

ディラック模型からはじめる多バンド電子物性理論

磯部, 大樹
理化学研究所創発物性科学研究センター

<https://hdl.handle.net/2324/7361954>

出版情報 : Condensed Matter Physics Summer School Lecture Notes. 第69回, pp.257-266, 2025.
Condensed Matter Physics Summer School Committee
バージョン :
権利関係 : © 2025 Hiroki Isobe

ディラック模型からはじめる多バンド電子物性理論

磯部 大樹

理化学研究所 創発物性科学研究センター

2024 年 4 月 26 日

ディラック方程式は、量子力学の基本方程式であるシュレーディンガー方程式の相対論的拡張として得られる。その帰結として、線形のエネルギー分散関係や電子のスピン、非自明な多バンド構造が自然に現れる。グラフェンをはじめ物性物理においても有効的にディラック模型が現れる物質が数多く存在する。この集中ゼミでは、最も単純な模型のひとつであるディラック模型から生じる多彩な物性現象に関する最近の研究を紹介し、今後の研究の端緒とすることを目指す。

1. はじめに

物性物理学、特に量子物性物理学を学びはじめると、一般論と各論との間に飛躍があると感じることがあるかと思う。学部や大学院で学んだ事柄と、最新の論文との間に飛びを感じることもあるだろう。講義では一般的な概念や重要な現象を中心に学ぶことになる。これら基礎的な事項は、具体例を通じて理解するのが分かりやすいと思うが、それらを取り上げるとあまりに個別の例が多いため、煩雑になると同時に時間もいくらあっても足らなくなってしまう。ブロッホの定理を例に挙げると、結晶中の電子の波動関数 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ と表すことができ、結晶の周期よりも長周期の平面波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ と格子の周期性を持つ関数 $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ の積で表すことができる、と教わる。定理が成立することが一般的な証明や群の表現の観点から理解できても、どのような意義があるのかは自明ではない。基本的な概念をしっかりと確立することは、最近の研究のエッセンスを直観的に捉える上でも重要であると考えている。

この集中ゼミでは2次元ディラック電子系に関連する最近の研究を紹介する。積極的に研究が行われている分野のひとつであるが、ここではモアレ2層グラフェンにおける相関効果、非線形応答、非エルミート効果に着目する。その準備として、ディラック模型を導いた上で数式とその意味を感覚的・視覚的に捉えるところから始める。その上に立つと最近の研究を直観的に理解できると同時に、基礎事項から地続きのものとして感じるができると思う。集中ゼミのテーマは最近の研究の紹介だが、教科書や講義と研究の間のギャップを埋める上で必要となる感覚を養うことを目標とする。前半のディラック方程式の導出とグラフェンにおけるディラック電子の発現、およびトポロジーの基礎については、数式を利用しつつその物理的意味を直感的に理解することを目指す。その上で、後半は最近の話題を取り上げ、前半の部分で習得した物理的な描像を利用して最近の研究を直感的に主に図を用いて説明する。詳細については引用した論文中の数式を用いた議論を参照してほしいが、論文のエッセンスは図を用いて直観的に説明できる。物性理論に関して論文における議論は数式を用いて記述されるものの、その元となるアイデアはシンプルである。それを解説し自分なりの描像を描くことで、新たな研究に発展させてほしい。

2. 相対論的ディラック方程式 ローレンツ不変なスピン 1/2 の粒子の基本方程式

はじめにディラック方程式をローレンツ変換から導く [1]. ディラック方程式は相対論的な方程式である. 物性物理においては式の形はよく知られているが, どうして (特殊) 相対論に従うのかはあまり知られていないと思う. 電子物性物理を議論する上で必ずしも必要ではないが, 物性理論がしっかりとした基礎の上に成り立っていることと, 物理と数式を対応づけることの 2 点を示すのに良い例であると思うので簡単に触れることにする.

特殊相対論では物理法則はローレンツ変換に対して不変であるといわれる. ローレンツ変換は 3 次元空間においては 4 元ベクトル $x^\mu = (ct, x, y, z)$ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) の「長さ」 $g^{\mu\nu}x_\mu x_\nu = (ct)^2 - x^2 - y^2 - z^2$ を変えない変換 $\Lambda_\nu^\mu: x^\mu \mapsto x'^\mu = \Lambda_\nu^\mu x^\nu$ である. 計量テンソル $g^{\mu\nu} = \text{diag}(+1, -1, -1, -1)$ に対しては, $\Lambda_\mu^\lambda g_{\lambda\rho} \Lambda_\nu^\rho = g_{\mu\nu}$ のように作用する. また微小なローレンツ変換に対応する演算子 $J^{\mu\nu}$ *1 に対しては, ローレンツ代数 $[J^{\mu\nu}, J^{\rho\sigma}] = i(g^{\nu\rho}J^{\mu\sigma} - g^{\mu\rho}J^{\nu\sigma} - g^{\nu\sigma}J^{\mu\rho} + g^{\mu\sigma}J^{\nu\rho})$ が成り立つ. この交換関係を満たす行列表現 (リー代数) として $(\mathcal{J}^{\mu\nu})_{\alpha\beta} = i(\delta_\alpha^\mu\delta_\beta^\nu - \delta_\beta^\mu\delta_\alpha^\nu)$ がある. 対応するリー群 $\Lambda_\beta^\alpha = [\exp(-\frac{i}{2}\omega_{\mu\nu}(\mathcal{J}^{\mu\nu}))]_\beta^\alpha$ は, 任意の 4 元ベクトル V^α のローレンツ変換を記述する.*2

量子力学ではスピン 1/2 の粒子の記述にパウリ行列 σ^i が用いられるが, 2×2 行列ではローレンツ代数を満たすことができない. そこで行列を大きくして 4×4 行列を考える. 反交換関係 $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \times \mathbf{1}_{4 \times 4}$ (ディラック代数; $\mathbf{1}_{4 \times 4}$ は単位行列) を満たすガンマ行列 γ^μ を導入すると, $S^{\mu\nu} = \frac{i}{4}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ はローレンツ代数に従い, $\Lambda_{\frac{1}{2}} = \exp(-\frac{i}{2}\omega_{\mu\nu}S^{\mu\nu})$ がスピン 1/2 粒子のローレンツ変換を定める. ガンマ行列はローレンツ変換の下で $\Lambda_{\frac{1}{2}}^{-1}\gamma^\mu\Lambda_{\frac{1}{2}} = \Lambda_\nu^\mu\gamma^\nu$ と, ベクトルのように変換する. そこで同じくベクトルのように変換する微分演算子 (4 元運動量) $i\partial_\mu$ と組み合わせた方程式

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) = 0 \quad (1)$$

はローレンツ変換に対して不変な方程式となる. これがディラック方程式である.*3 波動関数にあたるスピノル $\psi(x)$ は 4 成分となり, 通常のスピン 1/2 粒子の 2 成分のスピノルと比べて 2 倍の成分を持つことになる. 相対論的量子力学ではこれは負のエネルギーを持つ正孔と解釈されるが, 物性物理学ではこれは多バンド構造に対応する.

*1 $J^{\mu\nu} = i(x^\mu\partial^\nu - x^\nu\partial^\mu)$ はブーストと回転に対応する演算子である. 添え字について反対称であり, $\mu \neq \nu$ のときのみ有限である. μ および ν が空間成分 (1, 2, 3) のときは角運動量の演算子となり, 空間回転に対応することが分かる.

*2 $\omega_{\mu\nu}$ は反対称行列であり, 変換の大きさ (ブーストの速度および空間回転の角度) を記述する.

*3 ガンマ行列は例えば $\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}$ (ワイル表現) と決めることができる. このときディラック方程式は $\begin{pmatrix} -m & i(\partial_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \\ i(\partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla}) & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix} = 0$ と表される. $\psi = \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix}$ はワイルスピノルと呼ばれる. これは 3 次元空間 [時間を合わせると (3+1) 次元] のディラック方程式である.

この集中ゼミでは 2 次元物質を取り扱う．このときはディラック代数を満たすガンマ行列を 2×2 行列で定めることができる．例えば $\gamma^0 = \sigma^3$, $\gamma^1 = i\sigma^2$, $\gamma^2 = -i\sigma^1$ とすると, ディラック方程式は $(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = (i\sigma^3 \partial_0 - \sigma^2 \partial_1 + \sigma^1 \partial_2 - m)\psi = 0$ となる． $i\partial_t \psi = H\psi$ と書き直すと, ハミルトニアン H は

$$H = -ic(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + m\sigma_z \quad (2)$$

となる．ここで単位系は $\hbar = 1$ とし, 光速 c を含めて質量 m を定義し直した．

3. グラフェン 低エネルギー有効模型としてのディラック方程式

2 次元ディラックハミルトニアン (2) は, グラフェンの低エネルギー有効模型として現れることが知られている．グラフェンは炭素原子が蜂の巣構造を成すことにより構成される 2 次元物質である．この有効模型をタイトバインディング近似により導出する．

蜂の巣格子はユニットセル内に 2 個の副格子を持つ構造である．基本格子ベクトルを $\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2}(1, \sqrt{3})$, $\mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}(-1, \sqrt{3})$ と取り, ユニットセル内の炭素原子の位置をそれぞれ A: (0, 0), B: (0, a) とする (図 1)． $a \approx 0.124 \text{ nm}$ は炭素原子間の距離を表す．^{*4} 電子の低エネルギー励起はグラフェンの 2 次元面に対して垂直な p_z 軌道の π 結合によるエネルギーバンドによるものである．サイト i の炭素原子の p_z 軌道の電子に対する生成消滅演算子を $c_i^\dagger$ および c_i で表し, 最近接サイト間での電子の飛び移りにより安定化される運動エネルギーの大きさを t とすると, タイトバインディング模型は $\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j$ と書くことができる．^{*5} 和はすべての隣接するサイトに対して取るものとする．フーリエ変換を施して $c_i = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{s(i)\mathbf{k}}$ (N : サイト数, $s = \text{A, B}$: 副格子のラベル)^{*6} を考えると, ハミルトニアンは $\hat{H} = -t \sum_{\mathbf{k}} (1 + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2}) c_{\text{A}\mathbf{k}}^\dagger c_{\text{B}\mathbf{k}} + \text{H.c.}$ となる． $\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} c_{s\mathbf{k}}^\dagger H_{ss'}(\mathbf{k}) c_{s'\mathbf{k}}$ と書くとき, 行列要素 $H_{ss'}(\mathbf{k})$ は蜂の巣格子が 2 つの副格子を持つことを反映して 2×2 行列を構成する．この行列 $H(\mathbf{k})$ の固有値を求めると, ブリルアンゾーンの点 K: $\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(-1, 0)$ および点 K': $\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(1, 0)$ にゼロ固有値を持つことが分かる．これらの点の周りで行列 $H(\mathbf{k})$ を $\mathbf{k}$ について 1 次まで展開すると

$$H_\xi(\mathbf{k}) = -v(\xi k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) \quad (3a)$$

が得られる．ただし $v = \frac{3ta}{2}$ である． $\xi = \text{K, K'}$ は波数 $\mathbf{k}$ の展開の原点を区別するラベルでバレー自由度と呼ばれる．式 (2) と比較することで, グラフェンの低エネルギー有効模型としてディラック方程式が現れることが分かる．式 (3a) を対角化することでディラック点近傍の有効

^{*4} 基本格子ベクトルの長さを基本的な長さに取ることもある．

^{*5} スピンの自由度はここでは考えない．副格子の自由度がスピノルの自由度に対応する．このため擬スピンと呼ばれることもある．

^{*6} 蜂の巣格子はブラベ格子ではなく, 六方格子 (三角格子) を基本に 2 つの副格子サイトを持つことに注意する．サイトのラベル i は基本となるブラベ格子の格子点と副格子を同時に指定している．ここで $\mathbf{r}_i$ はブラベ格子の格子点の座標を示すものとする．したがってユニットセル内の副格子間のホッピングでは位相因子は 1 である．

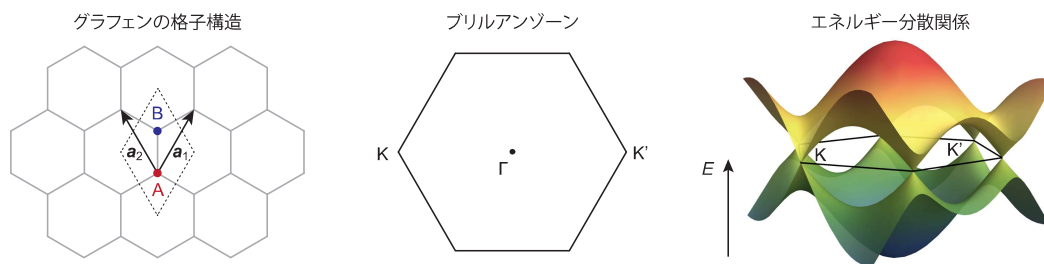


図1 グラフェンの格子構造および対応するブリルアンゾーンとタイトバインディング模型によるエネルギー分散関係.

模型についてエネルギー分散関係

$$\epsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm v k \quad (3b)$$

を得る. $\pm$ は2つのエネルギーバンドを示す. エネルギー分散関係はバレー ξ によらない.

式(2)と(3a)を比較すると, 違いがあることに気づく. まず光速 c が速度 v に置き換わっている. これは物質中の電子の速度が光速とは異なることを反映している. グラフェンでは $v \approx 10^6$ m/s と光速の $1/100$ 程度となる. また, 質量 m の項を持たない. 方程式の導出を思い出すと, $m\sigma_z$ は2つの副格子でのポテンシャルエネルギーの差に対応する. グラフェンはともに同じ炭素原子のためエネルギー差は生じないが, 例えば六方晶窒化ホウ素 (hBN) の基板の効果を考えると $m \neq 0$ となる. 六方晶の遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD) も同様の蜂の巣構造を持つが, この場合は2つの副格子サイトを異なる元素が占めるため m は有限となる.

4. トポロジー 波数空間の幾何学・実空間との対応

グラフェンが2つの副格子サイトを持つことを反映して, ハミルトニアンが 2×2 行列になることを見た. ハミルトニアンが行列構造を持ち, 対応してエネルギー固有値が複数存在し多バンド構造を持つときに生じる物理を記述する数学的手法を確かめるのが, この章の目的である.

ここでは連続体近似ではなく, 再び格子模型を考える. ハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ について, エネルギー固有値を $\epsilon_n(\mathbf{k})$, 対応する固有ベクトル (波動関数) を $|\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$ とする. ここで n はエネルギーバンドの指標であり, エネルギー固有値に縮退はないものとする. ブロッホの定理に従い, 平面波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ と格子の周期性を持つ関数 $|u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$ との積で表す. このとき, $|u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$ から計算される量

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}) = i \langle u_{n\mathbf{k}} | i \partial_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle, \quad \Omega(\mathbf{k}) = \nabla \times \mathcal{A}(\mathbf{k}) \quad (4)$$

を, それぞれベリー接続およびベリー曲率という.*⁷ ブラケット表記による内積はユニットセル

*⁷ より数学的にはブリルアンゾーンを底空間とし, その各点における波動関数をファイバーと呼ばれる微分可能多

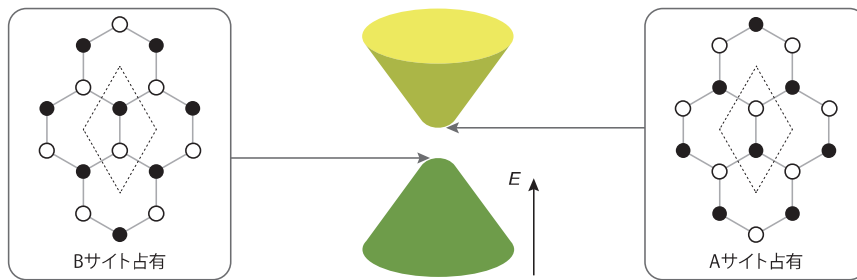


図2 ディラック模型の波動関数とトポロジーおよび分極との関連.

における積分を示す. これらは波動関数の持つ幾何学構造を示す量である.

まず, 2次元ディラック模型におけるベリー接続およびベリー曲率を計算する. エネルギー固有値の縮退および計算の発散を避けるため, 質量 m が有限の場合を考え, ハミルトニアンを

$$H_{\xi}(\mathbf{k}) = -v(\xi k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + m \sigma_z \quad (5a)$$

とし, 対応するエネルギー固有値を

$$\epsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{v^2 k^2 + m^2} \quad (5b)$$

と書くことにする (図2). このとき式 (5a) の固有ベクトルとして

$$\begin{aligned} |u_{\xi+}(\mathbf{k})\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_k(\epsilon_k + m)}} \begin{pmatrix} \epsilon_k + m \\ -\xi v(k_x + i\xi k_y) \end{pmatrix} \\ |u_{\xi-}(\mathbf{k})\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_k(\epsilon_k + m)}} \begin{pmatrix} \xi v(k_x - i\xi k_y) \\ \epsilon_k + m \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5c)$$

を得る.*⁸ ただし $\epsilon_k = \sqrt{v^2 k^2 + m^2}$ である.*⁹ これらの波動関数を用いると, ベリー接続およびベリー曲率

$$\mathcal{A}_{\xi\pm}(\mathbf{k}) = \pm \xi \frac{v}{2\epsilon_k(\epsilon_k + m)} \hat{z} \times \mathbf{k}, \quad \Omega_{\xi\pm}(\mathbf{k}) = \mp \xi \frac{mv^2}{2\epsilon_k^3} \hat{z} \quad (5d)$$

を得る.*¹⁰

様体と見たときのファイバー束に対する, ファイバー束上の接続および曲率にあたる.

*⁸ この固有関数は位置 $\mathbf{r}$ によらない. 有効模型は連続体模型となるのでユニットセル内部の構造によらないと考えてもよいし, もともとタイトバインディング模型から出発しており副格子の情報が点としてのみ含まれていると考えてもよい. いずれの場合もベクトルの成分が副格子の位置に対応する.

*⁹ m が負の時, $k \rightarrow 0$ で分母が0となり発散が生じるように見える. その場合は $vk = (\epsilon_k + m)(\epsilon_k - m)$ を用いて式を変形し, 見かけの発散を取り除いてやるとよい.

*¹⁰ ベリー接続はゲージの取り方に依存する. すなわち固有ベクトルに対して任意の位相因子 $e^{i\theta(\mathbf{k})}$ を掛けても固有ベクトルであることは変わらないが, ベリー接続は変化しうる. 一方でベリー曲率はゲージ不変である. また, これらの量を計算する際には固有ベクトルが規格化されていないといけない.

ベリー曲率 $\Omega_{\xi\pm}(\mathbf{k})$ が有限であることは、ディラックハミルトニアンが非自明な幾何学的構造を持つことを示唆する。特にディラック点 ($k = 0$) に近づくほど値が大きくなることが分かる。この波数空間における幾何学は多様な物理的意味を持つが、そのうちのひとつは実空間における波動関数の分布を調べることで明らかになる。 $k = 0$ において固有ベクトルは $|u_{\xi+}(\mathbf{0})\rangle = (1, 0)^T$, $|u_{\xi-}(\mathbf{0})\rangle = (0, 1)^T$ となる。つまりディラック点における波動関数は副格子の A サイトもしくは B サイトに集中しており、分極を生じていることが分かる (図 2)。これと関連してベリー接続から分極を計算する一般的な方法が提案されている [2]。またトポロジカル絶縁体に特徴的な端状態も、同様の実空間の描像により直観的に理解することができる。

もう一つの特徴として波束が自転すること、すなわち有限の角運動量を持つことが挙げられる。2次元系ではベリー曲率は面に垂直な z 成分しか持たないが、その成分は式 (4) より

$$\Omega_n^z(\mathbf{k}) = i \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_n | \partial_{k_x} H | u_{n'} \rangle \langle u_{n'} | \partial_{k_y} H | u_n \rangle}{(\epsilon_{n'} - \epsilon_n)^2} + \text{c.c.} \quad (6a)$$

と書かれる。一方で、座標 $\mathbf{r}_c$ を中心とする波束に対する角運動量 $\mathbf{L} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) \times \mathbf{p}$ は

$$L_n^z(\mathbf{k}) = i \frac{m}{\hbar} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_n | \partial_{k_x} H | u_{n'} \rangle \langle u_{n'} | \partial_{k_y} H | u_n \rangle}{\epsilon_{n'} - \epsilon_n} + \text{c.c.} \quad (6b)$$

となり、ベリー曲率とエネルギー分母を除き同じ表式が得られる [3]。これは有限のベリー曲率を持つエネルギーバンドから構成される波束は自転していることを示唆する。

ここまで標準的な固体物理の教科書 (例えば [4, 5]) に加えて必要な事項を説明してきた。ここから最近の研究を紹介する。これまでの基本的な事項を踏まえると、最近の研究のエッセンスのほとんどは図を用いて理解できると思う。紙面の都合上、テキストでは図と簡単な説明のみに留め、詳細は集中ゼミで時間をかけて説明する。

5. モアレ 2 層グラフェン 波数空間におけるタイトバインディング模型・密度波との類似

はじめにモアレ 2 層グラフェンにおけるほぼフラットな非常にバンド幅の狭いエネルギーバンドの形成、および相関効果による絶縁体・超伝導状態の発現 [6] の機構について紹介する。

モアレ 2 層グラフェンにおけるエネルギーバンドの再構成は図 3 に示した。グラフェン 2 層を互いに少し回転させて積層させることにより長周期のモアレ構造が生じる。実空間での長周期の構造は、波数空間では小さいブリルアンゾーンに対応する。このモアレブリルアンゾーンにおいては、低エネルギーの状態のみに興味があるため、低エネルギー有効模型において連続体近似を施すことにより得られる、ディラックコーンが点 $\bar{K}$, $\bar{K}'$ にある状況を考えればよい。モアレ構造は 2 層の結合によるものであり、実空間で長周期のポテンシャルを生じるが、波数空間では隣接する低エネルギーのディラックコーンの間に生じるホッピングと捉えられる。これは弱い周期ポテンシャルが存在するときのエネルギーバンドの構成や密度波が存在するときのバンドの折りたたみと同様の構造である [4, 5]。その結果、バンド幅がわずかに数 meV のエネルギーバンドを得る。詳細は例えば [7, 8] を参照のこと。

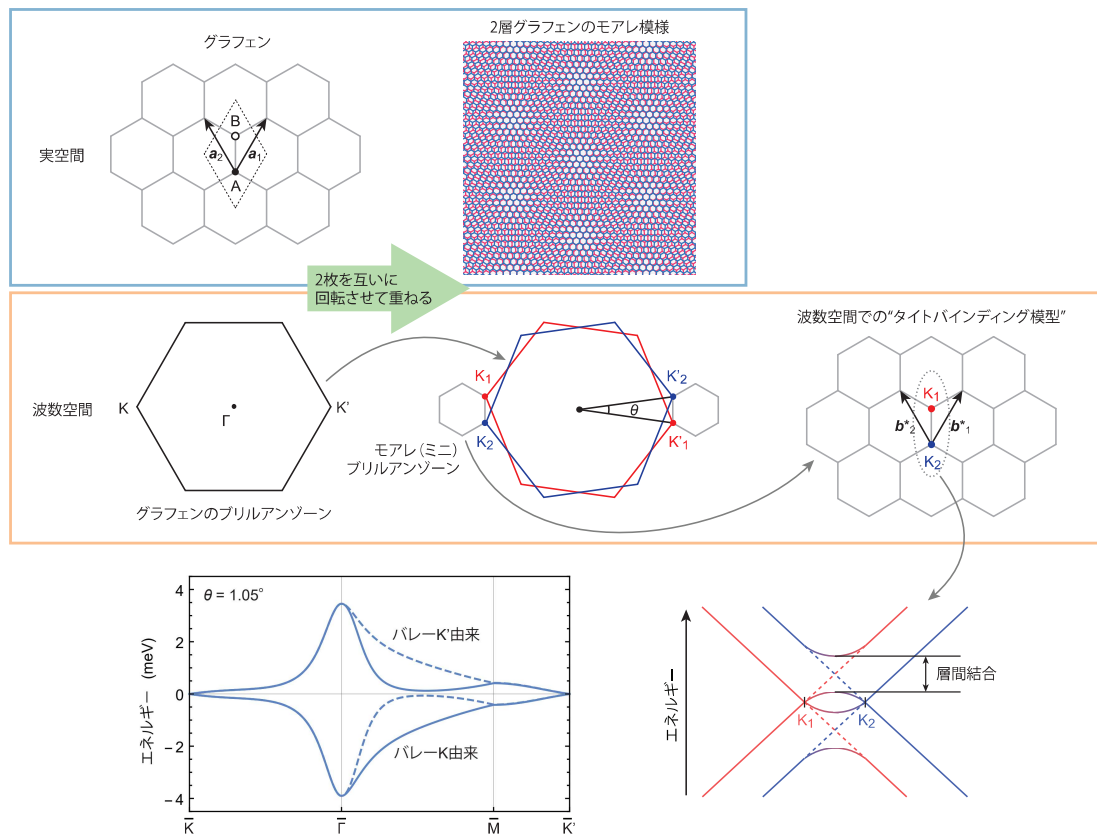


図3 モアレ2層グラフェンにおける平坦なエネルギーバンドの形成.

エネルギーバンド幅は大まかにいって電子の運動エネルギーの大きさに対応する．これが小さい場合には電子の相関効果は相対的に強くなることが期待される．実験的には相関効果による絶縁体や超伝導状態への転移は1 K程度で起こる．これはエネルギーでいうと0.1 meV程度であり，ハバード模型が適用されるほどの強相関電子系とは言い難い．一方でモアレ2層グラフェンのエネルギーバンド構造に着目すると，電子相関効果が発現する電子のフィリング付近でエネルギー状態密度が発散するファンホープ特異点が見られる．大きな状態密度は電子相関効果を強める働きを持つ．このこととフェルミ面のネスティングによる電子状態の不安定化を合わせて解析することで，電子相関効果による秩序状態への転移を説明することができる [9](図4)．これはあくまで考え得る理論のひとつであり，以降多数の理論提案が成されていることを注意しておく．

6. 非線形応答・整流効果 波束の回転によるスキュー散乱

式(6)で確かめたようにベリー曲率は波束の自転と関連する．有限のベリー曲率は有限の質量 $m \neq 0$ によるものであり，2つの副格子のポテンシャル差は結晶の空間反転対称性を破る．

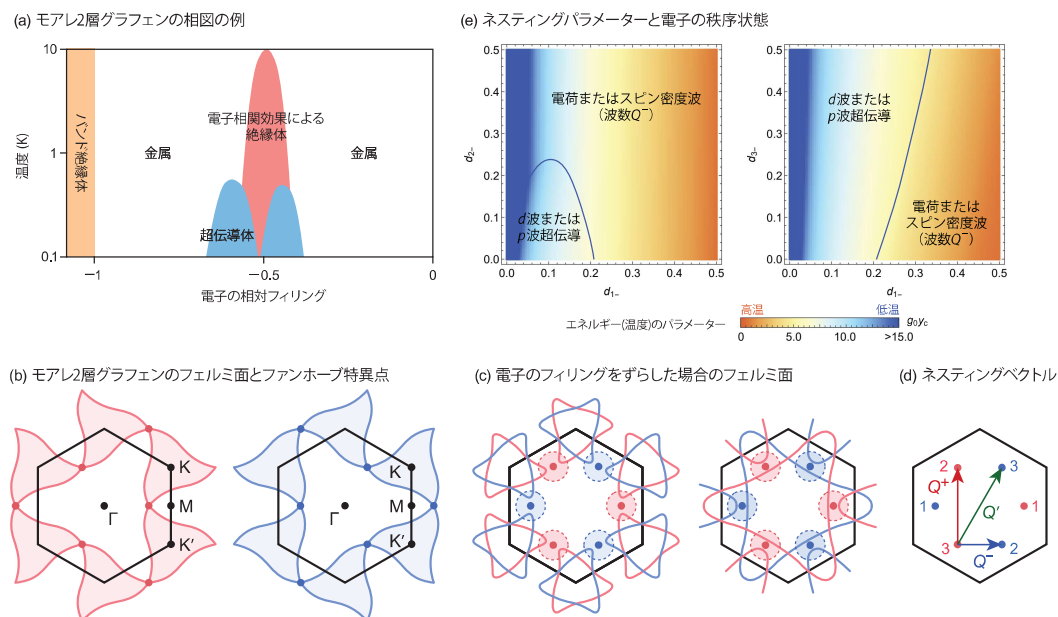


図4 ホットスポットに着目したモアレグラフェンの相関効果解析. (b)-(d) は [9] より転載.

ここで電場 E_a を印加したときの電流応答 j_a を考える. 2 次の非線形項まで考慮すると

$$j_a = \sigma_{ab} E_b + \chi_{abc} E_b E_c \quad (7)$$

と書くことができるが, 2 次の非線形応答 χ_{abc} が有限であるためには結晶が空間反転対称性を破る必要がある. これは空間反転の下での変換が $j_a \mapsto -j_a$ および $E_a \mapsto -E_a$ であることから理解できる.

この2つを組み合わせると, 波束の回転から理解できるスキュー散乱による2次の非線形応答の微視的機構 [10] を図5に示す. この理論提案の後, 実験的にもグラフェン [11] および, 同様の対称性を有するトポロジカル絶縁体の表面状態 [12] において, スキュー散乱による2次の非線形応答が測定されている.

7. 非エルミート効果 多バンド構造のもとらすフェルミアーケ

再び質量ゼロのディラック方程式を考える. これまで見てきたようにディラックコーンを有するディラック方程式は, 2つの軌道が非自明な形で混成している状態を示す方程式であると理解できる. ここでは基底を取り替えて $H_0(\mathbf{k}) = v(\sigma_z k_x + \sigma_x k_y)$ とし, ^{*11} それぞれの基底に対応する状態が有限の準粒子寿命を持つ状況を考える. これは例えば不純物 [13] や電子相関効

^{*11} ディラック方程式の基底には物理的意味を持つように定めるのが普通である. グラフェンの場合では2つの副格子に対応したが, 2つの格子点に位置する元素が異なる状況も存在する.

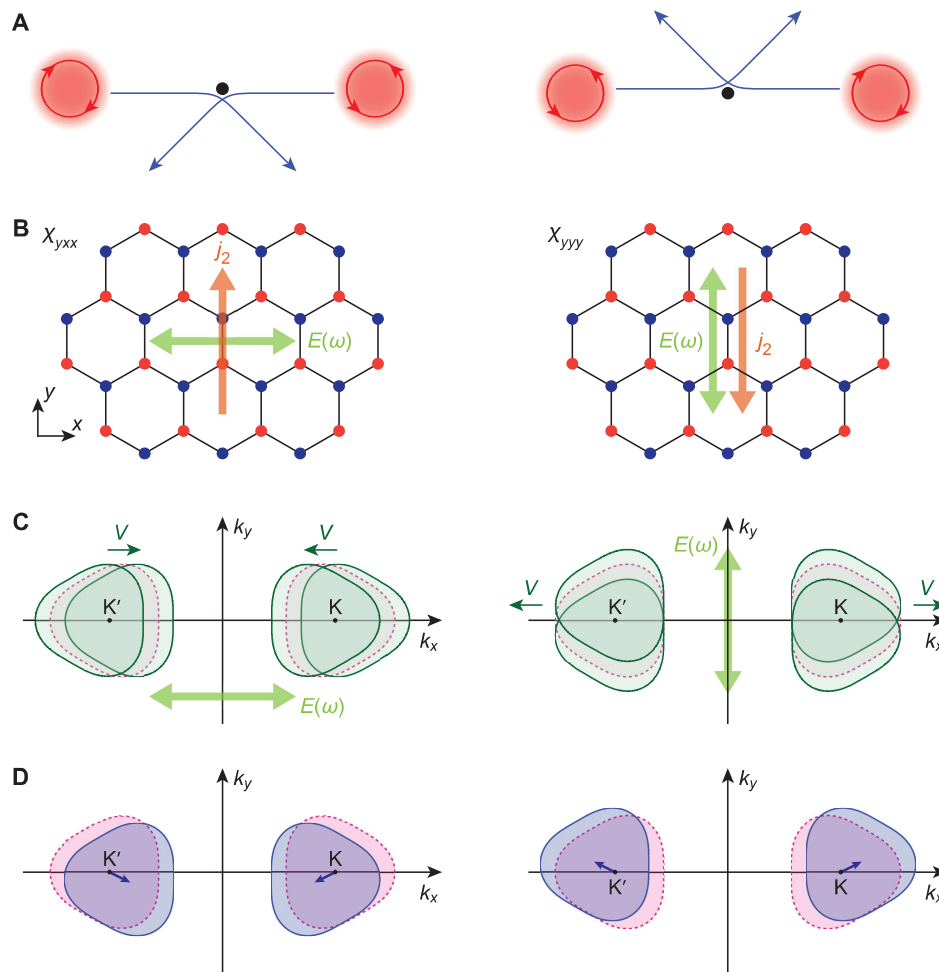


図5 スキュー散乱による非線形応答と整流効果. 自転する波束の散乱は流体中のマグヌス効果と類似する. [10] より転載.

果 [14] により引き起こされる. 有効模型において準粒子寿命は非エルミート項で表される.*¹² 2つの軌道が同じ寿命を持つときには $-i\Gamma\sigma_0$ を加わえればよく, 対応してエネルギー固有値は $\epsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm v\mathbf{k} - i\Gamma$ のように虚部を持つ. エネルギースペクトルの幅 $\text{Im } \epsilon_{\pm}(\mathbf{k})$ に幅が生じるが, エネルギー分散関係自体に変化は生じない. 一方で, ひとつの軌道のみが有限の寿命を持つ場合, 有効模型には $H' = -i\gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = -i\gamma \frac{\sigma_0 + \sigma_z}{2}$ の項が加わる. この場合には $H_0(\mathbf{k}) + H'$ の固

*¹² 有効模型では, 元の模型が持つ情報の一部が失われていることに注意する必要がある. たとえば不純物散乱では運動量が保存されないが, その微視的な情報は有効模型では保持されない. 不純物ポテンシャルを含む元のハミルトニアンはエルミートである. 物性物理学のほとんどの場合で非エルミート模型はあくまでも有効模型であり, 本来のハミルトニアンはエルミートであることに注意する必要がある. 特に電気伝導度などの輸送現象の計算においては, フェルミ面から離れたエネルギーの高い状態に対する系の詳細も結果に影響を与える [15].

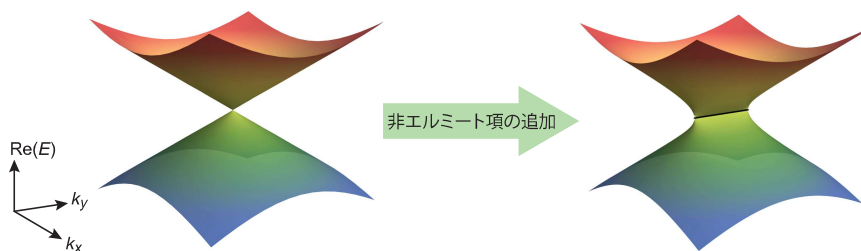


図6 多バンド構造に伴う非エルミート効果・フェルミアーク.

有エネルギーは $\epsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = -i\gamma/2 \pm \sqrt{(vk_x - i\gamma/2)^2 + v^2k_y^2}$ となり, 実部 $\text{Re} \epsilon_{\pm}(\mathbf{k})$ にも顕著な違いが現れる (図6). この効果は, 例えばスペクトル関数として角度分解光電子分光 (ARPES) により測定できる.

8. おわりに

この集中ゼミおよびテキストでは, まず物理現象の背後にある基礎からイメージを構築し, そこから直観的に最近の研究の雰囲気をつ掴んでもらうことを目指した. 後半の具体例の部分に関しては, テキストの説明は不十分であろうがその点については集中ゼミでの解説で補う. さらに興味を持っていただけたら引用した文献やさらに関連する文献を参照してほしい. 物性物理学は個別の事象や各論が多く存在するために, 全体像をつ掴むのが非常に難しい分野であると感じている. この機会がそのハードルを越える上での一助となれば幸いである.

参考文献

- [1] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *An Introduction to quantum field theory* (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1995).
- [2] R. D. King-Smith and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **47**, 1651(R) (1993).
- [3] M.-C. Chang and Q. Niu, Phys. Rev. B **53**, 7010 (1996).
- [4] C. Kittel, *Introduction to solid state physics* (8th ed.) (Wiley, New York, 2005).
- [5] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, New York, 1976).
- [6] Y. Cao *et al.*, Nature **556**, 43 (2018); **556** 80 (2018).
- [7] R. Bistritzer and A. H. MacDonald, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **108**, 12233 (2011).
- [8] M. Koshino *et al.*, Phys. Rev. X **8**, 031087 (2018).
- [9] H. Isobe, N. F. Q. Yuan, and L. Fu, Phys. Rev. X **8**, 041041 (2018).
- [10] H. Isobe, S.-Y. Xu, and L. Fu, Sci. Adv. **6**, eaay2497 (2020).
- [11] P. He, G. K. W. Koon, H. Isobe *et al.*, Nat. Nanotechnol. **17**, 378 (2022).
- [12] P. He, H. Isobe, D. Zhu, C.-H. Hsu, L. Fu, and H. Yang, Nat. Commun. **12**, 698 (2021).
- [13] M. Papaj, H. Isobe, and L. Fu, Phys. Rev. B **99**, 201107 (2019).
- [14] Y. Nagai, Y. Qi, H. Isobe, V. Kozii, and L. Fu, Phys. Rev. Lett. **125**, 227204 (2020).
- [15] H. Isobe and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **107**, L201116 (2023).