

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Electronic properties and relative stabilities of crystalline polymorphs of group IV and III-V semiconductors: A first principles study
著者(和文)	北玲男
Author(English)	Reo Kita
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12311号, 授与年月日:2023年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:齋藤 晋,村上 修一,笹本 智弘,三宅 隆,打田 正輝
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第12311号, Conferred date:2023/3/26, 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	北 玲男	
論文審査 審査員		氏名	職名	氏名	職名
	主査	斎藤 晋	教授	打田 正輝	准教授
	審査員	村上 修一	教授		
		笹本 智弘	教授		
三宅 隆		教授			

### 論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「Electronic properties and relative stabilities of crystalline polymorphs of group IV and III-V semiconductors: A first principles study」と題し、炭素 (C)、ケイ素 (Si)、炭化ケイ素 (SiC)、窒化ホウ素 (BN) の結晶多形の相対的な安定性予測と電子物性解明に関する理論研究成果を報告したもので、全 8 章からなる。

第一章「Introduction」では、4 配位の結晶構造をとる IV 族半導体と III-V 族化合物半導体について、これまでに知られている結晶多形について解説している。特に、本博士論文研究の主要な研究対象の一つである、六方晶に属し積層パターンが異なる結晶多形について詳しく述べている。また、結晶多形の合成方法として本研究で想定している chemical vapor deposition 法 (CVD 法)、さらには近年合成され興味深い電子物性が報告されている Q-carbon と称される系も含め、多様な炭素の多形についてもまとめられている。

第二章「The Systems Studied」では、六方晶の結晶多形の命名法とともに詳しい幾何構造が解説されている。さらに、本研究により Q-carbon の候補物質と判明することになる立方晶系の炭素結晶 (C20-sc、C21-sc、C21-sc'、C22-sc) について、ホウ素ドーピングも含めてその構造の詳細が説明されている。

第三章「Theory」では、本博士論文研究で用いられる理論および手法について詳しく説明がなされている。まず、現代の第一原理電子構造計算手法の基礎理論である密度汎関数理論、グリーン関数理論に基づき高精度で半導体のバンドギャップ値を予測できる GW 法、格子振動計算に用いられる密度汎関数摂動理論、さらには固体の電子構造計算に必須となっている擬ポテンシャル法、そして超伝導転移温度の算出に用いられる電子格子相互作用定数の計算方法についても解説がなされている。

第四章「Properties of Group IV and III-V Semiconductors」においては、まず、C、Si、SiC、BN それぞれについて、密度汎関数法および GW 法によって得られた 2H、3C、4H、6H の各結晶多形の電子構造と幾何構造の詳細、さらには密度汎関数摂動理論により得られたフォノンの分散曲線と状態密度がまとめられている。

第五章「Relative Stabilities of Group IV and III-V Semiconductors」では、C、Si、SiC、BN の各結晶多形について、まず、立方晶 (ダイヤモンド構造および閃亜鉛鉱構造) を基準にして、等方的な圧力下での相対的な安定性の予測結果が述べられている。そして、2 軸性応力下における CVD 成長を想定した、各結晶多形間の相対的な安定性について有限温度の効果も含めて自由エネルギーから比較し、2H、4H、6H の各相が 3C (3H) よりも安定となり、CVD 成長が期待される条件を求めている。これは、前例のない独創的な研究展開であり、かつ、得られた知見としても、積層パターンのみの違いによる同一元素 (同一化合物組成) の半導体超格子の合成可能性を示す大変興味深いものである。

第六章「Carbon Allotropes」では、C20-sc、C21-sc、C21-sc'、C22-sc の各結晶多形に関して構造の詳細予測に加えて、スピン自由度も考慮した電子構造計算による電子構造 (バンド構造と状態密度)、およびフォノン分散と状態密度が報告されている。そして、本研究で新たに提案された C21-sc' は強磁性体となることが予測される結果となり、Q-carbon の候補となることが示された。

第七章「B-doped Carbon」では、C20-sc、C21-sc、C21-sc'、C22-sc の各相において、炭素位置にホウ素を置換型でドーピングした場合の電子構造変化を詳細に報告している。そして、電子格子相互作用定数を密度汎関数摂動理論により求めた上で McMillan の式を用いて超伝導転移温度の予測を行っている。そして、C21-sc、C21-sc'、C22-sc の B ドーピング相で、数十 K のかなり高い温度で超伝導転移を示すことが期待される結果となった。

最後、第八章「Conclusion」においては、本博士論文研究で得られた成果をまとめ、2 軸性の加圧が多様な結晶多形の成長を制御できる興味深い手法であること、また、磁性とドーピング相での高温超伝導の両者を示す C21-sc' が Q-carbon の基本構造の候補として重要であることを述べている。

以上、まとめると、本論文では IV 族半導体および III-V 族半導体に関し、現代における最先端の電子構造計算手法を駆使することにより有限温度下において 2 軸性の加圧で様々な結晶多形の CVD 成長を制御しうることが明確に示され、同一元素あるいは同一組成の積層半導体超格子の合成可能性も明らかにされた。さらに、様々な立方晶炭素結晶およびその B ドープ相に関する電子物性予測と Q-carbon の候補物質の同定も報告されている。半導体物理学および炭素結晶の科学の両面で大変意義深い研究内容であり、博士（理学）の学位論文として十分に価値があると認められる。

注意：「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチリポジトリ(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。