窒素ドープした有限長 CNT の電気抵抗の温度依存性の評価

Temperature dependence of electrical resistance of nitrogen-substituted CNTs

東理大工 [1]，東理大総研 [2]　○(D)石関 圭輔 [1]，笹岡 健二 [2]，山本 貴博 [1,2]

Tokyo Univ. of Sci.[1], Tokyo Univ. of Sci. RIST[2], °Keisuke Ishizeki[1], Kenji Sasaoka[2], Takahiro Yamamoto[1,2]

E-mail: takahiro@rs.tus.ac.jp

背景

カーボンナノチューブ(CNT)は優れた電気伝導特性を有する材料であり、電界効果トランジスタや透明電極、熱電素子など様々な次世代電子デバイスへの応用が期待される。こうしたデバイス応用の際には、CNT の電気伝導率を向上させるために化学ドープした CNT がよく用いられる[1]。その一方で、ドープした有限長 CNT の電気抵抗 R は強い温度 T 依存性を示し、低温領域では温度増加に伴い抵抗は減少し($\partial R/\partial T<0$)、高温領域では増加する($\partial R/\partial T>0$)という特異な温度依存性を示すことが報告されている[2]。デバイス応用の観点から、ドープした CNT のこうした抵抗の温度依存性の物理的なメカニズムを理解することは重要であるが、その詳細は未だに不明である。

シミュレーション方法

本研究では、ドープした CNT の電気抵抗の要因となる不純物散乱とフォノン散乱の両方の効果を同時に取り込むことができる開放系シュレディンガー方程式と分子動力学法を組み合わせた量子輸送シミュレーション手法[3]を用いて、化学ドープした有限長 CNT の抵抗の温度依存性を調査した。本研究ではドーパントとして窒素を用い、ある固定した窒素濃度に対してランダム構造を 300 サンプル作製し、その平均抵抗値を評価した。

シミュレーション結果

はじめに、2 通りの CNT 長(65 nm, 173 nm)に対して、窒素(N)ドープ単層 CNT の抵抗の温度依存性を評価した(Fig.1)。短い CNT では全ての温度領域で抵抗は温度に比例して増加するのに対し、長い CNT では温度増加に対して低温領域では抵抗は減少し、高温領域では抵抗は増加するという、実験と一致する結果を得た。更に、こうした特性の物理的メカニズムを明らかにするため、様々な温度での抵抗の CNT 長依存性を評価し、こうした温度依存性の物理的メカニズムがドーパントによる不純物散乱が原因となる局在現象とフォノン散乱による拡散伝導のクロスオーバーであることを明らかにした。

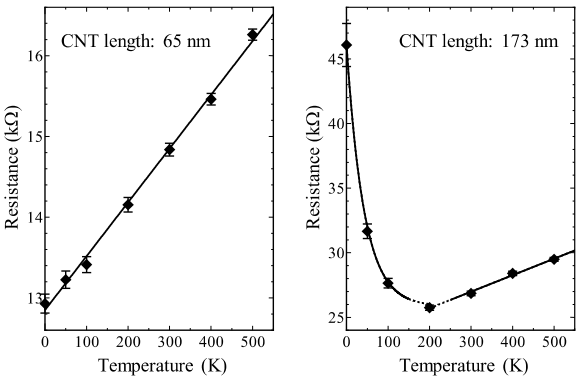

Fig.1 Temperature dependence of resistance of N-doped CNTs

参考文献

[1] Y.-M. Choi, *et al.*, Nano Lett. **3**, 839 (2003).

[2] K. Liu, *et al.*, Phys. Rev. B **63**, 161404(R) (2001).

[3] K. Ishizeki, *et al.*, Phys. Rev. B **96**, 035428 (2017).

© 2019年 応用物理学会