O-4

４次元ダイヤモンド格子上の強結合模型のバンド構造

The band structure of tigh-binding model in four dimentional diamond lattice

○加藤優一[1]，　山中雅則[2]
*Yuichi Kato[1], Masanori Yamanaka[2]

Abstract :We considered the first Brillouin Zone of the 4 dimensional diamond lattice and the band structure which is derived from it.

１．はじめに

結晶の空間群は，２次元では 17 種類，３次元では 230 種類，４次元では 4895 種類あることが知られている．一方，５次元以上の空間群の分類は未解決である．３次元以下の空間群に対応した結晶格子上の電子模型のバンド構造は多くが判明している．しかし４次元以上の空間群に対応する結晶格子上では，ほとんど解明されていない．ここでは４次元結晶のうち，群論的に最も美しいとされる４次元ダイヤモンド格子の Brillouin zone と，その格子上に定義される強結合模型の分散関係を求め，２次元平面に描くことを試みた.

２．４次元ダイヤモンド格子

４次元ダイヤモンド格子の格子点はいくつかの表現が存在するが，ここでは最近接を結ぶベクトル $\mathbf{e}_i$ として

$$\mathbf{e}_1 = \frac{1}{4}\left(\sqrt{5}, \sqrt{5}, \sqrt{5}, 1\right) \tag{1a}$$

$$\mathbf{e}_2 = \frac{1}{4}\left(\sqrt{5}, -\sqrt{5}, -\sqrt{5}, 1\right) \tag{1b}$$

$$\mathbf{e}_3 = \frac{1}{4}\left(-\sqrt{5}, -\sqrt{5}, \sqrt{5}, 1\right) \tag{1c}$$

$$\mathbf{e}_4 = \frac{1}{4}\left(-\sqrt{5}, \sqrt{5}, -\sqrt{5}, 1\right) \tag{1d}$$

$$\mathbf{e}_5 = \frac{1}{4}\left(0, 0, 0, -1\right) \tag{1e}$$

と定義されているものを用いる [2]．基本並進ベクトル $\mathbf{a}_i$ は [2]$\mathbf{a}_i = \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_5$ により定義される．電子の強結合模型のハミルトニアンはこの格子上で

$$H = -t \sum_{\mathbf{r}} \sum_{j=1}^{5} \left({C^B_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_j}}^{\dagger} C^A_{\mathbf{r}} + h.c. \right) \tag{2}$$

により与えられる．このハミルトニアンを対角化することで，分散関係

$$E = \pm \left(1 + 4\cos^2 \frac{\sqrt{5}}{4}(k_1 + k_2) + 4\cos^2 \frac{\sqrt{5}}{4}(k_1 - k_2) + 4\cos \frac{\sqrt{5}}{4}(k_1 - k_2) \cos\left(\frac{\sqrt{5}}{4} k_3 - \frac{1}{2} k_4 \right) \right.$$
$$\left. + 4\cos \frac{\sqrt{5}}{4}(k_1 + k_2) \cos\left(\frac{\sqrt{5}}{4} k_3 + \frac{1}{2} k_4 \right) + 8\cos \frac{\sqrt{5}}{4}(k_1 + k_2) \cos \frac{\sqrt{5}}{4}(k_1 - k_2) \cos \frac{\sqrt{5}}{2} k_3 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{3}$$

を得た.

３．第１ Brillouin zone の計算

４次元ダイヤモンド格子の第１ Brillouin zone を考察する．逆格子ベクトル $\mathbf{b}_j$ は

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij} \tag{4}$$

により定義される．この逆格子空間における最短のベクトルは１０本存在し，それぞれの垂直二等分空間，それらの交面，それらの交線，それらの交点を求める必要がある．３次元における Brillouin zone は２次元多角形によって囲まれる３次元多面体となることは周知の事実であるが，４次元における Brillouin zone は一般的には３次元多面体によって囲まれる４次元多胞体となる．４次元ダイヤモンド格子の場合，この４次元多胞体が１０個の３次元切頂四面体（figure 1）により構成される事が計算により判明した.

[1] 日大理工・院 (前)・物理　[2] 日大理工・教員・物理

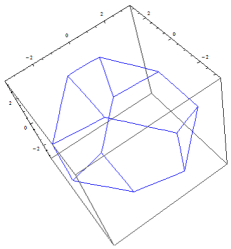

figure 1 . A truncated tetrahedron in a 3D space.

４．切頂四面体の貼り合わせ方と k 点

４次元多胞体は２次元平面や３次元空間に描画することはできない．ここでは１０個の切頂四面体の貼り合わせ方を，展開図 (figure 2) を用いて表現する．面内の記号は，この切頂四面体と貼りつく他の切頂四面体の面を表しており，記号の向きは，貼り付く向きの表と裏を表している．また，figure3 は第１ Brillouin zone 上の k 点を表しており，求めた k 点と (3) 式をもとに，分散関係を描画することができる．

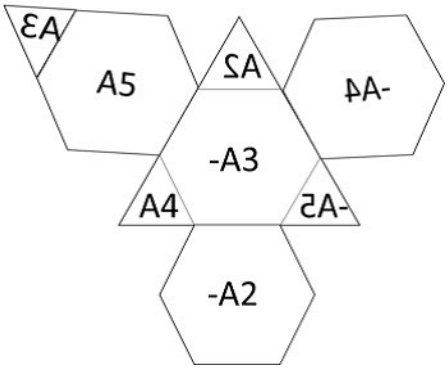

figure 2 . the development view.

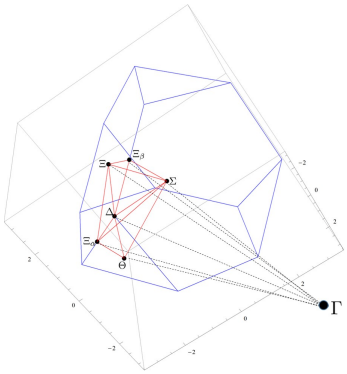

figure 3 . k-points.

５．まとめと課題

４次元ダイヤモンド格子に関する第１ Brillouin zone を考察し，１０個の３次元切頂四面体から構成される４次元多胞体になることを見出した．また主要な k 点を定義し，分散関係を二次元平面に描画した．しかし，ここで用いた１０本のベクトルだけでは第１ Brillouin zone の形成には不十分である可能性があり，次に短い逆格子空間内のベクトル等を用いた検証を行う必要がある．

参考文献

[1] 砂田利一：「ダイヤモンドはなぜ美しい？」，シュプリンガー・ジャパン，2006 年

[2] T.Kimura:”Characters of Lattice Fermions Based on the Hyperdiamond Lattice”,Prog.Theor.Phys,124,415-432,2010