

3次元ディラック型ハミルトニアンの表面束縛状態

永井佑紀

平成 25 年 8 月 2 日

3次元ディラック型方程式はトポロジカル絶縁体の有効モデルとして使われる。トポロジーの議論を全く使わずに、この方程式の表面束縛状態の解を求めてみた。

1 ディラック型ハミルトニアン

ディラック型ハミルトニアンを

$$H(-i\nabla) = \gamma^0 (M(-i\nabla) - i\partial_x\gamma^1 - i\partial_y\gamma^2 - i\partial_z\gamma^3) \quad (1)$$

と定義する。異方性等は適当な規格化で消去されているものとする。ここで、ディラック方程式でおなじみのガンマ行列を導入している。このガンマ行列は反交換関係：

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu} \quad (2)$$

を満たしている。ここで、 $\eta^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ である。そして、このガンマ行列のディラック表示と呼ばれるものは、

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

となっている。具体的には、

$$\gamma^{0,5}\gamma^{0,5} = 1 \quad (8)$$

$$\gamma^{1,2,3}\gamma^{1,2,3} = -1 \quad (9)$$

等の関係を満たしている。

このディラック表示でディラック型ハミルトニアンを書くと、

$$H(-i\nabla) = \begin{pmatrix} M(-i\nabla)\hat{1} & -i\nabla \cdot \hat{\sigma} \\ -i\nabla \cdot \hat{\sigma} & -M(-i\nabla)\hat{1} \end{pmatrix} \quad (10)$$

となる。ここで、 $\hat{\sigma}^T = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ であり、 $\hat{\sigma}_i$ はパウリ行列である。

2 一様系の解

一様系の場合のディラック方程式は

$$H(\mathbf{k})\psi = E\psi \quad (11)$$

となる。この方程式に左から $H(\mathbf{k})$ をもう一つかけてみると、

$$H^2(\mathbf{k})\psi = E^2\psi \quad (12)$$

となる。ここで、

$$(\mathbf{k} \cdot \hat{\sigma})(\mathbf{k} \cdot \hat{\sigma}) = \mathbf{k}^2 \hat{1} \quad (13)$$

となることを使うと、

$$\begin{pmatrix} (M(\mathbf{k})^2 + \mathbf{k}^2)\hat{1} & 0 \\ 0 & (M(\mathbf{k})^2 + \mathbf{k}^2)\hat{1} \end{pmatrix} \psi = E^2\psi \quad (14)$$

という対角表示になる。これから、エネルギーは

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{M(\mathbf{k})^2 + \mathbf{k}^2} \quad (15)$$

と求まる。これは、 $M = 0$ がゼロならばエネルギーが線形分散を持つ事を意味しており、まさに質量ゼロのディラック方程式が線形分散を持つことを意味している。

次に、固有ベクトルを求める。固有ベクトルを求めるためには、 $\psi^T = (\psi_e^T, \psi_h^T)$ とすれば、

$$M(\mathbf{k})\psi_e + \mathbf{k} \cdot \hat{\sigma}\psi_h = E(\mathbf{k})\psi_e \quad (16)$$

を満たすベクトル ψ_e を探せば良いことになる。ここで、式 (13) を使う事を念頭において

$$\psi_h = \alpha \mathbf{k} \cdot \hat{\sigma}\psi_e \quad (17)$$

と仮定して α が上式を満たすかを調べてみる。代入すると、

$$M(\mathbf{k})\psi_e + \alpha \mathbf{k}^2 \psi_e = E(\mathbf{k})\psi_e \quad (18)$$

となるので、

$$\alpha = \frac{E(\mathbf{k}) - M(\mathbf{k})}{\mathbf{k}^2} \quad (19)$$

$$= \frac{E(\mathbf{k}) - M(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})^2 - M(\mathbf{k})^2} \quad (20)$$

$$= \frac{1}{E(\mathbf{k}) + M(\mathbf{k})} \quad (21)$$

が得られる。この α は分母が発散しない限り問題がない。分母が発散するのは、 $k = 0$ のときで、このとき、エネルギーは

$$E(\mathbf{k} = 0) = \pm |M(\mathbf{k} = 0)| \quad (22)$$

となる。 $M(\mathbf{k} = 0) > 0$ であれば、負のエネルギーで発散する。よって、 $M(\mathbf{k} = 0) > 0$ のとき、正のエネルギーの解は

$$\psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \psi_e \\ \frac{\mathbf{k} \cdot \hat{\sigma}}{E(\mathbf{k}) + M(\mathbf{k})} \psi_e \end{pmatrix} \quad (23)$$

と書ける。 ψ_e は任意のベクトルで良い。 ψ_e は二成分のベクトルなので、お互いに直交する二つの解を作ることができて、

$$\psi_i^+(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \chi_i \\ \frac{\mathbf{k} \cdot \hat{\sigma}}{E(\mathbf{k}) + M(\mathbf{k})} \chi_i \end{pmatrix} \quad (24)$$

となる。ここで、 $\chi_1^T = (1, 0)$, $\chi_2^T = (0, 1)$ である。

負のエネルギー解は、

$$\mathbf{k} \cdot \hat{\sigma} \psi_e - M(\mathbf{k}) \psi_h = E(\mathbf{k}) \psi_h \quad (25)$$

を満たす解を

$$\psi_e = \alpha' \mathbf{k} \cdot \hat{\sigma} \psi_h \quad (26)$$

を仮定して探せばよくて、その結果、

$$\psi_i^-(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{k} \cdot \hat{\sigma}}{E(\mathbf{k}) - M(\mathbf{k})} \chi_i \\ \chi_i \end{pmatrix} \quad (27)$$

が得られる。

3 表面束縛状態の解

3.1 表面束縛状態の解の形

$z = 0$ を表面として、 $z > 0$ に物質が詰まっており、 $z < 0$ は真空だとする。一番単純な境界条件は、 $z = 0$ において波動関数がゼロ：

$$\psi(z = 0) = 0 \quad (28)$$

である。表面束縛状態とは、「表面に束縛状態がある」ということを意味しているので、「表面から十分に離れるとゼロ」となる状態でなければならない。これは、単純に考えると、

$$\psi(z) \propto e^{-\lambda z} \quad (29)$$

という波動関数を仮定すればいいように思える。しかし、この式と式 (28) は明らかに同時に成り立たない。ということは、波動関数は

$$\psi(z) = \sum_i c_i e^{-\lambda_i z} \phi_i(z) \quad (30)$$

という二つ以上の減衰因子 λ_i があればいいだろうか。これを式 (28) に代入すると、

$$\sum_i c_i \phi_i(z=0) = 0 \quad (31)$$

となる。 ϕ_i はベクトルなので、この条件式を満たす為には、 $z=0$ でベクトルが同じ：

$$\phi_i(z=0) = \phi \quad (32)$$

という条件が課される。

さて、ここで簡単のため、波動関数が

$$\psi(z) = (c_1 e^{-\lambda_1 z} + c_2 e^{-\lambda_2 z}) \phi \quad (33)$$

と書かれると仮定しよう。式 (28) を満たす為には、 $c_1 = -c_2$ でなければならない。また、 $\text{Re } \lambda_i > 0$ である。ここで、

$$\lambda_1 = \lambda + \frac{\delta\lambda}{2} \quad (34)$$

$$\lambda_2 = \lambda - \frac{\delta\lambda}{2} \quad (35)$$

と $\lambda = (\lambda_1 + \lambda_2)/2$ と $\delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_2$ を定義すると、波動関数は

$$\psi(z) = c_1 (e^{-\lambda z} e^{-\frac{\delta\lambda}{2} z} - e^{-\lambda z} e^{\frac{\delta\lambda}{2} z}) \phi \quad (36)$$

$$= -2c_1 e^{-\lambda z} \sinh\left(\frac{\delta\lambda}{2} z\right) \phi \quad (37)$$

となる。ここで出てくる \sinh 関数の発散しない条件は

$$\text{Re } \lambda > \frac{\text{Re } \delta\lambda}{2} \quad (38)$$

$$\text{Re}(\lambda_1 + \lambda_2) > \text{Re}(\lambda_1 - \lambda_2) \quad (39)$$

$$\text{Re } \lambda_2 > 0 \quad (40)$$

となるので、発散しない。

3.2 束縛状態の解が満たす方程式

上記のような波動関数に対するハミルトニアンが満たす方程式を考える。 $z=0$ の界面を考えているので、それ以外の次元についてはここではあらわに書かないこととする。また、 $z=0$ にデルタ関数型無限大ポテンシャルが入っているとす。このとき、 $z=0$ 以外の場所においてハミルトニアンは一様系のものと同じで、方程式は

$$H(-i\partial_z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (41)$$

となる。ここで、束縛状態の波動関数は式 (33) で表されており、これは、特殊解 $e^{-\lambda_i z} \phi$ の線形結合であるから、

$$H(-i\partial_z)e^{-\lambda_i z} \phi = Ee^{-\lambda_i z} \phi \quad (42)$$

$$H(i\lambda_i)e^{-\lambda_i z} \phi = Ee^{-\lambda_i z} \phi \quad (43)$$

$$H(i\lambda_i)\phi = E\phi \quad (44)$$

が満たされており、その結果、

$$H(i\lambda_1)\psi(z) = E\psi(z) \quad (45)$$

$$H(i\lambda_2)\psi(z) = E\psi(z) \quad (46)$$

が得られる。よって、

$$(H(i\lambda_1) - H(i\lambda_2))\psi(z) = 0 \quad (47)$$

という方程式が得られる。

3.3 ディラック型ハミルトニアンの場合

式 (47) にディラック型ハミルトニアンを代入してみる。このとき、 x, y に関しては一様であるとする、

$$(M(k_x, k_y, i\lambda_1) - M(k_x, k_y, i\lambda_2)\gamma^0 + i(\lambda_1 - \lambda_2)\gamma^0\gamma^3) \psi(z) = 0 \quad (48)$$

となるが、ここで左辺と同じものをもう一度かけると、

$$(M(k_x, k_y, i\lambda_1) - M(k_x, k_y, i\lambda_2)\gamma^0 + i(\lambda_1 - \lambda_2)\gamma^0\gamma^3)^2 \psi(z) = 0 \quad (49)$$

$$((M(k_x, k_y, i\lambda_1) - M(k_x, k_y, i\lambda_2))^2 - (\lambda_1 - \lambda_2)^2) \psi(z) = 0 \quad (50)$$

という対角行列になって、条件式は

$$(M(k_x, k_y, i\lambda_1) - M(k_x, k_y, i\lambda_2))^2 = (\lambda_1 - \lambda_2)^2 \quad (51)$$

となる。これは

$$[M(k_x, k_y, i\lambda_1) - M(k_x, k_y, i\lambda_2) - (\lambda_1 - \lambda_2)][M(k_x, k_y, i\lambda_1) - M(k_x, k_y, i\lambda_2) + (\lambda_1 - \lambda_2)] = 0 \quad (52)$$

と書き換える事ができる。よって、 $M(k_x, k_y, i\lambda_1) - M(k_x, k_y, i\lambda_2) - (\lambda_1 - \lambda_2) = 0$ あるいは $M(k_x, k_y, i\lambda_1) - M(k_x, k_y, i\lambda_2) + (\lambda_1 - \lambda_2) = 0$ が条件となる。

まず、前者の場合を考える。このとき、

$$M(k_x, k_y, i\lambda_1) - \lambda_1 = M(k_x, k_y, i\lambda_2) - \lambda_2 \quad (53)$$

となる。このままだと条件式の数足りない。ここで、エネルギーは

$$E^2 = k_x^2 + k_y^2 + M(k_x, k_y, i\lambda_1)^2 - \lambda_1^2 \quad (54)$$

$$E^2 = k_x^2 + k_y^2 + M(k_x, k_y, i\lambda_2)^2 - \lambda_2^2 \quad (55)$$

となるので、

$$M(k_x, k_y, i\lambda_1)^2 - \lambda_1^2 = M(k_x, k_y, i\lambda_2)^2 - \lambda_2^2 \quad (56)$$

$$(M(k_x, k_y, i\lambda_1) - \lambda_1)(M(k_x, k_y, i\lambda_1) + \lambda_1) = (M(k_x, k_y, i\lambda_2) - \lambda_2)(M(k_x, k_y, i\lambda_2) + \lambda_2) \quad (57)$$

という条件式が得られる。 $M(k_x, k_y, i\lambda_1) - \lambda_1 = A$ とおくと、上式は

$$A(A + 2\lambda_1) = A(A + 2\lambda_2) \quad (58)$$

となる。 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ の条件が満たされなければ束縛状態の解にならないので、 $A = 0$ が条件式である。ゆえに、

$$M(k_x, k_y, i\lambda_1) = \lambda_1 \quad (59)$$

$$M(k_x, k_y, i\lambda_2) = \lambda_2 \quad (60)$$

が λ_1 と λ_2 を決める方程式となる。

次に、後者の場合である。このときは、

$$M(k_x, k_y, i\lambda_1) + \lambda_1 = M(k_x, k_y, i\lambda_2) + \lambda_2 \quad (61)$$

であるので、 $M(k_x, k_y, i\lambda_1) + \lambda_1 = B$ とおくと、

$$(B - 2\lambda_1)B = (B - 2\lambda_2)B \quad (62)$$

が得られ、 $B = 0$ が条件式となる。

以上から、

$$M(k_x, k_y, i\lambda_1) = \pm\lambda_1 \quad (63)$$

$$M(k_x, k_y, i\lambda_2) = \pm\lambda_2 \quad (64)$$

が λ_1 と λ_2 を決める方程式となる。ただし、束縛解を作る条件として $\text{Re } \lambda_i > 0$ である必要があるので、 M の符号に応じて右辺の符号を選択することになる。 $\text{Re } M > 0$ のとき、上の符号を取る。このとき、エネルギーは式 (54) より、

$$E = \pm|\mathbf{k}_\perp| \quad (65)$$

となる。ここで、 $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y, 0)$ である。

3.4 ベクトルが満たす条件

式 (48) に得られた条件式を代入すると、

$$\pm((\lambda_1 - \lambda_2)\gamma^0 + i(\lambda_1 - \lambda_2)\gamma^0\gamma^3) \psi(z) = 0 \quad (66)$$

$$(\lambda_1 - \lambda_2) (\pm\gamma^0 + i\gamma^0\gamma^3) \psi(z) = 0 \quad (67)$$

となるが、 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ から、

$$(\pm\gamma^0 + i\gamma^0\gamma^3) \psi(z) = 0 \quad (68)$$

という $\psi(z)$ に関する条件式が得られる。この条件式により、式 (45) は

$$(\pm\lambda_1\gamma^0 + k_x\gamma^0\gamma^1 + k_y\gamma^0\gamma^2 + i\lambda_1\gamma^0\gamma^3) \psi(z) = E\psi(z) \quad (69)$$

$$(k_x\gamma^0\gamma^1 + k_y\gamma^0\gamma^2) = E\psi(z) \quad (70)$$

となる。条件式 (68) より、 $\psi(z)$ は γ^3 の固有状態に比例しなければならない。 γ^3 の固有状態は、固有値を ϵ_i とすると

$$\epsilon_1 = i, \psi_1^T = (1/\sqrt{2}) \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (71)$$

$$\epsilon_2 = i, \psi_2^T = (1/\sqrt{2}) \begin{pmatrix} -i & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (72)$$

$$\epsilon_3 = -i, \psi_3^T = (1/\sqrt{2}) \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (73)$$

$$\epsilon_4 = -i, \psi_4^T = (1/\sqrt{2}) \begin{pmatrix} i & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (74)$$

である。よって、 γ^3 の固有値を $i\sigma$ とおくと、条件式 (68) は

$$(\pm 1 - \sigma) \psi(z) = 0 \quad (75)$$

$$\sigma = \pm 1 \quad (76)$$

となる。この \pm はもともと M の符号由来だったので、 $\text{Re } M > 0$ のときは $\sigma = 1$ の固有値が選ばれることになる。

以上から、 $\text{Re } M > 0$ のとき、波動関数は

$$\psi(z) = (e^{-\lambda_1 z} - e^{-\lambda_2 z}) (D_1 \psi_1 + D_2 \psi_2) \quad (77)$$

となる。ここで、 λ_i は式 (63) より、

$$M(k_x, k_y, i\lambda) = \lambda \quad (78)$$

という方程式の二つの解であり、 $\text{Re } \lambda_i > 0$ でなければならない。解が二つであると仮定しているので、上式が二次方程式であるという仮定を行っている。波動関数に出てきた D_1 と D_2 は、まだ使っていない条件式 (70) から求まる。ここで、

$$\gamma^0 \gamma^1 \psi_1 = i\psi_2 \quad (79)$$

$$\gamma^0 \gamma^1 \psi_2 = -i\psi_1 \quad (80)$$

$$\gamma^0 \gamma^2 \psi_1 = \psi_2 \quad (81)$$

$$\gamma^0 \gamma^2 \psi_2 = \psi_1 \quad (82)$$

という関係式を用いれば、式 (70) は

$$(k_x(iD_1\psi_2 - iD_2\psi_1) + k_y(D_1\psi_2 + D_2\psi_1)) = E(D_1\psi_1 + D_2\psi_2) \quad (83)$$

となる。固有ベクトル同士は直交しているのので、左から ψ_i^\dagger をかけると D_1 と D_2 に関する方程式：

$$\begin{pmatrix} 0 & -ik_+ \\ ik_- & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \end{pmatrix} \quad (84)$$

が得られる。ここで、 $k_\pm \equiv k_x \pm ik_y$ とした。よって、

$$D_2 = i \frac{k_-}{E} D_1 \quad (85)$$

なので、波動関数は

$$\psi(z) = D_1 (e^{-\lambda_1 z} - e^{-\lambda_2 z}) (\psi_1 + ie^{-i\phi} \psi_2) \quad (86)$$

となる。ここで、 $k_\perp = (|k_\perp| \cos \phi, |k_\perp| \sin \phi, 0)$ および $E = |k_\perp|$ を用いた。 D_1 は適当な規格化条件によって決定される。

3.5 M の関数形について

もし、 M が k_z に依らない場合、 $i\lambda_i$ にも依らないことになるので、式 (51) の左辺はゼロである。このとき、右辺もゼロにならなければ条件式を満たさないが、 $\lambda_1 = \lambda_2$ となってしまう、これは減衰因子が一つしかないことを意味しており、束縛状態の解を作る事ができない。そして、式 (10) のハミルトニアンがエルミートでなければならない条件から、 M は実数である必要があり、そのためには M には k_z の奇数次が含まれてはならない。以上より、束縛状態を作りうる M の最低次数は 2 次であり、

$$M(k_x, k_y, k_z) = M_0(k_x, k_y) + M_1 k_z^2 \quad (87)$$

が最も単純な形である。

この M を用いると、 λ に関する方程式 (78) は

$$-M_1 \lambda^2 - \lambda + M_0 = 0 \quad (88)$$

となり、解は

$$\lambda = \frac{1}{-2M_1} \left(1 \pm \sqrt{1 + 4M_0 M_1} \right) \quad (89)$$

となる。 $\text{Re } \lambda > 0$ となるためには、

$$M_1 < 0 \quad (90)$$

$$1 + 4M_1 M_0 < 1 \quad (91)$$

である。よって、

$$M_1 M_0 < 0 \quad (92)$$

が条件となる。

参考文献

- [1] Y. Nagai, H. Nakamura, M. Machida, Phys. Rev. B **86**, 094507 (2012)
- [2] Y. Nagai, H. Nakamura, M. Machida, Physica C in press