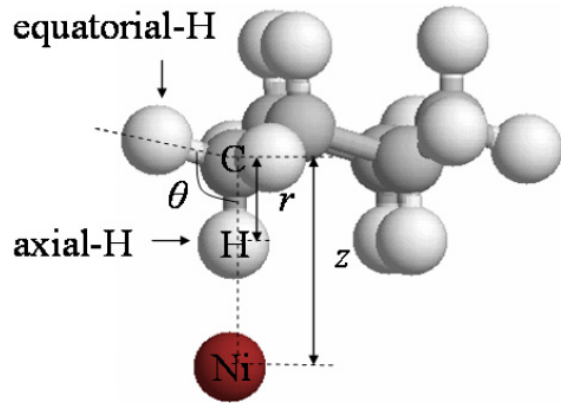
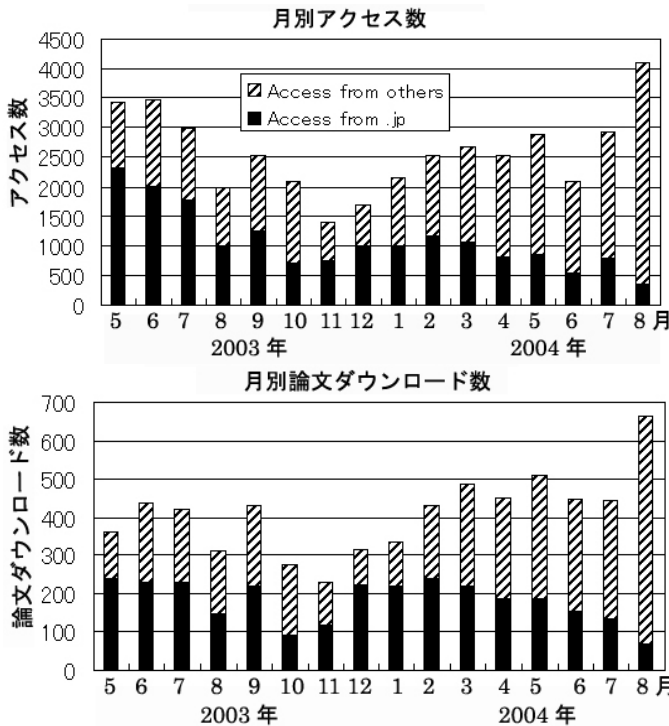


ホームページ : <http://www.sssj.org/ejssnt> 電子メール : ejssnt@sssj.org
 J-Stage アーカイブ : <http://ejssnt.jstage.jst.go.jp>

アクセス・論文ダウンロード数 月別統計



ナノ構造体内での(永久)ループ電流の起源

A Novel Viewpoint for Source-drain Driven Current inside Triangular Nanographene : Close Relationship with Magnetic Current (Regular Paper)

<http://dx.doi.org/10.1380/ejssnt.2004.205>

K. Tagami and M. Tsukada,

Vol. 2, pp. 205-209 (8 September, 2004)

触媒反応での触媒原子のスピンの偏極効果

Cyclohexane Dehydrogenation Process Design Using Ni - Spin Polarization Effects - (Superexpress Letter)

<http://dx.doi.org/10.1380/ejssnt.2004.200>

M. Tsuda, W. A. Diño, S. Watanabe, H. Nakanishi, and H. Kasai, Vol. 2, pp. 200-204 (4 September, 2004)

シクロヘキセン分子 (C_6H_{12}) は常温常圧で液体であり、化学反応 $C_6H_{12} \rightarrow C_6H_6 + 3H_2$ で水素を取り出せることから燃料電池のための水素貯蔵物質として注目されている。この反応には Pt などの貴金属が用いられ、しかも高温条件が必要とされるが、ここではもっと安価な触媒を探索するとともに脱水素反応過程を調べるため、Ni 原子と C_6H_{12} 分子の相互作用を理論的に調べた。密度汎関数理論にもとづく全エネルギー計算によってスピン三重項と三重項状態についてポテンシャルエネルギー面を求めて反応経路を調べた。 C_6H_{12} 分子が Ni 原子に近づくと、C-H 結合が切れて H 原子が Ni 原子によって引き抜かれ、Ni-H 結合が形成される。その結果、反応中間体 C_6H_{11} が形成され、Ni 原子から遠ざかる。そのとき、スピン三重項状態の場合には、エネルギー障壁無しで C_6H_{11} と Ni-H が遠ざかることがわかった。それは、Ni 原子と C 原子に存在する上向きスピン同士の反発に起因することがわかった。

巨大分子にソース・ドレイン電極をつけて電流を流し込むと、量子干渉性のために、その電流よりはるかに大きなループ電流が分子内に誘起されることが知られており、これを利用した分子メモリーなどのアイデアも提案されている。一方、分子に磁場を印加すると、やはりループ電流である反磁性電流が流れる。実は、この2つのループ電流は同じ物理的起源を持つことが、ナノスケールのグラフェンシートでの量子伝導の理論的解析によって明らかにされた。つまり、時間反転対称性が破れるために、2重縮退した2つの状態の縮退が解け、その結果、反対向きに流れるループ電流の相殺が完全でなくなり、ネットのループ電流が現れるのである。これを実験的に実証するには、ナノスケールで位置分解し、さらにエネルギー分解した電流の測定が必要である。

