ひずみ変調効果を用いたカーボンナノチューブのコヒーレントフォノン輸送制御

Tuning of Coherent Phonon Transport in Carbon Nanotubes with Strain

東大工 [1], JST-CREST[2], 物材機構 [3] ○(P)大西 正人 [1], 塩見 淳一郎 [1,2,3]

Univ. of Tokyo [1], JST-CREST [2], NIMS[3], ○Masato Ohnishi[1], Junichiro Shiomi[1,2,3]

E-mail: shiomi@photon.t.u-tokyo.ac.jp

デバイスの微小化や高性能化に伴いナノスケールにおける熱輸送制御が重要となっており，近年，多結晶構造等のナノ構造体を用いたフォノンの平均自由行程の制御が可能になってきた[1]. 一方, 熱ダイオードや熱スイッチ等のフォノンを用いたより高度なデバイスを実現するためには, コヒーレント効果を用いたフォノン輸送制御が必要になると考えられるが，熱フォノンの波長は音や光の波長と比較して非常に短く(1-10 nm), コヒーレント効果の計測が非常に困難である[2]. 最近，児玉等の計測により C_{60} フラーレン内包によりカーボンナノチューブ（CNT）の熱伝導率と熱伝導率温度依存性のピーク温度が減少することが明らかになった[3]．本研究では，フラーレン内包により CNT 内部に周期ひずみ場が発生することで，C_{60} 内包 CNT（C_{60} ピーポッド）が人工超格子として振る舞うことを明らかにしたので，その詳細を報告する．

非平衡分子動力学法を用い，C_{60} ピーポッドの熱伝導率を解析した結果を図 1(a)に示す．まず，単層 CNT とフラーレン間の層間相互作用に用いた Lennard-Jones(12-6)ポテンシャルの長さスケールを変化させることで, 実験で観察されたフラーレン内包による CNT の変形を再現した. さらに, 変形の実験値を再現した際に熱伝導率の減少率も実験結果とよく一致したことから，CNT とフラーレンの相互作用により CNT の熱伝導率が減少することが明らかになった．さらに，温度 300 K におけるフォノン分散を解析したところ, 図 1(b)のように zone-folding 効果によりフォノンギャップが発生した．以上より，ナノスケールの周期ひずみ場を用いることでコヒーレントフォノンの輸送制御が可能であることが明らかになった．

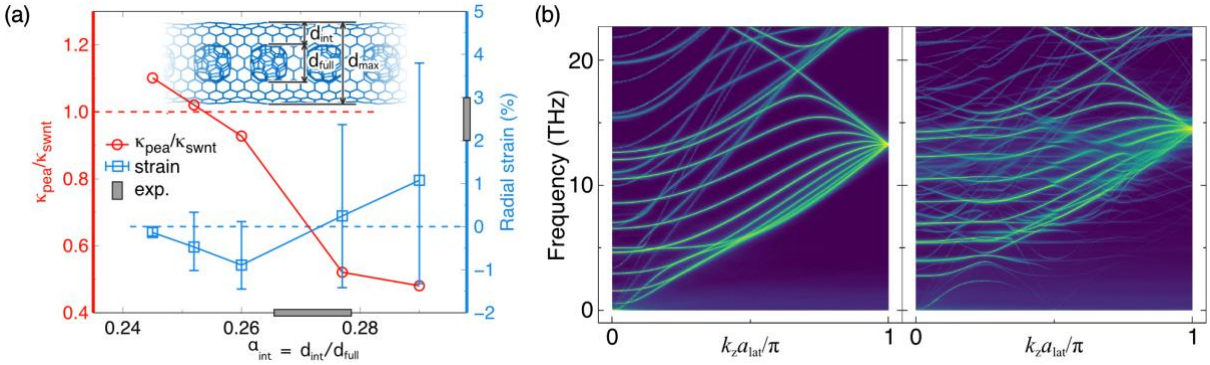

図 1　C_{60} フラーレン内包による CNT の熱輸送特性変化．(a) 層間相互作用の強さを変化させた時の CNT の変形と熱伝導率変化．(b) 単層 CNT（左）と C_{60} ピーポッド（右）のフォノン分散（半径方向モード）.

[1] J. Shiomi, APL Mater **4**, 1045404 (2016). [2] M. R. Wagner, et al., Nano Lett. **16**, 5661 (2016). [3] T. Kodama, et al., Nat. Mater. **295**, 828 (2017).

© 2018年 応用物理学会