

凝聚态物理基础

凝聚态物理中的输运现象

翁明其: weng@ustc.edu.cn;
物质楼 C 楼 515 (五楼西南角)
<http://staff.ustc.edu.cn/~weng>

第一章 Introduction

- 1.1 凝聚态物理中的输运现象
- 1.2 主要内容
- 1.3 参考资料

凝聚态物理中的输运现象

- 输运：外“力”作用下导致的物质 / 电荷 / 自旋 / 能量流动
- 实际用途：电能、电子器件、...
- 输运性质包含了丰富的物理，也是探索物理性质的重要手段
 - 能带结构
 - 器件结构
 - 拓扑性质
 - 相互作用
 - ...

主要内容

- 能带结构
 - Bloch 定理以及 Bloch 电子性质
 - 能带计算
 - 量子结构中的能带
- 凝聚态系统对电磁场响应的一般理论
- 体材料中的扩散性输运: Boltzmann 方程
- 量子结构中的弹道输运
- 磁输运现象: 量子 Hall 效应
- 拓扑绝缘体
 - 几何相位
 - 拓扑绝缘体
- 超导现象

参考资料

- 《凝聚态物理学(上)》,冯端、金国钧,高等教育出版社,(2006)。
- “*Solid State Properties*”, M. Dresselhaus *et. al.*, Springer, (2018).
- “*A Short Course on Topological Insulators*”, J. K. Asbóth *et. al.*, Springer, (2016).
- “*Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals: Gradient corrections and Berry-phase effects*”, G. Sundaram and Q. Niu, PRB **59**, 14915 (1999).

基础课程

- 普物、四大力学
- 固体物理

第二章 Bloch 电子性质

- 2.1 Bloch 电子
- 2.2 Bloch 波包的运动
- 2.3 有效质量近似
- 2.4 量子结构中的能带计算：紧束缚近似
- 2.5 能带例子：金属
- 2.6 能带例子：半导体
- 2.7 二维材料

Bloch 理论的近似

$$\mathcal{H}_{crystal} = \sum_I \frac{\mathbf{P}_I^2}{2M_I} + \sum_{IJ} \frac{Z_I Z_J e^2}{\epsilon_0 |\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|} \quad \text{原子核}$$
$$+ \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{Ii} \frac{Z_I e^2}{\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|} \quad \text{电子 + 电子 - 核}$$

- 绝热近似
- 独立电子近似：电子之间相互作用可忽略或者平均场近似
- 周期场近似

Bloch 理论的近似

- 绝热近似

$$\mathcal{H}_{crystal} = \mathcal{H}_N + \mathcal{H}_e \quad \boxed{\mathcal{H}_e \text{ 里 } R_I \text{ 是不变的数}}$$

$$\mathcal{H}_e(\{\mathbf{R}_I\}) = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{Ii} \frac{Z_I e^2}{\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|}$$

- 独立电子近似：电子之间相互作用可忽略或者平均场近似

$$\mathcal{H}_e = \sum_i \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}_i | \{\mathbf{R}_I\}) \right] = \sum_i \mathcal{H}_0(\mathbf{r}_i)$$

- 周期场近似

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}) \quad V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = V(\mathbf{r})$$

$\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3$ 为 Bravais 格矢。

系统态和单粒子态

在上述近似下，系统本征态可以用单粒子态表示

$$\mathcal{H}_e \Psi(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_{N_e}) = \mathcal{E} \Psi(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_{N_e})$$

$$\mathcal{H}_e(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_{N_e}) = \sum_i \mathcal{H}_0(\mathbf{r}_i)$$

$$\mathcal{H}_0 \psi_s(\mathbf{r}) = \varepsilon_s \psi_s(\mathbf{r})$$

$$\mathcal{H}_e \Psi(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_{N_e}) = \mathcal{E} \Psi(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_{N_e})$$

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_{N_e}) = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \sum_P (-)^P P \psi_{s_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{s_2}(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_{s_{N_e}}(\mathbf{r}_{N_e})$$

$$\mathcal{E} = \sum_i \varepsilon_{s_i}$$

- ☞ 系统基态是费米球 / 费米海
- ☞ 系统的低能激发态是在费米面附近的粒子 - 空穴激发
- ☞ 平衡时电子服从费米分布

Bloch 定理

单粒子本征波函数是 Bloch 波函数

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = V(\mathbf{r})$$

$$\hat{T}(\mathbf{R}_l)f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) \quad [\hat{T}(\mathbf{R}_l), \mathcal{H}_0] = 0$$

$$\mathcal{H}_0|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k})|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \quad \hat{T}(\mathbf{R}_l)|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$$

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad \boxed{n: \text{能带指标}; \mathbf{k} \text{ 平移算符本征值指标}}$$

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\hat{T}(\mathbf{R}_l)|\psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}_m}\rangle = e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_m)\cdot\mathbf{R}_l}|\psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}_m}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}|\psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}_m}\rangle$$

$$|\psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}_m}\rangle = |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \quad \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m)$$

$\mathbf{G}_m = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3$ 为倒格矢。

☞ $\mathbf{k}$ 可以取在第一布里渊区里。

Bloch bundle

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle &= \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right]e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_{n\mathbf{k}}\rangle = \left[\frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right]e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_{n\mathbf{k}}\rangle \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left[\frac{(\hbar\mathbf{k} - i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right]|u_{n\mathbf{k}}\rangle \\ &= \varepsilon_n(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_{n\mathbf{k}}\rangle\end{aligned}$$

$$\varepsilon_n(\mathbf{k})|u_{n\mathbf{k}}\rangle = \left[\frac{(\hbar\mathbf{k} - i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right]|u_{n\mathbf{k}}\rangle = \mathcal{H}_0(\mathbf{k})|u_{n\mathbf{k}}\rangle$$

- ☞ Bloch 电子本征态可以看成一族以 $\mathbf{k}$ 为参数的本征态，对于某个确定的能带，每个 $\mathbf{k}$ 对应一个本征波函数 $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ 。
- ☞ 整个布里渊区所有 $\mathbf{k}$ 的波函数合起来形成一个抽象的几何结构称为 Bloch bundle。
- ☞ Bloch bundle 可能具有特别的拓扑性 $\Rightarrow$ 拓扑绝缘体。

Bloch bundle

$$|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = |\psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}\rangle \Rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}} = e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}$$

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad u_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

• $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 和 $u_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ 相差一个规范变换，有相同的本征能量

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}} = \left[\frac{(\hbar\mathbf{k} - i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\varepsilon_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) u_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) u_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}$$

$$= \left[\frac{(\hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{G} - i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] u_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}$$

$$= \left[\frac{(\hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{G} - i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$= e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \left[\frac{(\hbar\mathbf{k} - i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

第一布里渊区的拓扑以及物理后果

🔗 $\mathbf{k} \Leftrightarrow \mathbf{k} + \mathbf{G}$: 第一布里渊区是周期的

🔗 第一布里渊区 (Bloch bundle 的底流形) 为环面
一维为圆; 二维为游泳圈面; ...

🔗 物理后果: Bloch 振荡, U -过程, ...

- 不考虑散射, 真空中电子在均匀电场下作用下做匀加速运动
- 不考虑散射, 晶体中的电子在均匀电场作用下其波矢 (准动量) 匀速改变 ($\dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E}/\hbar$), 但速度和位置都是周期振荡, 此即 Bloch 振荡
- 直流电场导致交流电流
- Bloch 振荡是第一布里渊区的非平凡拓扑性的体现

周期性边界条件

- 原胞基矢: $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$

$$\text{原胞体积 } \Omega = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3;$$

- 倒格子基矢: $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3, \dots$

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

$$\text{第一布里渊区体积} = \text{倒格子原胞体积} = (\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{b}_3 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

$$\langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \delta_{n'n} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$$

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + L_1 \hat{e}_1) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + L_2 \hat{e}_2) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + L_3 \hat{e}_3)$$

$$L_1 = N_1 |\mathbf{a}_1|, \dots$$

$$N = N_1 N_2 N_3 \text{ 为总原胞数; } V = N\Omega \text{ 为晶体总体积}$$

$$1 = e^{i\mathbf{k} \cdot N_1 \mathbf{a}_1} = e^{il_1 2\pi} \dots$$

$$\mathbf{k} = \frac{l_1 \mathbf{b}_1}{N_1} + \frac{l_2 \mathbf{b}_2}{N_2} + \frac{l_3 \mathbf{b}_3}{N_3} \quad l_1, l_2, l_3 = 0, \pm 1, \dots$$

周期性边界条件

☞ $\mathbf{k}$ 在倒空间里均匀地分布

☞ $\mathbf{k} \Leftrightarrow \mathbf{k} + \mathbf{G}_m \Rightarrow$ 可以把允许的 $\mathbf{k}$ 限制在第一布里渊区

☞ 每个 $\mathbf{k}$ 占据的体积 = $\left(\frac{\mathbf{b}_1}{N_1} \times \frac{\mathbf{b}_2}{N_2}\right) \cdot \frac{\mathbf{b}_3}{N_3} = \frac{(2\pi)^3}{N\Omega} = \frac{(2\pi)^3}{V}$

每个允许的 $\mathbf{k}$ 占据非常小的体积

☞ 求和化积分

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \int \int \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3/V} f(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \int \int d^3 \mathbf{k} f(\mathbf{k})$$

$$\Rightarrow \int d\mathbf{k} f(\mathbf{k})$$

大多数文献把系数省略，简写为左式

正交性归一性

$$\begin{aligned}\delta_{n'n}\delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} &= \langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\&= \sum_i \int_{\Omega} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i) \\&= \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} \int_{\Omega} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\&= N \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \int_{\Omega} u_{n'\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}\end{aligned}$$

不同 $\mathbf{k}$ 的正交性由平移不变性决定

● 平移部分正交性的证明: $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \frac{l_1 \mathbf{b}_1}{N_1} + \dots$

$$\begin{aligned}\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} &= \sum_{i_1=0}^{N_1-1} \sum_{i_2, i_3} \exp\left[i2\pi\left(\frac{i_1 l_1}{N_1} + \frac{i_2 l_2}{N_2} + \frac{i_3 l_3}{N_3}\right)\right] \\&= \frac{1 - e^{i2\pi N_1 l_2 / N_1}}{1 - e^{i2\pi l_1 / N_1}} \frac{1 - e^{i2\pi N_2 l_2 / N_2}}{1 - e^{i2\pi l_2 / N_2}} \frac{1 - e^{i2\pi N_3 l_3 / N_3}}{1 - e^{i2\pi l_3 / N_3}} \\&= N_1 \delta_{l_1, 0} N_2 \delta_{l_2, 0} N_3 \delta_{l_3, 0} = N \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}\end{aligned}$$

离散的 Kronecker 符号

离散变量的 Kronecker 符号和连续变量的 δ 函数

求和化积分时需要把离散变量的 Kronecker 符号变为连续变量的 δ 函数

$$\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} 1 & \mathbf{k} = \mathbf{k}' \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad \sum_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = 1 \quad \boxed{\text{[无量纲]}}$$

$$\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \begin{cases} \infty & \mathbf{k} = \mathbf{k}' \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad \int \int \int d\mathbf{k}' \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 1$$

$$\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \Rightarrow \frac{1}{C} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad \boxed{[\delta(x)] = [\frac{1}{x}] \quad \delta(\mathbf{k}) = [\frac{1}{k^3}] = [V]}$$

$$1 = \sum_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \int \int d^3\mathbf{k}' \frac{1}{C} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{C} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{C} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

$$\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \Rightarrow \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad \boxed{\text{选择系数使得二者等价}}$$

$$1 = \sum_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \int d\mathbf{k}' \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad \boxed{\text{大多数文献简写}}$$

δ 函数的性质

$$\int d\mathbf{k}' f(\mathbf{k}') \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = f(\mathbf{k})$$

$$\int d\mathbf{k}' [f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}) = 0$$

$$\Rightarrow [f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 0$$

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{k}' f(\mathbf{k}') \nabla_{\mathbf{k}'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') &= \int d\mathbf{k}' \{ \nabla_{\mathbf{k}'} [f(\mathbf{k}') \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] \\ &\quad - [\nabla_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}')] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \} \end{aligned}$$

$$= - \int d\mathbf{k}' \nabla_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}') \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -\nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})$$

$$\Rightarrow f(\mathbf{k}') \nabla_{\mathbf{k}'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -[\nabla_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}')] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -[\nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow [f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})] \nabla_{\mathbf{k}'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') &= -\{ \nabla_{\mathbf{k}'} [f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})] \} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &= -[\nabla_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}')] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -[\nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned}$$

Bloch 电子性质

Refs: “Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals: Gradient corrections and Berry-phase effects”, G. Sundaram and Q. Niu, PRB **59**, 14915 (1999); “Quantum Theory of the Solid State” (2nd ed), J. Callaway, §6.1

$$\begin{aligned}\langle \psi_{n'k'} | \mathbf{p} | \psi_{nk} \rangle &= \int \psi_{n'k'}^*(\mathbf{r}) [(-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}) \psi_{nk}(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \\&= \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n'k'}^*(\mathbf{r}) [-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \\&= \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n'k'}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} [(\hbar \mathbf{k} - i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}) u_{nk}(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \\&= \hbar \mathbf{k} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n'k'}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \Rightarrow \langle \psi_{n'k'} | \psi_{nk} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\&+ \sum_l e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_l} \int_{\Omega} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} u_{n'k'} [-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} u_{nk}] d\mathbf{r} \\&= \hbar \mathbf{k} \delta_{nn'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{P}_{n'n}(\mathbf{k})\end{aligned}$$

Bloch 电子性质

$$\langle \psi_{n'k'} | \mathbf{p} | \psi_{nk} \rangle = \hbar \mathbf{k} \delta_{nn'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{P}_{n'n}(\mathbf{k})$$

$$\mathbf{P}_{n'n}(\mathbf{k}) = N \int_{\Omega} u_{n'k}^* (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} u_{nk}) d\mathbf{r}$$

- 在真空中, $u_{nk} = 1$, $\mathbf{P}_{n'n}(\mathbf{k}) = 0$,
 $\langle \psi_{n'k'} | \mathbf{p} | \psi_{nk} \rangle = \hbar \mathbf{k} \delta_{nn'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \Rightarrow |\psi_{nk}\rangle$ 是 $\mathbf{p}$ 的本征函数,
动量本征值为 $\hbar \mathbf{k}$
- 晶体中的 Bloch 波函数不是动量的本征函数, $\hbar \mathbf{k}$ 表征晶格平移算符的本征值, 不是动量本征值 准动量
- 动量 = 准动量 + 高频修正

Bloch 电子性质

$$\begin{aligned}\langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle &= \int \psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\&= \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \left(-i \nabla_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\&= \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \left\{ -i \nabla_{\mathbf{k}} \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \left[i \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] \right\} d\mathbf{r} \\&= -i \nabla_{\mathbf{k}} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\&\quad + \int e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \left[i \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r} \\&= \delta_{nn'} [-i \nabla_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] + \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \int_{\Omega} u_{n'\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) [i \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \\&= \delta_{nn'} [-i \nabla_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}_n(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + (1 - \delta_{nn'}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathcal{X}_{n'n}(\mathbf{k}) \\&= \delta_{nn'} [-i \mathcal{D}_n^*(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] + (1 - \delta_{nn'}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathcal{X}_{n'n}(\mathbf{k}) \\ \mathcal{D}_n(\mathbf{k}) &= \nabla_{\mathbf{k}} - i \mathcal{A}_n(\mathbf{k}) \quad \mathcal{X}_{n'n}(\mathbf{k}) = N \int_{\Omega} u_{n'\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) [i \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})] d\mathbf{r}\end{aligned}$$

$P_{n'n}$ 和 $\mathcal{X}_{n'n}$ 的关系

$$\begin{aligned} [\mathbf{p}, \mathbf{r}] &= -i\hbar \quad \Rightarrow \quad -i\hbar \frac{\mathbf{p}}{m} = [\mathcal{H}_0, \mathbf{r}] = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \mathbf{r} \right] \\ -i\frac{\hbar}{m} \langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | \mathbf{p} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle &= \langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | [\mathcal{H}_0, \mathbf{r}] | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | \mathcal{H}_0 \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathcal{H}_0 | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= [\varepsilon_{n'}(\mathbf{k}') - \varepsilon_n(\mathbf{k})] \langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle \\ \frac{-i\hbar}{m} [\hbar \mathbf{k} \delta_{nn'} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \mathbf{P}_{n'n}(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})] \\ &= [\varepsilon_{n'}(\mathbf{k}') - \varepsilon_n(\mathbf{k})] \{ \delta_{nn'} [-i\mathbf{\nabla}_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}_n(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\ &\quad + (1 - \delta_{nn'}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \mathcal{X}_{n'n}(\mathbf{k}) \} \\ &= \delta_{n'n} \left(\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) (i\mathbf{\nabla}_{\mathbf{k}}) [\varepsilon_n(\mathbf{k}') - \varepsilon_n(\mathbf{k})] \Rightarrow -i\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hbar \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{A}_n(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) [\varepsilon_n(\mathbf{k}') - \varepsilon_n(\mathbf{k})] = 0 \right) \\ &\quad + (1 - \delta_{nn'}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) [\varepsilon_{n'}(\mathbf{k}) - \varepsilon_n(\mathbf{k})] \mathcal{X}_{n'n}(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

$P_{n'n}$ 和 $\mathcal{X}_{n'n}$ 的关系

$$\begin{aligned} & \frac{-i\hbar}{m} [\hbar \mathbf{k} \delta_{nn'} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \mathbf{P}_{n'n}(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})] \\ &= \delta_{n'n} (-i\hbar) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\ & \quad + (1 - \delta_{nn'}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) [\varepsilon_{n'}(\mathbf{k}) - \varepsilon_n(\mathbf{k})] \mathcal{X}_{n'n}(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} + \frac{\mathbf{P}_{nn}(\mathbf{k})}{m} \Rightarrow \mathbf{P}_{nn}(\mathbf{k}) = m \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) - \hbar \mathbf{k} \quad \boxed{n' = n}$$

$n \neq n'$, 非简并: $\varepsilon_{n'}(\mathbf{k}) \neq \varepsilon_n(\mathbf{k})$, 且带隙较大

$$\mathcal{X}_{n'n}(\mathbf{k}) = \frac{-i\hbar \mathbf{P}_{n'n}(\mathbf{k})}{m [\varepsilon_{n'}(\mathbf{k}) - \varepsilon_n(\mathbf{k})]} \simeq 0$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle &= \delta_{n'n} [-i \nabla_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}_n(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + (1 - \delta_{n'n}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathcal{X}_{n'n} \\ &\simeq \delta_{n'n} [-i \nabla_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}_n(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \delta_{n'n} [-i \mathcal{D}_n^*(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \end{aligned}$$

Berry connection/Berry 联接

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{X}_{nn}(\mathbf{k}) = N \int_{\Omega} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})(i\nabla_{\mathbf{k}})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_n^*(\mathbf{k}) &= N \int_{\Omega} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})[-i\nabla_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})]d\mathbf{r} \\&= N \int_{\Omega} \{(-i)\nabla_{\mathbf{k}}[u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})] + iu_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})[\nabla_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})]\}d\mathbf{r} \\&= -i\nabla_{\mathbf{k}}1 + N \int_{\Omega} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})[i\nabla_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})]d\mathbf{r} \\&= N \int_{\Omega} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})[i\nabla_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})]d\mathbf{r} = \mathcal{A}_n(\mathbf{k})\end{aligned}$$

🔗 $\mathcal{A}_n(\mathbf{k})$: Berry connection, 是实数

🔗 和 Bloch bundle 的拓扑性有关

Bloch 波包的运动：准经典近似 波包中心

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n\mathbf{k}} g_{n\mathbf{k}}(t) |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \quad 1 = \langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{n\mathbf{k}} |g_{n\mathbf{k}}|^2 \quad \hat{\mathbf{k}}|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \mathbf{k}|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$$

$$\mathbf{k}_c(t) = \langle\Psi(t)|\hat{\mathbf{k}}|\Psi(t)\rangle = \sum_{n'\mathbf{k}'n\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}'}^*(t) g_{\mathbf{k}}(t) \langle\psi_{n'\mathbf{k}'}|\hat{\mathbf{k}}|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \boxed{\mathbf{k} \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}}$$

$$= \sum_{n\mathbf{k}} |g_{n\mathbf{k}}(t)|^2 \mathbf{k} \quad \boxed{g_{n\mathbf{k}} \text{ 在 } \mathbf{k}_c \text{ 附近非零, 远离 } \mathbf{k}_c \text{ 为零}}$$

☞ 在没有能带简并时，电子只占据一个能带，只要考虑一个 n 指标，可以把 n 忽略，简化记号。

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}(t) |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad 1 = \langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}} |g_{\mathbf{k}}|^2 \quad \hat{\mathbf{k}}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \mathbf{k}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$$

$$\mathbf{k}_c(t) = \langle\Psi(t)|\hat{\mathbf{k}}|\Psi(t)\rangle = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}'}^*(t) g_{\mathbf{k}}(t) \langle\psi_{\mathbf{k}'}|\hat{\mathbf{k}}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mathbf{k}} |g_{\mathbf{k}}(t)|^2 \mathbf{k}$$

波包中心

$$\begin{aligned}r_c(t) &= \langle \Psi(t) | \mathbf{r} | \Psi(t) \rangle \\&= \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{k}} g_{\mathbf{k}'}^* g_{\mathbf{k}} \langle \psi_{\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle \left(\simeq [-i \nabla_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \right) \\&= \int d\mathbf{k}' d\mathbf{k} g_{\mathbf{k}'}^* g_{\mathbf{k}} [-i \nabla_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}(\mathbf{k})] \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\&= \int d\mathbf{k}' d\mathbf{k} \{ [i \nabla_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}'}^*] g_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}(\mathbf{k}) g_{\mathbf{k}'}^* g_{\mathbf{k}} \} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\&= \int d\mathbf{k} \{ g_{\mathbf{k}}^* [i \nabla_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}] + \mathcal{A}(\mathbf{k}) g_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}} \} \\&= \int d\mathbf{k} g_{\mathbf{k}}^* [i \nabla_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}(\mathbf{k})] g_{\mathbf{k}} = \int d\mathbf{k} g_{\mathbf{k}}^* i \mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \\&\Rightarrow \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^* i \mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \qquad \mathcal{D}_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} - i \mathcal{A}(\mathbf{k})\end{aligned}$$

外电场下波包中心随时间演化

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}' = \mathcal{H}_0 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} = \mathcal{H}_0 - \mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$$

当带隙比较大时, $\langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | \mathcal{H}' | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = -\mathbf{F} \cdot \langle \psi_{n'\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle \propto \delta_{n'n}$, 外场基本不会导致电子带间跃 $\Rightarrow eEa \ll E_g$ 时, 只考虑带内运动。前面说的只考虑一个带的近似在有外场的时候仍然可以成立, 可以把能带指标 n 忽略不计。

$$i\hbar \partial_t |\Psi\rangle = (\mathcal{H}_0 - \mathbf{F} \cdot \mathbf{r}) |\Psi\rangle$$

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_{\mathbf{k}'} \partial_t g_{\mathbf{k}'} |\psi_{\mathbf{k}'}\rangle &= \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} (\mathcal{H}_0 - \mathbf{F} \cdot \mathbf{r}) |\psi_{\mathbf{k}'}\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} [\varepsilon(\mathbf{k}') - \mathbf{F} \cdot \mathbf{r}] |\psi_{\mathbf{k}'}\rangle \quad \langle \psi_{\mathbf{k}} | \cdots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t g_{\mathbf{k}} &= \varepsilon(\mathbf{k}) g_{\mathbf{k}} - \mathbf{F} \cdot \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} [-i\nabla_{\mathbf{k}'} + \mathcal{A}(\mathbf{k}')] \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\ &= \varepsilon(\mathbf{k}) g_{\mathbf{k}} - \mathbf{F} \cdot [i\nabla_{\mathbf{k}} + \mathcal{A}(\mathbf{k})] g_{\mathbf{k}} = [\varepsilon(\mathbf{k}) - i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}] g_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

外电场下波包中心随时间演化

$$i\hbar\partial_t g_{\mathbf{k}} = [\varepsilon(\mathbf{k}) - i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}]g_{\mathbf{k}}$$

$$-i\hbar\partial_t g_{\mathbf{k}}^* = \varepsilon(\mathbf{k})g_{\mathbf{k}}^* + i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}}^*$$

$$i\hbar\partial_t |g_{\mathbf{k}}|^2 = g_{\mathbf{k}}^* (i\hbar\partial_t g_{\mathbf{k}}) + (i\hbar\partial_t g_{\mathbf{k}}^*) g_{\mathbf{k}}$$

$$= g_{\mathbf{k}}^* [\varepsilon(\mathbf{k}) - i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}]g_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}} [\varepsilon(\mathbf{k}) + i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}^*]g_{\mathbf{k}}^*$$

$$= -i\mathbf{F} \cdot g_{\mathbf{k}}^* (\mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}) - i\mathbf{F} \cdot (\mathcal{D}_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}}^*) g_{\mathbf{k}}$$

$$i\hbar \frac{d\mathbf{k}_c}{dt} = \int d\mathbf{k} \ i\hbar\partial_t |g_{\mathbf{k}}|^2 \mathbf{k}$$

$$= -i\mathbf{F} \cdot \int d\mathbf{k} \ [k g_{\mathbf{k}}^* (\mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}) + k (\mathcal{D}_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}}^*) g_{\mathbf{k}}]$$

$$= -i\mathbf{F} \cdot \int d\mathbf{k} \ \{k g_{\mathbf{k}}^* (\nabla_{\mathbf{k}} - i\mathcal{A}_{\mathbf{k}})g_{\mathbf{k}} + k [(\nabla_{\mathbf{k}} + i\mathcal{A}_{\mathbf{k}})g_{\mathbf{k}}^*]g_{\mathbf{k}}\}$$

$$= -i\mathbf{F} \cdot \int d\mathbf{k} \ \{k g_{\mathbf{k}}^* \nabla_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} + k [\nabla_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^*]g_{\mathbf{k}}\}$$

$$= -i\mathbf{F} \cdot \int d\mathbf{k} \ \{k g_{\mathbf{k}}^* \nabla_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} + \nabla_{\mathbf{k}} [k g_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}}] - g_{\mathbf{k}}^* \nabla_{\mathbf{k}} [k g_{\mathbf{k}}]\}$$

外电场下波包中心随时间演化

$$\hbar \dot{\mathbf{k}}_c = -\mathbf{F} \cdot \int d\mathbf{k} \{ \mathbf{k} g_{\mathbf{k}}^* \nabla_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} + \nabla_{\mathbf{k}} [\mathbf{k} g_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}}] - g_{\mathbf{k}}^* \nabla_{\mathbf{k}} [\mathbf{k} g_{\mathbf{k}}] \}$$

☞ 波包局限在 $\mathbf{k}_c$ 附近，远离 $\mathbf{k}_c$ 时 $g_{\mathbf{k}} = 0$ ， $\Rightarrow$ 第二项为零。

$$\begin{aligned} \hbar \dot{\mathbf{k}}_c &= -\mathbf{F} \cdot \int d\mathbf{k} \{ \mathbf{k} g_{\mathbf{k}}^* \nabla_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^* [\mathbf{k} \nabla_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \mathbf{k} = \overleftrightarrow{I}] \} \\ &= \mathbf{F} \cdot I \int d\mathbf{k} |g_{\mathbf{k}}|^2 = \mathbf{F} \end{aligned}$$

☞ 这个结果我们已经在固体物理中得到

外电场下波包中心随时间演化

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d\mathbf{r}_c}{dt} &= i\hbar \frac{d}{dt} \int d\mathbf{k} g_{\mathbf{k}}^*(t) i\mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}(t) \\&= \int d\mathbf{k} \{ (i\hbar \partial_t g_{\mathbf{k}}^*) (i\mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}) + g_{\mathbf{k}}^* [i\mathcal{D}_{\mathbf{k}} (i\hbar \partial_t g_{\mathbf{k}})] \} \\&= \int d\mathbf{k} \{ [-\varepsilon_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^* - i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}}^*] (i\mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}) \\&\quad + g_{\mathbf{k}}^* [i\mathcal{D}_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} - i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}})] \} \\&= \int d\mathbf{k} \{ [-g_{\mathbf{k}}^* \varepsilon_{\mathbf{k}} i\mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^* i\mathcal{D}_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}})] \textcircled{1} \\&\quad -i(\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}}^*) (i\mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}) \textcircled{2} -ig_{\mathbf{k}}^* [\mathcal{D}_{\mathbf{k}} (\mathbf{F} \cdot i\mathcal{D}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}})] \textcircled{3} \} \end{aligned}$$

$$\textcircled{1} = g_{\mathbf{k}}^* [i\mathcal{D}_{\mathbf{k}}, \varepsilon_{\mathbf{k}}] g_{\mathbf{k}}$$

外电场下波包中心随时间演化

$$\begin{aligned}\textcircled{2} &= \int d\mathbf{k} [-i\mathbf{F} \cdot (\nabla_{\mathbf{k}} + i\mathcal{A}_{\mathbf{k}})g_{\mathbf{k}}^*](i\mathcal{D}_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}}) \\ &= \int d\mathbf{k} \{-i\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}[g_{\mathbf{k}}^*i\mathcal{D}_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}}]\} \boxed{=0} \\ &\quad + \int d\mathbf{k} g_{\mathbf{k}}^*[i\mathbf{F} \cdot (\nabla_{\mathbf{k}} - i\mathcal{A}_{\mathbf{k}})(i\mathcal{D}_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}})] \\ &= i \int d\mathbf{k} g_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}})i\mathcal{D}_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\textcircled{2} + \textcircled{3} &= i \int d\mathbf{k} \{g_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}})i\mathcal{D}_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^*\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(\mathbf{F} \cdot i\mathcal{D}_{\mathbf{k}})g_{\mathbf{k}}\} \\ &= i \int d\mathbf{k} g_{\mathbf{k}}^*[i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}, \mathcal{D}_{\mathbf{k}}]g_{\mathbf{k}}\end{aligned}$$

在外电场下 Bloch 波包的运动

$$\hbar \dot{\mathbf{k}}_c(t) = \mathbf{F}$$

$$\hbar \dot{\mathbf{r}}_c = \int d\mathbf{k} \{g_{\mathbf{k}}^*[\mathcal{D}_{\mathbf{k}}, \varepsilon_{\mathbf{k}}]g_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^*[i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}, \mathcal{D}_{\mathbf{k}}]g_{\mathbf{k}}\}$$

速度和反常速度

$$\hbar \dot{r}_c = \int dk \{ g_k^* [\mathcal{D}_k, \varepsilon_k] g_k + g_k^* [i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_k, \mathcal{D}_k] g_k \}$$

$$[\mathcal{D}_k, \varepsilon_k] = [\nabla_k - i\mathcal{A}_k, \varepsilon_k] = \nabla_k \varepsilon_k = \hbar v_k$$

速度

$$[i\mathbf{F} \cdot \mathcal{D}_k, \mathcal{D}_k] = i \sum_{\mu\nu} F^\nu [D_k^\nu, D_k^\mu] \hat{e}_\mu$$

$$= i \sum_{\mu\nu} F^\nu [\partial_k^\nu - i\mathcal{A}_k^\nu, \partial_k^\mu - i\mathcal{A}_k^\mu] \hat{e}_\mu$$

$$= \sum_{\mu\nu} F^\nu [\partial_k^\nu \mathcal{A}_k^\mu - \partial_k^\mu \mathcal{A}_k^\nu] \hat{e}_\mu = \sum_{\mu\nu} F^\nu \Omega_k^{\nu\mu} \hat{e}_\mu$$

反常速度

$$\Omega_k^{\nu\mu} = \partial_k^\nu \mathcal{A}_k^\mu - \partial_k^\mu \mathcal{A}_k^\nu = -\Omega_k^{\mu\nu}$$

Berry 曲率张量，一般维度

$$\dot{r}_c = \int dk \left[v_k + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \overleftrightarrow{\Omega}_k \right] |g_k|^2 = v(k_c) + \dot{k}_c \cdot \overleftrightarrow{\Omega}(k_c)$$

$$= v(k_c) - \dot{k}_c \times \Omega(k_c)$$

三维情况

🔗 三维比较特殊，可以进一步用 Berry 曲率向量表示，

$$\Omega_k = \nabla_k \times \mathcal{A}_k$$

有磁场时的情况

$$\mathbf{B} = \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$$

$$\Omega_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_{\mathbf{k}}$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}}_c = \mathbf{F} - e \dot{\mathbf{r}}_c \times \mathbf{B}$$

$$\dot{\mathbf{r}}_c = \mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}}_c \times \Omega_{\mathbf{k}}$$

- ☞ Berry connection: k -空间的“矢势”
- ☞ Berry curvature: k -空间的“磁场”
- ☞ 在平直空间, Berry connection 和 curvature 为零
- ☞ 不考虑几何性质时, 输运关系只和速度(能谱)有关, 和 Bloch 电子波函数没有关系 $\Rightarrow$ 传统的输运

金属、绝缘体和半导体

电流密度

$$\mathbf{J} = -e \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i = -e \sum_{n\mathbf{k}} [\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) + \mathbf{F}/\hbar \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})] f_{n\mathbf{k}} \quad \boxed{f_{n\mathbf{k}} \text{ 分布函数}}$$

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(-\mathbf{k}) \quad \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = -\mathbf{v}_n(-\mathbf{k}) \quad \boxed{\text{时间反演对称}}$$

👉 没有外场 $\mathbf{F} = 0$ ，且达到平衡时

$$\begin{aligned} f_{n\mathbf{k}} &= \frac{1}{e^{[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu]/k_B T} + 1} = \frac{1}{e^{[\varepsilon_n(-\mathbf{k}) - \mu]/k_B T} + 1} = f_{n-\mathbf{k}} \\ \mathbf{J} &= -e \sum_{n\mathbf{k}} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) f_{n\mathbf{k}} = -e \sum_{n\mathbf{k}} \mathbf{v}_n(-\mathbf{k}) f_{n-\mathbf{k}} = -e \sum_{n\mathbf{k}} [-\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) f_{n\mathbf{k}}] \\ &= -\mathbf{J} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{J} = 0 \end{aligned}$$

👉 Bloch 超导第一定理：具有时间反演对称性的体系其平衡态电流为零。

金属、绝缘体和半导体

电流密度

$$\mathbf{J} = -e \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i = -e \sum_{n\mathbf{k}} [\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) + \mathbf{F}/\hbar \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})] f_{n\mathbf{k}}$$

$f_{n\mathbf{k}}$ 分布函数

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(-\mathbf{k}) \quad \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = -\mathbf{v}_n(-\mathbf{k})$$

时间反演对称

👉 “满带电子” 不导电 (不考虑 Berry curvature)

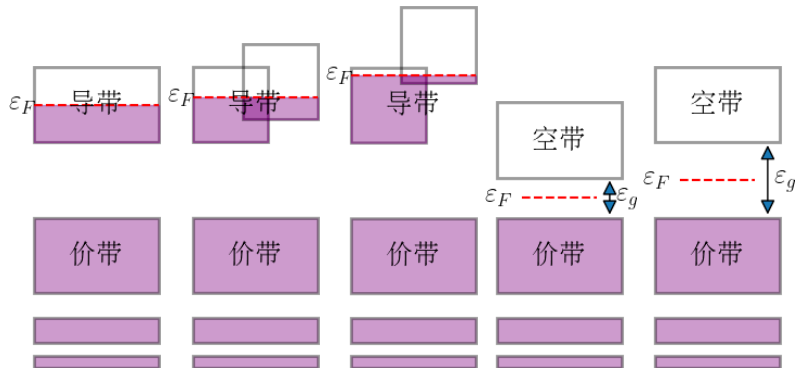
满带: $f_{n\mathbf{k}} \equiv 1$

$$\mathbf{J} = -e \sum_{n \in \text{occ}, \mathbf{k}} \mathbf{v}_{n\mathbf{k}} = -\frac{e}{2} \sum_{n \in \text{occ}, \mathbf{k}} [\mathbf{v}_{n\mathbf{k}} + \mathbf{v}_{n-\mathbf{k}}] = 0$$

👉 拓扑平凡的满带电子不导电

- 不考虑拓扑性时, 满带电子不导电
⇒ 金属、半金属、半导体和绝缘体

金属、绝缘体和半导体



导体

导体

半金属

半导体

绝缘体

$T \nearrow R(T) \nearrow$

$T \nearrow R(T) \searrow$

金属电导率是半金属的 10^{4-5} 倍

- 导带：能量最低的没有被完全填满的能带。
- 价带：能量最高的被全部填满的能带。

拓扑绝缘体

考虑拓扑性时，满带也可能承载电流

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= -e \sum_{n \in \text{occ}, \mathbf{k}} [\mathbf{v}_{n\mathbf{k}} + \mathbf{F}/\hbar \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})] \\ &= -e \sum_{n \in \text{occ}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \boxed{= 0: \text{时间反演对称}} - \frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \times \sum_{n \in \text{occ}} \sum_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) \\ &= -\frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \times \sum_{n \in \text{occ}} \int_{BZ} d\mathbf{k} \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

这种电流垂直于电场方向，类似于 Hall 效应。

上面的推导是没有表面的无穷大样品的结果，通过计算材料体内的性质得到的电流；在实际样品中，承载电流的是表面态。这两个电流是等价的。

体材料能带 / 波函数计算方法

- 全能谱计算
利用晶格周期性，在一个原胞内计算；可以得到整个 k 空间里的能谱和波函数。
 - 原胞法
 - ...
 - 赝势法
 - 密度范函理论 (DFT)
这是目前计算最准确但是耗时最多的计算方法
- Tight-binding 理论
 - 可以通过拟合在某些 k 点上 DFT 计算结果得到交叠积分
 - 利用这些交叠积分得到全能谱
- 在部分区间，例如导带底或者价带顶附近通常是某个高对称点 k_0 附近
 $k \cdot p$ 理论 (或者有效质量近似):
$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$$

量子结构中能带 / 波函数计算：有效质量近似

Ref: Dresselhaus, Chap. 5

$\mathcal{H}'$ 对周期场的偏离，
比较弱，不会引起不同能带的混合，可只考虑一个能带

$$\mathcal{H}_0|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k})|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$$

$$\langle\psi_{n'\mathbf{k}}|\mathcal{H}'|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \simeq \delta_{n'n}\mathcal{H}'(\mathbf{r}) \Leftarrow \Delta\mathcal{H}'(\mathbf{r}) \ll E_g$$

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$= e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}_0+\delta\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$$

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} g_{n\mathbf{k}}(t)\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \simeq \sum_{\mathbf{k}} g_{n\mathbf{k}}(t)e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = F_n(\mathbf{r}, t)\psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$$

$$F_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} g_{n\mathbf{k}}(t)e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \text{包络波函数，波函数的缓变部分}$$

$$i\hbar\partial_t\Psi_n(\mathbf{r}, t) = (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}')\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}')g_{n\mathbf{k}}\psi_{n\mathbf{k}}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} [\varepsilon_n(\mathbf{k}) + \mathcal{H}']g_{n\mathbf{k}}\psi_{n\mathbf{k}} = \sum_{\delta\mathbf{k}} [\varepsilon_n(\mathbf{k}_0 + \delta\mathbf{k}) + \mathcal{H}']g_{n\mathbf{k}}e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$$

$$= \{[\varepsilon_n(\mathbf{k}_0 - i\nabla\mathbf{r}) + \mathcal{H}'] \sum_{\delta\mathbf{k}} g_{n\mathbf{k}}e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\}\psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$$

量子结构中能带 / 波函数计算：有效质量近似

$$[i\hbar\partial_t F(\mathbf{r}, t)]\psi_{n\mathbf{k}_0} = \{[\varepsilon_n(\mathbf{k}_0 - i\nabla_{\mathbf{r}}) + \mathcal{H}']F(\mathbf{r}, t)\}\psi_{n\mathbf{k}_0}$$

$$i\hbar\partial_t F(\mathbf{r}, t) = [\varepsilon_n(\mathbf{k}_0 - i\nabla_{\mathbf{r}}) + \mathcal{H}']F(\mathbf{r}, t)$$

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}_0 - i\nabla_{\mathbf{r}}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + [\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_n(\mathbf{k}_0)] \cdot (-i\nabla_{\mathbf{r}})$$

$$+ \frac{1}{2}(-i\nabla_{\mathbf{r}}) \cdot [\nabla_{\mathbf{k}}\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_n(\mathbf{k}_0)] \cdot (-i\nabla_{\mathbf{r}}) + \dots$$

$$= [\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_0) \cdot (-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}) + (-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}) \frac{1}{2\overleftrightarrow{m}^*(\mathbf{k}_0)} (-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}) + \dots]$$

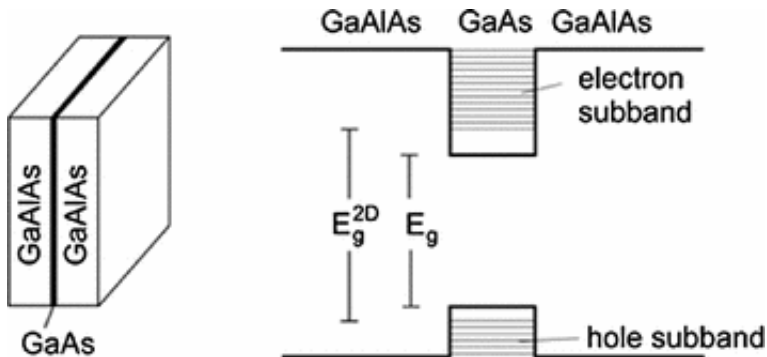
$$= \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \frac{1}{2\overleftrightarrow{m}^*(\mathbf{k}_0)} \mathbf{p} + \dots$$

各向同性带顶或者带底： $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}_0) = 0$,

$$i\partial_t F_n(\mathbf{r}, t) = \left[\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + \mathcal{H}' \right] F_n(\mathbf{r}, t)$$

☞ 以有效质量代替电子质量 + 空间势场 ☞ 包络波函数

量子结构例子：量子阱



导带电子

$$i\hbar\partial_t F(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_c(\mathbf{r})F(\mathbf{r}, t) + \mathbf{p} \frac{1}{2m^*(\mathbf{r})} \mathbf{p} F(\mathbf{r}, t)$$

$$\varepsilon_c(\mathbf{r}) = \begin{cases} \varepsilon_c & 0 < z < a \\ \varepsilon'_c & \text{otherwise} \end{cases} \quad m^*(\mathbf{r}) = \begin{cases} m^* & 0 < z < a \\ m'^* & \text{otherwise} \end{cases}$$

量子结构例子：量子阱

导带电子

$$i\hbar\partial_t F(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*(z)} + \frac{p_z^2}{2m^*(z)} + V(z) \right] F(\mathbf{r}, t)$$

$$V(z) = \begin{cases} 0 & 0 < z < a \\ V_0 = \varepsilon'_c - \varepsilon_c & z > a \text{ or } z < 0 \end{cases}$$

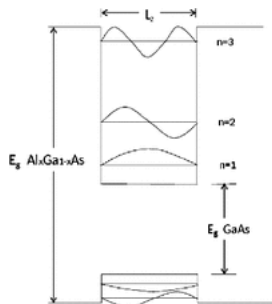
$$F(\mathbf{r}, t) = \psi_n(z)e^{i(k_x x + k_y y)}$$

$$\varepsilon_n(k_x, k_y)\psi_n = \frac{p_z^2}{2m^*(z)}\psi_n(z) + \left[V(z) + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*(z)} \right] \psi_n(z)$$

$$\psi_n(0^-) = \psi_n(0^+) \quad \psi_n(a^-) = \psi_n(a^+)$$

$$\frac{\partial_z \psi_n(0^-)}{m'^*} = \frac{\partial_z \psi_n(0^+)}{m^*} \quad \frac{\partial_z \psi_n(a^-)}{m^*} = \frac{\partial_z \psi_n(a^+)}{m'^*}$$

边界条件



- 量子阱中，平行于阱面（xy 方向）的电子运动基本不受影响，可以当成是质量为 m^* 的自由电子
- 垂直于阱面（z 方向）的运动收到约束，可以近似看成是处在一个势阱中运动的电子

量子结构例子：量子阱

无穷深势阱近似

$$V(z) = \begin{cases} 0 & 0 < z < a \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$F_{n,k_x,k_y}(x,y,z) = \psi_n(z)e^{i(k_x x + k_y y)}$$

$$\varepsilon_n(k_x, k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}$$

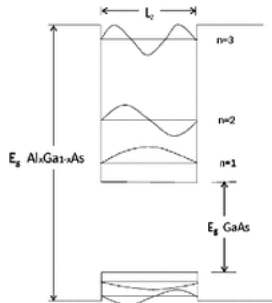
$$\varepsilon_n \psi_n(z) = -\frac{\hbar^2 \partial_z^2}{2m^*} \psi_n(z)$$

$$\psi_n(0) = \psi_n(a) = 0$$

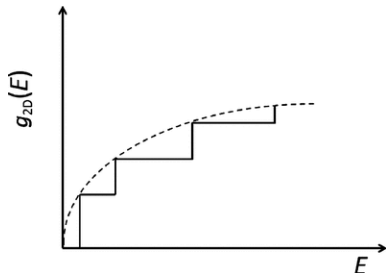
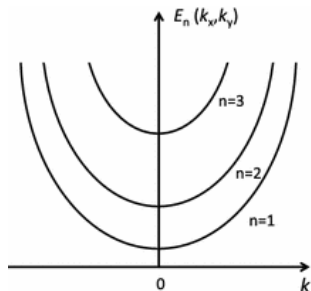
边界条件

$$\varepsilon_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi z}{a}$$



量子结构例子：无穷深量子阱



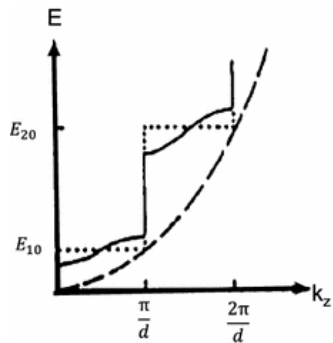
$$\varepsilon_n(k_x, k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} \quad \varepsilon_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

$$g_{2D}(E) = \sum_n \int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \delta[E - \varepsilon_n(k_x, k_y)] = \sum_n \Theta(E - \varepsilon_n) \frac{m^*}{\pi \hbar^2}$$

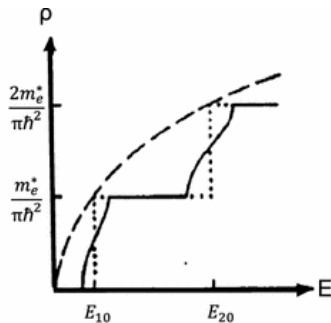
$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

🔗 本征态/能量分为两个部分， z 方向运动是离散/量子化的， xy 方向运动是（准）连续的。

量子结构例子：有限深量子阱



(a)



(b)

常见量子结构

- 量子阱
- 异质结
- 超晶格
- 量子线：准一维结构
- 量子点：零维

量子结构中的能带计算：紧束缚近似

Ref: Dresselhaus, Chap 3.2

☞ 以不同位置的各种原子轨道为基展开 Bloch 波函数

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + \sum_l U(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l) \quad \boxed{U \text{ 位于第 } \mathbf{R}_l \text{ 晶格里的原子势}}$$

$$\hat{h}_0(\mathbf{R}_l) = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l) \quad \hat{h}_0(\mathbf{R}_l)|\psi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l)\rangle = \varepsilon_i(\mathbf{R}_l)|\psi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l)\rangle$$

第 l 个原胞内的第 i 原子轨道，可代表复杂晶体里不同原子轨道。

$$\langle \psi_i(\mathbf{R}_l) | \psi_j(\mathbf{R}_{l'}) \rangle = \int \psi_i^*(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l) \psi_j(\mathbf{r}; \mathbf{R}_{l'}) d\mathbf{r} = \Phi_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_{l'})$$

$$= \int \psi_i^*[\mathbf{r} - (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})] \psi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \Phi_{ij}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}) = \Phi_{ij}(\mathbf{R}_{ll'}) \quad \boxed{\text{平移不变性}}$$

$$\langle \psi_i(\mathbf{R}_l) | U(\mathbf{r}; \mathbf{R}_m) | \psi_j(\mathbf{R}_{l'}) \rangle \simeq \delta_{l'm} J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_{l'})$$

$\mathbf{R}_l \neq \mathbf{R}_m$, 双中心近似

$$= J_{ij}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}) = J_{ij}(\mathbf{R}_{ll'}) \quad \boxed{\text{平移不变}}$$

$\Phi, J \Rightarrow$ 交叠积分；原子轨道局域，通常只考虑近邻。

量子结构中的能带计算：紧束缚近似

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{il} C_i(\mathbf{R}_l) \psi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l)$$

$$\langle \psi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l) | \mathcal{H} | \Psi \rangle = \varepsilon \langle \psi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l) | \Psi \rangle$$

$$\langle \psi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l) | \hat{h}_0(\mathbf{R}_l) + \sum_{l' \neq l} U(\mathbf{r}; \mathbf{R}_{l'}) | \sum_{jm} C_j(\mathbf{R}_m) | \psi_j(\mathbf{r}; \mathbf{R}_m) \rangle$$

$$= \varepsilon \sum_{jm} C_j(\mathbf{R}_m) \langle \psi_i(\mathbf{R}_l) | \psi_j(\mathbf{R}_m) \rangle$$

$$\sum_{jm} \varepsilon_i(\mathbf{R}_l) \Phi_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) C_j(\mathbf{R}_m) + J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) C_j(\mathbf{R}_m)$$

$$= \varepsilon \sum_{jm} \Phi_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) C_j(\mathbf{R}_m)$$

$$\sum_{jm} [\varepsilon - \varepsilon_i(\mathbf{R}_l)] \Phi_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) C_j(\mathbf{R}_m) = \sum_{jm} J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) C_j(\mathbf{R}_m)$$

$\Phi_{ij}(\mathbf{R}) \neq \delta_{ij} \delta_{\mathbf{R},0} \Rightarrow$
 $\{\psi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l)\}$ 是一组完备但不正交的基，计算时会带来额外的复杂性。

☞ N 个格点，每个格点 M 个可能态 $\Rightarrow NM \times NM$ 矩阵解。

体材料：平移不变性

$$\varepsilon_i(\mathbf{R}_l) = \varepsilon_i \quad \psi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l) = \psi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$$

$$\Phi_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) = \Phi_{ij}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \Phi_{ij}(\mathbf{k})$$

$$\Phi_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{R}} \Phi_{ij}(\delta \mathbf{R})$$

$$J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) = J_{ij}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} J_{ij}(\mathbf{k})$$

$$J_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{R}} J_{ij}(\delta \mathbf{R})$$

$$C_i(\mathbf{R}_l) \Rightarrow C_i^n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}$$

另一规范： $C_i(\mathbf{R}_l) = C_i^n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l + \mathbf{r}_i)}$

$$\sum_j [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_i] \Phi_{ij}(\mathbf{k}) C_j^n(\mathbf{k}) = \sum_j J_{ij}(\mathbf{k}) C_j^n(\mathbf{k})$$

👉 对每个 $\mathbf{k}$ ，方程为 $M \times M$ 的矩阵本征值问题

👉 不同的 $\mathbf{k}$ 独立，共有 N 个本征问题

平移不变性的另一规范

$$\varepsilon_i(\mathbf{R}_l) = \varepsilon_i \quad \psi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}_l) = \psi_i[\mathbf{r} - (\mathbf{R}_l + \mathbf{r}_i)] \quad C_i(\mathbf{R}_l) \Rightarrow C_i^n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l + \mathbf{r}_i)}$$

$$\Phi_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) = \Phi_{ij}[\mathbf{R}_l + \mathbf{r}_i - (\mathbf{R}_m + \mathbf{r}_j)] = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot [(\mathbf{R}_l + \mathbf{r}_i) - (\mathbf{R}_m + \mathbf{r}_j)]} \Phi_{ij}(\mathbf{k})$$

$$\Phi_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\delta \mathbf{R} + \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Phi_{ij}(\delta \mathbf{R} + \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$$J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) = J_{ij}[\mathbf{R}_l + \mathbf{r}_i - (\mathbf{R}_m + \mathbf{r}_j)] = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot [(\mathbf{R}_l + \mathbf{r}_i) - (\mathbf{R}_m + \mathbf{r}_j)]} J_{ij}(\mathbf{k})$$

$$J_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\delta \mathbf{R} + \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} J_{ij}(\delta \mathbf{R} + \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$$\sum_j [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_i] \Phi_{ij}(\mathbf{k}) C_j^n(\mathbf{k}) = \sum_j J_{ij}(\mathbf{k}) C_j^n(\mathbf{k})$$

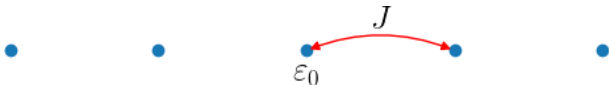
- ☞ 对于一个原胞内有多个原子的时候，这个规范形式推导稍微复杂一点，但因计算 $J_{ij}(\mathbf{k})$ 更加方便，实际计算中更常用。
- ☞ 不同规范波函数相差相位，Hamiltonian 形式改变，但是本征能量相同。

紧束缚近似的计算

- ❏ 早期很多人去真正计算原子轨道和交叠积分，但效果不佳
- ❏ 目前一般是把原子轨道能级和交叠积分当成拟合参数，利用 DFT 得到一些 k 点上的能量，然后拟合出最佳的原子能级和交叠积分，这样可以得到比较精确的结果，并且大大减小计算量
- ❏ 利用对称性可以减少独立的拟合参数数目，可以减少计算量
- ❏ 在处理量子结构的时候，可以利用体材料计算得到的原子能级和交叠积分等参数，带入原来的 $NM \times NM$ 阶本征方程来求解。
- ❏ 在处理量子结构的时候，如果在某些方向上有平移对称性的话，可以进一步利用这些对称性来简化计算。

紧束缚近似例子：一维简单晶格

一维格子，每个格点上只有一个原子轨道： $\varepsilon_i \equiv \varepsilon_0$ ， $\mathbf{R}_l = la$
 $\Rightarrow$ 平移不变性 $\Rightarrow 1 \times 1$ 本征问题



只考虑最近邻的交叠积分：

$$\Phi(0) = 1 \quad \Phi(\pm a) = \Phi_0 \quad J(\pm a) = J$$

$$\Phi(k) = \sum_{\Delta R} \Phi(\Delta R) e^{ik\Delta R} = 1 + 2\Phi_0 \cos ka$$

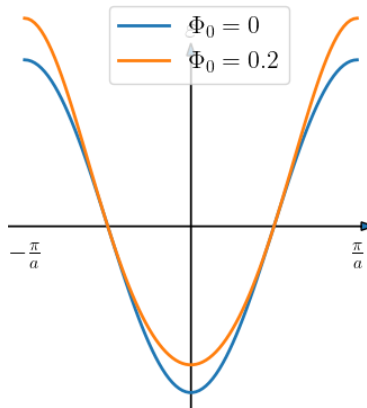
$$J(k) = \sum_{\Delta R} J(\Delta R) e^{ik\Delta R} = 2J \cos ka$$

$$[\varepsilon(k) - \varepsilon_0] \Phi(k) = 2J \cos ka$$

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_0 + \frac{2J \cos ka}{1 + 2\Phi_0 \cos ka}$$

$$= \varepsilon_0 + 2J \cos ka$$

$$\Phi_0 = 0$$



$\Phi_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) = \delta_{ij}\delta_{lm}$ 时的简化

$$\Phi_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) = \langle \psi_i(\mathbf{R}_l) | \psi_j(\mathbf{R}_m) \rangle \simeq \delta_{ij}\delta_{lm}$$

这种系统的实空间 Hamiltonian 可以写成

$$\mathcal{H} = \sum_{il} \varepsilon_i(\mathbf{R}_l) |\psi_i(\mathbf{R}_l)\rangle \langle \psi_i(\mathbf{R}_l)| + \sum_{ijlm} J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) |\psi_i(\mathbf{R}_l)\rangle \langle \psi_j(\mathbf{R}_m)|$$

$$= \sum_{il} \varepsilon_i(\mathbf{R}_l) |l, i\rangle \langle l, i| + \sum_{ijlm} J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) |l, i\rangle \langle m, j|$$

简化符号

$$\Rightarrow \sum_{il} \varepsilon_i(\mathbf{R}_l) c_i^\dagger(\mathbf{R}_l) c_i(\mathbf{R}_l) + \sum_{ijlm} J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) c_i^\dagger(\mathbf{R}_l) c_j(\mathbf{R}_m)$$

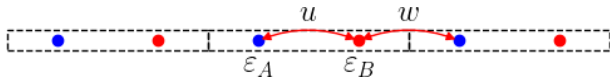
二次量子化

- $\varepsilon_i(\mathbf{R}_l)$: onsite energy, 格点能量
- $J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m)$: 跃迁矩阵元, 从 $\mathbf{R}_m$ 原胞第 j 个原子轨道跃迁到 $\mathbf{R}_l$ 原胞第 i 个原子轨道的强度
- 一维简单格子实空间 Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \sum_l \varepsilon |l\rangle \langle l| + \sum_{lm} J_{lm} |l\rangle \langle m|$$

紧束缚近似例子：SSH 模型

- 每个原胞两个原子：A, B；能级分别为 ε_A , ε_B ；原子们等间距排列；只考虑最近邻跃迁
- $\Phi_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) = \delta_{ij}\delta_{lm}$, $J_{AB}(0,0) = J_{BA}(0,0) = u > 0$, $J_{BA}(0,2a) = J_{AB}(2a,0) = w > 0$, 其余为零



实空间 Hamiltonian

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = & \sum_l [\varepsilon_A |l, A\rangle \langle l, A| + \varepsilon_B |l, B\rangle \langle l, B| \\ & + u \sum_l [|l, A\rangle \langle l, B| + |l, B\rangle \langle l, A|] + w \sum_l [|l, B\rangle \langle l+1, A| + |l+1, A\rangle \langle l, B|\end{aligned}$$

$$J_{AB}(k) = \sum_{\Delta R} J_{AB}(\Delta R) e^{-ik\Delta R} = u + w e^{-2ika}$$

$$J_{BA}(k) = \sum_{\Delta R} J_{BA}(\Delta R) e^{-ik\Delta R} = u + w e^{2ika}$$

紧束缚近似例子: SSH 模型

变成 k 空间

$$\varepsilon_n(k) \begin{pmatrix} C_A(k) \\ C_B(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & J_{AB}(k) \\ J_{BA}(k) & \varepsilon_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A(k) \\ C_B(k) \end{pmatrix} = \mathcal{H}(k) \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(k) &= \begin{pmatrix} \varepsilon_A & u + we^{-2ika} \\ u + we^{2ika} & \varepsilon_B \end{pmatrix} \\ &= \frac{\varepsilon_A + \varepsilon_B}{2} \boxed{= \bar{\varepsilon}} + \frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{2} \boxed{= \Delta} \sigma_z + (u + w \cos 2ka) \sigma_x + w \sin 2ka \sigma_y \\ &\bar{\varepsilon} + \Delta \sigma_z + (u + w \cos 2ka) \sigma_x + w \sin 2ka \sigma_y \end{aligned}$$

$$\varepsilon_{\pm}(k) = \bar{\varepsilon} \pm \sqrt{(u + w \cos 2ka)^2 + w^2 \sin^2 2ka + \Delta^2}$$

👉 分成 $\pm$ 两个能带

👉 带底 / 顶在第一布里渊区的边界, $k = \pm\pi/2a$ 。

$$\mathcal{E}_g = \varepsilon_+(\pi/2a) - \varepsilon_-(\pi/a) = 2\sqrt{\Delta^2 + (u - w)^2}$$

👉 在 $\Delta = 0$, $u = w$ 时带隙为零。 $\Rightarrow$ 布里渊区折叠

👉 $u > w$ 和 $u < w$ 时都是绝缘体 ($\mathcal{E}_g > 0$), 但是 Bloch bundle 拓扑性不同: $\int_{BZ} \mathcal{A}_{\pm}(k) dk$

紧束缚 + 有效质量近似

在没有平移不变性的系统中，紧束缚模型得到的结果一般是数值解。如果我们对某个能量附近的态感兴趣的话，我们可以在紧束缚模型基础上利用有效质量近似，得到相应的解析解，典型的例子是计算边界态。

SSH 模型在带边的有效 Hamiltonian:

$$\begin{aligned}k &\Rightarrow \pi/(2a) + \delta k & 2ka &\Rightarrow \pi + 2\delta ka \\ \mathcal{H}(k) &= \begin{pmatrix} \varepsilon_A & u + we^{-i\pi-2ia\delta k} \\ u + we^{i\pi+2ia\delta k} & \varepsilon_B \end{pmatrix} \\ &\simeq \begin{pmatrix} \varepsilon_A & u - w(1 - 2ia\delta k) \\ u - w(1 + 2ia\delta k) & \varepsilon_B \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \mathcal{H}(x) = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & u - w + 2wa\partial_x \\ u - w - 2wa\partial_x & \varepsilon_B \end{pmatrix} \\ &= \bar{\varepsilon} + \Delta\sigma_z + (u - w)\sigma_x - 2iwa\partial_x\sigma_y \\ &= \bar{\varepsilon} + \Delta\sigma_z + (u - w)\sigma_x + \frac{2wa}{\hbar}p_x\sigma_y\end{aligned}$$

紧束缚近似例子：量子阱

- 把原子 / 离子分层，层间跃迁（ z 方向）不具备平移不变，层内跃迁（ $x - y$ 方向）具有平移不变。
- $x - y$ 方向的结果和普通二维晶体结果相同，具有 Bloch 波函数的形式
- z 方向形成量子化能级， $\psi \propto \psi_{n_z}(z)e^{ik_x x + ik_y y}$



量子阱 z 方向原子排列，以及跃迁强度

有磁场时的紧束缚近似：Peierls substitution

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad \mathcal{H} = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} + U(\mathbf{r})$$

$$|\tilde{\psi}_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}_l)\rangle = e^{-i\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_l}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} |\psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}_l)\rangle$$

$$\mathcal{H}|\tilde{\psi}_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}_l)\rangle = e^{-i\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_l}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \mathcal{H}_0|\psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}_l)\rangle$$

$$\tilde{J}_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) = \langle \tilde{\psi}_i(\mathbf{R}_l) | \mathcal{H} | \psi_j(\mathbf{R}_m) \rangle$$

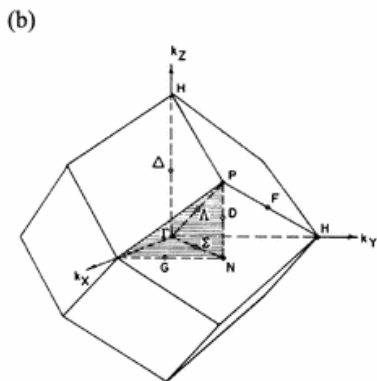
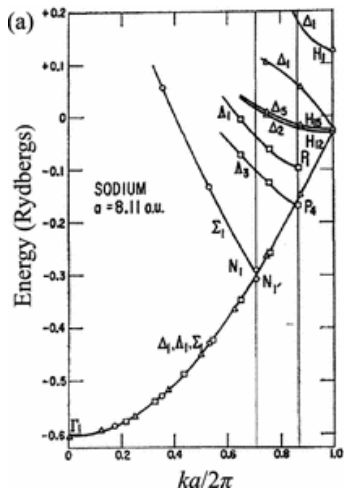
$$= \langle \psi_i(\mathbf{R}_l) | e^{i\frac{e}{\hbar} [\int_{\mathbf{R}_l}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' - \int_{\mathbf{R}_m}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}']} \mathcal{H}_0 | \psi_j(\mathbf{R}_m) \rangle$$

$$= e^{i\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_l}^{\mathbf{R}_m} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \langle \psi_i(\mathbf{R}_l) | \int e^{i\oint_{\mathbf{R}_l, \mathbf{r}, \mathbf{R}_m} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \mathcal{H}_0 | \psi_j(\mathbf{R}_m) \rangle$$

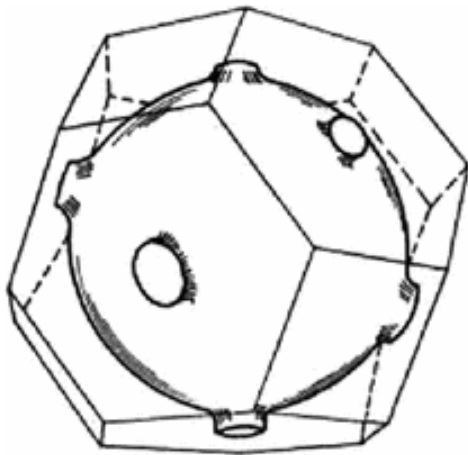
$$\simeq e^{i\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_l}^{\mathbf{R}_m} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \langle \psi_i(\mathbf{R}_l) | \mathcal{H}_0 | \psi_j(\mathbf{R}_m) \rangle$$

$$= e^{i\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_l}^{\mathbf{R}_m} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} J_{ij}(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m)$$

能带例子：碱金属：钠, BCC 结构



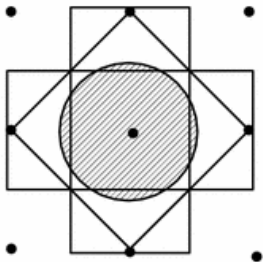
贵金属：铜的费米面



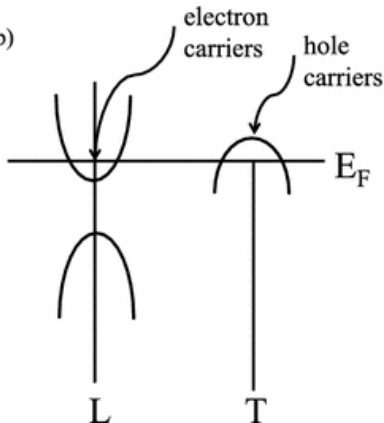
Semimetal: 铋, 石墨等

Small overlap between conduction and valence bands. Small DOS at Fermi surface.

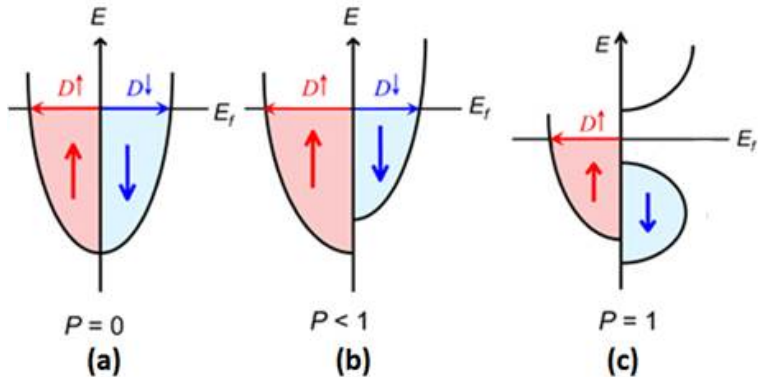
(a)



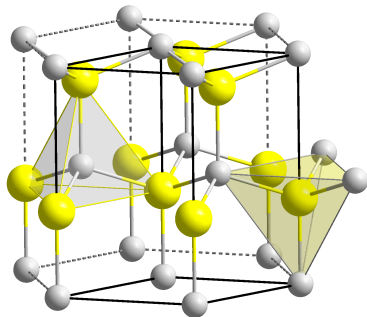
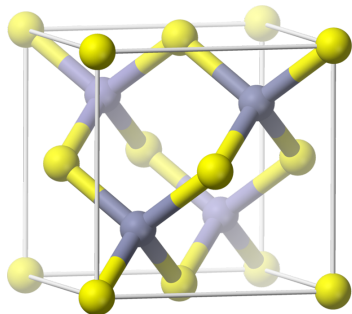
(b)



Halfmetal: 自旋极化的金属



Semiconductor crystal structure

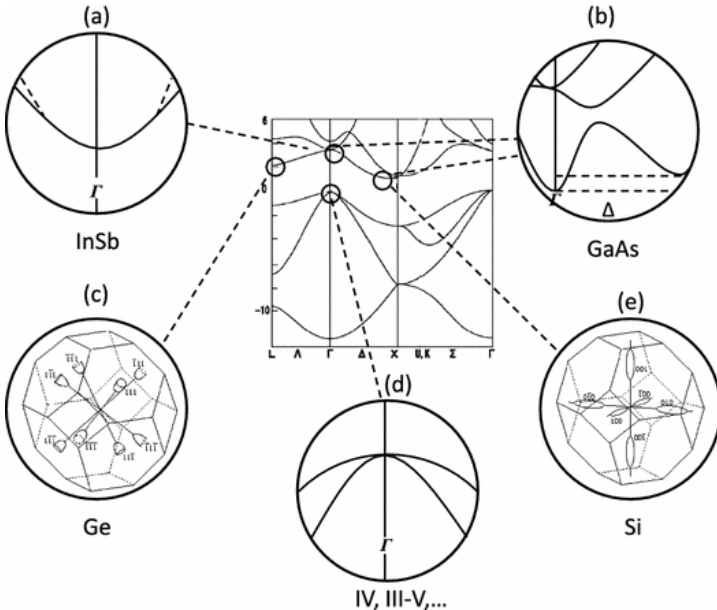


Diamond structure: IV Semiconductors, C, Si, Ge, ...

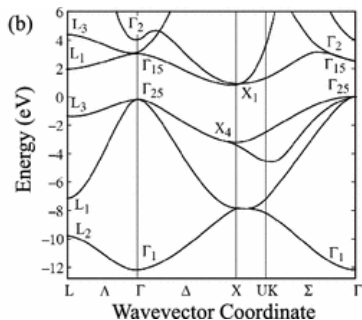
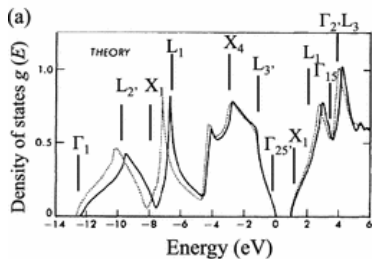
Zinc Blende: III-V Semiconductors, GaAs, InAs, ...

II-V semiconductors, ZnO, ZnS, PbSe, ...

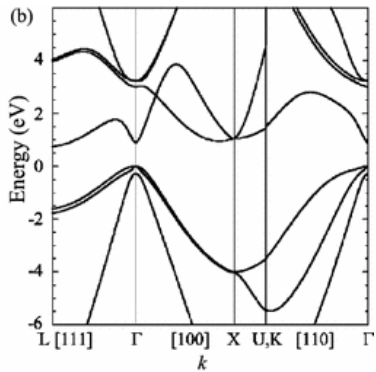
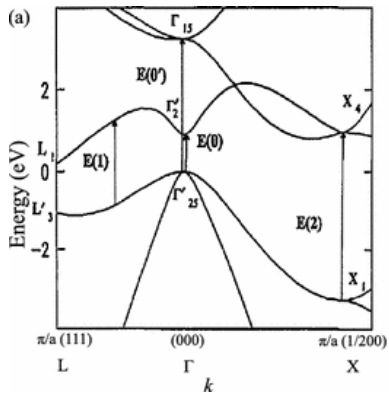
Important Semiconductors



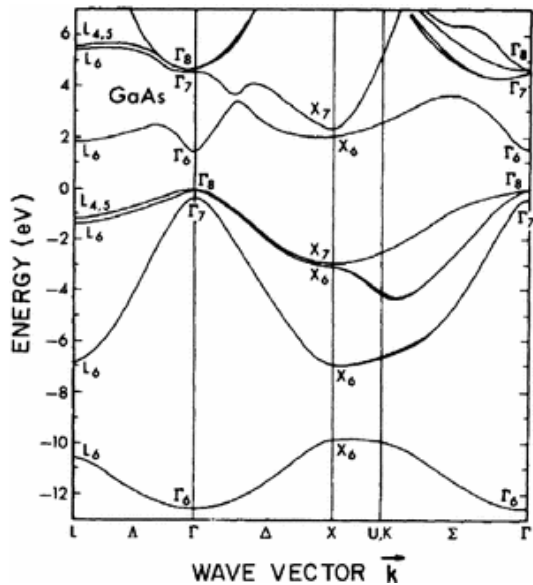
Silicon

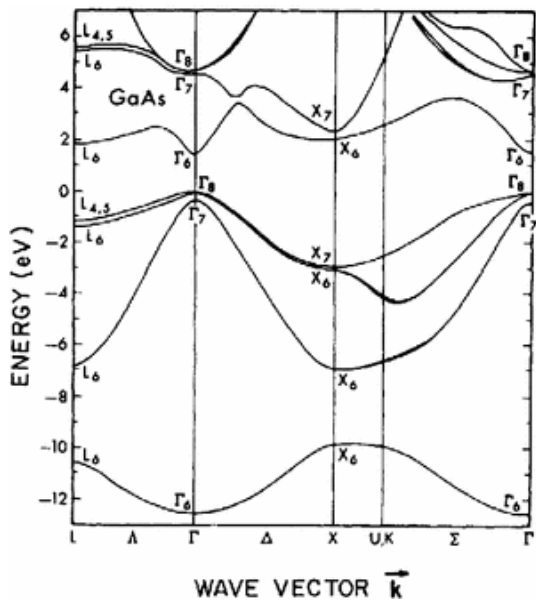


Germanium

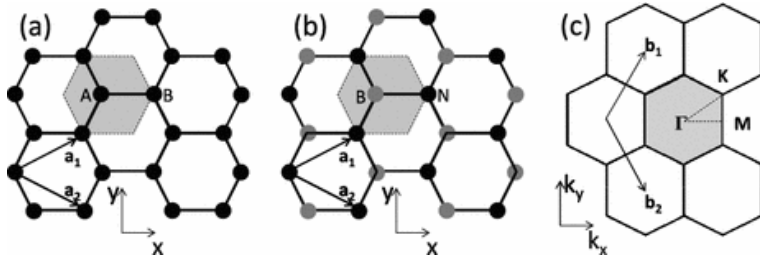


GaAs





二维材料：石墨烯、氮化硼等



👉 Bravais 格子为三角格子，每个原胞里有 A,B 两个原子。 $\mathbf{a}_1 = (3a/2, \sqrt{3}a/2)$, $\mathbf{a}_2 = (3a/2, -\sqrt{3}a/2)$; $\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a}(1, 1/\sqrt{3})$, $\mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3a}(1, -1/\sqrt{3})$ 。

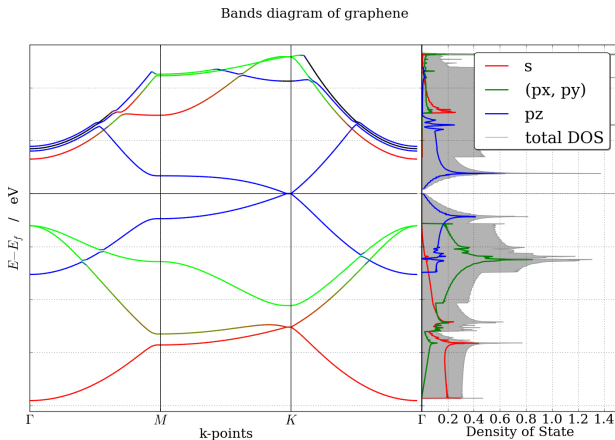
👉 最近邻近似 $-J = J_{AB}(0, 0) = J_{AB}(1, 0) = J_{AB}(0, 1)$,
 $= J_{BA}(0, 0) = J_{BA}(-1, 0) = J_{BA}(0, -1)$

具有平移不变时，简化为每个 k 对应一个 2×2 的本征问题。

$$J_{AB}(\mathbf{k}) = J_{BA}^*(\mathbf{k}) = \sum_{\Delta \mathbf{R}} J_{AB}(\Delta \mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{R}}$$

$$= \Delta(\mathbf{k}) = -J e^{ik_x a} \left[1 + 2e^{-i3k_x a/2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y a}{2} \right]$$

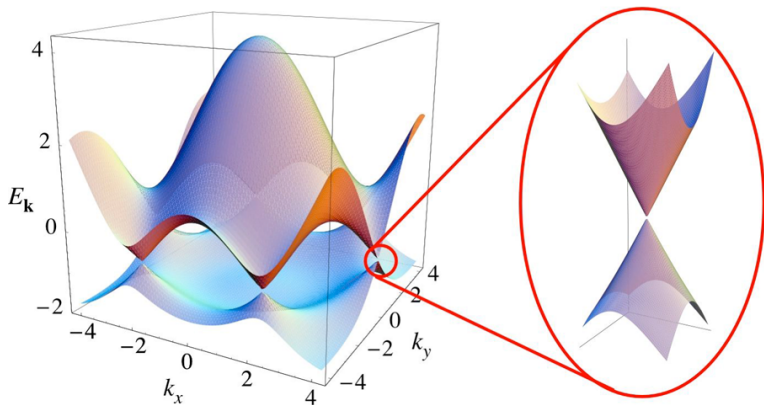
石墨烯, Graphene



$$\mathcal{H}_0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_A = 0 & \Delta_r(\mathbf{k}) + i\Delta_i(\mathbf{k}) \\ \Delta_r(\mathbf{k}) - i\Delta_i(\mathbf{k}) & \varepsilon_B = 0 \end{pmatrix} = \Delta_r(\mathbf{k})\sigma_x - \Delta_i(\mathbf{k})\sigma_y$$

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = |\Delta(\mathbf{k})|$$

石墨烯, Dirac cone



$$\mathbf{k} = \mathbf{K} + \delta\mathbf{k}$$

$$\text{有效质量近似: } \hbar\delta\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) \Rightarrow \mathbf{H}(\mathbf{K} + \delta\mathbf{k}) \simeq -\frac{3Ja}{2} \begin{pmatrix} 0 & k_y - ik_x \\ k_y + ik_x & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \hbar v_F \delta\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

$$\mathbf{H} \xrightarrow{\hbar\delta\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}} v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Leftrightarrow c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\gamma}$$

粒子物理中 Dirac Fermion

Graphene

$$\mathbf{K}^{\pm} = \mathbf{K}, \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3a}(1, \pm \frac{1}{\sqrt{3}})$$

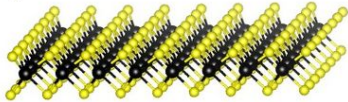
$$\begin{aligned}\Delta(\mathbf{K}^{\pm} + \mathbf{k}) &= -J[1 + 2e^{i3(K_x^{\pm} + k_x)a/2} \cos \frac{\sqrt{3}(K_y^{\pm} + k_y)a}{2}] \\&= -J[1 + 2e^{i(\pi + 3k_x a/2)} \cos(\pm \frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}k_y a}{2})] \\&= -J\{1 - 2(1 + i3k_x a/2)[\cos \frac{\pi}{3} - \sin \frac{\pi}{3}(\pm \frac{\sqrt{3}k_y a}{2})]\} \\&= -J[1 - (1 + i3k_x a/2)(1 \mp 3k_y a/2)] = \frac{3Ja}{2}(ik_x \mp k_y) \\&= \frac{3Ja}{2\hbar}(i\hbar k_x \mp \hbar k_y) = v_F(ip_x \mp p_y) \\ \mathcal{H}^{\pm}(\mathbf{p}) &= v_F \begin{pmatrix} 0 & ip_x \mp p_y \\ -ip_x \mp p_y & 0 \end{pmatrix} = v_F(p_x \sigma_y \mp p_y \sigma_x)\end{aligned}$$

👉 $\mathbf{K}, \mathbf{K}'$ 两个谷简并, $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|$

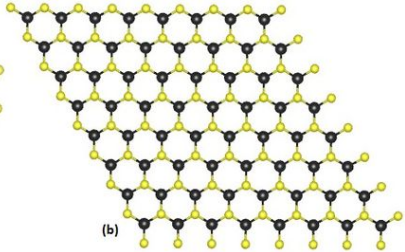
Transition metal dichalcogenide: MX_2

$\text{M}=\text{Mo}, \text{W}, \dots$; $\text{X}=\text{S}, \text{Se}, \text{Te}$

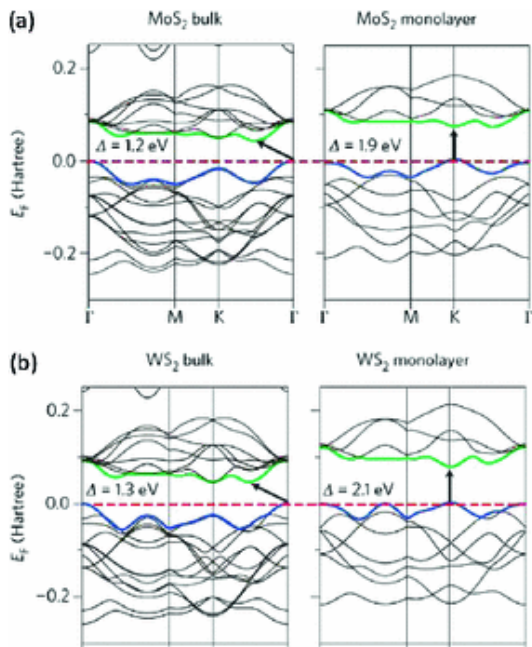
(a)



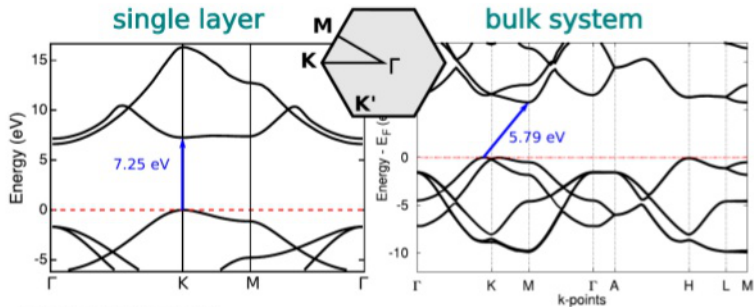
(b)



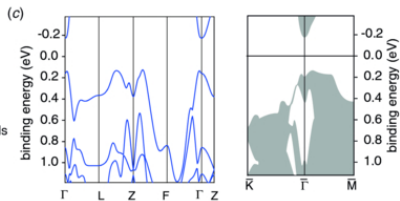
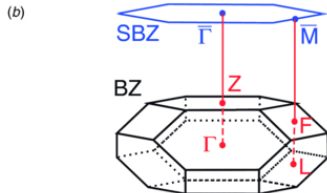
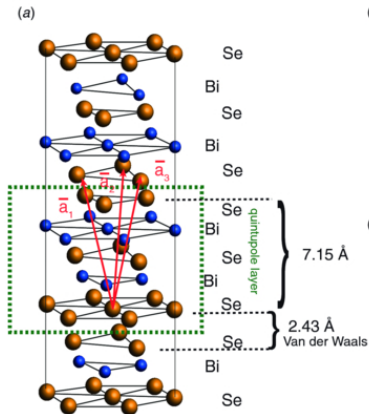
MoS₂ and WS₂



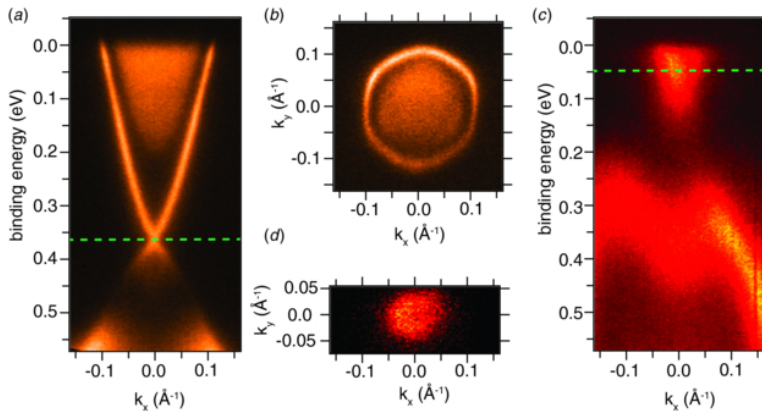
六角氮化硼, hexagonal boron nitride



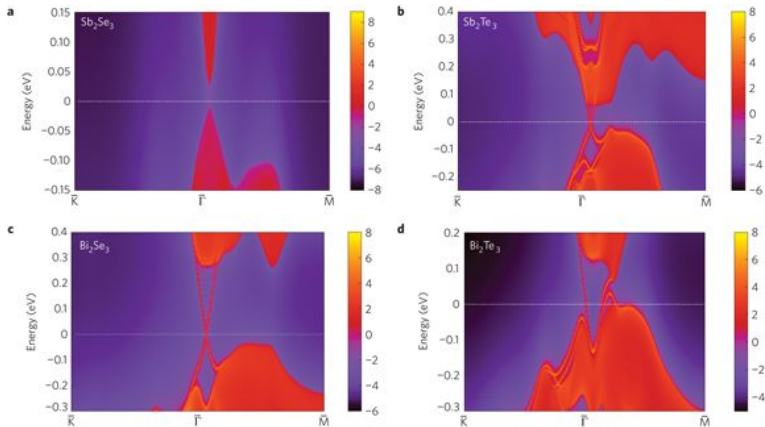
Topological insulator: Bi_2Se_3



ARPES for Bi_2Se_3



ARPES for surface states



a: Sb_2Se_3 ; b: Sb_2Te_3 ; c: Bi_2Se_3 ; d: Bi_2Te_3 .