

学 位 論 文 題 名

幾何誘起電磁場が引き起こす異常ナノ物性

学位論文内容の要旨

古典系から量子系への移行に際しては通常、正準共役量の非可換性 ($[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$) に基づく正準量子化法が用いられる。しかし曲がった空間を運動する粒子を量子力学的に記述しようとする、正準量子化法だけでは系のハミルトニアンを正しく表記することができなくなってしまう。その理由は、一般曲線座標で書かれた運動エネルギー項が $\hat{x}, \hat{p}$ の両者を含むため、演算子の順序の選び方如何でハミルトニアン of 物理的意味が変わってしまう点にある。こうした曲がった空間特有の問題は、operator ordering ambiguity という名で広く知られており、現在でも統一的な理解を得るには至っていない。

曲がった空間におけるハミルトニアンの定式化は、量子力学の理論的枠組みの拡張を意味するのみならず、現存する曲面型ナノ構造の量子物性を探る上で極めて重要である。実際、近年の微細加工技術の進展により、「曲がり」「振れ」等の非平坦形状を示すナノ構造体が数多く作成され、その物性探索が精力的に進められている。これら曲面型ナノ物質中を運動する電子のハミルトニアンは、系を「まっすぐな 3 次元空間」に置かれた有限厚さ (太さ) の物体とみなすことで、厚さゼロの理想曲面で生じる ordering ambiguity を避けた定式化が可能である。このようにして定式化されたハミルトニアンには、構造体の幾何曲率 (振れ率) に依存した有効電場 (磁場) が含まれる。すなわち曲がりや振れを伴うナノ構造体中の電子は、外場ゼロの状況下でさえ、あたかも電場 (または磁場) を受けたかのような振る舞いを示すという帰結を得る。

上に述べた幾何誘起電磁場が荷電キャリアの運動に影響を与える可能性が過去の理論研究で示唆されている。例えば、カーボンナノチューブ等に代表される細長い円筒状の擬一次元導体を局所変形させた場合、変形に伴って生じる幾何誘起電場が系の電子透過率を大きく変えると予測されている。また、スピン軌道相互作用を伴う曲線状量子細線に対しては、曲線形状制御に基づくスピン流生成技術が提案されている。ただし、これらの先行研究はいずれも量子伝導 (電荷またはスピン) のみを対象としており、幾何誘起電場ポテンシャルが電子波動関数の空間プロファイルに与える効果、とりわけ束縛状態の有無については全く理解されていない。他方、曲面系の有効電場に関する研究と同様に、振れ原子構造を持つ量子細線における振れ率誘起磁場に関する先行研究も複数報告されている。過去の研究によると、振れ量子細線中を運動する伝導電子には振れ率に依存した量子位相が付加される。しかし、先行研究のほとんどが Schrödinger 方程式の定式化を目指したものであり、実在の物質系においてこの位相変化が観測可能か否かについては議論が皆無である。

本論文では、局所変形を施した凹凸円筒ナノ導体、及び振れ量子細線の閉ループ構造 (=振れ量子リング) について、系の電子状態に対する幾何誘起電磁場の寄与とその観測可能性を理論・数値計算の両面から調べた。その結果、凹凸円筒面における電子状態は局所変形部の形状変化に応じて束縛状態・非束縛状態間の転移を示すことが明らかとなった。この結果は、同様の凹凸形状を示す

鎖状 C_{60} 重合体や MoS_2 ナノ細線における、電子物性と幾何形状の強い相関を意味するものである。一方、振れ量子リングでは、振れ構造に起因する量子位相が、通常とは異質な Aharonov-Bohm (AB) 効果と永久電流を発生させることが明らかとなった。特に永久電流についてはその大きさが一定条件下で 35nA を上回り、既存の測定機器で計測可能なオーダーに届くことがわかった。本研究で得た結果は、多様な幾何形状を有するナノ構造体の新規物性探索を展開するための重要な契機となる。さらに形状—物性相関を利用した次世代ナノデバイスの創製にも重要な貢献を果たすものであり、工学的にも大きな意味を持つ。本論文は全 8 章で構成され、各章の概要は以下の通りである。

第 1 章は序論であり、本論文の主題である幾何誘起電磁場に関する背景と問題点を概説する。

第 2 章では、本研究の舞台であるメソスコピック系について説明し、この系を特徴づける諸々の長さスケール・時間スケールを整理する。メソスコピック系の著しい特徴は、物理量が干渉効果に強い影響を受ける点である。特に干渉効果が顕在化する物理現象の代表例として、外部磁場を印加した常伝導リングに発生する AB 効果と永久電流を紹介する。

第 3 章では、前述の ordering ambiguity 問題に対してこれまでに得られている知見とその問題点を紹介する。特に、2 次元曲面系 (有限膜厚) においてハミルトニアンの変換が一意に定まる理由を説明する。さらに、曲面系における電子透過率とスピン偏極率の幾何形状依存性を求めた過去の研究例を紹介し、幾何形状効果に起因する物性変化の観測可能性を議論する。

第 4 章では、Riemann 幾何学の一般論を 3 次元曲線座標系に適用し、二階微分作用素として知られる Laplace 演算子の一般的表現を紹介する。その後、曲面量子系を運動する電子について、系の Schrödinger 方程式を導出する。曲面に拘束された電子は、その曲率に起因した有効電場が生じることを示す。

第 5 章では、局所変形を施した円筒導体における電子状態を考察する。曲率誘起電場が引き起こす低エネルギー電子束縛状態 (及び非束縛状態) の空間プロファイル、及びその局在長の幾何学的パラメータ依存性の解析結果を示す。その結果は、波動関数が円筒変形部の程度に応じて束縛状態・非束縛状態間を転移するものであった。

第 6 章では、振れ量子細線中の電子状態を記述する Schrödinger 方程式を導出する。導出過程において原子構造に追従する座標系をとる理由を述べるとともに、ハミルトニアンが幾何学的振れに起因した有効ベクトルポテンシャル項を含むことを示す。

第 7 章では、振れ量子リングにおける量子干渉効果による AB 効果及び永久電流の解析結果を述べる。位相因子を有限にするためにはリング中心部に外部電流を通す必要があることを説明する。また、系のコンダクタンスと永久電流の大きさは、外部電流に対して非周期的に振動することが明らかとなった。これは磁場に対して周期運動する、振れていないリングに生じる AB 効果と永久電流とは異なる現象である。このような現象が起こる理由について説明する。

第 8 章は結論である。幾何誘起電磁場に起因する異常な電子物性に関して本研究で得られた知見をまとめるとともに、今後の課題について述べる。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 矢久保 考 介

副 査 教 授 明 楽 浩 史

副 査 教 授 丹 田 聡

学 位 論 文 題 名

幾何誘起電磁場が引き起こす異常ナノ物性

古典系から量子系への移行に際しては通常、正準共役量の非可換性 ($[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$) に基づく正準量子化法が用いられる。しかし曲がった空間を運動する粒子を量子力学的に記述しようとする、正準量子化法だけでは系のハミルトニアンを正しく表記することができなくなる。その理由は、一般曲線座標で書かれた運動エネルギー項が $\hat{x}, \hat{p}$ の両者を含むため、演算子の順序の選び方如何でハミルトニアン of 物理的意味が変わってしまう点にある。こうした曲がった空間特有の問題は、operator ordering ambiguity という名で広く知られており、現在でも統一的な理解を得るには至っていない。

曲がった空間におけるハミルトニアン of 定式化は、量子力学 of 理論的枠組み of 拡張を意味するのみならず、現存する曲面型ナノ構造 of 量子物性を探る上で極めて重要である。実際、近年 of 微細加工技術 of 進展により、「曲がり」「振れ」等の非平坦形状を示すナノ構造体 that 数多く作成され、その物性探索が精力的に進められている。これら曲面型ナノ物質中を運動する電子 of ハミルトニアンは、物質が示す有限 of 厚さ (太さ) を考慮することで、厚さゼロ of 理想曲面で生じる ordering ambiguity を避けた定式化が可能となる。このようにして定式化されたハミルトニアンには、構造体 of 幾何曲率 (振れ率) に依存した有効電場 (磁場) が含まれる。すなわち曲がりや振れを伴うナノ構造体中の電子は、外場ゼロ of 状況下でさえ、あたかも電場 (または磁場) を受けたかのような振る舞いを示すことになる。こうした幾何誘起電磁場が荷電キャリア of 運動に与える影響を論じた先行研究はいずれも量子伝導 (電荷またはスピン) のみを対象としており、電子波動関数 of 空間プロファイルに与える効果、とりわけ束縛状態 of 有無については全く理解されていない。他方、曲面系 of 有効電場に関する研究と同様に、振れ原子構造を持つ量子細線における振れ率誘起磁場に関する先行研究も複数報告されている。過去の研究によると、振れ量子細線中を運動する伝導電子には振れ率に依存した量子位相が付加される。しかし、先行研究 of ほとんどが Schrödinger 方程式 of 定式化を目指したものであり、実在 of 物質系においてこの位相変化が観測可能か否かについては議論が皆無である。

本論文は、局所変形を施した凹凸円筒ナノ導体、及び振れ量子細線 of 閉ループ構造 (=振れ量子リング) について、系 of 電子状態に対する幾何誘起電磁場 of 寄与とその観測可能性を理論・数値計算の両面から調べることを目的としている。

本研究 of 結果、以下の事実が明らかとなった。(1) 凹凸円筒面における電子状態は局所変形部 of 形状変化に応じて束縛状態・非束縛状態間の転移を示す。(2) 振れ量子リングでは、振れ構造に起因する量子位相が、通常とは異質な Aharonov-Bohm (AB) 効果と永久電流が発生する。(3) 永久電

流は既存の測定機器で計測可能な大きさをもつ。

本論文は以下のように構成されている。第1章は序論であり、本論文の主題である幾何誘起電磁場に関する背景と問題点を概説している。第2章では、本研究の舞台であるメゾスコピック系について説明し、この系を特徴づける諸々の長さスケール・時間スケールを整理している。第3章では、前述の ordering ambiguity 問題に対してこれまでに得られている知見とその問題点を改めて紹介している。第4章では、曲面量子系を運動する電子について、系の Schrödinger 方程式を導出している。導出の結果、曲面に拘束された電子はその曲率に起因した有効電場が生じることが示されている。第5章では、局所変形を施した円筒導体における電子状態を考察している。曲率誘起電場が引き起こす低エネルギー電子束縛状態 (及び非束縛状態) の空間プロファイル、及びその局在長の幾何学的パラメータ依存性の解析結果を示している。第6章では、捩れ量子細線中の電子状態を記述する Schrödinger 方程式を導出している。導出の結果、ハミルトニアンが幾何学的捩れに起因した有効ベクトルポテンシャル項を含むことが示されている。第7章では、捩れ量子リングにおける量子干渉効果による AB 効果及び永久電流の解析結果を述べている。系のコンダクタンスと永久電流の大きさは、リング中心部を貫く外部電流に対して非周期的に振動することを示している。最終章は本論文の結論と今後の課題について述べている。

これを要するに著者は、非平坦ナノ構造体の幾何形状が誘起する異常な電子物性の発現機構解明と具体的測定手段の提案を行ったものであり、自然に対する深い洞察のみならず、幾何構造と物性との相関を利用した次世代ナノデバイスの創製に重要な役割を果たしている。これを通して、応用物理学に貢献するところ大なるものがある。

よって著者は、北海道大学博士 (工学) の学位を授与される資格あるものと認める。