「固体物理」印刷中

グラフェンの物理

筑波大学 数理物質科学研究科 物理学専攻　初貝安弘
東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻　青木秀夫

1　2次元結晶としてのグラフェン

グラフェン (graphene) が物性物理学のホットなテーマに躍り出てすでに久しい。グラフェンの研究は、2005年頃のGeimグループ、およびKimグループによる試料合成と、特異な量子ホール効果の発見 [1, 3] によりキックオフされた。この数年グラフェン関連の会議で話をする機会が何度かあったが、その度に、いまや一大分野に成長したこのコミュニティーの熱気を感じる。Cond-matでタイトルにgrapheneを含む投稿論文数を検索すると、89編 (2006年), 269編 (2007年), 504編 (2008年)、563編 (2009年) であるから、この数年は毎日1〜2編はグラフェン関連の論文が出現しているわけである。これを見ても、グラフェン関連の研究はまさに爆発的な状況にあることが見てとれる。

グラフェンのレビューは幾つか出版されており [1, 2]、邦文でのグラフェンの解説 [4] も見受けられる状況ではあるが、本解説では、できるだけ各論でなくグラフェンに関連する物理現象の中で普遍的な面を紹介することを目的としたい。特にグラフェンの電子状態は「特異」と呼ばれるが、何がどのように特異なのかを中心にまとめてみた。基本的な解説を目指したが、我々自身の視点や研究成果も適宜織り込んでいる。この解説で、なぜグラフェンがそれほど興味深いのかが伝われば幸いである。

グラフェンの電子構造を見る前に、結晶としてのグラフェンの化学的、物理的な構造から始めよう。グラフェンはベンゼン環が平面状につながった2次元結晶であり、炭素原子が（ sp^2 の化学結合により）蜂の巣格子をなす。炭素は、最も強い共有結合性をもつ元素としてユニークで、実際 sp^1, sp^2, sp^3 という多様な混成をとることを反映して、それぞれ1次元のポリアセチレン、2次元のグラフェン、3次元のダイヤモンドという形態が存在する（周期律表で同族のシリコンでは、グラフェン構造は少なくとも天然には存在しないことを想起されたい）。一般に一つの軌道をもちいて d 次元の結晶格子を構成しようとすると、配位数（或る原子からみたときの隣接原子の個数）は最低でも $d+1$ ないと無限 d 次元結晶を構成することができない。これを丁度みたすのが1次元で配位数2のポリアセチレン、2次元で配位数3のグラフェン、3次元で配位数4のダイヤモンドである。この意味では、これらの格子は d-次元単純立方格子（天然にはあまり存在しない）より基本的ともいえる。結晶学的には、蜂の巣格子もダイアモンド格子も、所謂Bravais格

子（結晶の単位胞に 1 原子）ではなく、単位胞に 2 原子を含む（例えば、ダイアモンド構造は、 2 個の fcc 格子が入れ籠になっている）[9]。

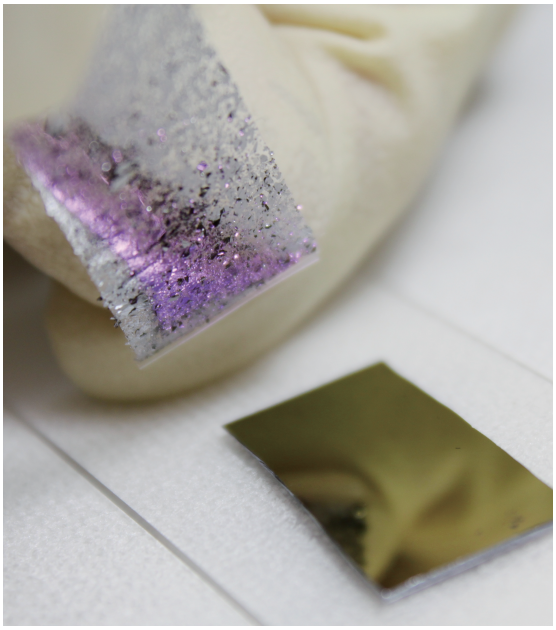


図 1: スコッチテープ法により剥がした試料（左）を、SiO2 基板（右）に転写する。（写真は、枡富龍一氏、渡辺悠樹氏提供）

理論的観点からは、グラフェンが合成できたのが驚きであるのは、原子単層、かつ十分マクロスコピック（現在では、典型的に数十ミクロン）な試料として合成される点にある。Peierls, Landau, Mermin 等が示したように、低次元の結晶は長波長ゆらぎに対して不安定であり、理論的には純粋な 1 次元や 2 次元の結晶は実現できないと考えられていた [11]。にも関わらず、グラフェンはどうやら十分に大きなサイズで 2 次元結晶構造をとっていると考えられている。マクロなグラフェンの外周の形態が、結晶構造を反映する特定の方位をもつこと（いわゆる faceting、 3 次元結晶では特定の方位をもつ結晶表面）にも表れている。実際の試料では、SiO_2 などの基板上におかれたり、バルクのシリコン・カーバイドの表面に作られたり、最近では CVD で基板の上に作られるので、2 次元系は 3 次元系に支えられている。しかし、後述する free-standing graphene (あるいは suspended graphene) と呼ばれるものでは、基本的には 2 次元無限系と考えるのが適切であると考えられている。理論的には存在してはいけないものが、実際にできてしまう。このあたりが、自然科学の面白いところで、実験家の面目躍如というところであろう。勿論この話には続きがあって、現実のグラフェンにおいては、蜂の巣格子は完璧な平面ではなく、凹凸をもっていて（これは ripple といわれる；図 2)、この長波長のうねりが重要な役割を果たしていると考えられている [12, 13]。つまり、グラフェンは 3 次元空間に存在するわけで、2 次元結晶とはいっても、3 次元方向のうねりの自由度を持

ち、この自由度がエントロピーを吸収することでゆらぎに対して安定な 2 次元構造を作るという考えである。うねりがあまり大きくなりすぎるとまずいが、そうなると sp^2 共有結合が歪むために電子系はエネルギーを損するため、局所的には変形を小さくしてエネルギー損失を抑えつつ、適当な大きさのうねりが存在することによりエントロピーを解放するというバランスにより、リップル構造をともなった 2 次元固体が存在し得ると考えられている。

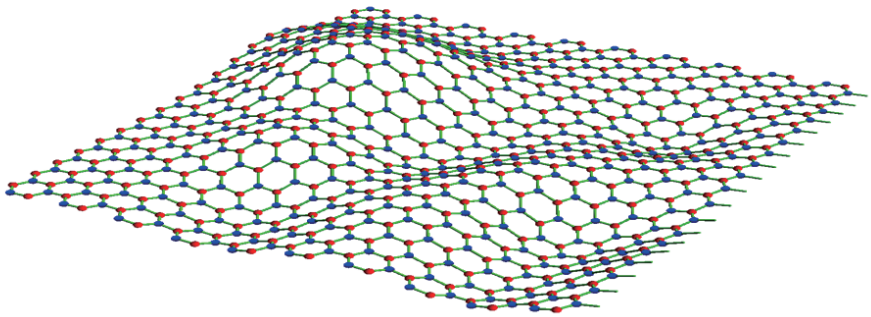


図 2: グラフェンの ripple の概念図。

2 質量を持たないディラック粒子としてのグラフェン中の電子

2.1 ゼロギャップ半導体と質量を持たないディラック粒子

グラフェンは、実際の合成こそごく最近に Geim 等により試料が得られるようになった訳であるが、理論的には 1940 年代から考えられており、その特異な電子構造を最初に指摘したのは Wallace[5] の 1947 年の論文であり、その後、群論的考察や、有効質量近似による考察が Lomer[6], McClure[7], Slonczewski-Weiss[8] によりなされた 。一般に結晶の電子構造は、金属と絶縁体（半導体を含む）に分けられる。金属はフェルミ面をもち、それをまたぐ電子正孔対生成によるギャップレスの励起をもつ一方、絶縁体は結晶の周期による量子力学的干渉効果に起因するバンド・ギャップで特徴付けられる。一方、半金属というカテゴリーがあり、これは普通は、半導体においてエネルギー・ギャップがゼロとなった状況として定義される。しかし、グラフェンの場合は、ギャップがゼロという意味では半金属であるが（実際、グラフェンを積層させたグラファイトは、小さな電子ポケットと小さな正孔ポケットをもつ半金属である）、グラフェンが特殊なのは、フェルミ・エネルギー E_F のところでバンド分散はゼロではないフェルミ速度をもって貫通している。つまり、普通は E_F がバンド端に来ると電子の速度はゼロになるのとは対照的な、普

通ではない半金属である点にある。これは、グラフェンがもつ蜂の巣格子という特

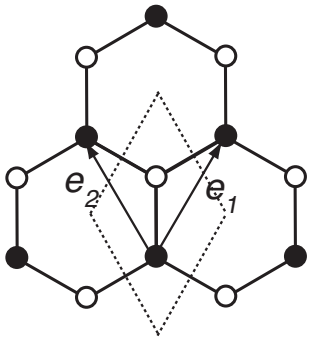


図 3: グラフェンの単位胞と基本並進ベクトル

別な格子 (図 3) のためである。蜂の巣格子は、図に菱形で描いた単位胞中に 2 原子（図では白黒で表示）を含む。格子は、炭素の sp^2 混成軌道が互いに 120 度異なる３方向を向く共有結合により結合しており、化学の言葉でいえば、これが σ 結合をなす。残る 1 電子は、格子 (x,y) 面から垂直に飛び出た p_z 軌道 (π 軌道) に入り、これが原子間を飛び移る。これを π 結合とよび、これから成るバンドを π バンドとよぶ。

グラフェンの電子的性質を担うのは、π バンドであり、フェルミ・エネルギー E_F もこのバンドを横切っている。これを普通は tight-binding 模型で扱う。[14] この時、ハミルトニアンは、 $\boldsymbol{x}$ を単位胞の位置のラベルとして

$$\mathcal{H} = t \sum_{x} \left[c_{\circ}^{\dagger}(\boldsymbol{x}) c_{\bullet}(\underline{x}) + c_{\bullet}^{\dagger}(\boldsymbol{x}+e_1) c_{\circ}(\boldsymbol{x}) + c_{\bullet}^{\dagger}(\boldsymbol{x}+e_2) c_{\circ}(\boldsymbol{x}) \right]$$

と書ける。ここで、$c_{\nu}^{\dagger}(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x}$ にある単位胞内の $\nu = \circ$ または $\bullet$ の原子の π 軌道に電子を生成する演算子、t は最隣接原子間の飛び移り積分である。現実のグラフェンでは $t \simeq -3$ eV という値をもつ。

ハミルトニアンを波数表示するために、$c_{\bullet\circ}(x) = \sum_k e^{ikx} c_{\bullet\circ}(k)$ のように Bloch 表示すると、

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(k) &= \sum_{k} \mathbf{c}^{\dagger}(k) H(k) \mathbf{c}(k), \\ H(k) &= \begin{pmatrix} 0 & D(k) \\ D^{*}(k) & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる。ここで $\mathbf{c}^{\dagger}(k) \equiv (c_{\bullet}^{\dagger}(k), c_{\circ}^{\dagger}(k))$、$D(k) = t(1 + e^{-ik_1} + e^{-ik_2})$ である。各 k ごとに対角化すれば、永年方程式が $\epsilon^2(k) = |D(k)|^2$ となることからすぐ分かるように、エネルギー分散は $\epsilon(k) = \pm |D(k)|$ となる。このエネルギー分散をを図 4 に示すが、これから、グラフェンのバンド分散は、波数空間 2 点（ブリユアン・ゾーンの、K 点と

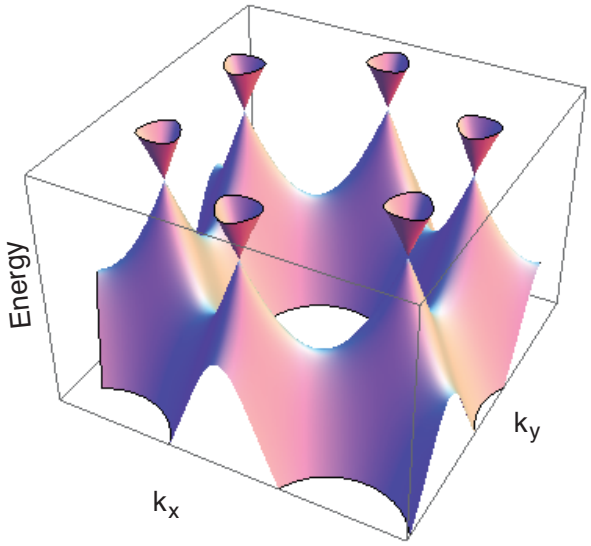


図 4: グラフェンのエネルギー分散 。

K’ 点とよばれる点）でエネルギー・ギャップが線形に閉じる（というか交差する）円錐 (cone) をもつ、特異な系であることが見て取れる。ギャップが閉じる点近傍で分散関係が、質量を持たないディラック粒子と形式的に似ているので、グラフェン中の電子は相対論的であるとも表現される。$D(k) = 0$ がゼロ・ギャップの条件をあたえる波数の条件であり、具体的には $e^{-ik_1} = \omega, e^{-ik_2} = \omega^2$ （ここで $\omega^3 = 1, \omega \neq 1$ は 1 の 3 乗根）となる。この代数的な条件は、各サイトからでる 3 本のリンクの同等性にあることは Slonczewsky-Weiss により古くから知られていた [8]。バンド・パラメータとしては、有効質量 $m^* \simeq 0.6m_e$、フェルミ速度 $v_F \simeq 10^5$ m/s （光速の約 1/300）である。

この特異なディラック・コーンの存在は偶然なのであろうか？また、線形にエネルギーが閉じる点は 2 箇所あるが、1 箇所ということも一般にはあり得るのであろうか？これらを問題意識として、少し一般的に考察してみよう。通常の固体中のエネルギー・バンド構造は、いわゆる有効質量近似により理解される。ブリユアン・ゾーン中の着目する点（普通はバンドの底、もしくは頂点）の波数 $\boldsymbol{k}_0$ 近傍でエネルギー分散 $\epsilon(\boldsymbol{k})$ を、$\epsilon(\boldsymbol{k}) - \epsilon(\boldsymbol{k}_0) \approx \pm\frac{\hbar^2(\delta k)^2}{2m_{\rm eff}}$ (ここで $\delta\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0$) のように展開し、$m_{\rm eff}$ を有効質量とみなし、k 表示から実空間表示にする手続き（ $\hbar\delta\boldsymbol{k} \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ ）により、有効ハミルトニアンを $H_{\rm eff} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\rm eff}}\boldsymbol{\nabla}^2$ と考え、質量 $m_{\rm eff}$ の自由粒子 (量子力学的には平面波) とみなす (図 5(a))。この有効質量近似はバンド理論の一つの基礎としてあまねく使われているものである。

しかしこの近似は図 5(b) のようにエネルギー分散が線形に交差するときには、分散の曲率の逆数としての有効質量はうまく定義できず、有効質量近似が成立しない。そのために、Slonczewsky-Weiss は、K 点、K’ 点の周りを、所謂 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 摂動

を用いて扱ったのであった [8]。

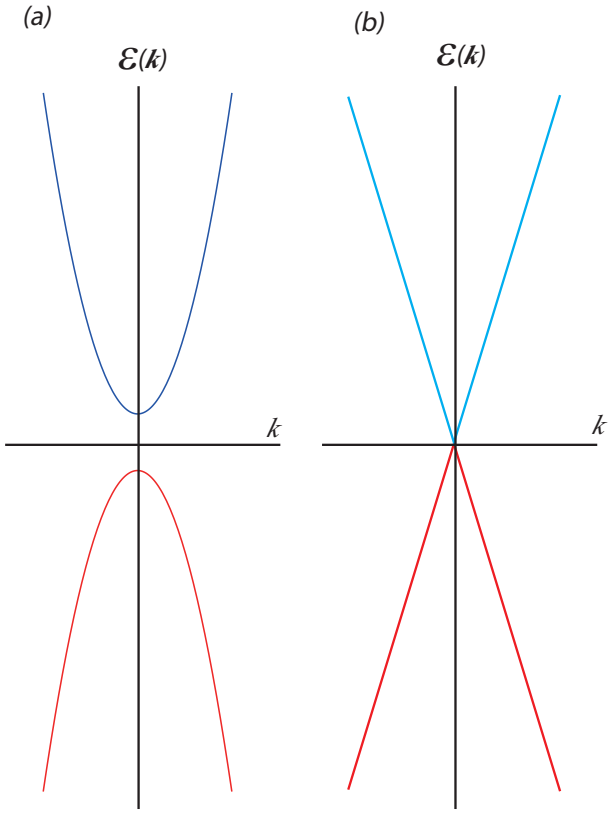


図 5: 半導体 (a) とゼロギャップ半導体 (b)。

ここでは、以下のような観点から見てみよう [15]。一般に、エネルギー的に接近あるいは交差した価電子帯、伝導帯という 2 つのエネルギー・バンドをギャップ（あるいは交差）近傍で議論するには、波数 $\boldsymbol{k}$ をパラメーターとする 2 準位系として考えればよい。つまりその k 空間でのハミルトニアンは 2 行 2 列となる。このように考えると、この設定は、偶然縮退点の近傍で波動関数を一般に議論した Berry の考察そのものと見なせる [16]。よって、エネルギー原点をギャップの中央（あるいは交点）にとり $\mathrm{Tr}\, H = 0$ とすれば、[1] 有効ハミルトニアンは

$$H(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} R_3(\boldsymbol{k}) & \Delta(\boldsymbol{k}) \\ \Delta^*(\boldsymbol{k}) & -R_3(\boldsymbol{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_3 & R_1 - iR_2 \\ R_1 + iR_2 & -R_3 \end{pmatrix} = \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tag{1}$$

のように書ける。ここで $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ はパウリ行列、Δ（複素数）と R_3（実数）はバンドの詳細を決定するパラメターであり、これを第 3 項においては Berry に従って 3 個の実パラメター $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{k}) = (R_1(\boldsymbol{k}), R_2(\boldsymbol{k}), R_3(\boldsymbol{k}))$, $R_1(\boldsymbol{k}) = \mathrm{Re}\,\Delta(\boldsymbol{k})$, $R_2(\boldsymbol{k}) = -\mathrm{Im}\,\Delta(\boldsymbol{k})$

[1] 縮退点、すなわちゼロギャップ点近傍でエネルギー原点に波数依存性を持たせると、一般にはディラックコーンの傾き (tilting) を与え、実際或る種の有機固体でこのようなことが見出されているが、グラフェンでは、系に後述の大局的なカイラル対称性を要求すれば、この tilting は起きない。

で書き直した。このハミルトニアンの固有エネルギーは、永年方程式が $E^2 = R^2$(ここで $R \equiv |\boldsymbol{R}|$) となることから、ただちに $E_{\pm} = \pm R(\boldsymbol{k})$ となり、複号は + が伝導帯、– が価電子帯に対応し、$E_g = 2R$ がエネルギー・ギャップとなることが分かる。

ここで、グラフェンは 2 次元系だから波数 $\boldsymbol{k}$ は 2 次元空間を動き、ハミルトニアンは 3 次元のパラメター $\boldsymbol{R}$ により指定されるので、自由度の数より変数の次元の方が少ないから、一般には $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{k})$ は原点を通過せず、つまり、ハミルトニアンが上記の 2×2 行列に書けるときでも、**エネルギー・ギャップは一般には閉じない**。つまり、ゼロ・ギャップになるためには条件が必要であり、一般には物理パラメタをうまく調整する (fine tune) したときのみ実現するとの意味で偶然縮退といえる。逆に、偶然で良いのであれば、２本のバンドが交差することはあり得る。これは、ブリユアン・ゾーン内で対称性の高い点でもおき得るし、一般の点でもおき得る。それでは、グラフェンにおけるディラック・コーンは、どんな条件により発生したのであろうか。

グラフェンにおいては、ディラック・コーンはブリユアン・ゾーン内で対称性の高い点 (K,K') に発生し、普通はグラフェンがディラック・コーンをもつ理由をこれから説明する [5]。しかし実は、より一般的には、**カイラル対称性**とよばれる或る対称性が重要であり、これを次節で詳しく説明してみよう。

2.2　カイラル対称性とグラフェン

グラフェンは単位胞に 2 原子（A,B と呼び、これらは等価, 図 3 の白、黒の格子点）をもつから、各格子点に 1 軌道（今の場合は π 軌道）を考えれば 2 バンドとなる。したがって、並進対称性さえあれば（例えば、現実には無視できない次隣接以遠の長距離ホッピングがあろうがあるまいが)、波数表示に移ったとき 2 行 2 列のハミルトニアン $H(\boldsymbol{k})$ で記述される。しかしグラフェンの基本的な特徴として、蜂の巣格子上で A,B 部分格子に分けたとき、図 3 のように、主要な飛び移り積分は AB 格子間にのみ存在する。この性質を、一般に bipartite と呼ぶ。この性質により、グラフェンのハミルトニアンは $\gamma = \sigma_3$ として、$\{H, \gamma\} = H\gamma + \gamma H = 0$ という関係式を満たすことが示せ、グラフェンのカイラル対称性と呼ばれる。実はこのカイラル対称性はグラフェンの一つの重要な特性であるフェルミオン・ダブリング (Fermion doubling) において本質的な条件である。これは場の理論における用語であり、ちなみに、南部理論において対称性の自発的破れが考えられたとき、元々はカイラル対称性が念頭に置かれた。

以下で示すように、質量のないディラック粒子に関するこのカイラル対称性を、より一般の観点から考えるとわかりやすい [15]。まず、一般のカイラル演算子 γ を 3 次元の単位ベクトル $\boldsymbol{n}_\gamma$, ($|\boldsymbol{n}_\gamma| = 1$) を用いて、次のように定義しよう。

$$\gamma = \boldsymbol{n}_\gamma \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \gamma^2 = \sigma_0$$

ここで σ_0 は 2 次元の単位行列である。この時、ハミルトニアン H がカイラル対称であれば

$$\{H, \gamma\} = 0, \quad \gamma H \gamma^{-1} = -H$$

となるから、トレースをとると $\mathrm{Tr}\, H = 0$ となる。よってカイラル対称なハミルトニアンは、一般に $H = \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ と展開できる。ここで、パウリ行列に関して演習問題などでお目にかかる関係式 $(\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}) + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})$ を用いると、カイラル対称性の条件は $0 = \{H, \gamma\} = \{\boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{n}_\gamma \cdot \boldsymbol{\sigma}\} = 2\boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{n}_\gamma$ となるから、$\boldsymbol{R}$ ベクトルが、原点を通る $\boldsymbol{n}_\gamma$ の法平面に常にのっていることに対応する。(図 6) 次に、この

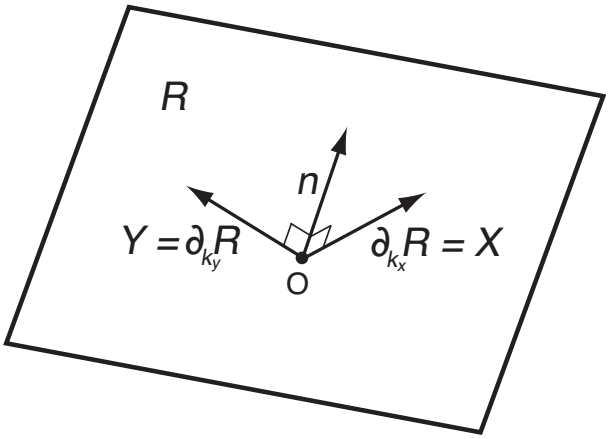


図 6: ゼロギャップ・ハミルトニアンのカイラル対称性の幾何学的表示。

カイラル対称な 2 バンド系において、ゼロギャップの条件 $(\boldsymbol{R}(\boldsymbol{k}_0) = 0)$ が或る波数 $\boldsymbol{k}_0$ で満たされるとしよう（一般のゼロギャップ半導体）。このとき、その波数周りで H を展開すると（$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ 摂動と同様の考え方である）、低エネルギーの有効ハミルトニアンは $\boldsymbol{k}$ の 1 次から始まり、

$$\begin{aligned} H(\boldsymbol{k}) &\approx H_0 = (\boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{\sigma})\delta k_x + (\boldsymbol{Y} \cdot \boldsymbol{\sigma})\delta k_y, \\ \boldsymbol{X} &= \partial \boldsymbol{R}/\partial k_x,\ \boldsymbol{Y} = \partial \boldsymbol{R}/\partial k_y,\ \delta \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0 \end{aligned}$$

のようにエネルギー分散はディラック・コーンを作る。

ここで $\boldsymbol{X} \times \boldsymbol{Y}$ もまたこの平面の法線ベクトルであることに注意し、これが $\boldsymbol{n}_\gamma$ と平行の場合に、ディラック・コーンのカイラリティー を $\chi = +1$, 反平行の場合にカイラリティー $\chi = -1$ と定義しよう。つまり、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X} \times \boldsymbol{Y} &= \chi(\hbar c)^2 \boldsymbol{n}_\gamma, \\ c^2 &= |\boldsymbol{X} \times \boldsymbol{Y}|/\hbar^2 \end{aligned}$$

と書こう。$(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}, \boldsymbol{n}_\gamma)$ が右手系の座標系をつくればカイラリティー +1, 左手系なら −1 である。ここで c は「光速」（質量のないディラック粒子の速度 v_F）である。H

を 2 乗すると

$$
\begin{aligned}
H^2 &= (\hbar c)^2(\delta k_x, \delta k_y)\Xi\begin{pmatrix} \delta k_x \\ \delta k_y \end{pmatrix}, \\
\Xi &= \frac{1}{(\hbar c)^2}\begin{pmatrix} \boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{X} & \boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{Y} \\ \boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{Y} & \boldsymbol{Y}\cdot\boldsymbol{Y} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

となるので、$\det\Xi = (\hbar c)^{-4}|\boldsymbol{X}\times\boldsymbol{Y}|^2 = 1$ となることから, 正定値の対称行列 Ξ を対角化する直交行列を $\boldsymbol{V}$ として $\Xi = \boldsymbol{V}^\dagger \mathrm{diag}\,(\xi_X, \xi_Y)\boldsymbol{V}$, $(K_X, K_Y) = (\delta k_x, \delta k_y)\boldsymbol{V}^\dagger$ とすれば、H のエネルギー分散が

$$
\begin{aligned}
E &= \pm\hbar\omega_K, \\
\omega_K &= c\bar{K}, \\
\bar{K} &= \sqrt{\xi_X K_X^2 + \xi_Y K_Y^2}, \\
\xi_X\xi_Y &= \det\Xi = 1
\end{aligned}
$$

という（一般的には異方的な）コーンになることを確かめることができる。

ここでは、A,B 部分格子の同等性に基づくカイラル対称性がある場合、自然にディラック分散が現れることを議論した。次節で議論するようにこのカイラル対称性を守る限り、系を detune しても（例えば、蜂の巣格子上の 1 軌道 tight-binding 模型から変更しても)、ディラック分散はトポロジカルに安定（有限の外乱に対して安定的で普遍的）であることが示せる。逆に、単位胞内の 2 サイトの同等性を破ればカイラル対称性が破れる。対称性は破られる運命にさらされることは南部理論のいうところであるが、このカイラル対称性も破られる場合があり、バルクでカイラル対称性を破らなくとも端付近で局所的にカイラル対称性は破られる（ＡＢサイトの等価性を破るスピン秩序が立つ）のがその例である。これについては「バルク・エッジ対応」と関連して後で議論する。

2.3 カイラル対称性とディラック・コーンのトポロジカル安定性

このように、並進対称かつ AB サイトが同等であるグラフェンではカイラル対称性が常に保たれることを説明した。このカイラル対称性さえ保てば、一度生成した質量のないディラック粒子としての分散関係は外乱等の摂動に対して安定に存在することが導かれる。しかも、この摂動は無限小であることは必要でなく、一般にはある範囲の有限の大きさの摂動下であっても、ゼロギャップのままである。これがトポロジカル安定性であり [18, 19]、例えば、格子変形等が有限に生じて、グラフェンの格子が六角形から適当に変形したとしても、その変形がある臨界値を超えさえしなければ、ギャップレスのエネルギー分散は安定に存在する。この事実はいくつかの数値的研究により示唆されている [17]。

また、ブリユアン・ゾーンが周期的であり、境界をもたないことに対応してゼロギャップの波数は一般には必ず偶数個存在する。これが**フェルミオン・ダブリング**であるが、４次元の格子ゲージ理論においては、Nielsen-二宮定理 [20] として、よく知られた事実である。我々の 2 次元系（グラフェン）においても同等の議論が行え、カイラル対称なギャップレスのディラック分散はダブリングを必ず伴う、すなわちディラック点は必ず偶数個存在する。この意味で、複数のディラック分散はカイラル対称性によりトポロジカルに保護されている [21, 22, 15]。

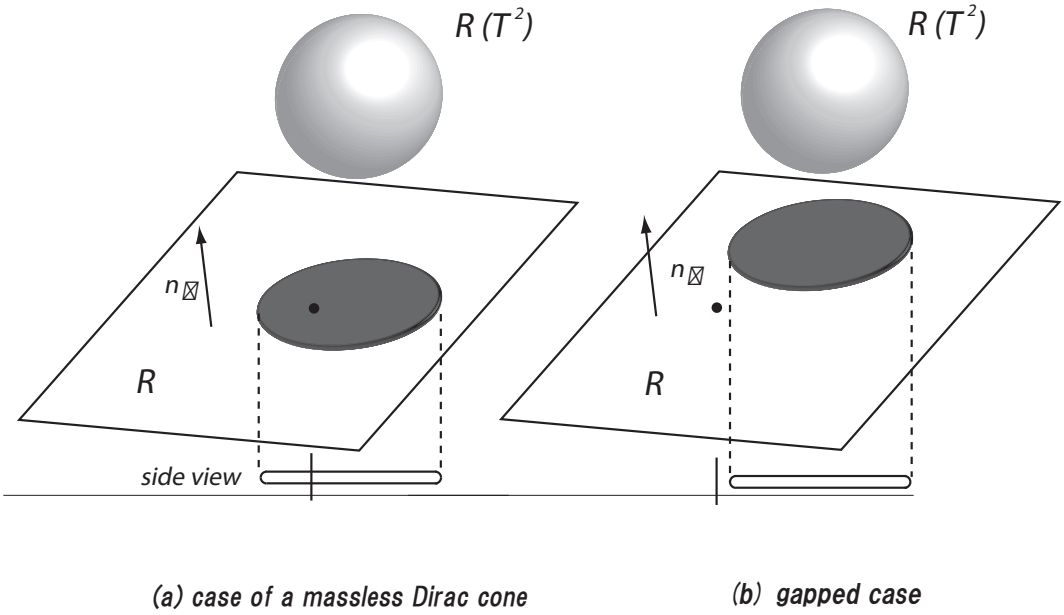


図 7: カイラル対称なときの像 $\boldsymbol{R}(T^2)$。

ダブリングについて以下簡単に説明しよう。まず、ブリユアン・ゾーンは周期的であり、2 次元では $T^2 = \{(k_x, k_y) | k_x, k_y \in [-\pi, \pi]\}$ となる。すなわち、正方形を $k_x = \pm\pi$ を貼り合わせてシリンダーに、さらに $k_y = \pm\pi$ を貼り合わせてトーラスとなる。ここで、前節でハミルトニアンの議論で用いたベリーのパラメトリゼーションである写像 $\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{R}(\boldsymbol{k})$ を使えば、3 次元空間 $\boldsymbol{R}$ 空間上で 2 次元閉曲面であるブリユアン・ゾーンの像 $\boldsymbol{R}(T^2)$　は、やはり 3 次元のなかの 2 次元閉曲面となる。ここでさらにカイラル対称性を要求すればこの閉曲面は原点を通り $\boldsymbol{n}_y$ に垂直な平面上につぶされて存在することとなる。風船を机の上に押しつぶすことを考えて見ればよい (図 7) 。このとき、原点上には（破れていない限り）風船は必ず偶数回重なっていることは明らかであろう。ただし、全く重なっていない図の右のような状況もあり得る。また、つぶされた風船の縁が偶然原点と重なることは一般には考えなくてよいので、重なった回数は風船を或る程度有限に動かしても変化しないことも明らかであろう。原点上に像 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{k}_0)$ が重なったとき、ゼロギャップをあたえることに注意すれば、以上の考察からフェルミオン・ダブリングとそのトポロ

ジカル安定性は自明となる。

このように一行も計算せずに、以上が導かれることがトポロジカルな議論の利点である。同様の議論は 4 次元でも実行可能で、これが Nielsen-二宮の定理と見なせる。このような導出は我々と独立に Creutz によりなされている [18, 19, 9, 21]。

カイラリティー については、我々の 2 次元の場合、 3 次元の中の閉曲面 $\boldsymbol{R}$ は一般の点では向き付け可能であることから、それを 2 次元平面上につぶした時、ダブラー間では、図 8 にあるように、表と裏にある $\boldsymbol{X} \times \boldsymbol{Y}$ は逆向きとなり、カイラリティー χ も逆符号となることも明らかとなる [15]。

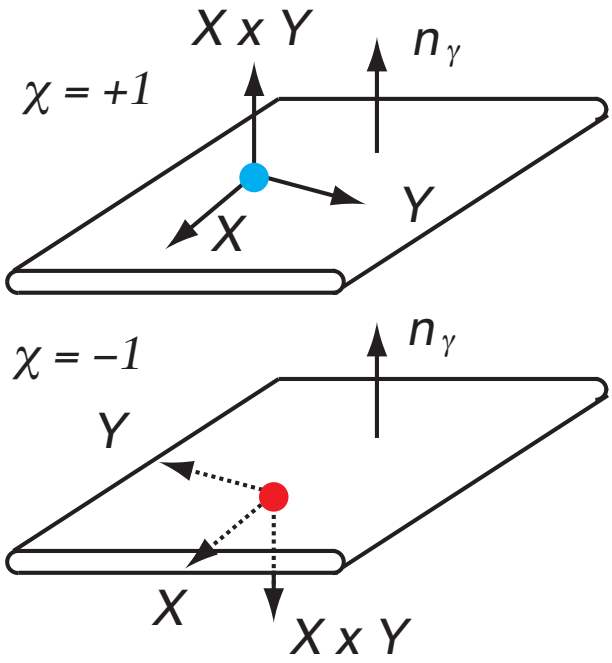


図 8: ダブリングによるカイラルペアのカイラリティー。

2.4 乱れたグラフェンにおけるカイラル対称性

グラフェンは、実際に存在する試料には必ず乱れが存在し、グラフェンの物理における重要な一側面をつくる。歴史を振り返れば、グラフェンの線形分散の発見は実験による実現よりはるかに古いことは既に説明したが、ディラック粒子に対する乱れの効果の理論も、グラフェンの発見よりかなり以前にさかのぼる。前節で説明したカイラル対称性は、より広く、並進対称性を持たない乱れをともなったグラフェンにおいても、bipartite な格子上で定義され、その意義はランダム系の普遍性の観点からもいろいろと議論がなされている [66, 67, 65]

グラフェンにおける乱れとしては、種々のタイプが考えられるが、これらを表にまとめてみよう 9。この表では、乱れが存在するとき系のカイラル対称性が保た

グラフェンにおける外乱	カイラル対称性
不純物原子	×
飛び移り積分の乱れ	○
ランダム磁場	○
リップル	○
反強磁性秩序	×
ボンド秩序	○

図 9: グラフェンにおける種々の外乱がカイラル対称性を破るか否かを示した表。

れるか否かを示す。カイラル対称性を保つ乱れに関しては、ゼロ・エネルギーが特別な意味をもち、後で説明する磁場中の $n = 0$ ランダウ準位は大きな影響を受ける。表にあるように、不純物原子等からの乱れの効果はカイラル対称性を破るが、この解説の最初に触れたフリースタンディング・グラフェンと呼ばれる空中に浮かんだグラフェンを考えると、この系では不純物以外に 2 次元固体の安定性の要求から必須であるリップルが内的要因としての乱れとして存在する。実験的に極限的に乱れを減らしてもリップルだけは取り除けないのである。このリップルの主な効果は、原子間の距離を変更し、π軌道間の重なりの角度を変えることに寄与すると考えられる。これは格子模型としては長周期の空間相関を持つランダム・ホッピング、ランダム位相として系に影響をあたえ、また、連続模型としてはゆらいだゲージ場をもたらすこととなる。

3　磁場中グラフェンの量子ホール効果

グラフェンの最大の驚きは、その特異な量子ホール効果にあった [1, 3]。実験的発見以前に、安藤等により蜂の巣格子の量子ホール効果は理論的に調べられていた [25]。グラフェンにおけるゼロギャップ状態を質量を持たないディラック粒子と呼べば、グラフェンの量子ホール効果はこの質量を持たないディラック粒子の量子ホール効果というわけである。物理的には磁場効果でランダウ準位が形成されるが、グラフェンの場合は、ディラック粒子のランダウ準位となり、通常のランダウ準位とは異なるものとなる。特に、量子ホール効果に付随する、所謂トポロジカル量子数の値が特異になる。それだけでなく、その背景として、一般にホール効果はフェルミ・エネルギー以下の状態が関与するが、ディラック粒子系ではこれが特異な問題となる。つまり、ディラック方程式に対して、その負エネルギー

状態を全て占有した電子状態を通常ディラックの海として真空と考えるが、グラフェンにとっては、価電子帯をすべて埋めた中性のゼロギャップ半導体がそのディラックの海に対応する。ランダウ量子化はもちろん負エネルギー状態にも及ぶから、その意味で、磁場中グラフェンでの磁場効果は必然的に真空の再構成を伴うこととなる。この節ではまずは、特異なグラフェン・ランダウ準位構造について説明したい。

3.1　ランダウ準位とホール伝導度

最初に、普通の xy 平面内の 2 次元自由電子のランダウ準位について簡単に復習しておこう。ハミルトニアンを $H_F = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2$, $\boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ とし、一様磁場 $\boldsymbol{B} = (0, 0, B) = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}$ を与えるランダウ・ゲージにおけるベクトル・ポテンシャルを $\boldsymbol{A} = (0, Bx, 0)$ をとれば、波動関数は $\Psi = X_{k_y}(x)e^{-ik_y y}$ と書け、波動関数を変数分離した $X_{k_y}(x)$ は $x = x_0(k_y) = \ell_B^2 k_y$, $(\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}})$ を中心とする（x 方向に局在した）角振動数 $\omega = \frac{eB}{m}$ の調和振動子の波動関数となる。y 方向に長さ L_y の周期的境界条件を課せば、波数 $k_y = \frac{2\pi}{L_y}n_y$ は、$n_y \in \mathbb{Z}$ のように波数が量子化し、エネルギー準位は $E_n = \hbar\omega(N + 1/2), N = 0, 1, 2, \cdots$ というランダウ準位構造をつくる。さらに系が x 方向有限のシリンダー上にあるとして $0 < x_0(k_y) = \ell_B^2 k_y < L_x$ との拘束条件をおけば、各準位は $D = \frac{1}{2}\frac{L_x L_y}{\pi\ell_B^2}$ だけ縮退することとなる（ランダウ縮退）。

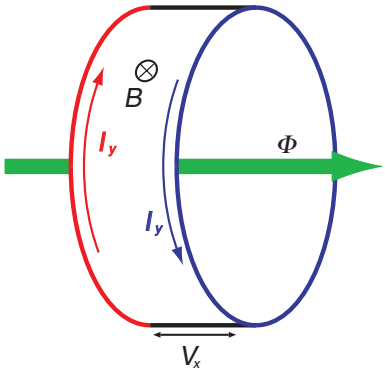


図 10: Laughlin の議論とホール伝導度

ここで Laughlin にならって、シリンダー内にアハロノフ・ボーム磁束 Φ を断熱的に導入し、系のホール伝導度を計算しよう [23]。磁束の効果は、$A_y \to A_y + \Delta A$ と定数 $\Delta A_y = \frac{\Phi}{L_y}$ だけ y 方向のベクトル・ポテンシャルを増加することで実現できるが、$p_y - e\Delta A = \hbar\frac{2\pi}{L_y}(n_y - \frac{\Phi}{\Phi_0}$ と書けるから、$\Delta\Phi = \Phi_0$ の変化はハミルトニアンに対する離散化された波数 k_y の 1 つ分のシフトとなり、断熱近似の範囲で、すなわち調和振動子の中心座標の変化に伴なうランダウ縮退した波動関数の x 方向への 1 つ分のずれに対応する。ここで $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ は磁束量子である。いま Φ を時間ととも

に連続的に増やしたとしよう。すると、電磁誘導により、シリンダーの円周方向に起電力が生じ、$\Delta\Phi = \Phi_0$ となる時刻 Δt でハミルトニアン（および境界条件）は元に戻る。つまり、$t = 0$ から $t = \Delta t$ になるまでに、離散的な k 点のセットは一様にシフトし、シリンダーの各端に電極がついているとすると、試料内部の状況は変わらず、或る整数個 (M) の電子が、一方の電極から他方の電極に移ったことになる。これがホール電流 j_x に対応するから、

$$j_x = -\frac{-eM}{L}\frac{1}{\Delta t} = -\frac{Me^2}{h}E_y$$

（ここで、L はシリンダーの周長、E_y は周方向の電場）。よって、ホール伝導度 $\sigma_{yx} = \frac{e^2}{h}M$ という量子化を得る。ここで系のフェルミ準位はバルクの N 番目と $N+1$ 番目の間にあるとすれば $(N = 1, 2, ...)$、この断熱過程においてシリンダーの両端を占有されたランダウ準位の数 N だけ一粒子準位（すなわち電子）が移動したと考えられるから、$M = N$ である。

3.2 グラフェンのランダウ準位とホール伝導度

グラフェンでは格子の効果は本質的であるから、一般には格子上のフェルミオンとしての電子を直接取り扱うことが必要となるが、その前にフェルミ面がギャップレスの $E = 0$ 十分近傍にあり、かつ磁場が十分弱いときの低エネルギーの有効理論としての連続系の質量を持たないディラック粒子の磁場効果について説明しよう。

前節でつかった一般のカイラル対称な零ギャップ半導体に対する有効ハミルトニアンは、k 表示から実空間表示に行く手続き $\hbar\delta k_x \to -i\hbar\partial_x, \hbar\delta k_y \to -i\hbar\partial_y$ となるが、ここで電磁場との結合をゲージ不変な形で $-i\hbar\partial_{x,y} \to -i\hbar\partial_{x,y} - eA_{x,y}$ として取り入れよう。ここでは磁場 $B = \mathrm{rot}\mathbf{A}$ は空間 z 方向に一様であるとする。よって、有効ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= \hbar^{-1}[(\boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{\sigma})\pi_x + (\boldsymbol{Y}\cdot\boldsymbol{\sigma})\pi_y], \\ \boldsymbol{\pi} &= -i\hbar\boldsymbol{\nabla} - e\boldsymbol{A} \end{aligned}$$

となる。ここで $[\pi_x, \pi_y] = i\hbar eB$ に注意すれば H^2 は

$$\begin{aligned} H^2 &= \hbar^{-2}\left[\boldsymbol{X}^2\pi_x^2 + \boldsymbol{Y}^2\pi_y^2 + \boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{Y}(\pi_x\pi_y + \pi_y\pi_x) + i(\boldsymbol{X}\times\boldsymbol{Y})\cdot\boldsymbol{\sigma}[\pi_x, \pi_y]\right] \\ &= c^2(\boldsymbol{\pi}^\dagger\boldsymbol{\Xi}\boldsymbol{\pi})\sigma_0 - \chi(eB\hbar c^2)\gamma \\ &= c^2(\xi_X\Pi_X^2 + \xi_Y\Pi_Y^2) - \chi(eB\hbar c^2)\gamma \end{aligned}$$

となる。ここで前に用いた $\boldsymbol{\Xi}$ を対角化する直交行列により $\boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\pi}$ とした。なお $\boldsymbol{X}\times\boldsymbol{Y}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \chi(\hbar c)^2\gamma$ である。H^2 の第一項は, $\det\boldsymbol{\Xi} = \xi_X\xi_Y = 1$ に注意して $c^2 \to \frac{1}{2m}$ と読み直せば、異方的な有効質量 $m/\xi_X, m/\xi_Y$ をもつ２次元一様磁場中の自由電子

のハミルトニアンとなるから, そのエネルギー準位構造は $\omega = \det \Xi \frac{eB}{m} = 2c^2 eB$ をサイクロトロン周波数とする $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \cdots$ というランダウ準位を作る [15]。一方第二項は $eB\hbar c^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ と書けるので γ の固有値 χ に応じて第一項のゼロ点エネルギーを打ち消す。結局、磁場中ディラック粒子のエネルギー準位は、n を整数として

$$E_{\pm n} \quad = \quad \pm c\sqrt{2e\hbar B|n|}$$

となる。これは、通常のランダウ準位に比べ、(i) n ではなく $\sqrt{n}$ に比例（不等間隔）であり、(ii)B ではなく $\sqrt{B}$ に比例 (サイクロトロン・エネルギーが B に比例しない)、という二点で異なる。この $\sqrt{B|n|}$ 依存性は McClure により準古典量子化により、1956 年に求められている [7]。特に、$n = 0$ のランダウ準位は特殊で、この状態のみカイラル演算子 γ の固有値 χ という特定のカイラリティーを持つことに注意しよう。また一般の $n \neq 0$ のランダウ準位は H^2 に関しては 2 重に縮退するが、 H に関しては縮退しないので、ディラック粒子一個あたり、各ランダウ準位は通常のランダウ準位とおなじ縮退度を持つ。

以上は、有効ディラック模型での話であるが、グラフェンにおいてはフェルミオン・ダブリングにより、ディラック・コーンは 2 カ所あることに注意すれば、系のランダウ準位は通常の 2 倍の縮退度をもつこととなる。特に $n = 0$ のランダウ準位はそれぞれのディラック・コーンに属する (K,K' 点に対応する) カイラル演算子 γ の符号の異なる固有状態から構成されるのである。

各ランダウウ準位にどのくらいの状態が縮退してるかを具体的に見積もるには、例えばランダウ・ゲージをとり、y 方向に周期的境界条件を課せば、状態数が普通の 2 次元電子系と同様であることが分かる。これから、Laughlin の議論により各ランダウ準位はホール伝導度 $2(e^2/h)$ をもつことを意味する。ディラック型の分散は電子・正孔対称 ($E \to -E$ に対して対称）であり、これは元々の蜂の巣格子でも最隣接飛び移りのみの tight-binding 模型では成立し、このために「ホール伝導度はフェルミ準位の関数として $E = 0$ に対して反対称（奇関数）である」との物理的要請を付加すれば、フェルミ準位が n-ランダウ準位と $n + 1$ ランダウ準位の間にあるときのホール伝導度は

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h}(2n + 1)$$

で与えられる。つまり、ラフリンの議論からフェルミ準位がランダウ準位を横切る度に e^2/h を単位にして 2 だけ増加する一方、奇関数であるためには、$E = 0$ のランダウ準位を横切る際には-1 から 1 に跳ぶことを要する。

ディラック・コーンが 2 個あるから、縮退度 2 で割り算して各コーンの寄与を見積もると

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h}(n + 1/2)$$

となり、つまり各ディラック・コーンは半奇数の寄与をもつ。これは奇妙な現象であるが、場の理論では質量ゼロのディラック粒子がもつ異常な性質として知られている [63]。ただし、模型をすこし工夫し、カイラル対称性をやぶれば、個々のディラックフェルミオンの寄与を数値的にうまく読み出すこともできることが示唆されている [63] この特異なホール伝導度の量子化則は Novoselov 等により図 11 のように実験的に確認され [1, 3]、理論的には Zheng-Ando により計算されていたものである [25]。また、この特異なディラック分散はグラフェンの磁気光学効果にも特徴的な効果をもたらす [62]。

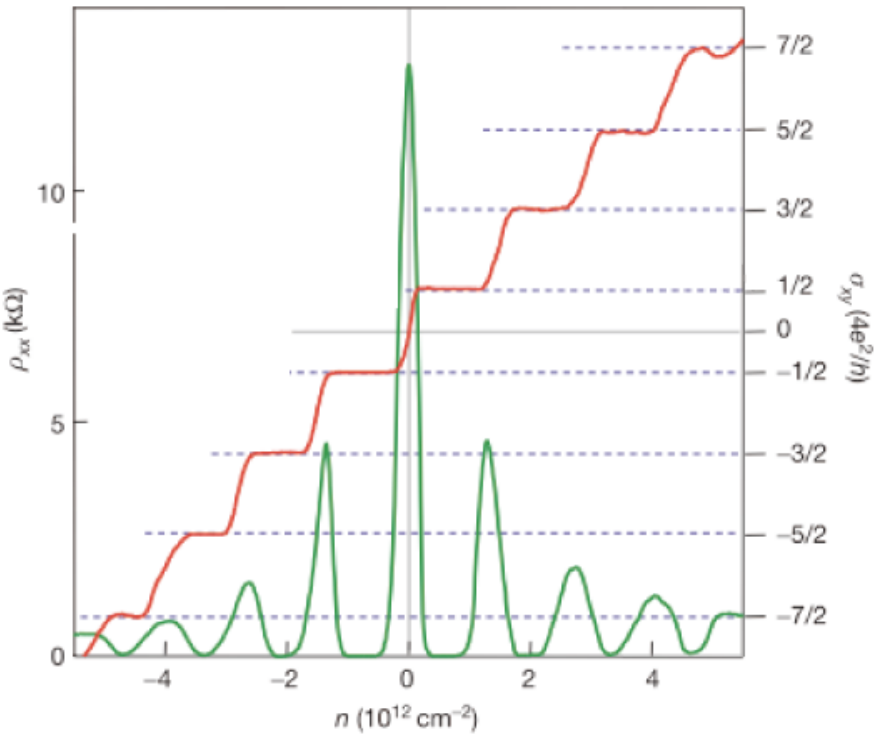


図 11: 観測されたグラフェンのホール伝導度 [1]。

次節で説明する、格子上の電子の厳密な取り扱いによるトポロジカルな表式を用いれば、ここで用いた電子・正孔対称性の仮定なしにフェルミ準位がゼロ・エネルギー近傍にある場合のこのグラフェンのホール伝導度の表式が導かれる。

3.3　グラフェンのホール伝導度のトポロジカルな表式

多粒子系のホール伝導度とチャーン数

一般に励起にエネルギーギャップを持つ多粒子系のホール伝導度は

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h}C, \quad C = \frac{1}{2\pi i}\int_{T^2}\mathcal{F}, \quad \mathcal{F} = d\mathcal{A}$$

のように、チャーン数 C と呼ばれるトポロジカルな量により表現される [27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34]。その導出は原論文を参照していただくこととして、ここではその意義を議論しよう。ここで被積分関数に現れる、微分幾何で 1 形式と呼ばれる $\mathcal{A}$ は、物理の言葉ではベリー接続という、電磁気学でのベクトル・ポテンシャルを一般化したような量であり,

$$\mathcal{A} = \langle G|dG\rangle = \langle G|\frac{\partial}{\partial\phi_\mu}|G\rangle\, d\phi^\mu = \langle G|\partial_\mu G\rangle\, d\phi^\mu \equiv \hat{\mathcal{A}}\cdot d\boldsymbol{\phi}$$

のように定義される（繰り返された添字 $\mu = x, y$ については和をとることと規約する）。 ここでケット $|G\rangle$ は、2 次元 x, y 方向へのひねり境界条件 ($|G(x+L_x, y)\rangle = e^{i\phi_x}|G(x,y)\rangle$、$|G(x, y+L_y)\rangle = e^{i\phi_y}|G(x,y)\rangle$) のもとでの多粒子系の基底状態の波動関数である。この境界条件はハミルトニアンの行列要素として取り込めるから、これを

$$H(\boldsymbol{\phi})|G(\boldsymbol{\phi})\rangle = E(\boldsymbol{\phi})|G(\boldsymbol{\phi})\rangle,$$

のように書こう。

この固有方程式は斉次方程式だから、規格化 $\langle G|G\rangle = 1$ を要求しても、その位相 $g = e^{i\theta}$ については不定である。つまり基底状態として $|G\rangle$ の代わりに $|G_g\rangle = g|G\rangle$ を用いてもよい。一般にこの位相 θ は、ひねり境界条件 $\boldsymbol{\phi}$ ごとに異なっても良いことに注意しよう。ただし、対応して $\mathcal{A}$ も

$$\mathcal{A}_g = \langle G_g|dG_g\rangle = \mathcal{A} + g^{-1}dg = \mathcal{A} + id\theta = \mathcal{A} + id\boldsymbol{\phi}\cdot\boldsymbol{\nabla}\theta$$

のように変更を受ける。この変換則はベリーによるものであり、それにちなんでベリー接続とよばれる [16]。接続というのは、一般にベクトル束の空間（ここではヒルベルト空間）で、微分を考えたときに現れる量で、今の場合は、位相を微小変化させたときにどう変化するかを表す。電磁気学でいえばベクトル・ポテンシャルに対するゲージ変換と同型であり、電磁気学と同型の位相（局所 $U(1)$） のゲージ構造がこの問題にも存在することを意味する。

このように $\mathcal{A}$ 自身はゲージ、すなわち多粒子系の波動関数の位相の自由度に依存するが、$\mathcal{F} = d\mathcal{A}$, 並びにその積分で与えられるチャーン数と呼ばれる C 自身は、

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= \langle dG|dG\rangle = [\langle\partial_x G|\partial_y G\rangle - \langle\partial_y G|\partial_x G\rangle]d\phi_x d\phi_y \\ &= [\mathrm{rot}\,\hat{\mathcal{A}}_g]_z d\phi_x d\phi_y \equiv \mathcal{F}_g\end{aligned}$$

となるために、ゲージには依存しない不変量である。チャーン数が物理的観測量であるホール伝導度に対応するから、それがゲージに依存してはならないことと整合する。

なお、系のハミルトニアン H が依存するパラメターであるツイスト境界条件 (x 方向に $e^{i\phi_x}$, y 方向に $e^{i\phi_y}$) においては、$\phi_{x,y}$ ともに $[0, 2\pi]$ を動くが、ツイスト境界条件としては、0 と 2π は等価であるから、積分領域は境界を持たない 2 次元トーラス T^2 とみなせることに注意しよう。前に説明したブリルアンゾーンと同様である。

非可換ベリー接続 — トポロジカル量子数をバンド中央付近でどう計算するか

ここでは、電子間の相互作用が無視できる一体問題を考えると、系の波動関数は、一粒子波動関数 ψ_ℓ からいわゆるスレーター行列式として構成される。ℓ はこの一粒子状態を指定する添え字である。この一粒子状態をフェルミ準位まで　j 個の電子を「詰める」ことで多粒子系の基底状態 $|G\rangle$ が得られる場合を考えよう。つまり j 番目と $j+1$ 番目の一粒子エネルギーの間に有限のエネルギーギャップがあり、そこにフェルミ準位がある場合を考える。この場合、ホール伝導度、すなわち多粒子系のベリー接続が定義するチャーン数は、一粒子状態に関するチャーン数のフェルミ準位までの総和であたえられる。これが TKNN 公式である [27]。上記の場合、多粒子系のチャーン数は

$$C = \sum_{\ell=1}^{j} C_\ell, \quad C_\ell = \frac{1}{2\pi i}\int_{T^2} dA_\ell, \quad A_j = \psi_j^\dagger d\psi_j$$

のように書ける。グラフェンのホール伝導度は、上で注意したように、詰まった「ディラックの海」を考える必要があり、これを求めるためにこの表式を直接適用することも原理的には可能であるが、実際の計算、特に現実的な磁場での計算や、ランダムネスの存在する場合の計算をしようとすると、すべてのエネルギー・ギャップがつぶれずに残るとは限らず、このような各チャーン数を個別に計算する方法はほとんど実用にならない [18]。

ここでは TKNN 公式を離れていわゆる Niu-Thouless-Wu 流に上述の多粒子系のチャーン数を直接評価することを考えよう。この時、フェルミ・エネルギー以下の一粒子軌道 ψ_ℓ すべてをまとめて作った多重項として $\mathbf{\Psi} = (\psi_1, \cdots, \psi_j)$ を定義すれば、多粒子系の基底状態は

$$|G\rangle \;=\; \prod_{\ell=1}^{j}(\boldsymbol{c}^\dagger\psi_\ell)|0\rangle \equiv |\mathbf{\Psi}\rangle$$

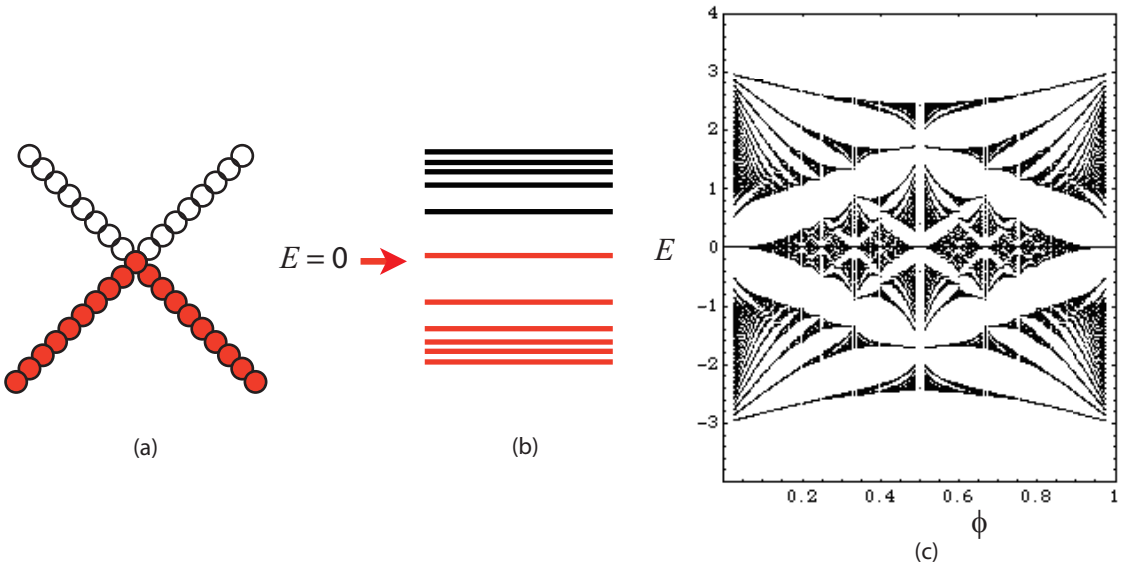


図 12: (a) ディラック分散とディラックの海（赤） (b) 質量を持たないディラック粒子のランダウ準位 (c) グラフェンに強磁場をかけた際のエネルギー準位。横軸がハニカム格子あたりの磁束を磁束密度で測ったもので、縦軸は一粒子エネルギー。弱磁場の極限で質量を持たないディラック粒子のランダウ準位を再現する。

のように書ける。この多粒子状態から定まる多粒子系のベリー接続を計算すれば、多重項 $\mathbf{\Psi}$ を用いた

$$\mathcal{A} \quad = \quad \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{A}$$

という関係式が得られる [32, 33, 34]。ここで、$\boldsymbol{A}$ は占有された多重項から作った非可換（行列値の）ベリー接続であり、[35, 32, 33, 34]。

$$\boldsymbol{A} = \mathbf{\Psi}^\dagger d\mathbf{\Psi} = \begin{pmatrix} \psi_1^\dagger \partial_\mu \psi_1 & \cdots & \psi_1^\dagger \partial_\mu \psi_j \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_j^\dagger \partial_\mu \psi_1 & \cdots & \psi_j^\dagger \partial_\mu \psi_j \end{pmatrix} d\phi^\mu$$

のように定義される。多重項 $\mathbf{\Psi}$ は一般に一粒子状態の位相の取り方の自由度をもつが、さらに占有状態間の線形結合の取り直しの自由度に対応する j 次元のユニタリ変換 g を許しても、多粒子系の状態は等価である。物理的にはこれはフェルミ・エネルギー以下の占有されている一粒子状態が、$U(j)$ というユニタリ変換で混ざることを許すことに対応する。ただし、フェルミ準位以上の非占有状態との混成は禁止する [33, 15]。$\mathbf{\Psi}$ と、それから作った Slater 行列式 $|\mathbf{\Psi}\rangle$ に対して

$$\begin{aligned} |\mathbf{\Psi}_g\rangle &= |\mathbf{\Psi}\rangle \det g, \quad \det g \in U(1) \\ \mathbf{\Psi}_g &= \mathbf{\Psi} \boldsymbol{g}, \quad g \in U(j) \end{aligned}$$

を用いて、多粒子系のチャーン数は、$\mathcal{A} = \mathrm{Tr}\boldsymbol{A}$ にも注意して、

$$C = \frac{1}{2\pi i}\int_{T^2} \mathrm{Tr}\, d\boldsymbol{A}$$

のように書き直せる [18]。これは書き直しにすぎないが、グラフェンの場合 $E = 0$ 近傍にフェルミ準位がある場合が興味の中心で、なおかつバンドの底から $E = 0$ 近傍までにはファンホーブ特異性に対応する密集したエネルギーバンド等が特に弱磁場の状況では多数存在するので、個々のチャーン数を計算する方法では取り扱うことが困難になるが、ここでの定式化を使うことで初めて計算可能となる [18] (図 12)。標語的には、「ディラックの海」の多数の一粒子軌道を正確に取り扱うためには非可換ベリー接続による定式化が重要となるのである。つまり、 $U(j)$ のゲージ変換を許容する定式化により、多粒子系のチャーン数は、フェルミ・エネルギーが属するエネルギー・ギャップさえ境界ひねりに対して安定に存在すれば、フェルミ準位から離れたバンドが準位交差や縮退をしようとも、数値的にも安定に計算できるのである。

ここで、多粒子系の波動関数自身は、多重項のゲージ変換で $U(1)$ の位相変換をうけるのみであるが、上記の非可換ベリー接続 $\boldsymbol{A}$ は

$$\boldsymbol{A}_g = \boldsymbol{g}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{g} + \boldsymbol{g}^{-1}d\boldsymbol{g}$$

という $U(j)$ ゲージ変換を受けることに注意しよう。また対応するゲージ場の強度を $\boldsymbol{F} = d\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^2 = (\partial_1 A_2 - \partial_2 A_1 + [A_1, A_2])d\phi^1 d\phi^2$ と定義すれば、これはゲージ変換に対して

$$\boldsymbol{F}_g = \boldsymbol{g}^{-1}\boldsymbol{F}\boldsymbol{g},$$
$$\mathrm{Tr}\, d\boldsymbol{A} = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{F} = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{F}_g$$

のように変換し、非可換ベリー接続によるチャーン数

$$C = \frac{1}{2\pi i}\int_{T^2}\mathcal{F} = \frac{1}{2\pi i}\int_{T^2}\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{F}$$

はゲージ不変な形で多粒子系のホール伝導度を与えるのである [33]。

具体的な計算においては、ゲージを固定してこのチャーン数を直接計算することも可能であるが [29, 32]、さらに、格子ゲージ理論でゲージ場のトポロジカルな配置を計算するために開発された手法を T^2 上での離散積分に適用した手法が有効である [36]。概略は、まず 2 次元ひねりのパラメター空間 T^2 を離散化し、$\boldsymbol{\phi}_m = \frac{2\pi}{M}(m_1, m_2)$, $\Delta\boldsymbol{k}_1 = \frac{2\pi}{M}(1, 0)$, $\Delta\boldsymbol{k}_2 = \frac{2\pi}{M}(0, 1)$ とし、

$$C_M = \frac{1}{2\pi}\sum_m F_m,$$
$$F_m = \mathrm{Arg}\left[u_1(\boldsymbol{\phi}_m)u_2(\boldsymbol{\phi} + \Delta\boldsymbol{k}_1)u_1^*(\boldsymbol{\phi}_m + \Delta\boldsymbol{k}_2)u_2^*(\boldsymbol{\phi}_m)\right],$$
$$u_\mu(\boldsymbol{k}) = [\Psi(\boldsymbol{\phi}_m + \Delta\boldsymbol{k}_\mu)]^\dagger\Psi(\boldsymbol{\phi}_m)$$

を定義する。こうすると C_M は有限の離散化においても常に整数であり、さらに $M \to \infty$ において、整数 C に収束する。このため、ある程度大きな M をとれば、精度の問題なく多粒子系のチャーン数が得られることとなる。ひどくテクニカルな話という印象かもしれないが、実は第一原理計算で近年良く使われる分極に関する、いわゆる King-Smith-Vanderbilt 公式を、チャーン数に拡張したと理解することもできる [37]。

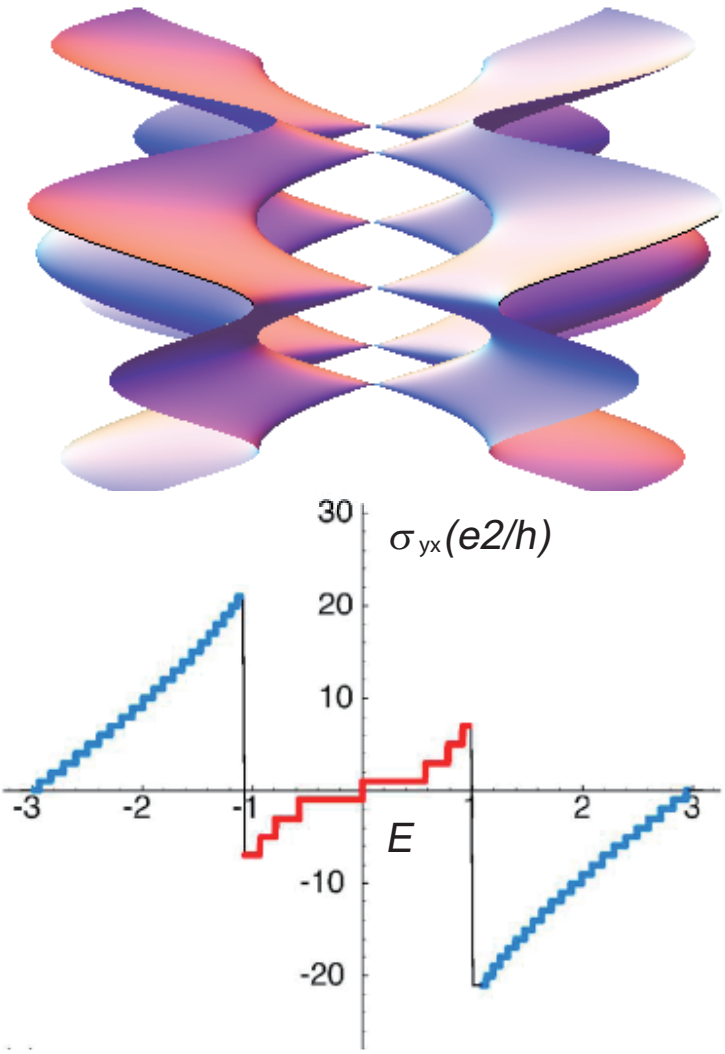


図 13: チャーン数の計算により求められたグラフェンのホール伝導度。赤線はチャーン数が 2 跳びの領域、青線は 1 跳び。分かり易いために、磁場の強さは磁束単位で計って単位格子あたり 1/31 という大きな値にとっている。上に添えたのは、横軸をエネルギーにとったバンド分散。

これを具体的に、グラフェン（最も基本的な単軌道蜂の巣格子模型）に適用した結果を図 13 に示す。これを見てわかるようにゼロ・エネルギー近傍では, $\cdots, -5, -3, -1, 1, 3, 5, \cdots$

のように、量子化値が零をまたいで 2 跳びの奇数に量子化する。つまり、有効理論である質量のないディラック粒子のもつホール伝導度と一致する（格子と有効場の理論間のこの一致は、決して自明ではない）。この図では、フェルミ・エネルギーがバンドの全域に亘って動いた場合を表示しているが、蜂の巣格子の元々の（ゼロ磁場での）バンドの端近傍では、普通の量子ホール効果、つまりバンドの底近傍では $-1, -2, -3, \cdots$ という 電子的な量子ホール効果、バンド上端近傍では $1, 2, 3, \cdots$ という普通の正孔的な量子ホール効果が得られる。これらの異なる振る舞いは、徐々に変化するのではなく、ファンホーブ特異点のエネルギーを境として不連続に切り替わる。これはホール伝導度はトポロジカルであり、特異性によってのみその量子化則を変更できると理解できる。また、上記の手法を用いることにより、最近では多軌道模型等の第一原理的電子状態計算とホール伝導度の計算を組み合わせることも可能となりつつある [38]。

3.4　$n = 0$ ランダウ準位とカイラル対称性

一般に一様磁場中の 2 次元電子系に乱れが存在すると、各ランダウ準位は完全縮退せず、幅を持つこととなり、波動関数はバンドの中心以外では局在し（アンダーソン局在）、この局在もまた観測される量子ホール効果においては重要な意味をもつのであった。グラフェンおいても一般の型のランダムネスに対してはディラック・フェルミオンの各ランダウ準位は通常の電子のランダウ準位と同様完全縮退は解消し有限の幅をもつことになる。ところが、グラフェンにおいて特異なこととして、リップルのみが乱れと考えられるようなグラフェンでは、$n \neq 0$ のランダウ準位は通常の 2 次元電子系におけるランダウ準位と同様に幅をもつが、$n = 0$ のランダウ準位は、縮退が保たれたままとなる。具体的な格子模型による具体的な数値的研究により実際に確認され、図にその様子を示す [61]。ゼロ・モードの縮退については、Aharonov-Casher による議論に基づくと、一様磁場でなく空間的に変動する磁場を持つ系に対しても $n = 0$ のみは完全なランダウ準位が保たれ、その縮退度は系全体を貫く全磁束のみで決定されている [26]。これは、より一般に「指数定理」とよばれるトポロジカルな定理がグラフェンで現れたと考えることもできる。

4　グラフェンの特異なエッジ状態

グラフェンにおける特異な電子状態について議論してきたが、グラフェンは端近傍の物理にも極めて特徴的な側面があることが知られている。そもそも、トポロジカルな相（量子ホール状態は典型例）では、バルクの状態とエッジ状態は密接に関連していることが知られている。グラフェンでは、この性質が特徴的に現

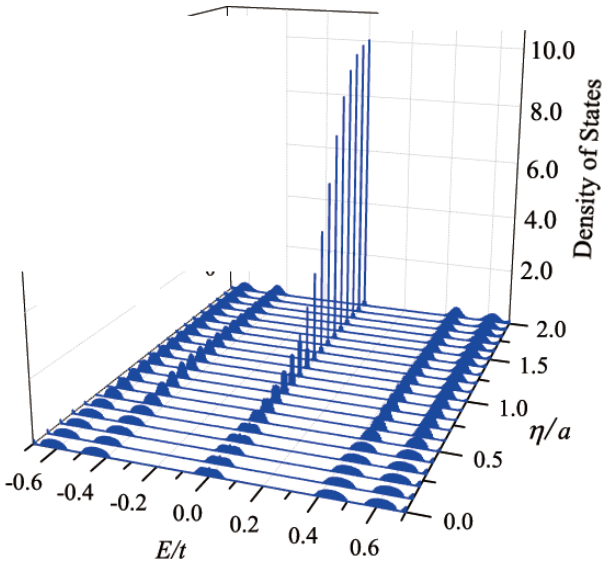


図 14: ランダム・ボンドをもつグラフェンにおけるランダウ準位の状態密度 [61]。奥行軸は、ランダムネスの空間相関長で、長いほど K 点と K' 点の間の散乱が抑制される。

れるのである。この節ではこれらを少し一般的な観点から普遍的に理解することを試みよう。

熱力学的量を議論する際、境界条件等による境界の影響は通常は無視できると考える。もちろん、境界はバルクな系に比して次元がひとつ少ないわけであり、系のサイズを無限大に飛ばす熱力学的極限においては無視できることは正しい。ただし、境界の物理がバルクの状態を反映したり、逆に境界の物理がバルクの状態を特徴的に記述している場合も少なくない。例えば 1 次元量子系において、バルクにおける共形不変性が、境界近傍の物理量の臨界的振る舞いを特定することはよく知られている。これは励起にギャップを持たない系での例であるが、近年励起に有限のエネルギー・ギャップを持つ系において、「トポロジカル」に非自明な絶縁体相では、バルクには特徴を持たないが、系が境界をもったとき特徴的局在状態が存在することが、多くの例において示されている。その典型例が量子ホール効果におけるエッジ状態の存在であるが [40, 41, 30]、同様の例は整数スピンから成る量子スピン鎖 [42, 43]、冷却原子の系 [44]、フォトニック結晶 [45, 46]、量子スピンホール相 [47, 48] 等、普遍的であることが明らかとなりつつある。境界の物理はこれらトポロジカル絶縁体と呼ばれる物質相においては、副次的役割ではなく、系の主たる特徴となる。絶縁相にあるバルクを真空とみたとき、そのギャップ中に存在する局在したエッジ状態はある種の粒子とみなせる。真空がその粒子を規定し、粒子がその背後にある真空を規定しあうのである。これを一般に「バル

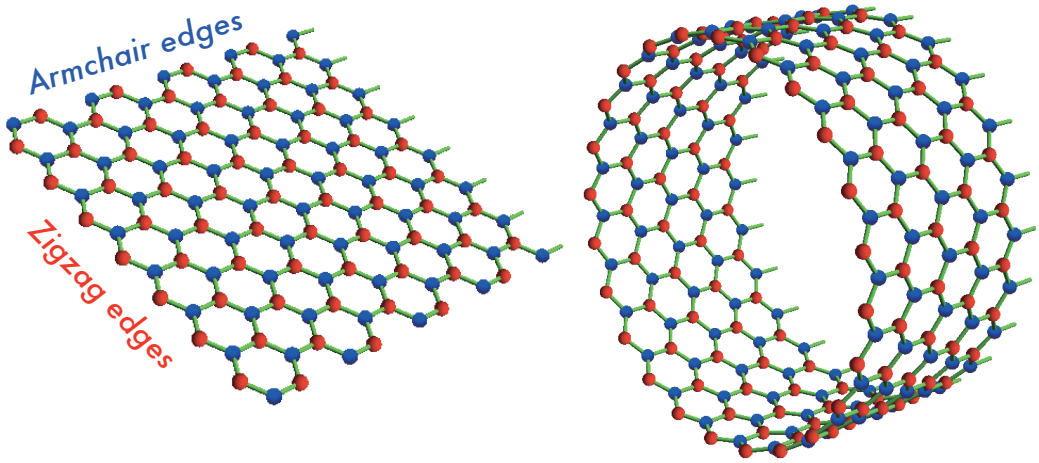


図 15: 左: グラフェンの典型的境界であるジグザグ端とアームチェアー端。右：ジグザグ端を持つグラフェンに周期的境界を課した系。（シリンダー状のグラフェン）

ク・エッジ対応」と呼ぶことがある。量子ホール・エッジ状態を含めて、境界をもつグラフェンにおける特徴的な局在状態は、「バルク・エッジ対応」の立場から、真空すなわちバルクの質量を持たないディラック粒子の基本的特性として理解出来る [30, 22]。

4.1 アームチェア端、ジグザグ端と局在ゼロモード

グラフェン、つまり蜂の巣格子から端を切り出すとき、典型的な境界の形としては図 15(a) に示す、ジグザグ (Zigzag) 境界とアームチェア (Armchair) 境界の 2 通りがある。これらの境界を持つグラフェンの、ゼロ磁場における一粒子エネルギーを示したものが図 16 である [39]。これを見ると、グラフェンのディラック・コーン分散の他に、エネルギーがゼロのところに、ジグザグ端をもつ系においては特徴的な平坦バンドが存在することが見て取れる。これが藤田等によって見いだされたグラフェンに特徴的な端局在状態である [39]。実際、このゼロモード局在状態はバルクのグラフェンのカイラル対称性に起因するものである。その意味で前述の「バルク・エッジ対応」に支配された普遍的な局在状態と考えることができる。これについて次節で少し詳しく説明しよう。

なおこのジグザグ端の特徴的な振る舞いは、現在では、第一原理的電子構造計算 [49] 並びに実際の STM 観測 [50] により観測されている。（図 17）

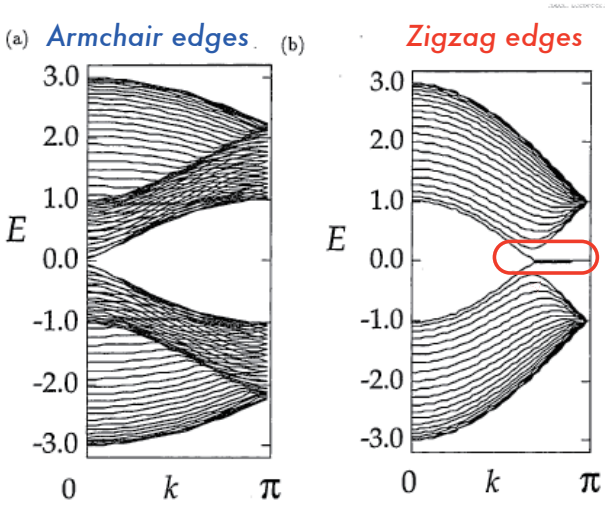


図 16: ゼロ磁場における、ジグザグ端とアームチェア端をもつグラフェンリボンの一粒子エネルギー [39]。

4.2 エッジ状態と Z_2-ベリー位相、カイラル対称性の自発的破れ

前節で議論した藤田状態（ゼロモード局在状態）は、偶然にジグザグ端に存在するものなのであろうか？なぜアームチェア端にはそれが存在しないのであろうか？これらの疑問に答え、かつ同様の現象が他の質量を持たないディラック分散をもつ系にも存在し、そこにはディラック粒子の「バルク・エッジ対応」としての普遍的特性があることを説明しよう [51]。そこでは、幾何学的位相としてのベリー位相が本質的役割を果たし、局在状態の存在は偶然ではなく、バルクのディラック分散の持つトポロジカルな性質と見なせる。

まず、グラフェンをシリンダー状に巻いた境界条件で考え、端はシリンダーの端に現れるとしよう。そこで、シリンダーの円周方向 (y 方向) にひとつの基本並進ベクトルをとり、これと独立な方向にもう一つの並進ベクトルをとる。よってハミルトニアンは

$$H^{2D} = \sum_{k_x,k_y} H_Z(k_x,k_y) \text{ or } \sum_{k_x,k_y} H_A(k_x,k_y)$$

のようにかける。ここで $H_{Z,A}(k_x,k_y)$ はそれぞれジグザグ端、アームチェアー端に対する周期系のハミルトニアンであり、シリンダーの幅方向に自由端の境界条件で考えることによりジグザグ端、アームチェアー端をもつシリンダー状のグラフェンのハミルトニアンが得られるわけである。グラフェンは波数空間 2 点でギャップレスとなる以外は有限のギャップをもつから、2 次元系はカイラル対称性を持つ（$\{H,\gamma\}=0$）とする。このとき、k_y ごとに k_x を 1 次元のパラメターと考えること

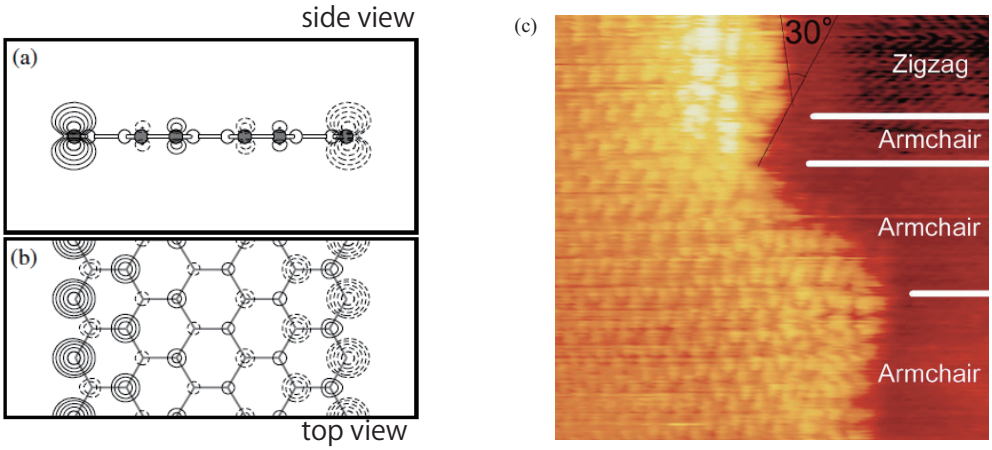


図 17: ゼロ磁場に対する、ジグザグ端での特徴的な局在状態の第一原理電子構造計算結果 [49]（左）と、グラフェンの境界近傍の STM 像（右）。ジグザグ端にのみ局在した状態が観測される [50]。

で、エネルギーの固有状態 $|k_x, k_y\rangle_{Z,A}$, $(H_{Z,A}(k_x, k_y)|k_x, k_y\rangle_{Z,A} = E(k_x, k_y)|k_x, k_y\rangle_{Z,A}$) から,

$$\gamma_{Z,A}^{1D}(k_y) = \int_0^{2\pi} dk_x \, {}_{Z,A}\langle k_x, k_y| \frac{\partial}{\partial k_x} |k_x, k_y\rangle_{Z,A} \Big|_{k_y:\text{fixed}}$$

として定義されるベリー位相（ザック位相）を考えると、k_y を固定して k_x を変化させたときに常にギャップがあいていれば、$\gamma_{Z,A}(k_y)$ は、そのカイラル対称性のために $0, \pi$ に $\mathrm{mod}\, 2\pi$ で量子化され,　2 つの値しか取り得ない Z_2-ベリー位相となる [34]。さらに、この 1 次元系を自由端の境界条件で考えたとき、ゼロモード局在状態が存在するための条件が

$$\gamma_{Z,A}^{1D} = \begin{cases} \pi & \text{ゼロモード局在状態が存在する} \\ 0 & \text{存在するとは必ずしもいえない} \end{cases}$$

のように与えられることが、カイラル対称性の局所性と断熱変形をもちいることで示される [51]。

この判定条件は、バルクの Z_2-ベリー位相によりゼロモード端状態の存在を示すもので、バルク・エッジ対応の一つの例となる。この条件は十分条件であり、数学的には、ベリー位相が 0 であるからといってゼロモード局在状態が存在しないとは限らないが、エッジ状態が理由なくゼロ・エネルギーにあることは考えにくく、具体的な多くの場合、このベリー位相が 0 であればゼロモード局在状態は存在しない。この判定法をシリンダー方向の波数 k_y ごとのジグザグ端、アームチェアー

端での１次元系のバルクのハミルトニアンに適用すれば、実際に得られた波数ごとのゼロモード局在状態の存在の有無をこの条件で確定することができる [51]。

このようにゼロモード局在状態はディラック粒子の性質であるが、より一般に、このグラフェンと類似した状況が別の系でも起き得る（対応表（図 19）参照)。典型例は、高温超伝導体でよく知られた２次元 d 波超伝導体に現れる。２次元 d 波超伝導体では、超伝導体における励起（Bogoliubov）モードが、波数空間４箇所において線形にギャップレスとなり、ディラック分散が４個あらわれるとみなせる（図 18)。この超伝導体においても、グラフェンと類似に図 18(b) のような異なる形状の境界に応じて、アンドレーエフ局在状態とよばれる一種のエッジ状態が存在したりしなかったりすることが理論的にも [52, 53]、実験的にも知られている [54]。このアンドレーエフ局在状態の有無も、ここでのベリー位相による判定法により、理論的に予言できる [51]。なお、グラフェンでの部分格子の同等性が系のカイラル対称性に対応したのに対して、この超伝導体では超伝導相の時間反転対称性がカイラル対称性となる。

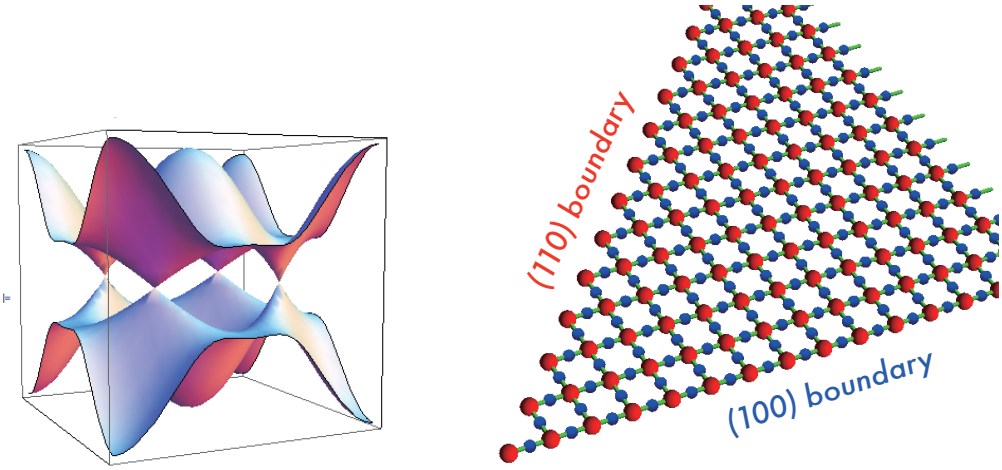


図 18: （左）2 次元 *d* 波超伝導体の準粒子分散。（右）2 次元 *d* 波超伝導体 (CuO_2) での異なる２つの境界と特徴的エッジ状態。

このようにディラック粒子としての２次元の線形分散と対応する境界のある系での局在状態には普遍的性質があり, その背後には「バルク・エッジ対応」としてのトポロジカルな意義がある。実は普遍性はこれにとどまらない。カイラル対称性起源のゼロモード局在状態はトポロジカルであるからして、ギャップが閉じない限り消失せず、一度うまれたゼロモード局在状態は１次元の波数空間 (k_y) で有限の区間存在することになる。これは２次元の物理としては，境界に局在した１次元的フラットバンドの存在を意味する。現実には、**パイエルス不安定性**まで考慮すると、系は不安定化し、摂動によりカイラル対称性は自発的に破れることが期待される。また、カイラル対称性の多体効果による自発的破れの一つの表れは、

対応する物理量	グラフェン	2次元 d 波超伝導体
Massless Dirac 分散	ゼロギャップ半導体の バンド構造	超伝導ギャップ
カイラル対称性	部分格子の同等性	時間反転対称性
ゼロモードエッジ状態	ジグザグ端での藤田状態[36]	(110) 界面での アンドレーフ局在状態[49,50]
カイラル対称性の局所的な 自発的破れ	ジグザグ端での局在磁化[46]	(110) 界面、不純物近傍で の局所磁束の自発的生成[54,55]

図 19: ディラック分散としてみたグラフェンと d 波超伝導体の対応表。[51, 55, 56]

グラフェンでの境界にのみ存在する局在磁化といえる [49, 55, 56]。*d* 波超伝導体においては、局所的かつ自発的なフラックス生成に対応する [57, 58] (図 19)。

4.3 グラフェン量子ホール系のエッジ状態

以上は、ゼロ磁場での話しであったが、磁場中の量子ホール効果ではどうだろうか。量子ホール効果のラフリンの一般論からすると、フェルミ準位が存在するバンドギャップ内（下から j 番目とする）のエッジ状態の左右の位置とその傾きから、ホール伝導度が定まる。これをエッジ状態によるホール伝導度 $\sigma_{xy}^{\mathrm{edge}}$ とすると、これはエッジ状態に関する winding 数と呼ばれるトポロジカルな数 I_j と

$$\sigma_{xy}^{\mathrm{edge}} = -\frac{e^2}{h} I_j$$

のように結ばれる [41, 30, 18]。正確には、バルクのランダウ準位の波動関数をあたえるブロッホ関数を複素エネルギーに拡張することで、境界のある系のエッジ状態の波動関数をジグザグ端の場合は構成できる。このとき、その複素エネルギー面はギャップの数だけの種数をもつリーマン面となり、上記のエッジ状態の winding 数 I_j は、ギャップに対応するリーマン面の穴周りの回転数となる。さらにこの winding 数はバンドごとのチャーン数と

$$C_j = I_j - I_{j-1}$$

との関係があることが示せる。これからバルクのホール伝導度 $\sigma_{xy}^{\mathrm{bulk}} = -\frac{e^2}{h}\sum_{\ell}^{j} C_\ell$ をつかえば、

$$\sigma_{xy}^{\mathrm{bulk}} = \sigma_{xy}^{\mathrm{edge}}$$

なる関係が導ける。これは、量子ホール効果の量子化はバルクからもエッジからも導けることを示し、バルクとエッジとが強く拘束されあっているという「バルク・エッジ対応」の厳密な例である [41, 30]。

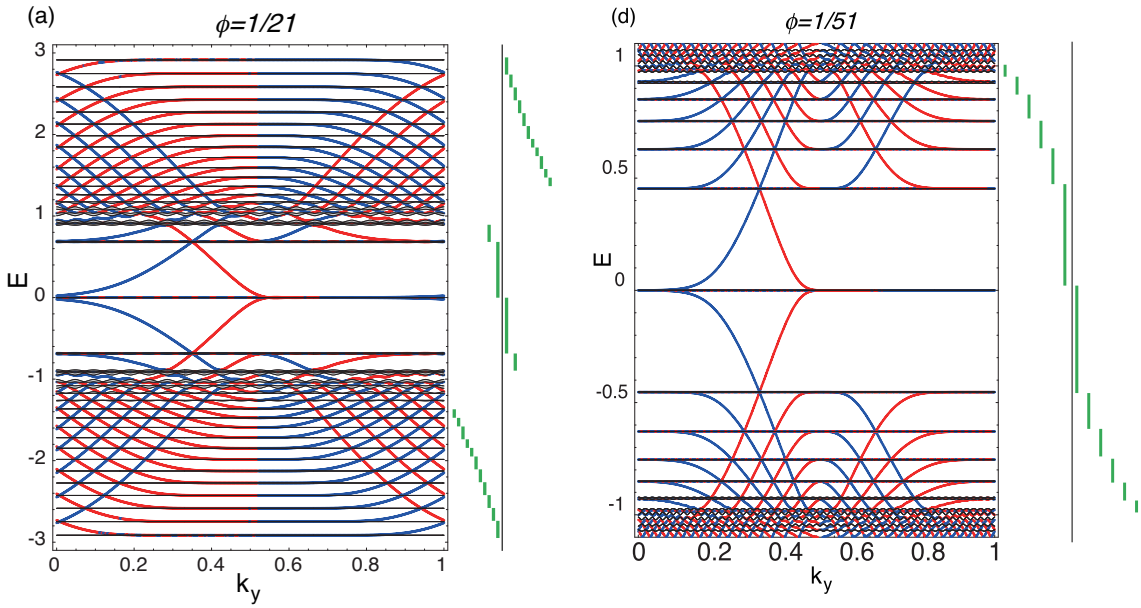


図 20: ジグザグ端を持つグラフェンの量子ホール・エッジ状態とホール伝導度。右端に局在するエッジ状態は青で、左端に局在するエッジ状態は赤で、ランダウ準位（水平線）の間のギャップ中にしめした。バルクのホール伝導度はグラフの外に緑のバーにて示す。(a) 単位格子あたりの磁束 $(1/21)\Phi_0$ の時の全エネルギー領域。(b) 単位格子あたりの磁束 $(1/51)\Phi_0$ の時のディラックフェルミオン的領域（$E = 0$ 近傍）。

本題のグラフェンではどうだろうか。「バルク・エッジ対応」はグラフェンにおいても当然成り立ち、具体的な計算においても、エッジ・モードの数とバルクの量子ホール・チャーン数が一致することにより確認できる [18]。（図 20）

4.4 ランダウ準位とゼロモード

通常の量子ホール系におけるエッジでは、上述のギャップ間に存在する特徴的エッジ状態の生成に伴って、端においてランダウ準位を構成する電子密度が減少する [40]。このような通常の量子ホール系と同様の振る舞いは、$n \neq 0$ のランダウ準位に関してはグラフェンでも同様に起こる [59]。しかし、$E = 0$ に存在する $n = 0$ のランダウ準位に関しては大いに状況が異なる。先ず、磁場なしの場合に議論した藤田等の研究以来のジグザグ端での局在状態が、実は磁場中でもジグザグ端においては存在することが示せる。しかも、$E = 0$ のランダウ準位の局所電荷密度はジグザグ端では減少せず、逆に増加する [59, 60]。（図 21）このような異常はアームチェアー端では全く存在せず（図 22）、ジグザグ端の特徴的振る舞いである。

ジグザグ端における局在状態はトポロジカルに存在が保証されるが、その厚み

（試料内部方向に対する減衰長）は磁気長のオーダーをもち、実はバルクの電子状態も少なからず混成していることが数値計算で示され、いわば「トポロジカル補償 (topological compensation)」と呼べる [59]。最近これに関する可能性を示唆する実験の報告もあり [64]、関連の実験的研究が待たれる。

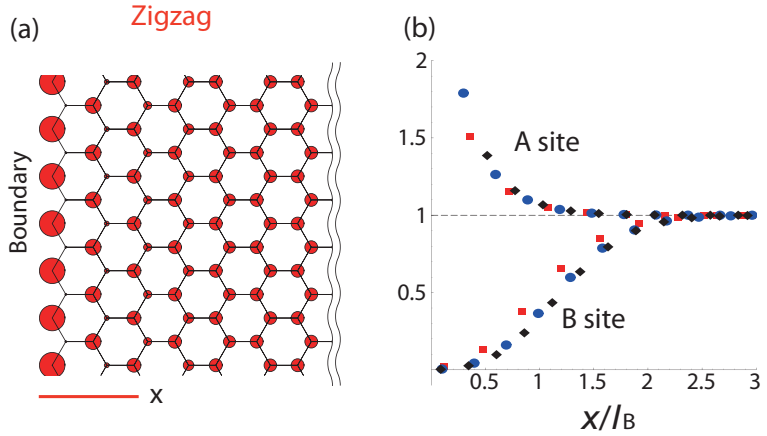


図 21: グラフェンジグザグ境界付近の $n = 0$ ランダウ準位の実空間像 (a) と、電荷の、端からの距離依存性 (b)。[59, 60]

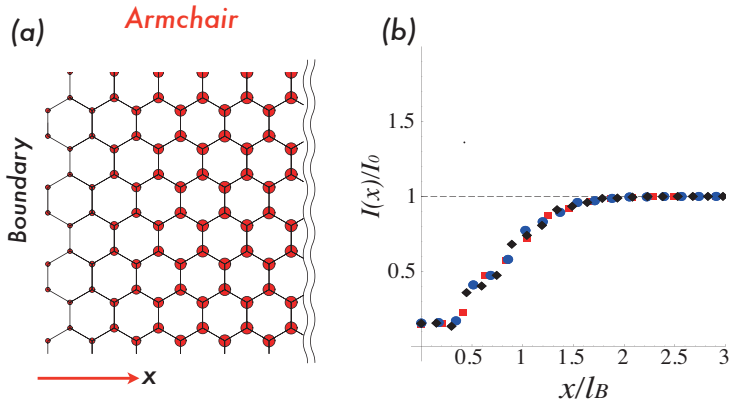


図 22: グラフェンアームチェアー境界付近の $n = 0$ ランダウ準位の実空間像 (a) と、電荷の、端からの距離依存性 (b)。[59, 60]

5　おわりに

以上グラフェンの電子論的観点からの特異な側面を、普遍的な観点から、特にトポロジカルな性質を強調しながら解説した。後半では「バルク・エッジ対応」を

キーワードとして、端状態から質量を持たないディラック粒子の特徴を捉えた。グラフェンは膨大な分野に成長しているから、本稿で触れられなかった話題や引用できなかった論文ももちろん膨大である。物質系としても、ディラック・コーンをもつものは、グラフェン以外にも有機固体などにおいて発展している。特に多体問題も興味深く、特に分数量子ホール効果が観測される、など強相関系としても注目されるが、本稿では一体問題の範囲に徹して解説した。読者の皆さんにも、グラフェンの面白さ、普遍性や物理的意義が何なのかが伝われば幸いである。本稿は、青木、初貝がそれぞれ、グラフェンについて国際会議 (Graphene Week, Graphene Tokyo, YKIS など）の招待講演、総合講演等に基づいて敷衍したものである。また、グラフェンの研究では、科学研究費基盤研究 B「対称性の破れを伴わない量子液体相:幾何学的位相による理論とその応用」の援助を受けている。最後に、グラフェン関係の研究で我々と共同研究等を行ってきた福井隆裕氏、笠 真生氏、森本高裕氏、河原林 徹氏、有川晃弘氏、新井正男氏に感謝し、また Andre Geim, Kostya Novoselov の各氏に有益な議論を感謝して、この解説を終わりたい。

（校正時の追記）本年 (2010) 度のノーベル物理学賞がグラフェンの業績に対して、Andre Geim と Konstantin Novoselov に与えられたことを喜びたい。

参考文献

[1] K.S. Novoselov et al, Nature 438, 197 (2005); A.K. Geim and K.S. Novoselov, Nature Materials 6, 183 (2007); A.H. Castro Neto et al, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).

[2] D.S.L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler and Tapash Chakraborty, Adv. Phys. **59** (2010) 261.

[3] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim. *Nature* 438, 197, 2005.

[4] 斉木幸一朗、徳本洋志（編）「グラフェンの機能と応用展望」（CMC 出版、2009）。

[5] P. R. Wallace. *Phys. Rev.* 71, 622 (1947).

[6] W. H. Lomer. *Proc. Roy. Soc. (London)* 330, A227 (1955).

[7] J. W. McClure. *Phys. Rev.* 104, 666 (1956).

[8] J. C. Slonczewsky and P. R. Weiss. *Phys. Rev.* 109, 272, 1958.

[9] この概念を、4 次元空間に拡張する試みが、格子ゲージ理論で知られる M. Creutz, JHEP **17**, 0804 (2008) により行われている。

[10] Pentacene と同じ、ベンゼン環を５個もつ picene の固体（にカリウムをドープしたもの）で最近超伝導が久保園等により発見された [R. Mitsuhashi et al, Nature **464**, 76 (2010)]。有機超伝導体としては最高の T_C = 20 K をもつ。バンド構造については T. Kosugi et al, J. Phys. Soc. Jpn **78**, 113704 (2009) 参照。グラファイトも、カリウム等をドープすると超伝導になり、最近ではカルシウムをドープしたグラファイトで T_C = 12 K となっている [T. E. Weller et al, Nature Phys. **1** (2005) 39; N. Emery et al, Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 087003]。

[11] N. D. Mermin. *Phys. Rev.* 176, 250, 1968.

[12] J. C. Meyer, A. K. Geim, M.I. Katsnelson, K.S.Novoselov, T.J. Booth, and S. Roth. *Nature* 446, 60, 2007.

[13] A. Fasolino, J. H. Los, and M. I. Katsnelson. *Nature Materials* 6, 858, 2007.

[14] 普通はグラフェン (単層グラファイト) での特異な分散は、π 電子に対する tight-binding 模型で議論される。しかし、ディラック・コーンは蜂の巣対称性のために生じるので、tight-binding 模型以外の一般的な模型でもディラック・コーンが生じる。例えば、原子ポテンシャルを蜂の巣状に置いた模型でもディラック・コーンが生じることを示せる [T. Nakajima and H. Aoki, Physica E **40**, 1354 (2008)]。実際、この模型により、tight-binding 模型における次隣接の飛び移り積分の値を評価することもおこなわれている [H. Hsu and L.E. Reichl, Phys. Rev. B **72** (2005) 155413]。また、磁場をかけたときのランダウ準位を、有効質量近似や磁場を Peierls 位相により取り入れる近似に依らず求めることができる [Nakajima et al, 前掲]。

[15] Y. Hatsugai, Proc. HMF-19, to be published (arXiv:1008.4653).

[16] M. V. Berry. *Proc. R. Soc.* A392, 45, 1984.

[17] A.H. Castro Neto et al, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).

[18] Y.Hatsugai, T. Fukui, and H. Aoki, *Phys. Rev. B* 74, 205414 (2006).

[19] Y. Hatsugai, T. Fukui, and H. Aoki, *Euro. Phys. J. Spec. Top.* 148, 133 (2007).

[20] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, *Nucl. Phys. B* 185, 20 (1981).

[21] Y. Hatsugai, *New J. Physics* 12, 055014 (2010).

[22] Y. Hatsugai, *Solid State Comm.* 149, 1016 (2009).

[23] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. B* 25, 2185 (1985).

[24] V. P. Gusynin and S.G. Sharapov, *Phys. Rev. Lett.* 95, 146801 (2005).

[25] Y. Zheng and T. Ando, *Phys. Rev. B* 65, 245420 (2002).

[26] Y. Aharonov and A. Casher, *Phys. Rev. A* 19, 2461 (1979).

[27] D. J. Thouless, M. Kohmoto, P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* 49, 405 (1982).

[28] Q. Niu, D. J. Thouless, and Y. S. Wu, *Phys. Rev. B* 31, 3372 (1985).

[29] M. Kohmoto, *Ann. Phys. (N. Y.)* 160, 355 (1985).

[30] Y. Hatsugai, *Phys. Rev. Lett.* 71, 3697 (1993).

[31] Y. Hatsugai, *J. Phys. C, Condens. Matter* 9, 2507 (1997).

[32] Y. Hatsugai, *J. Phys. Soc. Jpn.* 73, 2604 (2004).

[33] Y. Hatsugai, *J. Phys. Soc. Jpn.* 74, 1374 (2005).

[34] Y. Hatsugai, *J. Phys. Soc. Jpn.* 75, 123601 (2006).

[35] F. Wilczek and A. Zee, *Phys. Rev. Lett.* 52, 2111 (1984).

[36] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* 74, 1674 (2005).

[37] R. D. King-Smith and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* 47, 1651 (1993).

[38] M. Arai and Y.Hatsugai, *Phys. Rev. B*, 79, 075429 (2009).

[39] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, *J. Phys. Soc. Jpn.* 65, 1920 (1996).

[40] B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* 25, 2185 (1982).

[41] Y. Hatsugai, *Phys. Rev. B* 48, 11851 (1993).

[42] T. Kennedy, *J. Phys. Condens. Matter* 2, 5737 (1990).

[43] M. Arikawa, S. Tanaya, I. Maruyama, and Y. Hatsugai, *Phys. Rev. B* 79, 205107 (2009).

[44] V. W. Scarola and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* 98, 210403 (2007).

[45] Z. Wang, Y. D. Chong, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, *Phys. Rev. Lett.* 100, 013905 (2008).

[46] Z. Wang, Y. D. Chong, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, *Nature* 461, 772 (2009).

[47] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* 95, 146802 (2005).

[48] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* 314, 1757 (2006).

[49] S. Okada and A. Oshiyama, *Phys. Rev. Lett.* 87, 146803 (2001).

[50] Y. Kobayashi et al, *Phys. Rev. B* 71, 193406 (2005).

[51] S. Ryu and Y. Hatsugai, *Phys. Rev. Lett.* 89, 077002 (2002).

[52] C. Hu, *Phys. Rev. Lett.* 72, 1526 (1994).

[53] Y. Tanaka and S. Kashiwaya, *Phys. Rev. Lett.* 74, 3451 (1995).

[54] M. Aprili, E. Badica and L. H. Greene, *Phys. Rev. Lett.* 83, 4630 (1999).

[55] S. Ryu and Y. Hatsugai, *Physica C* 388-389, 90 (2003).

[56] S. Ryu and Y. Hatsugai, *Physica E* 22, 779 (2003).

[57] M. Matsumoto and H. Shiba, *J. Phys. Soc. Jpn.* 64, 3384 (1995).

[58] M. Sigrist, D. B. Bailey, and R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* 74, 3249 (1995).

[59] M. Arikawa, Y. Hatsugai, and H. Aoki, *Phys. Rev. B* 78, 205401 (2008).

[60] M. Arikawa, Y. Hatsugai, and H. Aoki, *J. Phys. Conf. Series* 150, 022003 (2009).

[61] T. Kawarabayashi, Y. Hatsugai, and H. Aoki, *Phys. Rev. Lett.* 103, 116803 (2009).

[62] T. Morimoto, Y. Hatsugai, and H. Aoki, *Phys. Rev. Lett.* 103, 116803 (2009).

[63] H. Watanabe, Y. Hatsugai, and H. Aoki, arXiv:1008.0130.

[64] D. L. Miller and et al. *Science* 324, 924 (2009).

[65] A. Altland and M.R. Zirnbauer, Phys. Rev. B 55, 1142 (1997).

[66] A. Ludwig, M. Fisher, R. Shankar and G. Grinstein, Phys. Rev. B 50, 7526 (1994).

[67] Y. Hatsugai, M. Kohomoto and X-G. Wen, Phys. Rev. B 56, 1061-1064 (1997).