

論文内容の要旨

氏 名 (人見 将)

論文題名

Theory of electronic properties in quasicrystalline tisted bilayer graphene

論文内容の要旨

この論文では、準周期的な構造を持つ30度ねじれ2層グラフェンについて、電子構造と光学吸収及びその磁場効果を理論的に研究した。

近年、原子が2次元的に配列した薄膜である2次元物質が広く研究されている。炭素の2次元物質であるグラフェンをはじめとしたこれらの物質群は、電磁氣的、熱的、力学的に豊かな性質を持っており、すでに数十種類を超える2次元物質が合成されている。さらに、異なる性質を持った物質同士を積層することで得られるヘテロ積層物質についても注目が集まっており、新たな個体物理学の一分野を成している。さらに最近になって、物質同士を角度をつけて（捻って）積層するねじれ積層系の研究が進んでいる。最も有名な例としてねじれ積層グラフェンが挙げられるが、この物質は、積層する角度によって伝導性が大きく変化することが報告されている。この発見を契機として、さまざまな積層角度、グラフェン以外の物質のねじれ積層が、理論・実験の両面から議論されている。

このねじれ積層系は、本来、結晶の物性予測の前提となる周期性を持たない。しかしその代わりに、積層角度が微小な場合には、モアレ構造と呼ばれる長周期構造が出現する。このモアレ構造は、物性の理論的研究を可能にするだけでなく、物質の伝導性や他の性質に深く関係することが知られており、先に述べたねじれ2層グラフェンの伝導特性も、このモアレ構造から理解することができる。一方、積層角度が大きくなると、モアレ長周期構造は次第に小さくなり、最後には完全に消失する。2層グラフェンにおいては、30度で完全に周期性を失い、準結晶となる。準結晶とは、物質が周期性を持たないが、ガラスのように完全にランダムな状態とも異なり、特定の回転対称性を持つ物質のことである。30度ねじれ2層グラフェンは、結晶であるグラフェンを重ねるだけで得られる、新たなタイプの準結晶であると理解される。周期性を持たないために、既存のバンド理論による解析は難しいとされている。近年、擬バンド理論と呼ばれる有効理論が提唱された。これはそれぞれの層の周期性に着目し、全体としては準結晶であるにも関わらずバンド理論に類似した計算が可能であるとするものである。

本研究では、この擬バンド理論を拡張することで、積層準結晶の光吸収特性及び、磁場中の電子状態の理論的解析を行った。特に、30度ねじれ2層グラフェンにおいて、結晶では許されない12回転対称性が、光吸収や磁場中の準位に本質的に重要であることを明らかにした。光吸収においては、回転対称性によって定義される角運動量によって電子の遷移が制限され、単層グラフェンとは異なる吸収特性を有する。また、磁場を印加した際に現れる量子化されたエネルギー準位についても、擬バンド構造および角運動量の観点から理解することができる。低エネルギー領域では単層グラフェンと似た状態をとるのに対し、その他の領域においては、30度での積層の効果による非自明なエネルギー準位が生じる。さらに、このエネルギー準位は、磁場中の光吸収に本質的な役割を果たし、磁場中の吸収スペクトルは、擬バンドの角運動量と量子化されたエネルギー準位という異なる2つの指標を用いることで完全に理解できる。

本研究では、30度ねじれ2層グラフェンについての解析を行ったが、この理論的枠組みは、積層角度や物質が異なる場合にも応用可能であり、今後、多くの物質の物性予測を可能とするものである。また、本研究で扱った光学伝導度や磁場中のエネルギー準位の計算方法は、固体物理において基礎的な物理量の一般的な計算方法の好例であり、今後、強相関電子系やトポロジなど他の物理量の計算の基礎となると考えられる。したがって、これらの結果は、今後のねじれ積層物質の基礎・応用研究の理論的土台の一端をなすものである。