

Tight Binding Model

2012 年 3 月 13 日

1 イントロ

サイトに固定された原子核の周りの電子の状態を決定する近似法の一つ Tight Binding Model、いわゆる「強束縛近似」について解説。

基本的には、ブロッホ状態を持ってきて、それをサイト毎に変調して作ったワニエ状態で展開する。

2 Tight Binding Model

電子-電子相互作用は、電子がサイトに束縛されていて距離があるため十分弱く無視できると仮定する。

1 粒子ハミルトニアン

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_i V(r - R_i)$$

R_i は i 番目の原子核の座標

Wannier 状態とは、Bloch 状態 $|\psi_{k,n}\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 |\psi_{k,n}\rangle &= E_n |\psi_{k,n}\rangle \\ T(R) |\psi_{k,n}\rangle &= e^{ik \cdot R} |\psi_{k,n}\rangle\end{aligned}$$

に対し、(R は結晶並進ベクトル)

$$|\psi_{i,n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k^{B.Z} e^{-ik \cdot R_i} |\psi_{k,n}\rangle$$

によって定義される。

これより、Bloch 状態、Wannier 状態を基底にとったときのそれぞれの第二量子化の Creation/Annihilation Operators は

$$a_{k\sigma n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{ik \cdot R_i} a_{i\sigma n}^\dagger$$

の関係があり、Bloch 状態が一粒子ハミルトニアンを対角化することから、第二量子化では

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \sum_{k\sigma n} E_n a_{k\sigma n}^\dagger a_{k\sigma n} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{ii'} \sum_{k\sigma n} e^{ik \cdot (R_i - R_{i'})} E_n a_{i\sigma n}^\dagger a_{i'\sigma n} \\
&= \sum_{ii'} \sum_{n\sigma} t_{ii'n} a_{i\sigma n}^\dagger a_{i'\sigma n} \\
t_{ii'n} &= \sum_k^{B.Z} e^{ik \cdot (R_i - R_{i'})} E_n
\end{aligned}$$

と、Wannier 基底での第二量子化の表式が得られた。

多くの場合、十分低温では n が大きいところへの励起する確率は小さいので、無視して $n = 0$ のみを考える。

この $t_{i,i',n}$ のことを、hopping 行列という。

ここからさらに、 i, i' が最近接、次最近接・・・とどこまで取るかで近似の精度が変わる。

最近接の場合は Ising model に対応している。

3 $n=0$, 最近接だけとった場合

この時、ハミルトニアンは第二量子化で $E = t_{ii}$ として、

$$\hat{H}_0 = \sum_{\langle ii' \rangle} \sum_{\sigma} t_{ii'} a_{i\sigma}^\dagger a_{i'\sigma} + E \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$$

これをフーリエ変換すると

$$\begin{aligned}
a_{k\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-ik \cdot R_i} a_{i\sigma} \\
a_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik \cdot R_i} a_{k\sigma}
\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}
\sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} &= \frac{1}{N} \sum_{i\sigma} \sum_{kk'} e^{i(k-k') \cdot R_i} a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma} \\
&= \sum_{kk'} \delta(k - k') a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma} \\
&= \sum_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}
\end{aligned}$$

次の式中で出てくる a は、最近接サイトの相対位置 (途中で σ の和は省略した)。

$$\begin{aligned}
\sum_{\langle ii' \rangle} t_{ii'} a_{i\sigma}^\dagger a_{i'\sigma} &= \frac{1}{N} \sum_{\langle ii' \rangle} \sum_{kk'} t_{ii'} e^{i(k \cdot r_i - k' \cdot r_{i'})} a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\langle ii' \rangle} \sum_{kk'} t_{ii'} e^{i(k \cdot (r_i - r_{i'}) + (k - k') \cdot r_{i'})} a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma} \\
&= \frac{1}{N} \sum_i \sum_a \sum_{kk'} t_a e^{i(-k \cdot a + (k - k') \cdot r_i)} a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma} \\
&= \sum_a \sum_{kk'} \delta(k - k') t_a e^{-ik \cdot a} a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma} \\
&= \sum_{k\sigma} \sum_a t_a e^{-ik \cdot a} a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \\
&= \sum_{k\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \\
\varepsilon_k &= \sum_a t_a e^{-ik \cdot a}
\end{aligned}$$

となり対角化できる。

4 疑問点とか

そのうち具体的な計算例とかを追加する。

電子-電子相互作用を考慮した系は、**強相関電子系**と呼ばれ、mott 転移等の面白い性質を持つ。

キーワード:mott 転移,mott 絶縁体,wigner 結晶