

フラットバンドの構成法 – 分子の奏でるハーモニー –

A 東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻

B 福岡工業大学 情報工学部

桂 法称^A・丸山 勲^B

1 はじめに

特異なバンド構造（分散関係）を示す系は、近年の物性物理において大きな注目を集めている。その代表格は、グラフェンやトポロジカル絶縁体の表面に現れるディラック電子系であり、本誌でも過去に特集号が組まれている¹⁾。固体中のディラック電子の特徴は、あたかも質量ゼロの相対論的粒子のように1電子エネルギーが波数に比例する点であったが、それとは逆に質量が「重い」極限として、1電子エネルギーが波数に依存しない、つまり平坦な分散関係の場合も考えられる。このようなバンド構造はフラットバンド（平坦バンド）と呼ばれ、多体電子系の基底状態を非摂動的に調べることができる舞台として、これまで重要な役割を果たしてきた。これは、遍歴電子系のモデルでは通常、「運動項」と「相互作用項」の競合が起きるが、フラットバンドが存在しその近傍にフェルミエネルギーがある場合には、実効的に相互作用の効果を調べることだけに「専念できる」ためである。

特に1990年代に精力的に調べられたのは、フラットバンド（あるいは、ほぼフラットなバンド）を持つHubbardモデルである。これは、Mielkeや田崎^{2, 3, 4)}による数理的研究の中で、このようなモデルで特定のフィリングの場合には、基底状態が強磁性状態となることが厳密に証明されたことに端を発している¹⁾。その後の数値的研究や、実際にフラットバンドをもつ物質系の探索についての総合報告は、草部・青木による教科書⁸⁾でまとめられている。また今世紀に入り、電子系以外にも様々な粒子系において、フラットバンドが現れる場合があることが認識され調べられている。たとえば、カゴメ格子のようなフラストレーションの

¹⁾相互作用や状態密度に特異性のないHubbardモデルにおける強磁性の厳密な例は、⁵⁾で構成されている。また一連の数理的研究についての田崎による解説記事が、過去の本誌⁶⁾および日本物理学会誌⁷⁾にある。

ある格子上的反強磁性体では、マグノン励起のフラットバンドが現れることが発見され、飽和磁場近傍での基底状態は局在したマグノン励起の結晶状態として理解できることが明らかにされている^{9, 10)}。また、冷却原子系の進展に刺激を受けたフラットバンドが現れる光学格子上のボゾン系^{11, 12)} やフェルミオン系^{13, 14)} の提案、金属導波管ネットワークにおける光のフラットバンド (つまり「重い光」)¹⁵⁾、サーキット QED 系におけるポラリトンのフラットバンド¹⁶⁾ の提案など、枚挙にいとまがない²⁾。

2011 年に入り、フラットバンドの物理はさらに新たな局面を迎えることになる。これは、3つのグループにより独立に、**ほぼフラットでかつ非自明なトポロジカル数をもつバンド**の具体的な構成法が考案されたためである^{18, 19, 20)}。事の発端となった発想は、次のような単純なものである。二次元連続空間での荷電粒子の量子力学を考える。このとき、二次元面に垂直な一様磁場をかけると、よく知られているようにランダウ準位が形成される。各ランダウ準位の縮退度は磁場に比例しており、強磁場下では巨視的に縮退する。これはある意味で、連続空間の「フラットバンド」と見なすことができるだろう。さらに低温では、この系は整数および分数量子ホール効果という非自明な現象を示すことが知られている^{21, 22)}。「ではフラットバンドをもつ格子系でも、同様の非自明な現象が起こる場合があるのではないか？」という疑問が自然にわくだろう。

二次元格子上的 tight-binding 模型で、Chern 数というトポロジカル数が非自明な値をとる (すなわち整数量子ホール効果が起きる) ようなものは、Hofstadter 模型²³⁾ や蜂の巣格子上の Haldane 模型²⁴⁾ など既にいろいろ知られている。このことをヒントに、フラットバンドが現れる tight-binding 模型に局所的に磁束を導入することで、非自明な Chern 数をもつフラットバンドを作ろうという試みが、執筆者らともうひとつのグループにより最初になされた^{25, 26)}。しかしこれは失敗に終わる。理由は完全なフラットさを保つように局所的な磁束を導入すると、フラットバンドの Chern 数は必ずゼロになるためである³⁾。後のブレイクスルーとなった研究^{18, 19, 20)} では、「バンド幅がバンドギャップに対して非常に小さい」というより現実的な要請の範囲で、**ほぼフラットでかつ非自明な Chern 数をもつバンド**を構成する処方箋が与えられている。

整数量子ホール効果の格子系でのアナロジーが見つかり、次に考えられるのは分数量子

²⁾物性物理を離れると、格子上的場の理論の文脈でも、Nielsen-二宮の定理のある種の例外として、フラットバンドが現れる系が Dagotto らにより提案されている¹⁷⁾。

³⁾Chern 数は Berry 曲率の積分として表現できるが、Chern 数がゼロであることは必ずしも Berry 曲率がゼロであることを意味しない。実際に Berry 曲率が非自明となるような完全なフラットバンドは簡単に構成できる²⁷⁾。

ホール効果のアナロジーである。これは**分数 Chern 絶縁体**と呼ばれ、現在精力的に研究が進められている。格子系のメリットは、磁場の総和がゼロであったり、トポロジカル絶縁体のように時間反転対称性を破らない場合にもトポロジカルに非自明な系が存在する点で、理論的にもいろいろな拡がりを持っている。また実験的にも、エネルギーギャップの大きい系を探索することで、より高温での分数量子ホール状態の実現が期待される。実際に、酸化物界面²⁸⁾、Organometallic Framework と呼ばれる有機金属系²⁹⁾、冷却原子系^{30, 31)}などでの分数 Chern 絶縁体の実現が、理論的に提案されている。これらの最近の成果についてのレビューとして、^{32, 33)}がある。

このようにフラットバンドの物理は、現在爆発的に進展しているトポロジカル物性の物理と相まって、多彩な方向へと拡がりつつある。このような（非常に長い）前置きの上で、あえて本稿ではこれらの最近の進展ではなく、「そもそもどのようなホッピングのある tight-binding 模型を考えるとフラットバンドは現れるか?」、「またその理由は何故か?」、という基本中の基本に焦点をしばって解説を行いたい。その理由は、多くの先行研究ではアドホックにフラットバンドの構成法が与えられているが⁴、実はそれらの一見異なる方法の背後には、同じ数学的な構造があることを読者に知ってもらいたいためである。

この目的のためには、一見逆説的だが、「バンド」という概念を一度捨てた方が都合が良い。以下では、1粒子ハミルトニアンエネルギー固有値がある値で巨視的に縮退している場合も、広義のフラットバンドと考えることにする。これにより、並進対称性がないため波数が定義できないような系についても同様に議論できるようになる。実際そのような場合の典型例である、乱れのあるアモルファス系^{34, 35)}や準結晶の模型³⁶⁾での「フラットバンド」の方が、歴史的には先に発見されているのは特筆すべきことであろう。また量子化学で扱われる分子も、有限系ゆえ連続的な波数を定義することができないが、このような系での軌道縮退についても、これから先に紹介する議論では統一的に扱うことができる。

2 Tight-binding 模型とホッピング行列

この節では tight-binding 模型の第二量子化を用いた表示と、その固有状態の構成を復習する。第二量子化を用いた表示はフラットバンドの理解には直接必要はないが、慣れると直観的なイメージを持ちやすいというメリットもあるだろう。また、今後本格的な多体問題の文

⁴もちろん、先行研究での焦点はフラットバンドの先にある多体問題にあるので、それらの価値が損なわれる訳ではない。

献を読む上での一助となるかもしれない。次節以降に用いるグラフ理論の用語もここで導入する。

2.1 模型の定義

まず、一般的な tight-binding 模型を定義しよう。考える有限の大きさの格子を Λ とし、各サイト（格子点）を $i = 1, 2, \dots, N$ とラベル付けする。サイト i に局在している粒子を生成する演算子を c_i^\dagger 、消滅させる演算子を c_i とする。これらの演算子は、フェルミオンないしボゾンであるとする。つまりこれらの演算子に対して、

$$[c_i, c_j]_{\pm} = [c_i^\dagger, c_j^\dagger]_{\pm} = 0, \quad [c_i, c_j^\dagger]_{\pm} = \delta_{i,j} \quad (2.1)$$

が成立する。ここで $[A, B]_{\pm} = AB \pm BA$ であり、 $+/-$ はそれぞれフェルミオン/ボゾンの場合に対応する。また簡単のため、本稿ではスピンなどの粒子の内部自由度は考えない⁵。これらの生成・消滅演算子を用いて、tight-binding 模型のハミルトニアンは、

$$H = \sum_{i,j=1}^N t_{i,j} c_i^\dagger c_j \quad (2.2)$$

と表される。 $t_{i,j}$ は一般には複素数で、 $i = j$ のときオンサイト・ポテンシャル、 $i \neq j$ のとき飛び移り積分（の (-1) 倍）である。 $\mathbf{T} = (t_{i,j})_{i,j=1,\dots,N}$ は、 N 次のエルミート行列と見ることができるので、以下ではこれを**ホッピング行列**と呼ぶことにしよう。

2.2 固有状態の構成

ハミルトニアン H の 1 体および多体の固有状態は、ホッピング行列 \mathbf{T} を対角化することにより得られる。まず 1 体の固有状態を構成してみよう。行列 \mathbf{T} の k ($= 1, 2, \dots, N$) 番目の固有値 ε_k に対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{\varphi}^{(k)} = (\varphi_1^{(k)}, \varphi_2^{(k)}, \dots, \varphi_N^{(k)})^T$ とする⁶。これはつまり、

$$\sum_{j=1}^N t_{i,j} \varphi_j^{(k)} = \varepsilon_k \varphi_i^{(k)} \quad (2.3)$$

⁵内部自由度のある場合も、サイトと内部自由度のラベルの組を新たにサイトとみなすことで、同様に議論できる。

⁶ここでは議論していないが、必要に応じて規格化してよい。

が任意のサイト i について成り立つことを意味する。次に $\varphi^{(k)}$ を用いて、次の演算子を定義する。

$$a_k^\dagger = \sum_{i=1}^N \varphi_i^{(k)} c_i^\dagger \quad (2.4)$$

この演算子とハミルトニアンとの交換関係は、恒等式 $[AB, C]_- = A[B, C]_\pm \mp [A, C]_\pm B$ を用いて、

$$[H, a_k^\dagger]_- = \varepsilon_k a_k^\dagger \quad (2.5)$$

と得られる。したがって、粒子がひとつもない真空状態を $|0\rangle$ とすると、

$$H a_k^\dagger |0\rangle = [H, a_k^\dagger]_- |0\rangle = \varepsilon_k a_k^\dagger |0\rangle \quad (2.6)$$

が得られ、 $a_k^\dagger |0\rangle$ は H の固有エネルギー ε_k の 1 粒子固有状態であることが分かる。ここで、全てのサイト i について $c_i |0\rangle = 0$ であることを使った。式 (2.6) から、演算子 a_k^\dagger は 1 体のエネルギーが ε_k の固有状態を生成する演算子であると理解できるだろう。

では次に H の多体の固有状態を構成しよう。第二量子化を使うメリットは、多体の固有状態も 1 体と全く平行に議論できる点である。関係式 (2.5) は、調和振動子のハミルトニアンと昇降演算子の交換関係と同じであることから、次のようにして多体の固有状態を構成することができる。

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots (a_N^\dagger)^{n_N} |0\rangle \quad (2.7)$$

ここで、フェルミオンについては $n_k \leq 1$ である。これは $(c_i^\dagger)^2 = 0$ 、つまり Pauli の排他律に起因する。 H と a_k^\dagger の積との交換関係を左側から順にとることで、

$$H |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = \left(\sum_{k=1}^N n_k \varepsilon_k \right) |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \quad (2.8)$$

つまり、この状態が H のエネルギー固有値 $E = \sum_k n_k \varepsilon_k$ の固有状態であることが分かる。また、全粒子数は $\sum_k n_k$ で与えられる。

以上はどんな tight-binding 模型についても、一般的に成立する性質である。

2.3 グラフとホッピング行列

序論で述べたように、フラットバンドとは 1 体の固有エネルギー ε_k 、つまりホッピング行列 T の固有値に巨視的な縮退が生じる場合のことを指す。より正確には、系統的に格子 Λ を

大きくしていても、縮退度 M とサイト数 N の比 M/N が一定値 (> 0) になる場合を意味するが、ここでは分子など有限系の例も含めておおらかに議論する。

フラットバンドが現れる主たる原因は、 T の行列要素 $t_{i,j}$ の間の非自明な干渉効果である⁷。そのため、以下の議論では $t_{i,j}$ がどのように繋がっているか、つまり格子 Λ 上のサイトがホッピングによりどのようにネットワークを組んでいるか、が重要になる。このような繋がり方を専門に扱うのは、グラフ理論という数学の分野である。次節以降のために、グラフ理論の用語をここで幾つか導入しておこう。

グラフ $G = (V, E)$ は、頂点 (サイト) の集合 V と、辺 (ボンド) の集合 E からなる図形である。これは普通の物理の意味では、単に有限の格子を指していると考えてよい。2つの頂点 $i, j \in V$ を結ぶ線を (i, j) と表すことにしよう。このとき、辺 $e \in E$ に対して、 $e = (i, j)$ のとき、 e は i, j と接続している、 i と j は隣接しているという。グラフ G で、頂点と辺を次のように交互に並べた列

$$p = (i_1, e_1, i_2, e_2, \dots, i_k, e_k, i_{k+1}) \quad (2.9)$$

に対し、 $e_\ell = (i_\ell, i_{\ell+1})$ ($\ell = 1, 2, \dots, k$) となっているとき、 p を i_1 から i_{k+1} への長さ k の道という。グラフ G の頂点集合 V が2つの共通部分を持たない集合 A, B に分けられ、 A の頂点どうし、 B の頂点どうしは隣接しないとき、 G は **bipartite** (二部グラフ) であるという。固体物理では集合 A, B は、それぞれ A 副格子、 B 副格子と呼ばれる。bipartite の例を図 1(a) にあげた。 A に属する頂点を●、 B に属する頂点を○で塗り分けると、●どうし、○どうしを結ぶ辺がないことが分かるだろう。

続いて行列とグラフの対応関係を導入しよう。一般の N 次正方行列 $M = (m_{i,j})_{i,j=1,\dots,N}$ に対して、 N 個の頂点の集合 V を考える。次に、 $i \neq j$ について $m_{i,j}$ がゼロでないとき、 $e = (i, j)$ という辺を結ぶ。このようにしてできあがったグラフ $G = (V, E)$ を行列 M に対応するグラフと呼ぶ。これはホッピング行列 T については、tight-binding 模型が定義されている格子 Λ そのものである。例として次の行列 T を考えてみよう。

$$T = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & t & t' \\ t & 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & t & t \\ t & 0 & t & 0 & 0 \\ t' & 0 & t & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

⁷ここでは、原子極限 (任意の $i \neq j$ について $t_{i,j} = 0$) で現れる自明なフラットバンドは考えない。

ここで t, t' は任意の実数である。この場合、 T に対応するグラフは図 1(a) であることが分かる。

行列とグラフの関係の面白いところは、行列のべき乗に対しても自然に対応するグラフが導入される点である。上の例の場合、簡単な計算により T^2 に対応するグラフは図 1(b) であることが分かる⁸。これは行列の乗算の規則を直接反映している。例えば図 1(b) のグラフで、頂点 2 と 5 が繋がるのは、頂点 1 を介する長さ 2 の道と、頂点 3 を介する長さ 2 の道が存在するためである。このことから容易に推測できるように、 T に対応するグラフが bipartite で、 T の対角要素が全てゼロ ($t_{i,i} = 0$) のとき、 T^2 に対応するグラフは $G_1 = (A, E_1)$ と $G_2 = (B, E_2)$ という形に完全に分離する。また T のべき乗をホッピング行列とする tight-binding 模型を考えることもできる。これの利点は、 T の固有値 ε_k さえ分かれば、 T のべき乗のそれは自明に求まる点である。またその非自明な帰結として、異なるグラフ上の tight-binding 模型の固有エネルギーの間関係を知ることができる。

3 インバランス型フラットバンド

この節では、ホッピング行列の要素の詳細に依らずロバストに現れるフラットバンドについて議論する。このタイプのフラットバンドは、bipartite の場合、 A 副格子と B 副格子のサイト数の差に起因しているので、ここでは「インバランス型」と呼ぶことにする。ここでの議論と類似なものは、Sutherland の論文³⁷⁾ にも見受けられる。

3.1 Bipartite グラフ

まずホッピング行列 T に対応するグラフ G が bipartite で、 $t_{i,i} = 0$ ($i = 1, 2, \dots, N$) である場合を考えよう。このとき、 T の固有値は正負対称、つまり ε が固有値なら $-\varepsilon$ も固有値の集合 (スペクトル) に含まれる。この事実は以下のようにして簡単に分かる。 G の頂点を、 $i = 1, 2, \dots, |A|$ は A に属する頂点、 $i = |A| + 1, \dots, N$ は B に属する頂点となるようにラベル付けする⁹。このとき T は、 $|A|$ 行 $|B|$ 列の行列 T_{AB} とそのエルミート共役 $T_{BA} = (T_{AB})^\dagger$ を

⁸ここでは一般的な t, t' の値を考えている。特殊な場合 ($t'/t = -1, -2$) には、繋がらない辺が出てくる。

⁹この解説では、集合 S の要素の個数を $|S|$ と書く。

用いて、

$$T = \begin{pmatrix} 0 & T_{AB} \\ T_{BA} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

という形に表される。ここで 0 は全ての成分が 0 の行列である。 T の固有値 ε に対応する固有ベクトルを $\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix}$ とすると、 $\varphi' = \begin{pmatrix} \varphi_A \\ -\varphi_B \end{pmatrix}$ は、 T の固有値 $-\varepsilon$ に対応する固有ベクトルであることが分かる。これは、 T が次の対角行列

$$C = \text{diag}(\overbrace{1, \dots, 1}^{|A| \text{ 個}}, \overbrace{-1, \dots, -1}^{|B| \text{ 個}}) \quad (3.2)$$

と反交換する ($CTC = -T$) ことから簡単に分かる。この性質をカイラル対称性と呼ぶことも多い。

$\varepsilon \neq 0$ の固有値は必ず $-\varepsilon$ と対を組んでスペクトルに現れるが、 $\varepsilon = 0$ だけは特別である。これは、 φ と $\varphi' = C\varphi$ が必ずしも線形独立なベクトルとは限らないためである。このことから N が奇数の場合には、対を組めなくなる「仲間外れ」の $\varepsilon = 0$ が少なくとも 1 つ存在することが分かる。実際に、 N が奇数 ($N = 5$) である式 (2.10) について、固有値を計算した結果を図 1(c) に示す。スペクトルが正負対称であり、また t'/t の値を変えても $\varepsilon = 0$ が必ずスペクトルに現れることが分かるだろう。

以上の議論では、 T のゼロ固有値の数について非常に弱い結論しか得られない。しかし、実は次のような議論により、 $|A|$ と $|B|$ に差がある場合には、この評価を大幅に改良することができる。どちらの副格子を A と呼ぶかは任意なので、以下では $|B| > |A|$ である場合を考えよう。まず、ホッピング行列の二乗

$$T^2 = \begin{pmatrix} T_{AB}T_{BA} & 0 \\ 0 & T_{BA}T_{AB} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

を考える。これは図 1(b) の例で見たように、対応するグラフが A 副格子、 B 副格子だけのものに完全に分離している。したがってブロック行列 $S_A = T_{AB}T_{BA}$ 、 $S_B = T_{BA}T_{AB}$ について、そのスペクトルを調べれば、 T^2 のスペクトルが分かる。行列 S_A 、 S_B については、次の三つの性質があることが分かる。

1. S_A 、 S_B の全ての固有値は非負 (0 以上)
2. S_A と S_B のゼロでない固有値は全て一致

3. S_B は、少なくとも $(|B| - |A|)$ 個のゼロ固有値を持つ

T のゼロ固有値の数は、 T^2 のそれに等しいので、性質 3. から T は、少なくとも $(|B| - |A|)$ 個のゼロ固有値を持つことが分かる。実際に図 1(a) の例では、 $3 - 2 = 1$ 個のゼロ固有値が t, t' の詳細に依らず現れている。

では、上の性質 1~3. を証明しよう。性質 1. は、 $S_B = (T_{AB})^\dagger T_{AB}$ であることから、 $|B|$ 次元ベクトルを ψ とすると、 $\langle \psi, S_B \psi \rangle = \langle T_{AB} \psi, T_{AB} \psi \rangle = |T_{AB} \psi|^2 \geq 0$ となることから明らかである¹⁰。 S_A についても証明は同様である。性質 2. は次のように示せる。 ψ を S_B の固有値 $\lambda > 0$ の固有ベクトルとしよう。このとき、 $T_{BA} T_{AB} \psi = \lambda \psi$ であることから、両辺に左から T_{AB} をかけて、 $S_A \tilde{\psi} = \lambda \tilde{\psi}$ を得る。ただし、 $\tilde{\psi} = T_{AB} \psi$ である¹¹。したがって、 S_A も固有値 λ を持つことが分かる。 S_B と S_A を入れ替えて同様の議論をすることで証明は完成する。

性質 3. は、線形代数における零空間 (核) の概念を思い出すとすぐに分かる。 S_B のゼロ固有値に対応する固有ベクトルを ψ_0 とすると、 $\langle \psi_0, S_B \psi_0 \rangle = |T_{AB} \psi_0|^2 = 0$ であることから、 $T_{AB} \psi_0 = \mathbf{0}$ であることが分かる。 T_{AB} は $|A|$ 行 $|B|$ 列の行列であるので、零空間 (この連立方程式の解空間) の次元は $(|B| - |A|)$ 以上である。この零空間を張る線形独立なベクトルは全て S_B のゼロ固有値に対応する固有ベクトルとなる。この証明から副産物として、 T のゼロ固有値に対応する固有ベクトルは、(アクシデンタルな場合を除き) 全て B 副格子にしか振幅をもたないことが分かる。したがって、 T のかわりに、

$$T' = \begin{pmatrix} T_{AA} & T_{AB} \\ T_{BA} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

(T_{AA} は任意の $|A|$ 次エルミート行列) というホッピング行列を考えても、この場合も $(|B| - |A|)$ 個のゼロ固有値が存在することが分かる。

ここまでは一般論であったが、では実際に $|B| - |A|$ が巨視的な数になるような bipartite の例を挙げよう。最もよく知られているのは、図 2(a) に示す Lieb 格子と呼ばれるものである³⁸⁾。この場合は単位胞の数を N_c とすれば、 $|B| - |A| = N_c$ となる。したがって周期的境界条件を課した場合、 T の全固有値の $1/3$ がゼロ固有値である。その他にも、図 3(a) に示したデコレートした蜂の巣格子 ($|B| - |A| = N_c$)⁴⁰⁾、図 4(a) に示したダングリングボンドのある Lieb 格子 ($|B| - |A| = N_c$) などがある。通常はこのような格子上で一様な飛び移り積分

¹⁰ d 次元ベクトル \mathbf{u}, \mathbf{v} の内積を、 $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \sum_{i=1}^d u_i^* v_i$ で定義する。

¹¹ $\tilde{\psi} \neq \mathbf{0}$ である。なぜなら、 $\tilde{\psi} = \mathbf{0}$ と仮定すると、 $0 = |\tilde{\psi}|^2 = \langle S_B \psi, \psi \rangle = \lambda \langle \psi, \psi \rangle \neq 0$ となり矛盾。

$t_{i,j}$ を考えた場合に、 $\varepsilon = 0$ にフラットなバンドが現れると考えられているが、ここで重要なのは、 $t_{i,j}$ が完全にランダムであっても、同じ数だけ T にはゼロ固有値が現れるということである³⁹⁾。したがってこのタイプのフラットバンドは非常にロバストなものであると考えられる。また $t_{i,j}$ は実数である必要はなく、任意の複素数でも構わない⁴¹⁾。これは物理的には、ループ（グラフ上の閉じた道）に磁束を導入しても $\varepsilon = 0$ の状態の数は変わらないことを意味している。

3.2 非 bipartite グラフ

ここまでの結果と、前節で導入した行列とグラフの関係を組み合わせると、bipartite でないグラフ上のフラットバンドをいろいろと導出することができる。このクラスでよく知られているものは、Mielke の構成法である⁴²⁾。これはグラフ理論のライングラフという概念を援用したものだが、実は次のように簡単に理解することができる。

任意のグラフ $G = (V, E)$ に対して、 V を A 副格子の頂点の集合、 E を B 副格子の頂点の集合とする、新たなグラフ $\tilde{G} = (\tilde{V}, \tilde{E})$ を考えることができる¹²⁾。たとえば、 G が正方格子なら \tilde{G} は Lieb 格子 (図 2(a))、 G が蜂の巣格子なら \tilde{G} はデコレートされた蜂の巣格子 (図 3(a)) である。 G がどんなグラフでも、 \tilde{G} は必ず bipartite なので、 \tilde{G} に対して、隣接する i, j について $t_{i,j} \neq 0$ 、その他の i, j について $t_{i,j} = 0$ というホッピング行列 T を考えると、これは式 (3.1) の形になる。これから $S_B = T_{BA}T_{AB}$ が得られるが、この行列 S_B に対応するグラフのことを G のライングラフ $L(G)$ という。たとえば、図 2 に示すように G が正方格子なら $L(G)$ はチェッカーボード格子、図 3 に示すように G が蜂の巣格子なら $L(G)$ はカゴメ格子である。 $S_A = T_{AB}T_{BA}$ についても対応するグラフが考えられるが、これは元のグラフ G であることが分かる。

さらに行列 S_A, S_B の性質 2. から、強力な結果が得られる： G 上の S_A をホッピング行列とする tight-binding 模型と、 $L(G)$ 上の S_B をホッピング行列とするその 1 粒子固有エネルギーは、 $\varepsilon = 0$ のフラットバンドを除いて完全に一致する。これはたとえば、一様なホッピングの蜂の巣格子 (つまりグラフエン) とカゴメ格子の tight-binding 模型のバンド構造が (適当な定数のシフトと定数倍で) フラットバンドを除き一致すること意味している (図 3 の (b) と (c))。同様の対応関係が、正方格子とチェッカーボード格子の間にも存在する (図 2 の (b) と (c))。これらの事実はあまり認知されていないように思われる。

¹²⁾Ising 模型における、“decoration-iteration transformation” と呼ばれるものと本質的に同じである⁴³⁾。

ホッピング行列を二乗する方法は、ライングラフに限られたものではない。例えば、図 4(a) で示した bipartite グラフに対して、隣接する i, j について $t_{i,j} = t$ 、その他の i, j について $t_{i,j} = 0$ というホッピング行列 T を考えると、 S_A はチェッカーボード格子の、 S_B は田崎模型³⁾ のホッピング行列となることが分かる。ライングラフの構成法から、チェッカーボード格子にはフラットバンドが現れることは知っているが、いまの例ではダングリングボンドがあるため、このフラットバンドのエネルギーは $\varepsilon = t^2$ にシフトしている。この事と、行列 S_A, S_B の性質 2., 3. から、田崎模型のホッピング行列には $\varepsilon = 0, t^2$ の 2 つのエネルギーにフラットバンドが現れることが分かる (図 4(c))。

以上のように、bipartite グラフ・非 bipartite グラフそれぞれについて、インバランス型のフラットバンドの構成法を紹介した。このやり方により、Lieb 型・Mielke 型・田崎型など、従来は独立に考えられていたフラットバンドは実は「親戚」であったことが分かる。また簡単のため、具体例は二次元のものばかりを紹介したが、三次元の例も容易に構成することができる⁴⁴⁾。

4 共鳴型フラットバンド

この節では、ホッピング行列の要素の詳細に依るタイプのフラットバンドについて議論する。このタイプのフラットバンドは、格子上に埋め込まれている分子のエネルギー準位が共鳴する場合に現れるので、ここでは「共鳴型」と呼ぶことにする。(これが、本稿の副題の由来である。) 共鳴型フラットバンドは、インバランス型と異なり $t_{i,j}$ の変更に対してロバストではないが、ゼロエネルギーに限らずいろいろなエネルギーに現れる。

4.1 磁束リングの結合系

まずフラットバンドとは一見関係ない、磁束の入ったリングが結合した系を考えよう。図 5(a) に例として、3 サイトのリングがひとつのサイトで結合した系を示している。各ボンド

の飛び移り積分を t 、左右のリングを貫く磁束を ϕ_1, ϕ_2 とすると、ホッピング行列は、

$$T = \begin{pmatrix} 0 & te^{i\phi_1} & t & t & te^{i\phi_2} \\ te^{-i\phi_1} & 0 & t & 0 & 0 \\ t & t & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & 0 & 0 & t \\ te^{-i\phi_2} & 0 & 0 & t & 0 \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

で与えられる。この行列の固有値をいろいろな ϕ_1, ϕ_2 で調べてみると面白いことに気が付く。 ϕ_1, ϕ_2 に依らずに必ず $\varepsilon = \pm t$ という固有値が現れるのである。図 5 (c) に、 T の固有値を ϕ_1, ϕ_2 の関数としてプロットしたものを示した。さらに一般化として、図 5(b) のように、左のリングに p サイト、右のリングに q サイトの場合を考えることもできる。実はこのときも、磁束 ϕ_1, ϕ_2 に依らない固有値が存在する。またその数は、(p と q の最大公約数 -1) 個である。このような磁束の変化に「鈍感」な状態は “idle state” と呼ばれ、格子系でなく連続系でも存在する⁴⁵⁾。

なぜこのような idle state が現れるかを、図 5(a) の例を通して考えてみよう。左のリングのサイト 2, 3 だけに振幅をもつ、 $\varphi_1 = (0, 1, 1, 0, 0)^T$ というベクトルを考える。これは式 (4.1) の T の固有ベクトルに、「ほとんど」なりかけている。なぜなら、シュレディンガー方程式 (2.3) で $\varepsilon_k = t$ ととると、 φ_1 はこれを $i = 1$ 以外では満たしているからである。同じように、右のリングのサイト 4, 5 だけに振幅をもつ $\varphi_2 = (0, 0, 0, 1, 1)^T$ というベクトルを考える。これも $\varepsilon_k = t$ ととると、式 (2.3) を $i = 1$ 以外では満たしている。 φ_1 も φ_2 もこのままでは、 T の厳密な固有ベクトルではない。しかし、 $i = 1$ でも、式 (4.1) を満たすように、これらをうまく重ね合わせることで厳密な固有ベクトルが構成できる。実際、

$$\varphi = (1 + e^{i\phi_2})\varphi_1 - (1 + e^{i\phi_1})\varphi_2 \quad (4.2)$$

ととれば、 $i = 1$ も含めたすべての i で式 (4.1) が満たされる¹³。同様にして、 $\varepsilon_k = -t$ に対応する固有状態も、 $\varphi_3 = (0, 1, -1, 0, 0)^T$ と $\varphi_4 = (0, 0, 0, 1, -1)^T$ をうまく重ね合わせることで構成することができる。

この証明から、図 5(b) に示す一般の場合への拡張は容易だろう。2つのリングの結節点がないときには、この系は $(p - 1)$ -サイトの直線分子と $(q - 1)$ -サイトの直線分子に分離する。

¹³ $\phi_1 = \pi$ や $\phi_2 = \pi$ のときには、 φ_1 や φ_2 自身が idle state となっている。

長さ n の直線分子のホッピング行列の固有値は、

$$\varepsilon_m^{(n)} = -2t \cos\left(\frac{m\pi}{n+1}\right), \quad m = 1, 2, \dots, n \quad (4.3)$$

であることを思い出すと、 p と q が互に素でない場合には、左の直線分子と右の直線分子の固有値に縮退が生じることが分かる。この縮退した固有値の固有ベクトルを、上の例と同じようにうまく重ね合わせてやれば、式 (2.3) を結節点でも満たす idle state が構成できる。さらに一般には、左右のリング上にある「分子」の固有エネルギーが一致する場合、idle state が現れる (図 5(d))。これが「共鳴型」の、その名の由来である。

4.2 デコレートした正方格子のフラットバンド

少し見方を変えてやると、磁束リングの話はフラットバンドの構成法を与えることが分かる。図 6(a) に示す、正方格子の各辺上に 2 つずつサイトを置いた格子を考える。単位胞内のサイト数は 5 である。この格子上で隣接する i, j について $t_{i,j} = t$ 、その他の i, j について $t_{i,j} = 0$ というホッピング行列 T を考える。x, y 方向に周期的境界条件を課した場合、フーリエ変換により T の固有値問題は、式 (4.1) で $\phi_1 \rightarrow k_x$, $\phi_2 \rightarrow k_y$ とした行列の対角化問題に帰着する。つまり、磁束 \leftrightarrow 波数という読みかえで、2 つの問題は数学的に等価であることが分かる。したがって、磁束リングの問題での idle state のエネルギー固有値 $\varepsilon = \pm t$ に対応するフラットバンドが、この系に現れることが分かる。

この現象は図 6(a) の格子に限った話ではない。正方格子の各辺上に 3 つずつサイトを置いた格子 (図 7(c)) にもやはり、対応する磁束リングの問題があり、この場合は $\varepsilon = 0, \pm\sqrt{2}t$ にフラットバンドが現れる。また前節で紹介した Lieb 格子も、一様なホッピングの場合は、共鳴型の一例と考えることができる。図 7 にこのシリーズの格子とバンド構造を示した。正方格子を例にとったが、デコレートした蜂の巣格子のシリーズを考えることもできる¹⁴。そのような格子構造を持つ仮想的な物質は α -graphyne と呼ばれており、第一原理計算などで精力的に研究が行われている^{46, 47}。また三次元についての拡張も容易である。三次元の場合は、対応する磁束リングの問題は、3 つのリングがひとつの結節点で結合したものになるが、1 つのリング上のサイトの振幅を全て 0 とする ansatz を課すことで、実効的に 2 つのリングの場合に帰着する。

¹⁴蜂の巣超構造のバンド構造の一般論については、文献⁴⁰や教科書⁸)の第3章をが詳しい。

共鳴型についても、ホッピング行列 T の二乗を考えることで、フラットバンドをもつ新しい tight-binding を構成することができる。図 6(a) の格子は bipartite なので、二乗すると ● と ○ の副格子に分かれるが、● については図 6(b) の格子上の tight-binding 模型が得られる¹⁵。この格子上の tight-binding 模型にフラットバンドが現れることは、宮原らにより既に指摘されている^{48, 49}。また**部分ライングラフ**と名付けられている、この格子を含むより広いクラスの格子上の tight-binding 模型にフラットバンドが現れることが示されているが、本稿で紹介したやり方により、さらに広いクラスの模型を構成することができる。

4.3 局在状態

この節の最後に、共鳴型のフラットバンドと局在状態の関係性を述べておこう。式 (4.2) で $\phi_1 \rightarrow k_x$, $\phi_2 \rightarrow k_y$ とした状態を生成する演算子は、 k 空間での生成演算子を用いて

$$a^\dagger(\mathbf{k}) = (1 + e^{ik_y})\{c_2^\dagger(\mathbf{k}) + c_3^\dagger(\mathbf{k})\} - (1 + e^{ik_x})\{c_4^\dagger(\mathbf{k}) + c_5^\dagger(\mathbf{k})\} \quad (4.4)$$

と表せる。これは $Z(\mathbf{k}) = 2\sqrt{2 + \cos k_x + \cos k_y}$ を用いて、 $\tilde{a}^\dagger(\mathbf{k}) = a^\dagger(\mathbf{k})/Z(\mathbf{k})$ と規格化することで、通常の正準 (反) 交換関係、 $[\tilde{a}(\mathbf{k}), \tilde{a}^\dagger(\mathbf{k}')]_{\pm} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ を満たす。この $\tilde{a}^\dagger(\mathbf{k})$ を逆フーリエ変換してやれば、 $\varepsilon = t$ のフラットバンドを構成する実空間の Wannier 関数が得られる。しかし、これを実際に計算してみると、指数関数的に減衰する裾野をもった関数になることが分かる。

直観的により理解しやすい基底関数は、実は規格化しない $a^\dagger(\mathbf{k})$ を逆フーリエ変換することで得られる。単位胞の位置を \mathbf{R} , x, y 方向の単位ベクトルをそれぞれ $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ とすると、 $a^\dagger(\mathbf{k})$ の逆フーリエ変換は、

$$a^\dagger(\mathbf{R}) = c_2^\dagger(\mathbf{R}) + c_3^\dagger(\mathbf{R}) + c_2^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{e}_y) + c_3^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{e}_y) - \{c_4^\dagger(\mathbf{R}) + c_5^\dagger(\mathbf{R}) + c_4^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{e}_x) + c_5^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{e}_x)\} \quad (4.5)$$

となる。ただし、 $c_a^\dagger(\mathbf{R})$ は、位置 \mathbf{R} の単位胞内の、 a 番目のサイトの粒子の生成演算子である。これを図示したものが、図 6(a) の灰色に塗られた部分である。正方形の 4 つの辺上にある直線分子の分子軌道を、同じエネルギーとなるようにうまく“共鳴”させて接続していることが分かるだろう。このように接続することで、基底関数は正方形の中に閉じ込められ、外に染み出さない。これらの状態は、隣り合う四角形上にある場合、互いに重なりを持つので

¹⁵○については、図 6(b) の格子を上下 or 左右に正方形 1 個分ずらした格子になる。

非直交な基底関数となっている。また、これらは、ホッピングの絶妙な干渉効果で局在しているので、前節のインバランス型とは異なり、行列要素 $t_{i,j}$ の値の変化に対して脆弱である。

上の例のように、フラットバンドを構成する（非直交だが）局在した固有状態を構成できるのが共鳴型の特徴である。また、このような局在状態は、Hubbard 模型における強磁性の証明など、相互作用の非摂動論的な取扱いにおいても、本質的に重要な役割を果たしている。

5 むすび

以上、フラットバンドの現れる tight-binding 模型の構成法について紹介した。インバランス型と共鳴型のどちらの構成法にも、ホッピング行列とグラフの関係という、単純な構造が背後にあることが分かるだろう。また、これらの分類は説明の便宜上のもので、必ずしも厳格なものではない。実際、インバランス型も、行列要素 $t_{i,j}$ の性質がよい場合には、局所的な分子の軌道をうまく共鳴させながら接続することで、フラットバンドの局在した基底関数を構成することができる。したがって、広い意味では、フラットバンドは格子上に埋め込まれた分子たちの織り成すハーモニーと見なせるだろう。

紙数の制約で多くの具体例は紹介できなかったが、読者も親となる bipartite グラフを変えることで、いろいろなフラットバンドの例を「自作」してみると面白いかもしれない。実験系の読者は、実験室で実際に物質を「自作」されるのも一興だろう。（ちなみに、理論研究⁵⁰⁾に刺激を受けて、フラットバンドの出る格子構造をもつ超伝導体探索を試みた、という記事が過去の本誌にある⁵¹⁾。）

最後に、本文では触れられなかった話題について、幾つか簡単に述べておきたい。

3節で述べたインバランス型のフラットバンドの構成法は、Atiyah-Singer の指数定理や、Witten の超対称性量子力学⁵²⁾と、数学的なアイデアとしては似ているように思われる。実際、式(3.1)の T_{AB} を格子上のディラック作用素とみなせば、(ゼロ固有値の数)=(Witten 指数)となるような超対称性量子力学系を具体的に構成することができる。場の理論の古典解であるインスタントンの ADHM 構成法にも、実は似たようなアイデアが現れる⁵³⁾。また、最近では超対称性をもつ格子上の量子多体系もいろいろと調べられている^{54, 55)}。これらの系の多体の基底状態には巨視的な縮退が現れるが、これは「多体のフラットバンド」と見ることもできるだろう¹⁶⁾。

¹⁶⁾この巨視的縮退は多体効果に由来するもので、1粒子固有エネルギーのゼロエネルギーでの縮退に還元できるような、単純なものではない。

4 節で述べた磁束リングの問題とフラットバンドの対応は、 k 空間の特定のライン上や面上でフラットな分散が現れる場合を調べることを可能にする。このような部分的なフラットバンドについて、その「トポロジカル」な由縁を考えるのも今後面白いかもしれない。また、境界の効果で発生するフラットバンドについても触れることができなかつたが、ジグザグ境界をもつグラフェンの端状態^{56, 57)} や、反転対称性の破れた超伝導体の表面フラットバンド⁵⁸⁾ など、いろいろな例が知られている。さらに特殊だが、Hofstadter 模型では、境界条件と有限サイズ効果の微妙なバランスで現れるフラットバンドもある^{25, 59)}。

3、4 節の議論を、Bogoliubov-de Gennes 方程式を含む tight binding 模型に拡張するのも面白いだろう。その場合は格子構造によっては、マヨラナフェルミオンのフラットバンドが現れる可能性がある⁶⁰⁾。また、フラットバンドの特性を活かした相互作用の非摂動論的な取扱いについては、本文では一切触れることができなかつたが、1 節で紹介した教科書や解説記事、最近のレビュー^{61, 62)}などを参照されたい。本稿が、読者がフラットバンドや強相関系の物理に興味をもつきっかけとなれば、執筆者らにとって望外の喜びである。

謝辞

共同研究を通じて多くのことを教えてくださった、青木秀夫氏、田崎晴明氏、田中彰則氏に感謝します。

参考文献

- [1] 固体物理 特集号 **45**, No. 11 (2010).
- [2] A. Mielke: J. Phys. A **24** (1991) 3311.
- [3] H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 1608.
- [4] A. Mielke and H. Tasaki: Commun. Math. Phys. **158** (1993) 341.
- [5] H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 4678.
- [6] 田崎晴明: 固体物理 **31**, No. 3 (1996) 1201.
- [7] 田崎晴明: 日本物理学会誌 **51** (1996) 741.

- [8] 草部浩一, 青木秀夫 : 「多体電子論 I 強磁性」 (東京大学出版会, 1998).
- [9] J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, and H.-J. Schmidt: Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 167207.
- [10] M. E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu: Phys. Rev. B **70** (2004) 100403(R).
- [11] C. Wu, D. Bergman, L. Balents, and S. Das Sarma: Phys. Rev. Lett. **99** (2007) 070401.
- [12] C. Wu and S. Das Sarma: Phys. Rev. B **77** (2008) 235107.
- [13] R. Shen, L. B. Shao, Baigeng Wang, and D. Y. Xing: Phys. Rev. B **81** (2010) 041410(R).
- [14] V. Apaja, M. Hyrkäs, and M. Manninen: Phys. Rev. A **82** (2010) 041402(R).
- [15] S. Endo, T. Oka, and H. Aoki: Phys. Rev. B **81** (2010) 113104.
- [16] J. Koch, A. A. Houck, K. Le Hur, and S. M. Girvin: Phys. Rev. A **82** (2010) 043811.
- [17] E. Dagotto, E. Fradkin, and A. Moreo: Phys. Lett. B **172** (1986) 383.
- [18] E. Tang, J-W. Mei, and X-G. Wen: Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 236802.
- [19] K. Sun, Z-C. Gu, H. Katsura, and S. Das Sarma: Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 236803.
- [20] T. Neupert, L. Santos, C. Chamon, and C. Mudry: Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 236804.
- [21] 吉岡大二郎 : 「量子ホール効果」 (岩波書店, 1998) .
- [22] 青木秀夫, 中島 龍也 : 「多体電子論 III 分数量子ホール効果」 (東京大学出版会, 1999).
- [23] D. R. Hofstadter: Phys. Rev. B **14** (1976) 2239.
- [24] F. D. M. Haldane: Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2015.
- [25] H. Katsura, I. Maruyama, A. Tanaka, and H. Tasaki: Europhys. Lett. **91** (2010) 57007.
- [26] D. Green, L. Santos, and C. Chamon: Phys. Rev. B **82** (2010) 075104.
- [27] L. Chen, T. Mazaheri, A. Seidel, and X. Tang: J. Phys. A: Math. Theor. **47** (2014) 152001.

- [28] D. Xiao, W. Zhu, Y. Ran, N. Nagaosa, and S. Okamoto: Nat. Commun. **2** (2011) 596.
- [29] Z. Liu, Z-F. Wang, J-W. Mei, Y-S. Wu, and F. Liu: Phys. Rev. Lett. **110** (2013) 106804.
- [30] N. Y. Yao, A. V. Gorshkov, C. R. Laumann, A. M. Läuchli, J. Ye, and M. D. Lukin: Phys. Rev. Lett. **110** (2013) 185302.
- [31] N. R. Cooper and J. Dalibard: Phys. Rev. Lett. **110** (2013) 185301.
- [32] S. A. Parameswaran, R. Roy, and S. L. Sondhi: Comptes Rendus Physique **14** (2013) 816 (2013). [arXiv:1302.6606]
- [33] E. J. Bergholtz and Z. Liu: Int. J. Mod. Phys. B **27** (2013) 1330017.
- [34] D. Weaire and M. F. Thorpe: Phys. Rev. B **4** (1971) 2508.
- [35] J. P. Straley: Phys. Rev. B **6** (1972) 4086.
- [36] M. Kohmoto and B. Sutherland: Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 2740.
- [37] B. Sutherland: Phys. Rev. B **34** (1986) 5208.
- [38] E. H. Lieb: Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 1201.
- [39] M. Inui, S. A. Trugman, and E. Abrahams: Phys. Rev. B **49** (1994) 3190.
- [40] N. Shima and H. Aoki: Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 4389.
- [41] H. Aoki, M. Ando, and H. Matsumura: Phys. Rev. B **54** (1996) 17296(R).
- [42] A. Mielke: J. Phys. A **24** (1991) L73.
- [43] I. Syozi: “Transformation of Ising Models”, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 1, edited by Domb & Green (Academic Press, 1972).
- [44] C. Weeks and M. Franz: Phys. Rev. B **82** (2010) 085310.
- [45] Y. Avishai and J. M. Luck: J. Phys. A **42** (2009) 175301.
- [46] D. Malko, C. Neiss, F. Viñes, and A. Görling: Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 086804.

- [47] B. G. Kim and H. J. Choi: Phys. Rev. B **86**(2012) 115435.
- [48] S. Miyahara, K. Kubo, H. Ono, Y. Shimomura, and N. Furukawa: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 1918. (2005).
- [49] K. Kubo, C. Hotta, S. Miyahara, and N. Furukawa: Physica B **378** (2006) 273.
- [50] M. Imada and M. Kohno: Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 143.
- [51] 錢谷勇磁, 堀金和正, 大久保茂春, 秋光純: 固体物理 **38** (2003) 415.
- [52] E. Witten: Nucl. Phys. B **202** (1982) 253.
- [53] 浜中真志: 素粒子論研究 **106** (2002) 1.
- [54] P. Fendley and K. Schoutens: Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 046403.
- [55] L. Huijse, J. Halverson, P. Fendley, and K. Schoutens: Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 146406.
- [56] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1920.
- [57] S. Ryu and Y. Hatsugai: Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 077002.
- [58] A. P. Schnyder and S. Ryu: Phys. Rev. B **84** (2011) 060504(R).
- [59] T. Scaffidi and S. H. Simon: Phys. Rev. B **90** (2014) 115132.
- [60] R. R. Biswas: Phys. Rev. Lett. **111** (2013) 136401 (2013).
- [61] Z. Liu, F. Liu, and Y-S. Wu: Chin. Phys. B **23** (2014) 077308. [arXiv:1404.1131]
- [62] O. Derzhko, J. Richter, and M. Maksymenko: preprint (2015). [arXiv:1502.02729]

図 1: (a) bipartite グラフの例。式 (2.10) の T に対応する。サイト 1 と 5 の間の飛び移り積分が t' 、その他のボンド上では t である。(b) T^2 に対応するグラフ。(c) T の固有値を t' の関数としてプロットしたもの。 $t = 1$ としている。

図 2: (a) Lieb 格子。破線で囲んだ部分は単位胞を表す。(b) 正方格子。行列 S_A に対応。(c) チェッカーボード格子 (正方格子のライングラフ)。行列 S_B に対応。一様周期的な場合のバンド構造を、それぞれの格子の下に示した。ただし、(a) の各ボンド上で飛び移り積分を $t = 1$ としている。

図 3: (a) デコレートした蜂の巣格子。破線で囲んだ部分は単位胞を表す。(b) 蜂の巣格子。行列 S_A に対応。(c) カゴメ格子 (蜂の巣格子のライングラフ)。行列 S_B に対応。一様周期的な場合のバンド構造を、それぞれの格子の下に示した。ただし、(a) の各ボンド上で飛び移り積分を $t = 1$ としている。

図 4: (a) ダングリングボンドのある Lieb 格子。(b) チェッカーボード格子。行列 S_A に対応。(c) 田崎模型のホッピング行列のネットワーク。行列 S_B に対応。一様周期的な場合のバンド構造を、それぞれの格子の下に示した。ただし、(a) の各ボンド上で飛び移り積分を $t = 1$ としている。

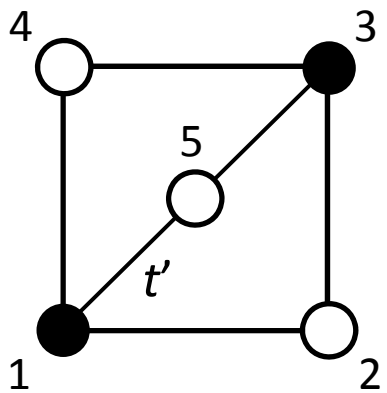
図 5: 磁束の入ったリングが結合した系。(a) には 2 つ、(b) には 3 つの idle state (磁束を変化させてもエネルギーが変わらない固有状態) が存在する。(c) T の固有値を $0 \leq \phi_1, \phi_2 \leq 2\pi$ でプロットしたもの。 $t = 1$ としている。(d) 一般化した磁束リング問題。左右のリング上の 2 つの「分子」の固有エネルギーが一致する場合、idle state が現れる。

図 6: (a) 正方格子の各辺に 2 つずつサイトを置いた格子。破線で囲んだ部分は単位胞を表す。単位胞内のサイトのラベルは、図 5 (a) のサイトに対応する。灰色に塗られた部分と符号は、式 (4.5) の局在状態を表す。(b) 正方格子の部分ライングラフ。(a) の格子上的ホッピング行列 T の二乗に対応する。

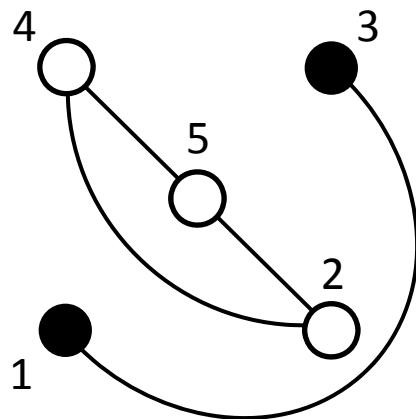
図7: 正方格子の各辺に (a) 1つ、(b) 2つ、(c) 3つずつサイトを置いた格子。一様周期的な場合のバンド構造を、それぞれの格子の下に示した。これらに現れるフラットバンドのエネルギーは、直線分子の固有エネルギー (4.3) に対応している。

图 1

(a)



(b)



(c)

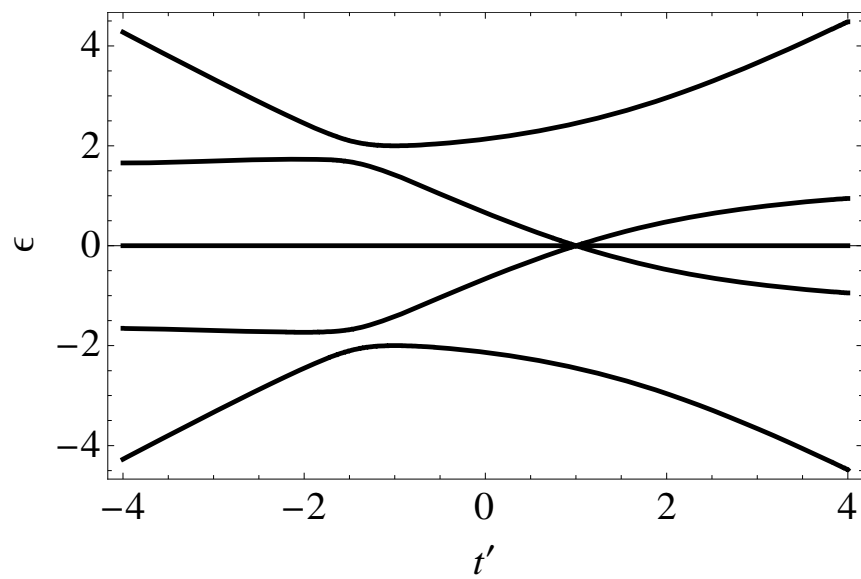
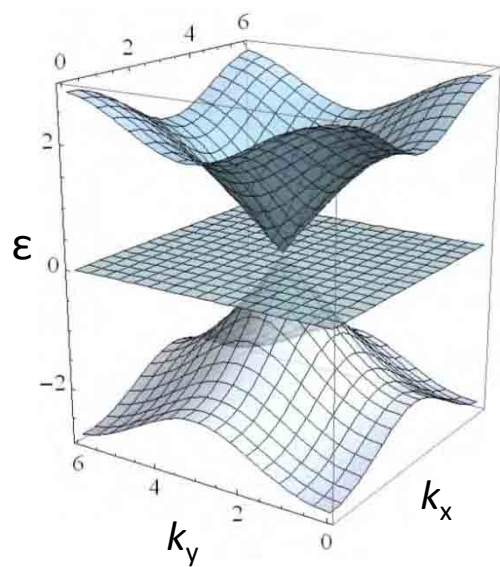
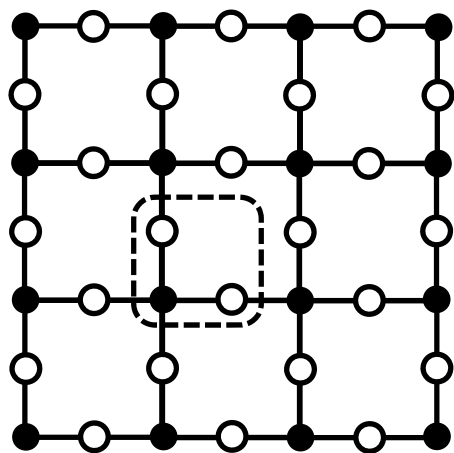
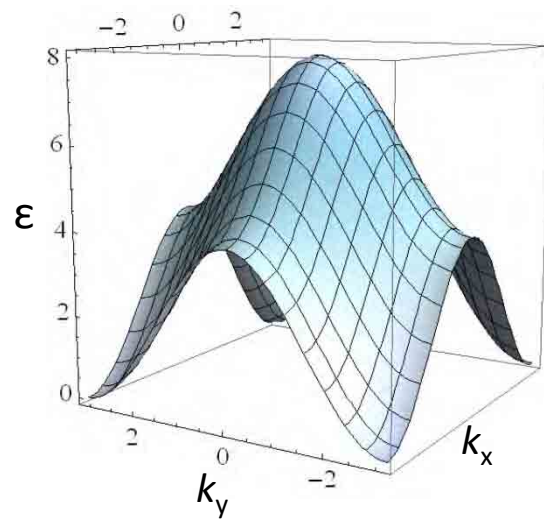
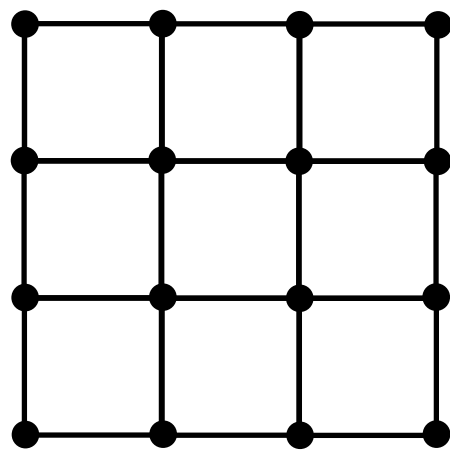


图2

(a)



(b)



(c)

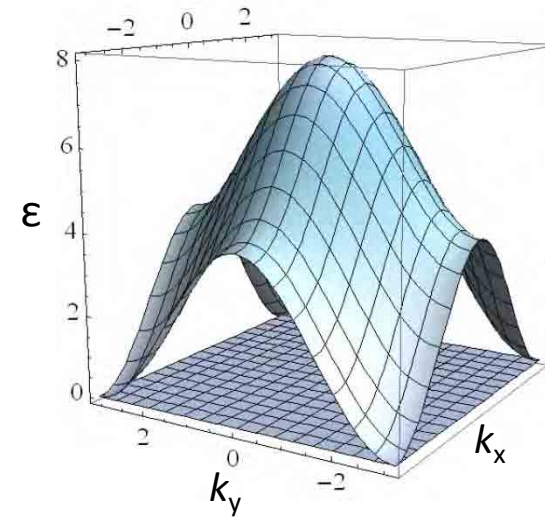
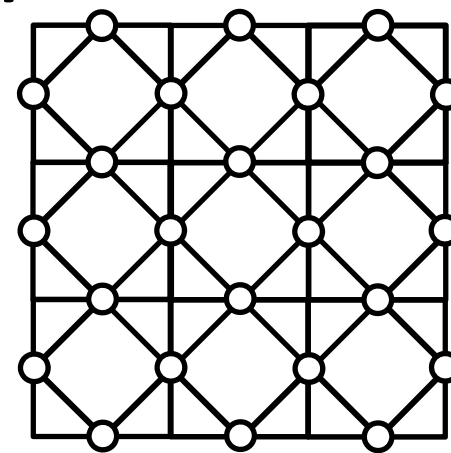
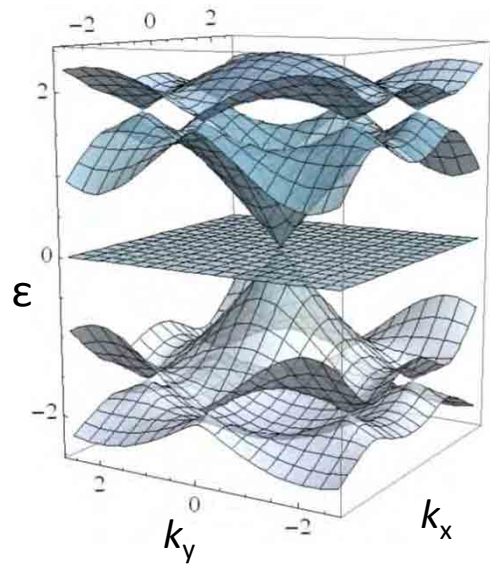
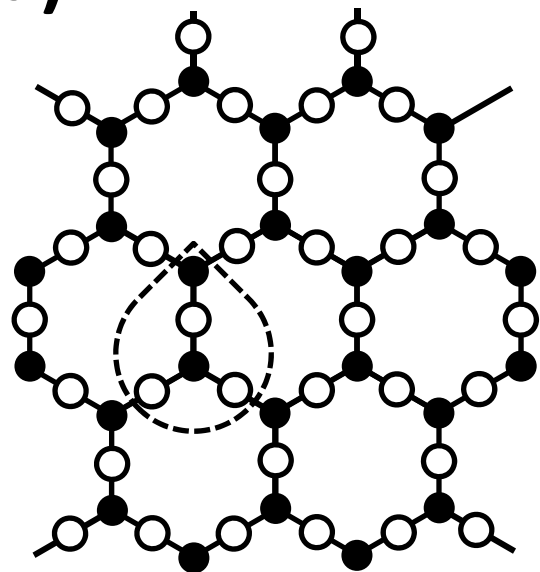
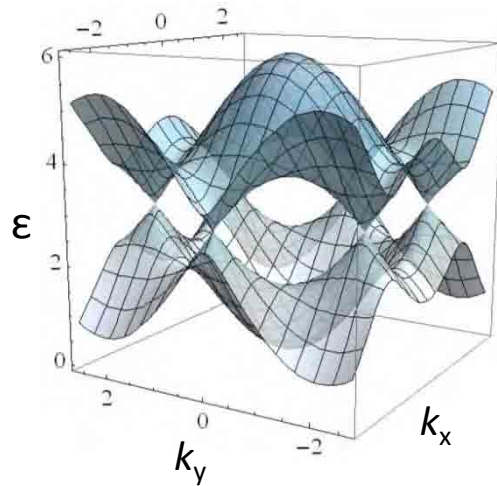
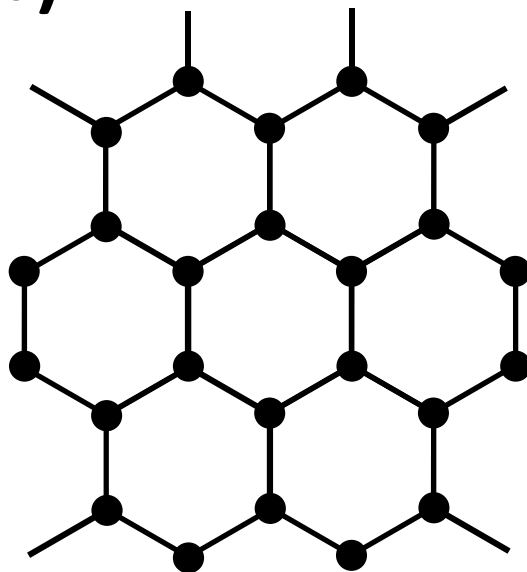


图3

(a)



(b)



(c)

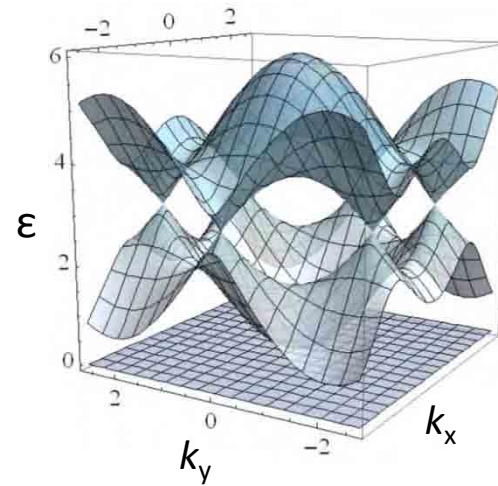
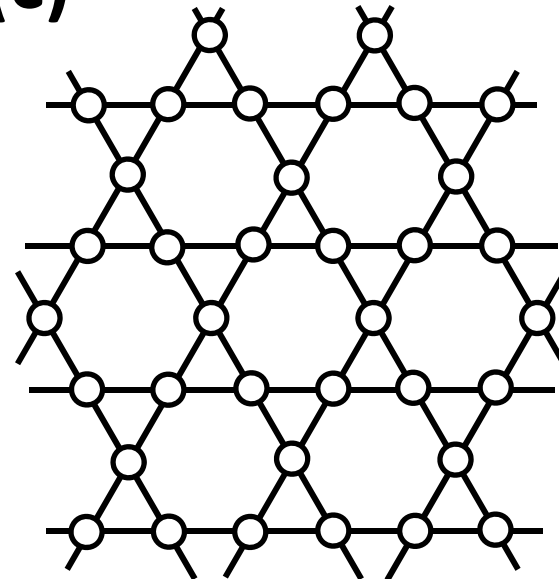
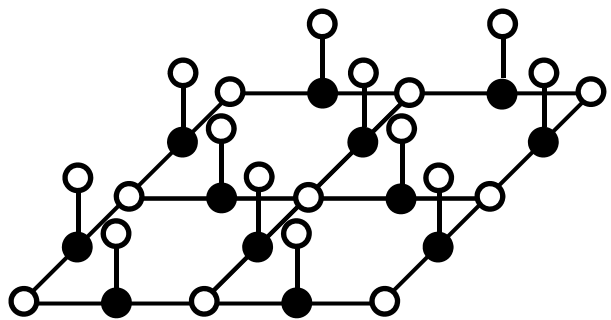
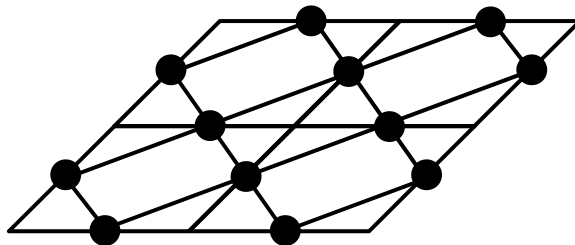


图4

(a)



(b)



(c)

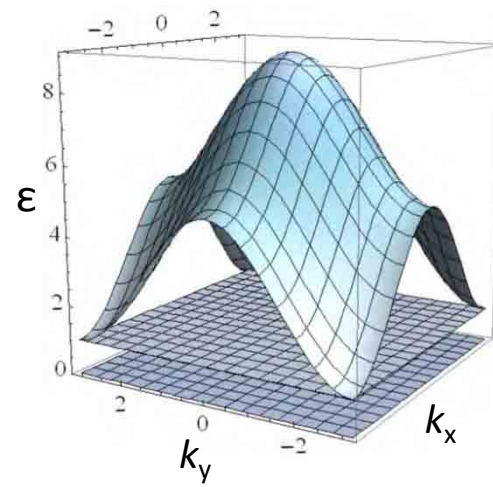
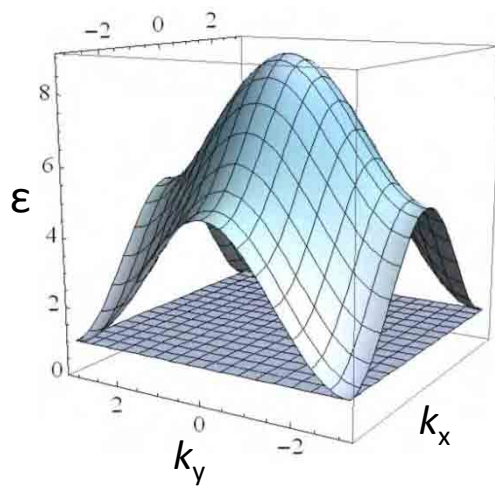
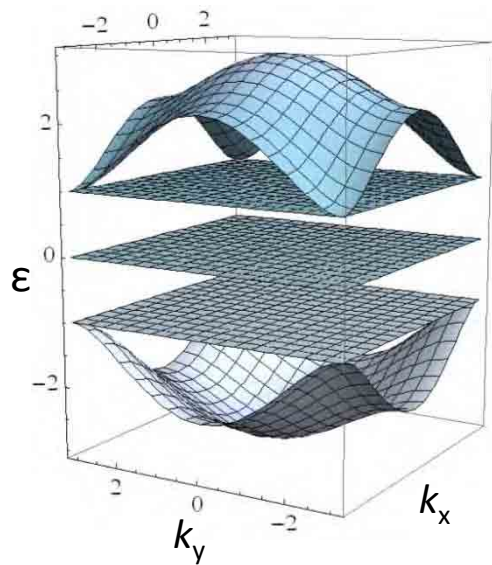
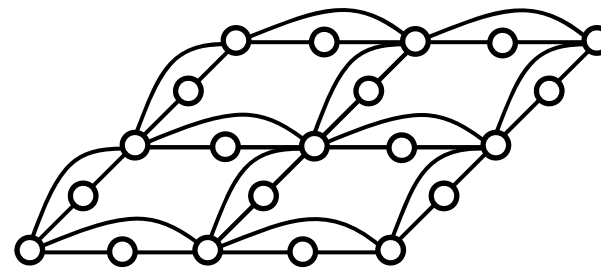
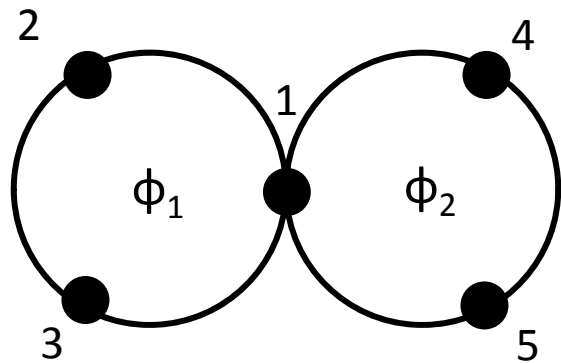
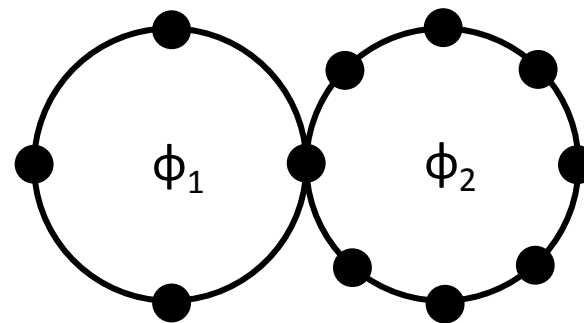


图5

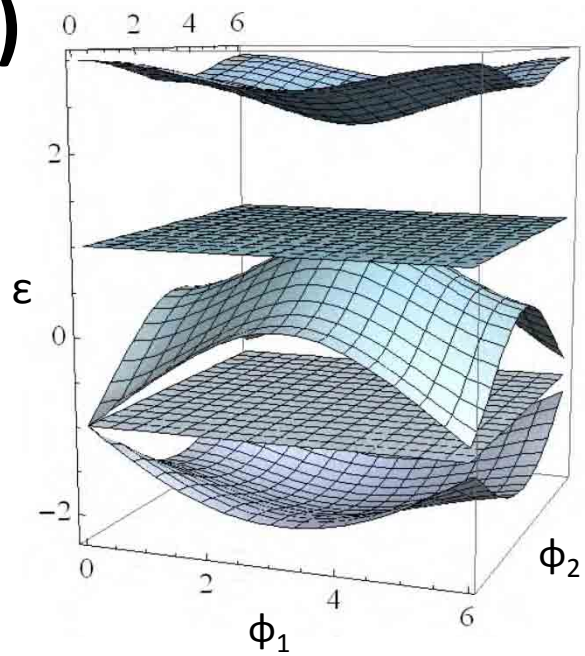
(a)



(b)



(c)



(d)

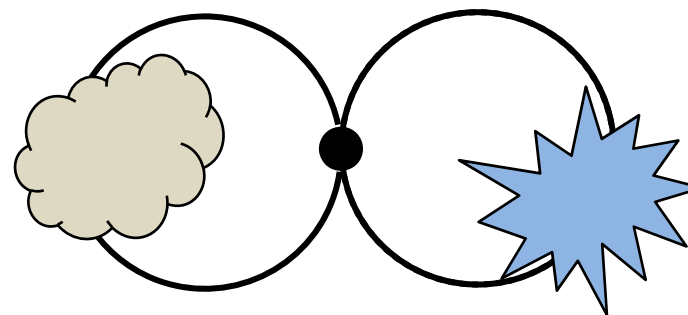
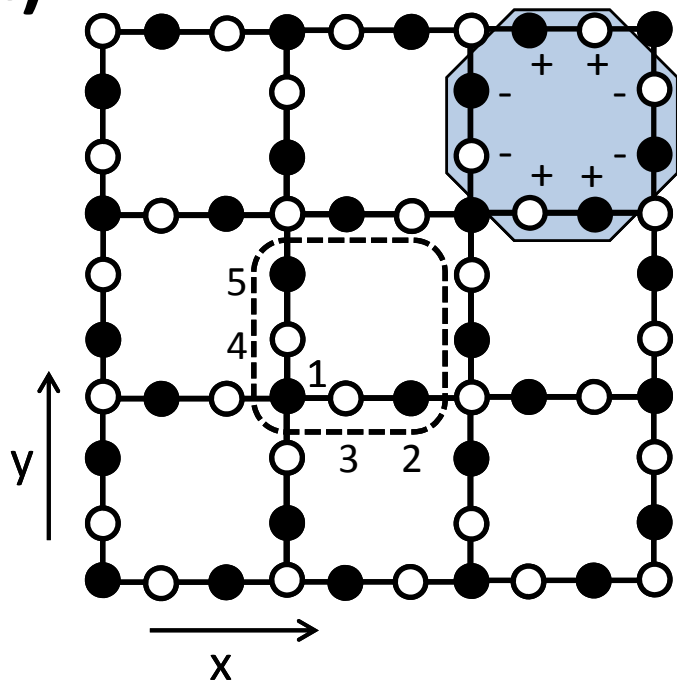


图6

(a)



(b)

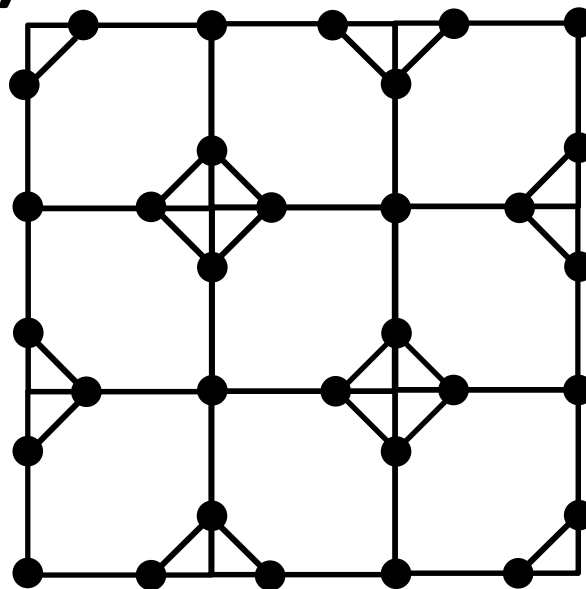
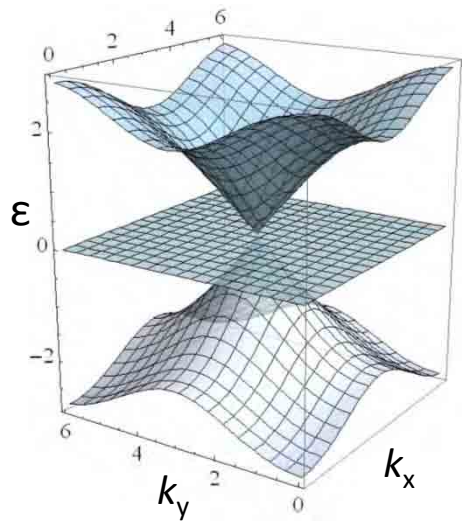
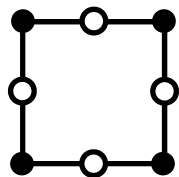
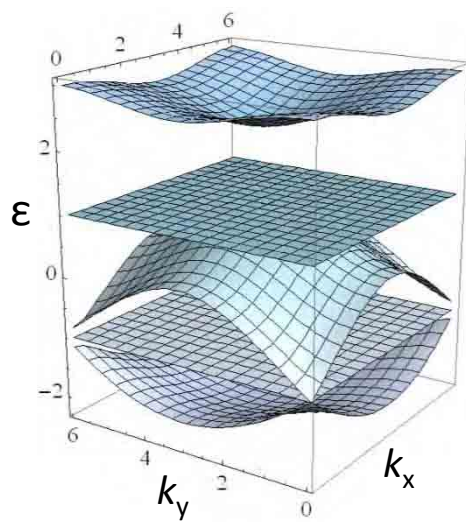
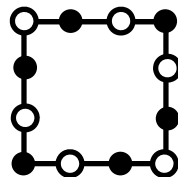


图7

(a)



(b)



(c)

