物性物理学 2 レポート

修士 1 年, 学生番号 37-246618, 齊藤孝太朗

2024 年 11 月 4 日

解答 1：

与えられたハミルトニアンは次の以下の通りである：

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{L} \left[v \left(\hat{b}_n^\dagger \hat{a}_n + \hat{a}_n^\dagger \hat{b}_n \right) + t \left(\hat{a}_{n+1}^\dagger \hat{b}_n + \hat{b}_n^\dagger \hat{a}_{n+1} \right) + g \left(\hat{a}_{n+2}^\dagger \hat{b}_n + \hat{b}_n^\dagger \hat{a}_{n+2} \right) \right]$$

ここで、運動量空間へのフーリエ変換を行う。演算子を次のように定義する：

$$\hat{a}_n = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikn} \hat{a}_k, \quad \hat{b}_n = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikn} \hat{b}_k$$

ここで、L は全サイト数、k は運動量です。これらの定義をハミルトニアンに代入して、各項をフーリエ変換する。ここで、 $\sum_n e^{i(k'-k)n} = L\delta_{k,k'}$ を利用している。

- v 項の変換を行います。

$$\begin{aligned} v \sum_{n=1}^{L} \left(\hat{b}_n^\dagger \hat{a}_n + \hat{a}_n^\dagger \hat{b}_n \right) &= v \sum_{n=1}^{L} \left(\frac{1}{L} \sum_{k,k'} e^{-ikn} e^{ik'n} \hat{b}_k^\dagger \hat{a}_{k'} + \frac{1}{L} \sum_{k,k'} e^{-ik'n} e^{ikn} \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{b}_k \right) \\ &= v \sum_k \left(\hat{b}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_k \right) \end{aligned}$$

  となります。

- まず、t 項の変換を行います。

$$\begin{aligned} t \sum_{n=1}^{L} \left(\hat{a}_{n+1}^\dagger \hat{b}_n + \hat{b}_n^\dagger \hat{a}_{n+1} \right) &= t \sum_{n=1}^{L} \left(\frac{1}{L} \sum_{k,k'} e^{-ik(n+1)} e^{ik'n} \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_{k'} + \frac{1}{L} \sum_{k,k'} e^{-ik'n} e^{ik(n+1)} \hat{b}_{k'}^\dagger \hat{a}_k \right) \\ &= t \sum_k \left(e^{-ik} \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_k + e^{ik} \hat{b}_k^\dagger \hat{a}_k \right) \end{aligned}$$

- 次に、g 項の変換を行います。

$$
\begin{aligned}
g\sum_{n=1}^{L}\left(\hat{a}_{n+2}^{\dagger}\hat{b}_n+\hat{b}_n^{\dagger}\hat{a}_{n+2}\right) &= g\sum_{n=1}^{L}\left(\frac{1}{L}\sum_{k,k'}e^{-ik(n+2)}e^{ik'n}\hat{a}_k^{\dagger}\hat{b}_{k'}+\frac{1}{L}\sum_{k,k'}e^{-ik'n}e^{ik(n+2)}\hat{b}_{k'}^{\dagger}\hat{a}_k\right) \\
&= g\sum_{k}\left(e^{-i2k}\hat{a}_k^{\dagger}\hat{b}_k+e^{i2k}\hat{b}_k^{\dagger}\hat{a}_k\right)
\end{aligned}
$$

以上をまとめると、ハミルトニアンは次のように書けます。

$$
\hat{H}=\sum_{k}\left[\hat{a}_k^{\dagger}\hat{b}_k\left(v+te^{-ik}+ge^{-i2k}\right)+\hat{b}_k^{\dagger}\hat{a}_k\left(v+te^{ik}+ge^{i2k}\right)\right]
$$

これを行列表記にすると、Bloch ハミルトニアン $H(k)$ は次のようになります。

$$
H(k)=\begin{pmatrix} 0 & d(k) \\ d^*(k) & 0 \end{pmatrix}
$$

ここで、

$$
d(k)=v+te^{-ik}+ge^{-i2k}
$$

Chiral 対称性を確かめる。パウリ行列 σ_z と $H(k)$ の反交換関係を確認します。

$$
\sigma_z H(k)=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & d(k) \\ d^*(k) & 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & d(k) \\ -d^*(k) & 0 \end{pmatrix}
$$

$$
H(k)\sigma_z=\begin{pmatrix} 0 & d(k) \\ d^*(k) & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & -d(k) \\ d^*(k) & 0 \end{pmatrix}
$$

これらを足し合わせると、

$$
\{H(k),\sigma_z\}=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

解答 2

エネルギー分散 $E(k)$ を計算し、ギャップが閉じる条件を特定する。ハミルトニアン $H(k)$ の固有値を計算すると、エネルギー分散は次のようになります。

$$
E(k)=\pm|d(k)|=\pm\sqrt{\mathrm{Re}[d(k)]^2+\mathrm{Im}[d(k)]^2}
$$

ここで

$$
\mathrm{Re}[d(k)]=v+t\cos k+g\cos 2k
$$

$$
\mathrm{Im}[d(k)]=-t\sin k-g\sin 2k
$$

となるので、

$$|d(k)|^2 = (v + t\cos k + g\cos 2k)^2 + (t\sin k + g\sin 2k)^2$$

を展開すると、

$$|d(k)|^2 = v^2 + t^2 + g^2 + 2vt\cos k + 2vg\cos 2k + 2tg\cos 3k$$

となります。

エネルギーギャップが閉じる条件を考える。対称性の観点から $k = \pi$ の点でギャップが閉じる可能性を検討する。

$$d(\pi) = v + te^{-i\pi} + ge^{-i2\pi} = v - t + g$$

従って、

$$|d(\pi)|^2 = (v - t + g)^2$$

ギャップが閉じるためには、

$$v = t - g$$

が成り立つ必要があります。

エネルギー分散は、

$$E(k) = \pm\sqrt{v^2 + t^2 + g^2 + 2vt\cos k + 2vg\cos 2k + 2tg\cos 3k}$$

である。

解答 3

トポロジカル不変量である巻き数 ν は以下で定義される：

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi(k)}{dk}dk$$

ここで、

$$d(k) = |d(k)|e^{i\varphi(k)}$$

と定めた。巻き数とは原点を中心にどのくらい「巻いているか」を示す値である。

$$\mathrm{Re}[d(k)] = v + t\cos k + g\cos 2k, \quad \mathrm{Im}[d(k)] = -t\sin k - g\sin 2k$$

となる。ここで $\mathrm{Im}[d(k)] = 0$ を解くと

$$-t = 2g\cos k \Rightarrow \cos k = -\frac{t}{2g} \quad \text{または} \quad \sin k = 0$$

上式において $|t/2g| \leq 1$ と考える。$\cos k = -\frac{t}{2g}$ を $\mathrm{Re}[d(k)]$ に代入して

$$\mathrm{Re}[d(k)] = v - \frac{t^2}{2g} + g\left(\frac{t^2}{2g^2} - 1\right) = v - \frac{t^2}{2g} + \frac{t^2}{4g} - g = v - g$$

$1 \le \left|\frac{t}{2g}\right|$ の場合は、解は $\sin k = 0$ のみとなる。
これらの条件を考えると、巻き数 ν は以下のように分類されます：

$$\begin{cases} \left|\frac{t}{2g}\right| \le 1 \text{ の時} \\ \begin{cases} v - g \le 0 & \Rightarrow \text{巻き数は } 1 \\ v - t + g \le 0 \le v - g & \Rightarrow \text{巻き数は } 2 \\ 0 \le v - t + g & \Rightarrow \text{巻き数は } 0 \end{cases} \\ \\ 1 \le \left|\frac{t}{2g}\right| \text{ の時} \\ \begin{cases} 0 \le v - t + g & \Rightarrow \text{巻き数は } 0 \\ v - t + g \le 0 & \Rightarrow \text{巻き数は } 1 \end{cases} \end{cases}$$

$\frac{v}{t}$, $\frac{g}{t}$ で書きなおすと

$$\begin{cases} \left|\frac{t}{2g}\right| \le 1 \text{ のとき} \\ \begin{cases} \frac{v}{t} - \frac{g}{t} \le 0 & \Rightarrow \text{巻き数は } 1 \\ \frac{v}{t} - 1 + \frac{g}{t} \le 0 \le \frac{v}{t} - \frac{g}{t} & \Rightarrow \text{巻き数は } 2 \\ 0 \le \frac{v}{t} - 1 + \frac{g}{t} & \Rightarrow \text{巻き数は } 0 \end{cases} \\ \\ 1 \le \left|\frac{t}{2g}\right| \text{ のとき} \\ \begin{cases} 0 \le \frac{v}{t} - 1 + \frac{g}{t} & \Rightarrow \text{巻き数は } 0 \\ \frac{v}{t} - 1 + \frac{g}{t} \le 0 & \Rightarrow \text{巻き数は } 1 \end{cases} \end{cases}$$

これをグラフでプロットすると下図のようになる。

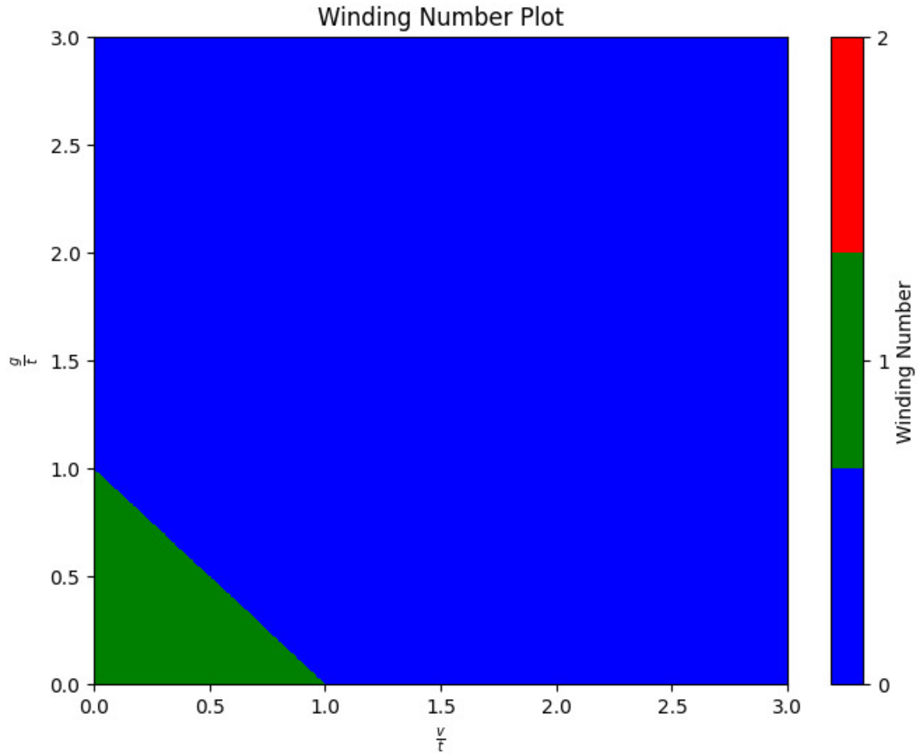

図 1: Winding Number Plot