



Title	Theoretical study of mechanical / electronic properties of carbon nanotubes and application for the nano-scale switching device
Author(s)	小野, 裕己
Citation	大阪大学, 2007, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/47309
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名	お 小 野 ゆう 裕 き 己
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	第 2 1 2 7 6 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 19 年 3 月 23 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 基礎工学研究科物質創成専攻
学 位 論 文 名	Theoretical study of mechanical/electronic properties of carbon nanotubes and application for the nano-scale switching device (炭素ナノチューブの力学的/電子的特性の理論的評価とそのナノスケールスイッチングデバイスへの応用)
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 鈴木 直 (副査) 教 授 戸部 義人 教 授 吉田 博 教 授 松本 和彦 助教授 草部 浩一

論 文 内 容 の 要 旨

第一原理電子状態計算とモデル計算を併用することによって、「1・ナノチューブとフラーレン内包ナノチューブ（ピーポッド）との力学的特性の比較評価」および、「2・振動するナノチューブの伝導特性解析」を行った。それぞれの結果から、ナノチューブの幾何学的構造に起因する特異な物性を理論的に指摘し、ナノチューブが新奇デバイスとして利用できる可能性があることを指摘した。同時にこれらの研究における現行計算手法の限界を述べ、その解決に向けた「3・非局所交換相関効果計算コードの開発」を行った。

1 フラーレン内包によるナノチューブの力学特性の変化を把握するためにナノチューブとピーポッドの特徴的な固有振動モードの振動数を解析・比較した。結果、フラーレン内包によって定性的にナノチューブの力学的特性が変化することが分かった。具体的には「曲げに強く・側面圧縮に弱い」ナノチューブの特徴に対して、ピーポッドでは逆に「曲げに弱く・側面圧縮に強い」傾向があることが分かった。

2 振動するナノチューブの両端を電極基板に固定しても無理な負荷がかからない「局在振動モード」を持つ、くびれたタイプのナノチューブを提案し、振動・伝導解析を行った。結果、電子の透過振幅が縦波振動の場合は大きく減少すること、フェルミ準位近傍でも変化し得ること、伝導度がむしろ上昇する場合があること、また伝導特性が定性的に大きく変化することを見つけた。これらはくびれ構造が引き出す特殊な性質であり、単純なナノチューブでは起こりえない現象である。

3 上述研究で用いられた局所密度近似 (LDA) の抱える欠点を克服するための新たな第一原理的計算手法開発に着手した。LDA を用いた既存コードに容易に挿入できるアルゴリズムを作った。さらに計算量の観点から実現的ではなかったこのフォーミュレーションの大部分を解析的に解いた。このため実際にコード開発を進めることができた。

論文審査の結果の要旨

炭素ナノチューブの理論的研究において、ナノチューブのもつ構造の特徴から発生する特異な振動特性、電気伝導特性の理解が重要であることは、広く認識されている。この中で、フラーレン内包ナノチューブ（以下ピーポッドと略記する）のもつ振動特性や、ナノチューブの振動特性と電気伝導特性の相関を考えることは、理論的に未解明の点が残っていること、また現象の応用に関して検討すべきものがあることから、興味深い課題である。特に、中性の炭素構造に特有の強いファンデルワールス型相互作用の理論評価は、第一原理的評価法自体がまだ開発途上にあるものである。

本論文において、申請者の小野君は、ピーポッドの振動解析、ナノチューブ架橋構造における振動構造の同定と伝導特性の解明を通じて、ナノチューブ系や関連物質に対する理論的知見を得ている。まず、ピーポッドの振動解析を、第一原理計算結果から得た2体ポテンシャルを用いた場合と、レナードジョーンズ型ポテンシャルを用いた場合の双方の結果の比較から解析し、フラーレン内包の効果を纏めた。続いて、ナノチューブ架橋系として欠陥のない直線状ナノチューブにおいて実用上問題となっていたゼロバイアス近傍での伝導度コントロールの可能性を開くため、くびれを持たせたナノチューブの活用を提案し、断熱近似の範囲内であるがそこに振動励起をした場合に電気伝導度の変化が観測できることを指摘した。

同時に小野君は、Rydberg らが 2000 年に提出したファンデルワールス密度汎関数法の方程式系を元にして、実用化へ向けた方程式系の整備とアルゴリズムの改善を行い、大幅な計算時間の短縮を行った。これにより、この方法が実用計算で利用出来るものであることを示した。この結果は、今後ファンデルワールス力の第一原理的評価が必要とされる分野への応用を開くものとして着目すべき結果である。

以上の審査結果から、申請された博士論文は、博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。