二次元格子における Dirac 点の設計

浅野建一（大阪大学大学院理学研究科物理学専攻）

最近二次元格子系で様々な Dirac 電子系が見つかっている．グラフェンはもちろん，例えば有機導体系の α-ET_2I_3 や鉄ヒ素系超伝導体 LaOFeAs でも Dirac コーン型の分散が現れる．特に α-ET_2I_3 で見つかった Dirac 点は，Brillouin ゾーン内部の一般点（特別な対称性を持たない $\boldsymbol{k}$ 点）に位置する．これは Dirac 点が偶然縮退として現れることを示している．以上の事実を踏まえ，本講演では (1) Dirac 点が現れる格子系の候補を（具体的に固有方程式を解くことなしに）選別する方法，(2) Dirac 点の位置を効率よく特定する手法の二点について述べる．

ここで興味があるのは「実現可能」なバンドの縮退である．理論的に設計された系を，実験で厳密に再現することはできないから，バンドパラメータを精密に調節しないと実現しないような縮退にはあまり意味が無い．つまり，系が満たす制約（主に空間的対称性）を満足する限りにおいて，バンドパラメータ（格子模型で言えば，サイトのポテンシャルや，サイト間のホッピングの値）を僅かに変えても縮退が解けてはいけない． m 重縮退点が，Brillouin ゾーン内で n_d 次元の $\boldsymbol{k}$ 点の集合を成している状況が，上記の意味で「実現可能」となるには，一般化された von-Neumann-Wigner 条件

$$n_d = n_u - m^2 + 1 + n_c \tag{1}$$

が満たされなければならない．ここで，n_c はハミルトニアンが満たすべき制限の数，n_u はその制限が成立している $\boldsymbol{k}$ 点の集合の次元である．ハミルトニアンに課される制限の数は，系の対称性を考察するだけで分かることが多く，例えば最も重要な二重縮退（$m = 2$）を考えた場合，ユニタリ演算子で表現される対称性は 2 個の制限，反ユニタリ演算子で表現される対称性は 1 個または 3 個の制限を与える．

実際に，二次元系において，Brillouin ゾーン内の一点（$n_d = 0$）で，バンドの二重縮退（$m = 2$）が「実現可能」となる例を考えよう．まず，系が時空間反転対称性を持つ場合を挙げることができる．この対称操作は反ユニタリ演算子で表され，ハミルトニアンに $n_c = 1$ 個の制限を与える．対称操作があらゆる $\boldsymbol{k}$ 点を不変に保つ（制限があらゆる $\boldsymbol{k}$ 点で成立する）ため，$n_u = 2$ であり，式 (1) が満たされる．もう一つの例として，系が時空間反転対称性を持たず鏡映対称性だけを持つ場合がある．この場合は対称操作がユニタリ演算子で表されるため $n_c = 2$ であり，対称操作が対称軸上の $\boldsymbol{k}$ 点だけを不変に保つので $n_u = 1$ となって，やはり式 (1) が満たされる．

我々は，バンド縮退が起こる $\boldsymbol{k}$ 点の位置を効率良く探索する手法も開発した．これは $m \times m$ 行列形式の Green 関数（縮約された $m \times m$ 有効ハミルトニアン）に着目し，縮退を持つエネルギー固有値のみを選択的に求めるものである．この方法は大変有用なものであり，簡単な格子模型であれば，この手法を使って解析的に Dirac 点の位置を特定したり，縮退点が現れるバンドパラメータの範囲を特定することが可能である．

参考文献:

Kenichi Asano and Chisa Hotta, Phys. Rev. B **83**, 245125 (2011).