

17.4.1 Fonctions de Wannier

↳ Pour valider l'approximation des liaisons fortes.

On construit les fonctions de Wannier de la façon suivante:

$$|W_m(\underline{R})\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}} e^{-i\underline{k}\cdot\underline{R}} |\psi_{m\underline{k}}\rangle$$

$$\langle \Omega | W_m(\underline{R}) \rangle = w_{m,\underline{R}}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}} e^{-i\underline{k}\cdot\underline{R}} \underbrace{\langle \Omega | \psi_{m\underline{k}} \rangle}_{\psi_{m\underline{k}}(\Omega)}$$

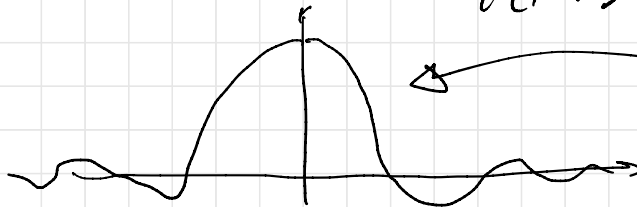
$$\text{avec } \psi_{m\underline{k}}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}} U_{m\underline{k}}(\Omega)$$

Les fonctions de Wannier sont des fonctions localisées dans différentes cellules.

Posons que $U_m(\mathbf{r})$ ne dépend pas de t (pas très réaliste) et 1D.

$$\begin{aligned}
 \psi_{mR}(n) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{R})} U_m(\mathbf{r}) \\
 &= \frac{1}{N} U_m(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{R})} = \frac{1}{N} U_m(\mathbf{r}) \frac{L}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{R})} \\
 &= \frac{1}{N} \frac{L}{2\pi} U_m(\mathbf{r}) \left. \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{R})}}{i(\mathbf{r}-\mathbf{R})} \right|_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \\
 &= \frac{a}{2\pi} U_m(\mathbf{r}) \frac{e^{i\frac{\pi}{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R})} - e^{-i\frac{\pi}{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R})}}{i(\mathbf{r}-\mathbf{R})} = U_m(\mathbf{r}) \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R})\right)}{\frac{\pi}{a}(\mathbf{r}-\mathbf{R})}
 \end{aligned}$$

$L = Na$



Les fonctions de Wannier sont orthogonales:

$$\begin{aligned} \langle W_m(\underline{R}) | W_m(\underline{R}') \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\underline{R}} \sum_{\underline{k}'} e^{i\underline{k} \cdot \underline{R} - i\underline{k}' \cdot \underline{R}'} \underbrace{\langle \psi_{m\underline{k}} | \psi_{m\underline{k}'} \rangle}_{\sum_m \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot (\underline{R} - \underline{R}')} \sum_m \end{aligned}$$

$$\underline{k} = m_1 \underline{k}_1 + m_2 \underline{k}_2 + m_3 \underline{k}_3$$

$$m_i = \frac{k_i}{N_i} \quad k_i = 0, \dots, N_i - 1$$

$$\underline{R}'' = m_1 \underline{a}_1 + m_2 \underline{a}_2 + m_3 \underline{a}_3$$

$$m_i \in \mathbb{Z}$$

$$N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$$

$$\begin{aligned} \underline{k} \cdot \underline{R}'' &= m_1 m_1 2\pi + m_2 m_2 2\pi + m_3 m_3 2\pi \\ &= 2\pi \left(\frac{k_1 m_1}{N_1} + \frac{k_2 m_2}{N_2} + \frac{k_3 m_3}{N_3} \right) \end{aligned}$$

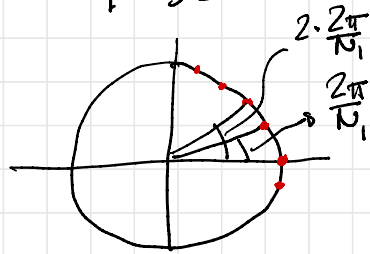
$$\frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{R}''} = \frac{1}{N} \left(\sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{i 2\pi l_i / N_i} \right) (\dots) (\dots)$$

$$\Omega \sum_{n=0}^{N-1} \Omega^n = \Omega + \Omega^2 + \Omega^3 + \dots + \Omega^N = \Omega^N + \sum_{n=0}^{N-1} \Omega^n - 1$$

$$(\Omega - 1) \sum_{n=0}^{N-1} \Omega^n = \Omega^N - 1 \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{n=0}^{N-1} \Omega^n = \frac{1 - \Omega^N}{1 - \Omega}$$

Donc

$$\sum_{l_i=0}^{N_i-1} \left(e^{2\pi i \frac{l_i}{N_i}} \right)^{l_i} = \frac{1 - e^{2\pi i \frac{N_i}{N_i}}}{1 - e^{2\pi i \frac{1}{N_i}}} = 0$$



Mais si $R'' = 0$, alors $\sum_{l_i=0}^{N_i-1} (e^{i\theta})^{l_i} = N_i$

$$\text{et } \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} e^{i\underline{b} \cdot (\underline{R} - \underline{R}')} = \delta_{\underline{R}, \underline{R}'}$$

Donc

$$\langle W_m(\underline{R}) | W_m(\underline{R}') \rangle = \delta_{\underline{R}, \underline{R}'} \delta_{m, m'}$$

Fonctions de Wannier maximales localisées:

Puisque un état quantique est seulement déterminé modulo une phase complexe, on peut ajouter une phase qui dépend de \underline{k} à la définition des fonctions de Wannier:

$$|W_n(\underline{R})\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}} e^{-i\underline{k} \cdot \underline{R} + i\phi(\underline{k})} |N_{n,\underline{k}}\rangle$$

On peut utiliser ce degré de liberté afin de localiser encore plus les fonctions de Wannier.

On peut aller plus loin en considérant une transformée unitaire des fonctions de Bloch.

Posons que $|\tilde{\Psi}_{mk}\rangle = \sum_m^N U_{mn}^k |\Psi_{mk}\rangle$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{satisfait } H|\Psi_{mk}\rangle = E_{mk}|\Psi_{mk}\rangle \\ \text{Ne satisfait pas} \end{array} \right.$

$\{|\tilde{\Psi}_{mk}\rangle\}$ et $\{|\Psi_{mk}\rangle\}$ définissent le même sous-espace d'Hilbert

Donc, on peut définir

$$|W_m(R)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \sum_n e^{ik \cdot R} e^{i\phi_n(k)} U_{mn}^k |\Psi_{mk}\rangle$$

$$|W_m(R)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \sum_n e^{ik_0 R} \tilde{U}_{mn}^k |\Psi_{mk}\rangle$$

↳ Ce sont les fonctions de Wannier maximales localisées.

Maximally localized Wannier functions: Theory and applications

 Nicola Marzari, Arash A. Mostofi, Jonathan R. Yates, Ivo Souza, and David Vanderbilt
 Rev. Mod. Phys. **84**, 1419 – Published 10 October 2012

Article

References

Citing Articles (1,073)

PDF

HTML

Export Citation

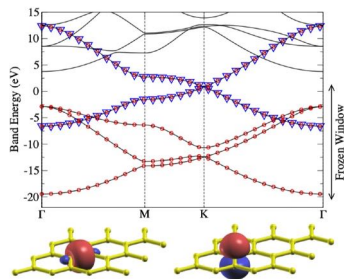
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.84.1419>


FIG. 6 (Color online) Solid black lines: band structure of graphene. Blue triangles: band structure for the subspace selected by projection onto atomic p orbitals. Red circles: band structure for the subspace selected by projection onto atomic p orbitals on each site and sp^2 orbitals on alternate sites, and using the frozen window indicated. The lower panels show the MLWFs obtained from the standard localization procedure applied to these two projected manifolds.

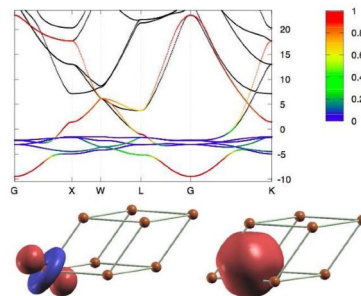
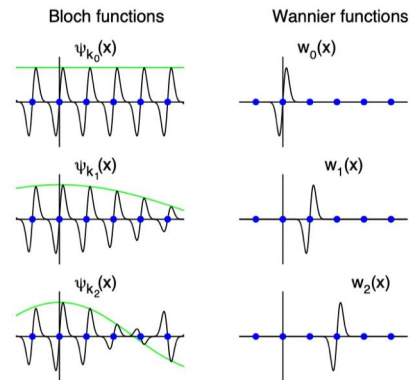


FIG. 8 (Color online) Solid black lines: band structure of bulk crystalline Cu. Colored lines: band structure for the subspace selected by optimal smoothness, and a target dimensionality of 7, giving rise to 5 atom-centered d -like MLWFs and two s -like MLWFs in the tetrahedral interstitials, shown below. The color coding represents the projection of the disentangled bands onto these MLWFs, smoothly varying from red (representing s -like interstitial MLWFs) to blue (atom-centered d -like MLWFs).

Les fonctions de Wannier et modèle de liaisons fortes

Au lieu d'utiliser des fonctions atomiques, on peut penser utiliser des fonctions de Wannier. Ainsi, on transforme un problème aux valeurs propres généralisées à un problème de valeurs propres ordinaires.

$$\det(\underline{H} - \varepsilon \underline{S}) \rightarrow \det(\underline{\tilde{H}} - \varepsilon \underline{I})$$

Cependant, il n'y a pas de "free-lunch". Les fonctions de Wannier sont moins localisées que les fonctions atomiques alors on doit considérer l'interaction à plus longue distance.

Si on pense à $\underline{\underline{H}}$ et $\underline{\underline{S}}$ obtenus avec des orbitales atomiques, ces matrices sont assez diagonales

$$\underline{\underline{H}} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & -t & 0 & 0 & 0 \\ t & \epsilon_2 & -t & 0 & 0 \\ 0 & t & \epsilon_3 & -t & \\ 0 & 0 & t & \ddots & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

On peut transformer le problème de valeurs propres généralisées en problème ordinaire de la façon suivante:

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{S}}^{1/2} \underline{\underline{S}}^{1/2} \rightarrow$$

$$\underline{\underline{H}} \underline{\underline{x}} = \epsilon \underline{\underline{S}}^{1/2} \underline{\underline{S}}^{1/2} \underline{\underline{x}}$$

$$\underline{\underline{S}}^{-1/2} \underline{\underline{H}} \underline{\underline{S}}^{-1/2} \underline{\underline{S}}^{1/2} \underline{\underline{x}} = \epsilon \underline{\underline{S}}^{1/2} \underline{\underline{x}}$$

$$\underline{\underline{H}} \underline{\underline{y}} = \epsilon \underline{\underline{y}}$$

$$\underline{\underline{H}} = \underline{\underline{S}}^{-1/2} \underline{\underline{H}} \underline{\underline{S}}^{-1/2}, \quad \underline{\underline{y}} = \underline{\underline{S}}^{1/2} \underline{\underline{x}}$$

Si $\|S\|_{\infty} = 1$

A diagram showing a matrix S with three parallel cyan diagonal bands. The matrix is enclosed in large square brackets. The label $\|S\|_{\infty} = 1$ is written to the left of the matrix.

$\|\hat{H}\|_{\infty} =$

A diagram showing a matrix \hat{H} with three parallel cyan diagonal bands. The matrix is enclosed in large square brackets. The label $\|\hat{H}\|_{\infty} =$ is written to the left of the matrix.

Donc, \hat{H} est plus dense que H .

$\|\hat{H}\|_{\infty} =$

A diagram illustrating the multiplication of two matrices. The first matrix has three cyan diagonal bands, and the second matrix has three magenta diagonal bands. They are enclosed in large square brackets and separated by an equals sign. The resulting matrix on the right has six orange diagonal bands, indicating a denser structure. The label $\|\hat{H}\|_{\infty} =$ is written to the left of the first matrix.