

博士論文審査報告書

論文題目： Interpretation of electric conduction phenomena through nanostructure bridge
by the Friedel sum rule

「フリーデル総和則による原子架橋系における電気伝導現象の解釈」

申請者： 小谷 祐介

1. 論文内容の要旨

原子鎖や分子などが電極を架橋した系を議論する際に、架橋内の個々の原子における中性条件を用いた解析がしばしば用いられる。しかしながら、一般的な手法によって記述された電気伝導度には、架橋系における電荷と電気伝導度との関連性を示すような情報は含まれておらず、原子架橋系に対して中性条件を導入するという指導原理は無い。これに対して申請者は、原子架橋系の電気伝導現象を散乱問題とみなすことにより位相のずれにより記述する理論に注目し現象の解釈を行った。この理論では、電気伝導度がフリーデル総和則を満足する位相のずれによって記述されることから、架橋系の電荷と関連付けられる。これにより、指導原理として系に電気的中性条件を導入することを可能にした。これをもとに、系全体の中性条件を課した架橋系電気伝導度の議論を行った。具体例として、Au 架橋系において特徴的な現象である電気伝導度の量子化、Pt および Al 架橋系における電極間距離の増加に伴う電気伝導度の上昇が、フリーデル総和則を課す事によって一貫して解釈される事を示した。また、これらが架橋内部原子のエネルギー準位がフェルミエネルギー位置にピン止めされる効果によるものである可能性を指摘した。この結果は、このような系の今後の研究に対して、重要な寄与をするものと考えられる。

2 . 論文審査結果

本論文で申請者は、原子・分子架橋系における電気伝導度の位相のずれを用いた表式から出発し、位相のずれが Friedel 総和則を満足することを利用して、架橋系における電気的中性条件を満たすための指導原理を確立し、Au 架橋系に代表される電気伝導度の量子化、Pt および Al 架橋系において観測される電極間距離の増加に伴う電気伝導度の上昇が、フリーデル総和則を課す事によって一貫して解釈される事を示した。また、これらが架橋内部原子のエネルギー準位がフェルミエネルギー位置にピン止めされる効果によるものである可能性を指摘した。これらの成果は、今後の架橋系電気伝導度に関する研究の基礎となる重要な寄与をなすものであり、今後の研究に対して指針を与えるものである。よって、本論文は、博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。

また、平成23年1月26日、論文内容およびこれに関連する事項について試問を行った結果、合格と判定した。

主査： 馬越 健次 印

副査： 高橋 慶紀 印

： 坂井 徹 印

： 鈴木 直 印

(関西大学システム理工学部、教授)

： 島 信幸 印