L-54

曲がった量子細線による電子の束縛状態への影響の評価

The evaluation of dynamics of electron bound states formed in moving curved thin wires

中野竜太朗[1]，池田遼[1]，石井雄大[1]，胡桃聡[2]，鈴木薫[2]，松田健一[2]
R. Nakano[1], R. Ikeda[1], Y. Ishii[1], S. Kurumi[2], K. Suzuki[2], K.-i. Matsuda[2]

概要 : 量子細線を曲げることにとってソリトンポテンシャルを作ることができ，その中に電子を束縛できることが知られている．本研究では，ソリトンポテンシャルと電子の波動関数の時間的移動に関して理論的に考察した．応用としては，動く人工原子としての可能性が考えられる．ソリトン波の特性により，電子の束縛準位を固定することが出来る．

１．研究背景と目的

近年，カーボンナノチューブや半導体ナノワイヤーなどの量子細線が注目されている．ナノメートルスケールの微細な構造であるうえに，比較的に容易に曲がる自由度を有しているため，複雑な立体構造を利用した太陽電池への応用やナノマシンの配線材料などとしての利用が考えられている．

従来，これらの材料の電気伝導特性に対する形状変化の効果はあまり考えられてこなかった．しかし，変形（特に曲率）がその電子状態に影響を及ぼす可能性が da Costa によって理論的に指摘され[1]，細線の変形とそれが電子状態にもたらす量子効果についての検討が始まった．

本研究では，ソリトン解を持つ非線形方程式である KdV 方程式に着目し，そのソリトン解と等価なポテンシャル形状を有する細線の変形と，それが電子状態に及ぼす影響について検討した．特に，時間変化するソリトン解に対応した時々刻々の細線の変形を調べ，その時の電子状態の時間変化についても理論的に調べた．その結果，いくつかの特徴的なパラメータの取り方があること，またそれに対応した細線の変形にも特徴が現れることを明らかにした．

２．原理

2.1 細線の曲率の効果

変形させる細線は一次元的なものとして，振率は無視することとした．また細線に沿った位置パラメータとして弧長パラメータ q を取る．この細線上を運動する電子に対するシュレーディンガー方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2}+u(q,t)\right]\psi(q)=E\psi(q)$$

である．ここで，$u(q,t)$ は細線の変形が電子に対して形成するポテンシャルエネルギーであり，

$$u(q,t)=-\frac{h^2}{8m}C^2(q,t)$$

と書き表すことができる．ただし $C(q,t)$ は細線の曲率を表す．すなわち，曲率は電子に対する引力的なポテンシャルを形成することがわかる．

2.2 KdV ソリトン

今回我々は，細線の曲率が形成するポテンシャル形状として，KdV 方程式

$$\frac{\partial u(q,t)}{\partial t}-6\frac{\partial u(q,t)}{\partial q}u(q,t)+\frac{\partial^3 u(q,t)}{\partial q^3}=0$$

に属するソリトン解に相当するものを検討した．特に２つのソリトンを持つ場合の解は

$$u(q,t)=-2\frac{\partial^2}{\partial q^2}[\log\ \phi]$$

と書ける．ここで

$$\phi=1+\frac{\kappa_2+\kappa_1}{\kappa_2-\kappa_1}(e^{-2\eta_2}+e^{-2\eta_1})+e^{-2(\eta_1+\eta_2)}$$

である．また η_1，η_2 はそれぞれ

$$\eta_1=\kappa_1 x-4{\kappa_1}^3 t$$

$$\eta_2=\kappa_2 x-4{\kappa_2}^3 t$$

である．このポテンシャル中には二つの電子束縛状態が形成されることがわかり，$\kappa_2>\kappa_1$としたときの束縛状態の波動関数はそれぞれ

$$\psi_1(q,t)=\sqrt{2\kappa_1\left(\frac{\kappa_2+\kappa_1}{\kappa_2-\kappa_1}\right)}\frac{e^{-\eta_1}}{\phi}(1-e^{-2\eta_2})$$

$$\psi_2(q,t)=\sqrt{2\kappa_2\left(\frac{\kappa_2+\kappa_1}{\kappa_2-\kappa_1}\right)}\frac{e^{-\eta_2}}{\phi}(1+e^{-2\eta_1})$$

であらわされる．

３．結果と考察

3.1 細線形状と KdV ソリトンポテンシャルの関係

図１にソリトン型ポテンシャルの形状（黒線）と，その中に形成される束縛状態の波動関数（赤線，青線）を示す．またこのポテンシャル形状に対応した細線の形状を図２に示す．これらからわかることは，細線の

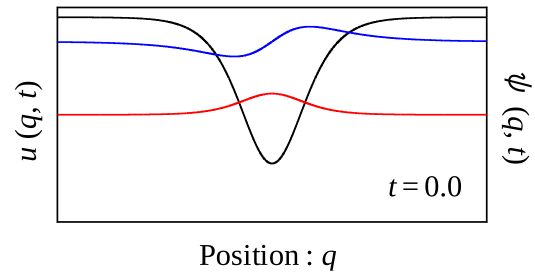
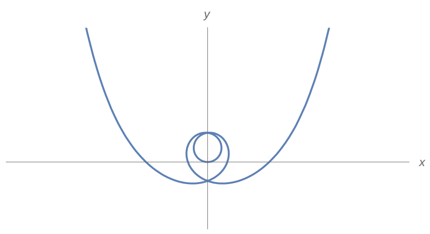


図 1 : KdV ソリトンポテンシャルの形状（黒線）と，その中に形成される二つの電子束縛状態（赤線，青線）．ただし，ここで $\kappa_1 = 1$, $\kappa_2 = 2$, $t = 0$.
図 2 : 上記のポテンシャルに対応した細線形状.



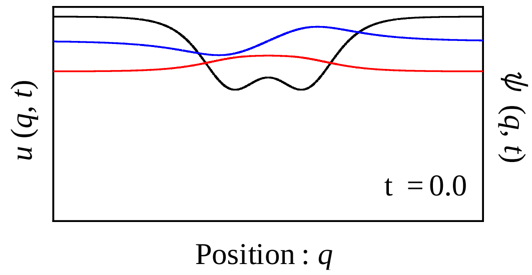
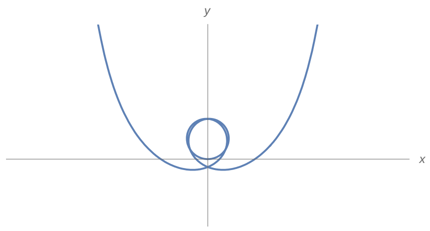


図 3 : KdV ソリトンポテンシャルの形状（黒線）と，その中に形成される二つの電子束縛状態（赤線，青線）．ただし，ここで $\kappa_1 = 1$, $\kappa_2 = 1.5$, $t = 0$.
図 4 : 上記のポテンシャルに対応した細線形状.



変形（曲率）が電子に対して引力的なポテンシャルを形成することである．

さらに別のパラメータの取り方として $\kappa_1 = 1$, $\kappa_2 = 1.5$ としたものを図３，図４に示す．この場合，同じ２ソリトン解ではあるが，ポテンシャル形状が二重井戸構造になっており，それに伴って細線の形状も２か所で曲率が大きくなっているのがわかる．

このように，元の KdV ソリトン解は同じクラスのものを採用しても，パラメータの取り方によってポテンシャル形状に違いが生まれること，またそれに伴って細線形状も異なることがわかる．一方，どちらの場合にも，電子束縛状態は二つ形成され，その形に大きな差異は見られないことがわかる．

４．まとめ

本研究から単電子輸送，人工原子への応用が考えられる．ソリトンの移動と電子の波動関数の移動が時間的に対になっていることがわかった．このことから，安定した状態で単一の電子を輸送することが可能であり単電子輸送への応用が期待される．人工原子とは電子の束縛準位が，あるひとつの値に固定されている人工物のことである．ソリトン波の特性により，電子の束縛準位を固定することができる．更に，波の深さを任意に変更することが可能なため，固定されている電子の束縛準位を変化させることができる．これにより，エネルギーギャップを変化させられ，光電効果によって発生する光子の波長を変化させられる．つまり，幾何学的な形状の変化によってソリトン波の深さを変化させることで，波長が可変な単光子発光の素子への応用が期待される．

５．参考文献

[1] R. C. T. da Costa, Phys. Rev. A **23**, 1982 (1981)
[2] 渡辺慎介，「ソリトン物理入門」，培風館，p. 36〜46
[3] 戸田盛和，「波動と非線形問題 30 講」，朝倉書店，p. 53，62〜63
[4] A.グレイ，「Mathematica 曲線と曲面の微分幾何」，凸版印刷，p. 93~102