

# 極小曲面を用いた量子ナノ構造

東北大学・多元物質科学研究所 藤田 伸尚

## 1. はじめに

自然界に見られる安定な物質構造の多くは、与えられた温度・圧力・化学ポテンシャル等の条件下で一定不変の熱力学的平衡状態として実現している。統計力学では、系に含まれる構成要素（原子、分子等）の間に働く相互作用エネルギー、熱力学エントロピー、電磁場等の外場、その他の外部条件を含む自由エネルギーを出発点とし、これを最小化する状態として熱力学的平衡状態が表現される。この普遍的原理により、結晶（周期構造）、アモルファス（不規則構造）、さらには準結晶（準周期構造）を含む多様な物質構造の安定性を説明することができる。<sup>1</sup>

自然界に形成する最も身近な曲面構造として、シャボン膜の形状を理解する際にも同じ原理が適用される [1]。最も単純なモデルとして、シャボン膜が単位面積当たり一定の有効自由エネルギー  $\gamma$  を持つと考え、与えられた境界条件  $C$  を満たす（例えば、適当な針金の外枠を境界とする）曲面  $S$  上の自由エネルギーの積分値を、

$$\Phi = \iint_S \gamma dA = \gamma \iint_S dA \quad (1)$$

と定義する。但し、 $\gamma$  [単位: エネルギー/面積 = 力/長さ] は表面張力とも呼ばれ、シャボン膜を構成する分子種や膜厚、温度等に依って異なる値を持つ。実際のシャボン膜の曲面構造は、 $\Phi$  を最小とする曲面  $S_0$  として与えられる（膜の両側の空気圧の差がゼロの場合）。また、当該モデルでは  $\Phi$  がシャボン膜の面積に比例することから、この問題は与えられた境界条件の下で面積を最小化の問題（Plateau 問題 [2]）に帰着する。Plateau 問題の解として決定される曲面は極小曲面と呼ばれ、曲面上至るところで平均曲率  $H$  がゼロとなることが示される。

空間的な周期性を有する極小曲面は周期的極小曲面と呼ばれ、代表的な例のいくつかは 19 世紀には既に出版されていた [3; 4]。1970 年に H. A. Schön により Gyroid (G 曲面) が新たに発見され [5]、1980 年代には高分子集合体（ソフトマター）における微細な界面構造として G 曲面が自発的に形成することが見出されたため、周期的極小曲面は数学のみならず物理・化学を含む物質科学の分野からも注目を集めるようになった [6]。これらの物質における典型的な周期は 10~100nm (ナノメートル) 程度であり、これを鋳型としてナノ構造材料・デバイスを作成した場合、曲面構造に由来するユニークな物性が期待される。従って、曲面構造と物性との関係を明らかにすることは純粋な物理学の問題としてだけでなく、工学的応用の観点からも非常に興味深い課題である。

本稿の目的は、電子が周期的極小曲面上に強く拘束されて伝播する理想的物質を考え、そ

---

<sup>1</sup> 自然界に形成する構造には、熱力学的平衡状態とは全く異なる散逸構造と呼ばれるものもある。これは、外部との物質・エネルギーのやり取りを伴う非平衡開放系において形成するエネルギー的な流れを伴う定常的な構造のことで、渦潮などはその一例である。

の量子論的特性を調べることである。滑らかな曲面上を運動する電子に対しては、Jensen-Koppe (1971) を手始めとするシュレーディンガー方程式の定式化が知られている [7; 8; 9; 10; 11]。極小曲面に対しては、Weierstrass-Enneper 表現を適用することでシュレーディンガー方程式はさらに Gauss 球面上の極座標  $\theta, \varphi$  を変数とする偏微分方程式として書き表せる [12]。これを適当な境界条件の下で数値的に解くことで、周期的極小曲面に対する電子構造(バンド構造、及びエネルギー固有関数)が求められる。このようにして求めた電子構造を曲面の幾何学的性質(トポロジーや曲率)と関連付けながら議論を試みる。また、互いに Bonnet 変換により関連付けられる極小曲面の電子構造が、単一の高次元バンド構造の異なる断面プロファイルとして表せることを示す。

## 2. 周期的極小曲面

一般に、極小曲面に対する Weierstrass-Enneper (WE) 表現は次式で与えられる：

$$\begin{aligned}\bar{x}(w) &\equiv (x(w), y(w), z(w)) \\ &= \ell \operatorname{Re} \left[ e^{i\alpha} \left( \int^w F(\zeta)(1-\zeta^2)d\zeta, \int^w iF(\zeta)(1+\zeta^2)d\zeta, \int^w 2F(\zeta)\zeta d\zeta \right) \right] \quad (2) \\ &=: \ell \operatorname{Re} \left[ e^{i\alpha} \bar{\xi}(w) \right]\end{aligned}$$

但し、 $w = u + iv$  は曲面上の任意の点に対するガウス写像の複素平面上へのステレオ投影、 $\ell$  はスケール因子、 $\alpha$  は角度パラメタ (Bonnet 角)、 $F(\zeta)$  は正則関数である。与えられた  $F(\zeta)$  に対して  $\alpha$  の異なる曲面の族 (Bonnet 族) が対応するが、ユークリッド空間上で自己交差しない曲面は一般に限られた  $\alpha$  の値に対してのみ許される。Scherk 第 1 曲面・第 2 曲面 ( $\rightarrow 1$ )、及び P 曲面・D 曲面・G 曲面 ( $\rightarrow 2$ ) は代表的な周期的極小曲面として知られているが、(1) と (2) はそれぞれ Bonnet 族を構成する。また、Bonnet 角の変化に対応する曲面の変換を Bonnet 変換と呼ぶ。

(1) Scherk 第 1・第 2 曲面：

$$F(\zeta) = \frac{4}{\zeta^4 - 1} \quad (3)$$

WE 表現から学部レベルの積分問題を解くと、次の表式が得られる(積分定数を  $\bar{\xi}(0) = 0$  となるように決めた場合)。

$$\bar{\xi}(w) = \left( \frac{2}{i} \ln \frac{1-iw}{1+iw}, \frac{2}{i} \ln \frac{1+w}{1-w}, 2 \ln \frac{1-w^2}{1+w^2} \right) \quad (4)$$

二つの曲面はそれぞれ下記の Bonnet 角により与えられる。

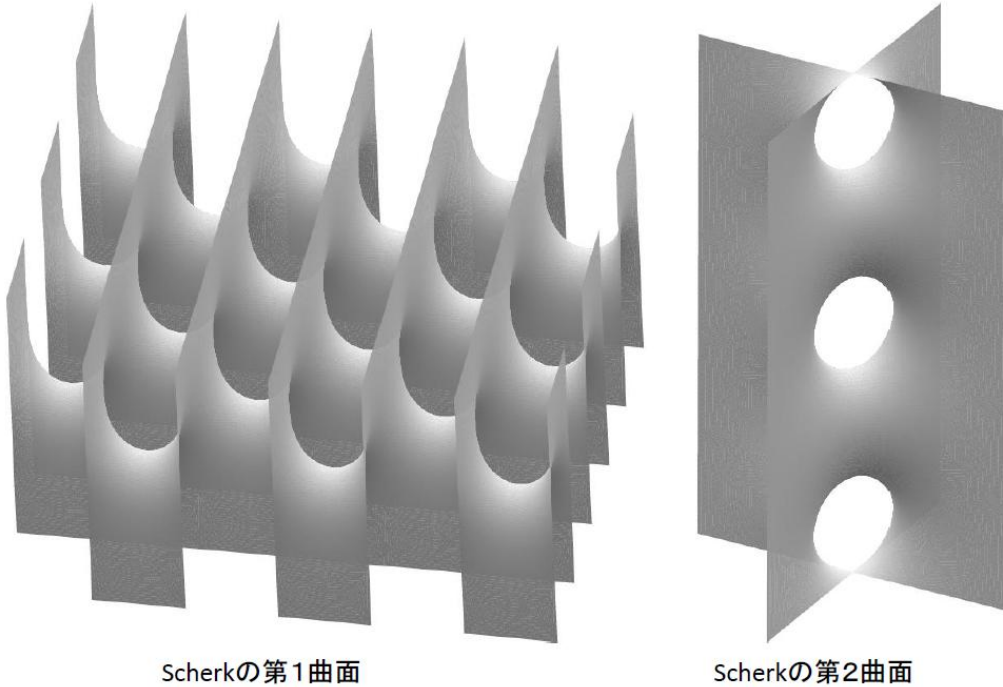
第1曲面:  $\alpha = 0$

$$\begin{aligned} \vec{x}(w) &= \ell \left( 2 \tan^{-1} \left( \frac{2r \cos \phi}{r^2 - 1} \right), -2 \tan^{-1} \left( \frac{2r \sin \phi}{r^2 - 1} \right), \ln \frac{1 + r^4 - 2r^2 \cos(2\phi)}{1 + r^4 + 2r^2 \cos(2\phi)} \right) \\ &=: \ell \left( X, Y, 2 \ln \frac{\cos(X/2)}{\cos(Y/2)} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

第2曲面:  $\alpha = \pi/2$

$$\vec{x}(w) = \ell \left( \ln \frac{1 + r^2 + 2r \sin \phi}{1 + r^2 - 2r \sin \phi}, \ln \frac{1 + r^2 + 2r \cos \phi}{1 + r^2 - 2r \cos \phi}, 2 \tan^{-1} \frac{2r^2 \sin(2\phi)}{1 - r^4} \right) \quad (6)$$

但し、変数  $(r, \phi)$  は複素変数の極座標表示  $w = r \exp(i\phi)$  を表す。



**Fig. 1 :** Scherk の第 1 曲面は  $x$  軸と  $y$  軸の二方向に二次元的な周期性を持ち (**doubly-periodic**)、Scherk の第 2 曲面は  $z$  方向のみに一次元的な周期性を持つ (**singly-periodic**)。

(2) P・D・G 曲面:

これらの曲面は三次元的な周期性を持つ(**triply-periodic**)周期的極小曲面の代表格として知られ、高分子集合体の自己組織化により形成する界面構造を良く記述する幾何学的構造として重要である。

$$F(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{1+14\zeta^4 + \zeta^8}} \quad (7)$$

WE 表現の積分は第一種楕円積分  $f(u) = 1/2 \times \int_0^u (1 - v^2 + v^4)^{-1/2} dv$  を用いて、

$$\bar{\xi}(w) = \left( f\left(\frac{2w}{1+w^2}\right), f\left(\frac{2iw}{1-w^2}\right), f\left(\frac{w^2-1}{w^2+1}\right) + f(1) \right) \quad (8)$$

三つの曲面はそれぞれ以下の Bonnet 角により与えられる。

- P 曲面 (Schwarz) :  $\alpha = 0$   
 G 曲面 (Schön) :  $\alpha = \tan^{-1}(r/s)$   
 D 曲面 (Schwarz) :  $\alpha = \pi/2$

但し、 $r + is = 2 \exp(-i\pi/6)K(k^2)$ 、 $K(k^2)$  は第一種完全楕円積分、また、 $k = \exp(-i\pi/3)$  である。

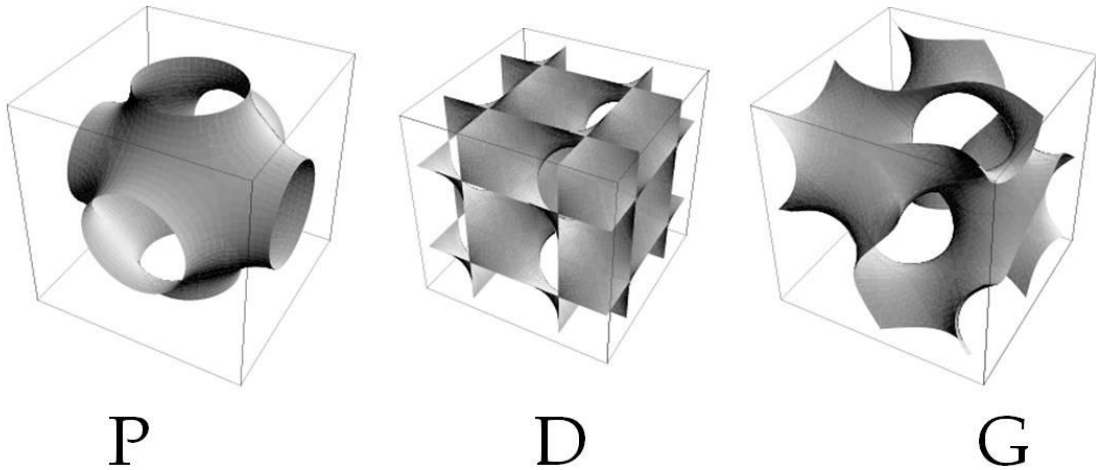


Fig. 2 : Schwarz の P 曲面、Schwarz の D 曲面、Schön の G 曲面の立方体単位胞。

### 3. Bonnet 変換と並進対称性

第2節で述べたように、関数  $F(\zeta)$  及び Bonnet 角  $\alpha$  は極小曲面の幾何学的構造を完全に決定するが、曲面の周期がどのようにして WE 表現によって与えられるのかを本節では考えてみよう。まず、Scherk の曲面に対する関数  $F(\zeta) = 4/(\zeta^4 - 1)$  は  $\zeta = \pm 1, \pm i$  の四点で特異点を持ち、これらは一位の極となっている。WE 表現の  $x, y$ , 及び  $z$  成分に対応する被積分関数  $G_1(\zeta) = F(\zeta)(1 - \zeta^2)$ 、 $G_2(\zeta) = iF(\zeta)(1 + \zeta^2)$ 、及び  $G_3(\zeta) = 2F(\zeta)\zeta$  の実部と虚部を等高線で

表す（下図）と、 $F(\zeta)$ に由来する特異点（一位の極）を持つことが分かる。但し、下図では横軸と縦軸は $\zeta$ の実部と虚部に対応する。

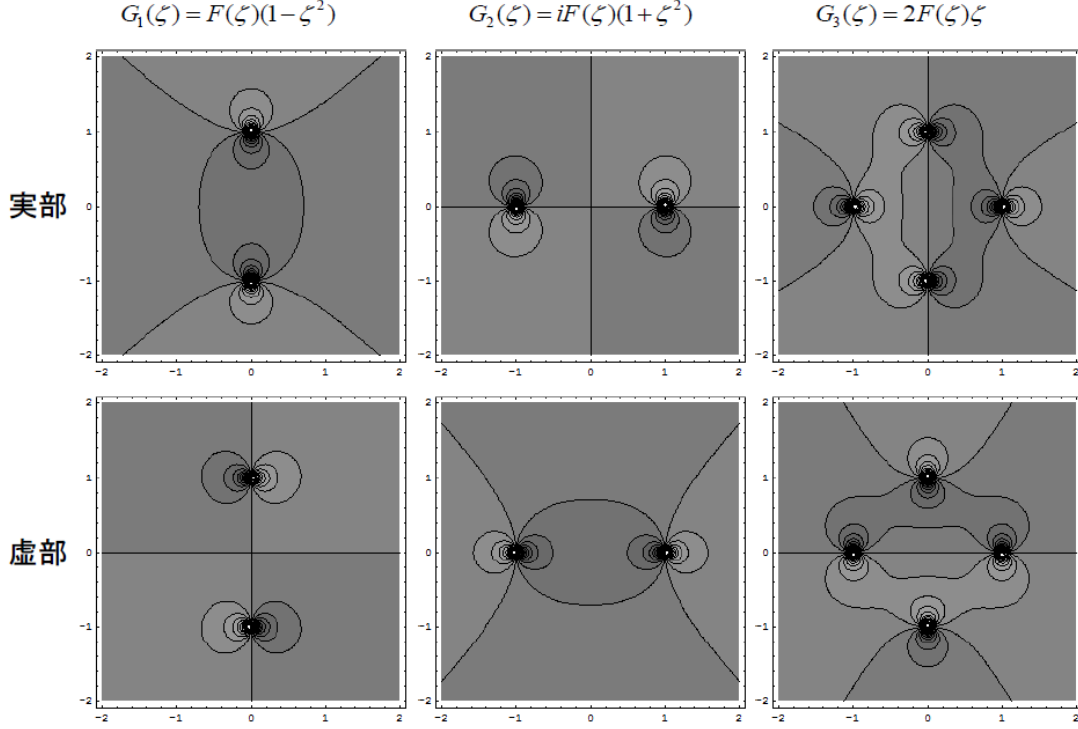


Fig. 3 : Scherk の曲面に対する WE 表現の被積分関数の等高線プロフィール。

特異点以外の領域ではこれらの被積分関数は正則であるので、特異点を含まない任意の単連結領域を取り囲む閉曲線上の積分はゼロとなる。一方、極のいずれかを取り囲む閉曲線上の積分値は、留数定理を用いて次のように計算できる。

$$\begin{aligned} \bar{\Xi}(\alpha) &= \left( \oint_{C_\alpha} G_1(\zeta) d\zeta, \oint_{C_\alpha} G_2(\zeta) d\zeta, \oint_{C_\alpha} G_3(\zeta) d\zeta \right) \\ &= \lim_{\zeta \rightarrow \alpha} (2i\pi(\zeta - \alpha)G_1(\zeta), 2i\pi(\zeta - \alpha)G_2(\zeta), 2i\pi(\zeta - \alpha)G_3(\zeta)) \end{aligned} \quad (9)$$

$$\therefore \bar{\Xi}(C_{\pm 1}) = (0, \mp 4\pi, 4i\pi), \quad \bar{\Xi}(C_{\pm i}) = (\mp 4\pi, 0, -4i\pi) \quad (10)$$

但し、 $C_\alpha$  ( $\alpha = \pm 1, \pm i$ ) は特異点  $\alpha$  のみを反時計回りに一回周回する任意の Jordan 曲線である。始点と終点が一致する任意の閉じた積分経路が特異点の一つまたは複数を周回するとき、これに対応する曲面上の経路の始点と終点はその積分値に対応する有限の並進ベクトルで結ばれる。その場合、始点と終点は対称性の観点から全く等価なため、極小曲面はその並進ベクトルに対する並進対称性を持つ。上記の結果  $\bar{\Xi}(C_{\pm 1}), \bar{\Xi}(C_{\pm i})$  は Scherk の曲面に対する  $\mathbb{C}^3$  空間における基本並進ベクトルに他ならない。これらの実部を取ると、第1曲面に対する基本並進ベクトル

$\vec{A} = (4\pi, 0, 0)$  及び  $\vec{B} = (0, 4\pi, 0)$  が得られる。また、虚部からは第 2 曲面に対する基本並進ベクトル  $\vec{C} = (0, 0, 4\pi)$  が得られる。読者は Fig.1 の第 1 曲面には上述の基本並進ベクトルよりもさらに短い並進ベクトル  $(\vec{A} + \vec{B})/2 = (2\pi, 2\pi, 0)$  に対する並進対称性の存在に気づいたかもしれない。後者に対しては曲面の表裏が入れ替わるので、曲面の表と裏の区別が存在しない場合に限り許される対称性である。一般に表裏の区別が存在しない曲面は、本節の方法で同定されるよりも高い対称性を持ちうる。

次に P・D・G 曲面について考える。 $F(\zeta)$  の特異点は  $1 + 14\zeta^4 + \zeta^8 = 0$  の八つの解、

$$\{\zeta_j\}_{j=1,2,\dots,8} = \left\{ \frac{\sqrt{3}-1}{\sqrt{2}} e^{i(2n+1)\pi/4}, \frac{\sqrt{3}+1}{\sqrt{2}} e^{i(2n+1)\pi/4} \right\}_{n=0,1,2,3} \quad (11)$$

で与えられる (下図の黒丸)。これらは関数  $F(\zeta)$  の 2 位の分岐点(branch point)であることに注意したい。即ち、関数  $F(\zeta)$  は特異点以外の領域では二価関数となっており、各特異点の周りに二回周回して元の値に戻る。従って、WE 表現に対する積分経路は、2 枚の複素平面 (下図の I 及び II) が適当に取った branch cut (例えば下図の太線) で滑らかに接合した Riemann 曲面上で考える必要がある。また、8 つの特異点をガウス球面上で表すと、ガウス球に内接する立方体の頂点に対応することにも注意しておく。

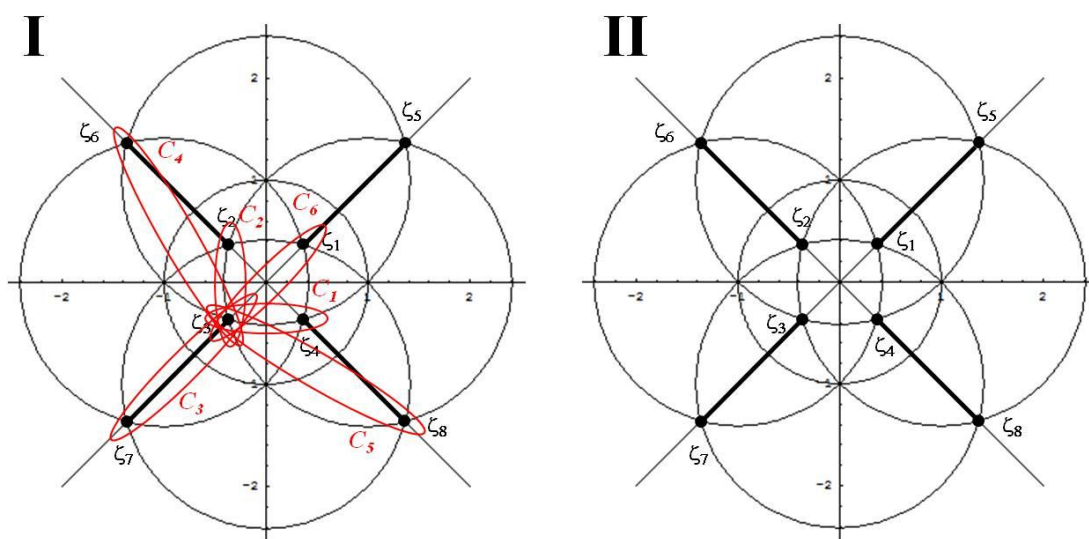


Fig. 4 (カラー) : P・D・G 曲面の Bonnet 族に対する  $F(\zeta)$  の定義域と特異点  $\zeta_1 \sim \zeta_8$ 。基本並進ベクトルに対応する六つの閉経路  $C_1 \sim C_8$  を赤で示す。

P・D・G 曲面に対する基本並進ベクトルは、Riemann 曲面上最も基本的な六つの閉じた積分経路  $C_j$  ( $j=1,2,\dots,6$ ) によって与えられる (上図)。これらは各特異点を一度周回する Jordan 曲線  $C(\zeta_j)$  により、

$$\begin{aligned}
C_1 &= C(\zeta_3) + C(\zeta_4), & C_2 &= C(\zeta_3) + C(\zeta_2) \\
C_3 &= C(\zeta_3) + C(\zeta_7), & C_4 &= C(\zeta_3) + C(\zeta_6) \\
C_5 &= C(\zeta_3) + C(\zeta_8), & C_6 &= C(\zeta_3) + C(\zeta_1)
\end{aligned} \tag{12}$$

と表される。これ以外の全ての閉経路による WE 積分は、これらの六つの基本的な閉曲線に対する WE 積分の合成により与えられる。これらの閉経路による WE 積分、 $\bar{\Xi}_j \equiv \bar{\Xi}(C_j)$  は、

$$\left( \bar{\Xi}_1, \bar{\Xi}_2, \bar{\Xi}_3, \bar{\Xi}_4, \bar{\Xi}_5, \bar{\Xi}_6 \right) = \begin{pmatrix} r & -is & is & 0 & r-is & -r-is \\ is & r & -is & -r-is & 0 & r-is \\ -is & is & r & r-is & -r-is & 0 \end{pmatrix} \tag{13}$$

と与えられる [13]。但し、 $r+is=2\exp(-i\pi/6)K(k^2)$ 、 $K(k^2)$  は第一種完全楕円積分、また、 $k=\exp(-i\pi/3)$ 、よって  $r \cong 2.156$ 、 $s \cong 1.686$  である。

(以下、スペースの都合上  $\bar{\Xi}_j$  を 3 成分の列ベクトルで表す。)

Bonnet 角  $\alpha$  に対して上記の  $\mathbb{C}^3$  基本並進ベクトルの  $\mathbb{R}^3$  への射影  $\text{Re}[e^{i\alpha}\bar{\Xi}_j]$  を取ると、個々の曲面に対する並進ベクトルが得られる。P・D・G 曲面に対して、

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}: \text{Re}\left[\left(\bar{\Xi}_1, \bar{\Xi}_2, \bar{\Xi}_3, \bar{\Xi}_4, \bar{\Xi}_5, \bar{\Xi}_6\right)\right] &= \begin{pmatrix} r & 0 & 0 & 0 & r & -r \\ 0 & r & 0 & -r & 0 & r \\ 0 & 0 & r & r & -r & 0 \end{pmatrix} \\
\mathbf{D}: \text{Re}\left[i\left(\bar{\Xi}_1, \bar{\Xi}_2, \bar{\Xi}_3, \bar{\Xi}_4, \bar{\Xi}_5, \bar{\Xi}_6\right)\right] &= \begin{pmatrix} 0 & s & -s & 0 & s & s \\ -s & 0 & s & s & 0 & s \\ s & -s & 0 & s & s & 0 \end{pmatrix} \\
\mathbf{G}: \text{Re}\left[\left(\frac{s+ir}{\sqrt{r^2+s^2}}\right)\left(\bar{\Xi}_1, \bar{\Xi}_2, \bar{\Xi}_3, \bar{\Xi}_4, \bar{\Xi}_5, \bar{\Xi}_6\right)\right] &= \frac{rs}{\sqrt{r^2+s^2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ -1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 1 & -1 & 1 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{14}$$

即ち、 $\mathbb{R}^3$  空間における基本並進ベクトルの組  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  は、それぞれ次式で与えられる。

$$\mathbf{P}: \begin{pmatrix} r & 0 & 0 \\ 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}: \begin{pmatrix} 0 & s & s \\ s & 0 & s \\ s & s & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}: \frac{rs}{\sqrt{r^2+s^2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{15}$$

以上により、P・D・G 曲面に対するブラヴェ格子、 $\Lambda_P \cdot \Lambda_D \cdot \Lambda_G$  はそれぞれ、単純立方格子(P)・面

心立方格子(F)・体心立方格子(I)であることが分かる。実際に、これらの曲面に対する空間群はそれぞれ $Pm\bar{3}m \cdot Fd\bar{3}m \cdot I4_132$ であることが知られており、上の結果と符合する。(空間群の同定には並進対称性に加えて、Riemann 曲面上の $F(\zeta)$ 関数の点対称性に関する考察を必要とするが、ここでは省略する。) 但し、表裏の区別が無いと仮定した場合には、P・D・G 曲面の空間群はそれぞれ $Im\bar{3}m \cdot Pn\bar{3}m \cdot Ia\bar{3}d$ で与えられ、特にP及びD曲面ではブラヴェ格子が前とは異なるのでより高い並進対称性を持つようになる。

周期的極小曲面の幾何学的説明はここまでとする。

#### 4. 曲面に拘束された電子状態

近年の半導体微細加工技術の進歩によって量子ドット・量子細線・人工超格子などの低次元ナノ構造体の作製が可能となり、これらの量子閉じ込め効果を利用した新しい量子現象の発見やそれを応用した光・電子デバイスの開発研究が飛躍的に進展した。一方、物質科学では、ソフトマターの系に見られる自己組織化現象を利用することで周期的極小曲面などの全く新しいタイプのナノ構造体の作製が進められて来た。これらの物質に対しては、曲面で区切られた細孔ネットワークを触媒等の反応場として利用した応用研究が進められているが、我々は曲面構造自体に由来する量子閉じ込め効果と量子干渉効果に注目する。現状ではこれらの物質は原子配列等の乱れを多く含むため、曲面構造に由来する量子現象を観察するのは困難であるが、将来的に理想的な周期的極小曲面がナノ構造体として実現された場合を念頭に、どのような量子現象が期待されるのかを理論的に明らかにしておくことは重要である。

曲面上に拘束された電子の運動を理論的に取り扱う為の最も簡単なモデルとして、曲面を中心とする一定の厚さ $d$ の薄膜内部に電子を閉じ込めた場合を考える。これに対するシュレーディンガー方程式は、

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{\mu, \nu=1}^3 \frac{\partial}{\partial u^\mu} \sqrt{g} g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial u^\nu} + V(u^3) \right\} \Psi(u^1, u^2, u^3) = E \Psi(u^1, u^2, u^3) \quad (16)$$

となる。但し、(16)式ではデカルト座標系 $(x, y, z)$ の代わりに曲面に沿った座標系 $(u^1, u^2, u^3)$ を用い、座標軸 $u^3$ は曲面の法線方向に取っている。また、 $g_{\mu\nu}$ は計量テンソル(但し、 $g_{j3} = g_{3j} = 0$ ,  $j=1,2$ )、即ち、無限小距離 $ds$ を $ds^2 = \Sigma g_{\mu\nu} du^\mu du^\nu$ により与え、 $g = \det(g_{\mu\nu})$ 、 $g^{\mu\nu}$ は計量テンソルの逆行列を表す。薄膜内部に電子を閉じ込めるポテンシャルエネルギーは $V(u^3) = 0$  ( $|u^3| \leq d/2$ )、 $\infty$  ( $|u^3| > d/2$ )である。

ここで、薄膜が非常に薄いと仮定し上式において $d \rightarrow 0^+$ とおくと、曲面の垂直方向の運動の自由度が完全に凍結し、曲面に沿った運動の自由度のみが残る。後者を記述する二次元のシュレーディンガー方程式は以下の形を持つ。



$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{j,k=1}^2 \frac{\partial}{\partial u^j} \sqrt{g} g^{jk} \frac{\partial}{\partial u^k} - \frac{\hbar^2}{8m} (\kappa_1 - \kappa_2)^2 \right\} \psi(u^1, u^2) = E \psi(u^1, u^2) \quad (17)$$

但し、(17)式の計量テンソル  $g_{jk}$  は、曲面に沿った方向に関する  $2 \times 2$  の成分のみを表す。左辺の第一項は曲面上の電子の伝播を表し、第二項は垂直方向の運動を量子化したことに起因する主曲率の差の平方に比例する有効引力ポテンシャルエネルギーを表す。曲率に依存する引力ポテンシャルエネルギーの存在は、純粋に量子力学的な効果として興味深い。極小曲面の場合、平均曲率  $H = (\kappa_1 + \kappa_2)/2 = 0$  により、有効ポテンシャルエネルギーは  $-\hbar^2/8m(\kappa_1 - \kappa_2)^2 = \hbar^2/2m\kappa_1\kappa_2$  となる。即ち、曲面上の電子は負のガウス曲率が大きい双曲部に強く引きつけられる。

極小曲面に対しては、曲面座標系として WE 表現の複素座標  $w = u + iv$  が用いられる。このとき、曲面上の計量は  $ds^2 = \ell^2 |F(w)|^2 (1 + |w|^2)^2 (du^2 + dv^2)$  で与えられ、また、 $(\kappa_1 - \kappa_2)^2 = 16/[\ell^2 |F(w)|^2 (1 + |w|^2)^4]$  であるから、シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\ell^2 |F(w)|^2 (1 + |w|^2)^2} \left\{ \left( \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right) + \frac{4}{(1 + |w|^2)^2} \right\} \psi(u, v) = E \psi(u, v) \quad (18)$$

の形となる。さらに、ガウス球面上の極座標  $\theta$  と  $\varphi$  を  $w = \cot(\theta/2)e^{i\varphi}$  により定義すると、方程式はさらに単純な形

$$-\frac{(1 - \cos \theta)^4}{|F(w)|^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1 \right) \psi(\theta, \varphi) = \varepsilon \psi(\theta, \varphi) \quad (19)$$

(但し、 $\varepsilon = 8m\ell^2 E / \hbar^2$ ) に帰着する。

## 5. 周期的極小曲面のバンド構造

式(19)において、個々の極小曲面の構造は左辺第一因子の分母  $|F(w)|^2$  に込められており、Bonnet 角  $\alpha$  は含まれていない。従って、同一の Bonnet 族に属する複数の極小曲面に対し、シュレーディンガー方程式は同じものとなる。この理由は、これらの曲面同士が局所的に等長同型であるためであると理解できる。しかし、三次元ユークリッド空間に埋め込まれた曲面として、これらの曲面は全く異なるトポロジを持つ。曲面のトポロジはその上を伝播する電子波の干渉を強く規定するので、電子構造はこれらの曲面で異なったものとなる。トポロジによる電子構造の違いは、シュレーディンガー方程式を解く際に用いる境界条件の違いとして取り入れられる。

個々の周期的極小曲面について調べる前に、固体電子論の基礎であるブロッホの定理について復習しておく。ブロッホの定理は、周期的なポテンシャル中を運動する電子のシュレーディンガー方程式に対して一般的に成り立つもので、次のように記述される [14]。

**ブロッホの定理 (Bloch's theorem) :**

ポテンシャルエネルギー  $V(\vec{r})$  が周期格子  $\Lambda$  の周期性を有すると仮定する。即ち、

$$\forall \vec{R} \in \Lambda \text{ に対して、 } V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$$

このとき、 $V(\vec{r})$  中を運動する電子に対するシュレーディンガー方程式

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

の解(固有関数系)として、常に次の条件を満たすもの(ブロッホ関数)を選ぶことが出来る。

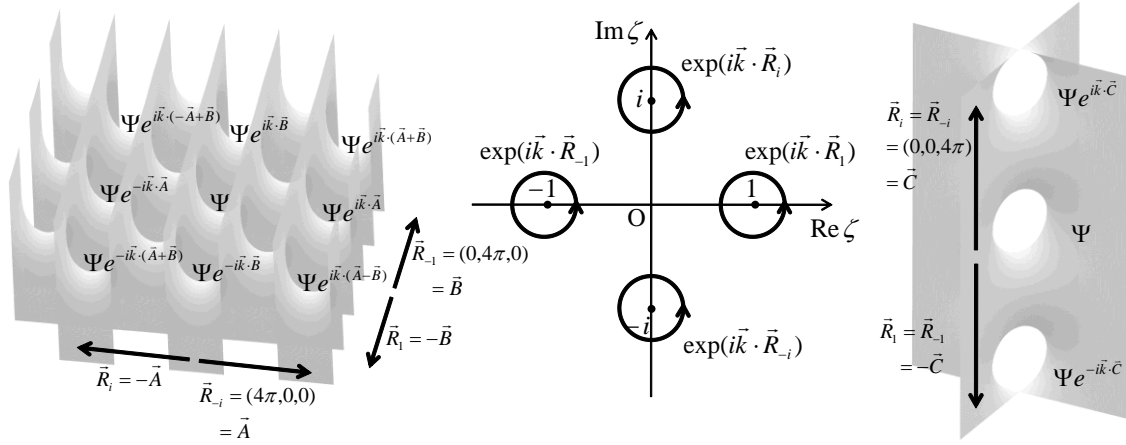
$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (\forall \vec{R} \in \Lambda)$$

ブロッホの定理は、シュレーディンガー方程式の全ての固有関数及びエネルギー固有値がベクトル  $\vec{k}$  で指定されることを意味する。また、このように指定される固有関数をブロッホ関数と呼ぶ。 $\vec{k}$  は周期格子  $\Lambda$  に対する逆格子空間(逆空間)のベクトルで、波数ベクトルと呼ばれる。また、エネルギー固有値  $E$  は  $\vec{k}$  の関数  $E(\vec{k})$  として表すことが出来るが、関数  $E(\vec{k})$  のことをバンド構造と呼ぶ。 $E(\vec{k})$  は周期格子  $\Lambda$  の逆格子  $\Lambda^*$  の周期性を持つ。

周期的極小曲面に対してもブロッホの定理は適用可能である。この場合、曲面の任意の周期  $\vec{R}$  の並進に対して、波動関数に位相因子  $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R})$  が掛かる。Riemann 曲面上では、並進ベクトル  $\vec{R}$  を与える閉曲線に沿って波動関数を解析接続したときに、周回後の波動関数は元の波動関数に位相因子  $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R})$  が掛かったものとなる。Scherk の曲面の場合、四つの極  $\{\pm 1, \pm i\}$  を周回する軌道に対して波動関数の位相の回転はそれぞれ、

$$\{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\pm 1}), \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\pm i})\} \quad (20)$$

で与えられる(Fig.5)。但し、第 1 曲面に対して  $\vec{k}$  及び  $\vec{R}$  は  $xy$  面内のベクトルを表し、第 2 曲面に対してこれらは  $z$  軸方向のベクトルを表す。一般に、同一の Bonnet 族に属する異なる曲面のトポロジは、Riemann 曲面上の閉曲線周りのブロッホ関数の位相の回転を通して取り入れられる。



**Fig. 5:** Scherk の曲面に対する Bloch の定理の適用。(左)第 1 曲面上の Bloch 関数の位相の空間変化。(中) $\zeta$ -平面上の特異点を周回する軌道に対応する位相の回転。(右)第 2 曲面上の Bloch 関数の位相の空間変化。

理解の見通しを良くするために、Scherk の第 1・第 2 曲面に対するバンド構造を統一的な枠組みで記述することを試みる。議論の便宜上、 $\mathbb{C}^3$  空間のベクトル  $(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$  を  $\mathbb{R}^6$  空間のベクトル、

$$(\text{Re } \xi_1, \text{Re } \xi_2, \text{Re } \xi_3, \text{Im } \xi_1, \text{Im } \xi_2, \text{Im } \xi_3) \quad (21)$$

と表すことにすると、Scherk の曲面に対する基本並進ベクトル((10)式)は、

$$\vec{\Xi}(C_{\pm 1}) = (0, \mp 4\pi, 0, 0, 0, 4\pi), \quad \vec{\Xi}(C_{\pm i}) = (\mp 4\pi, 0, 0, 0, 0, -4\pi) \quad (22)$$

の形に書き直される。これらの 4 つのベクトルは第 1、第 2、第 6 成分からなる部分空間 ( $=\mathbb{R}^3$ ) に含まれるため、この部分空間上のベクトルとして

$$\vec{\Xi}'(C_{\pm 1}) = (0, \mp 4\pi, 4\pi), \quad \vec{\Xi}'(C_{\pm i}) = (\mp 4\pi, 0, -4\pi) \quad (23)$$

と表すことが出来る。また、4 つのベクトルの総和は

$$\vec{\Xi}'(C_1) + \vec{\Xi}'(C_{-1}) + \vec{\Xi}'(C_i) + \vec{\Xi}'(C_{-i}) = (0, 0, 0) \quad (24)$$

であり、整係数一次独立な基本並進ベクトルは三つに限られる。((24)式は、四つの特異点を取り囲む閉曲線の内部と外部を入れ替えると、特異点を含まない閉曲線とみなせることに対応する。) (23)式の基本並進ベクトルが生成するブラヴェ格子  $\Lambda$  は面心立方格子である。

ここで、 $\Lambda$  に対する三次元逆格子空間の波数ベクトル  $\vec{k}$  を導入し、各特異点の周りの位相の回転を

$$\{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{\Xi}'(C_{\pm 1})), \exp(i\vec{k} \cdot \vec{\Xi}'(C_{\pm i}))\} \quad (25)$$

と定義する。Scherk の第 1・第 2 曲面の位相の回転((20)式)は、(25)式で $\vec{k}$  を個々の曲面に対応する部分空間に限定した場合に対応する。このように拡張した位相の回転((25)式)を、シュレーディンガー方程式の境界条件として取り入れることで、Scherk の曲面の Bonnet 族に対して仮想的な三次元のバンド構造  $\tilde{E}_{Scherk}(\vec{k})$  が求められる。 $\tilde{E}_{Scherk}(\vec{k})$  は  $\Lambda$  の逆格子  $\Lambda^*$  に対応する並進対称性を持つ。 $\Lambda$  が面心立方格子の場合、 $\Lambda^*$  は体心立方格子となる。但し、各格子点に対応する曲面要素の点群は正方対称なので、バンド構造  $\tilde{E}_{Scherk}(\vec{k})$  は点群として正方対称性のみを持つ。(即ち、四回対称軸  $k_z$  は  $k_x, k_y$  軸と非等価である。)第 1 及び第 2 曲面のバンド構造は、それぞれ  $\tilde{E}_{Scherk}(\vec{k})$  の二次元及び一次元部分空間上の断面:

$$E_1(k_x, k_y) = \tilde{E}_{Scherk}(k_x, k_y, 0), \text{ 及び } E_2(k_z) = \tilde{E}_{Scherk}(0, 0, k_z)$$

で与えられる。逆格子  $\Lambda^*$  の Wigner-Seitz セル(Brillouin ゾーン)に含まれる特殊点の内、 $\Gamma$  点及び M 点は、共に  $(k_x, k_y)$  平面と  $k_z$  軸に含まれる (Fig.6 参照)。よって、 $\Gamma$  点または M 点に対応する位相の回転は二つの曲面で等価となる。このことは、Scherk の第 1、第 2 曲面のバンド構造が、 $\Gamma$  点及び M 点において完全に等しいエネルギー固有値を持つことを意味する。(これを、本稿では「二つの曲面のバンド構造が  $\Gamma$  点または M 点において交差する」と表現する。)

$$\begin{aligned} E_1(0, 0) &= E_2(0) = \tilde{E}_{Scherk}(\Gamma) \\ E_1(1/4, 1/4) &= E_2(1/4) = \tilde{E}_{Scherk}(M) \end{aligned} \quad (26)$$

シュレーディンガー方程式((19)式)は、二つの変数を差分化し位相の回転を境界条件として取り入れることで、行列の対角化問題に帰着する。これを数値的に解くことで、バンド構造を求めることが出来る。(但し、Scherk の曲面に対する実際のバンド構造は本稿では示さない。)

[演習: 第 1 及び第 2 曲面に対する M 点の波数  $(1/4, 1/4, 0)$  及び  $(0, 0, 1/4)$  を(20)式に代入し、これらが  $\zeta$ -平面上の特異点の周りで等価な位相の回転を与えることを確認せよ。]

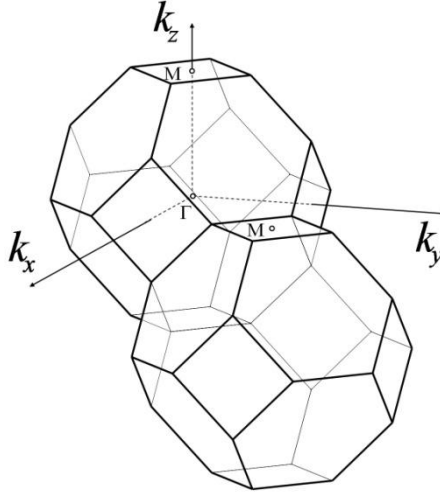


Fig. 6 : 面心立方格子 $\Lambda$ に対する Brillouin ゾーン (即ち、体心立方格子 $\Lambda^*$ に対する Wigner-Seitz セル)。( $k_x, k_y$ )平面と  $k_z$  軸はどちらも特殊点  $\Gamma$  及び  $M$  を含む。これらの点におけるエネルギー固有値は、Scherk の第 1・第 2 曲面に対して完全に一致する値を持つ。

$P \cdot D \cdot G$  曲面の場合についても基本的にこれまでと同様の議論を行う。式(13)の基本並進ベクトルを $\mathbb{R}^6$ 空間のベクトルとして書き直すと、

$$\begin{aligned}\vec{\Xi}_1 &= (r, 0, 0, 0, s, -s), & \vec{\Xi}_4 &= (0, -r, r, 0, -s, -s) \\ \vec{\Xi}_2 &= (0, r, 0, -s, 0, s), & \vec{\Xi}_5 &= (r, 0, -r, -s, 0, -s) \\ \vec{\Xi}_3 &= (0, 0, r, s, -s, 0), & \vec{\Xi}_6 &= (-r, r, 0, -s, -s, 0)\end{aligned}\tag{27}$$

となるが、これらは整係数一次独立であり $\mathbb{R}^6$ 空間におけるブラヴェ格子 $\Lambda_6$ を生成する。 $P \cdot D \cdot G$  曲面の並進対称性を表すブラヴェ格子 $\Lambda_P \cdot \Lambda_D \cdot \Lambda_G$ は、 $\Lambda_6$ をそれぞれに対応する部分空間上に直交射影したものとなり、それぞれの生成元は(15)式で与えられる。ブロッホ関数は、六次元逆格子空間上の波数ベクトル $\vec{k}$ に対して、(12)式の六つの閉経路、 $C_j$ 上の位相の回転を

$$\{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{\Xi}_j)\}_{j=1,2,\dots,6}\tag{28}$$

と指定したシュレーディンガー方程式の解として求められる。また、これに対応して仮想的な六次元のバンド構造 $\tilde{E}(\vec{k})$ が決まる。 $\tilde{E}(\vec{k})$ は $\Lambda_6$ に対する逆格子 $\Lambda_6^*$ の並進対称性を持つ周期関数である。即ち、

$$\tilde{E}(\vec{k} + \vec{G}) = \tilde{E}(\vec{k}), \quad \forall \vec{G} \in \Lambda_6^*\tag{29}$$

を満たす。 $P \cdot D \cdot G$  曲面に対するバンド構造は、 $\tilde{E}(\vec{k})$ の各曲面に対する三次元部分空間 (以下、 $\mathbb{E}_P \cdot \mathbb{E}_D \cdot \mathbb{E}_G$ と表す) 上の断面として与えられる。

次に、バンド構造のエネルギー固有値が異なる曲面同士で完全に一致する(バンドが交差す

る)波数を求めることにする。まず、逆格子 $\Lambda_6^*$ の生成元 $\vec{Q}_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 6$ )を

$$\vec{Q}_i \cdot \vec{E}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (30)$$

により定義する。これを満たすベクトル $\vec{Q}_i$ は次式で与えられる(但し、 $\bar{r} = 1/r, \bar{s} = 1/s$ )。

$$\begin{aligned} \vec{Q}_1 &= \pi(0, \bar{r}, \bar{r}, 0, \bar{s}, -\bar{s}), & \vec{Q}_4 &= \pi(0, -\bar{r}, \bar{r}, -\bar{s}, 0, 0) \\ \vec{Q}_2 &= \pi(\bar{r}, 0, \bar{r}, -\bar{s}, 0, \bar{s}), & \vec{Q}_5 &= \pi(\bar{r}, 0, -\bar{r}, 0, -\bar{s}, 0) \\ \vec{Q}_3 &= \pi(\bar{r}, \bar{r}, 0, \bar{s}, -\bar{s}, 0), & \vec{Q}_6 &= \pi(-\bar{r}, \bar{r}, 0, 0, 0, -\bar{s}) \end{aligned} \quad (31)$$

$\Lambda_P \cdot \Lambda_D \cdot \Lambda_G$ に対する逆格子 $\Lambda_P^* \cdot \Lambda_D^* \cdot \Lambda_G^*$ は、 $\Lambda_6^*$ の各曲面に対する三次元部分空間上の断面として与えられ、それぞれ以下の基底で生成される周期格子となる。

$$\begin{aligned} \Lambda_P^* &: \{\vec{Q}_1 + \vec{Q}_5 - \vec{Q}_6, \vec{Q}_2 - \vec{Q}_4 + \vec{Q}_6, \vec{Q}_3 + \vec{Q}_4 - \vec{Q}_5\} \\ \Lambda_D^* &: \{-\vec{Q}_2 + \vec{Q}_3 + \vec{Q}_4, \vec{Q}_1 - \vec{Q}_3 + \vec{Q}_5, -\vec{Q}_1 + \vec{Q}_2 + \vec{Q}_6\} \\ \Lambda_G^* &: \{\vec{Q}_1 - \vec{Q}_4 - \vec{Q}_6, \vec{Q}_2 - \vec{Q}_4 - \vec{Q}_5, \vec{Q}_3 - \vec{Q}_5 - \vec{Q}_6\} \end{aligned} \quad (32)$$

$\Lambda_P \cdot \Lambda_D \cdot \Lambda_G$ はそれぞれ単純立方格子・面心立方格子・体心立方格子である(第3節)ことから、逆格子 $\Lambda_P^* \cdot \Lambda_D^* \cdot \Lambda_G^*$ はそれぞれ単純立方格子・体心立方格子・面心立方格子である。[演習:(31)式を(32)式に代入してこのことを確認せよ。]

三つの曲面(P・D・G)のうち任意の二つからなる組み合わせをX, Y ( $X \neq Y$ )とする。これらに関する部分空間上の波数ベクトルを $\vec{k}_X$ 及び $\vec{k}_Y$ と表記すると、

$$\vec{k}_X + \vec{G} = \vec{k}_Y, \quad \exists \vec{G} \in \Lambda_6^* \quad (33)$$

の条件の下でこれらの波数ベクトルはRiemann曲面上の閉曲線に対して同一の位相の回転を与える。また、(29)式よりこれらの波数に対応するエネルギー固有値は曲面X及びYで完全に一致する(バンド交差)。(33)式の逆格子ベクトル $\vec{G}$ は

$$\vec{G} = \vec{G}_X + \vec{G}_Y, \quad \vec{G}_X \in E_X, \vec{G}_Y \in E_Y \quad (34)$$

のように、 $E_X$ 成分と $E_Y$ 成分に一意的に分解可能である。よって、

$$\vec{k}_X + \vec{G}_X = \vec{k}_Y - \vec{G}_Y = \vec{0} \quad (35)$$

$$\therefore \vec{k}_X = -\vec{G}_X, \quad \vec{k}_Y = \vec{G}_Y \quad (36)$$

となる。但し、上式の導出で部分空間 $E_X$ と $E_Y$  ( $X \neq Y$ )が原点のみで交差することを用いた。以上

から、六次元逆格子 $\Lambda_6^*$ の任意の逆格子ベクトルを $\mathbf{E}_X$ 成分と $\mathbf{E}_Y$ 成分に分解した波数 $\vec{k}_X$ と $\vec{k}_Y$ において、X曲面とY曲面に対するエネルギー固有値は完全に一致することが分かった。特に、逆格子ベクトルが

$$\vec{G} \in \Lambda_X^* \oplus \Lambda_Y^* \quad (37)$$

を満たす場合には $\vec{G}_X \in \Lambda_X^*$ 及び $\vec{G}_Y \in \Lambda_Y^*$ となるので、対応するバンド交差は $\Gamma$ 点 (Brillouin ゾーン の中心) で起こる。一方、(37)式以外の逆格子ベクトルに対応するバンド交差は Brillouin ゾーン の特殊点 (special points) で起こる (Fig.7 参照)。並進対称性に関して非等価なバンド交差は、剰余群 $\Lambda_6^* / \Lambda_X^* \oplus \Lambda_Y^*$ の元に一対一に対応する。これらは、さらに点対称性に関して等価なものに分類され、その多重度は Brillouin ゾーン の特殊点の多重度と一致する。

P・D・G 曲面に対するバンド交差は Table 1 で尽くされる [15]。各曲面に対する Brillouin ゾーン の特殊点を表すシンボル( $\Gamma$ , M 等)については Fig.7 を参照して欲しい [16]。バンド構造の数値計算を行った結果を Fig.8 に示す。これらの結果から、Table 1 の特殊点におけるエネルギー固有値が完全に一致することが確かめられる。

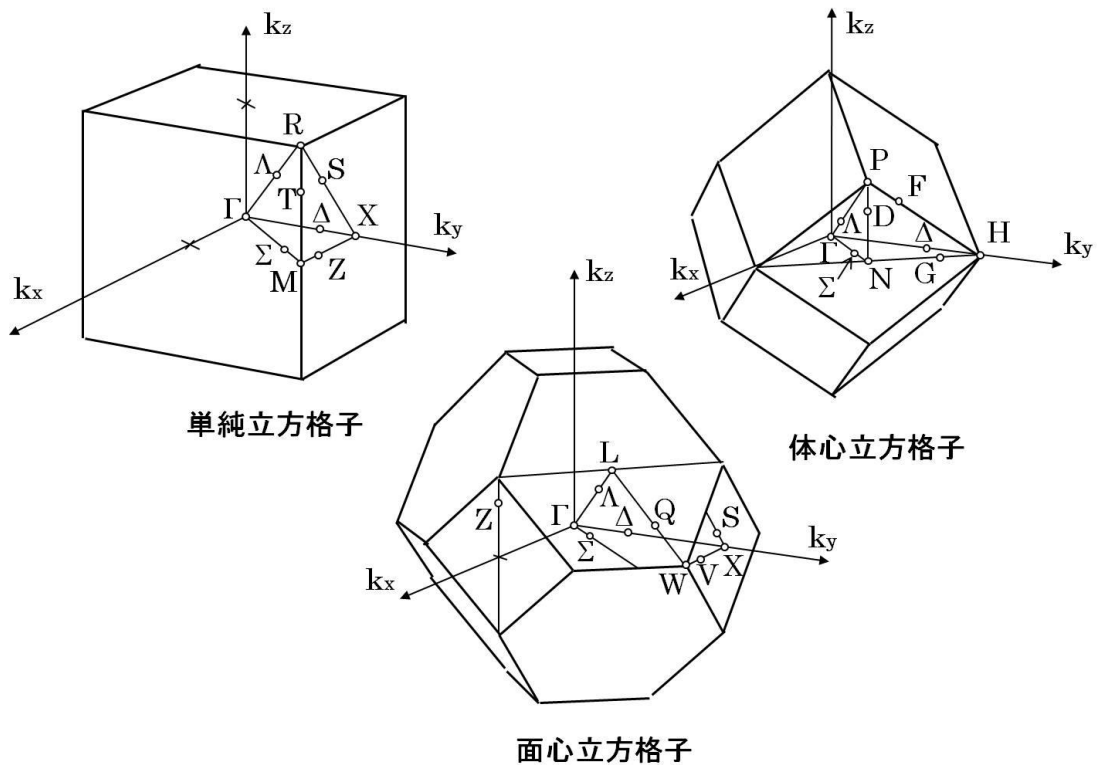


Fig. 7 : 単純立方格子 (P)、面心立方格子 (F)、及び体心立方格子 (I) に対する Brillouin ゾーンとそれに含まれる特殊点の位置 (点群に関して等価なもののみ)。

バンド交差	P 曲面 $Pm\bar{3}m$ ( $Im\bar{3}m$ )	D 曲面 $Fd\bar{3}m$ ( $Pn\bar{3}m$ )	G 曲面 $I4_132$ ( $Ia\bar{3}d$ )
I	$\Gamma^1$ ( $\Gamma^1, H^1$ )	$\Gamma^1$ ( $\Gamma^1, R^1$ )	$\Gamma^1$
II	$M^3$ ( $N^6$ )	$X^3$ ( $M^3, X^3$ )	—
III	$R^1$ ( $P^2$ )	—	$H^1$

Table 1 : P・D・G 曲面に対するバンド交差のリスト。任意の二つの曲面のペアに対して、点対称性に関して等価なバンド交差を各行に示す。但し、Brillouin ゾーンの特定点のシンボルの右肩の数字は多重度を表す。また、曲面の表裏を同一視した場合のブラヴェ格子に対応する特殊点をカッコ内に表す。

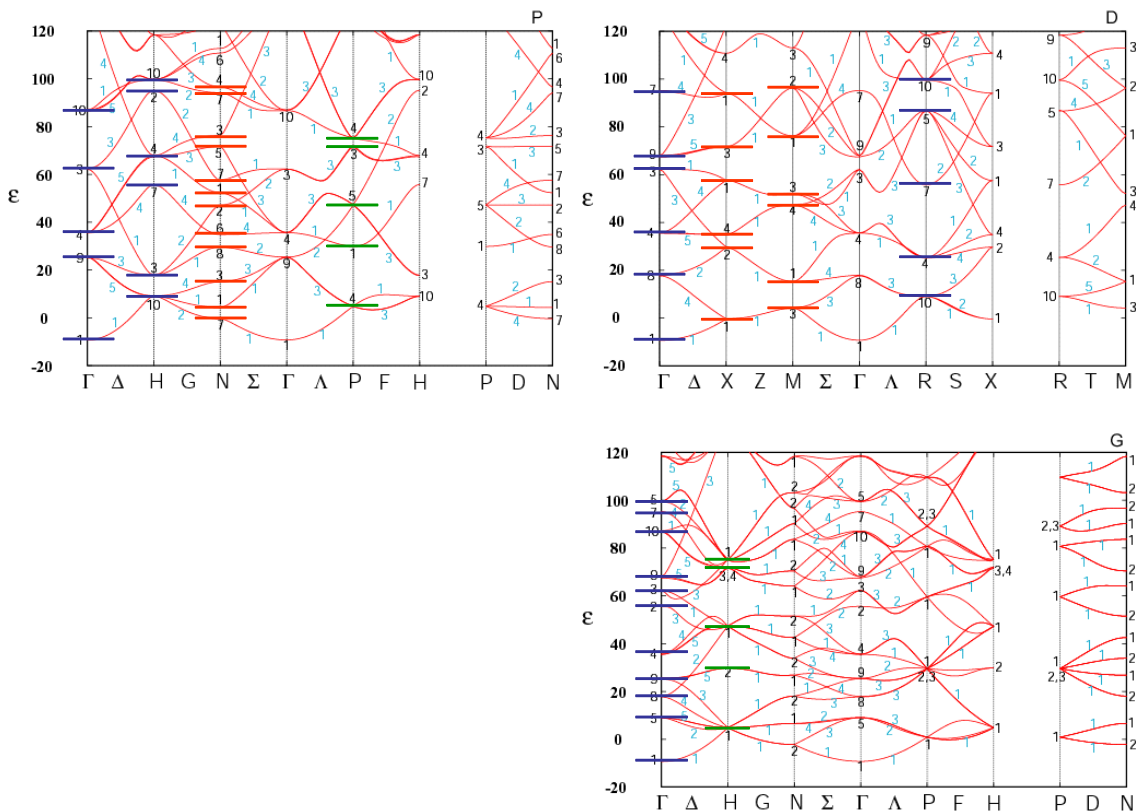


Fig. 8 (カラー) : P・D・G 曲面のバンド構造を数値的に求めた結果。シュレーディンガー方程式は曲面の表裏の区別を含まないので、空間群はそれぞれ  $Im\bar{3}m \cdot Pn\bar{3}m \cdot Ia\bar{3}d$  として表示してある。横軸はそれぞれに対応する Brillouin ゾーンの特定点及びその間をつなぐ特殊線上の波数を表し、縦軸は各波数におけるエネルギー固有値  $\varepsilon$  を表す。各バンド曲線に対応する空間群の規約表現を番号で付記した ([15]参照)。Table 1 に示したバンド交差に対応するエネルギー固有値を横線で強調した。青・赤・緑はそれぞれ、バンド交差 I・II・III に対応する。同色の固有値を比較するとそれらが一致していることが確認できる。



## 6. 最後に

本稿では、周期的極小曲面上に強く拘束されて運動する電子に対する量子力学を、Weierstrass-Enneper 表現に基づいて定式化する方法を説明した。この方法では、Bonnet 変換で結ばれる異なる曲面のトポロジの違いは、Riemann 曲面上の波動関数の位相の回転を通して取り入れられる。また、これらの曲面のバンド構造は単一の高次元のバンド構造の異なる断面として与えられ、両曲面に対して等価な位相の回転を与える逆格子空間の特殊点では二つのバンド構造が交差しエネルギー固有値が完全に一致する。バンド交差のコンセプトは、周期的極小曲面上を伝播する波動一般(例えば、音波)に対して拡張可能である。

## 引用文献

1. D. Weaire and S. Hutzler, *The Physics of Foams*, (Oxford, 2001).
2. J. A. F. Plateau, *Statistique Experimentale et Theorique des Liquides soumis aux seules Forces Moleculaires* (Gauthier-Villars, Paris, 1873).
3. H. Schwarz, *Gesammelte Mathematische Abhandlungen* (Springer, Berlin, 1890) Vol.1.
4. H. F. Scherk, *J. reine angew. Math.* 13, 185 (1834).
5. A. H. Schön, *NASA Technical Report D-5541* (1970).
6. S. Andersson *et al.*, *Chem. Rev.* (Washington, D. C.) 88, 221 (1988).
7. H. Jensen and H. Koppe, *Ann. Phys.* 63, 586 (1971).
8. R. C. T. da Costa, *Phys. Rev. A* 23, 1982 (1981).
9. R. C. T. da Costa, *Phys. Rev. A* 25, 2893 (1982).
10. M. Ikegami and Y. Nagaoka, *Prog. Theor. Phys.* 106, 235 (1991).
11. M. Ikegami *et al.*, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 88, 229 (1992).
12. H. Aoki *et al.*, *Phys. Rev. B* 65, 035102 (2001).
13. C. Oguey and J.-F. Sadoc, *J. Phys. I France* 3, 839 (1993).
14. N. W. Ashcroft and D. Mermin, *Solid State Physics* (Brooks Cole, 1976).
15. N. Fujita and O. Terasaki, *Phys. Rev. B* 72, 085459 (2005).
16. M. Lax, *Symmetry Principles in Solid State and Molecular Physics* (Wiley, New York, 1974).