

| | |
|---------|-----------------------------------|
| 氏名(本籍) | ち だ ただ ひこ 千 田 忠 彦 (岩手県) |
| 学位の種類 | 博 士 (工 学) |
| 学位記番号 | 博 甲 第 3404 号 |
| 学位授与年月日 | 平成 16 年 3 月 25 日 |
| 学位授与の要件 | 学位規則第 4 条第 1 項該当 |
| 審査研究科 | 工学研究科 |
| 学位論文題目 | 電場効果ドーブ C_{60} の構造と電子状態の第一原理的研究 |

| | | | |
|-----|---------|--------|---------|
| 主 査 | 筑波大学教授 | 理学博士 | 中 尾 憲 司 |
| 副 査 | 筑波大学教授 | 理学博士 | 大 成 誠之助 |
| 副 査 | 筑波大学教授 | 理学博士 | 門 脇 和 男 |
| 副 査 | 筑波大学助教授 | 博士(理学) | 有 馬 孝 尚 |
| 副 査 | 筑波大学教授 | 理学博士 | 押 山 淳 |

論 文 の 内 容 の 要 旨

化学ドーピングのように不純物を導入することなく C_{60} 固体にキャリアをドーブする方法として、電場効果ドーピングが近年注目されている。これは C_{60} 固体を用いた FET 構造にゲート電圧を印可して絶縁膜に接した C_{60} 固体の表面にキャリアを誘起する方法で、ゲート電圧によってキャリア濃度を自由に換えられ、またその極性を換えればホールと電子を同様に導入することが可能である。しかし、電場効果ドーブ C_{60} 固体の系統的な研究は未だ実験的にも理論的にも行われていない。特に、電場効果ドーピングの場合には電場によってキャリアが表面に閉じこめられ、その電子状態は化学ドーピングの場合とは著しく異なると考えられるが、電場の効果を考慮した電子状態の定量的な研究は行われていないのが現状である。

本論文は、第一原理計算によって理論的な面から電場効果ドーブ C_{60} の構造と電子状態を明らかにすることを目的としている。用いている計算手法は、密度汎関数理論に局所密度近似を適用した Full-potential, All-electron, LCAO 法である。FET 構造に対するモデルとしては、 C_{60} 単層と電極層からなる単層 2 次元周期系モデルを用いた。また、単層モデルの妥当性を調べるために C_{60} 3 層からなる 3 層モデルも用いている。

単層モデルについては、キャリア数が単位胞当たり 1 から 3 個程度の高濃度ドーブの場合に、次のような電場効果ドーピング特有の構造と電子状態の変化が起こることが明らかになった。まず、電荷密度が C_{60} 分子の北半球(電極側)で大きく変化し、最も電荷密度の変化が大きい上端六角形では C-C 結合が最大で 7% も長くなる。これに対し、南半球では電荷密度の変化は小さく結合長の変化も見られない。また、電極が作る一様電場と C_{60} 分子内での電荷密度分布の偏りによって、電子に働くポテンシャルが大きく変調され、 C_{60} 固体におけるバンド分散の変化と状態密度における構造分裂が起こる。これらの構造と電子状態の変化は化学ドーピングの場合と大きく異なる。電場効果ドーピングの特徴は定性的にはホールドーブの場合でも電子ドーブの場合でも変わらないが、電子ドーブ C_{60} の方が C_{60} 分子の構造変化や C_{60} 固体における状態密度の分裂がより大きい。なお、本研究では電子間相互作用や電子・格子相互作用を考慮していないので、キャリアがドーブされた C_{60} 固体は全て金属である。

高濃度ドーブの場合について 3 層モデルを用いて調べた結果、電荷密度は表面層だけで大きく変化し、内

部層ではほとんど変化しないことが分かった。このことは高濃度ドーブに対しては単層モデルで十分であることを意味する。しかしキャリア濃度が低い場合には、キャリアは内部層へも広がることを3層モデルでの計算で確認し、更に Thomas-Fermi 近似による連続体モデルで確かめている。

審 査 の 結 果 の 要 旨

本論文はこれから研究が発展するであろう電場効果ドーブ C_{60} について、第一原理計算に基づく理論的研究を行なって多くの新しい知見を与えており、この分野における今後の研究進展に対して重要な指針を与えるものとして高く評価できる。特に、高濃度ドーブではキャリアは表面層に局在すること、一方低濃度ドーブではキャリアは内部にも広がっていること、並びにこれらの影響を受けて電子状態が化学ドーピングの場合とは大きく異なることを初めて示した点は重要である。今後実験結果が積み重ねられ、本論文の予測と比較検討されることが期待される。なお、アルカリ金属ドーブ C_{60} において電子間相互作用と電子・格子相互作用が電子状態に大きな影響を与えることが著者らの研究から明らかにされており、電場効果ドーブ C_{60} においてもそれらの役割を調べるのが今後の課題である。

よって、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。