1. 紧束缚近似

每个晶格点（原子）处有 $P_1, \cdots, P_l$ 条轨道，每个轨道处有2个自旋.

↑

束缚于格点.

在距离不远的2个格点间，电子可由一条轨道跃至另一条.

数学描述：产生/湮灭算符

$C^{\dagger}_{i,p_a,\alpha}$ / $C_{i,p_a,\alpha}$ → 在 i 格点处第 p_a 个轨道产生/湮灭一个自旋为 α 的电子

（i：格点，p_a：轨道，α：自旋.）

电子数算符：$\hat{N}_{i,p_a,\alpha} = C^{\dagger}_{i,p_a,\alpha} C_{i,p_a,\alpha}$

由于电子为 Fermion，$N_{i,p_a,\alpha} = 0$ 或 1.

对易关系：$\{C^{\dagger}_{i,p_a,\alpha}, C_{j,p_b,\beta}\} = \delta_{ij}\delta_{p_a p_b}\delta_{\alpha\beta}$.

实空间晶格 Hamiltonian：

(1) 在位能：$H_{on\text{-}site} = \sum_i \varepsilon_{p_a,\alpha} C^{\dagger}_{i,p_a,\alpha} C_{i,p_b,\alpha}$

(2) 跃迁：$\langle ij\rangle$ 代表对所有距离最近的 (i,j) 对加合.

$\langle\langle i,j\rangle\rangle$ 代表 - - - - - 次近的 - - - ；

依此类推.

例：$H' = \sum_{\langle ij\rangle} t_{ij,p_a p_b,\alpha\beta} C^{\dagger}_{i,p_a,\alpha} C_{j,p_b,\beta}$.

（$C^{\dagger}_{i,p_a,\alpha}$：此处产生；$C_{j,p_b,\beta}$：此处电子湮灭）

故总电子数不变.

动量空间

$$c_{ip_a\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k c_{kp_a\alpha}\, e^{ik\cdot R_i}$$

R_i：第i个晶格点的矢量位置.

$$\Rightarrow c_{kp_a\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i c_{ip_a\alpha}\, e^{-ik\cdot R_i}$$

在位能：

$$H_{on\text{-}site} = \sum_i \varepsilon_{p_a,\alpha}\,\frac{1}{N}\sum_{k_1}\sum_{k_2} c^{\dagger}_{k_1p_a\alpha}\, e^{-ik_1\cdot R_i}\, c_{k_2p_a\alpha}\, e^{ik_2\cdot R_i}$$

$$= \varepsilon_{p_a,\alpha}\sum_{k_1}\sum_{k_2}\frac{1}{N}\, c^{\dagger}_{k_1p_a\alpha}\, c_{k_2p_a\alpha} N\delta_{k_1,k_2}$$

$$= \varepsilon_{p_a,\alpha}\sum_{k} c^{\dagger}_{kp_a\alpha}\, c_{kp_a\alpha}$$

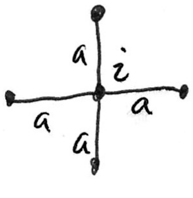
跃迁：

$$H' = \sum_{\langle ij\rangle} t_{ij,p_ap_b,\alpha\beta}\,\frac{1}{N}\sum_{k_1,k_2} c^{\dagger}_{k_1,p_a,\alpha}\, e^{-ik_1\cdot R_i}\, c_{k_2p_b\beta}\, e^{ik_2\cdot R_j}$$

对于最近邻：$R_j = R_i + \delta$.

例子：

二维正方晶格：



i的最近邻有4个.

$$R_j = R_i + \begin{cases}(a,0)\\(0,a)\\(-a,0)\\(0,-a)\end{cases}$$ 有4种δ的值.

$$\sum_{\langle ij\rangle} = \sum_i\sum_\delta$$

$$H' = \sum_i\sum_\delta t_{ij,p_ap_b,\alpha\beta}\,\frac{1}{N}\sum_{k_1,k_2} c^{\dagger}_{k_1p_a\alpha}\, c_{k_2p_b\beta}\, e^{i(k_2-k_1)\cdot R_i}\, e^{ik_2\cdot\delta}.$$

作简化：$t_{ij,p_ap_b,\alpha\beta} = t_{p_ap_b,\alpha\beta}$（与格点无关）.

$$H' = \sum_k t_{p_a p_b,\alpha\beta}\, C^{+}_{kp_a\alpha} C_{kp_b\beta}\, e^{ik\cdot\delta}.$$

$$H' = \sum_k H_k$$

$$H_k = \varepsilon_{p_a,\alpha} C^{+}_{kp_a\alpha} C_{kp_a\alpha} + C^{+}_{kp_a\alpha}\Big(\sum_\delta t_{p_a p_b,\alpha\beta}\, e^{ik\delta}\Big) C_{kp_b\beta}$$

固定k，以 $C_{kp_b\alpha}$ 为基

$$H_k = \left(C^{+}_{kp_a\alpha} \right) \Big[\varepsilon_{p_a\alpha}\delta_{\alpha\beta} + \sum_\delta t_{p_a p_b,\alpha\beta}\, e^{ik\delta} \Big] \left(C_{kp_b\beta} \right)$$

像态矢一样处理 (<1|)

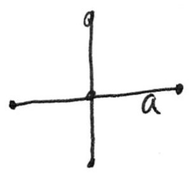
哈密顿量矩阵

像态矢一样处理(|1>)

对角化 给出能带与Bloch态的周期部分

例子：(1) 二维方晶格

1格点处有1原子，无自旋



$$H = \sum_i \varepsilon \cdot c_i^{+} c_i + t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^{+} c_j$$

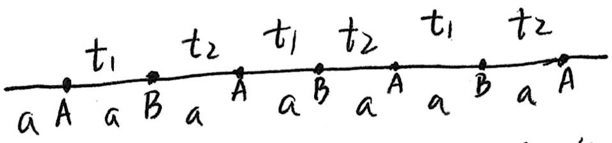
4种δ.

$$H_k = \varepsilon + t\left(e^{ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_x a} + e^{-ik_y a}\right).$$

$$= \varepsilon + 2t\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right)$$

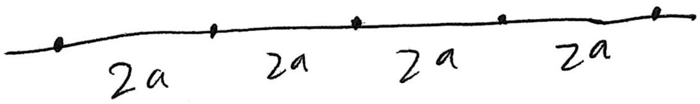
能带.

(2) 一维双原子链



尽管距离相同，但跃迁强度不同，故一个单元格有2原子.

相当于如下周期性，
在每个格点处放2个原子.



紧束缚：

$$H=\sum_i (-1)^i \varepsilon c_i^{\dagger} c_i + \sum_{\langle ij\rangle} t_{ij}\, c_i^{\dagger} c_j$$

2个原子在位能不同.

跃迁与位置有关.

设A为基

$$H_k = \left(C_{Ak}^{\dagger}, C_{Bk}^{\dagger}\right)\begin{pmatrix} -\varepsilon & t_1 e^{-ika}+t_2 e^{ika} \\ t_1 e^{ika}+t_2 e^{-ika} & \varepsilon \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_{Ak} \\ C_{Bk} \end{pmatrix}$$

哈密顿矩阵.

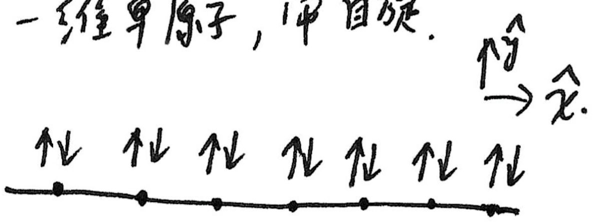
可写为

$$\hat{H} = \vec{h}\cdot\vec{\sigma}$$

$$\vec{h} = (t_1\cos ka + t_2\cos ka,\ t_1\sin ka - t_2\sin ka,\ -\varepsilon)$$

$\vec{\sigma}$ 为泡利矩阵(赝自旋).

(3) 一维单原子，带自旋.



$\hat{R}_{ij}$ 为从i到j的方向的单位矢量.

$$H = \sum_i \varepsilon (\sigma_z)_{\alpha\beta} C_{i\alpha}^{+} C_{i\beta} + \sum_{\langle ij\rangle} i t \left[(\hat{z}\times\hat{R}_{ij})\cdot\sigma\right]_{\alpha\beta} C_{i\alpha}^{+} C_{j\beta}$$

i 虚数单位，保证厄米性.

在位能与自旋有关，作Fourier转换后:

$$H_{on\text{-}site} = (C_{k\uparrow}^{+}, C_{k\downarrow}^{+}) \begin{pmatrix} \varepsilon & \\ & -\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{k\uparrow} \\ C_{k\downarrow} \end{pmatrix}.$$

跃迁:

$$H' = (C_{k\uparrow}^{+}, C_{k\downarrow}^{+}) \begin{pmatrix} 0 & te^{ika} - te^{-ika} \\ -te^{ika} + te^{-ika} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{k\uparrow} \\ C_{k\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$= (C_{k\uparrow}^{+}, C_{k\downarrow}^{+}) \begin{pmatrix} 0 & 2it\sin ka \\ -2it\sin ka & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{k\uparrow} \\ C_{k\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon & 2it\sin ka \\ -2it\sin ka & -\varepsilon \end{pmatrix}$$

$$= -2t\sin ka\, \sigma_y + \varepsilon \sigma_z$$

泡利阵(真实自旋).