

論文題目要旨

学位申請者：岡裕樹

論文題目：Energy spectrum and topological gap labeling in two-dimensional quasi-periodic systems

論文要旨：

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。

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。

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に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変に保たれる。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二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。

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。