

※本件に係る**報道解禁**

日本時間 12月10日(水) 午後10時
(新聞は12月11日(木) 朝刊 から)

なお、解禁時間につきましては *Nano Letters* 誌からの指定となっております。

令和7年12月10日

各報道機関文教担当記者 様

ナノ構造のバンド構造可視化に成功 —不完全な周期構造をもつ材料や「曲がった系」に 電子バンドの概念を拡張—

金沢大学ナノマテリアル研究所の山口直也助教、石井史之教授、台湾・淡江大学の李啟正准教授、東京大学の尾崎泰助教授らの国際共同研究グループは、**有限サイズの巨大分子モデルに対する第一原理計算から非周期的なナノ材料 (※1) の電子状態 (※2) をバンド (※3) 構造として可視化する新しい計算手法を開発しました。**

ナノ材料は、特異な電子状態を持ち、新機能創出が期待される材料群として世界的に注目されています。ナノ材料の電子状態解析技術の発展により実験的観察は進んだ一方で、従来の第一原理計算 (※4) では、並進対称性 (※5) を欠くナノ構造に対しては解析が難しい場合が多く、理論的解析基盤が十分に整備されていませんでした。本研究では、従来のバンドアンフォールディング (※6) 法を拡張することで有限ナノ構造を扱える形式に再定式化し、計算プログラムとして実現しました。一連の計算手続きを「巨大分子バンドアンフォールディング法 (GMBU 法)」として位置づけ、グラフェン、遷移金属ダイカルコゲナイド (二硫化タングステン (WS_2))、ビスマス/銀表面合金のナノフレークに適用しました。その結果、数ナノメートルスケールの有限モデルでも明瞭な電子バンド構造の可視化に成功しました。さらに湾曲構造にも適用可能であることを確認し、ナノ材料の電子構造解析における汎用的解析基盤としての有用性を示しました。**GMBU 法は並進対称性が完全には成り立たない場合や、材料中に空間的な不均一性・ゆらぎが存在する場合でも、材料が局所的な周期性を有していれば大規模第一原理計算と統合することで、バンド理論の観点から電子構造を解析できる柔軟な計算手法であり、今後の広範な展開が期待されます。**本研究の成果は、**高分解能化が進むナノ ARPES による実験観測と理論解析の連携を促し、次世代のエレクトロニクスやスピントロニクス材料の設計の高度化に寄与することが期待されます。**

本研究成果は、2025年12月10日午前8時(米国東部標準時)に米国科学誌『*Nano Letters*』のオンライン版に掲載される予定です。また、本誌の表紙 (Supplementary Cover) に採用されています。

【研究の背景】

ナノ材料は、従来のバルク材料（※7）とは異なる電子状態や物性を示し、近年、エレクトロニクスや量子デバイス、エネルギー材料の開発において中心的な役割を担いつつあります。特に、原子層程度の厚みを持つ2次元材料は、異種材料との積層や、湾曲といった特徴的なナノ構造を形成することで、特有の電子状態を示し、新たな物性や機能の創出が期待されています。

一般的な材料の電子状態の理解には、固体中の電子の運動量とエネルギーの関係である「バンド構造」の解析が不可欠です。これは、一般的な結晶性固体に適用される基本概念ですが、ナノ材料では、サイズ効果や局所構造の不均一性により、従来の周期性とは異なる特徴を示します。ナノ構造内に局所的な周期性がある場合でも、並進対称性が完全に成り立たないと、従来の第一原理計算手法ではバンド構造の可視化が困難でした。特に、ナノフレークや、湾曲構造を持つナノ集合体では、電子状態の理論的な記述に工夫が求められてきました。

近年、微細構造を持つ電子材料の設計が進み、ナノ材料のバンド構造解析の重要性が一層高まっています。角度分解光電子分光法（ARPES）は、バンド構造を直接観測する手法として広く用いられていますが、ナノメートルの空間分解能を有するナノ ARPES の発展により、微小領域での局所的な電子構造観察が可能になりつつあります。一方で、このような実験的進展に対して、有限サイズで非周期的なナノ材料のバンド構造を体系的に解析する理論的枠組みは、十分に整備されておらず、さらなる発展が求められていました。

【研究成果の概要】

本研究では、従来の周期系における電子構造解析手法を有限非周期系にも拡張するための新たな理論的手続きとして、「巨大分子バンドアンフォールディング（Giant Molecule Band Unfolding : GMBU）法」を構築しました。GMBU法は、有限サイズのナノ集合体を「巨大分子」の計算モデルとみなすことで、有限非周期系においても電子バンド構造の再構成を可能にする手法です（図1）。第一原理計算などで「巨大分子」の計算を行い、得られた電子状態に対して、GMBU法を適用します。これにより、局所的な並進対称性を持たないナノ材料でも電子バンド構造の可視化が実現可能となります。

GMBU法を検証するために、グラフェン、遷移金属ダイカルコゲナイドである二硫化タングステン（ WS_2 ）、およびビスマス／銀表面合金といった2次元材料のナノフレークに対し、第一原理計算で電子状態を計算して GMBU法を適用しました。その結果、グラフェン（図2）では、ディラックコーン、 WS_2 （図3）ではスピン・バレー結合、ビスマス／銀表面合金ではラシュバスピンスピン分裂といった特徴的な電子バンド構造の再現に成功しました。これらはすべて、ナノメートルスケールの大きさのフレークモデルにおいて得られたものであり、数ナノメートル程度の極小サイズのナノ構造においても、十分に明瞭なバンド構造が可視化されたことを示しています。

さらに、湾曲させたグラフェンフレークにも本手法を適用し、局所的な並進対称性が完全に失われた状況でも、電子構造のバンド構造としての記述が有効であることを確認

しました (図 1)。このような湾曲した構造は、従来のバンドアンフォールディング手法では明瞭な可視化や実際の適用が難しい場合があり、GMBU 法の有効性を実証する一例となりました。このように、GMBU 法は柔軟なナノ構造や不完全な周期構造を持つ材料に対しても有用であることが示されました。

本手法は 2 次元材料に限らず、有限 1 次元系 (ナノワイヤなど) や有限 3 次元系 (ナノ粒子など) にも適用可能であり、従来のバンドアンフォールディング手法と接続性を持ちながら、周期系から非周期系までの電子構造を一貫して解析できる理論的枠組みを提供します。

【今後の展開】

本研究で構築した GMBU 法は、対象を周期系に限定せず、ナノスケール材料から一般的な材料系まで広く適用可能な柔軟な電子構造解析手法として位置付けられます。今後は、大規模第一原理計算との統合により、完全な周期構造を仮定する従来の計算手法では扱うことが難しかった、局所構造の多様性や原子配列の空間的ゆらぎを含む複雑な材料系にも適用範囲を拡張し、電子バンド構造の普遍的な記述を確立していくことが期待されます。さらに、実験技術の進展により、ナノ ARPES の空間分解能が 100 ナノメートルオーダーに達しつつある中で、本手法はその理論的補完として、観測データ解釈や電子構造の空間分布の理解に寄与します。今後は時間依存第一原理計算や、機械学習的手法との連携を通じて、空間的、時間的ゆらぎを含む多様な非周期材料系を統一的に解析できる基盤的手法として発展することが期待されます。

本研究は、日本学術振興会科研費 (若手研究 (JP20K15115)、学術領域変革研究 (A) (JP22H05452、JP25H01525)、基盤研究 (B) (JP23K23157、JP23K25826、JP24K02950)、基盤研究 (C) (JP22K04862)、挑戦的研究 (萌芽) (JP25K22797))、JST 戦略的国際共同研究プログラム (JPMJSC21E3)、地域中核・特色ある研究大学強化促進事業 (J-PEAKS)、台湾国家科学技術委員会 (NSTC 114-2112-M-032-014)、金沢大学先魁プロジェクトの支援を受けて実施されました。

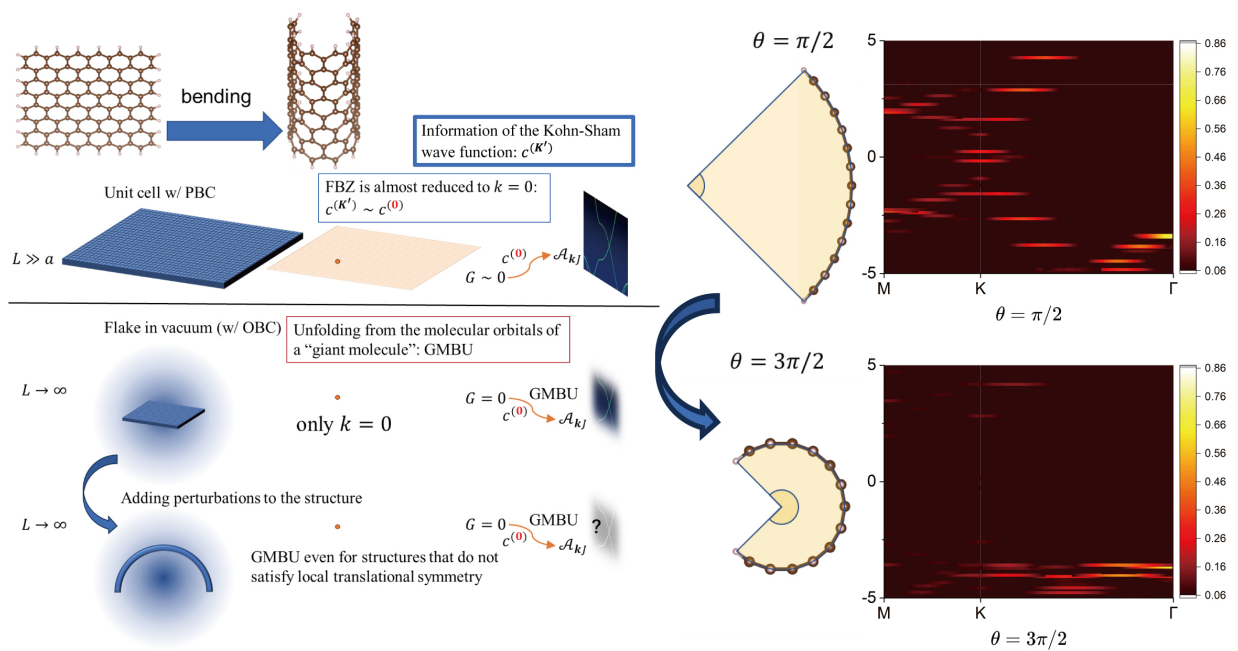


図 1 : 巨大分子バンドアンフォールディング (GMBU) 法 (図左側) とその応用 (図右側)。

左図は、巨大分子の分子軌道からバンド構造を抽出する手続きについて、従来のバンドアンフォールディングとの比較しながら説明がされている。右図は、グラフェンナノフレークを湾曲させた場合の適用例となる。湾曲が急になると、ディラックコーン様のバンド構造が消失する。N. Yamaguchi et al.による論文“Band Unfolding in Finite Nanostructures: Visualizing Dirac, Spin-Valley, and Rashba Features”に掲載された図を転載。著作権は American Chemical Society に帰属します。本図は、CC BY 4.0 ライセンス (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>) に基づいて利用しています。

出典元 DOI : 10.1021/acs.nanolett.5c04721

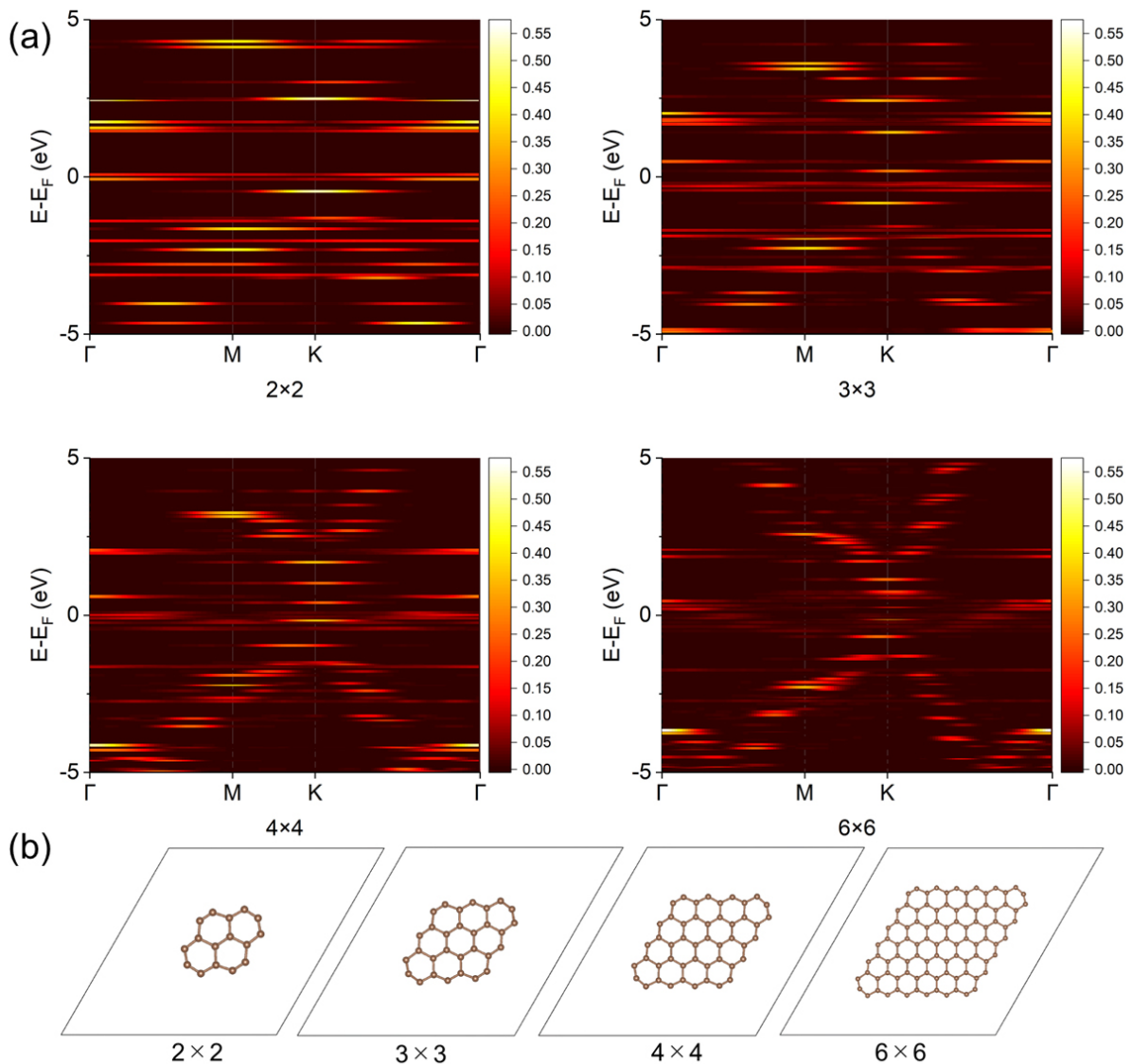


図 2 : グラフェンナノフレークへの巨大分子バンドアンフォールディング (GMBU) 法の応用。

グラフェンナノフレークのサイズが大きくなるほど、バンド構造が明瞭になる。

(a) 2×2、3×3、4×4、6×6 のサイズの環からなるグラフェンナノフレークモデルから抽出されたバンド構造。ヒートマップの色はスペクトルの重みを表す。(b) 2×2、3×3、4×4、6×6 のサイズの環からなるグラフェンナノフレークモデルのナノ構造。N. Yamaguchi et al. による論文“Band Unfolding in Finite Nanostructures: Visualizing Dirac, Spin-Valley, and Rashba Features”に掲載された図を転載。著作権は American Chemical Society に帰属します。本図は、CC BY 4.0 ライセンス (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>) に基づいて利用しています。

出典元 DOI : 10.1021/acs.nanolett.5c04721

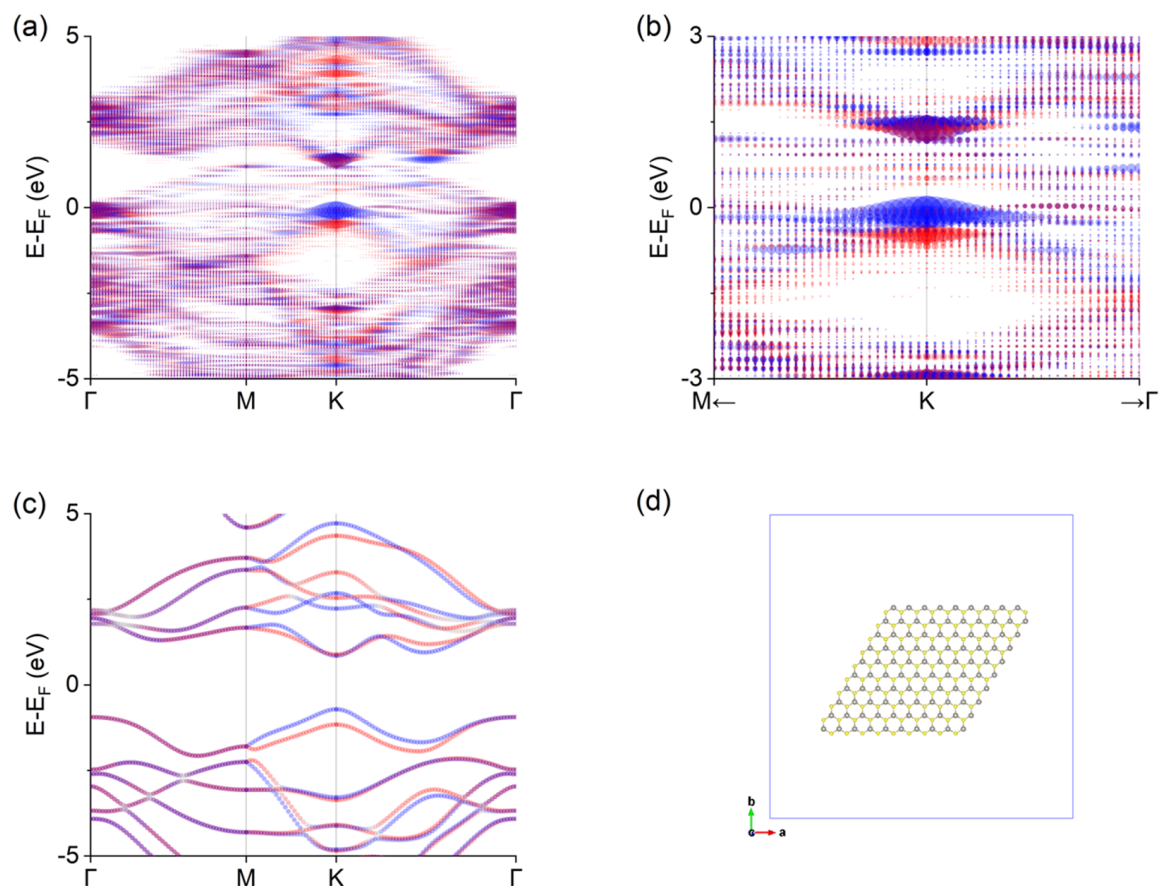


図 3 : 二硫化タングステン (WS_2) ナノフレークへの巨大分子バンドアンフォールディング (GMBU) 法の応用。

(a) 9×9 のサイズの環からなる WS_2 フレークモデルから抽出されたスピン分解バンド構造。青と赤の円は正規化スピン z 偏極スペクトル重みの負符号と正符号をそれぞれ表し、各円の半径はスペクトル重みの絶対値の大きさを反映する。(b) (a) の K 点近傍の拡大図。(c) (a) との比較のための WS_2 シートのスピン分解されたバンド構造。フェルミ準位はエネルギー軸の原点に設定されている。(d) 9×9 のサイズの環からなる WS_2 ナノフレークモデルの俯瞰図。灰色の球と黄色の球はそれぞれタングステン原子と硫黄原子を表し、棒は原子間の結合を示す。青い正方形は単位格子を表す。N. Yamaguchi et al. による論文 “Band Unfolding in Finite Nanostructures: Visualizing Dirac, Spin-Valley, and Rashba Features” に掲載された図を転載。著作権は American Chemical Society に帰属します。本図は、CC BY 4.0 ライセンス (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>) に基づいて利用しています。

出典元 DOI : 10.1021/acs.nanolett.5c04721

【掲載論文】

雑誌名 : *Nano Letters*

論文名 : Band Unfolding in Finite Nanostructures: Visualizing Dirac, Spin-Valley, and Rashba Features

(有限ナノ構造におけるバンドアンフォールディング : ディラック、スピン・バレー、およびラッシュバ特性の可視化)

著者名 : Naoya Yamaguchi, Sefty Yunitasari, Wardah Amalia, Chi-Cheng Lee, Taisuke Ozaki, Fumiyuki Ishii

(山口直也、ユニタサリ・セフティ、アマリア・ワルダ、李啟正、尾崎泰助、石井史之)

掲載日時 : 2025 年 12 月 10 日 午前 8 時 (米国東部標準時) にオンライン版に掲載

DOI : 10.1021/acs.nanolett.5c04721

【用語解説】

※1 ナノ材料

ナノスケールで特徴的な構造 (ナノ構造) を有する材料。微細加工技術によって人工的に作製されることが多い。ナノ材料を制御するためには、試料作製技術だけでなく、測定技術の開発も重要になる。

※2 電子状態

物質中の電子の振る舞い。材料物性の多くは電子状態によって決定される。

※3 バンド

固体において電子軌道のエネルギーの分布が帯 (バンド) 状になるが、その帯状の分布それぞれのこと。

※4 第一原理計算

実験観測によらずに量子力学の基礎方程式に基づいて電子状態を計算する計算科学手法。コンピューターを利用した第一原理計算によりバンド構造が得られる。

※5 並進対称性

ある長さだけ系を平行移動させると、その前後で系が不変である性質。理想的な固体結晶では並進対称性が満たされ、同じ結晶格子が繰り返し隣接しながら現れる。

※6 バンドアンフォールディング

拡大周期の計算モデルのバンド構造の折り畳みを解除する手法。元の周期を有する計算モデルでのバンド構造や ARPES の計測結果とのより直観的な比較が可能になる。

※7 バルク材料

表面や界面の部分が近くに無い領域のことをバルクと呼び、物質のバルクの領域が発現する物性が主である材料。例えば永久磁石の材料としてのフェライトなど。

【本件に関するお問い合わせ先】

■研究内容に関すること

金沢大学ナノマテリアル研究所 助教

山口 直也 (やまぐち なおや)

TEL : 076-264-5492

E-mail : n-yamaguchi@cphys.s.kanazawa-u.ac.jp

金沢大学ナノマテリアル研究所 教授

石井 史之 (いしい ふみゆき)

TEL : 076-264-6075

E-mail : ishii@cphys.s.kanazawa-u.ac.jp

■広報担当

金沢大学理工系事務部総務課総務係

多賀 曜子 (たが ようこ)

TEL : 076-234-6826

E-mail : s-somu@adm.kanazawa-u.ac.jp