

上讲回顾：近自由电子近似

- 近自由电子近似的数学

- * Bloch定理推论一，Bloch函数是周期性调幅平面波
- * 调幅函数既然是实空间的周期函数，在倒空间展开

$$u(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad u(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{K}} c(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}$$

- * 这样Bloch函数成（平面波——近自由电子方法）

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} c(\mathbf{k}, \mathbf{K}) e^{i(\mathbf{K} + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}}$$

$$c(\mathbf{K}) = \frac{1}{V} \int_V V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

- 近自由电子近似的物理

- * 对 $V \neq 0$ ，逐步加入微扰
- * 对 \mathbf{K} 求和， \mathbf{K} 由小到大，取遍使 $V(\mathbf{K}) \neq 0$ 的平面波
- * $(\mathbf{k} + \mathbf{K})$ 对自由电子是动量算符的本征值 \rightarrow 电子动量

本讲目的：什么是绝缘？

1. 绝缘的本质是什么？
2. 现代极化理论与能带理论的结合？

第18讲、专题三，绝缘的本质

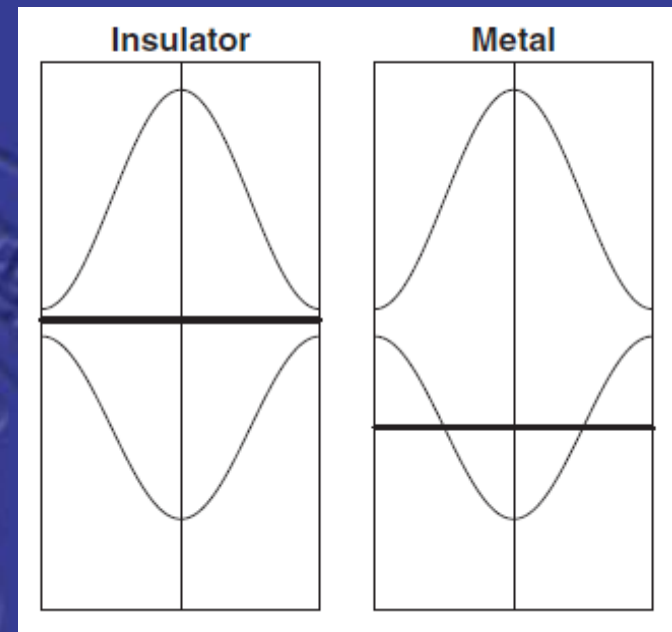
1. 能隙绝缘
2. Mott绝缘
3. Anderson绝缘
4. 绝缘的本质
5. 极化的宏观与微观

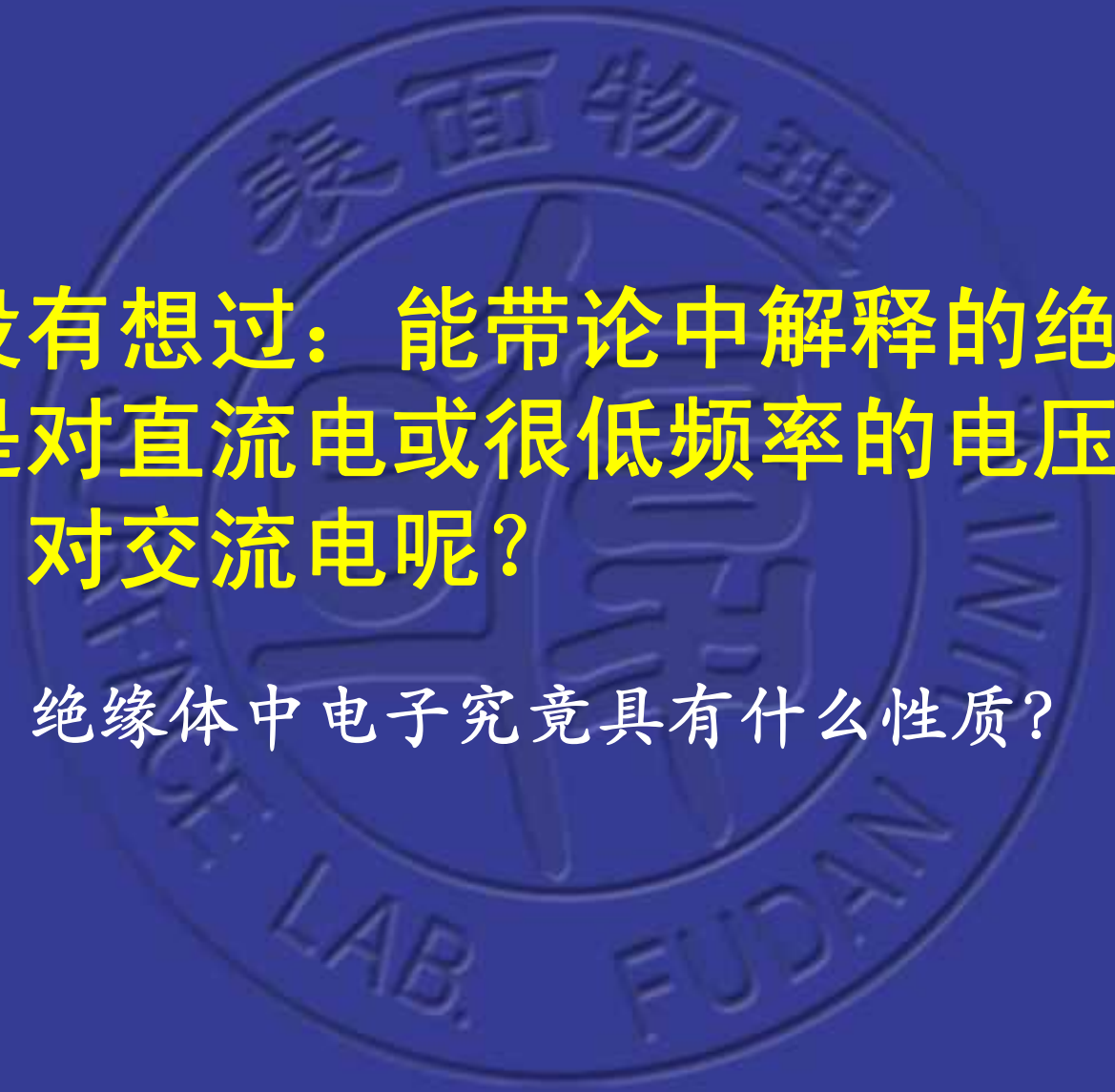
与阎守胜教材中9.1.1和12.2.2节的内容有关，
即Mott绝缘体和Anderson绝缘体，两者都不
涉及绝缘的本质

- * 但本讲目的主要是关于绝缘本质这个问题
- * 主要得益于Berry Phase发现（1984）

1、能隙绝缘

- 教科书能带论对绝缘体的解释
 - * 由费米能级附近的能带结构决定
 - # 未填满带电子整体移动是导体
 - # 绝缘体能带理论解释的关键
 - † 能隙的存在和满带不导电
 - † 在外电场下，电子从边界出布里渊区，又从另一端进，电子因而没有整体移动
- 实验与理论不符→Mott绝缘体！（1949年）
 - * 一些过渡金属氧化物，MnO、NiO、CoO
 - # 能带理论预言是金属，而实验发现是绝缘体
 - # 假想实验：单价原子晶体，如果晶格常数逐渐增大，还是金属吗？



The background features a large, faint, circular logo of the Fudan University Surface Physics Lab. The logo contains the text "表面物理" (Surface Physics) at the top, "FUDAN UNIVERSITY" around the bottom, and "SURFACE LAB" in the center.

有没有想过：能带论中解释的绝缘完全是对直流电或很低频率的电压而言！对交流电呢？

绝缘体中电子究竟具有什么性质？

能带论解释的评论

- 追究→能带理论→Bloch定理→三大近似
 - 1、绝热近似
 - 2、单电子近似
 - 3、周期性势场近似
- 能带理论中绝缘=能隙的解释并非普遍适用
 - * 单电子近似不满足→Mott绝缘体(关联)
 - * 周期性势场不满足→Anderson绝缘体(无序)

究竟什么是绝缘体？

先看Mott绝缘体和Anderson绝缘体

2、Mott绝缘体→关联→单电子近似

- 由Bloch定理，可以得到：
 - * 电子在晶体中是共有化的，许多能级形成能带
 - * 能带被电子填充至半满→金属
 - * 能带被电子填充至全满，费米能级以上全空，并且占据和非占据能带之间有能隙→绝缘体或半导体
- 做假想实验
 - * 想象碱金属原子形成晶体，每个原胞一个原子，每个原子一个电子，一个电子填充能带半满→导体
 - * 现在，保持该晶体的平移周期性，并拉开原子距离，即让晶格常数慢慢地变大，直至原子间无作用
 - * 晶体的电子态性质会发生什么变化？

对Bloch定理的挑战！

- 晶格常数很大时能带会发生什么变化？
 - * 注意：平移周期性 $V(x)=V(x+na)$ 仍然保持
 - * 碱金属原子晶体每个原胞只有一个电子，填充情况只能半满，它还是金属吗？
 - * 当然不是！但是根据Bloch定理它却仍然是金属
- 显然，这是一系列互不相干的孤立原子的集合，那么
 - * Bloch定理还成立吗？
 - * 为什么从Bloch定理得出完全不同的结论呢？
问题出在那里呢？

问题的转换

- 如原子只有一个s电子，那么将上述问题转化为：
 - * 任一原子的最外层的轨道同时被两个电子占据或都是空的情况是不是有可能发生？
- 答案是否定的！因为这种移动需要很高的能量
 - * 相当于将电子从一个原子电离，再放到另一原子上
 - * 这需要能量，电离能减去亲和能，不可能自然发生！
- 但对于 **Bloch** 电子，这却是可能的！为什么？
 - * 因为单电子势场是所有电子(离子)的平均势场
 - # 因此，对所有电子来说都相同的势场！不区分一个原子轨道被占据还是未被占据
- 设问：单电子近似究竟扮演什么角色？

单电子近似究竟以何方式影响方程的解？

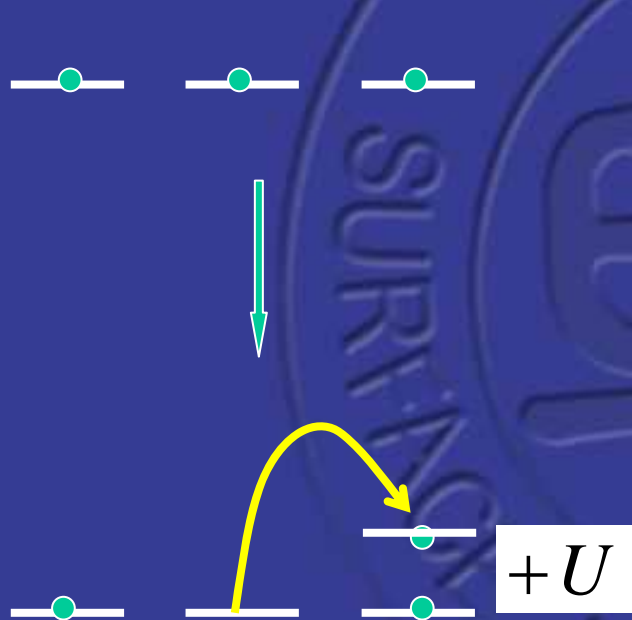
- Bloch定理所依赖的单电子近似对所研究的问题的实际影响
 - * 对单电子薛定谔方程，其解不止一个电子能级(能带)，但讨论单电子方程得到的能带时，并无限制只有一个电子填充能带！
 - # 这样做对不对？为什么？
- 在方程中，其他所有电子对这个单电子的库仑作用是经过平均的，而且也包含该单电子本身
 - * 这样，原本 N (所研究系统的电子总数)个电子应该有 N 个联立方程，由于势能采用对所有电子进行平均，现在都是相同的
 - 因此，当一个电子填充某个能级时，与该能级以下的能级是否已经被电子占据无关，它们的势能是一样的 → 没有**关联**(相对于强关联)

问题在单电子近似！

- 两个电子挤在一个原子上需要的克服排斥能，但是Bloch定理却没有考虑，这就是关联
- 问题在单电子近似，在关联能！
 - * ——Bloch定理无疑是正确的，不容挑战的！但它的适用条件是单电子近似！
 - * 如果关联过强的话，单电子近似在一定的条件下可能不成立！
- 当一个电子从一个局域轨道运动到另一局域轨道时，必须考虑后一轨道是已被占据还是空
- 如已占据，则应当计入库仑排斥能
 - * 显然在单电子近似中没有考虑库仑排斥能
 - * 这一库仑排斥相互作用使能带状态发生变化

何为电子关联?

- 每个原子轨道可填充两个电子，如果该轨道上原来已有一个电子，对第二个电子有排斥作用



- * 因此，两个电子占据同一轨道需要克服这一排斥，需能量 U

- 左图画成两个不同的能级

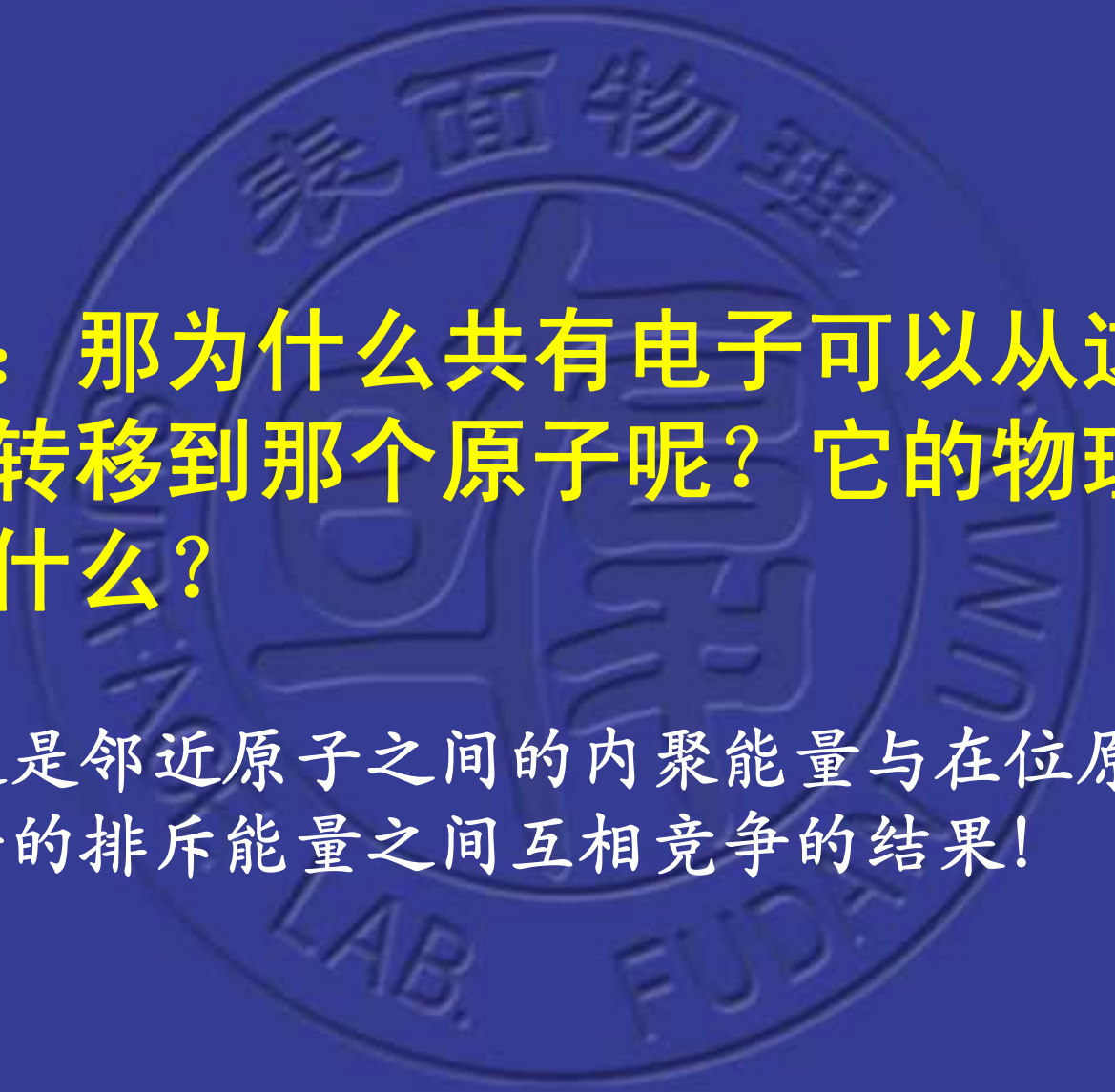
- * 单电子近似不是这样：表示成同一能级不同自旋是两个不同状态，可以被两个电子占据，但那样没有表示出所需能量 U

- 这就是说，单电子理论没有考虑这种电子关联：每个电子处于任何位置的几率相等，与该位置是否已有电子占据无关

定性分析——Mott转变

- Mott绝缘体

- * 在一定的条件下，一个基态是绝缘体的晶体，如果忽略关联能，则可能错误地把它当作金属
- * 这样的绝缘体称为Mott绝缘体，这种金属——绝缘体的转变称为Mott转变
- * MnO 、 CoO 、 NiO 等就是这样的绝缘体
- * 高温超导大多是这种掺杂Mott绝缘体



设问：那为什么共有电子可以从这个原子转移到那个原子呢？它的物理原因是什么？

这是邻近原子之间的内聚能量与在位原子的排斥能量之间互相竞争的结果！

排斥和内聚的竞争关系

- 假想实验中的晶格常数拉大是相对的
- 问题转换成，电子为什么能和为什么不能跳跃到邻近的原子上去？
 - * 不能，因为有库仑排斥力，因为原来那里已经有电子占据了，再占据一个就需要克服排斥力
 - * 能，有一个内聚能，要看跳过去能量是否有利
- 但能和不能显然于原子间距有关！
 - * 因此，有一个于原子距离有关的量决定何时可以、何时不可以跳到邻近的原子上去



晶体内聚能量

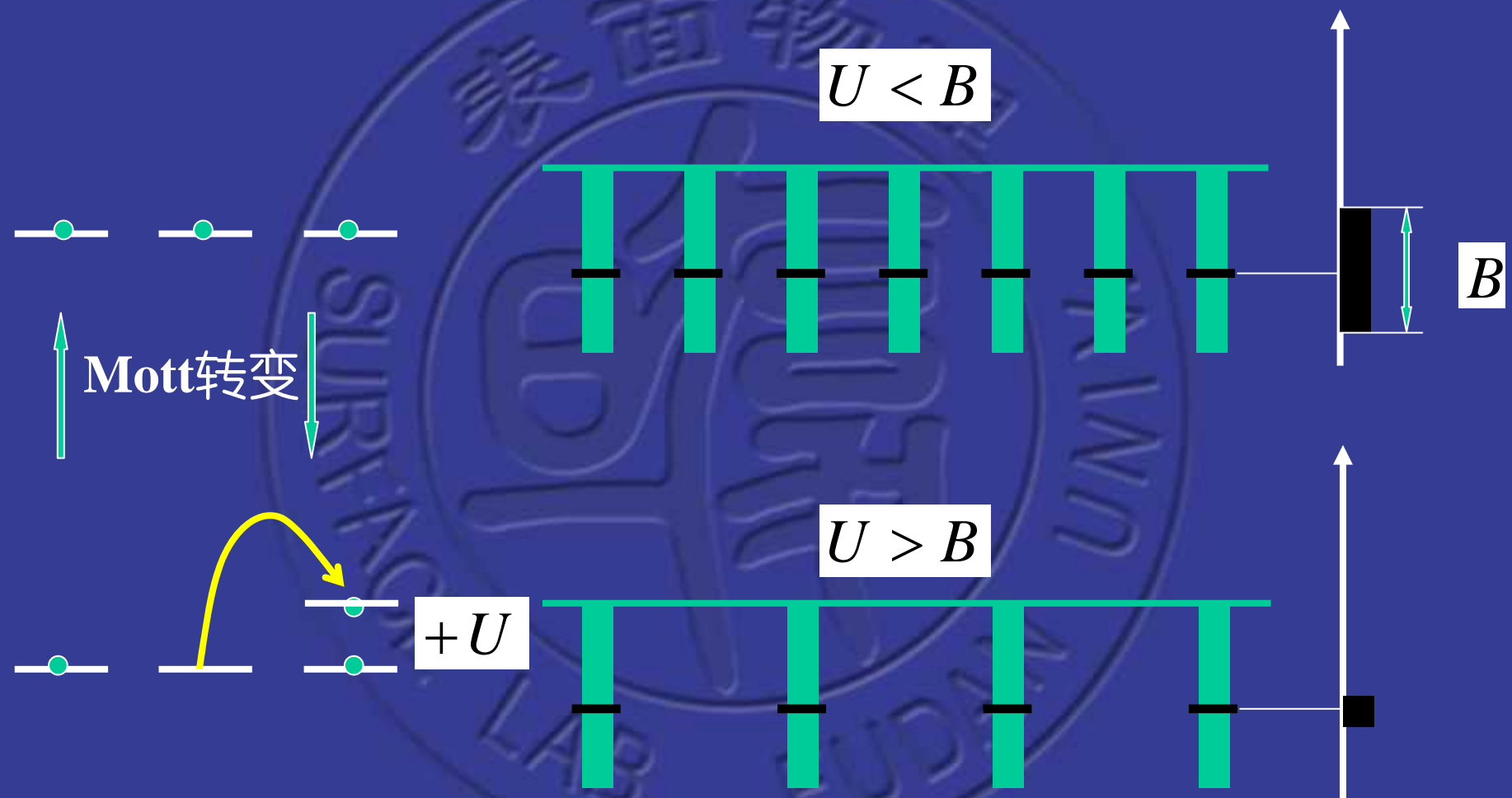


- 考察单电子孤立原子，互相靠拢形成一维晶体
 - * 原子互相靠近，孤立原子的分裂能级展宽成能带
 - * 假定能带宽度在 $-B/2$ 到 $B/2$ 的能量范围，总带宽为 B
- 电子填充能带至半满时，即从 $-B/2$ 填充到 0
 - * 电子平均能为 $-B/4$ ，即比孤立原子能级下降了 $-B/4$
 - * 也即由于原子互相靠拢，平均每个电子获能 $B/4$
- 相对于孤立原子，能级下降就是金属的内聚力
 - * 原因是波函数交迭成扩展态，平滑，因而电子动能减少（与波矢 k 有关），总能量减少
- 显然，带宽 B 与原子交叠因而与晶格常数有关
 - * $a \rightarrow \text{无穷大}, B \rightarrow 0$

Mott转变条件的估计

- 轨道全空、或单电子占据、或双电子占据的几率分别是 $1/4$ 、 $1/2$ 、 $1/4$
 - * 因此，要使单电子占据变成双电子占据或轨道全空，每个电子平均势能消耗为 $U/4$
- 退局域得到能量 $B/4$ ，局域化需能量 $U/4$ ，因此如果 $U > B$ ，将发生关联引起的局域
 - * 电子即使在周期性势场中也不再是共有化的了
- Mott转变的条件就是看 $U > B$ ，还是 $B > U$
 - * U 对原子间距不敏感。当原子间距增大，能带变窄，即 B 减小；因此 $U > B$ 时，将出现Mott转变，金属 \rightarrow 绝缘体。反之，当原子靠拢，能带变宽，即 B 增大， $B > U$ 时，将从绝缘体变为金属

Mott转变图象



The logo of the Surface Physics Lab at Fudan University is a circular emblem. It features the Chinese characters '表面物理' (Surface Physics) at the top and '复旦大学' (Fudan University) in the center. The English text 'SURFACE LAB' and 'FUDAN UNIVERSITY' are also present around the central design.

单电子近似的有效性有无规律可循？

Mott转变与电子密度的关系

- 如果电子局域在间距为 a 的格点上
 - * 势能为 $-1/a$ ，动能是多少呢？
- 这时电子的动能可以用测不准原理来估计。约束长度 a ，动量的不确定量级为 $\sim h/a$
 - * 相应的动能 $\sim 1/a^2$
- 因此，低密度极限下电子的局域标志着该区域内势能超过动能
 - * a 趋于无穷大时，即低密度时，势能占主导地位——局域态
 - * a 趋于零时，即高密度时，动能占主导地位——扩展态，可以忽略关联

准电子——单电子近似的有效性

- 那么，为什么大多数情况单电子近似有效呢？

- 电子—电子相互作用是长程作用

$$\frac{1}{r}, \text{长程作用}$$

- * 即电子并非只与它最近邻的电子产生相互作用

- * 同时受正电荷屏蔽→形成正电荷屏蔽云，裹住电子

- # →准电子：电子+正电屏蔽

- 准电子之间的相互作用不再是库仑势→屏蔽势

$$\frac{1}{r} \rightarrow \frac{e^{-r/\lambda}}{r}, \text{屏蔽长度 } \lambda = k_s^{-1} \approx n^{-1/6}$$

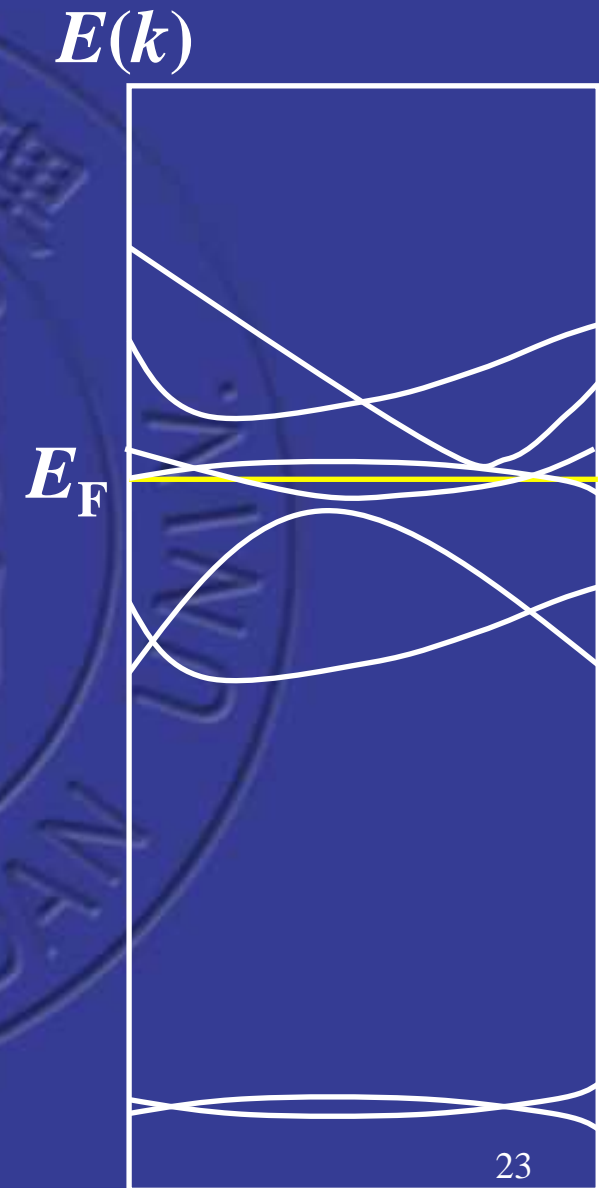
- 电子浓度越大，屏蔽效应越强，电子关联越弱

- 电子浓度降低，屏蔽效应越弱，电子关联越强

- * 金属中的准电子可以看成是相互独立的

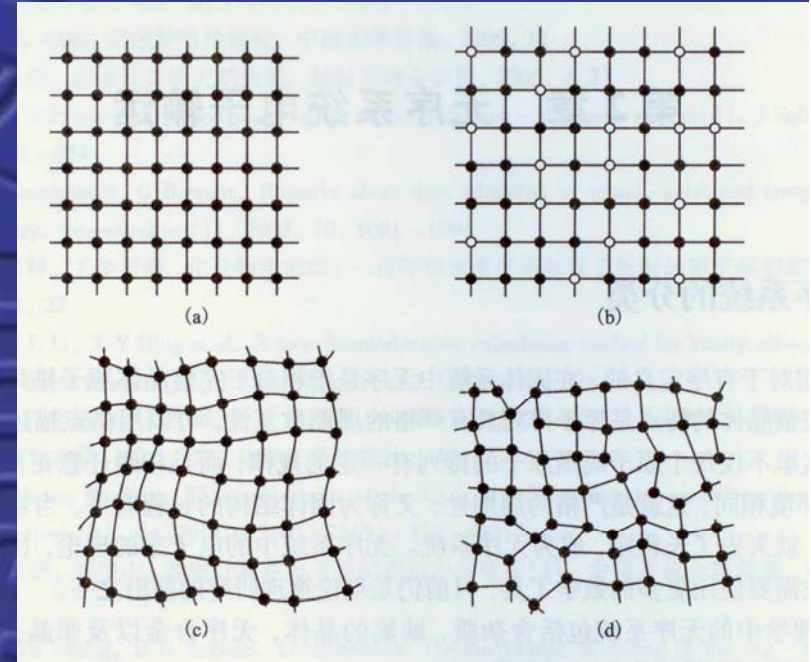
为何过渡金属氧化物会表现成Mott绝缘体？

- 过渡金属氧化物大多属Mott绝缘体，因其 d 带都穿越 E_F
 - * 过渡金属中的 d 电子是比较局域的。但基于单电子近似的能带理论也把它处理成共有电子
 - * 如这类能带在远离费米能级时，与输运性质无关，问题还不小
 - * 但如果这类能带正好跨越费米能级，则实际上费米能级附近就只有局域电子，不能参与导电，应该是绝缘体，但能带理论却给出金属能带结构→Mott绝缘体

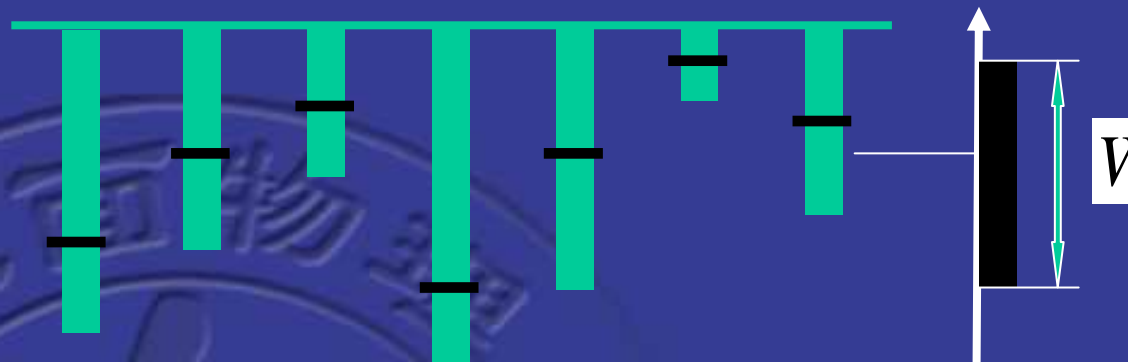


3、Anderson绝缘→ 无序

- 晶体周期性，由Bloch定理，才导致电子共有化，如果无序呢？
 - * 杂质，缺陷等都会导致周期性破缺，会在禁带中导致局域态
 - Anderson提出，无序可导致局域态
 - * 如果局域态正好处于费米能级→Anderson绝缘体！
 - 无序分类
 - * 成分无序，拓扑无序，结构无序、关联无序，等等
- <http://10.107.0.68/~jgche/> 绝缘的本质



Anderson模型



- 模型哈密顿

$$\hat{H} = \sum_{\langle i \rangle} \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} |i\rangle\langle j|$$

- * 前项是格点在位能，在 W 范围内无序变化；
 - * 后项是格点 $|i\rangle$ 与 $|j\rangle$ 之间的作用，由交迭积分 t_{ij} 决定；
 - * 仍用 B 表示有序时的带宽，对sc, $B=2zt$
- W 描写无序的量
 - * 如 $W=0$ ，则完全有序，没有局域态
 - * 如 W 不等于零，而 $t=0$ ， $B=0$ ，完全局域

W/B 的竞争

- 用一个无序参量 W/B 描写两者的竞争
 - * 如这个值很大时，全为局域态
 - * 小于一临界值时，开始出现扩展态，与局域态共存
 - * 在共存时，扩展态位于能带中心，局域态位于能带边缘
- 改变无序度，可以改变扩展态与局域态，
 - * 如使费米能级附近的扩展态边为局域态，则也有可能发生金属-绝缘体转变
- 注意Anderson模型的基础仍然是单电子模型，只是针对Bloch定理的另一个基础的偏离

有无可能用一个统一的理论解释绝缘体？

这个问题相当于，绝缘的本质是什么？

4、绝缘的本质

- Lorentz模型和Drude模型

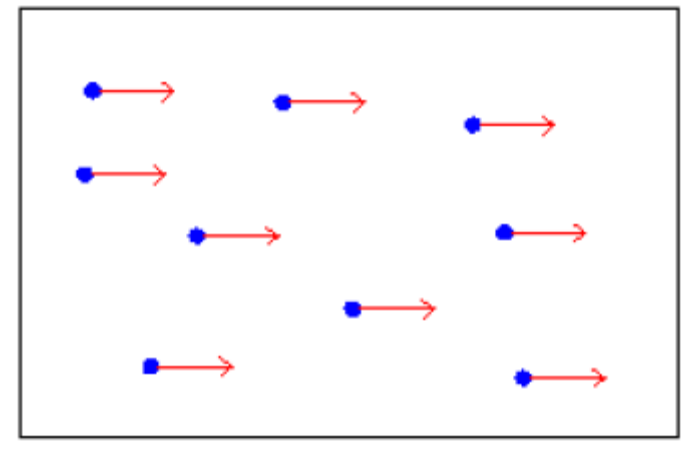
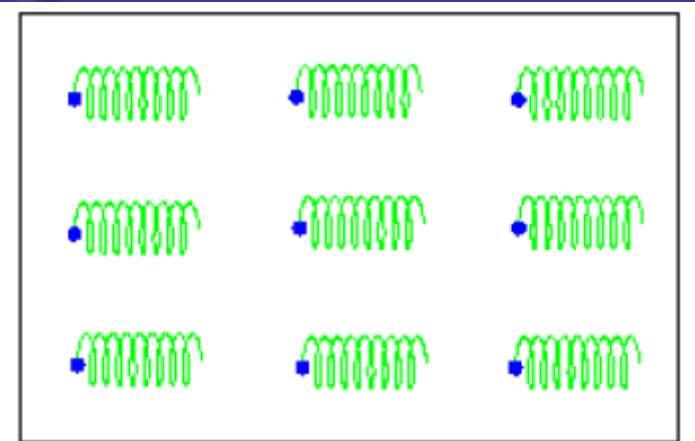
- * 上图是绝缘体。绝缘体中，电子在外场下作用下偏移，但并不自由，被核吸引，不能远离
- * 下图是导体。导体中，电子是自由的，因此有整体移动

- 重要结论：绝缘体将极化

- * 根据当时已经有一些关于绝缘体的实验现象，虽然这个模型提出更早，但比能带理论更接近于绝缘体本质——极化！

- 系在核上是什么意思？

- * 不能远离→局域！



Lorentz-Drude经典模型解释的评论

- 经典自由电子气模型在固体物理学中只提到了Drude模型
 - * 用来解释金属，并没有涉及绝缘体
- 但也有Lorentz的修正，Lorentz模型至少在两点上抓住了绝缘体的本质→微观上电子局域和宏观上绝缘体极化
 1. 极化（电子这样的偏移将产生极化，虽然不应该是每个原子极化，当时的条件并不能观察到这个具体的细节）
 2. 局域（电子被原子核系住就是电子被限制——局域！）

绝缘与局域(极化)的关系

- 与在金属中不同，在外电场下，电子在绝缘体中不能随意移动，而是产生极化
- ←现代极化理论对此给予更深刻的解释←局域
 - * 如果金属样品放进电场中，因表面电荷屏蔽，电场不能进入体内，对所有金属都是这样，因而是一个普遍现象，不是一个体内的问题，电子是广域的；
 - * 而绝缘体放进电场后，其极化与材料性质有关。电子波函数维持极化。如果体系没有中心反演对称，可观察到极化；如果中心反演对称，虽然观察不到极化，但是，与金属不同，电子波函数仍然保持确定局域性质

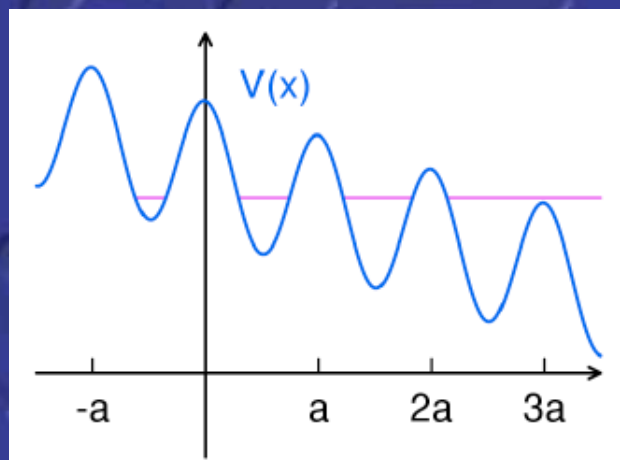
The background of the slide features a large, faint, circular logo of the Surface Physics Lab at Fudan University. The logo contains the text '表面物理' (Surface Physics) at the top, '物理' (Physics) in the center, and 'SURFACE LAB. FUDAN UNIV.' around the bottom.

能带理论中如何考虑外电场？

外电场加入能带理论会引起什么问题？

外电场引起的问题？

- 外电场使势没有周期性
 - * Bloch定理无效
 - * 传统能带理论不能用

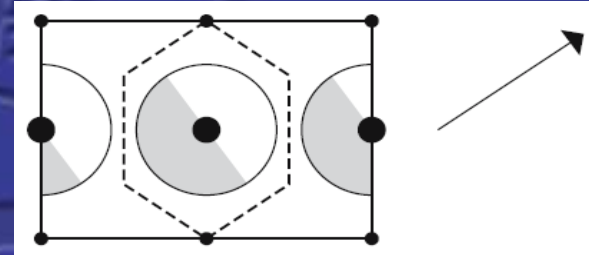


$$\mathbf{P} = \mathbf{d} / V$$

5、极化的宏观与微观

- 在极化的微观理解上一直被回避，包括能带论
 - * 因为微观定义比较困难
- 宏观定义很简单：单位体积内的平均电偶极矩
 - * 但作为一个无限伸展没有边界的晶体，如何定义？
 - * 在比如电介质内部，究竟发生了什么？
- 转变问题→实验上如何测量极化呢？
 - * 测量极化矢量的差，即多余的电荷即可

$$\mathbf{P} = \mathbf{d}_{\text{样品}} / V_{\text{样品}}$$



问，什么是极化？

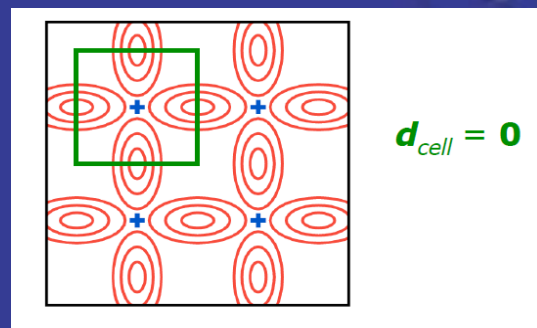
如图，是否可定义极化？

$$\mathbf{P} = \mathbf{d}_{\text{原胞}} / V_{\text{原胞}}$$

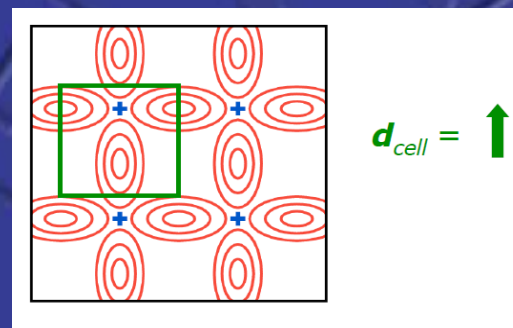
$$\mathbf{P} \propto e \sum_{n\mathbf{k}} \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \mathbf{r} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle$$

把电荷分布看作电偶极矩对晶体是错误的

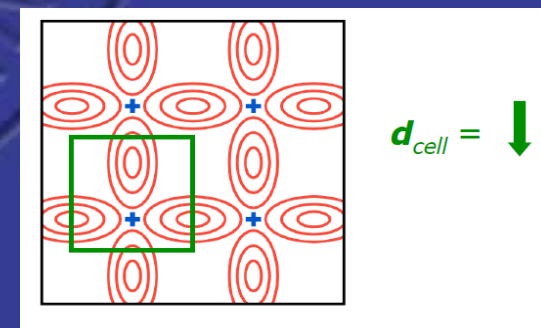
- 但在材料中的实际情况呢？并非如此，而是
 1. 周期性重复的；
 2. 互相重叠。
 - * 如图是加外电场的结果
 - # 可见在与电场箭头并行的bond区域，电荷分布是dipole的形状，似乎为其找到了根据
 - * 但实际上，如果试图作原胞区域把这个结论固定下来，就会发现困难→因为这不是唯一的



<http://10.107.0.68/~jgche/>



绝缘的本质



这个谬误的本质

$$\mathbf{P} \propto e \sum_{n\mathbf{k}} \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \mathbf{r} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle$$

- 对有限体系，可以用单电子密度定义dipole

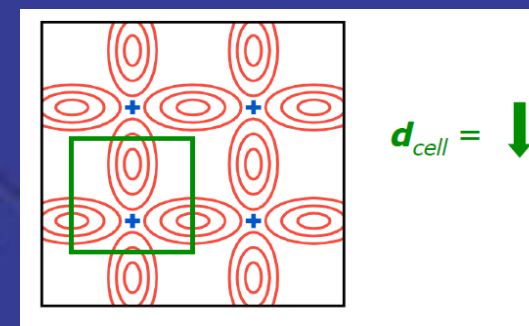
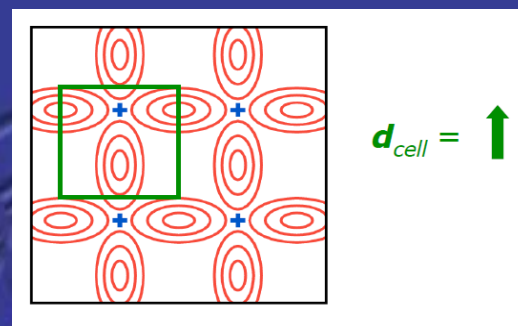
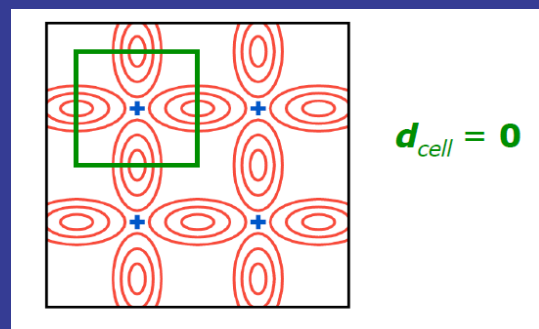
$$\mathbf{d} = e \int \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}^3$$

- * 引入位置算符

$$\hat{R} = \sum_i r_i \text{后}, \mathbf{d} = e \langle \psi | \hat{R} | \psi \rangle$$

- ✓ • 但是，这个定义对于具有循环周期性边界条件(或无限)的体系来说是没有意义的

- * 因为其解也必须满足周期性边界条件
- * 因为本质上，上面的位置 \mathbf{r} 作用于一个周期函数上，结果不再是周期函数，因此是被周期性边界条件禁止的算符，与周期边界条件不兼容



因此，微观上，不能简单地把极化归结成局域电荷分布的贡献。那，有没有其他办法来定义！

从这个例子可以看到，如有一个具有周期的量就可按原胞定义。

那，该如何定义极化呢？

1990年代早期，理论上已经认识到，极化的差是比绝对的极化更基本的量。这最终导致了极化的现代理论的诞生

如果用P的梯度来定义？

- 很容易从前面的图象中想到，从原胞无法界定因而对P不是唯一定义这个困难中，可以看出，梯度具有周期性，那么是否可以用P的梯度来定义

$$\nabla \bullet \mathbf{P}_{micro}(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r})$$

- * 也不行，因为可以附加任何常数而不改变这个梯度，所以也不是唯一的
 - * 但这个想法也并非一无是处，至少启发我们应该从P的变化上，而不是从P的绝对值上来定义P
- 看看如何测量P
 - * 也是P的差值，而不是绝对值

- 材料宏观极化的大多数实验测量并不是测量其绝对值，而是其导出量，通常表示为笛卡儿坐标系的张量，比如：介电常数 (permittivity)，热电(pyroelectric)系数，压电 (piezoelectric)张量，它们分别是

$$\chi_{\alpha\beta} = \frac{dP_{\alpha}}{dE_{\beta}}$$

$$\pi_{\alpha} = \frac{dP_{\alpha}}{dT}$$

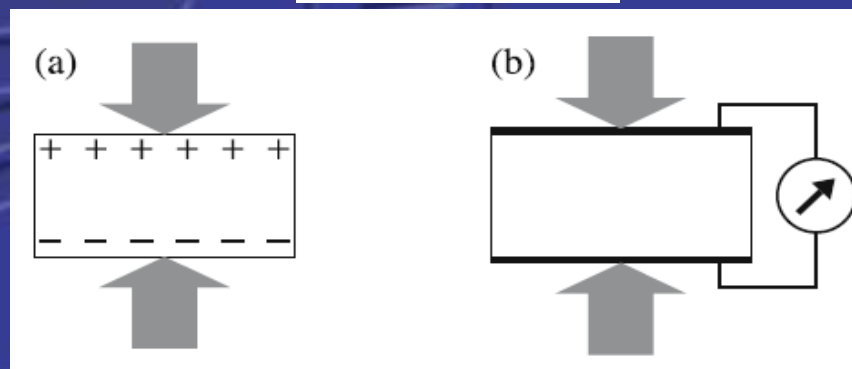
$$\gamma_{\alpha\beta\delta} = \frac{dP_{\alpha}}{d\varepsilon_{\beta\delta}}$$

* 右图是压电效应测量图

a. 压缩导致表面电荷

b. 置于电容间，测电流

表面电荷实际来自体内累积



测量电流比测量极化容易得多！

电流的时间积分给出了一个样品的宏观极化，即

$$\Delta \mathbf{P} = \mathbf{P}(\Delta t) - \mathbf{P}(0) = \int_0^{\Delta t} \mathbf{j}(t) dt$$

利用P的差定义极化

- 定义 $\mathbf{P} \propto e \int \mathbf{r} \rho(r) dr^3$
- Resta提出用电流密度来定义，也即极化矢量的变化率

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = e \int \mathbf{j}(r) dr^3$$

- * 因为 $\mathbf{r} \rho(r)$ 不是周期性的，而 $\mathbf{j}(r)$ 是周期性的
- 而计算极化矢量的变化

$$\Delta \mathbf{P} = \int \frac{d\mathbf{P}}{dt} dt$$

$$\Delta \mathbf{P} = \mathbf{P}(t_2) - \mathbf{P}(t_1)$$

- 实际上这个参数并不一定要时间 t ，可以是子晶格的移动，应变或者电场等等

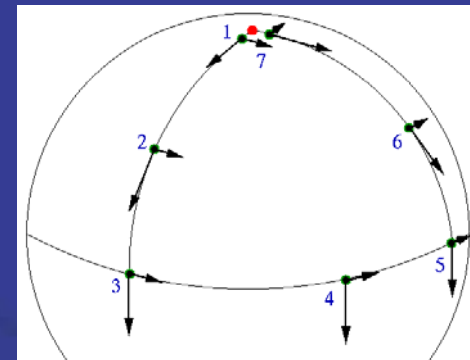
$$\Delta \mathbf{P} = \int_0^1 \frac{d\mathbf{P}}{d\lambda} d\lambda$$

- * 0和1只是初始态和末态
- 这里的关键是这个 $d\mathbf{P}/d\lambda$ 必须具有很好的体矢量的性质，也就是周期性
 - * 需要强调，对于 λ 参数的所有中间值，系统必须仍然保持绝缘性质，否则，这个瞬间性质不是唯一定义的
 - * 此外，注意对于瞬间响应而言，积分并不是必须的，因为感兴趣的物理量是在任何合适的 λ 展开而与 $d\mathbf{P}/d\lambda$ 相联系的

为什么可以这么做？

- 实际上这个问题相当于：
 - * 为什么到90年代才开始解决这个问题？
 - * 困难是什么？无限体系没有定义！
 - # 如何克服这个困难？
 - * 这期间发现了什么？
- **Berry Phase**

✓什么是Berry phase?



- 薛定谔方程的解的相位是不确定的
- 过去这个相位因不能被观察而被忽略。Berry在1984年提出：这个相位在一定条件是可观察的，不能被忽略，并有重要意义→Berry phase
 - * 一矢量沿地球表面切线指向南极移动，移动中，矢量始终与路径平行，如果沿如图的封闭路径移动，回到原来出发地方，这个矢量转动了一个方向
 - # 一自旋如始终与磁场对准，那么如磁场旋转后回原，则该自旋的量子态必然多出一个复数相因子
 - * 其原因属纯粹几何拓扑学；即它与球面的曲率有关
 - # 如果沿着平面或柱面移动，这种情况就不会出现。转动的角度与和封闭路径确定的曲率有关。

Berry phase是个可观察量

- 经常会遇到H算符与一些外参量 q 有关，量子态这样就有可能被Berry相所影响。因为

$$\phi = i \int_0^1 \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \partial_\lambda | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle d\lambda$$

- * 只要绝热近似成立，这个积分并不依赖于具体的路径。因此，类似于磁场强度，可以定义参数空间的矢势

$$A(\lambda) = i \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \partial_\lambda | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle$$

- * 可以证明，这个矢势为实数，所以Berry phase是一个可观察量

近年才产生极化理论的原因是

- 可定义多体相位算符 $\hat{U}(\kappa) = \exp(i\kappa \cdot \hat{R})$, 其中 $\hat{R} = \sum_i r_i$
 - * 这里 κ 是个矢量, 单位是长度的倒数。 κ 可以是波矢。显然, 如 κ 是 $2\pi/L$ 的整数倍。这个相位算符就是 Hilbert 空间周期性边界条件允许的算符。即本质上这个相算符是真正的多体算符, 如果用它作用在周期函数上, 得到的仍然是周期函数
- 如将 κ 选择在笛卡儿坐标系的某一方向 α , 则

$$z_N^{(\alpha)} = \langle \psi_0 | \hat{U}(\kappa^{(\alpha)}) | \psi_0 \rangle$$

- * 可以证明, 对于绝缘体, 这个相位算符的期待值的相位就是极化的 α 分量的相位, 就是 Berry phase

$$z_N^{(\alpha)} = |z_N^{(\alpha)}| e^{i\gamma_N^{(\alpha)}}, \quad \gamma_N^{(\alpha)} = \text{Im} \log z_N^{(\alpha)}$$

利用Berry phase计算极化

- 利用Berry phase,

$$\mathbf{P} = \frac{ie}{(2\pi)^3} \sum_n \int_{BZ} \langle u_{n\mathbf{k}} | i\nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle d\mathbf{k}$$

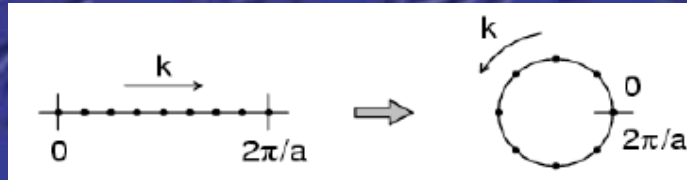
$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

* 而其中 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 就是周期性调幅函数

- 这样，进出一次Brillouin区边界，就增加一个相位，Berry phase，增加一个相因子。一个无限的问题，以这种方式转换成有限的，dipole也因此能够定义了！

一维例子

- 一维



- 和

$$i\nabla_{\mathbf{k}} \Rightarrow i \frac{d}{dk}$$

- 对一维封闭路径的Berry phase, 相位变化 2π

$$\mathbf{P} = \frac{ie}{(2\pi)^3} \sum_n \int_{BZ} \langle u_{n\mathbf{k}} | i\nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle d\mathbf{k}$$

$$\mathbf{P}_n = -\frac{e}{2\pi} \arg \prod_k \langle u_{nk} | u_{nk+\Delta k} \rangle = \frac{e}{2\pi} \phi_n$$

$$\phi_n = -\text{Im} \int \langle u_{nk} | \nabla_k | u_{nk} \rangle dk = -\text{Im} \ln \left[\langle u_{k_1} | u_{k_2} \rangle \langle u_{k_2} | u_{k_3} \rangle \langle u_{k_3} | u_{k_4} \rangle \dots \langle u_{k_{n-1}} | u_{k_n} \rangle \right]$$

本讲小结：兼答本讲目的所提问题

- 绝缘的本质是局域
 - * 绝缘体置于外电场下将引起极化
- 现代极化理论
 - * 周期结构的极化可以借助于Berry phase计算

新引入的概念

- Mott绝缘体
- Anderson绝缘体
- 电子局域与极化
- Berry Phase

习题

18. 设有二维矩形格子晶体，长、宽分别为 $a, \sqrt{3}a$ 晶体的周期势为

$$V(x, y) = -2V_0 \left(\cos \frac{2\pi}{a} x + \cos \frac{2\pi}{b} y \right)$$

- a) 画出第一、第二布里渊区；
- b) 以近自由电子近似模型求 $E(k_x, 0)$ 的第一能带与 $E(0, k_y)$ 的第二能带交迭的条件。