

氏名(本籍)	水野誠司(愛媛県)			
学位の種類	工学博士			
学位記番号	博甲第754号			
学位授与年月日	平成2年3月23日			
学位授与の要件	学位規則第5条第1項該当			
審査研究科	工学研究科			
学位論文題目	<b>Electronic Structures of the Graphite Intercalation Compounds <math>C_8K</math> and <math>C_{4n}KH_x</math></b> (グラファイト層間化合物 $C_8K$ , $C_{4n}KH_x$ の電子構造)			
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	岡崎誠	
副査	筑波大学教授	理学博士	藤井保彦	
副査	筑波大学助教授	理学博士	大貫惇睦	
副査	東京大学教授	理学博士	寿栄松宏仁	

## 論文要旨

グラファイト層間化合物(GIC)とは、母体グラファイトの層間に種々の原子や分子が挿入されてできる人造物質であり、グラファイトとも挿入物質とも異なる新しい物性を示すため、物性物理学の立場からも応用面の見地からも非常に興味深いものである。GICの物性に関して過去に多くの研究がなされてきたが、最も基礎的な電子状態に関する知見は未だ十分に得られているとは言えない。

著者は本学位論文で、第一原理からの計算を遂行することにより、基本的なGICであるカリウムが挿入された $C_8K$ 並びに水素も挿入された $C_{4n}KH_x$  ( $n=1,2; x=0.5, 1.0$ )の電子構造を求めた。これは、現在までに行われた計算の中で、各構成原子間の電子移動を最も完全に考慮したものであり、得られた結果は、母体グラファイトと挿入原子間の電子の移動に加えて、挿入原子の存在のために生じる母体グラファイトの中の非等価な炭素原子間の電子移動が電子構造に重要な効果を持っていることを明確に示している。

本論文は6章から構成されている。第1章は序論であり、第一原理からの電子状態の計算方法は第2章に述べられている。それは局所密度汎関数理論に基づく最適原子軌道を用いたLCAO法で、構成原子の電子の移動を計算の各ステップで適切に取扱えるように工夫されている。第3章は第一ステージカリウムGIC  $C_8K$ の電子構造の計算とその結果の解析に充てられており、カリウムの存在のために生じた非等価な炭素原子間の電子の移動が電子構造の様相に本質的な寄与をすること、その結果グラファイト $\pi$ バンドの性格をもつ3次元的フェルミ面が生じることを明らかにしている。

この事実は、種々の光学スペクトルの実験結果との良い一致とも合わせて、 $C_8K$ の電子構造に関する現在の論争点に初めて解決を与えたものといえる。第4章には、更に水素も挿入されたGIC  $C_{4n}KH_x$ の電子構造の計算結果が与えられている。この系に対する計算は本論文において初めて行われたもので、現在まで明確でなかった水素の状態が2次元金属状態であることを明らかにしている。また、この結果は種々の実験事実を（少なくとも定性的には）説明できることを示している。第5章では非等価な炭素原子間の電子の移動の電子構造に対する効果を、モデル計算により統一的に議論している。第6章は結論である。

## 審 査 の 要 旨

現在多くの研究が行われているGICは、その電子構造に関していくつかの論争点がある。著者は、母体グラファイトの層内に存在する非等価な炭素原子間の電子の移動を正しく考慮することにより、GICの電子構造を統一的に理解できることを初めて明確にしておき、その成果は高く評価できる。

よって、著者は工学博士の学位を受けるに十分な資格があるものとみとめる。