Hofstadterの蝶

Koki Shimura

2025 年 1 月 17 日

周期ポテンシャル中にある電子に磁場を印加し、横軸に磁束格子 Φ/Φ_0 の平均値、縦軸にエネルギーをとってプロットすると、フラクタル状の離散準位が現れる。この準位を発見者の名前をとって **Hofstadter の蝶**と呼び、量子力学の枠組みで初めて発見されたフラクタル構造として知られている。Hofstadter の蝶を実験的に観測するのは難しく、長らく純粋な理論的産物と見なされていたが、2013 年に二層グラフェンと六方晶窒化ホウ素を結合させて作ったモアレ超格子で実現させられることがわかり、人々の耳目を集めた。トポロジカル物性の文脈でも興味深い対象だが、本稿では Hofstadter の蝶のモデルとそこから導かれる方程式についてまとめるにとどめる。

1　パイエルス位相

準備として、強束縛模型

$$-\sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j + h.c. \tag{1}$$

が外場の中でどのような変化を受けるか考察する。まず磁場を印加したときの系の運動量は $\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ のように変化する。当然演算子も

$$-i\hbar\nabla \to -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A} \tag{2}$$

のように変化する。ここで天下り的ではあるが、場の演算子が

$$\Psi \to e^{i\phi}\Psi \tag{3}$$

のように変換したとしよう。なお ϕ は $\nabla\phi = \frac{e}{\hbar c}\vec{A}$ を満たすようなある関数である。この時

$$e^{i\phi}\Psi^\dagger \left(-i\hbar\nabla\right)^2 \Psi e^{i\phi} = \left[i\hbar\nabla\left(\Psi e^{i\phi}\right)\right]^\dagger \left[-i\hbar\nabla\left(\Psi e^{i\phi}\right)\right] \tag{4}$$

だが

$$\begin{aligned}
\left[\nabla\left(\Psi e^{i\phi}\right)\right] &= \left[\Psi\nabla e^{i\phi} + e^{i\phi}\nabla\Psi\right] \\
&= \left[\Psi\left(i\nabla\phi\right)e^{i\phi} + e^{i\phi}\nabla\Psi\right] \\
&= e^{i\phi}\Psi\left(\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)
\end{aligned}$$

であるから

$$e^{-i\phi}\Psi^\dagger\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\Psi e^{i\phi} = \Psi^\dagger\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\Psi \tag{5}$$

である。したがって、ベクトルポテンシャルの効果は場の演算子 Φ に位相因子 $e^{i\phi}$ をつけることで取り込むことができる。場の演算子に位相因子がつくため、生成消滅演算子も位相因子分の変化を受ける。この時、式 (1) は

$$\sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j e^{i\phi(\vec{r}_i,t)-i\phi(\vec{r}_j,t)} \tag{6}$$

と書き直すことができる。ここで

$$\phi(\vec{r}_i,t)-\phi(\vec{r}_j,t)=\int_{\vec{r}_j}^{\vec{r}_i}\vec{\nabla}\phi\cdot d\vec{r}=\frac{e}{\hbar c}\int_{\vec{r}_j}^{\vec{r}_i}\vec{A}\cdot d\vec{r} \tag{7}$$

であるから、磁場中の強束縛模型の形は最終的に

$$-\sum_{i,j} t_{ij} e^{i\theta_{ij}} c_i^\dagger c_j + h.c. \tag{8}$$

となる。いま $\frac{e}{\hbar c}\int_{\vec{r}_j}^{\vec{r}_i}\vec{A}\cdot d\vec{r}\equiv\theta_{i,j}$ とおいたが、これはパイエルス位相と呼ばれる。

2 Harper 方程式 [1]

磁場中の 2 次元正方格子強束縛模型を考慮する。ハミルトニアンは次のように書かれる。

$$\hat{H}=-\sum_{i,j} t_{ij} e^{i\theta_{ij}} c_i^\dagger c_j + \mathrm{h.c.} \tag{9}$$

ここでは簡単のため最近接ホッピングのみを考慮する。$\theta_{i,j}$ は最初のセクションで導入したパイエルス位相で

$$\theta_{ij}=\frac{c}{\hbar}\int_i^j \vec{A}\cdot d\vec{r},\quad \vec{A}=\begin{pmatrix}0\\Bx\\0\end{pmatrix}. \tag{10}$$

で与えられる。$\vec{A}$ は、磁場が z 軸の方向を向くように取っている。

パイエルス位相の計算例として、$x=m$ の位置にある電子が y 軸方向に $+1$ だけ飛び移るような場合を考えよう。飛び移る前の電子は y 軸のどこにいても構わない。この移動を $\boldsymbol{R}$ と名づける。するとパイエルス位相 $\theta_{\boldsymbol{R}}$ は

$$\theta_{\boldsymbol{R}}=\frac{c}{\hbar}\int_{\boldsymbol{R}}\begin{pmatrix}0\\Bm\\0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}dx\\dy\\dz\end{pmatrix}=\frac{c}{\hbar}Bm \tag{11}$$

と計算される。

波動関数 $\psi_{m,n}$ に対するシュレーディンガー方程式は

$$E\psi_{m,n}=-te^{i\frac{c}{\hbar}Bm}\psi_{m,n+1}-te^{-i\frac{c}{\hbar}Bm}\psi_{m,n-1}-t\psi_{m+1,n}-t\psi_{m-1,n}. \tag{12}$$

で与えられる。平面波解として $\psi_{m,n}=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\phi_{m,n}$ を仮定すると、方程式は

$$E\phi_{m,n}=-2t\cos\left(2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}m+k_y\right)\phi_{m,n}-te^{ik_x}\phi_{m+1,n}-te^{-ik_x}\phi_{m-1,n}. \tag{13}$$

と変形できる。ここで $\frac{c}{\hbar}B=2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}$ とおいた。式 (13) は **Harper 方程式**と呼ばれる。

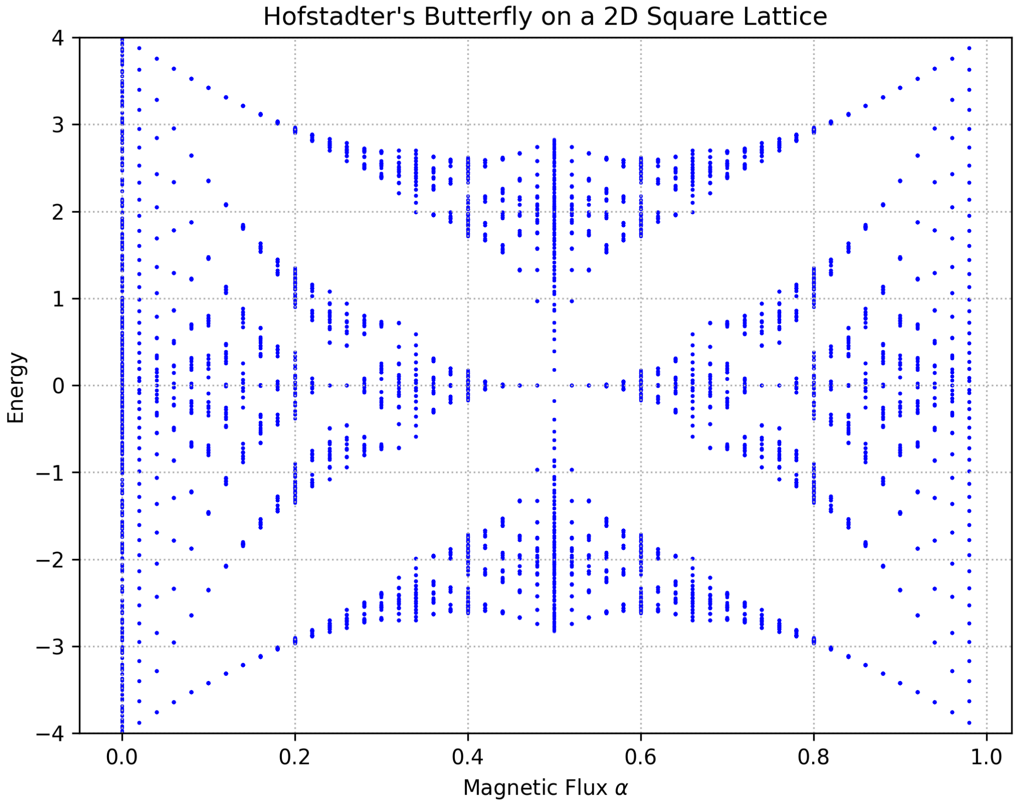

図 1: ホフスタッターの蝶。縦軸にエネルギー、横軸に規格化した magnetic flux を 0 から 1 まで取っている。

3 Hofstadter の蝶

Harper 方程式を解いてエネルギー準位 E を求める。サイト数は $L \times L$ ゆえ行列の大きさは $L^2 \times L^2$ で、この行列を対角化する必要がある。図 3は縦軸にエネルギー準位を、横軸に $\alpha = \Phi_0/\Phi$ を刻んでプロットしたものである。フラクタル状のスペクトルが確認できる。

4 Hofstadter の蝶の実験的観測

Hofstadter の蝶を実験的に観測するのは次の点で難しかった。すなわち、通常の原子の格子サイズでは必要な磁場が大きすぎて実現できなかったり、サイズの大きな人工格子では小さい磁場が必要で disorder に敏感だったり等、適切なスケールの格子を用意するのは容易でなかった。ところが 2013 年に二層グラフェンと六方晶窒化ホウ素を結合させて作ったモアレ超格子が、ホフスタッターの蝶を実現させるのにちょうどよい大きさの周期変調をもたらすことが分かり、フラクタル状スペクトルの観測成功に至った [2]。

参考文献

[1] Hofstadter, Douglas R., Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields, Phys. Rev. B **14**, 2239(1976).

[2] C R Dean 1, L Wang, P Maher, C Forsythe, F Ghahari, Y Gao, J Katoch, M Ishigami, P Moon, M Koshino, T Taniguchi, K Watanabe, K L Shepard, J Hone, P Kim, Hofstadter's butterfly and the fractal quantum Hall effect in moiré superlattices, Nature 497(7451), (2013)