連続模型におけるパイエルス位相について

永井佑紀

平成 30 年 10 月 23 日

以前、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。今回は、自由電子模型などの連続模型を解く際に微分を差分に置き換えた時の 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 磁場中のハミルトニアン

磁場中の一電子のハミルトニアンを

$$H = \frac{1}{2m}(-i\boldsymbol{\nabla} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2 + V(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

として、その固有値問題：

$$H\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{2}$$

シュレーディンガー方程式である。この方程式を数値的に解くことを考える。

1.1 磁場がない時の差分近似

数値的に解く場合には連続空間を取り扱えないので何らかの近似をすることになる。一番素朴なやり方としては、微分を差分に置き換える近似：

$$\left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=x_0} \sim \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x} \tag{3}$$

$$\left.\frac{d^2f(x)}{dx^2}\right|_{x=x_0} \sim \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} \tag{4}$$

を行う方法がある。ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ がない場合にはこの方法は非常によく行われていて、ハミルトニアンの二階微分を差分化すれば

$$(-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r}))\psi(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

$$= -\frac{1}{2m}\frac{1}{h^2}\sum_{i=1}^{3}(\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i) - 2\psi(\boldsymbol{r}) + \psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{e}_i)) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{6}$$

となる。ここで、ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ は $i = x, y, z$ 方向を向いた長さ h のベクトルで、差分化のため導入した。これにより、シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{1}{2m}\sum_j T_{ij}\psi(\boldsymbol{r}_j) + V(\boldsymbol{r}_i)\psi(\boldsymbol{r}_i) = E\psi(\boldsymbol{r}_i) \tag{7}$$

$$\left(-\frac{1}{2m}\hat{T} + \hat{V}\right)\boldsymbol{\psi} = E\boldsymbol{\psi} \tag{8}$$

という行列の固有値問題になった。

1.2 フーリエ変換

$V(\boldsymbol{r})=0$ の時に差分化された方程式をフーリエ変換してみよう。
波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ のフーリエ変換：

$$\psi(\boldsymbol{r})=\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{k}) \tag{9}$$

を導入すると、差分化されたシュレーディンガ方程式は

$$-\frac{1}{2m}\frac{1}{h^2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\left(e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_i}+e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_i}-2\right)\psi(\boldsymbol{k})=E\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{k}) \tag{10}$$

より、

$$-\frac{1}{2m}\frac{1}{h^2}\sum_{i=1}^{3}\left(e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_i}+e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_i}-2\right)\psi(\boldsymbol{k})=E\psi(\boldsymbol{k}) \tag{11}$$

$$-\frac{1}{2m}\frac{1}{h^2}\sum_{i=1}^{3}\left(2\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_i)-2\right)\psi(\boldsymbol{k})=E\psi(\boldsymbol{k}) \tag{12}$$

となるので、固有値は

$$E=-\frac{2}{2m}\frac{1}{h^2}\left(\cos(k_x h)+\cos(k_z h)+\cos(k_y h)\right)+\frac{6}{2m}\frac{1}{h^2} \tag{13}$$

となる。つまり、バンド理論における強束縛模型と同じ形をしている。強束縛模型においてベクトルポテンシャルを入れるとパイエルス位相が出てくることから、連続模型においても差分化すればパイエルス位相が出てくると期待される。

2 磁場がある時の差分近似

ベクトルポテンシャルがある時にも同様な差分近似をすることは可能であるが、一階微分の項が出てきてしまって、ベクトルポテンシャルがない時の固有値問題とは大きく変化してしまう。特に、ベクトルポテンシャルのゲージの選び方によって固有値問題が大きく変わってしまう（差分化によってゲージ不変性が破られている）のは大きな問題である。そこで、微分を少し変形してみよう。

2.1 パイエルス位相の導入

ベクトルポテンシャルがない時の固有値問題と似た形にするため、

$$\psi'(\boldsymbol{r})\equiv u(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{14}$$

という関数を導入してみる。この関数を微分すると、

$$-i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\left(u(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\right)=-i\frac{\partial u(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r})-iu(\boldsymbol{r})\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r}) \tag{15}$$

となるので、

$$-iu(\boldsymbol{r})^*\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\left(u(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\right)=-iu(\boldsymbol{r})^*\frac{\partial u(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r})-iu(\boldsymbol{r})^*u(\boldsymbol{r})\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r}) \tag{16}$$

とする。これがもとの演算子に等しいという条件：

$$-iu(\boldsymbol{r})^*\frac{\partial u(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r})-iu(\boldsymbol{r})^*u(\boldsymbol{r})\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r})=(-i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}+e\boldsymbol{A})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{17}$$

を課すと、

$$-iu(\boldsymbol{r})^* \frac{\partial u(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}} = e\boldsymbol{A} \tag{18}$$

$$u(\boldsymbol{r})^* u(\boldsymbol{r}) = 1 \tag{19}$$

を満たすような $u(\boldsymbol{r})$ を求めればよくて、これは、

$$u(\boldsymbol{r}) = \exp\left[ie\int_0^{r} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot d\boldsymbol{r}'\right] \tag{20}$$

とすれば求まる。この関数 u を使えば、

$$u(\boldsymbol{r})^*(-\boldsymbol{\nabla}^2)(u(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})) = (-i\boldsymbol{\nabla} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2\psi(\boldsymbol{r}) \tag{21}$$

となることも示すことができる。

2.2 差分化

上の関係式を用いれば、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{1}{2m}(-i\boldsymbol{\nabla} + e\boldsymbol{A}(\mathbf{r}))^2\psi(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{22}$$

$$\frac{1}{2m}u(\boldsymbol{r})^*(-\boldsymbol{\nabla}^2)(u(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{23}$$

となる。これを差分化すると、

$$u(\boldsymbol{r})^*(-\boldsymbol{\nabla}^2)(u(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})) \sim -\frac{1}{h^2}\sum_{i=1}^{3}\left(u(\boldsymbol{r})^*u(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i)\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i) - 2u(\boldsymbol{r})^*u(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) + u(\boldsymbol{r})^*u(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{e}_i)\psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{e}_i)\right) \tag{24}$$

$$= -\frac{1}{h^2}\sum_{i=1}^{3}\left(e^{ie\int_{\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot d\boldsymbol{r}'}\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i) - 2\psi(\boldsymbol{r}) + e^{ie\int_{\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{e}_i}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot d\boldsymbol{r}'}\psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{e}_i)\right) \tag{25}$$

となる。これはまさに強束縛模型で導入したパイエルス位相そのものである。この形にしておけば、ハミルトニアンをゲージ変換に対して不変にすることができる。$\boldsymbol{A}$ に比例した一階微分を含む形で差分化してしまうと、得られる差分化された方程式はゲージ不変にならない。