

Title	Theoretical study on the electric and magnetic properties of one-dimensional carbon based nanomaterials with transition metal atoms
Author(s)	Md., Mahmudur Rahman
Citation	大阪大学, 2007, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/48567">https://hdl.handle.net/11094/48567</a>
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、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

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

Osaka University

氏 名	エムディ マホムドゥル ラーマン MD. MAHMUDUR RAHMAN
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 2 1 1 6 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 工学研究科応用物理学専攻
学 位 論 文 名	Theoretical study on the electric and magnetic properties of one-dimensional carbon based nanomaterials with transition metal atoms (遷移金属原子を含む一次元炭素系ナノマテリアルの電気的・磁氣的性質の理論的研究)
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 笠井 秀明  (副査) 教 授 八木 厚志 理学研究科教授 笠井 俊夫 助教授 影島 賢巳

### 論 文 内 容 の 要 旨

本論文は遷移金属原子を含む一次元炭素系ナノマテリアルとして遷移金属ワイヤー内包カーボンナノチューブと多層ベンゼン・遷移金属サンドイッチ形錯体鎖を選び、第一原理電子状態計算を援用して、それらの安定性、電気的、磁氣的性質に関する理論的研究を行い、それらをまとめたものである。

第 1 章では、序論として本研究の目的について述べた。その中で、遷移金属ワイヤー内包カーボンナノチューブと多層ベンゼン・遷移金属サンドイッチ形錯体鎖の安定性、電気的、磁氣的性質を大きく左右する  $d\pi$  軌道間相互作用の重要性を指摘した。また、経験的パラメータを使わずに物性を調べる計算方法として、密度汎関数理論に基づいた第一原理電子状態計算の必要性と重要性について述べた。

第 2 章では、鉄ワイヤー内包 (3,3) 単層カーボンナノチューブ (SWCNT) について解析した。その結果、この系では鉄ワイヤーが SWCNT の中央を通る軸より壁側に位置し、鉄原子の  $d$  軌道と炭素原子の  $\pi$  軌道間に共有結合に近い結合が形成される。また、この系はスピン偏極せずに半導体となることと鉄原子もその磁気モーメントを失うことを見出した。

第 3 章では、コバルトワイヤー内包 (3,3) SWCNT について解析した。その結果、この系でもコバルトワイヤーが SWCNT の中央を通る軸より壁側に位置し、鉄ワイヤーの場合と同様に、コバルト原子の  $d$  軌道と炭素原子の  $\pi$  軌道間に共有結合に近い結合が形成される。さらに、コバルト原子の電子数は鉄原子より一つ多く、この電子が伝導に寄与する。このため、多数スピン電子は金属的性質を示し、少数スピン電子は半導体的性質を示す。したがって、この系にはハーフメタルの性質が現れることを見出した。

第 4 章では、多層ベンゼン・バナジウムサンドイッチ形錯体鎖について解析した。その結果、この系では反強磁性的な場合よりも強磁性的な場合が安定であり、ハーフメタルとなることを見出した。主として、バナジウム原子間に働く二重交換相互作用によって強磁性状態が発現していることを指摘した。

第 5 章では、多層ベンゼン・鉄サンドイッチ形錯体鎖について解析した。その結果、この系では多層ベンゼン・バ

ナジウムサンドイッチ形錯体鎖の場合と異なり、強磁性的な場合よりも反強磁性的な場合が安定であり、半導体となることを見出した。主として、ベンゼンの $\pi$ 軌道を介した鉄原子間の超交換相互作用によって反強磁性状態が発現していることを指摘した。

第6章では、各章で得られた結果について総括し、今後の展望について述べた。

## 論文審査の結果の要旨

一次元物質は一般的に、バルクと異なる性質をもっており、学術的な研究の対象であるばかりでなく、応用面でも重要である。本論文は遷移金属原子を含む一次元炭素系ナノマテリアルとして遷移金属ワイヤー内包カーボンナノチューブと多層ベンゼン・遷移金属サンドイッチ形錯体鎖を選び、第一原理電子状態計算を援用して、それらの安定性、電気的、磁氣的の性質に関する理論的研究を行い、それらをまとめたものである。とりわけ、遷移金属ワイヤー内包カーボンナノチューブと多層ベンゼン・遷移金属サンドイッチ形錯体鎖の安定性、電気的、磁氣的の性質を大きく左右する $d$ - $\pi$ 軌道間相互作用の重要性を指摘している。本研究における主な成果を要約すると以下のとおりである。

(1)鉄ワイヤー内包(3,3)単層カーボンナノチューブ(SWCNT)について解析し、以下のことを見出している。この系では鉄ワイヤーがSWCNTの中央を通る軸より壁側に位置し、鉄原子の $d$ 軌道と炭素原子の $\pi$ 軌道間に共有結合に近い結合が形成される。また、この系はスピン偏極せずに半導体となり、鉄原子も磁気モーメントを失う。

(2)コバルトワイヤー内包(3,3)SWCNTについて解析し、以下のことを見出している。この系でもコバルトワイヤーがSWCNTの中央を通る軸より壁側に位置し、鉄ワイヤーの場合と同様に、コバルト原子の $d$ 軌道と炭素原子の $\pi$ 軌道間に共有結合に近い結合が形成される。さらに、コバルト原子の電子数は鉄原子より一つ多く、この電子が伝導に寄与する。このため、多数スピン電子は金属的の性質を示し、少数スピン電子は半導体的の性質を示す。したがって、この系にはハーフメタルの性質が現れる。

(3)多層ベンゼン・バナジウムサンドイッチ形錯体鎖について解析している。その結果、この系では反強磁性的な場合よりも強磁性的な場合が安定であり、ハーフメタルとなることを見出している。主として、バナジウム原子間に働く二重交換相互作用によって強磁性状態が発現していることを指摘している。

(4)多層ベンゼン・鉄サンドイッチ形錯体鎖について解析している。その結果、この系では多層ベンゼン・バナジウムサンドイッチ形錯体鎖の場合と異なり、強磁性的な場合よりも反強磁性的な場合が安定であり、半導体となることを見出している。主として、ベンゼンの $\pi$ 軌道を介した鉄原子間の超交換相互作用によって反強磁性状態が発現していることを指摘している。

以上のように、本論文は遷移金属原子を含む一次元炭素系ナノマテリアルとして、遷移金属ワイヤー内包カーボンナノチューブと多層ベンゼン・遷移金属サンドイッチ形錯体鎖を選び、それらの安定性、電気的、磁氣的の性質を理論的に調べたもので、基礎的な面のみならず、応用の面でも有益な知見を得ており、応用物理学、特に物性物理学に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。