

Kitaev モデルを用いた一般次元のダイヤモンド格子のエネルギー関数について

明治大学大学院 先端数理科学研究科 現象数理学専攻
舘川 暁斗 (Akito Tatekawa) *

概要

A.Kitaev はハニカム格子における量子力学のエネルギー関数をパウリのスピン作用素を用いたハミルトニアン¹の固有値として構成した。本講演では一般次元のダイヤモンド格子におけるエネルギー関数を、Kitaev モデルを拡張して構成する。特に、基本グラフの概念を用いてモデルを構成する。次に、一般次元のダイヤモンドのエネルギー関数あたるものを離散フーリエ変換を用いて一般化した Kitaev モデルから計算する。このモデルはマヨラナ作用素から構成したハミルトニアン²の固有値として記述される。

1 導入

Kitaev [2] では、ハニカム格子上のスピン $\frac{1}{2}$ 系についての統計力学モデルを記述する。ハニカム格子は 2 次元平面上で実現される結晶格子であり、頂点に接続する 3 辺の方向を x, y, z で表す。Kitaev モデルのハニカム格子のハミルトニアン H は Pauli のスピン作用素 $\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z$ を用いて以下のように記述される (図 1)。

$$H = -J_x \sum_{x-link} \sigma_i^x \sigma_j^x - J_y \sum_{y-link} \sigma_i^y \sigma_j^y - J_z \sum_{z-link} \sigma_i^z \sigma_j^z, \quad (i, j \text{ は各頂点の添字を表す})$$

このとき、ハミルトニアン H の固有値 $\xi(\mathbf{q})$ は以下を満たす (図 2)。

$$\xi(\mathbf{q}) = \pm |f(\mathbf{q})|.$$

$$f(\mathbf{q}) = 2(J_x e^{\sqrt{-1}(\mathbf{q}, \alpha_1)} + J_y e^{\sqrt{-1}(\mathbf{q}, \alpha_2)} + J_z)$$

また、Kitaev モデルを用いた 3 次元ダイヤモンドは S. Ryu[7] により研究されている。本講演では、一般次元のダイヤモンド格子のエネルギー関数を Kitaev モデルを拡張することで求める。また、このモデルの一般次元ダイヤモンド格子のエネルギー関数が tight-binding モデルのエネルギー関数の値と一致することを示す。

* akitot@meiji.ac.jp

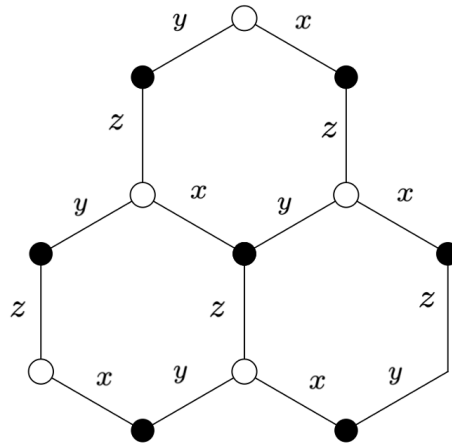


図1 ハニカム格子と対応するパウリ作用素

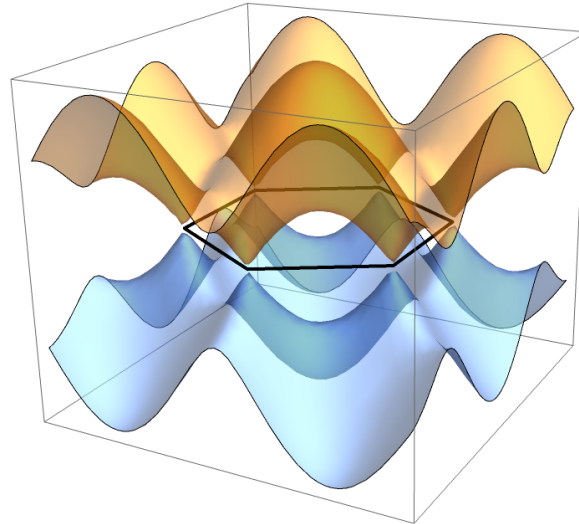


図2 ハニカム格子のエネルギー関数

2 準備の定理・定義

2.1 d -次元ダイヤモンド格子

我々は d -次元ダイヤモンドを以下のように定義する. この定義は T. Sunada [8](と T. O'Keeffe [6]) による. また d -次元ダイヤモンド格子を Δ_d と記述する. まず, $\mathbb{R}^{d+1}$ の標準基底 $\{e_i\}_{1 \leq i \leq d+1}$ とする.

$$W = \left\{ \sum_{i=1}^{d+1} y_i e_i \in \mathbb{R}^{d+1} \mid \sum_{i=1}^{d+1} y_i = 0, y_i \in \mathbb{R} \right\}.$$

とする.

このとき d 次元空間における A 型ルート格子 A_d を以下のように定義する.

$$A_d = \left\{ \sum_{i=1}^d n_i \alpha_i \in W \mid \alpha_i = \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_{d+1}, n_i \in \mathbb{Z} \right\}. \quad (1)$$

また A_d を $p = \frac{1}{d+1} \sum_{i=1}^d \alpha_i$ だけ平行移動させた集合を $A_d + p$ とし以下のように定義する.

$$A_d + p = \left\{ p + \sum_{i=1}^d n_i \alpha_i \in W \mid \alpha_i = \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_{d+1}, n_i \in \mathbb{Z}, p = \frac{1}{d+1} \sum_{i=1}^d \alpha_i \right\}.$$

このとき, d -次元ダイヤモンド格子 Δ_d は以下のように定義される.

Definition 1. Δ_d は, (1)(2) を満たす空間グラフとして定義される.

(1) Δ_d の頂点の集合 $V(\Delta_d) = A_d \cup (A_d + p)$ である.

(2) Δ_d の辺の集合 $E(\Delta_d)$ は $a' \in A_d$ と $a' - p \in A_d + p$ で結ばれた線分, または $a' \in A_d$ と $a' + \alpha_i - p \in A_d + p$, ($1 \leq i \leq d$) で結ばれた線分の集合である.

Γ_{A_d} は任意の $x \in \mathbb{R}^d$ に対して, $t_{\alpha_i}(x) = \alpha_i + x$ となる並行移動 t_{α_i} , ($1 \leq i \leq d$) から生成される群である.

2.2 生成・消滅演算子

以下を反交換関係 $\{ \}$ を満たす生成演算子 a_i , 消滅演算子 $a_i^\dagger$, b ($1 \leq i \leq \lfloor \frac{k}{2} \rfloor$) を考える.

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \{a_j, b\} = \{a_j^\dagger, b\} = 0, \{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \{b, b\} = 2. \quad (2)$$

2.3 空間 $\widetilde{M}$

ベクトル空間 V を基底 $|0\rangle$ と $|1\rangle$, $\mathbb{C}$ を係数で持つものとする.

ここで空間 M を以下のように定義する.

Definition 2.

$$\widetilde{M} = \begin{cases} \bigotimes^d V & d \text{ が偶数} \\ \bigotimes^{d-1} V & d \text{ が奇数} \end{cases}.$$

Definition 3. Δ_d の各頂点 $v \in V(\Delta_d)$ ごとに $\widetilde{M} \cong \widetilde{M}_v$ となるような空間 $\widetilde{M}_v$ とする. 以下のような空間を定義することができる.

$$\bigotimes_{v \in V(\Delta_d)} \widetilde{M}_v.$$

2.4 基本グラフ

Δ_d は Γ_{A_d} の作用で不変である. ある写像 p で Δ_d によって普遍アーベル被覆されるグラフを Δ_d の基本グラフと言う. このとき商空間 Δ_d / Γ_{A_d} は Δ_d の基本グラフとなることが T. Sunada [8] 8.3

example (ii) より知られている (図 3). ここで, Δ_d/Γ_{A_d} を X_0 と書く.

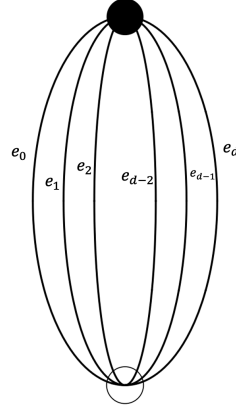


図 3 d-次元ダイヤモンドの基本グラフ

$$p: \Delta_d \rightarrow X_0$$

このとき, 各 $v \in V(\Delta_d)$ の辺と X_0 の辺は一対一対応している.

また, $E(X_0)$ を X_0 の辺の集合とする. 各 $e \in E(X_0)$ に対して P_e を $p^{-1}(e)$ からなる辺の集合とする

このとき, ℓ を以下のようなラベル付けとする

$$\begin{aligned} \ell: E(X_0) &\rightarrow \mathbb{Z} \\ \ell(e_i) &= i+1, e_i \in E(X_0), (0 \leq i \leq d) \end{aligned}$$

このとき, Δ_d の各頂点 $v \in V(\Delta_d)$ ごとに定まるスピンの方向とは, ある $v' \in V(\Delta_d)$ が存在し, $(v, v') \in E(\Delta_d)$ となるとき, $\ell(p((v, v')))$ のことである.

2.5 Majorana 作用素

もし d が偶数ならば, Majorana 作用素を生成演算子 a_i , 消滅演算子 $a_i^\dagger$, $(1 \leq i \leq \frac{d}{2} + 1)$ を用いて以下のように定義する

$$\begin{cases} c_{2i-1} = a_i + a_i^\dagger \\ c_{2i} = \frac{1}{\sqrt{-1}}(a_i - a_i^\dagger). \end{cases} \quad .$$

このとき, c_i は空間 $\bigotimes^d V$ に作用する. もし d が奇数ならば, Majorana 作用素を生成演算子 a_i , 消滅演算子 $a_i^\dagger$, $(1 \leq i \leq \frac{d-1}{2} + 1)$ と b を用いて以下のように定義する

$$\begin{cases} c_{2i-1} = a_i + a_i^\dagger \\ c_{2i} = \frac{1}{\sqrt{-1}}(a_i - a_i^\dagger) \\ c_{d+2} = b \end{cases} \quad .$$

このとき, c_i は空間 $\bigotimes^{d-1} V$ に作用する.

Majorana 作用素 c_1 から c_{d+1} は X_0 の各辺に対応し, c_{d+2} は X_0 の頂点に対応する (図 4).

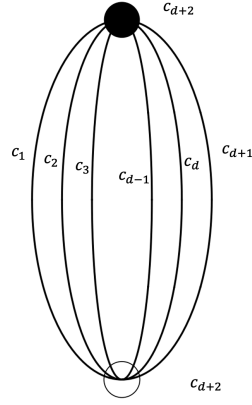


図4 d次元ダイヤモンドの基本グラフと Majorana 作用素の対応

2.6 ハミルトニアン構成

ハミルトニアンを構成する．次にスピンの作用素を $\sigma^k = \sqrt{-1}c_k c_{d+2}$ で構成する．また、各頂点 $v \in V(\Delta_d)$ ごとに作用素 c_k^v , $(1 \leq k \leq d+2)$ を定義する． c_k^v , $(1 \leq k \leq d+2)$ は $\widetilde{M}_v$ のみに作用する作用素 $\sigma^k = \sqrt{-1}c_k c_{d+2}$ とする．よって各 $v \in V(\Delta_d)$ ごとに $\widetilde{M}_v$ に作用する作用素 $\sigma_v^k = \sqrt{-1}c_k^v c_{d+2}^v$ を構成できる．これらのことを用いて、ハミルトニアンを以下のように定義する．

Definition 4.

$$H = - \sum_{e \in E(X_0)} \sum_{(v, v') \in P_e(\Delta_d)} J_{\ell(e)} \sigma_v^{\ell(e)} \sigma_{v'}^{\ell(e)}$$

ここで、改めて

$$\hat{u}_{v, v'} = \sqrt{-1} c_{\alpha_{v, v'}}^v c_{\alpha_{v, v'}}^{v'}$$

とする．ここで $c_{\alpha_{v, v'}}^v$ は Majorana 作用素, $\alpha_{v, v'} \in \ell(E(X_0))$ はスピンの方向である．

ここでハミルトニアン H を以下のように書き直す．

$$\tilde{H} = \frac{\sqrt{-1}}{4} \sum_{v, v' \in V(\Delta_d)} \hat{A}_{v, v'} c_v c_{v'}$$

このとき

$$\hat{A}_{v, v'} = \begin{cases} 2J_{\ell(e)} \hat{u}_{v, v'} & ((v, v') \in P_e) \\ 0 & (\text{そのほか}) \end{cases}$$

ここでの c_v と $c_{v'}$ はそれぞれ Majorana 作用素 c_{d+2}^v と $c_{d+2}^{v'}$, $v, v' \in V(\Delta_d)$ となる．

空間 $\widetilde{M}$ の作用する作用素 D を以下のように定義する.

$$D = (\sqrt{-1})^{d-1} \prod_{i=1}^{d+1} \sqrt{-1} c_i c_{d+2}.$$

このとき, D は以下のように書き直すこともできる. また, D の $\widetilde{M}$ の固有値は ± 1 である. $\bigotimes_{v \in V(\Delta_d)} \widetilde{M}_v$ への D への作用を以下のように定義する.

$$D\left(\bigotimes_{v \in V(\Delta_d)} u_v\right) = \left(\bigotimes_{v \in V(\Delta_d)} D u_v\right).$$

このことから

$$M'(\Delta_d) = \{u \in \bigotimes_{v \in V(\Delta_d)} \widetilde{M}_v \mid Du = u\}.$$

となる空間を構成できる.

ここで H と D は可換である. よって, $M'(\Delta_d)$ は H の作用で不変である.

3 主定理

3.1 離散フーリエ変換

t_i の $x \in \mathbb{R}^d$ への作用素を $t_i \cdot x = x + N e_i$ とする. このとき, Γ_N を以下のように定義する.

$$\Gamma_N = \{t_1^{m_1} \cdots t_d^{m_d} \mid m_1, \dots, m_d \in \mathbb{N}\}.$$

ここで十分大きな整数 $N > 0$ でハミルトニアン H は t_i の作用で不変となるものを用意する. H の固有値問題が最小となる場合を考える. このとき, $u_{v,v'} = 1$ となる. よって基底状態エネルギーの最小状態を任意の $u_{v,v'}$ が 1 となるときのものとする. これは物理の議論で E. H. Lieb[5] から得られる結果であるが, 本研究では仮定とする.

3.2 主定理

上記の条件を考える. この条件のもとで以下の定理が成り立つ.

Theorem 1. Δ_d の $M'(\Delta_d)$ での Kitaev モデルのエネルギー関数 (ハミルトニアンの固有値) を以下のように得ることができる. ここで, Kitaev モデルのエネルギー関数 (ハミルトニアンの固有値) が最小になる場合を考える. これは,

$$E(q_k) = \pm 2 |J_1 + \sum_{i=1}^d J_{i+1} e^{\sqrt{-1}(q_k, \alpha_i)}|$$

このとき, $q_k = \sum_{i=1}^d \frac{k_i}{N} b_i$, $k_i \in \{0, \dots, N-1\}$, $(\alpha_j, b_i) = 2\pi \delta_{ji}$, α_j は A_d の $\mathbb{Z}$ 基底である.

H の固有関数を q_k の関数としてみなしたとき, この関数は周期境界条件を持つとする. ここで, $\hat{u}_{v,v'}$ の固有値を $u_{v,v'} = \pm 1$ で定義する. 今回は基底状態エネルギーの最小状態を考えるため $u_{v,v'} = 1$ となる.

Γ_{A_d} に対する基本領域で隣接している 2 つの頂点を含み、それ以外の頂点を含まないものを unit cell と呼ぶ。ここで、 v を (s, λ) と v' を (t, μ) 書き直す。このとき s は unit cell 中の v の位置、 λ は $\mathbb{R}^d$ における unit cell の位置を指定している。よって v を定めるごとに (s, λ) の組み合わせを d パターン構成することができる。ここでハミルトニアン H は以下のように書き直すことができる。

$$H = \frac{\sqrt{-1}}{4} \sum_{(s, \lambda), (t, \mu) \in V(\Delta_d)} A_{s\lambda, t\mu} c_{s\lambda} c_{t\mu}$$

このとき

$$A_{s\lambda, t\mu} = \begin{cases} 2J_{\ell(e)} & ((s\lambda, t\mu) \in P_e) \\ 0 & (\text{そのほか}) \end{cases}.$$

さらにこのハミルトニアン H は $\tilde{H}_u$ として以下のように書き直すことができる。

$$\tilde{H}_u = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \lambda, \mu} \tilde{A}_{\lambda, \mu}(\mathbf{q}) a_{-\mathbf{q}\lambda} a_{\mathbf{q}\mu}$$

ここで

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{\lambda, \mu}(\mathbf{q}) &= \sum_s A_{0\lambda, s\mu} e^{\sqrt{-1}\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_s}, \\ a_{\mathbf{q}\lambda} &= \sum_s c_{s\lambda} e^{-\sqrt{-1}\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_s}, \end{aligned}$$

である。 r_s は、unit cell における s のもう一つの頂点に対しての位置ベクトルを表している。また、 $c_{s\lambda} = \sum_{\mathbf{q}} e^{\sqrt{-1}\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_s} a_{\mathbf{q}\lambda}$ である。作用素 $a_{\mathbf{q}, \lambda}$ and $a_{\mathbf{q}, \mu}^\dagger$ に対して

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{q}\lambda}^\dagger &= a_{-\mathbf{q}\lambda}, \\ \{a_{\mathbf{q}\lambda}, a_{\mathbf{q}'\mu}^\dagger\} &= \delta_{\lambda\mu} \delta_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}. \end{aligned}$$

の反交換関係が成り立つ。このことから H は 2×2 行列 $\sqrt{-1}\tilde{A}(\mathbf{q})$ を得ることができる。

$$\sqrt{-1}\tilde{A}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} O & \sqrt{-1}f(\mathbf{q}) \\ -\sqrt{-1}f(\mathbf{q})^* & O \end{pmatrix}$$

であり $f(\mathbf{q}) = 2 \sum_{i=0}^d J_{i+1} e^{\sqrt{-1}\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}_i}$ である。この行列の固有値がハミルトニアン H の固有値となるため $\xi(\mathbf{q}) = \pm |f(\mathbf{q})|$ である。これは改めて

$$\xi(\mathbf{q}_k) = \pm 2 \left| \sum_{i=0}^d J_{i+1} e^{\sqrt{-1}\mathbf{q}_k \cdot \alpha_i} \right|$$

ここで

$$\mathbf{q}_k \cdot \alpha_j = \frac{2\pi}{N} k_j \quad (j \geq 1).$$

である。

4 tight-binding-model との関係

Δ_d におけるシュレディンガー方程式の近似モデルである tight-binding-model を考える. シュレディンガー方程式は以下で記述される

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

このとき

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$$

である. また, $L^2(\mathbb{R}^d)$ で H は不変である.

このとき 一般的な Bloch の定理 が F. Bloch [1], P. Kuchment[4] Lemma 5.2, Definition 5.3, Theorem 5.5 より以下のように成り立つ.

Theorem 2 (Bloch Theorem). ポテンシャル $V(x)$ が格子群 Γ の作用で不変であるとする. このときシュレディンガー方程式の解は次のような性質を満たす. $\psi(x) = e^{\sqrt{-1}\mathbf{q}\cdot x}u(x)$ このとき, $u(x)$ は Γ の作用で不変である.

以下 tight-binding-model を構成する (C. Kittel[3]). 格子の頂点集合を $\mathcal{V}$ とする. $\mathcal{V}$ は Γ の作用で不変である. 頂点 v における基底となる関数 ψ_v とする. $\langle \psi_v | \psi_{v'} \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \psi_v \psi_{v'} dx = \delta_{v,v'}$ が成り立つと仮定する. またシュレディンガー方程式の解が ψ_v を基底とする線形な式で書けるする

$$\psi = \sum_{v \in \mathcal{V}} C_v \psi_v.$$

このとき,

$$\psi_v(x) = \sum_{r \in \mathcal{V}} e^{\sqrt{-1}\mathbf{q}\cdot r} u_v(x - r).$$

まは $h_{v,v'}$ を以下のように定義する

$$h_{v,v'} = \int_{\mathbb{R}^d} \psi_v^* \hat{H} \psi_{v'} dx.$$

$h_{v,v'}$ が以下を満たすと仮定する.

$$h_{v,v'} = \begin{cases} 0 & (v = v') \\ \sum_{r \in \mathcal{V}} t_{v,v'} e^{\sqrt{-1}\mathbf{q}\cdot r} & ((v, v') : \text{nearest neighbours}) \\ 0 & (\text{そのほか}) \end{cases}.$$

このとき $t_{v,v'} = t_{v',v}^*$. この手法は M. Tsuchiizu[9] の K_4 格子の基本グラフを用いたエネルギー関数の計算手法をもとにしている.

Theorem 3. Δ_d における tight-binding-model は以下のようになる.

$$E(\mathbf{q}) = \pm |t_1 + \sum_{i=1}^d t_{i+1} e^{\sqrt{-1}\mathbf{q}\cdot \alpha_i}|$$

このとき, v から v' へのベクトルまたは, v' から v へのベクトルが b_i のとき $t_{v,v'} = t_{i+1}$ としている.

定理 1 と定理 3 より, $2J_i$ を t_i と置き換えれば, Δ_d の tight-binding- model と Δ_d の Kitaev モデルによる一般化によって得られる固有値は等しいことがわかる.

参考文献

- [1] F. Bloch, Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern, Zeit. für Physik 52, 555-600, 1928.
- [2] A. Kitaev, Anyons in an exactly solved model and beyond. Annals of Physics Volume 3, 212-111, Issue 1, 2006.
- [3] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons, 2005.
- [4] P. Kuchment, An Overview Of Periodic Elliptic Operators, Bulletin of the American Mathematical Society, Volume 53, 343-414, 2016.
- [5] E. H. Lieb, Flux Phase of the Half-Filled Band, Phys. Rev. Lett. 73, 2158-2161, 1994.
- [6] T. O’Keeffe, N-dimensional diamond, sodalite and rare sphere packings. Acta Crystallogr A 47:748-753, 1991.
- [7] S. Ryu, Three-dimensional topological phase on the diamond lattice. Phys. Rev. B 79, 075124, 2009.
- [8] T. Sunada, Topological Crystallography: With a View Towards Discrete Geometric Analysis, Springer, 2012.
- [9] M. Tsuchiizu, Three-dimensional higher-spin Dirac and Weyl dispersions in the strongly isotropic K_4 crystal, Phys. Rev. B 94, 195426-1-8, 2016.