

# Introducción a las fases topológicas

## Unidad 2: Fase de Berry

Profesores: Alberto Martín,<sup>1</sup> Luis Urrutia,<sup>1</sup> and Eduardo Barrios<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM*

<sup>2</sup>*Facultad de Química, UNAM*

### Contents

I. Introducción	2
II. Evolución Adiabática Cíclica	3
III. Fórmulas para la Curvatura de Berry	7
IV. Sistema de dos niveles	8
V. Fase de Berry en bandas de Bloch	11
VI. Transferencia adiabática de carga en 1D	16
A. Corriente adiabática	16
B. Transporte adiabático cuantizado	18
A. Fórmula para la curvatura de Berry	20
B. Teoría de perturbaciones adiabática	21
References	23

## I. INTRODUCCIÓN

Desde su descubrimiento, la fase de Berry ha encontrado aplicaciones en diversas ramas de la física. En las últimas tres décadas, los físicos de materia condensada y del estado sólido han encontrado que la fase de Berry de las funciones de onda electrónicas tiene un efecto profundo en las propiedades de los materiales y es responsable de una gama de fenómenos interesantes, tales como la ferroelectricidad, el magnetismo orbital, varios efectos Hall (cuántico, anómalo, de espín), y el bombeo cuántico de carga.

La fase de Berry surge de la evolución adiabática de un eigenestado de energía cuando un parámetro externo del sistema cuántico varía lentamente y hace un ciclo completo en el espacio de parámetros. En ausencia de degeneración, el eigenestado regresará a este mismo punto al cerrar el ciclo, pero habrá una diferencia de fase igual a la integral temporal de la energía (dividida por  $\hbar$ ) más un término extra que es lo que conocemos como fase de Berry.

La fase de Berry tiene tres propiedades clave que hacen a dicho concepto importante: (i) *es invariante de norma*, (ii) *es un concepto geométrico* y (iii) *tiene una analogía cercana con las teorías de campos de norma y geometría diferencial*. La primera de estas propiedades hace que el concepto de fase de Berry sea físico (es decir, medible), la segunda implica que podemos expresarla en términos de cantidades geométricas locales en el espacio de parámetros (de hecho, Berry mismo demostró que la fase puede obtenerse como la integral de un campo, que ahora conocemos como *curvatura de Berry*, sobre una superficie que contenga al loop), y la tercer propiedad hace que el concepto de fase de Berry sea bello, intuitivo y poderoso.

Se sabe que la integral de la curvatura de Berry sobre una superficie cerrada, tal como una esfera o un toro, es topológica y está cuantizada. A estos *números cuánticos topológicos* se les denomina *números de Chern*. Dichos números son análogos a los que aparecen en la cuantización de las cargas magnéticas predicha por Dirac. Sin embargo, mientras que los monopolos de Dirac aún no se han observado experimentalmente, los números topológicos de Chern han encontrado una correspondencia con los plateaus de cuantización del efecto Hall.

## II. EVOLUCIÓN ADIABÁTICA CÍCLICA

El objetivo de esta sección es introducir el concepto de fase de Berry siguiendo de cerca el artículo original de Sir Michael Berry [1].

Consideremos un sistema general descrito por un Hamiltoniano  $H(\mathbf{R})$  que depende del tiempo a través de un conjunto de parámetros (tales como el campo magnético, el campo eléctrico y/o esfuerzos) denotados por  $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3, \dots)$ , donde  $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$ . Estamos interesados en la evolución adiabática del sistema, es decir, en la evolución del sistema a medida que los parámetros  $\mathbf{R}(t)$  varían lentamente en el tiempo a lo largo de una trayectoria  $\mathcal{C}$  en el espacio de parámetros. En general,  $\mathcal{C}$  puede ser una trayectoria cerrada o abierta. Resulta conveniente introducir una base ortonormal de eigenestados de  $H(\mathbf{R})$  en cada punto  $\mathbf{R}$  del espacio de parámetros. Ésta se obtiene diagonalizando  $H(\mathbf{R})$  para cada  $\mathbf{R}$ , esto es:

$$H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle. \quad (1)$$

Esta ecuación determina los estados base  $|n(\mathbf{R})\rangle$  hasta un factor de fase que puede depender de  $\mathbf{R}$ . Podemos hacer una elección de esta fase para remover esa arbitrariedad en la definición de los estados base. Una elección natural es pedir que el factor de fase sea una función suave y univaluada a lo largo de la trayectoria  $\mathcal{C}$  en el espacio de parámetros. Cuando no es posible hacer esta elección en toda la trayectoria, podemos dividirla en muchos segmentos que se traslapen levemente, y en donde la fase si puede definirse suavemente.

Consideremos ahora la evolución de un estado cuántico debido a la variación de los parámetros  $\mathbf{R}(t)$  a lo largo de la trayectoria  $\mathcal{C}$ . De acuerdo con el **teorema adiabático**, un sistema que se encuentra inicialmente en un eigenestado  $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$  permanecerá como un eigenestado instantáneo del Hamiltoniano  $H(\mathbf{R}(t))$  en el proceso. De esta manera, la única libertad que existe durante la evolución adiabática es un posible cambio de fase del estado cuántico, esto es,  $|\psi(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle$ . De hecho, sabemos que esa fase no puede ser cero puesto que al menos contiene el factor de fase dinámico que depende de la energía del eigenestado. La evolución temporal del estado del sistema está gobernada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$H(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle. \quad (2)$$

Sustituyendo el estado  $|\psi(t)\rangle = e^{i\theta(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle$ , de acuerdo a lo indicado por el teorema

adiabático, se obtiene la siguiente ecuación diferencial para la fase:

$$i\hbar\partial_t |n(\mathbf{R}(t))\rangle + \hbar\dot{\theta}_n(t) |n(\mathbf{R}(t))\rangle = E_n(\mathbf{R}(t)) |n(\mathbf{R}(t))\rangle. \quad (3)$$

Aplicando el bra  $\langle n(\mathbf{R}(t))|$  y asumiendo que los estados de la base están normalizados, esto es

$$\langle n(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R}(t))\rangle = 1, \quad (4)$$

se obtiene

$$\dot{\theta}_n(t) = \frac{1}{\hbar} E_n(\mathbf{R}(t)) - i \langle n(\mathbf{R}(t))| \partial_t |n(\mathbf{R}(t))\rangle. \quad (5)$$

La expresión final para la fase se obtiene integrando en el tiempo:

$$\theta_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' - i \int_0^t \langle n(\mathbf{R}(t'))| \partial_{t'} |n(\mathbf{R}(t'))\rangle dt'. \quad (6)$$

En este resultado, el primer término puede identificarse como la fase dinámica usual, mientras que el segundo término, al que denominamos **fase de Berry**, se origina de la evolución adiabática del estado  $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ . Escribiendo el estado evolucionado en la forma

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt'} e^{i\gamma_n} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (7)$$

la fase de Berry es

$$\gamma_n = i \int_0^t \langle n(\mathbf{R}(t'))| \partial_{t'} |n(\mathbf{R}(t'))\rangle dt'. \quad (8)$$

Físicamente, la fase de Berry surge del hecho de que los estados en  $t$  y  $t+dt$  no son idénticos. Algo interesante de la fase geométrica  $\gamma_n$  es que no depende de la parametrización de  $\mathbf{R}(t)$ . Para ver esto, podemos eliminar la dependencia temporal de la ec. (8) en favor de los parámetros  $\mathbf{R}$ , que sabemos dependen implícitamente del tiempo, como sigue:

$$\gamma_n = i \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} \langle n(\mathbf{R}(t'))| \frac{\partial}{\partial R_i} |n(\mathbf{R}(t'))\rangle dR_i = i \int_{\mathcal{C}} \langle n(\mathbf{R})| \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle \cdot d\mathbf{R}. \quad (9)$$

Definiendo el potencial vectorial o **conexión de Berry**

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n(\mathbf{R})| \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle, \quad (10)$$

es posible expresar la fase de Berry (9) de forma análoga al flujo magnético,

$$\gamma_n = \int_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}. \quad (11)$$

Esta expresión demuestra que, además de la fase dinámica, un estado cuántico adquiere la fase adicional  $\gamma_n$  durante la evolución adiabática.

El potencial de Berry (10) no es una cantidad físicamente medible porque depende de la norma. Si realizamos una transformación de norma, los eigenestados base se transforman de acuerdo a

$$|n(\mathbf{R})\rangle \rightarrow e^{i\zeta(\mathbf{R})} |n(\mathbf{R})\rangle, \quad (12)$$

donde  $\zeta(\mathbf{R})$  es una función suave y univaluada. Bajo esta transformación, el potencial de Berry (10) se transforma de acuerdo a

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow ie^{-i\zeta(\mathbf{R})} \langle n(\mathbf{R}) | [e^{i\zeta(\mathbf{R})} \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle] = \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}} \zeta(\mathbf{R}). \quad (13)$$

El término adicional hace que la fase de Berry (11) no sea univaluada. De hecho, esta puede calcularse como

$$\gamma_n \rightarrow \gamma_n - \int_{\mathcal{C}} \nabla_{\mathbf{R}} \zeta(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \gamma_n - [\zeta(\mathbf{R}(T)) - \zeta(\mathbf{R}(0))], \quad (14)$$

donde  $T$  es el tiempo en que se completa la trayectoria  $\mathcal{C}$  en el espacio de parámetros. En 1928, Fock concluyó que siempre es posible elegir apropiadamente la función  $\zeta(\mathbf{R})$  tal que la fase  $\gamma_n$  acumulada a lo largo de la trayectoria  $\mathcal{C}$  se anula, dejando así sólo el término de fase dinámica. Debido a esto, la fase geométrica  $\gamma_n$  quedó en el olvido por un largo tiempo en el tratamiento de los problemas dependientes del tiempo.

Esta situación permaneció así hasta que en 1984 Berry consideró la evolución adiabática cíclica de un sistema a lo largo de una trayectoria cerrada  $\mathcal{C}$  en el espacio de parámetros, esto es,  $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(T)$ . Dado que hemos elegido a los eigenestados base  $|n(\mathbf{R})\rangle$  univaluados, la función  $\zeta(\mathbf{R})$  también debe ser univaluada, de manera que al completar el circuito  $\mathcal{C}$ , se debe tener que  $e^{i\zeta(\mathbf{R}(0))} |n(\mathbf{R}(0))\rangle = e^{i\zeta(\mathbf{R}(T))} |n(\mathbf{R}(T))\rangle = e^{i\zeta(\mathbf{R}(T))} |n(\mathbf{R}(0))\rangle$ , de manera que

$$\zeta(\mathbf{R}(T)) - \zeta(\mathbf{R}(0)) = 2\pi m, \quad (15)$$

donde  $m$  es un entero. Esto muestra que el único cambio en la fase de Berry  $\gamma_n$  bajo una transformación de norma es por un múltiplo entero de  $2\pi$ , y éste no puede removerse. Por lo tanto, para una trayectoria cerrada  $\mathcal{C}$  en el espacio de parámetros,  $\gamma_n$  es una cantidad física invariante de norma. De aquí en adelante, nuestra definición de fase de Berry será para una

trayectoria cerrada, que la que tiene sentido físico. Esto es:

$$\gamma_n = \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \mod 2\pi. \quad (16)$$

Esta definición nos muestra que la fase de Berry depende únicamente del aspecto geométrico de la trayectoria cerrada  $\mathcal{C}$ , y es independiente de cómo  $\mathbf{R}(t)$  varía con el tiempo. De esta manera, la dependencia temporal no es esencial para la descripción de la fase de Berry.

Empleando el teorema de Stokes, también podemos convertir la integral de línea de la ec. (16) en una integral de superficie

$$\gamma_n = \int_{\mathcal{S}} \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S}_{\mathbf{R}}, \quad (17)$$

donde  $\mathcal{S}$  es una superficie arbitraria encerrada por la trayectoria  $\mathcal{C}$ . La ecuación (17) nos sugiere la definición de la **curvatura de Berry** como sigue

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}), \quad (18)$$

de manera que

$$\gamma_n = \int_{\mathcal{S}} \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S}_{\mathbf{R}}. \quad (19)$$

Se puede verificar directamente, de la definición (18), que a diferencia del potencial de Berry, la curvatura de Berry es invariante de norma, y por lo tanto, observable.

La forma vectorial de la curvatura de Berry nos proporciona de una interpretación intuitiva: puede verse como un campo magnético en el espacio de parámetros. De esta forma, el análogo electromagnético de la fase de Berry (19) es el flujo magnético  $\int_{\mathcal{S}} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}$ . Por lo tanto, los efectos físicos causados por la curvatura de Berry no serán medibles de la misma manera en la que podemos medir flujos magnéticos, sino que debe manifestarse de otra manera en sus propiedades físicas.

Finalizamos esta sección con una expresión general para el análogo del tensor de campo electromagnético  $F_{\mu\nu}$ , que es:

$$\Omega_{\mu\nu}^n = \frac{\partial}{\partial R^\mu} A_\nu^n(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial R^\nu} A_\mu^n(\mathbf{R}) = i \left[ \left\langle \frac{\partial n(\mathbf{R})}{\partial R^\mu} \left| \frac{\partial n(\mathbf{R})}{\partial R^\nu} \right\rangle - \text{c.c.} \right]. \quad (20)$$

### III. FÓRMULAS PARA LA CURVATURA DE BERRY

A continuación vamos a obtener una fórmula general para la curvatura de Berry asociada a un Hamiltoniano arbitrario, cuando el espacio de parámetros es tridimensional. Sustituyendo directamente la conexión de Berry (10) en la expresión (18) obtenemos

$$\mathbf{\Omega}_n(\mathbf{R}) = i \nabla_{\mathbf{R}} \times \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle = i \epsilon_{ijk} \partial_j \langle n(\mathbf{R}) | \partial_k | n(\mathbf{R}) \rangle \mathbf{e}_i = i \epsilon_{ijk} \langle \partial_j n(\mathbf{R}) | \partial_k n(\mathbf{R}) \rangle \mathbf{e}_i, \quad (21)$$

donde las parciales indican derivadas en el espacio de parámetros, esto es,  $\partial_i \equiv \partial / \partial R_i$ . Para simplificar esta expresión, introducimos la relación de completez  $\sum_{n'} |n'(\mathbf{R})\rangle \langle n'(\mathbf{R})| = 1$ , esto es:

$$\mathbf{\Omega}_n(\mathbf{R}) = i \epsilon_{ijk} \sum_{n'} \langle \partial_j n(\mathbf{R}) | n'(\mathbf{R}) \rangle \langle n'(\mathbf{R}) | \partial_k n(\mathbf{R}) \rangle \mathbf{e}_i, \quad (22)$$

En esta expresión podemos eliminar la notación de índice y expresarla como

$$\mathbf{\Omega}_n(\mathbf{R}) = i \sum_{n'} \langle \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) | n'(\mathbf{R}) \rangle \times \langle n'(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle. \quad (23)$$

Como siguiente asunto, vamos a usar el hecho de que los estados  $|n(\mathbf{R})\rangle$  son estados propios del Hamiltoniano  $H(\mathbf{R})$  con eigenvalores de energía  $E_n(\mathbf{R})$ , esto es:

$$H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle. \quad (24)$$

Nuestro propósito ahora es usar el resultado anterior para obtener los brackets que aparecen en la ec. (23). Para hacerlo, aplicamos el operador  $\nabla_{\mathbf{R}}$  a la ecuación de eigenvalores. Para el lado izquierdo de dicha expresión se obtiene:

$$(\nabla_{\mathbf{R}} E_n(\mathbf{R})) |n(\mathbf{R})\rangle + E_n(\mathbf{R}) |\nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R})\rangle = (\nabla_{\mathbf{R}} \hat{H}) |n(\mathbf{R})\rangle + \hat{H} |\nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R})\rangle. \quad (25)$$

Aplicando el bra  $\langle n'(\mathbf{R})|$ , y usando la ortogonalidad de los eigenestados base obtenemos

$$(E_n(\mathbf{R}) - E_{n'}(\mathbf{R})) \langle n'(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle = \langle n'(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} | n(\mathbf{R}) \rangle. \quad (26)$$

Nótese que la sumatoria sobre  $n'$  que aparece en la ec. (23) excluye aquellos valores para los que  $n = n'$ . Por lo tanto, es posible despejar el término deseado de la expresión anterior para obtener

$$\langle n'(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle = \frac{\langle n'(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} | n(\mathbf{R}) \rangle}{E_n(\mathbf{R}) - E_{n'}(\mathbf{R})}, \quad n \neq n'. \quad (27)$$

Sustituyendo este resultado en la ec. (23) se obtiene

$$\Omega_n(\mathbf{R}) = i \sum_{n'} \frac{\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} | n'(\mathbf{R}) \rangle \times \langle n'(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} | n(\mathbf{R}) \rangle}{(E_n(\mathbf{R}) - E_{n'}(\mathbf{R}))^2}. \quad (28)$$

Este resultado representa una herramienta útil para el cálculo de la curvatura de Berry, pues tiene la ventaja de que no involucra derivadas de los estados, de manera que puede evaluarse independiente de la elección de la norma.

**[Tarea 1U2]:** Usando el resultado de la ec. (28), demuestre que  $\sum_n \Omega_n(\mathbf{R}) = 0$ .

Esta es la conservación local de la curvatura de Berry. La ecuación (28) nos muestra que  $\Omega_n(\mathbf{R})$  es singular cerca de los puntos de degeneración  $\mathbf{R}^*$  es el espacio de parámetros, donde los niveles de energía se cruzan:  $E_n(\mathbf{R}^*) = E_{n'}(\mathbf{R}^*)$ . Como veremos más adelante, este punto de degeneración corresponde a un monopolo en el espacio de parámetros.

Hasta el momento hemos discutido la situación en la que un sólo nivel de energía puede separarse en la evolución adiabática. Sin embargo, si los niveles de energía son degenerados, la dinámica debe proyectarse al subespacio generado por los eigenestados degenerados. En tal caso, la conexión de Berry resulta ser una matriz de dimensión igual a la degeneración, de manera que la curvatura de Berry es no abeliana.

#### IV. SISTEMA DE DOS NIVELES

A continuación vamos a considerar un ejemplo concreto: el sistema de dos niveles. El Hamiltoniano genérico de un sistema de dos niveles es de la siguiente forma:

$$\hat{H}(\mathbf{R}) = h_0(\mathbf{R}) \sigma_0 + \mathbf{h}(\mathbf{R}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (29)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \mathbf{e}_x + \sigma_y \mathbf{e}_y + \sigma_z \mathbf{e}_z$  es el vector de matrices de Pauli,  $\sigma_0$  es la matriz identidad de  $2 \times 2$ ,  $h_0(\mathbf{R})$  y  $\mathbf{h}(\mathbf{R})$  son una función y un vector arbitrarios que dependen de los parámetros  $\mathbf{R}$ .

A pesar de su simplicidad, el Hamiltoniano (29) describe una gran cantidad de sistemas importantes en la física de materia condensada, donde los efectos de la fase de Berry resultan ser importante. Como ejemplos sobresalientes podemos mencionar a los sistemas



con acoplamiento espín-órbita [2, 3], moléculas diatómicas linealmente conjugadas [4, 5], ferroeléctricos unidimensionales [6, 7], grafeno [8, 9] y cuasipartículas de Bogoliubov [10].

Vamos a concentrarnos entonces en la física que podemos extraer del Hamiltoniano de dos bandas. Partimos de la ecuación de eigenvalores

$$H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle. \quad (30)$$

El espectro de energía podemos obtenerlo fácilmente. El resultado es:

$$E_n(\mathbf{R}) = h_0(\mathbf{R}) + n\sqrt{\mathbf{h}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{h}(\mathbf{R})}, \quad (31)$$

donde  $n = \pm 1$  es el índice de banda. Dado que el primer término del Hamiltoniano es proporcional a la matriz identidad, los eigenestados pueden calcularse de manera directa. Definiendo  $\tilde{E}_n(\mathbf{R}) = E_n(\mathbf{R}) - h_0(\mathbf{R})$ , la ecuación de eigenvalores correspondiente es

$$\mathbf{h}(\mathbf{R}) \cdot \boldsymbol{\sigma} |n(\mathbf{R})\rangle = \tilde{E}_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle \quad (32)$$

donde la solución  $|n(\mathbf{R})\rangle = (a, b)^T$  es un espinor de dos componentes. Los eigenvectores normalizados que se obtienen son

$$|n(\mathbf{R})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\tilde{E}_n(\tilde{E}_n + h_z)}} \begin{pmatrix} \tilde{E}_n + h_z \\ h_x + ih_y \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Introduciendo la parametrización  $\mathbf{h} = h \sin \theta \cos \varphi \mathbf{e}_x + h \sin \theta \sin \varphi \mathbf{e}_y + h \cos \theta \mathbf{e}_z$  los eigenestados para cada banda toman la forma

$$|+(\mathbf{R})\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |-(\mathbf{R})\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (34)$$

Para obtener una expresión general para la curvatura de Berry del sistema de dos bandas, emplearemos la fórmula (28). Los detalles de la derivación los dejamos en el apéndice. El resultado final es

$$\Omega_n^i(\mathbf{R}) = -n \frac{\epsilon^{ijk}}{4h^3} \mathbf{h} \cdot (\partial_j \mathbf{h} \times \partial_k \mathbf{h}). \quad (35)$$

Este resultado es sumamente importante, pues dado cualquier Hamiltoniano de dos bandas, sólo basta con identificar al vector  $\mathbf{h}$  y calcular las derivadas requeridas por la ec. (35).

Muchas propiedades interesantes de la fase de Berry se obtienen cuando consideramos el caso particular en que  $\mathbf{h}(\mathbf{R}) = \mathbf{R}$ . Usando el resultado (35) encontramos que la curvatura de Berry es:

$$\Omega_n(\mathbf{R}) = -\frac{n}{2} \frac{\mathbf{R}}{R^3}. \quad (36)$$

Este resultado verifica explícitamente la conservación local de la curvatura de Berry:  $\Omega_+(\mathbf{R}) + \Omega_-(\mathbf{R}) = 0$ . Además, la ec. (36) se reconoce como el campo magnético generado por un monopolo en el origen  $\mathbf{R} = 0$ , donde los niveles de energía se degeneran:  $E_+(\mathbf{0}) = E_-(\mathbf{0}) = h_0(\mathbf{0})$ . Por lo tanto, **los puntos de degeneración en el espacio de parámetros actúan como fuentes y sumideros de flujo de curvatura de Berry**. La fase de Berry de este sistema es:

$$\gamma_n = -\frac{n}{2} \int_S \frac{\mathbf{R}}{R^3} \cdot d\mathbf{S}_R. \quad (37)$$

De esta manera, la fase de Berry está relacionada con el ángulo sólido  $\Omega(\mathcal{C})$  barrido por  $\mathbf{R}$ , como se puede ver en la figura 1. Esto es:

$$\gamma_n = -\frac{n}{2} \Omega(\mathcal{C}). \quad (38)$$

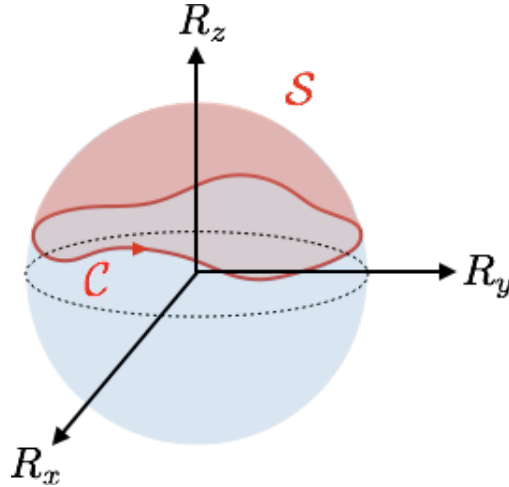


Figure 1: La curvatura de Berry sobre una curva  $\mathcal{C}$  es la mitad del área encerrada por la curva.

Si realizamos la integral de la ec. (37) sobre una superficie cerrada que contenga al monopolo, por ejemplo una esfera  $S^2$ , se obtiene

$$\gamma_n = -\frac{n}{2} \oint_{S^2} \frac{\mathbf{R}}{R^3} \cdot d\mathbf{S}_R = -2\pi n. \quad (39)$$

Es decir, la integral de la curvatura de Berry sobre una superficie cerrada está cuantizada en múltiplos de  $2\pi$ . Este resultado sugiere la definición de una cantidad, el **primer número de Chern**  $c_n$ ,

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{S}} \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S}_{\mathbf{R}} \in \mathbb{Z}, \quad (40)$$

que nos dice la cantidad de monopolos al interior de la superficie cerrada  $\mathcal{S}$ .

## V. FASE DE BERRY EN BANDAS DE BLOCH

Hasta el momento se introdujeron los conceptos básicos de la fase Berry para un sistema genérico descrito por un Hamiltoniano que depende del tiempo a través de un conjunto de parámetros  $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3, \dots)$ , con  $R_i = R_i(t)$ . El objetivo ahora es considerar su realización en sólidos cristalinos, pues la estructura de bandas de éstos proveen de una plataforma para estudiar los efectos de la fase de Berry.

En la aproximación monoeléctronica, la estructura de bandas de un cristal está determinada por el Hamiltoniano

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (41)$$

donde  $V(\mathbf{r})$  es el potencial con la periodicidad de la red, i.e.  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{t})$ , donde  $\mathbf{t}$  es un vector del grupo de traslación. De acuerdo al teorema de Bloch, los eigenestados de Hamiltonianos periódicos satisfacen la condición

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (42)$$

donde  $n$  es el índice de banda y  $\hbar\mathbf{k}$  es el momento cristalino, que definimos en la zona de Brillouin  $\simeq \mathbb{T}^2$ . Ver la figura 2. Entonces, el sistema estará descrito por un Hamiltoniano que depende de  $\mathbf{k}$  y con una condición de borde que también depende de  $\mathbf{k}$ . Esto sugiere que para un sólido cristalino, el parámetro que varía lentamente podemos identificarlo con el momento cristalino.

La función de onda electrónica puede escribirse como

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (43)$$

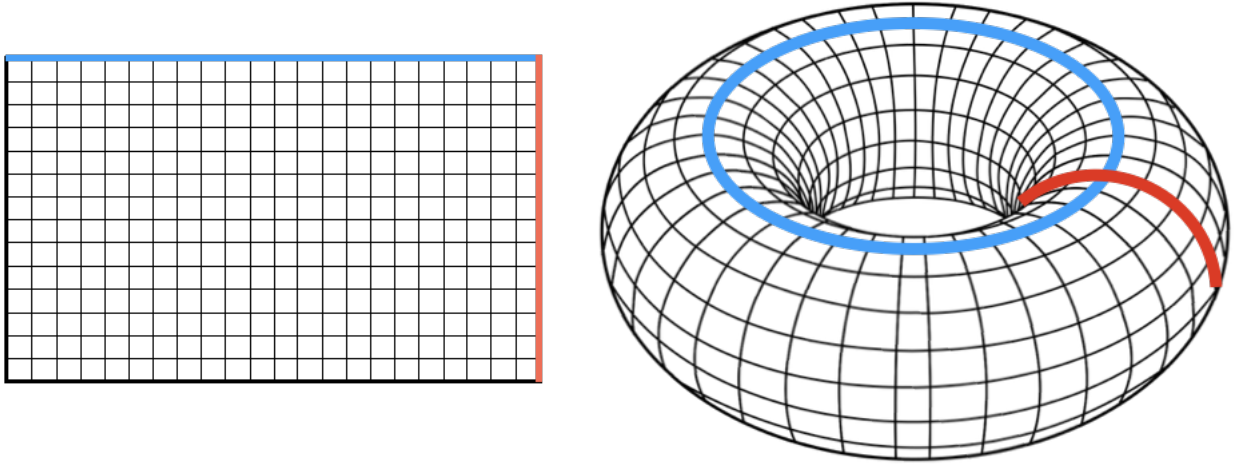


Figure 2: Zona de Brillouin.

donde  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  es la parte periódica de la función de Bloch, es decir, satisface la condición de borde

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (44)$$

Esta condición garantiza que todos los eigenestados viven en el mismo espacio de Hilbert. Además, sabemos que  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  satisface la ecuación  $\hat{H}_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , donde

$$\hat{H}_{\mathbf{k}} = \frac{(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (45)$$

Si  $\mathbf{k}$  describe una trayectoria cerrada  $\mathcal{C}$  en el espacio de momento, entonces el estado de Bloch adquiere un fase de Berry

$$\gamma_n = \oint_{\mathcal{C}} \langle u_{\mathbf{k}n} | i \nabla_{\mathbf{k}} | u_{\mathbf{k}n} \rangle \cdot d\mathbf{k}. \quad (46)$$

Una manera de generar un circuito cerrado en el espacio de momentos es, por ejemplo, aplicando un campo magnético. En tal caso, se produce un movimiento ciclotrón en órbitas cerradas en el espacio  $\mathbf{k}$ . En esta situación, la fase de Berry se manifiesta en varios efectos magneto-oscilatorios, que se han observado en la aleación metálica  $\text{LaRhIn}_5$  y grafeno. Por supuesto, tales órbitas cerradas son posibles solo en sistemas bidimensionales y tridimensionales.

Siguiendo las ideas de la primera sección, podemos definir la curvatura de Berry de las

bandas de energía como:

$$\Omega_{n\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_{n\mathbf{k}} | i \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle. \quad (47)$$

**La curvatura de Berry es una propiedad intrínseca de la estructura de bandas porque sólo depende de las funciones de onda de Bloch.** Es distinta de cero en una gran variedad de materiales, en particular en cristales con simetrías de inversión espacial y de inversión temporal rotas. Una vez que se introduce el concepto de curvatura de Berry ya no es necesario el circuito cerrado, pues la curvatura de Berry es una cantidad local invariante de norma. Actualmente, sabemos que la curvatura de Berry tiene efectos profundos en la dinámica de los electrones de Bloch, y éstos se manifiestan en las propiedades termodinámicas y de transporte en cristales.

Otro mecanismo para generar un circuito cerrado, como lo requiere la definición de la fase de Berry, es aplicando un campo eléctrico. Éste causará una variación lineal en  $\mathbf{k}$ , de manera que se realizarán circuitos cerrados cuando  $\mathbf{k}$  barra toda la zona de Brillouin. Recordemos que la zona de Brillouin tiene la topología de un toro: los puntos  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k} + \mathbf{G}$  pueden identificarse como el mismo punto, donde  $\mathbf{G}$  es un vector en la red recíproca. Esto puede verse notando que  $|\psi_n(\mathbf{k})\rangle$  y  $|\psi_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})\rangle$  satisfacen la misma condición de borde (42), de manera que dichos estados pueden diferir, a lo más, por un factor de fase. La topología del toro se realiza cuando elegimos el factor de fase tal que  $|\psi_n(\mathbf{k})\rangle = |\psi_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})\rangle$ . Esto implica que las funciones  $|u_n(\mathbf{k})\rangle$  y  $|u_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})\rangle$  satisfacen

$$|u_n(\mathbf{k})\rangle = e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} |u_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})\rangle. \quad (48)$$

A esta elección de norma se le conoce como **norma periódica**, y en tal caso, la fase de Berry en la zona de Brillouin recibe el nombre de **fase de Zak**:

$$\gamma_n = \oint_{\text{Z.B.}} \langle u_{n\mathbf{k}} | i \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \cdot d\mathbf{k}. \quad (49)$$

La fase de Zak está relacionada con la polarización macroscópica de un aislante. Veamos algunos ejemplos ilustrativos de cálculo de la curvatura de Berry.

### Ejemplo 1: Semimetal de Weyl

Consideremos el Hamiltoniano  $\hat{H}_{\mathbf{k}} = \chi \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \chi \mathbf{b})$ , donde  $\chi = \pm 1$  es la quiralidad,  $v_F$  la velocidad de Fermi, y  $\mathbf{b}$  es un vector constante en el espacio de momentos. De aquí se lee que

$$\mathbf{h}(\mathbf{k}) = \chi \hbar v_F (\mathbf{k} - \chi \mathbf{b}), \quad (50)$$

de manera que  $\partial_j \mathbf{h}(\mathbf{k}) = \chi \hbar v_F \mathbf{e}_j$ . Sustituyendo estas expresiones en la ec. (35) se obtiene

$$\Omega_{n\chi}^i(\mathbf{k}) = n\chi \frac{\epsilon^{ijk}(\mathbf{k} - \chi \mathbf{b}) \cdot \mathbf{e}_j \times \mathbf{e}_k}{4K^3}, \quad (51)$$

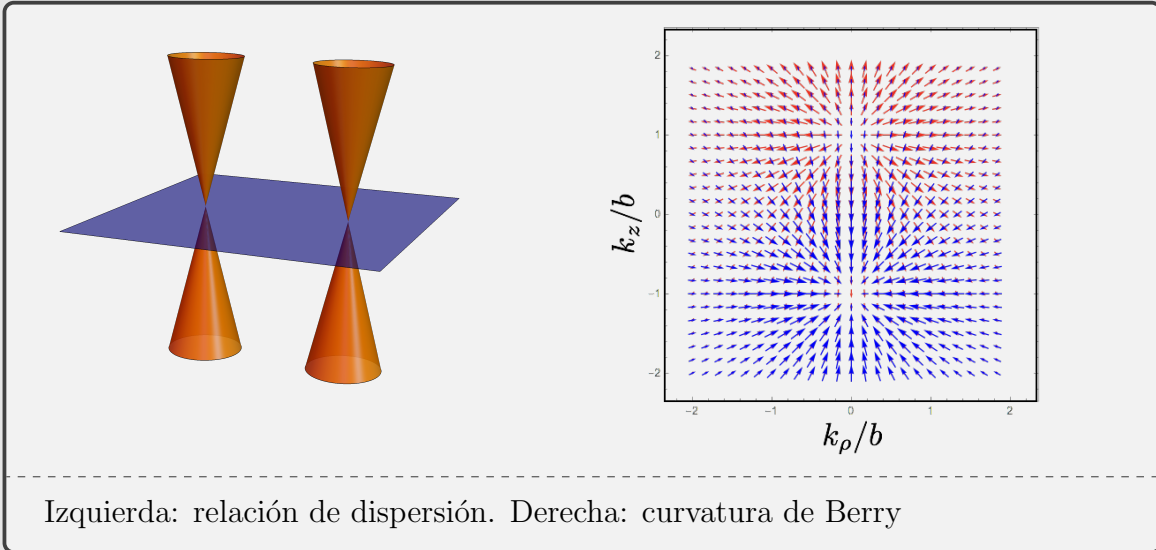
donde  $K \equiv \sqrt{(\mathbf{k} - \chi \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{k} - \chi \mathbf{b})}$ , de manera que la energía del sistema puede escribirse como  $E_{\mathbf{k}s\chi} = s\hbar v_F K$ . Es claro que la ecuación (51) se simplifica a

$$\boldsymbol{\Omega}_{n\chi}(\mathbf{k}) = n\chi \frac{\mathbf{k} - \chi \mathbf{b}}{2K^3}. \quad (52)$$

Se observa que la curvatura de Berry es generada por monopolos magnéticos de cargas  $s\chi/2$  y localizados en  $\mathbf{k} = \chi \mathbf{b}$ . Dado los valores de  $n$  y  $\chi$ , podemos calcular el primer número de Chern integrando sobre una esfera que encierre al monopolo, esto es:

$$n_{n\chi} = \frac{1}{2\pi} \oint_{S^2} \boldsymbol{\Omega}_{n\chi}(\mathbf{k}) \cdot d\mathcal{S}_{\mathbf{k}} = n\chi. \quad (53)$$

Algo importante a notar en este resultado es que es independiente del nivel de Fermi.



### Ejemplo 2: Aislante de Chern

Consideremos el Hamiltoniano  $\hat{H}_{\mathbf{k}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}_{\perp} + m\sigma_z$ , donde  $\mathbf{k}_{\perp} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$ , y  $m$  es un término de masa finito. De aquí se lee que

$$\mathbf{h}(\mathbf{k}) = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + m \mathbf{e}_z, \quad (54)$$

de manera que  $\partial_j \mathbf{h}(\mathbf{k}) = \mathbf{e}_j$ , con  $j = x, y$ . Sustituyendo estas expresiones en la ec. (35) se obtiene

$$\Omega_{\mathbf{k}s}^i = s \frac{\epsilon^{ijk} (m \mathbf{e}_z) \cdot (\hbar v_F)^2 \mathbf{e}_j \times \mathbf{e}_k}{4K^3}, \quad j, k = x, y, \quad (55)$$

donde  $K \equiv \sqrt{k_{\perp}^2 + m^2}$ , de manera que la energía del sistema puede escribirse como  $E_{\mathbf{k}n} = nK$ . La ecuación (51) se simplifica a

$$\Omega_n(\mathbf{k}) = \frac{n}{2} \frac{m}{(k_{\perp}^2 + m^2)^{3/2}} \mathbf{e}_z. \quad (56)$$

Para calcular la fase de Berry, supongamos que estamos a potencial químico finito  $\mu$ , pero mayor que la brecha  $m$ . Nótese que aunque no hemos incluido el potencial químico directamente en el Hamiltoniano, la curvatura de Berry permanece igual pues se trata de un término con entradas diagonales, de manera que los eigenestados no cambian. Para calcular la fase, debemos integrar entonces la curvatura de Berry sobre la superficie de Fermi. Esto define un valor de corte para el momento transversal que es:  $k_F = \sqrt{\mu^2 - m^2}$ . De esta manera obtenemos

$$\begin{aligned} \gamma_+ &= \oint_S \Omega_+(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{S}_z = \frac{1}{2} \oint_S \frac{m}{(k_{\perp}^2 + m^2)^{3/2}} \mathbf{e}_z \cdot d\mathbf{S}_z = \pi m \int_0^{k_F} \frac{k_{\perp} dk_{\perp}}{(k_{\perp}^2 + m^2)^{3/2}} \\ &= -\pi \left( 1 - \frac{m}{\sqrt{k_F^2 + m^2}} \right). \end{aligned} \quad (57)$$

Se observa que, cuando  $k_F \gg m$ , se obtiene que

$$\gamma_+ \approx -\pi \left( 1 - \frac{m}{k_F} \right). \quad (58)$$

Se observa que la fase de Berry en la fase sin brecha, es decir  $m = 0$ , es exactamente  $\pi$ . En la fase sin brecha la fase de Berry adquiere una contribución que depende del cociente entre la masa  $m$  y el momento de Fermi  $k_F$ , de manera que cuando el momento es muy grande, la fase de Berry es cercana (pero no igual) a  $\pi$ .

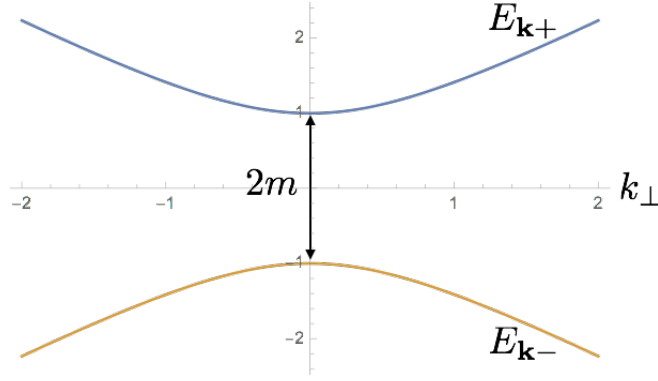


Figure 3: Relación de dispersión del modelo.

Los anteriores fueron ejemplos de cálculo de la curvatura de Berry en algunos sistemas, pero todavía no hemos discutido porqué éstos son topológicos. Eso quedará claro más adelante en el curso.

En lo que resta de esta unidad, vamos a estudiar algunas consecuencias físicas de la fase de Berry. Para hacerlo, son de fundamental importancia las siguientes preguntas: ¿Cuál es el significado de la fase de Berry de una banda? ¿Porqué  $\mathbf{k}$  debe cambiar con el tiempo?

Tenemos dos posibilidades: (i) Hamiltonianos dependientes del tiempo y (ii) movimiento de electrones en presencia de campos externos.

## VI. TRANSFERENCIA ADIABÁTICA DE CARGA EN 1D

Uno de los primeros ejemplos de los efectos de la fase de Berry en cristales es el transporte adiabático en un aislante de bandas (*band insulators*) unidimensional. Esta sección está basada en el artículo de D. Thouless [11]. Lo que Thouless encontró es que si el potencial varía lentamente en el tiempo, y es periódico después de cierto tiempo, el transporte de carga durante este ciclo puede expresarse en términos de la curvatura de Berry y está cuantizado.

### A. Corriente adiabática

Consideremos un aislante unidimensional bajo una perturbación dependiente del tiempo. El Hamiltoniano es periódico en el tiempo, esto es, satisface

$$H(k, t) = H(k, t + T). \quad (59)$$



Dado que el Hamiltoniano tiene también la simetría traslacional del cristal, sus eigenestados serán de la forma  $e^{ikx} |u_n(k, t)\rangle$ . En la representación de momentos,  $H(k, t)$  y  $|u_n(k, t)\rangle$  están definidos sobre un toro, pues  $k$  y  $t$  son periódicos e independientes, de manera que pueden tratarse en pie de igualdad.

La evolución adiabática de la función de onda, dejando de lado los factores de fase globales, es

$$|\phi_n(k, t)\rangle = |u_n(k, t)\rangle - i\hbar \sum_{n' \neq n} \frac{|u_{n'}(k, t)\rangle \langle u_{n'}(k, t)| \partial_t u_n(k, t) / \partial t}{E_{kn} - E_{kn'}}. \quad (60)$$

La derivación de este resultado puede verse en el apéndice. Ya sabemos que el operador de velocidad en la representación  $k$  es  $\mathbf{v}_{\mathbf{k}s} = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}s}$ , de manera que en este caso

$$\hat{v}(k, t) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H(k, t)}{\partial k}. \quad (61)$$

La velocidad promedio en un estado con una  $k$  dada es, a primer orden,

$$\begin{aligned} v_n(k, t) &= \langle \phi_n(k, t) | \hat{v}(k, t) | \phi_n(k, t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle u_n(k, t) | \partial_k H | u_n(k, t) \rangle \\ &\quad - i \sum_{n' \neq n} \left\{ \frac{\langle u_n(k, t) | \partial_k H | u_{n'}(k, t) \rangle \langle u_{n'}(k, t) | \partial_t u_n(k, t) \rangle}{E_{kn} - E_{kn'}} - \text{c.c.} \right\}, \end{aligned} \quad (62)$$

donde c.c. denota complejo conjugado. Esta expresión puede simplificarse usando el resultado (26), que en este caso se lee como

$$(E_{kn} - E_{kn'}) \langle \partial_k u_n(k, t) | u_{n'}(k, t) \rangle = \langle u_n(k, t) | \partial_k H | u_{n'}(k, t) \rangle. \quad (63)$$

Sustituyendo este resultado y la relación de completitud  $\sum_{n'} |u_{n'}(k, t)\rangle \langle u_{n'}(k, t)|$ , la velocidad promedio puede escribirse como

$$v_n(k, t) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{kn}}{\partial k} - i \left[ \langle \partial_k u_n(k, t) | \partial_t u_n(k, t) \rangle - \text{c.c.} \right] \quad (64)$$

El segundo término es exactamente el tensor de Berry  $\Omega_{qt}^n$ , a como se definió en la ec. (20).

De esta manera, la velocidad (64) puede escribirse en la forma:

$$v_n(k, t) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{kn}}{\partial k} - \Omega_{qt}^n. \quad (65)$$

Integrando la velocidad en la zona de Brillouin, el primer término (que depende de la derivada de la energía de las bandas) produce un cero, de manera que sólo sobrevive el término que depende de la curvatura de Berry. De esta manera, la corriente adiabática inducida es:

$$j = - \sum_n \int_{\text{Z.B.}} \frac{dq}{2\pi} \Omega_{qt}^n, \quad (66)$$

donde la suma se realiza sobre las bandas llenas. Este resultado es sumamente interesante, pues nos dice que la corriente adiabática inducida por un Hamiltoniano que depende del tiempo es igual a la integral en la zona de Brillouin de la curvatura de Berry.

### B. Transporte adiabático cuantizado

Vamos a considerar el transporte para la banda  $n$  en un ciclo completo, esto es:

$$c_n = - \int_0^T dt \int_{\text{z.B.}} \frac{dq}{2\pi} \Omega_{qt}^n. \quad (67)$$

Como el Hamiltoniano es periódico en  $q$  y  $t$ , el espacio de parámetros de  $H(q, t)$  es un toro  $\mathbb{T}^2$ . De acuerdo a la definición (49),  $2\pi c_n$  corresponde a la fase de Zak sobre el toro. Para evaluar la integral de superficie, podemos mapear el toro a un rectángulo, como se muestra en la figura 4, y utilizar el teorema de Stokes. Introduciendo las coordenadas  $x = t/T$  y  $y = qa/2\pi$ , la integral de la ec. (67) puede expresarse como:

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_n \cdot d\mathbf{l}, \quad (68)$$

donde  $\mathcal{C}$  es el contorno del rectángulo. Los vértices del rectángulo son  $A = (0, 0)$ ,  $B = (1, 0)$ ,  $C = (1, 1)$  y  $D = (0, 1)$ . Por lo tanto, la integral (68) puede escribirse como:

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{2\pi} \left[ \int_A^B A_x^n(x, 0) dx + \int_B^C A_y^n(1, y) dy + \int_C^D A_x^n(x, 1) dx + \int_D^A A_y^n(0, y) dy \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^1 [A_x^n(x, 0) - A_x^n(x, 1)] dx - \int_0^1 [A_y^n(0, y) - A_y^n(1, y)] dy \right\}. \end{aligned} \quad (69)$$

Debido a la periodicidad de los estados de Bloch,  $|u(x, 1)\rangle$  y  $|u(x, 0)\rangle$ , y  $|u(0, y)\rangle$  y  $|u(y, 1)\rangle$ , describen estados físicamente equivalentes, de manera que éstos pueden diferir a lo más en una fase, esto es:

$$|u_n(x, 0)\rangle = e^{i\theta_x^n(x)} |u_n(x, 1)\rangle, \quad |u_n(0, y)\rangle = e^{i\theta_y^n(y)} |u_n(1, y)\rangle. \quad (70)$$

Usando este resultado se obtiene mediante cálculo directo que

$$A_x^n(x, 0) - A_x^n(x, 1) = \partial_x \theta_x(x), \quad A_y^n(0, y) - A_y^n(1, y) = \partial_y \theta_y(y), \quad (71)$$

de manera que

$$c_n = \frac{1}{2\pi} [\theta_x(1) - \theta_x(0) + \theta_y(0) - \theta_y(1)]. \quad (72)$$

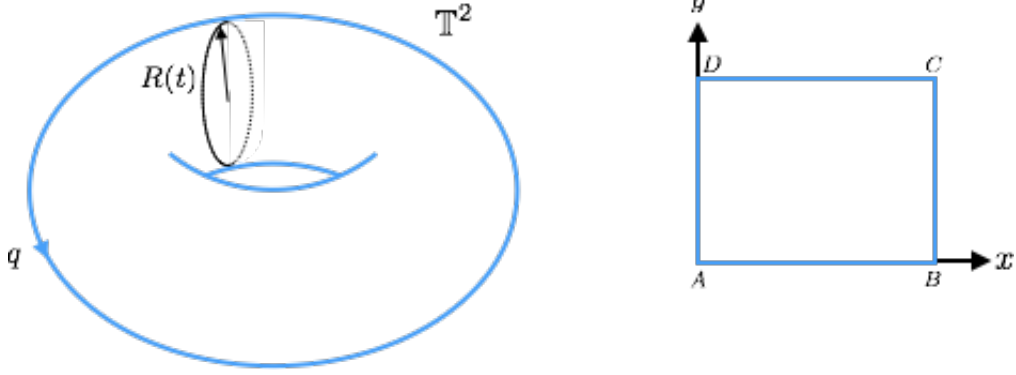


Figure 4: Zona de Brillouin sobre un toro. Izquierda: toro paramterizado por  $(q, t)$ . Derecha: equivalencia del toro sobre un rectángulo con condiciones de borde periódicas.

Usando la relación entre los estados en las esquinas del cuadrado se obtienen las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} |u_n(1, 0)\rangle &= e^{i\theta_x^n(1)} |u_n(1, 1)\rangle, & |u_n(0, 0)\rangle &= e^{i\theta_x^n(0)} |u_n(0, 1)\rangle, \\ |u_n(0, 0)\rangle &= e^{i\theta_y^n(0)} |u_n(1, 0)\rangle, & |u_n(0, 1)\rangle &= e^{i\theta_y^n(1)} |u_n(1, 1)\rangle, \end{aligned} \quad (73)$$

que podemos combinar para obtener

$$|u_n(0, 0)\rangle = e^{i[\theta_x(1) - \theta_x(0) + \theta_y(0) - \theta_y(1)]} |u_n(0, 0)\rangle. \quad (74)$$

Dado que los estados son univaluados, este resultado implica que la fase debe ser un múltiplo entero de  $2\pi$ . Por lo tanto,

$$c_n = m, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (75)$$

Esto también implica que el flujo de la curvatura de Berry a través del toro está cuantizado. Noten que en esta derivación no se hizo referencia a ningún modelo particular del Hamiltoniano, de manera que la cuantización del número de Chern será cierta siempre que el Hamiltoniano sea periódico en el tiempo.

### Appendix A: Fórmula para la curvatura de Berry

Vemos que la fórmula (28) requiere de los elementos de matriz del gradiente del Hamiltoniano, esto es  $\langle n'(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} | n(\mathbf{R}) \rangle$ , de manera que vamos a calcularlos. El gradiente del Hamiltoniano es

$$\partial_i \hat{H} = (\partial_i h_0) \sigma_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \partial_i \mathbf{h}. \quad (\text{A1})$$

Calculando los elementos de matriz de la expresión anterior obtenemos

$$\langle n'(\mathbf{R}) | \partial_i \hat{H} | n(\mathbf{R}) \rangle = \partial_i \mathbf{h} \cdot \langle n'(\mathbf{R}) | \boldsymbol{\sigma} | n(\mathbf{R}) \rangle, \quad (\text{A2})$$

donde se uso que  $\langle n'(\mathbf{R}) | \sigma_0 | n(\mathbf{R}) \rangle = 0$  debido a la ortogonalidad de los eigenestados. Sustituyendo (A2) en (28) se obtiene

$$\Omega_n^i(\mathbf{k}) = i \sum_{n' \neq n} \frac{\epsilon^{ijk} \partial_j h_l \langle n(\mathbf{R}) | \sigma_l | n'(\mathbf{R}) \rangle \partial_k h_m \langle n'(\mathbf{R}) | \sigma_m | n(\mathbf{R}) \rangle}{(E_n - E_{n'})^2} \quad (\text{A3})$$

Sin embargo, como la energía está dada por  $E_n(\mathbf{R}) = h_0 + nh$ , es claro que  $E_n - E_{n'} = h(n - n')$  y  $n - n' = \pm 2$ , por lo tanto la expresión para la curvatura (A3) se reduce a

$$\Omega_n^i(\mathbf{k}) = i \frac{\epsilon^{ijk} \partial_j h_l \partial_k h_m}{4h^2} \sum_{n' \neq n} \langle n(\mathbf{R}) | \sigma_l | n'(\mathbf{R}) \rangle \langle n'(\mathbf{R}) | \sigma_m | n(\mathbf{R}) \rangle. \quad (\text{A4})$$

Usando la relación de completez de los eigenestados obtenemos

$$\Omega_n^i(\mathbf{k}) = i \frac{\epsilon^{ijk} \partial_j h_l \partial_k h_m}{4h^2} \langle n(\mathbf{R}) | \sigma_l \sigma_m | n(\mathbf{R}) \rangle. \quad (\text{A5})$$

Para calcular el valor esperado que ha resultado, comenzamos por usar la identidad  $\sigma_l \sigma_m = \delta_{lm} \sigma_0 + i \epsilon_{lmn} \sigma_n$  de las matrices de Pauli. De esta manera se obtiene

$$\Omega_n^i(\mathbf{k}) = i \frac{\epsilon^{ijk} \partial_j h_l \partial_k h_m}{4h^2} \left( \delta_{lm} + i \epsilon_{lms} \langle n(\mathbf{R}) | \sigma_s | n(\mathbf{R}) \rangle \right). \quad (\text{A6})$$

Usando la antisimetría del tensor de Levi-Civita vemos que el primer término es cero, de manera que sólo nos preocupamos por el segundo, que contiene el término  $\langle n(\mathbf{R}) | \sigma_s | n(\mathbf{R}) \rangle$ .

Para calcular esta valor esperado proponemos el ansatz

$$\langle n(\mathbf{R}) | \sigma_s | n(\mathbf{R}) \rangle = \alpha h_s, \quad (\text{A7})$$

donde  $\alpha$  es una variable a determinar. Para hacerlo, multiplicamos por  $h_{sn}$  y sumamos los índices, esto es:

$$\langle n(\mathbf{R}) | h_s \sigma_s | n(\mathbf{R}) \rangle = \alpha h_s h_s \implies \langle n(\mathbf{R}) | \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma} | n(\mathbf{R}) \rangle = \alpha h^2. \quad (\text{A8})$$

Sin embargo, del Hamiltoniano (29) sabemos que  $n\mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \hat{H} - h_0\sigma_0$ . Por lo tanto

$$n \langle n(\mathbf{R}) | \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma} | n(\mathbf{R}) \rangle = \langle n(\mathbf{R}) | \hat{H} - h_0\sigma_0 | n(\mathbf{R}) \rangle = E_n(\mathbf{k}) - h_0 = nh. \quad (\text{A9})$$

Comparando este resultado con la ec. (A8) concluimos que  $\alpha = s/h$ . Por lo tanto

$$\langle n(\mathbf{R}) | \sigma_s | n(\mathbf{R}) \rangle = n \frac{h_s}{h}, \quad (\text{A10})$$

y sustituyendo este resultado en la ec. (A6) obtenemos

$$\Omega_n^i(\mathbf{k}) = n \frac{\epsilon^{lms} \epsilon^{ijk} h_s \partial_j h_l \partial_k h_m}{4h^3}. \quad (\text{A11})$$

En notación vectorial este resultado establece la ec. (35).

## Appendix B: Teoría de perturbaciones adiabática

Consideremos un Hamiltoniano  $\hat{H}(t) = \hat{H}[\mathbf{R}(t)]$  que depende del tiempo a través de los parámetros  $\mathbf{R}$ , que para los propósitos de este curso tomamos como el momento cristalino en la zona de Brillouin  $\mathbb{T}^2$ . Consideremos ahora un proceso adiabático en el que  $\mathbf{R}(t)$  varía lentamente en el tiempo. La función de onda del sistema  $|\psi(t)\rangle$  debe satisfacer la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (\text{B1})$$

Como se vio en el texto, siempre que la variación sea lenta, un eigenestado seguirá siendo eigenestado pero adquirirá una fase:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} |n, \mathbf{R}(t)\rangle, \quad (\text{B2})$$

donde  $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$  es un estado propio instantáneo del Hamiltoniano, es decir, satisface  $\hat{H}[\mathbf{R}(t)] |n, \mathbf{R}(t)\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n, \mathbf{R}(t)\rangle$  y las fases son

$$\theta_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n[\mathbf{R}(t')] dt', \quad \gamma_n(t) = -i \int_0^t \langle n, \mathbf{R}(t') | \partial_{t'} | n, \mathbf{R}(t') \rangle dt'. \quad (\text{B3})$$

Expandiendo la función de onda (B1) usando los eigenestados instantáneos (B2) obtenemos

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n e^{-i\theta_n(t)} a_n(t) |n, \mathbf{R}(t)\rangle. \quad (\text{B4})$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación de Schrödinger (B1) se obtiene

$$i\hbar \sum_n e^{-i\theta_n(t)} \left[ -i\dot{\theta}_n a_n(t) |n, \mathbf{R}(t)\rangle + \dot{a}_n(t) |n, \mathbf{R}(t)\rangle + a_n(t) \partial_t |n, \mathbf{R}(t)\rangle \right] = \sum_n e^{-i\theta_n(t)} a_n(t) E_n[\mathbf{R}(t)] |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (\text{B5})$$

y cerrando con el bra  $\langle l, \mathbf{R}(t) |$  obtenemos

$$\dot{a}_n(t) = - \sum_l a_l(t) e^{i[\theta_l(t) - \theta_n(t)]} \langle l, \mathbf{R}(t) | \partial_t |n, \mathbf{R}(t)\rangle. \quad (\text{B6})$$

Hasta aquí, no hemos hecho ninguna elección sobre la fase de los eigenestados instantáneos. Para nuestros propósitos, resulta conveniente imponer la condición de transporte paralelo:

$$\langle n, \mathbf{R}(t) | \partial_t |n, \mathbf{R}(t)\rangle = \dot{\mathbf{R}}(t) \cdot \langle n, \mathbf{R}(t) | \nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}(t)\rangle = 0. \quad (\text{B7})$$

A los estados elegidos de esta manera los denotamos por  $|\tilde{n}, \mathbf{R}(t)\rangle$ . Nótese que esta elección es distinta de la que se eligió antes, donde se requería que la función de onda sea univaluada. De hecho, la elección (B7) no garantiza que los estados  $|\tilde{n}, \mathbf{R}(t)\rangle$  están unívocamente determinados como función del tiempo, sino que puede ser una función multivaluada de  $\mathbf{R}$ . Para una trayectoria cerrada en el espacio de parámetros, la diferencia de fase  $\gamma_n$  entre los estados inicial y final es precisamente la curvatura de Berry, esto es,  $|\tilde{n}, \mathbf{R}(0)\rangle = e^{i\gamma_n} |\tilde{n}, \mathbf{R}(T)\rangle$ .

En el límite  $\dot{\mathbf{R}} \rightarrow \mathbf{0}$  tenemos que a orden cero:

$$\dot{a}_n(t) = 0. \quad (\text{B8})$$

Por lo tanto, si el sistema está inicialmente en el  $n$ -ésimo eigenestado, permanecerá en ese estado para todo  $t$ . Este es justo el **teorema adiabático cuántico**. Ahora consideremos la corrección de primer orden. Tenemos que  $a_n(0) = 1$  y  $a_{n'}(0) = 0$  para  $n' \neq n$ . Para el  $n$ -ésimo estado, aún tendremos que  $\dot{a}_n(t) = 0$ , de manera que  $a_n(t) = 1$ . Sin embargo, para  $n' \neq n$ ,

$$\dot{a}_{n'}(t) = -e^{i[\theta_n(t) - \theta_{n'}(t)]} \langle n', \mathbf{R}(t) | \partial_t |n, \mathbf{R}(t)\rangle. \quad (\text{B9})$$

El factor exponencial oscila, mientras que el coeficiente varía lentamente en el tiempo. Esto nos permite integrar el resultado anterior para obtener

$$a_{n'} = - \frac{\langle n', \mathbf{R}(t) | \partial_t |n, \mathbf{R}(t)\rangle}{E_n - E_{n'}} i\hbar e^{i[\theta_n(t) - \theta_{n'}(t)]}. \quad (\text{B10})$$

De esta manera, el estado del sistema incluyendo la aproximación de primer orden es:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'} \left[ |n, \mathbf{R}(t)\rangle - i\hbar \sum_{n' \neq n} |n', \mathbf{R}(t)\rangle \frac{\langle n', \mathbf{R}(t) | \partial_t | n, \mathbf{R}(t) \rangle}{E_n - E_{n'}} \right]. \quad (\text{B11})$$


---

- [1] M. V. Berry, Proc. R. Soc. London Ser. A 392, 45 (1984).
- [2] D. Culcer, A. MacDonald, and Q. Niu, Phys. Rev. B 68, 045327 (2003).
- [3] C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, Physical Review Letters 101(14), 146802 (2008).
- [4] M. J. Rice, and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. 49, 1455 (1982).
- [5] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Phys. Rev. Lett. 42, 1698 (1979).
- [6] S. Onoda, S. Murakami, and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. 93, 167602 (2004).
- [7] D. Vanderbilt, and R. D. King-Smit, Phys. Rev. B 48, 4442 (1993).
- [8] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 61, 2015 (1988).
- [9] G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. 53, 2449 (1984).
- [10] C. Zhang, A. M. Dudarev, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. 97, 040401 (2006).
- [11] D. J. Thouless, Quantization of particle transport, Phys. Rev. B27, 6083 (1983)