

# パイエルズ位相について

永井佑紀

平成 23 年 7 月 11 日

tight-binding 模型で磁場を取り扱う際に出てくる Peierls 位相についてまとめた。ただし、この理解が正しいかどうかはわからないので注意すること。

## 1 強束縛模型

tight-binding 模型とは、第一原理計算などで得られる現実の物質の性質（バンド等）を再現するように作られた模型である。あるハミルトニアン  $\hat{H}$  はある基底  $|\mathbf{R}\rangle$  を用いて

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} |\mathbf{R}'\rangle \langle \mathbf{R}' | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle \langle \mathbf{R} | \quad (1)$$

と書ける。このとき、固有状態  $|\psi\rangle$  は

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{R}} C_{\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle \quad (2)$$

と書くことができる。ここで  $\mathbf{R}$  は状態を特徴づけるラベルである。

次に、基底として空間的に局在した関数を用いることにする。つまり、基底  $|\mathbf{R}\rangle$  はサイト  $i$  に局在した状態であると、固有状態を

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |\mathbf{R}_i\rangle \quad (3)$$

と書く。このとき、ハミルトニアン  $\hat{H}$  は

$$\hat{H} = \sum_{ij} |\mathbf{R}_i\rangle \langle \mathbf{R}_i | \hat{H} | \mathbf{R}_j \rangle \langle \mathbf{R}_j | \quad (4)$$

である。さらに、 $t_{ij} \equiv \langle \mathbf{R}_i | \hat{H} | \mathbf{R}_j \rangle$  と置き、 $\langle \mathbf{R}_i |$  を消滅演算子  $c_i$  で置き換えれば、

$$\hat{H} = \sum_{ij} c_j^\dagger t_{ij} c_i \quad (5)$$

となる。ここで、 $\langle \mathbf{R}_i | \hat{H} | \mathbf{R}_j \rangle$  は  $i$  と  $j$  が近い場合のみ値を持つと近似できれば、扱いやすい強束縛模型ができあがる。

なお、局在した関数を  $w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r})$  とおくと、

$$\langle \mathbf{R}_i | \hat{H} | \mathbf{R}_j \rangle = \int d\mathbf{r} w^*(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \hat{H} w(\mathbf{R}_j, \mathbf{r}) \quad (6)$$

である。

## 2 ベクトルポテンシャル

ベクトルポテンシャルを強束縛模型で取り扱うには、演算子  $\hat{H}$  にどのようにベクトルポテンシャルが考慮されていたかを考えればよい。ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  を取り扱う場合、運動量演算子  $\hat{P}$  を  $\hat{P} + e\mathbf{A}/c$  と置きかればよい。置き換え前の無磁場のハミルトニアンを  $\hat{H}_0$ 、置き換え後の磁場中のハミルトニアンを  $\hat{H}$  とする。この置き換えがどのような影響を及ぼすかを追いかけることで強束縛模型にベクトルポテンシャルをどのように入れればよいか分かる。

### 2.1 具体例

ベクトルポテンシャルを  $\mathbf{A} = (0, x, 0)B$  と置く。運動量演算子は  $-i\hbar\nabla$  であるので、置き換えは

$$-i\hbar\nabla \rightarrow -i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A} \quad (7)$$

と書ける。

基底として空間的に局在した状態  $|\mathbf{R}\rangle$  を考える。このとき、 $\mathbf{r}$  表示した固有状態はこの基底を用いて

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \quad (8)$$

$$= \sum_i C_i \langle \mathbf{r} | \mathbf{R}_i \rangle \quad (9)$$

$$= \sum_i C_i w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \quad (10)$$

と書ける。さて、ここで、新しい基底  $|\mathbf{R}'\rangle$  を考えることにしよう。この基底は

$$w'(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \equiv e^{-ieyBR_x/\hbar c} w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \quad (11)$$

と定義されているとする。ここで  $R_x$  は  $\mathbf{R}_i$  の  $x$  成分である。このとき、固有状態  $\psi(\mathbf{r})$  は

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i C'_i e^{-ieyBR_x/\hbar c} w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \quad (12)$$

となる。

この基底に運動量演算子を作用させると

$$-i\hbar\nabla w'(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) = -i\hbar\nabla \left( e^{-ieyBR_x/\hbar c} w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \right) \quad (13)$$

$$= (0, -eBR_x e^{-ieyBR_x/\hbar c}/c, 0) w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) + e^{-ieyBR_x/\hbar c} (-i\hbar\nabla w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r})) \quad (14)$$

となるので、 $-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}$  を作用させると

$$\left( -i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) w'(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) = (0, -eB(R_x - r_x) e^{-ieyBR_x/\hbar c}/c, 0) w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) + e^{-ieyBR_x/\hbar c} (-i\hbar\nabla w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r})) \quad (15)$$

となる。ベクトルポテンシャルが  $\mathbf{R}_i$  の近傍でほとんど変化しない仮定とすると、 $\mathbf{r}$  が  $\mathbf{R}_i$  に近いときには

$$\left( -i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) w'(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) = e^{-ieyBR_x/\hbar c} (-i\hbar\nabla w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r})) \quad (16)$$

と近似でき、さらに、原子スケールでベクトルポテンシャルが滑らかであると仮定すれば運動量演算子とベクトルポテンシャルが可換であると近似できる。このとき、

$$\hat{H} w'(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) = e^{-ieyBR_x/\hbar c} \left( \hat{H}_0 w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \right) \quad (17)$$

である。 $w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r})$  は  $\mathbf{R}_i$  まわりに局在しているので

$$\hat{H} w'(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) = e^{-ieR_y BR_x/\hbar c} \left( \hat{H}_0 w(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \right) \quad (18)$$

となる。

この基底でハミルトニアン  $H$  を表すと、

$$\langle \mathbf{R}_i | \hat{H} | \mathbf{R}_j \rangle' = \int d\mathbf{r} w'^*(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \hat{H} w'(\mathbf{R}_j, \mathbf{r}) \quad (19)$$

$$= \int d\mathbf{r} e^{ieR_y^i B R_x^i / \hbar c} w'^*(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) e^{-ieR_y^j B R_x^j / \hbar c} (\hat{H}_0 w(\mathbf{R}_j, \mathbf{r})) \quad (20)$$

$$= e^{ieR_y^i B R_x^i / \hbar c} e^{-ieR_y^j B R_x^j / \hbar c} \int d\mathbf{r} w^*(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \hat{H}_0 w(\mathbf{R}_j, \mathbf{r}) \quad (21)$$

$$= e^{ie(R_y^i R_x^i - R_y^j R_x^j) B / \hbar c} \langle \mathbf{R}_i | \hat{H}_0 | \mathbf{R}_j \rangle \quad (22)$$

となる。つまり、強束縛模型では

$$\hat{H} = \sum_{ij} |\mathbf{R}_i\rangle' \tilde{t}_{ij} \langle \mathbf{R}_j|' \quad (23)$$

となり、状態  $|\mathbf{R}_i\rangle'$  を消滅させる演算子を  $c_i'$  と定義すれば、

$$\hat{H} = \sum_{ij} \tilde{t}_{ij} c_i'^{\dagger} c_j' \quad (24)$$

と書ける。ここで、行列要素は

$$\tilde{t}_{ij} \equiv e^{ie(R_y^i R_x^i - R_y^j R_x^j) B / \hbar c} t_{ij} \quad (25)$$

である。

これでベクトルポテンシャルの情報を強束縛模型に取り入れることができた。注意すべきことは、磁場下で用いている基底は、無磁場の基底に局所的に異なる位相を加えたものである、ということである。そして、この表式は原子スケールでベクトルポテンシャルが滑らかであるという仮定を使うことで導出されている。

## 2.2 一般化

より一般的には、運動量演算子  $\hat{P}$  を  $\hat{P} + e\mathbf{A}/c$  と置きかえたときに、

$$-i\hbar\nabla e^{F(\mathbf{r})} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})e^{F(\mathbf{r})} = 0 \quad (26)$$

となるような  $F(\mathbf{r})$  を見つければよい。よって、

$$-i\hbar\nabla F(\mathbf{r}) + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 \quad (27)$$

を解くと、

$$F(\mathbf{r}) = -i\frac{e}{\hbar c} \int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (28)$$

となる。このとき、強束縛模型での行列要素  $\tilde{t}_{ij}$  は

$$\tilde{t}_{ij} = \exp[-F(\mathbf{R}_i) + F(\mathbf{R}_j)] t_{ij} \quad (29)$$

$$= \exp\left[-i\frac{e}{\hbar c} \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_j} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}\right] t_{ij} \quad (30)$$

となる。これがパイエルズ位相である。

## 参考文献

Michael P. Marder *Condensed Matter Physics*, Wiley-Interscience