

## 論文の内容の要旨

論文題目 グラフェン上に出現するエッジ状態の一般化と  
エッジ状態が出現する物質の電子状態の理論的研究

氏 名 高木 祥光

炭素原子が平面的に結合した蜂の巣格子が積層したグラファイトは、長年にわたって熱心に研究されている物質の一つである。また、グラファイトに由来する物質は様々に存在し、グラファイトの層間に原子や分子が入り込んだグラファイト層間化合物や、蜂の巣格子が曲率をもって結合した球状のフラーレンや筒状のカーボンナノチューブ、その他それらに関連した物質等がある。最近では、グラファイトから蜂の巣格子を一層（グラフェン）を剥離する技術が確立され、グラフェンの研究が盛んに行われている。

グラフェンの電子構造の特徴として、 $\pi$ 電子によるバンド( $\pi$ バンド)がフェルミレベルで波数に対して線形の分散関係をもっていることが挙げられる。このことは、グラフェンの $\pi$ 電子が実効的に相対論的波動方程式であるディラック方程式に従い、質量のない電子として記述されることと等価であることが知られている。この波数に対して線形な分散をもっている $\pi$ バンドがフェルミレベルに存在するため、グラフェンは波数の2次の分散関係となる伝導バンドと価電子バンドをもつ通常の半導体とは大きく異なる電子物性をしめす。

グラフェンの $\pi$ 電子系には、エッジ状態と呼ばれる境界条件に強く依存した表面状態が存在し、この表面状態もグラフェンの $\pi$ 電子系の特徴の一つである。エッジ状態の出現には端の形状が重要な役割を担っており、端があれば必ず出現する通常の状態ではないことが知られている。つまり、グラフェンがジグザグ端をもった場合のみ出現することが理論計算、実験の両面から明らかにされている。エッジ状態が引き起こす物性も研究が行われ、ジグザグ端に磁気モーメントがフェリ磁性的な秩序を示すことが理論計算により予測されている。

これまでにエッジ状態が出現する物質はグラフェンとグラフェンを基にした物質(グラファイト等)以外には知られていなかった。これに対し、本論文ではエッジ状態はグラフェンに限った表面状態ではなく、ある種のネットワーク構造において広く出現する一般的な表面状態であることを明らかにする。エッジ状態はジグザグ端をもったグラフェンリボン上において出現するため、最初に、ジグザグ端のみをもったグラフェンリボン上のエッジ状態の波動関数の性質とジグザグリボンの構造の間関係を示す。その関係を拡張することにより、ジグザグ端のみをもったグラフェンリボンと同様の構造的特徴をもったネットワーク構造の構築法を提案する。さらに構築されたネットワーク構造が表面をもった場合にエッジ状態が出現する条件を明らかにする。エッジ状態が出現するネットワーク構造の例としては、3次元3配位構造、3次元炭化水素構造や立方晶ダイヤモンド構造等があることをしめす。特に、3次元炭化水素構造の電子状態には、フェルミレベルにエッジ状態が出現することを見出した。また、立方晶ダイヤモンド構造をもつ立方晶シリコンやダイヤモンドではフェルミレベルにはエッジ状態は出現しないが、

フェルミレベルより深いエネルギーのところではエッジ状態が出現していることも本論文中で明らかにする。最後に、現実には端がないグラフェンの上であっても、金属原子を吸着させることによってエッジ状態が出現することを明らかにする。