

学位論文及び審査結果の要旨

氏名 裴 星旻 (ベ ソンミン)

学位の種類 博士(理学)

学位記番号 理工博甲第47号

学位授与年月日 令和4年3月24日

学位授与の根拠 学位規則(昭和28年4月1日 文部省令第9号) 第4条第1項及び横浜国立大学学位規則第5条第1項

学府・専攻名 理工学府・数物・電子情報系理工学専攻

学位論文題目 Ab initio study of electronic structure and carrier localization in two-dimensional materials

論文審査委員	主査	横浜国立大学	准教授	Raebiger Hannes
		横浜国立大学	教授	関谷 隆夫
		横浜国立大学	教授	片山 郁文
		横浜国立大学	教授	武田 淳
		横浜国立大学	准教授	首藤 健一
		東京工業大学	教授	大場 史康

論文及び審査結果の要旨

二次元物質とは数原子層の厚さで構成される物質群である。二次元物質においては、三次元物質とは対照的に、電子状態が持つ次元が制限されるとともに、面直方向の静電遮蔽効果が弱まることから、三次元物質とは異なる電氣的及び振動的特性を持つことが知られている。例えば、三次元物質と比べて大きい励起子束縛エネルギーや、荷電粒子と格子との強い相互作用などが取り上げられる。従って、新しい二次元物質を発見しその物性を研究することは、新しい物理現象が宿る土台を築くための重要な役割を持つ。

本学位論文では、第一原理計算による二次元物質の新しい発見やそれらが持つ電子的・振動的特性の解析、そして二次元物質における電荷担体の束縛的挙動や電導・発光現象について述べる。まず、新しい二次元物質の探索の試みとして、第一原理計算による二次元遷移金属化合物 MXene (メクシン)の総括的な研究を行った。その結果、今まで報告されていない炭素の三量体を含む新しい MXene の電子化物を発見した。さらに、MXene 電子化物の生成メカニズムや電子的・振動的特性の分析を行なった。続いて、従来の三次元物質の二次元化における物性変化の理解を目指して、ヘケライト窒化ガリウムの原子薄膜の中の不純物による正孔の捕獲現象や発光現象の応力制御について

研究を行なった。二次元物質は三次元物質と比べて格子の応力制御が容易なので、二次元物質の機械的制御で物性を操作する応用が幅広く期待される。

以上の内容を持って、本論文では二次元物質の理論的設計、物性の解析、そして電導・発光現象の制御に至る包括的なプロセスを提示している。これらの理論計算による新物性の予言と、その方法を新規二次元物質で具体的に示している本研究内容は十分に博士を授与するのにふさわしいと判定した。

本学位論文で述べている研究成果は 3 本の査読付き学術論文に発表されている。MXene についての総括的な研究は *Materials Today Advances* で発表し、炭素の三量体を含む MXene 電子化物の発見は *Advanced Functional Materials* で発表し、ヘケライト窒化ガリウムの原子薄膜の中の不純物研究は *ACS Applied Electronic Materials* で発表している。従って成果を論文にまとめ、それを英語で広める能力も十分であるとの結論に達した。