

グラフェンにおける光誘起ホール効果と カゴメ・フォトニック結晶における光の局在

岡 隆 史・青木 秀夫

Photovoltaic Hall Effect in Graphene and Localization of Light in Kagome Photonic Crystal

Takashi OKA and Hideo AOKI

Two attempts at applying interesting electronic properties to manipulation of light are overviewed. First is the photovoltaic Hall effect in graphene, where an application of intense, circularly-polarized laser lights to graphene with its Dirac-cone dispersions is predicted to induce a DC Hall effect as a nonlinear effect. Secondly, “tight-binding photonic bands” are predicted to be realized in metallophotonic waveguide networks, where the photonic bound states (photonic analog of the zero-point states in wave mechanics) localized around the crossings of a network form a tight-binding band. With this we can design photonic bands, e.g., a “flat photonic band” in the kagome network where the group velocity can be as small as 1/1000 of that in vacuum.

Key words: photovoltaic Hall effect, graphene, tight-binding photonic bands, heavy photon

固体物理に対する現代的なアプローチは、約百年前の量子論の誕生と、結晶中の電子に対する適用に始まる。金属がなぜ光沢をもつのか、ダイヤモンドがなぜ透明なのか、といった疑問に、結晶中の電子状態のバンド構造から答えることができるようになった。既存の物質だけでなく、最近の固体物理の潮流には「面白い物質や面白い結晶構造に、新しい物理がひそんでいる」という考え方がある。これは、おもに電子に対して考えられており、めざましい現象が面白い物質や結晶構造を通じて新たな物理を生む、という図式になっている。筆者らも、このような固体物理を専門として、超伝導や強磁性や量子ホール効果などの電子物性や、非平衡の物性を調べているが、最近、その考えを光が絡む現象に適用してみたところ、従来全く知られていなかった新たな物理現象を発見するに至った。本稿では、その流れから2つの話題、すなわち、グラフェンにおける光誘起ホール効果^{1,2)}とカゴメ・フォトニック結晶における光の局在³⁾、というテーマについて解説をしたい。これらはいずれも光と面白いバンド構造が絡んだ現象である。

まず、第1の話題が光誘起ホール効果である。これは本来は磁場下の電子で起きるホール効果を光の照射だけで引き起こすというもので、キーワードは「ディラック電子」と「光による電子状態のトポロジーの制御」である。ディラック電子とは量子力学と相対性理論を整合させるためにディラックが導入したもので、電子のハミルトニアンは $H = p^2/2m$ の形ではなく後述の式(2)のように行列を用いて表せられる。固体物理では、相対論的效果を考えていないときでもディラック電子が顔を出すことがある。これは特別な結晶中で電子のバンドが近似的にディラック型となっているからであり、このような物質の代表例がグラフェンである。グラフェンはこの世で最も薄い物質といわれている。最近の固体物理における最もホットな物質のひとつであり、プレプリント・サーバーには年に何百というグラフェン関連の論文が投稿されている(レビューとしては例えば文献4)。この物質は炭素原子が蜂の巣格子を組んだ二次元結晶であり、電気伝導に関与するのは、原子当たり3個ある炭素のp軌道のうち、化学で π 軌道とよばれ

るものであり、この軌道に対するエネルギー分散（バンド構造）は、ブリュアン帯の隅（K, K' 点とよばれる）において、2 個の円錐が頂点を突き合わせたようになっている。これがちょうどディラック電子論における粒子の分散と同じなのである。ディラック電子は単なる半金属ではなく、ハミルトニアン構造のために深いトポロジカルな性質をもつ。グラフェンの物理がかくも勃興したのは、そのためである。グラフェンの物性については、実験・理論両面で、おもに電子の輸送の性質から膨大な研究があるが、本稿での興味は、光物性である。上述の「特異性」が、光物性に効くであろうか、効く、というのがわれわれの理論的予測であり、具体的には、グラフェンに円偏光を当てると、DC ホール電流が流れることが予言される。光と電流の絡んだ、純粋に量子力学的効果である。この現象の背後にはベリー位相に代表される幾何学位相が潜んでおり、非平衡系ではじめて生じる「純粋な量子効果」といえる。

2 番目の話題は光の局在効果についてである。光はこの世で最も速く、物質が光速 $c=3 \times 10^8$ m/s を超えて移動することはわれわれの物理法則に従えば不可能である。ところが逆に、光を遅くすることは可能なのだろうか。答えは是である。実はこれはとても簡単なことであって、物質中では光は真空中より遅く進むのである。実際、物質中の光速は $c/\sqrt{\epsilon\mu}$ となる（ ϵ は比誘電率、 μ は比透磁率）。では、光の速度をどこまで遅くすることができるのだろうか。因子 $\sqrt{\epsilon\mu}$ を大きくすれば光速が遅くなるかもしれないが、同時に完全反射（金属表面）してしまうので光は透過し得ないから駄目である。ところがある工夫をすれば光の速度を自在にコントロールできるのである。われわれは光の速度を限りなくゼロにして「光を静止させる」ことができることを理論的に示した。結晶中の電子がバンド構造をとると同様に、誘電率の異なる物質を用いて人工的な格子を構成すると、光のバンド構造すなわちフォトンニック・バンドが形成される。特に、バンド構造で重要なカテゴリーに強束縛模型（tight-binding model）があり、例えば前述のグラフェンのバンド構造も、蜂の巣格子上の強束縛模型で扱うのが普通である。それでは、フォトンニック・バンドにおいても、電子における強束縛バンドにアナログな系は実現できるだろうか。つまり、強束縛フォトンニック・バンドは可能であろうか。ここでは、金属導波管ネットワークからなるフォトンニック・バンドを考えると、強束縛フォトンニック・バンドが実現できることを提案する。面白いことに、この強束縛バンドの構成要素となる状態（電子でいえば、原子に局在したワニエ状態）に対応するものは、フォトンニック・バンドにおいては、金属導波管ネット

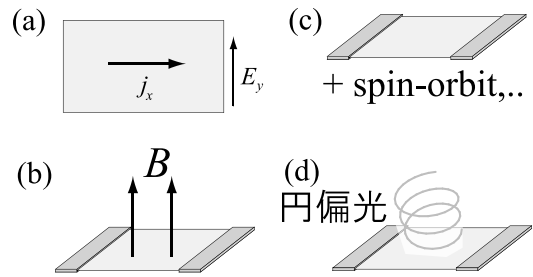


図 1 (a) 磁場中のホール電流. ここでいう「磁場」は静磁場 B 以外に（光誘起）ベリー曲率による有効磁場も含まれる. (b)~(d) 内因性ホール効果の例: (b) 磁場下の量子ホール効果. (c) トポロジカル絶縁体における量子（スピン）ホール効果. (d) 光誘起ホール効果.

ワークの交差点に局在する光のモードとなる。強束縛フォトンニック・バンドが可能になると、電子系でさまざまな議論されている面白い結晶構造に伴う特徴的な強束縛バンドとのアナロジーから、フォトンニック・バンドにおいても、多彩な格子を考えることにより面白いフォトン分散を実現できるであろう。面白い例として、電子系ではカゴメ格子上の強束縛バンドには分散がない（平らな）バンドが存在することがよく知られている。これは、たとえ原子間の遷移確率が有限であっても存在し、量子力学的干渉効果のため生じる現象である。そこで、カゴメ格子状の金属導波管ネットワークを考えると、「平坦フォトンニック・バンド」、つまり「静止したフォトン」が実現できることを提案する。

1. 光誘起ホール効果

それではまず、われわれの提唱する、新しいホール効果である「光誘起ホール効果」(photovoltaic Hall effect)^{1,2)} について、他のホール効果との類似点・相違点にも着目しながら解説しよう。ホール効果とは、普通は試料に磁場をかけ、試料に付けた電極間に電場をかけると、外部磁場にも電場にも垂直に電流（ホール電流）が流れる現象である（図 1 (a)）。このホール電流を特徴付けるのがホール伝導率 σ_{xy} であり、印加した電場 E と電流密度 j との関係

$$j_x = \sigma_{xy} E_y \quad (1)$$

の比例係数になっている。電流が電場に垂直に流れるという不思議な現象は、19 世紀にホールによって発見された静磁場中の電子が示す「古典ホール効果」が端緒である。この現象はニュートン力学の範囲内で理解でき、磁場中では電子が動くときローレンツ力を受けるので回転運動を行い、さらに電場があると、回転中心が磁場に垂直な方向にドリフトするために生じるのがホール電流である。

ところが、その後、量子効果を考慮に入れないと説明で

きないホール効果が続々と発見された。そのような例で最初に発見されたのは、同じく磁場中のホール効果である「整数量子ホール効果」と「分数量子ホール効果」である⁵⁾。これらは、半導体界面に存在する二次元電子系で発見されたものであり、物性物理学における位相幾何学的(トポロジカル)効果の重要性を研究者に気づかせる役割を果たした。トポロジーとホール効果が切っても切れない関係にあるのは、後で説明するように量子力学的に計算されたホール伝導率 σ_{xy} が、数学的には「トポロジカル不変量」とよばれる特別な量になるためである。

さらに、磁場のかかっていない系でもホール伝導率が有限になり得るということが認識されるようになった。つまり、近年話題になっているスピン・ホール効果(スピン軌道相互作用の存在下でスピン流に対して生じる)や、その後考えられた量子スピン・ホール効果である。後者は、元来グラフェンに対して提唱され、スピン軌道相互作用のためにエネルギー・ギャップが開いたトポロジカル絶縁体とよばれる状態において生じ、スピン・ホール伝導度はトポロジカル不変量となり、ナローギャップ半導体(HgTe/CdTe)の量子井戸で観測されている。本稿の主題である「光誘起ホール効果」は、これらに対して、いわば第三のホール効果といえる。量子スピン・ホール効果が特別な電子構造をもつバンド絶縁体においてみられる線形応答現象であるのに対して、光誘起ホール効果は一般の多バンド系において、強い円偏光の照射により変更を受けた電子状態が示す光応答であり、非線形応答としてのホール効果である。

1.1 円偏光中のディラック電子

ここで提案する光誘起ホール効果は、グラフェンについて考えられたので、まずグラフェンの簡単な解説をしよう。冒頭でも触れたように、炭素の蜂の巣格子であるグラフェンは二次元ディラック電子系とみなせる。バンド中でKとK'点にあるディラック・コーンに対しては、それぞれのコーン近傍でディラック・ハミルトニアンによって表すことができる。ac電場中のディラック電子系のハミルトニアンは、二次元系に対しては二次元波数 (k_x, k_y) 空間で 2×2 のパウリ行列 $\sigma_{x,y,z}$ を用いて

$$H(t) = \tau_z v [k^x + A_{ac}^x(t)] \sigma_x + v [k^y + A_{ac}^y(t)] \sigma_y + \frac{\Delta}{2} \sigma_z \quad (2)$$

のように書ける。ここで $\tau_z = \pm 1$ はカイラリティーとよばれる指数であり、グラフェンではK点は正のカイラリティーを、K'点は負のカイラリティーをもつ。 v はフェルミ速度、 Δ はバンドギャップであり、実際のグラフェンでは

$\Delta = 0$ であるが、ホール効果の説明の便のために、ここでは加えた。また、 \mathbf{A} は外部電磁場を表すベクトル・ポテンシャルである。円偏光のac電場であれば、 $(A \cos \Omega t, A \sin \Omega t)$ となり、 Ω は光の周波数、 $A = e E_{ac} / \Omega$ としたときに E_{ac} が電場強度を表す。

物質の電気伝導を量子論的に理解するには、普通は線形応答理論、いわゆる久保理論を使う。ここでは、弱い外部電場が誘起する電流を電場の一次摂動で計算し、伝導率は(ゼロ電場中、つまり平衡系の基底状態での)電流相関関数で表される。ところがわれわれが興味をもっているような強いレーザー光照射のもとでの電気伝導を考えようとすると、線形応答理論を超える必要がある。そこで、われわれは強いac電場中の光誘起電気伝導のための拡張された久保公式をまず導いた^{1,2)}。こんな拡張が可能なのは、ac電場中の時間依存シュレーディンガー方程式は、フロケ(Floquet)の方法というものをを用いることによって、時間依存しない問題に焼き直せるからである。つまり、空間的に周期的なポテンシャル中のシュレーディンガー方程式の解がブロッホ状態で表されるように、時間的に周期的なポテンシャル中のシュレーディンガー方程式はフロケ状態という正規直交解となる。

1.2 ディラック電子の光誘起ベリー曲率とホール効果

強いac電場中に置いた試料において、電流を測るために付けた電極に加えた弱いdc電場に対するdc電流応答、つまり光誘起電気伝導率は、

$$\sigma_{xy}(A_{ac}) = i \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \sum_{\alpha, \beta \neq \alpha} \frac{[f_\beta(\mathbf{k}) - f_\alpha(\mathbf{k})]}{\varepsilon_\beta(\mathbf{k}) - \varepsilon_\alpha(\mathbf{k})} \times \frac{\langle\langle \Phi_\alpha(\mathbf{k}) | J_y | \Phi_\beta(\mathbf{k}) \rangle\rangle \langle\langle \Phi_\beta(\mathbf{k}) | J_x | \Phi_\alpha(\mathbf{k}) \rangle\rangle}{\varepsilon_\beta(\mathbf{k}) - \varepsilon_\alpha(\mathbf{k}) + i0} \quad (3)$$

となる(詳細は文献1, 2に譲る)。ここで α はフロケ状態のラベルであり、 $f_\alpha(\mathbf{k})$ は非平衡定常状態の分布関数、 $\varepsilon_\alpha(\mathbf{k})$ はフロケの擬エネルギーとよばれる量である。

$\mathbf{J} = \partial H / \partial \mathbf{A}$ は電流演算子、 $\langle\langle \Phi_\alpha | \mathbf{J} | \Phi_\beta \rangle\rangle \equiv \frac{1}{T} \int_0^T \langle \Phi_\alpha(t) | \mathbf{J}(t) | \Phi_\beta(t) \rangle dt$ は2つのフロケ状態 α, β の内積(の時間平均)である。この表式は通常の久保公式とよく似ている。実際、この光誘起電気伝導の拡張久保公式は通常のエネルギー固有値の代わりにフロケ状態を基底として弱い電場について摂動展開をしたことに対応し、ac電場の強度 E_{ac} を無限小にすると当然ながら通常の久保公式に戻る。さらに、ホール伝導率については簡単な代数変形によって

$$\sigma_{xy}(A_{ac}) = e^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{k}) [\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{k})]_z \quad (4)$$

というコンパクトな表式になる ($\nabla_{\mathbf{k}} \equiv \partial/\partial \mathbf{k}$). ここで $\mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{k}) \equiv -i \langle \langle \Phi_{\alpha}(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | \Phi_{\alpha}(\mathbf{k}) \rangle \rangle$ という微分演算子の期待値は一種の「ゲージ場」であり、それから作られる「有効磁場」に相当する

$$\mathbf{B}_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{k}) \quad (5)$$

は「光誘起ベリー曲率」である。用語の解説をすると、波動関数は、ヒルベルト空間でのベクトルであるが、波数空間で波動関数を移動すると、ベリー (Berry) の位相とよばれる位相を獲得する場合がある⁶⁾。特に、ループ状の経路上で動かしたときに波動関数が元に戻らないとき、ベリー曲率をもつという。二次元電子系においてはホール伝導率は波数空間上の関数 $\mathbf{B}_{\mathbf{k}}$ の積分の形にかけるのだが、この関数がベリー位相と似た形をしているためにベリー曲率とよばれるようになった。また、このベリー曲率が有限の系では電子の運動は曲げられてしまい、あたかも静磁場がかかっているかのように振る舞う。

どのような物質でも大きなベリー曲率が発生するわけではない。重要な条件は (a) ギャップと (b) トポロジである。グラフェンで光誘起ホール効果が大きいのは、強い円偏光でギャップが開き、蜂の巣格子のトポロジからホール係数が残る、という筋書きである。ここでいうギャップというのは、グラフェンのモデルにおいてはディラック点におけるエネルギー・ギャップであり、有限温度でもホール効果を得るためにはギャップが十分大きく、フェルミ・エネルギーがその中にあることを要する。一方、トポロジが重要なのは、ホール係数がベリー曲率の全ブリュアン帯にわたる積分になっているためである。特定の波数でベリー曲率が有限になっても、積分すると消える場合は往々にしてある。例えば、グラフェンの場合には \mathbf{K} , \mathbf{K}' という2個のディラック点があるが、時間反転対称性を破らない摂動 (たとえば、蜂の巣格子を \mathbf{AB} 部分格子に分け、 \mathbf{A} と \mathbf{B} に異なるポテンシャル) を加えてギャップを開かせた場合、2つの点の寄与はキャンセルしてしまいホール効果は生じない。実際、この場合にベリー曲率を計算すると $\tau_z = \pm 1$ (\mathbf{K} , \mathbf{K}' 点) の寄与がキャンセルする。

では、強い円偏光の下での光誘起伝導率ではどうであろうか。まず、円偏光を当てた系は、時間反転対称を破っている。実際、右円偏光は、時間反転すれば左円偏光になることから、すぐわかる。円偏光中のディラック電子のフロケ状態を具体的にみてみよう。フロケ状態の擬エネルギーは

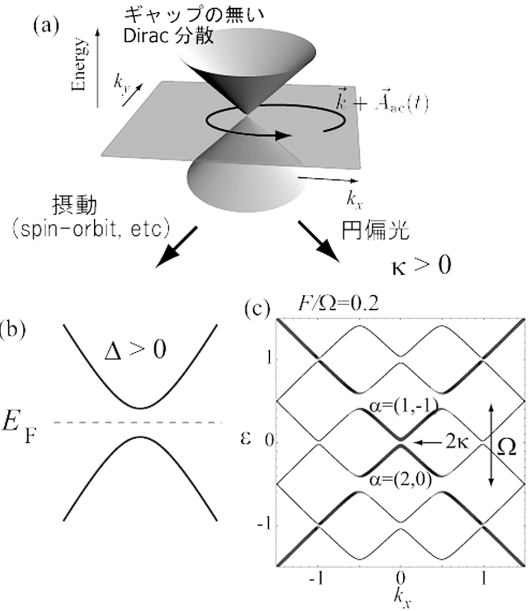


図2 (a) 二次元ディラック分散。円偏光中では各 \mathbf{k} 点はブリュアンゾーン中を円運動し、非断熱幾何学位相を獲得する。(b) ギャップ Δ の開いたディラック分散。(c) 円偏光のディラック電子のフロケ擬エネルギー。ディラック点にトポロジカル・ギャップ $2\kappa > 0$ がダイナミカルに (つまり、静的外場ではなく ac 外場 (光) のために) 開く。パラメータとしては、レーザー光の強度は $F=0.2$ 、エネルギーは $\Omega=1.0$ 、 v を 1 とする単位系をとっている。

$$\varepsilon_{\alpha} = \langle \langle \Phi_{\alpha} | H(t) | \Phi_{\alpha} \rangle \rangle + \Omega \gamma_{\alpha}^{AA} / 2\pi \quad (6)$$

のように動的位相 (第一項) と、アハロノフ・アナンダン (Aharonov-Anandan) 位相 (第二項) の和となる。アハロノフ・アナンダン位相というのは、普通は断熱変化 (十分ゆっくりした変化) に対して定義されるベリー位相を、非平衡に拡張したときに定義される位相である。特に、ディラック点においては $\gamma_{\alpha}^{AA} = \pi \{ [4(E_{ac}/\Omega)^2 + 1]^{-1/2} - 1 \}$ で与えられる。この円偏光中の擬エネルギー分散は、図2(c)で示すように、ディラック点 ($\mathbf{k}=0$) において $2\kappa = \sqrt{4(E_{ac}/\Omega)^2 + \Omega^2} - \Omega$ のギャップが開いている。ディラック点のギャップはアハロノフ・アナンダン位相のためであり、円偏光を照射した場合にのみ生じる。このとき、光誘起ベリー曲率を計算するとディラック点の近くでは

$$\{ [\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{k})]_z \} \sim \frac{1}{2} \kappa (|\mathbf{k}|^2 + \kappa^2)^{-3/2} \quad (7)$$

となり、最初からギャップがあいている場合と異なり、カイラリティー τ_z によらない。そのため、グラフェンについて計算をすると図3(b)のように \mathbf{K} , \mathbf{K}' 点において同符号で足し算され、光誘起ホール効果が生じることがわかる。

実際のサンプルに光誘起ホール電流が流れる様子を調べるために、有限のグラフェンに電極を接続し、円偏光を照

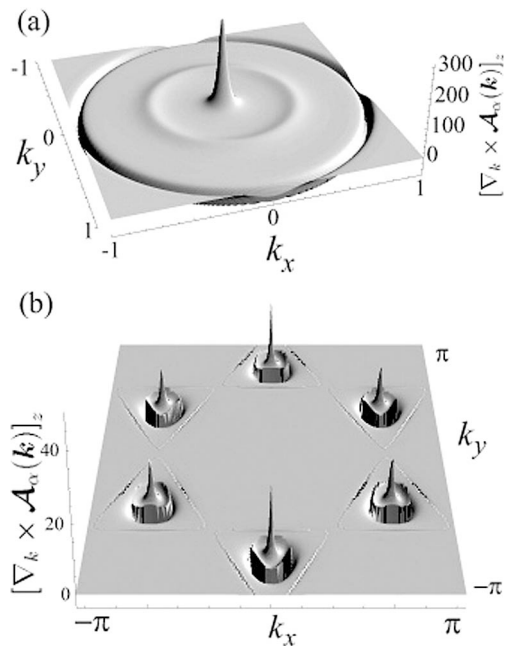


図3 (a) ディラック・バンドと (b) グラフェンの光誘起ベリー曲率.

射したときの電流分布を図4 (a) に示した. 電極間だけではなく, それと垂直方向にも光誘起ホール電流が流れている様子がみてとれる. 光誘起ホール電流の向きは, 右円偏光を左円偏光に変えれば当然逆転する. $I-V$ 特性を図4 (b) に与えるが, 照射する円偏光の強度を強くするとホール電流が大きくなる.

ここで考えた, 光誘起ホール効果のために必要となるレーザー光の強度は現実的であろうか. 図4 (b) から, 有意なホール電流を得るためには, 例えば $F \sim 0.001w$ (w はグラフェンのホッピング) 程度が必要とすると, フォトンのエネルギー $\Omega \sim 1$ eV, $w = 2.7$ eV, 格子定数 $a = 2.6$ Å に対しては, レーザー光の電場は $E \sim 10^7$ V/m という, 現実的な範囲内の値が得られる. また, グラフェンだけでなく, もっと一般に, 多層グラフェンや, 多バンド系 (例えば, dバンドと pバンドからなるような系) でも光誘起ホール効果が生じることが最近の研究により明らかになっており, 今後の実験的な検証が大いに期待されている.

2. 金属導波管ネットワークにおける強束縛フォトニック・バンド

2.1 強束縛フォトニック・バンドとは

それでは, 2番目の話題に移ろう. フォトニック結晶^{7,8)}は光の操作法として興味深いことはいまでもない. 電子は結晶中でブラッグ反射を受け, そのためにバンド構造が生じ, これは量子力学によれば電子も波であるから当然であるが, 逆に, 似たようなことが周期構造中で光波に対し

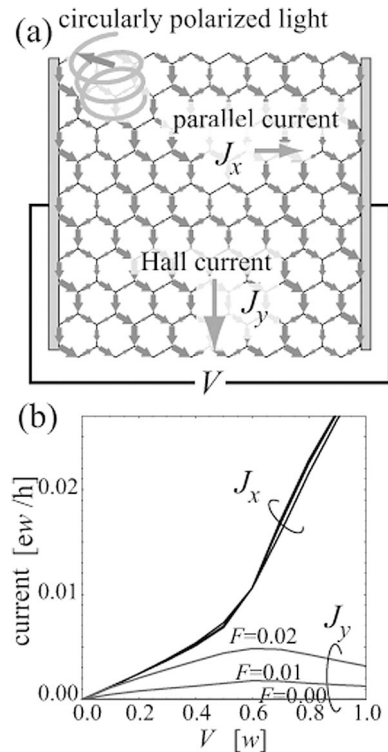


図4 (a) 円偏光を照射したグラフェンにおける光誘起ホール電流. 左右の電極の間に $V = 0.005w$ の電圧がかかっている ($w = 3$ eV は跳び移り積分). 円偏光の強度は $F = 0.025w$, $\Omega = 0.3w$ である. (b) 縦電流 J_x とホール電流 J_y についての $I-V$ 特性.

て起きるはず, というのは自然な発想である. 実際, 結晶中の電子とフォトニック結晶中の光の間のアナロジーは, フォトニック・バンドの物理として確立している. これにより, フォトニック・バンドにおけるバンド・ギャップ, 小さな群速度をもった光 (“heavy photon”), 欠陥に付随してギャップ中に現れる局在モード, 光のアンダーソン (Anderson) 局在などの現象が, 精力的に調べられている.

フォトニック・バンドを実現するには, 普通は誘電体の周期的構造が考えられ, 周期構造があれば, 電子の波に対するブロッホの定理と同様に, 光に対してもブラッグ反射に起因するバンド構造が生じる. これに対して, ここで問題にしたいのは, 次のようなことである. 電子のバンド構造については, 固体物理の教科書にあるように, 2つの極限がわかりやすい. ひとつは, 周期ポテンシャルが弱い (nearly free の) 場合で, 摂動によりバンド・ギャップが開くことが示せる. 逆の極限は, 周期ポテンシャルが強い場合で, このときには, 各原子に局在した軌道を用いて, 局在軌道間の遷移を記述する強束縛 (tight-binding) 模型がよい模型となる. どちらの場合でもバンド構造は結晶構造を反映するが, 強束縛模型が特に面白いのは, 結晶構造への依存性が大きく, さらに, 特徴あるバンド構造 (例え

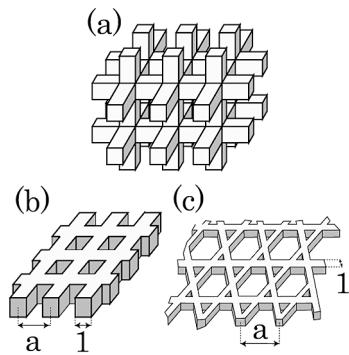


図5 金属導波管ネットワークの概念図（グレーの部分が光が閉じ込められ、白い部分は金属）. (a) 三次元格子, (b) 正方格子, (c) カゴメ格子.

ば、後述の平坦バンド)を得る指針が明確なことである。そこで、「強束縛フォトニック・バンド」を実現することは可能だろうか、というのが面白い問題となる。われわれの提案³⁾は、金属導波管ネットワークを使えば可能、というものである。ここでは、図5に示したように、金属導波管をネットワーク状につないだ構造を考え、そこでの光のモードを議論する。導波管が金属できていれば、光は(少なくとも金属のプラズマ振動数より小さな振動数をもつ光に対しては)壁の内部に侵入せず、ネットワーク状の空隙を伝播することになる。単に、光がネットワーク状に閉じ込められた、というだけなら、その周期構造は反映するだろうが、強束縛にはならないのでは、と一見思える。ところが、意外なことに、導波管の「交差点」には光が局在し、その理由は、(波動方程式として似ている)シュレーディンガー方程式でいえば、量子零点エネルギーを得るために束縛されるのである。この束縛状態が隣りあう交差点の間の重なりによりバンドを形成し、強束縛フォトニック・バンドとなる。

今までにも、強束縛フォトニック・バンドを考える試みはいくつかなされている。例えば、2つのフォトニック結晶の間のエバネセント欠陥モードの結合、不純物やフォトニック結晶の欠陥が線状に並んだ構造での局在波などである⁹⁻¹¹⁾。しかし、これらの構造では、光の局在状態は欠陥に局在したものが用いられる。それに対して、ここで提案するものは、導波管をネットワークにただで、その交差点(管の連結部)に生じる局在状態を使う。これが面白いのは、量子力学でよく知られた零点エネルギーが光物理でも現れ、光の伝搬を通じて観測され得ることである。構造としても簡単で自由に設計できる。実際、計算されたフォトニック・バンドの分散は、強束縛模型におけるものと驚くほどよい近似で一致するので、この意味でフォトニック・バンドの「設計」が現実的になったといえる。図

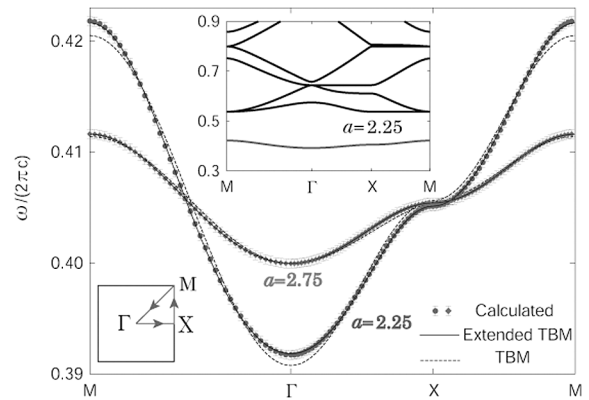


図6 図5 (b) の正方格子金属導波管ネットワークに対して計算されたフォトニック・バンドを、2つの異なる a の値に対して示す。実線は、tight-binding 模型によるフィット。挿入図は下のほうの数本のバンドを示す。

5 (a) の三次元的な導波管ネットワークは、いわゆる“woodpile”型の inverted 金属フォトニック結晶¹²⁾を思い出させるが、導波管ネットワークは、より一般的な構造であり、図5 (b) (c) のように二次元的なものも含む。さらに、woodpile では隙間 (air-band) のモードは隙間に振幅をもつが、金属導波管ネットワークでは、低い方のモードは交差点に局在した状態の間の強束縛バンドであるところが異なる。

それでは、実際に、典型的な図5 (b) の正方格子構造に対して、フォトニック・バンドを計算してみよう。ここでは、TM モード ($E \parallel z$) の計算を示す。簡単化として、金属は、絶対値が大きい負の誘電率をもつものとする。要するに、導波管を作る金属は、光に対して完全反射壁とする。これは、通常の金属で少なくともマイクロ波に対してはよい近似である。一方、より波長が短い可視光などでは、金属中の光の損失は無視できなくなり得るので、注意が必要であろう。フォトニック・バンド構造は、この境界条件のもとで、平面波展開 (典型的に 7000 個の波) により求めた。図6に示したフォトニック・バンド構造において、下のほうにあるモードをみると、バンド構造は、強束縛バンド構造にフィットしたもの(曲線)と非常によく一致している。正方格子の導波管は、格子の周期(ここでは a と名付ける)と管の太さ(ここでは 1 とする)の比で特徴付けられるが、異なる a に対する結果をみると、強束縛模型の“transfer energy”に対応する量は、 a が大きくなるほど小さくなり(つまりフォトニック・バンドの幅が減少し)、 a を増やすと指数関数的に減少する。当然ながら最隣接の交差点間の transfer が最大であり、次隣接以遠の transfer は、1 桁以上小さい。

それでは、光のモードをみてみよう。本当に、交差点に

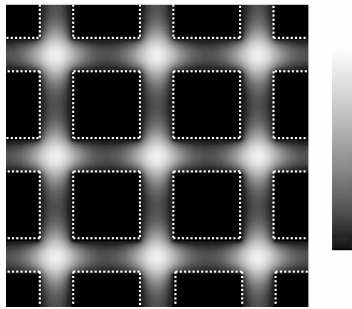


図7 正方格子金属導波管ネットワークの最低フォトニック・バンド (Γ 点) に対して計算された状態. 破線は、導波管の境界線.

局在しているだろうか. 図7をみると、確かに交差点に局在しており、強束縛の名が適当であることを示唆する. 振幅は交差点から離れるにつれて減衰し、これが上記の a に対する減衰を説明する.

2.2 量子力学とのアナロジー

それでは、なぜこのような局在モードが発生するのかをみてみよう. 量子力学のほうでは、電子が狭い領域 (例えば、量子細線とよばれる一次元の細い領域) に閉じ込められた場合の状態は学生の演習問題であるが、あまり知られていない現象として、2本の量子細線が十文字に交差した場合の状態である. このとき、一見、1本の量子細線状態の重ね合わせになるような気がするが、そうではなく、実は交差点のところに局在状態が発生する¹³⁾. 古典力学的にはこんな局在が生じるはずもないので、これは純粋に量子力学的効果である. 実は、電子が交差点の近傍にいと、前後左右に広がることのできるために制約が少なくなり、量子力学的な零点エネルギーが低下し、この効果により交差点に束縛される. 電磁波に対するマクスウェル方程式と、物質波に対するシュレーディンガー方程式とは、似た形をしている (実際、二次元系においてTMモードに対しては同じである). よって、光波に対しても同様な束縛状態が存在し、束縛エネルギーは、量子力学問題を光波問題に翻訳すると、0.406 (単位は $2\pi c$, 導波管の幅を1としている) となる. 上の導波管フォトニック結晶で得られた強束縛バンドの中心は、まさにこの値になっている.

このように、この強束縛バンドで使われているのは、束縛状態であり、何らかの共鳴状態 (ロスをもつ) を使っているわけではない. このような束縛状態そのものは、光に対して、例えばT型ジャンクションで、ジャンクション位置に局在したモードの存在などとして知られていたが¹⁴⁾、束縛状態が格子の上でバンドをなすことは考えられていなかった. 構成法 (零点アナログ) からして、このような強束縛フォトニック・バンドは、三次元系や、TM

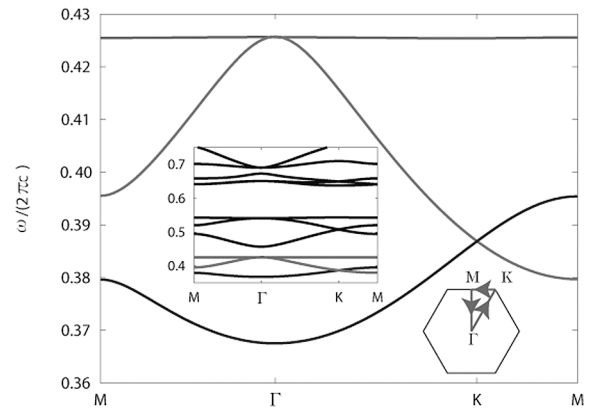


図8 図5(c)のカゴメ格子金属導波管ネットワークに対して計算されたフォトニック・バンド ($a=4$). 挿図は下の方の数本のバンドを示す.

以外のモードに対しても存在すると考えられる. ひとつコメントとして、結合されたプラズモン・モードを用いた強束縛バンドを実現するという提案がある¹⁵⁾. しかし、これは金属表面でのモードを使うために、表面の不規則性などに敏感である. 一方、ここで考えたバンドは、光の振幅は金属に侵入しないために、不規則性には鈍感であろう.

2.3 カゴメ格子における平坦フォトニック・バンド

それでは、このような強束縛模型を使うとフォトニック・バンドの「設計」(望んだバンド分散を得ること)ができる例として、カゴメ格子を考えると、フォトニック・バンドを「平坦」(分散が平ら)にできることを示そう. 遅い光は、フォトニック結晶の分野の大きなテーマのひとつであり、低閾値のレーザーなどの関連で興味もたれている^{16,17)}. 平坦バンドの発端は、やはり電子系である. 電子に対する強束縛模型で、一連の模型を考えると、平坦バンドが生じることが知られている¹⁸⁾. これは、Mielkeや田崎により考えられたことで、この平坦バンドは、transfer energyをゼロにした極限とは全く異なり、transferがあっても、トポロジカルな(波動関数の干渉の)効果により平坦になることが肝要である. このために、ブロッホ状態は、普通は波数 k にあまりよらないのとは対照的に、 k に強くよるのが平坦バンドのあかしとなる. カゴメ格子はその典型例 (3本のバンドのうち、下から3番目が平坦) である. 電子に対しては、量子細線をカゴメ格子に組み込みがある¹⁹⁾. それでは、光波に対して金属導波管カゴメ・ネットワークを考えたら、どうなるだろうか. つまり、トポロジカルな理由で平坦になるフォトニック・バンドは作れるか.

図8に結果を示す. 下端の3本のバンドが局在状態からできるカゴメ格子のバンドであり、下から3番目のものが確かに平坦になっている. このバンドの幅は、($a=4$ に対

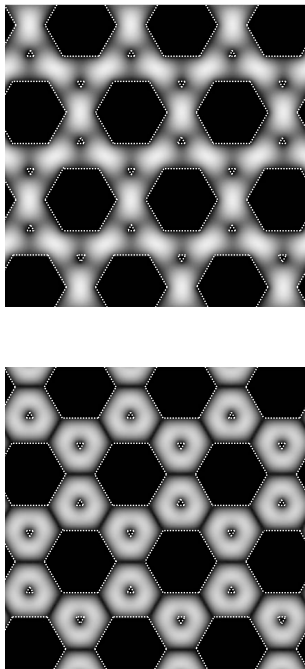


図9 カゴメ格子金属導波管ネットワークに対して計算された状態を、最低(上)および下から2番目(下)の平坦フォトニック・バンドに対してK点で示す。破線は、導波管の境界線。

して)、今の単位で 3×10^{-4} であり、つまり光速の1000分の1以下の群速度をもつバンドができた。光のモードを図9でみると、交差点に局在しているだけでなく、確かに、波数 k に強く依存している。下から6本目のバンドをみると、そこにも平坦なバンドがあり、これは、1つ上の(節(node)が余計に入った)束縛状態からなる平坦バンドになっていることがわかる。

以上でわかるように、金属導波管ネットワークにより、さまざまなフォトニック・バンド(「重い光」も含めて)の実現可能性が生じる。例えば、グラフェンにおけるような蜂の巣格子を考えれば、光のディラック・コーンも可能かもしれない。

格子構造と光物性という観点から、グラフェンにおける光誘起ホール効果という話題と、金属導波管ネットワークにおける強束縛フォトニック・バンドおよびカゴメ格子における光の局在という話題を解説した。どちらもまだ理論的な提案であるが、実験的に実現されることを願いながら筆をおきたい。グラフェンの仕事は、一部、文部科学省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」、ならびに新学術領域「分子自由度が拓く新物質科学」の援助を受けた。フォトニック・バンドの仕事は、遠藤晋平氏との共同研究

であり³⁾、また、物質材料研究機構量子ドット・センターの迫田和彰氏、東北大学理学研究科の畑野敬史氏に多くの貴重な議論をいただいたことを感謝したい。

文 献

- 1) T. Oka and H. Aoki: "Photovoltaic Hall effect in graphene," *Phys. Rev. B*, **79** (2009) 081406 (R).
- 2) T. Oka and H. Aoki: "Erratum: Photovoltaic Hall effect in graphene," *Phys. Rev. B*, **79** (2009) 169901 (E).
- 3) S. Endo, T. Oka and H. Aoki: "Tight-binding photonic bands in metallophotonic waveguide networks and flat bands in kagome lattices," *Phys. Rev. B*, **81** (2010) 113104.
- 4) 青木秀夫: "グラフェンの特異な物理", グラフェンの機能と応用展望, 齊木幸一朗, 徳本洋志編 (CMC 出版, 2009) 第1章.
- 5) 中島龍也, 青木秀夫: 分数量子ホール効果 (東京大学出版会, 1999).
- 6) 青木秀夫: "ベリーの位相", *数理科学*, **29**, No.11 (1991) 11-15. (別冊数理科学「場の理論」(サイエンス社, 1999) 107-112 に再録)
- 7) K. Sakoda: *Optical Properties of Photonic Crystals*, 2nd ed. (Springer, Berlin, 2005).
- 8) J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn and R. D. Meade: *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*, 2nd ed. (Princeton Univ. Press, Princeton, 2008).
- 9) P. K. Amiri, M. Ranjbaran, K. Mehrany, B. Rashidian and S. Fathololoumi: "Tight-Binding Analysis of Coupled Dielectric Waveguide Structures," *Fiber Integrated Opt.*, **25** (2006) 11-27.
- 10) N. Stefanou and A. Modinos: "Impurity bands in photonic insulators," *Phys. Rev. B*, **57** (1998) 12127-12133.
- 11) M. Bayindir, B. Temelkuran and E. Ozbay: "Tight-binding description of the coupled defect modes in three-dimensional photonic crystals," *Phys. Rev. Lett.*, **84** (2000) 2140-2143.
- 12) J.-H. Lee, C.-H. Kim, Y.-S. Kim, K.-M. Ho, K. Constant and C.-H. Oh: "Three-dimensional metallic photonic crystals fabricated by soft lithography for midinfrared applications," *Appl. Phys. Lett.*, **88** (2006) 181112.
- 13) R. L. Schult, D. G. Ravenhall and H. W. Wyld: "Quantum bound states in a classically unbound system of crossed wires," *Phys. Rev. B*, **39** (1989) 5476-5479.
- 14) A. Mekis, J. C. Chen, I. Kurland, S. Fan, P. R. Villeneuve and J. D. Joannopoulos: "High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides," *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996) 3787-3790.
- 15) T. Ito and K. Sakoda: "Photonic bands of metallic systems. II. Features of surface plasmon polaritons," *Phys. Rev. B*, **64** (2001) 045117.
- 16) H. Gersen, T. J. Karle, R. J. P. Engelen, W. Bogaerts, J. P. Korterik, N. F. van Hulst, T. F. Krauss and L. Kuipers: "Real-space observation of ultraslow light in photonic crystal waveguides," *Phys. Rev. Lett.*, **94** (2005) 073903.
- 17) Y. A. Vlasov, M. O'Boyle, H. F. Hamann and S. J. McNab: "Active control of slow light on a chip with photonic crystal waveguides," *Nature*, **438** (2005) 65-69.
- 18) 草部浩一, 青木秀夫: 強磁性 (東京大学出版会, 1998).
- 19) K. Shiraishi, H. Tamura and H. Takayanagi: "Design of a semiconductor ferromagnet in a quantum-dot artificial crystal," *Appl. Phys. Lett.*, **78** (2001) 3702-3704.

(2010年6月4日受理)