固体中的电子

物理中的几何相位（专题2）

高阳

固体理论发展的起始：输运问题

- 金属导电与导热现象
- 理论：Drude模型
- 导电：材料中有带电的、能自由运动的粒子

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\boldsymbol{p}}{m},$$

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -e\,\boldsymbol{E} - \frac{\boldsymbol{p}}{\tau}$$ 。（原始的Drude理论为保证电中性，会考虑多种粒子。）

$$\boldsymbol{J} = -en\dot{\boldsymbol{r}} = \sigma\boldsymbol{E} \qquad \sigma = ne^2\tau/m$$

- 导热：两次碰撞之间的热流

$$J_q^0 = n\,\varepsilon(x)\,v_x, \qquad \varepsilon(x) = \frac{3}{2}k_B T(x) = \frac{3}{2}mv_x^2$$

$$J_q^{net} = n\,\varepsilon(x)\,v_x - n\,\varepsilon(x+\ell)v_x = \kappa\frac{\partial T}{\partial x}, \qquad \kappa = \frac{3}{2}k_B^2 Tn\tau/m$$

- Wiedemann-Franz law

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{3}{2}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 T$$

Drude理论的若干重大缺陷

- 金属中的弱顺磁

- 实际观测的弛豫时间过大

- 霍尔效应中的负质量

首次改进：量子统计

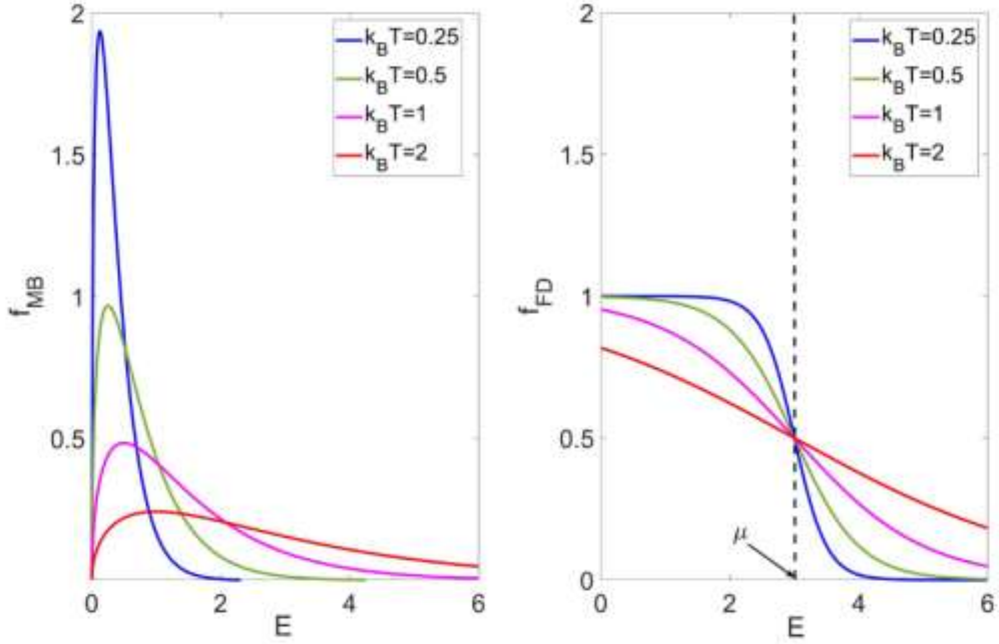
- 气体理论：Maxwell-Boltzmann分布

$$f_{MB} = \lambda_0 \, e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

- 电子的量子统计：Fermi-Dirac分布

$$f_{FD} = \frac{1}{1+\exp\left[\frac{\varepsilon_i-\mu}{k_B T}\right]}$$

- 在低温有极为不同的特征，但尾部相似



不同温度下的麦克斯韦分布（a）与费米-狄拉克分布（b）。

示例：泡利顺磁 (1)

- 具有固定磁矩的原子气（假设磁矩由自旋产生）
- 塞曼能

$$E = g\mu_B mB,\ m = \pm 1$$

- Maxwell-Boltzmann分布

$$f_{MB} = \frac{2}{\cosh\left(\frac{g\mu_B B}{k_B T}\right)}\ e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

- 磁矩

$$\bar{\mu} = n\sum_m f_{MB}\ g\mu_B m$$

- 磁化率

$$\chi_{MB} = \frac{\partial\overline{\mu}}{\partial B} = -4n\frac{g^2\mu_B^2}{k_B T}\frac{1}{\cosh^2\left(\frac{g\mu_B}{k_B T}\right)}$$

示例：泡利顺磁 (2)

- 具有固定磁矩的原子气（假设磁矩由自旋产生）
- 塞曼能

$$E = E_0 + g\mu_B mB,\ m = \pm 1$$ （动能部分不独立）

- Fermi-Dirac分布

$$f_{FD} = \frac{1}{1+\exp\left[\frac{E-\mu}{k_B T}\right]}$$

- 磁矩

$$\bar{\mu} = \int dE_0\, g(E_0) f_{FD}(E) g\mu_B m$$

态密度

- 磁化率

$$\chi_{FD} = \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial B} = 2g^2\mu_B^2 g(\mu) = n\frac{3g^2\mu_B^2}{2\mu},\qquad n = \frac{(2m\mu)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2}$$

- 不同方式的磁化率的比值

$$\frac{\chi_{FD}}{\chi_M} \propto \frac{k_B T}{E_0}$$

再次改进：布洛赫理论

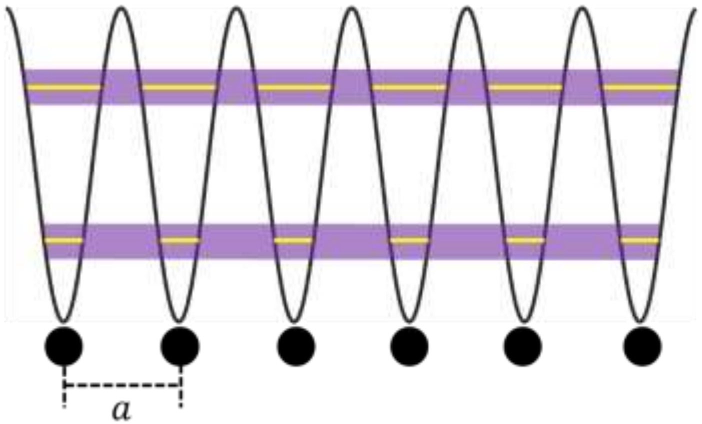
- 周期性势场中的电子

  $$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}), \qquad U(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = U(\boldsymbol{r})$$

- 势场来源：周期排布的原子，原子-电子、电子-电子的库伦势
- 本征值： $\hat{H}\psi = E\psi$
- 平移算符： $T_{\boldsymbol{R}}\phi(\boldsymbol{r}) = \phi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})$
- 平移算符本征态： $T_{\boldsymbol{R}}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\,\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$
- 调幅平面波

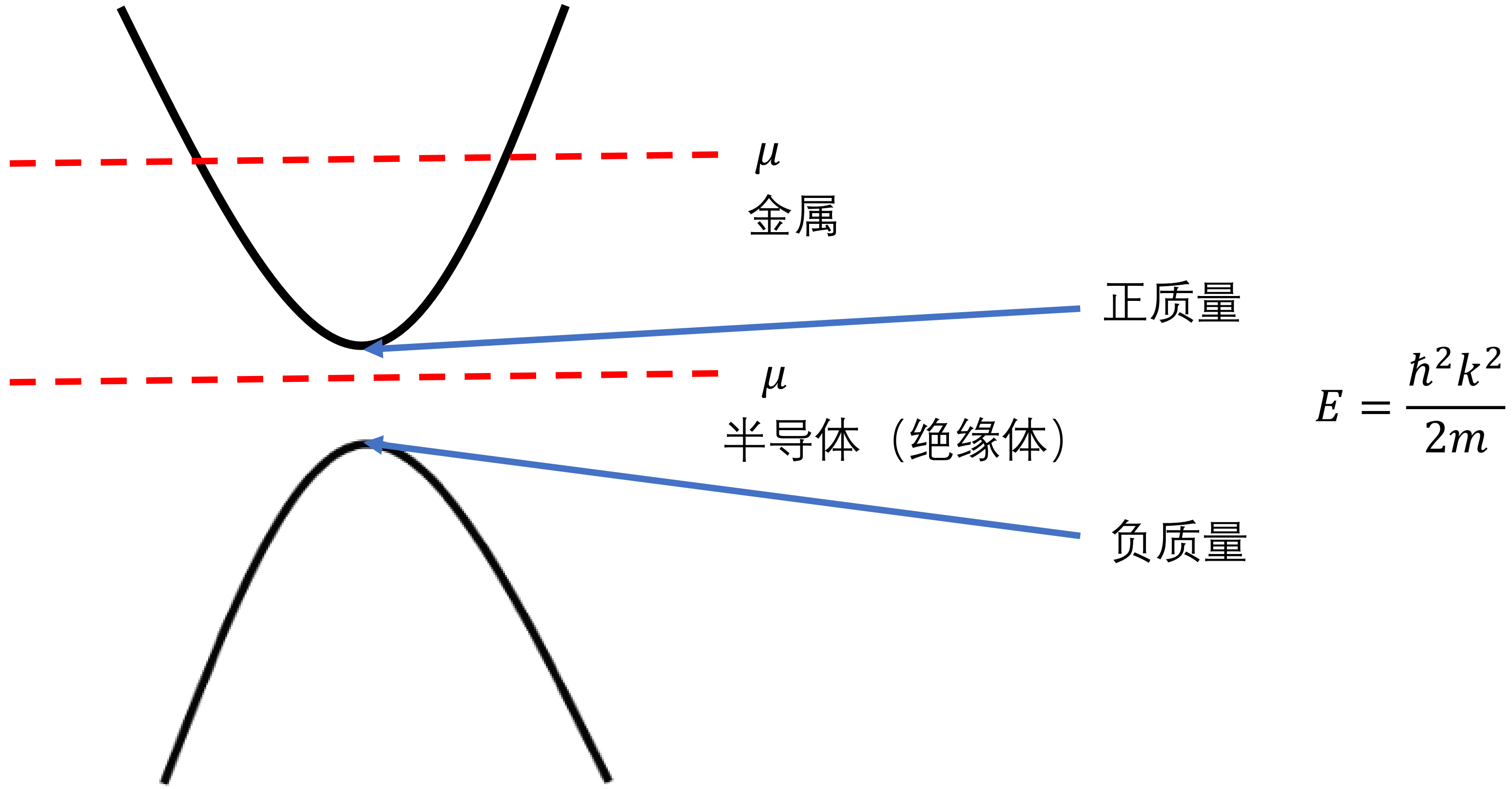
  $$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u(\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}),\ T_{\boldsymbol{R}}u(\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}) = u(\boldsymbol{k};\boldsymbol{r})$$

- 能带： $E = E(\boldsymbol{k})$ 　 $\boldsymbol{k}$取值于布里渊区（由于周期性）
- 分子概念的延申： $E = E_n(\boldsymbol{k}), \psi = \psi_n(\boldsymbol{k})$



固体中电子感受到的周期势场与能带。黄线展示每个原子中的电子能级，其初始值对于不同位置的原子相同。紫色区域则为不同原子的电子云重叠导致原子能级弥散而成的能带区域。

示例：材料分类与负质量



波函数的规范依赖

- 本征方程

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}) \qquad\qquad \hat{H}\psi_n(\boldsymbol{k}) = E\psi_n(\boldsymbol{k})$$

- 规范变换 $\psi_n(\boldsymbol{k}) \to e^{i\phi(\boldsymbol{k})}\psi_n(\boldsymbol{k})$
- 复平面内的转动

- 若存在简并 $\psi_n(\boldsymbol{k}) \to U_{nm}(\boldsymbol{k})\psi_m(\boldsymbol{k})$

波函数的规范依赖：示例

- 狄拉克型哈密顿量

$$\hat{H} = k_x\sigma_x + k_y\sigma_y + k_z\sigma_z = \begin{pmatrix} k_z & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & -k_z \end{pmatrix}$$

- 能带 $E = \pm k$

- 正能带波函数

$$\psi_+ = \frac{1}{\xi_1}\begin{pmatrix} k_x - ik_y \\ k - k_z \end{pmatrix} \qquad \psi_+ = \frac{1}{\xi_2}\begin{pmatrix} k + k_z \\ k_x + ik_y \end{pmatrix}$$

- 规范变换

$$e^{i\phi(\boldsymbol{k})} = \frac{k_x + ik_y}{\sqrt{k^2 - k_z^2}}$$

电子的贝里联络

- 参数空间的贝里联络

$$\phi_B = \int dR \, \langle \psi(R) | i\partial_R | \psi(R) \rangle$$

- 以动量为参数 $R \rightarrow \boldsymbol{k}$

- 贝里联络

$$\boldsymbol{A}_n(k) = \langle u_n(\boldsymbol{k}) | i\boldsymbol{\partial}_{\boldsymbol{k}} | u_n(\boldsymbol{k}) \rangle$$

- 规范变换 $|u_n(\boldsymbol{k})\rangle \rightarrow e^{i\phi(\boldsymbol{k})} \, |u_n(\boldsymbol{k})\rangle$

$$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k}) \rightarrow \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k}) - \boldsymbol{\partial}_{\boldsymbol{k}}\phi(\boldsymbol{k})$$

电子的贝里曲率

- 斯托克斯定理

$$\phi_B = \oint \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k}) \cdot d\boldsymbol{k} = \int\int d\boldsymbol{k}\ \hat{n} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k})\right)$$

- 贝里曲率：贝里相位密度

$$\boldsymbol{\Omega}_n = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k})$$

- 规范变换：$|u_n(\boldsymbol{k})\rangle \rightarrow e^{i\phi(\boldsymbol{k})}\,|u_n(\boldsymbol{k})\rangle$

$$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k}) \rightarrow \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k}) - \boldsymbol{\partial}_{\boldsymbol{k}}\phi(\boldsymbol{k})$$

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{k}) \rightarrow \boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{k})$$

贝里曲率的计算

- $\boldsymbol{\Omega}_n = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k}) = \hat{n}_i \epsilon_{ij\ell} \partial_{k_j} \langle u_n | i\partial_{k_\ell} | u_n \rangle$ 重复指标默认求和
$$= \hat{n}_i \epsilon_{ij\ell} \left\langle \partial_{k_j} u_n \middle| i\partial_{k_\ell} \middle| u_n \right\rangle$$
$$= \hat{n}_i \epsilon_{ij\ell} i \textstyle\sum_{m \neq n} \langle \partial_k u_n | u_m \rangle \langle u_m | \partial_k | u_n \rangle$$
- $\hat{H}(\boldsymbol{k}) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \hat{H} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \frac{(\hat{\boldsymbol{p}} + \hbar\boldsymbol{k})^2}{2m} + U(\boldsymbol{r})$
- $\hat{v}(k) = -i\left[\boldsymbol{r}, \hat{H}(\boldsymbol{k})\right] = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \hat{H}(\boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{k}}$
- $\hat{H}(k)|u_n\rangle = E_n |u_n\rangle,\ \partial_k \hat{H}(k)|u_n\rangle + \hat{H}(k)|u_n\rangle = \partial_k E_n |u_n\rangle + E_n \partial_k |u_n\rangle$
- $\langle u_m | \boldsymbol{\partial}_{\boldsymbol{k}} | u_n \rangle = \frac{\langle u_m | \partial_{\boldsymbol{k}} \hat{H}(\boldsymbol{k}) | u_n \rangle}{E_n - E_m}$
- $\boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{k}) = i \hat{n}_i \epsilon_{ij\ell} \frac{\left\langle u_n \middle| \partial_{k_j} \hat{H}(\boldsymbol{k}) \middle| u_m \right\rangle \left\langle u_m \middle| \partial_{k_\ell} \hat{H}(\boldsymbol{k}) \middle| u_n \right\rangle}{(E_n - E_m)^2} = -\hat{n}_i \epsilon_{ij\ell}\, Im \frac{\left\langle u_n \middle| \partial_{k_j} \hat{H}(\boldsymbol{k}) \middle| u_m \right\rangle \left\langle u_m \middle| \partial_{k_\ell} \hat{H}(\boldsymbol{k}) \middle| u_n \right\rangle}{(E_n - E_m)^2}$