時間依存 Wannier 関数による固体電子ダイナミクスの記述

Time-dependent Wannier function for electron dynamic in extended systems

東大院工　○(P)篠原 康

School of Engineering., the Univ. of Tokyo, ○Yasushi Shinohara

E-mail: shinohara@atto.t.u-tokyo.ac.jp

固体中の電子の記述には、Bloch の定理に従う Bloch 軌道がよく用いられる。Bloch 軌道は系の定常波様の状態を記述する上で有用である一方、Bloch 軌道は空間的に非局在化しており、Bloch 軌道を使った表現では、電子が格子間を移動するような強束縛近似様のダイナミクスを記述するのには不適当である。こうした様子を記述するには Bloch 軌道の結晶運動量を波数とみなして Fourier 変換をとった Wannier 関数での記述が有用である。

固体における高次高調波[1]に代表される、固体を対象とした強光子場下での量子ダイナミクスの研究が近年注目を集めている。こうした現象を調べる上では電場の影響を速度ゲージで扱い、時間依存 Bloch 軌道を用いて求めた誘起されるカレントを使って観測量との比較が行われてきた[2]。しかしながら、格子に対して周期的な Bloch 軌道では、外場により駆動された電子が、単一格子内で分極を作っているのか、あるいは異なる格子にまたがって運動しているのかについて、統一的な観点から記述するのに不適切である。

本発表では一次元模型固体における、Wannier 関数を時間依存版に拡張した時間依存 Wannier(TDW)関数が外場の下でどのようなダイナミクスを見せるかについて紹介する。TDW は

$$w_{bT}(x,t) = \sum_k e^{-ikT}\psi_{bk}(x,t), \qquad i\frac{\partial}{\partial t}\psi_{bk}(x,t) = h(t)\psi_{bk}(x,t),$$

で定義され、ここでbとkはバンドインデックスと結晶運動量、Tは任意の格子ベクトルである。定常状態の Wannier 関数は Schrödinger 方程式の解ではないが、TDW は時間依存 Schrödinger 方程式に従う：

$$i\frac{\partial}{\partial t}w_{bT}(x,t) = h(t)w_{bT}(x,t).$$

講演では、電場の下での TDW で評価した分極とそこから導かれるカレントが求まる。その時間発展の様子と TDW の実空間上での運動の様子を紹介する。

[1] S. Ghimire, et al., Nature Phys. **7** (2011) 138.

[2] T. Otobe, J. Appl. Phys. **111** (2012) 093112.