

学位論文審査結果の要旨

専攻名	材料科学 専攻	氏名	Dian Putri Hastuti
学位論文題目	First-principles study of electric field effects on graphene-based structures for battery and spintronic materials application		
主査・副査	主査	中村 浩次	㊞
	副査	村田 博司	㊞
	副査	八尾 浩史	㊞
	副査	小竹 茂夫	㊞
<p>審査結果の要旨</p> <p>電子デバイス材料としてグラフェンなど 2 次元材料の利用が今後期待されている。しかし、グラフェンの生成・成長において格子欠陥や不純物の混在、零バンドギャップの課題が残され、近年では、欠陥を持つグラフェンを積極的にデバイス材料として利用する方法も模索されている。この背景のもと、本学位論文では、理論的観点から欠陥構造やヘテロ構造を持つグラフェンの電子構造、バッテリーやスピントロニクスに向けたグラフェンの基礎物性に関する研究成果がまとめられている。第 1 章では本研究の背景、課題、目的、第 2 章では密度汎関数理論及び第一原理計算手法（フルポテンシャル線形化補強平面波法）について述べられている。第 3 章では、グラフェン及び類似 2 次元材料であるゲルマネンにおける欠陥構造の安定性が考察され、特に、グラフェンでは原子空孔欠陥生成エネルギーがゲルマネンに対して約 5eV と大きく、単一の原子空孔欠陥が安定であること、一方、ゲルマネンでは偶数個の複数原子空孔が容易に形成されることが示された。第 4 章では、対象を原子空孔欠陥を持つ 2 層グラフェンに展開され、バッテリー電極における Li インターカレーションについて解析されている。欠陥を有することに加え外部電界を印加することにより Li のインターカレーションエネルギーが増加することを明らかにし、Li イオンの容量を 140%増大させることを示唆する重要な予測でもある。第 5 章では、グラフェン/MoS₂ヘテロ構造の構造安定性について考察され、また、バンドギャップがヘテロ界面形成に伴う 2 つの炭素原子位置の対称性の破れに起因し、バンドギャップの大きさが層間距離に強く依存することが示された。引き続き、第 6 章では、同構造に対して外部電界印加によるバンドギャップの変調とスピンホール効果の解析がなされている。負の外部電界では電界の大きさと共にバンドギャップが線形に変調すること、一方、正の外部電界では、バンドギャップが消失し、スピンホール伝導度が増大することを明らかにし、これはグラフェンにスピン流生成が可能であることを示唆する重要な予測である。7 章では、本研究のまとめと今後の展望について述べている。以上、グラフェンの欠陥構造やヘテロ構造における電子構造の解析とバッテリーやスピントロニクスに向けたグラフェンの材料設計指針は当該分野において有意義な成果・知見であり、論文発表の状況を含めて、博士の学位を授与するに値すると判断する。</p>			