

論文審査の要旨および学識確認結果

報告番号	甲 第 号	氏 名	澁谷 泰蔵
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	博士(工学)・TeknD 深淵 康二
	副査	慶應義塾大学教授	博士(工学) 泰岡 顕治
		慶應義塾大学教授	博士(理学) 近藤 寛
	慶應義塾大学准教授	博士(理学) 山内 淳	
	慶應義塾大学専任講師	Ph.D. 安藤 景太	
<p>(論文審査の要旨)</p> <p>学士(工学), 修士(工学), 澁谷泰蔵君提出の学位請求論文は「Study of Reduced Rutile TiO₂ (110) Surfaces based on the Density Functional Theory (密度汎関数理論によるルチル型 TiO₂ (110)還元表面の研究)」と題し, 本論6章により構成されている。</p> <p>TiO₂は, 太陽光による水からの水素製造を可能とする光触媒作用や, 有害有機物の分解を実現する強い光酸化力などの機能が知られ, その本格応用に向けた研究が続けられている材料である。これらの機能は, 材料表面と分子との間の電子のやり取りがその本質にあるため, 系統的な性能改善には, まず材料表面での電子状態を理解する必要がある。走査型トンネル顕微鏡 (STM) を用いることにより表面電子状態は空間分解できるが, 結果の解釈に必要な還元表面の電子状態計算は難しく, その解釈は定まっていない。2000年代に入ってから, 密度汎関数理論 (DFT) にハイブリッド汎関数 (HF) あるいは DFT+U 法を施せば, 酸素欠陥由来の電子が Ti サイトに局在し, 還元表面が正しく計算できることが示された。ところが, 補正手法や計算ごとに異なる電子の局在位置が報告され, 2010年代に入っても STM 像の統一的な解釈には程遠い状況にあった。</p> <p>本論文ではこのような問題を解決するため, ルチル型 TiO₂ (110) 表面を対象として, 密度汎関数理論に基づく異なる手法を用いた計算を行うことにより還元表面の電子状態計算の信頼性を示すとともに, その計算結果に基づいて表面状態の統一的な解釈を試みている。</p> <p>各章の内容は以下のとおりである。</p> <p>第1章は序論であり, 研究の背景, 動機, 関連研究, 研究目的を述べている。</p> <p>第2章では, 計算に用いる理論である密度汎関数法や, それに基づく計算の中で用いられる, 相互作用を記述する手法である DFT+U およびハイブリッド汎関数について述べている。</p> <p>第3章では, DFT+U およびハイブリッド汎関数を用いて Ti³⁺の安定位置を計算し, これら2つの近似手法のいずれにおいても Ti³⁺は表面から第2層において最も安定であることを示し, このことが近似手法によらない普遍的な結果であることを示した。また, 計算されたバンドギャップの値からは, ハイブリッド汎関数を用いたほうが実験に近い値が得られることが分かった。</p> <p>第4章では, 酸素欠陥と電子, および格子歪みの位置関係について, 10通り変えた計算を行い, そのエネルギーを比較することにより, Ti³⁺は酸素欠陥の近傍のほうが安定に存在し, また Ti³⁺由来の格子歪みの影響は小さいことを示している。</p> <p>第5章では, 前2章の結果を踏まえ, 従来得られている STM 像の解釈を試みている。その結果, 表面から第2層に Ti³⁺が作る電荷分布によって STM の特徴が良く再現できることを示している。また, 温度の違いによる STM 像の差異は, 格子間 Ti から供給される電子の影響を考慮すれば説明できるとしている。</p> <p>第6章は結論であり, 一連の研究で得られた成果を総括している。</p> <p>以上をまとめると, 密度汎関数理論に基づく還元表面の電子状態計算手法の有効性が示されたほか, 酸素欠陥に伴う Ti³⁺の安定位置およびそのメカニズムについての重要な基礎的知見が与えられ, 従来の STM 像に対して統一的な解釈を与えることができた。また, これらの成果は著者が研究者として自立して研究活動を行うために必要な高度な研究能力および豊かな学識を有することを証したものである。</p> <p>よって, 本論文の著者は博士(工学)の学位を受ける資格があるものと認める。</p>			
学識確認結果	学位請求論文を中心にして関連学術について上記審査委員会委員で試問を行い, 当該学術に関し広く深い学識を有することを確認した。 また, 語学 (英語) についても十分な学力を有することを確認した。		