

# 半经典响应理论

牛谦<sup>1,†</sup> 高阳<sup>1,††</sup> 肖聪<sup>2</sup>

(1 中国科学技术大学物理学院 合肥 230026)

(2 澳门大学应用物理及材料工程研究院 澳门 999078)

2024-06-26收到

† email: niuqian@ustc.edu.cn

†† email: ygao87@ustc.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20240704

## Semiclassical response theory

NIU Qian<sup>1,†</sup> GAO Yang<sup>1,††</sup> XIAO Cong<sup>2</sup>

(1 School of Physical Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

(2 Institute of Applied Physics and Materials Engineering, University of Macau, Macau 999078, China)

**摘要** 对电子响应性质的研究,如平衡态下的磁化率和非平衡态下的输运系数等,是早期固体理论发展的原初动力之一。当朴素的经典粒子观经由量子力学原理和多体作用的锤炼升华至半经典粒子观后,进一步辅以对几何相位和拓扑性的深刻认识,人们终获得理解响应性质的完善、准确、颇具物理直观性的半经典理论框架。文章将介绍基于现代的电子粒子观和几何相位的半经典响应理论这一基本框架,并摘选热电响应、自旋输运、非线性响应、外禀机制这四个重要研究方向中的一些代表性问题,来解释半经典响应理论的内涵并展示其在固体物理研究中的价值。

**关键词**

半经典动力学,贝里曲率,人工电磁场,热电输运,爱因斯坦关系,热轨道磁化,守恒自旋流,昂萨格对易关系,电磁极化率,非线性霍尔效应,偏斜散射,散射横移

**Abstract** The study of the response properties of electron systems, such as the magnetic susceptibility in equilibrium and various transport coefficients out of equilibrium, was one of the primal forces driving the early development of solid state physics. After the classical particle view of electrons was modified by quantum mechanics and the many-body effect and evolved into the modern semiclassical particle view, the semiclassical response theory was established with the further help of the deep insight into Hilbert-space geometry and topology, offering a complete, accurate and, most importantly, intuitive framework for discussing various response properties. In this article we introduce the semiclassical response theory using classical examples from four important aspects, namely, thermoelectric response, spin transport, nonlinear response, and extrinsic mechanisms. Its value in solid state physics will also be demonstrated.

**Keywords** semiclassical dynamics, Berry curvature, emergent electromagnetic field, thermoelectric transport, Einstein relation, thermal orbital magnetization, conserved spin current, Onsager's reciprocal relation, electromagnetic polarizability, nonlinear Hall effect, skew scattering, side jump

物体的宏观性质往往以大量微观粒子对外场的总体响应来表现。对于经典粒子而言，其可观测的物理性质所对应的物理量往往可以写成位置和动量的函数，故它与相空间分布函数的乘积就给出了此物理量在相空间的密度。此密度对动量的积分则可给出物理量在空间的密度。经典物理中的质量、电荷和能量密度以及它们的流都是以这种方式给出的。

早年洛伦兹把金属中的电子想象成无相互作用的理想气体，其平衡状态下的分布函数由麦克斯韦—玻尔兹曼分布给出<sup>[1]</sup>。索莫非考虑到电子的量子统计，把分布函数改成费米—狄拉克分布<sup>[2, 3]</sup>。在布洛赫的半经典理论中，分布函数中的能量又进一步被改为布洛赫电子的能量<sup>[4]</sup>。

布洛赫电子的经典图像需要构造波包，此时电子的微观性质应由相应的量子算符在波包态下的期望值给出。比如，布洛赫电子的轨道磁矩反映了电流在波包中的几率密度分布，它可由布洛赫电子的哈密顿量在外磁场下的线性变化在波包态下的期望值给出<sup>[5, 6]</sup>。磁场除了使布洛赫波包能量变化之外，也会与贝里曲率耦合改变相空间的态密度<sup>[7]</sup>。这将反映在对各种宏观物理量的计算过程中。前文(本专栏第2篇，详见：《物理》，2024, 53(4): 215)讲到的轨道磁化强度就同时考虑到了磁场的这两种效应。

在外场作用下，粒子的位置和动量会发生变化。若此变化也使能量改变，分布函数就会偏离平衡状态。此时散射机制将起作用，使分布函数向平衡状态弛豫。所谓弛豫时间近似，就是在描述分布函数演化的玻尔兹曼方程中，把散射部分用一个唯象的时间参数来表达。更精细的做法需考虑布洛赫态之间的跃迁几率，其相关参数的计算还要用到量子力学的散射理论。散射和漂移两者抗衡，达到的稳恒状态仍然会剩余一个对平衡分布的偏移。传统输运理论中，电子体系对外场的非平衡响应主要体现在这个偏移中。

前文提到的内禀反常霍尔效应来自于电场通过贝里曲率对布洛赫粒子速度的修正<sup>[5, 6, 8-10]</sup>。在线性响应这一阶，由于这个反常速度已经正比于

电场，与其相关的电流的计算就可只用平衡分布而略去非平衡偏移。早年，当Karplus—Luttinger首次提出这个内禀效应的时候<sup>[11]</sup>，遭到了Smit的强烈反对，理由是反常速度正比于动量的变化率，它在体系达到稳恒状态时会趋于零<sup>[12]</sup>。其实这个理由并不成立，因为散射过程中动量的量子跃迁与漂移过程中的经典运动发生在完全不同的时间尺度上，它们对粒子运输的影响不可混为一谈。

本文把讨论范围从电磁场扩展到一般的非均匀外场，包括温度和化学势，分五个小节从不同侧面比较系统地介绍半经典响应理论，揭示拓扑几何效应在各种应用中的表现。本文讨论的重点放在平衡态响应和非平衡响应中的内禀部分，只涉及到费米—狄拉克分布，但包括外场通过能量和贝里曲率对物理量的修正。这部分结果可以直接与能带结构的第一性原理计算结合，针对实际材料做出理论预言。

为了完整，我们也划出一小节专门讨论散射造成的外禀效应。Sinitsyn等人对比早年拉廷格的量子输运理论<sup>[13]</sup>，系统地梳理了杂质散射在半经典响应理论中的各种作用，发现玻尔兹曼方程稍作修改即可继续使用<sup>[14]</sup>。这包括Smit提出的偏斜散射<sup>[12]</sup>和Berger提出的横移散射修正<sup>[15]</sup>。我们将描述不同类型的散射源对反常霍尔效应的影响及其对应的标度关系，并进一步介绍Sinitsyn等人的工作在一般响应问题中的推广。

## 1 粒子运动方程

半经典响应理论的核心是以波包为载体的粒子的运动方程。Sundaram和本文作者之一考虑了随位置和时间缓慢变化的外场对布洛赫粒子的影响<sup>[6]</sup>。此外场可以是电磁规范势，也可以是应变或其他序参量场。假设在波包范围内体系仍然可以看作是周期的，那波包就由某个局域能带里的布洛赫态叠加而成。我们假设这个能带是非简并的，并忽略波包的移动所导致的能带间的Zener隧穿。波包演化满足薛定谔方程，自然也应满足相应的变分原理。在外场缓慢变化的前提下，拉

格朗日量可以写成波包中心位置和动量以及它们的时间导数的函数。其中出现的有局域的能带函数和外场变化带来的能量修正。这个修正正比于外场所耦合的物理量在波包里的偶极矩，可以用局域布洛赫态来表达。拉格朗日量中出现的还有局域布洛赫态在动量、位置和时间维度的贝里联络。后两者来源于局域布洛赫态通过外场对位置

和时间的依赖。

粒子的运动方程可由相应的欧拉—拉格朗日方程给出。除了能量对动量和位置的导数以外，粒子的速度和动量变化率还线性地依赖于贝里曲率在相空间和时间维度的各种分量。在电磁场的情形中，通过吸收规范势把动量重新定义，方程会大大简化；新动量的变化率由洛伦兹力给出，

### Box 1 混合贝里曲率

假设晶体中的电子受到若干缓慢变化的外场  $\beta(\mathbf{r}, t) = \{\beta_1(\mathbf{r}, t), \beta_2(\mathbf{r}, t), \dots\}$  的影响，其空间变化的尺度远远大于晶格常数，时间变化的尺度远远大于普朗克常数除以带间能隙。在每个位置  $\mathbf{r}$  和时刻  $t$  附近，晶格周期性近似保留，从而可定义局域的布洛赫波函数  $\psi = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} |u_n[\mathbf{k}, \beta(\mathbf{r}, t)]\rangle$ 。我们进一步认为电子的运动局限在一个能带中，其波包可用上述局域布洛赫波函数展开。通过外场，电子的能量不但依赖于(晶格)动量，也成为位置和时间的函数  $\varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ 。此外，贝里曲率也有了更多的分量：动量、位置和时间，任意两个参数之间都可以定义贝里曲率。这些混合贝里曲率都会影响电子波包的运动<sup>[6]</sup>，

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \varepsilon}{\hbar \partial \mathbf{k}} - \boldsymbol{\Omega}_{kr} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \boldsymbol{\Omega}_{kk} \cdot \dot{\mathbf{k}} - \boldsymbol{\Omega}_{kt}, \quad (1)$$

$$\dot{\mathbf{k}} = -\frac{\partial \varepsilon}{\hbar \partial \mathbf{r}} + \boldsymbol{\Omega}_{rr} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \boldsymbol{\Omega}_{rk} \cdot \dot{\mathbf{k}} + \boldsymbol{\Omega}_{rt}. \quad (2)$$

这里的贝里曲率都应按照张量形式来理解。以时间与空间方向间的混合贝里曲率为例，

$$(\boldsymbol{\Omega}_{rt})_i = -2\text{Im} \langle \partial_{r_i} u_n | \partial_t u_n \rangle = -2 \sum_{j_1, j_2} \frac{\partial \beta_{j_1}}{\partial r_i} \frac{\partial \beta_{j_2}}{\partial t} \text{Im} \langle \partial_{\beta_{i_1}} u_n | \partial_{\beta_{i_2}} u_n \rangle, \quad (3)$$

$$(\boldsymbol{\Omega}_{rr})_{ij} = -2\text{Im} \langle \partial_{r_i} u_n | \partial_{r_j} u_n \rangle = -2 \sum_{l_1, l_2} \frac{\partial \beta_{l_1}}{\partial r_i} \frac{\partial \beta_{l_2}}{\partial r_j} \text{Im} \langle \partial_{\beta_{l_1}} u_n | \partial_{\beta_{l_2}} u_n \rangle. \quad (4)$$

有趣的是，方程(2)中与  $\boldsymbol{\Omega}_{rr}$  和  $\boldsymbol{\Omega}_{rt}$  相关的项具有与洛伦兹力完全相同的形式，故二者也分别称为人工磁场与人工电场。人工电磁场可以在金属磁构型中实现，其中电子部分的哈密顿量可写为  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + J\mathbf{n}(\mathbf{r}, t) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 。这里，前两项为动能和晶格势能，第三项描述局部磁矩与巡游电子自旋  $\boldsymbol{\sigma}$  的交换耦合。 $\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$  为单位矢量，其空间和时间依赖代表磁构型中局部磁矩方向的变化，如图1所示。假设磁构型在远大于晶格常数的尺度变化，电子处在局域的自旋布洛赫态上： $|\psi\rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_n(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta(\mathbf{r}, t)}{2} \\ e^{i\phi(\mathbf{r}, t)} \sin \frac{\theta(\mathbf{r}, t)}{2} \end{pmatrix}^T$ 。其中，自旋波函数里  $\theta$  与  $\phi$  代表  $\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$  的极角与方位角。由此给出的人工电磁场具有非常简洁的形式<sup>[20]</sup>：

$$E_i = (\boldsymbol{\Omega}_{rt})_i = \mathbf{n} \cdot (\partial_i \mathbf{n} \times \partial_t \mathbf{n}),$$

$$B_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \epsilon_{ijk} (\boldsymbol{\Omega}_{rr})_{jk} = \frac{1}{2} \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \mathbf{n} \cdot (\partial_j \mathbf{n} \times \partial_k \mathbf{n}).$$

人工磁场有两个有趣的性质：(1) 其  $z$  分量在整个磁构型上的积分是一个拓扑数，也即二维绕数；它给出了磁构型的拓扑荷，其典型代表即为斯格明子(图1)；(2) 根据方程(2)，人工磁场会使得电子运动轨迹发生偏转，如同真实磁场的洛伦兹力一样；其产生的横向电流即对应于拓扑霍尔效应(图1)。

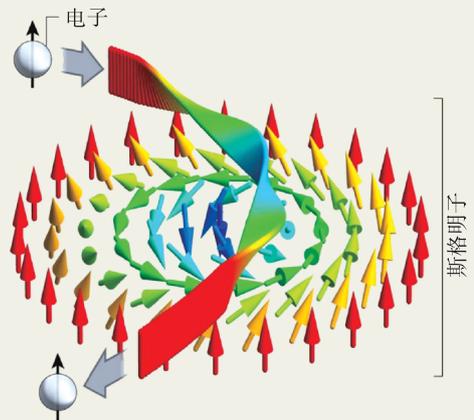


图1 斯格明子与拓扑霍尔效应。在斯格明子中，自旋方向随空间变化。这可给出人工磁场，从而使得电子的运动轨迹发生偏转(引自：Pfleiderer C, Rosch A. Nature, 2010, 465: 880)

而速度只留下通常的群速度和一个由动量空间贝里曲率决定的反常部分。

如果体系通过外场依赖时间，贝里曲率可有动量和时间的混合分量，并贡献一个额外的反常速度。这可以导致一个绝热泵浦电流，其大小正比于外场的时间导数。对于一个填满了的非简并的能带，这个电流可以写为一个电极化量的时间导数，而电极化就表达为布里渊区上的 Zak—Berry 相位<sup>[16-18]</sup>。索利斯量子电荷泵浦发生于外场随时间周期变化的一维绝缘体系，其中电流在一个周期内的积累就是个以电子电荷为单位的拓扑量子数<sup>[19]</sup>。

当外场还依赖于位置，贝里曲率就会有时空分量，其效果如同电磁场一样。在铁磁体中，如果序参量有个空间结构，比如斯格明子或畴壁，自旋极化的局域布洛赫态就会产生由贝里曲率导致的人工磁场，通过那些区域的电流将发生横向偏转，这被称为拓扑霍尔效应<sup>[20]</sup>。如果这种磁结构还随时间变化，比如移动着的畴壁，贝里曲率的时空分量就会产生一个电动势，甚至表现出一类似于约瑟夫森效应的拓扑行为<sup>[21, 22]</sup>。

一般情况下，贝里曲率还会有动量和位置之间的分量。例如，在塞曼场和自旋轨道耦合的共同作用下，局域布洛赫态的自旋方向会同时依赖位置和动量<sup>[23, 24]</sup>。自旋在相空间一个微小封闭轨道上的进动就会给出一个贝里相位，可由上述贝里曲率乘以这个微小轨道所围绕的面积计算。在一维半经典量子化问题中，这个贝里曲率的作用就像是把普朗克常数修改了一般。上述诸多混合贝里曲率的起源与物理意义参见 Box 1。

贝里曲率的出现，让运动方程不再具有正则的哈密顿形式。与之相对应，刘维尔关于相空间体积不随时间演化的定理就不再成立。因此，如前文指出，相空间里的态密度的改变将正比于磁场与动量空间贝里曲率的点乘。在无磁场或人工磁场的情况下，态密度的改变正比于位置和动量之间的贝里曲率<sup>[7, 25]</sup>。利用这个态密度，赵义强等人求出平衡状态下的电荷密度，并由此获得了不均匀系统中电极化的正确表达式<sup>[26]</sup>。

## 2 反常电热传输

半经典理论的应用场景可涵盖电热传输的方方面面。由于不同输运系数间往往有确切的数学关联(Box 2)，造成电输运中反常霍尔效应的贝里曲率也会在热输运以及电热交叉响应中有显著的体现。让我们先从著名的爱因斯坦关系谈起：化学势梯度的作用完全等同于电场力，可以驱动等量的电流和热流<sup>[27]</sup>。故化学势梯度也应引起一个反常霍尔电流。但它并不是如同弹簧力一样的机械力，不会在上节的运动方程中给电子带来反常速度。它怎么会造成同样的反常霍尔效应呢？

半经典理论对此输运问题的处理需用到局域平衡的假设，也即粒子仍遵循费米—狄拉克分布，但温度和化学势依赖于位置。在局域平衡下，波包中心速度对电流的贡献为零。总电流密度则由波包的磁偶极矩的旋度给出。但是，在计算可从材料流出的输运电流时，需从总电流中扣除局域于材料中的磁化电流部分<sup>[28, 29]</sup>。肖笛等人用半经典理论证明<sup>[30]</sup>，磁化强度除了磁偶极矩还有与贝里曲率相关的反常部分。前者给出的磁化电流与总电流密度正好相消，而后者即给出化学势梯度所驱动的反常霍尔电流，正如爱因斯坦关系所规定的那样。

传统的热电理论中，还有一个著名的莫特关系<sup>[30]</sup>，可关联热电导率和电导率。因此，电输运中的反常霍尔效应还会对应一个反常能斯特效应，也即温度梯度驱动的在其垂直方向上的电流。温度梯度也不是机械力，不能在运动方程中产生反常速度。但是，它可以像化学势梯度一样，通过贝里曲率导致的反常磁化强度，产生一个反常霍尔电流。因此，反常能斯特效应可发生在磁场为零但贝里曲率非零的各种磁性(包括反铁磁)材料中。

在一般线性输运理论中，按照对熵产率的贡献，把各种驱动力和流划分了对偶关系<sup>[31]</sup>。比如电场和电流，负温度倒数的梯度(热力)和热流，以及后面将会讲到的塞曼场梯度(自旋力)和自旋流。根据著名的昂萨格对易关系，两种对偶的流

Box 2 输运关系

电场、化学势梯度和温度梯度都可以用来驱动电子系统的电流和热流，并可由如下宏观响应方程描述：

$$j_a = \sigma_{ab} \left( E_b + \frac{1}{e} \partial_b \mu \right) - \frac{\alpha_{ab}}{T} \partial_b T,$$

$$j_a^Q = \alpha_{ab} \left( E_b + \frac{1}{e} \partial_b \mu \right) - \kappa_{ab} \partial_b T.$$

这里 $j_a$ 和 $j_a^Q$ 是沿着 $a$ 方向的电流和热流密度， $\sigma_{ab}$ 是电导率张量， $\alpha_{ab}$ 是热电导张量， $\kappa_{ab}$ 是热导率张量。上述方程中电场和化学势梯度一起出现，它们的效果不可区分，这就是爱因斯坦关系的内容。而温度梯度驱动电流和电场驱动热流的响应系数都是热电导率张量，这即是昂萨格关系在热电输运中的体现。除了这两个基本的输运关系之外，还有两个常用的输运关系对电子内禀反常输运以及弹性散射限定的外禀输运成立，分别是莫特关系和维德曼—弗兰兹定律。莫特关系表明低温下热电导率和电导率的能量依赖有关： $\frac{\alpha_{ab}}{T} = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{-3e} \frac{\partial \sigma_{ab}}{\partial \mu}$ ；而维德曼—弗兰兹定律把低温下的热导率直接与电导率联系在一起： $\frac{\kappa_{ab}}{\sigma_{ab} T} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2}$ 。值得注意的是，上述四个输运关系只对扣除轨道磁化流之后的输运电流和输运热流成立。

力之间的交叉响应系数有确定的数学关联<sup>[31]</sup>。上面讲到的反常能斯特效应是一种电流对热力的交叉响应，与之对应的就是一种反常的热流对电场的响应，叫做反常埃廷豪森效应。肖笛等人注意到了电场叉乘磁化强度对输运热流的贡献，用半经典响应理论证实了反常热电输运的昂萨格关系<sup>[30]</sup>。

温度梯度驱动横向热流的现象叫做热霍尔效应。热载流子可以是电子也可以是声子或磁性材料中的磁振子(自旋波量子)。对于后者，Murakami等人指出，像电子的轨道磁化那样，若将电荷换做能量，载流子在时间反演破坏的材料中也会有能量的轨道磁化。其中与贝里曲率相关的部分对应于一个环绕边界的能流，其在有温度梯度的非平衡状态下会给出一个垂直于梯度的部分，如同反常能斯特效应的机制一样，体现为热霍尔效应<sup>[32]</sup>。

当热载流子是电子时，如果弛豫时间不依赖于能量，那么热导率和电导率之间会满足维德曼—弗兰兹定律，其比值正比于绝对温度。在半经典理论中，电和热的内禀反常霍尔效应都来源于电子布洛赫态的贝里曲率，故也满足这个关系。维德曼—弗兰兹定律也常常被用来检验电子体系的关联程度，但往往受到弛豫时间假设方面的干扰。内禀反常霍尔效应不依赖于散射机制，因而没有这方面的干扰。

早年拉廷格在研究热传导问题时，为了使用量子微扰论方法，利用广义相对论的原理把温度梯度等同于引力的影响<sup>[33]</sup>。但是，微扰论直接给出的反常霍尔热导在低温下表现奇异，需要扣除热轨道磁化的贡献才能满足维德曼—弗兰兹定律。秦涛等人<sup>[34]</sup>推导出了热轨道磁化的计算公式，适用于一般多体相互作用体系。对于无相互作用的布洛赫粒子系统，此公式的结果也可以用半经典理论得出<sup>[35, 36]</sup>。需要注意的是，能流密度以及热流密度不是唯一定义的，相应的热磁化的结果也不唯一，但减除热磁化之后的输运热流却是唯一的<sup>[34]</sup>。

### 3 自旋电热响应

上面讨论的电热输运理论可推广到更一般的响应问题，比如自旋密度对电场和温度梯度的响应。Culcer等人指出自旋等物理量的密度不仅依赖于相应算符在波包态上的量子期望值，也依赖于它在波包态上的偶极矩<sup>[37]</sup>。前者乘以分布函数和态密度，再对动量积分并对各能带加和，可给出物理量的单极密度。同样手续处理后者，给出物理量的偶极密度。在非均匀情况下，物理量的密度不仅来源于单极密度，也来源于偶极密度的空间散度。后来，董良等人进一步考虑了贝里曲

率对偶极密度的修正，并证明了自旋密度在电热响应中的莫特关系和爱因斯坦关系<sup>[38]</sup>。

输运过程中电子自旋的寿命可远大于电子动量的弛豫时间，此时自旋的输运也是一个重要课题。前面提到的偏斜散射，也叫莫特散射，其左右偏向依赖于被散射电子的自旋。Hirsch指出，在非磁材料中，虽然左右偏转形成的电流严格抵消，但自旋流并不抵消，造成所谓自旋霍尔效应<sup>[39]</sup>。这个现象也有内禀对应，由Murakami等人<sup>[40, 41]</sup>和Sinova等人提出<sup>[40, 41]</sup>。很快，关于自旋输运的各种理论预言和实验相继出现，掀起一股研究热潮<sup>[42]</sup>。

理论中用到的自旋流算符有个简单的传统定

义，等于自旋和速度算符的对称化乘积。这种传统自旋流的电热响应也可以自然地纳入半经典输运理论框架中<sup>[37, 38]</sup>。但是，由于自旋轨道耦合等原因，晶体中电子自旋算符与哈密顿量不对易。对于这种不守恒的物理量，通常的连续性方程不再成立。也就是说，自旋密度的时间导数加上自旋流的空间散度不再恒等于零。这个非零的所谓源项就是自旋力矩，由自旋与哈密顿量的对易子给出，微观上对应于自旋的转动<sup>[43]</sup>。

Culcer等人注意到<sup>[37, 44, 45]</sup>，对于某个自旋分量，由于宏观上的某种对称性，源项的单极密度为零。此时，这个自旋分量可以满足通常的连续性方程，但是自旋流的定义需要补充一个源项的

### Box 3 自旋流定义

在自旋输运相关的文献中，自旋流通常定义为电子速度算符和自旋算符的对称化乘积<sup>[42]</sup>，即 $\hat{j}^s = \{\hat{v}, \hat{s}\}/2$ ，这被称为传统自旋流。由于自旋轨道耦合的存在，这样定义的自旋流密度满足的守恒方程中可以有非零的源项<sup>[37, 44, 45]</sup>：

$$\frac{\partial \langle \hat{s} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}^s(\mathbf{r}) = \tau(\mathbf{r}) .$$

源项对应自旋流传导过程中载流子的自旋进动，通常称为自旋转矩(spin torque)，其微观算符即是自旋算符随时间的变化率 $\hat{\tau} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{s}, \hat{H}]$ ， $\hat{H}$ 是载流子的哈密顿量。为了利用上述守恒方程，我们可以将 $\mathbf{j}^s(\mathbf{r})$ 和 $\tau(\mathbf{r})$ 做多极展开<sup>[37, 46, 47]</sup>：

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^s &= \mathbf{j}^{s,0} - \nabla \cdot \mathbf{D}^j - \dots , \\ \tau &= -\nabla \cdot \mathbf{D}^\tau + \partial_a \partial_b Q_{ab}^\tau - \dots . \end{aligned}$$

自旋转矩的多极展开没有单极项，这是因为自旋转矩作为一个局域物理量的时间变化率，在稳恒状态下为零<sup>[46]</sup>。因此，精确到空间梯度的二阶，自旋流的守恒方程可以改写为

$$\frac{\partial \langle \hat{s} \rangle}{\partial t} + \partial_a [j_a^{s,0} + D_a^\tau - \partial_b (D_b^j + Q_{ab}^\tau)] = 0 .$$

这是一个没有源项的自旋流守恒方程。由此可以定义守恒自旋流，它的多极展开为<sup>[46]</sup>

$$J_a^{s,c} = j_a^{s,0} + D_a^\tau - \partial_b (D_b^j + Q_{ab}^\tau) + \dots .$$

我们看到，守恒自旋流包含传统自旋流和自旋转矩的共同贡献。

守恒自旋流在平衡态下满足守恒方程 $\partial_a J_a^{s,c} = 0$ ，其单极项必须为0，而其偶极项一定可以写成某个矢量的实空间旋度，即 $\mathbf{J}_{\text{eq}}^{s,c} = \nabla \times \mathbf{M}^s$ 。半经典波包理论确证了这两个结论<sup>[46]</sup>。与计算电荷的热电输运类似，在计算自旋热电输运，即守恒自旋流对温度梯度和化学势梯度的响应时，必须扣除自旋的轨道磁化流，得到输运的自旋流，才可以满足爱因斯坦关系、昂萨格关系和莫特关系。

在上述半经典理论描述之前，守恒自旋流的量子算符描述就已经建立<sup>[45]</sup>。由于自旋转矩贡献的自旋流来源于自旋转矩偶极矩及其多极展开，它可以由算符 $\hat{r}\hat{s}$ 来描述。因此守恒自旋流的算符是 $d(\hat{r}\hat{s})/dt$ ，而与其共轭的自旋力是塞曼场梯度。守恒自旋流具有明确的热力学基础<sup>[47]</sup>。

值得一提的是，上述构建守恒自旋流的方法也为理解超导体中的电流提供了一种半经典的理论框架<sup>[46]</sup>。超导体中规范对称性自发破缺，产生库珀对凝聚体，故电荷不再守恒。因此准粒子电流的连续性方程存在非零源项，代表凝聚体对准粒子电流的影响，这即对应着南部阳一郎引入超导体研究的南部—戈德斯通模对电流的贡献。只有考虑了这项贡献，超导体的总电流才能保持守恒。在准粒子电流的半经典理论中，这个源项给出准粒子电荷时间变化率相关的偶极密度流和四极密度流，保证了超导体平衡态总电流最多是一个轨道磁化流，并可以对超导体的轨道磁化给出定量的表述。

偶极密度。后来发现，在稳恒状态下，由于源项的单极密度必须为零，不依赖于体系的对称性<sup>[46]</sup>，这个偶极密度总是可以唯一定义的。这个新的自旋流后来被称作守恒自旋流(Box 3)，代表的不仅仅是自旋载子的微观流动，也包括空间上非均匀的自旋转动造成的表象上的自旋移动。绝缘体中由磁振子所承载的自旋流即对应于后者。

施均仁等人发现<sup>[45, 47]</sup>，补充自旋力矩的偶极矩的自旋流才与塞曼场梯度对偶，其相应的自旋霍尔效应与它的逆效应之间才满足昂萨格对易关系。这个逆效应，亦即自旋化学势或者塞曼场梯度驱动下产生横向电流，也出现在自旋流的测量设计中，而昂萨格关系是个必要的假设。另外，这个自旋流的算符对应于自旋和位置乘积的时间导数。利用久保公式可以证明，它对电场的响应在能量本征态局域的安德森绝缘体中为零<sup>[45]</sup>。但是，在一般情况下，由于这个自旋流算符在非局域状态中发散，其响应系数的计算虽相当复杂，结果却简单直接<sup>[46, 47]</sup>。

肖聪等人利用半经典理论，对非均匀系统中的自旋流响应问题作了细致的分析<sup>[46]</sup>。在平衡状态下，上述守恒自旋流总可以写成一个矢量场的旋度，而通常意义下的自旋流没有这个性质。我们可以认为，这个矢量场就是自旋的轨道磁化。在化学势和温度梯度驱动的非平衡状态下，扣除掉自旋的轨道磁化流之后额外的部分才是输运自旋流。这样得到的自旋的内禀电热输运系数具有非常简单的形式，只依赖于自旋在能带里的期望值和通常的贝里曲率，而且显然满足爱因斯坦关系和莫特关系。

## 4 二阶电磁响应

很多应用场景需要考虑外场的高阶效应，故前面讲到的粒子运动方程的精确度需被提到相应的阶数。以二阶响应为例，我们可使波包按照准确的、包含微扰的哈密顿量进行量子演化，从而给出其正比于微扰的修正。然后再按照处理半经典动力学的方法限制波包取准粒子的形式。

这样得到的粒子运动方程形式不变：其受力仍是洛伦兹力，而其速度亦仍然由能带速度与反常速度构成。唯一的变化是，能带的能量与反常速度中的贝里曲率分别获得一个二阶与一阶的修正(Box 4)<sup>[48, 49]</sup>。

这组方程最简单的一个应用是计算满能带的电磁极化率，也就是电极化对电磁场的线性响应。前文讲到，在外场为零的情况下，能带的电极化等于周期规范下贝里联络在布里渊区的积分。在电场的微扰下，贝里联络有个一阶修正。它不依赖于规范，代表了电场造成的波包位置的移动。这个位置移动在布里渊区的积分就给出了电致极化。在磁场的微扰下，也会有相应的位置移动和磁致极化<sup>[48]</sup>。

但是，由于磁场让运动方程变得不正则，使得相空间态密度发生了改变，磁致极化还会有额外的具有拓扑特性的一项。这个贡献发生在磁场的方向，其大小等于贝里曲率点乘贝里联络(陈—西蒙斯形式)在布里渊区的积分。当体系具有时间反演对称，上述由位置移动给出的磁致极化变为零，但拓扑贡献可以非零且量子化，从而可被用来刻画三维拓扑绝缘体的 $Z_2$ 特征<sup>[50-54]</sup>。

准确到二阶的半经典响应理论还可以用来计算晶体的磁化率，也即自由能对磁场的二阶响应。从电子体系自由能的量子表达式出发，我们需把量子能级用准确到二阶的波包能量代替，量子态求和用相空间积分代替，并辅以态密度的改变。若进一步添加派尔斯—朗道抗磁自由能，则总的自由能即可准确到磁场的二阶。由于半经典理论用到的概念都有独立的物理含义，包括贝里曲率和量子度规等几何特征，我们对磁化率的各种贡献就可以有比较确切充实的认识<sup>[49]</sup>。半经典理论给出的磁化率也与基于密度矩阵微扰论的结果保持一致<sup>[55, 56]</sup>。

在电输运问题中，我们可以从电流的半经典表达式中三个主要因素考虑：粒子的速度、态密度、分布函数。前两者的二阶修正可以从新的运动方程得到，后者在玻尔兹曼方程的弛豫近似下也很容易做到高阶。利用这个方法，可以得到反

常霍尔电导的非线性修正(非线性霍尔效应),包括纯粹的内禀部分<sup>[48]</sup>和正比于弛豫时间但具有内禀系数的部分<sup>[57]</sup>。这揭示了布洛赫粒子更为丰富的几何特征,并于近些年来引发了许多实验观察<sup>[58-66]</sup>和进一步的理论探讨<sup>[67-76]</sup>。

磁场引起的纵向电阻的相对变化叫做磁阻,也属于电子系统对电磁场非线性响应的范畴。在传统的德鲁德自由电子模型里磁阻为零,而在索莫非-布洛赫输运理论中磁阻一般为正值。由于贝里曲率在外尔材料中的奇异分布, Son 和

Spivak 利用半经典响应理论阐明磁阻也可以为负值,并提议以此作为这类系统手性反常的证据<sup>[77]</sup>。但是,系统的研究表明,贝里曲率等几何特性可以在更一般的条件下引起负磁阻,不一定需要外尔材料中的那种贝里单极的存在<sup>[55, 78-80]</sup>。

从电磁场推广到随时变化和非均匀的一般性外场,通过对局域布洛赫态微扰,准确到外场空间梯度和时间导数的一阶,可以获得准确到二阶的半经典响应理论<sup>[81]</sup>。一个具有普遍意义的应用就是电荷密度和电流密度对外场(比如缓变磁结构

#### Box 4 半经典运动方程的高阶修正

如前文所述,布洛赫电子的半经典动力学方程可由波包的演化给出。当以无外加微扰的本征布洛赫态组成波包时,其演化可给出准确至微扰一阶的动力学方程。然而,此动力学方程无法为诸多非线性现象(如磁化率、磁电效应、整流效应等)提供完整的物理图像。为了将动力学方程推广至高阶,一个很自然的想法是考虑外加微扰对布洛赫态的影响,并用这种包含微扰的、更准确的布洛赫态来构造波包。以单能带波包为例,可采取如下形式<sup>[48, 49]</sup>:

$$|W\rangle = \int d\mathbf{k} C_0(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\tilde{u}_0(\mathbf{k})\rangle = \int d\mathbf{k} \left[ C_0(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_0(\mathbf{k})\rangle + \sum_{n \neq 0} C_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_n(\mathbf{k})\rangle \right].$$

这里,  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\tilde{u}_0(\mathbf{k})\rangle$  即为准确的布洛赫态,  $C_0(\mathbf{k})$  是归一化的波包系数;第二个等号代表将微扰过的布洛赫态按照非微扰原始布洛赫态做展开。有趣的是,当按照量子力学中微扰论的方法去计算  $C_n(\mathbf{k})$ , 也即准确布洛赫态中的微扰部分时,可发现其中可能包含两类截然不同的成份<sup>[49]</sup>。如图2所示,以磁场为例,第一种成份是磁场使得具有相同的晶格动量,但不同的带指标的布洛赫态发生混合——我们称之为垂直混合。这也是微扰的通常形式。第二种成份是磁场使得具有相同的能带指标,但相邻的动量指标的布洛赫态发生混合——我们称之为水平混合。这种方式源自固体材料的周期性晶格结构,是空间扩展的布洛赫态独有的。正是水平混合的存在,使得布洛赫电子的运动可感受到相邻布洛赫态的差异,从而受到如贝里曲率和量子度规等几何量的影响。

用变化过的布洛赫态构造的波包的演化仍可由上述的拉格朗日量描述,而其给出的运动方程自然包含高阶修正。例如,准确至二阶的运动方程有如下形式:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \frac{\partial \tilde{\mathcal{E}}}{\hbar \partial \mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \\ \dot{\mathbf{k}} &= -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}. \end{aligned}$$

它们保有与原先的运动方程完全相同的形式,但速度方程中的动能与贝里曲率会因布洛赫态的变化而分别获得二阶与一阶的修正,从而使速度保持二阶的准确性。同样以磁场为例,在一阶情况下,能量的修正为轨道塞曼能,  $\delta\mathcal{E} = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{m}$ 。二阶修正则可看作磁场对轨道磁矩的修正,也即能量上的磁化率。而贝里曲率的修正实际来源于磁场对波包中心位置的影响:  $\mathbf{r} = \partial_{\mathbf{k}} \gamma + \mathbf{a}_0 + \tilde{\mathbf{a}}(\mathbf{B})$ 。这里  $\gamma$  是组合系数  $C_0(\mathbf{k})$  的相位,  $\mathbf{a}_0 = \langle u_0(\mathbf{k}) | i\partial_{\mathbf{k}} | u_0(\mathbf{k}) \rangle$  是原始布洛赫态下的贝里曲率,而  $\tilde{\mathbf{a}}(\mathbf{B})$  则为磁场对贝里曲率的修改。 $\mathbf{a}_0 + \tilde{\mathbf{a}}(\mathbf{B})$  共同构成了准确布洛赫态下的贝里曲率。它们的旋度即为  $\tilde{\boldsymbol{\Omega}}$ 。

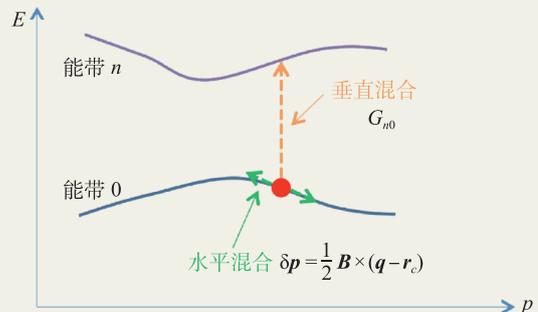


图2 磁场对布洛赫态的微扰<sup>[49]</sup>

或原子结构)的响应,其二阶修正有一个拓扑几何部分,可以表达成为一个贝里曲率的二次形式的积分<sup>[25, 26]</sup>。从这个结果出发,我们可以进一步获得空间梯度引起的电极化和时间导数引起的轨道磁化<sup>[25, 26, 81]</sup>,具有很大的应用价值。

## 5 外禀散射贡献

在传统的电热输运理论中,一个不可或缺的因素是杂质或者声子等热激发对载流子的动量散射。对于纵向的电热传导而言,散射在新的半经

### Box 5 玻尔兹曼方程和修正

玻尔兹曼输运方程是半经典输运理论的核心之一,它描述布洛赫电子波包的分布函数在相空间中的演化。以直流电场作用下的稳态为例,若考虑电子与定态杂质等的弹性散射,玻尔兹曼方程采取如下形式:

$$-e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} (\omega_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'}) .$$

方程左边描述分布函数在电场作用下的变化,其中 $\mathbf{k}$ 为晶格动量(这里为了简化形式我们忽略了能带指标)。方程右边称为碰撞积分,描述散射对分布函数的影响,其中 $\omega_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ 和 $\omega_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ 描述电子初末态之间的散射速率,它们由量子力学的费米黄金定则给出:

$$\omega_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) .$$

其中,狄拉克 $\delta$ 函数保证了弹性散射过程中电子的能量守恒; $T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ 即是著名的散射 $T$ 矩阵,与散射势和电子的能带有关,由李普曼—施温格方程决定。

对于横向的反常霍尔电流,需要考虑高阶散射过程带来的修正(图3)。1955年Smit提出二阶玻恩近似中包含一种称为偏斜散射的过程(图3(c)),仿佛电子在散射势作用下运动轨迹发生了偏斜,从而形成霍尔电流<sup>[12]</sup>。这在当时是一种全新的反常霍尔效应机制。受这一观察的激励,也为了给玻尔兹曼输运理论奠定量子力学基础,1957年科恩和拉廷格从量子力学的密度矩阵输运理论出发,在弱散射势的假设下证明了上述玻尔兹曼建构的正确性<sup>[85]</sup>。1958年拉廷格又在另一篇经典文章中使用该理论系统地研究了反常霍尔效应的内禀和外禀贡献<sup>[13]</sup>。他们的理论不仅得到了Smit的偏斜散射,还首次发现了三种新的贡献。

其中一种是三阶玻恩近似下的偏斜散射贡献。它可直接纳入上述标准的玻尔兹曼方程框架之中,但是直到2007年被SinitSyn等人借助费曼图表述的现代输运理论重新发现之后<sup>[84]</sup>,才引起霍尔效应领域的广泛重视。它贡献的反常霍尔电导率不依赖于杂质的密度和散射强度,但一般说来会依赖于散射势的形式<sup>[87]</sup>。

拉廷格发现的另外两种贡献不能被上述传统玻尔兹曼输运理论描述,在当时被视为超出半经典输运理论的框架。它们对应于在玻尔兹曼方程左边添加一个既和电场有关也和散射有关的驱动项,并在电子速度矩阵中考虑能带非对角元。对这两种贡献决定性的新理解出现在2005—2007年SinitSyn等人的文章中<sup>[82-84, 14]</sup>。他们指出,如图3(b)所示,动量空间中的几何相位(Pancharatnam phase)会引起散射前后电子波包中心的位置移动 $\delta\mathbf{r}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ <sup>[83]</sup>。这个位置移动在散射过程中的积累会给出一个附加速度 $\sum_{\mathbf{k}'} \omega_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \delta\mathbf{r}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ ,它导致的反常霍尔电流正好对应于拉廷格发现的速度矩阵非对角元的贡献<sup>[83]</sup>。另一方面, $\delta\mathbf{r}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ 意味着电场在散射过程中可做功,它使得玻尔兹曼方程采取如下修正形式:

$$-e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} \omega_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \left( f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'} + e\mathbf{E} \cdot \delta\mathbf{r}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) ,$$

其中 $f_0$ 是平衡态费米—狄拉克分布函数。SinitSyn等人证明这就是拉廷格得到的对玻尔兹曼方程的修改<sup>[14]</sup>。故包含位置移动的半经典输运理论和量子输运理论一致。

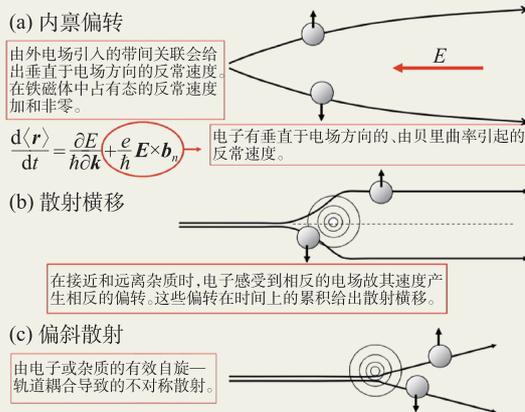


图3 反常霍尔效应的三种机制<sup>[86]</sup>

典理论中依然起主导作用。前面讲到的内禀效应主要针对横向传导，假设了粒子分布函数与平衡状态偏差不大，而且散射平移造成的额外的流的修正可以忽略不计。实际情况如何呢？

Sinitsyn 等人发现，传统的玻尔兹曼方程需要做些修改才可继续使用<sup>[82-84]</sup>。首先，漂移项需要使用贝里曲率修改过的粒子运动方程<sup>[82]</sup>。其次，散射项中，除了不同布洛赫态间的量子跃迁，包括对称散射以及由自旋轨道耦合造成的偏斜散射，跃迁过程中粒子位置的移动也有贡献<sup>[83]</sup>。这个位移一方面让粒子在电场中获得势能落差，从而修改了散射前后的能量守恒关系，另一方面与散射几率结合也可给出对电子速度的修正(Box 5)<sup>[83]</sup>。

实验学家主要通过横向与纵向输运系数之间的标度关系来粗略判断输运过程的主要机制。一般来说，对于相对纯净的晶体材料，在低温区反常霍尔电阻随掺杂浓度或纵向电阻呈正比关系。这种行为需要通过自旋轨道耦合造成的偏斜散射机制来理解。随着温度升高，当电子的散射主要来自声子等热激发，反常霍尔电阻会正比于纵向电阻的平方。此时，反常霍尔电导率基本上不随温度变化，亦即不依赖于散射强度，因此对内禀机制的实验检验也经常就是在这种条件下作出的<sup>[86]</sup>。

历史上，Berger 提出的散射横移机制<sup>[15]</sup>曾普遍被认为是上述平方标度关系的来源，而Karpus-Luttinger最早发现的内禀机制<sup>[11]</sup>在好长一段时期被基本遗忘。理论上，反常霍尔电导也确实可以被散射横移所修改，但这种修改又不依赖于散射源的强度或丰度。这如何理解呢？通过引入散射势场中不同的自旋结构，杨声远等人发现散射横移造成的反常霍尔电导还是会显著依赖于散射势场的种类<sup>[87]</sup>。如果有几种散射源，反常霍尔电导会依赖于它们的相对强度或丰度。

实验方面，通过变温和改变薄膜材料的厚度，金晓峰研究组仔细观察了在两种不同的散射机制下，高纯度铁磁金属晶体的反常霍尔效应。他们发现，文献中广泛采用的反常霍尔电阻对于纵向电阻的单一标度关系过于笼统，需要针对来自热激发和表面粗糙度散射的电阻成分作出不同系数的展开<sup>[88, 89]</sup>。理论分析表明，反常霍尔电阻应该

是各种电阻成分的二次函数，包括线性项和交叉双线性项。对于上述实验体系，侯达之等人获得了更为丰富系统的数据明确支持这种多成分标度关系<sup>[89]</sup>。遗憾的是，我们仍然无法利用这种标度关系把内禀反常霍尔电导从实验数据中精确分离出来。对于高居里温度的铁磁金属，常温下电阻的来源主要是声子。基于第一性原理，人们原则上可以计算出声子散射造成的纵向电阻和反常霍尔电阻。已有的计算结果表明，贝里曲率的内禀贡献远大于声子散射的贡献。

在弱散射极限下，自旋输运过程中也有类似的偏斜和横移散射机制导致的自旋流横向输运<sup>[42]</sup>。除此之外，还有一个布洛赫电子波包携带的自旋偶极矩在散射前后的“移动”<sup>[46]</sup>。这一移动正好抵消内禀响应中的自旋偶极矩随时间的变化率，使得剩余的内禀自旋守恒流仅仅由占据态的自旋期望值和通常的动量空间贝里曲率来决定<sup>[46, 47]</sup>。由于波包自旋偶极矩是个有限的物理量，它的时间导数在稳恒状态下确实就应该被抵消为零。同样的道理，自旋产生率也是时间导数，其内禀贡献在对称性足够低的情况下可以非零，但在稳恒状态下外禀的弛豫效应会与之完全抗衡<sup>[46]</sup>。

在早期的自旋输运研究过程中，人们还考虑过散射强度大于能带中自旋轨道耦合的情形。此时，后者引起的自旋进动速率远远小于载流子的碰撞频率<sup>[90-92]</sup>。由于不同动量下的自旋轨道耦合效应会相互抵消，自旋寿命会因动量散射而变得很长。在这种情况下，玻尔兹曼理论框架中的分布函数就需要扩展为二阶矩阵，表达电子的占据几率和自旋状态。相应地，玻尔兹曼方程中的漂移和散射项也应该反映这种自旋结构。自旋近简并能带中的非阿贝尔贝里曲率效应<sup>[93, 94]</sup>是个值得关注的问题。

## 6 总结和展望

电子的半经典响应理论，沿用玻尔兹曼和洛伦兹的经典框架，经过索莫非和布洛赫的量子诠释，发展成为了联系固体宏观性质和微观模型的重要手段。过去四十多年来，随着对布洛赫粒子

的拓扑几何性质的认识,半经典响应理论又获得了进一步充实和发展。

相较纯粹的量子响应理论,半经典理论在处理非均匀系统问题时具有独特的优势。因此,本文也是在这种背景下,以较为统一的视角,介绍半经典响应理论在一般情况下的运用。我们假设非均匀性发生在远大于晶格常数的尺度上,比如弱电磁场情形下缓慢变化的规范势,因而布洛赫波包的能量可以在局域近似的基础上做梯度展开。这种非均匀性也造成了相空间各种贝里曲率,它们会修改粒子的运动方程和相空间态密度。

我们也把目光放宽到半经典理论对一般物理量的处理,包括非守恒量的响应问题。在平衡状态下,物理量的非均匀密度和流会与相应的电极化和磁化强度关联,贝里曲率对物理量和态密度的影响自然也会反应到这些响应函数中。在涉及非平衡响应问题时,除了直接耦合在微观物理量上的外场,也考虑非均匀温度和化学势。为了保持爱因斯坦关系、昂萨格关系、莫特关系等输运系数的结构,我们需要正确地定义上述响应密度和流。

半经典响应理论也可以扩展到外场梯度的高阶。如果考虑到布洛赫波函数的一阶梯度修正,波包中心所代表的粒子运动方程就可以准确到梯度的二阶。方程的数学形式与一阶理论相同,只不过粒子能量准确到了二阶,而贝里曲率也会包括一阶修正。在电磁势的情形,这个梯度本身就

是电磁场。此时,二阶理论不但可以应用到电极化率和轨道磁化率的计算,也可以用来研究各种电磁耦合和非线性输运现象。考虑到其他外场,还可以研究更多种类的交叉耦合和响应的问题。

本文叙述的重点放在了平衡态响应和非平衡态响应中的内禀部分,但也对反常霍尔效应和自旋霍尔效应中的外禀贡献和对应的标度关系稍作论述。如果声子散射起主导作用,即实验中通常用来确认内禀贡献的地方,仍然会有散射横移的影响,需要第一性原理计算去进一步厘清。对于特别纯净的铁磁晶体,有可能看到低温下(也就是当年布洛赫得到纵向电阻温度5次率的条件),散射横移对于反常霍尔效应的贡献。由于起主导作用的是长波声子,此结果会与常温下的结果不同<sup>[95-97]</sup>,其差别可以用来标定第一性原理的计算。

在小杂质密度或弱散射场的情况下,半经典响应理论可以与量子散射理论精确对应。上世纪五十年代,科恩-拉廷格从量子统计出发,推出了玻尔兹曼方程,并给出了弛豫时间的计算方法<sup>[85]</sup>。在研究反常霍尔效应时,Karplus-Luttinger注意到电场会造成能带之间的相干混合,再计及速度算符在能带间的非对角矩阵元,就可获得我们现在常说的正比于贝里曲率的反常速度<sup>[11]</sup>。后来拉廷格又对各种外禀散射过程做出细致分析<sup>[13]</sup>,其半经典对应也在Sinitsyn等人的工作中被一一找出<sup>[14, 83, 84]</sup>。这种对应也被证明可以扩展到自旋等其他物理量的线性响应<sup>[98]</sup>。

## 参考文献

- [1] Lorentz H A. Proc. R. Acad. Amst., 1905, 7: 438, 585, 684
- [2] Sommerfeld A. Naturwissenschaften, 1927, 15: 825
- [3] Sommerfeld A. Z. Phys., 1928, 47: 43
- [4] Bloch F. Z. Phys., 1928, 52: 555
- [5] Chang M C, Niu Q. Phys. Rev. B, 1996, 53: 7010
- [6] Sundaram G, Niu Q. Phys. Rev. B, 1999, 59: 14915
- [7] Xiao D, Shi J, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 137204
- [8] Jungwirth T, Niu Q, MacDonald A H. Phys. Rev. Lett., 2002, 88: 207208
- [9] Onoda M, Nagaosa N. J. Phys. Soc. Jpn., 2002, 71: 19
- [10] Yao Y, Kleinman L, MacDonald A H *et al.* Phys. Rev. Lett., 2004, 92: 037204
- [11] Karplus R, Luttinger J M. Phys. Rev., 1954, 95: 1154
- [12] Smit J. Physica (Utrecht), 1955, 21: 877; 1958, 24: 39
- [13] Luttinger J M. Phys. Rev., 1958, 112: 739
- [14] Sinitsyn N A. J. Phys.: Condens. Matter, 2008, 20: 023201
- [15] Berger L. Phys. Rev. B, 1970, 2: 4559
- [16] King-Smith R D, Vanderbilt D. Phys. Rev. B, 1993, 47: 1651
- [17] Resta R. Rev. Mod. Phys., 1994, 66: 899
- [18] Resta R, Vanderbilt D. Physics of Ferroelectrics: A Modern Perspective. Berlin: Springer-Verlag, 2007. p.31
- [19] Thouless D J. Phys. Rev. B, 1983, 27: 6083
- [20] Nagaosa N, Tokura Y. Nat. Nanotechnol., 2013, 8: 899
- [21] Yang S A, Beach G S D, Knutson C *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 067201
- [22] Yang S A, Beach G S D, Knutson C *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 82: 054410
- [23] Xiong B, Chen H, Li X *et al.* Phys. Rev. B, 2018, 98: 035123

- [24] Xiao C, Xiong B, Niu Q. *Phys. Rev. B*, 2021, 104:064433
- [25] Xiao D, Shi J, Clougherty D P *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 102: 087602
- [26] Zhao Y, Gao Y, Xiao D. *Phys. Rev. B*, 2021, 104: 144203
- [27] Ashcroft N W, Mermin N D. 固态物理学. 北京: 世界图书出版公司, 2007
- [28] Hirst L L. *Rev. Mod. Phys.*, 1997, 69: 607
- [29] Cooper N R, Halperin B I, Ruzin I M. *Phys. Rev. B*, 1997, 55: 2344
- [30] Xiao D, Yao Y, Fang Z *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 97: 026603
- [31] Landau L, Lifshitz E M. 统计物理学I. 北京: 高等教育出版社, 2011
- [32] Matsumoto R, Murakami S. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 106: 197202
- [33] Luttinger J M. *Phys. Rev.*, 1964, 135: A1505
- [34] Qin T, Niu Q, Shi J. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 107: 236601
- [35] Zhang L. *New J. Phys.*, 2016, 18: 103039
- [36] Xiao C, Niu Q. *Phys. Rev. B*, 2020, 101: 235430
- [37] Culcer D, Sinova J, Sinitsyn N A *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93: 046602
- [38] Dong L, Xiao C, Xiong B *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124: 066601
- [39] Hirsch J E. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, 83: 1834
- [40] Murakami S, Nagaosa N, Zhang S C. *Science*, 2003, 301: 1348
- [41] Sinova J, Culcer D, Niu Q *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92: 126603
- [42] Sinova J, Valenzuela S O, Wunderlich J *et al.* *Rev. Mod. Phys.*, 2015, 87: 1213
- [43] Sun Q F, Xie X C. *Phys. Rev. B*, 2005, 72: 245305
- [44] Culcer D, Niu Q. *Phys. Rev. B*, 2006, 74: 035209
- [45] Shi J, Zhang P, Xiao D *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96: 076604
- [46] Xiao C, Niu Q. *Phys. Rev. B*, 2021, 104: L241411
- [47] Pan H, Liu Z, Hou D *et al.* *Phys. Rev. Res.*, 2024, 6: L012034
- [48] Gao Y, Yang S A, Niu Q. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 112: 166601
- [49] Gao Y, Yang S A, Niu Q. *Phys. Rev. B*, 2015, 91: 214405
- [50] Wilczek F. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, 58: 1799
- [51] Fu L, Kane C L, Mele E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98: 106803
- [52] Qi X L, Hughes T L, Zhang S C. *Phys. Rev. B*, 2008, 78: 195424
- [53] Essin A M, Moore J E, Vanderbilt D. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 102: 146805
- [54] Essin A M, Turner A M, Moore J E *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81: 205104
- [55] Gao Y. *Front. Phys.*, 2019, 14: 33404
- [56] Duff A H, Lau A, Sipe J E. *Phys. Rev. B*, 2023, 108: 235206
- [57] Sodemann I, Fu L. *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 115: 216806
- [58] Ma Q *et al.* *Nature*, 2019, 565: 337
- [59] Kang K, Li T, Sohn E *et al.* *Nat. Mat.*, 2019, 18: 324
- [60] Kumar D, Hsu C H, Sharma R *et al.* *Nat. Nanotechnol.*, 2021, 16: 421
- [61] Sinha S *et al.* *Nature Physics*, 2022, 18: 765
- [62] He P, Koon G K W, Isobe H *et al.* *Nat. Nanotechnol.*, 2022, 17: 378
- [63] Duan J, Jian Y, Gao Y *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2022, 129: 186801
- [64] Ye X G, Liu H, Zhu P F *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2023, 130: 016301
- [65] Gao A *et al.* *Science*, 2023, 381: 181
- [66] Wang N *et al.* *Nature*, 2023, 621: 487
- [67] Du Z Z, Wang C M, Li S *et al.* *Nat. Commun.*, 2019, 10: 3047
- [68] Shao D F, Zhang S H, Gurung G *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124: 067203
- [69] Isobe H, Xu S Y, Fu L. *Sci. Adv.*, 2020, 6: 2497
- [70] Du Z Z, Lu H Z, Xie X. *Nat. Rev. Phys.*, 2021, 3: 744
- [71] Wang C, Gao Y, Xiao D. *Phys. Rev. Lett.*, 2021, 127: 277201
- [72] Liu H, Zhao J, Huang Y X *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2021, 127: 277202
- [73] Chen W, Gu M, Li J *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2022, 129: 276601
- [74] Wang J, Zeng H, Duan W *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2023, 131: 056401
- [75] Das K, Lahiri S, Atencia R B *et al.* *Phys. Rev. B*, 2023, 108: L201405
- [76] Kaplan D, Holder T, Yan B. *Phys. Rev. Lett.*, 2024, 132: 026301
- [77] Son D T, Spivak B Z. *Phys. Rev. B*, 2013, 88: 104412
- [78] Gao Y, Yang S A, Niu Q. *Phys. Rev. B*, 2017, 95: 165135
- [79] Goswami P, Pixley J H, Das Sarma S. *Phys. Rev. B*, 2015, 92: 075205
- [80] Dai X, Du Z Z, Lu H Z. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 119: 166601
- [81] Xiao C, Ren Y, Xiong B. *Phys. Rev. B*, 2021, 103: 115432
- [82] Sinitsyn N A, Niu Q, Sinova J *et al.* *Phys. Rev. B*, 2005, 72: 045346
- [83] Sinitsyn N A, Niu Q, MacDonald A H. *Phys. Rev. B*, 2006, 73: 075318
- [84] Sinitsyn N A, MacDonald A H, Jungwirth T *et al.* *Phys. Rev. B*, 2007, 75: 045315
- [85] Kohn W, Luttinger J M. *Phys. Rev.*, 1957, 108: 590
- [86] Nagaosa N, Sinova J, Onoda S *et al.* *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 87: 1539
- [87] Yang S A, Pan H, Yao Y *et al.* *Phys. Rev. B*, 2011, 83: 125122
- [88] Tian Y, Ye L, Jin X. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 103: 087206
- [89] Hou D, Su G, Tian Y *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 114: 217203
- [90] D'Yakonov M, Perel V. J. *Exp. Theor. Phys. Lett.*, 1971, 13: 3023
- [91] Burkov A A, Núñez A S, MacDonald A H. *Phys. Rev. B*, 2004, 70: 155308
- [92] Mishchenko E G, Shytov A V, Halperin B I. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93: 226602
- [93] Chang M C, Niu Q. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2008, 20: 193202
- [94] Xiao D, Chang M C, Niu Q. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 82: 1959
- [95] Xiao C, Liu Y, Xie M *et al.* *Phys. Rev. B*, 2019, 99: 245418
- [96] Xiao C, Liu Y, Yuan Z *et al.* *Phys. Rev. B*, 2019, 100: 085425
- [97] Xiao C, Zhou H, Niu Q. *Phys. Rev. B*, 2019, 100: 161403(R)
- [98] Xiao C, Niu Q. *Phys. Rev. B*, 2017, 96: 045428