半導体における電磁場と相互作用する電子の有効ハミルトニアンの微視的導出

Microscopic Derivation of Effective Hamiltonian
of Electorons Interacting with Electromagnetic
Field in Semconductors

奥　村　　　暁

平成 28 年 12 月 22 日

1 Introduction

バンドギャップが eV 程度である半導体は可視光とエネルギーが同程度となるため，半導体中の電子と可視光の相互作用によって様々な現象が生じることが知られている。特に電子とホールの束縛状態である励起子はバンド端近傍の線形・非線形光学応答に対して非常に重要な役割を果たすと同時に，励起子のボーズ粒子性から，多励起子系が巨視的量子現象であるボーズ凝縮を示すことも期待されている。このように，可視光と半導体中の電子の相互作用に起因する現象は理論的にも実験的にも様々な研究が行われてきた [1, 2, 3]。

しかし近年，振動数が THz 程度である光を非常に強く発振する技術が発展したことにより，この THz 光と半導体の相互作用の研究が進んでいる。THz 光の振動数は励起子の内部自由度のエネルギーと同程度であることから，THz 光を用いることで励起子の内部自由度を直接調べることができるようになった。これにより今までの可視光を用いた研究では捉えることのできない現象が期待されることから，THz 光と半導体との相互作用は理論的にも実験的にも近年多くの研究が行われている [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15]。

理論的な研究において，その基礎となるのは対象となる系を記述するハミルトニアンである。可視光と半導体中の電子の相互作用ハミルトニアンは，バンド間の電気双極子遷移を表す電子とホールの対生成，対消滅の項によって記述されるのに対し，THz 光という新しい光と半導体の電子との相互作用を記述するハミルトニアンは，光の振動数がバンドギャップに比べて十分小さいことから，電子とホールそれぞれのバンド内遷移が重要になる。

振動数がバンドギャップより小さい電磁場と半導体中の電子との相互作用を記述するハミルトニアンとして，Luttinger らは静磁場中による半導体中の電子のサイクロトロン運動を記述するためのハミルトニアンを一般的なハミルトニアンから正準変換によって導いている [16]。その変換の結果としてのハミルトニアンは電子がバンドの有効質量をもっ

た荷電粒子として電磁場とミニマルカップリングをする形になっている。そのハミルトニアンの特徴は，電子のバンド内遷移があるのみで，バント間遷移はなく，また電子の裸の質量がなく，有効質量のみで記述されているところである。

一方，近年の THz 光と半導体中の電子との相互作用に関する理論的な研究として，Kira らは一般的なハミルトニアンを直接変形することによって，一般的な振動数の光と半導体中の電子との相互作用ハミルトニアンを導いている［17］。このハミルトニアンの特徴は，電子のバンド内遷移とバンド間遷移の両方を含み，かつ電子の質量も有効質量と裸の質量の両方を含んでいるため，このハミルトニアンは一般的な振動数の電磁場に対して成り立つ一方で，上述のハミルトニアンと比べ複雑になっている。Kira らはこのハミルトニアンを THz 光に適用することで，半導体による THz 光における半導体の光学応答の理論的計算の枠組みを作った。

このように，現在振動数がバンドギャップより十分小さい電磁場と相互作用する半導体中の電子の微視的ハミルトニアンは，２つの種類が用いられている状態であるが，これらの２種類のハミルトニアンの関係性については明らかにされていない。

この論文は，電磁場の振動数がバンドギャップより十分小さい場合において上述の２つの種類の微視的ハミルトニアンが一致することを理論的に示すものである。Kira らは彼らのハミルトニアンを用いた物理量の理論的計算の途中で，電子の裸の質量がキャンセルして消えることを指摘しているが，本研究の結論は端的にその理由を示すものになっている。

以下，電磁場と相互作用する半導体中の電子のハミルトニアンを，一般的な電磁場と電子のハミルトニアンから導出し，どのような形で電磁場と半導体中の電子との相互作用が記述できるかを説明し，最後に上記２種類のハミルトニアンの関係性について論じる。その際，半導体を扱うにあたっての固体物理の基本的な考えについても記述をすることで，この論文にておおよそのハミルトニアンの微視的導出が完結するようにした。

2 クーロンゲージを用いた電磁場と相互作用する電子の一般的なハミルトニアン

一般的に，電磁場と相互作用する電子のハミルトニアンは，クーロンゲージのもとで次のように表される。

$$
\begin{aligned}
\hat{H} = \sum_{s's} \int_V d^3\boldsymbol{x}\hat{\psi}^\dagger(s',\boldsymbol{x}) \Bigg[&-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{(-e)}{\hbar c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2 \delta_{s's} + U_{s's}(\boldsymbol{x}) \\
&- \frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}_{s's}\cdot \mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\Bigg]\hat{\psi}(s,\boldsymbol{x}) \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{s's}\int_V d^3\boldsymbol{x}\int_V d^3\boldsymbol{x}'\hat{\psi}^\dagger(s,\boldsymbol{x})\hat{\psi}^\dagger(s',\boldsymbol{x}')\frac{(-e)^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\hat{\psi}(s',\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(s,\boldsymbol{x}) \\
&+ \int d\boldsymbol{x}^3\frac{1}{8\pi}\left[\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\right)\cdot\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\right) + \mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right]
\end{aligned}
\tag{1}
$$

ここで，$\hat{\psi}(s,\boldsymbol{x})$はスピンインデックス$s$の電子場の消滅演算子であり，次の反交換関係を満たす。

$$\left\{\hat{\psi}(s,\boldsymbol{x}),\hat{\psi}(s',\boldsymbol{x}')\right\} = 0 \tag{2}$$

$$\left\{\hat{\psi}(s,\boldsymbol{x}),\hat{\psi}^\dagger(s',\boldsymbol{x}')\right\} = \delta_{ss'}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{3}$$

また$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$はベクトルポテンシャルであり，$\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})$は$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$の正準運動量を表す横波の場で，電場$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x})$と次のような関係をもつ。

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) = -4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}) \tag{4}$$

$U_{s's}(\boldsymbol{x})$は結晶中の周期的ポテンシャル，$\boldsymbol{\sigma}$は Pauli 行列，mは電子の裸の質量を表している。また，空間積分は体積Vの結晶内で行われるものとする。

3 Bloch function $b_{\lambda \boldsymbol{K}}(s, \boldsymbol{x})$ と Wannier function $w_{\lambda \boldsymbol{R}}(s, \boldsymbol{x})$

ここでは, 周期的ポテンシャル中での電子場を考察するための数学的な準備を説明する。

3.1 Primitive translational vector と Reciprocal lattice axis vector

Primitive translational vector（基本並進ベクトル）は，結晶中のすべての格子点をそれらの整数倍の線形結合のベクトルで表すことのできるベクトルであり, 選び方は無限にある。それらの選び方の１つを $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ とする。

このとき並進ベクトル $\boldsymbol{T}$ を

$$\boldsymbol{T} = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3 \tag{5}$$

（n_i = 結晶中の格子点をすべて表すための整数）

また，$\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ で作られる平行６面体の体積 v_0

$$v_0 = |\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)| \tag{6}$$

は単位胞の最小のものであり，どのような基本並進ベクトルをとっても v_0 は不変である。

次に，この基本並進ベクトルに対応する Reciprocal Lattice Axis Vector $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ は次のように定義される。

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3} \tag{7}$$

$$\boldsymbol{b}_2 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3} \tag{8}$$

$$\boldsymbol{b}_3 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3} \tag{9}$$

これらのベクトルより，Reciprocal Lattice vector $\boldsymbol{G}$ を

$$\boldsymbol{G} = m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3 \tag{10}$$

$$(m_i = \text{全整数}) \tag{11}$$

この $\boldsymbol{G}$ によって作られる格子点を波数空間の逆格子 Reciprocal Lattice といい，$\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$ は波数空間での基本並進ベクトルをあらわし，波数空間の繰り返し構造を表している。

　この$\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$で作られる波数空間内の平行６面体の体積を計算すると,

$$|\boldsymbol{b}_1 \cdot (\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3)| = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \tag{12}$$

となる。

3.2 First Brillouin Zone (FBZ)

　波数空間における逆格子の Wigner-Seitz Cell を First Brillouin Zone という。First Brillouin Zone の体積も

$$|\boldsymbol{b}_1 \cdot (\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3)| = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \tag{13}$$

である。

3.3 Lattice Axis Vector

　基本単位格子とは限らない単位格子 Unit cell を表す Lattice Axis Vector を$\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_3$とする。これらのベクトルがつくる平行６面体の体積$v$は

$$v = |\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 \times \boldsymbol{\alpha}_3| \tag{14}$$

　またこれらのN_1,N_2,N_3倍を結晶の辺を表すベクトル$\boldsymbol{L}_1$,$\boldsymbol{L}_2$,$\boldsymbol{L}_3$とする。

$$\boldsymbol{L}_1 = N_1\boldsymbol{\alpha}_1 \tag{15}$$
$$\boldsymbol{L}_2 = N_2\boldsymbol{\alpha}_2 \tag{16}$$
$$\boldsymbol{L}_3 = N_3\boldsymbol{\alpha}_3 \tag{17}$$

　ここで結晶のサイト位置ベクトルは

$$\boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{\alpha}_1 + n_2\boldsymbol{\alpha}_2 + n_3\boldsymbol{\alpha}_3 \tag{18}$$
$$(n_i = 0 \cdots N_i - 1)$$

で表す。

また結晶の体積Vは

$$V = \boldsymbol{L}_1 \cdot \boldsymbol{L}_2 \times \boldsymbol{L}_3 \tag{19}$$

$$\overset{\text{or}}{=} N_1 N_2 N_3 v \tag{20}$$

3.4 Periodic Boundary Condition and Wave Number Vector

結晶が$\boldsymbol{L}_1$,$\boldsymbol{L}_2$,$\boldsymbol{L}_3$で作られる平行６面体でできているものとし，周期的境界条件をつけて結晶内の物理量を考えることとする。

このとき，結晶内での波動現象を表す波数ベクトル$\boldsymbol{K}$は

$$\boldsymbol{K} = m_1 d\boldsymbol{K}_1 + m_2 d\boldsymbol{K}_2 + m_3 d\boldsymbol{K}_3 \tag{21}$$

（m_iは全整数）

で表せられる。

ここで

$$d\boldsymbol{K}_1 = 2\pi \frac{\boldsymbol{L}_2 \times \boldsymbol{L}_3}{\boldsymbol{L}_1 \cdot \boldsymbol{L}_2 \times \boldsymbol{L}_3} \tag{22}$$

$$\overset{\text{or}}{=} \frac{1}{N_1} 2\pi \frac{\boldsymbol{\alpha}_2 \times \boldsymbol{\alpha}_3}{\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 \times \boldsymbol{\alpha}_3} \tag{23}$$

$$d\boldsymbol{K}_2 = 2\pi \frac{\boldsymbol{L}_3 \times \boldsymbol{L}_1}{\boldsymbol{L}_1 \cdot \boldsymbol{L}_2 \times \boldsymbol{L}_3} \tag{24}$$

$$\overset{\text{or}}{=} \frac{1}{N_2} 2\pi \frac{\boldsymbol{\alpha}_3 \times \boldsymbol{\alpha}_1}{\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 \times \boldsymbol{\alpha}_3} \tag{25}$$

$$d\boldsymbol{K}_3 = 2\pi \frac{\boldsymbol{L}_1 \times \boldsymbol{L}_2}{\boldsymbol{L}_1 \cdot \boldsymbol{L}_2 \times \boldsymbol{L}_3} \tag{26}$$

$$\overset{\text{or}}{=} \frac{1}{N_3} 2\pi \frac{\boldsymbol{\alpha}_1 \times \boldsymbol{\alpha}_2}{\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 \times \boldsymbol{\alpha}_3} \tag{27}$$

である。

よって，波数空間はこららの非常に細かい点の集合でできている。こららの点の１点あたりの波数空間の体積は

$$d\boldsymbol{K}_1 \cdot d\boldsymbol{K}_2 \times d\boldsymbol{K}_3 = \frac{1}{N_1 N_2 N_3} \frac{(2\pi)^3}{v} \tag{28}$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{V} \tag{29}$$

3.5 FBZ 内の状態数

First Brillouin Zone 内における波数の数，つまり状態数は

$$\frac{\text{FBZ の体積}}{\text{波数の 1 点あたりの体積}} = \frac{V}{v_0} \tag{30}$$

$$= \text{結晶中の基本単位格子の数} \tag{31}$$

となる。

3.6 Bloch function

結晶中の周期的ポテンシャルによる 1 体の電子のエネルギー固有関数は Bloch Function $b_{\lambda \boldsymbol{K}}(s, \boldsymbol{x})$を用いて表される。

$$\begin{pmatrix} b_{\lambda \boldsymbol{K}}(\uparrow, \boldsymbol{x}) \\ b_{\lambda \boldsymbol{K}}(\downarrow, \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\lambda \boldsymbol{K}}(\uparrow, \boldsymbol{x}) \\ u_{\lambda \boldsymbol{K}}(\downarrow, \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}} \tag{32}$$

ここで$N \equiv N_1 N_2 N_3$，λはバンドインデックスであり，バンドが conduction band を表すとき$\lambda = \mathrm{c}$，valence band を表すとき$\lambda = \mathrm{v}$とする。また$\boldsymbol{K}$は First Brillouin Zone 内の波数を表す。つまり

$$\boldsymbol{K} = m_1 d\boldsymbol{K}_1 + m_2 d\boldsymbol{K}_2 + m_3 d\boldsymbol{K}_3 \tag{33}$$

（m_iは First Brillouin Zone に入る整数）

$u_{\lambda \boldsymbol{K}}(s, \boldsymbol{x})$は結晶と同じ周期性をもつ関数であり，任意の並進ベクトル$\boldsymbol{T}$に対し，

$$\begin{pmatrix} u_{\lambda \boldsymbol{K}}(\uparrow, \boldsymbol{x} + \boldsymbol{T}) \\ u_{\lambda \boldsymbol{K}}(\downarrow, \boldsymbol{x} + \boldsymbol{T}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\lambda \boldsymbol{K}}(\uparrow, \boldsymbol{x}) \\ u_{\lambda \boldsymbol{K}}(\downarrow, \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \tag{34}$$

を満たしている。

また周期的境界条件を用いるものとし，

$$\begin{pmatrix} b_{\lambda \boldsymbol{K}}(\uparrow, \boldsymbol{x} + \boldsymbol{L}_i) \\ b_{\lambda \boldsymbol{K}}(\downarrow, \boldsymbol{x} + \boldsymbol{L}_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\lambda \boldsymbol{K}}(\uparrow, \boldsymbol{x} + \boldsymbol{L}_i) \\ u_{\lambda \boldsymbol{K}}(\downarrow, \boldsymbol{x} + \boldsymbol{L}_i) \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{L}_i)} \tag{35}$$

$$= \begin{pmatrix} b_{\lambda \boldsymbol{K}}(\uparrow, \boldsymbol{x}) \\ b_{\lambda \boldsymbol{K}}(\downarrow, \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \tag{36}$$

が成り立つ。

ここで

$$\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{L}_i = 2\pi m_i \qquad (i=1,2,3) \tag{37}$$

を用いている。

3.7 Wannier function

Wannier function $w_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})$は以下のような Bloch function の線形結合によって定義される。

$$\begin{pmatrix} w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} = \sum_{\boldsymbol{K}} \begin{pmatrix} b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\boldsymbol{K}\boldsymbol{R}} \tag{38}$$

$$\overset{\text{or}}{=} \sum_{\boldsymbol{K}} \begin{pmatrix} u_{\lambda\boldsymbol{K}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ u_{\lambda\boldsymbol{K}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R})} \tag{39}$$

また逆に，Bloch function も Wannier function の線形結合で書くことができる。

$$\begin{pmatrix} b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} = \sum_{\boldsymbol{R}} \begin{pmatrix} w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{R}} \tag{40}$$

Bloch function が周期的境界条件をもつことから，以下のように Wannier function も周期的境界条件をもつ。

$$\begin{pmatrix} w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\uparrow,\boldsymbol{x}+\boldsymbol{L}_i) \\ w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\downarrow,\boldsymbol{x}+\boldsymbol{L}_i) \end{pmatrix} = \sum_{\boldsymbol{K}} \begin{pmatrix} b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\uparrow,\boldsymbol{x}+\boldsymbol{L}_i) \\ b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\downarrow,\boldsymbol{x}+\boldsymbol{L}_i) \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\boldsymbol{K}\boldsymbol{R}} \tag{41}$$

$$= \begin{pmatrix} w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \tag{42}$$

3.8 Bloch function と Wanier function の正規直交性と完全性

Bloch function と Wannier function はそれぞれ以下のように正規直交性と完全性をもつものとする。

$$\int d\boldsymbol{x}^3 \begin{pmatrix} b^*_{\lambda'\boldsymbol{K}'}(\uparrow,\boldsymbol{x}), b^*_{\lambda'\boldsymbol{K}'}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} = \delta_{\lambda'\lambda}\delta_{\boldsymbol{K}'\boldsymbol{K}} \tag{43}$$

$$\int d\boldsymbol{x}^3 \begin{pmatrix} w^*_{\lambda'\boldsymbol{R}'}(\uparrow,\boldsymbol{x}), w^*_{\lambda'\boldsymbol{R}'}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} = \delta_{\lambda'\lambda}\delta_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}} \tag{44}$$

$$\sum_{\lambda\boldsymbol{K}} \begin{pmatrix} b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b^*_{\lambda\boldsymbol{K}}(\uparrow,\boldsymbol{x}'), b^*_{\lambda\boldsymbol{K}}(\downarrow,\boldsymbol{x}') \end{pmatrix} = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{45}$$

$$\sum_{\lambda\boldsymbol{R}} \begin{pmatrix} w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w^*_{\lambda\boldsymbol{R}}(\uparrow,\boldsymbol{x}'), w^*_{\lambda\boldsymbol{R}}(\downarrow,\boldsymbol{x}') \end{pmatrix} = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{46}$$

3.9 電子場$\hat{\psi}(s,\boldsymbol{x})$の展開と消滅演算子$\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{K}}$，$\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{R}}$

Bloch function と wannier function の完全性より，電子の場の演算子$\hat{\psi}(s,\boldsymbol{x})$を Bloch function と Wannier function でそれぞれ展開すると，

$$\begin{pmatrix} \hat{\psi}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ \hat{\psi}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} = \sum_{\lambda\boldsymbol{K}} \hat{c}_{\lambda\boldsymbol{K}} \begin{pmatrix} b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ b_{\lambda\boldsymbol{K}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \tag{47}$$

$$\overset{\text{or}}{=} \sum_{\lambda\boldsymbol{R}} \hat{c}_{\lambda\boldsymbol{R}} \begin{pmatrix} w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\uparrow,\boldsymbol{x}) \\ w_{\lambda\boldsymbol{R}}(\downarrow,\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \tag{48}$$

ここで，$\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{K}}$と$\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{R}}$はそれぞれ電子の場を Bloch function と Wannier function で展開したときの電子の消滅演算子であり，次の反交換関係を満たすものである。

$$\{\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{K}}, \hat{c}_{\lambda'\boldsymbol{K}'}\} = 0 \tag{49}$$

$$\left\{\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{K}}, \hat{c}^\dagger_{\lambda'\boldsymbol{K}'}\right\} = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'} \tag{50}$$

$$\{\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{R}}, \hat{c}_{\lambda'\boldsymbol{R}'}\} = 0 \tag{51}$$

$$\left\{\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{R}}, \hat{c}^\dagger_{\lambda'\boldsymbol{R}'}\right\} = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}'} \tag{52}$$

また，$\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{K}}$と$\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{R}}$は次のような関係をもつ。

$$\hat{c}_{\lambda\boldsymbol{R}} = \sum_{\boldsymbol{K}} \hat{c}_{\lambda\boldsymbol{K}} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{R}} \tag{53}$$

または

$$\hat{c}_{\lambda \boldsymbol{K}} = \sum_{\boldsymbol{R}} \hat{c}_{\lambda \boldsymbol{R}} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\boldsymbol{K}\boldsymbol{R}} \tag{54}$$

3.10 Bra-Cket representation

以下のように，関数を抽象的な Bra-Cket で表記することもできる。

$$\begin{pmatrix} u_{\lambda \boldsymbol{k}}(\uparrow, \boldsymbol{x}) \\ u_{\lambda \boldsymbol{k}}(\downarrow, \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}} \to |\lambda \boldsymbol{k}, \boldsymbol{K} > \tag{55}$$

$$\begin{pmatrix} w_{\lambda \boldsymbol{R}}(\uparrow, \boldsymbol{x}) \\ w_{\lambda \boldsymbol{R}}(\downarrow, \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \to |\lambda \boldsymbol{R} >= \sum_{\boldsymbol{k}} |\lambda \boldsymbol{k}, \boldsymbol{k} > \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}} \tag{56}$$

$$\begin{pmatrix} u^*_{\lambda \boldsymbol{k}}(\uparrow, \boldsymbol{x}), u^*_{\lambda \boldsymbol{k}}(\downarrow, \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}} \to < \lambda \boldsymbol{k}, \boldsymbol{K}| \tag{57}$$

$$\begin{pmatrix} w^*_{\lambda \boldsymbol{R}}(\uparrow, \boldsymbol{x}), w^*_{\lambda \boldsymbol{R}}(\downarrow, \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \to < \lambda \boldsymbol{R}| = \sum_{\boldsymbol{k}} < \lambda \boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}| \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}} \tag{58}$$

ここで，任意の演算子$O_{s's}(\frac{\hbar}{i}\nabla, \hat{\boldsymbol{x}})$に対し，

$$\sum_{s's} \int_V d\boldsymbol{x} w^*_{\lambda' \boldsymbol{R}'}(s', \boldsymbol{x}) O_{s's}(\frac{\hbar}{i}\nabla, \boldsymbol{x}) w_{\lambda \boldsymbol{R}}(s, \boldsymbol{x}) \equiv < \lambda' \boldsymbol{R}'|O(\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{x}})|\lambda \boldsymbol{R} > \tag{59}$$

$$\sum_{s's} \int_V d\boldsymbol{x} u^*_{\lambda' \boldsymbol{k}'}(s', \boldsymbol{x}) \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\boldsymbol{K}'\boldsymbol{x}} O_{s's}(\frac{\hbar}{i}\nabla, \boldsymbol{x}) u_{\lambda \boldsymbol{k}}(s, \boldsymbol{x}) \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}} \equiv < \lambda' \boldsymbol{k}', \boldsymbol{K}'|O(\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{x}})|\lambda \boldsymbol{k}, \boldsymbol{K} > \tag{60}$$

$$\sum_{s's} \int_V d\boldsymbol{x} w^*_{\lambda' \boldsymbol{R}'}(s', \boldsymbol{x}) O_{s's}(\frac{\hbar}{i}\nabla, \boldsymbol{x}) u_{\lambda \boldsymbol{k}}(s, \boldsymbol{x}) \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}} \equiv < \lambda' \boldsymbol{R}'|O(\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{x}})|\lambda \boldsymbol{k}, \boldsymbol{K} > \tag{61}$$

$$\sum_{s's} \int_V d\boldsymbol{x} u^*_{\lambda' \boldsymbol{k}'}(s', \boldsymbol{x}) \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\boldsymbol{K}'\boldsymbol{x}} O_{s's}(\frac{\hbar}{i}\nabla, \boldsymbol{x}) w_{\lambda \boldsymbol{R}}(s, \boldsymbol{x}) \equiv < \lambda' \boldsymbol{k}', \boldsymbol{K}'|O(\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{x}})|\lambda \boldsymbol{R} > \tag{62}$$

と表現する。ここで，Vは結晶全体の体積を表す。

次に，$O(\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{x}})$が周期的な演算子である場合について考える。演算子$O(\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{x}})$が任意の並進ベクトル$\boldsymbol{T}$に対し，

$$O(\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{T})=O(\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{63}$$

であるとき，

$$
\begin{aligned}
&< \lambda'\boldsymbol{k}',\boldsymbol{K}'|O(\hat{\boldsymbol{P}},\hat{x})|\lambda\boldsymbol{k},\boldsymbol{K}> \\
&=\sum_{s's}\int_V d\boldsymbol{x}u^*_{\lambda'\boldsymbol{k}'}(s',\boldsymbol{x})\frac{1}{\sqrt{N}}e^{-i\boldsymbol{K}'\boldsymbol{x}}O(\frac{\hbar}{i}\nabla,\boldsymbol{x})_{s's}u_{\lambda\boldsymbol{k}}(s,\boldsymbol{x})\frac{1}{\sqrt{N}}e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}} &(64)\\
&=\sum_{s's}\int_V d\boldsymbol{x}\frac{1}{N}e^{i(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{K}')\boldsymbol{x}}u^*_{\lambda'\boldsymbol{k}'}(s',\boldsymbol{x})O(\frac{\hbar}{i}(\nabla+i\boldsymbol{K}),\boldsymbol{x})_{s's}u_{\lambda\boldsymbol{k}}(s,\boldsymbol{x}) &(65)\\
&=\sum_{\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{K}')\boldsymbol{R}} \\
&\times\sum_{s's}\int_v d\boldsymbol{x}e^{i(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{K}')\boldsymbol{x}}u^*_{\lambda'\boldsymbol{k}'}(s',\boldsymbol{x})O(\frac{\hbar}{i}(\nabla+i\boldsymbol{K}),\boldsymbol{x}+\boldsymbol{R})_{s's}u_{\lambda\boldsymbol{k}}(s,\boldsymbol{x}) &(66)\\
&=\sum_{\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{K}')\boldsymbol{R}} \\
&\times\sum_{s's}\int_v d\boldsymbol{x}e^{i(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{K}')\boldsymbol{x}}u^*_{\lambda'\boldsymbol{k}'}(s',\boldsymbol{x})O(\frac{\hbar}{i}(\nabla+i\boldsymbol{K}),\boldsymbol{x})_{s's}u_{\lambda\boldsymbol{k}}(s,\boldsymbol{x}) &(67)\\
&=\delta_{\boldsymbol{K}'\boldsymbol{K}}\sum_{s's}\int_v d\boldsymbol{x}u^*_{\lambda'\boldsymbol{k}'}(s',\boldsymbol{x})O(\frac{\hbar}{i}(\nabla+i\boldsymbol{K}),\boldsymbol{x})_{s's}u_{\lambda\boldsymbol{k}}(s,\boldsymbol{x}) &(68)\\
&\equiv\delta_{\boldsymbol{K}'\boldsymbol{K}}< \lambda'\boldsymbol{k}'|O(\hat{\boldsymbol{p}}+\hbar\boldsymbol{K},\boldsymbol{x})_{s's}|\lambda\boldsymbol{k}> &(69)
\end{aligned}
$$

ここで，vは単位格子の体積である。

よって，周期的な演算子$O(\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{x}})$に対して，簡単のために次のような表現をする。

$$O(\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{x}})|\lambda\boldsymbol{k},\boldsymbol{K}>=\{O(\hat{\boldsymbol{p}}+\hbar\boldsymbol{K},\hat{\boldsymbol{x}})|\lambda\boldsymbol{k}>\}\,|\boldsymbol{K}> \quad \equiv O(\hat{\boldsymbol{p}}+\hbar\boldsymbol{K},\hat{\boldsymbol{x}})|\lambda\boldsymbol{k},\boldsymbol{K}> \tag{70}$$

ただし，$\hat{\boldsymbol{p}}$は前の状態$|\lambda\boldsymbol{k}>$にかかるものとする。

ここで，$|\lambda\boldsymbol{k}>$は次のような関数に対応する。

$$|\lambda\boldsymbol{k}>\to\begin{pmatrix}u_{\lambda\boldsymbol{k}}(\uparrow,\boldsymbol{x})\\u_{\lambda\boldsymbol{k}}(\downarrow,\boldsymbol{x})\end{pmatrix} \tag{71}$$

ここで，$u_{\lambda\boldsymbol{k}}(s,\boldsymbol{x})$における$\boldsymbol{x}$は原点に置かれた単位格子内の座標を意味する。

4 Bloch function を用いて表現されたハミルトニアン

クーロンゲージを用いた電磁場と相互作用する結晶中の電子のハミルトニアンは，電子の場$\hat{\psi}(s,\boldsymbol{x})$を Bloch function を用いて展開することにより，以下のように表現される。

$$H=\sum_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1}H_0\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}\hat{c}^\dagger_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\hat{c}_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1} \tag{72}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\lambda_3\boldsymbol{K}_3}\sum_{\lambda_2\boldsymbol{K}_2}\sum_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1}V\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4,\lambda_3\boldsymbol{K}_3|\lambda_2\boldsymbol{K}_2,\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}\hat{c}^\dagger_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\hat{c}^\dagger_{\lambda_3\boldsymbol{K}_3}\hat{c}_{\lambda_2\boldsymbol{K}_2}\hat{c}_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1} \tag{73}$$

$$-\frac{1}{c}\sum_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\hat{c}^\dagger_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\hat{c}_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1} \tag{74}$$

$$+\sum_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\hat{c}^\dagger_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\hat{c}_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1} \tag{75}$$

$$-\sum_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\hat{c}^\dagger_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4}\hat{c}_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1} \tag{76}$$

$$+\int d\boldsymbol{x}^3\frac{1}{8\pi}\left[\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)\cdot\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)+\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\right] \tag{77}$$

ただし

$$H_0\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}$$
$$=\sum_{s,s'}\int d^3\boldsymbol{x}b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\delta_{s,s'}+U_{s,s'}(\boldsymbol{x})\right]b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s'}(\boldsymbol{x}) \tag{78}$$

$$V\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4,\lambda_3\boldsymbol{K}_3|\lambda_2\boldsymbol{K}_2,\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}$$
$$=\sum_{s,s'}\int d^3\boldsymbol{x}\int d^3\boldsymbol{x}'b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})b^*_{\lambda_3\boldsymbol{K}_3 s'}(\boldsymbol{x}')\frac{(-e)^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}b_{\lambda_2\boldsymbol{K}_2 s'}(\boldsymbol{x}')b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x}) \tag{79}$$

$$\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})$$
$$=\sum_{s}\frac{(-e)\hbar}{2im}\left[b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right)-\left(\nabla b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\right)b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right] \tag{80}$$

$$R\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})$$
$$=\sum_{s}\frac{(-e)^2}{2mc^2}b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x}) \tag{81}$$

$$\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})$$
$$=\sum_{s,s'}b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}_{s,s'}b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s'}(\boldsymbol{x}) \tag{82}$$

また，以降のために次のものを定義しておく。

$$\boldsymbol{I}^{+e}\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})$$
$$=\sum_{s}\frac{(+e)\hbar}{2im}\left[b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right)-\left(\nabla b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\right)b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right] \tag{83}$$

$$\boldsymbol{M}_S^{+e}\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})$$
$$=\sum_{s,s'}b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\frac{(+e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}_{s,s'}b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s'}(\boldsymbol{x}) \tag{84}$$

5 Denition of Hole Operator

一般的にバンドギャップが eV 程度である半導体では，valence band に電子がつまっており，valence band にいる電子が励起され conduction band に遷移する。このとき valence band には電子がいた場所に穴があくが，これをホールという粒子として扱うと便利である。このため，ホールを表す演算子を導入する。

5.1 Band index λ

はじめにバンドインデックスについて

$$\text{Conduction Band} \qquad \lambda = \mathrm{c} \tag{85}$$
$$\text{Valence Band} \qquad \lambda = \mathrm{v} \tag{86}$$
$$\text{内部自由度を逆転させた Band index} \qquad \bar{\lambda} = \bar{\mathrm{c}} \text{ or } \bar{\mathrm{v}} \tag{87}$$

とおく。

5.2 ホールを表す演算子

Bloch function を用いて表現されたときのホールの演算子 $\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}}$,$\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}}$ は次のように定義される。

$$\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}} \equiv \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}} \tag{88}$$
$$\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}} \equiv \hat{c}_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}} \tag{89}$$

同様に，Wannier function を用いて表現されたときのホールの演算子 $\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}$,$\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}$ は次のように定義される。

$$\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \equiv \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}} \tag{90}$$
$$\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \equiv \hat{c}_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}} \tag{91}$$

6 Representation of Hamiltonian with hole operator $\hat{d}_{\bar{\lambda}\boldsymbol{K}}$ of Bloch Function

6.1 Hamiltoninan on hole representation

クーロンゲージを用いた電磁場と相互作用する結晶中の電子のハミルトニアン$\hat{H}$は，Bloch function による展開のもとでをホールを用いて表現すると次のような形になる。

$$\hat{H} = E_M + \hat{H}_M + \hat{H}_{M-P} + \hat{H}_P \tag{92}$$

ここで，E_Mは定数項，$\hat{H}_M$は物質系のハミルトニアン，$\hat{H}_{M-P}$ 物質系と電磁場の相互作用項，$\hat{H}_P$は電磁場のハミルトニアンを表している。以降，各項について説明する。

6.2 定数項 E_M

E_Mは電子が全て valence band に詰まったときの電子系のエネルギーを与えている。このとき電子間のクーロン相互作用によるエネルギーの効果は，Hartree-Fock 近似の形で入っている。

$$E_M = \sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}} \left[H_0 \left\{ \mathrm{v}\boldsymbol{K} | \mathrm{v}\boldsymbol{K} \right\} + \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{v}'\boldsymbol{K}'} \left[V \left\{ \mathrm{v}\boldsymbol{K}, \mathrm{v}'\boldsymbol{K}' | \mathrm{v}'\boldsymbol{K}', \mathrm{v}\boldsymbol{R} \right\} - V \left\{ \mathrm{v}\boldsymbol{K}, \mathrm{v}'\boldsymbol{K}' | \mathrm{v}\boldsymbol{K}, \mathrm{v}'\boldsymbol{K}' \right\} \right] \right] \tag{93}$$

6.3 物質系のハミルトニアン$\hat{H}_M$

次に，物質系のハミルトニアン$\hat{H}_M$は，電子とホールの一体項$\hat{H}_1$とクーロン相互作用項$\hat{V}$の和として書かれる。

$$\hat{H}_M = \hat{H}_1 + \hat{V} \tag{94}$$

つぎに，これらの各項についてそれぞれ考察する。

電子とホールの1体のハミルトニアン$\hat{H}_1$

電子とホールの1体のハミルトニアン$\hat{H}_1$は

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_1 = \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1} \Bigg[& H_0 \left\{ \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4 | \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1 \right\} \\
& + \sum_{\mathrm{v}' \boldsymbol{K}'} \left[V \left\{ \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}' \boldsymbol{K}' | \mathrm{v}' \boldsymbol{K}', \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1 \right\} - V \left\{ \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}' \boldsymbol{K}' | \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}' \boldsymbol{K}' \right\} \right] \Bigg] \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1} \\
- \sum_{\mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1} \Bigg[& H_0 \left\{ \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1 | \mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}_4 \right\} \\
& + \sum_{\mathrm{v}' \boldsymbol{K}'} \left[V \left\{ \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}' \boldsymbol{K}' | \mathrm{v}' \boldsymbol{K}', \mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}_4 \right\} - V \left\{ \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}' \boldsymbol{K}' | \mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}' \boldsymbol{K}' \right\} \right] \Bigg] \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4 - \boldsymbol{K}_4} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1 - \boldsymbol{K}_1} \\
+ \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1} \Bigg[& H_0 \left\{ \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4 | \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1 \right\} \\
& + \sum_{\mathrm{v}' \boldsymbol{K}'} \left[V \left\{ \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}' \boldsymbol{K}' | \mathrm{v}' \boldsymbol{K}', \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1 \right\} - V \left\{ \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}' \boldsymbol{K}' | \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}' \boldsymbol{K}' \right\} \right] \Bigg] \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1 - \boldsymbol{K}_1} \\
& + (\mathrm{h.c.}) \qquad (95)
\end{aligned}
$$

この項は有効な周期的ポテンシャルの導入と適切な Bloch function を用いることにより対角化させることが知られている。これについては次の章で述べる。

クーロン相互作用項$\hat{V}$

クーロン相互作用項$\hat{V}$は，次のように電子とホールの間の相互作用を表している。

$$
\begin{aligned}
\hat{V} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{c}_3 \boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{c}_2 \boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{c}_3 \boldsymbol{K}_3 | \mathrm{c}_2 \boldsymbol{K}_2, \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1\right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_3 \boldsymbol{K}_3} \hat{c}_{\mathrm{c}_2 \boldsymbol{K}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_3 \boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{v}_2 \boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}_2 \boldsymbol{K}_2 | \mathrm{v}_3 \boldsymbol{K}_3, \mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}_4\right\} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4 - \boldsymbol{K}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_3 - \boldsymbol{K}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2 - \boldsymbol{K}_2} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1 - \boldsymbol{K}_1} \\
& - \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_3 \boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{v}_2 \boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1} \Big[V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}_2 \boldsymbol{K}_2 | \mathrm{v}_3 \boldsymbol{K}_3, \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1\right\} - V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}_2 \boldsymbol{K}_2 | \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}_3 \boldsymbol{K}_3\right\} \Big] \\
& \qquad \qquad \times \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_3 - \boldsymbol{K}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2 - \boldsymbol{K}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1} \\
& - \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_3 \boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{v}_2 \boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1 | \mathrm{v}_2 \boldsymbol{K}_2, \mathrm{v}_3 \boldsymbol{K}_3\right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_3 - \boldsymbol{K}_3} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_2 - \boldsymbol{K}_2} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1 - \boldsymbol{K}_1} \\
& \qquad \qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
& + \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_3 \boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{c}_2 \boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{c}_2 \boldsymbol{K}_2 | \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}_3 \boldsymbol{K}_3\right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_3 - \boldsymbol{K}_3} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_2 \boldsymbol{K}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1} \\
& \qquad \qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{c}_3 \boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{v}_2 \boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4, \mathrm{c}_3 \boldsymbol{K}_3 | \mathrm{v}_2 \boldsymbol{K}_2, \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1\right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_4} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_3 \boldsymbol{K}_3} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_2 - \boldsymbol{K}_2} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1 - \boldsymbol{K}_1} \\
& \qquad \qquad + (\mathrm{h.c.})
\end{aligned} \tag{96}
$$

1 体の演算子が対角化された物質系のハミルトニアン

1 体の演算子の部分は，バレンスバンドに電子が詰まった状態についてのハートリーフォック近似を表している。Bloch Function が適切に選ばれるとこの 1 体の部分は対角されるので，

$$H_M = \sum_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} E_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \tag{97}$$

$$- \sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}} E_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}} \tag{98}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4, \mathrm{c}_3\boldsymbol{K}_3 | \mathrm{c}_2\boldsymbol{K}_2, \mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1\right\} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{K}_3} \hat{c}_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{K}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1} \tag{99}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2 | \mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3, \mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4\right\} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_4-\boldsymbol{K}_4} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3-\boldsymbol{K}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2-\boldsymbol{K}_2} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1} \tag{100}$$

$$- \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1} \left[V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2 | \mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3, \mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1\right\} - V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2 | \mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3\right\}\right]$$

$$\times \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3-\boldsymbol{K}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2-\boldsymbol{K}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1} \tag{101}$$

$$- \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1 | \mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2, \mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3\right\} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3-\boldsymbol{K}_3} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_2-\boldsymbol{K}_2} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1} \tag{102}$$

$$+ (\mathrm{h.c.}) \tag{103}$$

$$+ \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4, \mathrm{c}_2\boldsymbol{K}_2 | \mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3\right\} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3-\boldsymbol{K}_3} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{K}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1} \tag{104}$$

$$+ (\mathrm{h.c.}) \tag{105}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \sum_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{K}_3} \sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4, \mathrm{c}_3\boldsymbol{K}_3 | \mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2, \mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1\right\} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{K}_3} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_2-\boldsymbol{K}_2} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1} \tag{106}$$

$$+ (\mathrm{h.c.}) \tag{107}$$

このとき，$E_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}}$ と $E_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}}$ はバンド構造を表す。

半導体を念頭に置いた電子とホールのクーロン相互作用項$\hat{V}$

クーロン相互作用の項$\hat{V}$は，キャリア間距離が励起子ボーア半径程度であるとき meV 程度の大きさになる。これに対し electron と hole の数の和を保存しない状態間のエネルギー差は典型的な半導体において eV 程度である。よって electron と hole の数の和を保存しないクーロン項は，数の和を保存する状態を無摂動状態としたときに，1/1000 程度の良い近似で摂動項となる。よって第 0 近似として，electron と hole の数の和を保存しない項を無視することができる。このときクーロン相互作用項$\hat{V}$は，

$$\begin{aligned}\hat{V} =& \frac{1}{2}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{K}_3}\sum_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{K}_2}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4, \mathrm{c}_3\boldsymbol{K}_3|\mathrm{c}_2\boldsymbol{K}_2, \mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1\right\}\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{K}_3}\hat{c}_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{K}_2}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1} \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3}\sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1} V\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2|\mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3, \mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4\right\}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_4-\boldsymbol{K}_4}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3-\boldsymbol{K}_3}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2-\boldsymbol{K}_2}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1} \\ &- \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3}\sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}\Big[V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2|\mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3, \mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1\right\} - V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4, \mathrm{v}_2\boldsymbol{K}_2|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1, \mathrm{v}_3\boldsymbol{K}_3\right\}\Big] \\ &\times \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3-\boldsymbol{K}_3}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2-\boldsymbol{K}_2}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}\end{aligned} \tag{108}$$

となる。以下，クーロン相互作用項$\hat{V}$として，この式を用いる。

Band Structure と Effective Mass

H_Mの 1 体の項のエネルギーにおいて，Γ-Pointの周りで波数について展開すると，

$$E_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} = E_g + \sum_{i,j}\frac{1}{m_{\mathrm{c}ij}}K_iK_j + \cdots \tag{109}$$

$$E_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}} = -\sum_{i,j}\frac{1}{m_{\mathrm{v}ij}}K_iK_j + \cdots \tag{110}$$

となる。このとき$m_{\mathrm{c}ij}$は電子の有効質量，$-m_{\mathrm{v}ij} \equiv m_{\bar{\mathrm{v}}ij}$はホールの有効質量である。

物質系と電磁場の相互作用項 $\hat{H}_{M-P}$

物質系と電磁場の相互作用項$\hat{H}_{M-P}$は，電子のバンド内遷移，バンド間遷移に対応して電子とホールのバンド内遷移，電子とホールの対生成，対消滅と形で以下のように記述される。

$$\hat{H}_{M-P} = \hat{H}_{1M-P} + \hat{H}_{2M-P} + \hat{Z}_{M-P} \tag{111}$$

ここで，$\hat{H}_{1M-P}$は電子とホールによる電流とベクトルポテンシャル$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$との相互作用を表し，ベクトルポテンシャル$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$が１乗の形で寄与する項である。また，$\hat{H}_{2M-P}$はベクトルポテンシャル$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$の２乗の項を含む相互作用を表し，$\hat{Z}_{M-P}$は電子とホールのスピンと磁場との相互作用を表す項である。以下に各項の具体的な式を記述する。

$$\begin{aligned}\hat{H}_{1M-P} =& -\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\\ &+(\mathrm{h.c.})\\ &-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\\ &-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4-\boldsymbol{K}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{+e}\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\end{aligned} \tag{112}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{2M-P} =& \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\\ &+(\mathrm{h.c.})\\ &+\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\\ &-\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4-\boldsymbol{K}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\end{aligned} \tag{113}$$

$$\begin{aligned}\hat{Z}_{M-P} =& -\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\\ &+(\mathrm{h.c.})\\ &-\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\\ &-\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4-\boldsymbol{K}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1-\boldsymbol{K}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{+e}\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\end{aligned} \tag{114}$$

電磁場のハミルトニアン

最後に電磁場のハミルトニアンは，以下のようになる。

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_P =& \int d\boldsymbol{x}^3 \frac{1}{8\pi}\left[\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)\cdot\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right) + \mathrm{rot}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\right] \\
&- \frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{K}|\mathrm{v}\boldsymbol{K}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \\
&+ \sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{K}|\mathrm{v}\boldsymbol{K}\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \\
&- \sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{K}|\mathrm{v}\boldsymbol{K}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
\tag{115}
$$

ここで，の第２項から第３項は valence band に電子が全て詰まっているときの電子と電磁場の相互作用を表している。

7 Diagonalization of one-body Hamiltonian $\hat{H}_1$

この章では，電子とホールの一体のハミルトニアン$\hat{H}_1$において，Hartree-Fock 近似で表される電子とホールのクーロン相互作用項を１体のポテンシャル項とみなすことにより，電子とホールは有効ポテンシャル中の自由な粒子として振舞うことになる。以下では，周期的な有効ポテンシャル$U^{\mathrm{eff}}_{s's}(\boldsymbol{x})$の導入と，Bloch function による$\hat{H}_1$の対角化とエネルギー固有値について説明する。

7.1 有効ポテンシャルの導入

電子とホールの１体のハミルトニアン$\hat{H}_1$における係数を以下のように周期的な有効ポテンシャル$U^{\mathrm{eff}}_{s's}(\boldsymbol{x})$を用いて表すこととする。このときこの係数を以下のように$H^{\mathrm{eff}}\left\{\lambda'\boldsymbol{K}'|\lambda\boldsymbol{K}\right\}$とする。

$$
\begin{aligned}
&H_0\left\{\lambda'\boldsymbol{K}'|\lambda\boldsymbol{K}\right\} + \sum_{\mathrm{v}''\boldsymbol{K}''}\left[V\left\{\lambda'\boldsymbol{K}',\mathrm{v}''\boldsymbol{K}''|\mathrm{v}''\boldsymbol{K}'',\lambda\boldsymbol{K}\right\} - V\left\{\lambda'\boldsymbol{K}',\mathrm{v}''\boldsymbol{K}''|\lambda\boldsymbol{K},\mathrm{v}''\boldsymbol{K}''\right\}\right] \\
&= H^{\mathrm{eff}}\left\{\lambda'\boldsymbol{K}'|\lambda\boldsymbol{K}\right\}
\end{aligned}
\tag{116}
$$

$$
H^{\mathrm{eff}}\left\{\lambda'\boldsymbol{K}'|\lambda\boldsymbol{K}\right\} = \sum_{s's}\int_v d\boldsymbol{x}b^*_{\lambda'\boldsymbol{K}'}(s',\boldsymbol{x})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U^{\mathrm{eff}}_{s's}(\boldsymbol{x})\right]b_{\lambda\boldsymbol{K}}(s,\boldsymbol{x}) \tag{117}
$$

またH^{eff}は，Bra-Cket 表示を使って，以下のようにも書くことができる。

$$H^{\mathrm{eff}}\{\lambda'\boldsymbol{K}'|\lambda\boldsymbol{K}\} =< \lambda'\boldsymbol{K}', \boldsymbol{K}'|\hat{H}_1^{\mathrm{eff}}|\lambda\boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} > \tag{118}$$

ここで$\hat{H}_1^{\mathrm{eff}}$は

$$\hat{H}_1^{\mathrm{eff}} = \frac{\hat{\boldsymbol{P}}^2}{2m} + U^{\mathrm{eff}}(\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{119}$$

であり，有効ポテンシャルを表す演算子$U^{\mathrm{eff}}(\hat{\boldsymbol{x}})$については結晶格子の周期性をもつものとし，任意の並進ベクトルに対し

$$U^{\mathrm{eff}}(\hat{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{T}) = U^{\mathrm{eff}}(\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{120}$$

が成り立つものとする。このため$\hat{H}_1^{\mathrm{eff}}$も同様の周期性をもつものとする。

このとき 1 体のハミルトニアン$\hat{H}_1$は

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathrm{c'c}} \sum_{\boldsymbol{K}'\boldsymbol{K}} < \mathrm{c}'\boldsymbol{K}', \boldsymbol{K}'|\hat{H}_1^{\mathrm{eff}}|\mathrm{c}\boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} > \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{K}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \tag{121}$$

$$- \sum_{\mathrm{v'v}} \sum_{\boldsymbol{K}'\boldsymbol{K}} < \mathrm{v}'\boldsymbol{K}', \boldsymbol{K}'|\hat{H}_1^{\mathrm{eff}}|\mathrm{v}\boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} > \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'-\boldsymbol{K}'} \tag{122}$$

$$+ \sum_{\mathrm{c'v}} \sum_{\boldsymbol{K}'\boldsymbol{K}} < \mathrm{c}'\boldsymbol{K}', \boldsymbol{K}'|\hat{H}_1^{\mathrm{eff}}|\mathrm{v}\boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} > \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{K}'}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}} \tag{123}$$

$$+ \sum_{\mathrm{v'c}} \sum_{\boldsymbol{K}'\boldsymbol{K}} < \mathrm{v}'\boldsymbol{K}', \boldsymbol{K}'|\hat{H}_1^{\mathrm{eff}}|\mathrm{c}\boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} > \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'-\boldsymbol{K}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \tag{124}$$

と表される。

7.2 有効ポテンシャルにおける Bloch function$|\lambda\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}>$と$\hat{H}_1$の対角化

適切な Bloch function$|\lambda\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}$は，以下のように$\hat{H}_1^{\mathrm{eff}}$の固有状態となることができる。

$$\left(\frac{\hat{\boldsymbol{P}}^2}{2m} + U^{\mathrm{eff}}(\hat{\boldsymbol{x}})\right)|\lambda\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}> = E_\lambda(\boldsymbol{k})|\lambda\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}> \tag{125}$$

これより$\hat{H}_1^{\mathrm{eff}}$は Bra-Cket を用いて，

$$\frac{\boldsymbol{P}^2}{2m} + U^{\mathrm{eff}}_{s's}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\lambda\boldsymbol{k}} |\lambda\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k} > E_\lambda(\boldsymbol{k}) < \lambda\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}| \tag{126}$$

と表すこともできる。

これより $\hat{H}_1$ は

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathrm{c}} \sum_{\boldsymbol{K}} E_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{K}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \tag{127}$$

$$- \sum_{\mathrm{v}} \sum_{\boldsymbol{K}} E_{\mathrm{v}}(\boldsymbol{K}) \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}} \tag{128}$$

と対角化される。

また,

$$\left\{ \left(\frac{(\boldsymbol{p} + \hbar\boldsymbol{k})^2}{2m} + U^{\mathrm{eff}}_{s's}(\boldsymbol{x}) \right) |\lambda\boldsymbol{k}> \right\} |\boldsymbol{k}> = \left\{ E_{\lambda}(\boldsymbol{k}) |\lambda\boldsymbol{k}> \right\} |\boldsymbol{k}> \tag{129}$$

であることから，括弧内だけに注目し,

$$\left(\frac{(\boldsymbol{p} + \hbar\boldsymbol{k})^2}{2m} + U^{\mathrm{eff}}_{s's}(\boldsymbol{x}) \right) |\lambda\boldsymbol{k}> = E_{\lambda}(\boldsymbol{k}) |\lambda\boldsymbol{k}> \tag{130}$$

と書く。

これを変形すると,

$$\left(\hat{h} + \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p} \right) |\lambda\boldsymbol{k}> = \epsilon_{\lambda}(\boldsymbol{k}) |\lambda\boldsymbol{k}> \tag{131}$$

ここで,

$$\hat{h} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U^{\mathrm{eff}}_{s's}(\boldsymbol{x}) \tag{132}$$

$$\epsilon_{\lambda}(\boldsymbol{k}) = E_{\lambda}(\boldsymbol{k}) - \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m} \tag{133}$$

とおく。

この $\epsilon_{\lambda}(\boldsymbol{k})$ をもちいると， $\hat{H}_1$ は

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathrm{c}} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\epsilon_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{K}) + \frac{\hbar \boldsymbol{K}^2}{2m} \right) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \tag{134}$$

$$- \sum_{\mathrm{v}} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\epsilon_{\mathrm{v}}(\boldsymbol{K}) + \frac{\hbar \boldsymbol{K}^2}{2m} \right) \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}-\boldsymbol{K}} \tag{135}$$

と表される。

8 Representation of Hamiltonian with Wannier Function

前章では，物質系の１体のハミルトニアン $\hat{H}_M$ についての説明をした。次に物質系と電磁場と相互作用 $\hat{H}_{M-P}$ について考察する。このとき電子とホールの描像として，Wannier function を用いると電磁場との相互作用についての見通しが良くなる。Wannier function の特徴は数サイト程度の広がりしか持たないことである。このため電磁場と電子もしくはホールとの相互作用において，電子やホールの Wannier function の広がり程度において電磁場を定数と見なすことができる。これにより，相互作用の項を簡単化して表すことができるようになる。

この章では，Wannier function で表したハミルトニアンを記述する。ハミルトニアン $\hat{H}$ は以下のように４つの項から成り立っていた。

$$\hat{H} = E_M + \hat{H}_M + \hat{H}_{M-P} + \hat{H}_P \tag{136}$$

以降，各項を Wannier function で表したものを記述する。その準備として，以下の各関数を定義する。

$$
\begin{aligned}
&H_0\left\{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 | \lambda_1 \boldsymbol{R}_1\right\} \\
&\quad = \sum_{s,s'} \int d^3\boldsymbol{x} w^*_{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 s}(\boldsymbol{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \delta_{s,s'} + U^{\mathrm{eff}}_{s,s'}(\boldsymbol{x}) \right] w_{\lambda_1 \boldsymbol{R}_1 s'}(\boldsymbol{x}) \\
&V\left\{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4, \lambda_3 \boldsymbol{R}_3 | \lambda_2 \boldsymbol{R}_2, \lambda_1 \boldsymbol{R}_1\right\} \\
&\quad = \sum_{s,s'} \int d^3\boldsymbol{x} \int d^3\boldsymbol{x}' w^*_{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 s}(\boldsymbol{x}) w^*_{\lambda_3 \boldsymbol{R}_3 s'}(\boldsymbol{x}') \frac{(-e)^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} w_{\lambda_2 \boldsymbol{R}_2 s'}(\boldsymbol{x}') w_{\lambda_1 \boldsymbol{R}_1 s}(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
\tag{137}
$$

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 | \lambda_1 \boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&\quad = \sum_{s} \frac{(-e)\hbar}{2im} \left[w^*_{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 s}(\boldsymbol{x}) \left(\nabla w_{\lambda_1 \boldsymbol{R}_1 s}(\boldsymbol{x})\right) - \left(\nabla w^*_{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 s}(\boldsymbol{x})\right) w_{\lambda_1 \boldsymbol{R}_1 s}(\boldsymbol{x}) \right]
\end{aligned}
\tag{138}
$$

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{I}^{+e}\left\{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 | \lambda_1 \boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&\quad = \sum_{s} \frac{(+e)\hbar}{2im} \left[w^*_{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 s}(\boldsymbol{x}) \left(\nabla w_{\lambda_1 \boldsymbol{R}_1 s}(\boldsymbol{x})\right) - \left(\nabla w^*_{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 s}(\boldsymbol{x})\right) w_{\lambda_1 \boldsymbol{R}_1 s}(\boldsymbol{x}) \right]
\end{aligned}
\tag{139}
$$

$$
\begin{aligned}
&R\left\{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 | \lambda_1 \boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&\quad = \sum_{s} \frac{(-e)^2}{2mc^2} w^*_{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 s}(\boldsymbol{x}) w_{\lambda_1 \boldsymbol{R}_1 s}(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
\tag{140}
$$

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{M}^{-e}_{S}\left\{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 | \lambda_1 \boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&\quad = \sum_{s,s'} w^*_{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 s}(\boldsymbol{x}) \frac{(-e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}_{s,s'} w_{\lambda_1 \boldsymbol{R}_1 s'}(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
\tag{141}
$$

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{M}^{+e}_{S}\left\{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 | \lambda_1 \boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&\quad = \sum_{s,s'} w^*_{\lambda_4 \boldsymbol{R}_4 s}(\boldsymbol{x}) \frac{(+e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}_{s,s'} w_{\lambda_1 \boldsymbol{R}_1 s'}(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
\tag{142}
$$

8.1 Constant E_M

定数項E_Mは次のように表される。

$$
E_M = \sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}} \left[H_0\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R} | \mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\} + \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{v}'\boldsymbol{R}'} \left[V\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}, \mathrm{v}'\boldsymbol{R}' | \mathrm{v}'\boldsymbol{R}', \mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\} - V\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}, \mathrm{v}'\boldsymbol{R}' | \mathrm{v}\boldsymbol{R}, \mathrm{v}'\boldsymbol{R}'\right\} \right] \right]
\tag{143}
$$

8.2 物質系のハミルトニアン$\hat{H}_M$

次に物質系のハミルトニアン$\hat{H}_M$は１体のハミルトニアン$\hat{H}_1$とクーロン相互作用項$\hat{V}$の和として次のように表される。

$$\hat{H}_M = \hat{H}_1 + \hat{V}$$

ここで$\hat{H}_1$については

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathrm{c}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \left(\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{K}} E_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \right) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1} \tag{144}$$

$$+ \sum_{\mathrm{v}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \left(-\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{K}} E_{\mathrm{v}-\boldsymbol{K}} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \right) \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4} \tag{145}$$

また$\hat{V}$については

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_3 \boldsymbol{R}_3} \sum_{\mathrm{c}_2 \boldsymbol{R}_2} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4, \mathrm{c}_3 \boldsymbol{R}_3 | \mathrm{c}_2 \boldsymbol{R}_2, \mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1\right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_3 \boldsymbol{R}_3} \hat{c}_{\mathrm{c}_2 \boldsymbol{R}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} \tag{146}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{v}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3} \sum_{\mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1} V\left\{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1, \mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2 | \mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3, \mathrm{v}_4 \boldsymbol{R}_4\right\} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_3 \boldsymbol{R}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2 \boldsymbol{R}_2} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1 \boldsymbol{R}_1} \tag{147}$$

$$- \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3} \sum_{\mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} \Big[V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4, \mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2 | \mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3, \mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1\right\} - V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4, \mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2 | \mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1, \mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3\right\} \Big] \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_3 \boldsymbol{R}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2 \boldsymbol{R}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} \tag{148}$$

と表される。

8.3 物質と電磁場の相互作用項$\hat{H}_{M-P}$

物質と電磁場の相互作用項$\hat{H}_{M-P}$は以下のような３項からなる。

$$\hat{H}_{M-P} = \hat{H}_{1M-P} + \hat{H}_{2M-P} + \hat{Z}_{M-P} \tag{149}$$

ここで，

$$\hat{H}_{1M-P} = -\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$
$$+\,(\mathrm{h.c.})$$
$$-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$
$$-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{+e}\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{150}$$

$$\hat{H}_{2M-P} = \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$
$$+\,(\mathrm{h.c.})$$
$$+\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$
$$-\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{151}$$

$$\hat{Z}_{M-P} = -\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$
$$+\,(\mathrm{h.c.})$$
$$-\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$
$$-\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{+e}\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{152}$$

8.4 電磁場の粗視化の導入

ここで Wannier Function の局在性を考慮し，各サイトで電磁場の平均（粗視化）を導入する。

$$\bar{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{R}) \equiv \int_{\text{1-cite-volume } v \text{ around } \boldsymbol{R}} d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{153}$$

$$\rightarrow \text{簡単のため } \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}) \text{ で表す} \tag{154}$$

$$\bar{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{R}) \equiv \int_{\text{1-cite-volume } v \text{ around } \boldsymbol{R}} d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) \tag{155}$$

$$\rightarrow \text{簡単のため } \boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}) \text{ で表す} \tag{156}$$

8.5 粗視化した電磁場を用いた光と物質の相互作用ハミルトニアン $\hat{H}_{M-P}$

上記のように，電子やホールが Wannier function で表されているとき，各相互作用項は $\boldsymbol{R}_1$ と $\boldsymbol{R}_4$ に局在する Wannier function の重なり積分の形で表現される。このため $\boldsymbol{R}_1$ と $\boldsymbol{R}_4$ は Wannier function の広がり程度しか離れることはできない。よって相互作用に出てくる空間積分においては $\boldsymbol{R}_1$ もしくは $\boldsymbol{R}_4$ の近傍のみが重要となる。その範囲において粗視化された電磁場は定数と見なすことができるので，積分の外に出すことができる。このとき電磁場の値は $\boldsymbol{R}_1$ と $\boldsymbol{R}_4$ の中間地点での値をもつものとすると，以下のように相互作用項 $\hat{H}_{M-P}$ の各項を書くことができる。

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{1M-P} = &-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\cdot\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&\qquad + (\text{h.c.}) \\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\cdot\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\cdot\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{+e}\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x})
\end{aligned} \tag{157}$$

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{2M-P} = &+ \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \cdot \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \int d^3\boldsymbol{x} R\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&\qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
&+ \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \cdot \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \int d^3\boldsymbol{x} R\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&- \sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \cdot \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \int d^3\boldsymbol{x} R\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x})
\end{aligned} \tag{158}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{Z}_{M-P} = &- \frac{1}{c} \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \cdot \int d^3\boldsymbol{x}\ \mathrm{rot}\ c\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&\qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
&- \frac{1}{c} \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \cdot \int d^3\boldsymbol{x}\ \mathrm{rot}\ c\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \\
&- \frac{1}{c} \sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \cdot \int d^3\boldsymbol{x}\ \mathrm{rot}\ c\boldsymbol{M}_S^{+e}\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x})
\end{aligned} \tag{159}
$$

ここで，記述を簡単化するため以下の関数を定義する。

$$
\frac{1}{a_{\mathrm{B}}}\left(\frac{ea_{\mathrm{B}}}{\hbar c}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\right) \equiv \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} \tag{160}
$$

このとき，$\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}$は波数の次元をもつ量であり，ベクトルポテンシャル$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$の大きさは

$$
0 < \frac{ea_{\mathrm{B}}}{\hbar c}|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})| < 1 \tag{161}
$$

であるとする。

ここで$\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}$と Bra-Cket 表現をすることで$\hat{H}_{M-P}$をなす３項を以下のように記述する。

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{1M-P} = &\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{P}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1 > \\
&\qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
&+ \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{P}}|\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1 > \\
&- \sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4} < \mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{P}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1 >
\end{aligned} \tag{162}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{2M-P} = &+ \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4 | \mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1 > \\
&+ (\mathrm{h.c.}) \\
&+ \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4 | \mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1 > \\
&- \sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4} \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} < \mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4 | \mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1 >
\end{aligned} \tag{163}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{Z}_{M-P} = &- \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \cdot < \mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4 | \frac{(-e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1 > \\
&+ (\mathrm{h.c.}) \\
&- \frac{1}{c} \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \cdot < \mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4 | \frac{(-e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1 > \\
&- \frac{1}{c} \sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4} \boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \cdot < \mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4 | \frac{(+e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1 >
\end{aligned} \tag{164}
$$

さらに，Bloch function による表現，Wannier function の直交性を用いると $\hat{H}_{M-P}$ の各項は以下のようにまとめられる。

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{1M-P} = &\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K},\boldsymbol{K} | \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{P}} | \mathrm{v}_1\boldsymbol{K},\boldsymbol{K} > \right) \\
&+ (\mathrm{h.c.}) \\
&+ \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K},\boldsymbol{K} | \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{P}} | \mathrm{c}_1\boldsymbol{K},\boldsymbol{K} > \right) \\
&- \sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{v}_4\boldsymbol{K},\boldsymbol{K} | \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{P}} | \mathrm{v}_1\boldsymbol{K},\boldsymbol{K} > \right)
\end{aligned} \tag{165}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{2M-P} = &\sum_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R},\boldsymbol{R}} \\
&- \sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R},\boldsymbol{R}}
\end{aligned} \tag{166}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{Z}_{M-P} = &- \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1 \boldsymbol{R}_1} \mathrm{rot} \boldsymbol{A} \left(\frac{\boldsymbol{R}_4 + \boldsymbol{R}_1}{2} \right) \\
&\qquad \cdot \left(\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{K}} e^{i \boldsymbol{K} (\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} | \frac{(-e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} > \right) \\
&\qquad\qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
&- \frac{1}{c} \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} \mathrm{rot} \boldsymbol{A} \left(\frac{\boldsymbol{R}_4 + \boldsymbol{R}_1}{2} \right) \\
&\qquad \cdot \left(\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{K}} e^{i \boldsymbol{K} (\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} | \frac{(-e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} > \right) \\
&- \frac{1}{c} \sum_{\mathrm{v}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1 \boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4 \boldsymbol{R}_4} \mathrm{rot} \boldsymbol{A} \left(\frac{\boldsymbol{R}_4 + \boldsymbol{R}_1}{2} \right) \\
&\qquad \cdot \left(\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{K}} e^{i \boldsymbol{K} (\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} | \frac{(+e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}, \boldsymbol{K} > \right)
\end{aligned}
\tag{167}
$$

さらに，Bloch function による表現を簡単化して以下の$\hat{H}_{M-P}$の表現を最終的に得ることができる。

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{1M-P} = &\sum_{\mathrm{c}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c} \boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c} \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i \boldsymbol{K} (\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \frac{\hbar^2}{m} \boldsymbol{K} \cdot \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \right) \\
&+ \sum_{\mathrm{v}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}} \boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}} \boldsymbol{R}_4} \left(- \frac{1}{N} e^{i \boldsymbol{K} (\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \frac{\hbar^2}{m} \boldsymbol{K} \cdot \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \right) \\
&+ \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i \boldsymbol{K} (\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K} | \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} | \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K} > \right) \\
&\qquad\qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
&+ \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i \boldsymbol{K} (\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4 \boldsymbol{K} | \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} | \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K} > \right) \\
&- \sum_{\mathrm{v}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1 \boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i \boldsymbol{K} (\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{v}_4 \boldsymbol{K} | \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} | \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K} > \right)
\end{aligned}
\tag{168}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{2M-P} = &\sum_{\mathrm{c} \boldsymbol{R}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c} \boldsymbol{R}} \hat{c}_{\mathrm{c} \boldsymbol{R}} \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R}, \boldsymbol{R}} \\
&- \sum_{\mathrm{v} \boldsymbol{R}} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}} \boldsymbol{R}} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}} \boldsymbol{R}} \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R}, \boldsymbol{R}}
\end{aligned}
\tag{169}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{Z}_{M-P} =& -\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\cdot\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K} > \right) \\
&+(\mathrm{h.c.}) \\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\cdot\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K} > \right) \\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\cdot\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{v}_4\boldsymbol{K}|\frac{(+e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K} > \right)
\end{aligned}
\tag{170}
$$

8.6 電磁場のハミルトニアン$\hat{H}_P$

Wannier function を用いて表現するとき, 電磁場のハミルトニアン$\hat{H}_P$は以下のようになる。

$$\hat{H}_P + \int d\boldsymbol{x}^3\frac{1}{8\pi}\left[\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)\cdot\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)+\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\right] \tag{171}$$

$$-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{172}$$

$$+\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{173}$$

$$-\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{174}$$

9 H_{1M-P}の式

この章では，H_{1M-P}をさらにHelman-Feynmann の定理を用いて変形する。そのためにHelman-Feynmann の定理の説明から始める。

9.1 数学的準備 : Helman-Feynmann の定理

一般に，あるパラメーターKを含むハミルトニアンを$\hat{H}(K)$とし，その固有ケット$|a;K>$，$|b;K>$と固有値$E_a(K)$，$E_b(K)$を導入する。このとき

$$\hat{H}(K)|a;K> = E_a(K)|a;K> \tag{175}$$

$$\hat{H}(K)|b;K> = E_b(K)|b;K> \tag{176}$$

$$<a;K|a;K> = 1 \tag{177}$$

$$<b;K|b;K> = 1 \tag{178}$$

$$<a;K|b;K> = 0 \tag{179}$$

となる。またこれより，

$$\frac{\partial}{\partial K} <a;K|a;K> = \left(\frac{\partial}{\partial K} <a;K|\right)|a;K> + <a;K|\left(\frac{\partial}{\partial K}|a;K>\right) = 0 \tag{180}$$

$$\frac{\partial}{\partial K} <b;K|b;K> = \left(\frac{\partial}{\partial K} <b;K|\right)|b;K> + <b;K|\left(\frac{\partial}{\partial K}|b;K>\right) = 0 \tag{181}$$

$$\frac{\partial}{\partial K} <b;K|a;K> = \left(\frac{\partial}{\partial K} <b;K|\right)|a;K> + <b;K|\left(\frac{\partial}{\partial K}|a;K>\right) = 0 \tag{182}$$

これらから以下の定理が証明される。

Helman-Feynmann の定理 1

$|a;K>$において，

$$<a;K|\frac{\partial \hat{H}(K)}{\partial K}|a;K> = \frac{\partial E_a(K)}{\partial K} \tag{183}$$

証明

$$E_a(K) =< a;K|\hat{H}(K)|a;K > \tag{184}$$

この両辺を K で微分すると,

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_a(K)}{\partial K} &=< a;K|\frac{\partial \hat{H}(K)}{\partial K}|a;K > \\ &+ E_a(K)\left(\frac{\partial}{\partial K} < a;K|\right)|a;K > + E_a(K) < a;K|\left(\frac{\partial}{\partial K}|a;K >\right) \end{aligned} \tag{185}$$

$$\begin{aligned} &=< a;K|\frac{\partial \hat{H}(K)}{\partial K}|a;K > \\ &+ E_a(K)\frac{\partial}{\partial K} < a;K|a;K > \end{aligned} \tag{186}$$

$$=< a;K|\frac{\partial \hat{H}(K)}{\partial K}|a;K > \tag{187}$$

Helman-Feynmann の定理 2

$E_a(K)$ と $E_b(K)$ が縮退している，つまり $E_a(K) = E_b(K)$ のとき，

$$< b;K|\frac{\partial \hat{H}(K)}{\partial K}|a;K > = 0 \tag{188}$$

証明

$$< b;K|\hat{H}(K)|a;K >= 0 \tag{189}$$

この両辺を K で微分すると,

$$0 = \frac{\partial}{\partial K} < b;K|\hat{H}(K)|a;K > \tag{190}$$

$$\begin{aligned} &=< b;K|\frac{\partial \hat{H}(K)}{\partial K}|a;K > \\ &+ E_a(K)\left(\frac{\partial}{\partial K} < b;K|\right)|a;K > + E_b(K) < b;K|\left(\frac{\partial}{\partial K}|a;K >\right) \end{aligned} \tag{191}$$

$$\begin{aligned} &=< b;K|\frac{\partial \hat{H}(K)}{\partial K}|a;K > \\ &+ E_a(K)\frac{\partial}{\partial K} < b;K|a;K > \end{aligned} \tag{192}$$

$$=< b;K|\frac{\partial \hat{H}(K)}{\partial K}|a;K > \tag{193}$$

Helman-Feynmann の定理（まとめ）

以上より，Helman-Feynmann の定理は以下のように表される。

$E_a(K) = E_b(K)$を満たす２つの状態$|a; K>$，$|b; K>$に対して，

$$< b; K|\frac{\partial \hat{H}(K)}{\partial K}|a; K> = \frac{\partial E_a(K)}{\partial K}\delta_{b,a} \tag{194}$$

9.2 $<\lambda_4 \boldsymbol{K}|\hat{\boldsymbol{p}}|\lambda_1 \boldsymbol{K}>$ の計算

$|\lambda \boldsymbol{K}>$は次の固有値方程式

$$\left(\hat{h} + \frac{\hbar}{m}\boldsymbol{K}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)|\lambda\boldsymbol{K}> = \epsilon_\lambda(\boldsymbol{K})|\lambda\boldsymbol{K}> \tag{195}$$

を満たす。ここで，

$$\hat{h} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U^{\text{eff}}_{s's}(\boldsymbol{x}) \tag{196}$$

$$\epsilon_\lambda(\boldsymbol{k}) = E_\lambda(\boldsymbol{k}) - \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} \tag{197}$$

であった。

ここで

$$\hat{H}(\boldsymbol{K}) \equiv \hat{h} + \frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \tag{198}$$

とおくと，$\hat{H}(\boldsymbol{K})$はパラメータを$\boldsymbol{K}$とするハミルトニアンとなるので，これに Helman-Feynmann の定理を適用すると，$\epsilon_{\lambda_4}(\boldsymbol{K}) = \epsilon_{\lambda_1}(\boldsymbol{K})$である２つの状態$|\lambda_1\boldsymbol{K}>$，$|\lambda_4\boldsymbol{K}>$において

$$\begin{aligned}< \lambda_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\hat{\boldsymbol{p}}|\lambda_1\boldsymbol{K}> &= \frac{\partial\epsilon_{\lambda_1}(\boldsymbol{K})}{\partial\boldsymbol{K}}\delta_{\lambda_4\lambda_1} \\ &= \left(\frac{\partial E_{\lambda_1}(\boldsymbol{K})}{\partial\boldsymbol{K}} - \frac{\hbar^2}{m}\boldsymbol{K}\right)\delta_{\lambda_4\lambda_1}\end{aligned} \tag{199}$$

9.3 $\hat{H}_{1M-P}$ の式

上述の計算を$\hat{H}_{1M-P}$に用いることにより，以下のような$\hat{H}_{1M-P}$の式を得ることができる。

$$\begin{aligned}\hat{H}_{1M-P} =& \sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\frac{\partial E_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{K})}{\partial \boldsymbol{K}}\cdot \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\right)\\ &+\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(-\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\frac{\partial E_{\mathrm{v}}(\boldsymbol{K})}{\partial \boldsymbol{K}}\cdot \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\right)\\ &+\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K} >\right)\\ &\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad + (\mathrm{h.c.})\\ &+\sum_{\mathrm{c}_4\neq\mathrm{c}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K} >\right)\\ &-\sum_{\mathrm{v}_4\neq\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{v}_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K} >\right)\end{aligned} \tag{200}$$

ただし，最後の２項におけるc_4とc_1についてとv_4とv_1についてのそれぞれの和は，エネルギーの縮退していない状態での和をとるものとする。

10 H_{1M-P}についての考察

この章では，H_{1M-P} の具体的な意味について考察を行う。

$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x})$ について

$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x})$は

$$b_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x}) = u_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x})\frac{1}{\sqrt{N}}e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}} \tag{201}$$

を用いると，

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x})$$
$$=\sum_s\int d^3\boldsymbol{x}\frac{(-e)\hbar}{2im}\left[b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x}-)\right)-\left(\nabla b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\right)b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right] \tag{202}$$

$$=\sum_s\int d^3\boldsymbol{x}\frac{(-e)\hbar}{im}\left[b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right)\right] \tag{203}$$
$$=\sum_{\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i(\boldsymbol{K}_4-\boldsymbol{K}_1)\boldsymbol{R}}\sum_s\int_v d^3\boldsymbol{x}\frac{(-e)\hbar}{im}\left[u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right)+i\boldsymbol{K}_1 u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right] \tag{204}$$

$$=\delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}\frac{(-e)\hbar}{im}\sum_s\int_v d^3\boldsymbol{x}\left[u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right)+i\boldsymbol{K}_1 u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right] \tag{205}$$

$$=\delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}\frac{(-e)\hbar}{im}\left[\sum_s\int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right)+i\boldsymbol{K}_1\delta_{\lambda_4,\lambda_1}\right] \tag{206}$$

(207)

ここで，Bloch Function において周期的な有効ポテンシャル$U^{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{x})$を用いて

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\delta_{ss'}+U^{\mathrm{eff}}_{ss'}(\boldsymbol{x})\right]b_{\lambda\boldsymbol{K}s'}(\boldsymbol{x})=E_{\lambda\boldsymbol{K}}b_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x}) \tag{208}$$

が成り立つものとする。ここで

$$b_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x})=u_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x})\frac{1}{\sqrt{N}}e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}} \tag{209}$$

より，１サイト内において，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla+i\boldsymbol{K})^2\delta_{ss'}+U^{\mathrm{eff}}_{ss'}(\boldsymbol{x})\right]u_{\lambda\boldsymbol{K}s'}(\boldsymbol{x})=E_{\lambda\boldsymbol{K}}u_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x}) \tag{210}$$

または

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\delta_{ss'}-i\frac{\hbar^2}{m}\boldsymbol{K}\cdot\nabla\delta_{ss'}+U^{\mathrm{eff}}_{ss'}(\boldsymbol{x})\right]u_{\lambda\boldsymbol{K}s'}(\boldsymbol{x})=\left(E_{\lambda\boldsymbol{K}}-\frac{\hbar^2\boldsymbol{K}^2}{2m}\right)u_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x}) \tag{211}$$

よって，$u_{\lambda \boldsymbol{K} s}(\boldsymbol{x})$はパラメーターを$\boldsymbol{K}$として，１サイト内で定義されるハミルトニアン

$$\hat{H}(\boldsymbol{K}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \delta_{ss'} - i\frac{\hbar^2}{m}\boldsymbol{K}\cdot\nabla\delta_{ss'} + U^{\mathrm{eff}}_{ss'}(\boldsymbol{x}) \tag{212}$$

の固有関数であり，固有値は$E_{\lambda\boldsymbol{K}} - \frac{\hbar^2\boldsymbol{K}^2}{2m}$である。つまり，

$$\hat{H}(\boldsymbol{K})u_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x}) = \left(E_{\lambda\boldsymbol{K}} - \frac{\hbar^2\boldsymbol{K}^2}{2m}\right)u_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x}) \tag{213}$$

$$\tag{214}$$

また１サイト内において正規直交関係

$$\sum_s \int_v d^3\boldsymbol{x} u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x}) u_{\lambda_1\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x}) = \delta_{\lambda_4,\lambda_1} \tag{215}$$

が成り立つ。

この$\hat{H}(\boldsymbol{K})$，$u_{\lambda\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x})$に対して Helman-Feynmann の定理を適用すると，

$$\frac{\partial\hat{H}(\boldsymbol{K})}{\partial K_i} = -i\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x_i}\delta_{ss'} \tag{216}$$

$$\frac{\partial}{\partial K_i}\left(E_{\lambda\boldsymbol{K}} - \frac{\hbar^2\boldsymbol{K}^2}{2m}\right) = \frac{\partial E_{\lambda\boldsymbol{K}}}{\partial K_i} - \frac{\hbar^2}{m}K_i \tag{217}$$

より，$E_{\lambda_4} = E_{\lambda_1}$を満たす２つのバンド$\lambda_4$，$\lambda_1$に対して，

$$\sum_s \int_v d^3\boldsymbol{x} u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x})\left(\partial_i u_{\lambda_1\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x})\right) = \frac{im}{\hbar^2}\frac{\partial E_{\lambda_1\boldsymbol{K}}}{\partial K_i}\delta_{\lambda_4,\lambda_1} - iK_i\delta_{\lambda_4,\lambda_1} \tag{218}$$

または

$$\sum_s \int_v d^3\boldsymbol{x} u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x})\left(\partial_i u_{\lambda_1\boldsymbol{K}s}(\boldsymbol{x})\right) = \frac{im}{\hbar^2}\frac{\partial E_{\lambda_1\boldsymbol{K}}}{\partial K_i}\delta_{\lambda_4,\lambda_1} - iK_i\delta_{\lambda_4,\lambda_1} \tag{219}$$

ただし，

$$\left(\frac{\partial E_{\lambda\boldsymbol{K}}}{\partial\boldsymbol{K}}\right)_i \equiv \frac{\partial E_{\lambda\boldsymbol{K}}}{\partial K_i} \tag{220}$$

である。

これらより以下の場合に分けて$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x})$の結果を表す。

(1) $\lambda_4 = \lambda_1(\equiv \lambda)$ **のとき** ($E_{\lambda_4\boldsymbol{K}} = E_{\lambda_1\boldsymbol{K}}$)

$$\begin{aligned}
&\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda\boldsymbol{K}_4|\lambda\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x}) \\
&= \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}\frac{(-e)\hbar}{im}\left[\sum_s\int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\lambda\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla u_{\lambda\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right) + i\boldsymbol{K}_1\right] && (221) \\
&= \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}\frac{(-e)\hbar}{im}\left[\frac{im}{\hbar^2}\frac{\partial E_{\lambda\boldsymbol{K}_1}}{\partial\boldsymbol{K}_1} - i\boldsymbol{K}_1 + i\boldsymbol{K}_1\right] && (222) \\
&= \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}(-e)\left[\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{\lambda\boldsymbol{K}_1}}{\partial\boldsymbol{K}_1}\right] && (223)
\end{aligned}$$

ここで，$\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{\lambda\boldsymbol{K}}}{\partial\boldsymbol{K}}$ はバンドλでの電子の群速度vを表す。

$$\boldsymbol{v}_{\lambda\boldsymbol{K}} \equiv \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{\lambda\boldsymbol{K}}}{\partial\boldsymbol{K}} \tag{224}$$

これより，

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda\boldsymbol{K}_4|\lambda\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x}) = \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}(-e)\boldsymbol{v}_{\lambda\boldsymbol{K}_1} \tag{225}$$

よって，

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\mathrm{c}\boldsymbol{K}_4|\mathrm{c}\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x}) = \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}(-e)\boldsymbol{v}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}_1} \tag{226}$$

また

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{+e}\{\mathrm{v}\boldsymbol{K}_1|\mathrm{v}\boldsymbol{K}_4\}(\boldsymbol{x}) = \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}(+e)\boldsymbol{v}_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}_1} \tag{227}$$

$$\tag{228}$$

(2) $\lambda_4 \neq \lambda_1$ **かつ**$E_{\lambda_4\boldsymbol{K}} = E_{\lambda_1\boldsymbol{K}}$ **のとき（縮退したバンド間）**

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{229}$$

(3) $\lambda_4 \neq \lambda_1$ **かつ**$E_{\lambda_4 \boldsymbol{K}} \neq E_{\lambda_1 \boldsymbol{K}}$ **のとき（縮退していないバンド間）**

このとき$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x})$ は，Helman-Feynmann の定理からはとくに変形はできないが，１サイト内での Bloch function による電気双極子と関係することがわかる。

$$\begin{aligned}&\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x})\\ &=\delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}\frac{(-e)\hbar}{im}\left[\sum_s\int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right)\right]\end{aligned} \tag{230}$$

ここで

$$[\boldsymbol{x},\hat{H}(\boldsymbol{K})] = i\hbar\left[\frac{\hbar}{im}\nabla+\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{K}\right]\delta_{s's} \tag{231}$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\left[\nabla+i\boldsymbol{K}\right] \tag{232}$$

より，

$$\nabla = \frac{m}{\hbar^2}[\boldsymbol{x},\hat{H}(\boldsymbol{K})]-i\boldsymbol{K} \tag{233}$$

これを用いて，

$$\begin{aligned}&\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x})\\ &=\delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}\frac{(-e)\hbar}{im}\left[\sum_s\int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\left(\frac{m}{\hbar^2}[\boldsymbol{x},\hat{H}(\boldsymbol{K})]-i\boldsymbol{K}\right)u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right]\end{aligned} \tag{234}$$

$$=\delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}\frac{(-e)}{i\hbar}\left[\sum_s\int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})[\boldsymbol{x},\hat{H}(\boldsymbol{K})]u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right] \tag{235}$$

$$=\delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}\frac{(-e)}{i\hbar}\left[(E_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1}-\frac{\hbar^2\boldsymbol{K}_1^2}{2m})-(E_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1}-\frac{\hbar^2\boldsymbol{K}_1^2}{2m})\right]\sum_s\int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x}) \tag{236}$$

$$=\delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}i\frac{E_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1}-E_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}\sum_s\int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})(-e)\boldsymbol{x}u_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x}) \tag{237}$$

よって，

(i) conduction-conduction band 間の遷移に対して

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x})$$

$$= \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1} i\frac{E_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}\sum_s \int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})(-e)\boldsymbol{x}u_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x}) \tag{238}$$

$$\equiv \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1} i\frac{E_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}\boldsymbol{D}_{\mathrm{c}_4\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}_1} \tag{239}$$

(ii) valence-valence band 間の遷移に対して

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{+e}\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1|\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_4\}(\boldsymbol{x})$$

$$= \delta_{\boldsymbol{K}_1,\boldsymbol{K}_4} i\frac{E_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}\sum_s \int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})(+e)\boldsymbol{x}u_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x}) \tag{240}$$

$$\overset{\text{or}}{=} \delta_{\boldsymbol{K}_1,\boldsymbol{K}_4} i\frac{E_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}\sum_s \int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})(-e)\boldsymbol{x}u_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x}) \tag{241}$$

$$\overset{\text{or}}{=} \delta_{\boldsymbol{K}_1,\boldsymbol{K}_4} i\frac{E_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}\left[\sum_s \int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})(-e)\boldsymbol{x}u_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right]^* \tag{242}$$

$$\equiv \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1} i\frac{E_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}\boldsymbol{D}^*_{\mathrm{v}_4\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1} \tag{243}$$

(iii) valence-conduction band 間の遷移に対して

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1\}(\boldsymbol{x})$$

$$= \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1} i\frac{E_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}\sum_s \int_v d^3\boldsymbol{x}u^*_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})(-e)\boldsymbol{x}u_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x}) \tag{244}$$

$$\equiv \delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1} i\frac{E_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}\boldsymbol{D}_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1} \tag{245}$$

10.1 $\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{R}_4|\lambda_1\boldsymbol{R}_1\}(\boldsymbol{x})$ について

以上の準備１，２による$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{R}_4|\lambda_1\boldsymbol{R}_1\}(\boldsymbol{x})$ の結果を表す。

$$\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\lambda_4\boldsymbol{R}_4|\lambda_1\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x})$$

$$=\sum_s\frac{(-e)\hbar}{2im}\left[w^*_{\lambda_4 s}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_4)\left(\nabla w_{\lambda_1 s}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_1)\right)-\left(\nabla w^*_{\lambda_4 s}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_4)\right)w_{\lambda_1 s}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_1)\right] \tag{246}$$

$$=\sum_{\boldsymbol{K}_4\boldsymbol{K}_1}\frac{1}{N}e^{i(\boldsymbol{K}_4\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{R}_1)}\sum_s\frac{(-e)\hbar}{2im}\left[b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\left(\nabla b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right)-\left(\nabla b^*_{\lambda_4\boldsymbol{K}_4 s}(\boldsymbol{x})\right)b_{\lambda_1\boldsymbol{K}_1 s}(\boldsymbol{x})\right] \tag{247}$$

$$=\sum_{\boldsymbol{K}_4\boldsymbol{K}_1}\frac{1}{N}e^{i(\boldsymbol{K}_4\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\lambda_4\boldsymbol{K}_4|\lambda_1\boldsymbol{K}_1\right\}(\boldsymbol{x}) \tag{248}$$

これらより，以下の場合に分けて$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{R}_4|\lambda_1\boldsymbol{R}_1\}(\boldsymbol{x})$の結果を表す。

(1) $\lambda_4=\lambda_1(\equiv\lambda)$ のとき($E_{\lambda_4\boldsymbol{K}}=E_{\lambda_1\boldsymbol{K}}$)

以下のように真電流を定義する。

$$(-e)\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{v}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}}\equiv\boldsymbol{J}^{-e}_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1) \tag{249}$$

$$(+e)\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{-i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{v}_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}}\overset{\mathrm{or}}{=}(+e)\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{v}_{\mathrm{v}-\boldsymbol{K}} \tag{250}$$

$$\equiv\boldsymbol{J}^{+e}_{\bar{\mathrm{v}}}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1) \tag{251}$$

これより，

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4|\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{J}^{-e}_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1) \tag{252}$$

(253)

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{+e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}_1|\mathrm{v}\boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{J}^{+e}_{\bar{\mathrm{v}}}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1) \tag{254}$$

(255)

(2) $\lambda_4\neq\lambda_1$ かつ$E_{\lambda_4\boldsymbol{K}}=E_{\lambda_1\boldsymbol{K}}$のとき（縮退したバンド間）

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda_4\boldsymbol{R}_4|\lambda_1\boldsymbol{R}_1\}(\boldsymbol{x})=0 \tag{256}$$

よって，電磁場によって縮退したバンド間での遷移は生じないことがわかる。

(3) $\lambda_4 \neq \lambda_1$ かつ $E_{\lambda_4 \boldsymbol{K}} \neq E_{\lambda_1 \boldsymbol{K}}$ のとき（縮退していないバンド間）

以下のように，分極波による電流を定義する。

$$\sum_{\boldsymbol{K}} \frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} i \frac{E_{\lambda_4 \boldsymbol{K}} - E_{\lambda_1 \boldsymbol{K}}}{\hbar} \boldsymbol{D}_{\lambda_4 \lambda_1 \boldsymbol{K}} \equiv \boldsymbol{J}^P_{\lambda_4 \lambda_1}(\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1) \tag{257}$$

（i）conduction-conduction band 間の遷移に対して

$$\int d^3\boldsymbol{x} \boldsymbol{I}^{-e}\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4 | \mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1\}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{K}_4 \boldsymbol{K}_1} \frac{1}{N} e^{i(\boldsymbol{K}_4 \boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{K}_1 \boldsymbol{R}_1)} \delta_{\boldsymbol{K}_4, \boldsymbol{K}_1} i \frac{E_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1}}{\hbar} D_{\mathrm{c}_4 \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}_1} \tag{258}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{K}} \frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} i \frac{E_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{K}} - E_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}}}{\hbar} D_{\mathrm{c}_4 \mathrm{c}_1 \boldsymbol{K}} \tag{259}$$

$$\equiv \boldsymbol{J}^P_{c_4 c_1}(\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1) \tag{260}$$

（ii）valence-valence band 間の遷移に対して

$$\int d^3\boldsymbol{x} \boldsymbol{I}^{+e}\{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1 | \mathrm{v}_4 \boldsymbol{R}_4\}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{K}_4 \boldsymbol{K}_1} \frac{1}{N} e^{i(\boldsymbol{K}_1 \boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{K}_4 \boldsymbol{R}_4)} \boldsymbol{I}^{+e}\left\{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1 | \mathrm{v}_4 \boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x}) \tag{261}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{K}_4 \boldsymbol{K}_1} \frac{1}{N} e^{i(\boldsymbol{K}_1 \boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{K}_4 \boldsymbol{R}_4)} \delta_{\boldsymbol{K}_4, \boldsymbol{K}_1} i \frac{E_{\mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}_1} - E_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1}}{\hbar} D^*_{\mathrm{v}_4 \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}_1} \tag{262}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{K}} \frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_4)} i \frac{E_{\mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}} - E_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}}}{\hbar} D^*_{\mathrm{v}_4 \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}} \tag{263}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{K}} \frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} i \frac{E_{\mathrm{v}_4 \boldsymbol{K}} - E_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}}}{\hbar} D^*_{\mathrm{v}_4 \mathrm{v}_1 \boldsymbol{K}} \tag{264}$$

$$\equiv \boldsymbol{J}^P_{\bar{\mathrm{v}}_4 \bar{\mathrm{v}}_1}(\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1) \tag{265}$$

（iii）conduction-valence band 間の遷移に対して

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4|\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1\}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{K}_4\boldsymbol{K}_1}\frac{1}{N}e^{i(\boldsymbol{K}_4\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{R}_1)}\delta_{\boldsymbol{K}_4,\boldsymbol{K}_1}i\frac{E_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}_1}-E_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1}}{\hbar}D_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}_1} \tag{266}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}i\frac{E_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}}-E_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}}}{\hbar}D_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}} \tag{267}$$

$$\equiv \boldsymbol{J}^{P}_{\mathrm{c}_4\bar{\mathrm{v}}_1}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1) \tag{268}$$

10.2 $\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda\boldsymbol{R}_4|\lambda\boldsymbol{R}_1\}(\boldsymbol{x})$ について有効質量 m_λ を用いた考察

バンドλにおける群速度

$$\boldsymbol{v}_{\lambda\boldsymbol{K}} \equiv \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{\lambda\boldsymbol{K}}}{\partial\boldsymbol{K}} \tag{269}$$

を用いて，

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4|\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{J}^{-e}_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1) \tag{270}$$

$$= (-e)\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{v}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} \tag{271}$$

$$= (-e)\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}}}{\partial\boldsymbol{K}} \tag{272}$$

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{+e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}_1|\mathrm{v}\boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{J}^{+e}_{\bar{\mathrm{v}}}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1) \tag{273}$$

$$= (+e)\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{-i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{v}_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}} \tag{274}$$

$$= (+e)\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{-i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}}}{\partial\boldsymbol{K}} \tag{275}$$

であるが，このとき以下のように有効質量 m_λ を用いることで，より電流の形式を具体的に示すことができる。

Γ点のまわりでの球対称な有効質量近似のとき

バンド構造はΓ点のまわりでの球対称であるとみなし，バンドの分散について有効質量近似を行うと，

$$E_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} = E_{\mathrm{c}} + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{K}^2}{2m_{\mathrm{c}}} \tag{276}$$

$$E_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}} = E_{\mathrm{v}} + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{K}^2}{2m_{\mathrm{v}}} \tag{277}$$

$$= E_{\mathrm{v}} - \frac{\hbar^2 \boldsymbol{K}^2}{2m_{\mathrm{h}}} \tag{278}$$

となる。

このとき群速度は

$$\boldsymbol{v}_{\mathrm{c}\boldsymbol{K}} = \frac{\hbar \boldsymbol{K}}{m_{\mathrm{c}}} \tag{279}$$

$$\boldsymbol{v}_{\mathrm{v}\boldsymbol{K}} = -\frac{\hbar \boldsymbol{K}}{m_{\mathrm{h}}} \tag{280}$$

と表される。

これより，

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4|\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1\right\}(\boldsymbol{x}) = \frac{(-e)\hbar}{m_{\mathrm{c}}}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{K} \tag{281}$$

$$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{+e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}_1|\mathrm{v}\boldsymbol{R}_4\right\}(\boldsymbol{x}) = -\frac{(+e)\hbar}{m_{\mathrm{h}}}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{-i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{K} \tag{282}$$

$$= \frac{(+e)\hbar}{m_{\mathrm{h}}}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{K} \tag{283}$$

となる。

ここで，次の近似を考える。

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}K_i$$
$$\sim \frac{1}{2}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{2ih}\left[\left\{e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4+h\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{R}_1)}-e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\right\}+\left\{e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}-e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-h\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{R}_1)}\right\}\right] \tag{284}$$

$$-\frac{1}{2}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{2ih}\left[\left\{e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1-h\boldsymbol{e}_i)}-e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\right\}+\left\{e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}-e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1+h\boldsymbol{e}_i)}\right\}\right] \tag{285}$$

$$= \frac{1}{2i}\left[\frac{1}{2h}\left[\{\delta_{\boldsymbol{R}_4+h\boldsymbol{e}_i,\boldsymbol{R}_1}-\delta_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\}+\{\delta_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}-\delta_{\boldsymbol{R}_4-h\boldsymbol{e}_i,\boldsymbol{R}_1}\}\right]\right.$$
$$\left.-\frac{1}{2h}\left[\{\delta_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1+h\boldsymbol{e}_i}-\delta_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\}+\{\delta_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}-\delta_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1-h\boldsymbol{e}_i}\}\right]\right] \tag{286}$$

この近似がもっとも良くなるのは，hが小さいほどよいことから，

$$h = a_i \qquad (i\text{ 方向のサイト間距離}) \tag{287}$$

のときである。つまり最隣接サイト間のホッピングによる電流を表すことになる。

また$h = 0$とすると計算が破綻することから，$\boldsymbol{R}_4 = \boldsymbol{R}_1$に対しては$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\lambda\boldsymbol{R}_4|\lambda\boldsymbol{R}_1\}(\boldsymbol{x})$に群速度を用いた式変形を適用してはいけないことがわかる。

$\boldsymbol{R}_4 = \boldsymbol{R}_1(\equiv \boldsymbol{R})$における$\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{\pm e}\{\lambda\boldsymbol{R}_4|\lambda\boldsymbol{R}_1\}(\boldsymbol{x})$についての考察

$\boldsymbol{R}_4 = \boldsymbol{R}_1(\equiv \boldsymbol{R})$のとき，

$$-\frac{1}{c}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{\pm e\hbar}\{\lambda\boldsymbol{R}|\lambda\boldsymbol{R}\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$
$$= -\frac{1}{c}\sum_s\int d^3\boldsymbol{x}\left[\frac{(\pm e)}{im}w^*_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\nabla w_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\right]\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{288}$$

ここで静磁場$\boldsymbol{B} = (0,0,B)$との相互作用を考える。このときベクトルポテンシャル$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$は

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = (-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx, 0) \tag{289}$$

と書くことができる。このとき

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{c}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{\pm e}\{\lambda\boldsymbol{R}|\lambda\boldsymbol{R}\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\\
&=-\sum_s\int d^3\boldsymbol{x}\left[w^*_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\frac{(\pm e)}{2mc}\left(\boldsymbol{x}\times\frac{\hbar}{i}\nabla\right)w_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\right]\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x})\\
&=-\sum_s\int d^3\boldsymbol{x}\left[w^*_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\frac{(\pm e)}{2mc}\left(\boldsymbol{x}\times\frac{\hbar}{i}\nabla\right)w_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\right]\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\\
&=-\sum_s\int d^3\boldsymbol{x}\left[w^*_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\frac{(\pm e)}{2mc}\left(\boldsymbol{x}\times\frac{\hbar}{i}\nabla\right)w_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\right]\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})\\
&=-\sum_s\int d^3\boldsymbol{x}\left[w^*_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\frac{(\pm e)}{2mc}\left((\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R})\times\frac{\hbar}{i}\nabla\right)w_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\right]\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})
\end{aligned}
\tag{290}
$$

これは磁気モーメントと静磁場の相互作用を表すもので，Zeemann 効果を生じさせる項である。この変形を一般のベクトルポテンシャルにも適用できるとすると，

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{c}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\{\mathrm{c}\boldsymbol{R}|\mathrm{c}\boldsymbol{R}\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\\
&\sim-\sum_s\int d^3\boldsymbol{x}\left[w^*_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\frac{(\pm e)}{2mc}\left((\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R})\times\frac{\hbar}{i}\nabla\right)w_{\lambda\boldsymbol{R}}(s,\boldsymbol{x})\right]\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})\\
&\equiv-\boldsymbol{m}_L^{\pm e}\{\lambda\boldsymbol{R}|\lambda\boldsymbol{R}\}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})
\end{aligned}
\tag{291}
$$

ここで$\boldsymbol{m}_L^{\pm e}\{\lambda\boldsymbol{R}|\lambda\boldsymbol{R}\}$

$$
\boldsymbol{m}_L^{\pm e}\{\lambda\boldsymbol{R}|\lambda\boldsymbol{R}\}=<\lambda\boldsymbol{R}|\frac{(\pm e)}{2mc}\left(\hat{\boldsymbol{x}}\times\hat{\boldsymbol{P}}\right)|\lambda\boldsymbol{R}>
\tag{292}
$$

と表される。

10.3 $\hat{H}_{1M-P}$の意味

以上の考察から，次のように$\hat{H}_{1M-P}$が表されることがわかる。

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{1M-P} = & -\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\neq\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\boldsymbol{J}_c^{-e}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1)\cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \\
& -\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\neq\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1}\boldsymbol{J}_{\bar{\mathrm{v}}}^{+e}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1)\cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \\
& -\sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\boldsymbol{m}_L^{-e}\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R}|\mathrm{c}\boldsymbol{R}\right\}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right) \\
& -\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\boldsymbol{m}_L^{+e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right) \\
& -\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\boldsymbol{J}^{P}_{\mathrm{c}_4\bar{\mathrm{v}}_1}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1)\cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
& -\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\neq\mathrm{c}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\boldsymbol{J}^{P}_{c_4c_1}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1)\cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right) \\
& -\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}_4\neq\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\boldsymbol{J}^{P}_{\bar{\mathrm{v}}_4\bar{\mathrm{v}}_1}(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1)\cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)
\end{aligned}
\tag{293}
$$

ここで，第１項と第２項は電子とホールにおける真電流と電磁場との相互作用を表し，第３項と第４項は各バンドの内部軌道角運動量による磁気モーメントと磁場との相互作用を表し，第５項から第７項はバンド間の分極波が作る電流と電磁場との相互作用を表している。

10.4 $\hat{H}_{1M-P}$についての$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動に対する大きさ

$\hat{H}_{1M-P}$は以下のようにもまとめることができる。

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{1M-P} = &-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\frac{(-e)\hbar}{m_{\mathrm{c}}}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1}\frac{(+e)\hbar}{m_{\mathrm{h}}}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{(-e)}{m}\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}> \cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad + (\mathrm{h.c.})\\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{c}_1(\epsilon_{\mathrm{c}_4}\neq\epsilon_{\mathrm{c}_1})}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{(-e)}{m}\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}> \cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}_4\mathrm{v}_1(\epsilon_{\mathrm{v}_4}\neq\epsilon_{\mathrm{v}_1})}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{v}_4\boldsymbol{K}|\frac{(+e)}{m}\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}> \cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)
\end{aligned}
\tag{294}
$$

ここで

$$
\frac{ea_{\mathrm{B}}}{\hbar c}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\frac{1}{a_{\mathrm{B}}} \equiv \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1} \tag{295}
$$

の書き換えを行うと，

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{1M-P} = &\sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\frac{\hbar^2}{m_{\mathrm{c}}}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\\
&-\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\frac{\hbar^2}{m_{\mathrm{h}}}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\\
&+\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}> \cdot\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad + (\mathrm{h.c.})\\
&+\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{c}_1(\epsilon_{\mathrm{c}_4}\neq\epsilon_{\mathrm{c}_1})}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}> \cdot\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\\
&-\sum_{\mathrm{v}_4\mathrm{v}_1(\epsilon_{\mathrm{v}_4}\neq\epsilon_{\mathrm{v}_1})}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\boldsymbol{K}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{v}_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}> \cdot\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}
\end{aligned}
\tag{296}
$$

11 ハミルトニアンの$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動による考察

この章では，今まで計算してきたハミルトニアンを$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動の視点から考察する。はじ

めに，今まで計算してきたクーロンゲージを用いた電磁場と相互作用する物質系のハミルトニアンをまとめる。

11.1 ハミルトニアン$\hat{H}$

ハミルトニアン$\hat{H}$は以下の各項に分けて記述することができる

$$\begin{aligned}\hat{H} &= E_M + \hat{H}_M + \hat{H}_{M-P} + \hat{H}_P \\ &= E_M + \hat{H}_1 + \hat{V} + \hat{H}_{1M-P} + \hat{H}_{2M-P} + \hat{Z}_{M-P} + \hat{H}_P\end{aligned} \tag{297}$$

ここで$\hat{H}_1$については

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathrm{c}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \left(\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{K}} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \left(\epsilon_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{K}) + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{K}^2}{2m} \right) \right) \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1} \tag{298}$$

$$+ \sum_{\mathrm{v}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \left(-\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{K}} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \left(\epsilon_{\mathrm{v}}(-\boldsymbol{K}) + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{K}^2}{2m} \right) \right) \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4} \tag{299}$$

また$\hat{V}$については

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_3 \boldsymbol{R}_3} \sum_{\mathrm{c}_2 \boldsymbol{R}_2} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4, \mathrm{c}_3 \boldsymbol{R}_3 | \mathrm{c}_2 \boldsymbol{R}_2, \mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1\right\} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_3 \boldsymbol{R}_3} \hat{c}_{\mathrm{c}_2 \boldsymbol{R}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} \tag{300}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{v}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3} \sum_{\mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2} \sum_{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1} V\left\{\mathrm{v}_1 \boldsymbol{R}_1, \mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2 | \mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3, \mathrm{v}_4 \boldsymbol{R}_4\right\} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3 \boldsymbol{R}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2 \boldsymbol{R}_2} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1 \boldsymbol{R}_1} \tag{301}$$

$$\begin{aligned}- \sum_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3} \sum_{\mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2} \sum_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1} \Bigg[& V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4, \mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2 | \mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3, \mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1\right\} \\ & - V\left\{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4, \mathrm{v}_2 \boldsymbol{R}_2 | \mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1, \mathrm{v}_3 \boldsymbol{R}_3\right\} \Bigg] \hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4 \boldsymbol{R}_4} \hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3 \boldsymbol{R}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2 \boldsymbol{R}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1 \boldsymbol{R}_1}\end{aligned} \tag{302}$$

と表される。

また

$$\begin{aligned}\hat{H}_{1M-P} =& \sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\frac{\partial E_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{K})}{\partial \boldsymbol{K}}\cdot\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1}\\
&+\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(-\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\frac{\partial E_{\mathrm{v}}(\boldsymbol{K})}{\partial \boldsymbol{K}}\cdot\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4}\\
&+\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}<\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}>\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad+(\mathrm{h.c.})\\
&+\sum_{\mathrm{c}_4\neq\mathrm{c}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}<\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}>\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\\
&-\sum_{\mathrm{v}_4\neq\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}<\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}>\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\end{aligned}\tag{303}$$

ただし，上式の最後の２項におけるc_4とc_1についてとv_4とv_1についてのそれぞれの和は，エネルギーの縮退していない状態での和をとるものとする。

$$\begin{aligned}\hat{H}_{2M-P} =& \sum_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R},\boldsymbol{R}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\
&-\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R},\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\end{aligned}\tag{304}$$

$$\begin{aligned}\hat{Z}_{M-P} =& -\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}<\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}>\right)\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad+(\mathrm{h.c.})\\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}<\mathrm{c}_4\boldsymbol{K}|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c}_1\boldsymbol{K}>\right)\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}<\mathrm{v}_4\boldsymbol{K}|\frac{(+e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}_1\boldsymbol{K}>\right)\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{R}_4+\boldsymbol{R}_1}{2}\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\end{aligned}\tag{305}$$

電磁場のハミルトニアン$\hat{H}_P$は

$$\hat{H}_P + \int d\boldsymbol{x}^3 \frac{1}{8\pi}\left[\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)\cdot\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right) + \mathrm{rot}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\right] \tag{306}$$

$$-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{307}$$

$$+\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{308}$$

$$-\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{309}$$

となっている。

11.2 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動と摂動の大きさ

$|\lambda\boldsymbol{K}>$は次の固有値方程式

$$\left(\hat{h} + \frac{\hbar}{m}\boldsymbol{K}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)|\lambda\boldsymbol{K}> = \epsilon_\lambda(\boldsymbol{K})|\lambda\boldsymbol{K}> \tag{310}$$

を満たす。ここで,

$$\hat{h} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U^{\mathrm{eff}}_{s's}(\boldsymbol{x}) \tag{311}$$

$$\epsilon_\lambda(\boldsymbol{k}) = E_\lambda(\boldsymbol{k}) - \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} \tag{312}$$

であった。

ここで$\hat{h}$を無摂動のハミルトニアン，$\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{K}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$を摂動項として摂動展開するのが$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動である。

摂動展開にあたり，摂動項の大きさを見積もる。

$$\boldsymbol{k} \sim \frac{1}{a_{\mathrm{B}}} \tag{313}$$

$$\boldsymbol{a} \sim \frac{1}{a_{\mathrm{B}}}\left(\frac{ea_{\mathrm{B}}}{\hbar c}A\right) \qquad (A\text{は横波ベクトルポテンシャルの大きさ}) \tag{314}$$

$$\boldsymbol{p} \sim \frac{\hbar}{a} \qquad (a\text{は Lattice Constant}) \tag{315}$$

$$\epsilon_\lambda \sim \frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{316}$$

より,

$$\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p} \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{a}{a_{\mathrm{B}}}\right) \tag{317}$$

$$\frac{1}{\epsilon-\hat{h}} \sim \frac{ma^2}{\hbar^2} \tag{318}$$

$$\frac{1}{\epsilon-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p} \sim \left(\frac{a}{a_{\mathrm{B}}}\right) \tag{319}$$

よって，$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動のエネルギーは

$$(\text{0次のエネルギー})\epsilon_\lambda \sim \frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{320}$$

$$(\text{1次のエネルギー})\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p} \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{a}{a_{\mathrm{B}}}\right) \tag{321}$$

$$(\text{2次のエネルギー})\frac{1}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{1}{\epsilon_\lambda-\hat{h}} \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{a}{a_{\mathrm{B}}}\right)^2 \sim \frac{\hbar^2}{ma_{\mathrm{B}}^2} \tag{322}$$

$$(\text{運動エネルギー})\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{a}{a_{\mathrm{B}}}\right)^2 \sim \frac{\hbar^2}{ma_{\mathrm{B}}^2} \tag{323}$$

ここでLattice constant$a$と励起子ボーア半径a_{B}の比は

$$\frac{a}{a_{\mathrm{B}}} \sim 10^{-3} \tag{324}$$

であるので，この摂動展開は十分に正当である。

11.3 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動

ここでは２次の$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動により，$|\lambda\boldsymbol{K}>$と$E_\lambda(\boldsymbol{k})$の具体的な形と，計算における諸性質を説明する。

はじめに，無摂動の状態とエネルギー固有値を以下のようにおく。

$$|\lambda\boldsymbol{k}=0> \equiv |\lambda> \tag{325}$$

$$\epsilon_\lambda(\boldsymbol{k}=0) \equiv \epsilon_\lambda \tag{326}$$

このとき，摂動項$\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$の２次まで考慮した$|\lambda\boldsymbol{K}>$と$\epsilon_\lambda(\boldsymbol{k})$は

$$|\lambda\boldsymbol{k}> = C_{\lambda\boldsymbol{k}}|\lambda> + \frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda> + \frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda> \tag{327}$$

$$\epsilon_\lambda(\boldsymbol{k}) = \epsilon_\lambda + <\lambda|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda> \tag{328}$$

または，

$$E_\lambda(\boldsymbol{k}) = \epsilon_\lambda + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} + <\lambda|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda> \tag{329}$$

である。

ただし，$|\lambda>$のパリティを考慮して，１次の摂動のエネルギーは

$$<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda> = 0 \qquad (\epsilon_{\lambda'} = \epsilon_\lambda \text{ のとき}) \tag{330}$$

を仮定した。

また，縮退した$|\lambda>$の部分空間に対して，

$$<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda> = \delta_{\lambda'\lambda}<\lambda|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>$$
$$(\epsilon_{\lambda'} = \epsilon_\lambda \text{ のとき}) \tag{331}$$

のように，２次の摂動エネルギーが対角化されるように$|\lambda>$を選ぶ。

ここで，

$$C_{\lambda\boldsymbol{k}} = 1 - \frac{1}{2}D(\lambda\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k}) \tag{332}$$

であり，$D(\lambda'\boldsymbol{k}'|\lambda\boldsymbol{k})$は次のように定義する。

$$D(\lambda'\boldsymbol{k}'|\lambda\boldsymbol{k}) =<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda')}}{\epsilon_{\lambda'} - \hat{h}}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda> \tag{333}$$

また，$D(\lambda)$は同じエネルギーϵ_λをもつバンドインデックスの集合をあらわし，$\bar{\phi}_{D(\lambda)}$は次のように定義される。

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_{D(\lambda)} &\equiv \sum_{\lambda'\notin D(\lambda)} |\lambda'><\lambda'| \\ &\overset{\text{or}}{\equiv} \hat{1} - \sum_{\lambda'\in D(\lambda)} |\lambda'><\lambda'|\end{aligned}$$

$|\lambda\boldsymbol{k}>$が$\hat{h} + \frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$の固有状態となることの証明

以下のように，$|\lambda\boldsymbol{k}>$は２次の摂動の範囲で$\hat{h} + \frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$の固有状態になっていることを証明することができる。

$$
\begin{aligned}
&\left(\hat{h}+\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\right)|\lambda\boldsymbol{k}>\\
=&\left(\hat{h}+\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\right)\\
&\times\left[|\lambda>\left(1-\frac{1}{2}D(\lambda\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k})\right)+\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>+\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\right]\\
=&\hat{h}|\lambda>\left(1-\frac{1}{2}D(\lambda\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k})\right)\\
&+\hat{h}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>+\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&+\hat{h}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>+\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
=&\hat{h}|\lambda>\left(1-\frac{1}{2}D(\lambda\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k})\right)\\
&+\hat{h}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>+(\epsilon_\lambda-\hat{h})\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&+\hat{h}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>+(\epsilon_\lambda-\hat{h})\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&+\sum_{\lambda'\in D(\lambda)}|\lambda'><\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
=&\epsilon_\lambda|\lambda>\left(1-\frac{1}{2}D(\lambda\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k})\right)\\
&+\epsilon_\lambda\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&+\epsilon_\lambda\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&+|\lambda><\lambda|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
=&\left(\epsilon_\lambda+<\lambda|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\right)\\
&\times\left[|\lambda>\left(1-\frac{1}{2}D(\lambda\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k})\right)+\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>+\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\right]\\
=&\left(\epsilon_\lambda+<\lambda|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\right)|\lambda\boldsymbol{k}>
\end{aligned}
\tag{334}
$$

$D(\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k})$の性質

以下の議論において，$D(\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k})$性質を理解しておくことは重要であるため，幾つかの性質を記述する。

はじめに，準備として２次の摂動まで考慮した$<\lambda'\boldsymbol{k}'|\lambda\boldsymbol{k}>$の式を与える。

$$
\begin{aligned}
<\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k}> = \delta_{\epsilon_{\lambda'}\epsilon_\lambda}&\Big[\delta_{\lambda'\lambda} + (1-\delta_{\lambda'\lambda})\,D(\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k})\Big] \\
&+\left(1-\delta_{\epsilon_{\lambda'}\epsilon_\lambda}\right)\Bigg[D(\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k}) \\
&\qquad + <\lambda'|\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda> \\
&\qquad + <\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda')}}{\epsilon_{\lambda'}-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda')}}{\epsilon_{\lambda'}-\hat{h}}|\lambda>\Bigg]
\end{aligned}
\tag{335}
$$

(i) $\epsilon_{\lambda'}\neq\epsilon_\lambda$**のとき**

$$<\lambda'\boldsymbol{k}|\left(\hat{h}+\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\right)|\lambda\boldsymbol{k}>=\epsilon_\lambda(\boldsymbol{k})<\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k}> \tag{336}$$

$$<\lambda'\boldsymbol{k}|\left(\hat{h}+\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\right)|\lambda\boldsymbol{k}>=\epsilon_{\lambda'}(\boldsymbol{k})<\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k}> \tag{337}$$

これらの両辺引き算をすると

$$(\epsilon_{\lambda'}(\boldsymbol{k})-\epsilon_\lambda(\boldsymbol{k}))<\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k}>=0 \tag{338}$$

より，

$$<\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k}>=0 \tag{339}$$

このことは，以下の計算を用いて，摂動展開した$|\lambda'\ >$と$|\lambda\ >$で直接$<\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k}>$を計算してもわかる。

$$
\begin{aligned}
&D(\lambda'\boldsymbol{k}|\lambda\boldsymbol{k})\\
&\quad +<\lambda'|\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&\quad +<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda')}}{\epsilon_{\lambda'}-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda')}}{\epsilon_{\lambda'}-\hat{h}}|\lambda>\\
&=<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda')}}{\epsilon_{\lambda'}-\hat{h}}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&\quad +<\lambda'|\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&\quad +<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda')}}{\epsilon_{\lambda'}-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda')}}{\epsilon_{\lambda'}-\hat{h}}|\lambda>\\
&=\sum_{\lambda''\notin D(\lambda')D(\lambda)}\frac{1}{\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_{\lambda''}}\frac{1}{\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda''}}<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda''><\lambda''|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&\quad +\sum_{\lambda''\notin D(\lambda')D(\lambda)}\frac{1}{\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda'}}\frac{1}{\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda''}}<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda''><\lambda''|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&\quad +\sum_{\lambda''\notin D(\lambda')D(\lambda)}\frac{1}{\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_{\lambda''}}\frac{1}{\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_\lambda}<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda''><\lambda''|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&\quad +\sum_{\lambda''\notin D(\lambda)\lambda''\in D(\lambda')}\frac{1}{\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda'}}\frac{1}{\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda''}}<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda''><\lambda''|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&\quad +\sum_{\lambda''\notin D(\lambda')\lambda''\in D(\lambda)}\frac{1}{\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_{\lambda''}}\frac{1}{\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_\lambda}<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda''><\lambda''|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&=\sum_{\lambda''\notin D(\lambda')D(\lambda)}\left[\frac{1}{\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_{\lambda''}}\frac{1}{\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda''}}+\frac{1}{\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda'}}\frac{1}{\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda''}}+\frac{1}{\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_{\lambda''}}\frac{1}{\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_\lambda}\right]\\
&\qquad\qquad\times<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda''><\lambda''|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&=\sum_{\lambda''\notin D(\lambda')D(\lambda)}\left[\frac{(\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_\lambda)-(\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_{\lambda''})+(\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda''})}{(\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_{\lambda''})(\epsilon_\lambda-\epsilon_{\lambda''})(\epsilon_{\lambda'}-\epsilon_\lambda)}\right]<\lambda'|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda''><\lambda''|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>\\
&\quad =0
\end{aligned}
\tag{340}
$$

ただし，

$$
<\lambda''|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda>=0 \qquad (\epsilon_{\lambda''}=\epsilon_\lambda\ \text{のとき}) \tag{341}
$$

を用いた。

よってこのとき，$D(\lambda' \boldsymbol{k}|\lambda \boldsymbol{k})$については

$$D(\lambda' \boldsymbol{k}|\lambda \boldsymbol{k}) \neq 0 \tag{342}$$

ということしかわからない。

(ii) $\epsilon_{\lambda'} = \epsilon_\lambda$かつ$\epsilon_{\lambda'}(\boldsymbol{k}) \neq \epsilon_\lambda(\boldsymbol{k})$のとき

(i) と同じ議論により，

$$< \lambda' \boldsymbol{k}|\lambda \boldsymbol{k} > = 0 \tag{343}$$

また，今の条件において

$$< \lambda' \boldsymbol{k}|\lambda \boldsymbol{k} > = D(\lambda' \boldsymbol{k}|\lambda \boldsymbol{k}) \tag{344}$$

となるので，

$$D(\lambda' \boldsymbol{k}|\lambda \boldsymbol{k}) = 0 \tag{345}$$

(iii) $\epsilon_{\lambda'} = \epsilon_\lambda$かつ$\epsilon_{\lambda'}(\boldsymbol{k}) = \epsilon_\lambda(\boldsymbol{k})$かつ$\lambda' \neq \lambda$のとき

このとき次の２つの状態

$$|\lambda' \boldsymbol{k} > = C_{\lambda' \boldsymbol{k}}|\lambda' > + \frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}} \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}|\lambda' > + \frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}} \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p} \frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}} \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}|\lambda' > \tag{346}$$

$$|\lambda \boldsymbol{k} > = C_{\lambda \boldsymbol{k}}|\lambda > + \frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}} \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}|\lambda > + \frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}} \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p} \frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}} \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}|\lambda > \tag{347}$$

は縮退したバンドを表している。これらについては適切な線形結合により必ず互いに直交した状態をつくれるので，

$$< \lambda' \boldsymbol{k}|\lambda \boldsymbol{k} > = D(\lambda' \boldsymbol{k}|\lambda \boldsymbol{k}) = 0 \tag{348}$$

11.4 有効質量m_λの導入

２次の摂動エネルギーにおいて，

$$< \lambda|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda > \equiv \frac{\hbar^2}{2}\left[\left(\frac{1}{m_\lambda}\right)_{ij} - \frac{1}{m}\delta_{ij}\right]k_i k_j \tag{349}$$

とすると，

$$E_\lambda(\boldsymbol{k}) = \epsilon_\lambda + \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_\lambda}\right)_{ij}k_i k_j \tag{350}$$

となる。

さらに簡単のため，以降

$$\left(\frac{1}{m_\lambda}\right)_{ij} = \frac{1}{m_\lambda}\delta_{ij} \tag{351}$$

とし，

$$< \lambda|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D(\lambda)}}{\epsilon_\lambda - \hat{h}}\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}|\lambda > \equiv \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2}\left(\frac{1}{m_\lambda} - \frac{1}{m}\right) \tag{352}$$

また

$$E_\lambda(\boldsymbol{k}) = \epsilon_\lambda + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_\lambda} \tag{353}$$

とする。

また，

$$\frac{\partial E_\lambda(\boldsymbol{k})}{\partial\boldsymbol{k}} = \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}}{m_\lambda} \tag{354}$$

となる。

12 2次の$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動によるハミルトニアン

12.1 ハミルトニアン$\hat{H}$

$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動を２次まで考慮した場合，ハミルトニアン$\hat{H}$は以下のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned}\hat{H} &= E_M + \hat{H}_M + \hat{H}_{M-P} + \hat{H}_P \\ &= E_M + \hat{H}_1 + \hat{V} + \hat{H}_{1M-P} + \hat{H}_{2M-P} + \hat{Z}_{M-P} + \hat{H}_P \end{aligned} \tag{355}$$

ここで$\hat{H}_1$については

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathrm{c}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \left(\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{K}} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \left(\epsilon_{\mathrm{c}} + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{K}^2}{2m_{\mathrm{c}}} \right) \right) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1} \tag{356}$$

$$+ \sum_{\mathrm{v}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \left(\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{K}} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \left(-\epsilon_{\mathrm{v}} + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{K}^2}{2m_{\mathrm{h}}} \right) \right) \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4} \tag{357}$$

また$\hat{V}$については

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{R}_3} \sum_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{R}_2} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4, \mathrm{c}_3\boldsymbol{R}_3 | \mathrm{c}_2\boldsymbol{R}_2, \mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{R}_3} \hat{c}_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{R}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \tag{358}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3} \sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2} \sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1} V\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1, \mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2 | \mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3, \mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4\right\} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_3\boldsymbol{R}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2\boldsymbol{R}_2} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \tag{359}$$

$$\begin{aligned} - \sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3} \sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2} \sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \Bigg[& V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4, \mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2 | \mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3, \mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\} \\ & - V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4, \mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2 | \mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1, \mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3\right\} \Bigg] \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_3\boldsymbol{R}_3} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2\boldsymbol{R}_2} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \end{aligned} \tag{360}$$

と表される。ここで$\hat{V}$の大きさは

$$\frac{\hbar^2}{m a_{\mathrm{B}}^2} = \frac{\hbar^2}{m a^2} \left(\frac{a}{a_{\mathrm{B}}} \right)^2 \tag{361}$$

より，２次の摂動の大きさである。

また

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{1M-P} = & \sum_{\mathrm{c}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \frac{\hbar^2 \boldsymbol{K}}{m_{\mathrm{c}}} \cdot \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \right) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1} \\
& + \sum_{\mathrm{v}} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} \frac{\hbar^2 \boldsymbol{K}}{m_{\mathrm{h}}} \cdot \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \right) \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4} \\
& + \sum_{\mathrm{c}_4 \mathrm{v}_1} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4 | \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} | \mathrm{v}_1 > \right) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
& + \sum_{\mathrm{c}_4 \neq \mathrm{c}_1} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{c}_4 | \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} | \mathrm{c}_1 > \right) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \\
& - \sum_{\mathrm{v}_4 \neq \mathrm{v}_1} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} < \mathrm{v}_4 | \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} | \mathrm{v}_1 > \right) \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4} \\
& + \sum_{\mathrm{c}_4 \mathrm{v}_1} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} d^{(2)}(\mathrm{c}_4, \mathrm{v}_1, \boldsymbol{K}, \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1}) \right) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad + (\mathrm{h.c.}) \\
& + \sum_{\mathrm{c}_4 \neq \mathrm{c}_1} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} d^{(2)}(\mathrm{c}_4, \mathrm{c}_1, \boldsymbol{K}, \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1}) \right) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4} \hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \\
& - \sum_{\mathrm{v}_4 \neq \mathrm{v}_1} \sum_{\boldsymbol{R}_4 \boldsymbol{R}_1} \sum_{\boldsymbol{K}} \left(\frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{R}_1)} d^{(2)}(\mathrm{v}_4, \mathrm{v}_1, \boldsymbol{K}, \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1}) \right) \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}
\end{aligned} \tag{362}
$$

ただし，上式の$\sum_{\mathrm{c}_4 \neq \mathrm{c}_1}$と$\sum_{\mathrm{v}_4 \neq \mathrm{v}_1}$は，エネルギーの縮退していない状態での和をとるものとする。また$d^{(2)}(\lambda_4, \lambda_1, \boldsymbol{K}, \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4, \boldsymbol{R}_1})$は摂動の２次の大きさをもつ項である。また上式の第１, ２項は２次の大きさ，第３項から第５項は１次の大きさをもつ項である。

次に

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{2M-P} = & \sum_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R}, \boldsymbol{R}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
& - \sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}} \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R}, \boldsymbol{R}} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}
\end{aligned} \tag{363}
$$

は２次の大きさをもつ。

波数を$\frac{1}{a_{\mathrm{B}}}$程度であるとし，

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{m}_S^{\pm e}\left\{\lambda'\boldsymbol{R}'|\lambda\boldsymbol{R}\right\}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\frac{\boldsymbol{R}'+\boldsymbol{R}}{2}) &\sim \frac{e\hbar}{2mc}\times qA \qquad (q\text{ は電磁波の波数 }q<<\frac{1}{a_{\mathrm{B}}})\\
&= \frac{e\hbar}{2mc}\times q\left(\frac{ea_{\mathrm{B}}}{\hbar c}A\right)\frac{\hbar c}{ea_{\mathrm{B}}}\\
&= \frac{\hbar^2}{2ma_{\mathrm{B}}^2}(qa_{\mathrm{B}})\left(\frac{ea_{\mathrm{B}}}{\hbar c}A\right)\\
&\sim (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\text{ 摂動の 2 次のエネルギー})\times(qa_{\mathrm{B}})\left(\frac{ea_{\mathrm{B}}}{\hbar c}A\right)
\end{aligned}
\tag{364}
$$

よって，$<\lambda'\boldsymbol{k}|\frac{(\pm e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\lambda\boldsymbol{k}>$は$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動において 0 次で十分である。よって

$$
\begin{aligned}
\hat{Z}_{M-P} = &-\sum_{\mathrm{c_4v_1}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c_4}|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v_1}>\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c_4}\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}}\\
&+(\mathrm{h.c.})\\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c_4c_1}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c_4}|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c_1}>\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c_4}\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c_1}\boldsymbol{R}}\\
&-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v_4v_1}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{v_4}|\frac{(+e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v_1}>\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}}
\end{aligned}
\tag{365}
$$

電磁場のハミルトニアン$\hat{H}_P$は

$$
\hat{H}_P+\int d\boldsymbol{x}^3\frac{1}{8\pi}\left[\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)\cdot\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)+\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\right] \tag{366}
$$

$$
-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{367}
$$

$$
+\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{368}
$$

$$
-\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}_S^{-e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{369}
$$

となっている。

13 2 次の$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動による$\hat{H}$の全体像

以上において，$\hat{H}$の各項について摂動の大きさも含めて記述をした。ここでは各項をまとめ，全体像を記述する。ただし，電磁場による物質系の励起において，バンドギャップに比べ電磁場の振動数が十分小さいとすると，バンド間遷移をともなう 2 次の摂動項は

無視して良い。これより$\hat{H}$を以下のように記述する。

$$\hat{H}=\sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\left(\epsilon_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2\boldsymbol{K}^2}{2m_{\mathrm{c}}}+\frac{\hbar^2\boldsymbol{K}}{m_{\mathrm{c}}}\cdot\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}+\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\right)\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}_1} \tag{370}$$

$$+\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{K}}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}\left(-\epsilon_{\mathrm{v}}+\frac{\hbar^2\boldsymbol{K}^2}{2m_{\mathrm{h}}}-\frac{\hbar^2\boldsymbol{K}}{m_{\mathrm{h}}}\cdot\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}+\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{a}^2_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\right)\right)\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}_1}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{R}_3}\sum_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{R}_2}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4,\mathrm{c}_3\boldsymbol{R}_3|\mathrm{c}_2\boldsymbol{R}_2,\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\}\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_3\boldsymbol{R}_3}\hat{c}_{\mathrm{c}_2\boldsymbol{R}_2}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1} \tag{371}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3}\sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2}\sum_{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1}V\left\{\mathrm{v}_1\boldsymbol{R}_1,\mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2|\mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3,\mathrm{v}_4\boldsymbol{R}_4\right\}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3\boldsymbol{R}_3}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2\boldsymbol{R}_2}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1} \tag{372}$$

$$-\sum_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\sum_{\mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3}\sum_{\mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2}\sum_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}\Big[V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4,\mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2|\mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3,\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1\right\}$$
$$-V\left\{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4,\mathrm{v}_2\boldsymbol{R}_2|\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1,\mathrm{v}_3\boldsymbol{R}_3\right\}\Big]\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_3\boldsymbol{R}_3}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_2\boldsymbol{R}_2}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}$$
$$+\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}<\mathrm{c}_4|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_1>\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}$$
$$+(\mathrm{h.c.})$$
$$+\sum_{\mathrm{c}_4\neq\mathrm{c}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}<\mathrm{c}_4|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{c}_1>\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}_1}$$
$$-\sum_{\mathrm{v}_4\neq\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}_4\boldsymbol{R}_1}\sum_{\boldsymbol{K}}\left(\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{K}(\boldsymbol{R}_4-\boldsymbol{R}_1)}<\mathrm{v}_1|\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{R}_1}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\mathrm{v}_4>\right)\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}_4}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}_1}$$
$$-\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c}_4|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}_1>\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}}$$
$$+(\mathrm{h.c.})$$
$$-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{c}_4\mathrm{c}_1}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c}_4|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c}_1>\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}_4\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c}_1\boldsymbol{R}}$$
$$-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}_4\mathrm{v}_1}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{v}_1|\frac{(+e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}_4>\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}_4\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}_1\boldsymbol{R}}$$
$$+\int d\boldsymbol{x}^3\frac{1}{8\pi}\left[\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)\cdot\left(-4\pi c\boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\right)+\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\right] \tag{373}$$

$$-\frac{1}{c}\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{I}^{-e}\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{374}$$

$$+\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}R\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{375}$$

$$-\sum_{\mathrm{v}\boldsymbol{R}}\int d^3\boldsymbol{x}\boldsymbol{M}^{-e}_S\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R}|\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}(\boldsymbol{x})\cdot\mathrm{rot}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{376}$$

14 ２次の$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動における電磁場の振動数が物質系のエネルギーギャップより十分小さい場合にたいする有効ハミルトニアン

前章で述べたハミルトニアンはベクトルポテンシャルの２乗の項に現れる質量が電子の裸の質量になっていた。これは Kira らが指摘している通りであるが，一方で Luttinger らはこの質量が有効質量となるハミルトニアンを用いている。本章では，前章までに導かれた Kira 型のハミルトニアンが電磁場の振動数が物質系のエネルギーギャップより十分小さい場合にたいする有効ハミルトニアンを考えることにより，Luttinger 型のハミルトニアンに一致することを示す。

14.1 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$摂動における２次までの Kira 型のハミルトニアン$\hat{H}$

$$
\begin{aligned}
\hat{H} =& \sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\epsilon_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{c}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{m_{\mathrm{c}}}\right)(-\boldsymbol{a})^2\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\
&-\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\epsilon_{\mathrm{v}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{v}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{m_{\mathrm{v}}}\right)(-\boldsymbol{a})^2\right)\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\\
&+\sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}(\epsilon_{\mathrm{c}'}\neq\epsilon_{\mathrm{c}})}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}_{\mathrm{c}'\mathrm{c}}+h^{(2)}(\mathrm{c}',\mathrm{c},\boldsymbol{k},\boldsymbol{a})\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\
&-\sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}(\epsilon_{\mathrm{v}'}\neq\epsilon_{\mathrm{v}})}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}_{\mathrm{v}'\mathrm{v}}+h^{(2)}(\mathrm{v}',\mathrm{v},\boldsymbol{k},\boldsymbol{a})\right)\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\\
&+\sum_{\mathrm{c}'\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}_{\mathrm{c}'\mathrm{v}}+h^{(2)}(\mathrm{c}',\mathrm{v},\boldsymbol{k},\boldsymbol{a})\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\\
&+\sum_{\mathrm{v}'\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}_{\mathrm{v}'\mathrm{c}}+h^{(2)}(\mathrm{v}',\mathrm{c},\boldsymbol{k},\boldsymbol{a})\right)\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\
&+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R},\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'|\mathrm{c}'\boldsymbol{R}',\mathrm{c}\boldsymbol{R}\right\}\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\
&+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R},\mathrm{v}'\boldsymbol{R}'|\mathrm{v}'\boldsymbol{R}',\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\\
&-\sum_{\mathrm{cv}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R},\mathrm{v}\boldsymbol{R}'|\mathrm{v}\boldsymbol{R}',\mathrm{c}\boldsymbol{R}\right\}\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\
&-\sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c}'|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\
&-\sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{v}'|\frac{(+e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}}\\
&-\sum_{\mathrm{c}'\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c}'|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^\dagger_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}}\hat{d}^\dagger_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\\
&-\sum_{\mathrm{v}'\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{v}'|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\
&\equiv\hat{H}^{(0)}+\hat{H}^{(1)}+\hat{V}+\hat{M}
\end{aligned}
\tag{377}
$$

ここで,

$$\hat{H}^{(0)}=\sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\epsilon_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{c}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{m_{\mathrm{c}}}\right)(-\boldsymbol{a})^2\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}$$
$$-\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\epsilon_{\mathrm{v}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{v}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{m_{\mathrm{v}}}\right)(-\boldsymbol{a})^2\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'} \tag{378}$$

$$\hat{H}^{(1)}=+\sum_{\mathrm{c'c}(\epsilon_{\mathrm{c'}}\neq\epsilon_{\mathrm{c}})}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}_{\mathrm{c'c}}+h^{(2)}(\mathrm{c'},\mathrm{c},\boldsymbol{k},\boldsymbol{a})\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c'}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}$$
$$-\sum_{\mathrm{v'v}(\epsilon_{\mathrm{v'}}\neq\epsilon_{\mathrm{v}})}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}_{\mathrm{v'v}}+h^{(2)}(\mathrm{v'},\mathrm{v},\boldsymbol{k},\boldsymbol{a})\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}$$
$$+\sum_{\mathrm{c'v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}_{\mathrm{c'v}}+h^{(2)}(\mathrm{c'},\mathrm{v},\boldsymbol{k},\boldsymbol{a})\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c'}\boldsymbol{R}'}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}$$
$$+\sum_{\mathrm{v'c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}_{\mathrm{v'c}}+h^{(2)}(\mathrm{v'},\mathrm{c},\boldsymbol{k},\boldsymbol{a})\right)\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \tag{379}$$

$$\hat{V}+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{c'c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R},\mathrm{c'}\boldsymbol{R}'|\mathrm{c'}\boldsymbol{R}',\mathrm{c}\boldsymbol{R}\right\}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c'}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c'}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{v'v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R},\mathrm{v'}\boldsymbol{R}'|\mathrm{v'}\boldsymbol{R}',\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}$$
$$-\sum_{\mathrm{cv}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R},\mathrm{v}\boldsymbol{R}'|\mathrm{v}\boldsymbol{R}',\mathrm{c}\boldsymbol{R}\right\}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \tag{380}$$

$$\hat{M}=-\sum_{\mathrm{c'c}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c'}|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c'}\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}$$
$$-\sum_{\mathrm{v'v}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{v'}|\frac{(+e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}}$$
$$-\sum_{\mathrm{c'v}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c'}|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c'}\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}$$
$$-\sum_{\mathrm{v'c}}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{v'}|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \tag{381}$$

14.2 各 valence band と conduction band にあるホールと電子の数が常に保存する部分空間における $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 摂動 2 次の有効ハミルトニアン $\hat{H}$

考慮する部分空間として，各 valence band と conduction band 内にあるホールと電子において,縮退したバンド内のホールもしくは電子の合計数が一定である状態の空間をとる。このとき $\hat{H}^{(1)}$ はエネルギーの違うバンド間遷移，またはホールと電子の対生成，対消滅を表すが，大きさが$\frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{a}{a_{\mathrm{B}}}\right)=$（１次のエネルギーの大きさ）であるので，これを２次摂動の形で $\hat{H}^{(0)}$ に繰り込む。これを $\hat{H}^{(0)}_{\mathrm{eff}}$ とする。このとき $h^{(2)}(\lambda',\lambda,\boldsymbol{k},\boldsymbol{a})$ は３次の効果になるので無視することができる。これより $\hat{H}^{(0)}_{\mathrm{eff}}$ は

$$
\begin{aligned}
\hat{H}^{(0)}_{\mathrm{eff}} =& \sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\Bigg[\epsilon_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{c}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{m_{\mathrm{c}}}\right)(-\boldsymbol{a})^2 \\
&\qquad + <\mathrm{c}|\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D_{(\mathrm{c})}}}{\epsilon_{\mathrm{c}}-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}|\mathrm{c}>\Bigg]\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
&- \sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\Bigg[\epsilon_{\mathrm{v}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{v}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{m_{\mathrm{v}}}\right)(-\boldsymbol{a})^2 \\
&\qquad + <\mathrm{v}|\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}\frac{\bar{\phi}_{D_{(\mathrm{v})}}}{\epsilon_{\mathrm{v}}-\hat{h}}\frac{\hbar}{m}(-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{p}|\mathrm{v}>\Bigg]\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'} \\
=& \sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\Bigg[\epsilon_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{c}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{m_{\mathrm{c}}}\right)(-\boldsymbol{a})^2 \\
&\qquad +\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_{\mathrm{c}}}-\frac{1}{m}\right)(-\boldsymbol{a})^2\Bigg]\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
&- \sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\Bigg[\epsilon_{\mathrm{v}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{v}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{m_{\mathrm{v}}}\right)(-\boldsymbol{a})^2 \\
&\qquad +\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_{\mathrm{v}}}-\frac{1}{m}\right)(-\boldsymbol{a})^2\Bigg]\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'} \\
=& \sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\Bigg[\epsilon_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{c}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2\Bigg]\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
&- \sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\Bigg[\epsilon_{\mathrm{v}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{v}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2\Bigg]\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}
\end{aligned}
$$

よって，このときハミルトニアン $\hat{H}$ は

$$\begin{aligned}\hat{H}=&\sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\epsilon_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{c}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\&-\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\epsilon_{\mathrm{v}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{v}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\\&+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R},\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'|\mathrm{c}'\boldsymbol{R}',\mathrm{c}\boldsymbol{R}\right\}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\&+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R},\mathrm{v}'\boldsymbol{R}'|\mathrm{v}'\boldsymbol{R}',\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\\&-\sum_{\mathrm{cv}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R},\mathrm{v}\boldsymbol{R}'|\mathrm{v}\boldsymbol{R}',\mathrm{c}\boldsymbol{R}\right\}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\&-\sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}(\epsilon_{\mathrm{c}'}=\epsilon_{\mathrm{c}})}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c}'|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\&-\sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}(\epsilon_{\mathrm{v}'}=\epsilon_{\mathrm{v}})}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{v}'|\frac{(+e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}}\end{aligned}\tag{382}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}=&\sum_{\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})}\left(\epsilon_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{c}}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\&+\sum_{\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}\frac{1}{N}e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}')}\left(-\epsilon_{\mathrm{v}}-\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{v}}}(-\boldsymbol{k}-\boldsymbol{a})^2\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\\&+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R},\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'|\mathrm{c}'\boldsymbol{R}',\mathrm{c}\boldsymbol{R}\right\}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\&+\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{v}\boldsymbol{R},\mathrm{v}'\boldsymbol{R}'|\mathrm{v}'\boldsymbol{R}',\mathrm{v}\boldsymbol{R}\right\}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\\&-\sum_{\mathrm{cv}}\sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}}V\left\{\mathrm{c}\boldsymbol{R},\mathrm{v}\boldsymbol{R}'|\mathrm{v}\boldsymbol{R}',\mathrm{c}\boldsymbol{R}\right\}\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\&-\sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}(\epsilon_{\mathrm{c}'}=\epsilon_{\mathrm{c}})}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{c}'|\frac{(-e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{c}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}}\hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}}\\&-\sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}(\epsilon_{\mathrm{v}'}=\epsilon_{\mathrm{v}})}\sum_{\boldsymbol{R}}<\mathrm{v}'|\frac{(+e)\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}|\mathrm{v}>\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{R}\right)\hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}}\hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}}\end{aligned}\tag{383}$$

$$
\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{\mathrm{c}} \sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}} \frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{R})} \left[\epsilon_{\mathrm{c}} + \frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{c}}} \left(\boldsymbol{k} - \frac{(-e)}{\hbar c} \boldsymbol{A} \left(\frac{\boldsymbol{R}'+\boldsymbol{R}}{2} \right) \right)^2 \right] \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}'} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
& + \sum_{\mathrm{v}} \sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}} \frac{1}{N} e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}')} \left[-\epsilon_{\mathrm{v}} + \frac{\hbar^2}{2(-m_{\mathrm{v}})} \left(\boldsymbol{k} - \frac{(+e)}{\hbar c} \boldsymbol{A} \left(\frac{\boldsymbol{R}'+\boldsymbol{R}}{2} \right) \right)^2 \right] \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}} \sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}} V \left\{ \mathrm{c}\boldsymbol{R}, \mathrm{c}'\boldsymbol{R}' | \mathrm{c}'\boldsymbol{R}', \mathrm{c}\boldsymbol{R} \right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'} \hat{c}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}} \sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}} V \left\{ \mathrm{v}\boldsymbol{R}, \mathrm{v}'\boldsymbol{R}' | \mathrm{v}'\boldsymbol{R}', \mathrm{v}\boldsymbol{R} \right\} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \\
& - \sum_{\mathrm{cv}} \sum_{\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}} V \left\{ \mathrm{c}\boldsymbol{R}, \mathrm{v}\boldsymbol{R}' | \mathrm{v}\boldsymbol{R}', \mathrm{c}\boldsymbol{R} \right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
& - \sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}(\epsilon_{\mathrm{c}'}=\epsilon_{\mathrm{c}})} \sum_{\boldsymbol{R}} < \mathrm{c}' | \frac{(-e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{c} > \mathrm{rot} \boldsymbol{A} (\boldsymbol{R}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
& - \sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}(\epsilon_{\mathrm{v}'}=\epsilon_{\mathrm{v}})} \sum_{\boldsymbol{R}} < \mathrm{v}' | \frac{(+e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{v} > \mathrm{rot} \boldsymbol{A} (\boldsymbol{R}) \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}}
\end{aligned}
\tag{384}
$$

以上のように，電磁場の振動数がバンドギャップに比べて十分小さく，キャリアのバンド間遷移を考えない部分空間を考えると，そのとき現れる有効ハミルトニアンが Luttinger 型になることが示された。

また上記ハミルトニアンは格子を連続体に近似したとき，以下のようにも書かれることを指摘しておく。

$$
\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{\mathrm{c}} \int d\boldsymbol{R}^3 \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \left[\epsilon_{\mathrm{c}} - \frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{c}}} \left(\nabla - i \frac{(-e)}{\hbar c} \boldsymbol{A} (\boldsymbol{R}) \right)^2 \right] \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
& + \sum_{\mathrm{v}} \int d\boldsymbol{R}^3 \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \left[-\epsilon_{\mathrm{v}} - \frac{\hbar^2}{2(-m_{\mathrm{v}})} \left(\nabla - i \frac{(+e)}{\hbar c} \boldsymbol{A} (\boldsymbol{R}) \right)^2 \right] \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}} \int d\boldsymbol{R}^3 \int d\boldsymbol{R}'^3 V \left\{ \mathrm{c}\boldsymbol{R}, \mathrm{c}'\boldsymbol{R}' | \mathrm{c}'\boldsymbol{R}', \mathrm{c}\boldsymbol{R} \right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'} \hat{c}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}'} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}} \int d\boldsymbol{R}^3 \int d\boldsymbol{R}'^3 V \left\{ \mathrm{v}\boldsymbol{R}, \mathrm{v}'\boldsymbol{R}' | \mathrm{v}'\boldsymbol{R}', \mathrm{v}\boldsymbol{R} \right\} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}'} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \\
& - \sum_{\mathrm{cv}} \int d\boldsymbol{R}^3 \int d\boldsymbol{R}'^3 V \left\{ \mathrm{c}\boldsymbol{R}, \mathrm{v}\boldsymbol{R}' | \mathrm{v}\boldsymbol{R}', \mathrm{c}\boldsymbol{R} \right\} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}'} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
& - \sum_{\mathrm{c}'\mathrm{c}(\epsilon_{\mathrm{c}'}=\epsilon_{\mathrm{c}})} \int d\boldsymbol{R}^3 < \mathrm{c}' | \frac{(-e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{c} > \mathrm{rot} \boldsymbol{A} (\boldsymbol{R}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{c}'\boldsymbol{R}} \hat{c}_{\mathrm{c}\boldsymbol{R}} \\
& - \sum_{\mathrm{v}'\mathrm{v}(\epsilon_{\mathrm{v}'}=\epsilon_{\mathrm{v}})} \int d\boldsymbol{R}^3 < \mathrm{v}' | \frac{(+e)\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} | \mathrm{v} > \mathrm{rot} \boldsymbol{A} (\boldsymbol{R}) \hat{d}^{\dagger}_{\bar{\mathrm{v}}\boldsymbol{R}} \hat{d}_{\bar{\mathrm{v}}'\boldsymbol{R}}
\end{aligned}
\tag{385}
$$

15 研修の報告と謝辞

本研修は２０１５年４月から２０１６年３月まで，大阪大学大学院理学研究科物理学専攻小川研究室, 東洋大学理工学部柴田研究室にて行いました。大阪大学には２週間に一度，大阪に２泊しながら大学に通って研究を行いました。大阪大学では主に教授の小川先生，准教授の浅野先生，ポスドクの山田さん，馬場さん，ドクターコース学生の比嘉さん，マスターコース学生の八木さんと議論をさせていただきました。そこでの議論や物理学会での話から，現在 THz 光の発展がめざましいことを教えていただいたことは，本研修の中心的な役割を果たしました。本研修では私が学生時代に勉強していた半導体中の励起子についてさらに勉強をすることにしたが，そこに THz 光の光がどのように関わるかについて調べることにしました。大阪大学のコンピュータを使わせていただき，励起子が THz のエバネッセント光によって重心運動が生じるかについて計算をおこないましたが，まだ結論が出ていないので，紀要にはそのベースとなる理論的基礎付けを書くことにしたのみにとどめました。THz のエバネッセント光による励起子重心運動についての計算は今後も続けていく予定です。大阪大学の皆様には，部屋やコンピュータの提供から議論にいたるまで大変お世話になりました。　東洋大学には２週間に１度通い，柴田先生と多くの議論をしていただき，光と物質についての関係について様々なこと教えていただきました。ありがとうございます。　また研修中に２回山梨大学の准教授である石川先生，埼玉医科大学の鈴木先生にも議論をしていただき，大変感謝をしています。石川先生には半導体と光の理論についての様々な先端の情報を教えていただき，また論文等も紹介していただきました。また鈴木先生には様々な視点から本研究のコメントをいただきました。　このように研修中には多くの方にお世話になり，多くの勉強をすることができました。感謝申し上げます。また本校の教職員の皆さまには，このような大変貴重な勉強の機会を与えていただきましたことに大変感謝しております。ありがとうございました。

関連図書

［1］ H.Haug and S.W.Koch,QUANTUM THEORY OF THE OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF SEMICONDUCTORS,World Scientific (1990).

［2］ Schmitt-Rink,Chemla,Miller,Adv.Phys. **38**, 89 (1989).

［3］ Chemla and Shah, Nature(London) **411**, 549 (2001).

［4］ Koch,Kira,Khitrova,Gibbs,Nat.Mater **5**, 523 (2006)

［5］ Kira,Jahnke,Koch,Phys.Rev.Lett. **81**, 3263 (1998)

［6］ Kaindl,Carnahan,Hagele,Lovenich,Chemla,Nature (London) **423**, 734 (2003)

［7］ Galbraith,Chari,Pellegrini,Phillips,Dent,van der Meer,Clarke,Kar,Buller,Pidgeon,Murdin,Allam,Strasser, Phys.Rev.B **71**, 073302 (2005)

［8］ Huber,Schmid,Shen,Chemla,Kaindl,Phys.Rev.Lett. **96**, 017402 (2006)

［9］ Kira,Hoyer,Stroucken,Koch, Phys. Rev. Lett. **87**, 176401 (2001)

［10］ Kira, Koch, Phys. Rev. Lett. **93**, 076402 (2004)

［11］ Kira,Koch, Phys. Rev. A **73**, 013813 (2006)

［12］ Kira, Koch, Phys. Rev. Lett. **93**, 076402 (2004)

［13］ Kira,Koyer,Koch,Solid State Commun. **129**, 733 (2004)

［14］ Kuhler,Huber,Leitenstorfer,Semicond.Sci.Technol. **20**,S128 (2005)

［15］ Kobler,Tredicucci,Beltram,Beere,Linfield,Davies,Ritchie,Iotti,Rossi,Nature(London) **417**, 156 (2002)

［16］ J.M.Luttinger and M.Kohn,Phys,Rev. **97**, 869 (1955).

［17］ M.Kira and Koch,Phys.Stat.Sol, 238 (2003).