

曲がった細線中に形成される電子束縛状態の研究

A Study on Electron Bound States in Curved Nano Wires

○波田野健人¹, 松田健一²Kento Hatano¹, Ken-ichi Matsuda²

Abstract : We investigated the formation of electron-bound states in a curved nanowire. The curvature of the wire creates potential wells due to geometric effects, which in turn leads to the formation of electron-bound states. This phenomenon offers a new method for confining electrons. We treated this system as an artificial atom and also discussed its potential applications.

1. 研究の背景と目的

近年、微細加工技術の進展に伴い、ナノメートルスケールの小さな構造物が作製可能となっている。カーボンナノチューブはよく知られたナノ材料であるが、近年ではそれが螺旋状に成長したカーボンナノコイルが作製されている。^[1]このようなナノメートル程度の構造を持つ導電性材料は、今後ナノテクノロジーの様々な分野で、柔軟性のある配線材料として活用される可能性がある。

しかしながら、このような材料中の電子状態にはまだ解明されていない点があると考えられている。その一つに「幾何学的効果」と呼ばれるものがある。これは材料が自体持っている曲げや捻りを伴うナノ構造が電子状態を変化させる効果の事で、現在でも議論の対象となっている。

この問題について R. C. T. da Costa は、曲面や曲線に拘束された粒子が、その形状からどのような影響を受けるかについて理論的に考察をした。^[2]その結果、曲面や曲線の特徴づけるパラメータのうち曲率(κ で表す)が、粒子に対する有効ポテンシャルを形成することを見出した。これは「幾何学的ポテンシャル」(Geometric Potential)と呼ばれる。このポテンシャルは、後述するように、曲率の二乗に比例し、かつ負の符号を持つため、粒子に対する引力ポテンシャルであるとされる。

細線状のナノ材料について考えると、直線状の部分については形状による影響を無視できるが、曲がっている領域においては曲率に依存した幾何学ポテンシャルが形成されているために、この領域のポテンシャルエネルギーが直線部分よりも低下していることになる。すなわちこの領域は、電子にとって、ある種の量子井戸となりうることを示している。細線状のナノ材料を局部的に曲げることによって、そこに形状誘起による量子井戸の形成ができるということは、その部分は「電子閉じ込め構造」として機能すると期待される。通常、

半導体を用いた量子井戸や量子ドットを形成する場合には、高度な微細加工技術が要求される。一方、ナノ細線の曲げられた部分をこれに利用できるとすれば、自己組織的に成長するナノ細線構造をそのまま利用できるため、非常に簡便で柔軟な「人工原子」の創出が可能となることが期待される。

そこで本研究の目的はナノ細線の形状(曲げによる曲率)と、それによって誘起される幾何学的ポテンシャルの関係を詳細に調べることで、また、ポテンシャル井戸内に形成される束縛状態の様子を調べることとした。特定の曲げ方をしたナノ細線は、その部分が人工原子的な離散準位系を形成することから、光子との相互作用についても検討したので報告する。

2. 曲がった細線中の電子状態

ここでは、変形可能な細線に拘束された電子を考察対象とする。細線は、一次元導体として考えてよいが、その形状が変化しうる点について検討する必要がある。^[2]まず、電子の、細線上における位置座標を指定するためのパラメータとして、弧長パラメータ q を採用する。これは細線の形状に関わらず、その線に沿って向き付けされた長さパラメータである。細線の変形は、曲線上の各点 q における曲率 $\kappa(q)$ と振率 $\tau(q)$ によって記述される。R. C. T. da Costa によれば、そのような曲がった細線中を運動する粒子に対しては、以下のような、曲率に起因したポテンシャル(幾何学的ポテンシャル)が発生するとされる。^[2]すなわち、

$$U(q) = -\frac{\hbar^2}{8m}\kappa^2(q). \quad (1)$$

ここで m は粒子の質量である。この幾何学的ポテンシャルは、常に負の符号をもつ引力ポテンシャルとして発生することがわかる。本研究では、この幾何学

1 : 日大理工・院(前)・電気 2 : 日大理工・教員・電気

的ポテンシャルを取り入れることにより、細線中の電子状態を量子力学に基づいて検討する。

ここで、理論式の煩雑さを軽減するために、以下のような置き換えを行う。すなわち $\hbar = 1$, $m = 1/2$ とする。この結果、一粒子についてのハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{1}{4}\kappa^2(q) \quad (2)$$

となる。

ここで滑らかに変形する細線の例として、式 (3) に示すような曲率を持つ細線を考える。すなわち

$$\kappa(q) = \frac{2\sqrt{6}}{\cosh(q)} \quad (3)$$

図 1 (a) には、この曲線の形状を、また図 1 (b) には、幾何学的ポテンシャルの形状を示す。

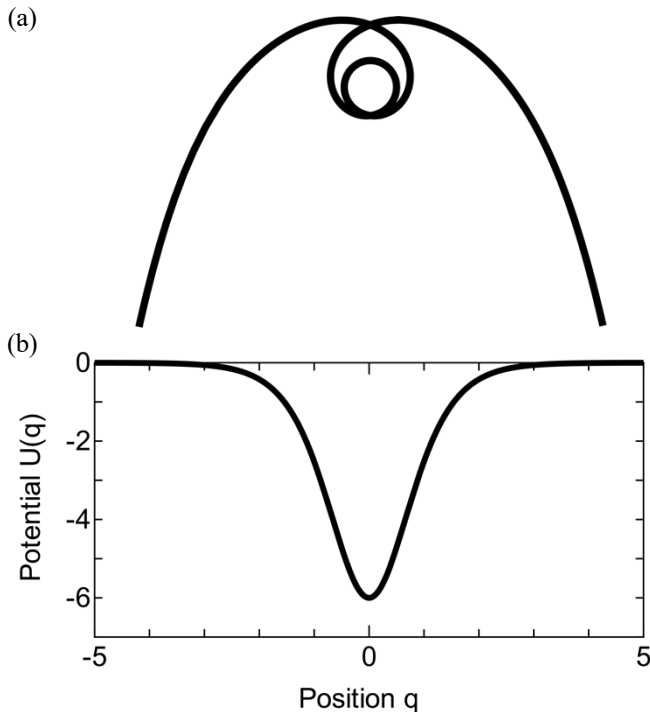


Figure 1. (a) A wire having the curvature described as eq. (3). (b) Geometrical potential induced by the curvature.

今の場合、振率を考慮していないため、細線形状は平面上に投影されたものとして示されている。そのために、細線の図は二か所で交差しているが、そのことは、実際には考慮しなくてよい。図 1 (b) で示されたように、細線のうち直線的な部分は幾何学的ポテンシャルのゼロの基準となり、それに対して曲率のある部分は負の値を持つことがわかる。従って、細線中の電子状態には (a) エネルギーがゼロ以上の連続状態、および (b) エネルギーが負の束縛状態、の2つがあることがわかる。このうち、連続状態については、S. Matsutani et al. の先駆的な研究がある^[3]。そのた

め、ここでは式 (3) に示す曲率の場合に形成される束縛状態について調べた。

式 (4) および式 (5) は、前述の幾何学ポテンシャル中に形成される束縛状態の波動関数である。基底状態を g 、励起状態を e の添え字でそれぞれ区別している。

$$|\psi_e\rangle = -\frac{\sqrt{6}e^q(-1+e^{2q})}{(1+e^{2q})^2} \quad (4)$$

$$|\psi_g\rangle = \frac{2\sqrt{3}e^{2q}}{(1+e^{2q})^2} \quad (5)$$

Fig. 2 には、幾何学的ポテンシャルと、そこに分布する束縛状態を示す。

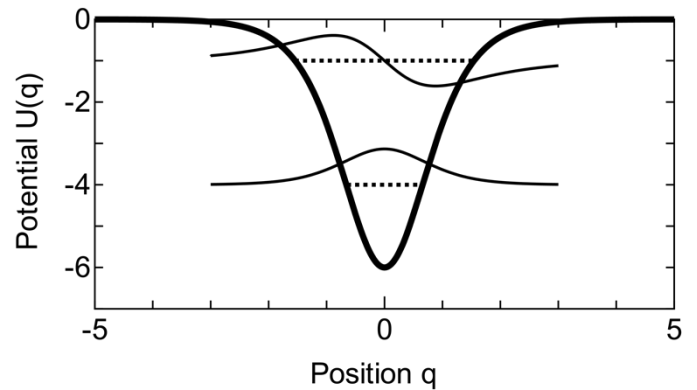


Figure 2. Wave functions of bound states formed in the geometrical potential, $U(q)$.

各束縛準位は、式 (2) に示された (単純化された) ハミルトニアンに対して、それぞれ $E_e = -1$, $E_g = -4$ であることが確認された。

3. まとめ

本研究ではナノ細線の形状と、それにより形成される幾何学的ポテンシャルの関係を数値的に示した。曲率を持つ細線部分は、粒子に対する負のポテンシャルが形成され、また、特定の曲げ方をした場合のポテンシャル中に形成される束縛状態の波動関数を示した。本発表では、曲率を持つ細線を一種の「二準位系人工原子」として、その応用についても議論する予定である。

4. 参考文献

- [1] T. Yonemura et al., J. Appl. Phys., **112**, 084311 (2012)
- [2] R. C. T. da Costa, Phys. Rev. A **23**, 1982 (1981)
- [3] S. Matsutani and H. Tsuru, J. Phys. Soc. Jpn., **60**, 3640 (1991)