

Particle-Hole Symmetry と副格子

永井佑紀

平成 21 年 5 月 29 日

ハミルトニアンが副格子構造を持っていると見なすことができ、かつ、その副格子間にしか飛び移り要素がない場合（副格子内での飛び移り要素がない場合）電子正孔対称性があることを示す。なお、電子正孔対称性のある点にちょうどフェルミエネルギーを持ってくると、そのとき系は half-filling となっており、このときの化学ポテンシャル μ は温度に依らない。 μ が温度に依らないというのは計算上とても楽になる。

最後に、Hubbard model の場合の half-filling のときの化学ポテンシャルの値について議論する。

1 電子正孔対称性のある例

一次元最近接ホッピングのみの強束縛模型のハミルトニアンは

$$H = t \sum_i c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1} \quad (1)$$

と書ける。このハミルトニアンは容易に対角化ができて

$$H = \sum_k 2t \cos(ka) c_k^\dagger c_k \quad (2)$$

である。ここで、 a はサイト間の距離である。エネルギー固有値 E は

$$E_k = 2t \cos(ka) \quad (3)$$

であるので、 $E_k = 0$ が電子正孔対称な点となっている。つまり、あるエネルギー E_0 が固有値のとき、 $-E_0$ も固有値である。このような電子正孔対称な点が存在する系を、ここでは電子正孔対称性がある系とすることにする。

二次元、三次元の場合、サイトの並び方で電子正孔対称性を持っているかどうか異なる。たとえば、グラフェンのような二次元の六角格子構造の場合、ハミルトニアンを対角化してエネルギーを計算すると、 $E = 0$ にディラックコーンが現れ、 $E = 0$ が電子正孔対称な点となっている。

2 ハミルトニアンの行列表示

時間に依存しない Schrodinger 方程式は

$$H\psi = E\psi \quad (4)$$

と書ける。ここで、 ψ をある完全規格直交基底 ϕ_α の線形結合：

$$\psi = \sum_\alpha c_\alpha \phi_\alpha \quad (5)$$

で表現しよう。もし強束縛模型であれば、 ψ_α はあるサイト α に局在した波動関数であり、 c_α はサイト α におけるその波動関数の大きさである。簡単のため、一次元の強束縛模型を考えると、

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle \quad (6)$$

一般にこのような並び替えをしたときのブロック対角行列にはオンサイトのエネルギー $E c_i^\dagger c_i$ から来る要素があるが、その全ての要素がすべて等しい場合、エネルギーを一様にシフトさせる効果しかないので、エネルギーの基準点をずらすことでブロック対角行列の要素をゼロにできる。

どんな系であれ、サイトを副格子 A,B にわけることができるとき¹、Schrodinger 方程式は

$$\begin{pmatrix} 0 & \hat{H}_{AB} \\ \hat{H}_{AB}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\psi}_A \\ \vec{\psi}_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \vec{\psi}_A \\ \vec{\psi}_B \end{pmatrix} \quad (12)$$

と書ける。

4 電子正孔対称性

式 (12) の形をした方程式の固有値が E_0 のとき、 $-E_0$ も同様に固有値であることを示す。

まず、固有値 E_0 の固有ベクトルを ψ_{0A} 、 ψ_{0B} とすると、

$$\begin{pmatrix} 0 & \hat{H}_{AB} \\ \hat{H}_{AB}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\psi}_{0A} \\ \vec{\psi}_{0B} \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} \vec{\psi}_{0A} \\ \vec{\psi}_{0B} \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_{AB} \vec{\psi}_{0B} \\ \hat{H}_{AB}^\dagger \vec{\psi}_{0A} \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} \vec{\psi}_{0A} \\ \vec{\psi}_{0B} \end{pmatrix} \quad (14)$$

が満たされている。ここで、あるベクトル $\vec{\Psi}$:

$$\vec{\Psi} = \begin{pmatrix} \vec{\psi}_{0A} \\ -\vec{\psi}_{0B} \end{pmatrix} \quad (15)$$

を考える。このベクトルを式 (12) に代入すると

$$\begin{pmatrix} 0 & \hat{H}_{AB} \\ \hat{H}_{AB}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\psi}_{0A} \\ -\vec{\psi}_{0B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\hat{H}_{AB} \vec{\psi}_{0B} \\ \hat{H}_{AB}^\dagger \vec{\psi}_{0A} \end{pmatrix} \quad (16)$$

となり、式 (14) を用いると

$$\begin{pmatrix} 0 & \hat{H}_{AB} \\ \hat{H}_{AB}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \vec{\Psi} = \begin{pmatrix} -E_0 \vec{\psi}_{0A} \\ E_0 \vec{\psi}_{0B} \end{pmatrix} = -E_0 \begin{pmatrix} \vec{\psi}_{0A} \\ -\vec{\psi}_{0B} \end{pmatrix} \quad (17)$$

となり、このベクトル $\vec{\Psi}$ は方程式の固有ベクトルであることがわかる。そして、その固有値は $-E_0$ である。

ゆえに、 $E = 0$ が電子正孔対称の点である。

5 状態密度と化学ポテンシャル

フェルミオンの場合、系の粒子数の期待値は状態密度 ρ を用いて

$$\langle n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \quad (18)$$

と書くことができる。 $\epsilon = 0$ の点が電子正孔対称な点である系の場合、状態密度も $\epsilon = 0$ の点で対称である。

¹実空間のサイトである必要もないはず。

5.1 絶対零度のとき

絶対零度のときの粒子数の期待値は

$$\langle n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \theta(-(\epsilon - \mu)) = \int_{-\infty}^{\mu} d\epsilon \rho(\epsilon) \quad (19)$$

であり、粒子は $\epsilon = \mu$ まで詰まっている。よって化学ポテンシャルはフェルミエネルギー E_F を用いて

$$\mu = E_F \quad (20)$$

である。もし、粒子数の期待値が、入りうるすべての状態数 N の半分 (half-filling) になるような μ を求めたいのであれば、状態密度が $\epsilon = 0$ で対称なのでフェルミエネルギーを $E_F = 0$ として、 $\mu = 0$ とすればよい。

5.2 有限温度のとき

一般に、粒子数の期待値をある値に固定して温度を変化させた場合、化学ポテンシャル μ は温度に依存する。しかし、電子正孔対称な点を持つ系で half-filling の場合を考えると、化学ポテンシャルは温度に依らない。

絶対零度において、電子正孔対称な点を持つ系では、half-filling が実現するのは電子正孔対称な点がフェルミエネルギーにきたときである。有限温度の場合、温度ゆらぎによって電子が $\epsilon > E_F$ の領域に励起する。もし、状態密度が $\epsilon = 0$ で対称ならば、正孔は $\epsilon < E_f$ の領域に電子と同じ数だけ励起する。正孔とは、電子の抜けた孔であるから、電子と正孔の数が同じということは、全体の粒子数は変化していないことになる。よって、絶対零度のときと同じ化学ポテンシャルであれば、温度を変化させてもつねに half-filling の状態にとどまっている。

この節の議論は、電子正孔対称性を持つ一般の場合に常に成り立つ。

6 Hubbard model の half filling

Hubbard 模型のハミルトニアンは

$$H = \sum_i t_{ij} c_j^\dagger c_i + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + h.c. \quad (21)$$

である。一番単純な Hubbard 模型として、一次元でホッピングが最近接だけの場合：

$$H = t \sum_i c_{i+1}^\dagger c_i + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + h.c. \quad (22)$$

を考える。

この模型は、 $U = 0$ とすれば、先ほどまで議論してきた一次元強束縛模型となる。したがって、ホッピング t の項は電子正孔対称性を持っている。一方、斥力ポテンシャル U の項は電子正孔対称性を持っていない。なぜなら、電子と正孔の取り扱いが異なるからである。

上のハミルトニアンには電子正孔対称性がないことを理解するために、 N 個のサイトのある Hubbard 模型を考える。あるサイトにはスピナップとダウンの二つの電子が入りうるので、状態は

$$|0\rangle \quad (23)$$

$$|\uparrow\rangle \quad (24)$$

$$|\downarrow\rangle \quad (25)$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle \quad (26)$$

の四通りである。さて、このサイトに電子が一つだけ入っているときを考えよう。もしアップスピンが入っているのならば、このときの状態は $|\uparrow\rangle$ である。このサイトにさらにダウンスピンを付け加えると、斥力ポテンシャルの効果によってエネルギーは U だけ上昇し $|\uparrow\downarrow\rangle$ となる。一方、ダウンスピンを取り除くと、 $|0\rangle$ となり、エネルギーの上昇はない。同じことをダウンスピンが入っているときにも考えると、全部で四つの場合があり、まとめると

- $|\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\downarrow\rangle : U$ だけ上昇
- $|\uparrow\rangle \rightarrow |0\rangle : \text{変化なし}$
- $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\downarrow\rangle : U$ だけ上昇
- $|\downarrow\rangle \rightarrow |0\rangle : \text{変化なし}$

である。つぎに、「電子を取り去る」を「正孔を入れる」と考えてみる。アップスピンの正孔を \uparrow_h 、ダウンスピンの正孔を \downarrow_h と考えると、あるサイトの状態は

$$|0\rangle = |\uparrow_h\downarrow_h\rangle \quad (27)$$

$$|\uparrow\rangle = |\downarrow_h\rangle \quad (28)$$

$$|\downarrow\rangle = |\uparrow_h\rangle \quad (29)$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle = |0_h\rangle \quad (30)$$

と書ける。このとき、一つの正孔を入れたり取り去ったりするプロセスのエネルギーの変化

- $|\uparrow_h\rangle = |\downarrow\rangle \rightarrow |0_h\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle : U$ だけ上昇
- $|\downarrow_h\rangle = |\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow_h\downarrow_h\rangle = |0\rangle : \text{変化なし}$
- $|\downarrow_h\rangle = |\uparrow\rangle \rightarrow |0_h\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle : U$ だけ上昇
- $|\uparrow_h\rangle = |\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow_h\downarrow_h\rangle = |0\rangle : \text{変化なし}$

と書き直すことができる。これらは、正孔を付け加えてもエネルギーが変化しないことを意味している。つまり、電子と正孔の取り扱いが異なり、電子正孔対称ではない。

では、どのようにすれば電子正孔対称性があるハミルトニアンになるのだろうか。まず、式 (22) に化学ポテンシャル μ を導入する：

$$H = t \sum_i c_{i+1}^\dagger c_i + \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + h.c. \quad (31)$$

この μ を調整することで、粒子数の期待値を操作することができる。もし電子正孔対称性があれば、その電子正孔対称性のある点にフェルミエネルギーを設定すれば half filling になる。先ほどの議論と同じように、あるサイトに電子が一つだけ入っている場合を考えよう。このとき、エネルギーの変化は

- $|\uparrow_h\rangle = |\downarrow\rangle \rightarrow |0_h\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle : U + \mu$ 変化
- $|\downarrow_h\rangle = |\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow_h\downarrow_h\rangle = |0\rangle : -\mu$ 変化
- $|\downarrow_h\rangle = |\uparrow\rangle \rightarrow |0_h\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle : U + \mu$ 変化
- $|\uparrow_h\rangle = |\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow_h\downarrow_h\rangle = |0\rangle : -\mu$ 変化

となる。もし、 $\mu = U/2$ とすると、

- $|\uparrow_h\rangle = |\downarrow\rangle \rightarrow |0_h\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle : U/2$ 変化
- $|\downarrow_h\rangle = |\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow_h\downarrow_h\rangle = |0\rangle : -U/2$ 変化
- $|\downarrow_h\rangle = |\uparrow\rangle \rightarrow |0_h\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle : U/2$ 変化
- $|\uparrow_h\rangle = |\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow_h\downarrow_h\rangle = |0\rangle : -U/2$ 変化

となる。このとき、電子を入れる操作と正孔を入れる操作が等しくなっている²。つまり、電子正孔対称となっている。 $\mu = U/2$ としたとき、ホッピングの項も斥力相互作用の項も電子正孔対称なので、 $\mu = U/2$ がこのモデルでの half filling である。

²バンド理論を考えれば、正孔の励起はエネルギーの軸を上下ひっくり返して考えればよいことがわかる。