/I$ - $V$  特性を計算すると、図. 3.6(a), (b), (c) が得られた。この図で実線、一点鎖線、破線はそれぞれ長さ  $N=5, 10, 20$  の CNT の特性である。図. 3.6 (a)、(b)、(c) の中の“↑” or “↓” は遷移  $b1 \rightarrow b1, b2 \rightarrow b1, b3 \rightarrow b1, b4 \rightarrow b1, b5 \rightarrow b1$  が始まる点を表す。

$GV/I$  は、図. 3.6 (a) と (b) より  $N$  によらず  $V_0=0$  と  $1.27\text{V}$  で極大になっている。また、 $GV/I$  は、図. 3.6 (c) より  $N=20$  の時に  $V_0=0.68\text{V}$  で極大になっている。 $N=5, 10$  の時、 $V_0$  が  $0.6\text{V}$  の付近で  $GV/I$  の極大点が現れているが、この極大点が、 $V_0=0.68\text{V}$  の極大点を隠している。しかし、 $N=20$  に長くなると、 $V_0=0.6\text{V}$  付近の極大点はほとんど消える。遷移  $b1 \rightarrow a1$  が減衰電子波であり、その伝導への寄与が CNT の長さに敏感に変化するから、 $V_0=0.6\text{V}$  付近の極大点は遷移  $b1 \rightarrow a1$  の伝導への寄与と見られる。これら 3 つの極大点の  $V_0=0, 0.68, 1.27\text{V}$  は、遷移  $b1 \rightarrow b1, b3 \rightarrow b1, b5 \rightarrow b1$  の始まる電圧にそれぞれ一致している。一方、 $GV/I$  は、遷移  $b2 \rightarrow b1$  と  $b4 \rightarrow b1$  では極大にはなっていないと見られる。 $GV/I$  が遷移  $b_i \rightarrow b1, i=1,2,3,4,5$  の始まる電圧で極大になるかならないかは、 $b_i$  と  $b1$  との群速度の違いがないかあるかによる。群速度が分散曲線の傾きに比例し、図. 3.4 よりその傾きが、 $b1$  のものと  $b3, b5$  のものが同程度なので、遷移  $b1 \rightarrow b1, b3 \rightarrow b1, b5 \rightarrow b1$  は伝導に寄与した。一方、遷移  $b2 \rightarrow b1$  と  $b4 \rightarrow b1$  は、遷移前後の群速度の違いが大きいため、同様に考えて前者 3 遷移に比べあまり伝導には寄与しない。

$GV/I$  の実験値 [9] は、 $V_0 = 0, 0.7, 1.2\text{V}$  で極大になる。これら 3 つの  $V_0$  は、遷移が始まる電圧にほぼ等しいことから、遷移  $b1 \rightarrow b1, b3 \rightarrow b1, b5 \rightarrow b1$  にそれぞれ相当していると考えられる。この実験値と理論値の一致は、この理論が妥当であることの証である。実験で用いられた CNT は遷移  $b1 \rightarrow a1$  の減衰電子波を減衰させるのに十分長いので、これらの 3 つの  $V_0$  は遷移  $b1 \rightarrow a1$  には対応しない。

tube(14,0) の CNT の電流電圧特性を調べた所、図. 3.7 が得られた。実線の実験値 [9] と比較すると、理論値は  $\mu\text{A}$  程度の大きさであるのに対し、実験値は  $\text{nA}$  程度になっている。これらの間の違いは、実験では CNT と金属電極との接触抵抗が影響しているためと考えられる。また、理論値、実験値両方に傾きが急になる  $V_0$  があり、それらは  $V_0$  が負のとき同じ程度の電圧  $V_0 = -0.8\text{V}$  付近である

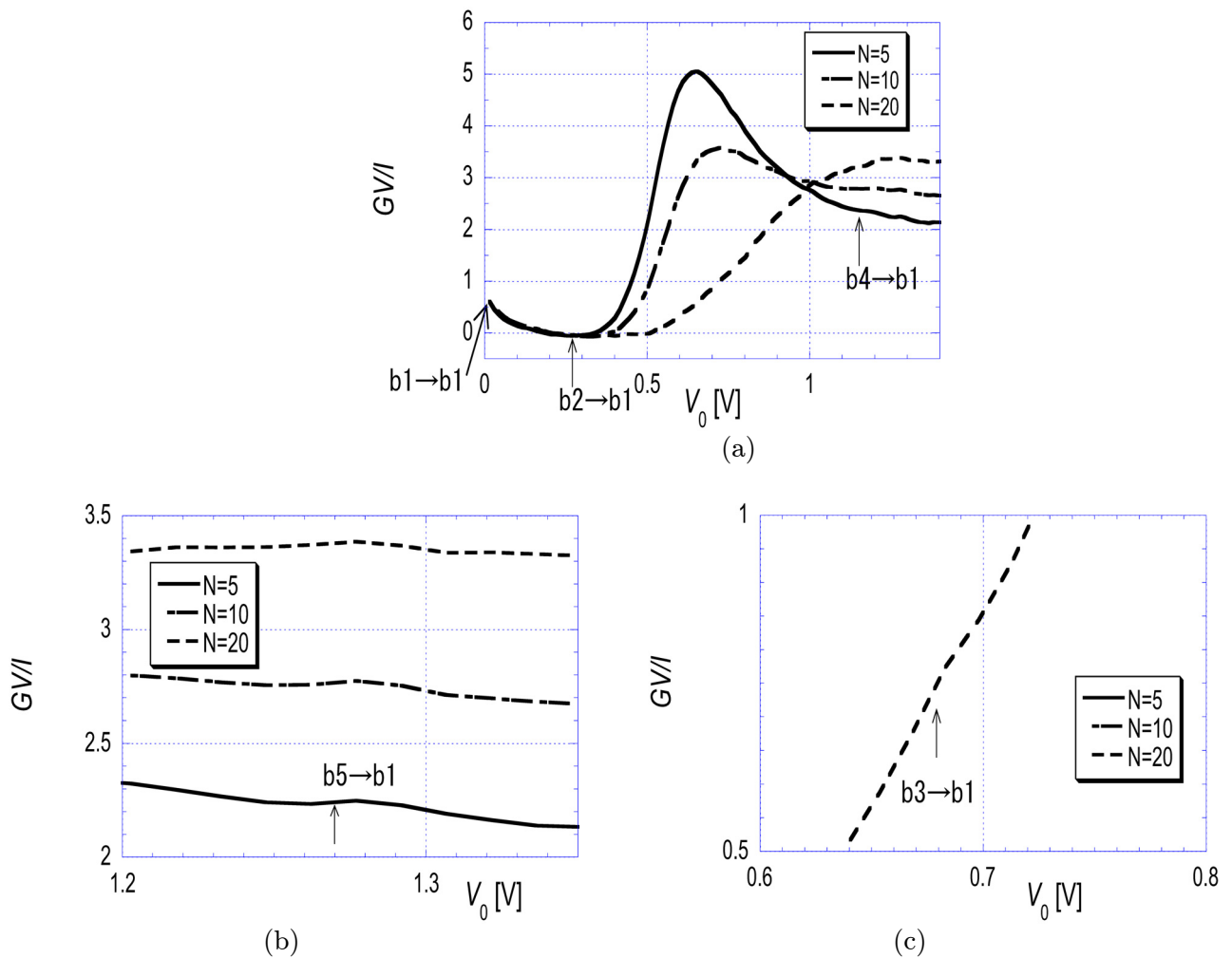


図 3.6: 半導体的 CNT tube(16, 0) の  $GV/I$ - $V$  特性; (a)  $V_0 = 0-1.4$  V, (b)  $V_0 = 1.2-1.35$  V, (c)  $V_0 = 0.6-0.8$  V;  $N=5$ (実線),  $10$ (一点鎖線),  $20$ (破線);  $E_F = -0.26$  eV,  $T=300$  K.

のに対し、 $V_0$  が正のとき理論値は  $V_0=0.8$  V に対し、実験値は  $V_0=+1.2$  V 付近となっている。この違いは、CNT と金属電極との接触抵抗が印加電圧の極性に依存しているためと考えられる。

### 3.3.2 armchair 形 CNT の電流電圧特性

$V_0$  を、0 から 0.01V まで変化させた時の電流電圧特性と  $G$ - $V$  特性を、図. 3.8 に示す。図. 3.8 (a) ~ (d) は tube(3, 3) ~ (6, 6) の特性をそれぞれ示す。これら tube(3, 3) ~ (6, 6) の電流電圧特性は、TM 法で求められた結果 [7] にそれぞれ一致し、妥当な結果を示した。

伝導に寄与するモードの考察は分散曲線とフェルミディラック分布関数を個々に示して説明できる(付録参照)が、ここではこれら 1 つの図にまとめた図. 3.9 の分散曲線で説明する。図. 3.10 (a) と (b) は夫々 tube(18, 18) CNT の電流電圧特性と  $G$ - $V$  特性を示す。ここで  $E_F = -0.4$  eV である。 $G$ - $V$  特性は  $V_0$  の違いにより次の 3 領域からなる。

- I)  $I$  は、図. 3.9 に示された遷移  $b1 \rightarrow b1$  と  $b2 \rightarrow b2$  が伝導に寄与することにより  $V_0$  と共に増える。 $G$  は遷移  $b1 \rightarrow b1$  からの寄与と  $b2 \rightarrow b2$  からの寄与とからなるので、 $2G_0$  を超えている。ただし、 $G_0$  は量子コンダクタンスである。

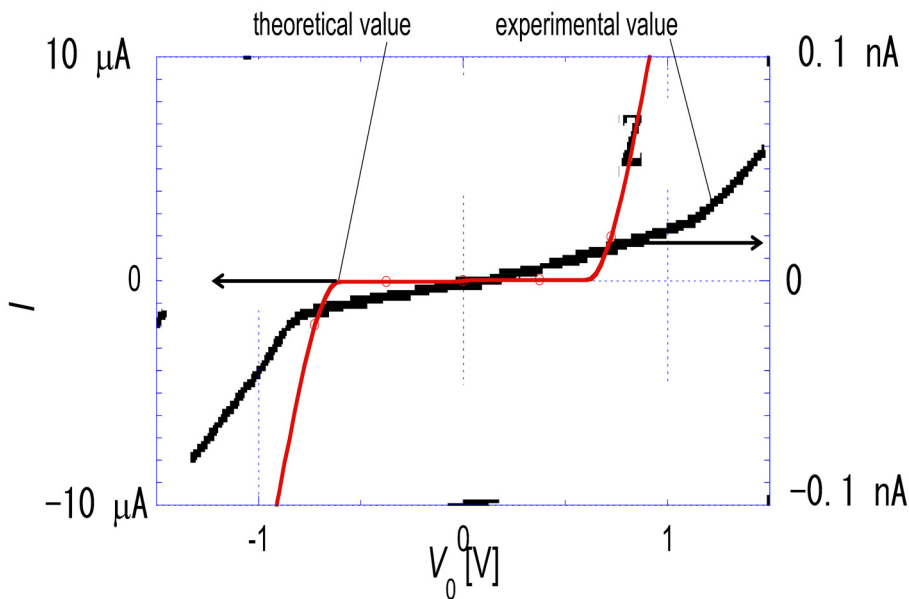


図 3.7: 半導体的 CNT tube(14,0) の電流電圧特性;  $E_F = -0.2\text{eV}$ ,  $N=5$ ,  $T=300\text{K}$

- II)  $G$  は遷移  $b1 \rightarrow b1$  と  $b2 \rightarrow b2$  からの寄与よりなるが、これらのうち  $b2 \rightarrow b2$  からの寄与は  $I$  が一定になるので、 $2G_0$  になる。
- III)  $b1 \rightarrow b1$  と  $b2 \rightarrow b2$  からの寄与に加え、 $b2 \rightarrow a2$  からの寄与が  $I$  に加わりはじめる。 $G$  は  $2G_0$  を超えているが、遷移  $b2 \rightarrow a2$  が CNT 中を減衰する電子波だから、 $N$  を長くすると  $G$  は  $2G_0$  に減少していく。

### 3.4 結言

任意のカイラリティを持つカーボンナノチューブ (CNT) の量子輸送解析へのグリーン関数法適用について研究した。その定量評価の結果、金属的で真性 CNT の中では、線形に分布するポテンシャル分布を仮定すれば、電子、正孔が電荷中性条件を満たしそれらの分布が平坦なため、既にポアソン方程式が成り立っていることが分かった。半導体的な CNT と金属的な CNT との  $I-V$  特性を計算した。これらの特性を基に、カイラリティやフェルミレベル、そして印加直流電圧を変化させて、微分コンダクタンス  $G$  を負の値から量子コンダクタンスの何倍かまで制御できることを明らかにした。次に、tube(16, 0) CNT の  $GV/I-V$  特性を評価した。実波数を持つモード  $b_i$  の群速度がほかのモード  $b_j$  ( $i, j=1, 2, \dots$ ) の群速度と同程度であれば、 $GV/I$  はそれらのモード間遷移が始まるバイアス電圧で極大になることが分かった。この GFM の定式化は任意のカイラリティを持つ CNT や欠陥を持つものなどにも適用できるので、金属的な CNT だけでなく、半導体的、絶縁体的 CNT の特性も評価できる。この方法は、CNT を流れる電流だけでなく、CNT 中の電子・正孔密度の評価にも適用できるので、GFM とポアソン方程式とを連立させて自己無撞着に解くのに適用できる。次章では、本章の結果を参考に用いて CNT の電極応用を議論する。

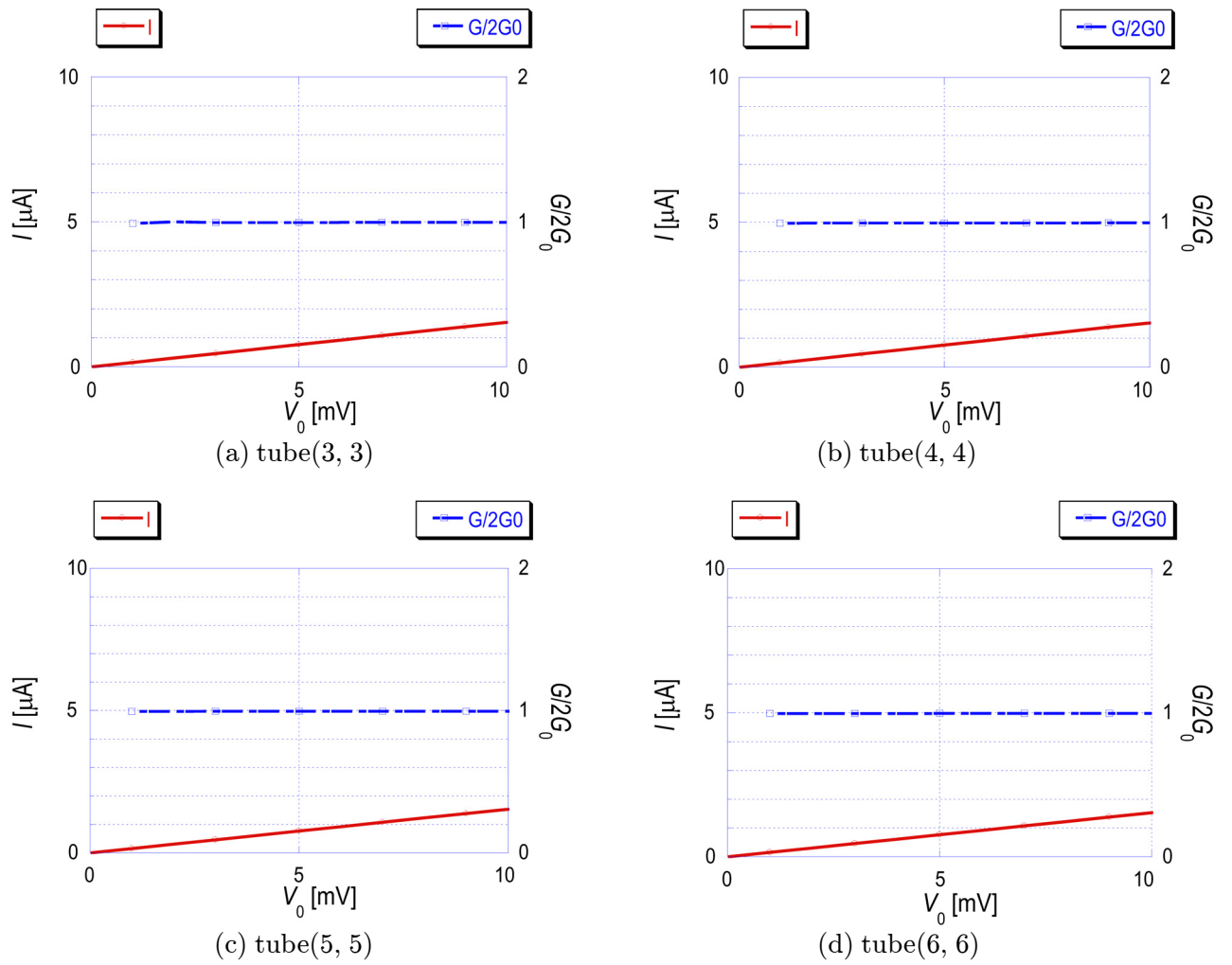


図 3.8: *armchair* 形 CNT の  $I$ - $V$ ,  $G$ - $V$  特性,  $E_F=0\text{eV}$ ,  $\gamma_3=10^{-4}\gamma_1$ ,  $N=20$

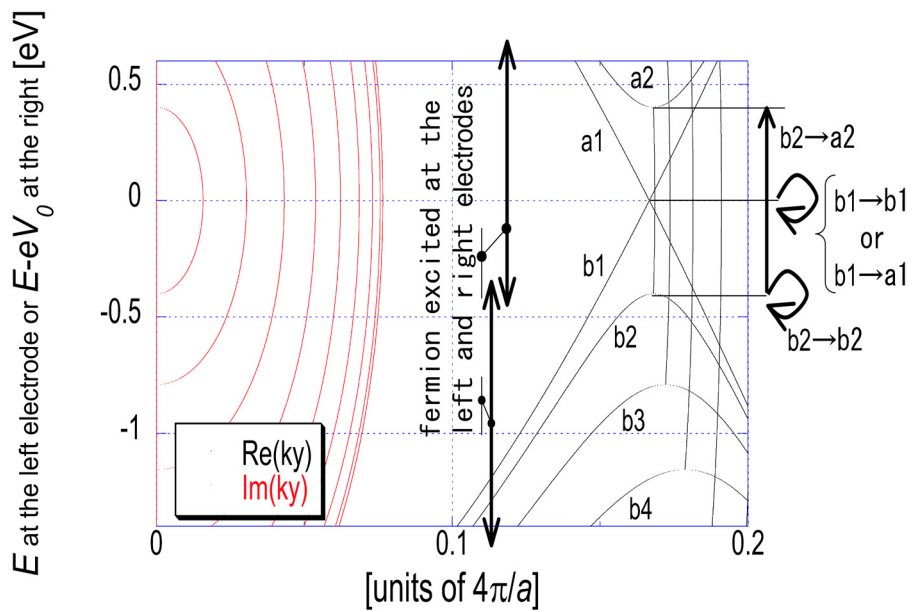


図 3.9: tube(18,18)CNT の左右電極での分散曲線; “ $\updownarrow$ ” は  $V_0=1.00\text{V}$  で左右電極で励振された電子・正孔のエネルギー範囲を示す; b1, b2, b3, b4, a1, a2 は実波数の分散曲線を示す。

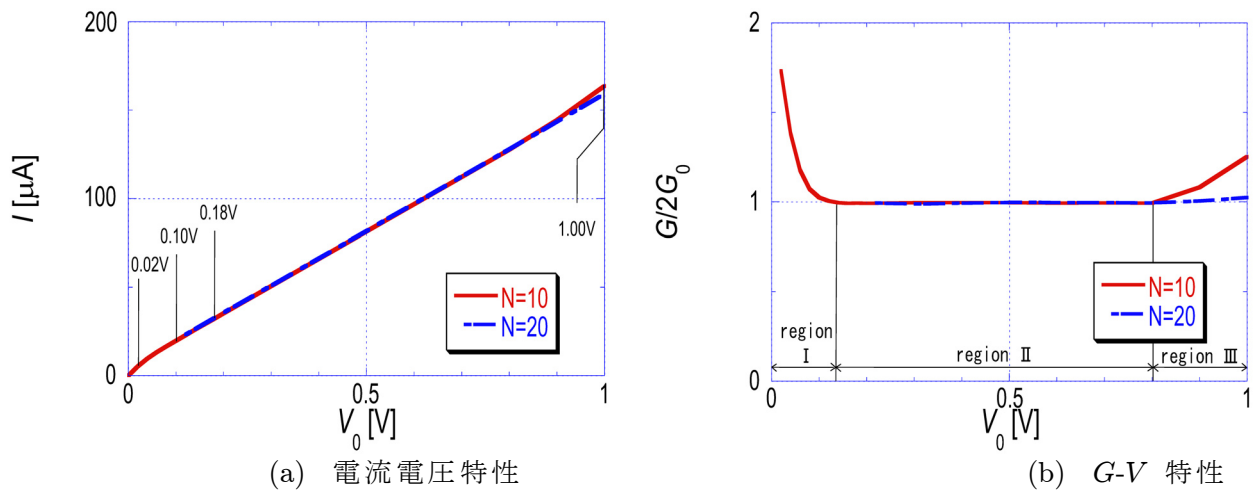


図 3.10: tube(18, 18) の電流電圧,  $G$ - $V$  特性;  $E_F = -0.4\text{eV}$ ,  $\gamma_3 = 10^{-4} \gamma_1$

### 第3章の参考文献

- [1] S. Datta, “Electronic Transport in Mesoscopic Systems,” Cambridge University Press (1995).
- [2] R. Tamura and M. Tsukada, “Conductance of Nanotube Junctions and Its Scaling Law,” *Phys. Rev. B*, vol. 55, no. 8, pp.4991-4998 (1997).
- [3] 牧野泰幸, “カーボンナノチューブ中の電子の量子輸送解析に関する研究,” 神戸大学大学院修士論文 (2004年3月).
- [4] 梶原正法, “カーボンナノチューブの輸送特性に関する研究,” 神戸大学卒業論文 (2003年3月).
- [5] J. Guo, S. Datta, and M. Lundstrom, “A Numerical Study of Scaling Issues for Schottky-Barrier Carbon Nanotube Transistors,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 51, no. 2, pp. 172-177 (2004).
- [6] T. Ando, T. Nakanishi, and M. Igami, “Effective-Mass Theory of Carbon Nanotubes with Vacancy,” *J. Phys. Soc. Jpn.* vol. 68, pp. 3994-4008 (1999).
- [7] T. Umegaki, M. Ogawa, Y. Makino, and T. Miyoshi, “Electronic Transport in Carbon Nanotubes Using the Transfer-Matrix Method,” *J. Appl. Phys.* vol. 96, no. 11, pp. 6669-6678 (2004).
- [8] M. Ogawa, T. Sugano, and T. Miyoshi, “Full Multiband Simulation of Quantum Electron Transport in Resonant Tunneling Devices,” *Solid-State Electronics* vol. 44, pp. 1939-1948 (2000).
- [9] J. W. G. Wildoer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley, and C. Dekker, “Electronic Structure of Atomically Resolved Carbon Nanotubes,” *NATURE*, vol. 391, p. 59 (1998).
- [10] J. D. Bernal, “The Structure of Graphite,” *Proc. Roy. Soc.*, vol. A106, pp. 749-773 (1924).
- [11] O. Hassel and H. Mark, “Über die Kristallstruktur des Graphites,” *Z. Phys.*, vol. 25, p. 317 (1924).
- [12] H. Lipson and A. R. Stokes, “The Structure of Graphite,” *Proc. Roy. Soc.*, vol. A181, pp. 101-105 (1942).
- [13] J. B. Nelson and D. P. Riley, “The Thermal Expansion of Graphite from 15°C to 800°C,” *Proc. Phys. Soc.*, vol. 57, p. 477 (1945).

## 第 3 章の研究業績

- [1] T. Umegaki, M. Ogawa, and T. Miyoshi, “Electronic Transport in Carbon Nanotubes Using Green’s Function Method” submitted to Journal of Applied Physics, 28 Jun 2005.

## 第4章

# カーボンナノチューブによるスピン波励振 高周波フィルタの特性解析

### 4.1 序言

静磁波の応用として遅延線、フィルタ、発振器等の様々な形でマイクロ波デバイスが報告されてきた。しかし、これらのデバイスの動作波長は $10\mu\text{m}$ から $10\text{nm}$ 程度 [1, 2] であった。動作波長及び動作周波数は、スピン波を励振する金属電極の寸法で決まり、その加工精度で制限されている

一方、CNTの発見 [3] 以来、CNTはそのユニークな構造と有望な電気特性を持つことで非常に注目されている。特に、CNTの直径は数 $\text{nm}$ の大きさに簡単に制御することができる。さらに、CNTは自己組織的に形成することができ、シリコンなどの従来の物質に比べて非常に優れたバリスティック伝導性を持つ。前章と前々章とでこれらの特性について基本特性を解析し、その結果を利用してCNTの応用として、静磁波を直接励振・検出する電極としてCNTを用いた高周波フィルタにつき考察を加えた結果を本章で述べる。従来のGHz帯で動作する金属電極を持つ高周波フィルタ [1, 2] に比べ、直径を小さくできるCNT電極は、動作周波数をTHz帯域へ広げる可能性がある。そのデバイスの動作周波数帯域を広げることができれば、多くの情報を取り扱えるデバイスが実現できると考えられる。

第4.2節では、交流電圧を印加した時のCNTの特性について説明する。第4.3節では、イットリウム・鉄・ガーネット (YIG) 中に、CNT電極によって励振、検出された静磁波の特性を、高周波フィルタに用いたときのフィルタ特性につき検討を行う。まず、交換相互作用の分子磁場近似法とマクスウェル方程式の静磁近似法を用いてYIG中を伝搬する静磁波の分散関係式を定式化し、分散曲線を評価する。その結果として、静磁波はTHzの周波数領域で数 $\text{nm}$ の波長で伝搬することを明らかにする。CNTにCNT単体の量子輸送解析の結果を反映させ、かつCNTを円筒形電極として扱った単層CNTに高周波電流を流したYIGデバイスの帯域通過フィルタについて検討する。その結果、CNT電極は、近くに置かれたフェライト薄膜中に静磁波を直接励振・検出し得ることを明らかにする。

さらに、第2章でのCNTコンダクタンスの制御の結果に基づき、マイクロ波のマッチング条件を改善すべく、第4.3節では、バンドルCNTに高周波電流を流した場合のデバイスを、単層CNTの場合と同様に検討した。分散曲線は伝搬し得る周波数帯域がGHzからTHzまでに及んでおり、波長は $\mu\text{m}$ から短くて数 $\text{nm}$ に及んでいる。この波長の多様性のため、フィルタ特性を解析するデバイスの電極には、単層CNTかまたはバンドルCNTを用いた。CNTを流れる高周波電流で効果的に静磁波を励振検出するためには、静磁波の減衰とCNT間の直達電磁気結合を少なくするような実際の構造を構成する必要がある。ここでは、CNTを現実的な量子細線として取り扱う。帯域通過特性の挿入損失 $IL$ 、通過中心周波数 $f_0$ 、帯域幅 $BW$ は、CNT電極のカイラリティやバンドルCNT電極内の単層CNTの本数により十分制御できる。これらの結果を利用して、我々はCNTのカイラリティやバンドルCNT内の本数を弁別できる新しいフェライトデバイスを提案した。このデバイスでは、カイラリティやバンドルCNT内の単層CNTの本数を、静磁波の波長を介して帯域通過特性で測定することができる。最後の節では、結果をまとめる。

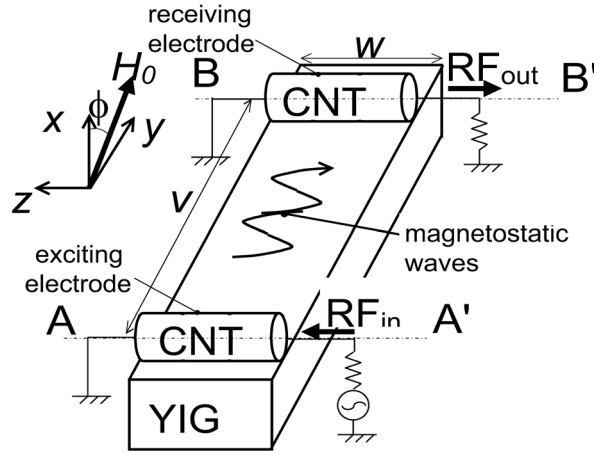


図 4.1: 高周波フィルタのデバイス構造の概観図: 一方の単層 CNT に流れる高周波電流が、フェライト薄膜中に直接静磁波を励振し、他方の単層 CNT がそれらの静磁波を検出する。直線 A-A' と B-B' は、それぞれ RF<sub>in</sub> が供給される CNT と RF<sub>out</sub> が検出される CNT の中心軸に一致している。直線 A-A' と B-B' は互いに平行で、それらの距離は  $v$  である。

## 4.2 GFM を用いた高周波に対する CNT の伝導特性について

交流に対するアドミッタンスの計算結果 [4] によると、金属的な真性 CNT の交流微分コンダクタンス  $G^1$  は 24THz(0.1eV) 程度以下なら、直流の場合と同じ  $2G_0$  になる事がわかっている。この計算では低温近似が使われており、常温での  $G^1$  を、GFM を用いて付録 C.2 で議論したところ、金属的な (15, 0)CNT の  $G^1$  は百数十 THz 以下なら  $2G_0$  になる事がわかった。これら 2 つの計算結果から、我々が提案したスピン波励振高周波フィルタ [5] が動作する数 THz 以下の周波数では、金属的な単層 CNT は、直流と同じ  $G^1=2G_0$  のナノ電極として取り扱うことができることが判った。

## 4.3 単層 CNT を電極として用いるフェライトデバイス

### 4.3.1 理論解析

図 4.1 に示す構造を持つスピン波励振電極として CNT を用いたフェライトを基板とした高周波フィルタ [5] を考える。この高周波フィルタでは、一方の単層 CNT を流れる高周波電流がフェライト薄膜中にスピン波を直接励振し、他方の単層 CNT がそれらを検出する。図 4.2 は単層 CNT を持つデバイスのモデルの断面図を示す。ここで、 $r$  は CNT の半径、 $t$  は YIG の厚みである。CNT は種々の方法で作られるが、オングストロームオーダの直径精度で選択的な成長も可能となってきた。将来的には選択的成長だけでなく位置精度も向上した成長 [6, 7] が可能となるだろう。

ここで、2 つの電極間距離  $v$  はこの計算のパラメータにはなっていないが、実際には、静磁波の減衰と CNT 間の直達電磁気結合を少なくする構造にするために  $v$  を最適な値にする必要があると考えられる。

バイアス直流磁界  $H_0$  が  $x$  軸から角度  $\phi$  で印加された場合、透磁率は次のテンソルの形で表される。

$$\hat{\mu} = \begin{pmatrix} \bar{c}^2 + \mu\bar{s}^2 & (1-\mu)\bar{s}\bar{c} & -j\kappa\bar{s} \\ (1-\mu)\bar{s}\bar{c} & \bar{s}^2 + \mu\bar{c}^2 & j\kappa\bar{s} \\ j\kappa\bar{s} & -j\kappa\bar{c} & \mu \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

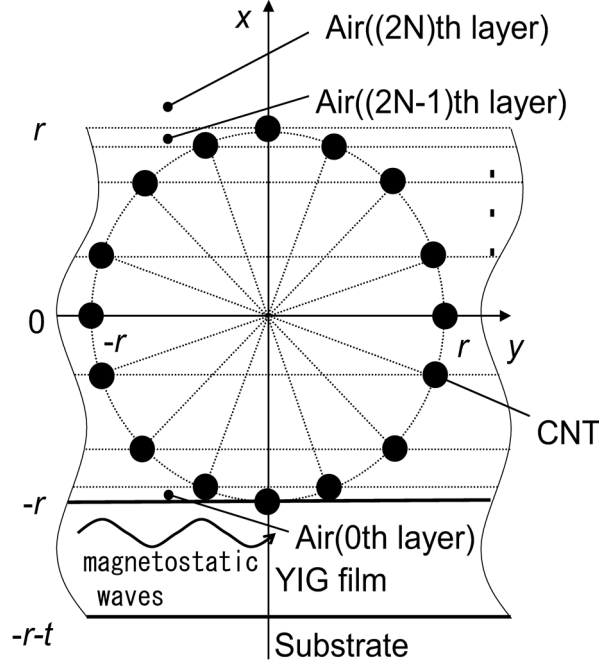


図 4.2: 直線 A-A' または B-B' を中心軸としてなす単層 CNT を持つデバイス構造の断面図。図 4.1 で示したように、静磁波は CNT (A-A') で励振され、CNT(B-B') で検出される。磁束密度の法線 ( $x$ ) 成分の連続性と、磁界の接線 ( $y$ ) 成分と電流密度の連続性の境界条件を適用している点を、この断面図では丸印で示している。これらの丸印には点電流が流れており、 $x$ 、 $y$  軸の原点を中心にした円上に等間隔で無限個並んでいる。

$$\bar{c} \equiv \cos \phi, \quad \bar{s} \equiv \sin \phi, \quad (4.2)$$

$$\mu = \frac{[\omega_h + \omega_{he}(\beta)][\omega_h + \omega_j + \omega_{he}(\beta)] - \omega^2}{[\omega_h + \omega_{he}(\beta)]^2 - \omega^2}, \quad (4.3)$$

$$\kappa = \frac{\omega \omega_j}{[\omega_h + \omega_{he}(\beta)]^2 - \omega^2}, \quad (4.4)$$

$$\omega_{he}(\beta) = 2\omega_e(1 - \cos \beta a), \quad (4.5)$$

$$\omega_j = \gamma \mu_0 M_0, \quad \omega_h = \gamma \mu_0 H_0, \quad \omega_e = \gamma \mu_0 H_e, \quad (4.6)$$

ただし、 $\beta$  は静磁波の伝搬定数、 $\omega$  は角周波数、 $\gamma$  は磁気回転比で、 $1.759 \times 10^{11} \text{ m}^2/\text{Wb}\cdot\text{s}$ 、 $H_0$  はバイアス直流磁界、 $M_0$  は飽和磁化、 $a$  は YIG の格子定数で、 $1.238 \text{ nm}$ 、そして、 $H_e$  はワイスの分子磁場 [8] に対応する磁界をそれぞれ示す。本章では、虚数単位を  $j$  で表記する。式 (4.1) は、付録 C.2 の議論から、従来のテンソル透磁率 [2] の磁気共鳴周波数が  $\omega_{he}(\beta)$  だけ高くなった式になっている。ここで、もし静磁波の波長が格子間隔  $a$  程度に短くなると、YIG と CNT の原子サイズでの電磁界相互作用が影響する可能性があるが、ここではこの作用が無いと仮定する。

この電磁界解析では、付録 C.3 の議論より静磁波の波長は  $2 \text{ nm}$  ~ 数十  $\text{nm}$  を扱うので、真空中の電磁波波長に比べて波長が十分短いと仮定でき、伝導電流や変位電流が磁界の回転  $|\nabla \times \mathbf{H}|$  に比べて非常に小さく、マクスウェルの方程式に静磁近似 [2, 9, 10] が適用できる。静磁近似を使うと、次式のように磁界  $\mathbf{H}$  は磁気ポテンシャル  $\psi$  の勾配で表せる。

$$\mathbf{H} = -\nabla \psi.$$

磁束密度  $\mathbf{B}$  は、 $\mu_0 \hat{\mu} \mathbf{H}$  で表され、

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

から、磁気ポテンシャル  $\psi$  に関する方程式が次式のように得られる。

$$\begin{aligned} (\bar{c}^2 + \mu \bar{s}^2) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2(1 - \mu) \bar{c} \bar{s} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \\ + (\bar{s}^2 + \mu \bar{c}^2) \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0. \end{aligned} \quad (4.7)$$

今回のデバイス構成に対し、この方程式 (4.7) を解くために、図 4.2 に示すように  $y$  軸に平行な  $2N$  層の分割層にわけ、解析を行った。その結果、 $\psi$  は次式のように得られる。

$$\psi_{2N} = \int_{-\infty}^{\infty} A_{2N} e^{-|\beta|(x-r)} e^{-j\beta y} d\beta \quad (4.8a)$$

$$\psi_i = \int_{-\infty}^{\infty} (A_i e^{-|\beta|\bar{x}_i} + B_i e^{|\beta|\bar{x}_i}) e^{-j\beta y} d\beta \quad (4.8b)$$

$$\bar{x}_i = x - x_i, \quad (i = 0, 1, 2, \dots, 2N - 1) \quad (4.8c)$$

$$x_i = r \cos \frac{\pi i}{2N}, \quad (4.8d)$$

$$\psi_f = \int_{-\infty}^{\infty} (C e^{jk_1^x \bar{x}} + D e^{jk_2^x \bar{x}}) e^{-j\beta y} d\beta \quad (4.8e)$$

$$\bar{x} = x + r, \quad (4.8f)$$

$$k_l^x = |\beta| \frac{(1 - \mu) \bar{s} \bar{c} s \mp \sqrt{-\mu}}{\bar{c}^2 + \mu \bar{s}^2}, \quad (l = 1, 2) \quad (4.8g)$$

$$s = \frac{\beta}{|\beta|}, \quad (4.8h)$$

$$\psi_{\text{sub}} = \int_{-\infty}^{\infty} E e^{|\beta|(x+r+t)} e^{-j\beta y} d\beta, \quad (4.8i)$$

ここで、各  $\psi$  の添え字は、図 4.2 に示す  $x$  軸に沿う各領域を示し、 $t$  は YIG 薄膜の厚みである。添え字 f は YIG 薄膜を表し、sub は基板を表す。第  $i$  空気層の振幅を  $A_i, B_i$  ( $i=0, 1, \dots, 2N$ ) で表し、それぞれ  $+$ 、 $-x$  方向に減少していく成分とする。YIG 薄膜層の振幅を  $C, D$  で表し、それぞれ  $+$ 、 $-x$  方向に減少していく成分とする。基板層の振幅を  $E$  で表し、 $-x$  方向に減少していく成分とする。

磁束密度の法線 ( $x$ ) 成分  $B_i^x, i = 0, 1, \dots, 2N, B_f^x, B_{\text{sub}}^x$  の連続性と、磁界の接線 ( $y$ ) 成分  $H_i^y, i = 0, 1, \dots, 2N, H_f^y, H_{\text{sub}}^y$  と電流密度  $J_i^z, i = 0, 1, \dots, 2N$  の連続性とを適用すると、次式が得られる。

$$\begin{aligned} H_{2N}^y - H_{2N-1}^y &= J_{2N}^z \Big|_{x=r}, \\ B_{2N}^x - B_{2N-1}^x &= 0 \Big|_{x=r}, \\ H_i^y - H_{i-1}^y &= J_i^z \Big|_{x=x_i}, \\ B_i^x - B_{i-1}^x &= 0 \Big|_{x=x_i}, \quad (i = 0, 1, \dots, 2N - 1) \\ H_0^y - H_f^y &= J_0^z \Big|_{x=-r}, \\ B_0^x - B_f^x &= 0 \Big|_{x=-r}, \\ H_f^y - H_{\text{sub}}^y &= 0 \Big|_{x=-r-t}, \\ B_f^x - B_{\text{sub}}^x &= 0 \Big|_{x=-r-t}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

式 (4.9) が静磁波に対する連続条件 [2] である。式 (4.9) へ式 (4.8) を代入して、振幅  $D$  は次式で得ら

れる。

$$D = -\frac{\sum_{k=0}^{2N} e^{|\beta|(-r+x_k)} \tilde{J}_k^z(\beta)}{4\pi j \beta F(\omega, \beta) p(\omega, \beta)}, \quad (4.10)$$

ここで、

$$\tilde{J}_k^z(\beta) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} J_k^z e^{j\beta y} dy, \quad (4.11)$$

$F(\omega, \beta)$  と  $p(\omega, \beta)$  は後で式 (4.13) のところで説明する。他の振幅は全て  $D$  で表せる。例えば、振幅  $C$  は

$$C = \frac{jk_2^x - |\beta|}{-jk_1^x + |\beta|} e^{j(k_1^x - k_2^x)t} D. \quad (4.12)$$

で表せる。 $F(\omega, \beta)$  が 0 になる項とすると、次の 2 つの場合に分けて  $F(\omega, \beta)$  と  $p(\omega, \beta)$  を計算できる。

i)  $k_3^x > 0$  或いは、 $\phi = 0$  のとき (図 4.1 参照),

$$\begin{aligned} F(\omega, \beta) &= \tan \frac{k_3^x t}{2} - \frac{1}{\sqrt{-\mu}}, \\ p(\omega, \beta) &= \frac{2 \cos^2 \frac{k_3^x t}{2}}{\left(\frac{j}{\sqrt{-\mu}} - 1\right)} e^{-jk_3^x t} \left(\tan \frac{k_3^x t}{2} + \sqrt{-\mu}\right). \end{aligned} \quad (4.13a)$$

ii)  $k_3^x < 0$ ,

$$\begin{aligned} F(\omega, \beta) &= \tan \frac{k_3^x t}{2} + \sqrt{-\mu}, \\ p(\omega, \beta) &= \frac{2 \cos^2 \frac{k_3^x t}{2}}{\left(\frac{j}{\sqrt{-\mu}} - 1\right)} e^{-jk_3^x t} \left(\tan \frac{k_3^x t}{2} - \frac{1}{\sqrt{-\mu}}\right), \end{aligned} \quad (4.13b)$$

ここで、 $k_3^x = \frac{1}{2}(k_2^x - k_1^x)$  と置く。 $\phi$  は任意の値にできるが、本章では簡単のために  $\phi = 0$  にして数値計算する。

第 2 章で明らかにしたように、CNT の端全体に電圧を印加した場合、単層 CNT を流れる電流密度は一般に周方向に関して均一になる [12] ことから、その電流密度は

$$J_i^z = \begin{cases} \frac{I_0}{4N} \delta(y), & i = 0 \\ \frac{I_0}{4N} \sum_{\pm} \delta(y \pm y_i), & i = 1, \dots, 2N - 1 \\ \frac{I_0}{4N} \delta(y), & i = 2N \end{cases} \quad (4.14a)$$

$$y_i = r \sin\left(\frac{\pi i}{2N}\right), \quad i = 0, 1, 2, \dots, 2N - 1, \quad (4.14b)$$

で表す事ができる。ここで、 $I_0$  は CNT に流れる電流の合計、 $\delta(y)$  はディラックのデルタ関数である。従って、振幅  $D$  はベッセルの積分表示を使って次の式で書ける。(付録 C.4 参照)

$$D = -\frac{I_0 e^{-|\beta|r}}{4\pi j \beta F(\omega, \beta) p(\omega, \beta)}. \quad (4.15)$$

式 (4.8) と (4.15) から、静磁ポテンシャル  $\psi$  は、 $F(\omega, \beta)$  を極として持つ留数で求められる。各領域を流れる電磁気的な電力の流れは、ポインティング定理を使って

$$P^y = \frac{1}{2} \mathbf{Re} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} (-j\omega\psi^* B^y) dx \right], \quad (4.16)$$

で求められる。ここで、 $\psi^*$  は  $\psi$  の複素共役である。この電力から、放射抵抗  $R^\pm$  は

$$R^\pm(\omega) = \frac{2P^y w}{I_0^2} \Big|_{s=\pm 1}, \quad (4.17)$$

で求められる。ただし、 $w$  は CNT 電極の長さである。挿入損失  $IL$  は、デバイスの入力電力と出力電力との比で定義される。 $IL$  は高周波フィルタの性能指標の 1 つで、

$$IL = 10 \log \frac{[R_g + R^+(\omega) + R^-(\omega) + R_C]^2}{4R_g R^+(\omega)}. \quad (4.18)$$

で表される。式 (4.18) で、 $R_g$  は電源の内部抵抗で、通常、民生用には  $50\Omega$  が用いられるので、この章の計算では  $50\Omega$  と置く。第 2, 3 章の CNT の量子輸送解析から、金属的で真性状態にある CNT の  $R_C$  は  $1/(2G_0)$  になる。ここで、 $G_0$  は量子コンダクタンス  $2e^2/h$  である。式 (4.18) に量子コンダクタンスの値を入れたのは、CNT を励振電極として用いているからである事に注意されたい。 $R^\pm(\omega)$  の式 (4.18) による計算では、簡単のため、YIG 薄膜の厚み方向の第 1 高調波のみの寄与を考え、静磁波の伝搬損失を無視する。巨視的なロスによるスピン波の伝搬損失は、YIG の線幅  $\Delta H$  に比例した値で与えられるが [2]、微視的な伝搬損失は原子スケールで CNT とフェライト薄膜とが共存しているモデルを使って解析して求める必要がある。また、CNT のリアクタンス [4] を十分小さいとして無視した。デバイス指標の 1 つとしてここで定式化した挿入損失を、次に数値的に評価していく。

### 4.3.2 数値計算結果

図 4.3 は YIG 中を伝搬する静磁波の分散曲線を表す。図 4.3 の実線は第 4.3.1 小節の方法で計算された分散曲線で、 $\mu_0 H_e = 46\text{T}$  [8]、 $t = 10\text{nm}$ 、 $\mu_0 M_0 = 0.17\text{T}$ 、 $\phi = 0$ 、 $\mu_0 H_0 = 0.1\text{T}$  の時の理論値である。分散曲線の右端は、各電子スピンの磁化の持つ位相差が、最近接スピン間で  $\pi$  より小さいという条件で決まる。波長が  $2.5\text{nm}$  になると、動作周波数は従来の静磁波デバイス [1, 2] の千倍の数 THz になる。この高周波化の理由は、バイアス磁界にワイスの分子磁場  $H_e$  が加算され、動作周波数に関与する等価的な直流磁界を高める働きをするためである。一方、図 4.3 の丸印は実験値 [13] である。これらの理論値と実験値から、図 4.3 の分散曲線に従って静磁波が YIG 中を伝搬すると考えられる。

一方、図 4.3 中の短い破線、長い破線、一点鎖線は参考用データで、 $\mu_0 H_e$  がそれぞれ  $-30$ 、 $-10$ 、 $+10\%$  に増減した、それぞれ 32, 41, 51 Tesla の時の理論値である。分散曲線の周波数の実験値は、 $\mu_0 H_e$  が  $46\text{T}$  [8] の時の理論値に比べて  $30\%$  程低い。そこで、その実験値に合わせるため、 $\mu_0 H_e$  を  $32\text{T}$  に小さくした理論値を図 4.3 に示した。この理論値と実験値との定量的な差の原因は不明だが、第 4.3.1 小節で議論した解析モデルと実際の YIG との比較検討が課題である。

図 4.4 は、YIG と同じフェリ磁性体の 1 つであるニッケル中を伝搬する静磁波の分散曲線で、実線は  $\mu_0 H_e$  が  $317\text{T}$  [14] のとき、他の 2 曲線は  $\mu_0 H_e$  がそれぞれ  $\pm 10\%$  だけ変化した時の理論値、丸印は実験値 [15] をそれぞれ示している。この図より、我々の理論値は実験値 [15] によく一致しているので、第 4.3.1 小節で議論された理論は実際のニッケル中を伝搬する静磁波の分散曲線を正確に記述し、ニッケル中にも図 4.4 の分散曲線に従う周波数帯域で静磁波が伝搬すると考えられる。

図 4.1 のデバイス構造で静磁波を効率よく励振するためには、電極幅あるいは直径を正確にしかも静磁波の波長よりも短く設計・製作 [9] する必要がある。この章では、静磁波の波長が数  $\sim 100\text{nm}$  の

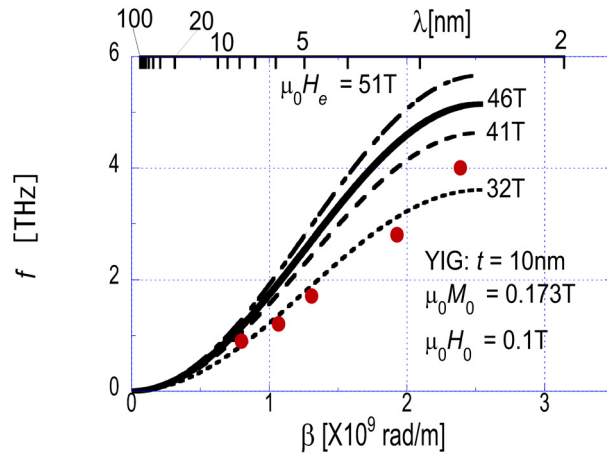


図 4.3: YIG 中に励振された THz 帯域での静磁波の分散曲線。実線がワイスの分子磁場  $\mu_0 H_e$  が 46Tesla [8] の場合、他の 3 曲線は  $\mu_0 H_e$  がそれぞれ  $-30$ 、 $-10$ 、 $+10$  増減した、それぞれ 32, 41, 51Tesla の時の理論値である。一方、丸印が実験値 [13] である。

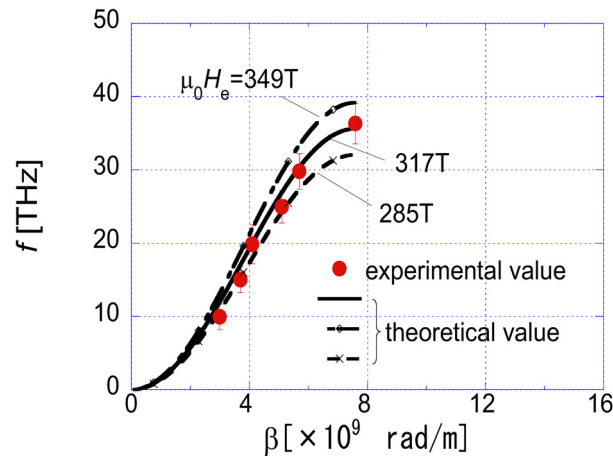


図 4.4: ニッケル中に励振された静磁波の分散曲線。実線がワイスの分子磁場  $\mu_0 H_e$  が 317Tesla [14] の場合、他の 2 曲線は  $\mu_0 H_e$  がそれぞれ  $-10$ 、 $+10$  増減した、それぞれ 285, 349Tesla の時の理論値である。一方、丸印が実験値 [15] である。

範囲にわたっているので、CNT 電極は従来のデバイスと同様の設計・製作ルール [2, 9] に照らし合わせると、静磁波励振に適していると言える。

図 4.5 は挿入損失 ( $IL$ ) の周波数特性の計算結果である。ここで、ジグザグ形の CNT を電極に使い、金属的になるようにそのカイラリティを  $(n, 0)$ ,  $n=30, 45, 90, 120$  と変化させた。また、電極長  $w$  は  $1\mu\text{m}$  とした。図 4.5 から、このデバイスは THz 帯で帯域通過型フィルタ (Band Pass Filter: BPF) として動作していることがわかる。このデバイスの性能を評価する 3 つの特性指標、即ち最小挿入損失  $IL_{\min}$ 、中心周波数  $f_0$ 、3dB 帯域幅 ( $IL$  が  $IL_{\min}+3\text{dB}$  より小さい周波数帯域幅)  $BW$  が定義できる。 $n$  が 30 のとき、図 4.5 の実線から、 $IL_{\min}=24.1\text{dB}$ 、 $f_0=5.14\text{THz}$ 、 $BW=0.02\text{THz}$  がそれぞれ得られる。一方、 $n$  が 120 のとき、同破線から、 $IL_{\min}=24.1\text{dB}$ 、 $f_0=0.61\text{THz}$ 、 $BW=0.19\text{THz}$  がそれぞれ得られる。

図 4.6 は、 $f_0$  と  $BW$  の CNT のカイラリティ  $n$  依存性を示す。この図から、 $n$  または CNT の直径が増え、動作している静磁波の波長が長くなり、 $f_0$  が下がることがわかる。 $n$  と  $f_0$  の関係により、CNT の直径、或いはカイラリティ  $n$  によってこの BPF の特性を制御可能である事が明らかになった。

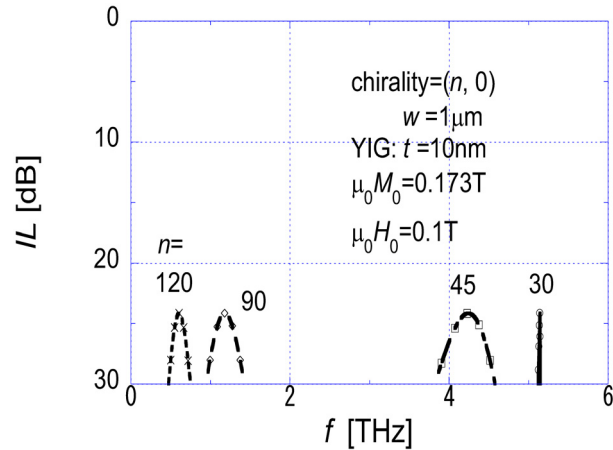


図 4.5: 色々な  $n$  に対する挿入損失  $IL$  の周波数特性。  $n=120$  の時、  $f_0$ 、  $BW$  はそれぞれ  $0.60\text{THz}$ 、  $0.19\text{THz}$  であることがこの特性からわかる。  $n=90$ 、  $45$ 、  $30$  の場合も同様に  $f_0$ 、  $BW$  を求めることができる。

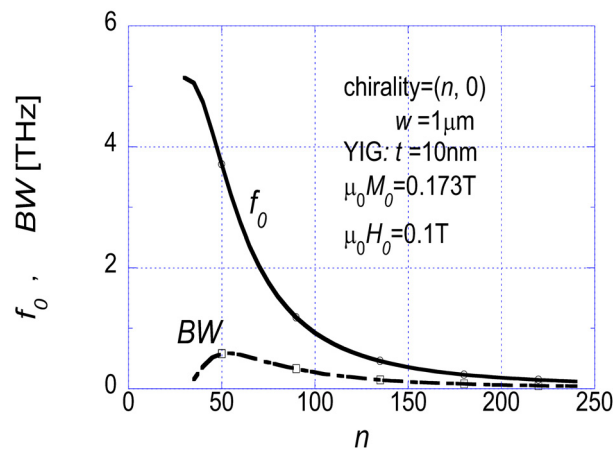


図 4.6: 帯域通過フィルタの中心周波数  $f_0$  と通過帯域幅  $BW$  のカイラリティ ( $n$ ) 依存性。  $f_0$  は  $n$  とともに単調減少するが、  $BW$  は  $n=50$  付近で最も広がっている。

しかし、実際に応用するには、図 4.5 のように  $IL$  が  $25\text{dB}$  と大きすぎる。これは、主に単層 CNT のコンダクタンスが第 2 章の結果より  $2G_0$  と小さく、特性インピーダンス  $Z_0=50\Omega$  とのマッチングが十分に取れていないからである。CNT 電極のコンダクタンスを増やせば、 $IL$  が小さくなるので、この  $IL$  特性を改善するため、バンドル CNT を用いた BPF の特性を次節で数値解析する。

## 4.4 バンドル CNT を電極として用いるフェライトデバイス

### 4.4.1 バンドル CNT の理論解析

挿入損失特性を改善するため、単層 CNT を電極として用いた高周波フィルタに替わり、図 4.7 のバンドル CNT を用いたデバイス構造を考える。図 4.8 はバンドル CNT を電極として用いたデバイスモデルの断面図を示す。ただし、 $r$  は各単層 CNT の半径、 $m$  は  $x$  軸と  $y$  軸夫々に沿う CNT の本数である。前章と同様に、ここでのデバイス構造では、方程式 (4.7) を解くために図 4.8 のように、 $y$  軸

方向に平行な  $2mN$  層の分割層に切り分けた。切り分けた各分割層での  $\psi$  は、次の様に求められる。

$$\psi_{2mN} = \int_{-\infty}^{\infty} A_{2mN} e^{-|\beta|[x-(2m-1)r]} e^{-j\beta y} d\beta \quad (4.19a)$$

$$\psi_i = \int_{-\infty}^{\infty} (A_i e^{-|\beta|(x-x_i)} + B_i e^{|\beta|(x-x_i)}) e^{-j\beta y} d\beta \quad (4.19b)$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, 2mN - 1, 2mN \quad (4.19c)$$

$$x_i = -r \cos \frac{\pi i}{2N} (-1)^{int(\frac{i-1}{2N})} + 2r \cdot int(\frac{i-1}{2N}), \quad (4.19d)$$

$$\psi_f = \int_{-\infty}^{\infty} (C e^{jk_1^x(x+r)} + D e^{jk_2^x(x+r)}) e^{-j\beta y} d\beta \quad (4.19e)$$

$$k_l^x = |\beta| \frac{(1-\mu)\bar{s}\bar{c}s \mp \sqrt{-\mu}}{\bar{c}^2 + \mu\bar{s}^2}, \quad (l = 1, 2) \quad (4.19f)$$

$$s = \frac{\beta}{|\beta|}, \quad (4.19g)$$

$$\psi_{\text{sub}} = \int_{-\infty}^{\infty} E e^{|\beta|(x+r+t)} e^{-j\beta y} d\beta, \quad (4.19h)$$

ここで、各  $\psi$  の添え字は、図 4.8 の  $x$  軸に沿う各領域について表している。

式 (4.9) と同じ連続条件を適用すると、式 (4.19e) 中の振幅  $D$  が次式で得られる。

$$D = -\frac{\sum_{i=0}^{2mN} e^{|\beta|(x_0-x_i)} \tilde{J}_i^z(\beta)}{4\pi j\beta F(\omega, \beta)p(\omega, \beta)}, \quad (4.20)$$

ここで、 $J_i^z$  は式 (4.14a) の代わりに次式で与えられる。

$$J_i^z = \begin{cases} I_0 \sum_{j=1}^m \frac{\delta(y - y_{i,j,1})}{4m^2 N}, & i = 0, 2mN \\ I_0 \sum_{j=1}^m \frac{\delta(y - y_{i,j,1})}{2m^2 N}, & i = 2N, \dots, 2(m-1)N \\ I_0 \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^2 \frac{\delta(y - y_{i,j,k})}{4m^2 N}, & i = \text{others} \end{cases} \quad (4.21)$$

但し、

$$y_{i,j,k} = r \left[ 2(j-1) - (-1)^k \sin \frac{\pi i}{2N} \right]. \quad (4.22)$$

振幅  $D$  は、式 (4.15) の導出時と同様にして次のベッセルの積分表示を使って次のように表せる。つまり、

$$D = -\frac{I_0 \sum_{l'=1}^m e^{2j(l'-1)\beta r} \sum_{l=1}^m e^{-2(l-1)|\beta|r} e^{-|\beta|r}}{4\pi m^2 j\beta F(\omega, \beta)p(\omega, \beta)}. \quad (4.23)$$

他の全ての振幅係数は、 $D$  を用いて表される。方程式 (4.19) と (4.23) から、磁気ポテンシャル  $\psi$  は、 $F(\omega, \beta)$  を極として持つ留数で求められる。各領域を流れる電磁気的な電力、放射抵抗  $R^\pm$ 、挿入損失  $IL$  は、それぞれ式 (4.16)、(4.17)、(4.18) で与えられる。式 (4.18) では、 $R_C$  はバンドル CNT については  $1/(2m^2 G_0)$  で得られ、 $R_g$  と他の条件は前章の単層 CNT 電極の場合と同じである。

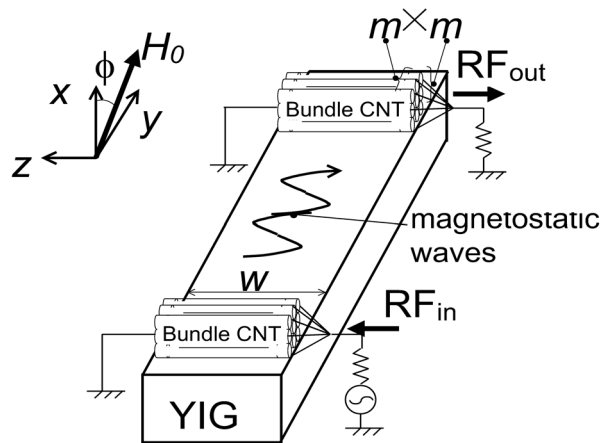


図 4.7: 高周波フィルタのデバイス構造の概観図: 一方のバンドル CNT を流れる高周波電流がフェライト薄膜中に静磁波を直接励振し、他方のバンドル CNT がそれらの波を検出する。各バンドル CNT は  $m \times m$  本の単層 CNT からできていて、 $x$ 、 $y$  軸方向に沿って並べられている。

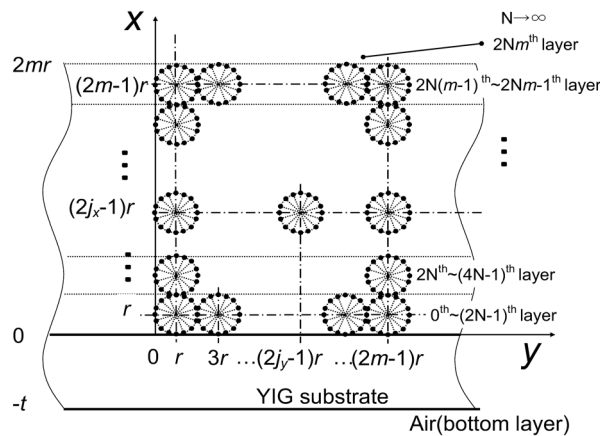


図 4.8: バンドル CNT を持つデバイス構造の断面図。図 4.2 と同じ単層 CNT が  $m \times m$  本並べられていて、それらは  $x$ 、 $y$  軸方向に沿って並べられている。

#### 4.4.2 数値計算結果

図 4.9 は、 $IL$ -周波数特性を示す。図 4.9 では、 $n$  と CNT の本数  $m$  の積が一定値 300 になるように、 $m$  をパラメータとして 1, 10, 20, 50 と変化させ、バンドル CNT が、カイラリティ  $(300/m, 0)$  をもつ金属的な zig-zag 形 CNT の束からなるようにした。 $m$  が 1 のとき、 $IL_{\min}=27.5\text{dB}$ 、 $f_0=4.4\text{THz}$  (図 4.9 の実線) となったが、他方  $m$  が 50 のとき、 $IL_{\min}=9.0\text{dB}$ 、 $f_0=1.2\text{THz}$  (図 4.9 の破線) となった。ここで特筆すべきは、挿入損失  $IL$  は単層 CNT に比べてバンドル CNT を電極に用いることで十分改善できる事である。

図 4.10 は  $IL_{\min}$  の  $m$  依存性を示す。この図から、CNT の本数  $m$  や、バンドル CNT の全寸法が大きくなると、 $IL_{\min}$  が改善する事がわかる。この  $IL_{\min}$  の改善はインピーダンスマッチングと関係があり、さらにこのインピーダンスマッチングは式 (4.18) の  $R_C$  によって大きく改善されるので、 $IL$  もインピーダンスマッチングも単層 CNT に変わってバンドル CNT を励振電極として使う事で改善できる。

図 4.11 は  $f_0$  と  $BW$  の  $m$  依存性を示す。この図 4.11 から、 $m$  が 20 程度以上の所では、 $m$  によらず  $f_0$  が一定になっているが、 $m$  が 20 程度未満の所では  $m$  と  $f_0$  の間に強い相関が現れ、 $m$  の減少に

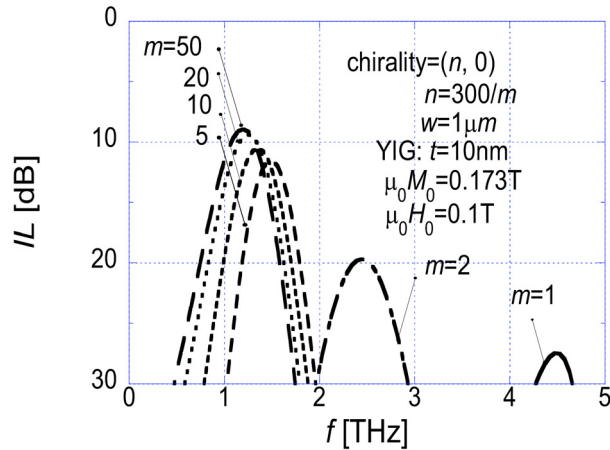


図 4.9: 色々な  $m$  に対する挿入損失  $IL$  の周波数特性。  $m=50$  の時、  $IL_{\min}$ 、  $f_0$ 、  $BW$  は、それぞれ 9.0dB、 1.2THz、 0.4THz である。  $m=20$ 、 10、 5、 2、 1 の場合も同様に  $IL_{\min}$ 、  $f_0$ 、  $BW$  が求められる。

つれて  $f_0$  が高くなっている事がわかる。図 4.11 では  $nm$  積を 300 に固定しているため、  $m$  が 20 程度以上の所では接点が多くなり、接点間の距離が YIG の格子間隔 1.2nm 程度より狭いと、バンドル CNT 全体のサイズを持つ平板電極と等価になる。そして、その電極は静磁波と結合しており、静磁波から見てその電極サイズは  $m$  によらず一定と見なせるため、  $f_0$  は 1THz 台でほぼ一定になったと考えられる。他方、  $m$  が 20 程度未満の所では、バンドル CNT の YIG との接点が少なく、CNT と YIG とが接している部分で主に高周波エネルギーが相互作用している事から、バンドル CNT 全体サイズよりも短い波長の静磁波と結合していると考えられ、  $m$  の減少につれて  $n$  又は各単層 CNT の直径が大きくなるものの、静磁波から見た電極サイズは細くなるため、分散曲線図 4.3 に従って  $f_0$  が高くなる事がわかる。

$n \cdot m$  積を固定させた場合と異なり、  $n \cdot m$  積を変化させた場合はデバイス動作に大きな影響が現れる。図 4.12 は  $f_0$  の  $n \cdot m$  積依存性を示す。  $n \cdot m$  積は  $f_0$  と強い相関を持ち、そのためバンドル CNT の寸法で BPF 特性を設計できる。この性質を逆に利用して、帯域通過特性の  $IL_{\min}$ 、  $f_0$ 、  $BW$  を測定する事で、  $n \cdot m$  積を弁別する事ができる。  $n$  と  $f_0$  との間に関係を持つ単層 CNT の場合と同様の中からくりで、バンドル CNT の場合も帯域通過フィルタはバンドル CNT の寸法で帯域通過特性を制御する事ができる。逆に言うと、このデバイスは、バンドル CNT の本数や直径を弁別する弁別器になり、これまでにない全く新しいバンドル CNT 構造測定方法を世の中に提供し、新たな発展が期待できる可能性がある。

図 4.10 と図 4.11 から、  $m$  を 50 程度にする事で、動作周波数  $f_0$  を 1THz 程度の高さにでき、最小挿入損失  $IL_{\min}$  は 9dB 程度に改善できる。この BPF の性能を使い、1THz で増幅器と帰還回路を合わせた増幅率が 9dB を上回る回路を作事ができれば、更なる応用として周波数 1THz 程度の発振器を実現できる可能性がある。ここで、増幅器に正帰還がかかるように発振回路を構成する。

## 4.5 結言

高周波に対するコンダクタンスの計算結果から、前章で我々が提案したスピン波励振高周波フィルタが動作する数 THz 以下の場合には、CNT のコンダクタンスは直流の場合と同じ  $2G_0$  として取り扱うことができる事がわかった。マクスウェルの方程式に静磁近似を用い、ナノ電極で励振された YIG 中を伝搬する静磁波の分散曲線を解析した。その静磁波は数 nm の波長を持ち、THz 帯で伝搬する

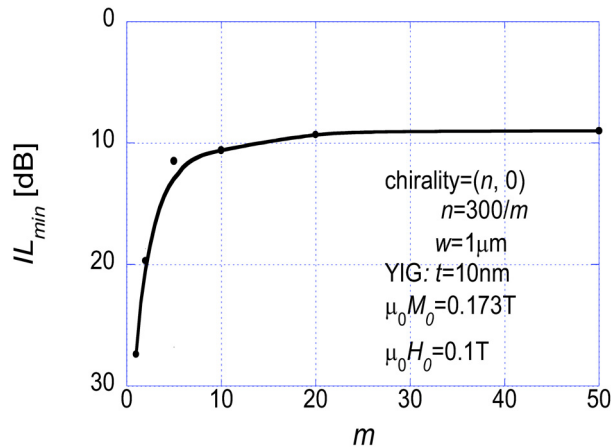


図 4.10: 最小挿入損失  $IL_{min}$  の  $m$  依存性。  $IL_{min}$  は  $m$  に対して単調増加する。

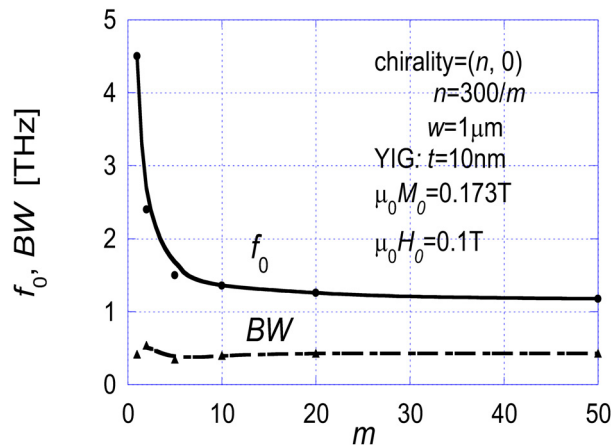


図 4.11:  $f_0$ 、 $BW$  の  $m$  依存性。  $f_0$  は  $m$  に対して単調減少するが、 $BW$  は殆ど  $m$  に依らない

事がわかった。YIG を伝搬する静磁波の分散曲線の理論値と、その実験値とを比較検討した。また、ニッケルを伝搬する静磁波についても同様の比較検討を行い、理論値と実験値とが一致する事を明らかにした。単層 CNT に高周波電流を流し、その下に置かれた YIG 薄膜に静磁波を直接励振し、また静磁波を直接検出できる帯域通過フィルタ (BPF) のフィルタ特性について定量評価した。その挿入損失  $IL$  の周波数特性や  $IL_{min}$ 、中心周波数 ( $f_0$ )、バンド幅 ( $BW$ ) を、CNT の直径や、CNT のカイラリティを変化させて調べた。その結果、CNT の直径で BPF の特性を設計でき、動作周波数を THz 帯域の高さにまで改善できる事が解かった。実際の応用で  $IL$  を改善するため、第 2 章でのコンダクタンスの考察結果を利用してバンドル CNT をナノ電極に用いた場合の BPF を提案した。我々の提案したバンドル CNT を用いた BPF は、単層 CNT の場合に比べ  $IL_{min}$  は 27.5dB から 9.0dB に改善した。

これらの特徴を生かし、バンドル CNT のカイラリティや本数を弁別する弁別器として動作する新しいフェライトデバイスを提案した。我々の提案したこのデバイスは、帯域通過特性を測定する事で、静磁波の動作波長を媒介してバンドル CNT のカイラリティや本数を測定できる可能性がある。また、この BPF の  $IL_{min}$ 、 $f_0$ 、 $BW$  の CNT 本数 ( $m$ ) 依存性から、1THz で増幅器と帰還回路を合わせた増幅率が 9dB を上回る回路を作る事ができれば、更なる応用として周波数 1THz 程度の発振器を実現できる可能性がある。上記で提案したデバイスは、CNT の応用分野を開拓するものとなる。

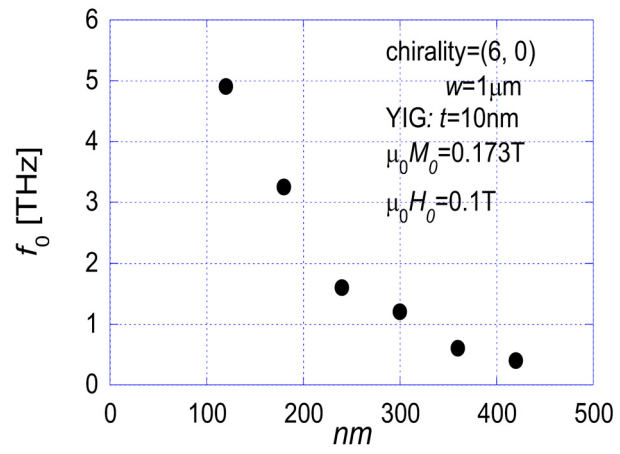


図 4.12:  $n \cdot m$  積の  $f_0$  依存性。  $f_0$  は  $n \cdot m$  積に対して単調減少する。

## 第4章の参考文献

- [1] P. C. Fletcher, C. Kittel, “Consideration on the Propagation and Generation of Magnetostatic Waves and Spin Waves,” *Phys. Rev.*, vol. 120, pp. 2004-2006 (1960); 中島 将光 「マイクロ波工学-基礎と応用-」 森北出版 (1989).
- [2] S. N. Bajpai, R. L. Carter, and J. M. Owens, “Insertion Loss of Magnetostatic Surface Wave Delay Lines,” *IEEE Trans.* vol. MTT-36, pp. 132-136 (1988).
- [3] S. Iijima, “Helical Microtubules of Graphitic Carbon,” *Nature (London)*, vol. 354, pp.56-58 (1991).
- [4] C. Roland, M. B. Nardelli, J. Wang, and H. Guo, “Dynamic Conductance of Carbon Nanotubes,” *Phys. Rev. Lett.* vol. 84, p. 2921 (2000).
- [5] T. Umegaki, M. Ogawa, Y. Makino, and T. Miyoshi, “Electronic Transport in Carbon Nanotubes Using the Transfer-Matrix Method,” *J. Appl. Phys.* vol. 96, no. 11, pp. 6669-6678 (2004).
- [6] S. Lim, D. Ciuparu, C. Pak, F. Dobek, Y. Chen, D. Harding, L.D. Pfefferle, and G. Haller, “Synthesis and Characterization of Highly Ordered Co-MCM-41 for Production of Aligned Single Walled Carbon Nanotubes (SWNT),” *J. Phys. Chem. B*, vol. 107, no. 40, pp. 11048-11056 (2003).
- [7] Xu-Hui Sun, Chi-Pui Li, Wing-Kwong Wong, Ning-Bew Wong, Chun-Sing Lee, Shuit-Tong Lee, and Boon-Keng Teo, “Formation of Silicon Carbide Nanotubes and Nanowires via Reaction of Silicon (from Disproportionation of Silicon Monoxide) with Carbon Nanotubes,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 124, pp. 14464-14471 (2002).
- [8] R. Bauminger, S. G. Cohen, A. Marinov, and S. Ofer, “Study of the Internal Fields Acting on Iron Nuclei in Iron Garnets, Using the Recoil-Free Absorption in  $\text{Fe}^{57}$  of the 14.4-keV Gamma Radiation from  $\text{Fe}^{57m}$ ,” *Phys. Rev.*, vol. 122, pp. 743-748 (1961).
- [9] Y. Ishikawa, T. Nomoto, T. Okada, S. Shinmura, F. Kanaya, S. Ichiguchi and T. Umegaki, “A Signal-to-Noise Enhancer with Extended Bandwidth Using Two MSSW Filters and Two  $90^\circ$  Hybrids,” *IEICE Trans. Electron.*, vol. E78-C, no. 8, pp. 1026-1032 (1995).
- [10] P. R. Emtage, “Interaction of Magnetostatic Waves with a Current,” *J. Appl. Phys.*, vol. 49, pp. 4475-4484 (1978).
- [11] R. Saito, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus, “Trigonal Warping Effect of Carbon Nanotubes,” *Phys. Rev.*, vol. B61, pp. 2981-2990 (2000).

- [12] T. Umegaki, M. Ogawa, Y. Makino, and T. Miyoshi, "Quantum Transport in Carbon Nanotubes with Arbitrary Chirality," *Memoirs Graduate School Science & Technology, Kobe University*, vol. 22-A, pp. 103-114 (2004).
- [13] J. S. Plant, "Pseudo-Acoustic Magnon Dispersion in Yttrium Iron Garnet," *J. Phys. C: Solid State Phys.*, vol. 16, pp. 7037-7051 (1983).
- [14] C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics (Seventh Edition)," John Wiley and Sons, Inc. (1996).
- [15] H. A. Mook and D. McK. Paul, "Neutron-Scattering Measurement of the Spin-Wave Spectra for Nickel," *Phys. Rev. Let.*, vol. 54, no. 3, pp. 227-229 (1985).

## 第4章の研究業績

- [1] T. Umegaki, M. Ogawa, and T. Miyoshi, “Analysis of Band - Pass Filter Characteristics in a Ferrite Device with Carbon Nanotube Electrodes” accepted for publication in Applied Computational Electromagnetics Society (ACES) Journal, 17 October 2004 and to be published in ACES Journal (2005).
- [2] T. Umegaki, M. Ogawa, Y. Makino, and T. Miyoshi, “Electronic Propagating Waves in Carbon Nanotubes for the Electrodes of the Spin Wave Device” International Conference on the Science and Application of Nanotubes (Nanotube 2004), P13, held in San Luis Potosi, (S.L.P.), Mexico, 19-24 July, 2004.
- [3] 梅垣俊仁, 小川真人, 三好旦六, “Carbon Nanotube によるスピンの波励振特性の解析” 第64回応用物理学学会学術講演会講演予稿集, No.3, 31a - E - 4, p. 1362 (2003年9月).
- [4] 梅垣俊仁, 小川真人, 三好旦六, “Carbon Nanotube によるスピンの波励振特性の解析” 輻射科学研究会 2004年3月例会, No. RS03 -18 (2004年3月).
- [5] 梅垣俊仁, 小川真人, 三好旦六, “バンドル CNT によるスピンの波励振高周波フィルタの特性解析” 第51回応用物理学関係連合講演会講演予稿集, No.3, 28p - ZX - 14, p. 1673 (2004年3月).
- [6] 梅垣俊仁, 小川真人, 三好旦六, “スピンの波励振・検出装置、前記装置を用いた高周波信号処理装置及びカーボンナノチューブの構造評価装置” 特願 2003-421425.

## 第5章 結論

本研究は、カーボンナノチューブ (CNT) の高周波応用を目的に行われた。本論文は、CNT 基本伝導特性と、CNT をスピン波励振用のナノ電極として用いた高周波フィルタの特性を解析した結果についてまとめたものである。

第1章では CNT について高周波フェライトデバイス研究の歴史について明らかにし、これらの経緯について述べ、本論文の構成について述べた。

第2章では、伝搬行列法を用いた CNT の基本伝導特性の解析結果について記述した。CNT をグラフェンシートを巻いて円筒形にしたものと捉え、その中の電子波伝搬特性を、LCAO 展開法と TM 法の両方を用いて明らかにした。ジグザグ形とアームチェア形 CNT の周方向に関する電流密度分布と、 $I$ - $V$  特性を数値的に評価した。その  $I$ - $V$  特性を基に、CNT のコンダクタンスとフェルミ準位との関係、および CNT 端での電子波の励振法によって伝搬の様子が異なることを議論した。その電流密度分布は CNT のカイラリティで十分制御できることが明らかになった。さらに、電流密度分布は、入力端での電子波励振位置で制御できる事が分かった。我々は、入力端での電子波励振位置により異なる以下の3通りの場合について検討した

**case 1** CNT の周方向に関して全体に電子波が励振された場合、

**case 2** CNT の単位胞  $K' = 1$  に電子波が励振された場合、

**case 3** CNT の周方向に関して均等に電子波が励振され、各単位胞で平均化された値として電子波が検出された場合。

case 1 と 3 では、CNT の周方向に関する電流密度分布は金属的カイラリティに対して常に均一になる。逆に、case 2 では CNT の周方向に関する電流密度分布は、アームチェア形に対して均一になる一方、ジグザグ形に対して不均一になることが分かった。CNT のコンダクタンスを改善するため、真性状態にある CNT の代わりに p 型 CNT を使って電極のコンダクタンスを大きくする事を提案した。 $E_f$  と  $n$  の両方で CNT のコンダクタンスを改善できることが分かった。

第3章では、グリーン関数法 (GFM) を用いた CNT の基本伝導特性について記述した。その結果、金属的で真性状態にある CNT の中では、線形に分布するポテンシャル分布を仮定すれば、電子、正孔が電荷中性条件を満たしそれらの分布が平坦なため、既にポアソン方程式が成り立っていることが分かった。半導体的な CNT と金属的な CNT との  $I$ - $V$  特性を計算した。これらの特性を基に、カイラリティやフェルミレベル、そして印加直流電圧を変化させて、微分コンダクタンス  $G$  を負の値から量子コンダクタンスの何倍かまでに制御するができることを明らかにした。次に、tube(16, 0) CNT の  $GV/I$ - $V$  特性を評価した。実波数を持つモード  $b_i$  の群速度がほかのモード  $b_j$  ( $i, j=1, 2, \dots$ ) の群速度と同じくらいであれば、 $GV/I$  はそれらのモード間遷移が始まるバイアス電圧で極大になることが分かった。この GFM の定式化は任意のカイラリティを持つ CNT や欠陥を持つものなどにも適用できるので、金属的な CNT だけでなく、半導体的、絶縁体的 CNT の特性も評価できる。この方法は、CNT を流れる電流だけでなく、CNT 中の電子・正孔密度の評価にも適用できるので、ポアソン方程式とを連立させて自己無撞着に解くのに適用できる。

第4章では、GFM を用いて交流電圧印加 CNT の伝導特性を議論し、CNT がナノ電極として使える事について議論した。次いでイットリウム・鉄・ガーネット (Yttrium Iron Garnet: YIG) 中に、

CNT 電極によって励振、検出された静磁波の特性を、高周波フィルタに用いたときのフィルタ特性につき検討を行った。まず、交換相互作用の分子磁場近似法とマクスウェル方程式の静磁近似法を用いて YIG 中を伝搬する静磁波の分散関係式を定式化し、分散曲線を定量評価した。その結果、その静磁波は数ナノメートルの波長を持ち、THz 帯で伝搬する事がわかった。YIG を伝搬する静磁波の分散曲線の理論値と、その実験値とを比較検討した。また、ニッケルを伝搬する静磁波についても同様の比較検討を行い、理論値と実験値とが一致する事を明らかにした。

CNT に、GFM で計算された CNT 単体のコンダクタンスを反映させ、かつ CNT を円筒形電極として扱った単層 CNT に高周波電流を流した YIG デバイスの帯域通過フィルタ (Band Pass Filter: BPF) について検討した。そこで、CNT 電極が、近くに置かれたフェライト薄膜中に静磁波を直接励振・検出しうることを明らかにした。その BPF の挿入損失  $IL$  の周波数特性や  $IL_{min}$ 、中心周波数 ( $f_0$ )、バンド幅 ( $BW$ ) を、CNT の直径や、CNT のカイラリティを変化させて調べた結果、CNT の直径で帯域通過フィルタ (BPF) の特性を設計でき、動作周波数を THz 帯域の高さにまで改善できる事がわかった。

次に、単層 CNT をナノ電極として用いた場合の BPF のフィルタ特性改善のため、バンドル CNT を用いた場合の BPF のフィルタ特性を、単層 CNT の場合と同様に検討した。バンドル CNT を用いた BPF は、単層 CNT の場合に比べ  $IL_{min}$  は 27.5dB から 9.0dB に改善した。BPF のフェライト中を伝搬する静磁波の分散曲線は、伝搬しうる周波数帯域が GHz から THz までに及んでおり、波長はマイクロメートルから短くて数ナノメートルに及んでいることを示した。この波長の多様性のため、フィルタ特性を解析する BPF の電極には、単層 CNT あるいはバンドル CNT を用いた。CNT を流れる高周波電流で効果的に静磁波を励振・検出するためには、静磁波の減衰と CNT 間の直達電磁気結合を少なくするような実際の構造を構成する必要がある。帯域通過特性の挿入損失  $IL$ 、通過中心周波数  $f_0$ 、帯域幅  $BW$  が、CNT 電極のカイラリティやバンドル CNT 電極内の単層 CNT の本数により制御できる事を示し、BPF としての動作特性を明らかにした。これらの特徴を逆に生かして、CNT のカイラリティやバンドル CNT 内の本数を弁別できる新しいフェライトデバイスを実現できる可能性がある。このデバイスでは、カイラリティやバンドル CNT 内の単層 CNT の本数を、静磁波の波長を介して帯域通過特性で測定することができる。

また、この BPF の  $IL_{min}$ 、 $f_0$ 、 $BW$  の CNT 本数 ( $m$ ) 依存性から、1THz で増幅器と帰還回路を合わせた増幅率が 9dB を上回る回路を作ることができれば、更なる応用として周波数 1THz 程度の発振器を実現できる可能性がある。

以下に、今後の課題を述べる。今回、CNT の輸送特性解析を、ナノ電極実現のために発展させたが、将来、提案したデバイス動作をより正確に評価するために、外部電磁界と CNT との相互作用について研究する予定である。GFM は、CNT 中の電子波と電磁界との相互作用の解析へと発展させて、CNT 中の量子電流を評価できるので、広い範囲のデバイス応用に適用でき、新デバイスを提案する上で助けになるだろう。今後ますますの発展が予想される CNT の高周波デバイス応用技術を支援するため、CNT の高周波特性シミュレータの研究開発を進めていきたい。

## 謝辞

本論文作成について、終始ご指導とご鞭撻を賜りました神戸大学 自然科学研究科 情報・電子科学専攻 三好 且六教授に心より感謝いたします。

また、適切なお助言・ご鞭撻を賜りました同専攻 林 真至教授に厚くお礼申し上げます。

また、常に懇切丁寧な直接のご指導と有意義なお助言・ご鞭撻を賜りました同専攻 小川 真人教授に厚くお礼申し上げます。

そして、研究に必要な数値計算機などの技術についてご助言・ご協力賜りました同専攻 土屋 英昭助教授、伊地知 武吉技官に深く感謝いたします。

また、同じ博士課程院生として常に暖かいご助言を頂いた エヌブイテック株式会社 川野 英郎課長、院生・学生として協力いただいた牧野 泰幸氏、梶原 正法氏、米谷 充氏、長野 祐司氏に感謝いたしますとともに、日頃ご討論いただいた神戸大学工学部 電気電子工学科 電子デバイス研究室の諸兄に厚くお礼申し上げます。

また、研究推進のための発明届出を通じて有益な議論を頂いた神戸大学 大内 権一郎産学連携コーディネータ、TLO ひょうご 芦崎 重也氏、株式会社ノリタケカンパニーリミテド 上村佐四郎博士、財団法人ファインセラミックセンタ 楠美智子博士、そして小倉知材弁理士事務所 小倉 啓七弁理士に厚くお礼申し上げます。

最後に、会社を退職し研究に専念する自分の生き方を理解してくれた父に、家族の生活を支え応援してくれた母に、遠地から応援してくれた姉にそれぞれ心からお礼を言います。

## 付録 A 第2章の付録

### A.1 平均確率密度流の定式化

波動関数  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は次式で表せる [13] :

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.1})$$

ここで、 $F(\mathbf{r})$  は振幅係数、 $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  はブロッホ関数である。CNT では、 $F(\mathbf{r})$  は一般に各炭素原子での振幅を組み合わせたベクトルであるが、ここでは簡単のため  $F(\mathbf{r})$  をスカラとする。第  $J$  番目の CUC での  $y$  方向に流れる平均確率密度流は次式で定義できる :

$$\bar{J}_J = \int_{\text{CUC}(J)} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\hat{p}^y}{m_0} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (\text{A.2})$$

ここで、 $m_0$  は電子質量である。振幅  $F(\mathbf{r})$  はブロッホ関数に比べてゆっくり変化するのので、次の方程式を得る :

$$\frac{\hat{p}^y}{m_0} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx F_J \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}{m_0} (\hat{p}^y + \hbar k^y) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{第 } J \text{ 番目の CUC で}). \quad (\text{A.3})$$

この方程式から、平均確率密度流は次式で表される。

$$\bar{J}_J = \frac{1}{m_0} |F_J|^2 \int_{\text{CUC}(J)} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) (\hat{p}^y + \hbar k^y) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{A.4})$$

式 (A.3) に演算子  $\hat{p}^y$  を作用させると、次の方程式を得る。

$$\hat{p}^y {}^2 \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = F_J \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) (\hat{p}^y + \hbar k^y)^2 u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.5})$$

式 (A.5) を Schrödinger 方程式に適用すると、

$$H(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.6a})$$

$$H(\mathbf{k}) = \frac{(\hat{p}^y + \hbar k^y)^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}). \quad (\text{A.6b})$$

が得られる。式 (A.4) と式 (A.6) とヘルマン・フラインマンの定理 [8] から、式 (2.8) が最終的に得られる。

$$\begin{aligned} \bar{J}_J &= \frac{1}{\hbar} |F_J|^2 \int_{\text{CUC}(J)} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k^y} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \\ &= |F_J|^2 \int_{\text{CUC}(J)} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k^y} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k^y} |F_J|^2. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

## A.2 $x$ 方向に関する境界条件の適用

$x$  方向に向かって流れる確率密度流  $\bar{J}_{J,K}^x$  は

$$\bar{J}_{J,K}^x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_{J,K}^x} |F_{J,K}|^2. \quad (\text{A.8})$$

で表すことができる。平均確率密度流と確率密度との保存性から、電流が  $y$  方向に流れるように以下の境界条件を適用する事ができる。

$$\left\{ \begin{array}{l} F_{J,K} \quad \text{が単位胞境界で連続,} \\ \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_{J,K}^x} F_{J,K} \quad \text{が単位胞境界で連続.} \end{array} \right. \quad (\text{A.9})$$

第  $K$  番目の GUC での振幅は次式で表される。

$$\begin{aligned} F_{J,K}(x, y) &= \{A_{J,K} \exp [ik^x(x - x_{J,K}^C)] + \\ &+ C_{J,K} \exp [-ik^x(x - x_{J,K}^C)]\} \exp [ik_J^y(y - y_{J,K}^C)] + \\ &+ \{B_{J,K} \exp [ik^x(x - x_{J,K}^C)] + \\ &+ D_{J,K} \exp [-ik^x(x - x_{J,K}^C)]\} \exp [-ik_J^y(y - y_{J,K}^C)], \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

ここで、座標  $(x, y)$  は各 GUC の中を動き、 $k_{J,K}^x$  は  $J, K$  に因らないため、 $x$  座標に関する波数を  $k^x \equiv k_{J,K}^x$  と置く。振幅  $F_{J,K}(x, y)$  は、次の時計周り (+) の方向に伝搬する波の項と反時計周り (-) の項とで表せる。

$$\begin{aligned} F_{J,K}^{x+}(x, y) &= \{A_{J,K} \exp [ik_{J,K}^y(y - y_J^C)] + \\ &+ B_{J,K} \exp [-ik_{J,K}^y(y - y_J^C)]\} \exp [ik^x(x - x_K^C)], \end{aligned} \quad (\text{A.11a})$$

$$\begin{aligned} F_{J,K}^{x-}(x, y) &= \{C_{J,K} \exp [ik_{J,K}^y(y - y_J^C)] + \\ &+ D_{J,K} \exp [-ik_{J,K}^y(y - y_J^C)]\} \exp [-ik^x(x - x_K^C)]. \end{aligned} \quad (\text{A.11b})$$

連続条件の式 (A.9) を適用すると、境界  $x = (x_K^C + x_{K+1}^C)/2$ ,  $(y_{J-1}^C + y_J^C)/2 < y \leq (y_J^C + y_{J+1}^C)/2$  での次の条件式が得られる。

$$F_{J,K}^{x+} + F_{J,K}^{x-} = F_{J,K+1}^{x+} + F_{J,K+1}^{x-}, \quad (\text{A.12a})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial k_{J,K}^x} F_{J,K}^{x+} - \frac{\partial E}{\partial k_{J,K}^x} F_{J,K}^{x-} &= \\ \frac{\partial E}{\partial k_{J,K}^x} F_{J,K+1}^{x+} - \frac{\partial E}{\partial k_{J,K}^x} F_{J,K+1}^{x-}. \end{aligned} \quad (\text{A.12b})$$

式 (A.12a)、(A.12b) は次式に変形できる。

$$A_{J,K+1} + B_{J,K+1} = R(A_{J,K} + B_{J,K}), \quad (\text{A.13a})$$

$$C_{J,K+1} + D_{J,K+1} = \frac{1}{R}(C_{J,K} + D_{J,K}), \quad (\text{A.13b})$$

ここで、

$$R = \exp [ik^x (x_{K+1}^C - x_K^C)] = \exp (ik^x x_G), \quad (\text{A.14a})$$

$$x_G = x_{K+1}^C - x_K^C. \quad (\text{A.14b})$$

出力端  $J=1$  では反射がない事から、

$$B_{1,K} = D_{1,K} = 0, \quad K = 1, 2, \dots, N. \quad (\text{A.15})$$

が得られる。時計周り (+) の方向に伝搬する波と反時計周り (-) の波とが可逆である事から、振幅  $A_{1,K}$ 、 $C_{1,K'}$  の絶対値は常に等しく、 $K=K'$  では  $A_{1,K'}$  と  $C_{1,K'}$  は等しい。

$$A_{1,K'} = C_{1,K'}. \quad (\text{A.16})$$

式 (A.13)–(A.16) から、振幅に関する式が次式で得られる。

$$A_{1,K} + C_{1,K} = 2 \cos [(K - K') k^x x_G] A_{1,1}. \quad (\text{A.17})$$

### A.3 電流密度の定式化

電流密度  $\mathcal{J}_K$  は次式で与えられる。

$$\mathcal{J}_K = \int_{r_{CNT}}^{r_{CNT+\delta z}} n_c q v^y dz, \quad (\text{A.18})$$

ここで、

$$n_c = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \times 2 \{f_M(E) [1 - f_1(E)] - f_1(E) [1 - f_M(E)]\} \mathcal{D}_K, \quad (\text{A.19a})$$

$$v^y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k^y} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk^y}. \quad (\text{A.19b})$$

である。式 (A.18) は、ジグザグ形 CNT で  $d^3k = dk^x dk^y dk^z$ 、 $0 < k^x \leq \frac{2\pi}{a}$ 、 $0 < k^y \leq \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$ 、 $0 < k^z \leq \frac{2\pi}{\delta z}$  を仮定すると、

$$\mathcal{J}_K = \int_{r_{CNT}}^{r_{CNT+\delta z}} dz \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{\frac{2\pi}{a}} dk^x \int_0^{\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}} dk^y \int_0^{\frac{2\pi}{\delta z}} dk^z 2\{f_M(E) - f_1(E)\} \frac{q}{\hbar} \frac{dE}{dk^y} \mathcal{D}_K. \quad (\text{A.20})$$

で表すことができる。式 (A.20) で

$$\int_{r_{CNT}}^{r_{CNT+\delta z}} dz = [z]_{r_{CNT}}^{r_{CNT+\delta z}} = \delta z, \quad (\text{A.21})$$

である。ここで、 $k^x = \frac{2\pi i^x}{Nx_G}$  を使うと、

$$\int_0^{\frac{2\pi}{a}} dk^x = \frac{2\pi}{Nx_G} \int di^x = \frac{2\pi}{Nx_G} \sum_{i^x}^{1st-BZ}, \quad (\text{A.22})$$

$$\int_0^{\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}} dk^y \frac{dE}{dk^y} = \int_{-\infty}^{\infty} dE, \quad (\text{A.23})$$

である。

$$\int_0^{\frac{2\pi}{\delta z}} dk^z = [k^z]_0^{\frac{2\pi}{\delta z}} = \frac{2\pi}{\delta z}, \quad (\text{A.24})$$

式 (A.21)~(A.24) から、次の電流密度の式が得られる。

$$\mathcal{J}_K = \frac{q}{\pi\hbar} \frac{1}{Nx_G} \sum_{i^x}^{1st-BZ} \int_{-\infty}^{\infty} dE \{f_M(E) - f_1(E)\} \mathcal{D}_K. \quad (\text{A.25})$$

#### A.4 バンド図を使つての電流電圧特性の飽和現象検討結果

TM法で計算された tube(19,0)CNT の電流電圧特性図 A.1 が飽和するメカニズムを、分散曲線とフェルミディラック分布関数を用いて解明する。V<sub>0</sub>=0.02 V の時、電流電圧特性上では線形領域で、伝

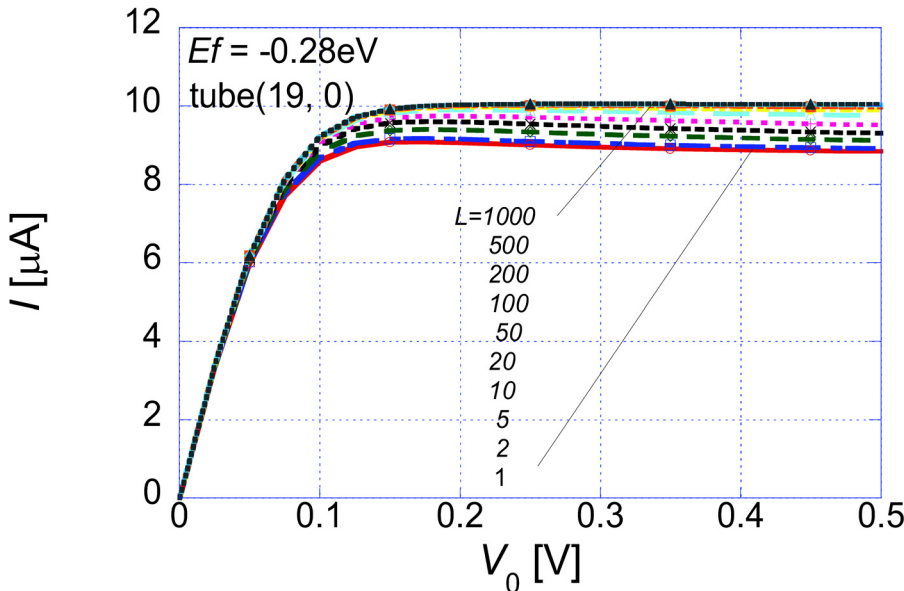


図 A.1: TM法で計算された tube(19,0)CNT の電流電圧特性;  $E_f = -0.28$  eV

導に寄与するモード遷移は、図 A.2 が示すように  $0 < k^y a / 4\pi \leq 0.5$  で  $i^x = 9 \rightarrow i^x = 9$  と  $0.5 < k^y a / 4\pi \leq 1$  で  $i^x = 10 \rightarrow i^x = 10$  との 2 つがある。  $i^x = 9, 10$  のとき分散曲線のバンドギャップは最も狭くなる。

$V_0=0.15$  V の時、伝導に寄与するモード遷移は  $V_0=0.02$  V の時の物と同じ  $i^x=9 \rightarrow i^x=9$  と  $i^x=10 \rightarrow i^x=10$  だが、図 A.2 の分散曲線とフェルミディラック分布との兼ね合いで電流電圧特性上では飽和領域である。

$V_0=0.4$  V の時、伝導に寄与するモード遷移は  $V_0=0.02$  V の時の物と同じ  $i^x=9 \rightarrow i^x=9$  と  $i^x=10 \rightarrow i^x=10$  と  $i^x=8 \rightarrow i^x=9$  と  $i^x=11 \rightarrow i^x=10$  だが、後者は電流に寄与せず、図 A.2 の分散曲線とフェルミディラック分布との兼ね合いで電流電圧特性上では飽和領域である。

$V_0=0.5$  V の時、伝導に寄与するモード遷移は  $V_0=0.4$  V の時の物と同じ  $i^x=9 \rightarrow i^x=9$ ,  $i^x=10 \rightarrow i^x=10$ ,  $i^x=8 \rightarrow i^x=9$ ,  $i^x=11 \rightarrow i^x=10$  に加え、 $i^x=7 \rightarrow i^x=9$  と  $i^x=12 \rightarrow i^x=10$  だが、後者は電流に寄与せず、図 A.2 の分散曲線とフェルミディラック分布との兼ね合いで電流電圧特性上では、尚、飽和領域である。

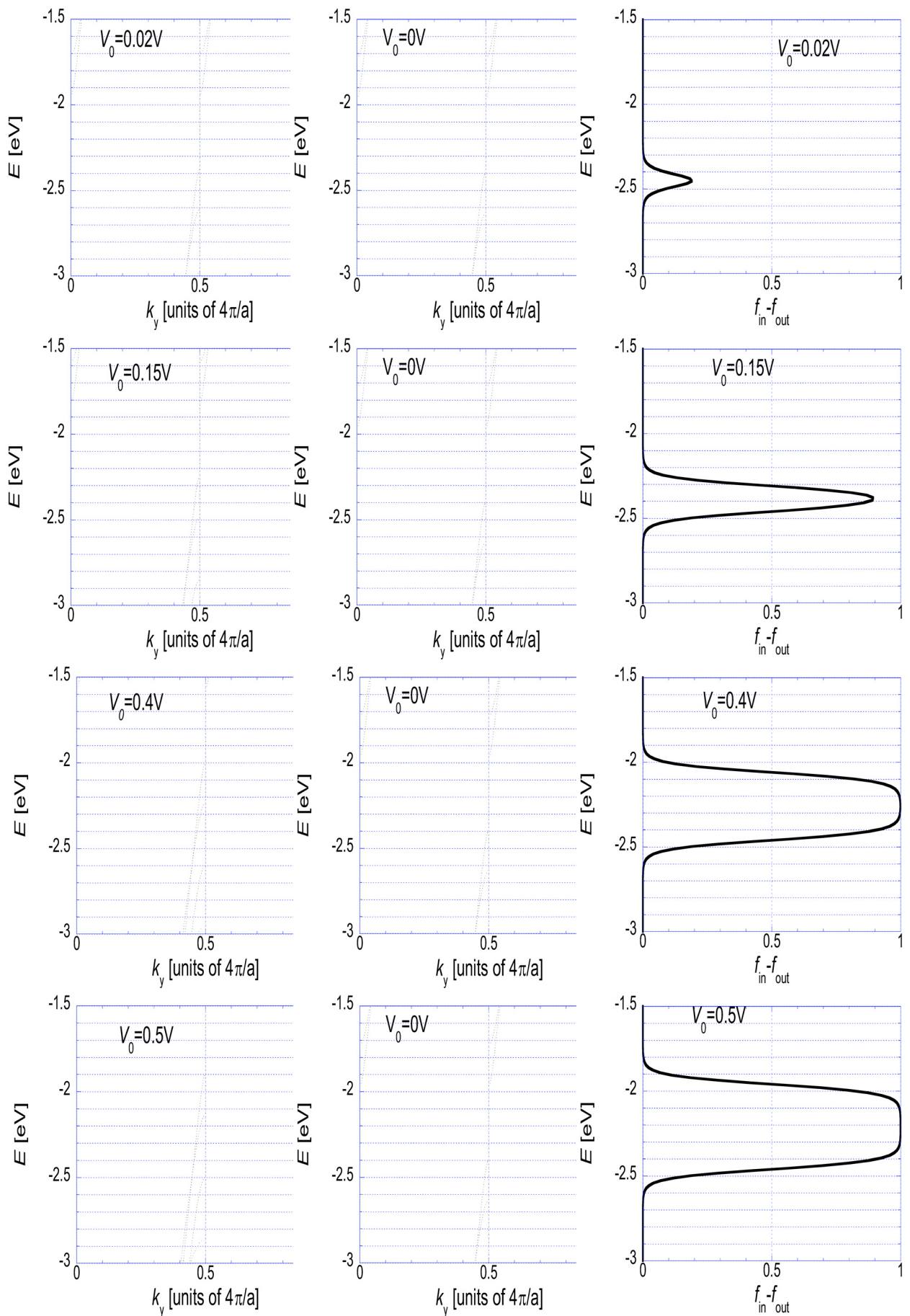


図 A.2: tube(19,0)CNT の, (左列) 入力端子での分散曲線, (中列) 出力端子での分散曲線, そして (右列) フェルミディラック分布; 印加電圧  $V_0$ =(第 1 行目)0.02, (第 2 行目)0.15, (第 3 行目)0.4, そして (第 4 行目)0.5V;  $E_f=0.28$  eV

## 付録B 第3章の付録

### B.1 CNT中でのポアソン方程式の定式化

ガウスの発散定理

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (\text{B.1})$$

( $\rho$ : 電荷密度,  $\mathbf{D}$ : 電束密度) と構成関係式

$$\mathbf{D} = \varepsilon_r \varepsilon_0 \mathbf{E} \quad (\text{B.2})$$

( $\varepsilon_0$ : 真空中の誘電率= $8.85 \times 10^{-12}$  F/m,  $\varepsilon_r$ : CNT中の比誘電率,  $\mathbf{E}$ : 電界) と、静電ポテンシャル  $U$  を

$$\mathbf{E} = -\nabla U \quad (\text{B.3})$$

で導入する事により、次式のポアソン方程式が得られる。

$$\nabla \cdot (\varepsilon_r \nabla U) = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (\text{B.4})$$

また、誘電率が CNT 内で場所によらず一定として、即ち

$$\nabla \varepsilon_r = \mathbf{0} \quad (\text{B.5})$$

として、ポアソン方程式は、ベクトル公式  $\nabla \cdot (\varepsilon_r \nabla U) = (\nabla \varepsilon_r) \cdot (\nabla U) + \varepsilon_r \nabla \cdot \nabla U$  を用いて、

$$\nabla^2 U = -\frac{\rho}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \quad (\text{B.6})$$

となる。 $\nabla^2$  は、円筒座標系  $(r, \theta, z)$  では、

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{B.7})$$

である。式 (B.7) を式 (B.6) へ代入して

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) U + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \quad (\text{B.8})$$

$\rho$  は、炭素原子の点電荷が各格子点  $(j, k)$  に存在するとして、

$$\rho = \sum_{j,k} \delta(r - r_{\text{CNT}}) \underbrace{\delta(r_{\text{CNT}}(\theta - \theta_{j,k}))}_{\delta(\theta - \theta_{j,k})/r_{\text{CNT}}} \delta(z - z_{j,k}) q \left[ -n_{j,k} + p_{j,k} + n_k^{\text{eff}} \right] \quad (\text{B.9})$$

と、デルタ関数を使って電荷の体積密度で表される。ただし、 $q$ : 電子の素電荷:  $1.602 \times 10^{-19}$  C である。 $n_k^{\text{eff}}$  は、接地端での電荷中性条件より求められ、左電極  $J = 0$  で接地しているとする、

$$n_k^{\text{eff}} = n_{0,k} - p_{0,k} \quad (\text{B.10})$$

より求められる。式 (B.8) を第  $j$ -CUC の半径  $r_{CNT} - c_0/2 < r < r_{CNT} + c_0/2$ 、長さ  $T$  の円筒形で体積平均をとると、

$$\frac{1}{2\pi c_0} \int_{r_{CNT}-c_0/2}^{r_{CNT}+c_0/2} dr \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{T} \int_{jT}^{(j+1)T} dz \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) U + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right\} =$$

$$\frac{q}{2\pi c_0 r_{CNT} \varepsilon_r \varepsilon_0} \int_{r_{CNT}-c_0/2}^{r_{CNT}+c_0/2} dr \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{T} \int_{jT}^{(j+1)T} dz \sum_{j,k} \delta(r - r_{CNT}) \delta(\theta - \theta_{j,k}) \delta(z - z_{j,k}) n_{j,k}^{tot} \quad (\text{B.11})$$

$$n_{j,k}^{tot} \equiv n_{j,k} - p_{j,k} - n_k^{eff} \quad (\text{B.12})$$

$U$  が第  $j$ -CUC 中の  $r_{CNT} - c_0/2 < r < r_{CNT} + c_0/2, 0 < \theta < 2\pi$  で一定とすると、式 (B.11) の左辺では

$$\frac{\partial U}{\partial r} = 0 \quad (\text{B.13a})$$

$$\frac{\partial U}{\partial \theta} = 0 \quad (\text{B.13b})$$

が成り立っている。一方、式 (B.11) の右辺で、デルタ関数の性質を使って積分してから和をとると、式 (B.11) は全体として次式になる。

$$\left\{ \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right\}_j = \frac{q}{\varepsilon_r \varepsilon_0} (n_j - p_j - N_{eff}) \quad (\text{B.14a})$$

$$N_{eff} = \frac{1}{2\pi c_0 r_{CNT} T} \sum_{k=1}^{4n} n_k^{eff} \quad (\text{B.14b})$$

ただし、

$$\left\{ \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right\}_j \equiv \frac{1}{T} \int_{jT}^{(j+1)T} \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} dz \quad (\text{B.15a})$$

$$n_j \equiv \frac{1}{2\pi c_0 r_{CNT} T} \sum_{k=1}^{4n} n_{j,k} \quad (\text{B.15b})$$

$$p_j \equiv \frac{1}{2\pi c_0 r_{CNT} T} \sum_{k=1}^{4n} p_{j,k} \quad (\text{B.15c})$$

と置いた。式 (B.15a) は、 $\partial^2 U / \partial z^2$  の第  $j$ -CUC での平均値である。式 (B.15b) の  $n_j$  は第  $j$ -CUC 中で平均化された電子密度に相当し、単位は  $[\text{m}^{-3}]$  である。ここで、 $T$  はジグザグ形 CNT の場合、 $T = \sqrt{3}a_0$ 、 $a_0, c_0$  は六方晶系黒鉛 [10, 11] の格子定数で、 $a_0$  は基底面 (炭素原子が結合された平面) に水平方向の格子定数 = 0.24612nm [12]、 $c_0$  は基底面に垂直方向の格子定数 = 0.6707nm [13] である。

## B.2 数値計算のためのポアソン方程式の差分化

第  $j$ -CUC の重心に主分割点 ( $j$ ) があるとし、主分割点 ( $j$ ) と主分割点 ( $j+1$ ) の中点に副分割点 ( $J$ ) があるとして、分割点をとる。 $\partial U / \partial z$  を差分化すると、

$$\left\{ \frac{\partial U}{\partial z} \right\}_j = \frac{U_J - U_{J-1}}{T} \quad (\text{B.16})$$

$$\left\{ \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right\}_j = \frac{U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}}{T^2} \quad (\text{B.17})$$

式 (B.16)、(B.17) を (B.14a) に適用すると、

$$\frac{U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}}{T^2} = \frac{q}{\varepsilon_r \varepsilon_0} n_j^{\text{tot}} \quad (\text{B.18})$$

$$n_j^{\text{tot}} \equiv n_j - p_j - N_{\text{eff}}, \quad j = 1, 2, \dots, N-1 \quad (\text{B.19})$$

のポアソン方程式の差分方程式が得られる。ポアソン方程式を数値的に解くために、まず  $U_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, N-1$  の初期値を与えて、式 (B.17) で  $n_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, N-1$  を求め、その  $n_j$  をポアソンの差分方程式 (B.18) の右辺に与えて、新しい  $U_j$  を求める。ここで、方程式 (B.18) を解く繰り返し計算の収束性を良くするため、 $U_j$  の 1 ステップ前の値を  $\bar{U}_j$  と置いてそれらの差を  $\delta U_j$  として、

$$U_j = \bar{U}_j + \delta U_j \quad (\text{B.20})$$

と置く。式 (B.20) を式 (B.18) へ代入して、

$$\delta U_{j+1} - 2\delta U_j + \delta U_{j-1} = - \{ \bar{U}_{j+1} - 2\bar{U}_j + \bar{U}_{j-1} \} + \frac{qT^2}{\varepsilon_r \varepsilon_0} n_j^{\text{tot}} \quad (\text{B.21})$$

が得られる。また、左右電極とデバイスとの静電ポテンシャルに関する境界条件

$$U_{-1} = U_0 \quad (\text{B.22a})$$

$$U_N = U_{N+1} \quad (\text{B.22b})$$

を差分方程式 (B.21) に適用し、 $j = 1, 2, \dots, N-1$  に関してそれぞれ方程式を立てて行列でまとめて表示すると、

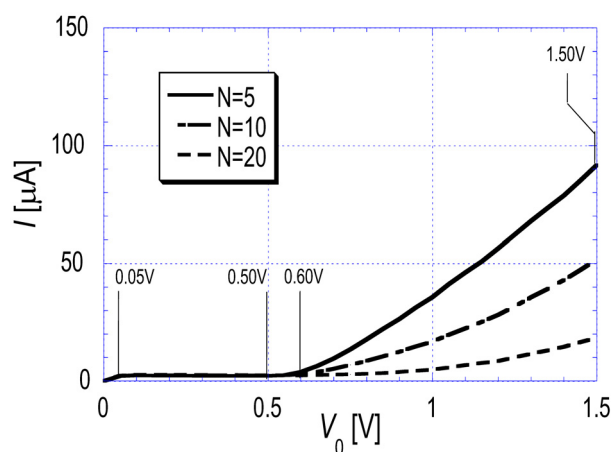
$$\begin{bmatrix} \delta U_1 \\ \delta U_2 \\ \delta U_3 \\ \vdots \\ \delta U_{N-2} \\ \delta U_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & & & & \\ 1 & -2 & 1 & 0 & & & \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}^{-1} \left\{ \frac{qT^2}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \begin{bmatrix} n_1^{\text{tot}} \\ n_2^{\text{tot}} \\ n_3^{\text{tot}} \\ \vdots \\ n_{N-2}^{\text{tot}} \\ n_{N-1}^{\text{tot}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ V_0 \end{bmatrix} \right\} - \begin{bmatrix} \bar{U}_1 \\ \bar{U}_2 \\ \bar{U}_3 \\ \vdots \\ \bar{U}_{N-2} \\ \bar{U}_{N-1} \end{bmatrix} \quad (\text{B.23})$$

となる。 $U_j$  の初期値として、例えば、従来仮定していた静電ポテンシャル分布

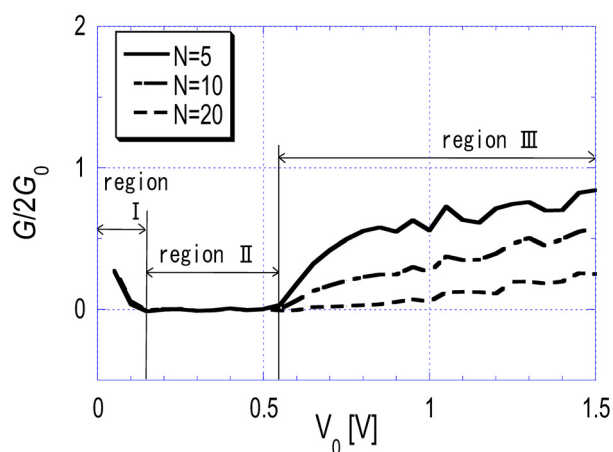
$$U_j = -\frac{j}{N} V_0 \quad (\text{B.24})$$

を与えてみる方法が考えられる。ポアソン方程式の数値計算フローチャートを下記に示す。

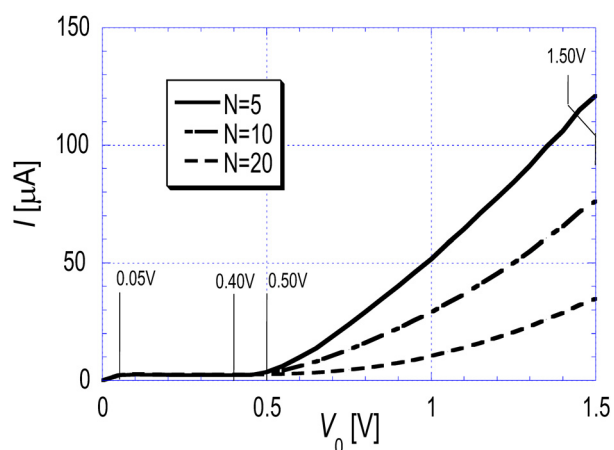




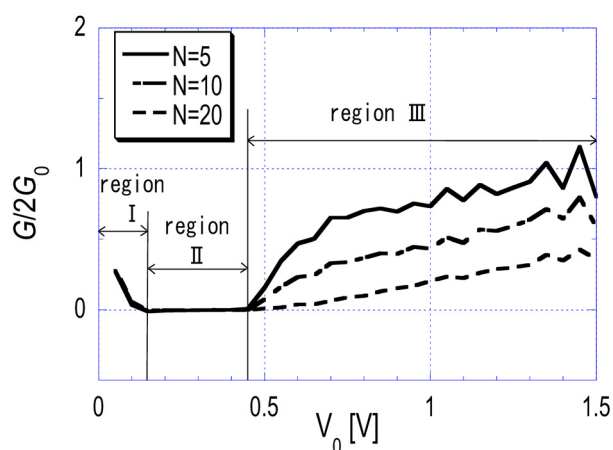
(a)  $I$ - $V$  特性, tube(16, 0),  $E_F = -0.26\text{eV}$



(b)  $G$ - $V$  特性, tube(16, 0)



(c)  $I$ - $V$  特性, tube(19, 0),  $E_F = -0.23\text{eV}$



(d)  $G$ - $V$  特性, tube(19, 0)

図 B.1: tube(16, 0) の  $I$ - $V$ ,  $G$ - $V$  特性 (上段) と tube(19, 0) の  $I$ - $V$ ,  $G$ - $V$  特性 (下段)

III) 上2つの遷移に加え、 $b2 \rightarrow a2$  遷移が電流に寄与する。 $b2 \rightarrow a2$  遷移がデバイス途中で減衰電子波で伝搬するから、CNTの長さが長くなると $G$ が小さくなり、 $b2 \rightarrow a2$  遷移の寄与が消えて $b1 \rightarrow b1$  遷移の寄与だけになるから $G$ が $2G_0$ に近づく。

領域 I の分散曲線 (左右電極) と、フェルミディラック (FD) 分布関数を図 B.4 の上から1段目に示す。領域 II のそれらを2段目、領域 III のそれらを3, 4段目に夫々示す。

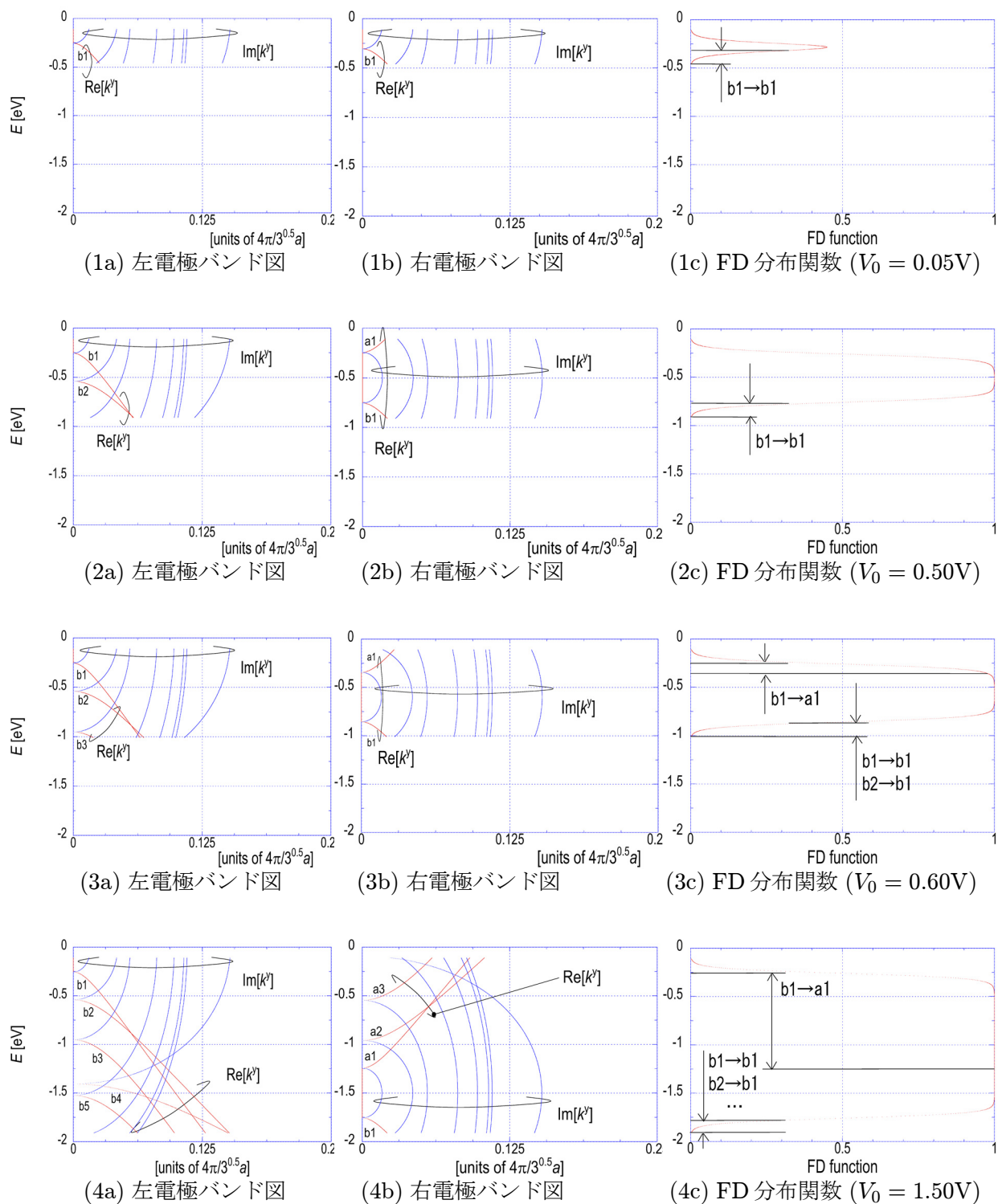


図 B.2: tube(16, 0) のバンド図 (左列; 左電極, 中列; 右電極) と FD 分布関数 (右列),  $V_0 = 0.05 \sim 1.50\text{V}$

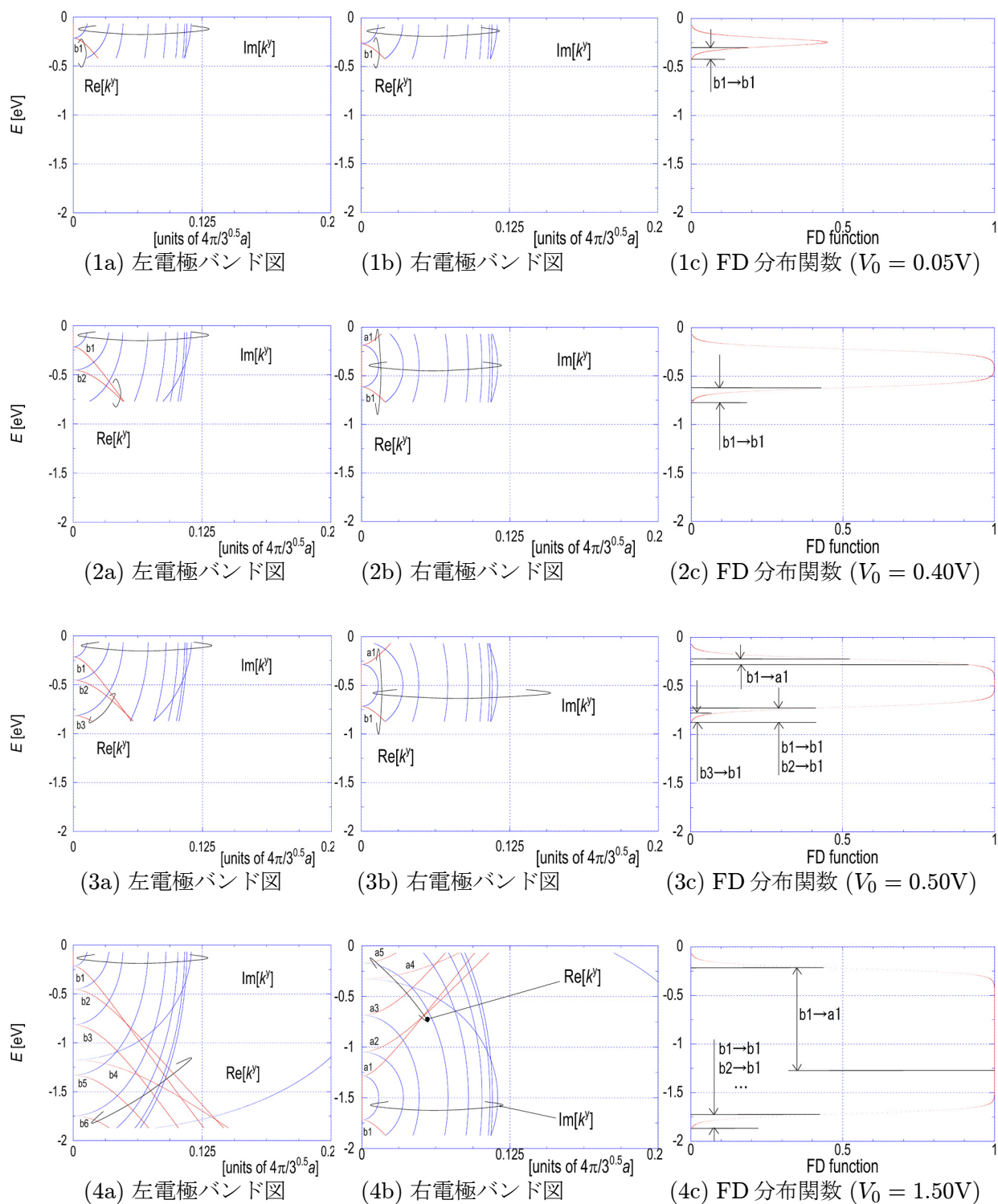


図 B.3: tube(19, 0) のバンド図 (左列; 左電極, 中列; 右電極) と FD 分布関数 (右列),  $V_0 = 0.05 \sim 1.50\text{V}$

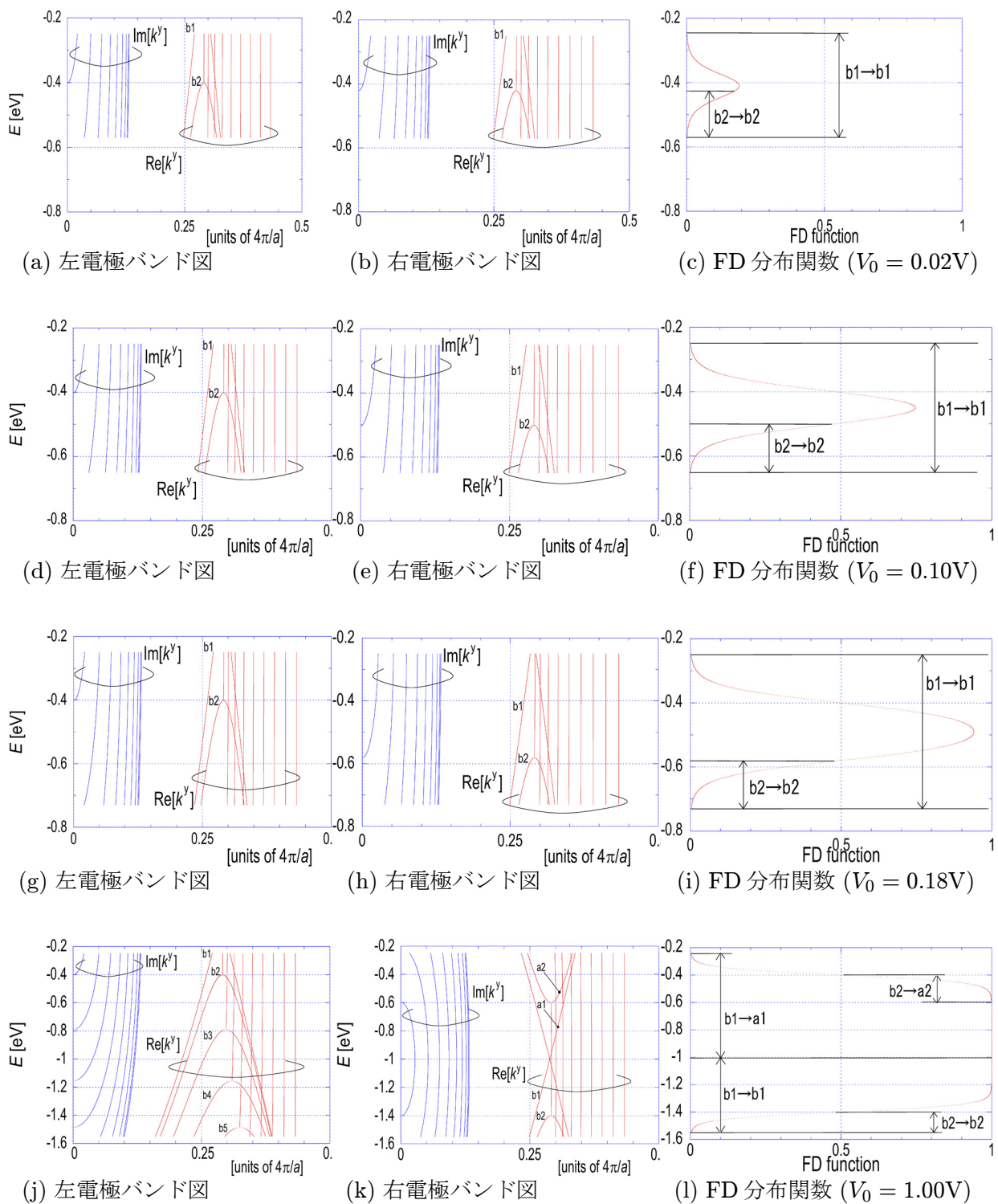


図 B.4: tube(18, 18) のバンド図 (左列; 左電極, 中列; 右電極) と FD 分布関数 (右列),  $V_0 = 0.02 \sim 1.00V$

# 付録C 第4章の付録

## C.1 交流電圧を印加したときのGFMによる定式化

本章では、交流電圧が印加されたカーボンナノチューブ (CNT) 中の電子波を、グリーン関数法 (GFM) で小信号近似して定式化し、微分コンダクタンスを定量評価する。最初に、次式の波動関数

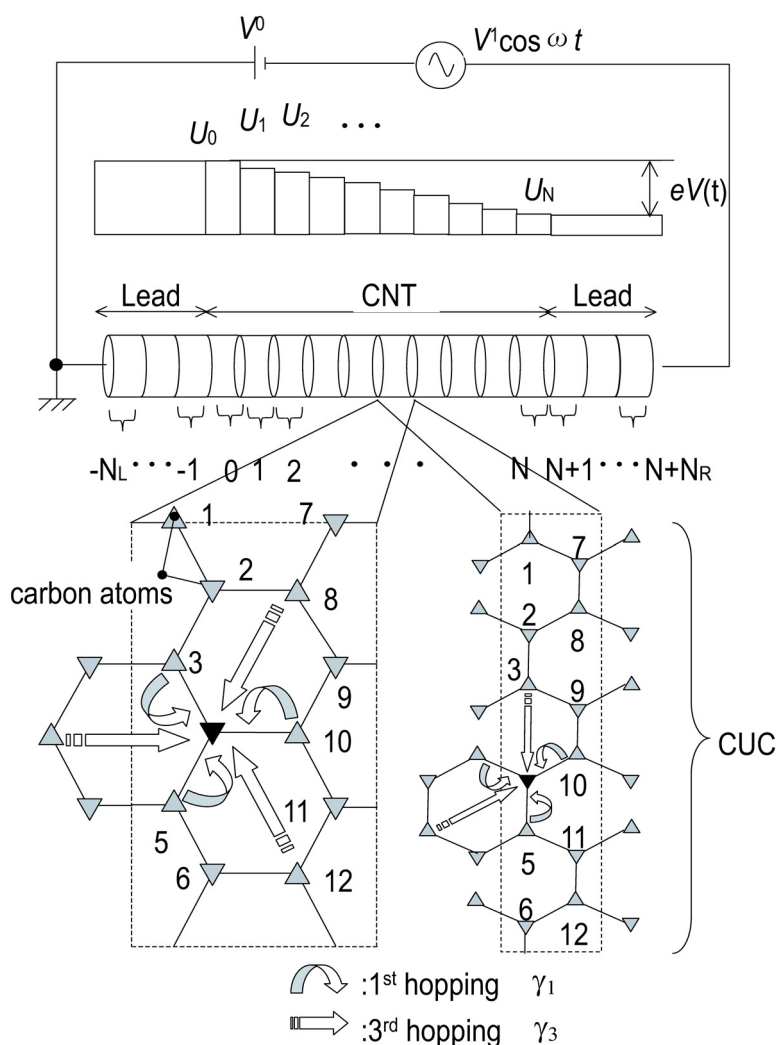


図 C.1: 電圧が印加された CNT の解析モデル

左右の CUC は夫々 zig-zag、armchair 形に対応、カイラリティはそれぞれ  $(3, 0)$ 、 $(3, 3)$ 。▼印が  $k=4$  の格子点で、▼へ向かう矢印がホッピングをあらわし、曲がって伸びる矢印が第 1 近接、まっすぐが第 3 近接を表す。

$|\Psi(t)\rangle$  に関する時間を含む Schrödinger 方程式から出発する。

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (\text{C.1})$$

交流電圧を CNT の両端に印加した場合、 $\hat{H}$  は直流の項  $\hat{H}^0$  と交流の項との和で

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + U^1(\mathbf{r}) \cos \omega t \quad (\text{C.2})$$

と仮定する。ここで、 $U^1(\mathbf{r})$  は静電ポテンシャルエネルギーの交流成分である。 $U^1(\mathbf{r})$  が量子電流にどの程度影響するかを調べるため、 $|\Psi(t)\rangle$  を次式で展開する。高周波の振幅を小信号近似して  $|\Psi(t)\rangle$  を直流の項と交流の項のうち角周波数  $\omega$  のみで

$$|\Psi(t)\rangle = \left( |\Psi^0\rangle + \frac{1}{2} |\Psi^1\rangle \exp(i\omega t) + \frac{1}{2} |\Psi^{-1}\rangle \exp(-i\omega t) \right) \exp(-i\frac{E}{\hbar}t) \quad (\text{C.3})$$

と展開する。式 (C.2)、(C.3) を式 (C.1) へ代入した式に、 $\exp[i(\frac{E}{\hbar} + l\omega)t]$  を掛け、 $t$  で積分すると、

$$(\hat{H}^0 - \hbar\omega) |\Psi^{-1}\rangle + U^1(\mathbf{r}) |\Psi^0\rangle = |\Psi^{-1}\rangle E \quad (\text{C.4a})$$

$$\frac{1}{4} U^1(\mathbf{r}) |\Psi^{-1}\rangle + \hat{H}^0 |\Psi^0\rangle + \frac{1}{4} U^1(\mathbf{r}) |\Psi^1\rangle = |\Psi^0\rangle E \quad (\text{C.4b})$$

$$U^1(\mathbf{r}) |\Psi^0\rangle + (\hat{H}^0 + \hbar\omega) |\Psi^1\rangle = |\Psi^1\rangle E \quad (\text{C.4c})$$

が得られる。式 (C.4) は夫々波動関数  $|\Psi^l\rangle$ ,  $l = -1, 0, 1$  に対する時間を含まない Schrödinger 方程式である。

図. C.1 の解析モデルから、 $|\Psi^l\rangle$  を TB 基底で展開すると、式 (C.4) から行列形式の Schrödinger 方程式が直流の場合と同様に定式化できる。また、同様に電極内での固有値方程式が直流、交流両方に対して定式化できる。

### C.1.1 遅延グリーン関数の定式化

CNT の左右電極からの影響を夫々見積もるため、行列形式の Schrödinger 方程式から、左右の電極の影響が入った遅延グリーン関数  $G_D^{l,m}$ ,  $l, m = -1, 0, 1$  は夫々

$$G_D^{-1,-1} = [\bar{H}_D^{-1} - \Sigma_L^{-1} - \Sigma_R^{-1} - \Sigma_D^0]^{-1}, \quad (\text{C.5a})$$

$$G_D^{0,0} = \{\bar{H}_D^0 - \Sigma_L^0 - \Sigma_R^0 - \Sigma_D^{-1} - \Sigma_D^1\}^{-1}, \quad (\text{C.5b})$$

$$G_D^{1,1} = [\bar{H}_D^1 - \Sigma_L^1 - \Sigma_R^1 - \Sigma_D^0]^{-1}, \quad (\text{C.5c})$$

$$G_D^{-1,0} = (\bar{H}_D^{-1})^{-1} \tau_D G_D^{0,0}, \quad (\text{C.5d})$$

$$G_D^{0,-1} = \frac{1}{4} (\bar{H}_D^0)^{-1} \tau_D G_D^{-1,-1}, \quad (\text{C.5e})$$

$$G_D^{0,1} = \frac{1}{4} (\bar{H}_D^0)^{-1} \tau_D G_D^{1,1}, \quad (\text{C.5f})$$

$$G_D^{1,0} = (\bar{H}_D^1)^{-1} \tau_D G_D^{0,0}, \quad (\text{C.5g})$$

$$G_D^{1,-1} = 0, \quad (\text{C.5h})$$

$$G_D^{-1,1} = 0, \quad (\text{C.5i})$$

$$\Sigma_D^l = \frac{1}{4} \tau_D (\bar{H}_D^l)^{-1} \tau_D, \quad l = -1, 0, 1 \quad (\text{C.5j})$$

$$\bar{H}_L^l = (E - i\eta)I - H_L^l \quad (\text{C.5k})$$

$$\bar{H}_D^l = (E - i\eta)I - H_D^l \quad (\text{C.5l})$$

$$\bar{H}_R^l = (E - i\eta)I - H_R^l \quad (\text{C.5m})$$

となる。式 (C.5) の内、 $\Sigma_L^l$  は左電極のデバイスへの影響を表す自己境界エネルギーで、

$$\Sigma_L^l = \tau_{DL} g_L^l \tau_{LD}, \quad (\text{C.6})$$

の関数を持つ。ここで、 $g_L^l$  は平衡グリーン関数で直流の場合と同様に求められるが、直流成分  $g_L^0$  と交流成分  $g_L^{\pm 1}$  の両方をもつ点が従来の GFM と異なる。

### C.1.2 電荷密度と電流

左右電極でのスペクトル関数をそれぞれ  $A_L^l, A_R^l, l = -1, 0, 1$  とおくと、左電極が  $E=E_0 \sim \infty$  の電子波を励振するから、 $\{A_L^l\}_{j,k;j,k}$  とフェルミディラック分布関数との積を、この  $E$  の範囲で積分したものが電子密度の左電極からの寄与になる。右電極からも同様の寄与があるから、格子点  $(j, k)$  での  $n_{j,k}^l$  は、これら 2 つの寄与の和

$$n_{j,k}^l = \int_{E_0}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \{A_L^l\}_{j,k;j,k} f(E - \mu_L) + \int_{E_N}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \{A_R^l\}_{j,k;j,k} f(E - \mu_R) \quad (\text{C.7})$$

で表される。ここで、式 (C.7) の  $\{ \}_{j,k;j,k}$  は、中の行列の対角項  $\{j, k; j, k\}$  成分を表す。 $p_{j,k}^l$  も  $n_{j,k}^l$  と同様に左右電極からの寄与の和で、

$$p_{j,k}^l = \int_{-\infty}^{E_0} \frac{dE}{2\pi} \{A_L^l\}_{j,k;j,k} f(\mu_L - E) + \int_{-\infty}^{E_N} \frac{dE}{2\pi} \{A_R^l\}_{j,k;j,k} f(\mu_R - E) \quad (\text{C.8})$$

と表される。電子、正孔密度は夫々、式 (C.7) の  $n_{j,k}^l$ 、式 (C.8) の  $p_{j,k}^l$  を CNT の体積で割って計算する。電流  $I^l$  は、 $T^l$  のトレースとフェルミディラック分布関数の積を  $E$  で積分したもののだから

$$I^l = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_{k=1}^{4n} \sum_{j=0}^N \{T^l\}_{j,k;j,k} [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] \frac{V^l}{V^0} \quad (\text{C.9})$$

となる。

$A_L^l, A_R^l$  は式 (C.5) より得られる  $G_D^{l,l'}$ ;  $l, l' = -1, 0, 1$  より

$$A_L^l = \sum_{l'', l''' = -1}^1 G_D^{l,l''} \Gamma_L^{l''} G_D^{l''', l \dagger}, \quad (\text{C.10a})$$

$$A_R^l = \sum_{l'', l''' = -1}^1 G_D^{l,l''} \Gamma_R^{l''} G_D^{l''', l \dagger}, \quad (\text{C.10b})$$

で求められる。ここで、 $A_L^l/2\pi, A_R^l/2\pi$  は状態密度に相当する。また、(C.10) の中の  $\Gamma_L^l, \Gamma_R^l$  は

$$\Gamma_L^l = i \left[ \Sigma_L^l - \Sigma_L^{l \dagger} \right] \quad (\text{C.11a})$$

$$\Gamma_R^l = i \left[ \Sigma_R^l - \Sigma_R^{l \dagger} \right] \quad (\text{C.11b})$$

で与えられる。左電極接続面から右電極接続面へ伝わる電子波の透過確率  $T^l$  は

$$T^l = \sum_{l'', l''' = -1}^1 \Gamma_L^l G_D^{l'', l'''} \Gamma_R^{l'''} G_D^{l''', l \dagger} \quad (\text{C.12})$$

で与えられる。また、式 (C.7) のフェルミディラック分布関数  $f(E - \mu_L)$ ,  $f(E - \mu_R)$  を、温度を  $T$ 、ボルツマン定数を  $k_B$  として

$$f(E - \mu_L) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_L}{k_B T}\right)} \quad (\text{C.13a})$$

$$f(E - \mu_R) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_R}{k_B T}\right)} \quad (\text{C.13b})$$

で与え、オンサイトエネルギーを直流成分のみと仮定し、CNT のフェルミレベルを  $E_F$  として、

$$\mu_L = E_0 + E_F \quad (\text{C.14a})$$

$$\mu_R = E_N + E_F \quad (\text{C.14b})$$

とする。

### C.1.3 交流電圧を印加した時の $G$ - $f$ 特性

式 (C.9) で電流を計算し、その電圧との比から、微分コンダクタンス  $G^l$  を

$$G^l = \frac{\partial I^l}{\partial V^l}, \quad l = 0, 1 \quad (\text{C.15})$$

で計算する。 $G^1$  をプロットすると、図. C.2 (a) が得られた。ここで、CNT はジグザグ形で、カイラリティは金属的な tube(15, 0) に設定した。図. C.2 (a) から、交流コンダクタンス  $G$ -周波数  $f$  特性は金属的な CNT の場合

- I) 周波数 150THz 程度までは、 $G/2G_0$  は直流の時と同じ 1 である。
- II) 周波数 180THz 以上になると、 $G/2G_0$  は周波数の増加とともに 1 ずつ増えていく
- III) その  $G/2G_0$  が増えだす周波数は、図. C.2 (b) の直流分散曲線に示された実モード b1 と b2, b3, b4, ..., とのエネルギー差の  $e/h$  倍になっている。

となった。

## C.2 スピン間の相互作用によって生じる周波数の増大項の導出

電子スピンの一直線上に並んだ図 C.3 のような 1 次元系で、次の電子スピンの磁化  $\mathbf{M}$  の運動方程式 [14] を考える。

$$\frac{d\mathbf{M}_i}{dt} = -\gamma\mu_0\mathbf{M}_i \times \mathbf{H}_i, \quad (\text{C.16})$$

ここで、 $i$  はスピンの位置を表す指標で、整数である。第  $i$  番目のスピンの働く、他のスピンからの交換相互作用が由来してできる磁界を

$$\mathbf{H}_i = \lambda(\mathbf{M}_{i-1} + \mathbf{M}_{i+1}), \quad (\text{C.17})$$

と仮定する。ここで、 $\lambda$  はワイスの分子磁場による係数である。第  $i$  番目のスピンの磁化は、一般に図 C.3 の右下の座標系を使って次のように書ける。

$$\mathbf{M}_i = M_s(\sin \theta_i \cos \psi_i, \sin \theta_i \sin \psi_i, \cos \theta_i). \quad (\text{C.18})$$

電子スピンの動きが定常状態 即ち  $\theta_i$  の時間変化が無い状態にあり、バイアスによる磁化に比べ高周波磁化が極めて小さい 即ち  $\theta_i$  がほぼ 0 であり、隣接する電子間の位相差  $\Delta\psi$  がほぼ一定であることより、それぞれ次式が成り立つ。

$$\frac{d\theta_i}{dt} = 0, \quad (\text{C.19a})$$

$$\theta_i = \theta_{i+1} = \theta_{i-1} \cong 0, \quad (\text{C.19b})$$

$$\Delta\psi \equiv \psi_{i+1} - \psi_i \cong \psi_i - \psi_{i-1} \equiv k_x a, \quad (\text{C.19c})$$

ここで、 $k_x$  は静磁波の波数、 $a$  は図 C.3 に描かれた隣接する電子スピン間の距離である。これら式 (C.19) の仮定は、文献 [14] で用いられた仮定と同じである。式 (C.16) へ式 (C.17)、(C.18)、(C.19) を代入すると、次式を得る。

$$\frac{d\psi_i}{dt} = 2\gamma\mu_0\lambda M_s(1 - \cos k_x a). \quad (\text{C.20})$$

静磁波の波長がフェライトの格子間隔よりも十分長い従来の静磁波デバイスでは式 (C.20) の右辺はほぼ 0 になるが、他方、我々の提案しているナノ電極で静磁波を励振した場合は、式 (C.20) の右辺は無視できず、その角周波数分だけ磁気共鳴角周波数が上がる結果になる。その角周波数の増分を  $\omega_{he}(\beta) \equiv d\psi_i/dt$  とし、 $H_e \equiv \lambda M_s$  とすると、

$$\omega_{he}(\beta) = 2\gamma\mu_0 H_e(1 - \cos k_x a), \quad (\text{C.21})$$

が得られる。この  $\omega_{he}(\beta)$  が、従来の透磁率中の磁気共鳴角周波数  $\omega_h$  に加わり、新たな透磁率の式 (4.3)、(4.4) が得られる。

### C.3 静磁近似の補足説明

静磁波は波数  $\beta$  によって図 C.4 の横軸に沿って次の 3 つの領域に分ける事ができる。

- I) 角周波数  $\omega = \sqrt{\omega_h(\omega_h + \omega_j)}$  付近で、波数  $\beta$  は電磁波 (EMW) の波数  $\omega/c$  ( $c$ : 光速) に近い
- II) 角周波数  $\omega$  は、 $\sqrt{\omega_h(\omega_h + \omega_j)}$  から  $\omega_h + \omega_j/2$  までの範囲で、波数  $\beta$  は  $\pi/t$  (磁性体の厚み  $t$ ) 付近で、 $\pi/a$  (磁性体の格子定数  $a$ ) より十分小さい。
- III) スピン波 (SW) とも呼ばれ、角周波数  $\omega$  は、 $\omega_h + \omega_j/2$  から  $4\omega_e$  までの範囲で、波数  $\beta$  は  $\pi/a$  以下になっている。

本章で数値的に計算された結果では、CNT で励振される波数の範囲は領域 III で、磁性体が YIG の場合、その波長は格子定数  $a$  の 2 倍の約 2.5nm から、数 10nm (100GHz で約 30nm) までの範囲である。

### C.4 振幅 $D$ の導出

式 (4.10) の右辺は、 $N$  を無限大にすると、次の積分表示で書ける：

$$\begin{aligned} & \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{2N} e^{|\beta|(-r+x_i)} \tilde{J}_i^z(\beta) \\ &= \frac{I_0}{\pi} \int_0^\pi e^{|\beta|r(-1+\cos x)} \cos(\beta r \sin x) dx \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

ベッセルの積分表示を式 (C.22) の右辺に適用すると、次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{I_0}{\pi} \int_0^\pi e^{|\beta|r(-1+\cos x)} \cos(\beta r \sin x) dx \\ = I_0 e^{-|\beta|r} J_0(0) \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

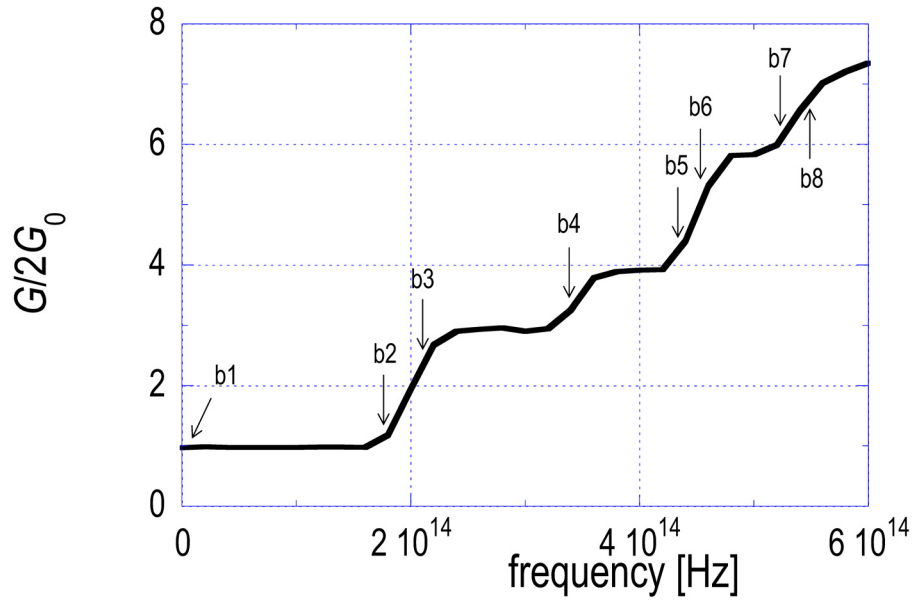
ここで、 $J_0(0)$  は 0 次ベッセル関数である。 $J_0(0) = 1$  である事に注意すると、式 (C.23) は、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{2N} e^{|\beta|(-r+x_k)} \tilde{J}_k^z(\beta) = I_0 e^{-|\beta|r}. \quad (\text{C.24})$$

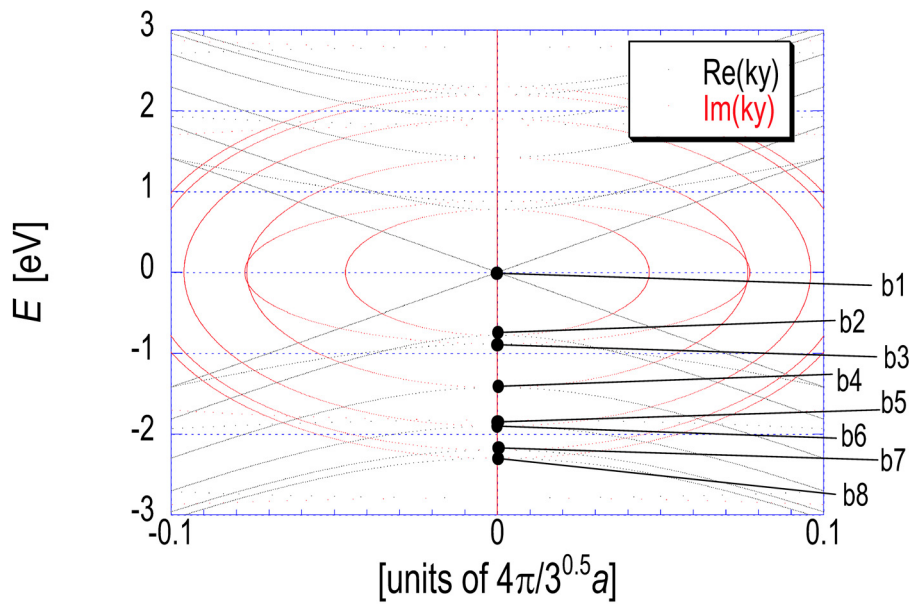
で表される。最終的に、振幅  $D$  は

$$D = -\frac{I_0 e^{-|\beta|r}}{4\pi j \beta F(\omega, \beta) p(\omega, \beta)}. \quad (\text{C.25})$$

となる。



(a)  $G$ - $f$  特性



(b) 分散曲線

図 C.2: tube(15, 0) CNT の (a) 微分コンダクタンス  $G^1$ -周波数  $f$  特性と、(b) 分散曲線 (直流成分 ( $l = 0$  の項) のみ表示);  $E_F = 0\text{eV}$ ,  $V_0 = 10\mu\text{V}$ ,  $V_1 = 1\text{pV}$ ,  $N_\omega = 30$ ,  $N = 5$ ,  $T = 300\text{K}$

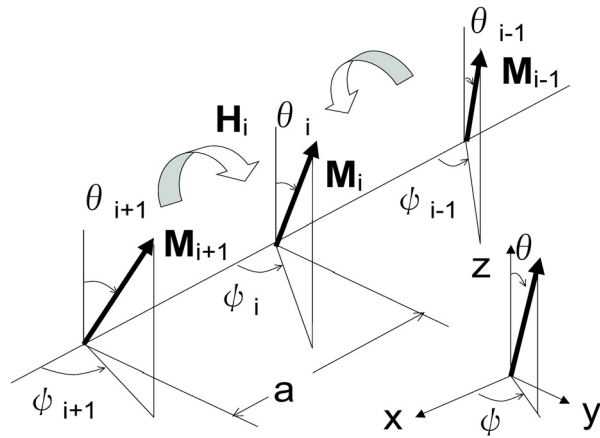


図 C.3: z 方向に磁化されたフェライトのスピンの交換相互作用による共鳴周波数の増大を解くための概念モデル。

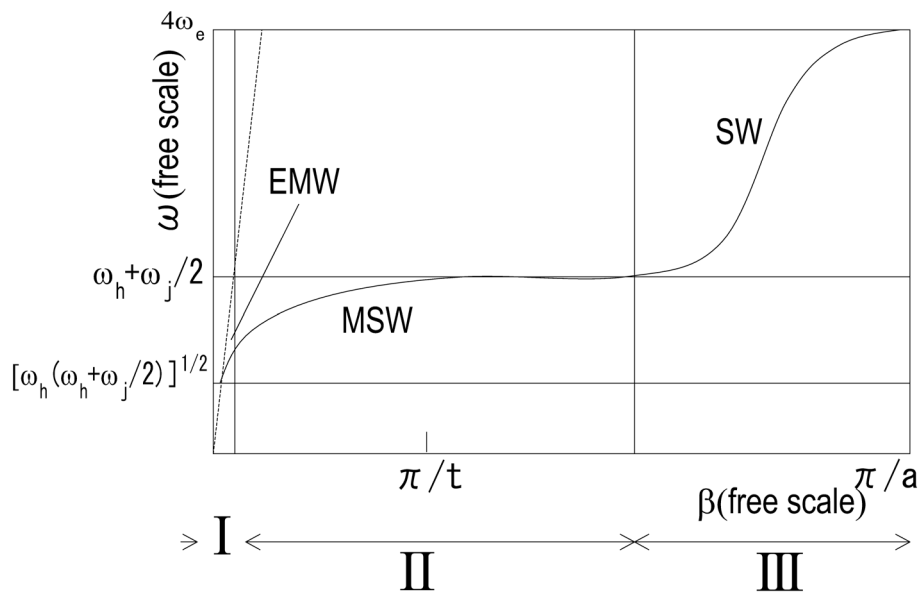


図 C.4: 分散曲線, 電磁波から nm 波長の静磁波まで。