

Bài 5

Cấu trúc dải năng lượng: tính chất topology

Huỳnh Thanh Đức

21/10/2022

7 Tính chất topology của điện tử Bloch

- ▶ Tiến triển đoạn nhiệt lượng tử
- ▶ Thế Berry
- ▶ Pha Berry
- ▶ Độ cong Berry
- ▶ Bất biến Chern và vật liệu topology
- ▶ Hiệu ứng Hall lượng tử
- ▶ Mô hình Haldane

Tài liệu tham khảo

- D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, *Berry phase effects on electronic properties*, Rev. Mod. Phys. 82, 1959 (2010).
- D. Vanderbilt, *Berry Phases in Electronic Structure Theory* (Cambridge University Press, 2018).

VII. Tính chất topology của điện tử Bloch

Tiến triển đoạn nhiệt lượng tử

Hamiltonian một hạt mô tả điện tử trong tinh thể được cho bởi

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Hàm riêng là hàm Bloch

$$|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (2)$$

Phương trình Schrödinger dùng cho hàm Bloch $|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle$ và phần tuần hoàn của nó $|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle$ lần lượt là

$$H|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (3)$$

$$H(\mathbf{k})|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (4)$$

trong đó

$$H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) \quad (5)$$

Tiến triển đoạn nhiệt lượng tử

Giả sử $H(\mathbf{k})$ phụ thuộc thời gian do \mathbf{k} phụ thuộc thời gian $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}(t)$.
Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian là

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |w_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle = H(\mathbf{k}) |w_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle \quad (6)$$

Nếu \mathbf{k} không phụ thuộc thời gian phương trình (6) có nghiệm

$$|w_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})t} |u_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (7)$$

Nếu \mathbf{k} biến đổi chậm theo thời gian, ta mong đợi nghiệm của phương trình (6) có thể biểu diễn bởi ansatz:

$$|w_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle = \sum_{\mu} a_{\nu\mu}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} |u_{\mu\mathbf{k}}\rangle \quad (8)$$

trong đó $\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}) \equiv \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}(t))$ và $|u_{\mu\mathbf{k}}\rangle \equiv |u_{\mu\mathbf{k}(t)}\rangle$ là nghiệm của phương trình Schrödinger dừng (4) tại thời điểm tức thời t .

Tiến triển đoạn nhiệt lượng tử

Thay ansatz (8) vào phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (6), nhân trái với $\langle u_{\mu\mathbf{k}} |$ ta được phương trình cho hệ số khai triển

$$\begin{aligned}\dot{a}_{\nu\mu}(t) &= - \sum_{\lambda} a_{\nu\lambda}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})]} \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\lambda\mathbf{k}} \rangle \\ &= -a_{\nu\mu}(t) \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\mu\mathbf{k}} \rangle - \sum_{\lambda \neq \mu} a_{\nu\lambda}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})]} \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\lambda\mathbf{k}} \rangle\end{aligned}\quad (9)$$

Chú ý rằng

$$\begin{aligned}\langle u_{\mu\mathbf{k}} | \dot{H}(\mathbf{k}) | u_{\lambda\mathbf{k}} \rangle &= \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} (H(\mathbf{k}) | u_{\lambda\mathbf{k}}) \rangle - \langle u_{\mu\mathbf{k}} | H(\mathbf{k}) | \frac{\partial}{\partial t} u_{\lambda\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) | u_{\lambda\mathbf{k}}) \rangle - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}) \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\lambda\mathbf{k}} \rangle \\ &= \dot{\varepsilon}_{\lambda}(\mathbf{k}) \delta_{\mu\lambda} + [\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})] \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\lambda\mathbf{k}} \rangle\end{aligned}$$

ta có thể biểu diễn (9) dưới dạng

$$\dot{a}_{\nu\mu}(t) = -a_{\nu\mu}(t) \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\mu\mathbf{k}} \rangle - \sum_{\lambda \neq \mu} a_{\nu\lambda}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})]} \frac{\langle u_{\mu\mathbf{k}} | \dot{H}(\mathbf{k}) | u_{\lambda\mathbf{k}} \rangle}{\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})}$$

Tiến triển đoạn nhiệt lượng tử

Gần đúng đoạn nhiệt: Hamiltonian biến đổi chậm, tức là $\dot{H}(\mathbf{k})$ nhỏ.

Tại bậc không của gần đúng đoạn nhiệt ta có:

$$\begin{aligned}\dot{a}_{\nu\mu}(t) &= -a_{\nu\mu}(t) \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\mu\mathbf{k}} \rangle \quad \Rightarrow \quad \frac{da_{\nu\mu}}{a_{\nu\mu}} = -\langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\mu\mathbf{k}} \rangle dt \\ \Rightarrow a_{\nu\mu}(t) &= a_{\nu\mu}(0) \exp \left[- \int_0^t dt' \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t'} u_{\mu\mathbf{k}} \rangle \right]\end{aligned}$$

Thay $\frac{\partial}{\partial t} = \dot{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}$ ta được

$$a_{\nu\mu}(t) = a_{\nu\mu}(0) e^{i\varphi_{\mu}(t)} \quad (10)$$

trong đó φ là *pha hình học*:

$$\varphi_{\mu}(t) = i \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\mu\mathbf{k}} \rangle \quad (11)$$

Tiến triển đoạn nhiệt lượng tử

Thay (10) vào (8) ta được

$$|w_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle = \sum_{\mu} a_{\nu\mu}(0) e^{i\varphi_{\mu}(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} |u_{\mu\mathbf{k}}\rangle \quad (12)$$

Điều kiện đầu $|w_{\nu\mathbf{k}}(0)\rangle = |u_{\nu\mathbf{k}}(0)\rangle$ dẫn đến

$$a_{\nu\nu}(0) = 1 \text{ và } a_{\nu\mu \neq \nu}(0) = 0 \quad (13)$$

Như vậy, hàm sóng phụ thuộc thời gian bậc không là

$$|w_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle = e^{-\int_0^t dt' \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})} e^{i\varphi_{\nu}(t)} |u_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (14)$$

Để tính đến bậc cao hơn ta thay nghiệm bậc không (10) với điều kiện đầu (13) vào vế phải phương trình (9)

- Nếu $\mu = \nu$, ta được

$$\dot{a}_{\nu\nu}(t) = -a_{\nu\nu}(t) \langle u_{\nu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle \Rightarrow a_{\nu\nu}(t) = e^{i\varphi_{\nu}(t)}$$

Tiến triển đoạn nhiệt lượng tử

- Nếu $\mu \neq \nu$, ta được

$$\dot{a}_{\nu\mu}(t) = -e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) - \varepsilon_\mu(\mathbf{k})]} \underbrace{e^{i\varphi_\nu(t)} \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle}_{\text{biến đổi chậm}}$$

$$\Rightarrow a_{\nu\mu}(t) \simeq -\frac{i\hbar}{\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) - \varepsilon_\mu(\mathbf{k})} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) - \varepsilon_\mu(\mathbf{k})]} e^{i\varphi_\nu(t)} \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle$$

Như vậy, hàm sóng tính đến bậc một gần đúng đoạn nhiệt lượng tử là

$$|w_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_\nu(\mathbf{k})} \underbrace{e^{i\varphi_\nu(t)}}_{\text{pha động học}} \left[|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle - i\hbar \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle}{\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) - \varepsilon_\mu(\mathbf{k})} |u_{\mu\mathbf{k}}\rangle \right] \quad (15)$$

pha hình học

Thế Berry

Thế Berry (Berry potential hay Berry connection) được định nghĩa bởi

$$\mathbf{\Lambda}_\nu(\mathbf{k}) = i\langle u_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle \quad (16)$$

Thực hiện phép biến đổi gauge

$$|\tilde{u}_{\nu\mathbf{k}}\rangle = e^{i\gamma(\mathbf{k})} |u_{\nu\mathbf{k}}\rangle \quad (17)$$

thế Berry biến đổi như

$$\tilde{\mathbf{\Lambda}}_\nu(\mathbf{k}) = i\langle \tilde{u}_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{u}_{\nu\mathbf{k}} \rangle = \mathbf{\Lambda}_\nu(\mathbf{k}) - \nabla_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \quad (18)$$

→ thế Berry phụ thuộc gauge.

$$\begin{aligned} 2i \operatorname{Im} [\mathbf{\Lambda}_\nu(\mathbf{k})] &= \mathbf{\Lambda}_\nu(\mathbf{k}) - \mathbf{\Lambda}_\nu^*(\mathbf{k}) = i\langle u_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle + i\langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle \\ &= i\nabla_{\mathbf{k}} \langle u_{\nu\mathbf{k}} | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle = 0 \end{aligned}$$

→ thế Berry $\mathbf{\Lambda}_\nu(\mathbf{k})$ là thực và $\langle u_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle$ là thuần ảo.

Pha Berry

Dưới phép biến đổi gauge (17) pha hình học (11) biến đổi như

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}_\nu &= i \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \langle \tilde{u}_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{u}_{\nu\mathbf{k}} \rangle = i \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \langle u_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle - \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \langle u_{\nu\mathbf{k}} | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle \\ &= \varphi_\nu + \gamma(\mathbf{k}(0)) - \gamma(\mathbf{k}(t)) \quad \rightarrow \quad \text{pha hình học phụ thuộc gauge}\end{aligned}$$

Pha hình học theo một đường cong kín \mathcal{L} trong không gian k được gọi là *pha Berry*:

$$\phi_\nu(\mathcal{L}) = i \oint_{\mathcal{L}} d\mathbf{k} \langle u_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle \quad (19)$$

Pha Berry liên hệ với thể Berry (16) như

$$\phi_\nu(\mathcal{L}) = \oint_{\mathcal{L}} d\mathbf{k} \cdot \mathbf{\Lambda}_\nu(\mathbf{k}) \quad (20)$$

Pha Berry

Do trạng thái đầu và trạng thái cuối trong trường hợp phase Berry là trùng nhau, tức là $|u_{\nu \mathbf{k}(t)}\rangle = |u_{\nu \mathbf{k}(0)}\rangle$ và $|\tilde{u}_{\nu \mathbf{k}(t)}\rangle = |\tilde{u}_{\nu \mathbf{k}(0)}\rangle$, ta có

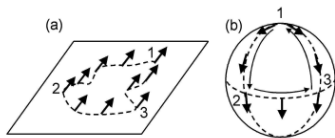
$$e^{i\gamma(\mathbf{k}(0))} = e^{i\gamma(\mathbf{k}(t))} \Rightarrow \gamma(\mathbf{k}(0)) - \gamma(\mathbf{k}(t)) = 2\pi l$$

Như vậy, pha Berry biến đổi gauge như sau

$$\tilde{\phi}_{\nu}(\mathcal{L}) = \phi_{\nu}(\mathcal{L}) + 2\pi l \quad l \in \mathbb{Z} \quad (21)$$

→ pha Berry bất biến gauge modulo 2π (bất biến gauge kiểu góc quay).

Pha Berry phụ thuộc hình dạng đường đi và hình học của không gian k , không phụ thuộc tốc độ biến đổi.



Hình ảnh minh họa phép tịnh tiến song song của một vector trong không gian 2 chiều: Góc lệch của vector khi trở về điểm ban đầu không phụ thuộc vào việc chọn phương ban đầu của nó mà chỉ phụ thuộc vào đường đi và hình học của không gian.

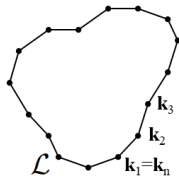
Pha Berry

Để tính toán thực tiễn pha Berry từ công thức (19), (20) ta làm như sau:
Sử dụng khai triển Taylor cho hàm sóng theo vi phân $d\mathbf{k}$

$$|u_{\nu\mathbf{k}+d\mathbf{k}}\rangle = |u_{\nu\mathbf{k}}\rangle + d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} |u_{\nu\mathbf{k}}\rangle + \dots$$

ta nhận được

$$\begin{aligned}\langle u_{\nu\mathbf{k}} | u_{\nu\mathbf{k}+d\mathbf{k}} \rangle &= 1 + d\mathbf{k} \cdot \langle u_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle + \dots \\ &= \exp[d\mathbf{k} \cdot \langle u_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle] \\ &= \exp[-i d\mathbf{k} \cdot \mathbf{\Lambda}_{\nu}(\mathbf{k})]\end{aligned}$$



$$\Rightarrow d\mathbf{k} \cdot \mathbf{\Lambda}_{\nu}(\mathbf{k}) = i \ln \langle u_{\nu\mathbf{k}} | u_{\nu\mathbf{k}+d\mathbf{k}} \rangle = -\text{Im} \ln \langle u_{\nu\mathbf{k}} | u_{\nu\mathbf{k}+d\mathbf{k}} \rangle \quad (22)$$

Công thức (22) viết cho trường hợp các điểm k rời rạc:

$$\Delta\mathbf{k}_i \mathbf{\Lambda}_{\nu}(\mathbf{k}_i) = -\text{Im} \ln \langle u_{\nu\mathbf{k}_i} | u_{\nu\mathbf{k}_{i+1}} \rangle$$

Lấy tổng theo các điểm k trên đường cong khép kín \mathcal{L} và lấy giới hạn liên tục ta tính được pha Berry:

$$\phi_{\nu}(\mathcal{L}) = \oint_{\mathcal{L}} d\mathbf{k} \mathbf{\Lambda}_{\nu}(\mathbf{k}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{n-1} \Delta\mathbf{k}_i \mathbf{\Lambda}_{\nu}(\mathbf{k}_i) = -\text{Im} \ln \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^{n-1} \langle u_{\nu\mathbf{k}_i} | u_{\nu\mathbf{k}_{i+1}} \rangle \quad (23)$$

Độ cong Berry

Độ cong Berry (Berry curvature) của dải ν được định nghĩa bởi:

$$\Omega_\nu(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_\nu(\mathbf{k}) \quad (24)$$

Dưới phép biến đổi gauge (17) độ cong Berry biến đổi như

$$\tilde{\Omega}_\nu(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \tilde{\mathbf{A}}_\nu(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_\nu(\mathbf{k}) + \cancel{\nabla_{\mathbf{k}} \times \nabla_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k})}^0 = \Omega_\nu(\mathbf{k}) \quad (25)$$

→ độ cong Berry bất biến gauge.

Thay thể Berry (16) vào (24) ta được

$$\begin{aligned} \Omega_\nu(\mathbf{k}) &= \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_\nu(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times i \langle u_{\nu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle \\ &= i \langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} | \times | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle + i \langle u_{\nu\mathbf{k}} | \cancel{\nabla_{\mathbf{k}} \times \nabla_{\mathbf{k}}}^0 u_{\nu\mathbf{k}} \rangle \\ &= i \sum_{\mu \neq \nu} \langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} | u_{\mu\mathbf{k}} \rangle \times \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle \end{aligned} \quad (26)$$

Độ cong Berry

Để tính số hạng vector $\langle u_{\mu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}} \rangle$ trong (26) người ta làm như sau:

Lấy đạo hàm theo \mathbf{k} hai vế của phương trình Schrödinger dừng

$$H(\mathbf{k})|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle$$

ta được

$$(\nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k}))|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle + H(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}}\rangle = (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}))|u_{\nu\mathbf{k}}\rangle + \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}}\rangle$$

Nhân trái với $\langle u_{\mu\mathbf{k}} |$ và thay $\langle u_{\mu\mathbf{k}} | H(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}) \langle u_{\mu\mathbf{k}} |$

$$\langle u_{\mu\mathbf{k}} | (\nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k})) |u_{\nu\mathbf{k}}\rangle + \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}) \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) \delta_{\mu\nu} + \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}}\rangle$$

Từ đây suy ra

$$\langle u_{\mu\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \frac{\langle u_{\mu\mathbf{k}} | (\nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k})) |u_{\nu\mathbf{k}}\rangle}{\varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} \quad \text{với } \mu \neq \nu \quad (27)$$

Độ cong Berry

Thay (27) vào (26) người ta rút ra *công thức Kubo* cho độ cong Berry

$$\Omega_\nu(\mathbf{k}) = i \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\langle u_{\nu\mathbf{k}} | (\nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k})) | u_{\mu\mathbf{k}} \rangle \times \langle u_{\mu\mathbf{k}} | (\nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k})) | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle}{(\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) - \varepsilon_\mu(\mathbf{k}))^2} \quad (28)$$

Cụ thể, các thành phần Descartes của độ cong Berry được cho bởi

$$\Omega_\nu^x(\mathbf{k}) = -2\text{Im} \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\langle u_{\nu\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_y} | u_{\mu\mathbf{k}} \rangle \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_z} | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle}{(\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) - \varepsilon_\mu(\mathbf{k}))^2}$$

$$\Omega_\nu^y(\mathbf{k}) = -2\text{Im} \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\langle u_{\nu\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_z} | u_{\mu\mathbf{k}} \rangle \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_x} | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle}{(\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) - \varepsilon_\mu(\mathbf{k}))^2}$$

$$\Omega_\nu^z(\mathbf{k}) = -2\text{Im} \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\langle u_{\nu\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_x} | u_{\mu\mathbf{k}} \rangle \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_y} | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle}{(\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) - \varepsilon_\mu(\mathbf{k}))^2}$$

Độ cong Berry và vận tốc dị thường

Toán tử vận tốc của điện tử được định nghĩa bởi

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{r}] \quad (29)$$

Trong biểu diễn không gian k , toán tử vận tốc có dạng

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k}) \quad (30)$$

Giá trị vận tốc trung bình của điện tử trên dải ν là

$$\mathbf{v}_{\nu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \langle w_{\nu\mathbf{k}}(t) | \nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k}) | w_{\nu\mathbf{k}}(t) \rangle \quad (31)$$

Thay hàm sóng phụ thuộc thời gian (15) vào (31) ta được vận tốc của điện tử Bloch trong chuyển động đoạn nhiệt

$$\mathbf{v}_{\nu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) \quad \boxed{-\dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_{\nu}(\mathbf{k})} \quad (32)$$

↖ vận tốc dị thường

Độ cong Berry và đối xứng nghịch đảo không, thời gian

- Nếu hệ có đối xứng nghịch đảo không gian, dưới phép nghịch đảo không gian $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$: \mathbf{k} , $\nabla_{\mathbf{k}}$, $\dot{\mathbf{k}}$ đổi dấu trong khi ε_{ν} là hàm chẵn và \mathbf{v}_{ν} là hàm lẻ của \mathbf{k} , phương trình (32) trở thành

$$-\mathbf{v}_{\nu}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) + \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_{\nu}(-\mathbf{k})$$

Điều kiện phương trình (32) bất biến dưới phép nghịch đảo không gian dẫn đến độ cong Berry là hàm chẵn $\boldsymbol{\Omega}_{\nu}(-\mathbf{k}) = \boldsymbol{\Omega}_{\nu}(\mathbf{k})$.

- Nếu hệ có đối xứng nghịch đảo thời gian, dưới phép biến đổi nghịch đảo thời gian $t \rightarrow -t$: \mathbf{k} , $\nabla_{\mathbf{k}}$ đổi dấu, $\dot{\mathbf{k}}$ không đổi, ε_{ν} là hàm chẵn và \mathbf{v}_{ν} là hàm lẻ của \mathbf{k} , phương trình (32) trở thành

$$-\mathbf{v}_{\nu}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) - \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_{\nu}(-\mathbf{k})$$

Điều kiện phương trình (32) bất biến dưới phép nghịch đảo thời gian dẫn đến độ cong Berry là hàm lẻ $\boldsymbol{\Omega}_{\nu}(-\mathbf{k}) = -\boldsymbol{\Omega}_{\nu}(\mathbf{k})$.

- Như vậy, nếu hệ có đồng thời đối xứng nghịch đảo không gian và thời gian thì độ cong Berry triệt tiêu, $\boldsymbol{\Omega}_{\nu}(\mathbf{k}) = 0$.

Mối liên hệ giữa độ cong Berry và pha Berry

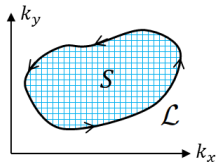
Xét trường hợp hệ hai chiều. Tưởng tượng thể Λ có vai trò như là thể vector của trường điện từ. Thông lượng "từ trường" $\Omega = \nabla_{\mathbf{k}} \times \Lambda$ đi xuyên qua một tiết diện S giới hạn bởi chu tuyến \mathcal{L} trong không gian k là

$$\Phi = \iint_S d\mathbf{S} \cdot \Omega_{\nu}(\mathbf{k}) = \iint_S d\mathbf{S} \cdot (\nabla_{\mathbf{k}} \times \Lambda_{\nu}(\mathbf{k}))$$

trong đó $d\mathbf{S} = \hat{\mathbf{n}} dk_x dk_y$.

Áp dụng định lý Stokes ta nhận được

$$\oint_{\mathcal{L}} d\mathbf{k} \cdot \Lambda_{\nu}(\mathbf{k}) = \iint_S d\mathbf{S} \cdot \Omega_{\nu}(\mathbf{k}) \quad (33)$$



Do vế phải của phương trình (33) bất biến gauge còn vế trái của nó bất biến gauge modulo 2π nên ta có hệ thức giữa pha Berry và độ cong Berry

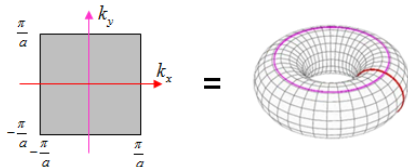
$$\oint_{\mathcal{L}} d\mathbf{k} \cdot \Lambda_{\nu}(\mathbf{k}) = \iint_S d\mathbf{S} \cdot \Omega_{\nu}(\mathbf{k}) + 2\pi l \quad (34)$$

Định lý Chern

Định lý Chern cho hệ hai chiều:

$$\frac{1}{2\pi} \oint\!\!\!\oint_{BZ} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_\nu(\mathbf{k}) = C_\nu \quad (35)$$

$$C_\nu \in \mathbb{Z}$$

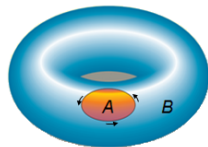


Chứng minh:

$$\oint_{\mathcal{L}} d\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_\nu(\mathbf{k}) = \iint_A d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_\nu(\mathbf{k}) + 2\pi m$$

$$\oint_{\mathcal{L}} d\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_\nu(\mathbf{k}) = -\iint_B d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_\nu(\mathbf{k}) + 2\pi n$$

$$\Rightarrow \oint\!\!\!\oint_{BZ} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_\nu(\mathbf{k}) = \iint_A d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_\nu(\mathbf{k}) + \iint_B d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_\nu(\mathbf{k}) = 2\pi(n - m) = 2\pi C_\nu$$

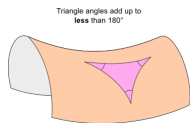


- Số Chern C là một đại lượng bất biến quan trọng của chất rắn.
- Có thể phân loại vật liệu dựa trên bất biến topo: vật liệu insulator thường $C = 0$, vật liệu topological insulator $C = \pm 1, \pm 2, \dots$

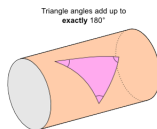
Sự tương tự với topology hình học

- Độ cong Gauss:

$$K = \kappa_{\min} \kappa_{\max} = \frac{1}{R_{\max}} \frac{1}{R_{\min}}$$



Negative Curvature



Zero Curvature



Positive Curvature

- Định lý Gauss-Bonnet:

$$\frac{1}{2\pi} \iint_M K dS = 2(1 - g) = \chi$$

M là đa tạp kín 2D

K là độ cong gauss

g là genus

χ là chỉ số topo

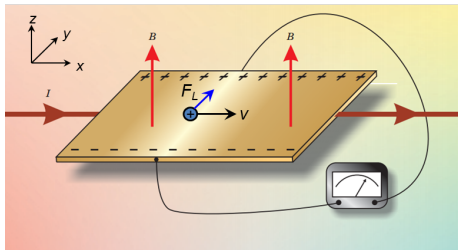


$g=0$



$g=1$

Hiệu ứng Hall

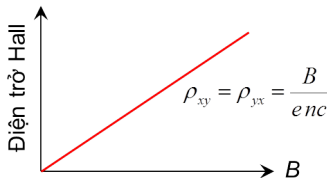
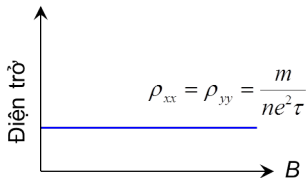


Định luật Ohm: mô tả sự phụ thuộc tuyến tính giữa \mathbf{j} và \mathbf{E}

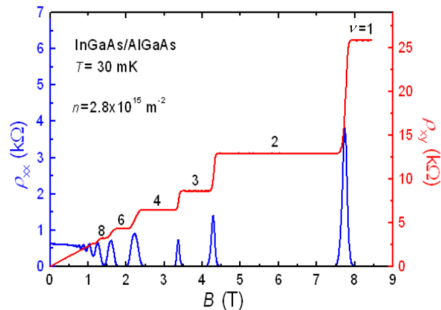
$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$
$$\mathbf{E} = \sigma^{-1} \mathbf{j} = \rho \mathbf{j}$$

Định luật Ohm cho hệ 2 chiều

$$\begin{bmatrix} j_x \\ j_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_x \\ j_y \end{bmatrix}$$



Hiệu ứng Hall lượng tử



Điện trở Hall:

$$\rho_{xy} = \frac{R_K}{\nu}, \quad \nu = 1, 2, \dots \quad (36)$$

Hằng số điện trở Klitzing:

$$R_K = \frac{h}{e^2} = 25812.8074555 \, \Omega \pm 0.0000059 \, \Omega$$

[Klitzing et al., Phys. Rev. Lett. 45, 494 (1980)]

- Cho phép tính hằng số cấu trúc tinh thể với độ chính xác rất cao từ phép đo điện trở

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{c\mu_0}{2R_K}$$

- Kết quả không phụ thuộc hình dạng, kích thước, tạp chất ... của vật liệu mẫu.

Hiệu ứng Hall lượng tử

Trong hệ 2 chiều, mối liên hệ giữa độ dẫn và điện trở được cho bởi

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{\rho_{xx}\rho_{yy} - \rho_{xy}\rho_{yx}} \begin{bmatrix} \rho_{yy} & -\rho_{xy} \\ -\rho_{yx} & \rho_{xx} \end{bmatrix} \quad (37)$$

- Ở đoạn bằng trên đồ thị của điện trở Hall (Hall plateau):

$$\begin{aligned} \rho_{xy} = \rho_{yx} = \text{const}, \quad \rho_{xx} = \rho_{yy} = 0 \\ \Rightarrow \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 1/\text{const}, \quad \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0 \end{aligned}$$

Một dạng vật chất mới?

- Ở giữa hai đoạn bằng trên đồ thị của điện trở Hall:

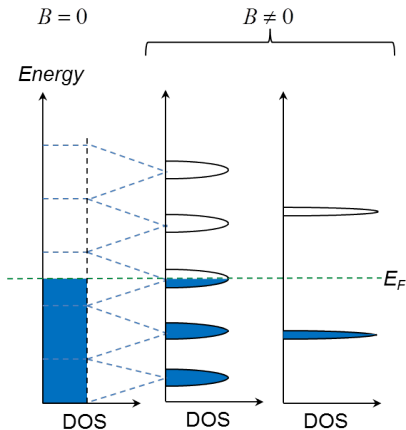
$$\rho_{xx}, \rho_{yy} \neq 0 \Rightarrow \sigma_{xx}, \sigma_{yy} \neq 0 \rightarrow \text{Hệ là vật dẫn}$$

Hiệu ứng Hall lượng tử: các mức Landau

Trong từ trường ngoài $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, chọn gauge $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$, Hamiltonian của điện tử dẫn có dạng

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m^* \omega_c^2}{2} (y - \beta k_x)^2 \quad \text{trong đó} \quad \hbar\omega_c = \frac{eB}{m^*}, \quad \beta = \frac{\hbar}{eB}$$

Năng lượng điện tử bị lượng tử hóa thành các mức Landau $\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c$



- Hình thành các dải con do chuyển động cyclotron.
- Các dải con dưới mức Fermi bị lấp đầy bởi điện tử.
- Nếu có một dải con bị chiếm một phần thì hệ là vật dẫn, ngược lại hệ là vật cách điện.
- Khi B tăng, số các dải con bị lấp đầy giảm.

Hiệu ứng Hall lượng tử: vận tốc dị thường và độ dẫn Hall

Khi có mặt điện trường $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$, vector sóng của điện tử Bloch trở nên phụ thuộc vào thời gian phù hợp với *định lý gia tốc*:

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E}$$

Công thức (32) cho vận tốc trung bình của điện tử trong dải n trở thành

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) \quad (38)$$

Mật độ dòng điện theo phương x là:

$$j_x = \frac{1}{L^2} e \langle v_x \rangle = \frac{e}{\hbar L^2} \sum_{n, \mathbf{k}} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} f_n(\mathbf{k}) + \frac{e^2}{\hbar L^2} E_y \sum_{n, \mathbf{k}} \Omega_n^z(\mathbf{k}) f_n(\mathbf{k}) \quad (39)$$

$$j_x \simeq \frac{e}{\hbar 4\pi^2} \left[\sum_n^{\text{occ.}} \oint_{\text{BZ}} dk_x dk_y \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} \xrightarrow{0} + 2 \iint d^2\mathbf{k} \frac{\partial \varepsilon_{n'}(\mathbf{k})}{\partial k_x} f_{n'}(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) \right] \\ + \frac{e^2}{\hbar 4\pi^2} E_y \left[\sum_n^{\text{occ.}} \oint_{\text{BZ}} dk_x dk_y \Omega_n^z(\mathbf{k}) + 2 \iint d^2\mathbf{k} \Omega_{n'}^z(\mathbf{k}) f_{n'}(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) \right]$$

trong đó $\Delta\mathbf{k} = -e\mathbf{E}\tau/\hbar$.

Hiệu ứng Hall lượng tử: vận tốc dị thường và độ dẫn Hall

Với hệ thức tán sắc $\varepsilon_{n'}(\mathbf{k}) \simeq \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ ta có

$$\begin{aligned} \iint d^2\mathbf{k} \frac{\partial \varepsilon_{n'}(\mathbf{k})}{\partial k_x} f_{n'}(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) &= \iint d^2\mathbf{k} \frac{\partial \varepsilon_{n'}(\mathbf{k} - \Delta\mathbf{k})}{\partial k_x} f_{n'}(\mathbf{k}) \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{k_F} k dk \frac{\hbar^2}{m} \left(k \cos \phi + \frac{eE_x \tau}{\hbar} \right) = \frac{\pi k_F^2 \hbar e E_x \tau}{m} \end{aligned}$$

trong đó $k_F = \sqrt{2\pi n}$.

Như vậy mật độ dòng j_x có thể viết dưới dạng

$$\begin{aligned} j_x &\simeq \frac{ne^2\tau}{m} E_x + \frac{e^2}{\hbar 4\pi^2} E_y \left[\sum_n^{\text{occ.}} \oint_{BZ} dk_x dk_y \Omega_n^z(\mathbf{k}) + 2 \iint d^2\mathbf{k} \Omega_{n'}^z(\mathbf{k}) f_{n'}(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) \right] \\ &\equiv \sigma_{xx} E_x + \sigma_{xy} E_y \end{aligned}$$

Nếu không có dải con nào bị chiếm một phần thì độ dẫn thường là $\sigma_{xx} = 0$ và độ dẫn Hall là

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \sum_n^{\text{occ.}} \frac{1}{2\pi} \oint_{BZ} dk_x dk_y \Omega_n^z(\mathbf{k}) \quad (40)$$

Hiệu ứng Hall lượng tử: vận tốc dị thường và độ dẫn Hall

Do tích phân theo toàn bộ BZ của độ cong Berry là số Chern, ta đi đến công thức Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs (TKNN)

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \sum_n C_n = \frac{e^2}{h} \nu, \quad \nu = 1, 2, \dots \quad (41)$$

Điện trở Hall tương ứng là

$$\rho_{xy} = \frac{1}{\sigma_{xy}} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{\nu} \quad (42)$$

Mô hình Haldane

Đây là mô hình tương đương cho vật liệu 2 chiều tựa graphene, trong đó ô cơ sở có 2 nguyên tử khác nhau. Khác với graphene, tinh thể Haldane không có cả hai đối xứng nghịch đảo không gian và thời gian.

Sử dụng phương pháp liên kết chặt với các thông số như sau

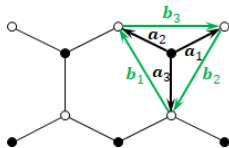
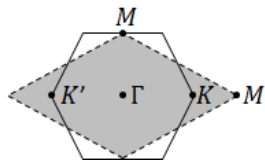
t_1 : năng lượng hopping lân cận gần nhất

$t_2 e^{i\varphi}$: năng lượng hopping lân cận gần thứ hai

m : hiệu năng lượng on-site

người ta nhận được Hamiltonian

$$H(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} 2t_2 \sum_i \text{Re}(e^{i\varphi} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i}) + m & t_1 \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} \\ t_1 \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} & 2t_2 \sum_i \text{Re}(e^{-i\varphi} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i}) - m \end{bmatrix} \quad (43)$$

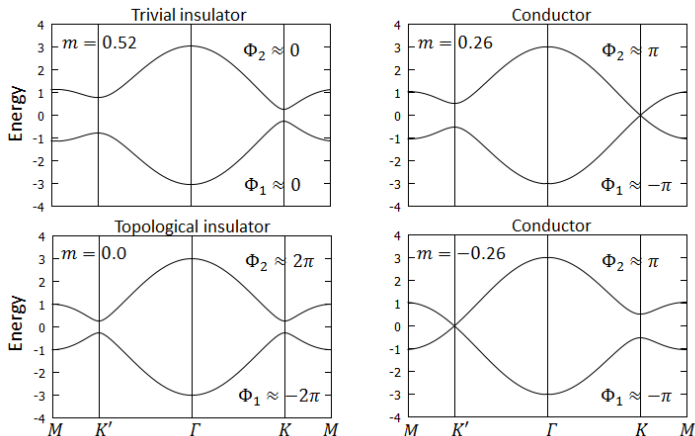


Vùng Brillouin trong không gian đảo
Các điểm đối xứng cao: Γ , K , K' , M

Mô hình Haldane

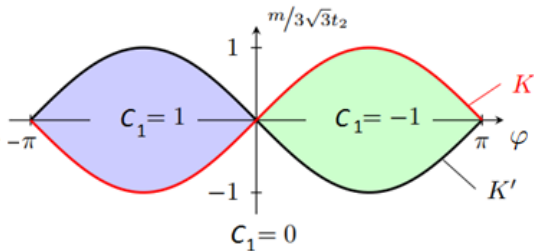
- Độ cong Berry: $\Omega_1(\mathbf{k}) = -2\text{Im} \frac{\langle u_{1\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_x} | u_{2\mathbf{k}} \rangle \langle u_{2\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_y} | u_{1\mathbf{k}} \rangle}{(\varepsilon_1(\mathbf{k}) - \varepsilon_2(\mathbf{k}))^2}$
- Thông lượng Berry qua BZ: $\Phi_1 = \oint_{BZ} dk_x dk_y \Omega_1(k_x, k_y)$

Kết quả tính số cho $t_1 = 1$, $t_2 = 0.05$, $\varphi = \pi/2$ và m khác nhau:



Mô hình Haldane

Số Chern: $C_1 = \frac{\Phi_1}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \oint_{BZ} dk_x dk_y \Omega_1(k_x, k_y)$

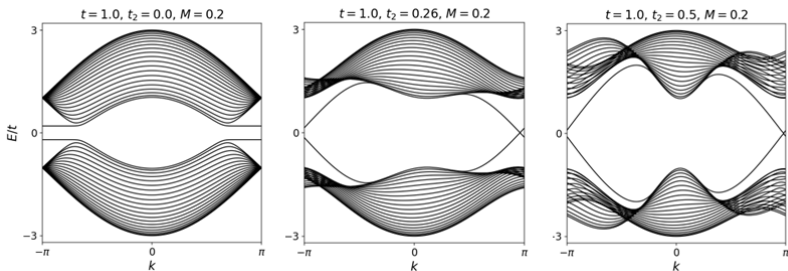
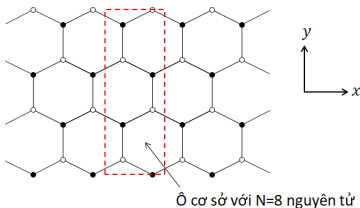


Xét trường hợp $\varphi > 0$

- Nếu $m > 3\sqrt{3}t_2 \sin \varphi$: khe dải tại K và K' mở, $C_1 = 0$
- Tại $m = 3\sqrt{3}t_2 \sin \varphi$: khe dải tại K đóng, tại K' mở, chuyển pha
- Nếu $|m| < 3\sqrt{3}t_2 \sin \varphi$: khe dải tại K mở, tại K' mở, $C_1 = -1$
- Tại $m = -3\sqrt{3}t_2 \sin \varphi$: khe dải tại K' đóng, tại K mở, chuyển pha
- Nếu $m < -3\sqrt{3}t_2 \sin \varphi$: Khe dải tại K' và K mở, $C_1 = 0$

Mô hình Haldane: hệ hữu hạn và edge state

Dây ruy băng Haldane dài vô tận theo trục x và hữu hạn theo trục y



Cấu trúc dải năng lượng cho $N=40, \varphi=\pi/2$