

氏名(本籍地)	實宝秀幸
学位の種類	博士(理学)
学位記番号	博甲第 7236 号
学位授与年月日	平成 27 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	数理物質科学研究科
学位論文題目	Fundamental properties of graphene hybrid structures (グラフェン複合構造の基礎物性)

主査	筑波大学教授	博士(理学)	岡田晋
副査	筑波大学連携大学院教授	工学博士	宮本良之
副査	筑波大学准教授	博士(理学)	丸本一弘
副査	筑波大学連携大学院准教授	博士(理学)	河合孝純

論 文 の 要 旨

グラフェンは、炭素原子がハニカム格子状に sp^2 共有結合した二次元平面シート 1 層から成る薄膜物質である。2004 年に A. K. Geim らによって初めてグラファイトから機械的に剥離され、それ以降そのユニークな電子物性やフレキブルで透明等の構造上の特徴からナノエレクトロニクスの様々な分野において盛んに研究が行われている。電子状態においては、第一ブリュアンゾーン内の K 点で、 π 電子によって構成された価電子帯と伝導帯が 1 点(Dirac 点と呼ばれる)で接する特徴を有する。フェルミ準位近傍で対称的な線形分散を示すことから電子とホール両方のキャリアで非常に高い移動度が予測され、高速かつ低消費電力な電子デバイス材料としての応用が期待されている。しかしながら、グラフェンは原子 1 層の厚みしかなく、完全な 2 次元電子系として全域で外部に対して暴露されているため、デバイス構造において本質である金属電極や絶縁膜などの異種物質との複合構造形成において、異種物質との相互作用に起因する電子物性の脆弱性が大きな問題となる。このような問題を回避するためには、グラフェンと異種物質との複合構造に対する、量子論に立脚した高精度な計算科学手法による基礎物性解明が必要不可欠である。そこで本論文では、第一原理計算を用いて、グラフェンと金属電極、及び絶縁膜との複合構造について、その電子状態や電気伝導特性を理論的に明らかにし、グラフェンと異種物質との界面科学構築を目指す。

グラフェンを用いた電子デバイス実現における深刻な問題の一つが、グラフェンと金属電極接合における高い接触抵抗である。また、接触抵抗については、金属の種類やプロセス条件によってもその値が変化することも実験的に報告されている。理論的には、グラフェンと金属表面の界面における構造、電子状態、及び伝導特性についていくつかの先行研究が存在する。それらの研究によって界面の基礎やチャンネル長数 nm の場合の伝導特性については解明されつつあるが、チャンネル長が 10nm に及ぶ大規模な構造モデル中での界面における基礎物性や電気伝導特性についてはまだ明らかになっていない。

このような状況の下、本論文では、金属電極間に架橋された最長 10nm のグラフェンチャンネルについて第一原理計算による電気伝導特性予測を行った。金属電極としては、グラフェンと弱い相互作用を示す Au と強い相互作用を示す Ti の 2 種類を用いた。Au に関しては、電極とグラフェン間の相互作用が弱いことから、グラフェンリボンは複合構造中においてもその特徴的な構造を保持することが明らかになった。また、その伝導特性に関しても、グラフェンリボンの詳細な電子構造を反映した振る舞いが明らかになった。他方、Ti 電極に対しては、グラフェンとの強い軌道混成により、リボン形状に依存しない、非常に高い電流密度が期待されることがあきらかになった。

グラフェンデバイスにおいて本質となる担持基盤の影響として、酸化シリコンがグラフェンの伝導に及ぼす影響も明らかにした。その結果、酸化シリコンの表面形状に依存せず、酸化シリコン上のグラフェンは、酸化シリコンが有する表面状態に起因するギャップ内状態を介した伝導が発現し、それが半導体応用において本質となるオン/オフ比の低下を引き起こしていることを明らかにした。

審 査 の 要 旨

〔批評〕

本論文は量子力学に立脚した第一原理電子状態計算の手法を用いることにより、今日問題となっている、グラファイト系材料の半導体デバイス応用時の各種複合構造体によるグラフェン物性変調の理解と、物性制御に必須となる基礎的知見を与えたものである。とりわけ、電極金属との接触抵抗の理論的見積もりと、その起源のミクロスコピックな解明は、グラフェイトを用いた各種電気・電子デバイス応用において非常に重要な知見となるものである。他方詳細な、リボン幅に起因する電子構造の多様性と波動関数の対称性に着目した詳細な伝導解析は、グラフェンをはじめとする種々の2次元原子層物質の関わるナノサイエンスのさらなる発展に大いに寄与するものである。以上の2点から、本論文は博士（工学）に相当するものである。

〔最終試験結果〕

平成27年2月16日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

〔結論〕

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士（理学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。