

論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)	氏名	下 村 祐 司
学位授与の要件	学位規則第4条第①・2項該当		
論 文 題 目			
Numerical Study of the Dephasing Effect on a Perfectly Conducting Channel in Graphene Nanoribbons with Zigzag Edges (ジグザグ端グラフェン・ナノリボンの完全伝導チャンネルに対する位相緩和効果に関する数値的研究)			
論文審査担当者			
主 査	教 授	高 根 美 武	
審査委員	教 授	角 屋 豊	
審査委員	教 授	嶋 原 浩	
審査委員	准教授	西 田 宗 弘	
〔論文審査の要旨〕			
<p>グラフェン・ナノリボンとは二次元炭素結晶グラフェンをナノサイズのリボン状に切り出した準一次元系である。特に両端の炭素原子がジグザグ状に配列したものをジグザグ端グラフェン・ナノリボン (ZGNR) と呼ぶ。ZGNR は波数空間において二つのエネルギー・バレーを有するが、各バレーにおいて一方に進む伝導チャンネル数と逆方向に進む伝導チャンネル数は1だけずれている。バレー間散乱が無視でき各々のバレーを独立な部分系と見なせる場合、このチャンネル数のずれによって透過確率が1となる伝導チャンネルが一つ現れることが指摘されていた。このようなチャンネルは不純物による乱れの存在に関わらず常に透過確率が1になるため完全伝導チャンネル (PCC) と呼ばれる。PCC を一つ持つ系の無次元コンダクタンスは系の長さの増大とともに量子化値1へと漸近し、無限大の極限でも1より小さくならない。このような極めて特異な振る舞いは理論と実験の両面から大きな注目を集めている。しかし現実的にはバレー間散乱を完全には無視できないため PCC は系の長さの増大に伴って徐々に不安定化する可能性を否定できない。さらに、現実的状況では不可避免的に存在する位相緩和が PCC の発現を妨げる可能性も懸念される。PCC の実験的な検証を促すうえで、このような影響の理論的解明が強く望まれていた。</p> <p>本論文の著者は、無次元コンダクタンスの数値計算を通して ZGNR の PCC に対する位相緩和の影響を詳細に解析し、位相緩和は PCC の発現を妨げず、むしろそれを安定化させることを明らかにした。本論文の構成は以下の通りである。</p> <p>第1章では研究の背景について述べている。グラフェンやZGNRの特徴について概説したのち、PCCの発現が期待される候補系について概観し、さらに本研究の目的を提示している。</p> <p>第2章ではモデルと定式化について説明している。数値計算では不純物を乱雑に配置した蜂の巣格子上の強束縛モデルを用い、不純物としては弱いバレー間散乱をもたらす長距離</p>			

型と強いバレー間散乱をもたらす短距離型の二種類が仮定されている。位相緩和の影響を取り込むために、系をいくつかの小領域に仮想的に等分割し、隣り合う小領域間において波動関数の連続性の代わりに電流の連続性を要請した。各小領域の長さは位相緩和長に相当する。以上のように構築したモデルにおいて系の透過確率を数値的に求めれば、ランダウアーの公式に基づいて無次元コンダクタンスを得ることができる。

第3章は本論文の中心的な部分に相当する。数値計算の結果を与え、位相緩和の影響を議論している。さらに、ボルツマン輸送理論から導かれたコンダクタンスの表式との比較も行っている。この理論は位相緩和が強い極限で正当化されるものである。

長距離型不純物を配置した場合の無次元コンダクタンスは、系の長さの増大とともに1に向かって急速に減衰し、1を下回るとゆっくりとした減衰へと移行する。著者は、位相緩和を強くするほど1以下の領域における0への減衰が緩和され、広い領域において1に近い値が維持されることを見出した。これは位相緩和によってPCCが安定化されたことを意味する。PCCはカーボン・ナノチューブ等においても発現することが知られているが、それらは位相緩和に対して脆弱である。位相緩和に対して頑強なPCCが見出された意義は大きい。著者は、位相緩和によってアンダーソン局在が抑制され、そのためPCCが間接的に安定化されたと解釈している。短距離型不純物を配置した系では無次元コンダクタンスは速やかに0へと減衰し、PCCの発現は認められない。位相緩和を加えた場合、無次元コンダクタンスは系の長さに反比例しオームの法則に従うことを見出した。これは位相緩和の影響によって古典的な振る舞いが顕在化したためと考えられる。位相緩和が強い場合の数値計算結果は、長距離型と短距離型のどちらにおいてもボルツマン輸送理論と非常に良く一致した。これは、本論文において用いられた位相緩和モデルがその本質を捉えていることを示唆する重要な知見と認められる。

第4章では得られた成果をまとめ、結論を述べている。

上記の通り、著者はZGNRのPCCに対する位相緩和の影響を理論的に検討し、位相緩和によってPCCが安定化することを明らかにした。また、その安定化を説明する合理的な解釈を与えている。一般に位相緩和は様々な物理現象の観測を妨げると考えられており、建設的な役割を果たす事例は極めてまれである。本論文の成果はZGNRがPCCの観測に適した系であることを示唆し、今後の実験的研究の進展を促すと期待される。

以上、審査の結果、本論文の著者は博士（理学）の学位を授与される十分な資格があるものと認められる。