



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Exploration of Functional Plasmonic Compounds and Microstructures for Spectroscopic Infrared Transducers [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	NGO, THIEN DUC
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(理学)
Dissertation Number	甲第15139号
Issue Date	2022-09-26
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/87442
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	doctoral thesis
File Information	NGO_Duc_Thien_review.pdf, 審査の要旨



学位論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称 博士 (理 学) 氏 名 NGO Duc Thien

審査担当者	主査	客員教授	長 尾 忠 昭
	副査	教 授	野 寄 龍 介
	副査	教 授	小 田 研
	副査	助 教	山 本 夕 可

学 位 論 文 題 名

Exploration of Functional Plasmonic Compounds and Microstructures for Spectroscopic Infrared Transducers
(分光型赤外線変換器のための機能性プラズモニック化合物およびマイクロ構造の探索的研究)

博士学位論文審査等の結果について (報告)

申請者 NGO Duc Thien 氏は、彼の学位申請論文において、中赤外帯域における完全吸収現象と、その現象を応用した狭帯域な光吸収素子構造について研究しました。この研究を進めるため、彼は必要な性能を持つ材料の探索のための物性予測の理論的な手法と計算プログラムを開発しました。また、得られた誘電関数をさらに素子構造の設計へと応用しつつ最適な構造を計算する方法を考案し、その有効性を実証しました。これまで、第一原理光学応答計算の結果、つまり、第一原理誘電関数の計算を系統的なハイスループット材料探索に応用した報告例は殆どなく、特に赤外域での研究は皆無でした。また、世界的に見ても、これまで第一原理光学応答計算と電磁場シミュレーションとを密接に連立させ、最適な材料を選定し、かつ光エネルギー変換素子の構造をも同時に最適化した研究は存在せず、その有効性を実験的に証明した研究もありませんでした。申請者は、第一原理 光物性計算と数値的な電磁場シミュレーションを組みあわせ、目的に応じた候補材料を2千を超える2元化合物の中から選び出し、最適と予想された性能を持つ光熱変換素子を実現しました。製作したデバイスは赤外帯域で高い吸収率と放射率、そして狭帯域な波長選択性を示し、彼のアプローチが大いに有効であることを実証しています。彼の研究で提案された材料や赤外線エミッター素子は、国内企業との共同研究にも発展し、その有用性が示されています。なお、申請者の研究のうち、第一原理バンド計算や電磁場計算は既存のプログラムを使用しており、特に第一原理計算による赤外帯域の金属的な誘電応答には緩和時間の設定に任意性が残っていました。この点について NGO 氏は金属結合、イオン結合、共有結合性を持つ高結晶性の物質を用いて実験結果との比較を行い、緩和時間を6.6フェムト秒に設定した場合、これらの3種類の物質群に対して波長 $3\mu\text{m}$ において誤差25%程度の精度(誘電率実部)で予測できることを確認しました。この誤差は成膜や表面粗さによる誤差と同程度であり、このレベルの精度が実験と比較するうえで限界であることも明らかにしました。本研究を進めるうえで、誘電率計算のコード、デバイス構造の最適化アルゴリズムなどは、NGO氏自身が自ら発案、作成し、解析を行っています。また、薄膜合成やデバイス製作はグループ員との共同で進めましたが、薄膜物性や赤外線エミッターデバイスの計測システムは自力でくみ上げたものです。また、本論文で提案、確立した方法論の核となる部分は自力で立ち上げました。これまで、試行錯誤に頼っていた赤外線デバイスにおける材料選定と構造決定のプロセスを大幅に短縮できる一つの方法論として、材料物理学分野での応用が期待できます。よって本論文は、北海道大学博士(理学)の学位申請論文に値するものと認めます。