

タイトバインディング模型

山影 相

2015年1月15日

概要

電子状態をタイトバインディング模型によって計算する方法について。幾つかの例と、タイトバインディング模型自体の導出についても説明する。

目次

1	一般論	1
1.1	常伝導体のタイトバインディング模型 . . .	1
1.2	有限次元鎖	1
2	具体例	2
2.1	単純次元鎖	2
2.2	副格子の導入-ポリアセチレンを例として	2
2.3	正方格子	3
2.4	有限次元鎖	3
3	タイトバインディング模型の導出	4
3.1	常伝導状態	4
3.2	超伝導状態	4
4	パッケージ解説	5
4.1	有限鎖のハミルトニアンを代入する関数 hmlt1d	5
4.2	エネルギーバンド図のためのデータ出力する関数 bddg	5

1 一般論

まず一般的、形式的な定義をしておく。実際の用法に関しては、次節に述べる例を見るのが良い。

1.1 常伝導体のタイトバインディング模型

格子点 n における電子の演算子を $c_{n,\alpha}$, $\{c_{m,\alpha}, c_{n,\beta}\} = 0$, $\{c_{m,\alpha}, c_{n,\beta}^\dagger\} = \delta_{mn}\delta_{\alpha\beta}$ としてハ

ミルトニアンは

$$H = \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta} c_{m,\alpha}^\dagger t_{mn}^{\alpha\beta} c_{n,\beta} \quad (1)$$

である。ここで α, β は電子の内部自由度（スピンや軌道、あるいは副格子の自由度など）を表す。^{*1}系に並進対称性があれば t は $m - n$ の関数になるので ($t_{m-n}^{\alpha\beta}$), 運動量表示においてハミルトニアンは以下のように簡単になる。

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) H_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) c_{\beta}(\mathbf{k}) \quad (2)$$

ここで運動量表示における電子の演算子

$$c_{\alpha}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}} c_{m,\alpha} \quad (3)$$

および

$$H_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}} t_{\mathbf{m}}^{\alpha\beta} \quad (4)$$

を導入した。また、 $c_{\alpha}(\mathbf{k})$ は $\{c_{\alpha}(\mathbf{k}), c_{\beta}(\mathbf{k}')\} = 0$, $\{c_{\alpha}(\mathbf{k}), c_{\beta}^\dagger(\mathbf{k}')\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\alpha\beta}$ に従う。式 (2) は 2 次形式であり、行列 $H(\mathbf{k})$ の固有値がエネルギーを与える。

1.2 有限次元鎖

$N < \infty$ サイトの次元鎖の場合には、並進対称性がないので運動量表示することはできない。したがって、 $gN \times gN$ 行列 (g は内部自由度の数) を直接対角化することになる。

1.2.1 開放境界

第 m 近接の跳び移りを t_m とすると、ハミルトニアンは

$$H = \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=1}^{N-m} c_n^\dagger t_m c_{n+m} + \text{h.c.} \quad (5)$$

^{*1} t はホッピング、跳び移り、トランスファーなどと呼ばれる。実際には波動関数の積分として表されるので、“積分”と付けられることもある。

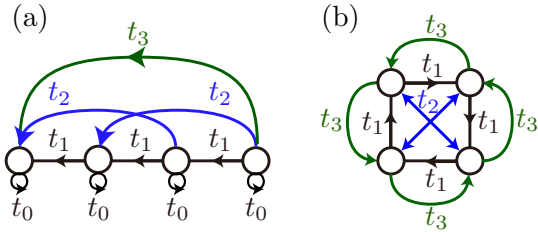


図1 4サイト模型. 境界条件が開放 (a) と周期 (b) の場合. 周期境界においては, $t_3 = t_1^\dagger$, $t_2 = t_2^\dagger$ の関係がある.

と表せる. 各サイトを基底 $(c_1, c_2, \dots, c_N)^T$ とすれば,

$$H = \begin{pmatrix} t_0 & t_1 & t_2 & \cdots & \cdots & t_{N-1} \\ t_1^\dagger & t_0 & t_1 & t_2 & \cdots & t_{N-2} \\ t_2^\dagger & t_1^\dagger & t_0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & t_2^\dagger & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ t_{N-1}^\dagger & t_{N-2}^\dagger & \cdots & \cdots & \cdots & t_0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

と顕に表示できる. t_i は $g \times g$ 行列. 図1(a)も参照のこと.

1.2.2 周期境界

上に示した開放境界条件の他に, 周期境界条件を採用することもある. 多くの場合, その方が有限サイズ効果が小さい. 周期境界条件では, サイト N と 1 が繋がることになり, 例えば, $c_N^\dagger c_{N+1} = c_N^\dagger c_1$ といった項も現れる. ここで $c_n = c_{n+N}$ である.

この結果として, 独立な跳び移りとしては $t_1, \dots, t_{N/2}$ だけを考えれば良い. なぜなら, 第 m 近接跳び移りの項を

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N c_n^\dagger t_m c_{n+m} &= \sum_{n=1}^{N-m} c_n^\dagger t_m c_{n+m} \\ &+ \sum_{n=N-m+1}^N c_n^\dagger t_m c_{n+m} \end{aligned} \quad (7)$$

と2つに分けると, 第二項は

$$\begin{aligned} \sum_{n=N-m+1}^N c_n^\dagger t_m c_{n+m} &= \sum_{n=1}^m c_{n+N-m}^\dagger t_m c_{n+N} \\ &= \sum_{n=1}^m c_{n+N-m}^\dagger t_m c_n \\ &= \sum_{n=1}^m (c_n^\dagger t_m^\dagger c_{n+N-m})^\dagger \end{aligned} \quad (8)$$

と変形されるので,

$$t_{N-m} = t_m^\dagger \quad (9)$$

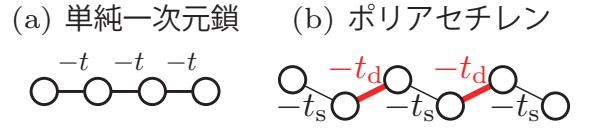


図2 (a) 単純一次元鎖と (b) ポリアセチレン. 有限個の格子点しか描いていないが, 左右に無限に繋がっている.

という関係が成り立つからである. 4サイトの例を図1(b)に示した.

2 具体例

2.1 単純一次元鎖

まず最も簡単な例として, 図2(a)に示す単純一次元鎖を考える. 最近接ホッピングのみを考え, その値を $-t$ とすると, ハミルトニアンは

$$H = -t \sum_n c_n^\dagger c_{n+1} + \text{h.c.} \quad (10)$$

と与えられる. ここで格子定数は1としている. また, スピンなどの内部自由度は無視している. 運動量表示では

$$H = -2t \sum_k \cos k c^\dagger(k) c(k) \quad (11)$$

となる. したがってエネルギー固有値は $E(k) = -2t \cos k$ と与えられる. この最も典型的なエネルギーバンドはコサインバンドなどと呼ばれる.

2.2 副格子の導入-ポリアセチレンを例として-

ポリアセチレンを表すタイトバインディング模型は Su-Schrieffer-Heeger 模型と呼ばれている*2. 実はこれは端に束縛状態を生じるトポロジカルな状態である. これについては後で述べる. さて, ポリアセチレンは図2(b)に示すように, single bond ($-t_s$) と double bond ($-t_d$) が交替して繋がった一次元鎖である. したがって基本単位胞内には2つの格子点が含まれる. 言い換えると, 格子点Aと格子点Bが半格子定数分だけずれて一次元鎖をなす. このような構造を副格子と呼んでいる. 副格子構造をもつ場合, 電子の演算子 $c_{n,\sigma}$ は格子点の座標 \mathbf{n} と, 副格子の指標 $\sigma = A, B$ でラベルされる.

実際にハミルトニアンを書き下してみようとするのが分かるが, 単位胞の取り方には図3に示すような二通りのやり方がある. 勿論, どちらの取り方を選んでも結果は

*2 W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Phys. Rev. Lett. **42**, 1698 (1979).

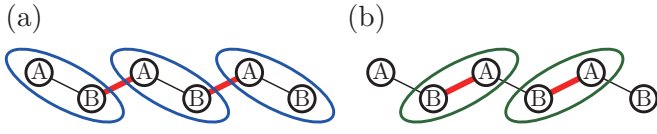


図3 単位胞をどのように選ぶか？

同じなのだが、ハミルトニアンの見かけ上の形は異なる。ここでは最も綺麗*3な選び方を与える。図を見ると、Aサイトの右側は single bond, Bサイトの右側は double bond となっている。この性質だけを反映して、以下のようにハミルトニアンを表す。

$$H = - \sum_n \left[t_s c_{n,A}^\dagger c_{n+1/2,B} + t_d c_{n,B}^\dagger c_{n+1/2,A} \right] + \text{h.c.} \quad (12)$$

運動量表示では

$$H = \sum_k \mathbf{c}^\dagger(k) H(k) \mathbf{c}(k) \quad (13)$$

と行列形式になる。ここで $\mathbf{c}(k) = (c_A(k), c_B(k))^T$ および 2×2 行列

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & -t_s e^{ik/2} - t_d e^{-ik/2} \\ -t_s e^{-ik/2} - t_d e^{ik/2} & 0 \end{pmatrix} \quad (14)$$

を導入した。上式はパウリ行列 σ_i を用いて

$$H(k) = d_x(k) \sigma_x + d_y(k) \sigma_y \quad (15)$$

とも表される。ここで

$$d_x(k) = -(t_s + t_d) \cos \frac{k}{2} \quad (16)$$

$$d_y(k) = (t_s - t_d) \sin \frac{k}{2} \quad (17)$$

である。 $H(k)$ の固有値がエネルギーバンド

$$E(k) = \pm \sqrt{d_x(k)^2 + d_y(k)^2} \quad (18)$$

を与える。

2.3 正方格子

次に二次元の例として、単純正方格子のタイトバインディング模型について説明する。簡単のため最近接の跳び移りのみを考慮して、ハミルトニアンは

$$H = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\mu=1}^2 c_{\mathbf{n}}^\dagger (-t) c_{\mathbf{n}+\mathbf{a}_\mu} + \text{h.c.} \quad (19)$$

*3 このような単位胞の選び方は、ハミルトニアンのゲージの異なる取り方に対応する。しかし、系の振る舞いを正しく理解するには最も対称性が高くなる(=「綺麗」)ような選び方が好ましい。

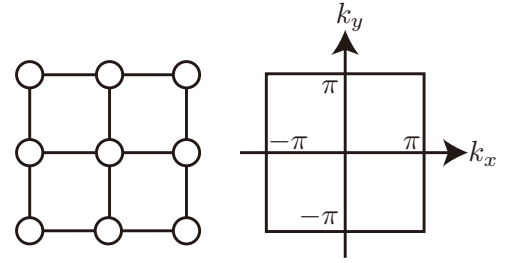


図4 正方格子とその第一ブリルアン域。

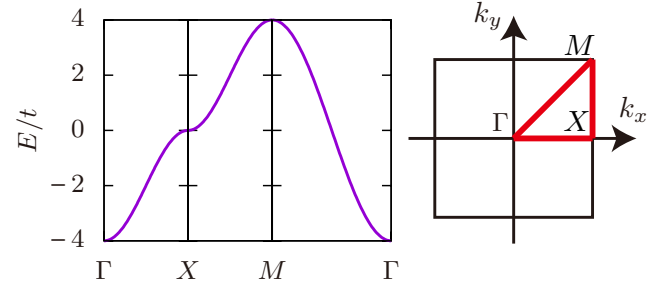


図5 正方格子のエネルギーバンド。

と書ける。ここで $\mathbf{a}_1 = (a, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (0, a)$ は正方格子の基本並進ベクトルである。 a は格子定数であるが、これを長さの単位に決めて $a = 1$ とする。一次元の時と同様にして運動量表示すると、

$$H(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) \quad (20)$$

であり、エネルギーが求められる。

可視化について

ここでの例のように、空間二次元の場合には三次元プロットを用いてエネルギーバンドを描けるが、一般に、空間三次元以上の場合には、全ての点におけるエネルギーバンドを一度に描くことはできない。そこでしばしば、高対称線上のみでバンドが図示される。正方格子の場合には $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\pi, 0)$, $M = (\pi, \pi)$ の三点を繋ぐようにエネルギーバンドが描かれる(図5)。

2.4 有限次元鎖

N サイトの単純一次元鎖(開放端)において最近接ホッピングだけ考えると

$$H_{\text{OBC}} = \begin{pmatrix} 0 & -t & & \\ -t & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -t \\ & & -t & 0 \end{pmatrix} \quad (21)$$

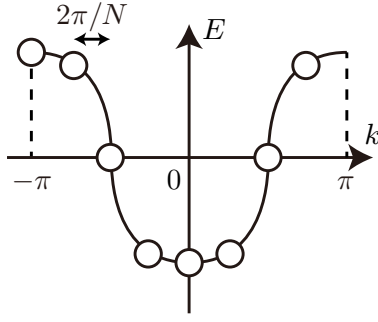


図6 周期境界条件の N サイト一次元鎖のエネルギースペクトルが○で示されている。取りうる運動量は $2\pi/N$ 間隔で離散化される。

という $N \times N$ 行列で表される。一方、周期境界条件においては

$$H_{\text{PBC}} = \begin{pmatrix} 0 & -t & & -t \\ -t & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -t \\ -t & & -t & 0 \end{pmatrix} \quad (22)$$

となる。 $(1, N)$ と $(N, 1)$ 成分が $-t$ になっていることに注意 (図1も参照)。なお、周期境界の場合には運動量表示することができたので、

$$\begin{aligned} H &= \sum_{n=1}^N c_n^\dagger(-t)c_{n+1} + \text{h.c.} \\ &= \sum_{n=1}^N c^\dagger(k_n)(-2t \cos k_n)c(k_n) \end{aligned} \quad (23)$$

である。ここで $k_n = -\pi + 2n\pi/N$ 。これは $N \rightarrow \infty$ の場合 (11) において、運動量が離散的な N 個の値だけとしたものになっている (図6参照)。これは系の詳細によらない性質である。

3 タイトバインディングモデルの導出

3.1 常伝導状態

3.2 超伝導状態

超伝導状態ではハミルトニアンに $c_{m,\alpha}c_{n,\beta}$ や $c_{m,\alpha}^\dagger c_{n,\beta}^\dagger$ といった粒子数を保存しない項が現れる。これを含めたハミルトニアンを Bogoliubov-de Gennes (BdG) ハミルトニアンと呼ぶ。具体形は

$$\begin{aligned} H &= \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta} c_{m,\alpha}^\dagger t_{mn}^{\alpha\beta} c_{n,\beta} - \mu \sum_{m,\alpha} c_{m,\alpha}^\dagger c_{m,\alpha} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta} \left[c_{m,\alpha}^\dagger \Delta_{mn}^{\alpha\beta} c_{n,\beta}^\dagger + c_{m,\alpha} (\Delta_{nm}^{\beta\alpha})^* c_{n,\beta} \right] \end{aligned} \quad (24)$$

である。ここで μ は系の化学ポテンシャルであり、超伝導を担う Δ は対関数 (pair potential) と呼ばれている。以下、一般論を述べるが、やはり理解のためには後述の例を見るのが良い。

電子の演算子 c は正準反交換関係に従うことに注意すると、定数項を除いて $c_{m\alpha}^\dagger c_{n\beta} \rightarrow (c_{m\alpha}^\dagger c_{n\beta} - c_{n\beta} c_{m\alpha}^\dagger)/2$ とおける。ゆえに、 $\mathbf{c}_{m,\alpha} = (c_{m,\alpha}, c_{m,\alpha}^\dagger)^T$ というベクトルを導入して

$$H = \frac{1}{2} \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta} \mathbf{c}_{m,\alpha}^\dagger \mathcal{H}_{mn}^{\alpha\beta} \mathbf{c}_{n,\beta} \quad (25)$$

の形に表せる。ここで

$$\mathcal{H}_{mn}^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} t_{mn}^{\alpha\beta} - \mu \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} & \Delta_{mn}^{\alpha\beta} \\ (\Delta_{nm}^{\beta\alpha})^* & -(t_{mn}^{\alpha\beta})^* + \mu \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} \end{pmatrix} \quad (26)$$

である。このように、電子 c と“正孔” c^\dagger を一つにまとめたものを南部表示と呼んでいる。常伝導状態の時と同様に、系に並進対称性があれば $t_{mn}^{\alpha\beta} \rightarrow t_{m-n}^{\alpha\beta}$ 、 $\Delta_{mn}^{\alpha\beta} \rightarrow \Delta_{m-n}^{\alpha\beta}$ という空間依存性になるから、ハミルトニアンは以下のように運動量表示できる。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{c}^\dagger(\mathbf{k}) \mathcal{H}(\mathbf{k}) \mathbf{c}(\mathbf{k}) \quad (27)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} h(\mathbf{k}) - \mu \mathbf{1} & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^\dagger(\mathbf{k}) & -h(-\mathbf{k})^* + \mu \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (28)$$

ここでベクトル $\mathbf{c}(\mathbf{k})$ の α 成分は

$$\mathbf{c}_\alpha(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_\alpha(\mathbf{k}) \\ c_\alpha^\dagger(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (29)$$

であり、行列 $h(\mathbf{k})$ と $\Delta(\mathbf{k})$ の $(\alpha\beta)$ 成分は

$$h_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}} t_{\mathbf{m}}^{\alpha\beta} \quad (30)$$

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}} \Delta_{\mathbf{m}}^{\alpha\beta} \quad (31)$$

と定義される。また、 $\mathbf{1}$ は単位行列である。

$\mathcal{H}(\mathbf{k})$ の固有値は超伝導状態における励起エネルギーであることを以下に述べる。まず、 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ の i 番目の固有値 $E_i(\mathbf{k})$ は $\mathcal{H}(-\mathbf{k})$ の固有値と対になって $E_i(\mathbf{k}) = -E_{-i}(-\mathbf{k})$ と現れることを説明する。

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{K} \quad (32)$$

による反ユニタリー変換を考える。対関数は $\Delta(\mathbf{k}) = -\Delta^T(-\mathbf{k})$ を満たすので、 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ は

$$\mathcal{C} \mathcal{H}(\mathbf{k}) \mathcal{C}^{-1} = -\mathcal{H}(-\mathbf{k}) \quad (33)$$

という対称性を示す。これは、運動量が \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ のベクトルが互いに -1 倍であることを意味する： $E_i(\mathbf{k}) = -E_{-i}(-\mathbf{k})$ 。このような反ユニタリー対称性は電子正孔対称性あるいは荷電共役対称性などと呼ばれる。^{*4}

4 パッケージ解説

apack.cpp に関数が定義してある。

main のソースファイル名を hoge.cpp とする。ここから apack.cpp 内の関数を呼び出したい。そのために、hoge.cpp と apack.cpp をコンパイル、リンクすれば良い：

```
$ icc hoge.cpp apack.cpp -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_core -lmkl_sequential -lpthread -lm
```

apack.cpp 内で定義される関数は表 1 にまとめられている。

4.1 有限鎖のハミルトニアンを代入する関数 hmlt1d

```
void hmlt1d(std::complex<double> *a, int N, int g, std::complex<double> *e, std::complex<double> *t, int b)
```

有限鎖 (N サイト) のハミルトニアン

$$H = \sum_{n=1}^N c_n^\dagger \epsilon c_n + \sum_{n=1}^N (c_n^\dagger t c_{n+1} + \text{h.c.}) + b \times c_N^\dagger t c_1 + \text{h.c.}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} \epsilon & t & 0 & \cdots & 0 & bt^\dagger \\ t^\dagger & \epsilon & t & \ddots & & 0 \\ 0 & t^\dagger & \epsilon & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & & & t \\ bt & 0 & \cdots & 0 & t^\dagger & \epsilon \end{pmatrix} \quad (34)$$

を a に代入する。ただし、最近接の跳び移りのみを扱っている。 g は内部自由度の数であり、 ϵ と t は $g \times g$ 行列である。 $b = 0$ は開放境界、 $b = 1$ は周期境界、 $b = -1$ は反周期境界を表す。

hmlt1d.cpp は

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, \quad t = \begin{pmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{pmatrix}, \quad (35)$$

の場合のハミルトニアンをつくり、それを表示する例題である。

4.2 エネルギーバンド図のためのデータを出力する関数 bddg

```
void bddg(const char *name, void (*hmlt)(std::complex<double>*, double,
```

表 2 hmlt1d の入出力

引数	説明	型
a	ハミルトニアン行列	$(gN)^2$ 成分 double complex
N	サイト数	int
g	内部自由度の数	int
ϵ	オンサイトエネルギー	g^2 成分 double complex
t	ホッピング	g^2 成分 double complex
b	境界条件	int

```
double, double), int d, double *kp, int np, int nk)
```

$d \times d$ ハミルトニアン行列 $H(k_x, k_y, k_z)$ の固有値を n_p 個の点 $k_p = \{\Gamma^{(1)}, \dots, \Gamma^{(n_p)}\}$, $\Gamma^{(i)} = (\Gamma_x^{(i)}, \Gamma_y^{(i)}, \Gamma_z^{(i)})$ に沿って求め、出力する。出力されたデータファイル “name” はそのまま gnuplot で描画できる形式になっている。各区間の運動量の分割数は n_k 。 k_p は 1 次元配列として $\{\Gamma_x^{(1)}, \Gamma_y^{(1)}, \Gamma_z^{(1)}, \Gamma_x^{(2)}, \Gamma_y^{(2)}, \Gamma_z^{(2)}, \dots, \Gamma_x^{(n_p)}, \Gamma_y^{(n_p)}, \Gamma_z^{(n_p)}\}$ という形式である。

なお、あらかじめ、ハミルトニアンを配列 a に代入する `void hmlt(std::complex<double> *a, double k_x, double k_y, double k_z)` を定義しておく必要がある。

bddg.cpp は

$$H(k_x, k_y, k_z) = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon(k_x, k_y, k_z) \\ \epsilon(k_x, k_y, k_z) & 0 \end{pmatrix}, \quad (36)$$

$$\epsilon(k_x, k_y, k_z) = -2 \cos k_x - 2 \cos k_y - 2 \cos k_z, \quad (37)$$

のエネルギーバンド図を $R(\pi, \pi, \pi) - X(\pi, 0, 0) - \Gamma(0, 0, 0) - M(\pi, \pi, 0) - R(\pi, \pi, \pi) - \Gamma(0, 0, 0) - X(\pi, 0, 0) - M(\pi, \pi, 0)$ に沿って描くためのデータファイル “test.dat” を出力する例題である。gnuplot で plot “test.dat” とすれば描画できる。

^{*4} C は電子と正孔の成分を入れ替えているのでこう呼ばれる。

表 1 apack において定義されている関数の一覧.

番号	関数	説明
1	hmlt1d	有限鎖のハミルトニアンをつくる.
2	bddg	エネルギーバンド図のためのデータを出力する.

表 3 bddg の入出力

引数	説明	型
name	出力データ	ファイル
hmlt	ハミルトニアン	関数ポインタ
d	ハミルトニアンの次元	int
k_p	高対称点のリスト	$3n_p$ 成分 double 配列
n_p	高対称点の数	int
n_k	運動量の分割数	int