量子化电导率与拓扑性

物理中的几何相位（专题4）

高阳

反常霍尔效应

- 反常霍尔电导

$$J = -\frac{e^2}{\hbar}\boldsymbol{E} \times \int \frac{d\boldsymbol{k_c}}{8\pi^3}\ \boldsymbol{\Omega}\, f\,(\varepsilon_{n\boldsymbol{k_c}})$$

- 零温下的分布函数：阶跃函数

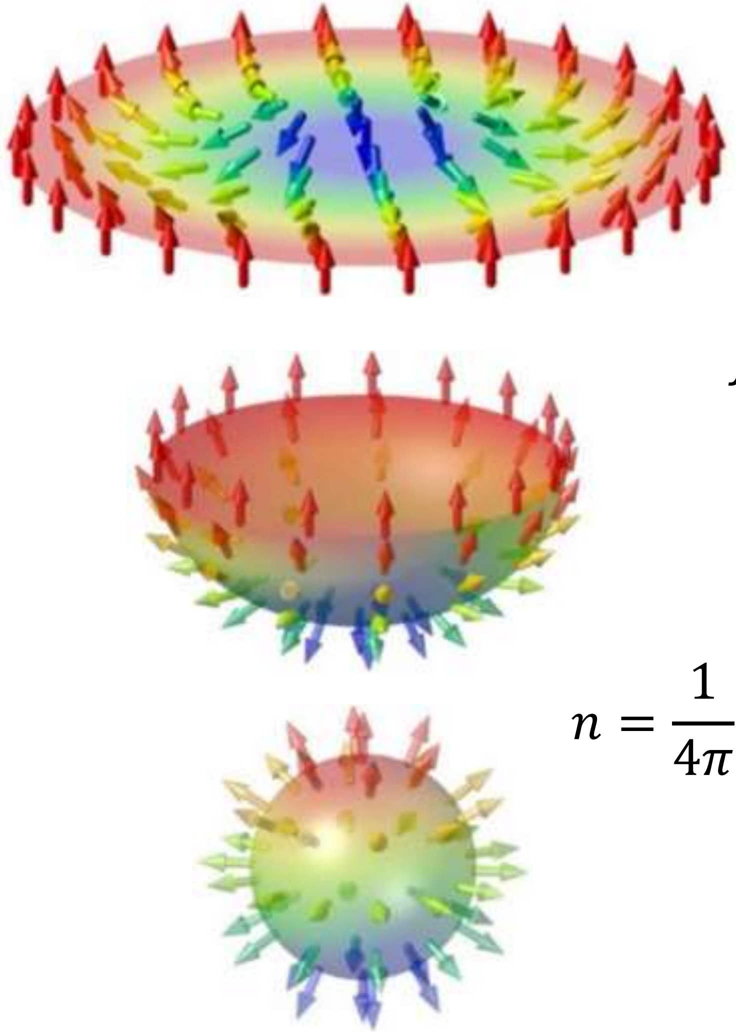
$$f(\varepsilon_n) \to \Theta(\mu - \varepsilon_n)$$

- 绝缘体：满带积分

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{\sigma}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = -\frac{e^2}{\hbar}\sum\nolimits_{n\in occ}\int \frac{d\boldsymbol{k_c}}{8\pi^3}\ \boldsymbol{\Omega}_n$$

贝里曲率与二维绕数



$$f: S^2 \to S^2$$

$$n = \frac{1}{4\pi} \int_c \hat{\boldsymbol{S}} \cdot \frac{\partial \hat{\boldsymbol{S}}}{\partial x} \times \frac{\partial \hat{\boldsymbol{S}}}{\partial y} dxdy$$

- 二能带模型:

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

- 动量取值范围

  全空间与局域近似

- 贝里曲率

  $$\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{z}} = \frac{1}{2} \hat{\boldsymbol{h}} \cdot (\partial_{k_x} \hat{\boldsymbol{h}} \times \partial_{k_y} \hat{\boldsymbol{h}})$$

- 量子化

  $$n = \frac{1}{2\pi} \int dk_x dk_y \, \Omega_z$$

量子化与斯托克斯定理

- 斯托克斯定理

$$\mathbf{\Omega_n} = \nabla \times \boldsymbol{A_n}$$

$$\int\int d\boldsymbol{S}\cdot\mathbf{\Omega_n} = \oint \boldsymbol{A_n}\cdot d\boldsymbol{k}$$

- 布里渊区的周期性

波函数角度

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

$$T_{\boldsymbol{R}}\psi_{n\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\psi_{n\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r})$$

物理量角度

$$E(\boldsymbol{k}) = E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})$$

布里渊区无边界!

$$\int\int d\boldsymbol{S}\cdot\mathbf{\Omega_n} = \oint \boldsymbol{A_n}\cdot d\boldsymbol{k} = \mathbf{0}$$

- 量子化的含义：无法以统一的方式构造波函数

波函数的规范选择

- 布洛赫波

$$\psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\, u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$$

- 规范选择

$$u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \to e^{i\phi(\boldsymbol{k})}\, u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$$

- 确定相位：傅里叶分解

$$u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{G}} c_{\boldsymbol{G}}^{\boldsymbol{k}}\, e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r}} \quad \text{G满足 } \boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{R} = 2n\pi$$

选取某个$\boldsymbol{G_0}$, 满足$c_{\boldsymbol{G_0}}^{k} \neq 0$

通过附加相位因子$e^{i\phi(\boldsymbol{k})}$，进一步要求 $e^{i\phi(\boldsymbol{k})} c_{\boldsymbol{G_0}}^{\boldsymbol{k}} > 0$

- 若此选择在布里渊区处处成立：

$$\int\int d\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{n}} = \oint \boldsymbol{A}_n \cdot d\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$$

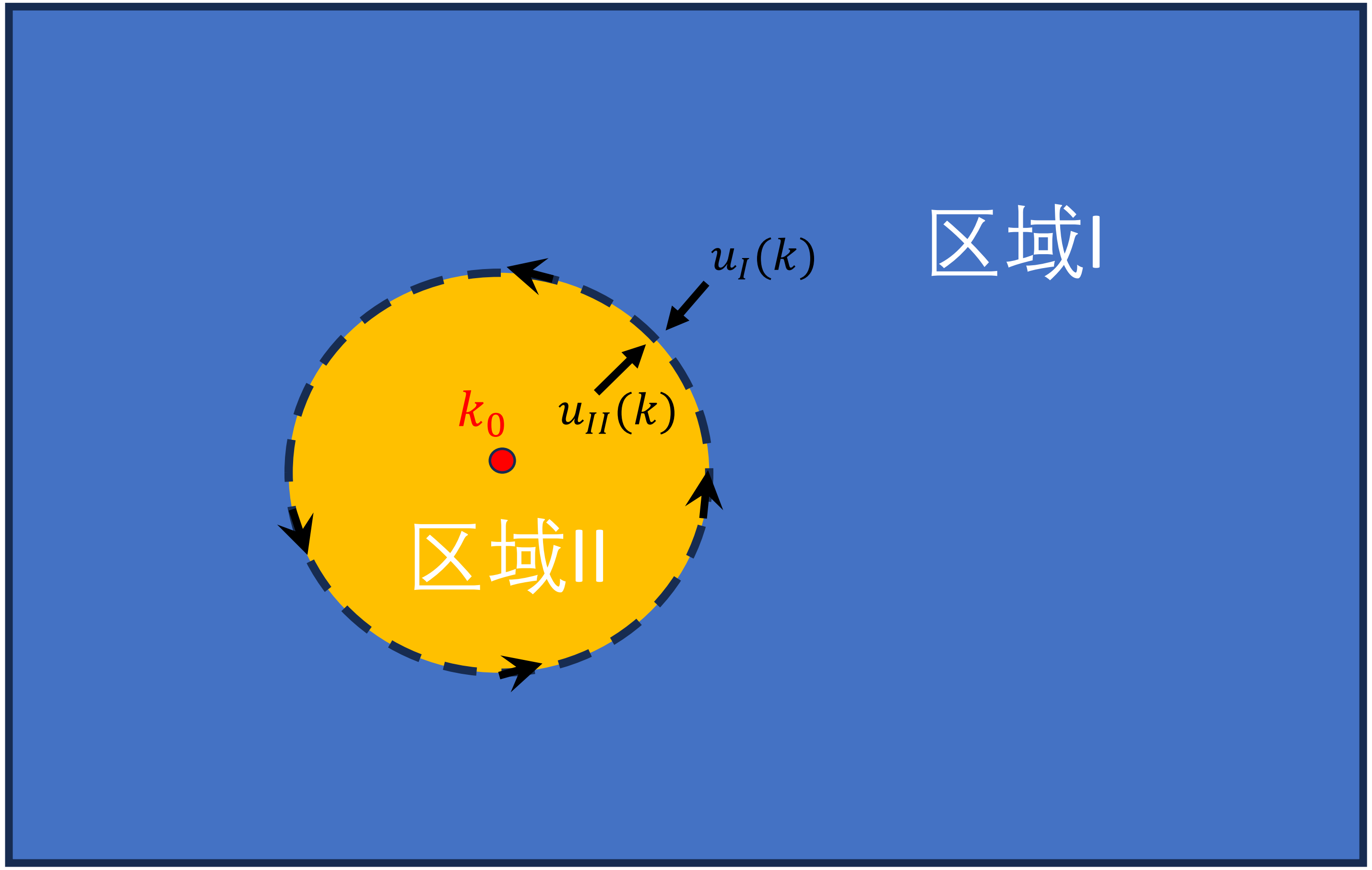
量子化与区域分化

- 若不能处处成立，则存在一点
$$c_{\boldsymbol{G_0}} = 0$$
- 另选一点$\boldsymbol{G_1}$, 满足$c_{\boldsymbol{G_1}} \neq 0$
- 通过附加相位因子$e^{i\phi_1(\boldsymbol{k})}$,
  进一步要求 $e^{i\phi_1(\boldsymbol{k})}c_{\boldsymbol{G_1}}^{\boldsymbol{k}} > 0$

- 通常情况下$\phi_0(\boldsymbol{k}) \neq \phi_1(\boldsymbol{k})$
  由此则用两种不同的相位给出了波函数的确切含义

- 可推广至一般情形

区域分化图解



区域I中：

$$c_{\boldsymbol{G_0}}^{k} \neq 0$$

区域II中：

$$c_{\boldsymbol{G_0}}^{k_0} = 0$$

$$c_{\boldsymbol{G_1}}^{k} \neq 0$$

斯托克斯定理与量子化

- 在几个区域各自定义波函数相位
- 在边界处应满足

$$u_{II}(\boldsymbol{k}) = e^{i\phi(\boldsymbol{k})}\, u_I(\boldsymbol{k})$$

- 在两个区域各自用斯托克斯定理

$$
\begin{aligned}
N = \frac{1}{2\pi}\int \Omega_z dS &= \frac{1}{2\pi}\int_I \Omega_z dS + \frac{1}{2\pi}\int_{II} \Omega_z dS \\
&= -\frac{1}{2\pi}\oint d\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{A_I} + \frac{1}{2\pi}\oint d\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{A_{II}} \\
&= \frac{1}{2\pi}\oint \boldsymbol{\partial}\phi\cdot d\boldsymbol{k} = n
\end{aligned}
$$

- 可推广至一般情形