

## 論文内容の要旨

氏 名 ( 玉置 弦 )

## 論文題名

Topological electronic states and interaction effects in graphene nanoribbon networks  
 グラフェンナノリボンネットワークにおけるトポロジカル電子状態と相互作用効果

## 論文内容の要旨

本博士論文では、グラフェンナノリボン (GNR) のトポロジカル特性と、そのネットワークにおける電子間相互作用の影響を理論的に研究した。グラフェンは炭素原子が二次元の蜂の巣状構造を形成する単純な材料であり、質量を持たないディラック粒子として振る舞う電子による高い移動度や特異な物性が特徴的である。グラフェンをナノスケールのリボン状構造にしたGNRは、その端構造 (ジグザグ型やアームチェア型) により金属的または絶縁体的な性質を示し、量子ワイヤやスピフィルターとしての応用が期待されている。

近年、GNRが一次元トポロジカル絶縁体としての性質を持つという新たな視点が提案された。具体的には、エネルギーギャップを持つアームチェア型GNRが $Z_2$ 不変量によって特徴づけられ、異なるトポロジカルクラスに属するGNR同士を接合すると、その接合部にトポロジカル束縛状態が現れることが示された。また、これらの接合を周期的に配列すると一次元のスピン鎖が形成され、量子スピン模型の理想的な研究プラットフォームとなることが期待されている。実験的にも様々な端構造や幅のGNRを合成する技術が開発され、異なる種類のGNR同士の接合も合成されている。一方で、GNR接合に関する従来のほとんどの研究では2本のリボンからなる単純接合が考えられてきた。一般には3本以上のGNRが分岐する多端子接合も可能であり、実際にGNRの3端子接合も実験的に合成されている。しかし、3つのトポロジカル物質の接合部における局在状態を記述する理論は存在せず、このような多端子GNR接合の電子状態の詳細は明らかでなかった。

本論文では、トポロジカル局在状態の理論を一般的な多端子接合構造に拡張し、さらに多端子接合の周期配列によって形成される2次元GNRネットワークの電子状態を理論的に研究した。まず第一に、カイラル対称性を持つ一次元系の多端子接合のトポロジカル局在状態の存否及びその数を記述する理論的枠組みを確立した。具体的には、多端子接合系を複数のリボンと接合部の島に分割し、それぞれのトポロジカル数を足し合わせることで単一のトポロジカル数 $N$ を定義し、この $N$ がゼロエネルギーに現れる独立な局在状態の個数と対応することを数理的に示した。

さらに、多端子接合の周期配列によって形成される2次元GNRネットワークを考え、その電子構造を系統的に計算した。その結果、各接合のトポロジカル局在状態が互いに結合することで、GNRのバルクギャップ中に、エネルギー幅の狭い孤立バンドが形成されることがわかった。そのバンド幅はネットワークのGNR部の長さ (接合間の距離) によって制御することが可能で、典型的には10meVから100meV程度である。重要な点は、そのバンド構造がトポロジカル数 $N$ に大きく依存する点である。 $N=1$ ではグラフェンに類似したバンド構造を、 $N=2$ 以上では「異常平坦バンド」を含むバンド構造を取ることがわかった。ここで異常平坦バンドとは、Lieb格子やカゴメ格子に見られるような、平坦バンドと非平坦バンドがトポロジカルに絡み合った特異なバンド構造である。

一般にエネルギー幅の狭いバンドでは、運動エネルギーの寄与が相対的に小さくなるため、電子間相互作用が本質的に重要な役割を果たす。本論文の後半では、 $N=1$ と $N=2$ のGNRネットワークに現れるトポロジカル局在状態由来のバンドに注目し、電子間相互作用によって現れる秩序状態を研究した。 $N=1$ に関しては、Hubbard模型と平均場近似を組み合わせたモデル計算と、第一原理計算の2つを行い、定性的に整合する結果を得た。具体的には、電子数  $n$  と電子間相互作用の強さ  $U/t$  の相図の上で、金属、強磁性体、反強磁性体の状態が現れることがわかった。 $N=2$  に対してはHubbard模型+平均場近似による解析を行った。 $N=1$ と大きく違う点は、各接合部に2つの軌道自由度が存在することと、異常平坦バンドが存在することである。実際に、電子のフェルミエネルギーが異常平坦バンド上に存在する場合、スピン秩序および軌道秩序が絡み合った様々な秩序状態が出ることが示された。

これらの成果は、トポロジカル物質における接合状態の発現機構に新しい理解を与えるとともに、GNR系の新しい量子物性及び物性機能の可能性を提案するものである。