

論文審査の結果の要旨

氏名 矢口 竜也

2次元状グラファイトを円筒状にした構造をもつカーボンナノチューブは、特定用途ではすでに工業的応用にむけた研究も進む一方、究極のナノワイヤーとしてこれを利用するための基礎研究が、世界的に急ピッチで進められている。そのような状況の下、本研究はカーボンナノチューブのキャップ（端の閉じた部分）を起源とする電子状態を、 π 電子系に対する強束縛近似による数値計算と有効質量近似という二つのアプローチによって取り扱い、その系統的な理解を目指したものである。

本論文は7章から構成される。第1章は序章であり、カーボンナノチューブに関する過去の研究の簡潔なまとめと本研究の目的を提示する。第2章ではグラファイト π 電子系の強束縛近似による取り扱い方法、グラファイトをまるめてチューブにしたときに現れる電子状態の特徴、その物理的な理解を助ける有効質量近似、5員環などのトポロジカルな欠陥の取り扱い方法、そのような欠陥を含むカーボンナノチューブキャップおよび接合部分に関する過去の理論研究、また関連する実験データの紹介を行う。本人の手になる研究は主に第3章以降である。第3章ではカーボンナノチューブのキャップとして考えられる構造の分類を行う。第4章では、様々なタイプのキャップにおける電子波の散乱（位相のずれ）を、強束縛近似の数値計算によって議論する。第5章では同じ問題を、より直感的な理解を助ける有効質量近似によって取り扱う。第6章では、位相のずれによって取り扱うことのできない局在キャップ状態を、やはり強束縛近似と有効質量近似の2つの手法で議論する。第7章は本論文の要約と結論である。

カーボンナノチューブキャップは、6員環だけからなる円筒状のグラファイトにトポロジカルな欠陥である5員環を6個導入することで生成することができる。このトポロジカルな欠陥は電子波の散乱を引き起こし、その結果、キャップ特有の電子状態がもたらされる。このような観点での電子状態や電気伝導特性に関する理論研究は、特定のキャップ形状については過去に報告されているが、本研究ではさまざまなキャップの形状について広く調べることで、より系統的なキャップ電子状態の理解を試みている。とくに、モデルの範囲で厳密に解くことはできるが大規模系への拡張や一般性の点で難のある強束縛近似の数値計算に加え、フェルミ準位近傍の近似理論ではあるが解析的取り扱いが可能な有効質量近似を用いて、数値計算結果の物理的な説明を行った点が、本論文の大きな特徴である。

なお本研究は、金属的な電子状態をもつことが知られるアームチェア型カーボンナノチューブを対象としている。

カーボンナノチューブ π 電子の伝播波は、キャップとの接合部から先端にむけて減衰し、位相差を得て散乱する。チューブのキャップの境界上にある再近接5員環間隔を底辺とする正三角形の高さを P としたとき、キャップ形状（5員環の配置）によらず、およそ $P/4$ の場所に有効反射端があると見なすことができ、あとはパリティに応じて 0 または π の位相差が生じるというのが、本研究で強束縛近似の数値計算から得られた結果である。有効反射端の位置は、有効質量近似では $0.24P$ となることが示され、さらに位相のずれからもとめた有限長ナノチューブのエネルギー準位は、キャップに局在する状態をのぞき、強束縛近似の結果とよい一致を見た。

キャップが高い対称性を持つ場合、伝播波と異なる対称性を持っている局在状態は位相のずれに寄与せず、従って位相のずれから局在状態を調べることができない。そこで本論文では、キャップ局在状態について、強束縛近似とキャップ先端付近の有効質量近似による取り扱いによって別途検討を行い、局在状態の波動関数の形状、ナノチューブのエネルギーとの対応関係について、一般的な知見を得ることができた。

以上のように、本論文はカーボンナノチューブキャップの電子状態に関して系統的に調べることによって、いくつかの興味深い知見を与えており、審査委員全員一致により、博士論文として十分な内容をもつものと判定された。なお本研究は安藤恒也教授との共同研究であるが、論文提出者が主体となって理論を構築したものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断された。したがって審査員全員により、博士（理学）の学位を授与できると認めた。