

「事象の地平線」的ディラック粒子の作り方

[1] 要旨

近年、相対論的粒子であるディラック粒子が、固体のバンド構造の中に現れることに注目が集まっている。固体中のディラック粒子の特徴の1つは、分散の非等方性が許される点にある。極限的な状況では、特定の方向のエネルギー分散が完全に平坦となることがあり、これは第 III 種ディラック粒子と呼ばれる。当該論文では、第 III 種ディラック粒子を有する格子模型の系統的な構成法が提案された。ここで得られた格子模型は、今後の新奇物性開拓、あるいはメタマテリアルでの実現への基礎となることが期待される。

[2] 本文

金属・絶縁体などの固体の物性は、電子の振る舞いによって決定される。物質の多様性は、構成元素と結晶構造から決まるバンド分散の多様性に帰着される。特異なバンド分散は、興味深い物性を生む。例えば、近年、固体中の電子が相対論的粒子として振る舞うディラック粒子に注目が集まっている。特に、2つのバンドがある波数点（ディラック点）において交差し、その近傍の分散が線形となると、質量のないディラック粒子が発現し、その運動は質量のない相対論的ディラック方程式（ワイル方程式）で記述される。現在では、炭素原子の単層蜂の巣構造物質であるグラフェンをはじめとして、多数の物質で実現例が知られており、我が国でも、有機物質 α -(BEDT-TTF)₂I₃ がディラック粒子の候補物質として発見されるなど、精力的に研究が進められてきた。ディラック粒子が生み出す通常の金属・絶縁体と異なる物性は、巨大反磁性や半整数ランダウ準位の出現など、枚挙にいとまがない。

固体中のディラック粒子の特徴の1つは、分散の非等方性が存在する点である。このことは、ローレンツ対称性が課される特殊相対論的場の理論との顕著な違いと言える。固体中のディラック粒子は、ディラック点まわりの等エネルギー面の形状に応じて3つの種類に分類される（図1）。等エネルギー面が楕円型の場合は第 I 種ディラック粒子と呼ばれ、グラフェンや α -(BEDT-TTF)₂I₃ はこれに属する。一方、等エネルギー面が双曲線型の場合は第 II 種ディラック粒子と呼ばれ、フェルミエネルギーで有限の状態密度を持つ。この2つの種類の境界に位置するのが第 III 種ディラック粒子であり、ある方向に完全に平坦な分散関係を持っている。この第 III 種ディラック粒子は、2016年に Volovik がブラックホールの「事象の地平線」のアナロジーという観点を提示したことに端を発し、多方面で注目を集めている。現実の物質においても、圧力や光照射によるバンドエンジニアリングによって第 III 種ディラック粒子が実現するという提案がある。

第 III 種ディラック粒子の物性の理論研究のためには、簡潔な格子模型があることが望ましい。しかし、第 III 種ディラック粒子は、ディラック分散の「傾き」を定量的に変化させたとき、第 I 種と第 II 種との臨界的な状態でのみ実現されるため、従来は模型のパラメータを詳細に調整することで初めて実現されるものと考えられていた。最近、筑波大学の溝口・初貝は、第 III 種ディラック粒子を有する格子模型を、パラメータを詳細に調整することなく系統的に構成する方法を提案した。研究の成果は、日本物理学会が発行する英文誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の 2020 年 10 月号に掲載された。当該論文で提案された模型の構成法は、分散のないバンドを持つ普遍的な性質である、波数空間でのハミルトニアン行列のランク落ちの構造に着目したもの

である。具体的には、ハミルトニアン行列が非正方行列の積で書き表されるとき、その非正方行列が波数によらず 0 固有値を持つことを利用した。著者らはこのハミルトニアン行列の書き換えを、量子化学における非直交かつ有限の数の原子軌道にまたがる波動関数に倣って「分子軌道表現」と呼び、バンドが波数空間全体で平坦になるような格子模型（平坦バンド模型）の構築に適用してきた。この構造を波数空間上のある方向のみ保つような格子模型を構築できれば、第 III 種ディラック粒子が得られる。ハミルトニアン行列のランク落ちの構造さえあれば、パラメータの詳細な調整が不要である点が、この構築法の有用な点である。論文では、具体的な例として、線上での 2 重縮退（線ノード）を持つような格子模型を出発点としている。そのような模型では上述の非正方行列のカーネル（固有値 0 の固有空間）が 2 次元である。そこに、カーネルの次元を 1 つ落とすような形の摂動を加えることで、第 III 種ディラック粒子を発現させることができる（図 2）。このような摂動は、ハミルトニアン行列の「形」に制約があるものの、パラメータを定量的に調節することなく実現できる。

論文では 3 つの具体的な模型を紹介しており、それらはいずれも有限の距離での飛び移り積分のみを持つ簡潔な模型であるため、今後の第 III 種ディラック粒子の新奇物性の開拓やその数値的研究の舞台となると期待される。さらに、上記の性質から、フォトニック結晶、フォノン結晶、電気回路などのいわゆるメタマテリアルにおいて、第 III 種ディラック粒子を実現させるための物質設計にも有用である。「事象の地平線」が実験室で作れるようになれば興味深い。

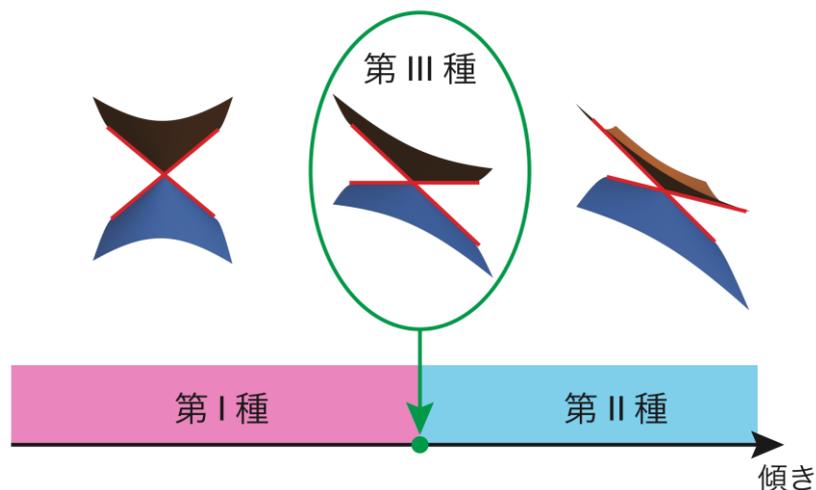


図 1. 3 種類のディラック粒子

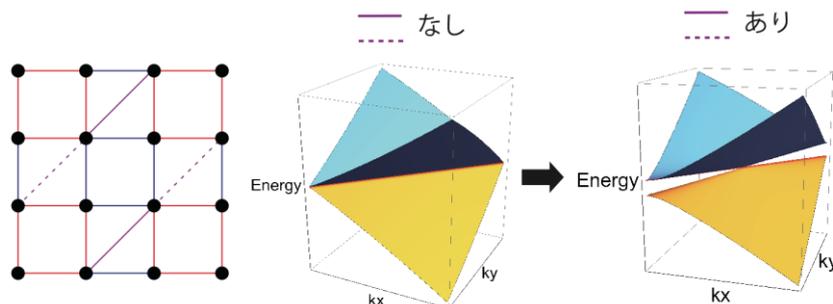


図 2. 第 III 種ディラック粒子を有する格子模型の例

紫のボンド上の飛び移り積分を有限にすることで、線ノードが第 III 種ディラック粒子に変化する。

原論文 (9月17日公開済)

Type-III Dirac Cones from Degenerate Directionally Flat Bands: Viewpoint from Molecular-Orbital Representation

Tomonari Mizoguchi and Yasuhiro Hatsugai:

J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 103704 (2020).

<情報提供：溝口 知成（筑波大学数理物質系物理学域）

初貝 安弘（筑波大学数理物質系物理学域）>