

# 科技部補助專題研究計畫成果報告 期末報告

## 奈米碳管鋸齒邊界態之性質分析

計畫類別：個別型計畫  
計畫編號：MOST 106-2112-M-003-009-  
執行期間：106年08月01日至108年06月30日  
執行單位：國立臺灣師範大學物理學系（所）

計畫主持人：陳穎叡

計畫參與人員：碩士班研究生-兼任助理：王俊凱  
碩士班研究生-兼任助理：詹敦皓

報告附件：出席國際學術會議心得報告

中華民國 108 年 10 月 01 日

中文摘要：依本計畫提案，我們已設法了解之前我們在緊束模型框架下使用疊代方法所得到的，具有鋸齒切口之奈米碳管的邊界態密度。具切口的奈米碳管可被視為是被擴張的類一維系統，並且可以用類似處理半無窮長的二聚化聚乙烯鍊的方式來了解，其邊界態實為拓樸性質之展現。我們利用已了解之塊材電子態，取符合邊界條件之線性組合，以積分法計算塊材電子態在所有態中的貢獻成分。

中文關鍵詞：奈米碳管切口，邊界態

英文摘要：Following what we have proposed, we have investigated the edge state DOS (density of state) we obtained previously via the iteration method in the tight binding model, for various CNT's (carbon nano-tubes) that display a zigzag cut. As an expanded quasi-one-dimensional system, the cut CNT's should be interpreted in the similar spirit as how one treats the semi-infinite dimerized polyene chain problem, where the edge state can be understood as a topological issue. Using the known bulk states, we have taken the allowed linear combinations that fit the boundary conditions, and studied the contribution of bulk states via the integration method.

英文關鍵詞：cut CNT, edge states

## 科技部補助專題研究計畫成果報告

(期中進度報告/期末報告)

(計畫名稱)

計畫類別：個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：MOST 106 - 2112 - M - 003 - 009 -

執行期間：106 年 08 月 01 日至 108 年 06 月 30 日

執行機構及系所：國立臺灣師範大學物理學系

計畫主持人：陳穎叡

共同主持人：

計畫參與人員：王俊凱，詹敦皓

本計畫除繳交成果報告外，另含下列出國報告，共 1 份：

執行國際合作與移地研究心得報告

出席國際學術會議心得報告

出國參訪及考察心得報告

中 華 民 國 108 年 09 月 30 日

## 科技部補助專題研究計畫成果自評表

請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現（簡要敘述成果是否具有政策應用參考價值及具影響公共利益之重大發現）或其他有關價值等，作一綜合評估。

1. 請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況作一綜合評估

- 達成目標
- 未達成目標（請說明，以 100 字為限）
- 實驗失敗
  - 因故實驗中斷
  - 其他原因

說明：

2. 研究成果在學術期刊發表或申請專利等情形(請於其他欄註明專利及技轉之證號、合約、申請及洽談等詳細資訊)

- 論文：已發表 未發表之文稿 撰寫中 無
- 專利：已獲得 申請中 無
- 技轉：已技轉 洽談中
- 無

其他：(以 200 字為限)

3. 請依學術成就、技術創新、社會影響等方面，評估研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性，以 500 字為限）。

本文討論奈米碳管邊界態對分子傳輸的影響，這類論文相對少有，因此我們相信此項研究應該有一定的學術或應用價值。

4. 主要發現

本研究具有政策應用參考價值：否 是，建議提供機關\_\_\_\_\_

(勾選「是」者，請列舉建議可提供施政參考之業務主管機關)

本研究具影響公共利益之重大發現：否 是

說明：(以 150 字為限) 屬於物理學方面的學術研究，理論計算階段的結果，不便貿然將研究成果指向政策或公共利益。

## 科技部補助專題研究計畫成果彙整表

計畫主持人：			計畫編號：				
計畫名稱：							
成果項目			量化	單位	質化 (說明:各成果項目請附佐證資料或細項說明,如期刊名稱、年份、卷期、起訖頁數、證號...等)		
國內	學術性論文	期刊論文		0	篇	請附期刊資訊。	
		研討會論文		0			
		專書		0	本	請附專書資訊。	
		專書論文		0	章	請附專書論文資訊。	
		技術報告		0	篇		
		其他		0	篇		
	智慧財產權及成果	專利權	發明專利	申請中	0	件	請附佐證資料,如申請案號。
				已獲得	0		請附佐證資料,如獲證案號。
			新型/設計專利		0		
		商標權		0			
		營業秘密		0			
		積體電路電路布局權		0			
		著作權		0			
		品種權		0			
		其他		0			
		技術移轉	件數		0		件
	收入		0	千元	1. 依「科技部科學技術研究發展成果歸屬及運用辦法」第2條規定,研發成果收入係指執行研究發展之單位因管理及運用研發成果所獲得之授權金、權利金、價金、股權或其他權益。 2. 請註明合約金額。		
	國外	學術性論文	期刊論文		0	篇	請附期刊資訊。
			研討會論文		0		
			專書		0	本	請附專書資訊。
專書論文			0	章	請附專書論文資訊。		
技術報告			0	篇			
其他			0	篇			
智慧財產權及成果		專利權	發明專利	申請中	0	件	請附佐證資料,如申請案號。
				已獲得	0		請附佐證資料,如獲證案號。

		新型/設計專利	0		
		商標權	0		
		營業秘密	0		
		積體電路電路布局權	0		
		著作權	0		
		品種權	0		
		其他	0		
	技術移轉	件數	0	件	
收入		0	千元	<p>1. 依「科技部科學技術研究發展成果歸屬及運用辦法」第2條規定，研發成果收入係指執行研究發展之單位因管理及運用研發成果所獲得之授權金、權利金、價金、股權或其他權益。</p> <p>2. 請註明合約金額。</p>	
參與計畫畫人力	本國籍	大專生	0	人次	
		碩士生	2		
		博士生	0		
		博士後研究員	0		
		專任助理	0		
	非本國籍	大專生	0		
		碩士生	0		
		博士生	0		
		博士後研究員	0		
		專任助理	0		
其他成果 (無法以量化表達之成果如辦理學術活動、獲得獎項、重要國際合作、研究成果國際影響力及其他協助產業技術發展之具體效益事項等，請以文字敘述填列。)					

## 科技部補助專題研究計畫出席國際學術會議心得報告

日期： 年 月 日

計畫編號	MOST 106-2112-M-003-009-		
計畫名稱	奈米碳管鋸齒邊界態之性質分析		
出國人員姓名	陳穎叡	服務機構及職稱	國立台灣師範大學物理學系
會議時間	107年3月13日 至 107年3月17日	會議地點	美國洛杉磯
會議名稱	(中文) (英文)APS March Meeting		
發表題目	(中文) (英文)Transport through Polyene Junctions in between Angled-cut Armchair Carbon Nanotubes		

一、參加會議經過

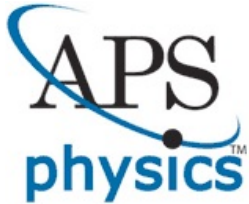
二、與會心得

三、發表論文全文或摘要

We investigate the surface Green's function and layer-by-layer local density of states (LDOS) of the armchair carbon nanotube (CNT) leads from the rim into the bulk tube. We find the 3-layer cycle oscillation of the cross-cut cases, and that the angled-cut cases, exhibiting a zigzag rim at the cut, possess not only the oscillation, but also evanescent edge states that decay into the bulk tube.

We study the single-polyene and two-polyene molecular junctions bridging the angled-cut armchair CNT leads, with both *ab initio* and tight-binding model approaches, and look into the interference effect between effective transport channels.





# American Physical Society

One Physics Ellipse • College Park, MD 20740-3844 • [www.aps.org](http://www.aps.org)

**TO:** **Yiing-Rei Chen**  
National Taiwan Normal Univ  
Department of Physics, 88, Sec.4, Ting-Chou Rd.  
Taipei, 11677  
Taiwan, Republic of China

**FROM:** **Terri Olsen**  
Director of Meetings and Conventions

**DATE:** January 06, 2018

**SUBJECT:** **Letter of Invitation to Attend the Annual March Meeting of the American Physical Society**

---

You are cordially invited to attend the March Meeting 2018 of the American Physical Society (APS) to be held **March 5-9, 2018** in Los Angeles, California, USA.

The APS March Meeting is the largest and most prestigious meeting of physicists in the world. More than 8,000 papers will be presented by eminent scientists in the field of physics, including condensed matter physics, materials physics, biological physics, chemical physics, polymer physics, magnetism, and computational physics.

For more information, please visit the conference website:

<http://www.aps.org/meetings/march/index.cfm>

We look forward to seeing you in Los Angeles in March.

Sincerely,

A handwritten signature in black ink that reads "Terri Olsen".

Terri Olsen  
Director of Meetings and Conventions

# MARCH MEETING 2018 LOS ANGELES MARCH 5-9

(/meetings/march/)

**About**  
(/meetings/march/index.cfm)

**Schedule**  
(/meetings/march/schedule.cfm)

**Abstracts**  
(/meetings/march/abstracts.cfm)

**Registration**  
(/meetings/march/registration.cfm)

**Hotel & Travel**  
(/meetings/march/hotel-travel.cfm)

**Meeting Services**  
(/meetings/march/services.cfm)

**Exhibits**  
(/meetings/march/exhibits.cfm)

## APS March Meeting 2018 Los Angeles, California March 5-9, 2018

The APS March Meeting 2018 will bring together more than 10,000 physicists, scientists, and students from all over the world to share groundbreaking research from industry, universities, and major labs. All meeting participants are expected to abide by the [Code of Conduct for APS Meetings \(https://www.aps.org/meetings/policies/code-conduct.cfm\)](https://www.aps.org/meetings/policies/code-conduct.cfm).

### Meeting Location

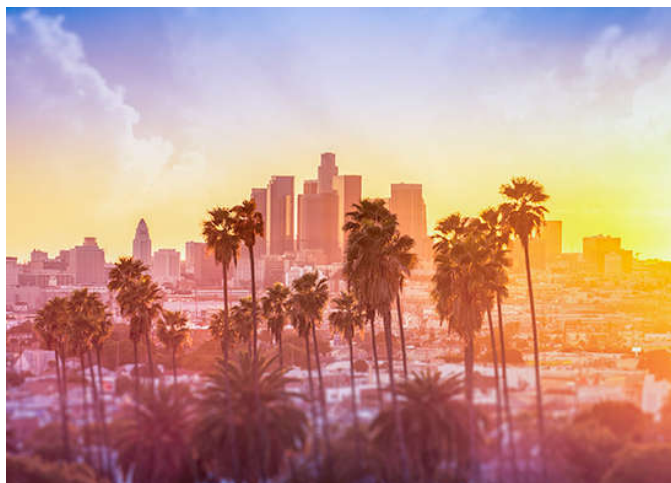
- Venue: [Los Angeles Convention Center \(LACC\) \(https://goo.gl/maps/7bU7KsWdfZT2\)](https://goo.gl/maps/7bU7KsWdfZT2)
- Headquarter Hotel: [JW Marriott Hotel Los Angeles \(https://goo.gl/maps/LrjSmRmda2P2\)](https://goo.gl/maps/LrjSmRmda2P2)

### Explore the Meeting

- [View the Schedule of Events \(/meetings/march/schedule.cfm\)](/meetings/march/schedule.cfm)
- [View the Scientific Program \(http://meetings.aps.org/Meeting/MAR18/\)](http://meetings.aps.org/Meeting/MAR18/)

### Free Wi-Fi at the Meeting

- Network: APS March Meeting
- Password: apsmarch



### Mobile App

The **Meetings@APS** mobile app allows attendees to view an APS meeting bulletin on any iOS or Android mobile device.

**Get the Mobile App (/meetings/march/app.cfm)**

### Code of Conduct for APS Meetings

All meeting participants are expected to conduct themselves in a professional manner and abide by the [Code of Conduct for APS Meetings \(/meetings/policies/code-conduct.cfm\)](/meetings/policies/code-conduct.cfm).

**View the Code of Conduct (/meetings/policies/code-conduct.cfm)**

### Check-in Faster

If you have preregistered, have your [registration receipt \(/memb-sec/meeting/startpage.cfm?event\\_id=1239\)](/memb-sec/meeting/startpage.cfm?event_id=1239) and/or a photo ID with you when you check-in to make the process go faster.

**Download Registration Receipt (/memb-sec/meeting/startpage.cfm?event\_id=1239)**



### Follow Us & Join the Conversation

On Twitter: [@APSmeetings \(https://twitter.com/APSmeetings\)](https://twitter.com/APSmeetings)

Official: [#apsmarch \(https://twitter.com/apsmarch\)](https://twitter.com/apsmarch)

[/search?f=tweets&vertical=default&q=%23apsmarch&src=typd](https://twitter.com/apsmarch)

## Bulletin of the American Physical Society

### APS March Meeting 2018

Monday–Friday, March 5–9, 2018; Los Angeles, California

#### Session T60: Poster Session III

1:00 PM, Thursday, March 8, 2018

LACC Room: West Hall A

#### **Abstract: T60.00198 : Ab initio and Theoretical Study on Electron Transport through Polyene Junctions in between Angled-cut Carbon Nanotubes\***

← Abstract →

#### **Presenter:**

Yiing-Rei Chen  
(Physics, National Taiwan Normal Univ)

#### **Author:**

Yiing-Rei Chen  
(Physics, National Taiwan Normal Univ)

We investigate the surface Green's function and layer-by-layer local density of states (LDOS) of the armchair carbon nanotube (CNT) leads from the rim into the bulk tube. We find the 3-layercycle oscillation of the cross-cut cases, and that the angled-cut cases, exhibiting a zigzag rim at the cut, possess not only the oscillation, but also evanescent edge states that decay into the bulk tube. We study the single-polyene and two-polyene molecular junctions bridging the angled-cut armchair CNT leads, with both *ab initio* and tight-binding model approaches, and look into the interference effect between effective transport channels.

\*This work was supported by the Ministry of Science and Technology of the Republic of China under Grant Nos. 105-2112-M-003-015- and 104-2112-M-001-008-MY3, and the National Center for Theoretical Sciences of Taiwan.

106年度專題研究計畫成果彙整表

計畫主持人：陳穎叡			計畫編號：106-2112-M-003-009-			
計畫名稱：奈米碳管鋸齒邊界態之性質分析						
成果項目			量化	單位	質化 (說明：各成果項目請附佐證資料或細項說明，如期刊名稱、年份、卷期、起訖頁數、證號...等)	
國內	學術性論文	期刊論文		0	篇	
		研討會論文		0		
		專書		0	本	
		專書論文		0	章	
		技術報告		0	篇	
		其他		0	篇	
	智慧財產權及成果	專利權	發明專利	申請中	0	件
				已獲得	0	
			新型/設計專利		0	
		商標權		0		
		營業秘密		0		
		積體電路電路布局權		0		
		著作權		0		
		品種權		0		
		其他		0		
	技術移轉	件數		0	件	
		收入		0	千元	
	國外	學術性論文	期刊論文		0	篇
			研討會論文		0	
			專書		0	本
專書論文			0	章		
技術報告			0	篇		
其他			0	篇		
智慧財產權及成果		專利權	發明專利	申請中	0	件
				已獲得	0	
			新型/設計專利		0	
		商標權		0		
		營業秘密		0		
		積體電路電路布局權		0		
		著作權		0		
		品種權		0		
其他		0				

	技術移轉	件數	0	件	
		收入	0	千元	
參與計畫人力	本國籍	大專生	0	人次	兩名碩士生參與研究計畫，學習理論推導、模擬計算，協助撰寫論文
		碩士生	2		
		博士生	0		
		博士級研究人員	0		
		專任人員	0		
	非本國籍	大專生	0		
		碩士生	0		
		博士生	0		
		博士級研究人員	0		
		專任人員	0		
其他成果 (無法以量化表達之成果如辦理學術活動、獲得獎項、重要國際合作、研究成果國際影響力及其他協助產業技術發展之具體效益事項等，請以文字敘述填列。)					

## 科技部補助專題研究計畫成果自評表

請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現（簡要敘述成果是否具有政策應用參考價值及具影響公共利益之重大發現）或其他有關價值等，作一綜合評估。

1. 請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況作一綜合評估

達成目標

未達成目標（請說明，以100字為限）

實驗失敗

因故實驗中斷

其他原因

說明：

2. 研究成果在學術期刊發表或申請專利等情形（請於其他欄註明專利及技轉之證號、合約、申請及洽談等詳細資訊）

論文： 已發表  未發表之文稿  撰寫中  無

專利： 已獲得  申請中  無

技轉： 已技轉  洽談中  無

其他：（以200字為限）

論文基本上已經完成，目前嘗試投稿，為了不同期刊之要求而修改。

3. 請依學術成就、技術創新、社會影響等方面，評估研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性，以500字為限）

本文討論奈米碳管邊界態對分子傳輸的影響，這類論文相對少有，因此我們相信此項研究應該有一定的學術或應用價值。

4. 主要發現

本研究具有政策應用參考價值： 否  是，建議提供機關

（勾選「是」者，請列舉建議可提供施政參考之業務主管機關）

本研究具影響公共利益之重大發現： 否  是

說明：（以150字為限）

屬於物理學方面的學術研究，理論計算階段的結果，不便貿然將研究成果指向政策或公共利益。