

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 (2761) 号
------	----------------

氏 名 服部 綾実

論文題目

新規2次元材料シリセン・ゲルマネン・スタネンナリボンのエッジ
状態の理論的研究
(Theoretical studies of edge states of novel two dimensional
materials: silicene, germanene and stanene nanoribbons)

論文審査担当者

主査	名古屋大学	教授	田仲 由喜夫
委員	名古屋大学	准教授	川口 由紀
委員	名古屋大学	教授	竹延 大志
委員	名古屋大学	准教授	小林 晃人
委員	京都大学	教授	佐藤 昌利

論文審査の結果の要旨

服部綾実君提出の論文「新規2次元材料シリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンのエッジ状態の理論的研究」は、IV族単原子層ナノリボンの電子状態を多軌道タイトバインディングモデルに基づく計算により理論的に明らかにしたものである。これらの物質は、トポロジカルに保護されたエッジ状態を持つ2次元トポロジカル絶縁体として注目を集め、ナノデバイス応用が期待されている。

第1章では、半導体微細化の現状、グラフェン材料の特徴と問題点が紹介された後、新規材料シリセン・ゲルマネン、スタネンに理論的に期待されるべきことが述べられている。またこれらの単原子層物質作成の実験の現状が紹介されている。さらにこの論文の主題であるエッジ状態について、グラフェンで明らかになっていることが記述されている。また単一バンドモデルでのシリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンの先行研究が紹介されている。この先行研究ではトポロジカル量子効果に基づくエッジ状態制御のトランジスタが提案されている。

第2章では、ナノリボンの原子構造、多軌道タイトバインディングモデルにおける計算方法が紹介され、各種ホッピングパラメータについて説明されている。また水素終端の際の水素と結合した際のパラメータの決定の方法としてSi-H、Ge-H、Sn-H結合を持つ分子であるシラン、ゲルマン、スタナンを用いた計算と、固有エネルギーについて記述されている。

第3章では、非磁性状態におけるエネルギー分散が計算された。水素終端がない場合のナノリボン、水素終端ジグザグナノリボンの電子状態の計算が記述されて、先行の単一軌道モデルでは正しくエッジ状態が求められないことが明らかにされている。

第4章ではエッジにできる磁性と電場効果が議論されている。エッジ磁性はハートリー近似を用いて計算された。水素終端がある場合についてエネルギーバンドが計算されて、エッジ状態を記述する有効低エネルギーモデルも提案された。また垂直電場が電子状態に与える影響についても計算されて、トポロジカル量子電界効果に関する検討がなされた。その結果、1軌道モデルで提案されたトポロジカル量子効果トランジスタ機能を実現することは容易ではないことが明らかになった。

第5章では、本研究の結論を与えている。

以上のように本論文では、新規2次元材料シリセン・ゲルマネン・スタネンナノリボンエッジ状態の研究がなされて多軌道モデルの重要性が明確になった。多軌道モデルでは1軌道モデルで記述できないエッジ状態の非線形性、エッジが磁性を持つ時の特異な電子状態、様々な水素終端による電子状態の違いなどが明らかにされた。これらの成果は、固体物理学のみならず新奇な量子デバイスへの応用が材料開発をするためにも重要であり、工学の発展に寄与するところが大きいと判断できる。よって、本論文の提出者である服部綾実君は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格があると判断した。