

ハチの巢格子の強束縛モデルにおけるディラック点についての理論研究

熊本大教育, 兵庫県大物質理^A 岸木敬太, 長谷川泰正^A

Theoretical study of Dirac points in the tight-binding model on the generalized honeycomb lattice

Kumamoto University, Faculty of Education

K. Kishigi

University of Hyogo, Graduate School of Material Science

Y. Hasegawa

グラフェン [1,2] は, フェルミ準位で2つのバンドが点 (Dirac 点) で接しており, ゼロギャップ半導体と呼ばれている. グラフェンの結晶構造は図1のようなハチの巣格子をしている. 強束縛モデルでの重なり積分は三次近接まで導入すると第一原理バンド計算と全体的なバンド構造がよい一致することが知られている [3]. その場合, 最近接重なり積分 (t_a, t_b, t_c) が 2.79~2.97 eV, 次近接重なり積分 ($t'_a, t'_b, t'_c, t''_a, t''_b, t''_c$) が 0.073~0.68 eV, 三次近接重なり積分 (t_{3a}, t_{3b}, t_{3c}) が 0.3~0.33 eV と見積もられている.

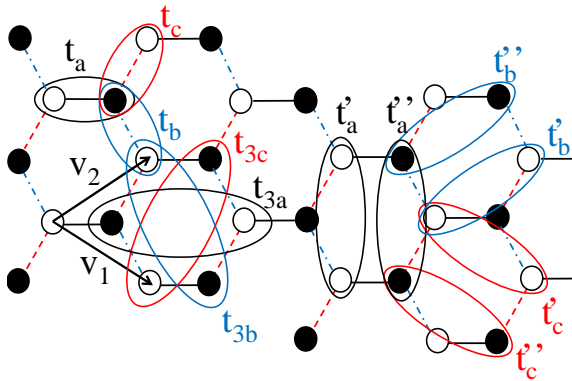


図 1: 副格子 A が \circ であり, 副格子 B が \bullet である.

系に反転対称があるときは, A と B の副格子が同等となるため, 次近接重なり積分は, バンドの傾きに寄与するだけで, バンドギャップや Dirac 点の位置に影響を与えない [4]. Bena と Simon [5] は重なり積分の異方性は無視し (最近接は $t = t_a = t_b = t_c$ とし, 三次近接は $t_3 = t_{3a} = t_{3b} = t_{3c}$ とする), t_3 を大きくしたとき, Dirac 点とバンドギャップがどのように変化するかを理論的に研究している [5]. 彼らは $t_3/t = 1/3$ のとき, Dirac 点の数が 2 点から 5 点になり, $1/3 < t_3/t < 1/2$ のとき Dirac 点の数が 8 点になることなどを明らかにした.

光格子上の超冷却原子 [6] や, グラフェンで強い一軸圧力が働く場合, 異方的な重なり積分が実現される可能性がある. それゆえ, 異方性を導入して, Dirac 点の数と状態密度とトポロジカル絶縁体とについて

理論的な研究を行った [7]. 例えば, 図 2 のような相図が得られた. Dirac 点が 3 点重なるという特異なパラメーター (P_1, P_2, P_3) が存在することがわかった. P_1, P_2, P_3 においては, 波数とエネルギーの関係式が $\epsilon \propto \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ から $\epsilon \propto \sqrt{k_x^2 + \alpha k_y^6}$ となることで状態密度が

$$D(\epsilon) \propto |\epsilon| \quad (1)$$

から

$$D(\epsilon) \propto |\epsilon|^{1/3} \quad (2)$$

へと変化することもわかった.

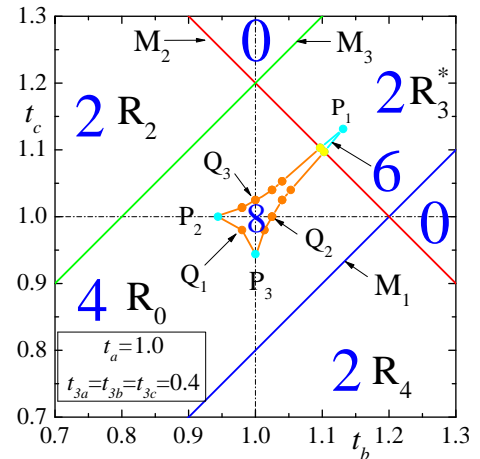


図 2: 横軸を t_b , 縦軸を t_c とした場合の相図. 図中の数字は Dirac 点の数である.

- [1] K. S. Novoselov, *et al.*, Science **306** (2004) 666.
- [2] Y. Hasegawa, *et al.*, Phys. Rev. B **74** (2006) 033413.
- [3] S. Reich, *et al.*, Phys. Rev. B **66** (2002) 035412.
- [4] M. O. Goerbig, *et al.*, Phys. Rev. B **78** (2008) 045415.
- [5] C. Bena and L. Simon, Phys. Rev. B **83** (2011) 115405.
- [6] L. Leticia, *et al.*, Nature **483**, 302 (2012).
- [7] Y. Hasegawa and K. Kishigi, Phys. Rev. B **86** (2012) 165430.