



Title	Energy spectrum and topological gap labeling in two-dimensional quasi-periodic systems
Author(s)	岡, 裕樹
Citation	大阪大学, 2024, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/96377">https://doi.org/10.18910/96377</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

## 論文内容の要旨

氏名 (岡 裕樹)	
論文題名	Energy spectrum and topological gap labeling in two-dimensional quasi-periodic systems (二次元準周期系におけるエネルギースペクトルとトポロジカルギャップラベリング)
論文内容の要旨	
<p>この論文では、二次元準周期系におけるエネルギースペクトルとトポロジカルなギャップラベリングについて、系統的な理論研究を行った。近年、二次元物質同士を小さな角度で積層させたモアレ積層系の物理が注目されている。モアレ干渉は二つの結晶格子のズレによって生じる空間的干渉模様であり、結晶格子よりもはるかに大きな周期構造を生じさせる。このモアレ干渉の周期は積層される結晶格子の差異や層間のツイスト角に依存し、その周期に応じて異なる物性が現れる。例えば、ツイスト二層グラフェンでは約1.1°のツイスト角により超伝導転移が観測される。六方晶窒化ホウ素(hBN)との積層系ではモアレ周期に応じたエネルギー準位にバンドギャップが生じる。これらの現象はモアレ周期を用いた有効連続体モデルによって理論的によく説明され、実験結果とも一致する。一方で、二層以上の多層モアレ積層系では複数のツイスト角が独立に存在し、多重周期構造が形成される。これにより単一モアレ系には存在した並進対称性が破れ、結晶周期に基づく従来のバンド理論では扱うことのできない準周期性が生じる。</p> <p>本研究の目的は、このような二次元準周期系が一般にどのような電子構造をもたらすかを調べ、さらにスペクトルに現れるエネルギーギャップがどのようなトポロジカル数で特徴づけられるかを明らかにすることである。一次元系では、これと対応する問題としてAubry-Andre模型に代表される二重周期系の問題がよく知られている。この模型は一つ上の次元である二次元量子ホール効果との間に数学的な対応があり、各ギャップは量子化したホール伝導度(第1 Chern数)によって特徴づけられる。つまり一次元準周期系におけるギャップは第1 Chern数でラベルされる。同様の議論が二次元準周期系に存在するかは未知の問題である。</p> <p>この研究では、まず代表的なモアレ3層系であるhBN/グラフェン/hBNの電子構造を調べた。hBN/グラフェン/hBN三層系では上下2つのモアレ周期が存在し一般に非整合であるが、モアレ格子点の近接点同士が一致するよう格子を歪ませることで、準周期系を近似結晶に置き換え、電子状態計算を可能にした。数値計算の結果、ツイスト角の変化に応じたフラクタル状のバンドギャップの存在が確認された。さらにそれぞれのギャップには、電子密度の量子化を与える6つの整数不変量が存在することを発見した。これらの整数はツイスト角を変化させてもギャップが閉じない限り不变に保たれる。2つの平面波ポテンシャルを導入した一般の電子系においても同様にフラクタル状のバンドギャップが現れ、各ギャップに6つの量子数が一意に与えられることが確認された。最後に、層間スライドによる断熱ポンプと4次元量子ホール効果の対応を調べることにより、この6つの量子数が第2 Chern数と数学的に一致することを明らかにした。これは上述の一次元準周期模型と2次元量子ホール効果の高次元への自然な拡張とみなすことができる。</p> <p>以上の結果より、二次元物質における多重周期系(準周期系)のエネルギーギャップは、第2 Chern数で記述されることを明らかにした。この概念は二次元物質に限らず一般の多重周期系に適用される。本研究は二次元準周期系の電子構造に関する新たな理論的枠組みを提供し、二次元物質の新たな物理的性質の理解に寄与することが期待される。</p>	

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏名 ( 岡 裕樹 )		
論文審査担当者	(職)	氏名
	主査 教授	越野 幹人
	副査 教授	黒木 和彦
	副査 教授	大野木 哲也
	副査 教授	新見 康洋
	副査 助教	川上 拓人

## 論文審査の結果の要旨

近年、2次元物質同士を非整合に重ねて作られるモアレ積層物質の物理が注目されている。これらの物質では、二つの結晶格子の非整合によって、原子格子よりもはるかに大きなモアレ干渉模様が生じ、電子構造が大きく変調を受ける。一般にモアレ干渉の周期は層間のツイスト角や結晶格子の違いに著しく依存し、またその周期の違いに応じて異なる物性が現れる。現在に至るまでモアレ物質の研究は、ツイスト2層グラフェンに代表されるモアレ2層系を中心に行われてきた。モアレ2層系の電子構造は、系に存在する単一のモアレ周期に基づくブロッホ電子系としてよく記述することができる。一方で、近年作成されるようになった3層以上の多層モアレ積層系では、異なる周期を持つ複数のモアレ模様が独立に存在し、多重周期構造が形成される。これにより単一モアレ系には存在した近似的な並進対称性が破れ、従来のブロッホ理論では扱うことのできない準周期性が生じる。これはペンローズ・タイルと同様の準結晶の問題であり、そのエネルギースペクトルの一般的な性質や、そこに内在するトポロジカルな性質を理論的に記述することは、通常の周期結晶と比較して極めて困難である。

岡裕樹氏は、このような二次元準周期系が一般にどのような電子構造をもたらすかを調べ、さらにスペクトルに現れるエネルギーギャップがどのようなトポロジカル数で特徴づけられるかを明らかにした。まず、代表的なモアレ準周期系として、グラフェンを2枚のhBN(六方晶窒化ホウ素)で挟んだ「hBN/グラフェン/hBN 3層系」に着目し、その電子構造とそのツイスト角依存性を調べた。上記の通り3層系では2つのモアレ周期が存在し一般に非整合であるが、モアレ格子点の近接点同士が一致するように格子をわずかに歪ませることで、準周期系を近似結晶に置き換え、電子状態計算を可能にした。角度依存を細密に調べた結果、ツイスト角の変化に連続的に依存するフラクタル状のバンドギャップの構造を発見し、またそれぞれのギャップには、電子密度の量子化を与える6つの整数不変量が存在することを見出した。これらの整数は、系の余剰な周期性から定義される6つのブリルアンズーンの面積と共に量であり、整合非整合に関わらず、ギャップが閉じない限り不変に保たれる。また2つの平面波ポテンシャルを導入した一般の準周期電子系においても、同様のギャップラベル数の存在が普遍的に存在することを見出した。最後に、多重周期系における断熱ポンプと4次元量子ホール効果の対応を調べることにより、この6つの量子数が第2Chern数と数学的に一致することを明らかにした。すなわちこの6つの数が量子化されるトポロジカルな起源を数学的に特定した。これらより、一般的な二次元物質における準周期系のエネルギーギャップは、第2Chern数ラベルされることが明らかになったのである。

本研究の成果は、モアレ多層物質の性質を明らかにしたことととどまらず、一般的な準周期系のスペクトル構造を支配する全く知られていない数学的原理を導き出したという意味で歴史的にも大きな意義があるものと認められる。岡裕樹氏のこれらの研究成果は、博士(理学)の学位論文として十分価値あるものと認める。