

氏名(本籍地)	棚谷 翔 (茨城県)
学位の種類	博士 (理学)
学位記番号	博 甲 第 6794 号
学位授与年月日	平成26年 3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	数理物質科学研究科
学位論文題目	

Numerical studies of edge states in hydrogen terminated silicene ribbons
(シリセンリボンの水素終端とエッジ状態の数値的研究)

主査	筑波大学 教授	工学博士	初貝 安弘
副査	筑波大学 客員教授	理学博士	白石 賢二
副査	筑波大学 教授	博士(学術)	都倉 康弘
副査	筑波大学 教授	博士(理学)	岡田 晋
副査	筑波大学 准教授	博士(工学)	谷口 伸彦

論 文 の 要 旨

本論文は、シリコン原子が座屈した蜂の巣格子を形成した2次元物質であるシリセンにおいて、系に境界が存在する場合に境界近傍に出現する局在状態(エッジ状態)の特性及びその物理的起源を境界における水素終端の効果も含めて理論的に明らかにしたものである。

シリセンの存在は 1994 年に武田、白石らが行った第一原理計算によりグラフェンのシリコン類似物質として予言されたものであるが、近年、実験的に合成され、理論実験の両面から多くの興味を集めている。シリセンはグラフェン同様に巣格子状にシリコン原子が 2 次元格子を作ったものである。グラフェンは電子構造においてフェルミ準位近傍に線形のバンド分散を持ちゼロギャップ半導体であり、グラフェン中の電子の記述には通常の有効質量近似は破綻し、グラフェン中の電子は質量をもたないディラック方程式をその有効理論とする固体中の相対論的な粒子と考えられている。またリボン形状のグラフェンにおける電子構造では、リボンの端の形状を反映してフェルミ準位近傍に特異なエッジ状態が現れる場合があることが知られている。これはディラック電子系におけるバルクの性質を反映した特徴的なエッジ状態であり、バルク-エッジ対応として普遍的な観点から理解される。

シリセンもグラフェンと同じ蜂の巣格子を形成し、電子構造に線形分散が現れることからグラフェン類似の多くの特異な性質を持つことが期待されているが、現在のところ基板上で合成されたシリセンは基板との相互作用により結晶構造に超周期構造が誘起され、フェルミ準位においてエネルギーギャップが開くことが、走査型トンネル電子顕微鏡並びに角度分解光電子分光などの実験で確認されている。その一方で長周期構造を誘起しない基盤物質の候補も理論的に提案されており、実験技術の展開により電子構造に線形分散をもつ純粋なシリセンの合成が強く期待されている。

グラフェンの電子は sp^2 混成軌道を形成し、 σ 電子が結合に寄与する一方、 π 電子は遍歴的である。よ

ってフェルミ準位近傍の電子状態は π 電子による単一軌道近似により十分精度よく記述される。特にグラフェンリボンでは境界に位置する非結合の σ 電子が水素と結合することにより終端される一方、 π 電子は水素終端の影響を受けず単一バンド近似が示すエッジ状態が実験的にも観測されている。その一方でシリセンのフェルミ準位近傍の状態は sp^3 的な特性をもち、シリセンリボンの境界での水素の結合状態には多様な状況が実現し得ると同時にエッジ状態にも大きな影響があると考えられる。

本研究ではディラックコーン型の線形分散が存在する長周期構造をもたない理想的なシリセンを研究対象とし、シリセンリボンにおいて生じるエッジ状態を同じディラック電子系であるグラフェンとの比較並びに種々の水素終端の効果も含めてその物理的起源の解明することを目的とし、数値計算と理論的な考察を併用することで理論的に明らかとした。具体的には蜂の巣格子上の多軌道タイトバインディングモデルにより、境界のある系の電子状態を数値的に明らかとしグラフェンとの比較を行った。その際に複数の水素終端の可能性を考慮し zigzag 端や armchair 端のシリセンリボンにおける、エッジ状態の性質を議論した。その結果、zigzag 端シリセンリボンの両端に1原子ずつ水素を結合させた場合のエネルギースペクトルでは、フェルミ準位近傍に zigzag 端グラフェンリボンの場合にも出現するエッジ状態と同様の状態を得た。さらに両端に2原子ずつ水素を結合させた場合のエネルギースペクトルでは、フェルミ準位近傍に Klein 端グラフェンリボンとよく似たエッジ状態が得られた。更にはリボン形状の一方の端を水素2個で終端し、もう一方では水素一つで終端した場合のシリセンリボンのエッジ状態は、端に Klein 端と zigzag 端を持つグラフェンリボンにも出現するエッジ状態と同様に、フェルミ準位近傍に波数空間全域にわたり平坦なバンドを持つエッジ状態が得られた。これらの結果は第一原理計算で計算されたエネルギーバンドの結果と整合的である。棚谷翔氏は理論的な解析を更にすすめ、数値的に得られたエッジ状態の物理的起源を考察する為に現実的なシリセンリボンのモデルからカイラル対称なモデルへの断熱変形を考慮し、その際のエッジ状態の振る舞いを検討した。その結果、シリセンのエッジ状態はカイラル対称なモデルにおけるエッジ状態に断熱変形可能であり、その特性がカイラル対称なモデルによりトポロジカルな観点から議論できることを明らかとした。

審 査 の 要 旨

〔批評〕

現在のシリセンに関する理論的研究は、第一原理的な手法に基づく電子構造に関するもの、もしくは単一軌道模型に簡略化し既存の系である、グラフェン、トポロジカル絶縁体等との類似性に基づくものが主である。しかしながらシリセンは sp^3 軌道的な電子状態をその特性としており、モデル化する際には本研究でなされたような多軌道模型として扱うことが本質的に重要である。特に系の境界において生じるエッジ状態の物理に関してはその多軌道性の意義は極めて大きく、境界での水素終端の多様性ならびに物理においても多軌道模型による議論に関しては、多軌道性は必須の重要性を持つ。

以上を背景に、本論文では、シリセンのエッジ状態を多軌道模型から議論を始め、対称性の高い系への断熱変形に基づき、物理的に議論することでいわゆるトポロジカル系におけるバルクエッジ対応のシリセンにおける有効性を明らかとした。よって、本論文はその新規性、独創性ならびにその物理的な有効性の観点から筑波大学数理物質科学研究科物理学専攻の博士論文として十分な意義をもつと評価される。

〔最終試験結果〕

平成 26 年 2 月 21 日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

〔結論〕

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士(理学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。