

Title	Theory of lattice relaxation in non-periodic moiré systems
Author(s)	中辻, 直斗
Citation	大阪大学, 2024, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/96385">https://doi.org/10.18910/96385</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

Osaka University

## 論文内容の要旨

氏名 ( 中辻 直斗 )

論文題名

Theory of lattice relaxation in non-periodic moiré systems  
(非周期モアレ物質における格子緩和の理論)

## 論文内容の要旨

本博士論文では非周期モアレ物質における結晶歪みとその電子状態への影響を理論的に調べた。モアレ物質は多彩な量子状態の舞台として近年注目を集めている。その代表であるツイスト二層グラフェン (TBG) は、2つの単層グラフェンを有限の相対角度で積層することで構成される。この物質では2層の結晶周期が干渉することでモアレ模様と呼ばれる長距離周期が生じ、これによって電子状態が変調される。特に魔法角と呼ばれる角度では、電荷中性点近傍に平坦なバンドが生じ、それに起因した超伝導状態や強相関絶縁体状態などが現れる。さらに最近では2層系を超えた多層モアレ物質の研究も行われている。一般に3層以上の系では、複数の異なるモアレ模様が互いに干渉することで、準周期的な高次モアレ構造が生じる。このような準周期モアレ系は、ブロッホ理論を超えた新しい固体物性の舞台として注目されている。

一般に、モアレ物質では自発的な格子緩和がその電子状態に大きな影響を与えることが知られている。TBGの場合、格子緩和によってエネルギー的に安定なグラファイト積層領域 (AB/BA構造) が拡大することでドメイン構造を構成し、これが平坦バンドと励起バンドの間のギャップの原因となる。モアレ系の格子緩和の理論研究は、現在のところ比較的単純な二層系に限られている。3層以上のモアレ系では、数十万個以上の原子を含む極めて大きな空間構造を持つため、格子緩和のシミュレーションは非常に困難な課題となる。

そこで本博士論文では、準周期モアレ系の代表的な例であるツイスト三層グラフェン (TTG) における結晶緩和の構造とその電子状態を理論的に調べた。原子を粗視化する適切な有効モデルを用いることで、100nmに及ぶ構造の計算を可能にした。その結果、2つのモアレ模様が相互作用することで、巨大な「モアレ原子」のドメイン構造が生じ、さらにドメインの間の境界には、電子の非自明なトポロジーに起因する境界状態が生じることを示した。本論文で示された方法論は、グラフェン以外の様々な2次元物質にも応用可能であり、モアレ多層系の物性探究の道を開くものである。

論文の後半部分では、非周期モアレ物質のもう一つの重要な課題として、ランダムな結晶歪みを有するTBGについて調べた。TBGは一様なモアレ模様を持つ周期物質と通常考えられるが、実際の試料では結晶歪みに起因する非周期な構造を有することが知られている。この歪みを取り入れた理論モデルを構築することでTBGの電子状態における結晶歪みの効果を調べた。その結果、平坦バンドが歪みによってエネルギー軸上で2つに分裂することを明らかにし、それが歪みによって生じた有効ベクトルポテンシャルによって解釈できることを解析的に示した。

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( 中 辻 直 斗 )	
	(職) 氏 名
論文審査担当者	主 査 教授 越野 幹人
	副 査 教授 千徳 靖彦
	副 査 教授 浅野 建一
	副 査 准教授 塩貝 純一
	副 査 准教授 Keith Slevin

## 論文審査の結果の要旨

2次元材料を非整合に重ねて作られるツイスト積層物質は、多彩な量子状態の舞台として近年大きな注目を集めている。例えば、二枚のグラフェンを回転して重ねたツイスト二層グラフェン(TBG)では、2つの原子格子の非整合性がもたらすモアレ干渉模様によって平坦なバンドが生じ、それに起因して超伝導状態が現れることが発見された。グラフェン以外にも、遷移金属カルコゲナイドや窒化ホウ素をはじめとする様々な2次元物質のツイスト系が盛んに研究されており、新たな物性機能が見つまっている。また最近では2層系を超えた多層モアレ物質の研究も行われるようになった。3層以上の系では、複数のモアレ模様が干渉することで、準周期的な高次モアレ構造が生じ、ブロッホ理論を超えた新しい固体物性の舞台として注目されている。

一般にこれらツイスト積層物質では、格子の僅かな変形がモアレ模様を大きく変調し、電子系に重大な影響を与えることが知られる。モアレ系の格子変形には大きく分けて、全エネルギーを下げるために格子系が自発的に歪む「モアレ格子緩和」と、原子位置のランダムな歪みに起因する「ランダムモアレ歪み」の2種類が存在する。理論的には、いずれも莫大な数の原子が関わる困難な問題である。中辻直斗氏は、以下に述べるように、このモアレ格子変形に関する2つの仕事を行った。

第一に、準周期モアレ系の一つであるツイスト3層グラフェンについて、そのモアレ格子緩和とその下での電子状態を調べた。上述のようにモアレ物質の電子系の記述には格子緩和の計算が必須であるが、この計算は比較的単純な構造を持つ2層系に限られている。3層以上のモアレ系は典型的に数十万個以上の原子を含む極めて大きな空間構造を持つため、格子緩和のシミュレーションは非常に困難な課題であったが、中辻氏は原子を粗視化する適切な有効モデルを用いることで、この構造の計算を初めて可能にした。その結果、2つのモアレ模様が相互作用することで、有効的な「モアレ原子」のドメイン構造が生じ、さらに各ドメイン内の非自明なトポロジーに起因する電子状態が生じることを示した。本論文で示された方法論は汎用性が高く、一般の2次元物質に応用可能である。

第二の成果は、ランダムモアレ歪みを有するTBGの電子状態を研究した。通常TBGは一様なモアレ模様を持つ周期物質として扱われるが、ここでは実際の試料に不可避のモアレ歪みを取り入れた理論モデルを構築することで、その電子状態を計算した。その結果、ランダム歪みの下で、平坦バンドが局所的平坦性を保ちつつも、エネルギー軸上で明確に2つに分裂することを明らかにした。またその分列幅を有効ベクトルポテンシャルによって定量的に表す解析的な表式を得た。

これらの仕事は、従来の原子格子に基づく方法では取り扱いが困難だった「超・超周期」原子構造を効率的に取り扱う方法を初めて示したものであり、モアレ系の物性研究の対象を大きく広げるものである。同時に、その困難性ゆえに未知であったあらたな物理的な知見とその定性的な解釈を得たという点で、大きな価値のあるものである。以上のことより、これらの成果は、博士(理学)の学位論文として十分価値あるものと認める。