

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Physics and Chemistry of Defects in a Graphitic Monolayer
著者(和文)	ZiatdinovMaxim Al bertovich
Author(English)	Maxim Ziatdinov
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第9620号, 授与年月日:2014年9月25日, 学位の種類:課程博士, 審査員:森 健彦,木口 学,石川 謙,塩谷 正俊,早水 裕平,榎 敏明
Citation(English)	Degree:., Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第9620号, Conferred date:2014/9/25, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第		号	学位申請者氏名	Maxim A. Ziatdinov	
		氏名	職名		氏名	職名
論文審査	主査	森 健彦	教授		塩谷 正俊	准教授
審査員	審査員	木口 学	教授	審査員	早水 裕平	准教授
		石川 謙	准教授		榎 敏明	名誉教授

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は、「Physics and chemistry of defects in a graphitic monolayer (単層グラフェン欠陥の物理と化学)」と題し、グラフェン上に作製した欠陥の構造に着目し、その幾何学的構造、並びに、化学的結合構造と電子構造の相関について、走査型トンネル顕微鏡による観察と第一原理計算による理論解析により研究を行っている。英文で書かれており、以下の6章で構成されている。

第1章 “Introduction”では、2次元蜂の巣構造からなる炭素原子膜であるグラフェンの電子構造と欠陥や端の形成による電子構造の変化について、物理的、化学的側面から、今までの研究から得られた知識を整理し、研究の現状について述べている。グラフェンの2次元構造は単位格子に2つの独立な格子点を有し、運動エネルギーが運動量に線形の関係で表現できることから、その電子構造が質量の無いDirac型フェルミ粒子描像で記述できることが示されている。また、グラフェン上に作製された欠陥やグラフェン端では、その電子構造は大きく影響を受け、その幾何学構造がアームチェア型構造を持つ場合には電子波干渉が起り、ジグザグ型構造では端原子に局在したエッジ状態(ゼロモード状態)と呼ばれるスピン分極した状態が形成されることを示している。これらの背景の基に、グラフェン上での欠陥の構造に着目し、電子構造の解明をする本研究の目的が示されている。

第2章 “Methods”では、本研究で用いる Ar イオンスパッタリングによる欠陥形成と欠陥端の炭素原子の水素終端の方法、観測手段として用いるトンネル顕微鏡測定法、また、理論解析に用いた第一原理計算手法(density functional theory (DFT))について述べている。

第3章 “Direct imaging of monovacancy-hydrogen complexes”では、1個の炭素原子が抜けた欠陥の電子構造について述べ、トンネル顕微鏡観察と DFT 計算の結果を踏まえ、欠陥周囲の3個の炭素原子がそれぞれ1個の水素原子で終端された構造では、Liebの定理から期待される通り、1つのゼロモード状態が形成され、また、3個の端炭素原子の内、1つが2個の水素原子で終端され、欠陥に4個の水素原子の有る場合にはゼロモードが消失することと結論し、水素と炭素から出来る化学結合構造によって電子構造が大きく変化すると述べている。また、欠陥端に結合した水素原子は拡散運動し、これに伴い、欠陥での電子構造は多様な変化を受けることを見出している。

第4章 “Visualization of electronic states on atomically smooth graphitic zigzag edges with different types of hydrogen termination”では、良く定義された端をもつ欠陥を作製し、欠陥端の幾何学構造と水素終端構造の違いによる電子構造の変化をトンネル顕微鏡像、トンネルスペクトル、DFT計算の結果から解析している。全ての端炭素原子が1水素化されたジグザグ端では端に局在したゼロモード状態が形成され、スペクトルの解析からその電子状態はスピン分裂していることを見出している。また、端炭素原子3個に1個が2水素化されると、ゼロモード状態が消失し、代わって $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 超格子が形成されることを見出し、アームチェア端と同様に、谷間散乱による遷移の結果、電子波干渉が発現していると結論している。更に、2つのジグザグ端の交点でのゼロモード状態の有無について解析し、2つのジグザグ端が 60° の角を形成したとき交点でエッジ状態が消失していることを見出し、交点にジグザグ端を形成する部分格子と異なる格子点の存在を推論している。

第5章 “Effect of structural and chemical disorder on the electronic properties of graphitic armchair edges”では、極低温トンネル顕微鏡を用いた、アームチェア端の高分解能格子像観察とDFT計算から、アームチェア端に存在する2つの炭素原子がそれぞれ1、2個の水素原子で終端された場合、ゼロモードが発生することを明らかにしている。

第6章 “Summary and Outlook”では、本研究で得られた結果が総括としてまとめられている。

これを要するに本論文は、グラフェン上に形成された欠陥の幾何学構造と化学的結合構造を詳細に解析し、その電子構造が多様に変化することと、そのことがグラフェン欠陥の電子活性、化学活性と深く結びつくことを明らかにし、炭素材料の科学的解明に有用な貢献をしており、工学上、貢献するところが大きい。よって本論文は博士(工学)として十分な価値があると認められる。