

氏 名 (本 籍)	若 <sup>わか</sup> 林 <sup>ばやし</sup> 克 <sup>かつ</sup> 法 <sup>のり</sup> (奈 良 県)
学 位 の 種 類	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	博 甲 第 2343 号
学位授与年月日	平成 12 年 3 月 24 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	Low-Energy Physical Properties of Edge States in Nano-Graphites (ナノグラファイトにおけるエッジ状態による低エネルギーでの物理的性質)
主 査	筑波大学教授 理学博士 中 尾 憲 司
副 査	筑波大学教授 工学博士 瀧 田 宏 樹
副 査	筑波大学助教授 博士 (理学) 有 馬 孝 尚
副 査	筑波大学助教授 工学博士 常 次 宏 一
副 査	筑波大学教授 P h . D . Manfred Sigrist

## 論 文 の 内 容 の 要 旨

ナノスケールのグラファイトは、端の効果が電子状態や物性に大きな影響を与える点で、炭素系物質の中で特異なものであり、著者の属する故藤田光孝助教授のグループで先駆的に研究が行われてきた。ナノグラファイトと言う名称もそこで提唱されたもので、著者は当初から研究の中心的役割を担った一人で、本論文はこれまでの研究成果をまとめたものである。

本論文の目的は、ナノグラファイトに特有な端に局在した電子状態（エッジ状態）について、その特徴を明らかにし、低エネルギーでの磁氣的性質と電気伝導特性に対するエッジ状態の寄与を理論的に解明することにある。

まず、エッジ状態は zigzag 端（及び bearded 端と cove 端）に生じるが、armchair 端では現れないことを、強結合法及び  $k \cdot p$  法により明らかにし、種々の場合について数値計算で具体的に示している。エッジ状態の特徴は、母体のグラファイトにおけるフェルミ準位の位置に部分的にフラットなバンドとして現れ、状態密度に鋭いピークを生じる点である。このことは、ナノグラファイトの電子物性がグラファイトや芳香族分子のそれと決定的に異なることを示唆する。また、磁場中における電子状態も強結合法及び  $k \cdot p$  法による定式化で詳しく調べており、エッジ状態が磁場で壊されないことを示している。更に、異方的超伝導体における Andreev 束縛状態とエッジ状態との類似性を検討して、エッジ状態が armchair 端では生じない理由を議論している。

次に、磁場中の電子状態の結果を基に、ナノグラファイトの軌道反磁性とスピン常磁性を計算し、特にエッジ状態に起因するスピン常磁性が Curie 的な温度変化を示すことを示し、他の炭素系物質とは異なり、ナノグラファイトでは高温での反磁性から低温で常磁性に変化することを予言している。また、磁場中の電子状態に対する電子間相互作用の効果とスピン波モードについても検討している。

最後に、zigzag 端を持つナノグラファイト・リボンについて、種々のジャンクションのモデルを考察し、そのコンダクタンスをフェルミエネルギーの関数として、Landauer 公式と反復グリーン関数法とにより求め、広く研究されているカーボン・ナノチューブ等とは異なり、コンダクタンス消失の現象が生じることを見出している。更に、このコンダクタンス消失がジャンクション領域における入射電子波と散乱電子波の共鳴によって生じる擬束縛状態の存在によって理解できることを示している。この擬束縛状態の出現はグラファイトに内在するカイラリ

ティーに起因することも指摘し、コンダクタンス消失の現象がナノグラファイトへの非磁性不純物や原子空隙の導入によっても現れ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ナノグラファイトの電子状態と電子物性について、丹念な理論的研究によって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。ナノグラファイトについては未だ実験結果が殆ど無く、本論文の理論的予測の検証ができないことは大変残念なことであるが、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。