

24aXK-3 ヘリカル金ナノワイヤ形成過程の2段階モデルとシミュレーション

¹ 東大工, ² 鳥取大工, ³CREST-JST, ⁴ 東大大総セ, ⁵ 東大物理工井口雄介^{1,*}、星健夫^{2,3,**}、藤原毅夫^{4,5,3}

Two-stage formation model and simulation of helical gold nanowires

¹Univ. of Tokyo, ²Tottori Univ, ³CREST-JST, Y. Iguchi^{1,*}, T. Hoshi^{2,3,**}, and T. Fujiwara^{1,3}

多層ヘリカル金ナノワイヤ [1] の形成過程について、2段階モデルを提案し、電子構造を用いた分子動力学シミュレーションによって確認した。 [2]

多層ヘリカル金ナノワイヤでは、「マジックナンバー」と呼ばれる数で特徴付けられる、限られた多層構造だけが観測されており [1]、その理論的説明は未解決となっていた。我々は、(i) 最外シェルが分離し (内側シェル原子との結合が弱くなり) (ii) 最外シェル (ワイヤ表面) において原子列スリップが起こり 2次元 hexagonal 構造が出現する (図 (a))、という2段階モデルを提案した。モデルを確認するため、スレーターコスター型ハミルトニアンを用いた電子状態計算に基づく動的シミュレーションを行った。ヘリシティをもたない初期構造から有限温度緩和プロセスを経る事で、種々の多層ヘリカル構造が出現した (例えば図 (b))。電子状態解析 (例えば図 (c)) により、*d* 軌道が重要な役割を果たす、ヘリカル構造出現メカニズムを解明した。さらに、他元素 (例えば、Cu, Pt など) でのヘリカル構造出現可能性や、金平衡表面での表面再構成構造などに渡る、統一的な知見が得られた。

* 現所属 : NEC,

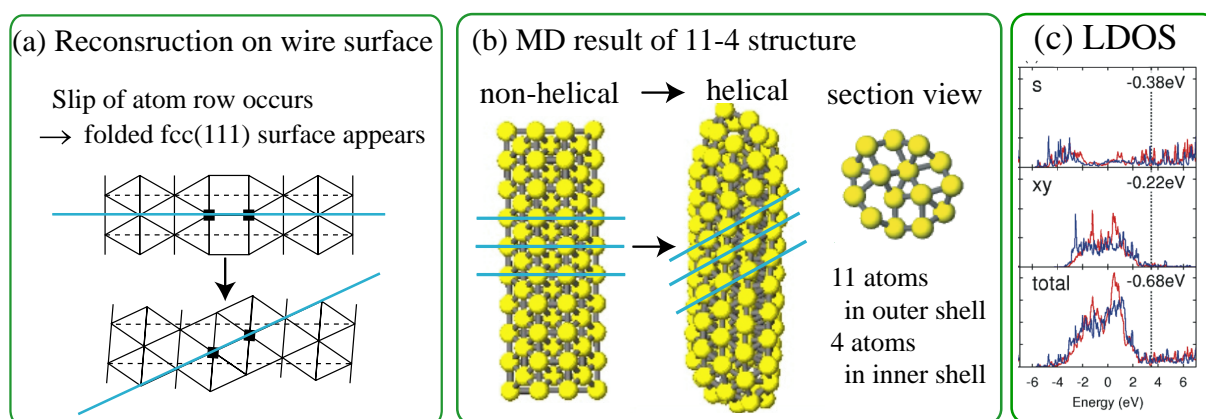
** 連絡先 : mail:hoshi@damp.tottori-u.ac.jp[1] Y. Kondo and K. Takayanagi, *Science* **289**, 606 (2000).[2] Y. Iguchi, T. Hoshi, T. Fujiwara, to appear in *Phys. Rev. Lett.*; Preprint cond-mat/0611738

図 : (a) ヘリカル構造の形成メカニズム : ワイヤ表面において原子列スリップが起こり、曲率のある、FCC(111) 面的 (2次元 hexagonal) 表面が出現する。(b) 多層ヘリカル金ナノワイヤの形成シミュレーションの例。11-4 型ヘリカルワイヤ形成の分子動力学計算。(c) 電子状態解析 : (a) の黒四角で示したワイヤ表面原子についての、原子面スリップ前後での局所状態密度 (LDOS) の比較。詳細は文献 [2] を参照。