

氏名(本籍)	葛葉隆 (茨城県)
学位の種類	理学博士
学位記番号	博乙第261号
学位授与年月日	昭和60年7月31日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当
審査研究科	物理学研究科
学位論文題目	An optical study on vibrational properties of layered hexagonal boron nitride (層状六方晶窒化硼素の格子振動に関する光学的研究)
主査	筑波大学教授 理学博士 新井敏弘
副査	筑波大学教授 理学博士 澤田克郎
副査	筑波大学教授 理学博士 長沢博
副査	東京大学助教授 工学博士 内野倉国光

論文の要旨

層状結晶の格子振動の特徴の一つとして、各層を構成する原子が一つの集団として振動するmodeがある。結晶の基本単位胞を構成する原子が二層以上に渡っている場合には、上記modeのうち波数 0 cm^{-1} 附近の光学モードは特にrigid-layer modeと呼ばれている。このモードはその結晶の層間結合の様子をよく反映するので、このモードの性質を精しく調らべることにより層間結合の特徴を明らかにすることができる。本論文では単結晶の製作が困難であるため従来研究がほとんど行なわれていない層状六方晶窒化硼素をとりあげ、常圧ならびに高圧下のラマン散乱スペクトルを測定し、rigid-layer modeを同定、この物質の層間結合の性質を明らかにした。また帯間電子遷移による吸収スペクトルも測定し、電子のエネルギー準位についても言及した。

シリコンをフラックスとして窒素ガス中で 1850°C 迄硼素・シリコン混合粉末を加熱して得た単結晶を十分に焼鈍し格子欠陥濃度をすくなくした結晶を試料として用いた。偏光ラマン散乱測定により、rigid-layer shear mode (52.5 m^{-1}) と層内原子間の伸縮モード (1366 cm^{-1}) を同定した。両散乱線の強度を比較しrigid-layer shear modeの散乱強度が著るしく低いことを見付け、これがrigid-layer振動の特徴的なことに基づくものであることを明らかにした。更にrigid-layer shear modeの振動数が弾性定数の C_{44} と関係付けられることを、最近接層間の相互作用のみを考慮した一次元モデルをたてて明らかにした。

またLennard-Jonesの6-12型ポテンシャルと静電ポテンシャルを用いて現象論的に層間結合を表示し、ラマン散乱の実験値等を用いてポテンシャル定数を決定、層間結合力を解析した結果、波動関数の重なりによって生ずる斥力ポテンシャルとして最近接層間原子対硼素-硼素、窒素-窒素、硼素-窒素を考慮すればこのモデルで実験値がよく説明できることを明らかにするとともに、窒素-窒素間の反撥ポテンシャルが層の重なり方を支配することも明らかにした。

ダイヤモンド・アンビルを用いて70Kbar迄のラマン散乱の圧力依存性を測定、rigid-layer shear modeとstretching modeの圧力依存性が大きく異なることを示し、その差を結合力の特異性から説明するとともに、モード・グリュナイゼン定数および弾性定数 C_{44} の圧力依存性についても論じた。

単結晶での光吸収スペクトルをはじめ測定し、基礎吸収端が5.8eV以上にあること、炭素不純物および窒素空孔子に局在する電子に関連するスペクトル線等も発見した。

審 査 の 要 旨

従来製作が困難であった層状六方晶窒化硼素の単結晶を製作しラマン散乱を測定、ある種の層間物質に特徴的にあらわれるrigid-layer shear modeを同定するとともに、単純なモデルを用いてこの物質の層間結合力の特徴、層の重なり方を決定する因子、弾性定数 C_{44} とrigid-layer shear modeの振動数との相関を明らかにした。これら一連の仕事は、単に層状六方晶窒化硼素の層間結合を明らかにしたにとどまらず、種々の層状物質の結合上の特徴を解明する上での方法と貴重な基礎知識を与えたものとして高く評価できる。

よって、著者は理学博士の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。