

## 審査の結果の要旨

氏名 平井 大介

金属カーボンナノチューブ (CNT) は、大きな許容電流密度とテラヘルツ高周波信号に十分応答可能な高いキャリア移動度を有するため、次世代高周波電子デバイス素子の候補として有力視されている。しかし、高周波信号の下での金属 CNT の交流応答特性は十分に理解されていない。この点に関する先行理論研究はあるものの、無欠陥の金属 CNT を対象としており、金属 CNT の合成の段階で少なからず含まれる欠陥・不純物が交流応答に与える影響は、その重要性にも関わらず未解明であった。本論文は、このような欠陥・不純物の影響に焦点を当てて金属 CNT の交流応答特性、特にエミッタンスの振舞いを理論計算によって解明することを目指したものである。本論文は 10 章からなる。

第 1 章は緒言であり、量子輸送特性に関するこれまでの実験的・理論的研究を、CNT 以外の系も含めて概観している。直流伝導特性に比べて交流応答特性の研究は少ないこと、CNT の交流応答特性に関する先行理論研究では無欠陥の CNT のみ扱っていて欠陥・不純物の影響についてはまだ研究されていないこと等を指摘して、本研究の目的を明確にした。

第 2 章から第 4 章までは、本研究で用いられている計算手法を述べている。第 2 章では、伝導特性を計算する手法である非平衡グリーン関数 (NEGF) 法について、まず直流伝導特性に対する方法論を概説した後、交流応答特性の表式を、変位電流の扱いや本研究で用いるワイドバンド極限近似も含めて述べている。第 3 章では、密度汎関数 (DFT) 法について概説している。第 4 章では、DFT 法と NEGF 法とを組み合わせて伝導特性を計算する手法の概略を述べている。なお、本研究では第 2 章及び第 4 章で概説した方法論に基づく計算プログラムの開発も行っている。また、第 6 章以外の計算では第 2 章の方法論を強束縛法と組み合わせた方法を用い、第 6 章の計算では第 4 章の方法論を用いている。

第 5 章と第 6 章では、原子空孔欠陥を一つだけ含む金属 CNT の交流応答特性の計算結果を述べている。第 5 章では、無欠陥の CNT のエミッタンスが誘導性応答を示すのに対し、原子空孔欠陥が導入されると空孔準位周辺で容量性応答を示すことを見出した。また、直径が大きな CNT ほど空孔準位周辺で大きな容量性応答を示すことを見出した。さらに、欠陥位置が中心領域の中央からずれている場合、直流コンダクタンスの振舞いは変化しないのに対し、エミッタンスは欠陥位置に依存した振舞いを示すことを明らかにした。第 6 章では、欠陥周辺の  $\sigma$  軌道から構成されるダングリリングボンド準位と 5 章で解析した空孔準位とで交流応答の振舞いを比較した。ダングリリングボンド準位の場合には、容量性応答ピークとともに、その近傍に誘導性ピークも現れることがわかった。この誘導性ピークは空孔準位周辺では確認できない。単純なモデルに基づく解析によって、このサテライト誘導性ピークの挙動が容量性ピークの鋭さと深く関係していることを明らかにした。

第 7 章では、欠陥が 2 個ある場合について解析している。この場合、欠陥の間で起こる電子波の量子干渉効果のため、共鳴トンネルや共鳴散乱が生じる。解析の結果、エミッタンスは共鳴トンネルや共鳴散乱が生じる場合にそれぞれ誘導性、容量性ピークを示すこと、および、非常に鋭い誘導性ピークの近傍には容量性ピークが現れることを見出した。そして、単純なモデルを用いた解析の結果、誘導性ピークが鋭くなるほど、その近傍に容量性ピークが強く現れることを明らかにした。

第 8 章では、欠陥・不純物、格子歪み、周辺環境との相互作用などによって生じる無秩序なポテンシャルの影響を解析している。直流コンダクタンスが無秩序ポテンシャルによる電子散乱のため CNT 長とともに減少するのに対し、エミッタンスは無秩序ポテンシャルの大きさに依存して異なる振る舞いを示すことがわかった。すなわち、無秩序ポテンシャルが弱い場合にはエミッタンスが CNT 長とともに増加するのに対し、無秩序ポテンシャルが強い場合には、エミッタンスは CNT 長とともにまず増加した後、弱局在領域に入ると減少し、容量性応答へ転移することが明らかとなった。

第 9 章では、不純物ポテンシャルの到達距離による交流応答の振る舞いの変化を解析している。金属 CNT の場合、格子定数より広がった長距離ポテンシャルによる電子散乱は抑制されることが先行理論研究で示されている。このことに対応して、到達距離による交流応答の振る舞いの違いが見られた。短距離ポテンシャルが存在する場合、エミッタンスは CNT 長と共にはじめは線形に増加し、その後線形な振る舞いからずれ、次第に値が小さくなる。これに対し、長距離ポテンシャルが存在する場合には、CNT 長によらずエミッタンスは CNT 長と共に線形に増加することがわかった。さらに、ポテンシャルが強くなるとエミッタンスは増加することを見出した。

第 10 章は総括である。

以上のように、本論文は、金属 CNT の交流応答特性における欠陥・不純物の影響を理論計算により解析した。無欠陥の場合と空孔がある場合との違い、空孔準位とダングリングボンド準位における違い、共鳴トンネル準位と共鳴散乱準位における違い、無秩序ポテンシャルの強弱による違い、不純物ポテンシャルの到達距離による違いといった様々な面から交流応答特性の振る舞いを明らかにし、ナノスケール電気特性を理解する上で有用な知見を得た。よって本論文のナノスケール電子物性学、計算マテリアル工学への寄与は大きい。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。