



Title	Theory of phonons and thermal transport in moiré superlattices
Author(s)	Krisna, Lukas Primahatva Adhitya
Citation	大阪大学, 2024, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/98712">https://doi.org/10.18910/98712</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

## Abstract of Thesis

Name ( Lukas Primahatva Adhitya Krisna )	
Title	Theory of phonons and thermal transport in moiré superlattices (モアレ超格子におけるフォノン及び熱伝導の理論)
<p><b>Abstract of Thesis</b></p> <p>In this thesis, we investigate the in-plane acoustic phonons and thermal transport properties in moiré superlattices, focusing on twisted bilayer systems. Moiré pattern plays an important role in the physical properties of van der Waals materials. A well-known example is twisted bilayer graphene (TBG), where modulation of graphene's Dirac fermions by the moiré potential leads to the emergence of flat bands and various correlated phases at a specific twist angle. Novel electronic phenomena were also observed in other twisted bilayer materials such as graphene/hexagonal boron nitride (G/hBN) or twisted bilayer transition metal dichalcogenides (TMD).</p> <p>The interlayer moiré potential in twisted bilayer systems also induces a structural change that should strongly affect the vibrational properties. In TBG, the in-plane acoustic phonons were shown to be reconstructed into superlattice mini bands with a notable flattening of some bands. These phonons behave as the vibrations of an effective triangular structure of the moiré superlattice with a distinct mechanical characteristic to the original honeycomb lattice of graphene. However, the moiré effect on the in-plane acoustic phonons of twisted bilayer materials beyond TBG was yet to be understood. Furthermore, changes in the band structure of the acoustic phonons would have an immediate impact on thermal transport properties, particularly at low temperatures.</p> <p>In the first part of this thesis, we investigate the in-plane acoustic phonons of twisted bilayer systems beyond TBG, which include twisted graphene/hexagonal boron nitride, and twisted bilayer molybdenum disulfide as a representative of TMD systems. We utilize the continuum approach, where the interlayer potential is a continuous function of the local stacking configurations that changes smoothly across the moiré unit cell. We show that there is a strong correspondence between the relaxed lattice structure and the phonon band structure which leads to the appearance of universal features across different twisted bilayer systems. To elucidate this correspondence, we develop an effective mass-spring model that qualitatively reproduces the original phonon bands at low-frequency. One particular characteristic of the reconstructed band structure is the presence of multiple flat bands. We demonstrate that these flat bands can be understood as the fundamental modes of a collection of isolated strings that oscillate independently. Furthermore, we also show that the moiré phonons can exhibit chiral properties for systems with no inversion symmetry in the moiré potential, such as G/hBN.</p> <p>In the second part of this thesis, we calculate the thermal conductivity of the twisted bilayer systems using the semiclassical transport equation. We focus on the low-temperature regime, where the mean free path of phonons is roughly constant, and the energy of the reconstructed phonons is the most relevant. We demonstrate that the significant flattening of phonon bands leads to a reduction in thermal conductivity by up to 40% at a particular temperature. Furthermore, we show that these changes are also manifested in the temperature dependence of thermal conductivity, where a characteristic deviation from the usual <math>T^2</math> of in-plane acoustic phonons is found for all twisted bilayer systems.</p> <p>Our results hold an important role in the study of moiré materials. We expect that the electron-phonon interactions are enhanced by the moiré effect which could help explain the mechanism behind various transport phenomena observed in twisted bilayer systems. The flat phonon bands are also expected to entail interesting physics, such as localized excitations that were previously realized in photonic lattices. Lastly, the characteristic changes introduced by the moiré effect in the thermal conductivity should be useful for the definitive verification of the presence of moiré phonons as well as the future of thermal device engineering.</p>	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( Lukas Primahatva Adhitya Krisna )		
	(職)	氏 名
論文審査担当者	主 査	教 授 越 野 幹 人
	副 査	教 授 吉 野 元
	副 査	准教授 越 智 正 之
	副 査	准教授 竹 森 那 由 多
	副 査	助 教 川 上 拓 人

論文審査の結果の要旨

2次元物質を格子非整合に重ねたモアレ積層物質は、新しい物質科学の舞台として大きな注目を集めている。その最も代表的な例であるツイスト二層グラフェン(TBG)では、非整合の原子格子の干渉がもたらすモアレ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や磁性などの強相関電子状態が現れることで大きな注目を集めている。またグラフェン以外にも、六方晶窒化ホウ素(hBN)や遷移金属カルコゲナイドなど様々な2次元物質のモアレ系が盛んに研究され、物性物理学の一つの分野を形成するに至っている。一方で、これまでのモアレ物質の研究の大多数は電子状態に関するもので、フォノンに関する研究はまだ少なく発展の途上にある。2019年にTBGにおけるフォノンの計算が発表され、音響フォノン分散にモアレ超格子が大きな影響を与えることが初めて示された。しかし、それ以外の2次元物質系への適用はなく、一般的なモアレ積層系でのフォノンの性質はいまだ明らかでない。

Lukas Krisna氏は、新しい計算法および理論模型を開発し、それらを様々なモアレ物質に適用することで、この系の理論研究を大きく推し進めた。具体的な成果は以下の通りである。

第一に、異種2次元物質のモアレ系におけるフォノンの計算法を確立し、これを用いて、基本的なヘテロ2層系であるグラフェンhBN系のモアレフォノンの計算を初めて行った。その結果、三角モアレ格子を生じるTBGとは大きく異なる、六角モアレ格子特有のモアレフォノンバンドが存在することを明らかにした。また同様の計算を遷移金属カルコゲナイド系にも適用し、いずれの場合も三角モアレ格子と六角モアレ格子いずれかのクラスに分類されることも見出した。これらの知見が多く物質群に共通する普遍的な結果であることを示した。

次に、これらモアレフォノンの複雑な格子振動を記述する簡便なバネおもりの力学模型を考案した。極めて単純なモデルながら、適切なパラメータを設定することで、モアレフォノンの基本的なバンド構造を定性的かつ定量的に再現することを明らかにした。さらにこれを用いることで、平坦フォノンバンドの起源を解析的に説明することに成功し、六角モアレ格子、三角モアレ格子ともに局在した単一の弦の振動に帰着されるという驚くべき結果を見出した。

最後に、計算されたフォノン状態を用いて、モアレ物質の熱伝導度の計算を行った。フォノンのモアレバンド化によって、低温における熱伝導度が30%以上減少することが明らかになった。これはモアレフォノンの物理的性質への影響を予言する初めての成果である。

これらの仕事は、原子数の多さの困難性ゆえに未知であったモアレ物質の格子振動の性質に関して、あらたな物理的な知見と多く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。