

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Electronic Properties and Impurity-Induced States of Hexagonal Boron Nitride Layers: A First-Principles Study
著者(和文)	芳賀太史
Author(English)	Taishi Haga
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11690号, 授与年月日:2022年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:齋藤 晋,村上 修一,三宅 隆,古賀 昌久,平原 徹
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11690号, Conferred date:2022/3/26, 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

(博士課程)

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	芳賀 太史	
論文審査 審査員		氏名	職名	氏名	職名
	主査	斎藤 晋	教授	平原 徹	准教授
	審査員	村上 修一	教授		
		三宅 隆	教授		
古賀 昌久		准教授			

論文審査の要旨 (2000 字程度)

わずか一層の原子膜からなる系であるグラフェンを実際に作成可能な物質として捉え、グラフェンを物質構築単位とする新奇な電子物性を持つ物質系を設計する理論的な研究が開始されたのは1990年代に入ってからである。そして、2004年にグラファイトからの剥離法によりグラフェンが実際に作成されると、その特異な電子物性と力学的な強靭さが注目を集め、理論・実験両面でのグラフェン研究が集中的になされてきた。その後、グラフェンに加えて、遷移金属ダイカルコゲナイド、あるいは六方晶窒化ホウ素などの多様な層状物質に対しても2次元原子膜物質が作成され、現在に至るまで、盛んにその物性研究が展開されてきている。本論文は「Electronic Properties and Impurity-Induced States of Hexagonal Boron Nitride Layers: A First-Principles Study」と題し、ワイドギャップ半導体である六方晶窒化ホウ素 (h-BN) の2次元原子膜物質について、グラフェンとの積層化合物も含めて、その電子物性を密度汎関数理論に基づいて解明した研究が6章に渡り報告されている。

第一章「Introduction」では、グラフェンと比較しながら、h-BN膜の構造と電子物性の基本事項、複数層積層させた場合の積層パターン、さらには半導体として不純物状態の重要性等が説明されている。

第二章「Theoretical method」では、密度汎関数理論、および同理論に基づく電子構造計算手法の詳細、擬ポテンシャル法、さらには、走査トンネル顕微鏡像 (STM) のシミュレーション手法についても詳しく説明がなされている。

第三章「Graphene/h-BN heterostructures」では、グラフェンとh-BN原子膜を積層させた系の電子構造、特に、h-BN膜中に炭素原子がBサイトあるいはNサイトに置換型不純物原子としてドーピングされた場合 (C_B あるいは C_N) の不純物状態について、詳細が報告されている。興味深いことに、 C_B (ドナー) と C_N (アクセプター) の電子構造は非対称であり、グラフェン系の特徴的な電子構造であるいわゆるディラックコーンの頂点のエネルギーからはかなり上方に C_B 起因のドナー状態が現れること、他方、 C_N に起因する状態はディラックコーン近辺に存在することが明らかとなった。これは実験研究結果とも合致する結果である。さらに、h-BN膜中の C_N 不純物は、グラフェンとの複合膜化によってその存在がSTMにより観測可能であることが報告された。

第四章「Thin h-BN layers」では、まず、三層からなるh-BNの多様な積層方法について解説している。そして、半導体ヘテロ構造研究において重要な概念である「変調ドーピング」に着目した研究が展開され、h-BN原子膜物質の場合、わずか三層の系でも、ドーピングされた層と電子あるいは正孔が誘起される層とが異なる積層パターンが存在すること、即ち電流を担っている伝導層と不純物ドーピングされた層を分離する変調ドーピングが実際に可能であることが報告されている。また、4層系についても変調ドーピングが可能であると予測されている。

第五章「Hybrid functional study of the doped h-BN monolayer」においては、h-BNのバンドギャップ値と不純物状態 (C_B , C_N , さらには O_N) のイオン化エネルギーをより正確に知るため、密度汎関数法およびハートリーフォック法の問題点について解説がなされた後、それらをハイブリッド化して用いる手法が解説されている。そして、2次元物質系にハイブリッド手法を適用する場合の最適なミキシングパラメータが通常の3次元バルクに適用する場合と大きく異なる、という発見が報告されている。

第六章「Conclusion」では以上の結果についてまとめられている。

この様に、最重要物質であるh-BN原子膜物質系に関して、申請者は第一線の多様な電子構造計算手法を駆使してその電子構造の解明に大きな寄与を与えており、博士 (理学) に相応しい業績である。

注意: 「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチポジトリ (T2R2) にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。