

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	ダイヤモンド同位体超格子での電子-格子相互作用の理論研究
Title(English)	Theoretical Study of Electron-Phonon Interactions in Isotopic Diamond Superlattice
著者(和文)	坂東優樹
Author(English)	Yuki Bando
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第11044号, 授与年月日:2019年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:齋藤 晋,吉野 淳二,西森 秀稔,村上 修一,西田 祐介,是常 隆,渡邊 幸志
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11044号, Conferred date:2019/3/26, 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	坂東 優樹	
論文審査 審査員		氏名	職名		
	主査	斎藤 晋	教授	西田 祐介	准教授
	審査員	吉野 淳二	教授	是常 隆	准教授
		西森 秀稔	教授	渡邊 幸志	主任研究員
		村上 修一	教授		

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は、“Theoretical Study of Electron-Phonon Interactions in Isotopic Diamond Superlattice”と題し、 ^{12}C からなる層と ^{13}C からなる層が交互に積層したダイヤモンド同位体超格子において電子格子相互作用が電子構造に与える影響を理論的に解明した研究について報告がなされている。

第 1 章 Introduction では、半導体における最重要物性値であるバンドギャップ値が、電子格子相互作用によって減少する zero-point renormalization について説明がなされている。そして、 ^{12}C からなるダイヤモンド結晶と ^{13}C からなるダイヤモンド結晶におけるバンドギャップ値の違いについて紹介がなされている。さらに、2009 年に作成された ^{12}C からなる層と ^{13}C からなる層が交互に積層したダイヤモンド同位体超格子において観測されたキャリアの ^{12}C 層への閉じ込め現象について説明がなされ、同系における電子格子相互作用の役割と電子構造の解明が本論文の主要課題であることが述べられている。

第 2 章 Theoretical and Computational Backgrounds では、固体の電子構造を定量的に記述する密度汎関数法について紹介がなされた後、本研究で適用する Wannier 軌道を用いて電子構造を記述するハミルトニアンが導出がなされている。そして、固体結晶において電子系が原子核に及ぼす力を第一原理から計算し、フォノンを正確に記述する手法である Density Functional Perturbation Theory の紹介の後、電子格子相互作用を扱う手法と、その Wannier 軌道を用いた定式化、さらには、本研究で展開された自己無撞着準粒子 GW 法について説明がなされている。

第 3 章 Phonon Modes in [001] and [111] Isotopic Diamond Superlattices では、[001]方向、および[111]方向に積層されたダイヤモンド同位体超格子におけるフォノンの状態密度と固有振動の振幅の空間分布が詳しく解析され、報告されている。本研究においては、Density Functional Perturbation Theory と Force constant model との組み合わせにより、各層が数 nm の厚さを持つ同位体超格子においても、高精度でフォノンを予測する手法が開発され、用いられており、3nm 程度の厚さ以上を持つ系では、 ^{12}C からなる層と ^{13}C からなる層において、それぞれバルクのフォノンと同等のフォノンが定義されていることを報告している。

第 4 章 Development of Quasiparticle Tight-Binding Model においては、自己無撞着準粒子 GW 法について、Wannier 軌道を用いた本研究における新しい適用方法が詳細に述べられている。特に、自己エネルギー演算子の非対角項の重要性が述べられている。

第 5 章 Validity of Our Quasiparticle Tight-Binding Model においては、4 章で紹介された新たな手法による電子構造計算手法の精度について報告がなされている。薄い膜厚を持つ同位体超格子について、新手法の結果をより厳密な手法による結果と比較・解析し、新手法が十分な定量的精度を持つことが示されている。

第 6 章では、 ^{6}C からなる層と ^{24}C からなる層が交互に積層した仮想的なダイヤモンド同位体超格子に関する結果が、まず報告されている。この系は、 ^{12}C からなる層と ^{13}C からなる層が交互に積層した現実のダイヤモンド同位体超格子よりもかなり大きなバンドオフセットを持つ系となると予想され、本論文の手法が電子構造の膜厚依存性を的確に記述できるかを検証する格好の舞台となっている。結果として、価電子帯頂上における量子井戸構造の形成が膜厚の関数として見事に予測され、本手法の有用性と精度が確認されている。

第 7 章では、 ^{12}C からなる層と ^{13}C からなる層が交互に積層した、現実のダイヤモンド同位体超格子についての結果が報告されている。その電子構造における量子井戸構造の形成が、層厚 20 nm 程度で明確に現れることが示されており、本研究の主要課題である、ダイヤモンド同位体超格子の電子構造の詳細解明がなされたことが示されている。

第 8 章では、本研究の意義と今後の同位体超格子の研究展開について述べられている。

以上をまとめると、本論文における研究は、これまで理論的な解析がなされていなかったダイヤモンド同位体超格子における電子格子相互作用の定量的な取り扱いに成功し、そのバンド構造の精密な予測に道を開いたものであり、今後の同位体超格子を用いた半導体応用にも重要な寄与を与える研究である。よって、本論文は博士（理学）の学位論文として高い価値があると認められる。