

# 論文題目要旨

学位申請者：中辻 直斗

論文題目：Theory of lattice relaxation in non-periodic moiré systems

論文要旨：

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アイト積層領域 (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的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。