

**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Milan Vrána

Berryho křivost počítaná ab-initio metodou

Fyzikální ústav UK

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Praha 2024

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Název práce: Berryho křivost počítaná ab-initio metodou

Autor: Milan Vrána

Department: Fyzikální ústav UK

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D., Fyzikální ústav UK

Abstrakt: Tato bakalářská práce se zabývá Berryho křivostí a jejím vlivem na pohybové rovnice elektronů v pevných látkách. Hlavním tématem je zavedení Berryho křivosti následován jejím výpočtem ab-initio metodou. V této práci spočítáme Berryho křivost pro bcc železo, a z které následně spočítáme orbitální magnetizaci a anomální vodivost.

Klíčová slova: Berryho křivost, ab-initio výpočty elektronové struktury, topologický transport

Title: Berry curvature calculated by ab-initio method

Author: Milan Vrána

Department: Fyzikální ústav UK

Supervisor: Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D., Fyzikální ústav UK

Abstract: This thesis deals with the Berry curvature and its effect on the equations of motion of electrons in solids. The main topic is the introduction of the Berry curvature followed by its calculation by the ab-initio method. In this work, we will calculate the Berry curvature of bcc iron, from which we subsequently calculate the orbital magnetization and anomalous conductivity.

Keywords: Berry curvature, ab-initio description of electronic structure, topological transport

Obsah

Úvod	1
1 Mnoha-částicový problém v kvantové mechanice pro pevné látky	2
1.1 Hamiltonián pro mnoha-částicový problém	2
1.2 Blochovy stavy a Blochův hamiltonián	2
2 Definice Berryho křivosti	4
2.1 Adiabatický transport	4
2.1.1 Nutná existence Berryho fáze	4
2.1.2 Topologické zavedení Berryho fáze a konexe	5
2.2 Berryho křivost	9
3 Modifikace pohybových rovnic	11
3.1 Zavedení pohybových rovnic	11
3.2 Modifikace objemu fázového prostoru	14
3.3 Anomální vodivost materiálu	15
3.4 Orbitální magnetizace	16
4 Numerické výpočty Berryho křivosti, anomální vodivosti a orbitální magnetizace	18
4.1 Berryho křivost pro Fe bcc	19
4.2 Anomální vodivost pro bcc Fe	23
4.3 Orbitální magnetizace pro Fe bcc	23
5 Závěr	25
Literatura	26

Úvod

V roce 1984 Michael Berry publikoval článek, ve kterém rozebíral adiabatickou evoluci vlastních stavů hamiltoniánu, kde se parametry kvantového systému mění velmi pomalu. Během evoluce zůstává systém ve vlastním stavu hamiltoniánu, a tedy nedochází k excitaci stavů. Berry dále diskutoval adiabatickou evoluci systému po uzavřené cestě parametrů. Pokud systém neobsahuje degeneraci, tak se systém vrátí do původního stavu. Při návratu do původního stavu, došlo ale ke změně fáze vlnové funkce elektronů. A to jak od dynamického členu, tak také od nového příspěvku do fáze, která je nyní známá jako Berryho fáze. Tato fáze má několik topologických vlastností, a jak se ukazuje, je potřeba při popisu některých transportních vlastností.

Nejprve ukážeme, že Berryho fáze je invariantní (tedy kalibračně nezávislá) vůči volbě globální fáze stavu (která je kalibračně závislá). Invariantnost Berryho fáze ukazuje, že její existence ovlivňuje měřitelné veličiny.

Dále odvodíme, že Berryho fáze je čistě geometrická a závisí pouze na geometrii systému. Jelikož se budeme bavit o hladkých prostorech parametru, ukážeme jako M. Berry, že tento prostor je zakřivený a tato vlastnost prostoru je čistě geometrická záležitost. Tato veličina bude hrát roli v dynamických rovnicích pro pohyb elektronů.

Toto má velmi blízko ke kalibračním polím a diferenciální geometrii. Tyto vlastnosti se velmi podobají Ahronov-Bohmovu efektu. Další topologickou vlastností prostoru je, že plošný integrál přes uzavřenou plochu je vždy kvantovaná hodnota, která se zde nazývá Chernovo číslo.

Velmi zajímavou aplikací je poté existence anomálních transportních jevů. Při zapnutém eklektickém poli vznikají anomální proudy elektronu, tj. proudy kolmé na směr působícího pole. Též Berryho fázi lze vysvětlit polarizací materiálu.

1 Mnoha-částicový problém v kvantové mechanice pro pevné látky

1.1 Hamiltonián pro mnoha-částicový problém

Podíváme se na zavedení mnoho-částicového problému v kvantové mechanice. Protože budeme potřebovat znát vlastní stavy elektronu v daném krystalu, musíme uvažovat o hamiltoniánu H , který bude obsahovat kinetický člen pro jednotlivé elektrony, potenciál, který je tvořený jádry v krystalu, a elektron-elektronovou interakci mezi jednotlivými elektrony,

$$H = \sum_n \frac{\mathbf{p}_n^2}{2m_e} + \sum_n e_n V(\mathbf{r}_n) + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{n,m \\ n \neq m}} \frac{e_n e_m}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|} \quad (1.1.1)$$

kde potenciál $V(\mathbf{r})$ bude reprezentovat elektrostatický potenciál jader v krystalu a budeme předpokládat, že je periodický. Budeme uvažovat o modelu krystalu, který je nekonečně velký a který je periodicky poskládaný z elementární buňky.

Pro tento hamiltonián budeme řešit problém vlastní energie a vlastních stavů $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, kde vlnová funkce $|\Psi\rangle$ je mnohaelektronová vlnová funkce, např. vyjádřená Slaterovým determinantem. Pro numerické výpočty tento zápis hamiltoniánu není numericky dosažitelný, proto použijeme DFT teorii. Ta aproximuje elektron-elektronovou interakci, jako funkcionál hustoty elektronového stavu. Tady jsme převedli problém mnohaelektronového hamiltoniánu na soustavu jednoelektronových hamiltoniánů, kde elektron-elektronová interakce je popsána efektivním potenciálem.

Vidíme tedy, že klíčová část je výpočet hustoty elektronových stavů. Ta je závislá na počtu částic v systému, ale protože náš model je nekonečný krystal, tak to zkomplikuje výpočet hustoty stavů. Tento problém můžeme obejít využitím periodicity potenciálu, kde díky této symetrii převedeme problém výpočtu z nekonečného krystalu na výpočet pouze přes jednu elementární buňku.

1.2 Blochovy stavy a Blochův hamiltonián

Zdefinujeme si Blochovy stavy a Blochův hamiltonián pro neinteragující systém s periodickým potenciálem¹. Uvažujeme, že máme řešení vlastní energie a vlastních stavů ve tvaru $H\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

Kde řešení je charakterizováno dvojicí kvantových čísel (n, \mathbf{k}) , kde n je index pásu a \mathbf{k} je krystalová hybnost. Pro vlnovou funkci využijeme Blochův teorém, který nám dovoluje zapsat vlnovou funkci ve tvaru: $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, kde má funkce $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ stejnou

¹I když jsme počítali s elektron-elektronovou interakcí, kterou jsme přepsali pomocí efektivního potenciálu, dostali jsme hamiltonián, který popisuje neinteragující systém.

periodicitu jako samotný krystal $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ². Z periodičnosti \mathbf{r} lze odvodit, že i vektor \mathbf{k} bude periodický $\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}$, kde \mathbf{G} je reciproký vektor mříže krystalu, takže díky této symetrii se můžeme omezit pouze na prostor \mathbf{k} , který se nachází v první Brillouinové zóně.

Můžeme zavést tzv. Blochův hamiltonián $H(\mathbf{k})$, který je modifikací předchozího hamiltoniánu $H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, který má potom vlastní stavy $E_{n\mathbf{k}}$ a $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Dostaneme rovnici pro vlastní stavy $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$.

$$H(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2.1 \text{ a})$$

Rovnice 2.2.1a je odvozena v \mathbf{r} -reprezentaci, platí však v libovolné reprezentaci a tedy $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ můžeme zobecnit do libovolné reprezentace $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow |u_{n\mathbf{k}}\rangle$,

$$H(\mathbf{k})|u_{n\mathbf{k}}\rangle = E_{n\mathbf{k}}|u_{n\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.2.1 \text{ b})$$

Později, vektor $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ bude reprezentovat naši bázi v Hilbertově prostoru.

²Kde posunutí \mathbf{R} vyjadřuje periodicitu krystalu, tj. patří k Bravaisově mříži krystalu

2 Definice Berryho křivosti

2.1 Adiabatický transport

V této kapitole se budeme zabývat adiabatickým transportem. Přesněji, nalezneme pohybové rovnice popisující vývoj pro adiabatický transport celého systému, spíše než vývoj jednotlivých kvantových stavů v systému. K tomu nám poslouží adiabatický teorém, který říká, že malé změny za velmi dlouhý čas nebudou měnit strukturu vlastních stavů v daném čase, tj. nebudou nastávat excitace elektronů do vyšších stavů.

2.1.1 Nutná existence Berryho fáze

Podíváme se, proč je nutné zavést Berryho fázi, aby byla Schrödingerova rovnice obecně platná. To je díky tomu, že uvažujeme časovou evoluci parametru \mathbf{k} . Máme klasické řešení

Schrödingerovy rovnice ve tvaru $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_{n\mathbf{k}}(t')} |u_{n\mathbf{k}}\rangle$.

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle &= H(\mathbf{k}) |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \\
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_{n\mathbf{k}}(t')} |u_{n\mathbf{k}}\rangle \right) &= E_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \\
 E_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_{n\mathbf{k}}(t')} \frac{\partial}{\partial t} |u_{n\mathbf{k}}\rangle &= E_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \\
 \frac{\partial}{\partial t} |u_{n\mathbf{k}}\rangle &= 0
 \end{aligned} \tag{2.1.1}$$

Jelikož připouštíme vývoj parametru \mathbf{k} , musíme uvažovat, že tato časová derivace musí být nenulová. Tedy, jak zachránit platnost Schrödingerovy rovnice? Tím, že dodáme do vlnové funkce $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ dodatečnou fázi a to ve tvaru $e^{i\gamma_n(t)}$ [1]. S touto opravou vlnové funkce dostaneme předpis pro počítání fáze $\gamma_n(t)$.

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle &= H(\mathbf{k}) |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \\
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\gamma_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_{n\mathbf{k}}(t')} |u_{n\mathbf{k}}\rangle \right) &= E_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \\
 -\hbar \frac{\partial}{\partial t} \gamma_n(t) |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + E_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + i\hbar e^{i\gamma_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_{n\mathbf{k}}(t')} \frac{\partial}{\partial t} |u_{n\mathbf{k}}\rangle &= E_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \\
 i e^{i\gamma_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_{n\mathbf{k}}(t')} \frac{\partial}{\partial t} |u_{n\mathbf{k}}\rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \gamma_n(t) |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle
 \end{aligned} \tag{2.1.2}$$

Teď zleva vynásobíme rovnici $\langle \psi_{n\mathbf{k}} |$ a uplatníme ortogonalitu stavů $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \gamma_n(t) &= i \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t} | u_{n\mathbf{k}} \rangle & \Big| \int_0^t dt' \\
\gamma_n(t) &= i \int_0^t dt' \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial t'} | u_{n\mathbf{k}} \rangle & \Big| \frac{\partial}{\partial t'} = \frac{d\mathbf{k}}{dt'} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \\
\gamma_n(t) &= i \int_0^t dt' \frac{d\mathbf{k}}{dt'} \cdot \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle & (2.1.3) \\
\gamma_n(t) &= i \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\
\gamma_n(t) &= \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_n
\end{aligned}$$

Máme předpis pro výpočet dodatečné fáze a zavedeme novou veličinu a to je Berryho konexe $\mathcal{A}_n = i \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle$.

Podíváme se na strukturu vektoru Berryho konexe. Jelikož je závislá na kalibraci $|u_{n\mathbf{k}}\rangle \rightarrow e^{i\zeta(\mathbf{k})} |u_{n\mathbf{k}}\rangle$, kde $\zeta(\mathbf{k})$ je libovolná hladká funkce. Potom máme transformaci Berryho konexe $\mathcal{A}_n \rightarrow \mathcal{A}_n - \nabla_{\mathbf{k}}\zeta(\mathbf{k})$. Což vede k tomu, že dodatečná fáze $\gamma_n(t)$ se změní o rozdíl $\zeta(\mathbf{k}(t)) - \zeta(\mathbf{k}(0))$. Ale pokud si můžeme vybrat libovolnou funkci $\zeta(\mathbf{k})$, tak to potom vede k závěru, že fáze $\gamma_n(t)$ můžeme vždy odtransformovat. Je zde případ, kdy fázi $\gamma_n(t)$ nelze odtransformovat a to tehdy, když $\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(0)$, což znamená, že se systém vyvíjí po uzavřené cestě \mathcal{C} v prostoru \mathcal{M} . Ale to nás vede k tomu, že rozdíl $\zeta(\mathbf{k}(t)) - \zeta(\mathbf{k}(0)) = 2\pi m$, kde m je přirozené číslo. Potom se fáze $\gamma_n(t)$ stává kalibračně invariantní a tato invariantní fáze se nazývá Berryho fáze nebo geometrická fáze [2].

$$\gamma_n = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_n \quad (2.1.4)$$

Ukázali jsme, že Berryho fáze je invariantní a nelze odtransformovat. To bude hrát roli ve vzniku nových jevů v materiálu, na který působí externí elektromagnetické pole. Než se dostaneme k těmto jevům, ukážeme si ještě jiné odvození Berryho fáze a Berryho konexe. Pomocí geometrického pohledu upřesníme, jak chápeme adiabatický vývoj systému.

2.1.2 Topologické zavedení Berryho fáze a konexe

Mějme hamiltonián, který je závislý na parametru $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$, který náleží do prostoru parametru \mathcal{M} , který uvažujeme za hladkou varietu. Potom můžeme uvažovat, že $\mathbf{k} = \mathbf{k}(t)$ je funkcí času. Stejným způsobem, můžeme uvažovat o adiabatickém vývoji parametru, což znamená malé změny parametru \mathbf{k} na cestě \mathcal{C} .

Vlastní energie $E_{n\mathbf{k}}$ má diskrétní hodnoty, které jsou obecně závislé na \mathbf{k} , tedy občas se objevují degenerace hladin, nebo velmi blízké přiblížení energetických hladin. Proto je na místě vytvořit podprostor $\mathcal{R}(\mathbf{k}) = \{|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle, n = 1 \dots N\}$ definovaný tak, že existuje $\Delta > 0$ taková, že energie $E_{n'\mathbf{k}}$ stavů $|\varphi_{n'\mathbf{k}}\rangle \notin \mathcal{R}(\mathbf{k})$ a platí $|E_{n\mathbf{k}} - E_{n'\mathbf{k}}| \geq \Delta$.

Z takové definice lze pak snadno vyčíst, že různé podprostory $\mathcal{R}(\mathbf{k})$ jsou mezi sebou oddělené energetickou mezerou, pro každé $\mathbf{k} \in \mathcal{M}$.

Prostor stavů jsme rozdělili na podprostory. To nám umožní zavést projektory $\mathcal{P}(\mathbf{k})$ na tyto různé podprostory. Projektory mají následující vlastnosti:

1. $P^2(\mathbf{k}) = P(\mathbf{k})$
2. $[H, P(\mathbf{k})] = 0$
3. $P(\mathbf{k})|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle, \forall \mathbf{k} \in \mathcal{M} \wedge |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \in \mathcal{R}(\mathbf{k})$
4. $\text{rank } P(\mathbf{k}) = N$

Pokud nyní zavedeme cestu $\mathbf{k}(t), t \in [0, \tau]$, zafixujeme koncový bod $\mathbf{k}(\tau)$ a budeme prodlužovat parametr $\tau \rightarrow \infty$, můžeme to interpretovat jako vývoj parametru t o konečnou hodnotu vůči parametru τ . Je to obdobné jako jiný adiabatický vývoj, např. v termodynamice. V realitě podmínka nekonečně dlouhého času, bude nahrazená časem, který bude mnohem větší než relaxační čas systému. V našem případě, kdy my budeme změnu parametru modifikovat pomocí změn vnějšího elektromagnetického pole, budou změny pole trvat déle než je potřebný čas na relaxaci systému.

Je to stále aproximace, takže skutečný projektor $P(t)$ pro čas t , potom tato aproximace projektoru bude náš projektor z adiabatického vývoje $P(\mathbf{k}(t))$, který je obraz našeho podprostoru $\mathcal{R}(\mathbf{k})$. Když v kvantové mechanice vidíme operátor závislý na čase, tak vyjádříme tuto časovou závislost pomocí evolučních operátorů (unitárních operátorů) $U(t)$, který odpovídá k hamiltoniánu $H(\mathbf{k})$:

$$P(t) = U(t)P(0)U^\dagger(t) \approx P(\mathbf{k}(t))$$

To souvisí s tím, že pro adiabatický projektor stále požadujeme, aby projektoval na stavy, které jsou stále vlastními stavy hamiltoniánu $H(\mathbf{k})$, kde ve skutečnosti je, že při vývoji systému se nemusí zachovávat vlastnost, že stavy v čase t budou stále vlastními stavy hamiltoniánu.

Takže zavedeme adiabatický evoluční operátor $U_A(t)$, pro který platí

$$P(\mathbf{k}(t)) = U_A(t)P(0)U_A^\dagger(t)$$

Pokud máme časovou závislost operátoru, určitě nás bude zajímat jeho časová derivace.

$$i\dot{P}(\mathbf{k}(t)) = \left[i\dot{U}_A(t)U_A^\dagger(t), P(\mathbf{k}(t)) \right] \quad (2.1.5)$$

Pokud vyjádříme časovou derivaci adiabatického evolučního operátoru z předchozí rovnice a dalších identit

$$\begin{aligned} \dot{U}_A(t) &= \left[\dot{P}(\mathbf{k}(t)), P(\mathbf{k}(t)) \right] U_A(t) \equiv \mathcal{A}_s(\mathbf{k}(t)) U_A(t) \\ \mathcal{A}_s(\mathbf{k}(t)) dt &= \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} P(\mathbf{k}(t)), P(\mathbf{k}(t)) \right] \cdot \dot{\mathbf{k}}(t) dt = \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} P(\mathbf{k}(t)), P(\mathbf{k}(t)) \right] \cdot d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

Když se podíváme na strukturu diferenciální rovnice, tak za předpokladu, že počáteční podmínka $U_A(0) = \mathbb{1}$ je řešením diferenciální rovnice pro adiabatický unitární operátor:

$$U_A(t) = \mathcal{T} e^{\int_0^t dt' \mathcal{A}_s(\mathbf{k}(t'))} \quad (2.1.7)$$

Kde operátor \mathcal{T} reprezentuje "path-ordered exponential". Takže jsme adiabatickou evoluci vyjádřili čistě jen za pomoci projektoru, což jsou čistě topologické objekty [3].

Podívejme se na to, co se děje s vlastními stavy a jejich závislostí na parametru \mathbf{k} . Mějme stav $|\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle \in \mathcal{R}(\mathbf{k})$ a platí, že $P(\mathbf{k}(t)) |\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle = |\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle$. A z předchozího odvozování máme adiabatický evoluční operátor, který funguje takto $|\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle = U_A(t) |\psi_{\mathbf{k}(0)}\rangle$. Ale to je podobné časové evoluci ze Schrödingerova obrazu. Teď se podíváme na změnu stavu $|\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle$ při změně \mathbf{k} .

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} U_A(t) |\psi_{\mathbf{k}(0)}\rangle = \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} P(\mathbf{k}(t)), P(\mathbf{k}(t)) \right] |\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} P(\mathbf{k}(t)), P(\mathbf{k}(t)) \right] P(\mathbf{k}(t)) |\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle = \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} P(\mathbf{k}(t)) \right) |\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

Ale když odečteme pravou stranu, dostáváme rovnici, která je velmi známá v oblasti topologie a variet.

$$\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} P(\mathbf{k}(t)) \right) P(\mathbf{k}(t)) \right] |\psi_{\mathbf{k}}\rangle = P(\mathbf{k}(t)) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle = 0 \quad (2.1.9)$$

Vidíme, že z tvaru rovnice 2.1.9 má stejnou strukturu, jako rovnice paralelního přenosu. Zde tedy identifikujeme část $\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} P(\mathbf{k}(t)) \right) P(\mathbf{k}(t))$ jako Berryho konexi. Toto je vodítko, že systém má v sobě zabudovanou křivost parametrického prostoru. Také z poslední rovnice vidíme, že změna vlnové funkce nenáleží podprostoru $\mathcal{R}(\mathbf{k})$.

Zkusíme, jak se změní rovnice paralelního přenosu, když budeme uvažovat stav $|\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle \in \mathcal{R}(\mathbf{k})$, který v N -dimenzionálním podprostoru můžeme zapsat pomocí lineární kombinace zvolené báze v daném podprostoru $|\phi_{n\mathbf{k}}\rangle \in \mathcal{R}(\mathbf{k})$. Touto volbou báze máme i definici

projektoru $P(\mathbf{k}) = \sum_{n=1}^N |\phi_{n\mathbf{k}}\rangle \langle \phi_{n\mathbf{k}}|$, kde obecně můžeme zapsat funkci $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{n=1}^N a_{n\mathbf{k}} |\phi_{n\mathbf{k}}\rangle$. Teď dosadíme do rovnice paralelního přenosu 2.1.9.

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} P(\mathbf{k}) \right) |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \\
&= \sum_{n=1}^N \left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}} \right) |\phi_{n\mathbf{k}}\rangle - \sum_{m=1}^N |\phi_{m\mathbf{k}}\rangle \left\langle \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \phi_{m\mathbf{k}} \middle| \phi_{n\mathbf{k}} \right\rangle a_{m\mathbf{k}} \right] \\
&= \sum_{n=1}^N \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}} + \sum_{m=1}^N \left\langle \phi_{n\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \phi_{m\mathbf{k}} \right\rangle a_{m\mathbf{k}} \right] |\phi_{n\mathbf{k}}\rangle = 0
\end{aligned} \tag{2.1.10}$$

Jelikož $|\phi_{n\mathbf{k}}\rangle$ jsou lineárně nezávislé, proto každý koeficient musí být rovný nule.

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}} - i \sum_{m=1}^N A_{nm}(\mathbf{k}) a_{m\mathbf{k}} = 0 \tag{2.1.11}$$

Kde jsme definovali Berryho konexi jako $A_{nm}(\mathbf{k}) = i \langle \phi_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \phi_{m\mathbf{k}} \rangle$. Je zřejmé, že pokud podprostor má dimenzi 1 ($N = 1$), tak dostáváme naši původní definici Berryho konexe z rovnice 2.1.3.

Zde jsme ukázali zobecnění definice Berryho konexe i pro případ degenerovaného systému. Zde dostáváme strukturu vektoru matic místo vektoru, který jsme dostali z rovnice 2.1.11. Což vede k tomu, že tato struktura již není Abelovská. Když jsme ukazovali nutnou existenci Berryho fáze, mlčky jsme předpokládali, že vývoj funkce bude stále vlastním stavem původního hamiltoniánu, a že nedochází k excitaci stavu při vývoji. Je zřejmé, že jsme uvažovali pouze jedoelektronovou strukturu, kde se neobjevují degenerace. Z pohledu topologie jsme začali uvažovat vývoj stavu, kde jsme se neomezili striktně na jedoelektronovou funkci, ale i na více elektronovou funkci. Potom se nám mění i struktura topologie a musíme použít neabelovskou strukturu Berryho konexe.

Stojí zde za podotknutí, že tvorba podprostoru je pro každý bod $\mathbf{k} \in \mathcal{M}$ obecně různá. Tudiž pro každý různý bod \mathbf{k} máme vlastní podprostory obecně s různou dimenzí těchto podprostorů.

2.2 Berryho křivost

Když se vrátíme k definici Berryho fáze z rovnice 2.1.4. Z této definice lze definovat novou veličinu přes Stokesovou větu.

$$\gamma_n = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_n = \int_S d\mathbf{S} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_n = \int_S d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) \quad (2.2.1)$$

Definujeme novou veličinou Berryho křivost $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$, kde \mathcal{C} je uzavřená dráha v prostoru \mathcal{M} a kde potom S je plocha, která je ohraničená křivkou \mathcal{C} .

Když se podíváme na vztah pro Berryho křivost, uvidíme, že je potřeba tento vztah upravit, abychom mohli dostat vztah, který využijeme k numerickým výpočtům.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) &= \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_n(\mathbf{k}) = i \nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle & \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{k_j} \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} \rangle &= \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{k_k} \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ \Omega_{ni}(\mathbf{k}) &= i \varepsilon_{ijk} \nabla_{k_j} \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} \rangle \stackrel{Leibniz}{=} i \varepsilon_{ijk} \left(\langle \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{k_j} \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} \rangle \right) \\ \Omega_{ni}(\mathbf{k}) &= i \varepsilon_{ijk} \langle \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} \rangle = i \varepsilon_{ijk} \langle \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} | \mathbf{1} | \nabla_{k_l} u_{n\mathbf{k}} \rangle = i \varepsilon_{ijk} \langle \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} | \sum_m | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | | \nabla_{k_l} u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ \Omega_{ni}(\mathbf{k}) &= i \sum_m \left(\langle \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} \rangle - \langle \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} \rangle \right) = \\ \Omega_{ni}(\mathbf{k}) &= i \sum_{m \neq n} \left(\langle \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} \rangle - \langle \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} \rangle \right) + \\ &+ \overbrace{\langle \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} \rangle - \langle \nabla_{k_k} u_{n\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{k_j} u_{n\mathbf{k}} \rangle}^0 \\ \Omega_{ni}(\mathbf{k}) &= i \sum_{m \neq n} \left(\frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_j} H(\mathbf{k}) | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_k} H(\mathbf{k}) | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}})^2} - \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_k} H(\mathbf{k}) | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_j} H(\mathbf{k}) | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}})^2} \right) \\ \Omega_{ni}(\mathbf{k}) &= \sum_{m \neq n} \text{Im} \left(\frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_j} H(\mathbf{k}) | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_k} H(\mathbf{k}) | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}})^2} \right) \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

Dostali jsme předpis pro výpočet Berryho křivosti, který závisí na derivaci hamiltoniánu podle \mathbf{k} . Snadno lze ukázat z definice $H(\mathbf{k})$, že kde je $\hat{p} \rightarrow (\hat{p} + \hbar \mathbf{k})$, tedy v čitateli budeme mít maticové členy operátoru hybnosti, spolu s rozdílem energie ve jmenovateli.

Získali jsme předpis pro Berryho křivost, který již lze využít k numerickým výpočtům. Právě tyto hodnoty lze numericky získat z programu Wien2k. Jak vidíme, tak největší závislost je na rozdílu energií, takže největší příspěvky mají blízké hladiny. Proto pro degenerované hladiny jsou tyto příspěvky divergentní. Ale na druhou stranu tyto divergentní hodnoty jsou stejně velké pro tyto degenerující hladiny, ale mají opačné znaménko. Proto často ani nepřispívají do jednotlivých pozorovatelných. Pokud budeme uvažovat

o případech, kde Hilbertův prostor rozdělíme na podprostory, které mohou mít dimenzi větší než jedna, budeme muset pozměnit definici Berryho křivosti. Jelikož už samotná Berryho konexe je neabelovská, musíme použít definici Stokesovy věty pro neabelovskou strukturu.

Tedy dostáváme vztah pro Berryho křivost pro podprostor $\mathcal{P}(\mathbf{k})$.

$$\Omega_{nm}(\mathbf{k}) = \nabla \times \mathbf{A}_{nm}(\mathbf{k}) - i \sum_{l \in \text{in}} \mathbf{A}_{nl}(\mathbf{k}) \times \mathbf{A}_{lm}(\mathbf{k}) \quad (2.2.3)$$

Kde sčítání jde přes $l \in \text{in}$, kde referujeme na stavy, které se nachází v daném podprostoru $\mathcal{P}(\mathbf{k})$. Takže dostáváme pro daný podprostor vektor matic. Lze ukázat, že stopa tenzoru Berryho křivosti je rovná nule. Což nám naznačuje to, že blízké hladiny mají stejné hodnoty až na znaménko. Pokud využijeme definici Berryho konexe pomocí Blochových stavů $|u_{nk}\rangle$:

$$\begin{aligned} \Omega_{nm}^i(\mathbf{k}) &= i\varepsilon_{ijk} \left(\partial_{k_j} \langle u_{nk} | \partial_{k_k} u_{mk} \rangle + \sum_{l \in \text{in}} \langle u_{nk} | \partial_j u_{lk} \rangle \langle u_{lk} | \partial_k u_{mk} \rangle \right) \\ &= i\varepsilon_{ijk} \left(\langle \partial_{k_j} u_{nk} | \partial_{k_k} u_{mk} \rangle + \langle u_{nk} | \partial_{k_j} \partial_{k_k} u_{mk} \rangle - \sum_{l \in \text{in}} \langle \partial_{k_j} u_{nk} | u_{lk} \rangle \langle u_{lk} | \partial_k u_{mk} \rangle \right) \\ &= i\varepsilon_{ijk} \left(\langle \partial_{k_j} u_{nk} | \sum_l |u_{lk}\rangle \langle u_{lk}| | \partial_{k_k} u_{mk} \rangle - \sum_{l \in \text{in}} \langle \partial_{k_j} u_{nk} | u_{lk} \rangle \langle u_{lk} | \partial_k u_{mk} \rangle \right) \\ &= i\varepsilon_{ijk} \sum_{l \in \text{out}} \langle \partial_{k_j} u_{nk} | u_{lk} \rangle \langle u_{lk} | \partial_{k_k} u_{mk} \rangle \\ &= \sum_{l \in \text{out}} \text{Im} \left(\frac{\langle u_{nk} | \frac{\partial}{\partial k_j} H(\mathbf{k}) | u_{lk} \rangle \langle u_{lk} | \frac{\partial}{\partial k_k} H(\mathbf{k}) | u_{mk} \rangle}{(E_{nk} - E_{mk})^2} \right) \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

Je zde vidět, že je výhodné někdy přejít k neabelovské struktuře, abychom se zbavili zdánlivých divergencí.

Jelikož náš konkrétní materiál bcc Fe nemá degeneraci hladin, bude nám stačit při numerickém výpočtu Berryho křivosti vztah 2.2.2.

3 Modifikace pohybových rovnic

Celá fyzika se zabývá pohybem a změnou systému. V této kapitole se podíváme na pohyb elektronu v systému, který je zatížen vnějším elektromagnetickým polem.

3.1 Zavedení pohybových rovnic

V předchozích kapitolách jsme se dívali na změnu systému, při adiabatické evoluci. Podíváme se na rovnice pohybu, které nám budou dávat změnu systému vlivem vnějších sil. První rovnice je pro střední rychlost stavu pro hladinu n . V kvantové mechanice se právě střední hodnoty fyzikálních hodnot definují jako střední hodnoty operátoru přiřazené k dané veličině.

Operátor pro rychlost odvodíme z časové derivace operátoru, přes komutátor hamiltoniánu a daného operátoru $\hat{\mathbf{v}} = \dot{\hat{\mathbf{r}}} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}]$. Podívejme se na střední rychlost pro elektronovou funkci hladiny n před tím, než na systém začne působit externí elektromagnetické pole.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v} \rangle_n &= \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{v}} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi_{n\mathbf{k}} | [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}] | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle u_{n\mathbf{k}} | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle = \\ &= \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \hbar \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{\partial E_{n\mathbf{k}}}{\partial \hbar \mathbf{k}} = \frac{\partial \omega_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

Dostáváme tvar očekávané rychlosti, který odpovídá definici grupové rychlosti. Ale pokud teď zapneme externí elektromagnetické pole, tak nám to ovlivní vlastní stavy. Střední rychlost systému, který je zatížen externím elektromagnetickým polem, se změní. Naší úkolem bude ukázat příspěvek prvního řádu poruchové teorie do střední rychlosti. Kde uvažujeme nový stav v poruchovém stavu $|\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle = |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$, kde z poruchové teorie nám vyplývá, že porucha je kolmá na původní neporušený stav $\langle \psi_{n\mathbf{k}} | \delta\psi_{n\mathbf{k}} \rangle = 0$. Kde my bereme poruchový parametr $\dot{\mathbf{k}}$, takže $|\delta\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \sim O(\dot{\mathbf{k}})$. Budeme počítat poruchu do první mocniny $\dot{\mathbf{k}}$. V kapitole 2.1.1, jsme ukázali, že pokud existuje časová změna parametru \mathbf{k} , tak je potřeba přidat fázi. Odvození poruchového členu, dostaneme ze Schrödingerovy rovnice. Podíváme se na levou stranu rovnice. Zde rovnou použijí rovnici pro periodickou část řešení hamiltoniánu $H(\mathbf{k}) |u_{n\mathbf{k}}\rangle = E_{n\mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \right) = \\
&= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d't E_{n\mathbf{k}}(t')} e^{i \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_n} \left(|u_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle \right) \right] = \\
&E_{n\mathbf{k}} \left(|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \right) - \hbar \dot{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{A}_n \left(|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \right) + \\
&\quad \dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle \sim O(\dot{\mathbf{k}}^2) \sim 0 \quad (3.1.2) \\
&+ i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d't E_{n\mathbf{k}}(t')} e^{i \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_n} \left[\dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle + \dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle \right] = \\
&= E_{n\mathbf{k}} \left(|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \right) - \hbar \dot{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{A}_n \left(|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \right) + \\
&+ i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d't E_{n\mathbf{k}}(t')} e^{i \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_n} \dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle
\end{aligned}$$

Podíváme se na pravou stranu rovnice.

$$H(\mathbf{k}(t)) \left(|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \right) = E_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle + H(\mathbf{k}(t)) |\delta\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (3.1.3)$$

Porovnáme obě části a vynásobíme obě strany fází $e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t d't E_{n\mathbf{k}}(t')} e^{-i \int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_n}$:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle &= H(\mathbf{k}(t)) |\psi_{\mathbf{k}(t)}\rangle \\
E_{n\mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle + E_{n\mathbf{k}} |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle - \hbar \dot{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{A}_n \left(|u_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle \right) + i\hbar \dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle &= \\
= E_{n\mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle + H(\mathbf{k}(t)) |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle & \\
i\hbar \dot{\mathbf{k}} \cdot \left[i\mathcal{A}_n + \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right] |u_{n\mathbf{k}}\rangle = \left[H(\mathbf{k}(t)) - E_{n\mathbf{k}} \right] |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle &
\end{aligned} \quad (3.1.4)$$

Než budeme pokračovat v odvozování, je potřeba se podívat na identitu:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle &= \mathbb{1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_m |u_{m\mathbf{k}}\rangle \left\langle u_{m\mathbf{k}} \left| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right. \right\rangle = \\
\left\langle u_{n\mathbf{k}} \left| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right. \right\rangle |u_{n\mathbf{k}}\rangle + \sum_{m \neq n} |u_{m\mathbf{k}}\rangle \left\langle u_{m\mathbf{k}} \left| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right. \right\rangle &= \\
-i\mathcal{A}_n |u_{n\mathbf{k}}\rangle + \sum_{m \neq n} |u_{m\mathbf{k}}\rangle \left\langle u_{m\mathbf{k}} \left| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right. \right\rangle &
\end{aligned}$$

Teď se vrátíme k rovnici 3.1.4 kam dosadíme předchozí identitu.

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{\mathbf{k}} \cdot \left[\left(i\mathcal{A}_n - i\mathcal{A}_n \right) |u_{n\mathbf{k}}\rangle + \sum_{m \neq n} \left\langle u_{m\mathbf{k}} \left| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle |u_{m\mathbf{k}}\rangle \right] &= \left[H(\mathbf{k}(t)) - E_{n\mathbf{k}} \right] |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle \\
i\hbar\dot{\mathbf{k}} \cdot \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \rangle}{H(\mathbf{k}(t)) - E_{n\mathbf{k}}} |u_{m\mathbf{k}}\rangle &= |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle \\
i\hbar\dot{\mathbf{k}} \cdot \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \rangle}{E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}}} |u_{m\mathbf{k}}\rangle &= |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle \\
-i\hbar\dot{\mathbf{k}} \cdot \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle}{(E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}})^2} |u_{m\mathbf{k}}\rangle &= |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle
\end{aligned} \tag{3.1.5}$$

Teď máme vše, abychom se mohli podívat na střední rychlost $\langle \tilde{\mathbf{v}} \rangle_n$ pro systém, který je zatížený externím elektromagnetickým polem. Kde máme z poruchového počtu $|\tilde{u}_{n\mathbf{k}}\rangle = |u_{n\mathbf{k}}\rangle + |\delta\phi_{n\mathbf{k}}\rangle$ a budeme novou střední rychlost vyjadřovat do první mocniny $\dot{\mathbf{k}}$.

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{\mathbf{v}} \rangle_n &= \langle \tilde{u}_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} | \tilde{u}_{n\mathbf{k}} \rangle = \langle \langle u_{n\mathbf{k}} | + \langle \delta\phi_{n\mathbf{k}} | | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} | | u_{n\mathbf{k}} \rangle + |\delta\phi_{n\mathbf{k}} \rangle \rangle \sim O(\dot{\mathbf{k}}^2) \sim 0 \\
&= \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} | \delta\phi_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle \delta\phi_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle \delta\phi_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} | \delta\phi_{n\mathbf{k}} \rangle \\
&= \frac{\partial E_{n\mathbf{k}}}{\partial \hbar \mathbf{k}} - i\dot{k}_i \sum_{m \neq n} \left[\frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_i} | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}})^2} - \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_i} | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}})^2} \right] \stackrel{2.2.2}{=} \\
\langle \tilde{\mathbf{v}} \rangle_n &= \frac{\partial E_{n\mathbf{k}}}{\partial \hbar \mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}^{(n)}
\end{aligned} \tag{3.1.6}$$

Můžeme spočítat transportní jevy v materiálu pod vlivem externího elektromagnetického pole. Abychom mohli spojit vliv externího pole na pohyb elektronu, tak se musíme podívat na čem závisí $\dot{\mathbf{k}}$.

Odvození vztahu pro $\dot{\mathbf{k}}$ lze nalézt v knize Ascrofta & Mermina [4], který používá první řád semi-klasické teorie pohybu elektronu.

Podívejme se v jaké závislosti vystupuje parametr \mathbf{k} v hamiltoniánu. Připomínáme, že $H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, pokud komutujeme exponenciálu přes hamiltonián, tak dostáváme nové členy do zobecněné hybnosti a to $\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \rightarrow \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k})^2}{2m}$. To je podobné, jako při počítání s magnetickým polem, tedy s vektorovým potenciálem \mathbf{A} . Což nás tato analogie přiblíží k odvození pohybové rovnice 3.1.7. Jelikož se budeme zabývat případy, kdy elektrické pole působící na systém bude záviset pouze na čase, a proto můžeme napsat elektrické

pole pomocí vektorového potenciálu $\mathbf{E}(t) = -\frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t}$ a magnetické pole napíšeme pomocí vektorového potenciálu $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(x)$. Zavedli jsme externí pole pomocí vektorového potenciálu a tedy nový hamiltonián. Jediná změna bude v obecní hybnosti, kde přejde $\frac{(\hat{p} + \hbar \mathbf{k})^2}{2m} \rightarrow \frac{(\hat{p} + \hbar \mathbf{k} + e\mathbf{A}(x,t))^2}{2m}$. Což nám vyhovuje, protože můžeme intuitivně zahrnout externí pole do parametru \mathbf{k} tedy $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}(t) = \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(t, r)$. Ale po této transformaci se tvar hamiltoniánu nezmění a tedy řešení vlastních stavů bude stejné jako před poruchou, jen parametr \mathbf{k} bude záviset na čase. Toto souhlasí s předpoklady na adiabatickou evoluci, kde jsme předpokládali evoluci parametru, kde systém stále bude mít stejné vlastní stavy. Poté mohou dostat přímočaře rovnici 3.1.7.

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e(\mathbf{E}_{\text{ext}} + \mathbf{v}_n \times \mathbf{B}_{\text{ext}}) \quad (3.1.7)$$

Kde pole \mathbf{E}_{ext} a \mathbf{B}_{ext} jsou externí pole, kterými působíme zvenčí na systém. Rychlost \mathbf{v}_n je střední rychlostí elektronu pro pás n .

3.2 Modifikace objemu fázového prostoru

Musíme podotknout důležitou vlastnost systému. Pokud systém obsahuje Berryho fázi, tak obecně systém nemá kanonické rovnice pohybu a to vede k narušení Liouvillovu teorému. Což pro nás znamená, že se nám mění hustota stavu ve fázovém prostoru. Tato modifikace se objevuje v semi-klasickém popisu pro očekávané hodnoty fyzikálních veličin.

Element objemu ΔV se ve fázovém prostoru mění v čase. Máme časový vývoj $\Delta V(t) = J(t, t_0) \Delta V(t_0)$, kde $J(t, t_0)$ je Jacobian transformace. Při malých změnách mohou napsat Jacobian ve tvaru $J(t, t_0) = 1 + \frac{\partial q_a(t_0)}{\partial q_a(t_0)} \Delta t$, kde q_a budou moje souřadnice \mathbf{r} a \mathbf{k} . Potom máme časovou změnu elementu objemu.

$$\frac{1}{\Delta V} \frac{d\Delta V}{dt} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} \quad (3.2.1)$$

Vezmeme výsledky z předchozí kapitoly pohybové rovnice pro systém zatížený externím elektromagnetickým polem.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v}(\mathbf{k}) - \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) \\ \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -e\mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}_{\text{ext}} \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

Jelikož jsou silně provázané, tak druhou rovnici dosadíme do první rovnice a první do druhé rovnice.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_{\text{ext}} \times \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) + \frac{e}{\hbar} (\dot{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \mathbf{B}_{\text{ext}} - \frac{e}{\hbar} (\mathbf{B}_{\text{ext}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \dot{\mathbf{r}} \\ \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -e\mathbf{E}_{\text{ext}} - e\mathbf{v} \times \mathbf{B}_{\text{ext}} - e(\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}) \dot{\mathbf{k}} + e(\dot{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}) \boldsymbol{\Omega} \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

Jednoduše lze dokázat, že $\dot{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\Omega} = \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega}$ a $\dot{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}$ a na levou stranu převedeme závislost na $\dot{\mathbf{r}}$ a $\dot{\mathbf{k}}$ a definujeme $D(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = 1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$.

$$\begin{aligned} D(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_{\text{ext}} \times \boldsymbol{\Omega} + \frac{e}{\hbar} (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \mathbf{B}_{\text{ext}} \\ D(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -e \mathbf{E}_{\text{ext}} - e \mathbf{v} \times \mathbf{B}_{\text{ext}} - \frac{e^2}{\hbar} (\mathbf{E}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}) \boldsymbol{\Omega} \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

Po dosažení výsledku z rovnice 3.2.4 do rovnice 3.2.1 zjistíme, že změna elementu objemu je $\Delta V = 1 + \mathbf{B}_{\text{ext}} \cdot \boldsymbol{\Omega}$ [5]. Tento člen bude modifikovat střední hodnoty fyzikálních veličin.

$$\langle O \rangle = \int d\mathbf{k} D(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \langle \mathbf{k} | O | \mathbf{k} \rangle \quad (3.2.5)$$

3.3 Anomální vodivost materiálu

Jednou z fyzikálních vlastností pevných látek je vodivost materiálu. Definujme anomální tenzor vodivosti σ^{AHE} jako $\mathbf{j}^{\text{AHE}} = \sigma^{\text{AHE}} \mathbf{E}_{\text{ext}}$, kde \mathbf{j}^{AHE} je dodatečná hustota proudu, která vznikne při zapnutí externího elektrického pole \mathbf{E}_{ext} . V předchozí kapitole jsme odvodili střední rychlost elektronu v materiálu pod vlivem externího pole. Pro tento případ je $\dot{\mathbf{k}} = -e \mathbf{E}_{\text{ext}}$.

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{\partial E_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_{\text{ext}} \times \boldsymbol{\Omega}^{(n)} \quad (3.3.1)$$

Vidíme, že dodatečný proud je z druhého členu z rovnice 3.3.1. Potom hustotu proudu systému $\mathbf{j}^{\text{AHE}} = e \sum_{\text{occ BZ}} \int d\mathbf{k} \mathbf{v}_n^{\text{AHE}}$ dostaneme jako integraci střední rychlosti přes Brillouinovu zónu a přes všechny okupované stavy.

$$\mathbf{j}^{\text{AHE}} = \mathbf{E}_{\text{ext}} \times \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} \sum_{\text{occ}} \frac{e^2}{\hbar} \boldsymbol{\Omega}^{(n)}(\mathbf{k}) \quad (3.3.2)$$

Potom definujeme tenzor anomální vodivosti jako $\sigma_{ij}^{\text{AHE}} = \varepsilon_{ijk} \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\text{occ BZ}} \int d\mathbf{k} \Omega_k^{(n)}(\mathbf{k})$.

Sčítání přes všechny okupované stavy, můžeme nahradit Fermi-Dirakovým rozdělením $f(\epsilon_f)$, kde je ϵ_f Fermiho energie. Právě toto rozdělení je pro systém s konečnou teplotou.

$$\sigma_{ij} = \varepsilon_{ijk} \frac{e^2}{\hbar} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} f(\epsilon_f) \Omega_k^{(n)}(\mathbf{k}) \quad (3.3.3)$$

Budeme definovat spektrum anomální vodivosti $\sigma_{ij}(\epsilon_f)$, kde budeme uvažovat, že anomální vodivost je funkcí Fermiho energie. Potom budeme měnit velikost Fermiho energie.

Ukázali jsme, že blízké energetické stavy mají velký příspěvek do Berryho křivosti. Součet Berryho křivostí blízkých stavů bývá nulová. Proto největší příspěvky do anomální vodivosti

jsou od stavů kolem Fermiho energie, kde právě tato hladina rozdělí v některých \mathbf{k} bodech blízké stavy tak, že jeden stav bude pod Fermiho hladinou a druhý stav bude nad Fermiho hladinou. Potom velký příspěvek do Berryho křivosti je od stavu těsně pod Fermiho hladinou, který není kompenzovaný druhým stavem, který je nad Fermiho hladinou [6].

Proto zavádíme anomální vodivost jako funkci Fermiho energie, abychom mohli ukázat příspěvky do Berryho křivosti pro různé energie, které rozdělují blízké stavy.

3.4 Orbitální magnetizace

Vlivem externího magnetického pole se mění i celková energie systému $\varepsilon_M = \varepsilon_{nk} - \mathbf{m}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}$, kde $\mathbf{m}(\mathbf{k})$ je orbitální magnetický moment.

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2} \int dr'^3 \mathbf{r}' \times \mathbf{j} = -\frac{e}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (3.4.1)$$

Jelikož se jedná o elektrony, tak můžeme proudovou hustotu psát jako $\mathbf{j} = -e\mathbf{v}\delta(\mathbf{r})$.

Jednoduše převedeme tento tvar do operátoru a budeme počítat střední hodnotu orbitálního momentu magnetizace.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{m} \rangle_n &= -\frac{e}{2} \langle \psi_{nk} | \mathbf{r} \times \mathbf{v} | \psi_{nk} \rangle \\ \langle m_i \rangle_n &= -\frac{e}{2} \varepsilon_{ijk} \langle \psi_{nk} | r_j v_k | \psi_{nk} \rangle \\ &= -\frac{e}{2} \varepsilon_{ijk} \sum_m \langle \psi_{nk} | r_j | \psi_{mk} \rangle \langle \psi_{mk} | v_k | \psi_{nk} \rangle \\ &= -\frac{e}{2} \varepsilon_{ijk} \sum_m \langle \psi_{nk} | r_j | \psi_{mk} \rangle \langle u_{mk} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \hbar k_k} | u_{nk} \rangle \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

Teď je potřeba se podívat, jak působí operátor polohy na stav $|\psi_{nk}\rangle$. Využijeme tvar pro maticové členy operátoru polohy z článku [7].

$$\begin{aligned} \langle \psi_{nk} | \hat{r}_j | \psi_{mk} \rangle &= \langle u_{nk} | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{r}_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | u_{mk} \rangle = \langle u_{nk} | \hat{r}_j | u_{mk} \rangle \\ &= i \left\langle u_{nk} \left| \frac{\partial}{\partial k_j} u_{mk} \right. \right\rangle \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

Vrátíme se k orbitálnímu momentu magnetizace, kde dosadíme výsledek z rovnice 3.4.3 a využijeme, že pro $m = n$ je tento člen symetrický a nebude přispívat.

$$\begin{aligned}
\langle m_i \rangle_n &= -i \frac{e}{2\hbar} \varepsilon_{ijk} \sum_{m \neq n} \left\langle u_{nk} \left| \frac{\partial}{\partial k_j} u_{mk} \right. \right\rangle \left\langle u_{mk} \left| \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_k} \right| u_{nk} \right\rangle \\
&= i \frac{e}{2\hbar} \varepsilon_{ijk} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{nk} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_j} | u_{nk} \rangle \langle u_{mk} | \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_k} | u_{nk} \rangle}{E_{nk} - E_{mk}} \\
&= \frac{e}{2\hbar} \sum_{m \neq n} \text{Im} \left(\frac{\langle u_{nk} | \frac{\partial}{\partial k_j} H(\mathbf{k}) | u_{mk} \rangle \langle u_{mk} | \frac{\partial}{\partial k_k} H(\mathbf{k}) | u_{nk} \rangle}{E_{nk} - E_{mk}} \right)
\end{aligned} \tag{3.4.4}$$

Zde máme předpis pro střední hodnotu orbitálního momentu magnetizace. Je dobré si povšimnout, že struktura je totožná jako pro výpočet Berryho křivosti 2.2.2, až na konstanty a lineární závislost rozdílu energie v jmenovateli.

Když zavedeme grand kanonický potenciál $\Omega(T, \mu, \mathbf{B}_{\text{ext}})$, kde T je teplota systému, μ je chemický potenciál, pro nás to bude Fermiho energie, a \mathbf{B}_{ext} je externí magnetické pole. Z teorie termodynamiky máme tvar grand kanonického potenciálu pro systém elektronu. Nesmíme zapomenout na závěry z kapitoly 3.2, kde vlivem externího magnetického pole musíme změnit hustotu stavu.

$$\Omega(T, \mathbf{B}_{\text{ext}}, \mu) = -\frac{1}{\beta} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B}_{\text{ext}} \cdot \boldsymbol{\Omega}^{(n)} \right) \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon_M - \mu)} \right) \tag{3.4.5}$$

Potom magnetizace systému má tvar $\mathbf{M} = -\left(\frac{\partial \Omega(T, \mathbf{B}_{\text{ext}}, \mu)}{\partial \mathbf{B}_{\text{ext}}} \right)_{\mu, T}$. Budeme uvažovat pouze se členy lineárně úměrné poli \mathbf{B}_{ext} .

$$\mathbf{M} = \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} f(\mu) \mathbf{m}_n + \frac{e}{\beta \hbar} \boldsymbol{\Omega}^{(n)}(\mathbf{k}) \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon_{nk} - \mu)} \right) \tag{3.4.6}$$

Je dobré se podívat na limitu pro nulovou teplotu [8]. Kde $\theta(\epsilon_f - \epsilon_{nk})$ je skoková funkce.

$$\mathbf{M} = \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(\epsilon_f - \epsilon_{nk}) \mathbf{m}_n - \frac{e}{\hbar} \theta(\epsilon_f - \epsilon_{nk}) (\epsilon_{nk} - \epsilon_f) \boldsymbol{\Omega}^{(n)} \tag{3.4.7}$$

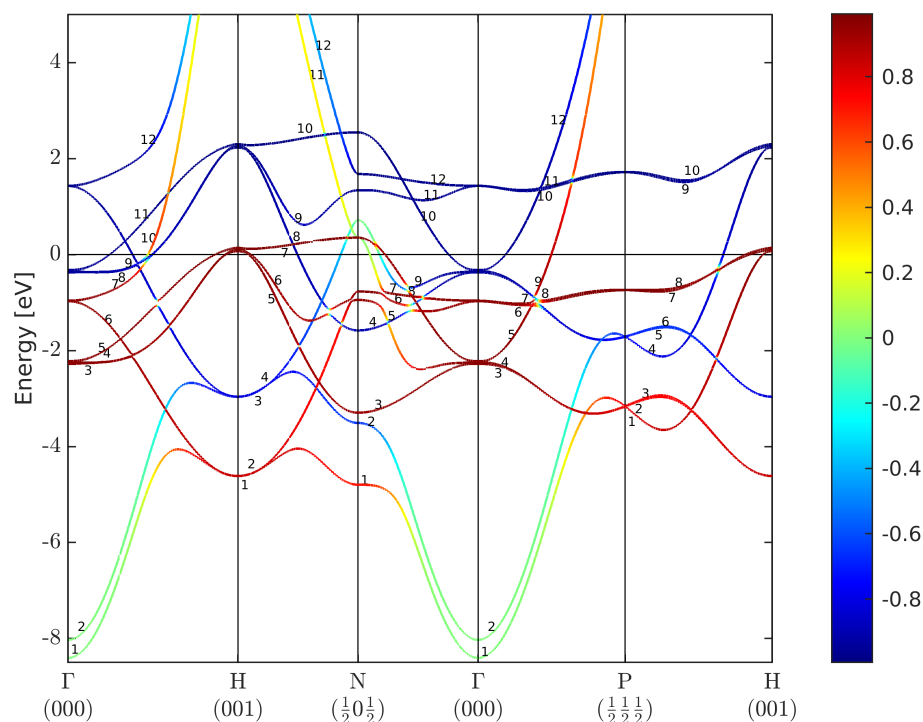
Opět jako pro anomální vodivost můžeme zavést spektrum magnetizace, kde budeme uvažovat závislost magnetizace na pozici Fermiho hladině.

4 Numerické výpočty Berryho křivosti, anomální vodivosti a orbitální magnetizace

Zobrazíme numerické výpočty Berryho křivosti, spektrum anomální vodivosti a spektrum orbitálního momentu magnetizace pro železo Fe se strukturou bcc.

Parametry výpočtu DFT

Počítali jsme strukturu železa, pro tělesově centrovanou kubickou strukturu, kde máme mřížkový parametr 2.8665 \AA ($5,416902 a_0$). Důležitým parametrem našeho systému je množství \mathbf{k} bodů, ve kterých jsme počítali Berryho křivost, což nám reprezentuje s jakou přesností jsme počítali. Zvolili jsme 120^3 počet \mathbf{k} bodů v jedné primitivní buňce. Dalším parametrem je rozsah energie, kde počítáme dané vlnové funkce a to nám určuje počet hladin, které budeme mít k dispozici. Zvolili jsme rozsah energií od -100 eV do 15 eV , což zhruba odpovídá, že jsme pro každý \mathbf{k} bod měli 40 hladin. Železo je feromagnet, které má vlastní magnetizaci, kterou jsme zvolili ve směru osy z .¹



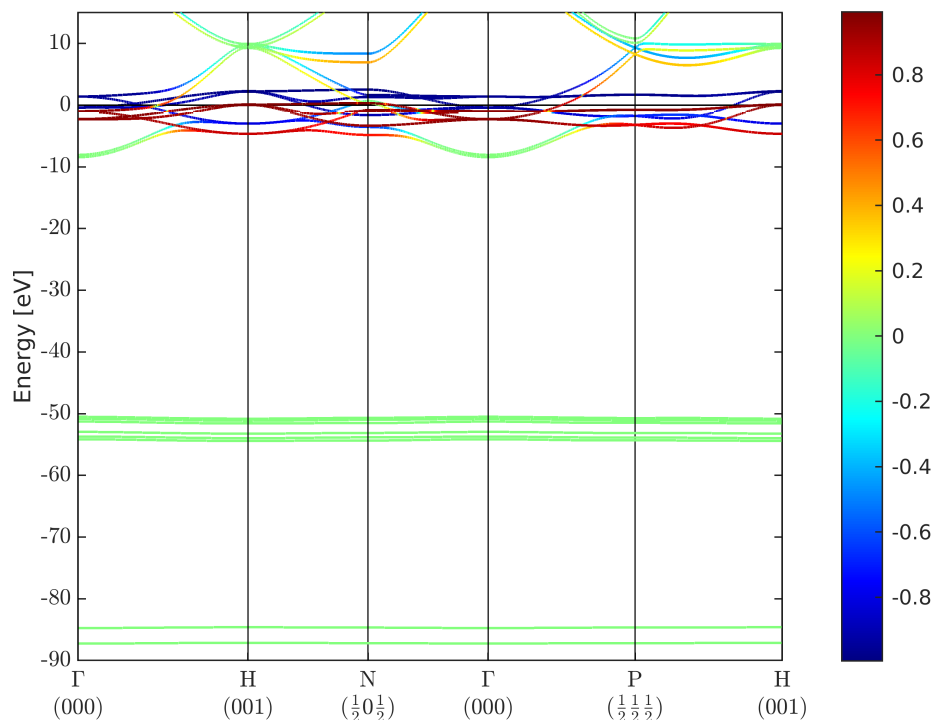
Obrázek 4.1 Pásová struktura železa Fe bcc, s projekcí do d-stavů

¹Toto je velmi důležité pro výpočet, jelikož nám vstupuje do výpočtu spin-orbitální interakce, která nám pozmění pásovou strukturu

Pásová struktura Fe bcc

Vytvořili jsme pro ilustraci pásovou strukturu. Kde jsme zvolili 1D cestu v Brillouinově zóně. Na pásové struktuře 4.1 jsme zvolili číslování pásu od pásu, který by měl odpovídat stavu elektronu $4s$.² Energie 0 eV vyjadřuje pozici Fermiho hladiny.

Ještě zde zobrazíme tu samou pásovou strukturu pro stejnou 1D cestu, ale zobrazíme to pro všechny pásy, které jsme spočetli pro dané \mathbf{k} body.



Obrázek 4.2 Pásová struktura železa Fe bcc, s projekcí do d-stavů

Pro co nejpřesnější výsledek Berryho křivosti potřebujeme znát co nejvíce hladin. Každá přispívá do Berryho křivosti, ale příspěvek je nepřímo úměrný kvadrátu rozdílu energií. Pro výpočet Berryho křivosti pro pásy kolem Fermiho hladiny nám postačí báze, kterou jsme zvolili (pásy zobrazené na Obr. 4.2).

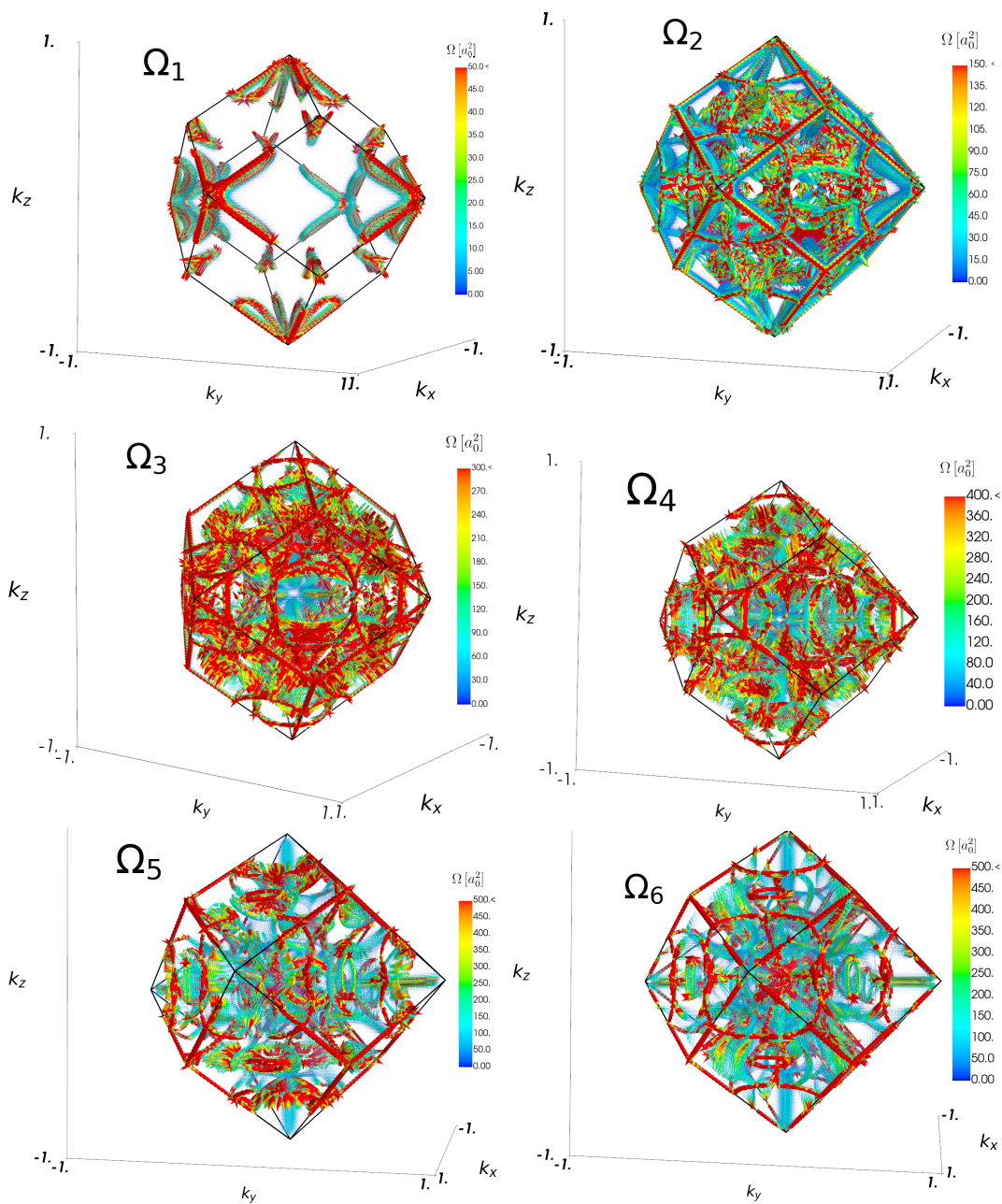
4.1 Berryho křivost pro Fe bcc

Vytvořili jsme program, který spočítá Berryho křivost $\Omega^{(n)}(\mathbf{k})$ pomocí vztahu 2.2.2 [6]. Pro výpočet potřebujeme energii a maticové členy operátoru hybnosti. Obě dvě hodnoty jsme získali z programu Wien2k, který počítá elektronovou strukturu látek pomocí metody ab-initio. Ve vztahu je sčítání přes všechny hladiny v systému, to je důvod proč jsme volili takový rozsah energií, aby počítání Berryho křivosti pro daný pás měl dostatek členů.

²Určitě neplatí, že by celý pás 1 byl stav $4s$. Už na pásové struktuře v bodě H má pás 1 nenulovou projekci do d-stavů

V grafech jsme zvolili vhodnou škálu zobrazení vektoru. V \mathbf{k} bodech s velkou symetrií se nacházejí hladiny, které mají rozdíl energií velmi malý a proto v těchto bodech je Berryho křivost o několik řádů větší než v ostatních bodech.³ Tento problém je pouze lokalizován na několik bodů v prostoru. Z tohoto důvodu jsme tyto body v grafech přeskálovali. V grafech znázorníme magnitudu daných vektorů pomocí barvy. V grafech je znázorněna Brillouinova zóna struktury bcc, ve které jsou zobrazeny Berryho křivosti pro daný pás. Berryho křivost počítáme v atomárních jednotkách pro $[\Omega] = a_0^2$, kde a_0 je Bohrov poloměr.

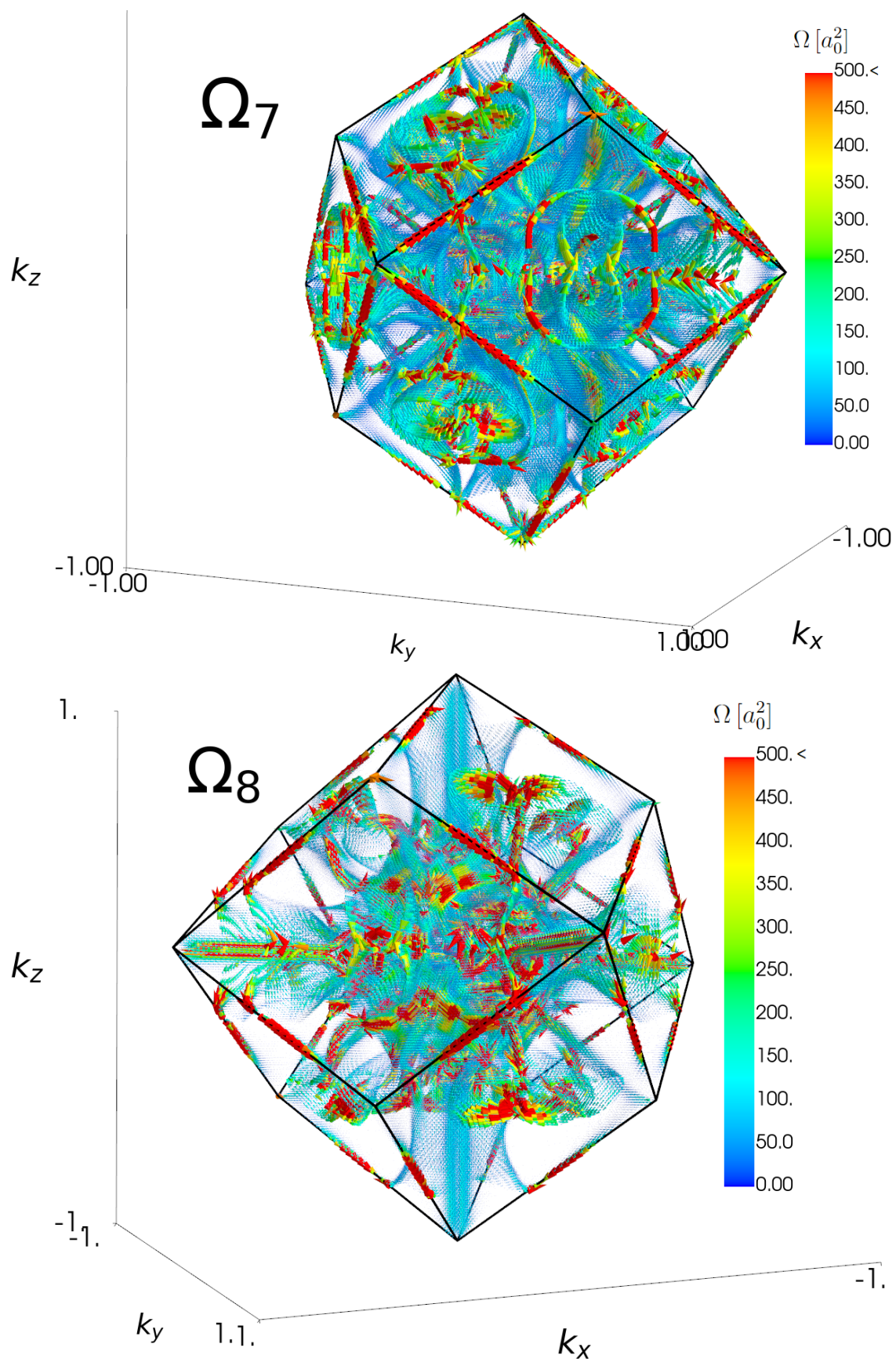
Znázorníme vektorové pole Berryho křivosti v Brillouinové zóně. Zobrazíme pásy od 1 do 10,⁴ které vidíme na pásové struktuře 4.1.



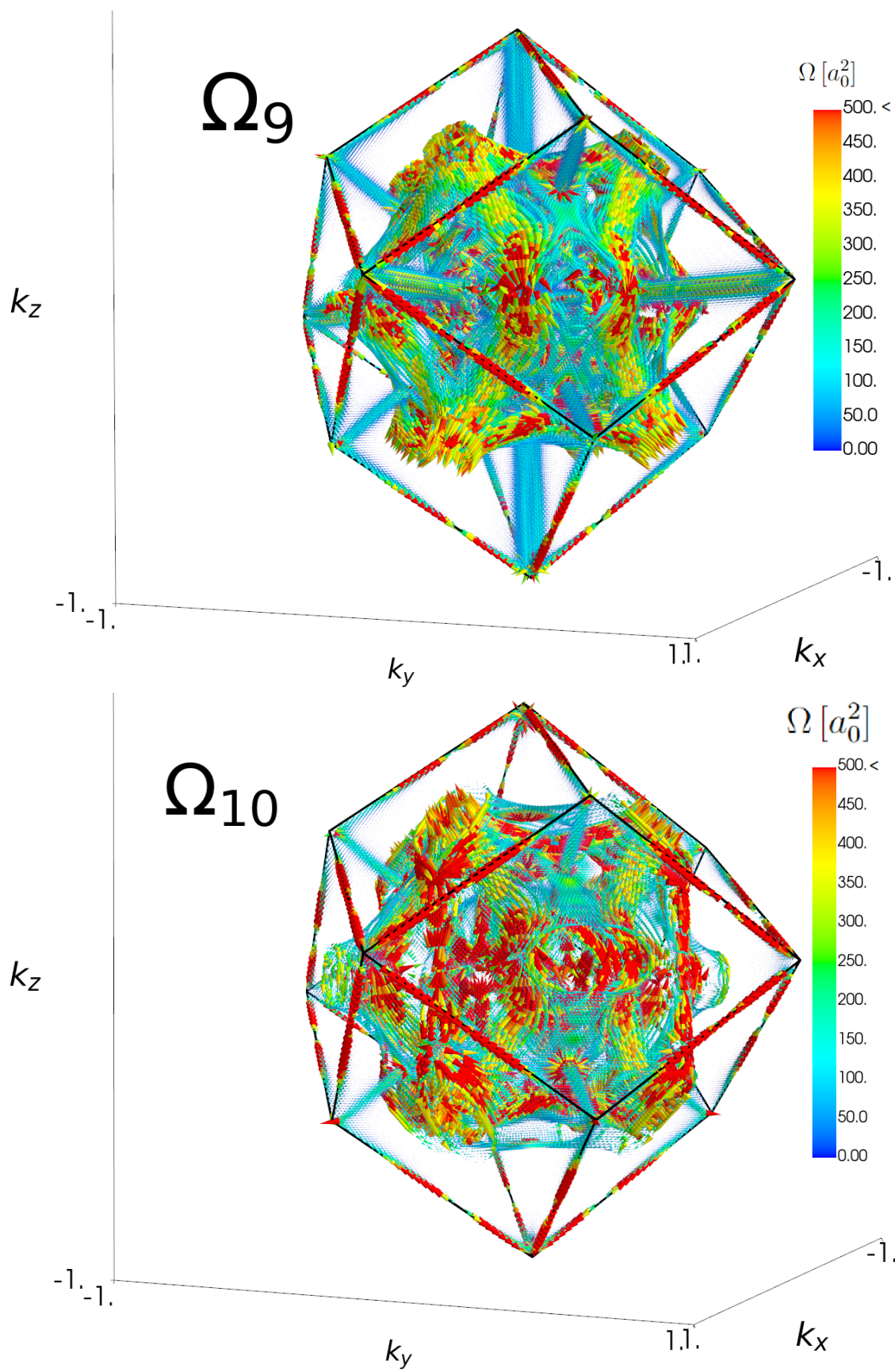
Obrázek 4.3 Berryho křivosti pro prvních 6 pásů

³Tyto body jsou převážně na hranách Brillouinovy zóny a v některých význačných bodech

⁴Číslování odpovídá číslům z pásové struktury 4.1



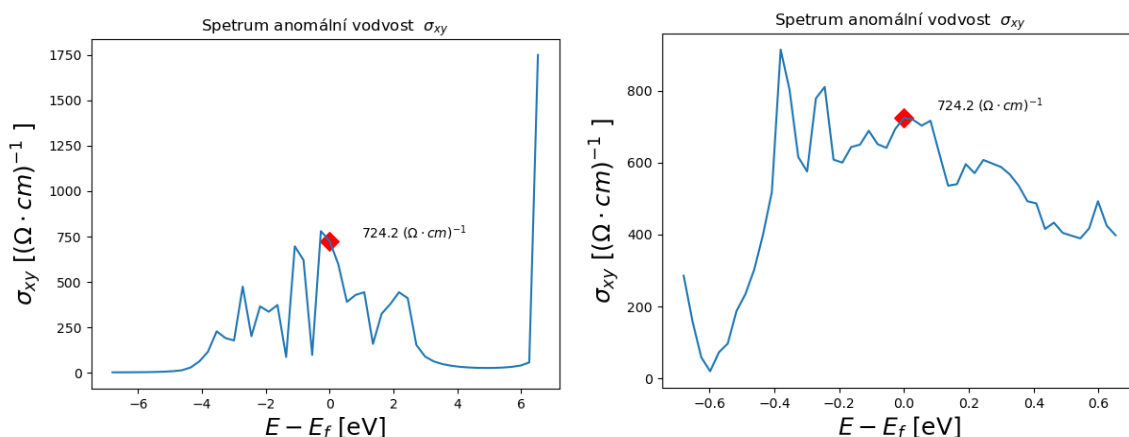
Obrázek 4.4 Berryho křivosti pro pásy těsně pod Fermiho hladinou



Obrázek 4.5 Berryho křivosti pro pásy těsně nad Fermiho hladinou

4.2 Anomální vodivost pro bcc Fe

Zde využijeme předchozí výpočet Berryho křivosti, s kterým můžeme za pomoci vztahu 3.3.3 vypočítat anomální vodivost při nulové teplotě.⁵ Spočítali jsme anomální vodivost pro různé hodnoty Fermiho hladiny, kterou jsme zobrazili v grafech Obr. 4.6, kde jsme zobrazili grafy pro dva různé intervaly. I když spektrum bylo spočítáno pro jemné dělení energií, tak se ukazuje, že vodivost je velmi citlivá na změnu Fermiho hladiny. V grafu je zapsaná anomální vodivost bcc železa pro Fermiho hladinu 0 eV. Velikost anomální vodivosti $\sigma_{xy} = 742.2 (\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$. Na grafu je vidět spektrum pro 6 eV, kde jsi všimneme, že anomální vodivost prudce vzrostla. Důvod je dosažení limitu našich výpočtu, jelikož jsme došli k posledním pásům, kde už nemáme vyšší pásy, které by tyto divergence vyrušily. Ostatní směry anomální vodivosti jsou nulové.

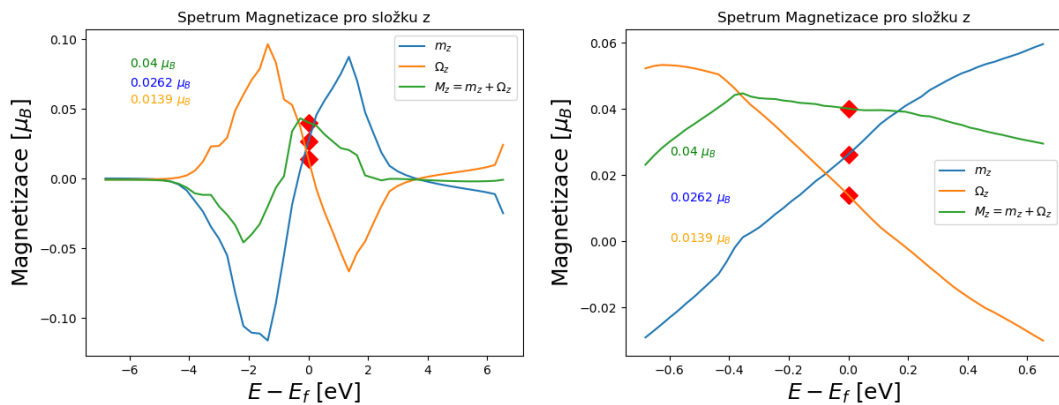


Obrázek 4.6 Spektra anomální vodivosti σ_{xy}

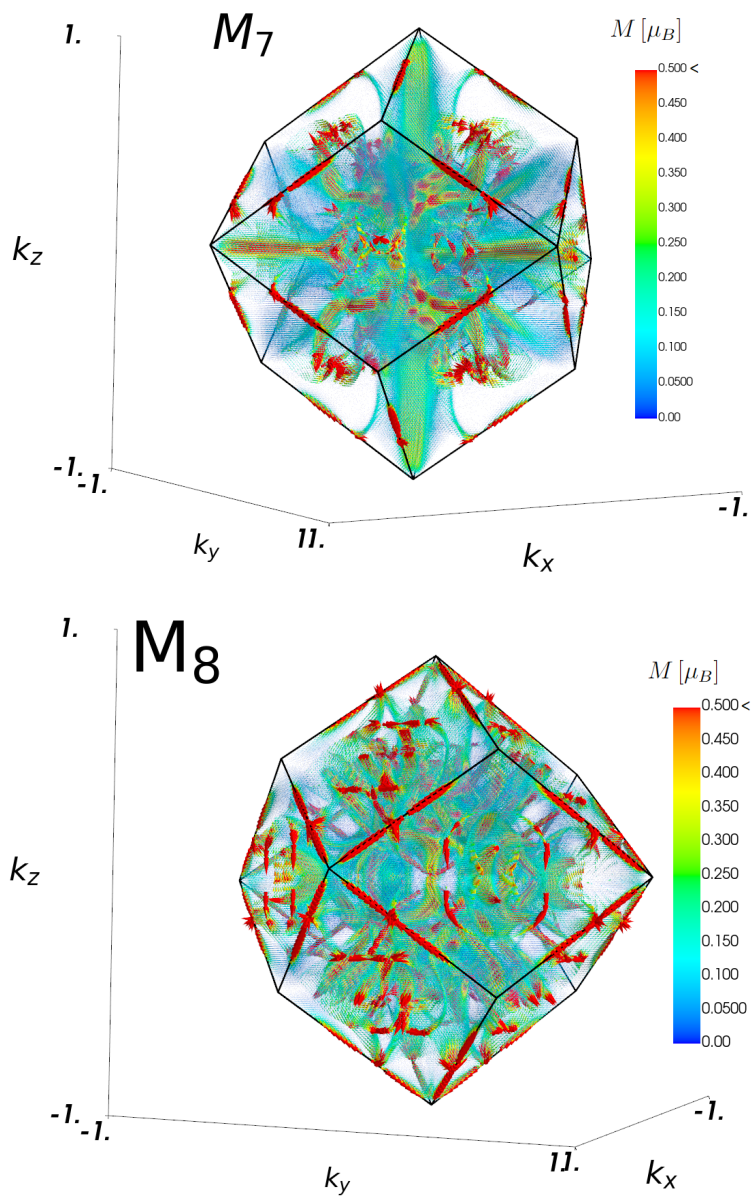
4.3 Orbitální magnetizace pro Fe bcc

Pro výpočet orbitální magnetizace jsme použili vztah 3.4.7, kde jsme výpočty rozdělili na dva příspěvky. První příspěvek je od magnetických dipólů elektronů a druhý příspěvek je od Berryho křivosti. První část jsme spočítali pomocí vztahu 3.4.4. Zobrazíme spektrum orbitální magnetizace a jednotlivých příspěvků od magnetických dipólů elektronu a od příspěvku Berryho křivosti. Vztah 3.4.4 má stejnou strukturu jako výpočet pro Berryho křivosti. Jediný rozdíl je v závislosti na rozdíl energii. Pro ukázkou jsme zobrazil orbitální magnetizaci pro pásy těsně pod Fermiho hladinou Obr. 4.8. Pro orbitální magnetizaci jsme sestrojili spektrum orbitální magnetizace Obr. 4.7, kde jsme znázornili příspěvky od jednotlivých členů orbitální magnetizace. Potom celková magnetizace je součtem těchto hodnot. Pro Fermiho hladinu jsme spočetli, že orbitální magnetizace ve směru z pro bcc železo je $M_z = 0.040 \mu_B$, kde μ_B je Bohrov magneton. Opět ostatní směry orbitální magnetizace jsou nulové. Pro oblast okolo -6 eV a okolo 6 eV, orbitální magnetizace jde k nule.

⁵ $f(\epsilon_f) \rightarrow \theta(\epsilon_f - E_{nk})$



Obrázek 4.7 Spektrum magnetizace ve směru osy z



Obrázek 4.8 Orbitální moment pro pásy těsně pod Fermiho hladinou

5 Závěr

Ukázali jsme, že Berryho křivost je vlastnost, která hraje důležitou roli ve fyzice pevných látek, neboť její existence zaručuje anomální transportní jevy v pevných látkách. V této práci jsme zavedli definici Berryho křivosti a diskutovali její původ. Odvodili jsme, že Berryho křivost je veličina, která je závislá pouze na geometrii daného systému. Dále jsme získali, vztah kterým jsme byli schopni spočítat Berryho křivost pro nedegenerované i degenerované systémy. Poté jsme odvodili zahrnutí Berryho křivosti do pohybových rovnic, popisující pohyb pro elektronů v externím elektromagnetickém poli. Dále jsme se zaměřili na počítání a vizualizaci Berryho křivosti pro bcc železo, které jsme vizualizovali pro pásy blízké Fermiho hladině. Následně jsme spočítali efekty svázané s Berryho křivostí a to pro anomální vodivost a orbitální magnetický moment. Zároveň jsme ukázali spektra těchto fyzikálních veličin.

Literatura

1. XIAO, Di; CHANG, Ming-Che; NIU, Qian. Berry phase effects on electronic properties. *Rev. Mod. Phys.* 2010, roč. 82, s. 1959–2007. Dostupné z DOI: [10.1103/RevModPhys.82.1959](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1959).
2. BERRY, Michael Victor. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences.* 1984, roč. 392, č. 1802, s. 45–57. Dostupné z DOI: [10.1098/rspa.1984.0023](https://doi.org/10.1098/rspa.1984.0023).
3. BRADLYN, Barry; IRAOLA, Mikel. Lecture notes on Berry phases and topology. *SciPost Phys. Lect. Notes.* 2022, s. 51. Dostupné z DOI: [10.21468/SciPostPhysLectNotes.51](https://doi.org/10.21468/SciPostPhysLectNotes.51).
4. ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. Holt-Saunders, 1976.
5. XIAO, Di. *Berry Phase Modification to Electron Density of States and Its Applications*. 2007. Dis. pr. The University of Texas at Austin.
6. STEJSKAL, O.; VEIS, M.; HAMRLE, J. The flow of the Berry curvature vector field. *Sci Rep.* 2022, roč. 12, s. 97. Dostupné z DOI: [10.1038/s41598-021-04076-z](https://doi.org/10.1038/s41598-021-04076-z).
7. ESTEVE-PAREDES, Juan José; PALACIOS, Juan José. A comprehensive study of the velocity, momentum and position matrix elements for Bloch states: Application to a local orbital basis. *SciPost Physics Core.* 2023, roč. 6, č. 1. ISSN 2666-9366. Dostupné z DOI: [10.21468/scipostphyscore.6.1.002](https://doi.org/10.21468/scipostphyscore.6.1.002).
8. ARYASETIAWAN, F.; KARLSSON, K. Modern theory of orbital magnetic moment in solids. *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* 2019, roč. 128, s. 87–108. ISSN 0022-3697. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2017.12.004>. Spin-Orbit Coupled Materials.