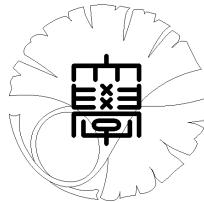


数理科学実践研究レター 2023-20 October 17, 2023

カーボンナノチューブの電気伝導性について

by

宮澤 仁



UNIVERSITY OF TOKYO

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

カーボンナノチューブの電気伝導性について

宮澤 仁*¹ (東京大学大学院数理科学研究科)

Jin Miyazawa (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

概要

炭素原子が六角形の格子状に平面上に並んだ物質をグラフェンという。カーボンナノチューブは六角形の格子が円筒上に巻き付いた構造である。単に数学的にグラフのように思うと、カーボンナノチューブはあるベクトルの分の平行移動であってグラフェンを不変にする作用に関する商グラフである。このとき、平行移動に使われるベクトルの性質によってカーボンナノチューブは半導体になるか金属になるかが変化する。このレターではこの現象が指数理論的に解釈できないか試みる。なお、この研究は最終的な結論には至っておらず、まだ途中である。

1 はじめに

このレターで、グラフェンと言ったら、ベクトル

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

$$b = \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

を用いて

$$\{\pm a, \pm b, \pm(a+b)\}$$

を頂点に持つ正六角形をタイル状に敷き詰めてえられる \mathbb{R}^2 内の無限グラフとする。 a, b について、ある非負整数 n, m (一方は 0 でない) を用いて与えられるベクトル $v = ma + nb$ の平行移動の作用で割ったものがカーボンナノチューブである。物性物理学では以下の事実が知られている。

定理 1 ([2], [3], [4], [1]) $v = ma + nb$ をカーボンナノチューブの定義に用いられるベクトルとする。このとき、

- $m - n$ が 3 の倍数のとき金属、
- $m - n$ が 3 の倍数でないとき半導体

になる。

このレターでは、この現象について同変 KR 理論を用いて理解できると思われる理由と数学的な言い換えに関する問題を提示する。この問題を解決するにあたって現時点で本質的な困難は見受けられないため、時間をかけて分析をすれば、通常的手法で証明ができるのではないかと思われる。なぜトポロジ的な理解ができそうかという点、[5, 3.2, 3.3, 3.4] の Berry 接続を用いた議論から、作用素の形を空間反転対称性と時間反転対称性を保って変形しても上の性質が変わらないことがわかるからである。

以下ではまず物理学で行われている状況設定と上の事実の説明を行い、そのあとの節でこの事実の KR 理論的な定式化と予想を述べる。さらに、関連しそうな数学および工学的な問題について少し触れる。最後の節で述べることの根拠は、単に数学的状況が似ているということのみである。しかし、状況が似ているということは背後に数学的繋がりがある可能性は十分にあるということであるため、ここでは大胆に予想を述べることにした。

謝辞 自由なテーマ設定を許してくださった Nikon の皆様、有用なコメントをくださった Nikon の高山侑也氏、信田萌伽氏、そして東京大学数理科学研究科の鮑園園先生に感謝します。

*¹ miyazawa@ms.u-tokyo.ac.jp

2 グラフェンの量子力学と電気伝導性

2.1 平面の格子状の物質の量子力学

この節ではグラフェンをはじめとする平面の格子状の物質の量子力学の数学的定式化と呼べそうな数学的設定をのべる。参考にしたのは [6] である。グラフェンを平面上の無限グラフだと思った際に、この無限グラフを保つような平行移動全体はベクトル a, b が生成する \mathbb{R}^2 の格子である。これを L とする。

定義 2 (双対格子) \mathbb{R}^2 内の格子 L に対し、 $\hat{L} \subset \mathbb{R}^2$ を $\hat{L} = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid \langle x, v \rangle \in \mathbb{Z} \forall v \in L\}$ で定める。

ここで、 $\mathbb{R}^2/L = T$, $\mathbb{R}^2/\hat{L} = \hat{T}$ とする。

定義 3 (状態空間) $k \in \mathbb{R}^2$ について、 $\rho_k : \mathbb{R}^2 \rightarrow U(1)$ を $x \mapsto e^{2\pi i k x}$ で定める。複素直線束 $E_k \rightarrow T$ を $\mathbb{R}^2 \times_{\rho_k} \mathbb{C}$ とする。

このとき、状態空間 \mathcal{H}_k を $L^2(T, E_k)$ で定める。

$k - l \in \hat{L}$ ならば E_k と E_l は同じベクトル束である。

定義 4 (ハミルトニアン) \mathcal{H}_k に作用する Fredholm な自己共役作用素 H_k をハミルトニアンという。 \hat{T} にパラメトライズされた自己共役作用素の族 $\{H_k\}_k$ もハミルトニアンと呼ぶ。

2.2 グラフェンの電気伝導性

平面格子状の物質の電気伝導性の問題はハミルトニアンのスペクトルがフェルミ順位を通るか否かで電気を通す金属になるか、半導体になるかが決まる。適当に定数倍の作用素を足して、 H_k が非自明な kernel を持つような k が存在するかという問題に帰着される。グラフェンの場合には以下が知られている。

事実 5 (電気伝導性とハミルトニアン) 物理的に自然なハミルトニアンをとると、グラフェンの場合には \hat{T} 上の 2 点で kernel が非自明になる。

以下ではグラフェンのハミルトニアンのスペクトルの分布 (バンド構造) についての概要を述べる。以下の説明が事実 5 の物理的な説明のうち一つである。

定義 6 (擬スピン) グラフェン上の頂点は、その頂点につながる辺のうち $a + b$ と平行な辺が右向きか左向きかによって 2 種類に分けられる。これらの頂点の集合をそれぞれ A, B とする。電子が頂点に局在化していることを仮定して、ハミルトニアンを、 A, B どちらの頂点に局在化しているかによってふたつの成分に分けて考える。この 2 成分の表示のことを擬スピンという。

このとき、擬スピんでハミルトニアンを表示する。

定義 7 (擬スピンによるハミルトニアンの表示) 波動関数を擬スピンによる 2 成分で表示する。フェルミ順位を 0 になおして、最もエネルギーの絶対値が小さい波動関数を擬スピンを用いて二成分表示した行列を

$$\begin{pmatrix} f_{AA} & f_{BA} \\ f_{AB} & f_{BB} \end{pmatrix}$$

と書くことにする。

さらに、タイトバインディング近似という近似を行う。これは、辺でつながれた頂点同士以外相互作用しないという条件で、これとグラフェンの形から $f_{AA} = 0, f_{BB} = 0$ が出る。このように書き直したハミ

ルトニアンをプロッホハミルトニアンという.

この、タイトバインディング近似のもと、スペクトルの絶対値の最も小さい固有関数の k についての族を考え、ハミルトニアンの作用が「隣の頂点のみに、等しい確率で移る作用である」という条件を課すと具体的に $f_{AB} = f_{BA}^*$ を書き下すことができ、これで近似したハミルトニアン H_k が T 上の 2 点で kernel が非自明になることがわかる.

定義 8 (時間反転対称性, 空間反転対称性) グラフェン上の量子力学には時間反転対称性と空間反転対称性がある. これは数学的にはそれぞれ波動関数への複素共役の作用と T^2 への, \mathbb{R}^2 の -1 倍の作用から誘導される involution に対応する.

Berry 接続を用いた議論から, 時間反転対称性, 空間反転対称性を保った変形ならハミルトニアンが 2 点で kernel が非自明になる事実は変わらないことがわかる. 詳細は [5, 3.2, 3.3, 3.4] にある.

3 カーボンナノチューブの電気伝導性の物理的な理解

定義 9 (カーボンナノチューブの電子の状態) カーボンナノチューブの場合は, グラフェンにさらに周期的な条件をつけたものと考えるとき $k \in \hat{T}$ の取れる値に限られる. 具体的には $k \in \hat{T}$ のうち $v = na + mb \in L$ と直交するもののみである. これは T の 1 次元部分多様体である. これを $l_{m,n}$ とする.

事実 10 (電気伝導性の分類の物理的な理解) グラフェン上の自然なハミルトニアン H_k をとると, kernel が非自明になる 2 点を $l_{m,n} \subset \hat{T}$ が通るときである. この条件を書き下すと

- $m - n$ が 3 の倍数のとき金属
- $m - n$ が 3 の倍数でないとき半導体

となる.

4 同変 KR 理論と予想

KR 群は Atiyah によって KO 群の Bott 周期性をよりよく理解するために生まれた K 群の変種である.

定義 11 B をコンパクトハウスドルフ位相空間, $\iota: B \rightarrow B$ を連続な involution とする. (E, f) が B 上 “Real” ベクトル束であるとは, E は B 上の複素ベクトル束であって, $f: E \rightarrow E$ は ι をカバーする連続写像で $f|_{E_x}: E_x \rightarrow E_{\iota(x)}$ は複素反線形写像であることである. “Real” ベクトル束には直和が定まるので, “Real” ベクトル束の安定同値類の Grothendieck 群が定まる. これを $KR(B)$ と書く.

空間反転対称性は involution に, 時間反転対称性は複素共役に対応する. なお, KR 群には上の定義とは別に, ある実構造付きヒルベルト空間に作用する, 実構造と compatible な $b \in B$ にパラメトライズされた有界作用素の族であってしかるべき対称性を持つものとしても定式化できる. むしろ, トポロジカル絶縁体など物性物理学で K 理論やその変種を扱うときにはこの定義あるいは作用素を用いた他の同値な定義を見ることが多い. B を運動量から定まるトーラスとし, 作用素を運動量でパラメトライズされたハミルトニアンとすれば物性物理で出てくる状況にあっているからである.

格子の対称性を見ると, 平行移動を除いた対称性は点群 D_6 である. したがって, グラフェンのハミルトニアンから $KR_{D_6}(T^2)$ の元が定まりそうである.

ここで, カーボンナノチューブの電気伝導性のトポロジー的な言い換えとして, 以下の予想を提出する.

予想 12 (カーボンナノチューブの電気伝導性の数学的な言い換え) n, m ごとに D_6 のある部分群 G と T^1 への作用が定まる. さらに, n, m ごとに埋め込み

$$\phi_{n,m}: T^1 \rightarrow T^2$$

がある. この写像による引き戻し

$$\phi_{n,m}^*: KR_{D_6}(T^2) \rightarrow KR_G(T^1)$$

の, グラフェンのハミルトニアンに対応する $KR_G^0(T^2)$ の元の行き先が $n - m \pmod{3}$ で変化するか?

5 終わりに

本論文では上の問題を提出するのみになったが, 上の予想はグラフェンのハミルトニアンを KR 群に対応させる部分を除いて数学の予想である. この数学的な予想の解決が, 重要な今後の課題である.

この問題と大きな枠組みでは関連する他の問題として, Nikon の高山氏に suggest していただいた画像処理の問題がある. 画像というのは格子状の関数で各点に対し 0 から 250 までの整数を 3 つ対応させたものである. 離散フーリエ変換という手法があり, 画像を見た目を変えずに情報量を落とすために行う. 現在は格子として正方格子のみが扱われているが, ここで他の格子で挙動が変わるかという疑問である. 格子の対称性と, 格子の上の関数の挙動という大きな枠組みでは本問題設定と関連するところがあると言えよう.

参考文献

- [1] Hiroshi Ajiki and Tsuneya Ando. Electronic states of carbon nanotubes. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 62, No. 4, pp. 1255–1266, 1993.
- [2] Noriaki Hamada, Shin-ichi Sawada, and Atsushi Oshiyama. New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules. *Physical review letters*, Vol. 68, No. 10, p. 1579, 1992.
- [3] Riichiro Saito, Mitsutaka Fujita, G Dresselhaus, and u MS Dresselhaus. Electronic structure of chiral graphene tubules. *Applied physics letters*, Vol. 60, No. 18, pp. 2204–2206, 1992.
- [4] Kazuyoshi Tanaka, Kenji Okahara, Mayumi Okada, and Tokio Yamabe. Electronic properties of bucky-tube model. *Chemical Physics Letters*, Vol. 191, No. 5, pp. 469–472, 1992.
- [5] 越野幹人. 講義ノート トポロジカルなバンド構造と物性物理. 物性研究・電子版, Vol. 7, No. 2, p. 1, 2018.
- [6] 齋藤理一郎. フラーレン・ナノチューブ・グラフェンの科学, 2015.