

## 審査の結果の要旨

氏名 合田 義弘

電界及び電気伝導に関する物理現象は、電子素子等への応用上の重要性のため古くから盛んに研究されてきたが、近年では、走査プローブ顕微鏡による微細加工と物性計測、電極間原子鎖の直接観察とコンダクタンス測定、カーボンナノチューブを用いた電界効果トランジスターの作製及び電界電子放出等、ナノテクノロジーのブレイクスルーを目指した研究の中でその重要性が一段と増している。中でも電界電子放出は、フラットパネルディスプレイ等への応用として工学的に重要であるばかりでなく、電界に対する固体表面の応答として基礎的にも非常に興味深い現象である。本論文では、電流を運ぶ散乱状態をあらわに考慮しつつ強電界下における表面電子状態を非経験的に計算する手法を新たに開発し、これを用いて単原子で終端された突起を持つ Al 表面、清浄および水素終端 Si 表面、および Al を吸着した Si 表面からの電界電子放出を理論解析した。本論文は6章からなる。

第1章は緒言であり、ナノ構造での電界・電気伝導関連現象の重要性を述べ、電界電子放出現象の基礎と既存の理論研究をまとめている。さらに、電界電子放出に対する原子レベルからの第一原理計算がまだ不十分であることを指摘して本研究の目的を明確にした。

第2章では、本研究で新たに開発された、散乱状態をあらわに考慮しつつ密度汎関数法に基づき非経験的に電子状態及び電気特性を理論解析する手法について述べている。解析で用いるモデルは半無限の電極、表面ナノ構造、及び真空の3つの領域からなるが、電極内部と真空領域での一電子波動関数が既知であれば、領域間の境界での波動関数の接続条件を利用して未知の透過係数と反射係数を境界条件から消去する事により表面ナノ構造領域の波動関数を求めることが可能になることを示した。これにより、既存の他手法より簡明なアルゴリズムで密度汎関数法に基づく第一原理計算を行い、電子分布及び電流分布を求める事が可能となった。さらに解析的な解が知られているモデル系に対する計算により、本手法が十分に高い精度を持つことを示した。

第3章では、単原子で終端された Al 突起を持つ Al(100) 表面からの電界電子放出の解析に第2章の手法を応用した。単原子で終端された突起を持つ放出源からの放出電流の全エネルギー分布には複数のピークが観測される場合と単一ピークの場合とが知られていたが、複数のピークが出現する原因は不明であった。これに対し、30原子からなる突起を持つ系に対する計算結果では2つのピークが現れるが5原子からなる突起を持つ系の場合には1つのピークしか現れないことを見出し、複数ピーク出現の有無が突起サイズに帰着できることを示した。さらに、突起サイズによるピーク数の変化が、突起先端原子に局在した電子状態の存在、電界印加による突起先端前方の局所的なポテンシャル障壁の低下、および突起サイズによるこの障壁低下の度合いの違いとから理解できることを示した。

第4章では、清浄 Si(100)表面および水素終端 Si(100)表面からの電界電子放出を理論解

析し、電界が弱い場合には水素終端表面の方が清浄表面よりも放出特性が良いことと、これが仕事関数の差により説明できることを確認した。さらに、強い電界を印加された水素終端表面の場合に放出電流のファウラー・ノルドハイム・プロットに顕著な非線形性が見られることと、これが強電界によるバンド湾曲のため表面に局在した 2 次元的伝導バンドからの電子放出に起因することとを明らかにした。

第 5 章では、金属吸着 Si(100)表面からの電界電子放出における放出特性向上のメカニズムや原子スケールでの最適な吸着条件等を明らかにするため、Al を吸着原子の例として金属 Si(100)表面からの電界電子放出を第一原理計算により解析した。Si(100)2×2·Al 表面からの電界放出特性が清浄 Si(100) 表面及び Al(100) 表面からのそれより顕著に大きいことを明らかにし、この 3 者の特性の違いは仕事関数の差からは統一的には理解できないのに対し、ポテンシャル障壁の空間分布の違いから統一的に理解できることを示した。

第 6 章は総括である。

以上のように、本論文は、表面ナノ構造における電子輸送現象を密度汎関数法に基づいて理論解析するための新たな手法を開発し、これを用いてナノ構造からの電界電子放出特性を解析して構造による特性変化の機構を明らかにし、また放出特性を左右する要因として、従来から知られていた仕事関数と放出源先端の曲率だけでなく、トンネル障壁の原子スケールでの空間的变化と表面電子状態の違いによる電界遮蔽能力の違いが重要であることを明らかにした。よって本論文の表面物性工学、電子物性工学への寄与は大きい。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。