

# グラフェンにおけるディラック方程式

永井佑紀

平成 21 年 2 月 13 日

グラフェンはフェルミエネルギーでバンドが点接触し、この接触点はディラックコーンと呼ばれる。ディラックコーンと呼ばれるのは、この低エネルギー領域で有効な方程式が質量のないディラック方程式となっているからである。このノートでは有効質量近似を用いてディラック方程式を導出する。このノートは Ando の J. Phys. Soc. Jpn. 74, 777(2005) を参考にしている。

## 1 グラフェンについて

グラフェンとはグラファイトが一層だけになったものである。六角形の格子を持ち、単位格子は A 格子と B 格子からなる。詳しいことは参考文献参照。

## 2 ハミルトニアンとシュレーディンガー方程式

最近接のみにホッピングのある強束縛模型を考える。A 格子と B 格子の二種類あるので、原子に強く束縛された波動関数も二種類ある。これらの波動関数をそれぞれ  $\psi_A(\mathbf{R}_A)$ 、 $\psi_B(\mathbf{R}_B)$  とする。ここで  $\mathbf{R}_{A(B)}$  は A(B) 格子上の座標である。ある A 格子上でシュレーディンガー方程式は

$$\epsilon\psi_A(\mathbf{R}_A) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_B(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l) \quad (1)$$

と書ける。ここで  $\boldsymbol{\tau}_l$  は最近接サイトの位置を示すベクトルで、

$$\boldsymbol{\tau}_1 = a \left( 0, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\tau}_2 = a \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}} \right) \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\tau}_3 = a \left( \frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}} \right) \quad (4)$$

である。座標系はジグザグリボンが伸びる方向を  $x$ 、それと直行する向きを  $y$  とした。同様に、ある B 格子上でシュレーディンガー方程式は

$$\epsilon\psi_B(\mathbf{R}_B) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_A(\mathbf{R}_B + \boldsymbol{\tau}_l) \quad (5)$$

と書ける。

## 3 有効質量近似

我々はいま、フェルミエネルギー近傍で成り立つ有効方程式を求めようとしている。厳密にフェルミエネルギーにおいては、バンドは点接触しており、この点を、 $K$  点 ( $\mathbf{K} = (2\pi/a)(1/3, 1/\sqrt{3})$ )、 $K'$  点 ( $\mathbf{K}' = (2\pi/a)(2/3, 0)$ )

と呼ぶ。フェルミエネルギー近傍においては、 $\psi_A(\mathbf{R}_A)$  や  $\psi_B(\mathbf{R}_B)$  は、 $K$  点と  $K'$  点の波動関数の和に若干の修正をほどこしたものになるだろう。よって、それぞれの波動関数を

$$\psi_A(\mathbf{R}_A) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_A} F_A^K(\mathbf{R}_A) + e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_A} F_A^{K'}(\mathbf{R}_A) \quad (6)$$

$$\psi_B(\mathbf{R}_B) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_B} F_B^K(\mathbf{R}_B) + e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_B} F_B^{K'}(\mathbf{R}_B) \quad (7)$$

という形に仮定してみよう。ここで、 $F_{A,B}^{K,K'}(r)$  は、ゆっくりと変動する関数である。何に対してゆっくり変動するかは計算していくうちに明らかになるだろう。上の二つの式は

$$\mathbf{F}_{A(B)} = \begin{pmatrix} F_{A(B)}^K \\ F_{A(B)}^{K'} \end{pmatrix} \quad (8)$$

と

$$\mathbf{a}(\mathbf{R}_A)^\dagger = (e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_A} \quad e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_A}) \quad (9)$$

$$\mathbf{b}(\mathbf{R}_B)^\dagger = (e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_B} \quad e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_B}) \quad (10)$$

を用いると

$$\psi_A(\mathbf{R}_A) = \mathbf{a}(\mathbf{R}_A)^\dagger \mathbf{F}_A(\mathbf{R}_A) \quad (11)$$

$$\psi_B(\mathbf{R}_B) = \mathbf{b}(\mathbf{R}_B)^\dagger \mathbf{F}_B(\mathbf{R}_B) \quad (12)$$

となる。この波動関数を式 (1) に代入すると

$$\epsilon \mathbf{a}(\mathbf{R}_A)^\dagger \mathbf{F}_A(\mathbf{R}_A) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \mathbf{b}(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l)^\dagger \mathbf{F}_B(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l) \quad (13)$$

となる。両辺に  $g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A)$  を左からかけ、 $\mathbf{R}_A$  で和を取ると

$$\epsilon \sum_{\mathbf{R}_A} g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A)^\dagger \mathbf{F}_A(\mathbf{R}_A) = -\gamma_0 \sum_{\mathbf{R}_A} \sum_{l=1}^3 g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A) \mathbf{b}(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l)^\dagger \mathbf{F}_B(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l) \quad (14)$$

となる。ここで、 $g(r)$  という関数は、 $|r| < a$  という格子間隔  $a$  よりも狭い領域ではゆっくりと変化し、それよりも遠く離れた場所では急速に減衰するとする。また、この関数は

$$\sum_{\mathbf{R}_A} g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A) = \sum_{\mathbf{R}_B} g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_B) = 1 \quad (15)$$

$$\int d\mathbf{r}' g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A) = \int d\mathbf{r}' g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_B) = \Omega_0 \quad (16)$$

を満たす関数とする。ここで、 $\Omega_0$  は単位セルの面積である。この条件は、単位セル程度では  $g(r) \sim 1$  であり、その外では急速に減衰する関数であることを意味している。さらに、この関数は格子間隔  $a$  よりもゆっくりと変動する関数にとってはデルタ関数 ( $g(r - \mathbf{R}) = \Omega_0 \delta(r - \mathbf{R})$ ) に見える。よって、式 (14) は

$$\epsilon \sum_{\mathbf{R}_A} g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A)^\dagger \mathbf{F}_A(\mathbf{r}') = -\gamma_0 \sum_{\mathbf{R}_A} \sum_{l=1}^3 g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A) \mathbf{b}(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l)^\dagger \mathbf{F}_B(\mathbf{r}' - \boldsymbol{\tau}_l) \quad (17)$$

となる。さらに、 $\mathbf{F}_B(\mathbf{r}' - \boldsymbol{\tau}_l)$  を  $\mathbf{r}'$  の周りで展開して一次まで取ると

$$\epsilon \sum_{\mathbf{R}_A} g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A)^\dagger \mathbf{F}_A(\mathbf{r}') = -\gamma_0 \sum_{\mathbf{R}_A} \sum_{l=1}^3 g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A) \mathbf{a}(\mathbf{R}_A) \mathbf{b}(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l)^\dagger [\mathbf{F}_B(\mathbf{r}') - \left( \boldsymbol{\tau}_l \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \right) \mathbf{F}_B(\mathbf{r}')] \quad (18)$$

が得られる。ここで、

$$a(\mathbf{R}_A)a(\mathbf{R}_A)^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{R}_A} \\ e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{R}_A} & 1 \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$a(\mathbf{R}_A)b(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l)^\dagger = \begin{pmatrix} e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_l} & e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{R}_A}e^{-i\mathbf{K}'\cdot\boldsymbol{\tau}_l} \\ e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{R}_A}e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_l} & e^{-i\mathbf{K}'\cdot\boldsymbol{\tau}_l} \end{pmatrix} \quad (20)$$

を用いれば、

$$\sum_{\mathbf{R}_A} g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A)a(\mathbf{R}_A)a(\mathbf{R}_A)^\dagger \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$\sum_{\mathbf{R}_A} g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A)a(\mathbf{R}_A)b(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l)^\dagger \approx \begin{pmatrix} e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_l} & 0 \\ 0 & e^{-i\mathbf{K}'\cdot\boldsymbol{\tau}_l} \end{pmatrix} \quad (22)$$

となる。非対角項がゼロになったのは、無数の  $\mathbf{R}_A$  で和を取ったためである。この結果を用いると、

$$\epsilon \sum_{\mathbf{R}_A} g(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_A)a(\mathbf{R}_A)a(\mathbf{R}_A)^\dagger \mathbf{F}_A(\mathbf{r}') \approx \epsilon \mathbf{F}_A(\mathbf{r}') \quad (23)$$

となる。さらに、式 (18) の展開の 0 次の項は

$$\sum_{l=1}^3 e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_l} = e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{-i\frac{2\pi}{3}} + 1 = 0 \quad (24)$$

$$\sum_{l=1}^3 e^{-i\mathbf{K}'\cdot\boldsymbol{\tau}_l} = e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{-i\frac{2\pi}{3}} + 1 = 0 \quad (25)$$

であるためにゼロとなる。一次の項は

$$\sum_{l=1}^3 e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_l} \begin{pmatrix} \tau_l^x & \tau_l^y \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2} a e^{-i\frac{2\pi}{3}} (+i \quad +1) \quad (26)$$

$$\sum_{l=1}^3 e^{-i\mathbf{K}'\cdot\boldsymbol{\tau}_l} \begin{pmatrix} \tau_l^x & \tau_l^y \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2} a (-i \quad +1) \quad (27)$$

を用いると計算ができて、結局、

$$\epsilon \mathbf{F}_A(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \gamma_0 \frac{\sqrt{3}}{2} a e^{-i\frac{2\pi}{3}} (i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}) & 0 \\ 0 & \gamma_0 \frac{\sqrt{3}}{2} a (-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}) \end{pmatrix} \mathbf{F}_B(\mathbf{r}) \quad (28)$$

となる。ここで、 $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$  を定義すれば、

$$\epsilon \mathbf{F}_A(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} -\gamma_0 \frac{\sqrt{3}}{2} a e^{-i\frac{2\pi}{3}} (\hat{k}_x - i\hat{k}_y) & 0 \\ 0 & \gamma_0 \frac{\sqrt{3}}{2} a (\hat{k}_x + i\hat{k}_y) \end{pmatrix} \mathbf{F}_B(\mathbf{r}) \quad (29)$$

と書ける。この行列はいまいちきれいではないので、 $F_B^K \rightarrow -e^{i\frac{2\pi}{3}} F_B^K$  と  $F_B^K$  を定義しなおすと<sup>1</sup>、

$$\epsilon \mathbf{F}_A(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \gamma_0 \frac{\sqrt{3}}{2} a (\hat{k}_x - i\hat{k}_y) & 0 \\ 0 & \gamma_0 \frac{\sqrt{3}}{2} a (\hat{k}_x + i\hat{k}_y) \end{pmatrix} \mathbf{F}_B(\mathbf{r}) \quad (30)$$

という方程式が得られる。同様な計算は B 格子のシュレーディンガー方程式に対してもすることができる。

<sup>1</sup>これは式 (7) を置き換えることを意味している。

## 4 Dirac 方程式

ここで、新しいベクトル  $F(\mathbf{r})$  を

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}^K(\mathbf{r}) \\ \mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$\mathbf{F}^K(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F_A^K(\mathbf{r}) \\ F_B^K(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (32)$$

$$\mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F_A^{K'}(\mathbf{r}) \\ F_B^{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (33)$$

と導入すれば、式 (30) は

$$\mathcal{H}_0 \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \epsilon \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (34)$$

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} 0 & \gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) & 0 & 0 \\ \gamma(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) \\ 0 & 0 & \gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) & 0 \end{pmatrix} \quad (35)$$

となる。ここで、 $\gamma \equiv \gamma_0 \frac{\sqrt{3}}{2} a$  とした。さらに、パウリ行列  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  と、 $\hat{\mathbf{k}}' \equiv (\hat{k}_x, -\hat{k}_y)$  を用いれば、方程式は

$$\gamma(\hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{F}^K(\mathbf{r}) = \epsilon \mathbf{F}^K(\mathbf{r}) \quad (36)$$

$$\gamma(\hat{\mathbf{k}}' \cdot \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) = \epsilon \mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) \quad (37)$$

と書き直すことができる。この方程式は、massless relativistic Dirac 方程式に形式的に一致している<sup>2</sup>。

一様系の場合、この方程式は簡単に求まる。このとき、 $K$  点と  $K'$  点は独立に解くことができる。式 (36) は

$$\begin{pmatrix} 0 & \gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) \\ \gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_A^K(\mathbf{r}) \\ F_B^K(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} F_A^K(\mathbf{r}) \\ F_B^K(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (38)$$

$$\gamma^2(\hat{k}_x - i\hat{k}_y)(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) F_B^K(\mathbf{r}) = \epsilon^2 F_B^K(\mathbf{r}) \quad (39)$$

$$-\gamma^2(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) F_B^K(\mathbf{r}) = \epsilon^2 F_B^K(\mathbf{r}) \quad (40)$$

と書ける。一様系の場合フーリエ変換すれば容易に解くことができ、エネルギー固有値は

$$\epsilon = s\gamma|\mathbf{k}| \quad (41)$$

となる。ここで  $s = \pm 1$  である。また、 $K$  点での波動関数は

$$\gamma(k_x - ik_y) c_B e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = s\gamma|\mathbf{k}| c_A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (42)$$

$$c_B = \frac{\gamma|\mathbf{k}|}{\gamma(k_x - ik_y)} {}^{sCA} \quad (43)$$

$$= \frac{(k_x + ik_y)}{|(k_x + ik_y)|} {}^{sCA} \quad (44)$$

より

$$\mathbf{F}^K(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} s \\ \frac{(k_x + ik_y)}{|(k_x + ik_y)|} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (45)$$

<sup>2</sup>Weyl 方程式と呼ばれるらしい。実はあまり詳しくは知らない。

となる。同様に、 $K'$  点での波動関数は

$$\mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} s \\ \frac{(k_x - ik_y)}{|(k_x - ik_y)|} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (46)$$

と書ける。

なお、 $k_x = k \cos \phi$ 、 $k_y = k \sin \phi$  として、角度  $\phi$  を使って書き直せば、

$$\mathbf{F}^K(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} s \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (47)$$

$$\mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} s \\ e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (48)$$

と書くこともできる。

## 参考文献

T. Ando, J.Phys.Soc.Jpn. **74**, 777 (2005).

若林克法, 草部浩一, 日本物理学会誌解説 63 巻 p. 344-352 (2008 年 5 月)