

7. 局在基底、ワニエ関数、強束縛模型

7.1 局在基底

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2} + v(r)\right) \varphi_j(r) = \varepsilon_j \varphi_j(r) \quad \text{を解く} \\ \text{(数値的)}$$

$$\varphi_j(r) = \sum_{\alpha} \varphi_{j\alpha} \chi_{\alpha}(r) \quad \text{基底展開}$$

$$\rightarrow \int d^3r \chi_{\alpha}^*(r) \times \quad h_{\alpha\alpha'} = \int d^3r \chi_{\alpha}^*(r) \left(-\frac{\nabla^2}{2} + v(r)\right) \chi_{\alpha'}(r)$$

$$\sum_{\alpha'} h_{\alpha\alpha'} \varphi_{j\alpha'} = \varepsilon_j \sum_{\alpha'} S_{\alpha\alpha'} \varphi_{j\alpha'}$$

$$S_{\alpha\alpha'} = \int d^3r \chi_{\alpha}^*(r) \chi_{\alpha'}(r)$$

$$\hat{h} |j\rangle = \varepsilon_j \hat{S} |j\rangle \quad \text{一般化固有値問題}$$

重なり行列 $\leftarrow$

$\Updownarrow$

標準固有値問題

一般的に局在基底は直交しない

・ガウシアン $\exp(-\sigma r^2)$

・原子基底 $\exp(-r/a_0)$: LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals)

$\rightarrow$ 生成・消滅演算子に問題

$$\hat{\psi}(r) = \sum_{\alpha} \chi_{\alpha}(r) \hat{c}_{\alpha}$$

$$\text{双対な関数 } \bar{\chi}_{\alpha}(r) \Rightarrow \int d^3r \bar{\chi}_{\alpha}^*(r) \chi_{\alpha'}(r) = \delta_{\alpha\alpha'}$$

$$c_{\alpha} = \int d^3r \bar{\chi}_{\alpha}^*(r) \psi(r)$$

$$\{c_{\alpha}, c_{\alpha'}^{\dagger}\} = \int d^3r \bar{\chi}_{\alpha}^*(r) \int d^3r' \bar{\chi}_{\alpha'}(r') \{\psi(r), \psi^{\dagger}(r')\} \\ = \int d^3r \bar{\chi}_{\alpha}^*(r) \bar{\chi}_{\alpha'}(r) \neq \delta_{\alpha\alpha'}$$

・一般化固有値問題解法 α 解法 (のりこ)

$$\hat{S}|\tilde{\chi}_j\rangle = S_j|\tilde{\chi}_j\rangle \longrightarrow \hat{S} = \sum_j S_j |\tilde{\chi}_j\rangle \langle \tilde{\chi}_j|$$

$$\longrightarrow \hat{S}^{1/2} = \sum_j \sqrt{S_j} |\tilde{\chi}_j\rangle \langle \tilde{\chi}_j| \quad S^{-1/2} = \sum_j \frac{1}{\sqrt{S_j}} |\tilde{\chi}_j\rangle \langle \tilde{\chi}_j|$$

$$\hat{h} \hat{S}^{-1/2} \hat{S}^{1/2} |j\rangle = \epsilon_j \hat{S}^{1/2} \hat{S}^{-1/2} |j\rangle$$

$$\hat{\tilde{h}} |\tilde{j}\rangle = \epsilon_j |\tilde{j}\rangle \quad \text{Löwdin 直交化}$$

$$\hat{\tilde{h}} \equiv \hat{S}^{-1/2} \hat{h} \hat{S}^{-1/2}$$

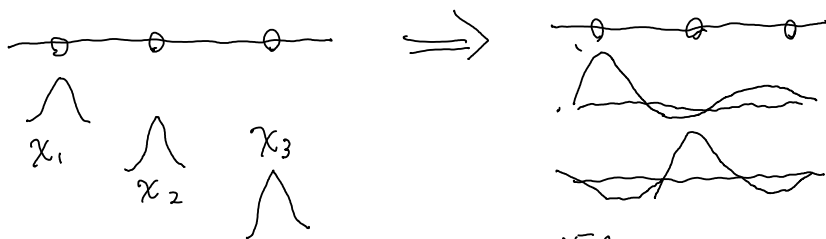
$$|\tilde{j}\rangle \equiv \hat{S}^{1/2} |j\rangle \longrightarrow |j\rangle = \hat{S}^{-1/2} |\tilde{j}\rangle$$

$$\varphi_{j\alpha} = \sum_{\alpha'} (S^{-1/2})_{\alpha\alpha'} \tilde{\varphi}_{j\alpha'}$$

$$\varphi_j(r) = \sum_{\alpha} \tilde{\chi}_{\alpha}(r) \tilde{\varphi}_{j\alpha}$$

$$\text{直交化した基底} \quad \sum_{\alpha'} \chi_{\alpha'}(r) (S^{-1/2})_{\alpha\alpha'}$$

$$\hat{\psi}(r) = \sum_{\alpha} \tilde{c}_{\alpha} \tilde{\chi}_{\alpha}(r) \longrightarrow \{\tilde{c}_{\alpha}, \tilde{c}_{\alpha'}^{\dagger}\} = \delta_{\alpha\alpha'}$$



振動しながら減衰

局在性 $\longleftrightarrow$ 直交性

トレードオフ

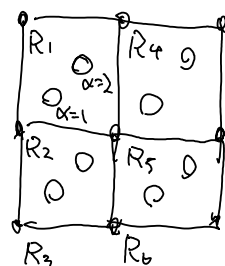
7.2 周期系

・フーリエの定理

$$\varphi_{kj}(r+R) = e^{ikR} \varphi_{kj}(r)$$

$$\Downarrow$$

$$\varphi_{kj}(r) = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{uc}}}} \sum_R \sum_{\alpha} e^{ikR} \chi_{\alpha}(r-R) \varphi_{kj\alpha}$$



$$\begin{aligned}
 (\text{確}) \quad \varphi_{kj}(r+R') &= \frac{1}{\sqrt{N_{uc}}} \sum_R \sum_{\alpha} e^{ikR} \chi_{\alpha}(r+R'-R) \varphi_{kja} \\
 &\quad \Downarrow \begin{array}{l} R-R' \rightarrow R \\ R \rightarrow R+R' \end{array} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N_{uc}}} e^{ikR'} \sum_R \sum_{\alpha} e^{ikR} \chi_{\alpha}(r-R) \varphi_{kjaR} = e^{ikR'} \varphi_{kj}(r)
 \end{aligned}$$

・ 周期局在基底

$$\chi_{k\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N_{uc}}} \sum_R e^{ikR} \chi_{\alpha}(r-R)$$

$$h_{k\alpha\alpha'} \equiv \int d^3r \chi_{k\alpha}^* \left\{ -\frac{\nabla^2}{2} + v(r) \right\} \chi_{k\alpha'}$$

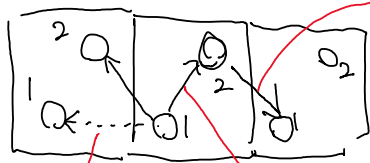
$$S_{k\alpha\alpha'} \equiv \int d^3r \chi_{k\alpha}^* \chi_{k\alpha'}$$

$$\hat{h}_k |kj\rangle = \hat{S}_k |kj\rangle$$

↑ 重なり行列も k に依存する

・ $\hat{h}_k, \hat{S}_k$ の行列要素の計算のやり方

$$\begin{array}{ccc}
 R=-a & R=0 & R=a
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{l}
 t_{21}(a) = \int d^3r \chi_1^*(r-a) \left(-\frac{\nabla^2}{2} + v \right) \chi_2(r) \\
 t_{12}(0) = \int d^3r \chi_2^*(r) \left(-\frac{\nabla^2}{2} + v \right) \chi_1(r)
 \end{array}$$



$$t_{11}(-a) = \int d^3r \chi_1(r+a) \left(-\frac{\nabla^2}{2} + v \right) \chi_1(r)$$

↓ ホッピング (飛び移り) 積分、最近接、第一近接、第二近接、...

$$\text{オンサイト項} \quad t_{11}(0) \equiv E_1 = \int d^3r \chi_1(r) \left(-\frac{\nabla^2}{2} + v \right) \chi_1(r)$$

$$\hat{h}_k = \begin{pmatrix} t_{11}(0) + t_{11}(a)e^{-ika} + t_{11}(-a)e^{ika} & t_{12}(0) + t_{12}(-a)e^{ika} \\ t_{21}(0) + t_{21}(a)e^{-ika} & t_{22}(0) + t_{22}(a)e^{-ika} + t_{22}(-a)e^{ika} \end{pmatrix}$$

ホッピング係数 $t_{\alpha\alpha'}(R)$ に因子 e^{-ikR} をかけて足し合わせる
 $\hat{S}_k$ についても同様

7.3 Wannier (フーリエ) 関数

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2} + v(r)\right) \varphi_{kj}(r) = \varepsilon_{kj} \varphi_{kj}(r)$$

$$\hat{\psi}(r) = \sum_{kj} \hat{C}_{kj} \varphi_{kj}(r) \quad \varphi_{kj} \text{ の展開}$$

↓ 代わりに

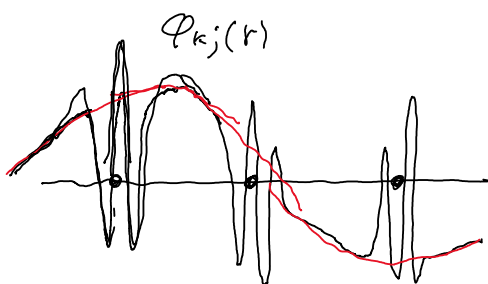
$\varphi_{kj}(r)$ の (中々制限された個数の) 重ね合わせで "新たな一体系基底" 目的

- ・ 多体ハミルトニアンを見通し良くする
- ・ Berry (ハミルトン) 位相による分極, トポロジカル指数
↑ この議論ではやらな

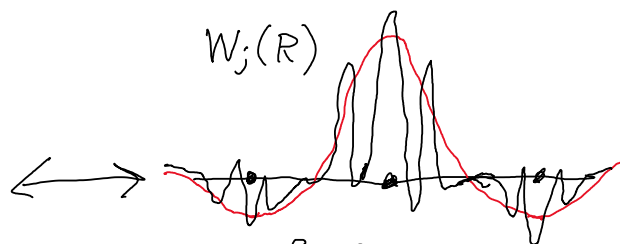
$$W_j(r-R) = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{Nuc}}}} \sum_k e^{-ikR} \varphi_{kj}(r) : \text{フーリエ関数}$$

$$\varphi_{kj}(r) = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{Nuc}}}} \sum_R e^{ikR} W_j(r-R) : \text{フーリエ関数}$$

フーリエ波数 $k \leftrightarrow$ 格子点 R に関するフーリエ変換



波数 k の包絡線



ある R に局在

・規格直交性 $\int d^3r W_j(r-R) W_{j'}(r-R') = \delta_{RR'} \delta_{jj'}$

$\varphi_{kj}(r)$ は一様な位相因子 $U_{kj} = e^{i\theta_{kj}}$ の自由度有り

$$\longrightarrow W_j(r-R) = \frac{1}{\sqrt{N_{uc}}} \sum_k e^{-ikR} U_{kj} \varphi_{kj}(r)$$

↑ 形式一意性は無い

さらに自由度を上げることも可能

$$W_j(r-R) = \frac{1}{\sqrt{N_{uc}}} \sum_{kj} e^{ikR} U_{kjj'} \varphi_{kjj'}(r)$$

↑ ユニタリ行列 $\hat{U} \hat{U}^\dagger = I$

ある原子の特定の軌道 (O の $2p_x$ など) と重なりが
大きくなる様にする (最射影) なども可能

・最后在 $\tau=1$ 関数

スプレッド (拡がり) 関数

$$\Omega = \sum_j \langle (r - \langle r \rangle_j)^2 \rangle_j = \sum_j (\langle r^2 \rangle_j - \langle r \rangle_j^2)$$

$$\langle r \rangle_j = \int d^3r W_j^2(r) r \quad \langle r^2 \rangle_j = \int d^3r W_j^2(r) r^2$$

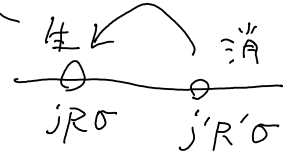
最もコンパクトになる様に $U_{kjj'}$ を調整する

7.4 Hubbard $\tau=1$ 関数

$$\hat{\psi}_\sigma(r) = \sum_{Rj} \hat{c}_{jR\sigma} W_j(r-R) \quad \{c_{jR}, c_{j'R'}^\dagger\} = \delta_{jj'} \delta_{RR'}$$

多体ハミルトニアンをユニタリ変換

$$\hat{H}^{(1)} = \sum_{\sigma} \sum_{RR'jj'} C_{jR\sigma}^{\dagger} C_{j'R'\sigma} t_{jj'}(R-R')$$



$$t_{jj'}(R-R') = \int d^3r W_j(r-R) \left(-\frac{\nabla^2}{2} + V(r) \right) W_{j'}(r-R')$$

↑ 格子ハクトルに関しては、差にしか依存しない

$$\hat{H}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{RR_2R_3R_4} \sum_{jj_2j_3j_4} U_{R_1R_2R_3R_4}^{jj_2j_3j_4} C_{j_1R_1\sigma}^{\dagger} C_{j_2R_2\sigma'}^{\dagger} C_{j_3R_3\sigma'} C_{j_4R_4\sigma}$$

$$U_{R_1R_2R_3R_4}^{jj_2j_3j_4} = \int d^3r \int d^3r' \frac{W_{j_1}(r-R_1) W_{j_2}(r'-R_2) W_{j_3}(r'-R_3) W_{j_4}(r-R_4)}{|r-r'|}$$

↑ これは一般性を失わない

↓ 極端なケース：同じ位置の $W_j(r-R)$ にしか有限の U が現れない (最局在の極限)

$$U_{jR} = \int d^3r \int d^3r' \frac{|W_j(r-R)|^2 |W_j(r'-R)|^2}{|r-r'|}$$

オンサイトクーロン積分

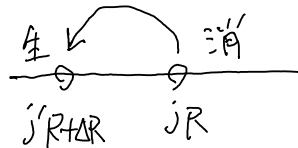
$$\hat{H}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{jR} \sum_{\sigma\sigma'} U_{jR} C_{jR\sigma}^{\dagger} C_{jR\sigma'}^{\dagger} C_{jR\sigma'} C_{jR\sigma}$$

↓ $\sigma=\sigma'$ の項は同じ消滅演算子が連続するのて 0

$$= \sum_{jR} U_{jR} \hat{n}_{jR\uparrow} \hat{n}_{jR\downarrow}$$

同じ jR を $\uparrow\downarrow$ 2つの電子が占有すると U_{jR} 増エネルギー

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{j,j',R,R'} t_{jj'}(\Delta R) C_{j',R+\Delta R}^{\dagger} C_{j,R\sigma} + \sum_{j,R} U_{jR} n_{jR\uparrow} n_{jR\downarrow}$$



・拡張ハバートモデル

$\bigcup_{R_1 R_2 R_3 R_4}^{j_1 j_2 j_3 j_4}$ の積分で、同じ積分変数 r, r' に属する $W_j(r-R)$

は同じと取る。 ($j_1=j_4, j_2=j_3$)

$$V_{jRj'R'} = \int d^3r \int d^3r' \frac{|W_j(r-R)|^2 |W_{j'}(r'-R')|^2}{|r-r'|}$$

オ>サイト-2-は積分

格子に関しては、 $R-R'$ (差) のみ依存

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{jRj'R'} \sum_{\sigma\sigma'} V_{jRj'R'} C_{jR\sigma}^{\dagger} C_{j'R'\sigma'}^{\dagger} C_{j'R'\sigma'} C_{jR\sigma}$$

$$= \sum_{jR} U_{jR} n_{jR\uparrow} n_{jR\downarrow} + \sum_{(jR) \neq (j'R')} V_{jRj'R'} \underbrace{\hat{n}_{jR} \hat{n}_{j'R'}}_{n_{jR\uparrow} + n_{jR\downarrow}}$$

・金森-ハバートモデル

$j_1=j_2, j_3=j_4$ または $j_1=j_3, j_2=j_4$ の項を省略
 $R_1=R_2, R_3=R_4$ $R_1=R_3, R_2=R_4$

$$J_{jRj'R'} = \int d^3r \int d^3r' \frac{W_j(r-R) W_{j'}(r-R') W_{j'}(r'-R') W_j(r'-R)}{|r-r'|}$$

直接交換積分

$$\hat{H}^{(2)} = \hat{H}_{\text{exHub}}^{(2)} \leftarrow \text{抗磁 III'-I 模型}$$

$$+ \sum_{(jR) \neq (j'R)} J_{j'R+\Delta R, jR} \left\{ -n_{j'R+\Delta R \uparrow} n_{jR \uparrow} - n_{j'R+\Delta R \downarrow} n_{jR \downarrow} \right. \\ \left. \text{Hund (7-1) 項} \right.$$

$$+ C_{j'R+\Delta R \uparrow}^\dagger C_{jR \downarrow}^\dagger C_{j'R+\Delta R \downarrow} C_{jR \uparrow} + \text{h.c.} \text{ 直接交換項}$$

$$+ C_{j'R+\Delta R \uparrow}^\dagger C_{j'R+\Delta R \downarrow}^\dagger C_{jR \downarrow} C_{jR \uparrow} + \text{h.c.} \left. \right\} \text{ 平行交換項}$$

