讨论班讲义 1　　Aojin 2024.4

拓扑绝缘体及体边对应关系

目录
1. AB效应，绝热演化，Berry Phase
2. IQHE 与 Chern 数拓扑
3. Lattice 中的拓扑：二次量子化与紧束缚模型，Bloch 理论，能带理论
4. Lattice 中的拓扑：Wannier 局域化与 Z_2 体边对应

Chapter 1

AB效应：物理规范最早的可观测效应

$$H=\frac{1}{2m}(P-qA(r))^2+V(r)+q\varphi$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_0}{\partial t}=H\psi_0$$

规范变换：$\Lambda(r,t)$

$$A\to A+\nabla\Lambda$$

$$\varphi\to\varphi-\frac{\partial\Lambda}{\partial t}$$

在变换后解变成了 $\psi'=\exp\left(\frac{iq\Lambda}{\hbar}\right)\psi_0$

因为 $[P_x, f(x)]=-i\hbar\partial_x f$

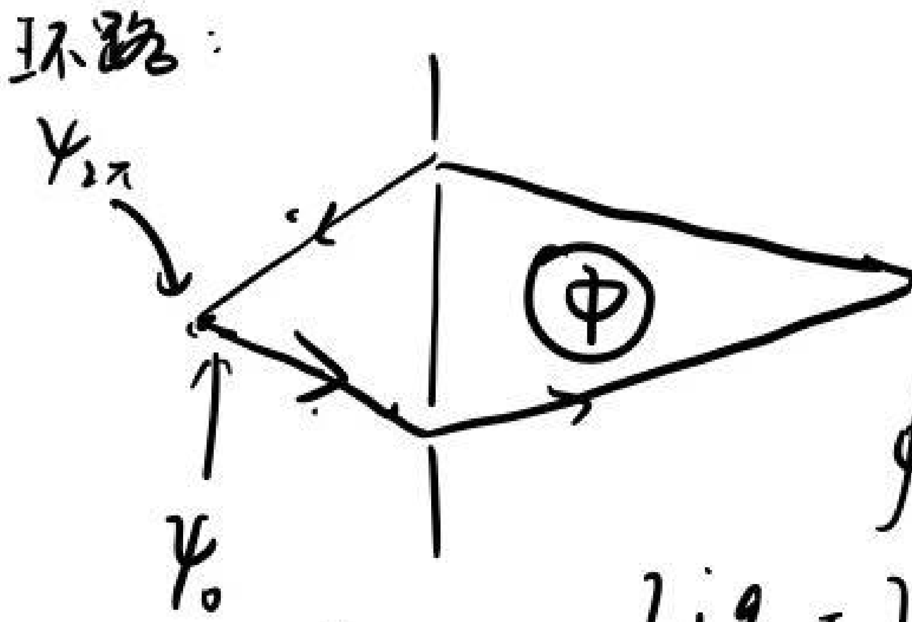
$$\Rightarrow(\hat{P}-qA-q\nabla\Lambda)\exp\left(\frac{iq\Lambda}{\hbar}\right)$$

$$=\exp\left(\frac{iq\Lambda}{\hbar}\right)(\hat{P}-qA)$$

$$\Longrightarrow H'\psi'=i\hbar\partial_t\psi'$$

gauge transformation 后，薛定谔方程不变

环路：



$$\oint A\cdot dr=\oiint B\cdot dS=\Phi$$

$\psi_{2\pi}=\exp\left[\frac{iq}{\hbar}\Phi\right]\psi_0$ 不会回到初态

可由电子干涉实验验证

绝热演化 $i\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=H(\lambda)|\psi\rangle$

H中有缓变参数 $\lambda(t)$

瞬时本征态

$$H(\lambda)|u(\lambda)\rangle=\varepsilon_n(\lambda)|u(\lambda)\rangle$$

系统从 $|\psi(0)\rangle=|u(\lambda_0)\rangle$ 开始

$$\to|\psi(t)\rangle=e^{i\gamma(t)}e^{-i\int_0^t\varepsilon_n(\lambda)dt}|u(\lambda)\rangle$$

代入演化方程 $\to\gamma(t)=\int i\,dt\langle u(\lambda)|\partial_t|u(\lambda)\rangle$

$$=\int i\,d\lambda\langle u(\lambda)|\nabla_\lambda|u(\lambda)\rangle$$

$$=\int A_\lambda^n\cdot d\lambda$$

A_λ：参数空间中的矢势（Berry 联络）

对于环路 $\oint A_\lambda^n d\lambda=\iint\Omega_\lambda^n dS$

$$\Omega_{\mu\nu}^n=\nabla\times A$$

$$=i\left[\langle\partial_\mu u_n|\partial_\nu u_n\rangle-\langle\partial_\nu u_n|\partial_\mu u_n\rangle\right]$$

称为 Berry 曲率

Additional：对多占据态系统，系统每一个占据能带均有贡献

$A^{mn}=i\langle u^m|\nabla_\lambda|u^n\rangle$ 不再是 $U(1)$ 的，称作 Non-Abelian 贝里联络

$$\gamma_c=\oint Tr(A)\cdot d\lambda$$

$m,n\in occ$ 占据带

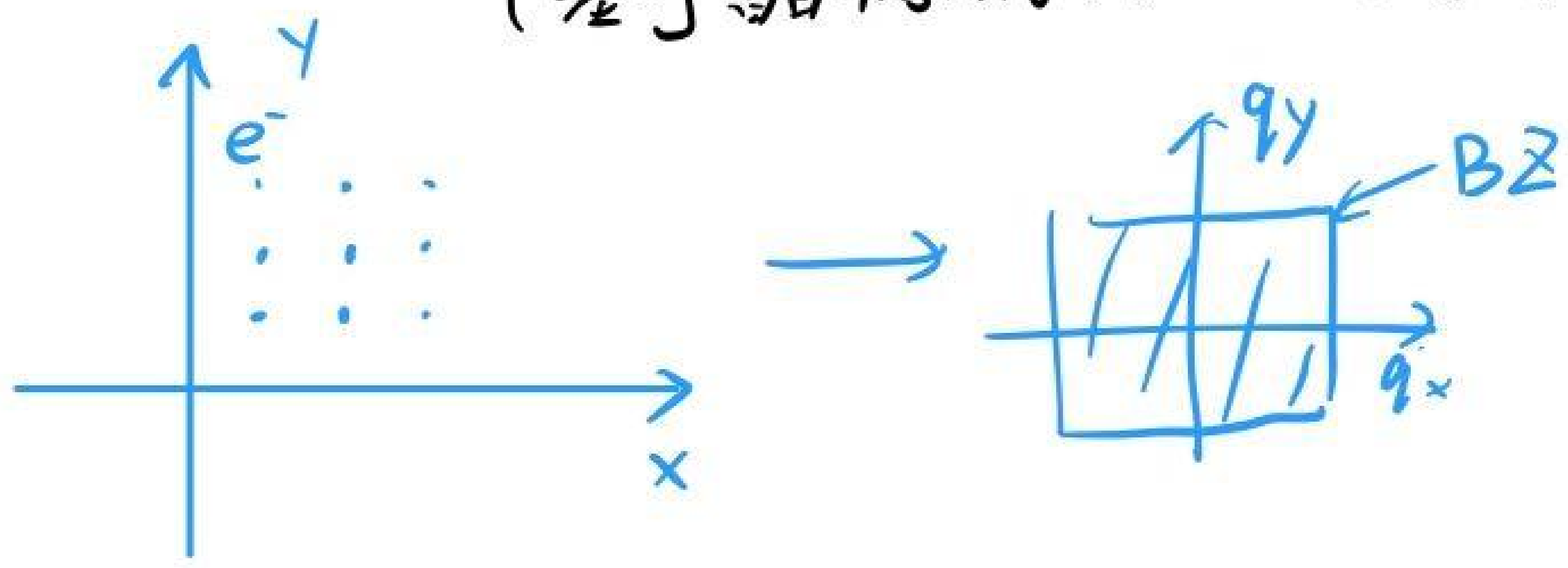
对于AB效应，若缓变：

$A=i\langle\psi'|\nabla\psi'\rangle=-\frac{q\bar{A}_n}{\hbar}$ 与磁矢势联系起来

Chapter 2

IQHE (Interger Quantum Hall Effect)

(基于晶格的动量空间导出)



给晶格加上电场 $E=-\frac{\partial \vec{A}(t)}{\partial t}$

(不加静电场 $\phi(r)$ 破坏空间平移对称性)

在动量空间下，$H(q)=\frac{\hbar^2(q+\frac{e}{\hbar}\vec{A}(t))^2}{2m}+V(r)$

q对应正则动量，在磁场下为好量子数

$k=q+\frac{e}{\hbar}A(t)$ 对应实际波矢

电子速度 $\hat{v}=\frac{1}{\hbar}\nabla_q H$

设第n个带初始本征态为 $|u_n(0)\rangle$

加入电场后 →

$$|\psi(q,t)\rangle=\sum a_n(t)\, e^{-\int\frac{iE_n(t)}{\hbar}dt}|u_n(q,t)\rangle$$

$$H(t)|\psi(t)\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle$$

$$\sum_n \varepsilon_n a_n(t) e^{-i\int\varepsilon_n(t)dt}|u_n(q,t)\rangle=\sum_n \dot{a}_n(t) e^{-i\int\varepsilon_n(t)dt}|u_n(q,t)\rangle+\sum_n a_n(t)\varepsilon_n e^{-i\int\varepsilon_n dt}|u_n(q,t)\rangle+\sum_n a_n(t) e^{-i\int E_n(t)dt}\partial_t|u_n(q,t)\rangle$$

$$\dot{a}_n=-\sum_m a_m(t)\langle u_n|\partial_t|u_m\rangle e^{-i\int\frac{E_m-E_n}{\hbar}dt}$$

初始时，电子处于第n个带.

$$a_n^{(0)}=\delta_{nn'}$$

$$\dot{a}_{n'}=-\langle u_{n'}|\partial_t|u_n\rangle e^{-i\int\frac{E_n-E_{n'}}{\hbar}dt}$$

$$a_{n'}=-\frac{i\hbar\langle u_{n'}|\partial_t|u_n\rangle}{E_{n'}-E_n}e^{-i\int\frac{E_{n'}-E_n}{\hbar}dt}$$

$$|\psi(t)\rangle=e^{-i\int E_n dt}|u_n(q,t)\rangle-\sum_{m\neq n}\frac{i\hbar\langle u_m|\partial_t|u_n\rangle}{E_n-E_m}e^{-i\int\frac{E_m dt}{\hbar}}|u_m(q,t)\rangle$$

$$\langle\hat{v}_n\rangle=\langle\psi(t)|\hat{v}|\psi(t)\rangle=\frac{\partial\varepsilon_n(q)}{\hbar\partial q}-i\left[\sum_{m\neq n}\frac{\langle u_n|\frac{\partial H}{\partial q}|u_m\rangle\langle u_m|\partial_t u_n\rangle}{E_n-E_m}-h.c\right]$$

又：

$$\langle u_n|\frac{\partial H}{\partial q}|u_m\rangle=\left(\frac{\partial H}{\partial q}|u_n\rangle\right)^{\dagger}|u_m\rangle=\left(E_n|\nabla_q u_n\rangle-H|\nabla_q u_n\rangle\right)^{\dagger}|u_m\rangle=(E_n-E_m)\langle\nabla_q u_n|u_m\rangle$$

代入后 利用 $\sum_{m\neq n}|u_m\rangle\langle u_m|=I-|u_n\rangle\langle u_n|$

得到

$$\langle\hat{v}_n\rangle=\frac{\partial\varepsilon_n(q)}{\hbar\partial q}-i\left[\langle\nabla_q u_n|\partial_t u_n\rangle-\langle\partial_t u_n|\nabla_q u_n\rangle\right]$$

$$=\frac{\partial\varepsilon_n(q)}{\hbar\partial q}-\underline{\Omega^n_{qt}}$$ 反常速度

由 $\vec{k}=\vec{q}+\frac{e}{\hbar}\vec{A}(t)$

$\nabla_q=\nabla_k$，$\partial_t=\frac{\partial k}{\partial t}\nabla_k=-\frac{e}{\hbar}\vec{E}(t)\nabla_k$

$$\Rightarrow \vec{v}(k)=\frac{\partial\varepsilon_n(k)}{\hbar\partial k}-\frac{e}{\hbar}\vec{E}\times\left(i\langle\nabla_k u_n|\times|\nabla_k u_n\rangle\right)$$

$$=\frac{\partial\varepsilon_n(k)}{\hbar\partial k}-\frac{e}{\hbar}\vec{E}\times\vec{\Omega}^n$$ (二阶反对称张量的对偶矢量)

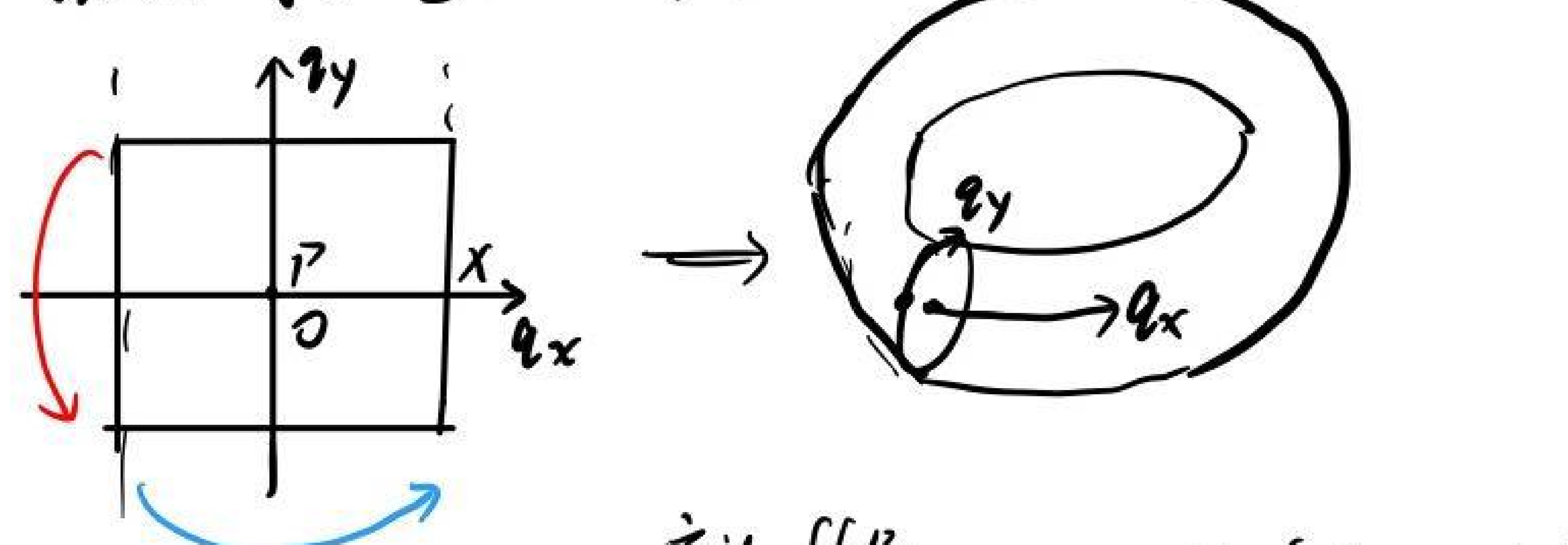
计算电流密度需要考虑所有占据态的贡献：

若 $\vec{E}=E_x\hat{x}$

$$j_y=\sum_{n\in occ}\sum_k -e v_y(k)=\frac{e^2}{\hbar}\sum_{n\in occ}\iint_{BZ}\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\Omega(k)E_x$$

二维的BZ左右等价，上下等价 (或 $\iint\frac{d^2q}{(2\pi)^2}\Omega(q)$)

拓扑等价于环面，在轮胎面上积分：



定义 $\iint\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\Omega(k)=C$ (chern number)

$$\sigma_H=\frac{j_y}{E_x}=\frac{e^2}{\hbar}\sum_{n\in occ}C_n$$

但需注意，我们研究的是态规范相位的拓扑，不是BZ的拓扑

讨论

① $\Omega(k)$ 仅依赖于 $|u_n(k)\rangle$，即能带拓扑与外加场无关，对于一些无外场体系也可有此现象：AQHE（晶格中的量子反常Hall效应）

② Chern number $\in \mathbb{Z}$.

对系统的对称性无要求

且体内的杂质不会影响Chern number的存在

③ $\Omega(k)$ 的对称性变换：

$$v(k)=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k}-\frac{e}{\hbar}\vec{E}\times\vec{\Omega}(k)$$

空间反演下，$v\to -v$，$k\to -k$，$E=-E$

时间反演下，$v\to -v$，$k\to -k$，$E=E$.

这要求：空间反演下 $\Omega(k)=-\Omega(-k)$

时间反演下 $\Omega(k)=\Omega(-k)$

当 T 与 P 均保证时 $C\equiv 0$.

说明此时 $\mathbb{Z}$ 上无法定义拓扑不变量，

于是在 $\mathbb{Z}_2$ 中寻找拓扑不变量

④ $\sum_{n\in all}\Omega(k)=0$. 说明拓扑物态是费米能以下基态的属性

Chapter 3

Lattice中的拓扑、二次量子化与紧束缚模型

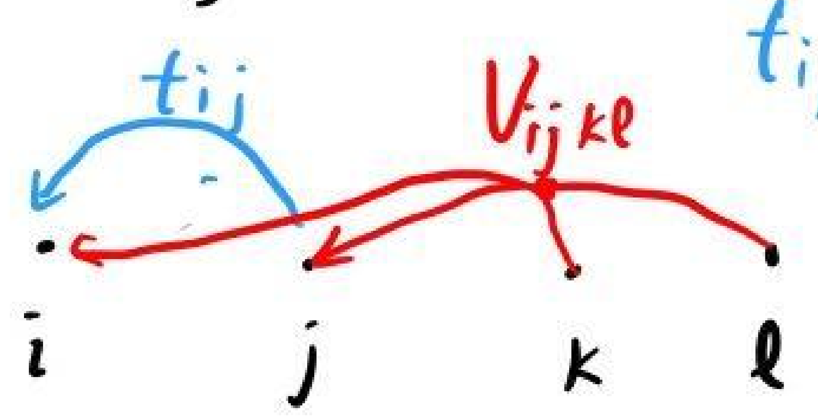
二次量子化物理内涵：

$a_i^\dagger(a_i)$：第i个格点上生成(湮灭)一个粒子

对易关系：$[a_i, a_i^\dagger]=1$，由于粒子被束缚在格点上，它们是可分辨的，玻色子与费米子没有区别

等效哈密顿量的表示：

$$H=\sum_{ij}t_{ij}a_i^\dagger a_j+\sum_{ijkl}V_{ijkl}a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l \ \cdots$$



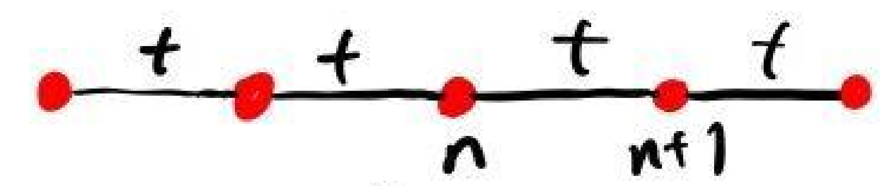
t_{ij} $j\to i$ 单体跳跃.

V_{ijkl} $(kl)\to(ij)$ 二体跳跃

能带论单电子假设：仅考虑单体跳跃相互作用

紧束缚模型：仅考虑最近邻相互作用

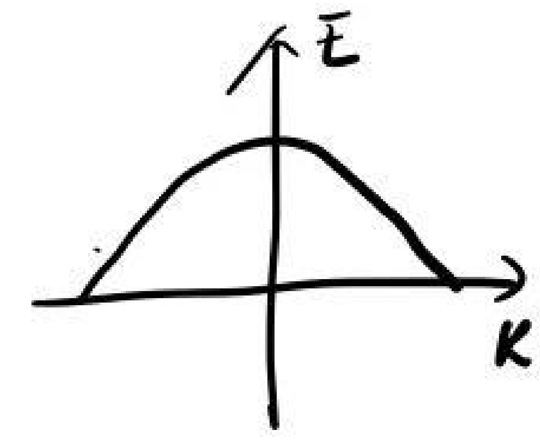
例：1D单原子链，N个原子.



$$H=t\sum_i a_{n+1}^\dagger a_n + h.c$$

离散傅里叶变换

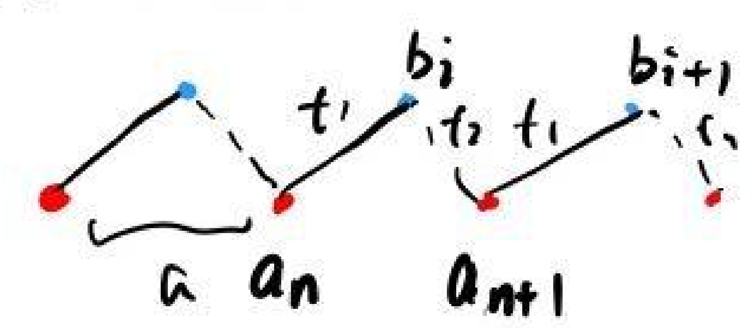
$$\begin{cases} a_k^\dagger=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n a_n^\dagger e^{ikna} \\ a_n^\dagger=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k a_k^\dagger e^{-ikna} \end{cases}$$



$$\Rightarrow H=\sum_k H(k)=\sum_k 2t\cos(ka)\,a_k^\dagger a_k$$

$H(k)$ 本征值为 $2t\cos(ka)$，为单原子能带.

2. 1D双原子链（SSH模型）

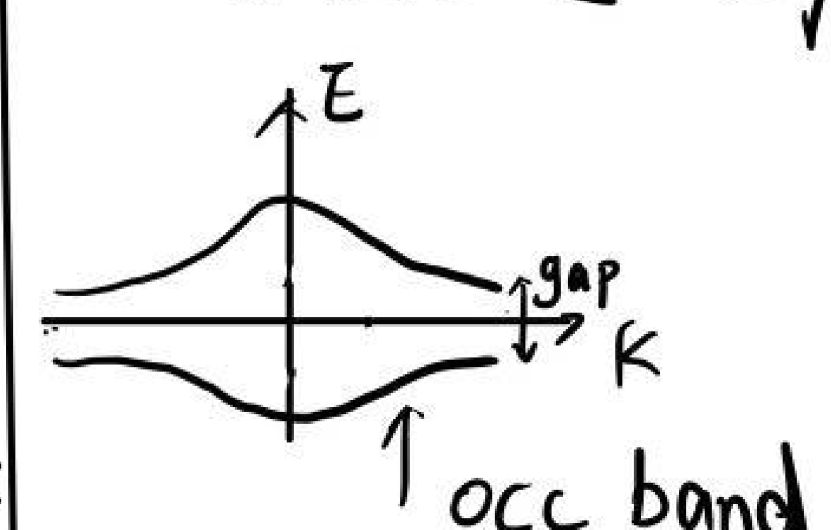


$$H=t_1\sum a_n^\dagger b_n+t_2\sum a_{n+1}^\dagger b_n + h.c$$

代入 $a_n^\dagger(b_n^\dagger)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k a_k^\dagger(b_k^\dagger)e^{-ikna}$

有 $H=(a_k^\dagger, b_k^\dagger)\begin{pmatrix}0 & t_1+t_2e^{ika}\\ t_1+t_2e^{ika} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_k\\ b_k\end{pmatrix}$

本征值 $E=\pm\sqrt{t_1^2+t_2^2+2t_1t_2\cos(ka)}$



一般地

$$H=\sum_k H(k)=\sum_k\sum_{\alpha,\beta}c_{k\alpha}^\dagger h_{\alpha\beta}(k)c_{k\beta}$$

$\alpha,\beta\in N_{orb}$ 代表一个原胞内的sub-position

对 $h_{\alpha\beta}(k)$ 对角化得到

$$h_{\alpha\beta}(k) = U^{\dagger}\begin{pmatrix} E_1 & & \\ & E_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} U$$

$U = (u_1(k), u_2(k) \cdots u_{N_{orb}}(k))$ 即为Bloch基.

引入能带产生湮灭算符

$$\gamma_p^{\dagger}(k) = \sum_{\alpha} u_p^{\alpha *}(k) C_{k\alpha}^{\dagger}$$

含义为生成一条占据能带

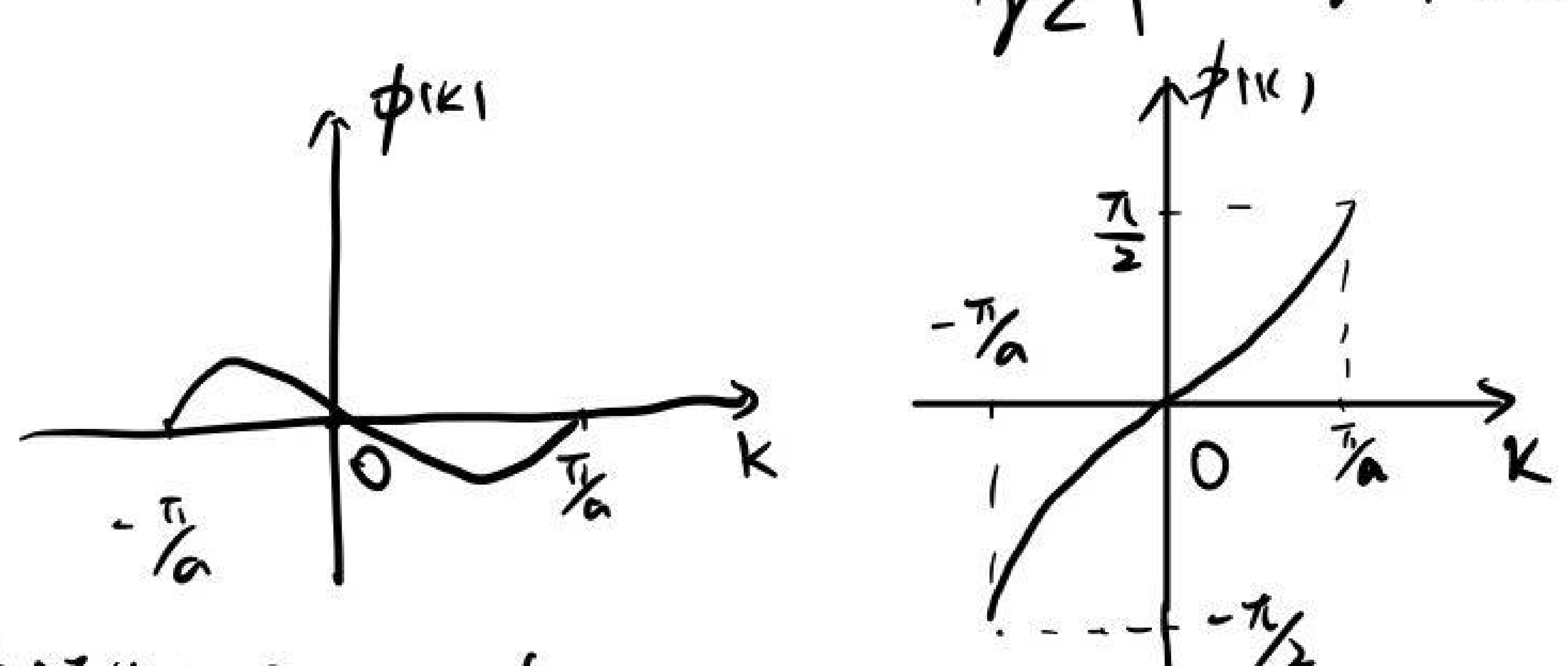
$$H(k) = \sum_p E_p(k) \gamma_p^{\dagger}(k) \gamma_p(k).$$

SSH模型中的拓扑.

负能态对应的本征态

$$u_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\phi(k)} \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \tan\phi = \frac{t_2 \sin k}{t_1 + t_2 \cos k} = \frac{\sin ka}{\gamma + \cos ka}$$

$\gamma > 1$ $\gamma < 1$

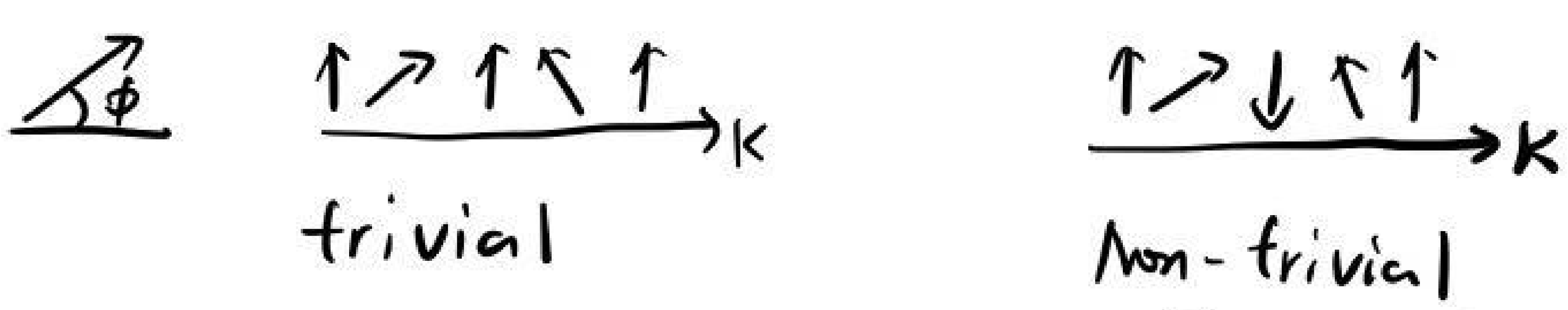


占据带的Berry phase

$$\gamma_c = \oint i\langle u_- | \partial_k | u_- \rangle dk$$

$= 0$ $= \pi$ (Nontrivial)

发现γ在跨越1时发生了拓扑相变



1D模型中的拓扑不变量称为Zak相位

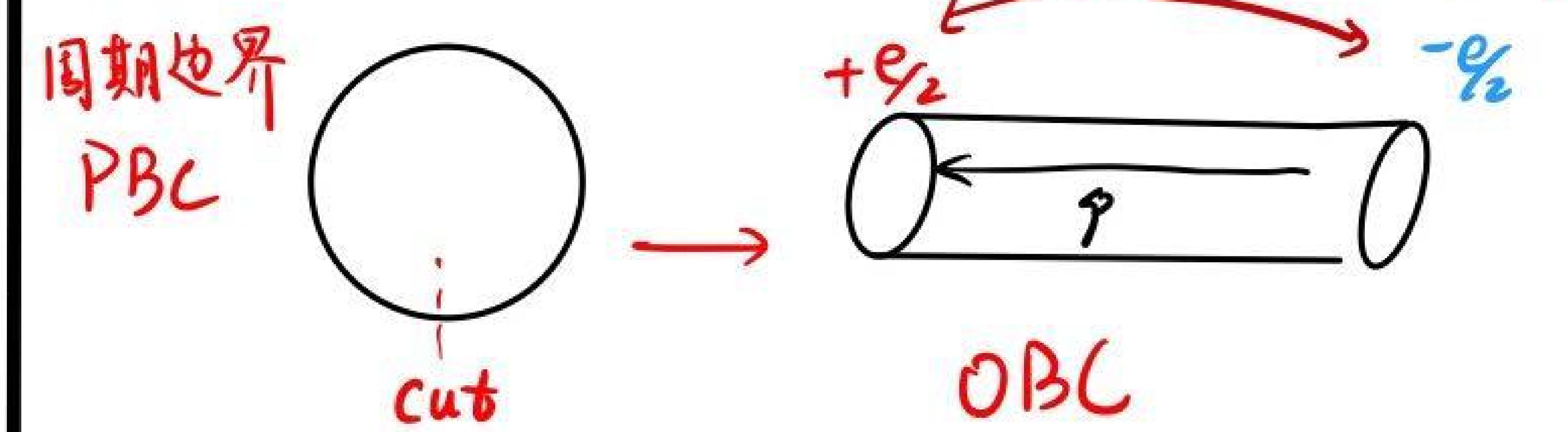
$$\gamma_{Zak} = \sum_{n \in occ} i \int_{BZ} \langle u_n | \partial_k | u_n \rangle dk$$

Berry phase 与极化

$\hat{x} \longrightarrow i\partial_k$ 体偶极矩 $p = e\langle x \rangle_{occ} = \frac{e}{2\pi}\gamma_c$

$\gamma_c = 0, \pi$ 对应 $p = 0, e/2$.

体边对应: 当p非零时, 示意如图: 怎么分别正负? 加入onsite 原胞须进行选择



对称性对p取值的限制

对于有时空对称性的体系 $\Omega(k) \equiv 0$ $C \equiv 0$

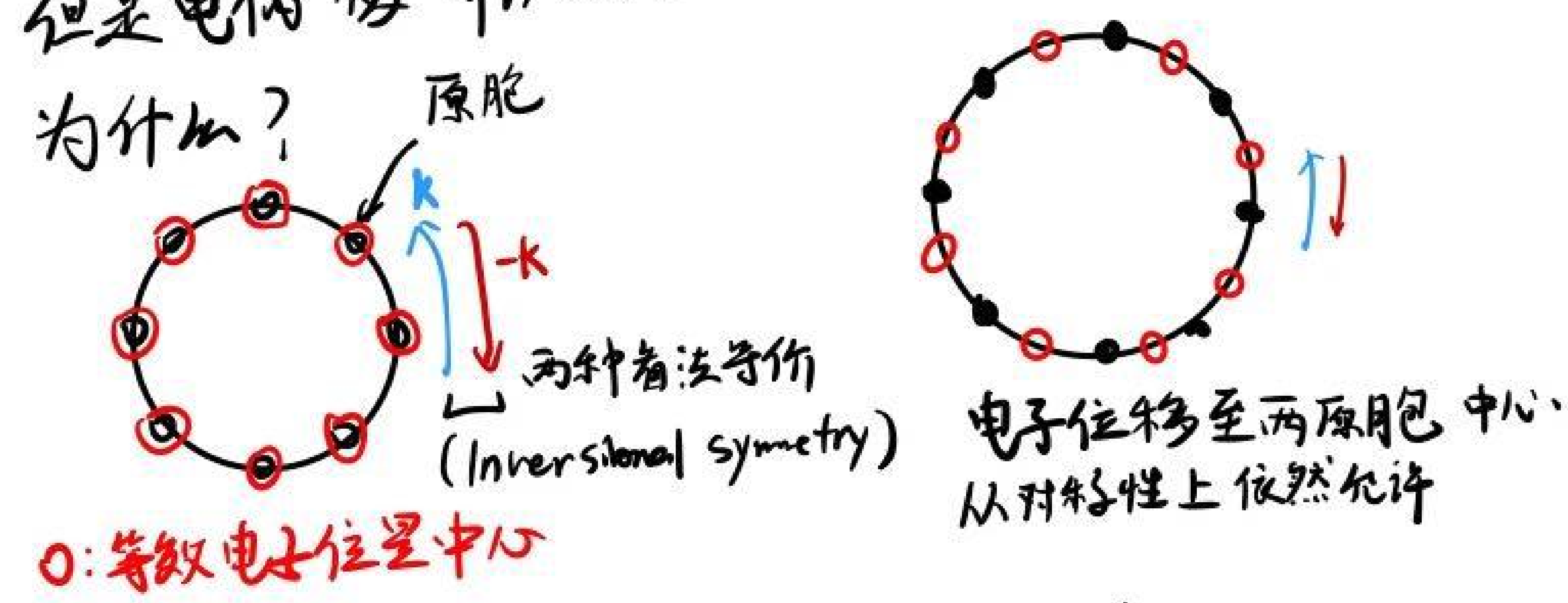
理解: $C = \iint \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Omega(k)$

形式上同构Gauss定理, C即为动量空间电荷

对于对称性良好体系中不能存在

但是电偶极可以存在

为什么?



两种状态均是允许的, 但是拓扑不等价

无法在不破坏对称性下连续变换至彼此

什么时候取trivial, 什么时候non-trivial?

(这种"非0即1"的拓扑数 也称作 Z_2 拓扑数)

一般针对受对称性限制体系.

空间对称性要求

$[H(r), P] = 0$ $P^2 = 1$ (对时间反演 $T^2 = -1$)

在动量空间中对应了

$$H(-k) = P H(k) P^{-1}$$

$$\longrightarrow H(-k) P|u(k)\rangle = P H |u(k)\rangle = E(k) P|u(k)\rangle$$

$$\Longrightarrow E(k) = E(-k), \quad |u(k)\rangle = e^{-i\alpha_k} P|u(-k)\rangle$$

引入 $B_{ij}(k) = \langle u_i(-k)|p|u_j(k)\rangle$ $i,j\in occ$

在OCC子空间中．$\sum_{i\in occ}|u_i(k)\rangle\langle u_i(k)| = I_{N_{occ}\times N_{occ}}$

$$B_{ij}B^{\dagger}_{jk} = \langle u_i(-k)|u_k(k)\rangle = \delta_{ik}.$$

故B是unitary的．

$$|u_i(-k)\rangle = B^*_{ij}\, p\,|u_j(k)\rangle$$

对Non-Abelian联络的作用

$$A^{mn}(-k) = i\langle u_m(-k)|\partial_{-k}|u_n(-k)\rangle$$

$$= -i\, u^*_m(-k)_\alpha\, \partial_k u_n(-k)_\alpha$$

正交关系．$B_{ij}B^*_{ik}=\delta_{jk}$

$p^{\dagger}_{\alpha\beta} = p^*_{\beta\alpha} = p_{\alpha\beta}$

$p_{\alpha\beta}p_{\beta\gamma} = p_{\beta\gamma}$

$$= -i\, B_{mi}\, p^*_{\alpha\gamma} u^*_{i\gamma}(k)\, \partial_k\left(B^*_{nj}\, p_{\alpha\beta}\, u_j(k)_\beta\right)$$

$$= -iB_{mi}\, p^*_{\alpha\gamma}\, u^*_{i\gamma}(k)\left(\partial_k B^*_{nj}\right) p_{\alpha\beta}\, u^*_{j\beta}(k)$$

$$-iB_{mi}\, p^*_{\alpha\gamma}\, u^*_{i\gamma}(k)\, B^{\dagger}_{jn}\, p_{\alpha\beta}\, \partial_k u_j(k)_\beta$$

$$= -B\nabla_k B^{\dagger} - BA^{mn}(k)B^{\dagger}$$

对单带情况（Abelian）

$$A(-k) = -Tr(B\nabla_k B^{\dagger}) - A(k).$$

$$p_1 = \frac{e}{2\pi}\int_{BZ} A(k)\,dk$$

$$= \frac{e}{2\pi}\int_0^{\pi} A(k)+A(-k)\,dk$$

$$= -\frac{e}{2\pi}\int_0^{\pi} Tr(B\nabla_k B^{\dagger})\,dk.$$

由于对 $\forall Q$

$$\det e^Q = e^{trQ} \qquad trQ = \log\det e^Q.$$

$$Tr(B\nabla_k B^{\dagger}) = -\nabla_k \log\det B$$

$$p_1 = \frac{e}{2\pi}\log(\det B(\pi) - \det B(0)) \quad \text{mod } e$$

注意：$H(-k) = pH(k)p^{-1}$

当 k 位于BZ高对称点 Γ_i 时

$-\frac{\Gamma_i}{2} = \frac{\Gamma_i}{2} + nG_i$ $\quad k=-k$

$H(\Gamma_i) = pH(\Gamma_i)p^{-1}$ $\qquad p|u_i(\Gamma)\rangle$

此时 $[H, p] = 0$． $\qquad = \pm1\,|u_i(\Gamma)\rangle$

H与p有共同本征函数

对于B矩阵．在Γ点处

它是对角的

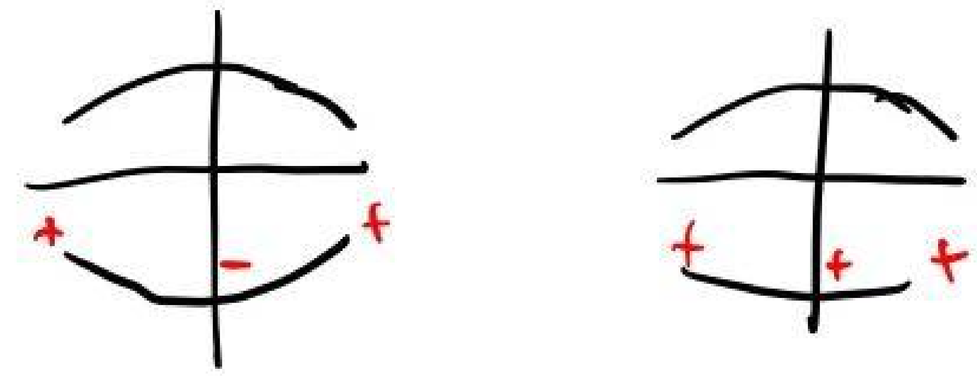
$$B_{ij}(\Gamma) = \langle u_i(\Gamma)|p|u_j(\Gamma)\rangle = \boxed{\pm1}\,\delta_{ij}$$

$\det(B(\Gamma)) = \prod_{i\in occ} p(\Gamma)$ ．$p(\Gamma)$为p的特征值

对于1D BZ，高对称点Γ为 $\Gamma=0, \pi$ $(\frac{\pi}{a}, a=1)$ 处

故 $p_1 = \frac{e}{2\pi}(\det B(0) - \det B(\pi))$

对SSH模型：示意如图



$\gamma < 1$ $\qquad$ $\gamma > 1$

nontrivial $\qquad$ trivial

由此发现仅根据占据态高对称点的对称操作特征值即可判定一个带的Z_2拓扑贡献

Chapter 4：更广泛适用的理论（对满带绝缘体）

Wannier带与Wilson Loop方法

研究系统的电极化．即研究电子的守数位置中心．

考察占据态算符 $P_{occ}\hat{x}P_{occ}$

P_{occ}为占据带投影算符

$$P_{occ} = \sum_{n\in occ}\sum_k \gamma^{\dagger}_{n,k}|0\rangle\langle 0|\gamma_{n,k}$$

$$\hat{x} = \sum_{R,\alpha} e^{-i\Delta k(R+r_\alpha)}\, c^{\dagger}_{R\alpha}|0\rangle\langle 0|c_{R\alpha}$$

r_α：原胞内坐标．

这样定义 $\hat{x}$ 是因为PBC下坐标不好定义．只好用相位进行代替，设晶格常数为1

$$\Delta k = \frac{2\pi}{N} \quad R = 1,2,\ldots N-1.$$

利用 $C^{\dagger}_{k\alpha}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{R}e^{-ik(R+r_\alpha)}C^{\dagger}_{R\alpha}$

$C^{\dagger}_{R\alpha}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k}e^{ik(R+r_\alpha)}C^{\dagger}_{k\alpha}$

$$\Rightarrow \hat{x}=\sum_{k,\alpha}C^{\dagger}_{k+\Delta k,\alpha}|0\rangle\langle 0|C_{k,\alpha}$$

$$\Rightarrow P_{occ}\hat{x}P_{occ}=\sum_{m\in occ}\sum_{n\in occ}\sum_{k}\sum_{k'}\sum_{q}\sum_{\alpha}\gamma^{\dagger}_{m,k}|0\rangle\langle 0|\gamma_{mk}C^{\dagger}_{q+\Delta k,\alpha}|0\rangle\langle 0|C_{q\alpha}\gamma^{\dagger}_{nk}|0\rangle\langle 0|\gamma_{nk}$$

利用关系 $\gamma^{\dagger}_{nk}=\sum_{\alpha}u^{n*}_{k\alpha}C^{\dagger}_{k\alpha}$

$$(P_{occ}\hat{x}P_{occ})=\sum_{m,n}^{N_{occ}}\sum_{k}\sum_{\alpha}\gamma^{\dagger}_{m,k+\Delta k}|0\rangle u^{m*}_{k+\Delta k,\alpha}u^{n}_{k\alpha}\langle 0|\gamma_{n,k}$$

$$=\sum_{m,n}^{N_{occ}}\sum_{k}\gamma^{\dagger}_{m,k+\Delta k}|0\rangle\langle 0|\gamma_{n,k}\langle u^{m}_{k+\Delta k}|u^{n}_{k}\rangle$$

设 $\hat{X}=P_{occ}\hat{x}P_{occ}$ 的本征态为 $|\psi^{j}_{R}\rangle$，本征值 E_j

$j\in 1,2,\cdots N_{occ}$

$$|\psi^{j}_{R}\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k}\sum_{n}^{N_{occ}}\nu^{n}_{j,k}e^{-ikR}\gamma^{\dagger}_{nk}|0\rangle$$

$$(P_{occ}\hat{x}P_{occ})|\psi^{j}_{R}\rangle$$

$$=\sum_{m,n}^{N_{occ}}\langle u^{m}_{k+\Delta k}|u^{n}_{k}\rangle\nu^{n}_{j,k}\gamma^{\dagger}_{m,k+\Delta k}|0\rangle$$

$$=E^{j}\cdot\sum_{k}\sum_{m}\nu^{m}_{j,k+\Delta k}\gamma^{\dagger}_{m,k+\Delta k}|0\rangle$$

$$=E^{j}|\psi^{j}_{R}\rangle$$

左乘 $\langle 0|\gamma_{m,k+\Delta k}$，有

$$\Rightarrow\sum_{n}\langle u^{m}_{k+\Delta k}|u^{n}_{k}\rangle\nu^{n}_{j,k}=E_j\nu^{m}_{j,k+\Delta k}$$

记 $[F_k]_{mn}=\langle u^{m}_{k+\Delta k}|u^{n}\rangle$ 则得到递推

$$F_k|\nu^{j}_{k}\rangle=E^{j}|\nu^{j}_{k+\Delta k}\rangle$$

设 $|\nu^{j}_{k}\rangle=\begin{pmatrix}\nu^{1}_{j}\\ \nu^{2}_{j}\\ \vdots\end{pmatrix}_{k}$ 注意到BZ周期性

$k=k+2\pi$

$=k+N\Delta k$

构造Wilson Loop

$$W=F_kF_{k+\Delta k}\cdots F_{k+(N-1)\Delta k}$$

由于 $W^{\dagger}=W_{逆向}$ 则 $WW^{\dagger}=I$，它是酉的。

$W|\nu^{j}_{k}\rangle=(E^{j})^{N}|\nu^{j}_{k}\rangle$

$(E^{j})^{N}=e^{i2\pi\nu_j}$

$$\Rightarrow E^{j}=e^{i\frac{2\pi}{N}(R+\nu_j)}=e^{i\Delta k(R+\nu_j)}$$

$R=1,2,\cdots N-1$

Wannier 函数正交性

$$\langle\psi^{i}_{R}|\psi^{j}_{R'}\rangle=\delta_{ij,RR'}$$

Wilson Loop 与极化

对于占据着 N_{occ} 带的电子，

每个带贡献一个 $P_{\nu_i}=\nu_i$

$$p=\sum\nu_i=-\frac{i}{2\pi}\log\det(W)$$

当 $N\to\infty$ 时 $[F_k]_{mn}=\langle u^{m}_{k+\Delta k}|u^{n}_{k}\rangle$

$=\delta_{mn}+\Delta k\cdot\langle\partial_k u^{m}_{k}|u^{n}_{k}\rangle$

$A^{mn}=\langle u^{m}|\partial_k|u^{n}\rangle$ $=\delta_{mn}-\Delta k\langle u^{m}_{k}|\partial_k u^{n}_{k}\rangle$

$=\delta_{mn}+i\,dk\cdot A^{mn}$

$N \to \infty$ 时.

$$W = \exp\left(i \int_{BZ} \mathrm{Tr}\, A_k \, dk \right)$$

$$p = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} \mathrm{Tr}\, A_k \, dk$$ 平推导出了极化公式

什么时候 trivial, non-trivial

事实上 Chapter 3 的内容总是适用的

$$A(D_g k) = -A(k) - B \nabla_k B^\dagger \qquad B_{ij} = \langle u^i_{D_g k} | D_g | u^j_k \rangle$$

其中 $D_g \cong Z_2$, 将 BZ 分为两个不等价部分

则 $$p = \frac{1}{2\pi} \int_{\frac{1}{2}BZ} \mathrm{Tr}(A(D_g k) + A(k))\, dk$$

$$= \frac{-1}{2\pi} \int_{\frac{1}{2}BZ} \mathrm{Tr}(B \nabla_k B^\dagger)$$