

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 $\phi_0 = \frac{h}{2e} \cong 2.068 [Tm^2]$ を使用して、

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

と表される。従って、 $B \cong 6.58 \times 10^4 \alpha [T]$ 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ン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、零磁場下ではチャンネル幅方向に対

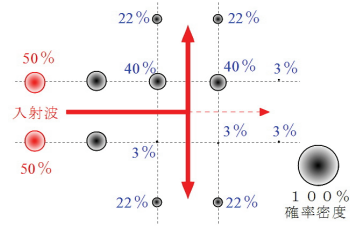
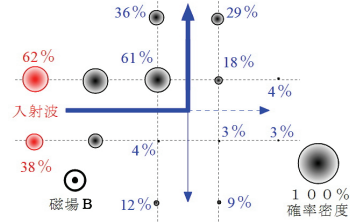
(A) 零磁場 ($\alpha = 0$)(B) 有限磁場 ($\alpha = 0.05\pi$)

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* 波がチャン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).