

令和 5 年 6 月 8 日現在

機関番号：32682

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2022

課題番号：19K14637

研究課題名（和文）カーボンナノチューブにおけるフォノンの量子光学

研究課題名（英文）Quantum Optics on Phonons in Carbon Nanotube

研究代表者

奥山 倫 (Okuyama, Rin)

明治大学・理工学部・助教

研究者番号：60735562

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究ではカーボンナノチューブの機械的な運動を量子論的に調べた。まず、電子と同じ変換則に従う面直フォノンを群論を用いて解析し、電子と類似したディラック分散関係と曲率由来微細構造の存在を示した。次に架橋したチューブに埋め込まれた荷電量子ビットが局在フォノンと相互作用する系の電子輸送を調べた。この状況はフォノン版「キャビティQED（量子電磁力学）」にほかならないが、電子ボソン結合は光学系よりもはるかに強い。強い結合は فرانク・コンドン効果として観測される。最後に軸受けに拘束されたチューブの剛体回転を調べ、回転の量子状態が古典的な回転モードである自転・歳差・章動と対応づけられることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究ではカーボンナノチューブの機械的運動の量子論的な性質を理論的に調べた。従来、ナノチューブの物性研究はその特異な電子系を主たる対象としており、機械運動そのものに着目した研究は稀である。ナノチューブはエレクトロニクスだけでなく、強靱かつ軽量のワイヤとしての応用も期待されており、基礎研究の分野からの下支えは重要である。さらに、ナノチューブのようなセミマクロな物体の量子状態の研究は、系のスケール変化によって、どのように量子系から古典系へのクロスオーバーが起きるのかという量子力学の根源的な問いを考える上で重要なヒントとなるだろう。

研究成果の概要（英文）：In this study, we have theoretically examined the quantum natures of the mechanical motions of carbon nanotubes (CNTs). First, we have constructed a group-theory framework for the perpendicular phonons, which transform just in the same manner as electrons for the symmetric operations. The Dirac dispersion relation and the curvature-induced fine structures have been predicted for the phonons. Then, we have examined a phonon-based cavity QED (Quantum ElectroDynamics), where a charged qubit embedded in a CNT couples to its localized phonon mode. This is nothing but the situation realized in a conventional cavity QED, but the Fermion-Boson coupling is much larger than in the optical counterpart. The strong coupling manifests itself as the Franck-Condon effect. Finally, the rigid-body rotation have been studied. We have shown that the quantum states of a CNT confined in a bearing potential can be identified to the classical rotation modes, the pure rotation, precession, and nutation.

研究分野：理論物性物理学

キーワード：カーボンナノチューブ 機械的運動 格子振動 フォノン 群の表現論 トポロジカル絶縁体 キャビティQED 剛体回転の量子論

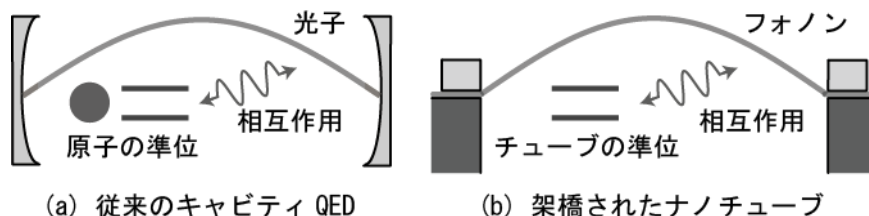
科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

原子と共振器中の光子が結合した**キャビティ QED**(共振器電磁力学系: 下図 a)は、今日の量子光学の中心的な研究対象である。近年、微細加工技術の長足の進歩に伴い、原子と光子を従来よりも強く結合させた系の設計が可能となり、単 1 原子によるレーザー発振や、光子を用いた量子情報処理など、新たな応用が実現されつつある。

一方、**カーボンナノチューブ**は炭素原子 1 層からなる**原子層物質**で、その優れた電子的・機械的性質により、基礎科学のみならず「オールカーボンデバイス」の中核を担う材料として工学的応用も期待されている。最近、サブミクロン程度の長さのナノチューブを中空に架橋した構造が作成されつつある(下図 b)。チューブ中の電子は、**量子閉じ込め効果**によって、天然の原子に類似した離散的なエネルギー準位をとる。電子のエネルギーは電氣的に制御できるため、ナノチューブをいわば「人工原子」として利用できる。他方、チューブの架橋部分はギター弦のように振動するが、量子閉じ込め効果により振動エネルギーは著しく離散化され、量子力学的な粒子である**フォノン**によって記述される。チューブ中の電子とフォノンは電子格子相互作用によって結合するため、ナノチューブを用いてキャビティ QED と等価な状況、すなわち「**フォノンの量子光学**」系が実現される(下図)。

ナノチューブを用いたキャビティ QED の特長は、電子とフォノンの結合が従来の光学系と比べて桁違いに強いことにある。この特性を最大限に活用することで、フォノンレーザーやフォノンを用いた量子情報処理など、量子「光」学の新たな側面を切り拓く研究が可能となる。またカーボンナノチューブという**セミマクロ**な物体の**機械的運動**を調べることは、量子論と古典論のクロスオーバーという量子力学の本質に迫る問題につながる。



2. 研究の目的

カーボンナノチューブはその特異な電子物性により、もっぱら電子系に着目した研究が行われてきた。ラマン分光など、格子振動が関与する現象自体は盛んに調べられてきたものの、主役となるのはあくまで電子であり、格子振動を初めとするチューブの**機械的運動**そのものに関する基礎研究は稀である。「1.」で述べた「**フォノンの量子光学**」の可能性を検討する過程で、**機械的運動**そのものが、基礎科学として研究の余地があるフロンティアであることがわかってきた。また、なじみ深い電子系でさえ、その全貌が理解しきれていないことも明らかになった。そこで、本研究では次のようなステップでカーボンナノチューブの**機械的運動**を調べる:

(1) 電子系の対称性による記述

カーボンナノチューブは炭素原子 1 層からなる**グラフェン**を筒状に丸めた構造を持つ。グラフェンとナノチューブに特異な**ディラック分散関係**は、グラフェンの結晶構造が持つ**対称性**によって説明できる。1 電子ボルト程度のエネルギー分解能の物理では、チューブの構造は周回方向の境界条件として採り入れられる。チューブの**カイラリティ**(巻き方)によって、ディラック点の波数が境界条件を満たすか否かが変わる。前者はギャップレスな**金属型チューブ**、後者は有限ギャップの**半導体型チューブ**となる。0.1 電子ボルト以下のスケールでは、境界条件では捉えきれない**曲率由来の微細構造**が現れる。従来、曲率効果は単純化したモデルを用いた摂動計算や、第 1 原理計算によって説明されてきた。本研究では対称性の数学である**群の表現論**を用いて、モデルのミクロな詳細に全く依存せず、対称性だけで微細構造を記述する理論を構築する。

(2) フォノンと電子の類似関係

グラフェンのフォノン分散関係を虚心坦懐に眺めると、電子系との類似性が見えてくる。**面直フォノン**のディラック分散関係である。面直フォノンは電子と同じく、ブリュアン帯の K および K' 点に**ディラック点**を持つ。この対応関係を群の表現論によって説明し、電子系の知見に基づいて、ナノチューブのフォノン系を理解する枠組みを構築する。

また、ナノチューブの電子と面直フォノンは、群の表現論の範疇を超えた対応関係を持つ。それは両者が**副格子対称性**(カイラル対称性)を持つことである。副格子対称性により、半導体型ナノチューブは**トポロジカル絶縁体**となる。これと同じことが、有限ギャップのフォノン系でも期待できる。そこで、**トポロジー**の観点からフォノン系を分類し、**フォノンのトポロジカル「絶縁体」**に固有の新奇物性を開拓する。

(3) カーボンナノチューブにおける「フォノンの量子光学」

(1),(2)で構築したカーボンナノチューブの電子および格子振動に関する知見に立脚し、研究開始当初の目標であった「フォノンのキャビティ QED」を調べる。ナノチューブに作成した量子ビットの輸送現象を解析し、電気伝導によって実現するフォノンの量子状態を求める。

(4) カーボンナノチューブの回転運動の量子論

カーボンナノチューブの機械的運動としては、格子振動のほかに**剛体回転**の自由度が考えられる。ナノチューブのようなセミマクロな物体の回転運動に関する基礎研究は稀である。また、チューブの回転を自在に制御できれば、**ナノモーター**としての応用が期待できる。そこで本研究では、軸受けに拘束されたカーボンナノチューブの剛体回転を量子論的に調べ、輸送現象によって回転運動を駆動する方法を検討する。

3. 研究の方法

本研究では「2.」で述べた課題を、次のような方法で理論的に調べる：

(1) 電子系の対称性による記述

前述のように、0.1 eV以下のエネルギースケールにおいて、カーボンナノチューブには曲率に起因する微細構造が現れる。**(i)曲率由来スピン軌道相互作用**：平坦なグラフェンのスピン軌道相互作用は非常に小さく、通常無視できる。ところが、チューブ構造を作成すると、曲率によって電子軌道の選択則が緩和されるため、有意なスピン軌道相互作用が発現する。**(ii)曲率由来微小ギャップ**：境界条件の描像では金属型ナノチューブはギャップレスなディラック分散関係を持つ半金属だが、曲率による伝導帯と価電子帯の準位反発により、微小なバンドギャップが生じる。(i), (ii)はともに、非自明なカイラリティ依存性を持つことが特徴である。本研究では、まず平坦なグラフェンにおける電子系の物理量を、ディラック点に対応する波数(K点)の**磁気小群**で既約分解する。ナノチューブの立体構造はグラフェンに**静的な格子変位**が摂動的に印加されたものとして取り扱うこととし、曲率の1次および2次に対応する変位場を既約分解する。ナノチューブの有効ハミルトニアンは、磁気小群の**全対称表現**である。電子系の物理量と曲率の積を既約分解し、曲率による摂動ハミルトニアンを求める。

(2) フォノンと電子の類似関係

(1)で電子系に行ったのと同じアプローチで、群の表現論に基づいてナノチューブにおける面直フォノンの有効ハミルトニアンを構築する。また、副格子対称性を用いて**トポロジカル不変量**を導入し、面直フォノンをトポロジカルに分類する。**バルク・エッジ対応**によって、トポロジカル不変量は有限系における**副格子偏極したカイラルエッジ状態**の数と対応する。フォノンのエッジ状態数を解析的に求め、数値計算による検証を行う。

(3) カーボンナノチューブにおける「フォノンの量子光学」

カーボンナノチューブで実現する「フォノンのキャビティ QED」を理論的に調べる。ナノチューブで量子ビットを実現する方法はいくつか考えられるが、本研究では半導体型チューブに外部電極を取り付けた、2重井戸構造による**荷電量子ビット**(直列2重量子ドット)を想定する。フォノンの自由度としては、量子閉じ込め効果によって離散化された**LAフォノンの基本振動**に着目し、このモードだけを考える。量子ビットとフォノンモードの結合定数は、変形ポテンシャルによる電子格子相互作用から計算する。有限バイアスにおける量子ビットの輸送現象を、**リンドブラッド型量子マスター方程式**によって解析し、定常状態におけるフォノンの量子状態を特徴付ける**(i)フォノン数(N)**および**(ii)2次の自己相関関数 $g^{(2)}(0) = \langle :N^2: \rangle / \langle N \rangle^2$** を数値的に求める。

(4) カーボンナノチューブの回転運動の量子論

軸受けにソフトに拘束された有限長ナノチューブの量子状態を、**剛体回転の量子論**を用いて数値的に調べる。摂動論に基づいて、数値計算の結果を説明する解析的な表式を与える。剛体回転の量子状態を**古典的なコマの回転モード**と対応づける。ナノチューブ中の電子スピンは、**相対論的慣性力**によって剛体回転と結合する(**スピン・回転結合**)。逆方向にスピン偏極した1対の強磁性電極をチューブに接続すると、**スピン・回転結合**によるスピン反転を伴う電流が生じる。角運動量保存則から、このとき失われたスピン角運動量は剛体の回転運動に変換される。この過程は**アインシュタイン・ドハース効果**として知られている現象の1種である。簡単のために、電子軌道として量子閉じ込め効果による離散準位をひとつだけ考え、この軌道を介したスピン反転電流を量子マスター方程式を用いて解析する。定常状態におけるチューブの回転運動を数値的に求める。

4. 研究成果

本研究の成果として、次のような成果が得られた：

(1) 電子系の対称性による記述

まず平坦なグラフェンにおいて、ディラック点に対応するK点の磁気小群で電子の物理量を既約分解した。全対称表現から有効ハミルトニアンを構築することで、よく知られたマ

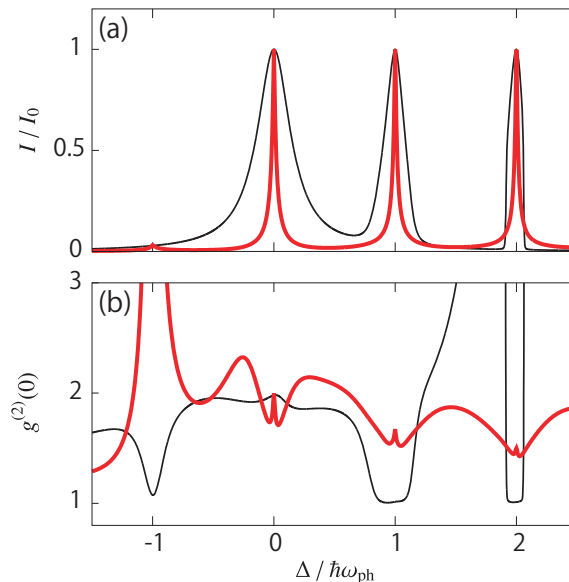
ストレスのディラック粒子のハミルトニアンと、(非常に小さい)スピン軌道相互作用を再現できた。次にチューブの立体構造に対応する変位場の空間微分を用いて、曲率の1次および2次の項を表し、それらを既約分解した。電子系の物理量と曲率との積を既約分解することで、有効ハミルトニアンを全対称表現として求めた。その結果、先行研究で得られた曲率由来の微細構造、すなわち(i)スピン軌道相互作用と(ii)金属型チューブの微小ギャップが**過不足なく**導出された。(i)および(ii)は非自明なカイラリティ依存性を持つ。チューブの周回方向とグラフェンの<100>軸のなす角を**カイラル角**と呼ぶが、その**3倍角**および**6倍角依存性**が現れる。この依存性が結晶構造および曲率の対称性から完全に説明できた。これらの成果は欧文誌に投稿中であり、プレプリントサーバで公開されている[A. Yamakage, T. Sato, R. Okuyama, T. Funato, W. Izumida, K. Sato, T. Kato, M. Matsuo, “Designing Valley-Dependent Spin-Orbit Interaction by Curvature”, arXiv:2304.12928 (2023)].

(2) フォノンと電子の類似関係

グラフェン・ナノチューブにおける格子の面直変位は、フェルミエネルギー近傍のバンドを担う π 電子と同一の変換則に従う。したがって、群の表現論の立場からは、**面直フォノン系と電子系は完全に等価**であることがわかった。(1)で構築した電子系に関する理論は、対称性だけを用いており、電子系のミクロな詳細には一切依存しない。つまり、フォノンには存在しないスピン自由度を除いて、すべてそのまま面直フォノンに適用できることが分かった。結果として、(i)**平坦なグラフェンにおいて、面直フォノンがK点にディラック点を持つ**ことが説明できる。このことから、(ii)**電子系の基準で分類した金属型/半導体型ナノチューブにおいて、面直フォノンもまた、バンドギャップを持たない/持つ**ことが直ちにわかる。さらに(iii)**金属型ナノチューブにおいて、曲率由来の微小フォノンバンドギャップが生じる**、ことがわかった。これらの結果は現実的な数値計算で確認できた。前述したように、 π 電子と面直フォノンはミクロなモデルにおいても類似性がある。両者はともに最近接原子間の相互作用だけで、半定量的に説明できる。すなわち、近似的に副格子対称性を持つ。このことから、電子系での議論にならって、半導体型ナノチューブの面直フォノンについて、トポロジカル不変量を導入した。考え得るあらゆるナノチューブについてこの不変量を解析的に求めることで、トポロジカル「**絶縁体**」として**面直フォノン**を分類した。バルク・エッジ対応により、有限チューブの端に形成される副格子偏極したフォノンのカイラルエッジ状態の数を解析的に決定し、数値計算によって確認した。これらの成果を報告する学術論文を執筆中(R. Okuyama, K. Sato, W. Izumida, “Band Gap and Chiral Edge States of Phonons in Single-Wall Carbon Nanotubes”, in preparation)である。

(3) カーボンナノチューブにおける「フォノンの量子光学」

カーボンナノチューブに作成した荷電量子ビットと、LAフォノンの基本振動モードとの結合定数をミクロな電子格子相互作用を用いて評価したところ、**フォノンのエネルギーの数倍程度**になり得ることが分かった。この極めて強い結合定数によって、**特異なフォノン支援伝導**が生じる。右図は(a)荷電量子ビットの電流と(b)フォノンの自己相関関数を、フォノンのエネルギーを単位として測った量子ビットの準位間隔の関数として数値的に評価した結果である。電子・ボソン相互作用として、赤い太線はミクロな理論から見積もったチューブのフォノン系の値、黒い細線は光学系に典型的な値を用いた。電流(a)について、どちらも準位間隔が整合(0)したときの弾性的伝導に加えて、フォノンのエネルギーと一致したとき(1, 2, ...)に**フォノン放出を伴う非弾性**



伝導が見られる。このとき、定常フォノン数には著しく増大する。現実のナノチューブに対応する赤線では、**フォノン吸収を伴う伝導ピーク**(-1, -2, ...)が見られる他、電流の線幅が総じて細くなっている。これは電子・ボソンの強結合による**フランク・コンドン効果**の現れである。フォノンの自己相関関数(b)は、フォノン支援伝導のピークにおいて、相互作用が大きい場合と小さい場合で著しく異なる。これはフォノン系と光学系で実現するボソンの量子状態が本質的に異なることを示唆している。これらの成果は欧文誌に採録された[M. Eto, R. Okuyama, “Novel phonon generator and photon detector by single electron transport in quantum dots” in *Quantum Hybrid Electronics and Materials*, Eds., Y. Hirayama, K. Hirakawa, and H. Yamaguchi, pp. 235-256 (Springer, Singapore, 2022)].

(4) カーボンナノチューブの回転運動の量子論

まず、軸受けに拘束された有限長のカーボンナノチューブの剛体回転を数値的に求めた。得られた結果を説明するために、軸受けによる束縛が強い極限から出発し、摂動論的に回転

モードを求め、解析的な表式を求めた。同時に古典的なコマとして解析することで、量子論の固有状態に対応する回転運動を求めた。その結果、同一の軸方向角運動量を持つ固有空間において、**(i)基底状態は古典的な眠りコマ**(軸まわりの自転運動)となることが分かった。さらに、**(ii)古典的な歳差運動**(軸まわりを自転しながら、軸自体が軸受けの中で回転)および**(iii)章動運動**(歳差運動しながら、軸が首振り)が励起状態に対応付けられることがわかった。次に、相対論的なスピン・回転結合を導入し、逆方向にスピン偏極した強磁性リードを接続したときのスピン反転電流を数値的に解析し、定常状態の剛体回転を数値的に評価した。その結果、**(a)エネルギーの散逸がなければ、(ii)の歳差運動だけが実現する一方、(b)軸受けとの間の摩擦を導入すると、ナノモーターとして利用できる(i)の眠りコマ状態が実現する**ことが分かった。これらの成果は欧文誌に発表された[W. Izumida, R. Okuyama, K. Sato, T. Kato, and M. Matsuo, “Einstein-de Haas nanorotor”, Phys. Rev. Lett. **128**, 017701 (2022)]。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Izumida W., Okuyama R., Sato K., Kato T., Matsuo M.	4. 巻 128
2. 論文標題 Einstein-de Haas Nanorotor	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 017701-1,6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevLett.128.017701	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Eto M., Okuyama R.	4. 巻 1
2. 論文標題 Novel phonon generator and photon detector by single electron transport in quantum dots	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Quantum Hybrid Electronics and Materials	6. 最初と最後の頁 235-256
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/978-981-19-1201-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件/うち国際学会 2件）

1. 発表者名 Rin Okuyama
2. 発表標題 Franck-Condon effect in transport through double quantum dot in carbon nanotube
3. 学会等名 International Symposium on Hybrid Quantum Systems 2019（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Rin Okuyama
2. 発表標題 Analytic Expression for Topological Number in Single-Wall Carbon Nanotube
3. 学会等名 14th Asia-Pacific Physics Conference（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 奥山 倫
2. 発表標題 カーボンナノチューブ量子ドットの輸送現象におけるフランク・コンドン効果II
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
中国	中国科学院大学		