

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 7 月 3 日現在

機関番号：34304

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2015～2019

課題番号：15H03521

研究課題名(和文)「モアレ」を利用した物性制御の第一原理的研究

研究課題名(英文)First-principles Study of Moire in Atomic Layer Materials

研究代表者

内田 和之(UCHIDA, Kazuyuki)

京都産業大学・理学部・准教授

研究者番号：10393810

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,200,000円

研究成果の概要(和文)：(1)h-BN(ヘキサゴナル・ボロンナイトライド)シート2枚を積層して互いに逆方向へとねじった系を第一原理計算で調べた。系の原子構造とエネルギーが、ねじれ角の関数としてどのように振る舞うのかを明らかにした。(2)グラフェンシート2枚を積層して互いに逆方向へとねじった系から、2層グラフェンリボンを切り出した系を調べた。リボンの端に現れる磁性が、リボンのモアレパターンとどのように関係しているのかを明らかにした。(3)グラフェン円盤2枚を積層して互いに逆方向へとねじった系のエネルギーを調べた。局所AA積層構造と局所AB積層構造の面積比が、系のエネルギーとどのように関係しているのかを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究により、(1)原子膜物質同士が積層した系においてモアレが現れる時、モアレのもたらす物性がねじれ角の関数としてどのような周期を持つのかを知るには、原子膜に含まれている元素の個数も重要であるという知見が得られた。(2)また2層グラフェンリボンに関する研究によって、原子膜物質同士の積層系においてモアレと磁性が相関する具体例の存在が、明らかになった。(3)さらに、原子膜物質同士が積み重なってファンデルワールス結合する時の界面エネルギーが、モアレとどのように関係するのかを理解するための物理が明らかになった。

研究成果の概要(英文)：(1) We have studied twisted bilayer of h-BN (hexagonal boron nitride). We have clarified how the energy and the atomic structures of the system depend on the twist angle of the system.(2) We have studied bilayer graphen ribbon which was cut out of from twisted bilayer of graphen. We have clarified how the magnetic properties of system depends on the Moire pattern in the ribbons.(3) We have studied the energetics of twisted bilayer of circular graphene flake. We have shown how the energy of the system depends on the ratio of the locally AA-stacking area and the locally AB-stacking area in the flakes.

研究分野：ナノサイエンス

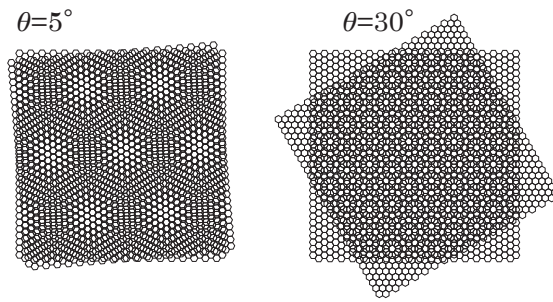
キーワード：原子膜

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

【モアレの物理の発見と、応用への期待】

モアレは、空間において2つの波が干渉した結果生じる「うなり」である。例えば2枚のグラフェンを、面直の軸の周りで互いに逆方向へとねじって積層した系 (twisted bilayer graphene, tBLG) では、モアレが生じる。近年におけるナノテクノロジーの進歩は、このような系(tBLG)を実際に作成することを可能にし [PRL100,125504(2008)]、そこには、これまで思いもかけなかった新しい物理が内在していることが明らかになりつつある [PRL106,126802(2011)]。

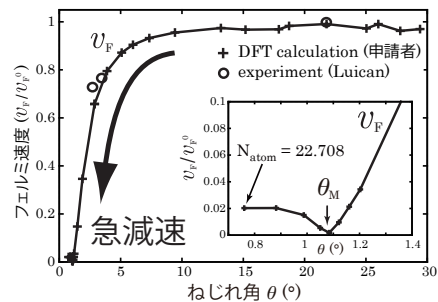
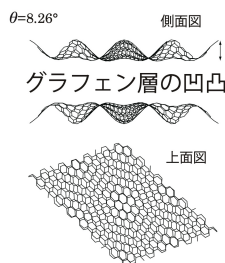


例えば、tBLGの原子構造が第一原理計算により調べられ、tBLGを構成するグラフェンの原子構造がモアレを反映した凹凸を示すことが示された [PRB90,155451(2014)]。また tBLGの電子構造も計算により調べられ、電子のフェルミ速度がねじれ角 $\rightarrow 0^\circ$ の時に急減速することが示された。これは、グラフェンの層間にはファンデルワールス的な弱い相互作用しか存在しないという常識を覆す驚くべき結果であり、モアレが単なる欠陥ではなく、原子膜積層系の性質を自在にコントロールして有益な物性を引き出す強力な手段であることを意味している。

このような新現象は、グラフェン以外の原子膜や、異種の原子膜同士を積層した場合にも現れるのか？また tBLGで発見された特異な電子状態は、原子配置のモアレと電子波が相互作用した結果と見なせるが、例えばフォノンなど他の波やスピンは、モアレとどのような相互作用をするのか？これらの問いに答えることは、磁性・熱伝導性・電気伝導性など系の諸物性を、モアレを積極的に利用して制御する応用技術にも通じる、重要な課題である。

2. 研究の目的

原子レベルの薄膜物質たちを積層した時、格子定数の差異や積層方位のねじれに伴ってモアレ模様が生じる。本研究では、このようなモアレがもたらす普遍的な物理と物質科学を調べ、以って、将来的にはモアレを利用した物性制御へと発展させて行くことを目的とする。



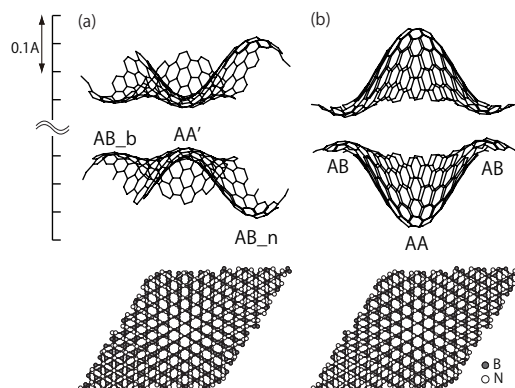
3. 研究の方法

第一原理計算を含む理論計算とシミュレーションを用いる。

4. 研究成果

- (1) h-BN (ヘキサゴナル・ボロンナイトライド) シート 2 枚を積層して互いに逆方向へとねじった系について調べた。系の原子構造とエネルギーが、ねじれ角の関数としてどのように振る舞うのかを明らかにした。

第一原理計算を行って調べた結果、h-BN シート 2 枚の系においてもモアレと対応するコラゲーションが生じることが発見された。グラフェンシート 2 枚の系では、コラゲーションの現れ方がねじれ角の関数として 60 度の周期を持つのに対して、h-BN シート 2 枚の系では、120 度の周期であることが分かった。このような周期の違



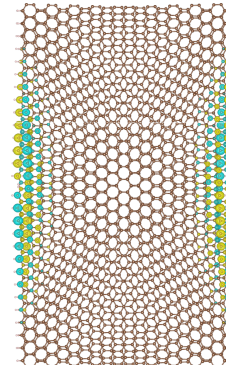
いは、h-BN はホウ素 (B) と窒素 (N) 2 元素からなる物質であることに対応して「AA 積層に 2 パターン、AB 積層に 3 パターン」存在しているが、炭素 (C) 1 元素からなるグラフェンにおいては「AA 積層に 1 パターン、AB 積層に 1 パターン」しか存在しないという事実に基づいて理解することが可能であることを、明らかにした。

この研究により、モアレのもたらす物性を理解する上で、原子膜に含まれている元素の個数も重要であるという知見が得られた。

- (2) グラフェンシート 2 枚を積層して互いに逆方向へとねじった系から、2 層グラフェンリボンを切り出した系について調べた。リボンの端に現れる磁性が、リボンのモアレパターンとどのように関係しているのかを明らかにした。

1 層のグラフェン・ナノリボンにおいてはリボン端の中で zigzag 型である部分に局在電子状態が現れ、その局在電子状態がスピン分極する(磁性を発現する)事が知られている。2 枚のグラフェン・ナノリボンを積層した場合、リボン間のねじれ積層はモアレ模様を生み出し、場所によってリボン同士の積層構造が異なる。スピン自由度を考慮した第一原理計算を行って調べた結果、2 層リボンの zigzag 端に、1 層リボンの zigzag 端と同様に局在状態が現れたが、局所的には AA 積層していると思わせる zigzag 端ではその磁性が抑制され、局所的には AB 積層していると思わせる zigzag 端でのみ磁性が発現するという結論を得た。

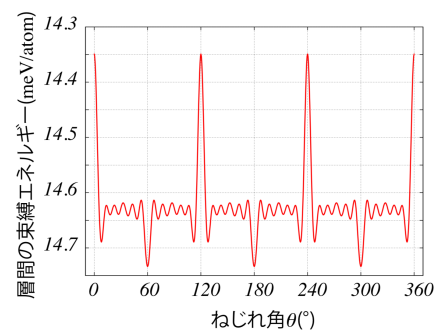
この研究により、原子膜物質同士の積層系におけるモアレと磁性の相関に関して、第一原理計算の水準で 1 つの知見が得られた。



- (3) グラフェン円盤 2 枚を積層して互いに逆方向へとねじった系のエネルギーについて調べた。局所 AA 積層構造と局所 AB 積層構造の面積比が、系のエネルギーとどのように関係しているのかを明らかにした。

経験ポテンシャルを用いたエネルギー計算を行って調べた結果、グラフェン円盤 2 枚からなる系のエネルギーは、ねじれ角の関数として特徴的な振動を示すという結果が得られた。このような振動は、(無限に広がった) グラフェンシート 2 枚からなる系においては見られなかったものである。計算結果の解析により、このようなエネルギー振動の周期が、モアレの周期と円盤サイズの共鳴条件から理解可能であることを明らかにした。またこの解析により、系に端が有る限りは、系のサイズが無限大であってもこのようなエネルギー振動が存在することが示された。

この研究により、ファンデルワールス結合する原子膜物質における界面のエネルギーが、モアレとどのように関係するのかを理解する知見が得られた。



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 作田真央、内田和之
2. 発表標題 グラフェン積層系のエネルギーにおける魔法角の研究
3. 学会等名 日本物理学会、第72回年次大会（2017年）
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	神谷 克政 (KAMIYA Katsumasa) (60436243)	神奈川工科大学・公私立大学の部局等・准教授 (32714)	
研究分担者	岩田 潤一 (IWATA Jun-Ichi) (70400695)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・講師 (12601)	削除：平成30年3月28日