千葉大学大学院自然科学研究科
修士論文

カゴメ型量子細線系に生じるフラットバンド励起子の数値計算

理化学専攻
凝縮系物理学講座
01UM1301
石井宏幸

目 次

第 1 章　序 **3**
1.1　半導体微細構造と人工格子 3
1.2　フラットバンドの定義と特徴 4
1.3　フラットバンドをもつ格子と強磁性 6
1.4　励起子の束縛エネルギーの次元依存性 10
1.5　研究目的 11

第 2 章　計算方法 **12**
2.1　タイトバインディングモデル 12
2.2　数値計算の方針 14
2.3　パラメーターの見積もり 14
2.4　数値計算の実際 21
2.4.1　波動関数の反対称化 21
2.4.2　周期境界条件について 22
2.4.3　数値計算の誤差評価 22

第 3 章　計算結果と考察 **26**
3.1　様々な格子に生じる励起子の束縛エネルギー 26
3.2　格子定数と励起子の束縛エネルギーの関係 29
3.3　励起子の半径 31
3.4　摂動計算による解析 32
3.4.1　正方格子 32
3.4.2　カゴメ格子 34
3.5　田崎格子に生じる励起子 36
3.6　束縛エネルギーの磁場依存性 39
3.7　複合励起子の安定性 44

第 4 章　まとめと今後の課題 **47**
4.1　まとめ 47
4.2　今後の課題と展望 48

付 録 A　励起子の束縛エネルギーの次元依存性 **50**
A.1　Wannier 方程式 50
A.2　各次元における励起子の束縛エネルギー 52

付 録 B　フラットバンドについて **57**
B.1　リープ型 58
B.2　田崎型 59
B.3　ミールケ型 63
B.3.1　グラフ理論の基礎 (使われる定義) 64
B.3.2　ライングラフ 66
B.3.3　グラフ理論から導かれる定理 67
B.3.4　フラットバンドについて 68
B.3.5　フラットバンドの固有状態について 69
B.3.6　フラットバンド以外のバンドについて 71
B.4　まとめ 71

付 録 C　ランチョス法 **73**
C.1　ランチョス法の原理 73
C.2　大規模疎行列に対するランチョス法 75

付 録 D　非直交で縮退のある摂動論 **77**

第1章　序

1.1　半導体微細構造と人工格子

半導体微細加工技術は年々進歩を続け、最近ではナノスケールにまで達している。この領域では量子効果が物性に重要な寄与をもたらす。例えば、量子ドット内に閉じ込められた電子のエネルギー準位は離散化し量子ドットは原子のような振る舞いをする。この技術を用いれば量子ドットや量子細線を半導体表面に周期的に並べて、図 1.1 や図 1.2 にあるような自然界には存在しない格子を人工的に作り出すことも可能である。

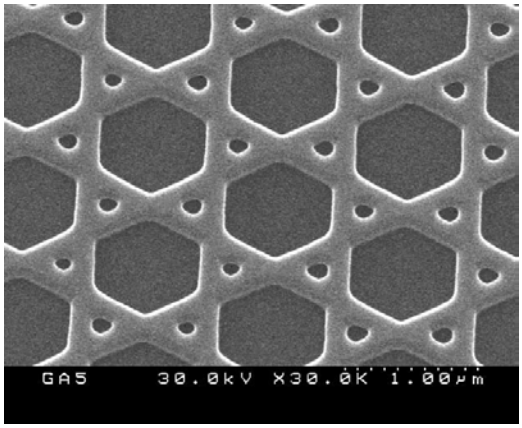

図 1.1: 量子細線によって造られたカゴメ格子。（北海道大学　福井孝志らにより提供）

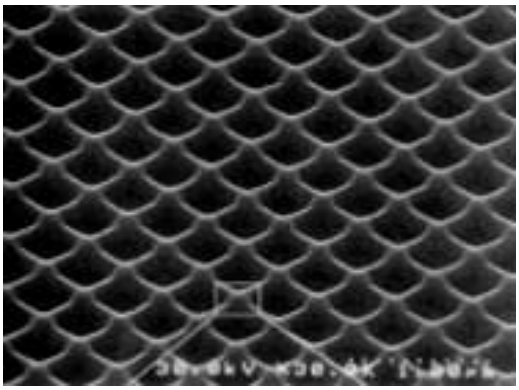

図 1.2: 量子ドットを量子細線でつないで作られた正方格子。（北海道大学　福井孝志らにより提供）

これらの人工格子系はゲート電圧を調整することで電子数を自由にコントロールすることができ、ヤーンテラー歪も起こらないという利点を持つ。電子が原子間の結合に大きく関与するような自然界にある結晶格子では、これらの利点を実現することは非常に難しい。

1976 年に Hofstadter はタイトバインディングモデルを用いて、２次元正方格子中の電子のエネルギースペクトルへの磁場の影響について、研究を行った [1]。次章で示すように図 1.3 のような量子細線中の電子状態はバンド端の状態については、タイトバインディングモデルで良く記述できる。彼らの結果によると、電子のエネルギースペクトルは磁場の強さに関して周期的に変化することが分かり、その図はバタフライダイヤグラム (図 1.4) と呼ばれている。通常の結晶格子の格

子定数は原子スケールの大きさなので、この周期的な変化を確認するために必要な磁場の大きさは 10^4T にも及ぶ。そのために、バタフライダイヤグラムは、今まで実験で確認することができなかった。しかし、量子細線によって造られた人工格子の格子定数は数百 nm 程度と相対的に大きく、必要な磁場は 1 ∼ 10T 程度ですむため、最近、図 1.3 のような人工正方格子を用いることで、実験でバタフライダイヤグラムが確認された [2]。

このバタフライダイヤグラムの例だけでなく、人工格子は、今まで自然界に対応する物質が無いために、机上の空論に過ぎないと思われていた格子系における純粋理論も実験で実証される可能性を与える強力な武器となる。

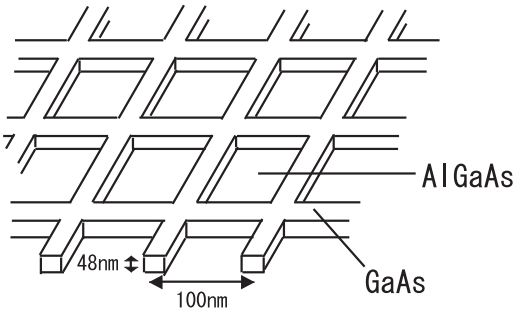

図 1.3: 量子細線で作られた正方格子の模式図。

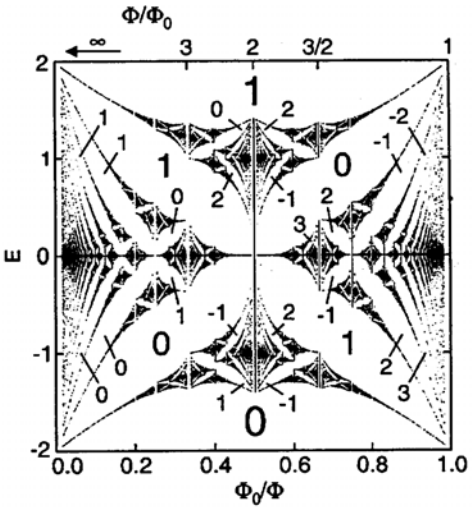

図 1.4: 正方格子中の電子スペクトルのバタフライダイヤグラム。([2] より)

1.2 フラットバンドの定義と特徴

ある格子中の電子が全く分散を持たない平坦なバンドをもつとき、平坦なバンドの発生起源から下の (1) と (2) の 2 つのタイプに分けられる。

(1) 電子の飛び移り積分の値がゼロの場合に生じる平坦なバンド。

例として、最近接原子間の距離が a の 1 次元格子中の電子の運動を、タイトバインディングモデルで考える。電子のハミルトニアンは

$$H = t \sum_{(i,j)\in n.n.} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \tag{1.1}$$

である。ただし、t は最近接原子間の電子の飛び移り積分の値を表し、$\hat{a}_i$ は i 原子にいる電子の消滅演算子である。シュレーディンガー方程式を解くと、

１次元格子における１電子バンドは

$$E(k) = 2tcos(ka) \tag{1.2}$$

であることが分かる。この式を見ても明らかなように一般の格子において、そのバンド幅は電子の飛び移り積分 t に比例する。そこで、$t \to 0$ の極限を考えると、バンド幅はゼロとなり、波数 k に依存しない平らなバンドになる。これは単なる孤立原子の集まりで、各原子に束縛された電子の局在軌道が互いに重なりをもたないために現れた平坦なバンドである。そのため、このタイプの平坦なバンドには新奇な物性は期待されない。

(2) 電子の飛び移り積分の値がゼロでないのに生じる平坦なバンド。

一方、$t \neq 0$ にもかかわらず、バンドが平坦となる格子が多数存在することが Mielke、Lieb、田崎らによって明らかにされた [3, 4, 5]。これらの格子中の１電子バンド構造は、共通して次の特徴をもつ [13]。

(a) 必ず複数のバンドが存在する。（ユニットセル中に複数の格子点を持つ。）

(b) 平らなバンド上の電子の固有状態として、局在した状態を選ぶことができるが、この状態同士は互いに重なりを持つ（図 3.7 参照）。即ち、局在した状態は非直交であり、もしワニア関数をつくると、$+\infty$ まで広がっている。極限して言うと、この平坦なバンド上の電子は格子中をしっかり動いている。

このタイプの平坦なバンドができる理由は以下のように説明できる。平坦なバンドのバンド幅はゼロであるが、電子の飛び移りを許すためには、バンド幅は有限でなければならない。この矛盾を回避するために、分散をもったバンドを複数本もつことでバンド幅を有限に保つ。そして、その複数のバンドのうちの一本を、波として広がろうとする遍歴電子の波の干渉の性質をうまく利用して、ユニットセル程度の拡がりしかもたない局在固有状態をつくる。この局在固有状態はユニットセルの数だけ縮退しているため、平坦なバンドができるのである。また、この局在固有状態は隣の局在状態と重なりを持つために、電子は格子中を動いている。

このタイプのフラットバンドを持つ格子は大きく３つに分類される。それは、(i) ＡとＢの格子点数に差のあるＡＢ副格子構造をもつリープ型、(ii) 完全グラフの単位セルにできる局在状態が単位セルを次々と連結しても、局在状態であり続ける田崎型、(iii) ＡＢ副格子構造におけるライングラフであるミールケ型である。これらの詳しい説明は、付録Ｂで述べる。

(2) のように、ある格子中の遍歴電子がつくる平坦なバンドは特に「フラットバンド」と呼ばれている。そして、このフラットバンド上の遍歴電子は、次に述べる強磁性をはじめ、様々な興味深い物性をもたらす。

1.3　フラットバンドをもつ格子と強磁性

様々な人工格子の中でも、最近、フラットバンドを持つ格子が注目されている。その理由は、未だに、完全には解明されていない強磁性の起源を理解するためである。Mielke、Lieb、田崎らによって、フラットバンドをもつ格子内の電子がフラットバンドにほぼ半分詰まっている時、強磁性状態が安定な状態となることが、タイトバインディングモデルを使って数学的に厳密に証明されている [3, 4, 5]。この強磁性は「フラットバンド強磁性」と呼ばれている。以下にフラットバンド強磁性の起源を説明する。

フラットバンドは前節で紹介したように、大きく３つに分類することが出来る。しかし、磁性の観点から見るとリープ型のフェリ磁性と、田崎、ミールケ型の完全強磁性の２つに分けられる。この差は有効交換相互作用の違いで説明される。ここでは、フラットバンド強磁性を理解するために図 1.5 のような量子ドット分子をハバードモデルで計算してみる [6]。図 1.5(a) がリープ型に対応する量子ドット分子、図 1.5(b) が田崎、ミールケ型に対応するカゴメ型量子ドット分子である。図中の ◯ がドットを表し、線（ボンド）で結ばれたドット間を電子が「遷移確率（エネルギー）」t で飛び移る。この時のハバードモデルのハミルトニアンは

$$H = H_{hop} + H_{int} \tag{1.3}$$

のように、２つの部分の和として表される。電子の飛び移りを表す H_{hop} の一般形は

$$H_{hop} = \sum_{x,y} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} t_{xy} c^{\dagger}_{x,\sigma} c_{y,\sigma} \tag{1.4}$$

である。$c_{x,\sigma}$ はドット x にあるスピン σ をもった電子を消す消滅演算子で、$t_{xy} = t$ は電子がドット y からドット x へ飛ぶ「遷移確率（エネルギー）」を表す。電子間のクーロン相互作用を表す H_{int} は

$$H_{int} = \sum_{x} U n_{x,\uparrow} n_{x,\downarrow} \tag{1.5}$$

である。$n_{x,\sigma}$ はドット x にいるスピン σ をもった電子の数を表す。H_{int} は互いに異なる向きのスピンをもった電子が同じドットに来たとき、クーロン反発により、エネルギーが U だけ上がる効果を表す。以下、相互作用の効果が顕著になるように、$U/t \gg 1$ の場合のみを考える。

(1) リープ型

リープ型の格子はＡとＢの格子点数に差を持ったＡＢ副格子構造である。図 1.5(a) に示したリープ型量子ドット分子の１電子ハミルトニアンは次のように与えられる。

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} 0 & t & t & t \\ t & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{1.6}$$

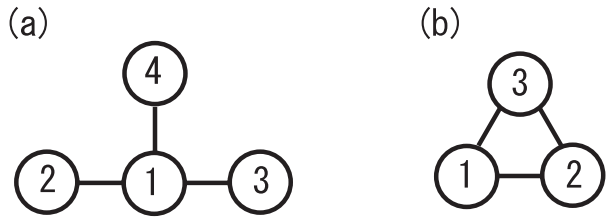

図 1.5: (a) リープ型と (b) カゴメ型の量子ドット分子モデル。◯がドットに対応する。線で結ばれたドット間を電子は遷移確率 t で飛び移る。

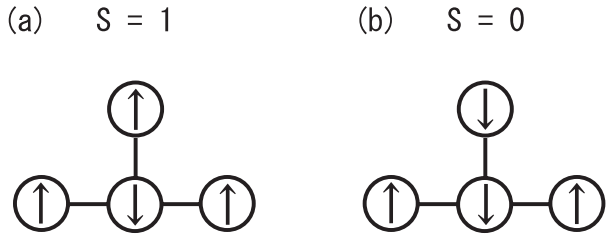

図 1.6: 実空間でのリープ型量子ドット分子の電子の詰め方。(a)$S = 1$ 状態と (b)$S = 0$ 状態の２状態が考えられる。

この固有値 E は $E = (0, 0, \pm\sqrt{3}t)$ のように $E = 0$ にフラットバンドに対応した縮退準位をとる。この縮退準位に電子が半分詰まった状況、即ち量子ドット分子内の全電子数が４個の状態を考える。

格子点の数と電子数が等しく、かつ $U/t \gg 1$ の場合の有効交換相互作用 $\mathcal{H}_{ex}$ は H_{hop} を摂動としたときの２次の効果で、

$$\mathcal{H}_{ex} = \frac{4t^2}{U}\left(s_i s_j - \frac{1}{4}\right) \tag{1.7}$$

である。但し s_i は i ドットにいる電子のスピンを表す。式 (1.7) から、ボンドで結ばれたドット間の電子のスピン配置は反強磁性型が安定であることが分かる。図 1.6(a) に示すように、全スピン S が $S = 1$ 状態のとき量子ドット分子の３つあるボンドのうち、全てのボンドが反強磁性的に電子を詰めることができる。しかし、$S = 0$ 状態のときは図 1.6(b) に示すように３つあるボンドのうち、２つが反強磁性的で１つが強磁性的になってしまう。したがって、$S = 1$ の高スピン状態が安定状態となる。この高スピン状態がリープ型のフラットバンド強磁性の起源である。

このように、リープ型の強磁性はＡとＢの副格子点数の差に起因するフェリ磁性であることが分かる。

(2) カゴメ型

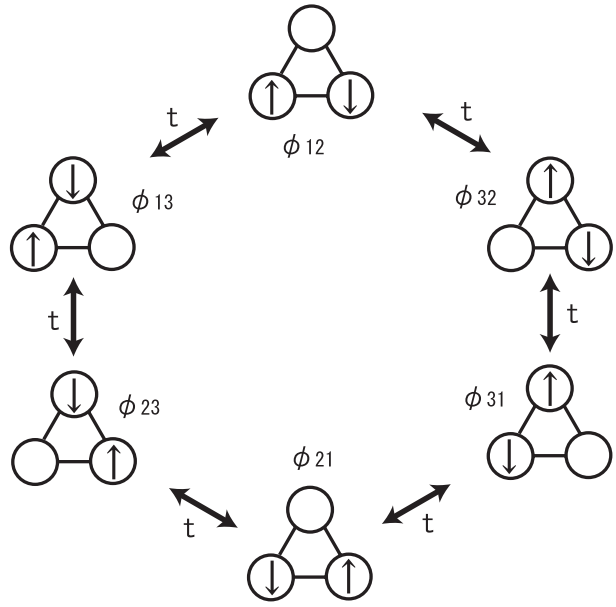

図 1.7: $U = +\infty$ のときの許される 6 つの状態と、それらの間の遷移確率。

図 1.5(b) に示したカゴメ型量子ドット分子の 1 電子ハミルトニアンは次のように与えられる。

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} 0 & t & t \\ t & 0 & t \\ t & t & 0 \end{bmatrix} \tag{1.8}$$

そして、この固有値 E は $E = (2t, -t, -t)$ である。$E = -t$ がフラットバンドに対応した縮退準位である。この縮退準位に半分だけ電子を詰める。カゴメ型量子ドット分子の場合、必要な電子数は 2 個である。そして、電子間にハバード型のクーロン斥力を入れる。ここでは、特に、$U/t \gg 1$ の極限である $U = +\infty$ を考える。この極限では、同じドットに電子が二つ存在する二重占有状態はありえないので、許される状態は図 1.7 にある 6 つだけである。ただし、図 1.7 中の ϕ_{xy} の状態は

$$\phi_{xy} = c^{\dagger}_{x,\uparrow} c^{\dagger}_{y,\downarrow} |0\rangle \tag{1.9}$$

を意味する。$|0\rangle$ は電子が一つも無い真空状態である。図 1.7 に示すように、6 つの状態は「遷移確率」t でつながっている。ここで注目すべき点は、リープ型とは違って、格子点数のほうが電子数より大きいため、電子の全くいないドットが存在する点である。このため、カゴメ型量子ドット分子内の電子は、図 1.7 のようにオンサイトクーロン斥力 U を全く感じることなく、動き回ることができる。

次に、基底状態の波動関数の形を求める。基底状態は節の無い波動関数である。節の無い波動関数は、図 1.7 を見ながら、次の法則を適用すれば作る

ことができる。

- 二つの状態が負の「遷移確率」で結ばれていたら、それらは同じ符号で重ね合わせる。
- 二つの状態が正の「遷移確率」で結ばれていたら、それらは異なる符号で重ね合わせる。

今、$t > 0$ なので、基底状態は

$$\Phi = \phi_{12} - \phi_{32} + \phi_{31} - \phi_{21} + \phi_{23} - \phi_{13} \tag{1.10}$$

となる。この基底状態の全スピンを調べる。式 (1.10) をさらに次のように変形する。

$$\Phi = (\phi_{12} - \phi_{21}) + (\phi_{23} - \phi_{32}) + (\phi_{31} - \phi_{13}) \tag{1.11}$$

ここで、特に $(\phi_{12} - \phi_{21})$ の項に注目すると、

$$\begin{aligned} \phi_{12} - \phi_{21} &= c^\dagger_{1,\uparrow} c^\dagger_{2,\downarrow} |0\rangle - c^\dagger_{2,\uparrow} c^\dagger_{1,\downarrow} |0\rangle \\ &= c^\dagger_{1,\uparrow} c^\dagger_{2,\downarrow} |0\rangle + c^\dagger_{1,\downarrow} c^\dagger_{2,\uparrow} |0\rangle \\ &= |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \end{aligned} \tag{1.12}$$

である。式 (1.11) の第２、３項についても全く同じことが言える。したがって、この基底状態は全スピン $S = 1$ の高スピン状態である。また、量子ドット分子の中に電子は２つしかいないので、この $S = 1$ 状態は、完全強磁性である。図 1.7 から分かるように、ϕ_{21} 状態は ϕ_{12} 状態に摂動 H_{hop} を３回作用させることによって得られる。そして、この３次の交換の過程に伴う量子力学的位相が、式 (1.12) のように、ちょうど強磁性を生むような状態の重ね合わせを作り出したと言える。

フラットバンドによる完全強磁性の起源は要約すると、以下のように言える。1.2 節 (2) で述べたように、フラットバンド上の隣り合う局在固有状態は互いに重なりをもつため、このバンド上の電子は格子内を飛び回っている。このフラットバンド状態に電子を詰めていくと次第に局在固有状態間は重なり始め、そこに電子間のクーロン斥力ポテンシャルを導入すると、反平行スピンをもつ電子間には相互作用の損が発生する。しかし、量子力学的位相の干渉を利用して、強磁性状態をつくると、同じスピンをもつ電子間には、パウリの排他律が働き、この損はない。こうして強磁性状態が最低エネルギー状態となる。このフラットバンド強磁性は、フラットバンド上の遍歴電子が引き起こす新しいタイプの完全強磁性状態であると考えられている。

以上の議論は、タイトバインディングモデルの範囲内のみであった。しかし、次章で述べるように、連続空間の自由度を持つ人工格子系の電子状態も、タイト

バインディングモデルを用いて良く記述される。したがって、量子細線、または、量子ドット列でフラットバンドをもつ人工格子を作製し、電子数をゲート電圧で調節することが出来れば、実験的に強磁性を発生させることができると期待されている。実際、カゴメ型量子細線系 (図 1.8) における磁性状態がスピン密度汎関数法による計算から調べられている。この系は、常磁性状態では図 1.9 のようなバンドをもつ。しかし、この下から３番目のフラットバンドに電子が半分だけ詰まると、図 1.10 に示すように、常磁性状態と強磁性状態のエネルギー差が最大となり、基底状態として強磁性状態が最も安定に存在することが予言されている [7, 8]。

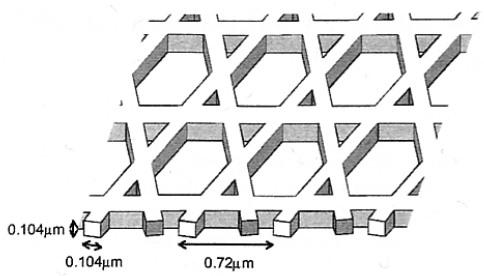

図 1.8: 量子細線によって造られたカゴメ格子の模式図。([7] より)

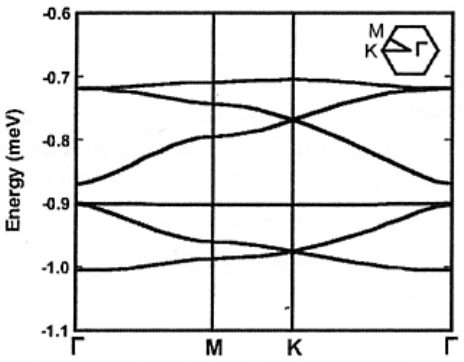

図 1.9: 密度汎関数法によって計算された図 1.8 のカゴメ格子のバンド構造。([7] より)

1.4　励起子の束縛エネルギーの次元依存性

本研究では半導体表面に作られた２次元人工格子系や１次元量子ドット列に生じる励起子を扱う。付録Aで示すように、各次元における励起子の束縛エネルギー E_B は、水素原子のように連続空間に広がった Wannier 励起子の場合、一般に次のように書ける。

- ３次元

$$E_B \equiv E_0 \tag{1.13}$$

- ２次元

$$E_B = 4E_0 \tag{1.14}$$

- 準１次元（量子細線）

$$E_B = \frac{E_0}{\lambda_0^2} \qquad (\lambda_0 \ll 1) \tag{1.15}$$

但し、$E_0 \equiv \hbar^2/(2m_r a_0^2)$ で m_r は電子とホールの換算質量を表し、$a_0 = (\hbar^2\epsilon_0)/(m_r e^2)$ である。また、λ_0 は式 (A.59) から決まり、量子細線の太さを

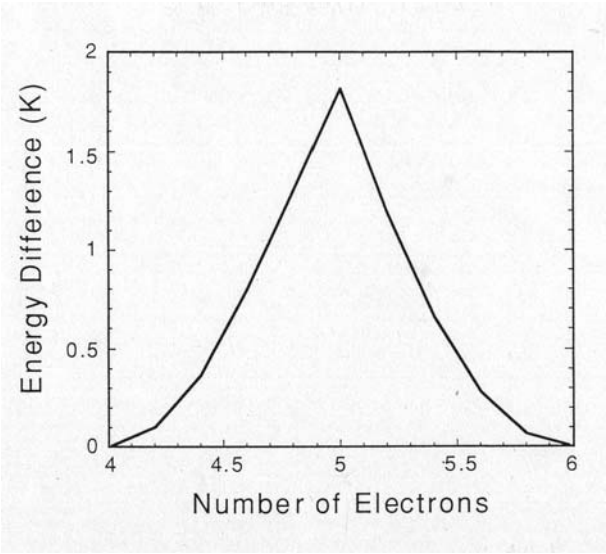

図 1.10: 電子数の違いによる強磁性状態と常磁性状態のエネルギー差の変化。フラットバンドに半分電子が詰まると、即ちユニットセルに平均５個の電子が入るとき強磁性状態が最も安定になっていることが分かる。([8] より)

表す。量子細線の太さがゼロになり、完全な１次元系になると λ_0 はゼロとなり、E_B は $+\infty$ に発散する。

ここで示されているように、一般に励起子の束縛エネルギーは、空間の次元が小さくなるほど大きな値をとる。これは、次元が下がると励起子を形成している電子とホールの閉じ込めの効果が高くなるため、その間に働くクーロン引力を強く感じるためである。

1.5　研究目的

通常、平坦なバンドは完全に局在した電子系の場合に現れるが、いくつかの格子系では、波として拡がろうとする電子の波の干渉という量子効果のために、電子は遍歴しながらもフラットバンドが現れる。そして、このフラットバンド上の電子系は多体効果により、新しいタイプの強磁性を出現させている。フラットバンドを引き起こす量子効果は、勿論光学的な性質にも特異な物性を与えると予想される。しかし、この系に対する光学的観点からの研究は未だ行われていない。

そこで、本研究では、フラットバンドをもつ格子系 (主にカゴメ格子) を扱い、そのフラットバンド上の電子 – 正孔対 (励起子：以下、フラットバンド励起子と呼ぶ) の性質を明らかにする。特に、フラットバンド固有状態特有の性質である多重縮退、非直交性、局在性に注目することで、その励起子の特性を明らかにする。

第2章　計算方法

2.1　タイトバインディングモデル

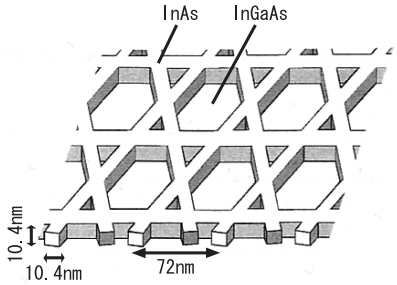

図 2.1: 本研究で想定するカゴメ型量子細線系の模式図。

本研究では、主に、図 2.1 に示すような $In_{0.72}Ga_{0.28}As$ 基板上に太さ 10.4nm の InAs 量子細線で作られた格子定数 72nm の２次元カゴメ型量子細線系を考える。

量子細線系に対するタイトバインディング近似

このカゴメ格子に電子をユニットセルあたり平均５個注入した時の、局所密度汎関数法により求めた電荷密度分布を図 2.2 に示す。量子細線が交差している場所に実効的に閉じ込めポテンシャルが生じ、量子ドットと同様に電子がそこに局在している様子が分かる [8]。

そこで図 2.3 のように量子細線が交差する点を格子点として、最近接格子点間を伝導帯の電子と価電子帯のホールが飛び移るタイトバインディングモデルを考える。図 2.5 のタイトバインディングモデルから求めたバンド構造は、図 2.4 の局所密度汎関数法から求めたバンド構造と同じ形をしている。これは、量子細線で作られた人工格子の電子構造を、タイトバインディングモデルで良く近似できることを示唆している。カゴメ格子の場合、最近接より遠い格子点間に電子の飛び移りがあるとフラットバンドが曲がってしまう。しかし、量子細線系では量子ドット列と違って最近接格子点間を直接量子細線でつないでいるので、第２近接以遠への電子の飛び移りは無視できるほど小さくなる利点がある。

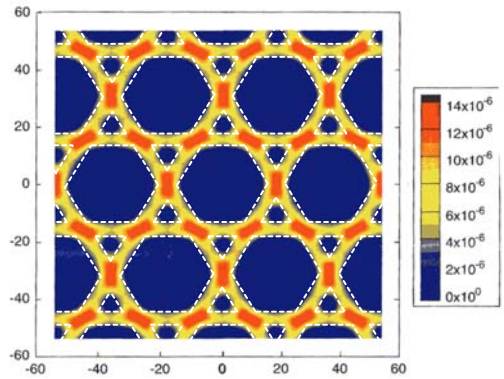

図 2.2: 局所密度汎関数法によるカゴメ格子上の電荷密度分布。([8] より)

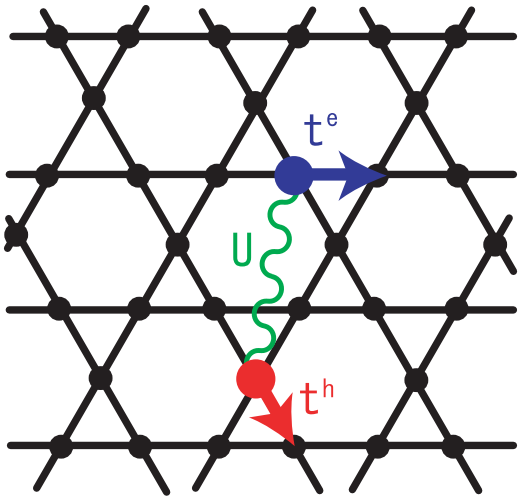

図 2.3: 励起子のタイトバインディングモデル。

ハミルトニアンの定義

電子とホールの間には長距離型のクーロン引力を仮定する。そして、電子とホールを別のフェルミオンとして扱う。この時、この系のハミルトニアンは次のように書ける。

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} t^e_{ij} \hat{a}^\dagger_i \hat{a}_j + \sum_{i,j} t^h_{ij} \hat{b}^\dagger_i \hat{b}_j + \sum_{i,j} U(r_{ij}) \hat{a}^\dagger_i \hat{a}_i \hat{b}^\dagger_j \hat{b}_j \tag{2.1}$$

ここで、t^e_{ij}、t^h_{ij}、$U(r_{ij})$ はそれぞれ電子、ホールの飛び移り積分、電子とホールの間のクーロン引力ポテンシャルを表す。そして、$\hat{a}_i$、$\hat{b}_i$ はそれぞれ i 番格子点にいる電子、ホールの消滅演算子を表す。

クーロンポテンシャルの定義

クーロン引力ポテンシャルは次を採用する [9]。

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} -U_0 & i = j \text{ のとき} \\ -\frac{U_1}{(\frac{r_{ij}}{a})} & i \neq j \text{ のとき} \end{cases} \tag{2.2}$$

ここで、a は最近接格子点間の距離である。r_{ij} は電子とホールが i 番格子点と j 番格子点にあるときの、２粒子間の距離である。$r_{ij} = 0$、即ち $i = j$ でクーロン引力ポテンシャルが発散しないのは遮蔽の効果に対応する。このモデルを実空間で模式的に表したのが図 2.3 である。

2.2　数値計算の方針

このハミルトニアンを有限系に対して、数値的に厳密対角化することにより励起子の固有状態を求める。本研究では周期境界条件を課した有限の大きさのカゴメ格子に電子とホールが１個ずついる系を考える。固有関数 $|\Phi\rangle\rangle$ は i 番格子点に局在している電子の軌道 $|\chi_i^e\rangle$ とホールの軌道 $|\chi_i^h\rangle$ を使って、

$$|\Phi\rangle\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |\chi_i^e\rangle |\chi_j^h\rangle \tag{2.3}$$

と書ける。対角化することにより、固有エネルギーとその関数（係数 c_{ij}）が求まる。特に、本研究で議論するのは、最低エネルギーをもつ励起子の束縛エネルギー E_B であり、その値はハミルトニアン $\mathcal{H}$ の最低固有エネルギー $E(U_0, U_1)$ を用いて次式で定義される。

$$E_B \equiv E(U_0 = U_1 = 0) - E(U_0 \neq 0, U_1 \neq 0) \tag{2.4}$$

つまり、励起子の束縛エネルギーとは１個の励起子をつくっている電子とホールを無限遠に遠ざけて、２つの自由粒子に分解するために必要なエネルギーである。

2.3　パラメーターの見積もり

励起子の束縛エネルギーを定量的に議論するために電子、ホールの最近接格子点間の飛び移り積分 t^e、t^h とオンサイトクーロン引力ポテンシャル U_0、そして U_1 の値を具体的に見積もる。

飛び移り積分 t^e と t^h の見積もり

まず最初に、伝導帯にいる電子の飛び移り積分 t^e の値を見積もる。局所密度汎関数法によって求められた InAs の量子細線が作るカゴメ格子のバンドは図 2.4 のようになっている [8]。そのバンド幅は約 10meV 程度である。一方、タイトバインディングモデルから求められるバンドは図 2.5 のようになっている。特に、最近接格子点間の電子の飛び移り積分 t^e を用いて、そのバンド幅は $6t^e$ となることが分かる。そこで、$6t^e$ が図 2.4 のバンド幅に一致するように、

$$t^e = 1.67\text{meV} \tag{2.5}$$

とする。電子の静止質量 m_0 を単位とすると、InAs 内の電子の有効質量 m_e は $0.02m_0$、ホールの有効質量 m_h は $0.4m_0$ なので、実際のホールの t^h は t^e より小さいと考えられる。しかし、励起子の束縛状態に効いてくるのは、その換算質量であり、

$$\frac{m_e m_h}{m_e + m_h} \sim m_e \tag{2.6}$$

なので、本研究では価電子帯にいるホールの飛び移り積分の値 t^h も t^e に等しい値を持つと仮定する。さらに、t^e の値は正にとった。図 2.4 の結果を再現するためには、t^e の値を負にとるべきだが、その場合、価電子帯及び伝導帯間の励起子には特別なものは期待されない。実際、後で見るように、フラットバンドが図 3.2(b) のように価電子帯上端、及び伝導帯下端に現れたとき、最もフラットバンドの効果が期待できる。そこで t^e を正にとった。このとき、図 2.4 の場合は、磁場を加えた場合に相当する。詳細は 3.6 節で述べる。

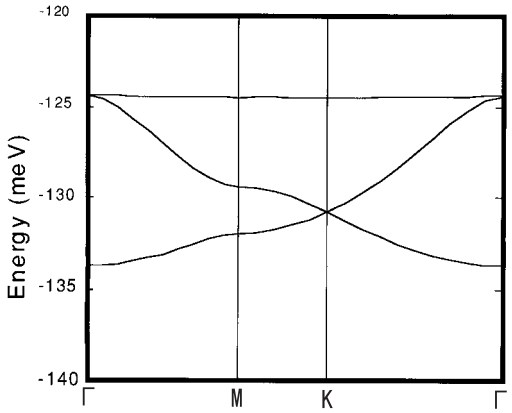

図 2.4: 局所密度汎関数法から求めたカゴメ格子の伝導帯のバンド構造。 [8] より。

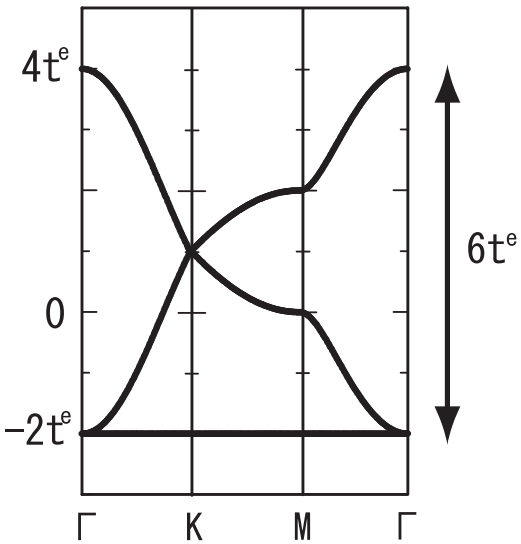

図 2.5: タイトバインディングモデルから求めたカゴメ格子の伝導帯のバンド構造。

クーロンポテンシャル U_0、U_1 の見積もり

量子細線中の遮蔽されたクーロンポテンシャルを、式 (2.2) で定義したときの U_0 と U_1 の関係は、明らかではない。そこで、本研究では下記の 2 通りの方法から、U_0、U_1 の値を見積もる。

(1) １次元量子細線系からの見積もり

1.4 節で述べたように、理想的な１次元格子の励起子の束縛エネルギーは、$+\infty$ に発散し、励起子の空間的な大きさも格子定数と同程度である。これは、$U_0 \to +\infty$ のときに対応する。しかし、実験では半導体量子細線や、鎖状 Polysilane などの１次元系に生じる励起子の空間的な拡がりは格子定数に比べて大きく、束縛エネルギーも発散しない。これは、実際の１次元格子は、有限の太さを持つために閉じ込め効果が弱くなるためである。

石田らは上記の実験的事実を考慮し、１次元系に生じる励起子の計算において、有限の大きさの U_0 と U_1 の間に、

$$U_1 = 0.75\,U_0 \tag{2.7}$$

の関係を仮定した [9]。本研究でも、この関係式を用いる。

電子とホールの間に働くクーロンポテンシャルは、一般に次のように書ける。

$$\begin{aligned} U(r) &= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon}\cdot\frac{1}{r} \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon a}\cdot\frac{1}{(\frac{r}{a})} \end{aligned} \tag{2.8}$$

この式と式 (2.7) との対応から

$$0.75U_0 \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon a} \tag{2.9}$$

したがって、

$$\begin{aligned} U_0 &= \frac{1}{0.75}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon a} \\ &= 4.18\text{meV} \end{aligned} \tag{2.10}$$

ただし、InAs の静電誘電率 $\varepsilon = 12.4\varepsilon_0$、最近接格子点間距離 $a = 36$nm で、$e(>0)$ は電子またはホールの電荷の大きさである。

(2) 量子ドットモデルからの見積もり

量子細線で作られたカゴメ格子は、量子細線が交差する点（格子点）に実効的に閉じ込めポテンシャルができる。そこで、図 2.6 のように、格子点に半径 $a/2$ の量子ドットがある量子ドットモデルを考える [6]。a は最近接格子点間距離で 36nm である。量子ドットの閉じ込めポテンシャルが

$$v(r) = \begin{cases} -\frac{1}{16}m\omega a^2\left[\cos(\frac{\pi x}{a})\cos(\frac{\pi y}{a})\right]^2 & r < \frac{a}{2} \\ 0 & r \geq \frac{a}{2} \end{cases} \tag{2.11}$$

と書けるとする。ここで、m は電子の有効質量、ω は閉じ込め振動数である。このポテンシャル中に局在した「原子波動関数」は良い近似で

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}d}\exp\left[-\frac{2|\mathbf{r}|^2}{d^2}\right] \tag{2.12}$$

と与えられる。$d = 2\sqrt{\hbar/m\omega}$ は波動関数の直径を表す。ここで、図 2.2 に再び注目すると、電荷密度が最大になるのは量子細線が交差する点（格子点）で、最小になるのは隣り合う２格子点間の中点である。その密度比（最小

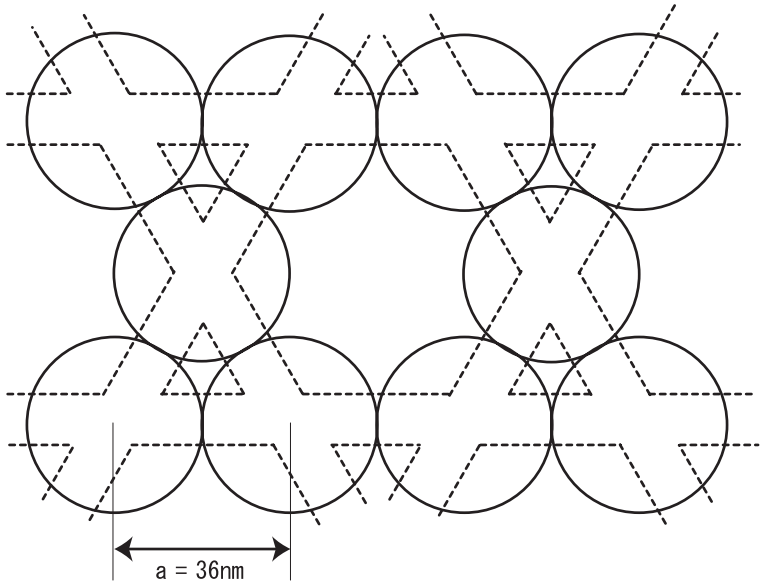

図 2.6: 量子ドットモデル。◯が量子ドットで、破線がカゴメ型量子細線系を表す。

値 / 最大値）は約 $(8\times10^{-6})/(14\times10^{-6})\sim0.6$ 程度である。これを再現するために、「原子波動関数」の直径 d の値を $d=a=36$nm ととる。このときのドットモデルにおける電子密度分布図を図 2.7 に示す。この「原子波動関数」を用いると、電子 – ホール間のクーロン引力は次のように得られる。

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= -\iint d^2r_1d^2r_2\frac{e^2|\phi(\mathbf{r}_1)|^2|\phi(\mathbf{r}_2-\mathbf{r})|^2}{4\pi\varepsilon|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon}\cdot\left(\frac{4}{\pi d^2}\right)^2\iint d^2r_1d^2r_2\frac{e^{-\frac{4|\mathbf{r}_1|^2}{d^2}}e^{-\frac{4|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}|^2}{d^2}}}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} \end{aligned} \tag{2.13}$$

但し、$\mathbf{r}$ は電子のいる格子点を原点とした時の、ホールの相対位置を表す。この式に、

$$\frac{1}{|\mathbf{r}|}=\frac{1}{2\pi}\int d^2q\frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{|\mathbf{q}|} \tag{2.14}$$

を代入すると、式 (2.13) は

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon}\cdot\left(\frac{4}{\pi d^2}\right)^2\cdot\frac{1}{2\pi}\iiint d^2r_1d^2r_2d^2q\frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}}{|\mathbf{q}|}e^{-\frac{4(|\mathbf{r}_1|^2+|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}|^2)}{d^2}} \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon}\cdot\left(\frac{4}{\pi d^2}\right)^2\cdot\frac{1}{2\pi}\iiint d^2r_1d^2r_2d^2q\frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2-\mathbf{r})}}{|\mathbf{q}|}e^{-\frac{4(r_1^2+r_2^2)}{d^2}} \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon}\cdot\left(\frac{4}{\pi d^2}\right)^2\cdot\frac{1}{2\pi}\int d^2q\frac{e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{q}\int d^2r_1e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1}e^{-\frac{4r_1^2}{d^2}}\int d^2r_2e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2}e^{-\frac{4r_2^2}{d^2}} \end{aligned} \tag{2.15}$$

となる。$\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ に関する積分を計算すると、それぞれ、

$$\int d^2 r e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-\frac{4r^2}{d^2}} = e^{-\frac{q^2 d^2}{16}} \frac{\pi d}{4} \tag{2.16}$$

なので、式 (2.15) は

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \cdot \frac{1}{2\pi} \int d^2 q \frac{e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{q} e^{-\frac{q^2 d^2}{8}} \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \cdot \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} dq e^{-\frac{d^2}{8}q^2} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-i\cdot q\cdot r\cdot\cos\theta} \end{aligned} \tag{2.17}$$

となる。続いて、θ 積分を実行すると、

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-i\cdot q\cdot r\cdot\cos\theta} &= \int_0^{\pi} d\theta e^{-i\cdot q\cdot r\cos\theta} + \int_{\pi}^{2\pi} d\theta e^{-i\cdot q\cdot r\cos\theta} \\ &= \int_1^{-1} -\frac{e^{-i\cdot q\cdot r\cdot t}}{\sqrt{1-t^2}} dt + \int_{-1}^{1} \frac{e^{-i\cdot q\cdot r\cdot t}}{\sqrt{1-t^2}} dt \\ &= 2\int_{-1}^{1} \frac{e^{-i\cdot q\cdot r\cdot t}}{\sqrt{1-t^2}} dt \\ &= 4\int_0^{1} \frac{cos(q\cdot r\cdot t)}{\sqrt{1-t^2}} dt \\ &= 2\pi J_0(q\cdot r) \end{aligned} \tag{2.18}$$

である。ただし、J_0 は第一種変形ベッセル関数である。式 (2.18) と公式

$$\int_0^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} J_0(\beta x) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} e^{-\frac{\beta^2}{8\alpha^2}} I_0(\frac{\beta^2}{8\alpha^2}) \tag{2.19}$$

から、式 (2.17) は

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \cdot \frac{\sqrt{2\pi}}{d} e^{-\frac{r^2}{d^2}} I_0(\frac{r^2}{d^2}) \tag{2.20}$$

となる。ただし、I_0 は第一種ベッセル関数である。

$d = a = 36$nm のときの $U(r)$ の具体的な形を図 2.8 に実線で示す。式 (2.20) に $r = 0$ を代入すると、U_0 の具体的な値が求まる。

$$\begin{aligned} U_0 &\equiv -U(r=0) \\ &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \cdot \frac{\sqrt{2\pi}}{a} \\ &= 8.08\text{meV} \end{aligned} \tag{2.21}$$

但し、InAs の静電誘電率は $\varepsilon = 12.4\varepsilon_0$ である。次に、U_1 を求める。$r > a(=$ 36nm) の領域で式 (2.20) を式 (2.2) でフィッティングすると、

$$U_1 = 0.45\, U_0 \tag{2.22}$$

の関係が求まる。

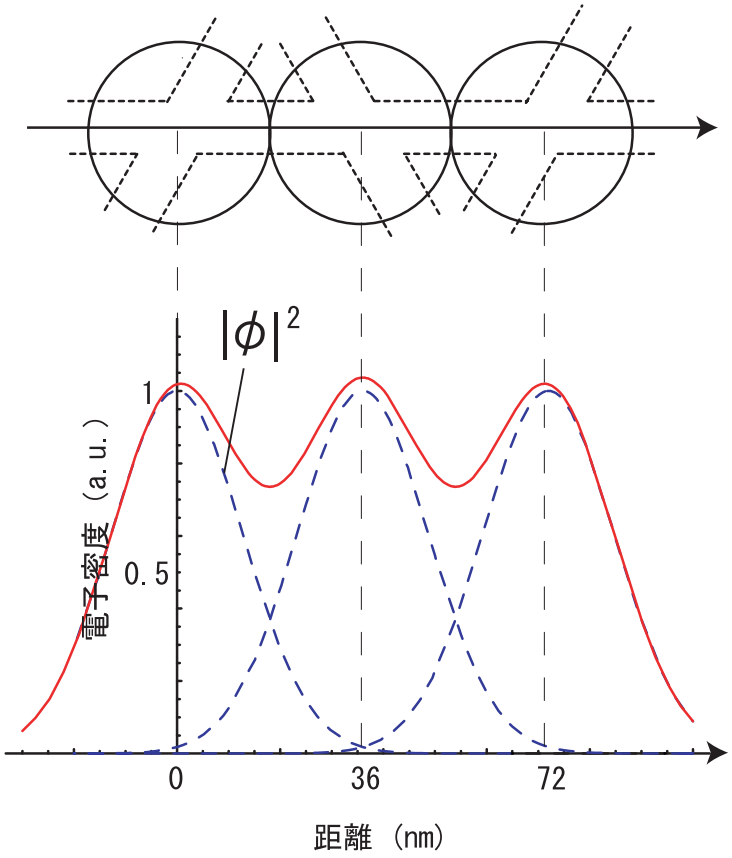

図 2.7: 下図の実線で描かれた曲線が、上部の挿入図のように３つのドットが並んだときの電子密度分布。３つの破線はそれぞれのドットに局在している「原子波動関数」ϕ を２乗したもの。但し、ドット間の距離 a は 36nm、「原子波動関数」の直径 d も 36nm。

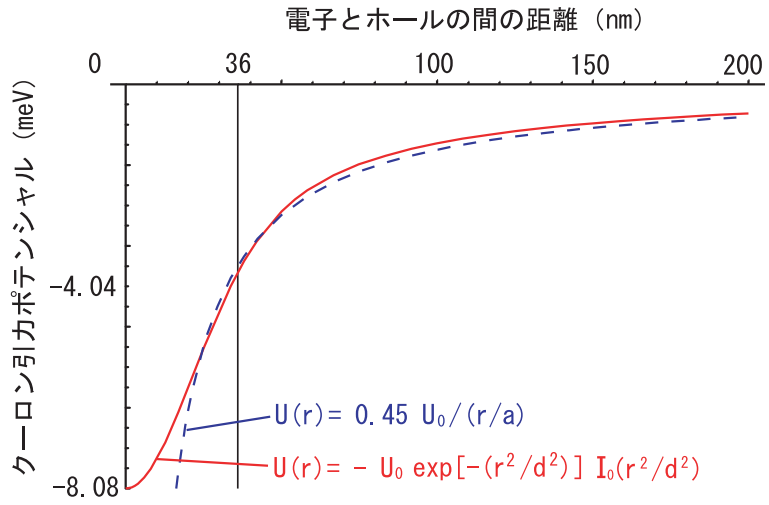

図 2.8: ドットモデルでのクーロン引力ポテンシャルの形。これを破線で描かれた $U(r) = U_1/(r/a)$ でフィッティングした結果、$U_1 = 0.45\,U_0$ の関係を得た。

パラメーターの見積もりの結果を下にまとめる。

(1) 電子とホールの飛び移り積分の値

$$t \equiv t^e = t^h = 1.67\text{meV} \tag{2.23}$$

(2) オンサイトクーロン引力ポテンシャル U_0 と U_1 の値

(a) １次元量子細線系からの見積もり

$$U_0 = 4.18\text{meV} \tag{2.24}$$

$$U_1 = 0.75U_0 \tag{2.25}$$

(b) 量子ドットモデルからの見積もり

$$U_0 = 8.08\text{meV} \tag{2.26}$$

$$U_1 = 0.45U_0 \tag{2.27}$$

2.4 数値計算の実際

2.4.1 波動関数の反対称化

励起子の波動関数

本研究では、励起子をつくる電子とホールは、別のフェルミオンとする。そのため、電子とホールの交換による波動関数の反対称化は考えない。このとき、励起子の波動関数 $|\Psi\rangle$ は

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j\in(\text{全格子点})} c_{ij}\ |\chi_i^e\rangle|\chi_j^h\rangle \tag{2.28}$$

である。ただし、$|\chi_i^e\rangle$ は電子が格子点 i にいる状態、$|\chi_j^h\rangle$ はホールが格子点 j にいる状態である。実際の数値計算では、行列の対角化で、この波動関数の固有値と固有ベクトル $\{c_{ij}\}$ を求める。

複合励起子の波動関数

3.7 節では、電子 2 個とホール 2 個の束縛状態である励起子分子、電子 2 個とホール 1 個の束縛状態である荷電励起子について計算を行った。その時、2 つの電子間の交換、または、2 つのホール間の交換に対して波動関数の反対称化を考慮に入れた。即ち、励起子分子の波動関数 $|\Psi_B\rangle$ は

$$|\Psi_B\rangle = \sum_{i,j\in(\text{全格子点})}\ \sum_{k,l\in(\text{全格子点})} c_{ijkl}\ |\phi_{ij}^e\rangle|\phi_{kl}^h\rangle \tag{2.29}$$

となる。ただし、$|\phi_{ij}^e\rangle$ は 2 電子の波動関数で、2 電子の合成スピンの大きさが $S_e = 0$ と 1 の状態がある。合成スピンの大きさが $S_e = 0$ のとき、空間波動関数は対称で

$$|\phi_{ij}^e\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\chi_i^e\rangle|\chi_j^e\rangle + |\chi_j^e\rangle|\chi_i^e\rangle\big) & i \neq j \text{ のとき} \\ |\chi_i^e\rangle|\chi_i^e\rangle & i = j \text{ のとき} \end{cases} \tag{2.30}$$

である。そして $S_e = 1$ のとき、空間波動関数は反対称で、

$$|\phi_{ij}^e\rangle = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\chi_i^e\rangle|\chi_j^e\rangle - |\chi_j^e\rangle|\chi_i^e\rangle\big) \quad i \neq j \text{ のみ} \right. \tag{2.31}$$

である。2 ホールの波動関数 $|\phi_{ij}^h\rangle$ も同様で、2 ホールの合成スピンが $S_h = 0$ のとき、

$$|\phi_{ij}^h\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\chi_i^h\rangle|\chi_j^h\rangle + |\chi_j^h\rangle|\chi_i^h\rangle\big) & i \neq j \text{ のとき} \\ |\chi_i^h\rangle|\chi_i^h\rangle & i = j \text{ のとき} \end{cases} \tag{2.32}$$

となり、$S_h = 1$ のときは、

$$|\phi_{ij}^h\rangle = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\chi_i^h\rangle|\chi_j^h\rangle - |\chi_j^h\rangle|\chi_i^h\rangle\big) \quad i \neq j \text{ のみ} \right. \tag{2.33}$$

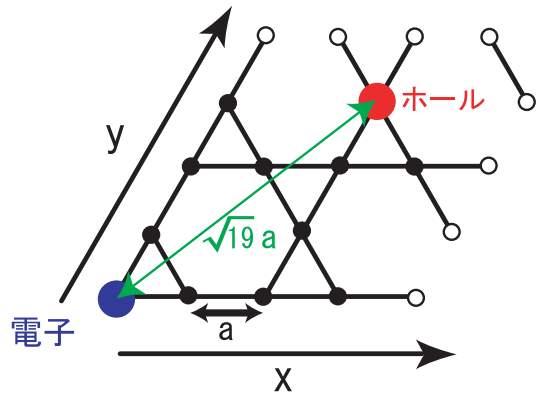

図 2.9: 2×2 の大きさのカゴメ格子。

となる。励起子分子の全スピンの大きさは $S = S_e + S_h$ で定義する。

一方、荷電励起子の波動関数 $|\Psi_C\rangle$ は

$$|\Psi_C\rangle = \sum_{i,j\in(\text{全格子点})} \sum_{k\in(\text{全格子点})} c_{ijk}\ |\phi^e_{ij}\rangle|\chi^h_k\rangle \tag{2.34}$$

である。$|\phi^e_{ij}\rangle$ は 2 電子の合成スピンの大きさにより、それぞれ、式 (2.30)、(2.31) で定義される。そして、荷電励起子の全スピンの大きさは $S = S_e + \frac{1}{2}$ で定義する。

2.4.2 周期境界条件について

本研究の励起子の計算は、周期境界条件を課した有限系に対して行っている。図 2.9 に 2×2 のカゴメ格子を示す。その中には電子とホールが 1 個ずつ存在する。そして、電子とホールの間の最短距離を r_{min} とすると、電子 – ホール間のクーロン引力ポテンシャルは $U(r_{min})$ となる。図 2.9 の場合、一見すると、電子とホールの間の最短距離は、a を最近接格子点間距離として $\sqrt{19}a$ である。しかし、x 方向の周期境界条件を考えると、図 2.10(a) のように、電子 – ホール間の最短距離は $\sqrt{7}a$ となる。さらに、y 方向の周期境界条件も考えると、図 2.10(b) から分かるように、最短距離は $r_{min} = \sqrt{3}a$ である。

結局、図 2.9 の場合の電子とホールの間に働くクーロン引力ポテンシャルは、$U(r_{min} = \sqrt{3}a) = -\frac{U_1}{\sqrt{3}}$ である。

2.4.3 数値計算の誤差評価

ランチョス法の誤差評価

本研究では、ハミルトニアン $\mathcal{H}$ をランチョス法を用いて、三重対角化する。そして、この三重対角行列の対角化には、HITACHI の数値計算副プログラムライブ

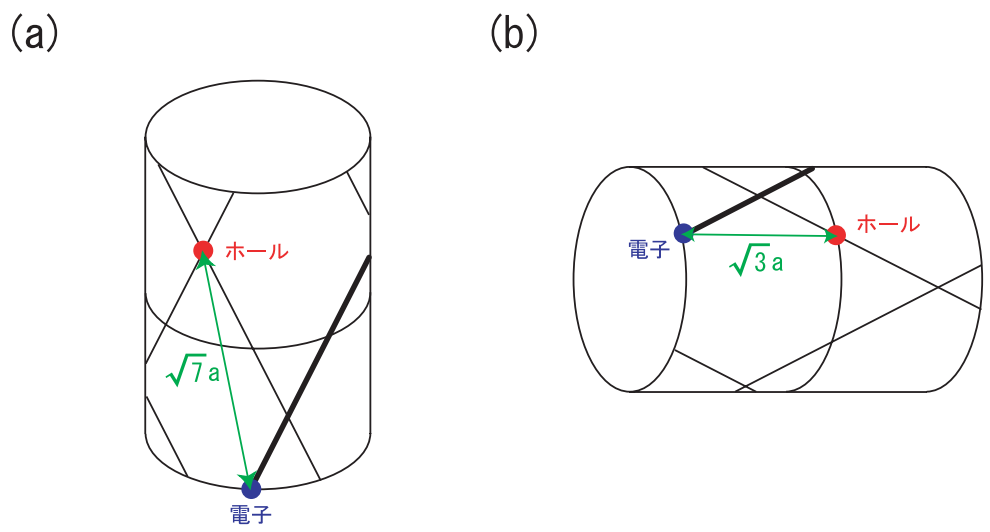

図 2.10: 図 2.9 のカゴメ格子に周期境界条件を課した時の模式図。太線は接合された図 2.9 の境界を表す。(a)x 方向の周期境界条件。この時、電子とホール間の最短距離は $\sqrt{7}a$。(b)y 方向の周期境界条件。この時、電子とホール間の最短距離は $\sqrt{3}a$。

三重対角行列の次数 m	50	100	150	200	250
束縛エネルギー (meV)	3.310	3.320	3.322	3.322	3.322

表 2.1: 15×15 の有限系カゴメ格子の束縛エネルギーと、ランチョス法によって作られる $m \times m$ 三重対角行列の次数 m との関係。

ラリを利用した。具体的には、バイセクション法で固有値を、逆反復法で固有ベクトルを求めている。

ランチョス法の利点は、この方法でつくられた三重対角行列の次数がハミルトニアン $\mathcal{H}$ の次数より、かなり小さくても、三重対角行列の最低固有値、固有ベクトルが $\mathcal{H}$ の最低固有値、固有ベクトルの良い近似になっている点にある（付録 C）。しかし、三重対角行列の次数を小さく取りすぎると、やはり精度が悪くなる。ここでは、最低限必要な三重対角行列の次数の大きさを検討する。

本研究で扱うハミルトニアン $\mathcal{H}$ が一番大きくなるのは、励起子の計算で、カゴメ格子の大きさが 15×15 の時である。この時、ハミルトニアンは 810000×810000 の実対称行列である。ランチョス法で $m \times m$ の三重対角行列をつくったときの束縛エネルギー E_B の値と三重対角行列の次数 m の値の関係を表 2.1 に示す。

表 2.1 によると、$m \geq 150$ で十分精度の良い値が得られているのが分かる。したがって、本研究では m の値を 200 に固定して、計算を行った。

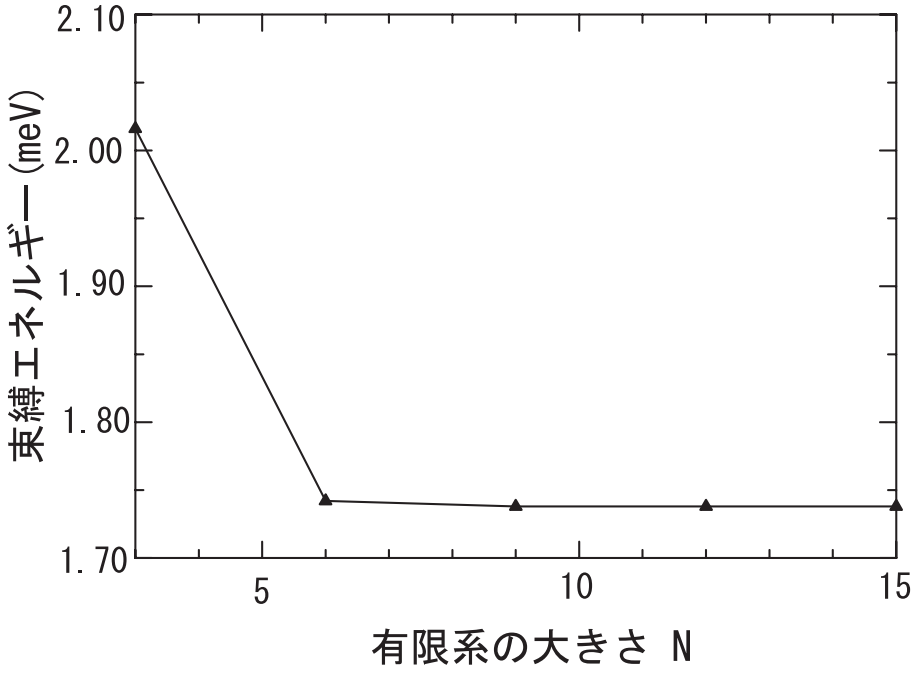

図 2.11: 三角格子の励起子の束縛エネルギーと格子の大きさ N の関係。横軸は三角格子が $N \times N$ の有限系のときの N を表す。

有限格子系の大きさの束縛エネルギーへの影響

本研究では、有限系に生じる励起子の計算を行っている。そのため、計算により求められた励起子の束縛エネルギーは有限格子系の大きさに依存してしまう。しかし、励起子の空間的広がりに対して格子の大きさを十分大きく採れば、その影響は無視できるほど小さくなる。このとき、有限系の励起子の束縛エネルギーは、無限系での値に収束する。図 2.11 と図 2.12 に、それぞれ、三角格子とカゴメ格子における励起子の束縛エネルギーと格子の大きさの関係を示す。計算は $U_0 = 4.18$meV、$U_1 = 0.75U_0$ で行った。これらの図から、格子の大きさが 6×6 より大きくなれば、有限系の励起子の束縛エネルギーは、格子の大きさによらない値になることが分かる。

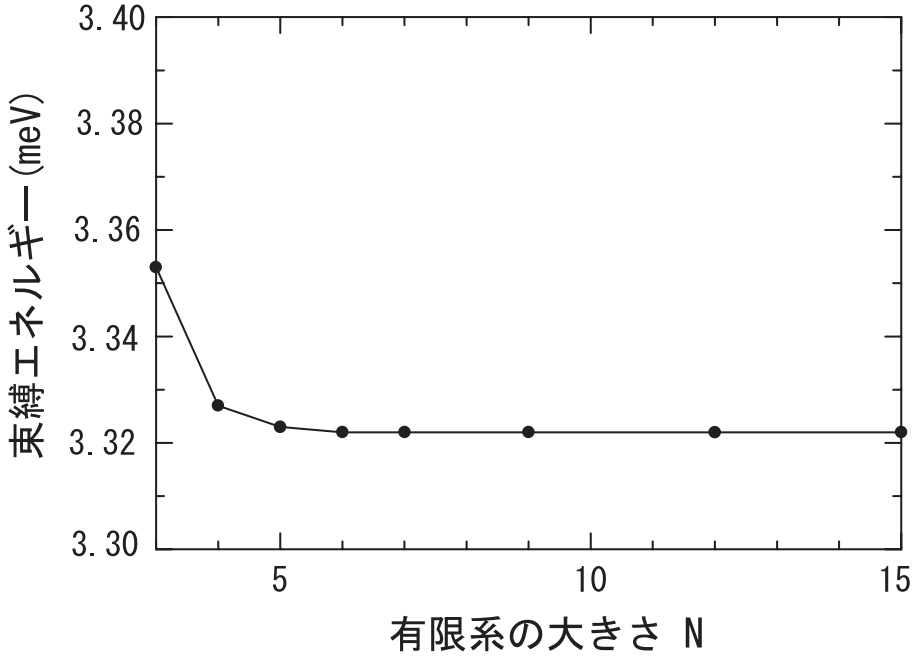

図 2.12: カゴメ格子の励起子の束縛エネルギーと格子の大きさ N の関係。横軸はカゴメ格子が $N \times N$ の有限系のときの N を表す。

第3章　計算結果と考察

3.1　様々な格子に生じる励起子の束縛エネルギー

カゴメ格子はフラットバンドを持つ。バンドがフラットであることは、バンドの有効質量が無限に大きいことを意味するが、前章で見たようにそのバンドの状態が完全に局在していることを意味しない。実際、ワニア関数は $+\infty$ に拡がっているし、局在した固有関数同士は重なり合い、直交しあわない。このような特異な性質をもったバンドに付随した励起子はどうなっているのだろうか。

カゴメ格子の特徴をみるために、本節では (b) カゴメ格子を (a) 三角格子、(c) １次元格子、(d) 正方格子と比較しながら考える。これらの格子を図 3.1 に実線で示す。実線で示した格子点間の飛び移り積分を $t = t^e = t^h = 1$ とした時の (a)∼(d) の各格子のエネルギーバンド構造を図 3.2 に示す。但し、価電子帯と伝導帯間のバンドギャップの値は任意である。また、(a)∼(c) については、カゴメ格子のユニットセルを単位としたブリルアンゾーンでバンドを描いている。価電子帯上端、及び伝導帯下端は、１次元格子、正方格子では $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ の Γ 点に現れる。一方、三角格子では K 点に現れ、カゴメ格子ではフラットバンドになっている。これらの格子に生じる励起子は、主に伝導帯の底付近にいる電子と価電子帯の頂上付近にいるホールの束縛状態である。(a)∼(c) の格子は、互いに連続的に移りあうことができる。つまり、図 3.1(b)、(c) の実線で書かれた飛び移り積分を t、点線で書かれた飛び移り積分を t' として、t' の値を $t' = t$ から $t' = 0$ へと連続的に変化させると (b) 三角格子からカゴメ格子、(c) カゴメ格子から１次元格子へ連続的に格子を変化させることができる。こうした格子における励起子の束縛エネルギーを図 3.3 に示す。但し、計算はカゴメ格子のユニットセルを単位として、周期境界条件を課した 15×15 の有限系について行った。図 3.3(a) は $t = 1.67$meV、$U_0 = 4.18$meV、$U_1 = 0.75\,U_0$ のときの励起子の束縛エネルギーの値、図 3.3(b) は $t = 1.67$meV、$U_0 = 8.08$meV、$U_1 = 0.45\,U_0$ のときの励起子の束縛エネルギーの値である。

一般に、２次元格子に生じる励起子の束縛エネルギーは１次元格子のものよりも小さくなる。このことは図 3.3 の三角格子や正方格子の励起子の束縛エネルギーが１次元格子のものよりも小さくなっている点に見られる。特に正方格子より、三角格子のほうが、励起子の束縛エネルギーが少し大きいのは、バンド端の有効質量が正方格子より大きいためと考えられる。しかし、カゴメ格子上に生じる励起子の束縛エネルギーは、同じ２次元格子である三角格子や正方格子の励起子の束縛エネルギーよりも大きな値をとり、さらに１次元格子のそれよりも大きくな

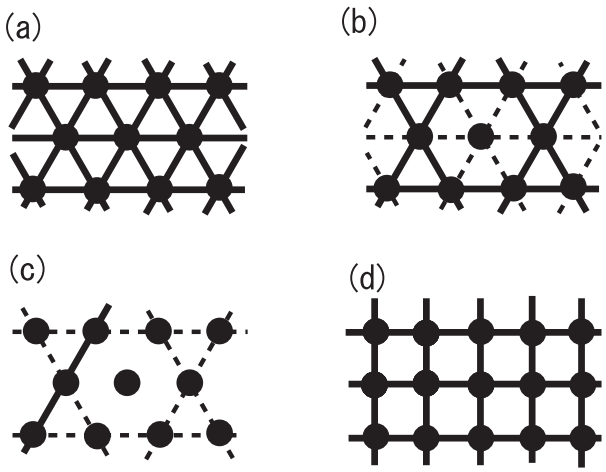

図 3.1: それぞれのグラフの実線が (a) 三角格子、(b) カゴメ格子、(c) １次元格子、(d) 正方格子　を表す。

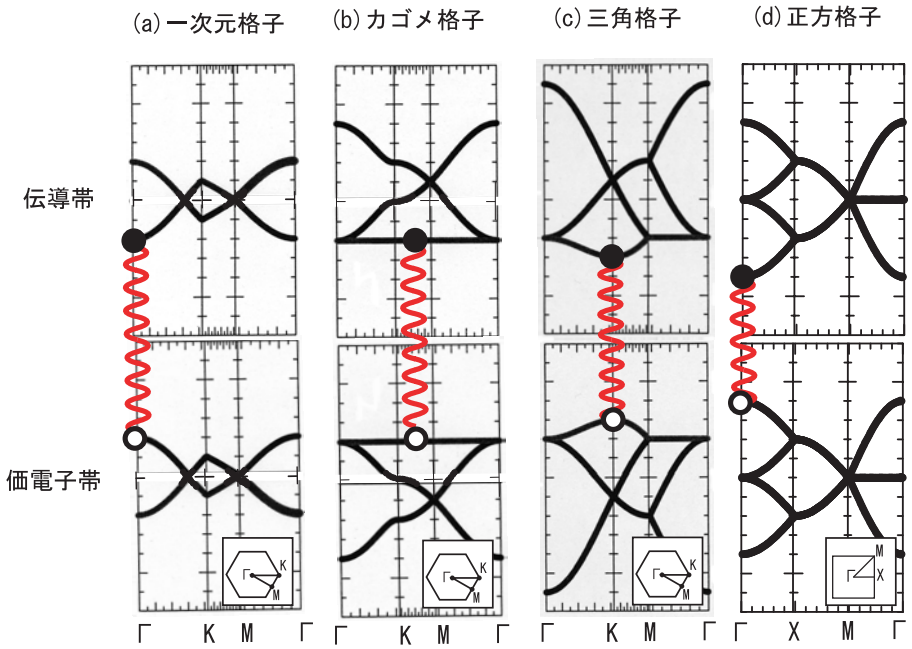

図 3.2: (a) １次元格子、(b) カゴメ格子、(c) 三角格子、(d) 正方格子　のバンド構造。挿入図は、２次元ブリルアンゾーンを示す。伝導帯、または価電子帯のバンドの数は、ユニットセル中の格子点数に等しく、各々、(a) ２ (b) ３ (c) ４ (d) ４本であり、(c)、(d) では一部の方向でバンドが縮退している。

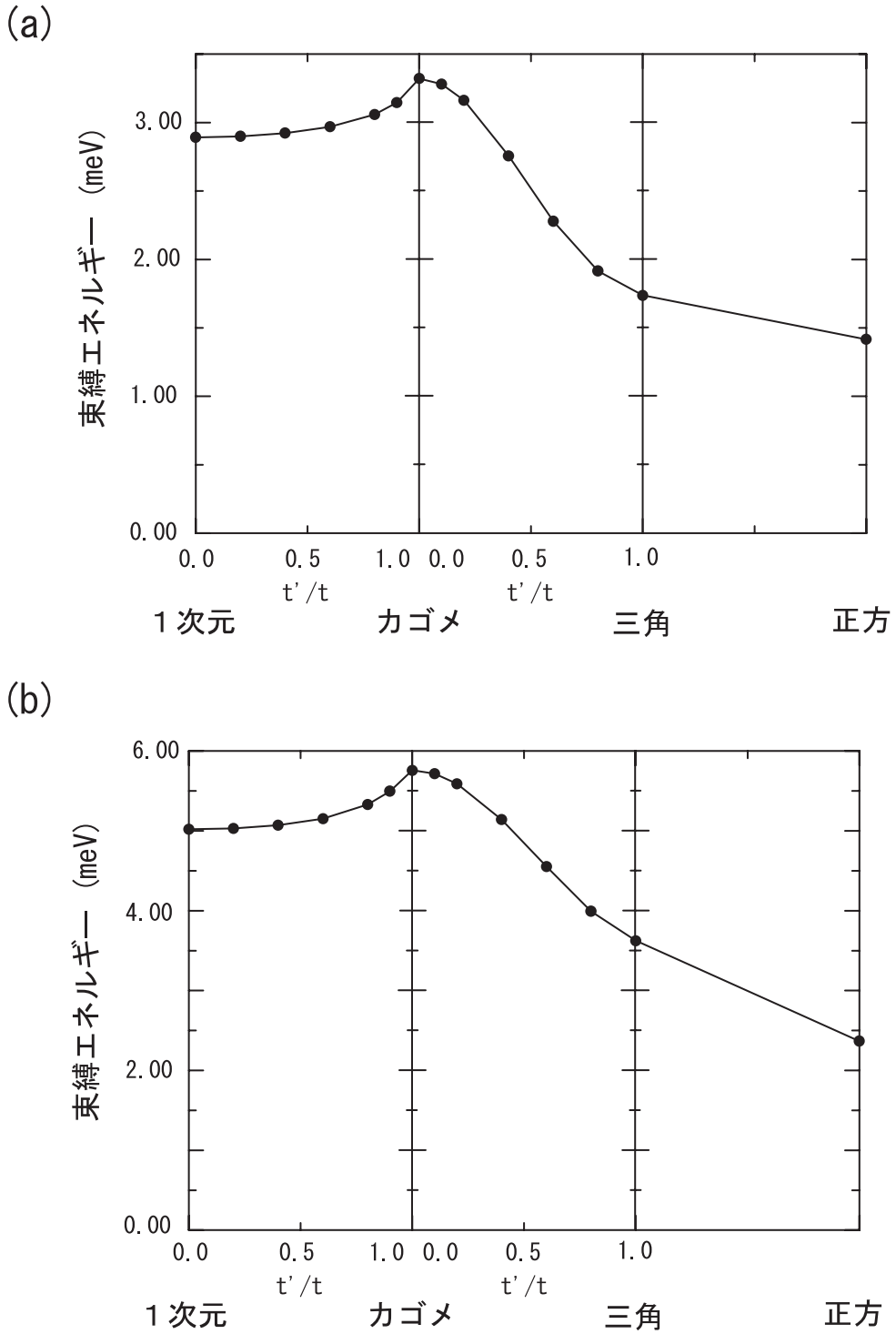

図 3.3: １次元格子、カゴメ格子、三角格子、正方格子の励起子の束縛エネルギー。(a) は $t = 1.67$meV、$U_0 = 4.18$meV、$U_1 = 0.75\,U_0$ の場合、(b) は $t = 1.67$meV、$U_0 = 8.08$meV、$U_1 = 0.45\,U_0$ の場合の励起子の束縛エネルギーの値である。

る結果を得た。カゴメ格子は２次元系であることを考えると、この結果は今までの励起子の束縛エネルギーの次元依存性の常識に入らないものである。図 3.3 によると、束縛エネルギーは、カゴメ格子から少しずれた格子、（即ち、t' の影響が多少入った格子）においても依然として大きな値を保っている。これは、例えば実験でつくられたカゴメ格子が多少歪んでいても、その格子に生じる励起子の束縛エネルギーは大きいことを示唆している。

図 3.3(a) と (b) の２つの場合において、各格子の励起子の束縛エネルギーに定性的な違いは見られない。そこで、以降の計算では最近接格子点間距離 a が 36nm のとき、電子またはホールの飛び移り積分の値は $t \equiv t^e = t^h = 1.67$meV、クーロン引力ポテンシャルは $U_0 = 4.18$meV、$U_1 = 0.75\,U_0$ の場合のみを考える。

3.2　格子定数と励起子の束縛エネルギーの関係

前節では、最近接格子点間距離 a が 36nm のときの各格子における励起子の束縛エネルギーを計算した。ここでは、最近接格子点間距離 a を変化させた時、各格子の励起子の束縛エネルギーが、どのように変化するか調べた。

最初に、電子とホールの飛び移り積分の値 $t\,(\equiv t^e = t^h)$ と最近接格子点間距離 a の関係を求める。正方格子内の電子、ホールの飛び移り積分を使って概算する。正方格子の伝導帯下端、または価電子帯上端のバンドの形は

$$E(\mathbf{k}) = -t\sqrt{4 + 2\cos k_x a + 2\cos k_y a + 4\sqrt{(1+\cos k_x a)(1+\cos k_y a)}} \tag{3.1}$$

である。$E(\mathbf{k})$ の最小値は Γ 点にあり、等方的である。そこで簡単のために、Γ 点の周りの、$k_x = k_y = \frac{k}{\sqrt{2}}$ が成り立つ方向を考える。このとき、

$$\begin{aligned} E(k) &\simeq -2t\sqrt{2 + 2\cos\left(\frac{ka}{\sqrt{2}}\right)} \\ &\simeq -2t\sqrt{4 - \frac{a^2k^2}{2}} \end{aligned} \tag{3.2}$$

となる。Γ 点での電子（ホール）の有効質量を m とすると、

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2}\cdot\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2}\bigg|_{k=0} \tag{3.3}$$

と書ける。式 (3.2) を (3.3) に代入して、計算すると、

$$t = \frac{2\hbar^2}{a^2 m} \propto \frac{1}{a^2} \tag{3.4}$$

が得られる。この式から、飛び移り積分 t は格子点間距離 a の２乗に反比例することが分かる。

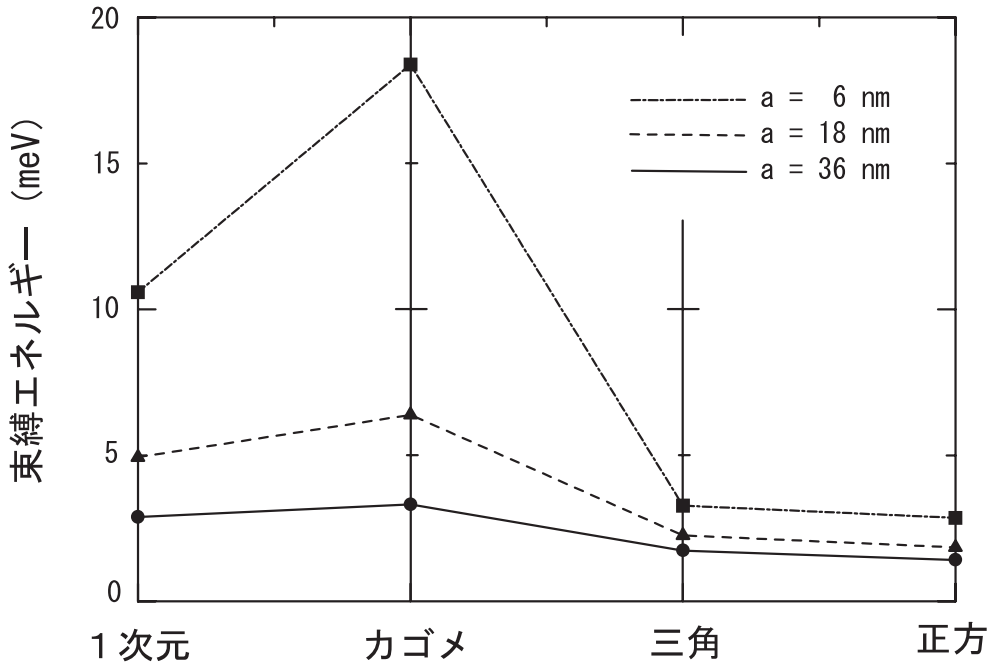

図 3.4: いろいろな最近接格子点間距離 a における三角格子、カゴメ格子、１次元格子、正方格子の励起子の束縛エネルギー。

また、オンサイトクーロン引力ポテンシャル U_0 と格子点間距離 a の関係は、式 (2.10) または、式 (2.21) から a に反比例することが分かる。

この関係を用いると、格子点間距離 a が 18nm のとき、飛び移り積分 t の値は

$$\begin{aligned} t &= \frac{1.67\text{meV}}{(18\text{nm}/36\text{nm})^2} \\ &= 6.68\text{meV} \end{aligned} \tag{3.5}$$

と求められる。そして、オンサイトクーロン引力 U_0 も同様に

$$\begin{aligned} U_0 &= \frac{4.18\text{meV}}{(18\text{nm}/36\text{nm})} \\ &= 8.36\text{meV} \end{aligned} \tag{3.6}$$

と求まる。格子点間距離 a が 6nm のときも、全く同様にして、$t = 60.12$meV、$U_0 = 25.08$meV が導かれる。このときの各格子の励起子の束縛エネルギーの計算結果を図 3.4 に示す。

この図から、格子点間距離 a が小さくなる程、励起子の束縛エネルギーは大きくなることが分かる。特に、$a = 6$nm になると他の格子に比べて、カゴメ格子の励起子の束縛エネルギーが急激に大きくなる。そのとき、カゴメ格子の励起子の束縛エネルギーは $a = 36$nm のときの約 6 倍で、20meV 近い値を示す。これは実験でも十分に確認できる束縛エネルギーの大きさである。

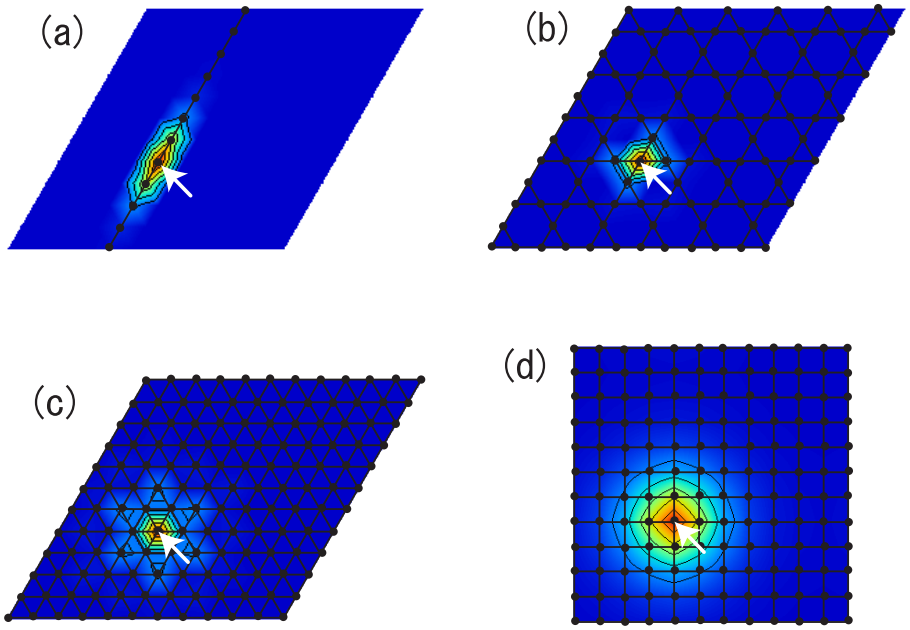

図 3.5: 三角格子、カゴメ格子、１次元格子、正方格子の励起子の波動関数。白い矢印が指す格子点に電子がいる時のホールの密度分布を表している。

3.3 励起子の半径

カゴメ格子のフラットバンドの状態は、完全に局在しているわけではない。この場合、フラットバンドに付随する励起子（以後、フラットバンド励起子と呼ぶ）はどのような広がりをもつのだろうか。ここでは、励起子の相対運動の波動関数を示し、その広がりを調べた。図 3.5 は、白い矢印で指定されたサイトに電子がいるときのホールの密度分布を描いたものである。但し、計算は、カゴメ格子のユニットセルを単位として周期境界条件を課した 6×6 の有限系について行った。三角格子を除いた格子では、電子上でホール密度が高い s 波的な関数をしている。一方、三角格子においては、電子上で密度が高いが、第１近接では低く、第２近接で再び大きくなっている。三角格子のバンド端は独立な２つの K 点であり、$k \neq 0$ の状態である。この２つの縮退した波動関数は、どちらも一様に電子が広がる状態ではなく、節を持つ状態である。そのために、三角格子のホールの密度分布は s 波的でなく、電子を中心に波打っていると考えられる。励起子の大きさを定量的に評価するために、上記のホールの密度分布を式

$$P_h(r) = P_0 e^{-\frac{r}{\xi}} \tag{3.7}$$

にフィッティングさせて、励起子の半径 ξ を数値的に求めた。ただし、r は電子 – ホール間の距離である。その結果を、表 3.1 に示す。

	1次元格子	カゴメ格子	三角格子	正方格子
半径 ξ（nm）	51	22	19	54

表 3.1: 1次元格子、カゴメ格子、三角格子、正方格子の各々に生じる励起子の半径 ξ の値。

ここで注目すべきは、三角格子の励起子のほうがカゴメ格子の励起子よりも小さいことである。前節の束縛エネルギーの結果は、カゴメ格子に生じる励起子はフラットバンドの存在のため、電子とホールの有効質量が非常に大きく、局在しやすいので束縛エネルギーが大きくなったと一見、解釈されがちである。しかし、ここでの励起子の拡がりについての結果は、フラットバンド励起子において、束縛エネルギーを大きくする原因として励起子の小ささ（空間局在性）だけでは説明ができないことを示唆している。

3.4 摂動計算による解析

フラットバンド励起子の束縛エネルギーが大きくなる起源をより詳しく調べるために、摂動論を用いて、正方格子とカゴメ格子に生じる励起子の束縛エネルギーを比較、考察する。系のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} t^e_{ij} \hat{a}^\dagger_i \hat{a}_j + \sum_{i,j} t^h_{ij} \hat{b}^\dagger_i \hat{b}_j + \sum_{i,j} U(r_{ij}) \hat{a}^\dagger_i \hat{a}_i \hat{b}^\dagger_j \hat{b}_j \tag{3.8}$$

であった。ここでは、電子とホールの運動エネルギーにあたる第1項と第2項を非摂動ハミルトニアン $H_0 = T_e + T_h$ とし、第3項を摂動ハミルトニアン V として摂動計算を行う。特に、簡単のためにクーロン引力は電子とホールが同じ格子点にいるときのみに働くと仮定する。即ち、

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} U & i = j \text{ のとき} \\ 0 & \text{それ以外のとき} \end{cases} \tag{3.9}$$

と近似する。また、励起子の広がりは小さいので、周期境界条件を課した 2×2 の有限系で、摂動計算を行う。

3.4.1 正方格子

まず最初に、電子またはホールのバンド状態が縮退をしていない、つまり、クーロン引力を考えない励起子の基底状態が縮退していない正方格子を考える。電子の運動エネルギー T_e の基底状態を $|\phi^{(e)}\rangle$ と書くと、その具体的な形は

$$|\phi^{(e)}\rangle = \sum_{i=\text{全ての格子点}} c_i |\chi_i\rangle \tag{3.10}$$

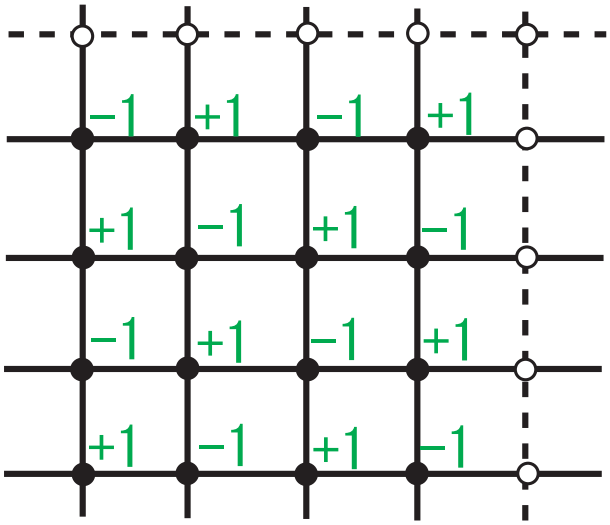

図 3.6: 正方格子の電子またはホールの基底状態。図内の数字は各格子点における振幅を表す。

となる。ここで $|\chi_i\rangle$ は i 番格子点に局在した規格直交軌道、c_i はその振幅を表す。実際に計算すると、$|\phi^{(e)}\rangle$ は図 3.6 に示すような振幅 c_i をもった関数である。ホールの運動エネルギー T_h の基底状態についても全く同じ振幅をもった関数になり、これを $|\phi^{(h)}\rangle$ と書く。すると非摂動ハミルトニアン H_0 の基底状態 $|\Psi^{(0)}\rangle\rangle$ は

$$|\Psi^{(0)}\rangle\rangle = |\phi^{(e)}\rangle|\phi^{(h)}\rangle \tag{3.11}$$

のように電子とホールの波動関数の直積で書ける。この時、エネルギー固有値に対する 1 次の摂動補正項 $E^{(1)}$ は摂動論の公式から

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle\langle\Psi^{(0)}|V|\Psi^{(0)}\rangle\rangle \\ &= -\frac{1}{16}U \end{aligned} \tag{3.12}$$

となる。したがって正方格子に生じる励起子の束縛エネルギー E_B は

$$E_B \equiv -E^{(1)} = \frac{1}{16}U \tag{3.13}$$

である。

この結果から分かるように、一般に H_0 の基底状態が縮退していない格子に生じる励起子の束縛エネルギーは、今の近似の範囲内では

$$E_B = \frac{1}{(\text{格子点の数})}U \tag{3.14}$$

と書ける。

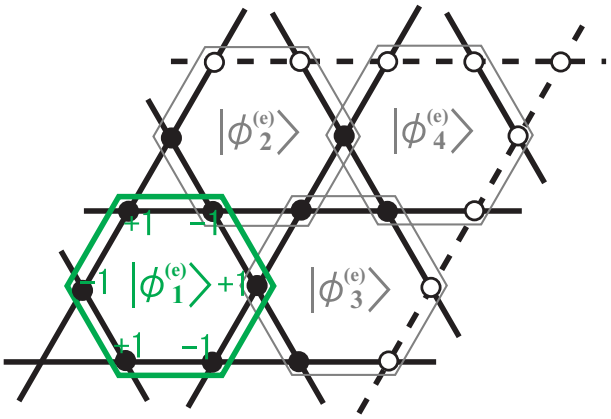

図 3.7: カゴメ格子のフラットバンド上の電子の非直交固有状態。ユニットセルの数だけ多重縮退している。格子点上の数字は固有関数 $|\phi_1^{(e)}\rangle$ の振幅を示す。

3.4.2 カゴメ格子

カゴメ格子内の電子の運動エネルギー T_e の基底固有状態は、1.2 節で示したように、ユニットセルの数だけ縮退している。図 3.7 のように、ユニットセル i に局在したこの固有状態を $|\phi_i^{(e)}\rangle$ と書く。今の場合、2×2 の有限系について考えているので縮退を表す指数 i は 1 から 4 までの整数値を取る。そして $|\phi_i^{(e)}\rangle$ の具体的な形は、式 (3.10) のように与えられ、その振幅の値は、図 3.7 に示したようになっている。$|\phi_1^{(e)}\rangle \sim |\phi_4^{(e)}\rangle$ は互いに非直交な局在固有状態である。ホールについても全く同様で、それらを $|\phi_j^{(h)}\rangle$ と書くと、非摂動ハミルトニアン H_0 の１６重縮退した基底状態は

$$|\Psi_{(i,j)}^{(0)}\rangle\rangle = |\phi_i^{(e)}\rangle|\phi_j^{(h)}\rangle \tag{3.15}$$

となる。全ハミルトニアン $\mathcal{H}$ の基底状態を、摂動の次数に従い、

$$|\Psi_\alpha\rangle\rangle = \sum_{\beta=1}^{16} a_\alpha^\beta |\Phi_\beta^{(0)}\rangle\rangle + |\Phi_\alpha^{(1)}\rangle\rangle + |\Phi_\alpha^{(2)}\rangle\rangle + \dots \tag{3.16}$$

とすると、付録Dに示した「重なりがあり、縮退のある摂動論の公式」から

$$\sum_{\beta=1}^{16} a_\alpha^\beta \langle\langle \Psi_\gamma^{(0)}|V|\Psi_\beta^{(0)}\rangle\rangle = E_\alpha^{(1)} \sum_{\beta=1}^{16} a_\alpha^\beta \langle\langle \Psi_\gamma^{(0)}|\Psi_\beta^{(0)}\rangle\rangle \qquad (\alpha = 1, 2, \cdots, 16) \tag{3.17}$$

の連立方程式を解けば、エネルギー固有値の１次の補正項が求まる。実際に式 (3.17) を行列で表すと、次式のようになる。

$$
\begin{aligned}
U \begin{bmatrix} -6 & 2\eta & 2\eta & \dots & -2\eta \\ 2\eta & -2 & 0 & \dots & 0 \\ 2\eta & 0 & -2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -2\eta & 0 & 0 & \dots & -6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^1 \\ a^2 \\ a^3 \\ \vdots \\ a^{16} \end{bmatrix} \\
= E^{(1)} \begin{bmatrix} 36 & -12\xi & -12\xi & \dots & 4\xi \\ -12\xi & 36 & -12\xi & \dots & 4\xi \\ -12\xi & -12\xi & 36 & \dots & 4\xi \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 4\xi & 4\xi & 4\xi & \dots & 36 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^1 \\ a^2 \\ a^3 \\ \vdots \\ a^{16} \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.18}
$$

但し、ここで、η、ξ はそれぞれ左辺、右辺の非対角項成分にかけたパラメータである。これらのパラメータは非対角項の効果を見易くするために導入したものであり、$\eta = \xi = 1$ のとき、正しい値を与える。η は、クーロン引力の非対角成分の効果を表している。一方、ξ は非摂動基底状態間の重なりを表している。例えば、パラメータ η、ξ を０とおくと、非対角項がゼロとなり、カゴメ格子はあたかも縮退が無くなったようにみることができる。式 (3.18) を解くと一番低い値を持つ $E_\alpha^{(1)}$ の値は

$$
E^{(1)} = \frac{-2(2 + 2\eta + \sqrt{1 + 2\eta + 13\eta^2})}{4(9 + 7\xi)} U \tag{3.19}
$$

となる。$\eta = \xi = 0$、つまり、縮退の効果を考えず、クーロン引力の対角項だけを考えた時には、１次の補正項は

$$
E^{(1)} = -\frac{2}{12} U \qquad (\eta = \xi = 0) \tag{3.20}
$$

となる。一般的な励起子の束縛エネルギーの式 (3.14) からは、カゴメ格子の束縛エネルギーは $\frac{1}{12}U$ となることが予想されるが、式 (3.20) から求められる束縛エネルギーの方が大きい。これはフラットバンドの固有状態がそもそも局在していた効果を表している。次に、$\eta = 0$、$\xi = 1$ とおくと、

$$
E^{(1)} = -\frac{1}{12} U \qquad (\eta = 0, \xi = 1) \tag{3.21}
$$

となり、束縛エネルギーは小さくなる。これは、基底が重なり合うと、状態は広がろうとしてクーロン引力を有効に使えなくなるためである。そして、$\eta = \xi = 1$ とすると、１次の補正項は

$$
E^{(1)} = -\frac{3}{12} U \qquad (\eta = \xi = 1) \tag{3.22}
$$

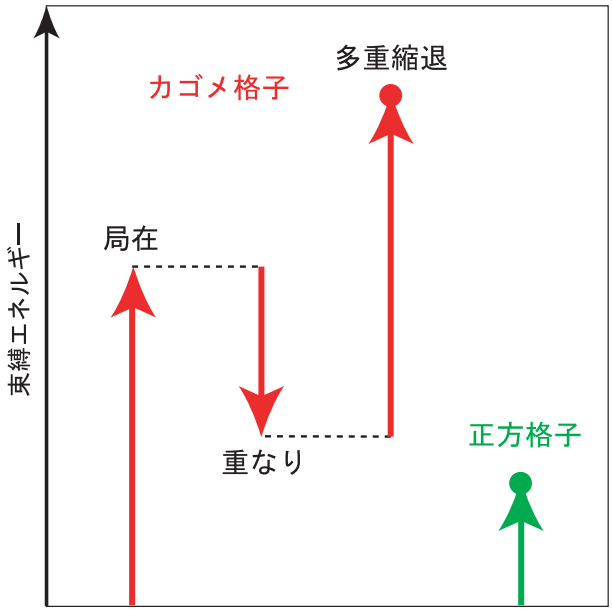

図 3.8: カゴメ格子の励起子の束縛エネルギーに寄与する３つの効果。局在性、非直交性（重なり）、多重縮退はいずれもフラットバンド状態を特徴付ける性質である。そして、この局在性と多重縮退がフラットバンド励起子の束縛エネルギーを大きくする。

と再び大きくなる。これは、縮退していたためにクーロン引力が増幅されたためと考えられる。式 (3.22) のカゴメ格子の励起子の束縛エネルギーは、式 (3.13) の正方格子の励起子の束縛エネルギーに比べて非常に大きくなる。以上の解析から、図 3.8 に示すように、フラットバンド励起子の束縛エネルギー E_B が大きくなる原因は、フラットバンドの固有状態がもつ局在性と多重縮退にあることが分かる。また、1.3 節で説明したように、強磁性のときに重要な働きをもっていたフラットバンドの非直交性は、励起子の束縛エネルギーに対しては、その値を小さくすることに働くことは興味深い。

3.5　田崎格子に生じる励起子

1.2 節に述べたように、フラットバンドをもつ格子は、カゴメ格子の他にも多数存在する。その中でも図 3.9 に示す田崎格子は特別である。田崎格子は正方格子の面心にも格子点を持ち、第１、第２近接の飛び移り積分が t であり、第３近接のそれが $t/2$ である格子である [10]。図 3.10 に田崎格子の電子のバンド構造を示す。ユニットセルには２つの格子点が含まれるため、２つのバンドが現れる。この図から分かるように田崎格子ではフラットバンドと他のバンドとの間にバンドギャップが存在する。

この田崎格子に対し、大きさ 12×12 の有限系を用意して、3.1 節と同様に周期

境界条件を課し、フラットバンド励起子の束縛エネルギーの計算を行った。

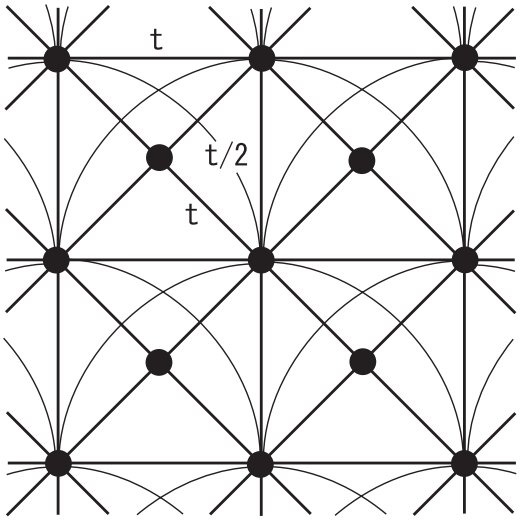

図 3.9: 田崎格子。

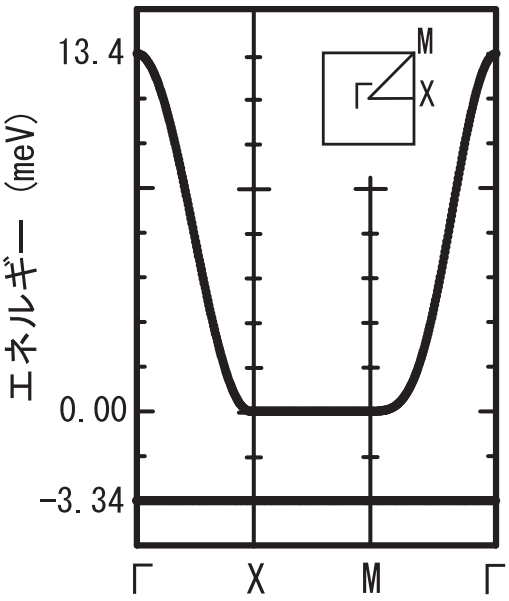

図 3.10: 田崎格子の伝導帯のバンド構造。挿入図は、２次元ブリルアンゾーン。

その計算結果を図 3.11 に示す。比較のため三角、カゴメ、１次元、正方格子の束縛エネルギーも描かれている。この図から、田崎格子に生じるフラットバンド励起子の束縛エネルギーは、カゴメ格子のそれよりもさらに大きくなることが分かる。これは、カゴメ格子と違って、田崎格子がエネルギーギャップを持つために、フラットバンドだけに付随した励起子が生じた、つまりフラットバンドの効果が、カゴメ格子より強く現れたためだと考えられる。田崎格子においては、更に顕著な特徴が見られる。即ち、田崎格子の励起子の束縛エネルギーは、オンサイトクーロン引力ポテンシャル U_0 よりも大きな値になっている。もし、励起子の空間局在性が極めて強く、電子とホールが同じ１格子点上のみに局在している場合、束縛エネルギーは最大の U_0 となる。しかし、図 3.12 に示すように田崎格子の励起子は、カゴメ格子より局在してはいるが、約第１近接までの広がりを持っている。故に、田崎格子のフラットバンド励起子の U_0 より大きな束縛エネルギーの原因は空間局在性だけでは説明ができず、多重縮退が重要な原因である事を意味する。

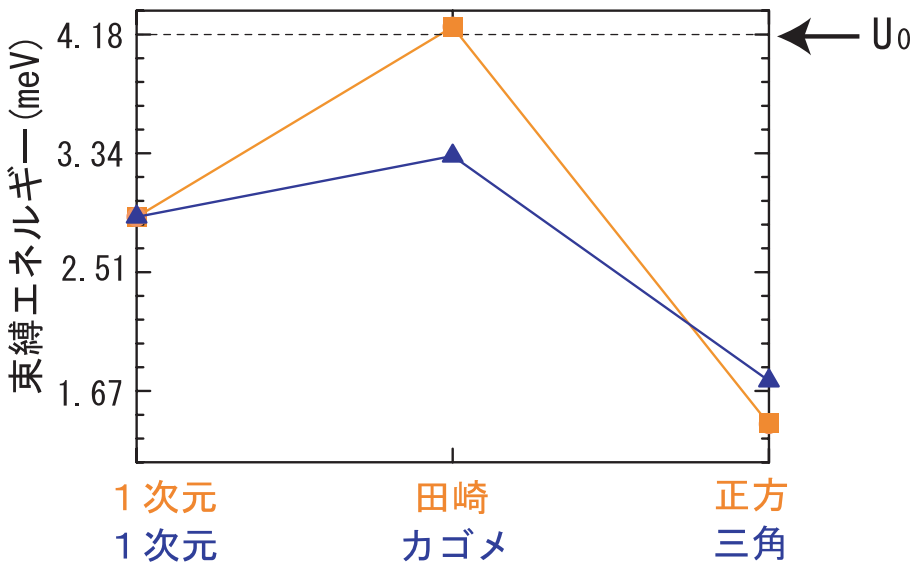

図 3.11: 田崎格子に生じる励起子の束縛エネルギー。束縛エネルギーはカゴメ格子より大きく、さらにオンサイトクーロン引力ポテンシャル U_0 よりも大きな値を持つ。

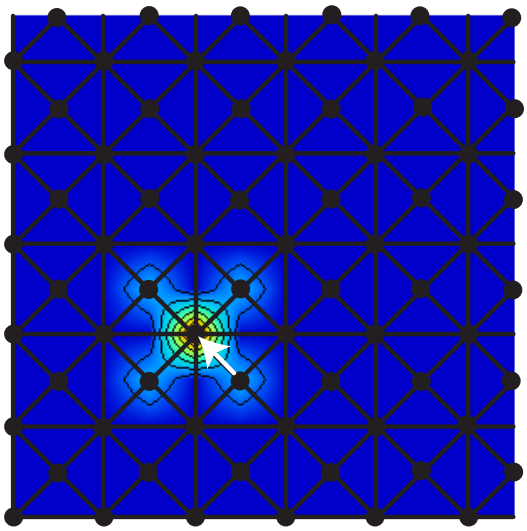

図 3.12: 6×6 の大きさの田崎格子に生じる励起子の相対運動の波動関数。白い矢印が指す格子点に電子がいるときのホールの密度分布を表している。

3.6　束縛エネルギーの磁場依存性

フラットバンドを持つ格子系に磁場をかけると、フラットバンドがエネルギー分散を持つようになる。ここでは、磁場の大きさと共に、カゴメ格子の励起子の束縛エネルギーがどのように変化するのかを調べる。

２次元格子の格子平面に垂直に磁場をかけると、タイトバインディングモデルでは飛び移り積分 t_{ij} が

$$t_{ij} \cdot exp\left[i\frac{2\pi e}{hc} \int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_j} \mathbf{A}\, d\mathbf{r} \right] \tag{3.23}$$

のように、磁場のベクトルポテンシャルに由来する位相因子の分だけ変化する [11]。ここで、e、h、c はそれぞれ電気素量、プランク定数、光速を表し、$\mathbf{A}$ は磁場のベクトルポテンシャル、$\mathbf{r}_i$ は格子点 i の座標である。磁場がかかっていない場合、図 3.13 の上図中央に示すように、カゴメ格子のフラットバンドは伝導帯の底、価電子帯の頂上に位置する。磁場をかけると、この位相因子によってフラットバンドは次第に分散を持ちながら、他のバンドと交差し合い、磁場の強さが１ユニットセルに磁束量子が４本入った 3.7T の時、図 3.13 の上図右に示すようにバンドは上下が逆転し、伝導帯では頂上に、価電子帯では底にフラットバンドが現れる。さらに、磁場を強めていくと、再びフラットバンドは分散を持ち、磁場の強さが 7.4T になると、磁場がかかっていない時と同じ状態に戻る。これを周期的に繰り返す。各々の磁場の強さに対し、カゴメ格子に周期境界条件を課して、9×9 の有限系で励起子の束縛エネルギーの計算を行った。但し、周期境界条件を課したので、計算に許される磁場の大きさは飛び飛びの値となる。その結果を図 3.13 に示す。図には、他の格子系についての結果も示してある。

１次元格子は磁場の影響を受けないので、束縛エネルギーは一定である。正方格子、三角格子の励起子の束縛エネルギーは、１次元格子のそれよりも小さな値の範囲で変化している。カゴメ格子に生じる励起子の束縛エネルギーは、磁場がかかっていない時は大きな値だが、磁場がかかると急激に減少し、他の２次元格子と変わらない程度の値になっている。ただし、図 3.13 に見るように、カゴメ格子の励起子の束縛エネルギーの増加が見られる磁場の範囲には幅がある。磁場がかかると、フラットバンドは分散を持ち、伝導帯の場合、その位置を他のバンドに比べて徐々に上昇させていくことを考えると、束縛エネルギーが大きくなるにはフラットバンドが伝導帯の底と価電子帯の頂上にあることが重要であることが分かる。ところで、本研究では、2.3 節に示したように、磁場のかかっていない時の格子点間の飛び移り積分 t を正に設定した。通常の量子細線系やドット列においては、t は負である。故に、量子細線を使った実験の場合は、むしろカゴメ格子に磁場を加えることにより励起子の束縛エネルギーの増加が見られることになる。

さらに、図 3.13 を眺めると、磁場の変化に伴って、各格子系の励起子の束縛エネルギーは、細かく変化している。これは図 3.14 から図 3.16 に示す各格子系における１電子スペクトルの磁場による変化に注目すれば説明できる。図の縦軸は、

電子の飛び移り積分の値を $t=1$ としたときの１電子のエネルギースペクトルを表し、横軸は磁場の強さを表す。これらの図はフラクタルな構造をもち、バタフライダイヤグラムと呼ばれている。励起子状態は、伝導帯下端と価電子帯上端の状態に強く依存する。そこで、各格子系における伝導帯下端（価電子帯上端）付近の状態数 $N(E_0)dE$ の磁場による変化を計算した。ただし、系の大きさは 9×9 の有限系で、状態数 $N(E_0)dE$ は、$t=1$ としたときの伝導帯下端から 0.1 のエネルギー幅内にある状態数とする。カゴメ格子、三角格子、正方格子の $N(E_0)dE$ の計算結果をそれぞれ図 3.17 $\sim$ 3.19 に示す。この結果と各格子系のバタフライダイヤグラムを比較すると、最低エネルギー準位の大きさが極大値をとるときに状態数 $N(E_0)dE$ も極大値をとっている。さらに、図 3.13 と図 3.17 $\sim$ 3.19 を比較すると、各格子系において、バンド端の状態数 $N(E_0)dE$ の磁場による増減と、励起子の束縛エネルギーの磁場による増減は全く同じであることが分かる。これより、磁場による励起子の束縛エネルギーの増減は、バンド端の状態数の増減、即ち、バンド端の縮退度の増減のためと考えられる。また、三角格子のバンド端の状態数 $N(E_0)dE$ は磁場の強さが約 ± 2.7T のとき、0T でのカゴメ格子の状態数 $N(E_0)dE$ ($\simeq$ フラットバンドの縮退度) よりも大きな値をとる。にもかかわらず、± 2.7T のときの三角格子における励起子の束縛エネルギーは、0T のときのカゴメ格子のそれよりも小さい。これは、カゴメ格子のフラットバンド状態が局在固有状態をもつためと考えられる。

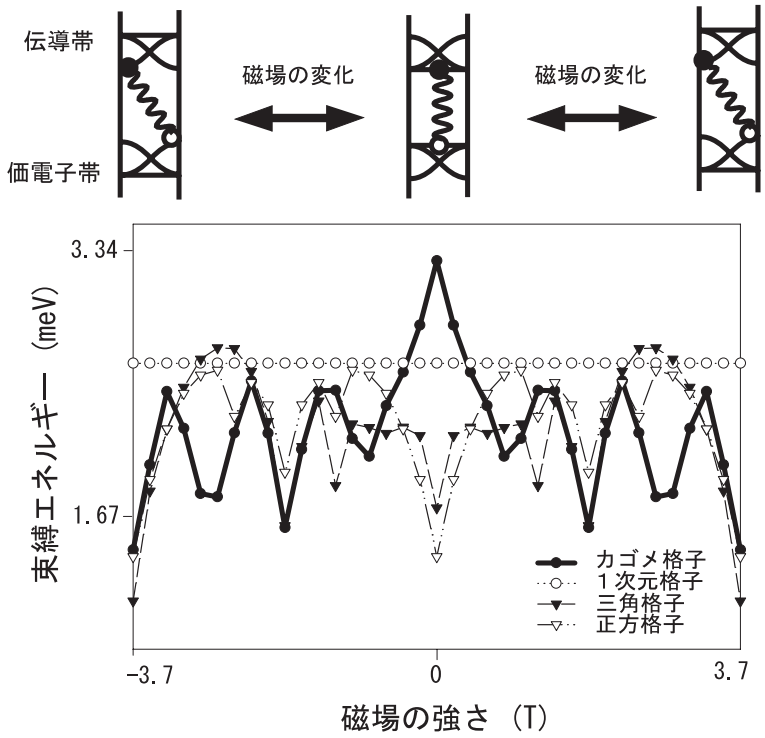

図 3.13: 様々な格子に生じる励起子の束縛エネルギーの磁場による変化。上部の挿入図は、左から順に磁場の強さが-3.7T、0T、3.7T の時のカゴメ格子のバンドの模式図である。

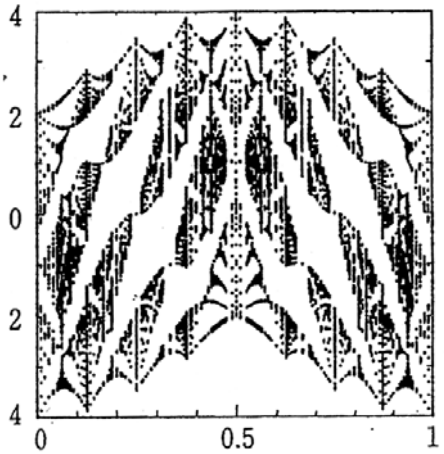

図 3.14: カゴメ格子のバタフライダイヤグラム。縦軸は電子の飛び移り積分 t の値を $t = 1$ とした時のカゴメ格子中の１電子のエネルギースペクトル。横軸の 0 ∼ 0.5 ∼ 1 は、磁場の強さ-3.7T ∼ 0T ∼ 3.7T に対応する。([6] より。)

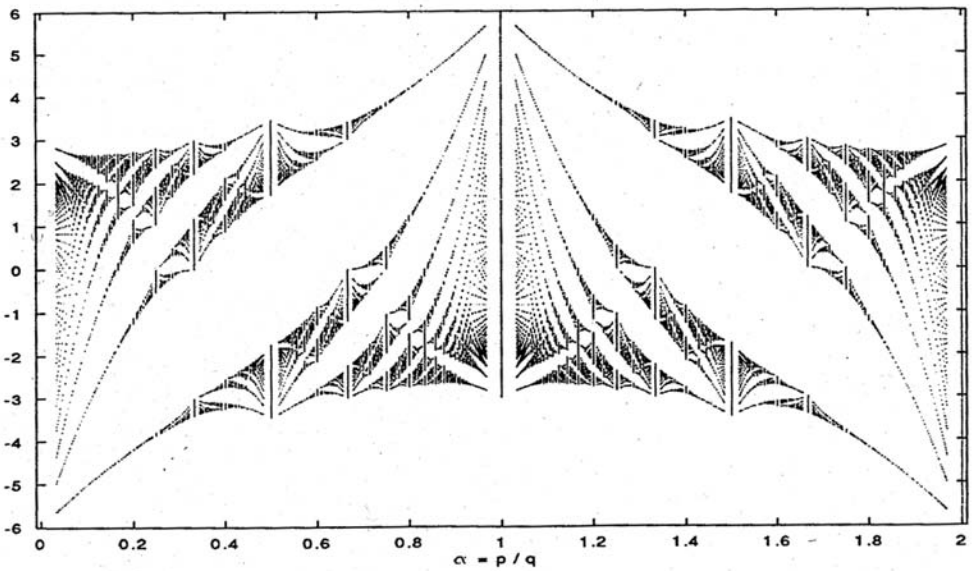

図 3.15: 三角格子のバタフライダイヤグラム。縦軸は電子の飛び移り積分 t の値を $t = 1$ とした時の三角格子中の 1 電子のエネルギースペクトル。横軸の 0 ∼ 1 ∼ 2 は、磁場の強さ-3.7T ∼ 0T ∼ 3.7T に対応する。([11] より。)

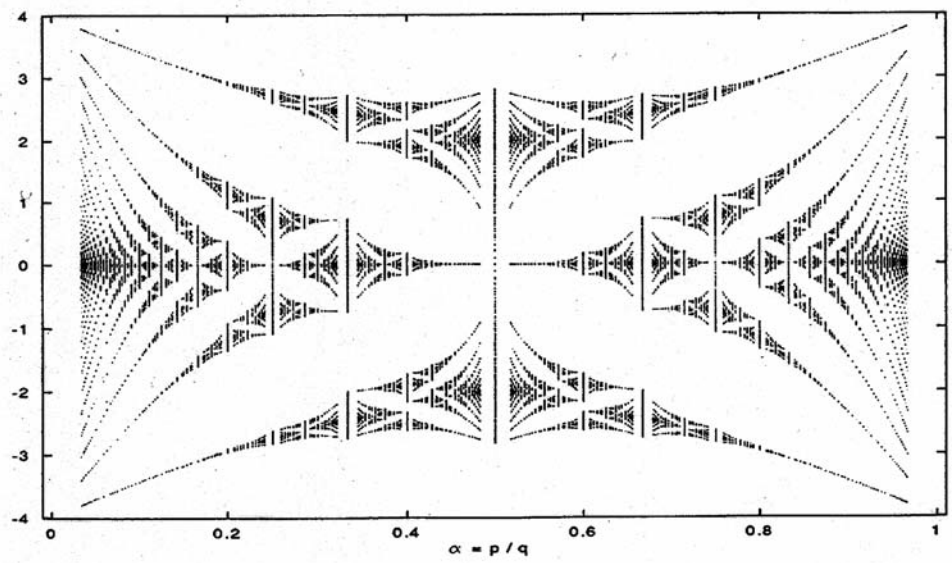

図 3.16: 正方格子のバタフライダイヤグラム。縦軸は電子の飛び移り積分 t の値を $t = 1$ とした時の正方格子中の 1 電子のエネルギースペクトル。横軸の 0 ∼ 1 が、磁場の強さ 0T ∼ 3.7T に対応する。([11] より。)

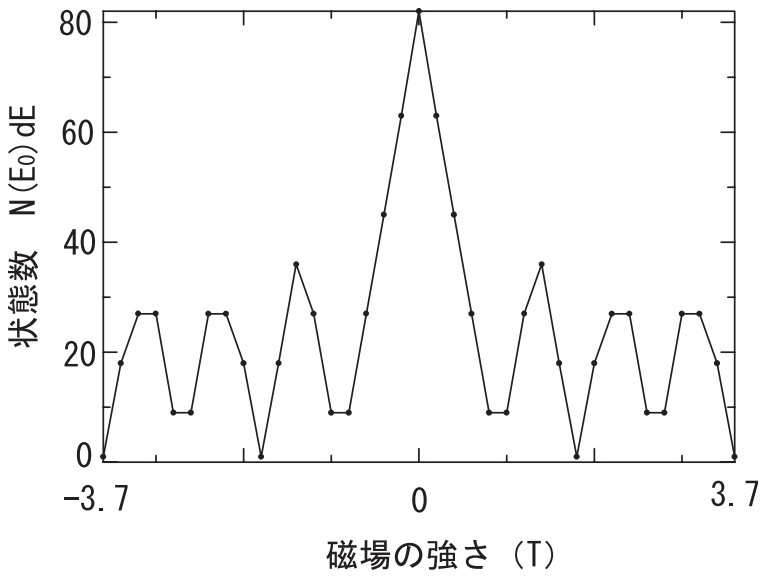

図 3.17: カゴメ格子の伝導帯下端（価電子帯上端）付近の状態数。

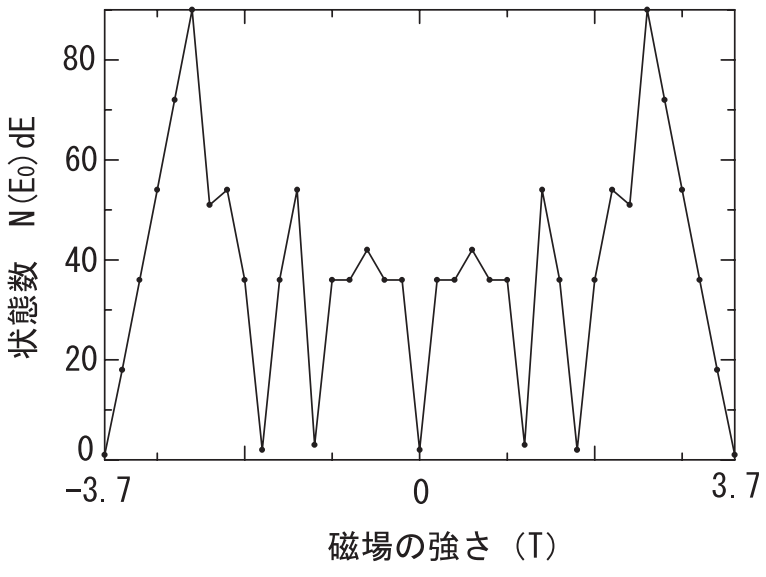

図 3.18: 三角格子の伝導帯下端（価電子帯上端）付近の状態数。

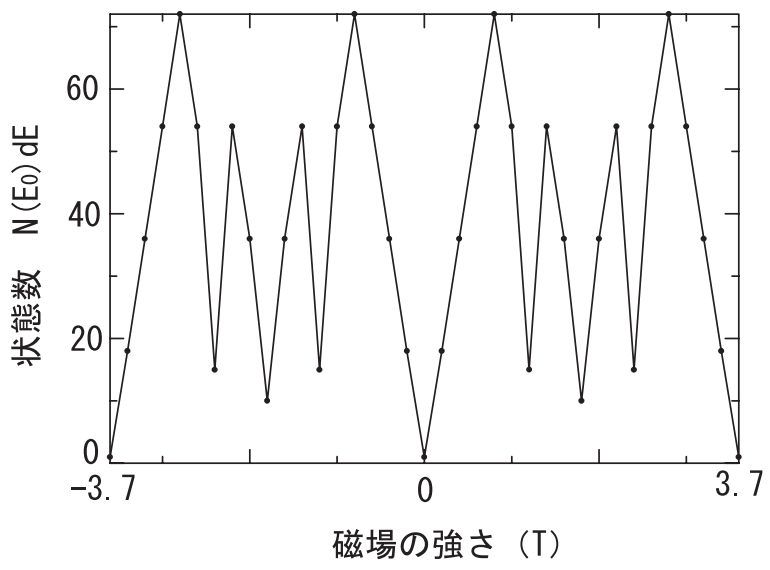

図 3.19: 正方格子の伝導帯下端（価電子帯上端）付近の状態数。

3.7　複合励起子の安定性

系に多数の励起子を励起し、励起子の高密度状態が実現されると、励起子同士が衝突する確率が増え、励起子は荷電励起子や励起子分子を形成することが知られている。ところで、3.3 節で、カゴメ格子に生じる励起子の半径は正方格子や１次元格子と比べると小さいことが分かった。この結果は、系に複数の励起子が励起されても、カゴメ格子の中では励起子同士の重なりが小さいままでよいので、励起子が高密度に存在できる可能性があることを意味する。そこで、本節ではカゴメ格子上の荷電励起子や励起子分子の安定性について、束縛エネルギーの観点から考える。

荷電励起子とは電子１個とホール２個の束縛状態で、励起子分子とは電子２個とホール２個によって生じる束縛状態である。計算においては、今までと同様に、電子とホールは互いに異なる種類のフェルミオンであると仮定し、電子とホールの間には引力、そして電子間、ホール間には斥力を取り入れる。また、電子またはホールが２個の時にはスピンを考え、パウリの原理による反対称化を行う (2.4 節参照)。荷電励起子の束縛エネルギーは荷電励起子を励起子１個と自由電子１個に分解するのに必要なエネルギー、励起子分子の束縛エネルギーは励起子分子を励起子２個に分解するのに必要なエネルギーと定義する。計算は周期境界条件を課した 3×3 の有限系について行った。

計算したこれらの複合励起子の束縛エネルギーを、表 3.2 に示す。一般に複合励起子は低スピン状態（荷電励起子では $S = \frac{1}{2}$、励起子分子では $S = 0$ の状態）ほど、波動関数の節の数が少ないためエネルギー的に安定な状態となっている。まず最初にこれらの低スピン状態に注目する。励起子の束縛エネルギーは正方、三角格子に比べてカゴメ格子に生じる励起子のものが一番大きい。一方、荷電励

	全スピン (S)	束縛エネルギー (meV)		
		正方格子	三角格子	カゴメ格子
励起子		1.82	2.02	3.35
荷電励起子	1/2	0.25	0.27	0.30
	3/2	-1.22	0.23	0.25
励起子分子	0	0.37	0.36	0.12
	1	-1.13	0.33	-0.11
	2	-2.09	0.31	0.01

表 3.2: 荷電励起子、励起子分子の束縛エネルギー

起子 ($S = \frac{1}{2}$) の束縛エネルギーにおいては正方、三角、カゴメ格子の差はあまり無い。そして励起子分子 ($S = 0$) になると、励起子のときとは逆に、カゴメ格子の束縛エネルギーが最も小さくなることが分かる。しかし、これらの結果の詳しい理由についてはまだ不明である。

次に、各格子におけるスピン状態の違いによる束縛エネルギーの大きさの違いに着目してみる。正方格子では荷電励起子と励起子分子の両方とも各スピン状態の束縛エネルギーの差は約 1meV あるが、三角格子とカゴメ格子ではその差はだいたい 0.1meV のオーダーと非常に小さいことが分かる。これは、正方格子、三角格子、カゴメ格子のバンド構造から説明できる。以下では励起子分子について考えるが、荷電励起子でも同様の議論が成り立つ。正方格子の場合、伝導バンドの底と価電子バンドの頂上は Γ 点にあり、第一ブリルアンゾーンの中に一つしかない。そのため、$S = 2$ 状態のときは伝導帯に 2 つある電子のうち、どちらか一方の電子は図 3.20(b) に示すように、より高いエネルギー準位に入らなければならない。価電子帯にあるホールについても同じことが言える。そのため、束縛エネルギーは、図 3.20(a) に示す $S = 0$ の状態よりも小さくなってしまう。一方、三角格子の場合、伝導バンドの底と価電子バンドの頂上は図 3.21 のように K 点にあり、独立な K 点は第一ブリルアンゾーンの中に 2 つ存在する。したがって、$S = 2$ 状態のときでも、2 つずつある電子とホールは高いエネルギー準位に入る必要はないため、$S = 0$ の状態と束縛エネルギーに差は無いのである。カゴメ格子の場合も全く同様のことが言える。しかし、カゴメ格子の場合、励起子分子の場合にだけ $S = 1$ と $S = 2$ の束縛エネルギーの大小関係が他と逆になっている。これもフラットバンドの特徴であると考えられるが、その理由は未だ明らかでない。

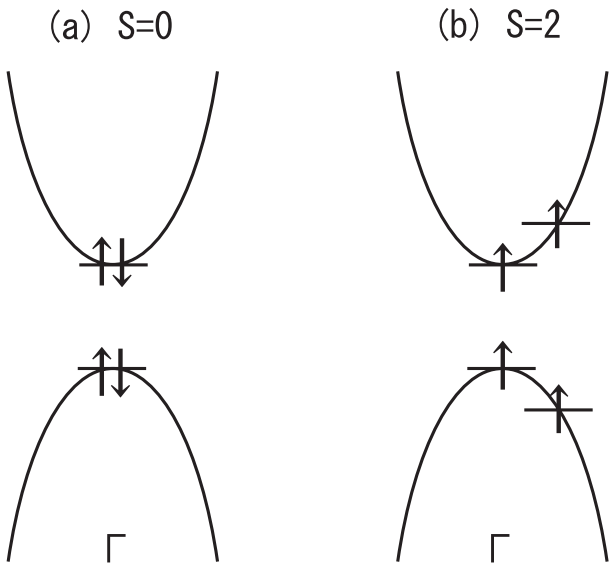

図 3.20: 正方格子に生じた励起子分子の (a)$S = 0$ 状態、(b)$S = 2$ 状態の電子、ホールの主な占有状況。

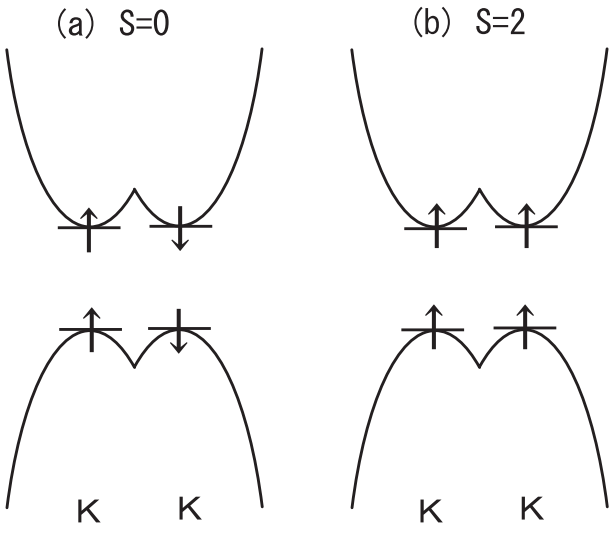

図 3.21: 三角格子に生じた励起子分子の (a)$S = 0$ 状態、(b)$S = 2$ 状態の電子、ホールの主な占有状況。

第4章　まとめと今後の課題

4.1　まとめ

本研究では、フラットバンドを持つカゴメ型量子細線系に生じる特異な電子・ホール状態がつくる励起子状態の束縛エネルギーや固有状態を、タイトバインディングモデルを用いて、有限系数値厳密対角化法により調べた。その結果、次に挙げるような特徴が明らかとなった。

(1) カゴメ格子に生じる励起子の束縛エネルギーは、他の２次元格子（正方、三角格子）だけでなく１次元格子の束縛エネルギーよりも大きくなる。この結果は、今までの励起子の束縛エネルギーと系の次元との関係の常識を打ち破るものである。また、カゴメ格子と同様にフラットバンドを持つ田崎格子に生じる励起子の束縛エネルギーはカゴメ格子よりも大きく、さらにオンサイトクーロン引力ポテンシャルよりも大きくなる。摂動論による解析を行い、フラットバンド励起子の束縛エネルギーが大きくなる原因は、フラットバンド状態の局在性と多重縮退にあることを明らかにした。

(2) ２次元カゴメ格子に垂直に磁場をかけると、フラットバンドに分散が発生し、励起子の束縛エネルギーは他の２次元格子と同程度の大きさまで急激に減少することが分かった。その原因は、フラットバンドの存在は格子ネットワーク上の電子（又はホール）状態の位相によるが、磁場がこの位相を壊すからである。この結果は、有限温度の実際の系においては、磁場により励起子の束縛エネルギー、つまり励起子の存在自身のコントロール（スイッチング）が出来ることが予想される。

(3) カゴメ格子に生じる励起子の半径は比較的小さいので、系が高励起されると高密度な励起子状態を生ずることが期待される。そこで、励起子に対する荷電励起子、励起子分子の安定性について調べた。その結果、カゴメ格子に生じる荷電励起子の束縛エネルギーの大きさは他の２次元格子と同程度であるが、励起子分子の束縛エネルギーは他の２次元格子と比較して非常に小さくなる、つまり高密度励起子でも励起子分子が形成されにくいことが分かった。その原因は未だ不明である。

4.2　今後の課題と展望

本研究では 3.2 節で、格子定数を小さくすれば、カゴメ格子の励起子（フラットバンド励起子）の束縛エネルギーは約 20meV にもなることが分かった。その際、飛び移り積分 t が最近接格子点間距離 a の 2 乗に反比例し、オンサイトクーロン引力ポテンシャル U_0 が a に反比例することを示した。しかし、実際には t と a、U_0 と a の関係はこれほど単純ではないと予想されるし、次最近接格子点間の電子、ホールの飛び移りによりフラットバンドが分散を持つ効果も考えなければならない。したがって、フラットバンド励起子の束縛エネルギーと格子定数の関係を議論するには、飛び移り積分 t、クーロン引力ポテンシャル U_0 と U_1 の値について、さらに考察する必要がある。

3.7 節では、各格子の複合励起子の束縛エネルギーを計算した。その結果、他の格子に比べて、カゴメ格子に励起子分子が形成されにくいことが分かった。しかし、その理由を明らかにすることが出来なかった。原因解明のためには複合励起子の波動関数の解析や、摂動計算を行ってさらに研究を続ける必要がある。

また、フラットバンドはエネルギー分散が無いために電子の群速度がゼロなので、カゴメ格子には電流が流れないと予想される。しかし、これはフラットバンドの固有状態が互いに重なりをもつ局在状態で、フラットバンド上の電子は格子内を動き回っているというフラットバンドの特徴に矛盾する。この観点から、カゴメ格子の電気伝導を調べることは、非常に興味深い課題である。さらに、カゴメ格子に磁場や光をあてたときの電気伝導も興味深い。

謝辞

修士論文を書くにあたり、多くの方々のお世話になりました。学部、修士を通して、日頃から熱心な指導、適切な助言をして下さった中山隆史教授に心から感謝いたします。また、私の些細な疑問にも、丁寧に分かりやすく教えて下さった井上純一先生にも心から感謝いたします。私の研究に興味を示し、議論にも参加して下さった夏目雄平教授にも深く感謝いたします。

同級生の小田将人さん、小林亮さん、藤田和志さんには、日常の生活だけでなく、一緒に旅行や富士登山などをして楽しく、充実した生活を送ることができました。ありがとうございました。そして、卒業生を含む中山研究室、夏目研究室の皆さんにも、ゼミでの議論、スポーツ、旅行、飲み会などを通して、大変お世話になりました。ありがとうございました。

最後に、陰になり日向になり支えて下さった父母、祖父母に感謝いたします。

付 録A　励起子の束縛エネルギーの次元依存性

A.1　Wannier 方程式

励起子状態とは電子とホールの束縛状態であり、各々の運動が連続空間で扱える場合、相対運動の運動方程式は水素原子と同じ式になる。この運動方程式は Wannier 方程式と呼ばれ、次のように表される [12]。

$$-\left(\frac{\hbar^2\nabla_r^2}{2m_r}+V(r)\right)\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r}) \tag{A.1}$$

ただし、m_r は電子とホールの換算質量。電子とホールの間に働くクーロン引力ポテンシャルは、系が３次元、２次元のとき

$$V(r)=\frac{e^2}{\epsilon_0 r} \tag{A.2}$$

であり、系が z 方向に伸びた準１次元（量子細線）のとき、

$$V(r)=V(z)=\frac{e^2}{\epsilon_0}\frac{1}{|z|+\gamma R} \tag{A.3}$$

となる。R は量子細線の半径であり、γ は通常 0.3 程度の値をとる。γ は、細線が太さを持っているために現れ、準１次元系では以下に見るようにクーロン力による発散が無いことを保障する。

今、２次元、３次元の場合、

$$\rho=r\alpha \tag{A.4}$$

と無次元量を定義すると、Wannier 方程式は

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m_r}\alpha^2\nabla_\rho^2+\frac{\alpha e^2}{\epsilon_0\rho}\right)\psi(\rho)=E\psi(\rho) \tag{A.5}$$

と書き直せる。ここで

$$\lambda\equiv\frac{2m_r e^2}{\epsilon_0\hbar^2\alpha}=\frac{2}{\alpha a_0} \tag{A.6}$$

$$a_0=\frac{\hbar^2\epsilon_0}{m_r e^2} \tag{A.7}$$

と置くと、Wannier 方程式は

$$\left(-\nabla_\rho^2 - \frac{\lambda}{\rho}\right)\psi(\rho) = \frac{2m_r E}{\hbar^2\alpha^2}\psi(\rho) \tag{A.8}$$

と変形できる。$E < 0$ のときは束縛状態、$E > 0$ のときは連続状態（イオン化状態）である。さらに、次の量を定義する。

$$a_0^2\alpha^2 \equiv -\frac{8m_r E}{\hbar^2}a_0^2 \equiv -4\frac{E}{E_0} \tag{A.9}$$

$$E_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2m_r a_0^2} = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_0} = \frac{e^4 m_r}{2\epsilon_0^2\hbar^2} \tag{A.10}$$

これらの量を用いて式 (A.8) を書き直すと、結局、３次元、２次元の場合の Wannier 方程式は次のようになる。

$$\left(-\nabla_\rho^2 - \frac{\lambda}{\rho}\right)\psi(\rho) = -\frac{1}{4}\psi(\rho) \tag{A.11}$$

$$\lambda = \frac{2}{\alpha a_0} = \sqrt{\frac{E_0}{-E}} \tag{A.12}$$

λ は束縛状態で実数、イオン化状態で純虚数となる。

一方、準１次元系では $\zeta = \alpha\left(|z|+\gamma R\right)$ と置いて同様の議論をすればよく、結局、式 (A.11) の ρ を ζ で置き換えればよい。

$$\left(-\nabla_\zeta^2 - \frac{\lambda}{\zeta}\right)\psi(\zeta) = -\frac{1}{4}\psi(\zeta) \tag{A.13}$$

各次元における Laplace 演算子は次のように書ける。

- ３次元

$$\nabla_\rho^2 = \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\rho^2} \tag{A.14}$$

- ２次元

$$\nabla_\rho^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{L}_z^2}{\rho^2} \tag{A.15}$$

- 準１次元

$$\nabla_\zeta^2 = \frac{\partial^2}{\partial\zeta^2} \tag{A.16}$$

ただし、$\hat{\mathbf{L}^2}$、$\hat{L_z}$ はそれぞれ全角運動量の大きさ、z 成分を表す演算子

$$\hat{\mathbf{L}^2} = -\left(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \tag{A.17}$$

$$\hat{L_z}^2 = -\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{A.18}$$

である。これらは固有値方程式

$$\hat{\mathbf{L}^2} Y_{lm}(\theta,\phi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{A.19}$$

$$\hat{L_z}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} = m\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \tag{A.20}$$

を満たす。ただし、$|m| \leq l$ となる。したがって、式 (A.11) と (A.13) を満たす波動関数 ψ はそれぞれ、

- 3 次元

$$\psi(\rho) = f_l(\rho)\, Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{A.21}$$

- 2 次元

$$\psi(\rho) = f_m(\rho)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\phi} \tag{A.22}$$

- 準 1 次元

$$\psi(\zeta) = f(\zeta) \tag{A.23}$$

と動径成分と角度成分の積の形に書くことができる。

式 (A.11) と (A.13) から各次元における動径成分の方程式は

- 3 次元

$$\left(\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) f_l(\rho) = 0 \tag{A.24}$$

- 2 次元

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{m^2}{\rho^2}\right) f_m(\rho) = 0 \tag{A.25}$$

- 準 1 次元

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2} + \frac{\lambda}{\zeta} - \frac{1}{4}\right) f(\zeta) = 0 \tag{A.26}$$

となる。

A.2 各次元における励起子の束縛エネルギー

電子とホールの間の距離が十分大きいとき方程式は

- 3 次元

$$\left(\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{4}\right) f_l(\rho) = 0 \tag{A.27}$$

- 2 次元

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{1}{4}\right)f_m(\rho)=0 \tag{A.28}$$

- 準 1 次元

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}-\frac{1}{4}\right)f(\zeta)=0 \tag{A.29}$$

という漸近形をとり、収束解は

- 3 次元

$$f_l(\rho\to\infty)=e^{-\frac{\rho}{2}} \tag{A.30}$$

- 2 次元

$$f_m(\rho\to\infty)=e^{-\frac{\rho}{2}} \tag{A.31}$$

と求められる。

次に電子とホールの間の距離が十分小さいときも同様に考えると、

- 3 次元

$$\left(\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)f_l(\rho)=0 \tag{A.32}$$

- 2 次元

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right)f_m(\rho)=0 \tag{A.33}$$

から解を

- 3 次元

$$f_l(\rho\to 0)=\rho^l \tag{A.34}$$

- 2 次元

$$f_m(\rho\to 0)=\rho^{|m|} \tag{A.35}$$

と書き表すことができる。これらの結果から各次元における一般解は

- 3 次元

$$f_l(\rho)=\rho^l\,e^{-\frac{\rho}{2}}R(\rho) \tag{A.36}$$

- 2 次元

$$f_m(\rho)=\rho^{|m|}\,e^{-\frac{\rho}{2}}\,R(\rho) \tag{A.37}$$

の形に置ける。これらの一般解を式 (A.24)、(A.25)、(A.26) にそれぞれ代入すると、関数 R の従うべき方程式は次のようになる。

- 3 次元

$$\rho\frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial\rho^2}+(2(l+1)-\rho)\frac{\partial R(\rho)}{\partial\rho}+(\lambda-l-1)R(\rho)=0 \tag{A.38}$$

- 2 次元

$$\rho\frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial\rho^2}+(2|m|+1-\rho)\frac{\partial R(\rho)}{\partial\rho}+(\lambda-|m|-\frac{1}{2})R(\rho)=0 \tag{A.39}$$

3 次元、2 次元系のとき、即ち式 (A.38) と (A.39) は次のように同じ形式にまとめることができる。

$$\rho\frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial\rho^2}+(p+1-\rho)\frac{\partial R(\rho)}{\partial\rho}+qR(\rho)=0 \tag{A.40}$$

$$p=\begin{cases}2l+1 & 3\text{次元}\\ 2|m| & 2\text{次元}\end{cases} \tag{A.41}$$

$$q=\begin{cases}\lambda-l-1 & 3\text{次元}\\ \lambda-|m|-\frac{1}{2} & 2\text{次元}\end{cases} \tag{A.42}$$

$R(\rho)$ を次式のようにべき級数展開して、式 (A.40) の解を求める。

$$R(\rho)=\sum_{\nu=0}^{\infty}\beta_\nu\rho^\nu \tag{A.43}$$

$\nu=0$ から始まるのは、$\rho=0$ で解が発散しないためである。式 (A.43) を式 (A.40) に代入すると、

$$\sum_{\nu=2}^{\infty}\beta_\nu\nu(\nu-1)\rho^{\nu-1}+(p+1)\sum_{\nu=1}^{\infty}\beta_\nu\nu\rho^{\nu-1}-\sum_{\nu=1}^{\infty}\beta_\nu\nu\rho^\nu+q\sum_{\nu=0}^{\infty}\beta_\nu\rho^\nu=0 \tag{A.44}$$

となる。この式で ρ^ν の係数について比較すると

$$\beta_{\nu+1}=\frac{\nu-q}{(\nu+1)(\nu+p+1)}\beta_\nu \tag{A.45}$$

という関係式が得られる。ν が大きいと、$\beta_{\nu+1}\sim\frac{1}{\nu}\beta_\nu$ となり、$R(\rho)\sim e^\rho$ の解を含むが、これは式 (A.36)、(A.37) を考えても $\rho=+\infty$ で発散してしまう。そこで、波動関数が規格化されるためには ν はある最大値を持たなくてはならない。即ち、ある整数 ν_{max} に対して、$\beta_{\nu>\nu_{max}}=0$ とならなくてはならない。この条件は式 (A.45) を使って

$$\beta_{\nu_{max}+1}=\frac{\nu_{max}-q}{(\nu_{max}+1)(\nu_{max}+p+1)}\beta_{\nu_{max}}\equiv 0 \tag{A.46}$$

のように表せるので、q は

$$\nu_{max}=q \tag{A.47}$$

を満たさなければならない。ここで主量子数 n をそれぞれ次のように定義する。

- 3 次元

$$n \equiv \lambda = \nu_{max} + l + 1 \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{A.48}$$

- 2 次元

$$n + \frac{1}{2} \equiv \lambda = \nu_{max} + |m| + \frac{1}{2} \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{A.49}$$

この時、励起子状態のエネルギー固有値は式 (A.12) から

- 3 次元

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{A.50}$$

- 2 次元

$$E_n = -\frac{E_0}{(n + \frac{1}{2})^2} \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{A.51}$$

と求まる。この式から励起子の束縛エネルギー E_B は

- 3 次元

$$E_B = E_0 \tag{A.52}$$

- 2 次元

$$E_B = 4E_0 \tag{A.53}$$

となることが分かる。但し、E_0 は式 (A.10) で与えられている。

続いて、準 1 次元系の励起子の束縛エネルギーについて考える。式 (A.26) は次の Whittaker 方程式

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} + \frac{\lambda}{\zeta} - \frac{1}{4} + \frac{\frac{1}{4} - \mu^2}{\zeta^2} \right) W_{\lambda,\mu}(\zeta) = 0 \tag{A.54}$$

で $\mu = +\frac{1}{2}$ としたものに等しい。$W_{\lambda,\mu}(\zeta)$ は Whittaker 関数で、この関数を使って固有関数 $f(|z|)$ は次のように書ける。

$$f(|z|) = N_\lambda \, W_{\lambda,\frac{1}{2}}(\frac{2(|z| + \gamma R)}{\lambda a_0}) \tag{A.55}$$

但し、N_λ は規格化定数である。$|z| \to +\infty$ で収束する Whittaker 関数は、積分表示で

$$W_{\lambda,\frac{1}{2}}(\zeta) = \frac{e^{-\frac{\zeta}{2}}}{\Gamma(1-\lambda)} \int_0^\infty dt \, e^{-t} (1 + \frac{\zeta}{t})^\lambda \tag{A.56}$$

と書けるので、その導関数は

$$\frac{dW_{\lambda,\frac{1}{2}}(\zeta)}{d\zeta} = \frac{e^{-\frac{\zeta}{2}}}{\Gamma(1-\lambda)} \int_0^\infty dt \, e^{-t} (1 + \frac{\zeta}{t})^\lambda (-\frac{1}{2} + \frac{\lambda}{\zeta + t}) \tag{A.57}$$

のように導かれる。基底状態は偶関数なので $z=0$ でこの導関数は０になる。つまり、

$$\int_0^\infty dt\, e^{-t}(-\frac{1}{2}+\frac{\lambda_0}{\zeta+t})=0 \tag{A.58}$$

ただし、λ_0 は基底状態のときの λ の値であることを意味する。この積分を実行すると、基底状態の固有エネルギーを決める関係式

$$\frac{1}{2}+\lambda_0 ln(\frac{2\gamma R}{\lambda_0 a_0})=0 \tag{A.59}$$

が求まる。今、とても細い量子細線を考えているので $R \ll 1$ が成り立つので、この式から $\lambda_0 \ll 1$ であることが分かる。また、準１次元系の励起子の基底状態の束縛エネルギーは、

$$E_B \simeq \frac{E_0}{\lambda_0^2} \tag{A.60}$$

となり、３次元系の励起子の束縛エネルギーよりもかなり大きな値になる。

付 録B　フラットバンドについて

現在までの研究によると、フラットバンドをもつ格子を大きく下の３種類に分けられている。ここでは、それぞれの型で何故フラットバンドが現れているのかについて説明する。 [13]。

- リープ型

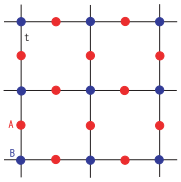

図 B.1: リープ格子。

- 田崎型

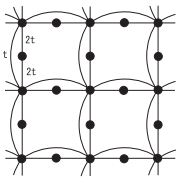

図 B.2: 田崎格子。

- ミールケ型

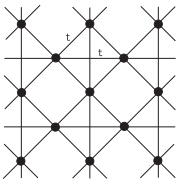

図 B.3: ミールケ格子。

B.1　リープ型

リープ模型は図 B.1 のように、A B副格子構造をとっているのでそのハミルトニアン $\mathcal{H}$ は一般に

$$\mathcal{H} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & T_{AB} \\ \hline T_{BA} & 0 \end{array}\right] \tag{B.1}$$

と書ける。ここで、T_{AB} は $|A|\times|B|$ 行列である。$|A|$、$|B|$ はそれぞれ A 副格子、B 副格子の格子点の数を意味し、$|A| > |B|$ とする。正方格子のような $|A|= |B|$ の格子にはフラットバンドは生じない。このハミルトニアン行列について行の入れ替えの操作を施すと、

$$\mathcal{H} = \left[\begin{array}{c|c} T_{BA} & 0 \\ \hline 0 & T_{AB} \end{array}\right] \tag{B.2}$$

となる。この形の行列から分かるように、行列 $\mathcal{H}$ の階数は高々$2|B|$ 程度であるので、$\mathcal{H}$ は少なくとも $(|A|+|B|) - 2|B|= (|A|-|B|)$ 個のゼロ固有値をもつ。例えば図 B.1 にある格子は 1 ユニットセルあたり $|A|= 2$、$|B|= 1$ なので N 個のユニットセルをもつとき、$(2-1)\times N = N$ 個の縮退したゼロ固有値が生じることが分かる。これがフラットバンドである。

ハミルトニアンの式 (B.1) からフラットバンド (縮退したゼロ固有値) の固有関数は

$$T_{AB}\mathbf{v} = \mathbf{0} \tag{B.3}$$

を満たせばよい。線形代数の知識からこのような $|A|$ 次元のベクトル $\mathbf{v}$ が $(|A|-|B|)$ 個存在することが示される。即ち、$(|A|+|B|)$ 次元のゼロ固有値の固有関数 ψ は

$$\psi = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{|A|} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{B.4}$$

という形をとる。これらの結果から副格子点の数のずれから生じているフラットバンドのゼロエネルギー状態は A 格子上にしか振幅を持たないことが分かる。よって、リープ模型のフラットバンドの固有関数は図 B.4 のような局在固有関数がとれる。この局在状態は各ユニットセルに存在し、さらに隣り合う局在状態は互いに重なりを持ち直交しないことも確認できる。図 B.5 は図 B.1 の格子の 1 電子バ

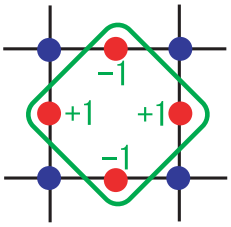

図 B.4: リープ模型のフラットバンドの固有関数。

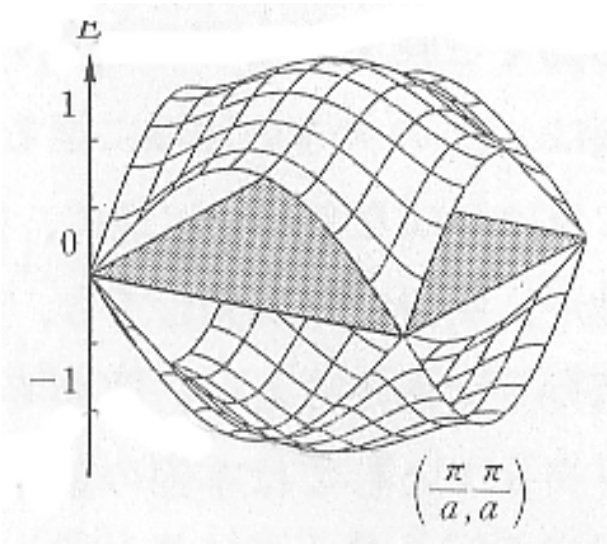

図 B.5: リープ模型のバンド構造。 [13] より。

ンド構造である。但し、格子点間の飛び移り積分の値 t は $t = 1$ とした。このリープ型のバンドは、常に $E = 0$ の位置にフラットバンドが現れるという特徴をもつ。

B.2　田崎型

B.1 節では、リープ型でのフラットバンドの固有状態はユニットセルの数だけ縮退した局在状態であることを説明した。一方、田崎型の模型は、単位となるセルに生じた局在固有状態がセルを連結していっても形を変えず局在固有状態であり続けることによってつくられるフラットバンドを持つ格子である。この模型では単位となるセルの選び方が重要で、完全グラフであるという特徴をもつ。完全グラフとは全ての格子点間にボンドをもつグラフのことで、（格子点の数 − 1）重に縮退したゼロ固有値と局在固有関数をもつという特徴がある。図 B.6 に示されているような三角単位セルが完全グラフの例である。この三角単位セルのハミルトニアンは飛び移り積分の値を 1、オンサイトエネルギーも 1 とすると次のよ

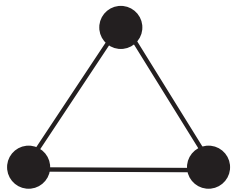

図 B.6: 三角単位セル。

うに表される。

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{B.5}$$

この固有値は $E = 0, 0, 3$ と 2 重縮退したゼロ固有値をとり、ゼロ固有値の固有状態は

$$\psi^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{B.6}$$

$$\psi^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{B.7}$$

のようにとることができる。田崎型の方法では波の干渉をうまく利用しながら、この節を持つ局在状態が形を変えずに固有状態であり続けるように単位セルを連結して格子を造って行く。以下に田崎型の格子をつくる手順を具体的に記す。

- 手順 1 . 単位となるセル (図 B.7) のハミルトニアンを

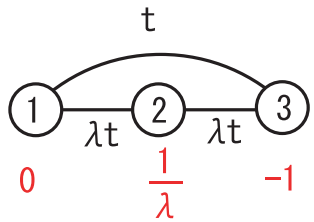

図 B.7: 拡張した三角単位セル。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{cell} &\equiv t(c_1^\dagger + \lambda c_2^\dagger + c_3^\dagger)(c_1 + \lambda c_2 + c_3) \\ &= t \begin{bmatrix} 1 & \lambda & 1 \\ \lambda & \lambda^2 & \lambda \\ 1 & \lambda & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{B.8}$$

と定義すると、縮退したゼロ固有値の固有状態 ψ_c は

$$(c_1 + \lambda c_2 + c_3)\psi_c = 0 \tag{B.9}$$

を満たせばよいので

$$\psi_c^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{\lambda} \\ -1 \end{bmatrix} \tag{B.10}$$

$$\psi_c^{(2)} = \begin{bmatrix} -1 \\ \frac{1}{\lambda} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{B.11}$$

と選ぶことができる。ただし、c_i は i 番格子点の粒子を消す消滅演算子。

- 手順２．２つの単位セルを、図 B.8 のように -1 の振幅をもつサイトが重なるように結合する。このときのハミルトニアン $\mathcal{H}_{2cell}$ は

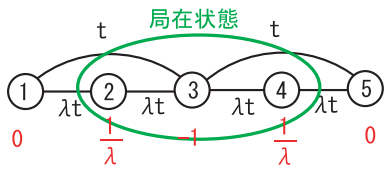

図 B.8: ２つの単位セルを連結した有限系。

$$\mathcal{H}_{2cell} = t \begin{bmatrix} 1 & \lambda & 1 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda^2 & \lambda & 0 & 0 \\ 1 & \lambda & 2 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda & \lambda^2 & \lambda \\ 0 & 0 & 1 & \lambda & 1 \end{bmatrix} \tag{B.12}$$

ここで、セルを結合することで作られたベクトル ψ_{2cell} は図 B.8 から分かるように

$$\psi_{2cell} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{\lambda} \\ -1 \\ \frac{1}{\lambda} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{B.13}$$

と書け、確かにハミルトニアン $\mathcal{H}_{2cell}$ のゼロ固有値の固有ベクトルになっていることがすぐに確かめられる。ψ_{2cell} は有限１次元格子において波動関数の両端の振幅がゼロとなる局在状態である。

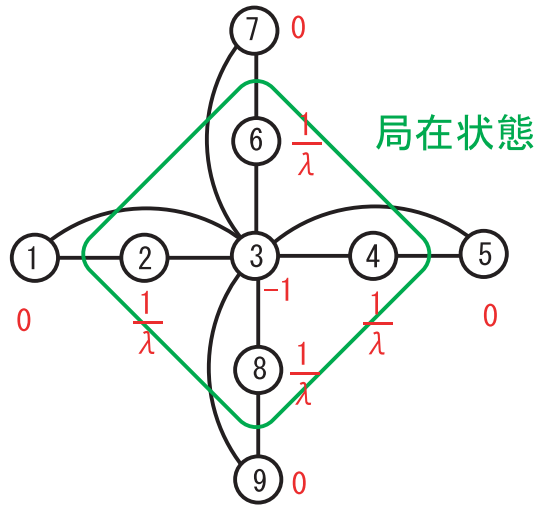

図 B.9: ４つの単位セルを連結した有限系。

- 手順３. 手順２の繰り返しを行えばよい。

  例えば、図 B.9 のように単位セルが４個つながった有限系のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}_{4cell} = t \begin{bmatrix} 1 & \lambda & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda^2 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \lambda & 4 & \lambda & 1 & \lambda & 1 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda & \lambda^2 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \lambda & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & \lambda^2 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \lambda & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda^2 & \lambda \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & 1 \end{bmatrix} \tag{B.14}$$

  であり、手順２と同様に連結によって求められたベクトル ψ_{4cell} は図 B.9 から

$$\psi_{4cell} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{\lambda} \\ -1 \\ \frac{1}{\lambda} \\ 0 \\ \frac{1}{\lambda} \\ 0 \\ \frac{1}{\lambda} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{B.15}$$

  となっていることが直ぐに分かる。また、このベクトル ψ_{4cell} が $\mathcal{H}_{4cell}$ のゼロ固有値の固有ベクトルであることも直ぐに確かめられる。手順２では有

限１次元格子における局在状態が生じていたが、ここでも有限２次元格子においてやはり、波動関数の全ての端の振幅がゼロであるような局在状態になっていることがわかる。

- 手順４. 振幅がゼロのサイト同士を結合する。

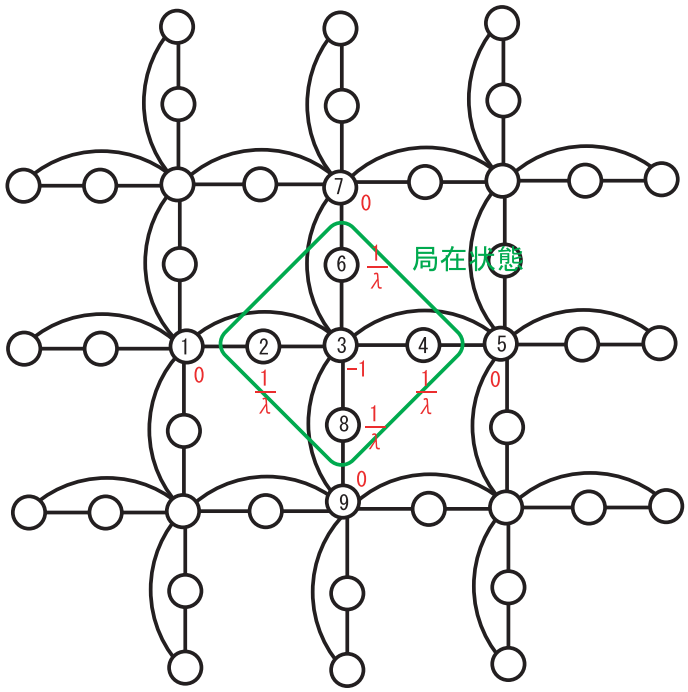

図 B.10: 多数連結された単位セル。中央に生じた局在固有状態はこれ以上セルを連結しても形は変わらない。

図 B.10 のように、手順３でできた有限格子の波動関数の振幅がゼロになっている端同士を何個結合させても手順３で生じた局在状態は全く形を変えず全ハミルトニアンのゼロ固有値の固有関数であり続けることが確認できる。そして、この局在固有状態は隣のユニットセルに広がる局在固有状態と重なりを持ち、リープ型と同様にフラットバンドの固有状態は多重縮退した非直交局在状態であることが分かる。図 B.11 は図 B.2 の格子の１電子バンド構造である。田崎型のバンド構造は一番底にできるフラットバンドと他のバンドとの間にエネルギーギャップをもつという特徴がある。

B.3　ミールケ型

ミールケ型のフラットバンドの存在は、グラフ理論 [14] を使って証明される。即ち、ＡＢ副格子におけるラングラフがもつ特徴の一つとして説明される。カゴメ格子もミールケ型に分類される。

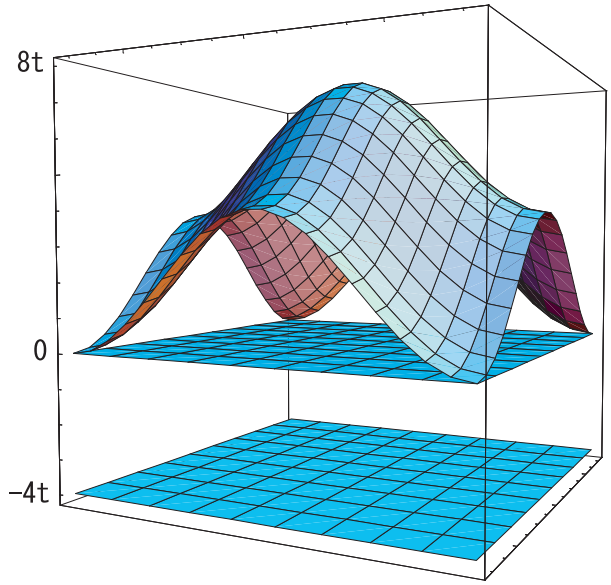

図 B.11: 図 B.2 の格子のバンド構造 ($\lambda = 2$ のとき)。$\lambda \neq 2$ では、$E = 0$ のフラットバンドがエネルギー分散をもつ。

B.3.1 グラフ理論の基礎 (使われる定義)

- グラフ $G(V, E)$

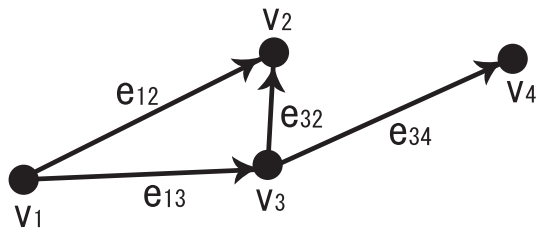

図 B.12: グラフ G の例

グラフは vertex(頂点) の集合 V とその頂点を結ぶ edge(辺) の集合 E で表される。i 番目の vertex を v_i、そして i 番目と j 番目の vertex を結ぶ edge を $e_{ij} = (v_i, v_j)$ と表すことにすると、図 B.12 のようなグラフ $G(V, E)$ は

$$V = \{v_1, v_2, v_3, v_4\} \tag{B.16}$$

$$\begin{aligned} E &= \{(v_1, v_2), (v_1, v_3), (v_3, v_2), (v_3, v_4)\} \\ &= \{e_{12}, e_{13}, e_{32}, e_{34}\} \end{aligned} \tag{B.17}$$

と書き表すことができる。１本の edge には２通りの向きを定義することができるが、その向きは適当に決めてよい。

また、ここで扱うグラフは２つの vertex の間が複数の edge で結ばれたり (multiple edges)、１つの vertex から伸びた edge が再び元の vertex に戻るような edge (loop) は考えない（図 B.13 参照）。

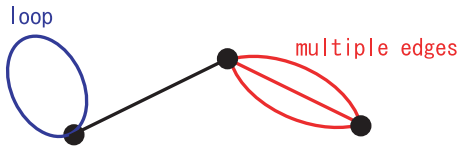

図 B.13: グラフとは呼ばない例

- 平面グラフ

  複数の edge が vertex でのみ交わっているグラフを平面グラフという。図 B.14 にあるようなグラフは、edge の交点が vertex では無いので平面グラフではない。

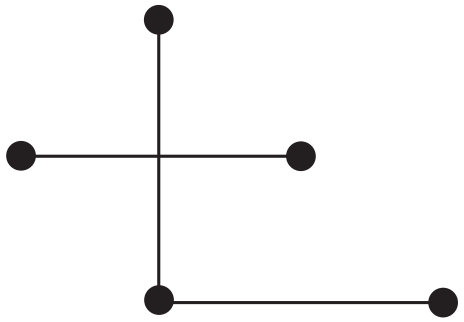

図 B.14: 平面グラフとは呼ばない例

- 正則なグラフ

  どの vertex も同じ次数 (最近接な vertex の数) をもつとき、このグラフを正則なグラフという。

- グラフ G の隣接行列 $A(G)$ と接続行列 $B(G)$

  隣接行列 $A(G)$ は次式で定義される $|V|\times|V|$ 行列である。

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & e_{ij} \in E(G) \\ 0 & e_{ij} \notin E(G) \end{cases} \tag{B.18}$$

ただし、$|V|$ は集合 V の位数、即ち vertex の数のことである。同様に $|E|$ は edge の数を意味する。

接続行列 $B(G)$ は

$$b_{ij} = \begin{cases} 1 & (v_i(\equiv i) \text{ が } e_{kl}(\equiv j) \text{ の始点であるとき。即ち } i = k \text{ のとき。}) \\ -1 & (v_i(\equiv i) \text{ が } e_{kl}(\equiv j) \text{ の終点であるとき。即ち } i = l \text{ のとき。}) \\ 0 & (\text{上記以外のとき}) \end{cases} \tag{B.19}$$

で定義される $|V|\times|E|$ 行列である。

B.3.2 ライングラフ

ライングラフの作り方

(1) $G(V, E)$ の edge の中点に新しい vertex v_L をつくる (図 B.15)。

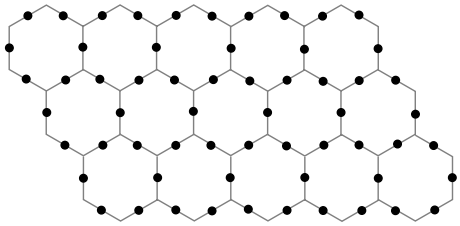

図 B.15: 六角格子 (G) と新しい vertex v_L

(2) 相異なる v_L が乗っている G の edge が一つの G の vertex で繋がっていたらその二つの v_L を新たな edge e_L で結ぶ (図 B.16)。この一連の操作によりできた新しいグラフを「G のライングラフ」と呼び、$L_G(V_L, E_L)$ と表す。

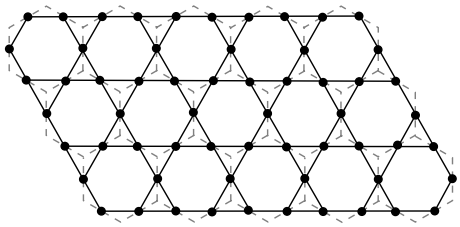

図 B.16: 点線が六角格子 (G) で実線がそのライングラフであるカゴメ格子 (L_G)。

図 B.15、B.16 は具体例として G に六角格子を選び、そのライングラフがカゴメ格子 L_G になることを示している。図 B.3 は正方格子のライングラフである。

B.3.3 グラフ理論から導かれる定理

(1) 定理１.

グラフ G が平面グラフであるとき

$$A(G) = D(G) - B(G) \cdot B(G)^t \tag{B.20}$$

が成り立つ [14]。ただし、$D(G)$ は

$$d_{ij} = \begin{cases} (\text{vertex} v_i \text{ の最近接 vertex 数}) & i = j \text{ のとき} \\ 0 & i \neq j \text{ のとき} \end{cases} \tag{B.21}$$

という行列なので、特に G が正則のときは、最近接 vertex 数を z、$I_{|V|}$ を $|V| \times |V|$ の単位行列とすると

$$D(G) = zI_{|V|} \tag{B.22}$$

のように更に簡単に書き直すことができる。したがって、式 (B.20) はグラフ G が正則のとき

$$A(G) = zI_{|V|} - B(G) \cdot B(G)^t \tag{B.23}$$

となる。

式 (B.20) の証明

$(BB^t)_{ij}$ は $\sum_{l=1}^{m} b_{il} b_{jl}$ であるので、$i = j$ ならばグラフ G の vertex v_i の最近接 vertex 数に等しく、(v_i, v_j) がグラフ G の edge になっているならば -1 に等しい。そして、(v_i, v_j) がグラフ G の edge ではなく、しかも $i \neq j$ ならば 0 に等しい。

(2) 定理２.

グラフ G が平面グラフで、かつ正則、そしてＡＢ副格子構造をとるとき、

$$A(L(G)) = B(G)^t \cdot B(G) - 2I_{|E|} \tag{B.24}$$

が成り立つ [3]。ただし、全ての edge の向きはＡ副格子からＢ副格子、またはＢ副格子からＡ副格子へ向かう向きのどちらかに統一する。

(3) 定理３.

グラフ G の接続行列 $B(G)$ は $|E|$ 次元空間を $|V|$ 次元空間へ写す線形写像であり、グラフ G 内の任意の閉路空間Ｃは $B(G)$ の核である。即ち、グラフ G 内の閉路空間Ｃを $\mathbf{z}_c$ とすると

$$B(G)\mathbf{z}_c = \mathbf{0} \tag{B.25}$$

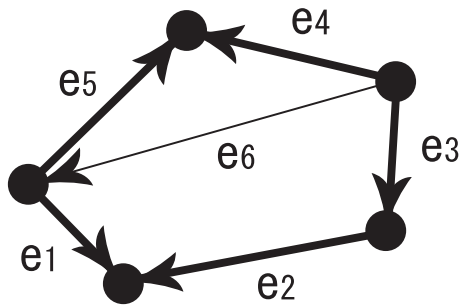

図 B.17: 閉路空間 $\mathbf{z}_c$ の具体例

が成り立つ [14]。

閉路空間 $\mathbf{z}_c$ の定義

閉路空間Cは向きを持っており、

$$\mathbf{z}_c = \begin{cases} 1 & e_i \in \text{閉路空間C} \quad \text{かつ} \quad \text{閉路空間Cと } e_i \text{ が同じ向きのとき} \\ -1 & e_i \in \text{閉路空間C} \quad \text{かつ} \quad \text{閉路空間Cと } e_i \text{ が逆向きのとき} \\ 0 & e_i \notin \text{閉路空間C} \end{cases} \tag{B.26}$$

と定義する。図 B.17 の例ではグラフ G における edge の集合 V は

$$V = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\} \tag{B.27}$$

とかけ、閉路空間 $\mathbf{z}_c$ を図中の太線で書かれた経路とし、その向きを反時計回りとすると前述の定義から

$$\mathbf{z}_c = \{\overset{e_1}{1}, \overset{e_2}{-1}, \overset{e_3}{-1}, \overset{e_4}{1}, \overset{e_5}{-1}, \overset{e_6}{0}\} \tag{B.28}$$

となる。

B.3.4 フラットバンドについて

本研究で扱ったタイトバインディングモデルでは 1 電子のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \tag{B.29}$$

と書くことができた。このハミルトニアンにおいて最近接格子点間の飛び移り積分 t を 1 とし、さらにグラフ G をタイトバインディングの格子とみなせば定義から明らかに $\mathcal{H}$ と $A(G)$ は等しい。

したがって、グラフ G として六角格子、そのライングラフ L_G としてカゴメ格子を考えると、カゴメ格子 (L_G) の固有状態は隣接行列 $A(L_G)$ を対角化すればよい。即ち、シュレーディンガー方程式は

$$A(L_G)\Psi^L_{|E|} = E_L\Psi^L_{|E|} \tag{B.30}$$

である。このシュレーディンガー方程式に式 (B.24) を代入すると、

$$B(G)^t \cdot B(G)\Psi^L_{|E|} - 2\Psi^L_{|E|} = E_L\Psi^L_{|E|} \tag{B.31}$$

となる。ここで、$\Psi^L_{|E|}$ として六角格子 (G) 内の閉路空間をとると式 (B.25) から

$$-2\Psi^L_{|E|} = E_L\Psi^L_{|E|} \tag{B.32}$$

となることが分かり、固有値が $E_L = -2$ でその固有ベクトル $\Psi^L_{|E|}$ は線形独立にとることのできる閉回路空間の数だけ存在 (縮退) することが分かる (図 B.18)。この縮退した固有値 $E = -2$ こそがフラットバンドに対応する。

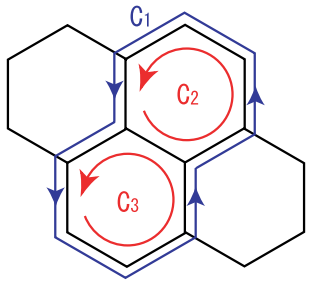

図 B.18: 閉路空間 C_1 は二つの独立な閉路空間 C_2 と C_3 に分けられる。

B.3.5 フラットバンドの固有状態について

六角格子の線形独立な閉路空間のひとつに図 B.3.5 のような経路があり、それは

$$\mathbf{z}_c = \{\overset{e_{12}}{0}, \overset{e_{14}}{0}, \overset{e_{16}}{0}, \overset{e_{32}}{+1}, \overset{e_{34}}{-1}, \overset{e_{38}}{0}, \overset{e_{52}}{-1}, \overset{e_{56}}{+1}, \overset{e_{58}}{0}, \overset{e_{74}}{+1}, \overset{e_{76}}{-1}, \overset{e_{78}}{0}\} \tag{B.33}$$

のように書ける。

六角格子の edge がカゴメ格子の vertex に対応しているので、上で求めた六角格子の閉路空間がカゴメ格子のフラットバンドの固有状態であることがわかる。つまり、

$$\Psi^L_{|E|} = \{\overset{e_{12}}{0}, \overset{e_{14}}{0}, \overset{e_{16}}{0}, \overset{e_{32}}{+1}, \overset{e_{34}}{-1}, \overset{e_{38}}{0}, \overset{e_{52}}{-1}, \overset{e_{56}}{+1}, \overset{e_{58}}{0}, \overset{e_{74}}{+1}, \overset{e_{76}}{-1}, \overset{e_{78}}{0}\} \tag{B.34}$$

これは、図 B.3.5 に示すような状態である。この局在固有状態もリープ、田崎型と同様にユニットセルの数だけ縮退した非直交な固有状態である。図 B.21(b) にカゴメ格子のバンド構造を示す。ミールケ型のフラットバンドは必ず $E = -2t$ にフラットバンドが現れる特徴をもつ。また、田崎型のようなエネルギーバンドギャップはない。

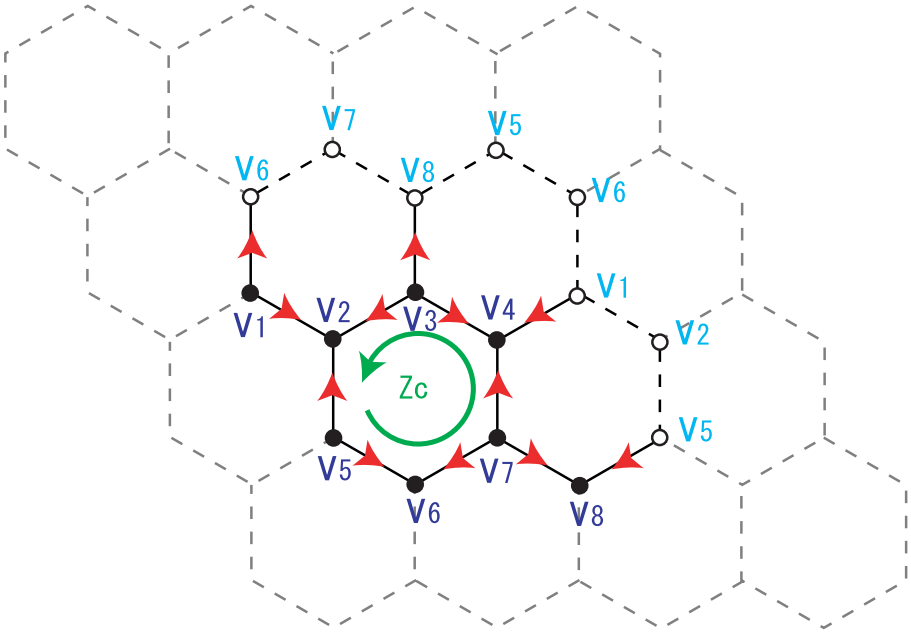

図 B.19: 六角格子の線形独立な閉路空間のひとつ。

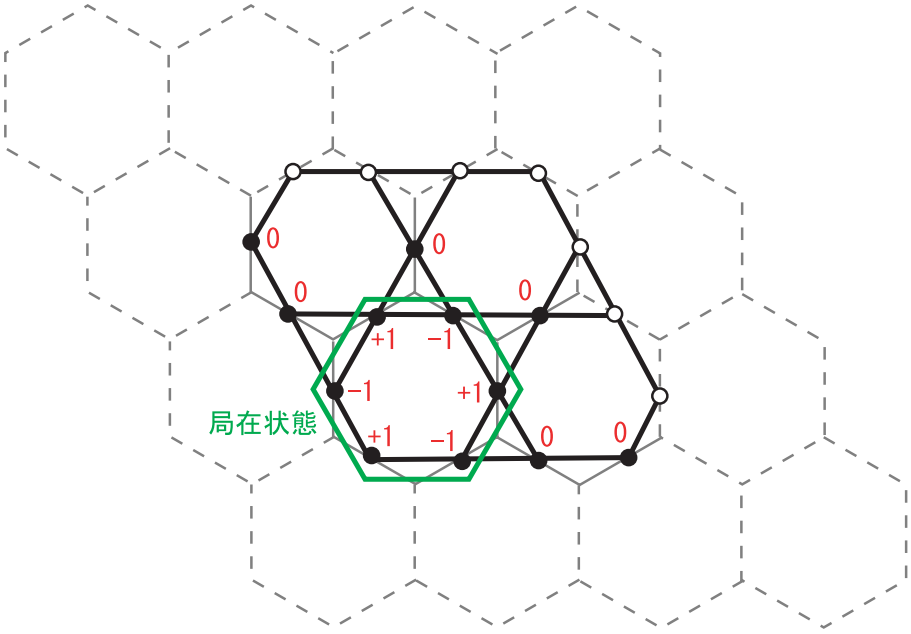

図 B.20: カゴメ格子の局在固有状態

B.3.6 フラットバンド以外のバンドについて

六角格子 (G) シュレーディンガー方程式は

$$A(G)\Psi^G_{|V|} = E_G\Psi^G_{|V|} \tag{B.35}$$

で、これに式 (B.23) を代入すると

$$z\Psi^G_{|V|} - B(G)\cdot B(G)^t\Psi^G_{|V|} = E_G\Psi^G_{|V|} \tag{B.36}$$

と書ける。一方、カゴメ格子 (L_G) のシュレーディンガー方程式は

$$B(G)^t\cdot B(G)\Psi^L_{|E|} - 2\Psi^L_{|E|} = E_L\Psi^L_{|E|} \tag{B.37}$$

と書けた。$B(G)^t\cdot B(G)$ のゼロ以外の固有値と $B(G)\cdot B(G)^t$ の固有値は等しいことが証明できるので、式 (B.36)、(B.37) から

$$E_L = z - 2 - E_G \tag{B.38}$$

今、グラフ G は副格子構造を仮定しているので G のバンド E_G は $E=0$ に対して対称となるため、結局、G と L_G のフラットバンド以外のバンドの間には次のような関係式が成り立つ。

$$E_L = z - 2 + E_G \tag{B.39}$$

図 B.21(a)(b) にはそれぞれ六角格子、カゴメ格子のバンド構造を示す。両者の比較から明らかなように、式 (B.39) が成立している。

B.4 まとめ

(1) リープ型

条件: ＡとＢの格子点数に差のあるＡＢ副格子構造。

特徴: ＡＢ副格子構造を持つ格子のバンドは $E=0$ について対称なので、必ず、$E=0$ にフラットバンドが出現する。

(2) 田崎型

条件: 完全グラフである単位セルの存在。

(3) ミールケ型

条件: 平面グラフで、かつＡＢ副格子構造である格子 (G) をライングラフ化した格子 (L_G)。

特徴: 必ず、$E=-2t$ にフラットバンドが出現。また、フラットバンド以外の L_G のバンドは G のバンドと同じ形をもつ。

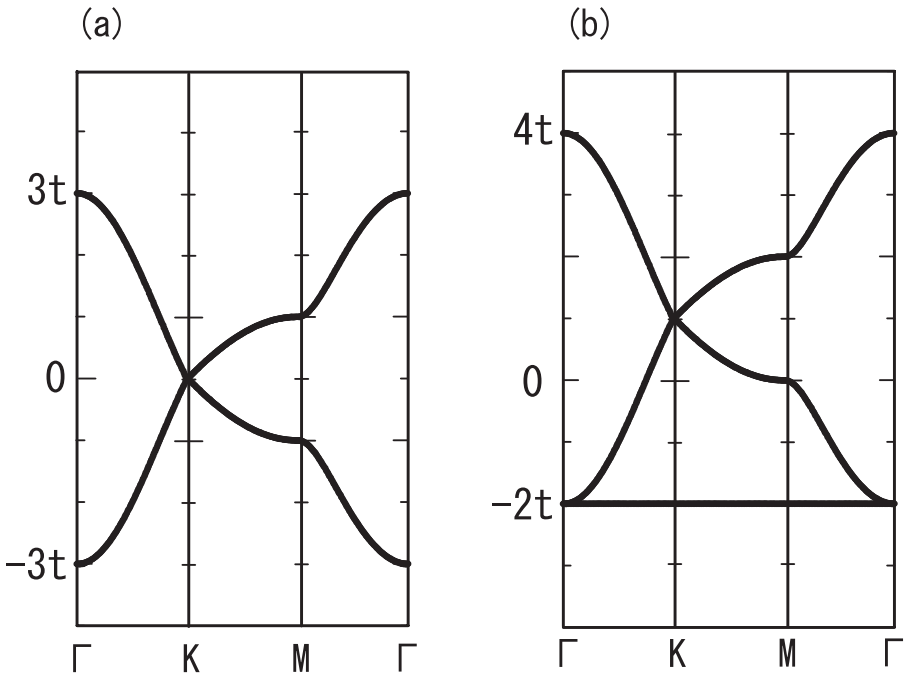

図 B.21: (a) 六角格子と (b) カゴメ格子のバンド構造

付 録C　ランチョス法

励起子の固有状態を計算する際、本研究で扱うハミルトニアンは実対称な大規模疎行列なので、このような行列の三重対角化に有効なランチョス法を使用した。

C.1　ランチョス法の原理

対角化したい実対称行列 H を、

$$H = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} & \dots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} & \dots & h_{2n} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & h_{34} & \dots & h_{3n} \\ h_{41} & h_{42} & h_{43} & h_{44} & \dots & h_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & h_{n3} & h_{n4} & \dots & h_{nn} \end{bmatrix} \tag{C.1}$$

と書き、これと相似な三重対角行列 T を、

$$T = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ 0 & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix} \tag{C.2}$$

と置くと、行列 T と H の間には次のような関係式が成り立つための直交行列 Q が必ず存在する。

$$T = Q^{-1} H Q \tag{C.3}$$

式 (C.3) は

$$H \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \dots & \mathbf{q}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \dots & \mathbf{q}_n \end{bmatrix} T \tag{C.4}$$

とも書ける。ただし、$\mathbf{q}_k$ は直交行列 Q の第 k 列を表す列ベクトルである。上式の両辺を各列ごとに比較すると

$$
\begin{aligned}
H\mathbf{q}_1 &= \alpha_1\mathbf{q}_1 + \beta_1\mathbf{q}_2 \\
H\mathbf{q}_2 &= \beta_1\mathbf{q}_1 + \alpha_2\mathbf{q}_2 + \beta_2\mathbf{q}_3 \\
&\vdots \\
H\mathbf{q}_k &= \beta_{k-1}\mathbf{q}_{k-1} + \alpha_k\mathbf{q}_k + \beta_k\mathbf{q}_{k+1} \\
&\vdots \\
H\mathbf{q}_n &= \beta_{n-1}\mathbf{q}_{n-1} + \alpha_n\mathbf{q}_n
\end{aligned}
\tag{C.5}
$$

という関係式が得られる。式 (C.5) の左から $\mathbf{q}_k$ をかけると、規格直交条件

$$(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_k) = 1 \tag{C.6}$$

$$(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) = 0 \tag{C.7}$$

$$(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k-1}) = 0 \tag{C.8}$$

から α_k は次のように書ける。

$$\alpha_k = (\mathbf{q}_k, H\mathbf{q}_k) \qquad k = 1, 2, \ldots, n \tag{C.9}$$

ただし、(,) は内積を表す。また、式 (C.5) から

$$\beta_k\mathbf{q}_{k+1} = H\mathbf{q}_k - \beta_{k-1}\mathbf{q}_{k-1} - \alpha_k\mathbf{q}_k \tag{C.10}$$

と移項することができ、ここで、

$$\mathbf{r}_k \equiv H\mathbf{q}_k - \beta_{k-1}\mathbf{q}_{k-1} - \alpha_k\mathbf{q}_k \qquad k = 1, 2, \ldots, n-1 \tag{C.11}$$

$$\beta_0 \equiv 0 \tag{C.12}$$

と置いて両辺を 2 乗すると

$$\beta_k^2(\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{q}_{k+1}) = (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) \tag{C.13}$$

となる。この式から結局 β_k は

$$\beta_k = \sqrt{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)} \qquad k = 1, 2, \ldots, n-1 \tag{C.14}$$

となり、式 (C.10) と (C.14) より、$\mathbf{q}_{k+1}$ が

$$\mathbf{q}_{k+1} = \frac{\mathbf{r}_k}{\beta_k} = \frac{\mathbf{r}_k}{\sqrt{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}} \tag{C.15}$$

と求まる。

実際に計算を行う際のランチョス法の流れは、規格化された任意の初期ベクトル $\mathbf{q}_1$ を設定し、式 (C.9) により α_1 を求める。α_1 が求まると式 (C.11)、(C.12) より $\mathbf{r}_1$ を決定することができるため、(C.14) 式から β_1 が求まる。従って、$\mathbf{q}_2$ が式 (C.15) より求められ、再び式 (C.9) から α_2 を求めることができる。これを n 回繰り返せば求めたい三重対角行列 T の全ての非零行列要素 α_k、β_k を求めることができる。

C.2　大規模疎行列に対するランチョス法

大規模行列の固有値問題では、その固有値、固有ベクトルがすべて必要となることは稀で普通は小さい方、あるいは大きい方から数個の固有値（両端に近い固有値)、固有ベクトルを求めれば良い。大規模行列に対してランチョス法が優れている点はこの方法による三重対角化を途中で打ち切った小さな三重対角行列 T_m の固有値が H の固有値の良い近似になっているという点である。

今、ランチョス法による三重対角化を第 m 段で打ち切ったとすると、得られるのは $m \times m$ の三重対角行列 T_m

$$T_m = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{m-2} & \alpha_{m-1} & \beta_{m-1} \\ 0 & & & & \beta_{m-1} & \alpha_m \end{bmatrix} \tag{C.16}$$

と m 個の n 次元縦ベクトル $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_m$ からなる $n \times m$ の行列 Q_m

$$Q_m = [\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_m] \tag{C.17}$$

である。これらを用いると、行列 H と行列 T_m の関係は

$$HQ_m = Q_m T_m + \beta_m \mathbf{q}_{m+1} \mathbf{e}_m^T \tag{C.18}$$

となることが分かる。ただし、$\mathbf{e}_m^T$ は m 次の単位ベクトルで、

$$\mathbf{e}_m^T = (0, 0, \ldots, 0, 1) \tag{C.19}$$

と定義される。式 (C.18) の右辺第 2 項は第 m 列が $\beta_m \mathbf{q}_{m+1}$ で他は全て 0 であるような $n \times m$ 行列である。即ち、この右辺第 2 項は式 (C.5) で $k = m$ としたときに

$$H\mathbf{q}_m = \beta_{m-1}\mathbf{q}_{m-1} + \alpha_m \mathbf{q}_m + \beta_m \mathbf{q}_{m+1} \tag{C.20}$$

ではみ出した右辺第 3 項に対応する。

第 m 段で打ち切った三重対角行列 T_m の固有値問題

$$T_m \tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\lambda} \tilde{\mathbf{y}} \tag{C.21}$$

を解いて得られる固有ベクトル $\tilde{\mathbf{y}}$ を式 (C.18) の右からかけた式は次のように変形される。

$$HQ_m \tilde{\mathbf{y}} = Q_m T_m \tilde{\mathbf{y}} + \beta_m \mathbf{q}_{m+1} \mathbf{e}_m^T \tilde{\mathbf{y}} \tag{C.22}$$

ここで、

$$\tilde{\mathbf{x}} = Q_m \tilde{\mathbf{y}} \tag{C.23}$$

を定義すると

$$
\begin{aligned}
H\tilde{\mathbf{x}} &= \tilde{\lambda} Q_m \tilde{\mathbf{y}} + \beta_m \mathbf{q}_{m+1} \tilde{y}_m \\
&= \tilde{\lambda} \tilde{\mathbf{x}} + \beta_m \tilde{y}_m \mathbf{q}_{m+1}
\end{aligned}
\tag{C.24}
$$

となる。この式から $|\tilde{y}_m|$ が十分小さければ近似的に

$$
H\tilde{\mathbf{x}} \backsimeq \tilde{\lambda}\tilde{\mathbf{x}} \tag{C.25}
$$

が成り立ち、$\tilde{\lambda}$、$\tilde{\mathbf{x}}$ がそれぞれ求めるべき H の固有値、固有ベクトルの良い近似になっていることが分かる。大抵の場合、両端に近い固有値に対して $|\tilde{y}_m|$ は非常に小さな値をとる。

付 録D　非直交で縮退のある摂動論

カゴメ格子のフラットバンドの固有状態は多重縮退した非直交固有状態である。ここでは、このカゴメ格子のように、非摂動固有状態が非直交で縮退がある場合の摂動の公式を導く。

非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有値 $E_n^{(0)}$ に対応する固有ベクトルが N_n 個あるとし、それらを $|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, \cdots, N_n)$ と書く。すなわち、

$$\hat{H}_0|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, \cdots, N_n) \tag{D.1}$$

である。$|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ は非直交固有ベクトルである。この非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ に小さな摂動 $\hat{V}$ が加わったとき、$\hat{H}_0$ の固有値 $E_n^{(0)}$ の縮退がどのように解けるかを求める。摂動が入った後のハミルトニアン $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ の固有値を $E_{n,\alpha}$、その固有ベクトルを $|\psi_{n,\alpha}\rangle$ とする。つまり、

$$\hat{H}|\psi_{n,\alpha}\rangle = E_{n,\alpha}|\psi_{n,\alpha}\rangle \tag{D.2}$$

である。固有値 $E_{n,\alpha}$、固有ベクトル $|\psi_{n,\alpha}\rangle$ を、次のように摂動の次数に従い展開する。

$$E_{n,\alpha} = E_n^{(0)} + E_{n,\alpha}^{(1)} + E_{n,\alpha}^{(2)} + \cdots \tag{D.3}$$

$$|\psi_{n,\alpha}\rangle = \sum_{\beta=1}^{N_n} a_{n,\alpha}^{\beta}|\psi_{n,\beta}^{(0)}\rangle + |\psi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle + \cdots \tag{D.4}$$

式 (D.3) と (D.4) を式 (D.2) に代入し、摂動の 1 次の項を両辺比較すると、

$$\hat{H}_0|\psi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle + \hat{V}\sum_{\beta=1}^{N_n} a_{n,\alpha}^{\beta}|\psi_{n,\beta}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle + E_{n,\alpha}^{(1)}\sum_{\beta=1}^{N_n} a_{n,\alpha}^{\beta}|\psi_{n,\beta}^{(0)}\rangle \tag{D.5}$$

が得られる。この式に、左から $\langle\psi_{m,\gamma}^{(0)}|$ をかけると、

$$\langle\psi_{m,\gamma}^{(0)}|\hat{H}_0|\psi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle + \sum_{\beta=1}^{N_n} a_{n,\alpha}^{\beta}\langle\psi_{m,\gamma}^{(0)}|\hat{V}|\psi_{n,\beta}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}\langle\psi_{m,\gamma}^{(0)}|\psi_{n,\alpha}^{(1)}\rangle + E_{n,\alpha}^{(1)}\sum_{\beta=1}^{N_n} a_{n,\alpha}^{\beta}\langle\psi_{m,\gamma}^{(0)}|\psi_{n,\beta}^{(0)}\rangle \tag{D.6}$$

である。そして、$m = n = 0$ とすると、非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_{(0)}$ の固有値 $E_0^{(0)}$ に対する摂動の 1 次の固有値 $E_{0,\alpha}^{(1)}$ を求める公式が導かれる。

$$\sum_{\beta=1}^{N_0} a_{0,\alpha}^{\beta}\langle\psi_{0,\gamma}^{(0)}|\hat{V}|\psi_{0,\beta}^{(0)}\rangle = E_{0,\alpha}^{(1)}\sum_{\beta=1}^{N_0} a_{0,\alpha}^{\beta}\langle\psi_{0,\gamma}^{(0)}|\psi_{0,\beta}^{(0)}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, \cdots, N_0) \tag{D.7}$$

参考文献

[1] D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B, **14**, (1976) 2239

[2] C. Albrecht, J. H. Smet, K. von Klizing, D. Weiss, V. Umansky, and H. Schweizer, Phys. Rev. Lett. **86**, (2001) 147

[3] A. Mielke, J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) L73; *ibid*. **24** (1991) 3311; *ibid*. **25** (1992) 4335.

[4] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 1201; *ibid*. 1927

[5] A. Mielke and H. Tasaki, Commun. Math. Phys. **158** (1993) 341

[6] 「固体物理」（相関電子系の物質設計）特集号、vol.36、No.10、(2001)

[7] K. Shiraishi, H. Tamura and H. Takayanagi, Appl. Phys.Lett. **78** (2001) 3702

[8] K. Shiraishi, H. Tamura and H. Takayanagi, unpubished

[9] K. Ishida, Phys. Rev. B, **49** (1994) 5541

[10] K. Kusakabe and H. Aoki, Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 144

[11] 及川一郎、修士論文（千葉大学自然科学研究科、1993）

[12] ”Quantum thory of the optical and electronic properties of semiconductors (Third edition)”, Hartmut Hang and Stephan W. Koch, world Scientific.

[13] 「多体電子論　　強磁性」、草部浩一、青木秀男共著、東京大学出版会（1998）

[14] 「グラフ理論入門」　B. ボロバッシュ著、斎藤伸自、西関隆夫共訳、培風館　（1983）