

令和3(2021)年度学術変革領域研究(A)

2.5次元物質科学：  
社会変革に向けた物質科学のパラダイムシフトハイライト研究座談会 1  
モアレ超格子の最前線へ

## A01班

物質創製班

## 加藤 幸一郎

九州大学

## A02班

集積化班

## 町田 友樹

東京大学

## A03班

分析班

## 末永 和知

大阪大学

## A04班

物性開拓班

## 越野 幹人

大阪大学

本領域では分野の垣根を超えた取り組みが活況を呈しています。そこで複数グループが参加し研究が進んでいるハイライト研究の座談会を行いました。今回はモアレをテーマに4名の先生方にご参加いただきました。

## 先生方のご専門分野を教えてください。

**町田** グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイド等の二次元層状物質を自由に積層し、それにより生じる特徴的で興味深い物性について調べています。モアレに関しては3つの研究が進行中です。1つ目は、我々がツイスト2層グラフェン(TBG)を作り、モアレができる様子を末永GとLin GにTEM観察してもらっています。2つ目は2層の $WTe_2$ における1次元モアレについてです。モアレ試料を作製し、高村GがTEM観察を、越野Gが理論を考え、さらに加藤Gがバンド計算と構造最適化をしてくれています。3つ目は、グラフェン2層と窒化ホウ素の計3層を重ねた2つのダブルモアレの系についてです。試料の実空間観測でみえたモアレ構造と越野Gの理論計算がピッタリ合うことが分かり、それについても進めています。

**末永** 高性能電子顕微鏡の開発、発展、最先端試料の観察を行っています。モアレの共同研究は、1つ目は特別な電子顕微鏡を使い、フリースタンディングという方法で試料を真空中に浮かせて透過して重ね、構造を観察しています。2つ目は町田さんが挙げてくださった研究で、モアレ構造の実空間直接観測や、フリースタンディングでの吸収スペクトルの計測です。1層の試料を重ねて、モアレを変えながら吸収スペクトルの光学特性変化を実空間

ZOOM座談会の様子  
(左上から時計回りに、加藤、町田、末永、越野)

で見えています。3つ目は、2層のモアレの間にインターカレーションし、光学特性がどのように変化するかを見るというものを進めています。

**加藤** 第一原理計算が専門で、モアレに関しては発見された材料について構造緩和や電子状態を計算しています。数値計算から特定の構造における電子状態を示し、その結果をもとに皆さんと議論しながら進めているところです。さらにマテリアルズインフォマティクスも専門としているので、越野さんや町田さんと一緒にデータ科学も取り入れた材料探索にも取り組んでいます。

**越野** 二次元層状物質やトポロジカル物質の量子物性の理論について研究しています。モアレに関しては町田さんが挙げてくれた通りです。モアレの研究自体は2011年頃から細々とスタートしています。

## モアレ研究の背景を教えてください。

**越野** モアレとは何かを重ねてできる模様です。この原子層分野において初めは、層を重ねて模様ができることを気に留める人は殆どいませんでした。そのような状況で、2011年にTBGにおけるモアレバンドの概念を導入したモデルが発表されました<sup>\*1</sup>。このモデルでは、特定の角度で重ねた2層グラフェンは、元のグラフェンの性質とは全然異なる性質を持つという理論的な予想がたっていました。我々はその頃から参入しましたが、研究グループが限定的で、ニッチな分野に留まっていました。

その後2018年に、単層グラフェン2枚を角度をつけてはり合わせる技術が開発され、誰も予想しなかった超伝

導を観測するというブレイクスルーがありました。グラフェンのマジックアングルと呼ばれるものです。これにより、爆発的にモアレの研究が増えていきました。その後、グラフェンとhBN、遷移金属ダイカルコゲナイドの組み合わせなど、盛んに調べられるようになりました。

2.5次元領域がスタートしたのはその頃です。グラフェンや二次元層状物質、そこで生まれるモアレについて、当時の日本は国際的に後れを取っていました。それぞれの研究者がバラバラに動いていたのです。2.5次元領域が立ち上ったことにより、各分野の専門家が知見を持ち寄り、共同研究を進められる場が整いました。

1次元モアレの共同研究は、  
どのようにスタートしたのでしょうか？

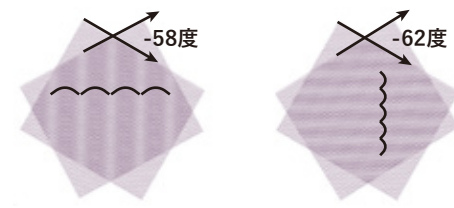
**町田**  $WTe_2$ の結晶の模式図を重ねて回すと1次元モアレが出現することは、以前から気がついていました。それを実際に試料として作製し、最終的には高村さんが所属する北陸先端科学技術大学院大学で実験したのですが、きっかけになったのは2022年に行われたサイトビジットです。高村Gは構造の分析拠点になっており、見学时に設備を拝見し、いろいろな事ができそうだという印象を持ちました。最初は1次元試料の観察が難しく、かなり苦労しました。しかし何度も挑戦するうちに、あるところではと見えたのです。一旦見えてしまえば後はやりようがあるもので、初めて1次元まで観察できたとき、これはいけると手ごたえを感じました。そして第7回領域会議で1次元モアレの報告をしたところ、越野さんが興味を持ってくれて、逆格子空間での考え方、実空間での考え方などを、とてもきれいに整理してくれました。

**越野** そうですね。モアレは普通スポット状に見えますが、ある大きい角度で重ねると縞々になるという発表を町田さんがされていて、これは面白いなと。アプローチ方法は様々ありますが、縞がある系での電子状態計算により、1次元のモアレ模様があるとどんな電子状態になるか予測が進められると考えました。そこで大きな原子数でも計算が可能な専門の加藤さんにもお声がけし、加わってもらうことになったのです。

**加藤** はじめにお話を伺った時、第一印象から「面白そう!」と思い、二つ返事でお引き受けしました。原子数が多いので大変そうでしたが、まずはやってみよう。また、私のところではデータ科学を使い、材料の組み合わせや重ね方、ひねり方の探索もしていますが、何を指標に探索するのが一番の課題になります。イメージ的には、第一原理計算でバンドギャップを求めて、そのバンドギャップが大きくなる材料を探索するという感じです。しかしモアレは計算量が膨大になりすぎるため、単純に第一原理計算を行う様な材料探索ができません。それに対して、何を指標にするのかという課題を越野さんと連携することで越えていけるのではないかと考えており、現在進めているところです。

**越野** 加藤さんに電子状態を計算してもらったところ、面白い性質がいろいろ出てきました。これをさらに様々な物質に広げていきたいですね。

**町田** 共同研究を通じて、モアレはただの模様ではなく物理的に非常に大きな意味があるだろうと、発展性があり本質的なものだとなってきました。2次元+2次元

2層 $WTe_2$ に出現する1次元モアレ超格子

で1次元になるという次元性の制御も重要です。このように様々な方向に発展する可能性を感じられます。

1次元モアレは越野さんと加藤さんを巻き込み、想像以上に広がりました。また実空間観測では専門家の末永さんや高村さんと組めたことも良かったです。末永さんは測定が難しい試料をお渡ししても美しい結果を示してくださることが多く驚いています。どれくらい先の状況を見通して用意していращやるのでしょうか？

**末永** 最先端の試料をお預かりするので、我々も何が起るかわからず進めています。ただ何かが起きたときに、きちっと測定できるだけの技術だけを持っておこうと、準備だけはしっかりしようという思いです。様々な試料を見ていると、測ってみて初めてびっくりすることも結構あります。これからまだ驚くようなことが続くのではないかと感じており、今後も楽しみな状況です。

## 今後について、お聞かせください。

**越野** 白い構造があるところには絶対にそれを反映した面白い物性があるはず。我々は理論を専門としているので、物理につなげていくために、様々な計算を駆使して予言していかなければと思います。

**加藤** 私のところでは、すごいことが起きそうな組み合わせを提案し、実際に作っていただき、それを測定するという具合に、相互に連携しながら循環していくことを目指したいです。

**町田** 今後も、より精度高く、欲しい特性が実現できるような原子層の組み合わせ、枚数、角度を見つけていきたいですね。それに向けて、連続量であるツイスト角度を連続可変できる技術を立ち上げているところです。

我々はこれまで誰も作製していないものを作っていて、それらは作ってみたいと何が起るかわかりません。出てきたものに対して、垣根なく議論し協力し合える場があることで、今回のようなスピード感で研究を深めていくことができます。そのため今回の成果における2.5次元領域の役割は大きいと思っています。

**末永** 我々は実験屋なのですが、理論の方々であればもっと近づきたいと思いました。モアレではユニットセルが大きく複雑なため、とすれば実験と理論の距離が遠くなるような気がします。励起状態を考えるような計算ともう少し近づけたらいいですね。もう一つはグループを越えて若い研究者とともに成果を出していく様子がみられたので、ここで生まれたネットワークが今後も生きていくのではないかと感じています。

<sup>\*1</sup> : Bistritzer, R.; MacDonald, A. H. Moire Bands in Twisted Double-Layer Graphene. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2011, 108, 12233–12237

(活動班順 敬称略)

ライター：柏田 百代 (広報担当)

領域ホームページ <https://25d-materials.jp>

(ニュースレター公開日：2025年9月27日)