

不純物をもつ半導体カーボンナノチューブの励起子と光学応答

富尾 祐 (北海道大学大学院工学研究科)

カーボンナノチューブにおける励起子は、電子エネルギーバンドの多谷構造に起因して微細構造をもち、光学活性な明励起子と不活性な暗励起子に分裂する。この励起子エネルギー準位構造は、谷間混成を生じるクーロン相互作用の短距離成分によって形成されることが知られているが[1]、他の要因として、欠陥や不純物(あるいはそれらに起因する局所電場[2])などの局所ポテンシャルも考えられる。本研究では、谷間混成を誘起する短距離不純物が存在する場合の励起子エネルギー準位構造および線形吸収スペクトルを調べ、暗励起子が光学活性化する可能性を議論した。

有効質量理論と遮蔽されたハートリー・フォック近似に基づいて計算した吸収スペクトル(不純物が1つのとき)をFig. 1に示す[3]。短距離不純物による散乱効果は、明励起子状態と他の暗励起子状態を混成させ、有限の重心運動量をもつ谷間励起子などをわずかに光学活性化させる。また、非常に強い不純物ポテンシャルの場合には、Fig. 1の挿入図に見られるように、ゼロ磁場下でも E_{11} 励起子ピークが分裂して観測される可能性があることがわかった。 E_{11} 暗励起子に関して今回得られた重要な知見は、不純物が1つ、あるいは2つの不純物がチューブに対して特別な配置関係にある場合には光学不活性なままであるが、一般に不純物の存在によって光学活性化され、そのエネルギー準位は E_{11} 明励起子よりも低エネルギー側へシフトする、ということである。

今後は、ナノチューブ中の束縛励起子や二層ナノチューブの励起子と光学応答などに対する理論構築を展開し、カーボンナノ構造における光励起状態に生じる動的電子相関効果の解明を目指す。

参考文献

- [1] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 024707.
- [2] K. Matsuda, *et al.*, Phys. Rev. B **77** (2008) 193405.
- [3] Y. Tomio and H. Suzuura, to be published in Physica E (Proceedings of EP2DS-18).

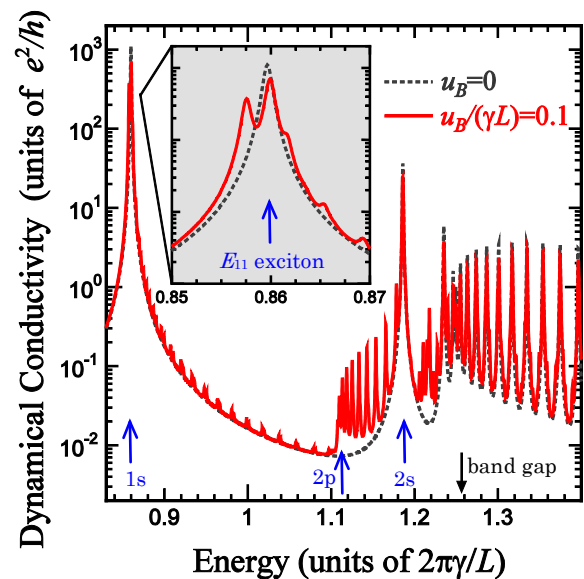


Fig.1: The absorption spectra in the presence of an impurity [3]. The parameter u_B denotes the effective strength of the impurity potential. The inset shows the spectra around the $E_{11}(1s)$ exciton peak. L : the circumference length. γ : the band parameter.