

Twisted Bilayer Graphene の RSDFT コードを用いた大規模電子状態計算 A Large-scale DFT Calculation for Twisted Bilayer Graphene with using RSDFT code

内田和之、古家真之介、岩田潤一、押山淳

K. Uchida, S. Furuya, J.-I. Iwata, and A. Oshiyama

東京大学工学系研究科物理工学専攻

Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-8656

2枚のグラフェンを積層し、面内で両者を角度 θ だけねじった系を、twisted bilayer graphene と呼ぶ。ねじれ角度 $\theta = 0$ 度の場合が AA stacking、 $\theta = 60$ 度の場合が AB stacking である。ねじれ角度が $\theta \neq 0$ 度、60度の場合を狭義の twisted bilayer graphene と呼び、この時、原子構造にはモアレ縞と呼ばれるパターンが現われる。twisted bilayer graphene の原子構造は、ある離散的な角度 θ に対してのみ周期的である。single-layer graphene の場合と同様に(狭義の) twisted bilayer graphene のバンド構造には、フェルミレベル近傍に Dirac cone が現われることが知られている。

最近 Luican らの STM/STS 実験[1]により、ねじれ角度 θ の関数として twisted bilayer graphene 中のフェルミ速度が測定された。Luican らの報告によれば、 $\theta \sim 30$ 度の領域ではフェルミ速度は single-layer graphene と同程度であるが、 $\theta < \sim 10$ 度の領域ではフェルミ速度が single-layer graphene に比べて顕著に小さくなり、特にねじれ角度 $\theta < \sim 2$ 度の領域ではほとんどゼロに近くなる。これらの結果は、2層グラフェンを流れる電流を層間のねじれ角度 θ を変化させることによって、制御することができるという事を意味しており、グラフェン系デバイスの新しい発展の方向性を切り開くものとして極めて興味深い。

本発表では、ねじれ角度 $\theta = 1.89$ 度、75 Å程度の超周期原子構造を持つ twisted bilayer graphene の電子構造を DFT-LDA 計算で調べ、フェルミ速度の減速を定量的に評価する。また、フェルミレベル近傍の波動関数の空間分布を調べ、2層のグラフェンが局所的には AA stacking な領域に波動関数が局在することを示す。さらに、原子構造に現われたモアレ縞と電子構造の相関についても議論を行う。

計算の対象としたねじれ角度 $\theta = 1.89$ 度の twisted bilayer graphene は、ユニットセルあたり 3600 個以上の炭素原子を含む超大規模系であるが、我々がこれまでに開発して来た実空間密度汎関数プログラム RSDFT[2]と、今回の計算の為に実装したウルトラソフト型の擬ポテンシャル法を用いることにより、比較的容易に計算遂行できることを付記したい。

[1] A. Luican et al., PRL 106, 126802 (2011).

[2] J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, and K. Yabana, J. Comp. Phys. 229, 2339 (2010).