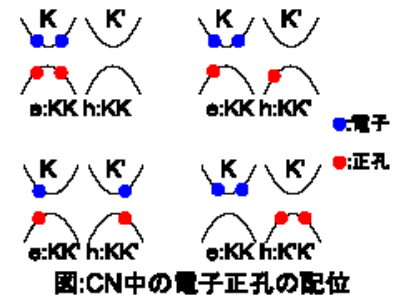


半導体カーボンナノチューブの非線形光学応答の解析

渡辺 耕太 (阪大理)

カーボンナノチューブ(CN)はグラフェンを丸めて作られた擬一次元系物質であり、巻き方により金属にも半導体にもなる。このような特異な物性を示すことから、CNは多岐に渡り盛んに研究が行われてきた。CNはグラフェンのバンド構造を反映して、多谷構造、線型分散といった特徴的なバンド構造を持つ。以前からCNの光学スペクトル解析に関してCN中でのクーロン相互作用による多体効果が議論されており、近年、半導体CNの光学スペクトルには擬一次元系物質の持つ特徴である強い励起子効果が現れることが実験的に示された。またバンドが多谷構造を持つので複数の電子正孔対による基底状態の存在が予測され、これらのプローブとしてのCNの光学スペクトルの解析は基礎物理的側面から非常に興味深い。

複数の電子正孔対からなる基底状態で重要な対象は励起子分子である。現在、CN中の励起子分子に関して理論予測と実験結果に不一致が存在する。理論結果では擬一次元性を反映し、励起子分子の束縛エネルギーは非常に大きく、励起子分子は安定に存在可能と予測されている。一方、発光スペクトルからは励起子分子由来の信号は観測されていない。この不一致を解消するために我々は励起子分子束縛エネルギー計算の精密化を行った。過去の理論モデルは有効質量近似に基づいて実空間で定式化されており放物バンドしか取り扱えない。そのため、クーロン相互作用の遮蔽効果が全く取り入れられていないために現実的な理論モデルにはなっていない。この点を解消するため、我々は安藤の励起子理論を拡張して波数空間で定式化を行った。我々の理論的枠組みは、バンドの繰り込みや遮蔽効果といった効果を全て取り入れることが出来、より現実的な理論モデルとなっている。図は電子正孔の配位を示したもので、我々の理論的枠組みでは多谷構造による4つの微細構造が存在する。この理論的枠組みを用いてCNの非線形光学スペクトルを計算し、CN中の多体基底状態を探る。



参考文献

- [1] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 1066.
- [2] T. G. Pedersen, K. Pedersen, H. D. Cornean, and P. Duclos, Nano Lett. **5** (2005) 291.
- [3] K. Matsuda, T. Inoue, Y. Murakami, S. Maruyama, and Y. Kanemitsu, Phys. Rev. B **77** (2008) 033406.
- [4] D. Kammerlander, D. Prezzi, G. Goldoni, E. Molinari, and U. Hohenester, Phys. Rev. Lett. **99** (2007) 126806.