

タイトバインディング模型

山影 相

2014年10月23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。

1 定義

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

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

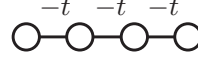
および

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

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} 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。

(a) 単純一次元鎖



(b) ポリアセチレン

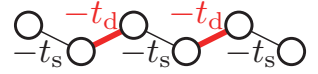


図1 (a) 単純一次元鎖と (b) ポリアセチレン。有限個の格子点しか描いていないが、左右に無限に繋がっている。

2 例

2.1 単純一次元鎖

まず最も簡単な例として、図1(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

$$H = -t \sum_n c_n^\dagger c_{n+1} + \text{h.c.} \quad (5)$$

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

$$H = -2t \sum_k \cos k c^\dagger(k) c(k) \quad (6)$$

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1(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

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

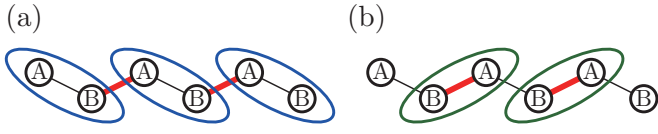


図2 単位胞をどのように選ぶか？

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2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。

$$H = - \sum_n \left[t_s c_{n,A}^\dagger c_{n+1/2,B} + t_d c_{n,B}^\dagger c_{n+1/2,A} \right] + \text{h.c.} \quad (7)$$

運動量表示では

$$H = \sum_k \mathbf{c}^\dagger(k) H(k) \mathbf{c}(k) \quad (8)$$

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

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & -t_s e^{ik/2} - t_d e^{-ik/2} \\ -t_s e^{-ik/2} - t_d e^{ik/2} & 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

を導入した。上式はパウリ行列 σ_i を用いて

$$H(k) = d_x(k) \sigma_x + d_y(k) \sigma_y \quad (10)$$

とも表される。ここで

$$d_x(k) = -(t_s + t_d) \cos \frac{k}{2} \quad (11)$$

$$d_y(k) = (t_s - t_d) \sin \frac{k}{2} \quad (12)$$

である。 $H(k)$ の固有値がエネルギーバンド

$$E(k) = \pm \sqrt{d_x(k)^2 + d_y(k)^2} \quad (13)$$

を与える。

^{*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。

2.3 超伝導の場合

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

$$H = \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta} c_{m,\alpha}^\dagger t_{mn}^{\alpha\beta} c_{n,\beta} - \mu \sum_{m,\alpha} c_{m,\alpha}^\dagger c_{m,\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta} \left[c_{m,\alpha}^\dagger \Delta_{mn}^{\alpha\beta} c_{n,\beta}^\dagger + c_{m,\alpha} (\Delta_{nm}^{\beta\alpha})^* c_{n,\beta} \right] \quad (14)$$

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

$$H = \frac{1}{2} \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta} \mathbf{c}_{m,\alpha}^\dagger \mathcal{H}_{mn}^{\alpha\beta} \mathbf{c}_{n,\beta} \quad (15)$$

の形に表せる。ここで

$$\mathcal{H}_{mn}^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} t_{mn}^{\alpha\beta} - \mu \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} & \Delta_{mn}^{\alpha\beta} \\ (\Delta_{nm}^{\beta\alpha})^* & -(t_{mn}^{\alpha\beta})^* + \mu \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} \end{pmatrix} \quad (16)$$

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。

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \mathbf{c}^\dagger(\mathbf{k}) \mathcal{H}(\mathbf{k}) \mathbf{c}(\mathbf{k}) \quad (17)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} h(\mathbf{k}) - \mu \mathbf{1} & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^\dagger(\mathbf{k}) & -h(-\mathbf{k})^* + \mu \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (18)$$

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

$$\mathbf{c}_\alpha(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_\alpha(\mathbf{k}) \\ c_\alpha^\dagger(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (19)$$

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

$$h_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_m e^{-ik \cdot \mathbf{m}} t_m^{\alpha\beta} \quad (20)$$

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_m e^{-ik \cdot \mathbf{m}} \Delta_m^{\alpha\beta} \quad (21)$$

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。

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{K} \quad (22)$$

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、 $H(\mathbf{k})$ は

$$\mathcal{C}H(\mathbf{k})\mathcal{C}^{-1} = -H(-\mathbf{k}) \quad (23)$$

という対称性を示す。これは、運動量が \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ のスペクトルが互いに -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}

3 タイトバインディングモデルの導出

^{*4} \mathcal{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。