Lecture 4.

An Intrinsic Topological Insulator — Chern Insulator

1. Bloch态的周期性.

$$\psi_k = e^{ikr} u_k(r)$$

ψ_k 是平移算符本征态

$T_{\vec{R}}$, $\vec{R}$ 是代表晶格周期性的实空间矢量. (一维为na)

$$T_{\vec{R}}\psi_k = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\psi_k.$$

$\vec{G}$为与$\vec{R}$共轭的动量空间矢量, $\vec{G}\cdot\vec{R} = 2m\pi$. (一维为$n\frac{2\pi}{a}$)

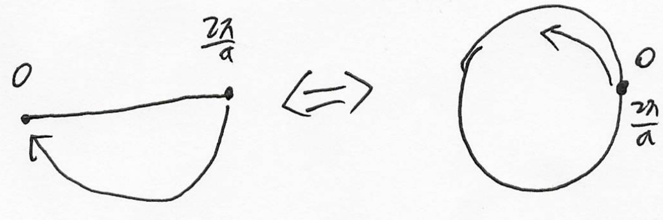
$$\begin{aligned} T_{\vec{R}}\psi_{k+G} &= e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot R}\psi_{k+G} \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}}\psi_{\vec{k}+\vec{G}} \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\psi_{\vec{k}+\vec{G}} \end{aligned}$$

故 ψ_k 与 ψ_{k+G} 为同一本征态.

故布里渊区中 $\vec{k}$ 与 $\vec{k}+\vec{G}$ 可认为同一点.

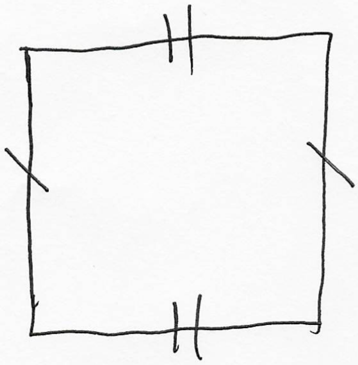
(一维) 对于布里渊区: 0与$\frac{2\pi}{a}$相同,

$-\frac{\pi}{a}$与$\frac{\pi}{a}$相同.



一维布里渊区等同于圆环

二维(2方)



丶与丶相同

||与||相同

把相同的边粘合，二维布里渊区等同于 Torus (环面).
一般情况下也是如此.

2. 拓扑数.

$$N = \frac{1}{2\pi} \iint_{\Sigma} dk_x dk_y \ \Omega_z .$$

Σ 代表布里渊区.

与 winding number 的关联：

考虑一个二能带的模型：

$$\hat{H} = \vec{h}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma} ,$$

$\vec{\sigma}$ 为泡利矩阵，$\vec{h}(\vec{k})$ 为从紧束缚模型中获得的矢量函数.

(可认为：$\hat{H} = \sum_{\substack{i,j \\ =1,2}} c^{+}_{ki} [\vec{h}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma}]_{ij} c_{kj}$.)

可如下：计算 Ω_z (在能量较低的带中)

(1) 贝利联络：

$$A_e = \langle u_k | i \partial_{k_e} | u_k \rangle$$
$$= i \partial_{k_e} h_i \langle u_k | \partial_{h_i} | u_k \rangle$$

(2) Ω_z: (相同指标代表求和)

$$\Omega_z = \varepsilon_{zlm}\,\partial_l A_m \qquad =0$$

$$= \varepsilon_{zlm}\, i\left(\partial_{k_l}\partial_{k_m} h_i\right)\langle u_k|\,\partial_{h_i}|u_k\rangle$$

$$+\ \varepsilon_{zlm}\, i\,\partial_{k_m}h_i\ \partial_{k_l}\langle u_k|\,\partial_{h_i}|u_k\rangle$$

$$= i\varepsilon_{zlm}\ \partial_{k_m}h_i\ \partial_{k_l}h_j\ \ \partial_{h_j}\langle u_k|\,\partial_{h_i}|u_k\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\varepsilon_{zlm}\,\partial_{k_m}h_i\ \partial_{k_l}h_j\ \ i\partial_{h_j}\langle u_k|\,\partial_{h_i}|u_k\rangle$$

$$+\ \frac{1}{2}\varepsilon_{zml}\,\partial_{k_l}h_i\ \partial_{k_m}h_j\ \ i\partial_{h_j}\langle u_k|\,\partial_{h_i}|u_k\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\varepsilon_{zlm}\,\partial_{k_m}h_i\ \partial_{k_l}h_j\ \ i\partial_{h_j}\langle u_k|\,\partial_{h_i}|u_k\rangle$$

$$-\ \frac{1}{2}\varepsilon_{zlm}\,\partial_{k_l}h_i\ \partial_{k_m}h_j\ \ i\partial_{h_j}\langle u_k|\,\partial_{h_i}|u_k\rangle$$

$\downarrow (i \leftrightarrow j)$

$$= \frac{1}{2}\varepsilon_{zlm}\,\partial_{k_m}h_i\ \partial_{k_l}h_j\ \ i\partial_{h_j}\langle u_k|\,\partial_{h_i}|u_k\rangle$$

$$-\ \frac{1}{2}\varepsilon_{zlm}\,\partial_{k_l}h_j\ \partial_{k_m}h_i\ \ i\partial_{h_i}\langle u_k|\,\partial_{h_j}|u_k\rangle$$

我们可定义 $\vec{h}$ 空间的贝利曲率

$$\vec{\Omega}_h = \nabla_{\vec{h}}\times\vec{A}_h$$

其中 $\vec{A}_h = i\langle u_k|\,\partial_{\vec{h}}|u_k\rangle$

我们利用之前的公式计算

$$\Omega_{h_x} = i\,\frac{\langle 1|\partial_y H|2\rangle\langle 2|\partial_z H|1\rangle - (y\leftrightarrow z)}{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)^2}$$

1和2为带指标，∂_y 为 ∂_{h_y}.（之前计算动量空间的Ω，故 ∂_y 为 ∂_{k_y}. 这里做了扩展）

在此：$\partial_y H=\sigma_y$, $\partial_z H=\sigma_z$.

$\varepsilon_1=-|\vec h|$, $\varepsilon_2=+|\vec h|$, 定义 $h=|\vec h|$.

$$(\varepsilon_2-\varepsilon_1)^2=4h^2$$

$$|1\rangle=\psi_1=\frac{1}{\xi}\begin{pmatrix} h_3-h \\ h_1+ih_2\end{pmatrix},\quad |2\rangle=\psi_2=\frac{1}{\xi}\begin{pmatrix} h_1-ih_2 \\ h-h_3\end{pmatrix}$$

$$\xi^2=(h_3-h)^2+(h_1+ih_2)(h_1-ih_2)=2h^2-2hh_3$$

$$\langle 1|\sigma_y|2\rangle=\frac{1}{\xi^2}\left[i(h-h_3)^2+i(h_1^2-h_2^2)+2h_1h_2\right]$$

$$\langle 1|\sigma_z|2\rangle=-\frac{h_1-ih_2}{h}.$$

代入.

$$\Omega_{h_x}=\frac{h_x}{2h^3}$$

同法可得 $\Omega_{h_y}=\frac{h_y}{2h^3}$, $\Omega_{h_z}=\frac{h_z}{2h^3}$.

回到. Ω_z

$$\Omega_z = \frac{1}{2}\varepsilon_{zlm}\,\partial_{k_m}h_i\,\partial_{k_l}h_j \quad \varepsilon_{jia}\,\Omega_{h_a}$$

$$= \frac{1}{2}\varepsilon_{zlm}\varepsilon_{jia}\,\partial_{k_m}h_i\,\partial_{k_l}h_j\,\frac{h_a}{2h^3}$$

$$= \varepsilon_{jia}\,\partial_{k_x}h_j\,\partial_{k_y}h_i\,\frac{h_a}{2h^3}$$

$$= \frac{1}{2h^3}\left(\partial_x\vec{h}\times\partial_y\vec{h}\right)\cdot\vec{h}$$

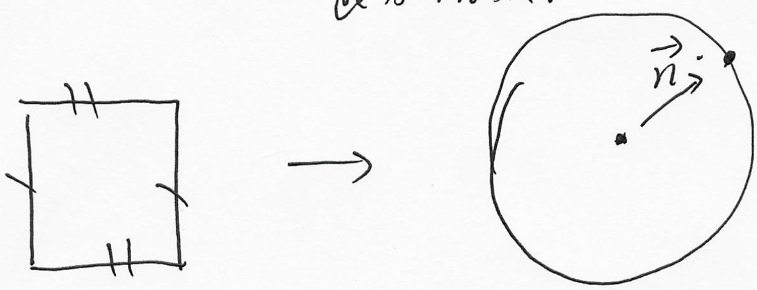
定义 $\vec{n} = \frac{\vec{h}}{h}$

则. $\Omega_z = \frac{1}{2}\left(\partial_x\vec{n}\times\partial_y\vec{n}\right)\cdot\vec{n}$

故 拓扑数:

$$N = \frac{1}{4\pi}\iint_{\Sigma} dk_x\,dk_y\,\left(\partial_x\vec{n}\times\partial_y\vec{n}\right)\cdot\vec{n}$$

此为绕数.



$\vec{h}$或者$\vec{n}$可定义如下映射:

$$\vec{n}:\{(k_x,k_y)\in T^2\}\longrightarrow\{\vec{n}\in S^2\}.$$

从环面至球面.

注意 $\partial_x\vec{n}$ 与 $\partial_y\vec{n}$ 均与 $\vec{n}$ 垂直,

故在切平面内.

$(\partial_x\vec{n}\times\partial_y\vec{n})\cdot\vec{n}$ 给出~~映射~~面积元映射:

$$dk_x dk_y \longrightarrow \delta S_{\vec{n}}$$

单位球上的面积元.

$$\iint_{\Sigma} dk_x dk_y \ (\partial_x\vec{n}\times\partial_y\vec{n})\cdot\vec{n}$$

则为映射的总面积

4π 为单位球面的总立体角.

故 N 代表当 $\vec{k}$ 遍历环面时, $\vec{n}$ 可绕球面几次.

3、 拓扑数与 Stokes 定理.

Stokes 定理:

$$\iint_{\Sigma} \Omega \, dk_x dk_y = \int_{\partial\Sigma} \vec{A}\cdot d\vec{l}$$

$$(\vec{\Omega}=\nabla\times\vec{A})$$

但二维布里渊区为环面, 无边界

故 $\int_{\partial\Sigma} \vec{A}\cdot d\vec{l}=0$

这与非零拓扑数矛盾.

但 Stokes 定理要求 $\vec{\Omega}$ 与 $\vec{A}$ 均有良好定义.

而二者均涉及 $|u\rangle$ 对 $\vec{k}$ 的导数.

注意 $|\psi\rangle$ 或者 $|u\rangle$ 的规范：

$$H=\frac{P^2}{2m}+U,\quad H_k=\frac{(P+\hbar k)^2}{2m}+U$$

$H|\psi\rangle=E|\psi\rangle$, $\quad |\psi\rangle\to e^{i\varphi(k)}|\psi\rangle$

$H_k|u\rangle=E|u\rangle$, $\quad$ 或 $|u\rangle\to e^{i\varphi(k)}|u\rangle$

仍满足左边方程.

为求导数，我们需要 $|u\rangle$ 在 $\vec{k}$ 空间光滑，故需确定相角 $\varphi(k)$

由于 $|u\rangle$ 具有周期性

$\langle r|u\rangle=u_k(r)$, $u_k(r+a)=u_k(r)$

(或 $u_k(r+\vec{R})=u_k(r)$)，$\vec{R}$ 为一般晶格的晶格矢.

故 $u_k(\vec{r})=\sum_G e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}\, C_{\vec{G}}(\vec{k})$

$\vec{G}$ 满足 $\vec{G}\cdot\vec{R}=2m\pi$，$\vec{G}$ 与 $\vec{R}$ 共轭，在一维 $G=m\cdot\frac{2\pi}{a}$.

C 为傅里叶分解的系数，一般与 $\vec{k}$ 和 $\vec{G}$ 均有关.

如果对某个 $\vec{G}_0$，$C_{G_0}(\vec{k})\neq 0$.

我们可取 $e^{i\varphi_0(k)}C_{G_0}(\vec{k})$ 为实数，则 $u_k(r)$ 的相位确定.

如果处处均如此，则 Stokes 定理成立，$N=0$.

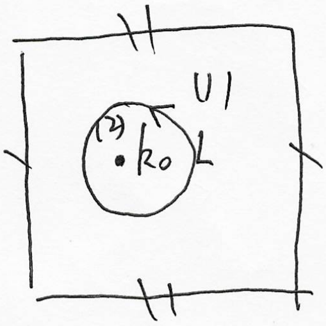
如果在某个 k_0 点处 $C_{G_0}(k_0)=0$，则在此点，上述取法不成立.

我们应另找一个 G_1，使得 $e^{i\varphi_1(k)}C_{G_1}(k)$ 在 k_0 点为实数.

注意一般情况下 $\varphi_0\neq\varphi_1$

同时，G_1 必定存在，因为不可能在某个 k_0 点，所有的 $C_G(k_0)$ 均为0.

拓扑数则源于规范选择的变化.



假设:

·在(1)中, $C_{G_0}(k)\neq 0$

在k_0点, $C_{G_0}(k_0)=0$

而在(2)中, $C_{G_1}(k)\neq 0$

则我们用 $e^{i\varphi_1(k)}|u_k\rangle$ 作为(1)中Bloch态的周期部分.

$e^{i\varphi_2(k)}|u_k\rangle$ 作为(2)中……

记为 $|u^{(1)}\rangle$　　记为 $|u^{(2)}\rangle$

则 $|u^{(2)}\rangle = e^{i(\varphi_2-\varphi_1)}|u^{(1)}\rangle = e^{i\tilde{\varphi}}|u^{(1)}\rangle$.

由于在(1)与(2)中 $|u^{(1)}\rangle$ 与 $|u^{(2)}\rangle$ 均光滑.

故在(1)与(2)中可用Stokes定理:

$$N=\frac{1}{2\pi}\iint_{(1)}\Omega_z\,dk_x dk_y+\frac{1}{2\pi}\iint_{(2)}\Omega_z\,dk_x dk_y$$

$$=-\frac{1}{2\pi}\oint_L \vec{A}_{(1)}\cdot d\vec{k}+\frac{1}{2\pi}\oint_L \vec{A}_{(2)}\cdot d\vec{k}$$ (注意边界的方向)

$$=\frac{1}{2\pi}\oint_L\left(\vec{A}_{(2)}-\vec{A}_{(1)}\right)\cdot d\vec{k}$$

而 $\vec{A}_{(2)}=i\langle u^{(2)}|\partial_k|u^{(2)}\rangle=i\langle u^{(1)}|\partial_k|u^{(1)}\rangle-\partial_k\tilde{\varphi}$
$=\vec{A}_{(1)}-\partial_k\tilde{\varphi}$

故 $\cancel{N=\frac{1}{2\pi}\oint_L\partial_k\tilde{\varphi}\cdot d\vec{k}}$ $N=-\frac{1}{2\pi}\oint_L\partial_k\tilde{\varphi}\cdot d\vec{k}$

由于波函数单值性的限制, $\oint_L\partial_k\tilde{\varphi}\cdot dk=\Delta\varphi=2m\pi$.

故 $N=-m$.

当布里渊区中有若干个点 ~~均有~~ 的 $C_{G_0}(k)=0$时, 上述结论不变.