

Tight-Binding Model における Peierls 位相

ガオゾウ

2020 年 2 月 19 日

1 概要

磁場下の一電子ハミルトニアンにおいては、ふつう運動量演算子 \mathbf{p} を $\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$ で置き換えることによって磁場の効果を取り入れる。これはまあいいのだけれど、Tight-Binding model においては、磁場の効果を電子のホッピング係数に位相因子をつけることで取り入れる。この手続きのことを Peierls substitution とかこの位相のことを Peierls phase などと呼ぶらしい。しかし、この Tight-Binding Model における Peierls 位相の導出が、少なくとも日本語ではあまり出てこなかった。唯一出てきたそれらしいものは [1] のみだったし、英語で調べて出てきたものを含めても、ちょっと個人的にあまり納得がいかなかったので、色々調べて書いてみた。本当にこれで正しいのかはわかりません。ちなみに Peierls の原著論文見たらドイツ語で死にました。

2 Tight-Binding Model

まず初めに Tight-Binding Model を、孤立原子における波動関数から始めてきちんと定義する。以下では簡単のため、結晶を構成する原子は一種類のみとし、また考える孤立原子の原子軌道は一種類のみとするが、これらの拡張はほとんど自明である（添え字を適当につけなせばよい）。

考える孤立原子の位置を \mathbf{x}_i 、原子軌道の波動関数を $\phi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ と書き、対応する状態ベクトルを $|i\rangle$ とかく。 i 番目の原子による電子の感じるポテンシャルを V_i とすれば、 \mathbf{x}_i は次のようなハミルトニアン H_i の固有状態である。

$$H_i = \frac{p^2}{2m} + V_i(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_i(\mathbf{x})$$

したがって次が成り立つ。

$$H_i |i\rangle = \varepsilon |i\rangle$$

ここで ε は孤立原子における原子軌道の固有エネルギーである。結晶における全ハミルトニアンは、全原子のポテンシャルを含めたハミルトニアンで*1

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_i V_i(\mathbf{x}) \quad (1)$$

となる。究極的な目標はこのハミルトニアンの固有状態を求めることである。

*1 正確には全原子のポテンシャルを足し合わせるだけでは不十分で、電子間のクーロン相互作用を考慮する必要がある。

Tight-Binding model においては、原子軌道が強く局在していると仮定することでこのハミルトニアンを近似する。具体的には、次のような仮定をする。

1. 各原子軌道の重なりは無視できる。

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

2. 各原子の波動関数 ϕ_i, ϕ_j や原子のポテンシャル V_k は、それぞれ原子 i, j, k の十分近くでのみ非ゼロの値を持つ。したがって、次のような V_k の行列要素は、原子 i, j, k が十分近い時のみ有限の値を持つ。

$$\langle i|V_k|j\rangle = \int \phi_i^*(\mathbf{x}) V_k(\mathbf{x}) \phi_j(\mathbf{x}) d^3x$$

このとき、ハミルトニアン H の行列要素 $\langle i|H|j\rangle$ は原子 i, j が十分近い時のみ有限の値を持つ。この値を t_{ij} と置けば、ハミルトニアンは

$$H = \sum_{i,j} |i\rangle t_{ij} \langle j|$$

あるいは、 $c_i^\dagger |0\rangle = |i\rangle$ ($|0\rangle$ は電子が存在しない状態に対応するケットベクトル) を満たすような生成演算子 c_i^\dagger や消滅演算子 c_i を用いれば、

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j$$

と表すことができる。これが通常の Tight-Binding Model である。

3 Peierls 位相

前節で定義した Tight-Binding Model に対し、ベクトルポテンシャル \mathbf{A} の効果を取り入れることを考える。すなわち、ハミルトニアン (式 (1)) に対して \mathbf{p} を $\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$ に置き換えたとき、どのように行列要素 t_{ij} が変化するかを考える。ベクトルポテンシャルがあるときの行列要素 $\langle i|H|j\rangle$ を \tilde{t}_{ij} と書くことにすると、

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{ij} &= \int \phi_i^* H \phi_j d^3x \\ &= \int \phi_i^* \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + \sum_k V_k \right] \phi_j d^3x \end{aligned}$$

となる。これを書き換えることで

参考文献

- [1] http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/kato-yusuke-lab/nagai/note_110711_mag.pdf