

原子鎖の電子輸送解析における磁場の影響について

清水 共*

Influence of a Static Magnetic Field in the Electronic Transport Characteristics of Atomic Chains

Tomo SHIMIZU

Abstract

In a static magnetic field, how to calculate the motion of an electron in atomic chains using the tight-binding model is reported. The transmission and the reflection probabilities are analyzed for the two-row atomic chain cross with and without the magnetic field. The motion of a charged particle influenced by classical mechanics in the magnetic field is confirmed in the atomic chain cross.

Key Words: tight-binding approximation, static magnetic field, atomic chain, symmetrical gauge

1 はじめに

ナノメータ・スケール部品からなる未来の集積システムにおいて、量子デバイス同士は、究極の微細配線デバイスである原子鎖を通じ相互にデータ交換を行う事が予想される。これらの配線デバイスに関しては、配線の交差点での分岐制御と同様に、原子鎖に沿ったキャリア（信号）の輸送も重要な特性である。以前、原子鎖の輸送特性に関して零磁場に関する原子鎖十字路の特性解析を行っている¹⁾。

この報告書では、原子鎖の解析に磁場が与える影響に関して考察する。原子鎖の電子状態解析には、タイトバインディング近似法（強束縛近似）を使用する。系にかかる磁場は、原子鎖である系に垂直方向に存在する一様な静磁場を仮定して対称ゲージであるベクトルポテンシャルを用いたゲージ変換を利用することで解析する^{2, 3)}。

2 磁場中の原子鎖の解析

古典力学において、一様な静磁場 \vec{B} 中の速度 \vec{v} を持った自由電子の運動は、 \vec{B} と \vec{v} に垂直な方向にローレンツ力 $q\vec{v} \times \vec{B}$ が作用する。ここで、 q は電気素量である。

量子力学において、電子の運動はハミルトニアン H の運動量 \vec{p} を $\vec{p} - q\vec{A}$ に変換することで記述される。ここで、 \vec{A} はベクトルポテンシャル $\vec{B} = \text{rot} \vec{A}$ である。よって、磁場中の一電子状態のハミルトニアンは、

$$H = \frac{1}{2m_e} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + V \quad (1)$$

と記述される。ここで、 V は結晶ポテンシャル、 m_e は電子の質量である。

磁場中の原子鎖における電子状態を解析するために、二次元正方格子原子配置の電子状態をタイトバインディング近似法によって解析する。図 1(A) に示す二列原子鎖に対して垂直方向 (z 軸) に一様静磁場 $\vec{B} = (0, 0, B)$ を印加した原子鎖モデルを考え

*香川高等専門学校詫間キャンパス 電子システム工学科

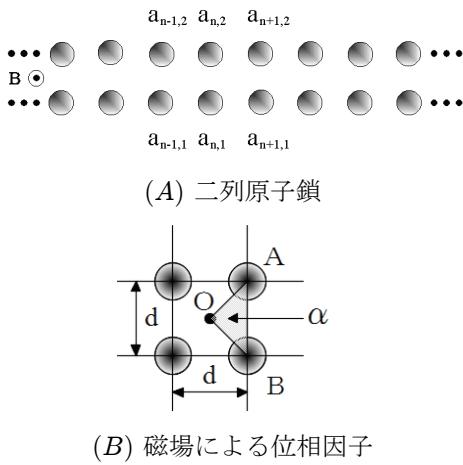


図 1: 波動解解析用の二列原子鎖と磁場の関係

る。ここで二列原子鎖を含む面を $x - y$ 平面とし, (n, m) の様に各サイトを表し, 各サイトに起因する量記号を添え字 m, n を用いて表す。ベクトルポテンシャルを対称ゲージとするとベクトルポテンシャルは,

$$\vec{A} = \frac{1}{2}B(-y, x, 0) \quad (2)$$

と表される。磁場中の電子のハミルトニアンを用いて, 原子鎖モデルに対するシュレーディンガー方程式を次式として記述する。

$$\left[\frac{1}{2m_e} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + \sum_{n,m} V_{nm}(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}) \quad (3)$$

ここで, V_{nm} は各サイトに対応する原子ポテンシャル, $\mathbf{r} = (x, y, z)$ である。

ゲージ変換を行った後のシュレーディンガー方程式を満足する系の波動関数 $\Phi(\mathbf{r})$ は, タイトバインディング法において次式のように静磁場におけるブロッホ関数として原子軌道の線形結合によって記述される。

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{n,m} a_{nm} \varphi_{nm} \\ &= \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{n,m} a_{nm} \exp\left(i\frac{q}{\hbar} G_{nm}\right) \phi_{nm} \end{aligned} \quad (4)$$

ここで, φ_{nm} は磁場中の原子軌道, ϕ_{nm} は零磁場に対する原子軌道, N, M はそれぞれ x, y 軸における原子の総数, a_{nm} は線形結合定数, G_{nm} は磁場における位相因子である。ゲージ変換は, 量子力学的ゲージ普遍性を保証し, オブザーバブルな量であるエネルギー E は, この変換に際して不变である。

変換された電子波動関数において, ベクトルポテンシャルは直接波動関数の位相を変化させる。各サイトの格子ベクトルを $\vec{R}(n, m)$ とすると, 式(4)の磁場による位相因子 G_{nm} は次のようにになる。

$$G_{nm} = \vec{A} \cdot \left\{ \mathbf{r} - \vec{R}(n, m) \right\} \quad (5)$$

式(3)に(4)を代入すると,

$$\begin{aligned} H\Phi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{n,m} a_{nm} \left[\frac{1}{2m_e} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + V \right] \\ &\quad \times \exp\left(i\frac{q}{\hbar} G_{nm}\right) \phi_{nm} \\ &= \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{n,m} a_{nm} \exp\left(i\frac{q}{\hbar} G_{nm}\right) \\ &\quad \times \left[\frac{1}{2m_e} \left\{ \vec{p} - q(\vec{A} - \nabla G_{nm}) \right\}^2 + V \right] \phi_{nm} \\ &= \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{n,m} a_{nm} \exp\left(i\frac{q}{\hbar} G_{nm}\right) \\ &\quad \times \left(\frac{1}{2m_e} \vec{p}^2 + V \right) \phi_{nm} \end{aligned} \quad (6)$$

ここで, $V = \sum_{n,m} V_{nm}(\mathbf{r})$ とする。

式(3)に, $\langle \exp(i\frac{q}{\hbar} G_{n'm'}) \phi_{n'm'} |$, すなわち, $\int d\mathbf{r} \exp(-i\frac{q}{\hbar} G_{n'm'}) \phi_{n'm'}^*$ を乗じる事で期待値を求める, 式(6)より次式の関係が得られる。

$$\begin{aligned} &\sum_{n,m} a_{nm} \exp\left(i\frac{q}{\hbar} (G_{nm} - G_{n'm'})\right) \\ &\quad \times \left\langle \phi_{n'm'} \left| \frac{1}{2m_e} \vec{p}^2 + \sum_{n,m} V_{nm} \right| \phi_{nm} \right\rangle \\ &= E \sum_{n,m} a_{nm} \exp\left(i\frac{q}{\hbar} (G_{nm} - G_{n'm'})\right) \\ &\quad \times \langle \phi_{n'm'} | \phi_{nm} \rangle \end{aligned} \quad (7)$$

タイトバインディング近似により, 上式(7)において各行列要素の値は最近接原子からの寄与のみが考慮される。すなわち, 重なり積分は $(n, m) = (n'm')$ の時のみ

$$\langle \phi_{n'm'} | \phi_{nm} \rangle = \langle \phi_{n'm'} | \phi_{n'm'} \rangle = 1 \quad (8)$$

それ以外は,

$$\langle \phi_{n'm'} | \phi_{nm} \rangle = 0 \quad (9)$$

となる。零磁場におけるハミルトニアン行列要素に対応する計算として, $(n, m) = (n'm')$ の時の孤立原子における価電子エネルギー準位に相当する ε_A ,

$$\left\langle \phi_{n'm'} \left| \frac{1}{2m_e} \vec{p}^2 + \sum_{n,m} V_{nm} \right| \phi_{n'm'} \right\rangle = \varepsilon_A \quad (10)$$

と、最近接原子からのトランスマッタ積分、

$$\left\langle \phi_{n'm'} \left| \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + \sum_{n,m} V_{nm} \right| \phi_{nm} \right\rangle = -t \quad (11)$$

を定義する。式(8)-(11)から、式(7)を再表記すると、

$$-t \sum_{n,m} a_{nm} \exp \left[i \frac{q}{\hbar} (G_{nm} - G_{n'm'}) \right] = E a_{n'm'} \quad (12)$$

が得られる。式(12)から、図1(A)に示す二列原子鎖の原子サイト $(n,1), (n,2)$ に対してシュレーディンガー方程式を展開した結果を次式に示す。

$$\begin{cases} E = -t \left[\frac{a_{n-1,2}}{a_{n,2}} e^{i\alpha} + \frac{a_{n+1,2}}{a_{n,2}} e^{-i\alpha} + \frac{a_{n,1}}{a_{n,2}} e^{-i\alpha(2n+1)} \right] \\ E = -t \left[\frac{a_{n-1,1}}{a_{n,1}} e^{-i\alpha} + \frac{a_{n+1,1}}{a_{n,1}} e^{i\alpha} + \frac{a_{n,2}}{a_{n,1}} e^{i\alpha(2n+1)} \right] \end{cases} \quad (13)$$

ここで、位相因子 α は次式の様に磁場による位相因子 G_{nm} によって表される値であり、例えば、原子鎖のチャネル方向の位相因子として、

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{q}{\hbar} (G_{n-1,2} - G_{n,2}) \\ &= -\frac{q}{\hbar} (G_{n-1,1} - G_{n,1}) = \frac{qBd^2}{4\hbar} \end{aligned} \quad (14)$$

の様に与えられる。ここで、 d は格子間隔であり、基準座標である原点は図1(B)の様に原子サイト間の中央に置かれる。ここで、無限長の原子鎖を仮定することで、式(13)からブロッホ関数の線形結合係数 a_{nm} に新たな制約を課す。エネルギー E がチャネル方向に対応する n によらないという条件から、係数 a_{nm} は次の関係を満足する。 a_{nm} はチャネル方向に対して等比数列である。よって、下式のように減衰項の係数 β と振動項の係数 k を用いて係数の関係式が導かれる。

$$\frac{a_{n\pm 1,m}}{a_{nm}} = (e^{\beta d} e^{ikd})^{\pm 1} \quad (15)$$

ここでは、原子鎖を電子が伝搬する最も単純なモデルとして、波動解のみを考慮する。よって、式(15)の等比数列は ($\beta = 1$)、すなわち、波動関数がチャネル内で減衰しないエネルギー領域を仮定する。式(13),(15)より、

$$\begin{aligned} \frac{a_2}{a_1} &= \cos(kd - 3\alpha) - \cos(kd + \alpha) \\ &\pm \sqrt{\{\cos(kd + \alpha) - \cos(kd - 3\alpha)\}^2 + 1} \end{aligned} \quad (16)$$

の関係が得られる。上式は原子鎖におけるチャネル幅方向の波動関数の係数の関係を与えている。ここで、 a_1, a_2 は線形結合係数の絶対値である。この係数とチャネル方向の係数の関係は次式となる。

$$\begin{cases} a_{n,2} &= a_2 e^{i(kd + 2\alpha)n} \\ a_{n,1} &= a_1 e^{i(kdn + \alpha)} \end{cases} \quad (17)$$

また、エネルギー分散関係は次式として導出される。

$$E = -t \left\{ \cos(kd - 3\alpha) + \cos(kd + \alpha) \right. \\ \left. \pm \sqrt{\{\cos(kd + \alpha) - \cos(kd - 3\alpha)\}^2 + 1} \right\} \quad (18)$$

ここで、式(18)のエネルギー分散関係と式(16)の波動関数の係数関係式における演算記号±は各々対応する。-と+のそれぞれが両式において対応するサブバンドを表す。この二つのサブバンドを区別するため、零磁場における原子鎖のチャネル幅方向の閉じ込め効果に由来した伝搬モード名として、エネルギー分散関係の式中の演算記号±における演算記号+の伝搬モードを *bonding*、演算記号-の伝搬モードを *antibonding* モードと名付ける。図2は、この二つのモードの波動関数を視覚的に分かりやすく表した直感的イメージ図である。これによっ

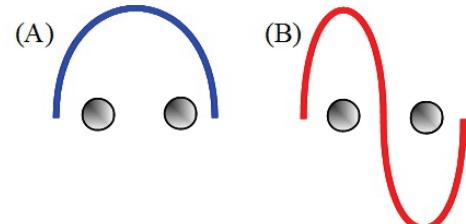


図2: 波動関数の直感的イメージ (A)*bonding* モード、(B)*antibonding* モード

て、式(18)から伝搬モードである二つのサブバンドのエネルギー分散関係はそれぞれ以下のように記述される。

- *bonding* サブバンド

$$E = -t \left\{ \cos(kd - 3\alpha) + \cos(kd + \alpha) \right. \\ \left. \pm \sqrt{\{\cos(kd + \alpha) - \cos(kd - 3\alpha)\}^2 + 1} \right\} \quad (19)$$

- antibonding サブバンド

$$E = -t \left\{ \cos(kd - 3\alpha) + \cos(kd + \alpha) - \sqrt{\{\cos(kd + \alpha) - \cos(kd - 3\alpha)\}^2 + 1} \right\} \quad (20)$$

図 3 に、磁場中の二列原子鎖に対するエネルギー分散関係を示す。(A) と (B) はそれぞれ、式 (19) と式 (20) の bonding サブバンドと antibonding サブバンドに対応している。式と図からも分かるように、磁場 (ここでは α) と波数 (k) に対して分散関係が周期関数となる。また、二つのサブバンド (bonding, antibonding) は決して交わらない。

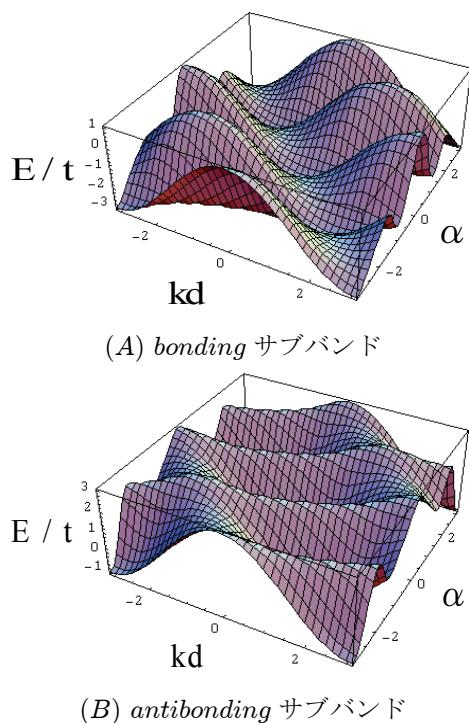


図 3: 磁場中の二列原子鎖のエネルギー分散関係 ($kd, \alpha, E/t$): 式 (18) を利用し、伝搬モードの波数 k と磁場による位相因子 α に対するエネルギー E/t を各々示す。(A) bonding 伝搬モード, (B) antibonding 伝搬モードのサブバンド

3 電子輸送における磁場の影響

図 4 に、実際に解析を行った二次元原子鎖十字路構造モデルを示す。 $x - y$ 平面上に十字路構造を持つ二列原子鎖があり、磁場が z 軸方向に存在する。十字路構造は解析するにあたり、図のように原子鎖

十字路を五つの領域 (I, II, III, IV, V) に分ける。領域 $I \sim IV$ は導波路である。各原子間隔はすべて d であり、簡単化のために系において十字路の中心に原点 O を設置する。ここで、 I 領域は電子の入射領域であり、交差点での電子波の反射が存在する。 III と IV 領域はサイド方向への透過領域である。 II は直進方向への透過領域である。 V 領域は十字路交差点領域である。電子波は赤で表される原子 (12 個の原子)，すなわち、交差点領域とその近傍領域でタイトバインディング近似による解析において交差点固有の特性を持つ。原子鎖十字路の輸送特性解析に

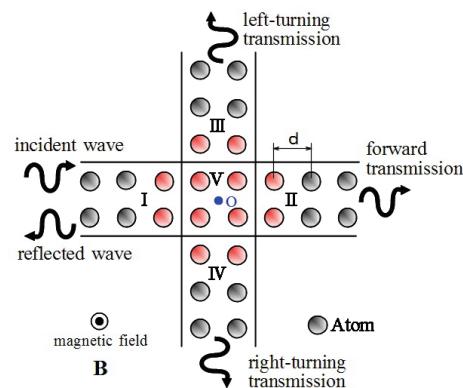


図 4: 磁場中の二列原子鎖十字路の輸送特性モデル：系 (原子鎖) に対して垂直方向に磁場 B が存在。

において、交差点から離れた領域 $I \sim IV$ (黒色の原子鎖) では 2 章で議論した原子鎖における電子状態を採用する。すなわち、導波路となる原子鎖中に存在する電子波は bonding と antibonding の二つの伝搬モードのみを持っている¹。

次に、図 4 に示す二列原子鎖中における輸送特性の計算手法を具体的に示す。ここでは、二列原子鎖十字路に bonding サブバンドに属する電子を入射する場合を議論する。入射領域である I 領域における波動関数 Φ_I は、入射波と反射波が存在するため次

¹ 2 章で議論したエネルギー分散関係式 (18)において、磁場 (位相因子 α) を考慮することで、伝搬モードのみが存在するエネルギー領域が存在する。ここではこのエネルギー領域を議論する。伝搬モード以外が存在するエネルギー領域においては他の議論が必要である。

式のように表される。

$$\begin{aligned} \Phi_I = & \frac{1}{\sqrt{2N}} \left\{ \sum_{n_I} e^{ik_b d n_I} \right. \\ & \times (D_{b1} e^{i\alpha} \phi_{n_I,1} + D_{b2} e^{i2\alpha n_I} \phi_{n_I,2}) \Big\} \\ & + R_b \frac{1}{\sqrt{2N}} \left\{ \sum_{n_I} e^{-ik_b d n_I} \right. \\ & \times (D_{b1} e^{-i\alpha} \phi_{n_I,2} + D_{b2} e^{-i2\alpha n_I} \phi_{n_I,1}) \Big\} \\ & + R_a \frac{1}{\sqrt{2N}} \left\{ \sum_{n_I} e^{-ik_a d n_I} \right. \\ & \times (D_{a1} e^{-i\alpha} \phi_{n_I,2} + D_{a2} e^{-i2\alpha n_I} \phi_{n_I,1}) \Big\} \end{aligned} \quad (21)$$

ここで、 R_a と R_b はそれぞれ *antibonding*, *bonding* モードの反射の振幅を表している。 α は式(14)によって定義した磁場による位相因子を表す。上式の右辺第一項が *bonding* 入射波を、第二項が *bonding* 反射波を、そして第三項が *antibonding* 反射波をそれぞれ示す。また、 D_{b1} , D_{b2} , D_{a1} , D_{a2} はチャネル幅方向のサイト間の波動関数の係数比を表した値であり、添え字の a は *antibonding*, b は *bonding* に対する係数を表し、それぞれ次式のように式(16)を規格化することによって与えられる。

$$\begin{aligned} D_{b1} &= \frac{1}{\sqrt{1+a_b^2}} \quad , \quad D_{b2} = \frac{a_b}{\sqrt{1+a_b^2}} \\ D_{a1} &= \frac{1}{\sqrt{1+a_a^2}} \quad , \quad D_{a2} = \frac{a_a}{\sqrt{1+a_a^2}} \end{aligned} \quad (22)$$

a_a , a_b は、それぞれ式(16)における *antibonding*, *bonding* サブバンドに対する a_2/a_1 の係数比を表す。また、図1における二列原子鎖の列の上、下に対する添え字2, 1は、電子波の進行方向に対して左側の原子鎖列を添え字2、右側の原子鎖列を添え字1にそれぞれ対応させる。ここで、 n_I は I 領域におけるチャネルに沿ったサイト番号であり、入射波の進行方向に沿って増加する。

一方で、直進方向の透過領域である II 領域での波動関数 Φ_{II} は次式となる。

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{II}} = & T_b^{\text{II}} \frac{1}{\sqrt{2N}} \left\{ \sum_{n_{\text{II}}} e^{ik_b d n_{\text{II}}} \right. \\ & \times (D_{b1} e^{i\alpha} \phi_{n_{\text{II}},1} + D_{b2} e^{i2\alpha n_{\text{II}}} \phi_{n_{\text{II}},2}) \Big\} \\ & + T_a^{\text{II}} \frac{1}{\sqrt{2N}} \left\{ \sum_{n_{\text{II}}} e^{-ik_a d n_{\text{II}}} \right. \\ & \times (D_{a1} e^{-i\alpha} \phi_{n_{\text{II}},1} + D_{a2} e^{-i2\alpha n_{\text{II}}} \phi_{n_{\text{II}},2}) \Big\} \end{aligned} \quad (23)$$

ここで、 T_b^{II} , T_a^{II} は、それぞれ *bonding*, *antibonding* モードの透過波の振幅を表す。 n_{II} は II 領域におけるサイト番号である。

サイドへの曲進透過である III 領域と IV 領域においては、式(23)において添え字 III と IV を II と置換することによって同様の式が与えられる。

最後に、原子鎖十字路の交差点 V 領域における波動関数 Φ_V を次式と置く。

$$\Phi_V = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{i=1}^4 S_i \phi_i \quad (24)$$

ここで、 ϕ_i と S_i は、それぞれ図4に示す二列原子鎖十字路における交差領域 V の四つの原子 $i (= 1, 2, 3, 4)$ の原子軌道と振幅を表している。

図4に示す交差点近傍領域として描いた12箇所の赤い原子サイトに対して、式(12)のように式(3)に示すシュレーディンガーハンマニ方程式の展開を行うと、式(13)のような独立な12個の方程式が得られる。この方程式の集合には、系に掛かる磁場 B とエネルギー(E/t)を変数としたとき、12個の未知数($S_1, S_2, S_3, S_4, R_a, R_b, T_a^{\text{II}}, T_b^{\text{II}}, T_a^{\text{III}}, T_b^{\text{III}}, T_a^{\text{IV}}, T_b^{\text{IV}}$)が存在する。 k_b と k_a は式(18)のエネルギー分散関係から E/t と α の関数として与えられ、同様に係数 D も式(22)から E/t と α の関数である。よって、上記される12個の未知数は、12個の独立な方程式を連立させることで、 E/t と α の関数として解かれる。

原子鎖十字路の輸送特性は、単位フラックスの入射に対する透過確率・反射確率を導入して議論する。フラックスの導入によって、直進方向の透過確率 $F^{\text{II}} (= |T_a^{\text{II}}|^2 + |T_b^{\text{II}}|^2)$ 、サイド方向への曲進透過確率 $F^{\text{III}} (= |T_a^{\text{III}}|^2 + |T_b^{\text{III}}|^2)$ 、 $F^{\text{IV}} (= |T_a^{\text{IV}}|^2 + |T_b^{\text{IV}}|^2)$ 、反射確率 $R (= |R_a|^2 + |R_b|^2)$ の関係から、次式の確率保存が満足される。

$$F^{\text{II}} + F^{\text{III}} + F^{\text{IV}} + R = 1 \quad (25)$$

次に、原子鎖十字路の輸送特性のシミュレーション結果を考察する。まず古典力学的に磁場中を運動する荷電粒子を考えてみる。図5に示すように、一般的に磁場が存在する領域を運動する荷電粒子(電子)はローレンツ力に支配され、荷電粒子は磁場と垂直方向に力を受ける。図4に示す原子鎖十字路についてはどうであろうか。単純に古典モデルを考慮すれば I 領域から交差点(V 領域)に入射された電子波は磁場によって III 領域に曲進することが予想される。しかし、ナノメータ・スケールの系において電子は”電子波”的な性質を有する”としての存在(性

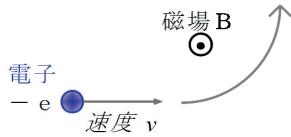


図 5: 古典力学的な磁場中の荷電粒子の運動

質) が大きく輸送特性に影響する。そこで、表 1 に原子鎖十字路の輸送特性として、各領域への透過確率を示す。ここで、系に入射する電子波は *bonding* モードとし、入射波のエネルギーを孤立原子の価電子のエネルギー準位に相当する式(10)で与えられる ε_A とする。 α は式(14)から与えられる磁場の大きさ

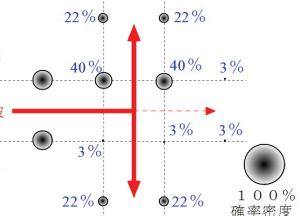
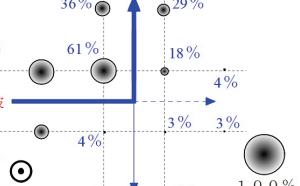
表 1: 原子鎖十字路の輸送特性；図 4 の系に ε_A を持つ *bonding* 波を入射した場合の各領域に対する透過確率と反射確率

磁場	α	F^{II}	F^{III}	F^{IV}	R
零	0	0.063	0.437	0.437	0.063
有限	0.05π	0.069	0.653	0.207	0.071

さに比例した位相因子である。原子鎖を構成する原子間隔を $d = 2 \text{ \AA}$ と仮定すると、磁場 B と位相因子 α との関係は、磁束量子 $\phi_0 = \frac{\hbar}{2e} \cong 2.068 \text{ [Tm}^2]$ を使用して、

$$\alpha = \frac{qBd^2}{4\hbar} = \frac{\pi * 10^{-20} [\text{m}^2]}{\phi_0} B \quad (26)$$

と表される。従って、 $B \cong 6.58 \times 10^4 \alpha \text{ [T]}$ となる。電子波の輸送は確率論的に扱われる。表から分かるように、磁場が存在しない系 ($\alpha = 0$) においては、十字路に入射した電子波の大部分が十字路の左右に均等に透過することが分かる。系に磁場が存在する場合 ($\alpha = 0.05\pi$) は、零磁場の場合と比較して F^{IV} の透過確率が減少し、 F^{III} の透過確率が増大する。この結果から、図 5 の古典力学的な電子の運動が原子鎖十字路においても再現されることが確認できる。図 6 は、十字路における電子波の輸送の様子を視覚的に見るために十字路交差点近傍領域に対して確率密度分布を模式的に描画したものである。図に示す円は、図の右側に描かれた 100% の確率密度を大きさの基準として、各原子サイトにおける確率密度を円の相対的な大きさとして描画している。赤丸は入射波のチャネル幅方向の係数比に関係した確率密度を表している。入射波として *bonding* 波が入射されているため、零磁場下ではチャネル幅方向に対

(A) 零磁場 ($\alpha = 0$)(B) 有限磁場 ($\alpha = 0.05\pi$)図 6: 原子鎖十字路交差点近傍領域における確率密度分布イメージ：図 4 の系に ε_A を持つ *bonding* 波を入射した場合

して対象な分布をとるが、有限磁場下では磁場の影響を受け *bonding* 波がチャネル幅方向に対して非対称な分布を示す。

4 おわりに

本報告では、磁場中に置かれた原子鎖の電子状態をタイトバインディング近似法を用いて解析する手法を報告した。原子鎖十字路における電子波の輸送特性は、古典力学的な磁場中を運動する荷電粒子モデルの運動を十分再現することを示した。原子鎖のバンド解析には伝搬モードである波動解のみが考慮されている。他のモードに関しては、いずれ何処かで報告する予定である。

参考文献

- 1) T. Shimizu, K. Natori and N. Sano: Jpn. J. Appl. Phys. Vol.40, pp.4489-4495 (2001).
- 2) R. Saito, M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus: Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, UK, Chap. 6, p.95 (1998).
- 3) L. Friedman and T. Holstein: Ann. Phys. **21**, p.494 (1963).