

カーボンナノチューブの芯へセレン、テルルらせんを入れた系の電子状態計算

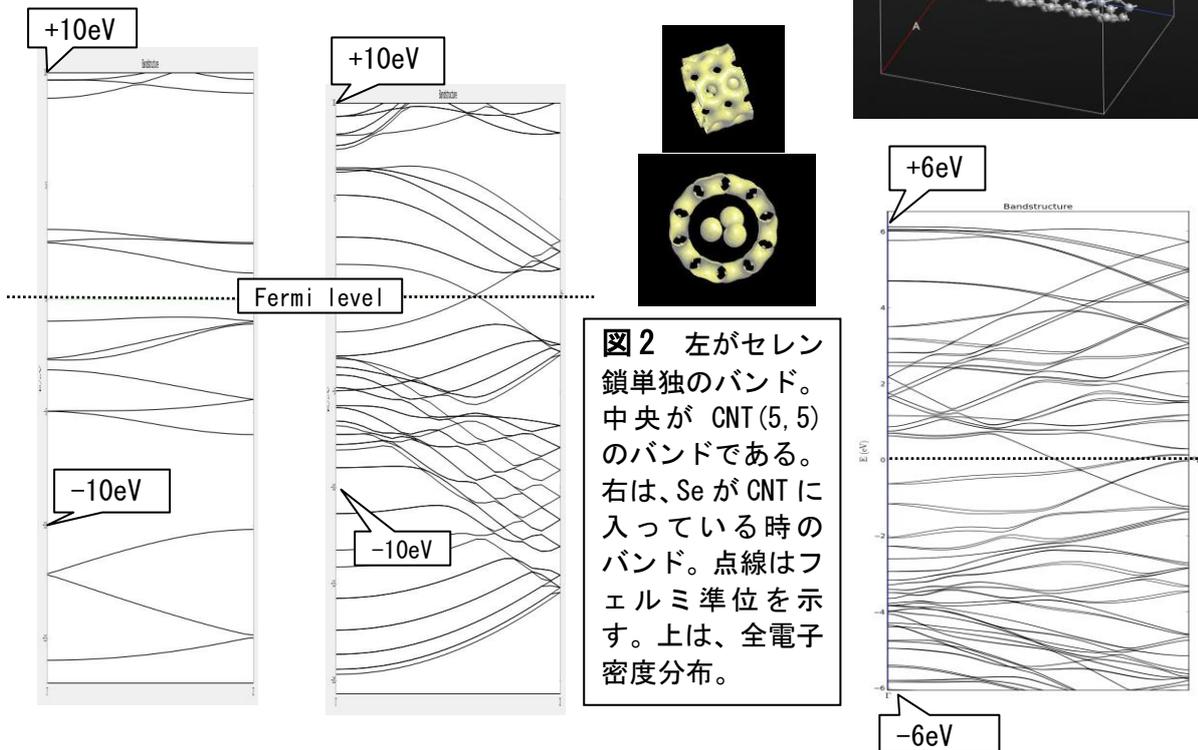
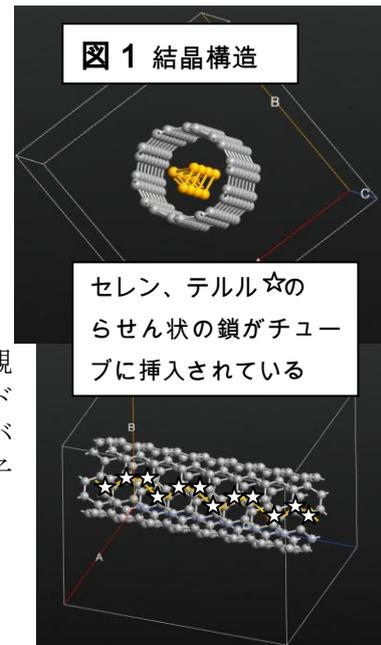
夏目雄平

千葉大学理学研究科(〒263-8522 千葉市稲毛区弥生町 1-33)

【緒言】

最近、密度汎関数法に基づく、第一原理計算による電子状態の計算が、市販のアプリケーションソフトによって、容易に実行出来るようになった[1]。それを使って、最先端課題に挑戦する一例を示す。カーボンナノチューブ (CNT) は、任意の太さのものが作れるようになりつつある[2]が、ここへ、鎖状高分子周期系である硫黄を挿入した系も報告されている[3]。CNT の持つ電気伝導特性のすぐれた点は既に応用面の展開をもたらしており[2]、挿入した高分子がどのような作用するかは、極めて重要な課題である[4,5]。さらには、同じカルコゲンであるセレン

(Se)、テルル(Te)を挿入した系は、らせんの性格の反映という観点からも興味深い。そこで、本講演では、電子エネルギーバンド計算を行う。状態密度、電子の空間分布密度、Fermi 面近傍のバンドの Bloch 状態を解析することによって、芯にある鎖状系電子と CNT の電子状態の混合の仕方を詳細に論じることが出来る。



【方法】 Quantum Wise Japan 製のソフト[1]を用いた。実験では、Se を内包した CNT の直径が 6.8nm と報告[3]されているので、対応する直径を持つカイラル数(n,m)=(5,5)の CNT を用いる。図1には系の様子を示している。さらに、Se, Te 高分子を挿入した際に、らせん構造の周期が CNT の 2 倍になるように配置し、この条件下での最適化を行った。特に Te の場合はスピン軌道相互作用の取り込みが必須である[1]。

【結果】

■まず、Se 単独の直線鎖の電子エネルギーバンド構造を図 2 右に記す。鎖を構成する原子間は強い共有結合で結ばれていて、フェルミエネルギー付近は主として最外殻の 4p 電子の軌道である。図 2 中央が、CNT(5,5) のバンド構造である。ブリルアンゾーンの Γ -Z 間の 2/3 でバンドが交差している。これはグラフェンの Dirac K 点に対応し、線形の分散になっている。図 2 右は、セレンらせん状高分子を CNT(5,5) に挿入した場合の系のバンド構造である。ここで、図 2 中に比べて、ブリルアンゾーンは半分に折りたたまれている。

■次に、Te を挿入した系についてバンド構造を図 3 左に示す。このフェルミ面付近を拡大したものが図 3 中央である。このフェルミ面近傍で、波数がブリルアンゾーンの 70% でのブロッホ状態を右に描く。フェルミ面近傍では、Te と CNT の電子状態はかなり混じり合っている。

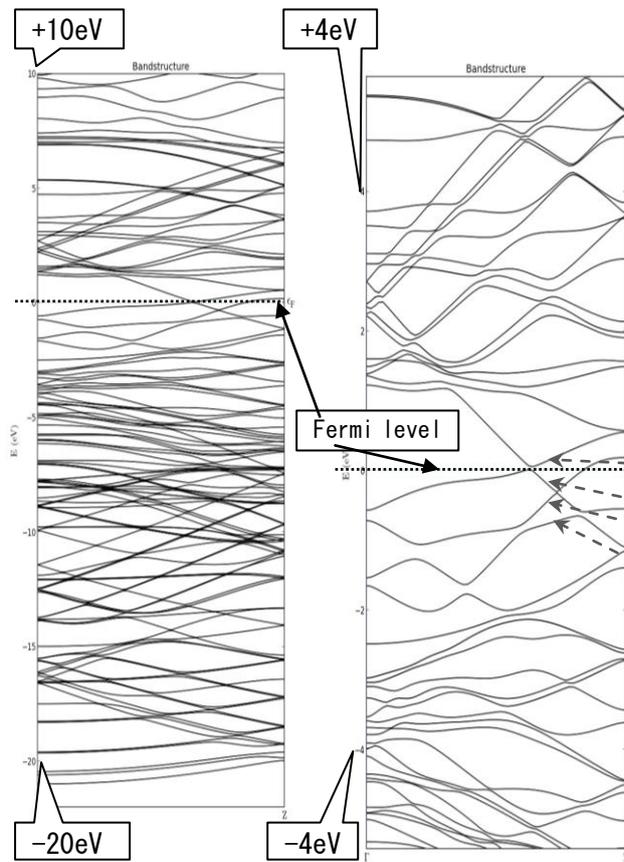


図 3 Te を CNT (5, 5) へ挿入した系のバンド構造。左が全構造で、中央はフェルミ面付近を拡大したもの。点線はフェルミ準位。右はフェルミ面付近のバンドのブロッホ状態を描いたもの上から 178, 176, 174, 172 番目のバンドを描いている。176 番目のバンドが純 CNT 的であるが、他は、Te と CNT の状態はかなり混合している。



Bloch 状態の図は CNT の軸方向から見たもの。中心が Te の軌道である。

参考文献

[1] Atomistix ToolKit version 2014.2, QuantumWise A/S (www.quantumwise.com).
M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P. Ordejo'n, J. Taylor, and K. Stokbro,
Phys. Rev. **B 65**, 165401 (2002). <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.65.165401>>

[2] テキストの例 ; H.-S. Philip Wong and Deji Akinwande, "Carbon Nanotube and Graphene Device Physics" (Cambridge University Press. Press, 2011).

[3] T. Fujimori, A. Morelos-Gomez, Z. Zhu, H. Muramatsu, R. Futamura, K. Urita, M. Terrones, T. Hayashi, M. Endo, S. Y. Hong, Y. C. Choi, D. Tomanek & K. Kaneko, "Conducting linear chains of sulphur inside carbon nanotubes", Nature Commun. 4:2162 (2013) doi 10.1038/ncomms 3162.
<http://www.nature.com/ncomms/index.html> 信州大学エキゾチック・ナノカーボンの創成と応用プロジェクト拠点 (長野市)

[4] Y. Natsume, "Ab initio calculation for electronic bands of CNT in which the chain of sulphur is inserted" 2P-13, The 48th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium, 21-23 Feb. 2015, Tokyo University, Hongo.

[5] 夏目雄平、日本コンピュータ化学会 2014 春季年会 1P17、および 2014 秋季年会 2p14.