

## 審査の結果の要旨

氏名 久間 馨

本論文は「ナノチューブおよびナノチューブ複合系の電子構造」と題し、密度汎関数理論に基づく電子構造計算によって、ナノチューブ状物質および複合系における新たな物性の解明を目指したものである。カーボンナノチューブ(CNT)は、グラフェンを円筒にして周方向の境界条件を印加した物質とみなせる。ナノチューブを構成可能な原子層は、グラフェンだけにとどまらない。六方晶窒化ホウ素によるBNナノチューブ(BNNT)や、二硫化モリブデンのナノチューブ(MoS<sub>2</sub>NT)など、様々なナノチューブが存在する。チューブ側壁の原子層の違い、カイラリティの違い、および複合系の形成によって、多様な電子構造をもつ。したがって、種々のナノチューブおよびその複合系を探索することによって、新奇な物性が得られ、また電子デバイスなどの応用において所望の物性をもつ物質が得られることが期待されている。近年、CNT, BNNT, MoS<sub>2</sub>NT を組み合わせた一次元ヘテロ構造、ヘテロナノチューブの高品質な実験的合成が報告され、ナノチューブとその複合系の構造制御・材料開発が大きく前進した。しかし、実験的な電気測定や光学測定が可能になってきた反面で、CNT 内包 BNNT(CNT@BNNT)や、単層 MoS<sub>2</sub>NT の電子構造は理論的に未解明な点が多い。したがって本論文では、それらの電子構造を明らかにするとともに、それぞれの新たな物性について論じている。本論文は、全6章から成る。

第1章は、「序論」であり、研究背景および研究目的を述べている。ナノチューブおよびその複合系による電子構造の多様性についてまとめ、本研究の位置付けが示されている。

第2章は「計算方法」であり、計算手法について論じている。密度汎関数理論、平面波基底と擬ポテンシャル、有効遮蔽媒質法(ESM)について説明し、手法の妥当性を検証している。

第3章は「CNT@BNNT のエネルギー論と電子構造」であり、BNNT に内包さ

れることによる CNT の物性変調を解明した。CNT@BNNT は電場を用いて内層の CNT へのキャリアドーピングが可能で、絶縁層付きの伝導体チャンネルとして機能する。また、CNT 由来のバンドギャップはカイラリティに依存して数十 meV 程度変調することを示し、電子構造に圧縮歪みと同じ傾向の変化が起こることを明らかにしている。

第 4 章は、「単層 MoS<sub>2</sub> NT のバンドギャップクロスオーバー」であり、単層 MoS<sub>2</sub> NT の電子構造の直径依存性を解明している。従来単層 MoS<sub>2</sub> NT はジグザグ型を除き間接ギャップを持つと考えられてきたが、これは BNNT と MoS<sub>2</sub> NT のヘテロナノチューブからのフォトルミネッセンス(PL)が実験的に観察されたことと整合しない。本章では、直径が 5.2 nm 以上と大きい場合は二次元の MoS<sub>2</sub> と同様に直接ギャップを持つことを示した。間接-直接バンドギャップクロスオーバーの発生とその起源を明らかにし、実験的に PL 活性となる理由を理論的に提示した。

第 5 章は「MoS<sub>2</sub> NT バンドルのカゴメバンド」であり、MoS<sub>2</sub> NT をバンドルさせた結晶の電子構造を解析している。チューブ軸に垂直な方向の電子状態がカゴメバンドと呼ばれる特異な分散関係を持つことを示し、チューブ外側の S 原子由来の波動関数の重なりによってこのような電子状態が発生していることを明らかにした。カゴメバンドは遍歴電子系における磁性の起源であり、スピントロニクスなどへの将来的な応用が期待される。

第 6 章は「結論」であり、上記の研究結果をまとめたものである。

以上要するに、本論文は CNT@BNNT および、単層 MoS<sub>2</sub> NT とそのバンドルについて電子構造と新たな物性を理論的に解明したものであり、今後の低次元ナノ物質による物性の応用、材料探索に有用な知見を述べている。したがって、ナノ材料工学及び分子熱工学の発展に寄与するものと考えられる。

以上より本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。