作业三

2024 年 3 月 20 日

1. 波包的半经典运动方程如下（取 $\hbar = 1$）：

$$\dot{\boldsymbol{x}}_c = \frac{\partial \varepsilon_M}{\partial \boldsymbol{k}_c} - \dot{\boldsymbol{k}}_c \times \boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{k}_c)$$
$$\dot{\boldsymbol{k}}_c = -e\boldsymbol{E} - e\dot{\boldsymbol{x}}_c \times \boldsymbol{B}$$

简便起见，我们在只有电场微扰的情况下推导这一运动方程。

在考虑电场微扰的情况下，体系的哈密顿量可以写成位置算符 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 和动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的函数：

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{p}}) - e\hat{\phi}(\hat{\boldsymbol{x}}, t)$$

其中，$\hat{H}_0$ 代表不考虑外场时的哈密顿量，满足晶格平移对称性，而电势项的存在破坏了 $\hat{H}$ 的晶格平移对称性（我们把规范选择为磁矢势为 0）。我们期望利用微扰论来解决这一困难，但是问题在于，$-e\hat{\phi}(\hat{\boldsymbol{x}}, t)$ 并不是微扰项，以匀强电场情况下 $-e\hat{\phi} = -e\boldsymbol{E} \cdot \hat{\boldsymbol{x}}$ 为例，当 $\hat{\boldsymbol{x}} \to \infty$ 时，这一项甚至会发散。但是如果我们假设体系是局域的，电子波函数在实空间和动量空间都形如一个波包（分别以 $\boldsymbol{x}_c$ 和 $\boldsymbol{k}_c$ 为波包中心），那么我们就可以在我们关心的有限区域内把 $-e\hat{\phi}(\hat{\boldsymbol{x}}, t) + e\phi(\boldsymbol{x}_c, t)$ 视作微扰：

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{p}}) - e\phi(\boldsymbol{x}_c, t) - e\frac{\partial \phi(\boldsymbol{x}_c, t)}{\partial \boldsymbol{x}_c} \cdot (\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}_c) = \hat{H}_c + \hat{H}'$$

$\hat{H}_c = \hat{H}_0(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{p}}) - e\phi(\boldsymbol{x}_c, t)$ 的本征态是 Bloch 态，我们将 n 能带的本征态记作 $|\psi_n(\boldsymbol{k})\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}}|u_n(\boldsymbol{k})\rangle$。

体系的拉氏量 $L = \left\langle \Psi \middle| i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \middle| \Psi \right\rangle$，如果对 $|\Psi\rangle$ 不施加限制，对应的欧拉拉格朗日方程就是薛定谔方程。我们限制 $|\Psi\rangle$ 的形式是一个在动量空间非常窄的波包，由 n 能带不同 $\boldsymbol{k}$ 对应的 Bloch 态叠加而成：$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3k\ C(\boldsymbol{k}, t)|\psi_n(\boldsymbol{k})\rangle$。叠加系数 $C(\boldsymbol{k}, t) = |C(\boldsymbol{k})|e^{-i\gamma(\boldsymbol{k},t)}$ 仅在 $\boldsymbol{k}_c$ 附近很小的区域取值，在计算时我们可以认为 $|C(\boldsymbol{k})|^2 = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_c)$。把 $|\Psi\rangle$ 代回 L 后，其欧拉拉格朗日方程就对应于波包的半经典运动方程。

(a) 我们定义 $\boldsymbol{x}_c = \langle \Psi | \hat{\boldsymbol{x}} | \Psi \rangle$，试证明：

$$\boldsymbol{x}_c = \frac{\partial \gamma(\boldsymbol{k}_c, t)}{\partial \boldsymbol{k}_c} + \left\langle u_n \middle| i \frac{\partial u_n}{\partial \boldsymbol{k}_c} \right\rangle$$

证明过程中可以直接使用结论：

$$\langle \psi_n(\boldsymbol{k}) | \hat{\boldsymbol{x}} | \psi_{n'}(\boldsymbol{k}') \rangle = i \frac{\partial \delta(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{k}} \delta_{nn'} + \left\langle u_n(\boldsymbol{k}) \middle| i \frac{\partial u_{n'}(\boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{k}} \right\rangle \delta(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k})$$

(b) 把 $|\Psi\rangle$ 的波包形式代入到拉氏量，试证明拉氏量可以化简为如下形式：

$$L = -\varepsilon_n(\boldsymbol{k}_c) + e\phi(\boldsymbol{x}_c, t) - \dot{\boldsymbol{k}}_c \cdot \boldsymbol{x}_c + \dot{\boldsymbol{k}}_c \cdot \left\langle u_n \middle| i \frac{\partial u_n}{\partial \boldsymbol{k}_c} \right\rangle$$

其中 ε_n 是没有电场微扰的哈密顿量 $\hat{H}_0$ 的 n 能带的本征值。

注意：如果两个拉氏量之差可以写成某个物理量的时间全导数，那么这两个拉氏量可以视为等价。

参考文献：Ganesh Sundaram and Qian Niu, Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals: Gradient corrections and Berry-phase effects, Phys. Rev. B. 59, 14915(1999).

2. 类比课上讲的时间反演 $\mathcal{T}$ 对称性下的情况，分别考虑在空间反演 $\mathcal{P}$（$\boldsymbol{x} \to -\boldsymbol{x}, t \to t$）对称性和镜面反演 M_z（$x \to x, y \to y, z \to -z, t \to t$）对称性下贝里曲率 $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k})$ 满足的关系。