

氏名(本籍)	伊 <sup>い</sup> 神 <sup>がみ</sup> 正 <sup>まさ</sup> 貫 <sup>つら</sup> (愛知県)		
学位の種類	博士(工学)		
学位記番号	博甲第2607号		
学位授与年月日	平成13年3月23日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	工学研究科		
学位論文題目	Defects in Carbon Nanotubes : Transport Properties and Electronic States (欠陥をもつカーボンナノチューブの輸送現象と電子状態)		
主査	筑波大学教授	理学博士	中尾 憲 司
副査	筑波大学教授	理学博士	植 寛 素
副査	筑波大学助教授	工学博士	常 次 宏 一
副査	東京大学教授	理学博士	安 藤 恒 也
副査	東京工業大学教授	理学博士	榎 敏 明

### 論 文 の 内 容 の 要 旨

カーボンナノチューブ(CN)は、グラファイト層がナノメートルのスケールでチューブ状に巻かれた構造を持つ、1次元性の新しい炭素物質であり、その構造に由来する独特な電子状態と特異な電子物性を示すこと、及びナノテクノロジーにおける新しい材料として、近年急速に研究が進展しているものである。CNの1次元性のために、CN上に導入された不純物の輸送現象に対する影響は非常に大きいものと期待されるが、不純物ポテンシャルのレンジが格子間隔よりも長い場合には不純物による電子の後方散乱が消失するという興味ある結果が最近理論的に示された。しかし、不純物ポテンシャルのレンジが格子間隔程度に短い格子欠陥のような場合については、その影響はこれまで明らかになっていない。

本論文では格子間隔程度に局在したポテンシャルを持つ欠陥が導入されたCNについて、その輸送現象を数値計算と $k \cdot p$ ハミルトニアンに基づく解析的方法とにより詳細に調べている。また、局在ポテンシャルを持つ欠陥の現実的な導入例として、フッ素を吸着させたグラファイト層について、その安定構造と電子状態を第一原理的計算で求めている。

まず、多チャンネル・ランダウアー公式を用いて格子欠陥を持つCNの第一サブバンドにおけるコンダクタンスを計算し、グラファイト層内の二つの副格子上の欠陥数の差( $\Delta N$ )が0, 1, 2以上の3通りの場合に対応してコンダクタンスのエネルギー依存性が全く異なること、特に欠陥ポテンシャルが大きい場合には、零エネルギーでのコンダクタンスが上記の3つの場合に対して基本コンダクタンス量子の2, 1, 0倍の値を取ることを見出している。またこのCNに独特のコンダクタンス量子化が欠陥のある場所に生じる不純物状態によって起こることを明らかにし、更に欠陥ポテンシャルが十分大きい場合について $k \cdot p$ ハミルトニアンに基づく有効質量理論によりコンダクタンス量子化を解析的にも示している。

次に、CNの軸に垂直な磁場がかかった場合のコンダクタンスを詳細に調べ、上記の3つの場合に対してコンダクタンスの磁場依存性が全く異なり、特に強磁場下では $\Delta N = 1$ の場合にコンダクタンスが基本コンダクタンス量子と一致し他の場合には0となることを見出している。またこの量子化の現象は強磁場下での電子が局在する位置との関係で説明できることを示し、さらに磁場中の(有効質量理論によりこれらの結果を解析的に導いている。さらに磁場の効果は欠陥の通る磁場の)チューブに垂直な成分のみで決まっていること、零エネルギーでの

磁気コンダクタンスの磁場依存性が一つの曲線上にスケールできることを明らかにしている。

最後に、フッ素が吸着したグラファイト層の安定構造と電子状態を、局所密度近似を用いた密度汎関数理論を用いて計算し、フッ素と結合する炭素原子はグラファイトの時の $sp^2$ 混成から $sp^3$ 混成に変化してその場所に $\pi$ 電子ネットワーク上での欠陥が生じ、フッ素吸着が $\pi$ 電子系に対する局在ポテンシャルを持つ欠陥の導入となること、そのポテンシャルはかなり大きいと見なせることを示している。

## 審 査 の 結 果 の 要 旨

新しいナノスケール炭素系物質として注目されているカーボンナノチューブについて、その伝導現象と電子状態に対する欠陥の影響に関する理論的研究を、詳細な数値計算と解析的方法により行い、多くの新しい事実を見出しその起源を明らかにした本論文の内容は高く評価できる。現在まで欠陥を持つカーボンナノチューブの系統的な実験が無く本論文の理論結果との対比ができないことは残念であるが、本論文はこの分野における今後の研究進展に対して重要な指針を与えるものである。

よって、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。