

波包动力学方程

SA21038021 魏贤昊

2024 年 7 月 19 日

目录

1	2D 波包半经典运动方程	1
1.1	推导方法一 [1, 4]	1
1.2	有杂质位错情况下的 Berry Phase[5]	4
1.3	只有电场情况下借鉴 Thouless Pump 原理的推导 [2]	4
1.4	刘维尔定理失效 [6]	6
1.5	基于波包动力学的泊松括号修正 [12]	8
2	石墨烯谷霍尔效应简介 [7]	9
3	四维波包动力学方程推导 [8]	10
4	二阶非线性霍尔效应 [9]	12
5	带温度情况热输运波包动力学方程 [11]	13
6	附录	15
6.1	电子在微扰磁场下角动量对波包动力学影响 [4]	15
6.2	Vanderbilt 等人给出的磁化公式 [10] 和波包动力学方程给出的磁化结果一致性	16
7	参考文献	17

1 2D 波包半经典运动方程

1.1 推导方法一 [1, 4]

体系哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m}[-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}} + e\vec{A}_0(\vec{r}) + e\delta\vec{A}(\vec{r}, t)]^2 + V(\vec{r}) \quad (1)$$

其中 \vec{A} 被吸收进磁布里渊区能带, $\delta\vec{A}$ 为微扰磁场对应磁矢势。对于强局域在 k_c 附近的波包来说

$$|W_0(t)\rangle = \int_{MBZ} d^2\vec{k} w(\vec{k}, t) |\Psi(\vec{k})\rangle \quad (2)$$

其中 $|\Psi(\vec{k})\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}|u(\vec{k})\rangle$ 。这里设置 $w(\vec{k}, t)$ 为强局域在 k_c 附近的包络曲线。同时对于宏观大固体来说，可以同时满足 k_c 和 r_c 相对局域在晶体很窄的位置。对于 r_c 附近的波包，近似为

$$W(r, t) = e^{-ie/\hbar\delta\vec{A}(\vec{r}_c, t)\cdot\vec{r}}W_0(\vec{r}, t) \quad (3)$$

$$\langle W|H|W\rangle = \langle W_0|H'|W_0\rangle \quad (4)$$

$$\begin{aligned} H' &= \frac{1}{2m}\{-i\hbar\nabla + e\vec{A}_0(\vec{r}) + e[\delta\vec{A}(\vec{r}, t) - \delta\vec{A}(\vec{r}_c, t)]\}^2 + V(\vec{r}) \\ &= H_0 + \frac{e}{2m}\{[\delta\vec{A}(\vec{r}, t) - \delta\vec{A}(\vec{r}_c, t)]\cdot\vec{P} + \vec{P}\cdot[\delta\vec{A}(\vec{r}, t) - \delta\vec{A}(\vec{r}_c, t)]\} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\vec{P} = -i\hbar\nabla_r + eA_0(r) \quad (6)$$

其中 H_0 为无微扰电磁场情况下的哈密顿量，我们定义微扰电磁场矢量势 $\delta\vec{A}(\vec{r}, t) = -\vec{E}t + 1/2\delta\vec{B}\times\vec{r}$ ，由于对易关系 $[P_j, (\delta\vec{B}\times\vec{r})_j] = 0$ ，于是有

$$H' = H_0 + \frac{e}{2m}\delta\vec{B}\cdot\vec{L} + eEr \quad (7)$$

故我们求得有磁布里渊区只有微扰磁场无微扰电场时时等效能带，也能解释为什么蝴蝶能谱存在能量劈裂，当然这是量子化的劈裂

$$E_n(k) = \epsilon_n(k) + \frac{e}{2m}\delta\vec{B}\cdot\vec{L}_n(\vec{k}) \quad (8)$$

下面导出等效拉格朗日量：根据 Eq3 以及波包在 \vec{k}_c 附近尖锐分布条件于是有

$$\langle W|i\hbar\partial_t|W\rangle = e\delta\vec{A}(\vec{r}_c, t)\cdot\vec{r} - \hbar\partial_t\arg w(k_c, t) \quad (9)$$

$$r_c = \langle W|i\hbar\partial_k|W\rangle = -\hbar\partial_k\arg w(k_c, t) + A(k_c) \quad (10)$$

整个体系拉格朗日量为

$$L = \langle W|i\hbar\partial_t|W\rangle - \langle W|H|W\rangle \quad (11)$$

并根据拉格朗日量变换法则将 $L \rightarrow L + \frac{df}{dt}$ 后粒子运动方程不变，这里我们假设 $f = \hbar\arg w(k_c(t), t) - e\delta\vec{A}(\vec{r}_c, t)\cdot\vec{r}$ ，于是有等效拉格朗日量为

$$L = \hbar\vec{k}_c\cdot\dot{\vec{r}}_c - e\delta\vec{A}\cdot\dot{\vec{r}} + \vec{A}(k_c)\cdot\dot{\vec{k}}_c - E(k) - eEr \quad (12)$$

其中 $E(k) = \epsilon(k) + \frac{e}{2m}\delta\vec{B}\cdot\vec{L}(\vec{k})$ 根据 $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\vec{r}} = \frac{\partial L}{\partial\vec{r}}$, $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\vec{k}} = \frac{\partial L}{\partial\vec{k}}$ 。同时根据附录”电子在微扰磁场下角动量对波包动力学影响”中我们论证了 $\delta\vec{B}\cdot\vec{L}(k_c)$ 项对波包动力学方程无任何影响，所有影响都被吸收进 $\epsilon_n(k, t)$ 里面了，故有

$$\dot{r} = \frac{\partial\epsilon_n(k)}{\hbar\partial k} - \dot{k}\times\Omega_n(k)\hat{z} \quad (13)$$

$$\hbar\dot{k} = -eE(r) - e\dot{r}\times\delta B(r) \quad (14)$$

在只有微扰磁场没有电场时候，根据上述方程可解得解得 [3] 半经典运动方程为

$$\hbar\dot{k} = -\frac{\frac{\partial E_n}{\partial k}\times\hat{z}\delta B e/\hbar}{1 + \Omega_n(\vec{k})\delta B e/\hbar} \quad (15)$$

$$\dot{r} = \dot{k}\times\hat{z}\frac{\hbar}{e\delta B} \quad (16)$$

加入电场后情况为

$$\dot{r} = \frac{\hbar}{e\delta B} \dot{k} \times \hat{z} + \vec{E} \times \hat{z} / \delta B \quad (17)$$

超磁轨道 [3, 4]: 在只有磁场没有电场下电子运动拉格朗日量 (Eq13、Eq14) 应该对应的半经典运动方程为

$$\hbar \dot{k}_c = e \left[\frac{\partial E}{\hbar \partial \vec{k}_c} + \dot{\vec{k}} \times \Omega \right] \times \delta B \hat{z} \quad (18)$$

$$L(k, \dot{k}) = \frac{\hbar^2}{2e\delta B} (k_1 \dot{k}_2 - k_2 \dot{k}_1) + \hbar \dot{k} \cdot A_n(k) - E_n(k_c) \quad (19)$$

根据 $\frac{d}{dt} \frac{\partial L(k, \dot{k})}{\partial \dot{k}} = \frac{\partial L(k, \dot{k})}{\partial k}$ 求得结果和运动方程 Eq18 一致

下面得到超轨道量子化, 对于一个周期来说, $\exp\left[\frac{i}{\hbar} \oint_0^T L dt\right] = 1$, 当然这在 Aharonov-Bohm 效应中得到了体现, 由此我们可以得到

$$\frac{1}{2} \oint_{C_m} (\vec{k} \times d\vec{k}) \cdot \hat{z} = 2\pi \left[m + \frac{1}{2} - C_m \right] \frac{e\delta B}{\hbar} \quad (20)$$

假设最外层磁轨道比第一磁布里渊区小, 那么定义 $\delta\phi = \delta B a^2 e / \hbar$, 可得轨道数目大概等于

$$\text{number of orbits} = \frac{1}{q\delta\phi} + C_m \quad (21)$$

联合玻尔兹曼方程解输运曲线: 根据 Eq13、Eq14 和玻尔兹曼方程

$$\dot{r} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \dot{k} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = -\frac{f - f_0}{\tau(k)} \quad (22)$$

当我们只考虑电场时可得

$$f = f_0 - \tau \left(\frac{\partial \epsilon}{\hbar \partial \vec{k}} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} + \frac{e}{\hbar} (\vec{E} \times \Omega \hat{z}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} - \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{k}} \right) \quad (23)$$

根据 Eq13 可得无杂质时的电流为

$$\vec{J} = -e \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} f \dot{\vec{r}} \quad (24)$$

$$J_0^\Omega = -e \dot{r} = -\frac{e^2}{\hbar} \vec{E} \times \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \Omega(\vec{k}) \hat{z} \quad (25)$$

于是可得有杂质情况电流为 $J = J^\Omega + J^\tau + J^\mu$

$$J^\Omega = -\frac{e^2}{\hbar} \vec{E} \times \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} f_0 \Omega(\vec{k}) \hat{z} \quad (26)$$

$$J^\tau = e^2 \tau \int \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \vec{v}_b (\vec{v}_b \cdot \vec{E}) \quad (27)$$

备注: 这里 $\vec{v}_b = \frac{\partial \epsilon}{\hbar \partial \vec{k}}$, 这里用了对称性分析: $x \rightarrow y, y \rightarrow -x$ 应造成结论不变, 故

$$-\frac{e^2 \tau}{\hbar} \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left(\vec{E} \cdot \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{k}} \right) \cdot \left(\frac{e}{\hbar} \vec{E} \times \vec{\Omega} \right) = 0 \quad (28)$$

$$J^\mu = e \tau \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{r}} \quad (29)$$

备注: 这里讨论的是杂质足够弱不改变能带结构才成立。当 $\phi = 2\pi p/q$ 中 q 过大分裂能带过多时, 杂质影响变大 另一种表示形式: 对以上推导做改进, 实空间磁场看作 Berry 曲率, 同时能带本身是含时变化的。根据

Eq3可知 $i\frac{\partial}{\partial r_c}|W_0\rangle$ 和 $i\frac{\partial}{\partial r}|W_0\rangle$ 不相关, 因为 $|W_0\rangle$ 只依赖 r 不依赖 r_c , 而只有前者与实空间的 Berry 曲率有关, 通常大部分情况与磁场成正负号关系。对 Eq12做改进, 有

$$L = -\epsilon(r, k) + q_c \dot{x}_c + \dot{q}_c \cdot \langle u | i \frac{\partial u}{\partial q_c} \rangle + \dot{x}_c \cdot \langle u | i \frac{\partial u}{\partial x_c} \rangle + \langle u | i \frac{\partial u}{\partial t} \rangle \quad (30)$$

$$\dot{x}_c = \frac{\partial \epsilon}{\partial q_c} - (\overleftarrow{\Omega}_{qx} \cdot \dot{x}_c + \overleftarrow{\Omega}_{qq} \cdot \dot{q}_c) + \Omega_{tq} \quad (31)$$

$$\dot{q}_c = -\frac{\partial \epsilon}{\partial x_c} + (\overleftarrow{\Omega}_{xx} \cdot \dot{x}_c + \overleftarrow{\Omega}_{xq} \cdot \dot{q}_c) - \Omega_{tx} \quad (32)$$

$$(\overleftarrow{\Omega}_{xx})_{\alpha\beta} = \Omega_{x_\alpha x_\beta} = i[\langle \frac{\partial u}{\partial x_{c\alpha}} | \frac{\partial u}{\partial x_{c\beta}} \rangle - \langle \frac{\partial u}{\partial x_{c\beta}} | \frac{\partial u}{\partial x_{c\alpha}} \rangle] \quad (33)$$

其中将里面的两个 x 任意一个换成 q 效果一致, 类似的定义

$$(\Omega_{tx})_\alpha = \Omega_{tx_\alpha} = i[\langle \frac{\partial u}{\partial t} | \frac{\partial u}{\partial x_{c\alpha}} \rangle - \langle \frac{\partial u}{\partial x_{c\alpha}} | \frac{\partial u}{\partial t} \rangle] \quad (34)$$

备注: 在拓扑介质加入电场和微扰磁场时 $\Omega_{tq} = \Omega_{tx} = \Omega_{qx} = 0$, 同时

$$i[\langle \frac{\partial u}{\partial x_{c\alpha}} | \frac{\partial u}{\partial x_{c\beta}} \rangle - \langle \frac{\partial u}{\partial x_{c\beta}} | \frac{\partial u}{\partial x_{c\alpha}} \rangle] = -e\delta B_{\alpha\beta}/\hbar \quad (35)$$

1.2 有杂质位错情况下的 Berry Phase[5]

备注: 此文章此部分推导喝多错误, 很多量纲错误, 我暂时不想推导了

1.3 只有电场情况下借鉴 Thouless Pump 原理的推导 [2]

对于含时微扰哈密顿量 $H = V_0(r) + V_1(t)$, 对于晶格中电子而言 $V_0(r)$ 为紧束缚电子势, $V_1(t)$ 为拓扑 Pumping 微扰势。其中

$$H_0|m(0)\rangle = E_m|m(0)\rangle \quad (36)$$

以下全部只讨论一阶修正。当 $t = 0$ 时用普通微扰论

$$|\psi_m(0)\rangle = |m(0)\rangle + \sum_{n \neq m} \frac{1}{E_m - E_n} V_{nm}(0)|n(0)\rangle \quad (37)$$

当 Pump 足够慢时, 也可认为波函数近似呆在本征态上, 我们定义用这种方式求出的本征态波函数为 $|\phi_m(t)\rangle$, 定义 $|m(t)\rangle = |m(0)\rangle$

$$|\phi_m(t)\rangle = e^{-iE_m t/\hbar} [|m(t)\rangle + \sum_{n \neq m} \frac{1}{E_m - E_n} V_{nm}(t)|n(0)\rangle] \quad (38)$$

当 $t > 0$ 时含时微扰论给出结果

$$|\psi_m(t)\rangle = e^{-iE_m t/\hbar} |m(0)\rangle - \sum_{n \neq m} \frac{i}{\hbar} \int_0^t [V_{nm}(t') e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} dt'] e^{-iE_n t/\hbar} |n(0)\rangle + \dots \quad (39)$$

$$\begin{aligned} |\dot{\psi}_m(t)\rangle = & -\frac{i}{\hbar} E_m e^{-iE_m t/\hbar} |m(0)\rangle - \sum_{p \neq m} \frac{i}{\hbar} V_{pm}(t) e^{-iE_m t/\hbar} |p(0)\rangle \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{p \neq m} \int_0^t V_{pm}(t') e^{i(E_p - E_m)t'/\hbar} dt' E_p e^{-iE_p t/\hbar} |p(0)\rangle + \dots \end{aligned} \quad (40)$$

下面式子 $n \neq m$

$$\begin{aligned} \langle \psi_n(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} V_{nm}(t) e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t V_{nm}(t') e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} E_n dt' \\ &+ \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t V_{mn}^*(t') e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} E_m dt' \end{aligned} \quad (41)$$

由于 $V^\dagger = V$, 故 $V_{mn}^* = V_{nm}$

$$\begin{aligned} |\psi_n(t) \rangle &= \langle \psi_n(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} V_{mn}(t) e^{-iE_m t/\hbar} |n(0) \rangle \\ &+ \frac{1}{\hbar^2} \left[\int_0^t V_{nm}(t') e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} (E_m - E_n) dt' \right] e^{-iE_n t/\hbar} |n(0) \rangle \end{aligned} \quad (42)$$

重新将 Eq39写成如下形式

$$\begin{aligned} |\phi_m(t) \rangle &= e^{-iE_m t/\hbar} [|m(t) \rangle + \sum_{n \neq m} \frac{1}{E_m - E_n} V_{nm}(t) |n(0) \rangle] \\ &+ \sum_{n \neq m} \frac{i\hbar}{E_n - E_m} \left\{ -\frac{i}{\hbar} V_{mn}(t) e^{-iE_m t/\hbar} |n(0) \rangle + \frac{1}{\hbar^2} \left[\int_0^t V_{nm}(t') e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} (E_m - E_n) dt' \right] e^{-iE_n t/\hbar} |n(0) \rangle \right\} \end{aligned} \quad (43)$$

故我们正确的补充推导出了文章 [2] 的公式

$$|\psi_m(t) \rangle = |\phi_m(t) \rangle + i\hbar \sum_{n \neq m} \frac{1}{E_n - E_m} |\psi_n(t) \rangle \langle \psi_n(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle \quad (44)$$

当 Pump 足够慢时, $|\psi_m(t) \rangle \simeq |\phi_m(t) \rangle$, 当 Pump 不是足够慢时, 一阶修正为此式子。

根据上一节讨论, 我们推广到 Bloch 态 $|\Psi_n(k_0, t) \rangle = \exp(ik_0 \cdot r) \hat{u}_n(k_0, t)$, 在弱电场下, $\hat{u}_n(k_0, t)$ 修正为

$$u_n(k) - i\hbar \sum_{n' \neq n} \frac{u_{n'}(k) \langle u_{n'}(k) | \dot{u}_n(k) \rangle}{E_n(k) - E_{n'}(k)} \quad (45)$$

对于实空间, 修正为

$$\tilde{\psi}_m(x, t) = \psi_m(x, t) + i\hbar \sum_{n \neq m} \psi_n(x, t) \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_m} \langle \psi_n(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle \quad (46)$$

电荷方程和电流方程

$$\rho = \Psi^\dagger \Psi, \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^\dagger \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^\dagger) \quad (47)$$

则电流的零阶项为零, 忽略二阶项后一阶项为

$$\begin{aligned} j_m &= \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\langle \psi_n | \dot{\psi}_m \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} [\psi_m^*(x, t) \nabla \psi_n(x, t) - \psi_n(x, t) \nabla \psi_m^*(x, t)] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\langle \dot{\psi}_m | \psi_n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} [\psi_n^*(x, t) \nabla \psi_m(x, t) - \psi_m(x, t) \nabla \psi_n^*(x, t)] \right\} \end{aligned} \quad (48)$$

$$\langle \psi_n(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle = \int dx \psi_n^*(x, t) \dot{\psi}_m(x, t) \quad (49)$$

由于周期边界下空间各向同性, 故有

$$J_m = \frac{\hbar^2}{mL} \sum_{n \neq m} \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_m} \left[-\langle \psi_n | \dot{\psi}_m \rangle \left\langle \frac{\partial \psi_m}{\partial x} \right| \psi_n \right\rangle - \langle \dot{\psi}_m | \psi_n \rangle \langle \psi_n \left| \frac{\partial \psi_m}{\partial x} \right\rangle \right] \quad (50)$$

在这里，解得本征态为 $|\psi_{nk}\rangle = e^{ikx}|u_{nk}\rangle$ ，于是有

$$J_{mk} = \frac{\hbar^2}{2\pi m} \sum_{n \neq m} \frac{1}{\epsilon_{nk} - \epsilon_{mk}} [-\langle \psi_{nk} | \dot{\psi}_{mk} \rangle \langle \frac{\partial \psi_{mk}}{\partial x} | \psi_{nk} \rangle - \langle \dot{\psi}_{mk} | \psi_{nk} \rangle \langle \psi_{nk} | \frac{\partial \psi_{mk}}{\partial x} \rangle] \quad (51)$$

下面我们得到一个代换公式，类似 $x \rightarrow i\partial_k$ 。主要是由于这里的 ϵ_n, ϵ_m 不是拓扑能带所需要的。我们假设整个体系相当于冷原子中的光晶格，体系哈密顿量为

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + V_0(x) \quad (52)$$

$$H_0|\psi_{nk}\rangle = \epsilon_n(k)|\psi_{nk}\rangle \quad (53)$$

$$\frac{(-i\hbar\nabla + \hbar k)^2}{2m}u_m(k) = E_m u_m(k) \quad (54)$$

故对 $u_m(k)$ 的有效作用哈密顿量 H'_0 满足

$$H'_0 = \frac{(-i\hbar\nabla + \hbar k)^2}{2m} + V_0(x) \quad (55)$$

$$\frac{\partial H'_0}{\partial k} = \frac{\hbar}{m}(-i\hbar\nabla + \hbar k) \quad (56)$$

$$\nabla = i\frac{m}{\hbar^2} \frac{\partial H'_0}{\partial k} - ik \quad (57)$$

$$\frac{\partial \psi_{mk}}{\partial x} = \nabla(u_{mk}e^{ikx}) = i\frac{m}{\hbar^2} \frac{\partial H'_0}{\partial k} u_{mk} e^{ikx} \quad (58)$$

代入 Eq51 可得等效变量替换公式

$$\frac{1}{\epsilon_m(k) - \epsilon_n(k)} \frac{\partial}{\partial x} \leftrightarrow \frac{im}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial k} \quad (59)$$

代入 Eq51 得

$$J_{mk} = \frac{i}{2\pi} [\langle \frac{\partial}{\partial k} \psi_{mk} | \dot{\psi}_{mk} \rangle - \langle \dot{\psi}_{mk} | \frac{\partial}{\partial k} \psi_{mk} \rangle] \quad (60)$$

还要注意，这里没有讨论零阶项，零阶项对应的就是电子在 Bloch 能带的运动行为 $\dot{r}_m = \frac{\partial E_m(k)}{\partial k}$ 于是可得半经典运动方程

$$\dot{r} = \frac{\partial E_n(k)}{\hbar \partial k} - \dot{k} \times \hat{z} \Omega_n(k) \quad (61)$$

$$\hbar \dot{k} = -eE \quad (62)$$

1.4 刘维尔定理失效 [6]

对于一个相空间 $\Delta V = \Delta r \Delta k$ ，相空间随时间变化为

$$\frac{1}{\Delta V} \frac{d\Delta V}{dt} = \nabla_r \cdot \dot{r} + \nabla_k \cdot \dot{k} \quad (63)$$

其中 ∇_r, ∇_k 分别作用在 \dot{r}, \dot{k} 上，故有

$$\begin{aligned} & \nabla_r \cdot \dot{r} + \nabla_k \cdot \dot{k} \\ &= \nabla_r \cdot \left(\frac{\partial \epsilon}{\hbar \partial k} - \dot{k} \times \Omega \right) + \nabla_k \cdot \left(-eE - \frac{e}{\hbar} \dot{r} \times \vec{B} \right) \\ &= -\nabla_r \cdot (\dot{k} \times \Omega) - \frac{e}{\hbar} \nabla_k \cdot (\dot{r} \times \vec{B}) \\ &= -\nabla_r \cdot \left[\left(-\frac{e}{\hbar} E(r) - \frac{e}{\hbar} \dot{r} \times B(r) \right) \times \Omega \right] - \frac{e}{\hbar} \nabla_k \cdot \left[\left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_n(k)}{\partial k} - \dot{k} \times \Omega_n(k) \right) \times B \right] \end{aligned} \quad (64)$$

根据 $\nabla \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) = (\nabla \times \vec{A}) \cdot \vec{B}$, 以及 $\nabla \times E = -\partial_t B$ 可得

$$\begin{aligned} & \nabla_r \cdot \dot{r} + \nabla_k \cdot \dot{k} \\ &= \frac{e}{\hbar} \nabla_r \cdot [(\dot{r} \cdot \Omega)B - (B \cdot \Omega)\dot{r}] + \frac{e}{\hbar} \nabla_k \cdot [(\dot{k} \cdot B)\Omega - (B \cdot \Omega)\dot{k}] - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot \vec{\Omega} \\ &= -\frac{e}{\hbar} (B \cdot \Omega)(\nabla_r \cdot \dot{r} + \nabla_k \cdot \dot{k}) - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot \vec{\Omega} \end{aligned} \quad (65)$$

故

$$(1 + \frac{e}{\hbar} B \cdot \Omega)(\nabla_r \cdot \dot{r} + \nabla_k \cdot \dot{k}) = -\partial_t [1 + \frac{e}{\hbar} B \cdot \Omega] \quad (66)$$

$$\frac{d}{dt} [(1 + \frac{e}{\hbar} B \cdot \Omega) \Delta V] = 0 \quad (67)$$

故定义态密度为

$$D_n(r, k) = (2\pi)^{-d} (1 + \frac{e}{\hbar} B \cdot \Omega) \quad (68)$$

引申结论 1: Streda Formula:

$$\sigma_{xy} = -e (\frac{\partial n_e}{\partial B_z})_\mu = -\frac{e^2}{\hbar} \int^\mu \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \Omega_z \quad (69)$$

引申结论 2: 磁阻效应, 当固体材料中电子数量相同时, 由于态密度不同, 在不同磁场下能带填充会有空穴和上能带导电电子, 故当磁场振荡变化时, 磁阻跟着变化

引申结论 3: 对金属磁化强度修正。对于玻尔磁子来说能量劈裂为 $-g\mu_{\frac{e}{2m_e}} \vec{L} \cdot \vec{B}$, 再引用附录中用波包动力学方法求得的角动量表达式, 可得磁化为

$$m(\vec{k}) = -i \frac{e}{2\hbar} \langle \nabla_k u | \times [H_0(k) - \epsilon_0(k)] | \nabla_k u \rangle \quad (70)$$

$$E = \int^{\mu(B)} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} (1 + \frac{e}{\hbar} B \cdot \Omega) (\epsilon_0(k) - m(k) \cdot \vec{B}) \quad (71)$$

一般对于正常金属 $\frac{eB \cdot \Omega}{\hbar} \sim 10^{-2}$, $m(k) \cdot B \ll \epsilon_0(k)$, 且电子数密度守恒

$$n_e = \int^{\mu(B)} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} (1 + \frac{e}{\hbar} B \cdot \Omega) \quad (72)$$

定义 $\int d\vec{k} = S_d dk$, 则有

$$M = -\frac{\partial E}{\partial B} = \int^{\mu_0} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} (m(k) - \frac{e\Omega}{\hbar} \epsilon_0(k)) - \frac{\partial \mu(B)}{\partial B} \mu_0 \frac{S_d}{(2\pi)^d |\nabla_k \epsilon_0(k)|} \quad (73)$$

$$\frac{\partial \mu(B)}{\partial B} \frac{S_d}{(2\pi)^d |\nabla_k \epsilon_0(k)|} + \int^{\mu_0} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \frac{e\Omega}{\hbar} = 0 \quad (74)$$

故由此可得

$$M = \int^{\mu_0} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} (m(k) + \frac{e\Omega}{\hbar} [\mu_0 - \epsilon_0(k)]) = \frac{e}{2\hbar} \int^{\mu_0} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^D} i \langle \nabla_k u | \times [2\mu_0 - \epsilon_0(k) - H_0] | \nabla_k u \rangle \quad (75)$$

下面计算对易子: 我们不做严格数学推导, 我们只做物理图像分析。在固体物理中同样存在 $\Delta x \Delta k = \hbar$, 当然这在微扰磁场为 0 时严格成立, 当有微扰磁场 δB 时, 同样的底带能容纳电子数更多, $\Delta x \Delta k = \frac{\hbar}{1 + \frac{e}{\hbar} \delta B \Omega}$ 。

我们从抽象原理想一想，如果 $\Delta x = 0, \Delta k = 0$ ，那么对易子一定为 0，因为 x 和 k 都完全确定了。因此，在有微扰磁场时，对易子一定有变化

下面我们看对易子如何变化。对于 k_x, k_y 动量空间来说，在同一个有效布里渊区底带能容纳电子数目更多了，因此 $\Delta k_x \Delta k_y$ 应该乘以 $\frac{1}{1 + \frac{\epsilon}{\hbar} \delta B \Omega}$ ；同样类似的道理，将动量空间换成实空间也有一致的结果，因此变化为

$$\Delta x \rightarrow \frac{\Delta x}{\sqrt{1 + \frac{\epsilon}{\hbar} \delta B \cdot \Omega}}, \Delta k_x \rightarrow \frac{\Delta k_x}{\sqrt{1 + \frac{\epsilon}{\hbar} \delta B \cdot \Omega}} \quad (76)$$

下面我们计算对易子，对于最简单的易于理解的情况

$$[p_x, p_y]|_{k_x=k_x^0, k_y=k_y^0} = -i \frac{\frac{\epsilon}{\hbar} B}{1 + \frac{\epsilon}{\hbar} B \Omega_{k_x^0 k_y^0}}, [x, k_x]|_{k_x=k_x^0, k_y=k_y^0} = i \frac{1}{1 + \frac{\epsilon}{\hbar} B \Omega_{k_x^0 k_y^0}} \quad (77)$$

下面我们计算一个难以理解的对易子 $[x, y]$ ，用类似 Thouless pump 原理， y 写作 $\langle u_k | i \partial_{k_y} | u_k \rangle$ ，pump 微小时刻移动距离为 $\langle u_k(t + \Delta t) | i \partial_{k_y} | u_k(t + \Delta t) \rangle - \langle u_k(t) | i \partial_{k_y} | u_k(t) \rangle = \Omega_{tk_y} \Delta t$ 。因此根据此原理我们可以得到

$$[x, y]|_{k_x=k_x^0, k_y=k_y^0} = i \frac{\Omega_{k_x^0 k_y^0}}{1 + \frac{\epsilon}{\hbar} B \Omega_{k_x^0 k_y^0}} \quad (78)$$

牛老师在这篇文章中提到的新问题是：如何将态密度修正运用到路径积分中，定义 $\xi = (x, p)$ ，则路径积分表达式为

$$\langle out | S | in \rangle = \int \prod_i D\xi \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int L dt\right] \quad (79)$$

$$L = \frac{1}{2} \xi^a J_{ab} \xi^b - \epsilon(\xi) + \dot{\xi}^a A_a(\xi) \quad (80)$$

1.5 基于波包动力学的泊松括号修正 [12]

下面我们来比较严格的求解基于波包动力学的泊松括号，其运动方程为

$$\dot{x} = \partial_p h - \dot{p} \times \Omega(k) \quad (81)$$

$$\dot{p} = -\partial_x h - \dot{x} \times B \quad (82)$$

故有：

$$\xi = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix} \quad (83)$$

我们定义泊松括号和运动方程满足：

$$\dot{\xi}_\alpha = [h, \xi_\alpha] = \omega^{\alpha\beta} \partial_\beta h \quad (84)$$

$$[f, g] = \omega^{\alpha\beta} \partial_\alpha f \partial_\beta g \quad (85)$$

$$\omega_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} A & -I \\ I & C \end{bmatrix} \quad (86)$$

$$\omega^{\alpha\beta} = (\omega_{\alpha\beta})^{-1} \quad (87)$$

Where

$$A = \begin{bmatrix} 0 & -B^3 & B^2 \\ B^3 & 0 & -B^1 \\ -B^2 & B^1 & 0 \end{bmatrix} \quad (88)$$

$$C = \begin{bmatrix} 0 & \Omega^3 & -\Omega^2 \\ -\Omega^3 & 0 & \Omega^1 \\ \Omega^2 & -\Omega^1 & 0 \end{bmatrix} \quad (89)$$

Matlab 数值模拟得

$$\omega^{\alpha\beta} = \frac{1}{1 + \vec{B} \cdot \vec{\Omega}} \begin{bmatrix} C & D \\ -D & A \end{bmatrix} \quad (90)$$

Where:

$$D_{ij} = \delta_{ij} + B^i \Omega^j \quad (91)$$

故泊松括号关系式为

$$[x^i, x^j] = \frac{\epsilon^{ijk} \Omega^k}{1 + \vec{B} \cdot \vec{\Omega}} \quad (92)$$

$$[x^i, k^j] = \frac{\delta_{ij} + B^i \Omega^j}{1 + \vec{B} \cdot \vec{\Omega}} \quad (93)$$

$$[k^i, k^j] = -\frac{\epsilon_{ijk} B^k}{1 + \vec{B} \cdot \vec{\Omega}} \quad (94)$$

2 石墨烯谷霍尔效应简介 [7]

对于石墨烯，在不同谷 $(\vec{k} \cdot \vec{a}_1, \vec{k} \cdot \vec{a}_2, \vec{k} \cdot \vec{a}_3) = (0, \pm \frac{2}{3}\pi, \mp \frac{2}{3}\pi)$ 展开得有效哈密顿量

$$H = \frac{\sqrt{3}}{2} at (q_x \tau_z \sigma_x + q_y \sigma_y) + \frac{\Delta}{2} \sigma_z \quad (95)$$

根据磁化强度公式可算 [4] 得

$$m(k) = -i \frac{e}{2\hbar} \langle \nabla_k u | \times [H(k) - \epsilon(k)] | \nabla_k u \rangle = \tau_z \frac{3ea^2 \Delta t^2}{4\hbar(\Delta^2 + 3q^2 a^2 t^2)} \quad (96)$$

当 $q \rightarrow 0$ 时这和 Bohl 磁子类似。由于在空间反演下，磁化强度反向，因此谷磁化必须在空间反演破缺 $\Delta \neq 0$ 才能发生

谷依赖磁化强度 [6]，其中 2 倍表示上自旋下自旋的简并

$$M = 2 \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} [m(k) + \frac{e}{\hbar} (\mu - \epsilon(k)) \Omega(k)] \quad (97)$$

当化学势对各谷相同时，整体谷磁化为 0。这里我们引入带自旋的偏振光作用，光自旋和谷自旋共同作用，诱导谷自旋变化，从而对两个不同类型谷占据不同， $\mu_1 \neq \mu_2$ ，从而诱导谷磁化和谷霍尔效应

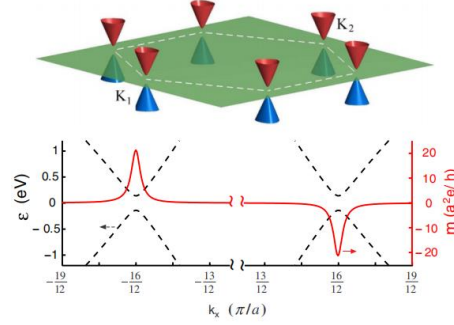


图 1: 石墨烯 Berry Phase 主要集中在谷附近能量范围较小值, 计算数据: $t = 2.82eV, \Delta = 0.28eV$

参考附录”电子在微扰磁场下角动量对波包动力学影响”可得 $m(k) = \frac{e}{\hbar}\epsilon(k)\Omega(k)$, 代入 Eq97可得 $M = 2\frac{e}{\hbar} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \mu\Omega(k)$ 。

由于石墨烯 Berry Phase 主要集中在谷附近能量范围较小值, 如图 1所示, 故谷磁化为

$$\delta M = 2\frac{e}{\hbar} [\mu_1 C_1(\mu_1) + \mu_2 C_2(\mu_2)] \approx 2\frac{e}{\hbar} C_1\left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{2}\right)(\mu_1 - \mu_2) \quad (98)$$

$$2\pi C_i(\mu) = \int^{\mu_i} d^2k \Omega_i(k) \quad (99)$$

对于谷附近 Berry phase 和相应霍尔电导, 形式为

$$\Omega(q) = \tau_z \frac{3a^2 \Delta t^2}{2(\Delta^2 + 3q^2 a^2 t^2)^{3/2}} \quad (100)$$

$$j_x = \frac{e^2}{h} \left[\frac{\Delta}{2\bar{\mu}^2} - \frac{9\Delta t^2 \bar{q}_F^2 a^2}{8\bar{\mu}^4} \right] \delta\mu E_y \quad (101)$$

$$m\bar{u} = (\mu_1 + \mu_2)/2, \delta\mu = \mu_1 - \mu_2 \quad (102)$$

3 四维波包动力学方程推导 [8]

根据之前波包动力学方程

$$\dot{r} = \frac{\partial \epsilon_n(k)}{\hbar \partial k} - \dot{k} \times \Omega_n(k) \hat{z} \quad (103)$$

$$\hbar \dot{k} = -eE(r) - e\dot{r} \times \delta B(r) \quad (104)$$

写成四维形式为

$$\begin{bmatrix} -\delta B & -I \\ I & \Omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{r} \\ \dot{k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E \\ \partial \epsilon \end{bmatrix} \quad (105)$$

其中 $\dot{r} = [\dot{x} \ \dot{y} \ \dot{z} \ \dot{w}]^T$, $\dot{k} = [\dot{k}_x \ \dot{k}_y \ \dot{k}_z \ \dot{k}_w]^T$, $E = [E_x \ E_y \ E_z \ E_w]^T$, $\partial \epsilon = \left[\frac{\partial \epsilon}{\partial k_x} \ \frac{\partial \epsilon}{\partial k_y} \ \frac{\partial \epsilon}{\partial k_z} \ \frac{\partial \epsilon}{\partial k_w} \right]^T$, 且

$$-\delta B = \begin{bmatrix} 0 & -B_{xy} & -B_{xz} & -B_{xw} \\ B_{xy} & 0 & -B_{yz} & -B_{yw} \\ B_{xz} & B_{yz} & 0 & -B_{zw} \\ B_{xw} & B_{yw} & B_{zw} & 0 \end{bmatrix} \quad (106)$$

$$\Omega = \begin{bmatrix} 0 & \Omega_{xy} & \Omega_{xz} & \Omega_{xw} \\ -\Omega_{xy} & 0 & \Omega_{yz} & \Omega_{yw} \\ -\Omega_{xz} & -\Omega_{yz} & 0 & \Omega_{zw} \\ -\Omega_{xw} & -\Omega_{yw} & -\Omega_{zw} & 0 \end{bmatrix} \quad (107)$$

为了推导四维动力学方程，我们先讨论这样一个情形，假设能带全部被拉平了，且 δB 矩阵的各分量都趋近于零，于是有

$$\begin{bmatrix} \dot{r} \\ \dot{k} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -I - \Omega \cdot \delta B & 0 \\ 0 & -I - \delta B \cdot \Omega \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -\Omega & -I \\ I & \delta B \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E \\ \partial \epsilon \end{bmatrix} \quad (108)$$

通过此计算出来的电流为

$$\dot{r}^\mu = \Omega_{\mu\gamma} E_\gamma + \Omega_{\mu\nu} B_{\nu\gamma} \Omega_{\gamma\delta} E_\delta \quad (109)$$

由于刘维尔定理失效，故该电流算符还要乘以态密度修正，下面我们导出四维情形下的态密度修正。我们假设没有磁场和拓扑贝利曲率时候电子运动波包为 \dot{r}_0, \dot{k}_0 ，于是四维形式运动方程为

$$\begin{bmatrix} -\delta B & -I \\ I & \Omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{r} \\ \dot{k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E \\ \partial \epsilon \end{bmatrix} \quad (110)$$

进行坐标变换可得

$$\begin{bmatrix} \lambda_{1234} & 0 \\ 0 & \lambda_{4567} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{r}' \\ \dot{k}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E' \\ \partial_{k'} \epsilon \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \lambda_{1234} & 0 \\ 0 & \lambda_{4567} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{r}'/\dot{r}'_0 \\ \dot{k}'/\dot{k}'_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (111)$$

上述讨论的是 4D 情形，下面我们讨论 2D 情形，考虑相空间各向同性，mathematica 计算得 $\det(-I + \delta B \cdot \Omega) = \det(-I + \Omega \cdot \delta B)$ ，在 2 维情况下值为 $(1 + \delta B_{xy} \Omega_{xy})^2$ ，于是相空间变化得

$$(1 + \delta B_{xy} \Omega_{xy}) \Delta x \Delta y = \Delta x_0 \Delta y_0 \quad (112)$$

$$(1 + \delta B_{xy} \Omega_{xy}) \Delta k_x \Delta k_y = \Delta k_{x0} \Delta k_{y0} \quad (113)$$

这和之前结论一致，利用 mathematica 算得四维情形为

$$\begin{aligned} \sqrt{|-I + \Omega \cdot B|} &= 1 + \Omega_{xy} B_{xy} + \Omega_{xz} B_{xz} + \dots + \Omega_{zw} B_{zw} + (B_{xw} B_{yz} - B_{xz} B_{yw} + B_{xy} B_{zw}) (\Omega_{xw} \Omega_{yz} - \Omega_{xz} \Omega_{yw} + \Omega_{xy} \Omega_{zw}) \\ &= 1 + \frac{1}{2} \Omega_{\mu\nu} B_{\mu\nu} + \frac{1}{64} (\epsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} B_{\alpha\beta} B_{\gamma\delta}) (\epsilon_{\mu\nu\lambda\rho} \Omega_{\mu\nu} \Omega_{\lambda\rho}) \end{aligned} \quad (114)$$

下面我们由态密度修正得到四维量子霍尔效应电流表达式，我们只计算微扰到二阶项情形

$$\begin{aligned} j^\mu &= \int d^4 k \dot{r}^\mu D(r, k) \\ &= \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} [E_\nu \Omega_{\mu\nu} + (E_\delta \Omega^{\gamma\delta} B_{\nu\gamma} \Omega_{\mu\nu} + \frac{1}{2} E_\nu \Omega_{\mu\nu} B_{\delta\gamma} \Omega_{\delta\gamma})] \\ &= E_\nu \frac{1}{(2\pi)^4} \int \Omega^{\mu\nu} d^4 k + \frac{\nu_2}{4\pi^2} \epsilon^{\mu\alpha\beta\nu} E_\nu B_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (115)$$

当然，由 Chern-Simons 场论得到的四维量子霍尔效应电流也可得到一模一样的结果

$$j_\mu^{(2)} = \frac{\nu_2}{4\pi^2} \epsilon^{\mu\alpha\beta\nu} E_\nu B_{\alpha\beta} \quad (116)$$

$$\nu_2 = \frac{1}{4\pi^2} \int d^4 k [\Omega_{xw} \Omega_{yz} - \Omega_{xz} \Omega_{yw} + \Omega_{xy} \Omega_{zw}] \quad (117)$$

$$\delta\rho^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^4} (B_{xw} B_{yz} - B_{xz} B_{yw} + B_{xy} B_{zw}) (\Omega_{xw} \Omega_{yz} - \Omega_{xz} \Omega_{yw} + \Omega_{xy} \Omega_{zw}) \quad (118)$$

4 二阶非线性霍尔效应 [9]

我感觉这篇文章的开头写的很好，一般的量子霍尔效应是打破时间反演对称性的，而我们是用电场驱动在维持时间反演对称性情况下仍然有二阶非线性霍尔效应。下面我们来推导此，根据 Boltzmann 方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\vec{r}} \cdot \nabla_r f - \frac{eE}{\hbar} \nabla_k f = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (119)$$

这里我们认为 $\nabla_r f = 0$ ，只讨论 $f = f(k, t)$ ，我们认为 τ 很小视作微扰，定义 $f = \text{Re}[f_0/2 + f_1^0/2 + f_2^0/2 + \dots + h.c. + f_1^\omega/2e^{i\omega t} + f_2^{2\omega}/2e^{2i\omega t} + \dots + h.c.]$, $E_{a,b} = \epsilon_{a,b}/2e^{i\omega t} + \epsilon_{a,b}^*/2e^{-i\omega t}$ ，于是有

$$f_1 = f_1^\omega e^{i\omega t}, f_1^\omega = \frac{e\tau\epsilon_a\partial_a f_0}{1 + i\omega\tau} \quad (120)$$

$$f_2^0 = \frac{(e\tau)^2\epsilon_a^*\epsilon_b\partial_{ab}f_0}{2(1 + i\omega\tau)} \quad (121)$$

$$f_2^{2\omega} = \frac{(e\tau)^2\epsilon_a\epsilon_b\partial_{ab}f_0}{(1 + i\omega\tau)(1 + 2i\omega\tau)} \quad (122)$$

其中对 f_0 的动量空间偏导数只在费米面附近有贡献，这里我们不考虑磁场带来的修正，继续沿用牛谦老师 Berry Phase 半经典理论那一套，有

$$j_a = -e \int_k f_k v_a \quad (123)$$

$$v_a = \partial_a \epsilon_k + \epsilon_{abc} \Omega_b \dot{k}_c \quad (124)$$

$$\Omega_a \equiv \epsilon_{abc} \partial_b A_c, A_c = -i \langle u_k | \partial_c | u_k \rangle \quad (125)$$

$$\epsilon_{abc} \Omega_b = \Omega_{ac} \quad (126)$$

如果 $\omega \ll \text{energy} - \text{gap}$ ，零级项为量子霍尔电流。在时间反演对称性不被破坏情况下，此项为零；当然对电场的一阶响应给出基本的固体电阻公式，和固体物理教材和讲义一致，为 $\sigma_{xx} = \frac{ne^2\tau E}{m^*}$ 。所以给出二阶响应就是新奇的响应，更高阶响应是 **remaining question**。我们根据以上式子可计算出：

$$j_a = \frac{1}{2}(j_a^0 + j_a^{2\omega} e^{2i\omega t} + h.c.) \quad (127)$$

则有

$$j_a^0 = \frac{e^2}{2} \int_k \epsilon_{abc} \Omega_b \epsilon_c^* f_1^\omega - e \int_k f_2^0 \partial_a \epsilon_k \quad (128)$$

$$j_a^{2\omega} = \frac{e^2}{2} \int_k \epsilon_{abc} \Omega_b \epsilon_c f_1^\omega - e \int_k f_2^{2\omega} \partial_a \epsilon_k \quad (129)$$

由于以上两个式子第二项包含 $\int d^2k \partial_a \epsilon_k \partial_{bc} f_0(k)$ ，由于时间反演对称性故积分结果为零，我们讨论的所有情况都是能带不占完情况，因此上一式子不消失，于是有

$$j_a^0 = \chi_{abc} \epsilon_b \epsilon_c^*, j_a^{2\omega} = \chi_{ab} \epsilon_b \epsilon_c \quad (130)$$

$$\chi_{abc} = \epsilon_{agc} \frac{e^3 \tau}{2(1 + i\omega\tau)} \int_k (\partial_b f_0) \Omega_g \quad (131)$$

我们考虑零温情形， $\partial_b f_0$ 只在费米面附近有贡献，也因此我们可以写成

$$\chi_{abc} = -\epsilon_{agc} \frac{e^3 \tau}{2(1 + i\omega\tau)} \int_k f_0 (\partial_b \Omega_g) = -\frac{e^3 \tau}{2(1 + i\omega\tau)} \int_k f_0 (\partial_b \Omega_{ac}) \quad (132)$$

我们现在考虑二维材料，在二维面内加电场，测定在二维面上的响应。我们可以定义

$$D_a = \int_k f_0(k) \partial_a \Omega_z(k) \quad (133)$$

于是可得二阶非线性响应表达式

$$\vec{j}^0 = \frac{e^3 \tau}{2(1 + i\omega\tau)} \hat{z} \times \vec{\epsilon}^* (\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}) \quad (134)$$

$$\vec{j}^{2\omega} = \frac{e^3 \tau}{2(1 + i\omega\tau)} \hat{z} \times \vec{\epsilon} (\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}) \quad (135)$$

从这个图像上看，满足 M_x, M_y 对称性的二维材料大概率没有二阶非线性霍尔效应，比如 QWZ Model，假设 E_F 没有达到底带的顶端，整个体系就是个导体，而且实际计算得二阶非线性霍尔系数为 0。因此要施加一些调制，比如 $\sin k_x I, \sin k_y I, \cos k_x I, \cos k_y I$ 这样的 term。来打破 M_x, M_y 对称性，使二阶非线性系数不为 0。论文 [9] 给出了很复杂的二阶非线性霍尔响应结果，从该结果来看只有底带没有被填满时才有二阶非线性霍尔效应

当然，理论上会有三阶非线性霍尔效应，这里不再讨论了

5 带温度情况热输运波包动力学方程 [11]

本文开头写的太好了，之前的是力学力，但对大量粒子运动行为的统计力对 Berry Phase 修正目前还是问题。近期的实验表明了反常热输运肯定不是过去的电子弛豫时间那一套搞出来的，而是 Berry 相诱导内禀机制修正。此理论还能恰好完美解释实验

而且这个修正造成影响有：温度激发热电流、电场诱导热输运。此电流还是 $\nabla \times \vec{M}$ 那一套搞出来的。

由于之前 Berry Phase 方法和 Vanderbilt 磁化方法都给出了相同的磁化公式，因此我们可以用同一个公式来讨论。

下面我们将 Berry Phase 那一套推广到低温情形，波包构型基本不变，自由能变为

$$F = -\frac{1}{\beta} \sum_k \log(1 + e^{-\beta(\epsilon_M - \mu)}) \quad (136)$$

$$\epsilon_M = \epsilon(k) - \vec{m}(k) \cdot \vec{B} \quad (137)$$

其中 $\vec{m}(k)$ 为 Bohr 磁子，之前的波包动力学方法已经给出了 $\vec{m}(k) = -i \frac{e}{2\hbar} \langle \nabla_k u | \times (H_k - \epsilon_k) | \nabla_k u_k \rangle$ 。于是有

$$\vec{M}(r) = \int [dk] f(r, k) \vec{m}(k) + \frac{1}{\beta} \int [dk] \frac{e}{\hbar} \vec{\Omega}(k) \log[1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}] \quad (138)$$

其中 $\int [dk] = \sum_k$ ，且 $f(r, k) = \frac{1 + \frac{e}{\hbar} \vec{B} \cdot \vec{\Omega}}{1 + e^{\beta(\epsilon_M - \mu)}}$ ， $\epsilon_M = \epsilon_k - \vec{m}_k \cdot \vec{B}$ ，这里面第一项是由体内自旋形成的小环流形成的体内磁化，在本论文出来的时候，输运测量无法探测到 $\nabla \times \vec{M}_{LC}$ 这个电流，因此只能探测到后一项 $\nabla \times \vec{M}_{IC}$ 电流，因此有

$$\vec{j} = -e \int [dk] g(r, k) \frac{d\vec{r}}{dt} - \nabla \times \frac{1}{\beta} \int [dk] \frac{e}{\hbar} \vec{\Omega}(k) \times \log(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}) = \vec{j}_0 + \vec{j}_1 \quad (139)$$

如果知识化学势梯度造成修正，则有

$$\vec{j}_1 = -\nabla \mu \times \frac{e}{\hbar} \int [dk] f_F(k) \Omega(k) \hat{z} \quad (140)$$

其中 $f_F = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}$ 。我们现在考虑温度造成的影响

$$\vec{j}_1 = -\frac{\nabla T}{T} \times \frac{e}{\hbar} \int [dk] \Omega_k [(\epsilon_k - \mu) f_F(k) + k_B T \log(1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)})] \hat{z} \quad (141)$$

我们定义 $\Omega(\epsilon) d\epsilon = \Omega(k) dk$ ，且定义 $\sigma(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\epsilon} \Omega(\epsilon') d\epsilon'$ ，于是有

$$\begin{aligned} \vec{j}_{in} &= -\frac{\nabla T}{T} \times \frac{e}{\hbar} \int d\epsilon \Omega(\epsilon) [(\epsilon - \mu) f + \frac{1}{\beta} \log(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)})] \hat{z} \\ &= -\frac{\nabla T}{T} \times \frac{e}{\hbar} \int d\sigma(\epsilon) \times [(\epsilon - \mu) f + \frac{1}{\beta} \log(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)})] \hat{z} \\ &= \frac{\nabla T}{T} \times \frac{e}{\hbar} \int d\epsilon \sigma(\epsilon) \times (\epsilon - \mu) \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \hat{z} \end{aligned} \quad (142)$$

故

$$\begin{aligned} j_{in,x} &= \left(-\frac{\nabla_y T}{T}\right) \times \frac{e}{\hbar} \int d\epsilon \sigma(\epsilon) \times (\epsilon - \mu) \frac{\partial f}{\partial \mu} \hat{z} \\ &= \left(\frac{\nabla_y T}{T}\right) \times \frac{e}{\hbar} \int df(\epsilon) \times \sigma(\epsilon) (\epsilon - \mu) \hat{z} \\ &= -\left(\frac{\nabla_y T}{T}\right) \times \frac{e}{\hbar} \int d\epsilon f(\epsilon) \frac{\partial}{\partial \epsilon} [\sigma(\epsilon) (\epsilon - \mu)] \hat{z} \end{aligned} \quad (143)$$

在黄昆《固体物理》中有一个公式

$$\int_0^{+\infty} f(E) Q'(E) dE = Q(E_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 Q''(E_F) \quad (144)$$

故我们可以得到热霍尔电流的 Mott 关系

$$\vec{j}_{in} = -\frac{\nabla T}{T} \times \frac{e}{\hbar} \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \frac{d\sigma_{xy}(\epsilon)}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=\epsilon_F} \hat{z} \quad (145)$$

下面我们推导电场诱导能流。本文没有给出详细的完全从底层波包动力学原理推导的能流公式 $-\vec{E} \times \vec{M}(\vec{k})$ ，但从经典图像很好理解此。因此能流表达式为

$$\vec{J}^E = \int [dk] g(k) (\epsilon_k - \mu) \frac{d\vec{r}}{dt} - \vec{E} \times \int [dk] f(\vec{k}) m(\vec{k}) \quad (146)$$

根据之前类似的讨论，去掉 \vec{M}_{LC} 完全的波包内禀自旋造成影响，只讨论 \vec{M}_{IC} 造成影响，有：

$$\vec{j}_{in}^Q = \vec{E} \times \frac{e}{\hbar} \int [dk] \vec{\Omega} [(\epsilon - \mu) f + k_B T \log(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)})] \quad (147)$$

其第一项为量子霍尔电流项。于是有

$$\vec{j}_{in}^Q = \vec{E} \times \frac{e}{\hbar} \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \frac{d\sigma_{xy}(\epsilon)}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=\epsilon_F} \quad (148)$$

经过第一性原理计算，这完美解释了实验

6 附录

6.1 电子在微扰磁场下角动量对波包动力学影响 [4]

还是运用波包强聚焦在 k_c 条件，计算波包角动量算符

$$\begin{aligned}
L_n(k_c) &= \int d^2k' \int d^2k w^*(k') w(k) \langle \Psi_n(k') | (\vec{r} - \vec{r}_c) \times \vec{P} | \Psi_n(k) \rangle \\
&= \sum_{n'} \int d^2k' \int d^2k \tilde{w}^*(k') \tilde{w}(k) \langle u_n(k') | e^{i(k-k') \cdot (r-r_c)} (r-r_c) | u_{n'}(k) \rangle \times \langle u_{n'}(k) | \tilde{P}(\vec{k}) | u_n(k) \rangle \\
&= \sum_{n'} \int d^2k' \int d^2k \tilde{w}(k') \langle u_n(k') | e^{i(k-k') \cdot (r-r_c)} i\hbar \partial_k | u_{n'}(k) \rangle \times \langle u_{n'}(k) | \tilde{P}(\vec{k}) | u_n(k) \rangle \\
&\quad + \int d^2k' \int d^2k \tilde{w}^*(k') \tilde{w}(k) \langle u_n(k') | e^{i(k-k') \cdot (r-r_c)} | u_{n'}(k) \rangle i\hbar \partial_k [\tilde{w}(k) \langle u_{n'}(k) | \tilde{P}(\vec{k}) | u_n(k) \rangle] \\
&\quad - r_c \sum_{n'} \int d^2k' \int d^2k \tilde{w}(k') w(k) \langle u_n(k') | e^{i(k-k') \cdot (r-r_c)} | u_{n'}(k) \rangle \times \langle u_{n'}(k) | \tilde{P}(k) | u_n(k) \rangle \\
&= \sum_{n'} \int d^2k -i |\tilde{w}(k)|^2 \langle \frac{\partial u_n(k)}{\partial k} | u_{n'}(k) \rangle \times \langle u_{n'}(k) | \tilde{P}(\vec{k}) | u_n(k) \rangle \\
&\quad + \int d^2k \tilde{w}^*(k) i\hbar \partial_k [\tilde{w}(k) \langle u_n(k) | \tilde{P}(\vec{k}) | u_n(k) \rangle] \\
&\quad - r_c \int d^2k |\tilde{w}(k)|^2 r_c \times \langle u_n(k) | \tilde{P}(k) | u_n(k) \rangle \\
&= -i \langle \frac{\partial u_n(k)}{\partial k} | \times \tilde{P}(\vec{k}) |_{k=k_c} - \hbar \partial_k \arg \tilde{w}(k) \langle u_n(k) | \tilde{P}(\vec{k}) | u_n(k) \rangle |_{k=k_c} - r_c \times \langle u_n(k_c) | \tilde{P}(k_c) | u_n(k_c) \rangle
\end{aligned} \tag{149}$$

根据

$$\tilde{P}(\vec{k}) = \frac{m}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial k} \tag{150}$$

可以将上式第二项写为

$$\begin{aligned}
&\frac{m}{\hbar} \langle \frac{\partial u_n}{\partial k_1} | \frac{\partial \tilde{H}}{\partial k_2} | u_n \rangle - (k_1 \leftrightarrow k_2) \\
&= \frac{m}{\hbar} \langle \frac{\partial u_n}{\partial k_1} | \frac{\partial u_n}{\partial k_2} \rangle \epsilon_n + \frac{m}{\hbar} \langle \frac{\partial u_n}{\partial k_1} | u_n \rangle \frac{\partial \epsilon_n}{\partial k_2} - \frac{m}{\hbar} \langle \frac{\partial u_n}{\partial k_1} | H | \frac{\partial u_n}{\partial k_2} \rangle - (k_1 \leftrightarrow k_2) \\
&= \frac{m}{\hbar} \langle \frac{\partial u_n}{\partial k} | \times (\epsilon_n - \tilde{H}) | \frac{\partial u_n}{\partial k} \rangle + \langle \frac{\partial u_n}{\partial k} | u_n \rangle \times \langle u_n | P | u_n \rangle
\end{aligned} \tag{151}$$

于是可得

$$L_n = -\hbar \partial_k w(k) P_n(k) |_{k=k_c} + i \frac{m}{\hbar} \langle \frac{\partial u_n}{\partial k} | \times (\hat{H} - \epsilon_n) | \frac{\partial u_n}{\partial k} \rangle |_{k=k_c} - i \langle \frac{\partial u_n}{\partial k} | u_n \rangle \times \vec{P}_n |_{k=k_c} - \vec{r}_c \times \vec{P}_n |_{k=k_c} \tag{152}$$

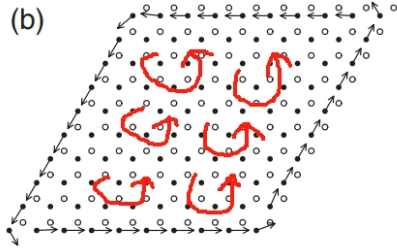


图 2: 红圈为公式 Eq.157 中的 M_{LC} 项, 边界环路为 M_{IC} 项。 M_{LC} 中 LC 为 local circulation, 刻画一个个小格点附近电子的回旋运动产生磁化; M_{IC} 的 IC 为 itinerant circulation, 只在边界附近的电流有贡献

根据 Eq.10 可得上式后三项全部抵消, 故 L_n 算符对波包动力学方程无任何影响, 只造成蝴蝶能谱能带劈裂。我们进一步化简

$$\begin{aligned}
 L_n(k) &= i \frac{m}{\hbar} [\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_1} | \hat{H} - \epsilon_n | \frac{\partial u_n}{\partial k_2} \rangle - c.c.] \\
 &= i \frac{m}{\hbar} [\sum_{\alpha \neq n} \langle \frac{\partial u_n}{\partial k_1} | u_\alpha \rangle \langle u_\alpha | \frac{\partial u_n}{\partial k_2} \rangle (\epsilon_\alpha - \epsilon_n) - c.c.] \\
 &= i \frac{m}{\hbar} [\sum_{\alpha \neq n} \frac{\langle u_n | \frac{\partial H}{\partial k_1} | u_\alpha \rangle \langle u_\alpha | \frac{\partial H}{\partial k_2} | u_n \rangle}{\epsilon_\alpha - \epsilon_n} - c.c.]
 \end{aligned} \tag{153}$$

备注: 由于 Berry 项分母为 $(\epsilon_\alpha - \epsilon_n)^2$ 因子, 故在非二能级情形这里计算结果和 Berry Phase 无关。对于二能级情形, 若上能带和下能带对同一 k 能量本征值反号, 则有

$$L_n(k) = -2\epsilon(k)\Omega(k) \tag{154}$$

6.2 Vanderbilt 等人给出的磁化公式 [10] 和波包动力学方程给出的磁化结果一致性

利用下列磁化公式计算磁化:

$$v = -\frac{i}{\hbar} [r, H] \tag{155}$$

$$M = -\frac{e}{2c} \sum_i \langle w_i | \vec{r} \times \vec{v} | w_i \rangle \tag{156}$$

最大的麻烦之处在于 $\vec{r} \times \vec{v}$ 在 Bloch 表象下是 ill Defined. 我们将磁化分成两个部分

$$\begin{aligned}
 M &= -\frac{e}{2Ac} \sum_i \langle w_i | (\vec{r} - \vec{r}_i) \times \vec{v} | w_i \rangle - \frac{e}{2Ac} \sum_i \vec{r}_i \times \langle w_i | \vec{v} | w_i \rangle \\
 &= M_{LC} + M_{IC}
 \end{aligned} \tag{157}$$

其中 $\vec{r}_i = \langle w_i | \vec{r} | w_i \rangle$ 。其 M_{LC} 和 M_{IC} 的物理图像如图 2 所示。根据公式 Eq.155 和 Eq.156, 可得

$$M_{LC} = \frac{e}{2A_0 \hbar c} \text{Im} \langle 0 | \vec{r} \times H \vec{r} | 0 \rangle = \frac{e}{2\hbar c} \text{Im} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \langle \partial_k u_k | \times H_k | \partial_k u_k \rangle \tag{158}$$

由于 $M_{IC} = -\frac{e}{2Ac} \sum_i \vec{r}_i \times \langle w_i | \vec{v} | w_i \rangle$, 且 $\vec{v} = -\frac{i}{\hbar} [r, H]$ 。下面用我自己的理解来推导 M_{IC} , 我们定义 $P_k = \sum_k |u_k\rangle \langle u_k| = \sum_j |w_j\rangle \langle w_j|$ 为粒子占据格点算符, 由于

$$\text{tr}[P_k r (I - P_k) H P_k] = 0 \tag{159}$$

且当 Wannier 波函数局域在体内时 $\langle w_j | \vec{v} | w_j \rangle = 0$, 于是有

$$M_{IC} = -\frac{e}{A\hbar} \sum_i \sum_j \epsilon_{\alpha\beta} \langle w_i | R_\alpha | w_i \rangle \text{Im} \langle w_i | r_\beta | w_j \rangle \langle w_j | H | w_i \rangle \quad (160)$$

由于

$$\langle w_i | r | w_j \rangle = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \langle u_k | r_\beta | u_k \rangle e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} A_k^\beta e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (161)$$

$$\langle w_j | H | w_i \rangle = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} E_k e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (162)$$

故有

$$\begin{aligned} M_{IC} &= -\frac{e}{A\hbar} \sum_i \sum_j \epsilon_{\alpha\beta} r_i^\alpha \times \text{Im} \int \frac{d^2k d^2k'}{(2\pi)^4} A_k^\beta e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} E_{k'} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\ &= -\frac{e}{2A\hbar} \sum_i \sum_j \epsilon_{\alpha\beta} (r_i^\alpha - r_j^\alpha) \times \text{Im} \int \frac{d^2k d^2k'}{(2\pi)^4} A_k^\beta e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} E_{k'} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\ &= -\frac{e}{2A\hbar} \sum_i \sum_j \epsilon_{\alpha\beta} \text{Im} \int \frac{d^2k d^2k'}{(2\pi)^4} A_k^\beta [-i\partial_{k_\alpha}] e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} E_{k'} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\ &= -\frac{e}{2A\hbar} \sum_i \sum_j \epsilon_{\alpha\beta} \text{Im} \int \frac{d^2k d^2k'}{(2\pi)^4} (i\partial_{k_\alpha} A_k^\beta) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} E_{k'} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\ &= -\frac{e}{2A\hbar} \epsilon_{\alpha\beta} \text{Im} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (i\partial_{k_\alpha} A_k^\beta) E_k \\ &= -\frac{e}{2A\hbar} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} E_k \Omega_k \end{aligned} \quad (163)$$

故有

$$M = \frac{e}{2\hbar c} \text{Im} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \langle \partial_k u_k | \times (H_k + E_k) | \partial_k u_k \rangle \quad (164)$$

7 参考文献

参考文献

- [1] 《The Geometric Phase in Quantum Systems》 A.Bohm at all
- [2] Quantization of particle transport.D.J.Thouless.PRB27,6083(1983)
- [3] Berry Phase,Hyperorbits,and the Hofstadter Spectrum.Ming-Che Chang and Qian Niu.(1995)
- [4] Berry Phase,hyperorbits,and the hofstadter spectrum:Semiclassical dynamics in magnetic Bloch bands.Ming-Che Chang and Qian Niu.(1996)
- [5] Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals:Gradient corrections and Berry-phase effects.Ganesh Sundaram and Qian Niu.(1999)
- [6] Berry Phase Correction to Electron Density of States in Solids.Di Xiao,Junren Shi and Qian Niu

- [7] Valley-Contrasting Physics in Graphene:Magnetic Moment and Topological Transport.Di Xiao,Wang Yao and Qian Niu
- [8] Four-dimensional quantum hall effect with ultracold atoms.H.M.Price,et al.
- [9] Quantum Nonlinear Hall Effect Induced by Berry Curvature Dipole in Time-Reversal Invariant Materials.Inti Sodemann and Liang Fu.
- [10] Orbital Magnetization in Periodic Insulators.T.Thonhauser,Davide Ceresoli,David Vanderbilt, and R.Resta(2005)
- [11] Berry-Phase Effect in Anomalous Thermoelectric Transport.Di Xiao,Yugui Yao,Zhong Fang,and Qian Niu.(2006)
- [12] Berry Phase Correction To Electron Density In Solids And “Exotic” Dynamics.Modern Physics Letters B, Vol. 20, No. 7 (2006) 373-378