1 紧束缚模型哈密顿量

$$H(\mathbf{k}) = A_x\sin(k_x)\sigma_x s_z + A_y\sin(k_y)\sigma_y s_0 + (m_0 - t_x\cos(k_x) - t_y\cos(k_y))\sigma_z s_0 + h_z\sigma_0 s_x \tag{1}$$

这是一个 2D 量子自旋霍尔效应, 在其中加上一个 Zeeman 场 h_z. 参数选取为 $m_0 = 1.5, t_x = t_y = 1.0, A_x = A_y = 1.0, h_z = 0.2$. 紧束缚模型哈密顿量的做法就是将三角函数改写成指数函数形式

$$\sin(k_x) = \frac{1}{2i}(e^{ik_x} - e^{-ik_x}) \qquad \cos(k_x) = \frac{1}{2}(e^{ik_x} + e^{-ik_x}) \tag{2}$$

这里假设了晶格常数 $a = 1$

$$\begin{aligned} &e^{ik_x} \to (100)\text{hopping} \qquad e^{-ik_x} \to (-100)\text{hopping} \\ &e^{ik_y} \to (010)\text{hopping} \qquad e^{-ik_y} \to (0-10)\text{hopping} \\ &e^{ik_x+ik_y} \to (110)\text{hopping} \qquad e^{-ik_x-ik_y} \to (-1-10)\text{hopping} \\ &e^{ik_x-ik_y} \to (1-10)\text{hopping} \qquad e^{-ik_x+ik_y} \to (-110)\text{hopping} \end{aligned} \tag{3}$$

接下来可以将 (1) 中的每一项都改写成关于指数形式的矩阵, 这里矩阵的直积顺序为 $s_i \otimes \sigma_i$.

$$A_x\sin(k_x)\sigma_x s_z = \frac{A_x}{2i}e^{ik_x}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{A_x}{2i}e^{-ik_x}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$A_y\sin(k_y)\sigma_y s_0 = \frac{A_y}{2i}e^{ik_y}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} - \frac{A_y}{2i}e^{-ik_y}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$t_x\cos(k_x)\sigma_z s_0 = \frac{t_x}{2}e^{ik_x}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{t_x}{2}e^{-ik_x}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

$$t_y\cos(k_y)\sigma_z s_0 = \frac{t_y}{2}e^{ik_y}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{t_y}{2}e^{-ik_y}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

$$m_0\sigma_z s_0 = m_0\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad h_z\sigma_0 s_x = h_z\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{8}$$

这里的 h_z 与 m_0 中并不涉及 hopping, 最后代表的是 onsite 能量, 即就是 (000) 方向的跃迁.

2 构建 WannierTools 紧束缚数据

接下来就是结合 (3,4,5,6,7) 来构建 WannierTools 计算所需要的紧束缚模型数据. 其中最主要的结构如下

$$x \quad y \quad z \quad m \quad n \quad \mathrm{Re} \quad \mathrm{Im} \tag{9}$$

$x \to x$ 方向跃迁取向, 可以取 (0,1,-1)　$y \to y$ 方向跃迁取向, 可以取 (0,1,-1)

$z \to z$ 方向跃迁取向, 可以取 (0,1,-1)　m, n对应的就是具体某一个取向下, 对应的矩阵的元素坐索引

$\mathrm{Re}(m,n)$矩阵位置上值的实部　$\mathrm{Im}(m,n)$矩阵位置上值的实部

下面给一个具体的例子来写这个数据, 比如要写 x 负方向的一个矩阵

$$\frac{A_x}{2i}e^{ik_x}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \frac{A_x}{2i} \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 3 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 3 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 & \frac{A_x}{2i} \\ -1 & 0 & 0 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 2 & 3 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 2 & 4 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 3 & 2 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 3 & 3 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 3 & 4 & 0 & -\frac{A_x}{2i} \\ -1 & 0 & 0 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & 2 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & 3 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & 4 & 0 & -\frac{A_x}{2i} \end{pmatrix} \tag{11}$$