

ナノチューブの音響フォノンモード導出アルゴリズム

Extended XYZ algorithm for deriving phonon modes in a tube structure

北大院工、 西口規彦

Hokkaido Univ., Norihiko Nishiguchi

E-mail: nn@eng.hokudai.ac.jp

多くの物理現象にはフォノンが関わっており、その現象の定量的な解析・評価には正確なフォノンモードの導出が欠かせない。半導体ナノワイヤーを構成する物質は結晶構造に起因した弾性的異方性を有し、またワイヤー断面は、その成長方向に依存し様々な形状を示す。このような系のフォノンモードを解析的に求めることは難しいが、数値的に求めることは可能であり、xyz アルゴリズム [1,2] として知られている。この方法では、座標のべき級数 $x^l y^m e^{ikz}$ を基底関数として変位を展開し、変分原理により、固有モードとその分散関係を得ることが出来る。

この方法は、ナノワイヤー中のフォノンに関して、フォノン伝導の量子化 [3]、新たな電子-フォノン相互作用 [4]、超格子ナノワイヤーにおけるフォノンモード [5]、熱伝導現象などを明らかにしてきた。また最近では、中空構造をもつ GaN ナノチューブ [6] や CNT [7] の音響フォノンモードの導出にも用いられている。

このように、ナノワイヤーのフォノン研究に広く用いられてきたが、xyz アルゴリズムは上述の中空構造をもつナノチューブ [6,7] においては必ずしも正しいフォノンモードを与えないと考えられる。xyz アルゴリズム法では、格子変位を構成する基底関数 $x^l y^m e^{ikz}$ を、ナノワイヤー内で変位が発散しないよう、断面の座標 x および y の 0 または正のべき乗 ($m, n \geq 0$) の積で表している。内部が充填されている場合これで良いが、中空構造の場合、原点で特異点を持つ基底関数も解として許されるため、上記の基底関数のみでは完全系を成さない。このため、中空

構造のナノチューブの場合、座標の負のべき乗項を基底関数に加えなければ、フォノンモードは正しく得られないと考えられる。

以上のことを鑑み、今回の発表では、xyz アルゴリズムをチューブ構造に応用した場合の精度を明らかにすると共に、座標の負のべき乗項を基底関数に加えることによるフォノンスペクトルの精度の改善を試みる。具体的には、等方弾性体からなる円柱について、ポテンシャル理論を用いて解析的にフォノンモードと分散関係を求め、xyz アルゴリズムから得られた結果と比較し、精度を議論する。

結果として、チューブの内径が外径の 10% の場合に xyz アルゴリズム精度がもっとも悪くなり、内径が 40% になると両者の方法で得られた分散関係に相違がみられなかった。また、基底関数にチューブ内で発散する基底関数を加えることにより、チューブの内径が外径の 10% の場合のスペクトルの不一致は解消されることが確認された。

Reference

- [1] W. M. Visscher, A. Migliori, T. M. Bell, and R. A. Reinert, J. Acoust. Soc. Am. 90, 2154(1991).
- [2] N. Nishiguchi, Y. Ando and M. N. Wybourne, J. Phys.:Condens. Matt. 9, 5751(1997).
- [3] K. Schwab, E. A. Henriksen, et al., Nature 404(6781): 974-977 (2000).
- [4] N. Nishiguchi, Physica E 13, 1 (2002).
- [5] S. Mizuno and N. Nishiguchi, Journal of Physics: Condens. Matter 21, 195303(1)-(11)(2009).
- [6] D. Martinez-Gutierrez and V.R. Velasco, Surface Science 605, 24-31(2011).
- [7] G. Li, G.A. Lamberton Jr. and J.R. Gladden, J. Appl. Phys. 104, 033524(2008).