

Una nota breu en forma de decàleg sobre la fase de Berry, el *Chern number*, la curvatura, Hamiltonians topològics i molt més

Josep Planelles

Departament de Química Física i Analítica, Universitat Jaume I,
Apartat 224, E-12080 Castelló, Spain

1. La funció d'ona Ψ i la funció d'ona $\Psi' = e^{i\gamma} \Psi$, amb γ una constant, representen el mateix estat. Diem que l'equació de Schrödinger és invariant sota un canvi *global* de fase a l'espai real (simetria $U(1)$).

Com qualsevol simetria, aquesta ha d'estar lligada amb una magnitud que se conserva (teorema de Noether). En aquest cas, aquesta simetria va lligada amb la conservació de la norma (apèndix 1) o conservació del nombre de partícules.

2. L'equació de Schrödinger d'una partícula carregada situada en un camp magnètic, $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} - eA)^2$, on A és el potencial vector, és invariant sota un canvi *local* de la fase a l'espai real. En efecte, si fem el canvi $A \rightarrow A' = A + \nabla\gamma$ amb $\gamma(\mathbf{r})$, aleshores $\Psi' = \Psi e^{i\gamma(\mathbf{r})}$ és solució de l'equació de Schrödinger associada amb el mateix autovalor, i.e., representa el mateix estat.

Cal adonar-se que la magnitud física observable, el camp magnètic, $B = \nabla \times A$, no canvia amb el canvi $A \rightarrow A + \nabla\gamma$ perquè $\nabla \times \nabla\gamma = 0$. Per això, tampoc no canvia l'estat del sistema.

3. En una xarxa cristal·lina amb simetria translacional, la funció d'ona té la forma d'ona de Bloch $\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = u_{nk}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Doncs be, (veure apèndix 2) les ones de Bloch són invariants sota un canvi *local* de la fase a l'espai recíproc (espai de moments).

Podem definir un anàleg del potencial vector en aquest cas? Veurem que si.

4. Considerem un Hamiltonià \hat{H} que depèn d'una sèrie de paràmetres, com ara el cas de l'Hamiltonià electrònic molecular, el qual depèn de les coordenades dels nuclis. Si efectuem un recorregut adiabàtic del sistema entre un temps $t = 0$ i un temps $t = T$, seguint un camí a l'espai de paràmetres que torna al punt inicial, també el sistema retorna a l'estat inicial. Aquest estat inicial però, després d'efectuat el recorregut, queda descrit per una funció Ψ_T que pot diferir de Ψ_0 amb un factor de fase $\gamma(C)$ el qual depèn del camí C seguit. Aquesta fase $\gamma(C)$ pot ser determinada a partir de l'equació de Schrödinger $i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$. Si anomenem $|u_{nR}(\mathbf{r})\rangle$ a l'enèsim autovalor de l'Hamiltonià $\hat{H}_R(\mathbf{r})$, aquesta fase, anomenada de Berry, resulta ser (apèndix 3):

$$\gamma(C) = \oint_C i \langle u_{nR}(\mathbf{r}) | \nabla_R u_{nR}(\mathbf{r}) \rangle \cdot d\mathbf{R} = \oint_C \mathbf{A}_n \cdot d\mathbf{R} \quad (1)$$

A la magnitud \mathbf{A}_n se l'anomena connexió de Berry i representa l'anàleg del potencial vector.

5. El teorema de Stokes permet canviar la integral de línia en una de superfície:

$$\gamma(C) = \iint_S \nabla \times \mathbf{A}_n \cdot d\mathbf{S} \quad (2)$$

i definir l'anàleg del camp magnètic, $\mathbf{F}_n = \nabla \times \mathbf{A}_n$, anomenat curvatura de Berry, la qual, com el camp magnètic, té sentit físic.

6. La **no** existència de monopols magnètics comporta divergència nul·la del camp, $\nabla \cdot \mathbf{F}_n = 0$, cosa que implica que el flux net de camp magnètic a través d'una superfície tancada (superfície sense vores, com ara una esfera o un torus) és zero. D'existir, el monopol magnètic generaria un camp $B = q_m \frac{\mathbf{r}}{r^3}$. Camp que podria derivar del potencial vector $A = q_m \frac{(y, -x, 0)}{r(r-z)}$ (és immediat comprovar-ho per substitució en $\nabla A = B$). Aquest camp podria tindre un flux net no nul a través d'una superfície tancada (si el monopol està situat al seu interior).

El potencial A que hem definit és singular en $z = r$. Ara be, el mateix camp B pot ser també generat pel potencial vector $A' = q_m \frac{(-y, x, 0)}{r(r+z)}$, el qual no és singular en $z = r$, però ho és en $z = -r$. Els dos potencials vectors estan relacionats per una transformació de *gauge*: $A - A' = 2q_m \nabla \varphi$ amb $\varphi = \arctan \frac{y}{x}$. L'existència d'aquesta simetria de *gauge* implica la quantificació de la càrrega magnètica (apèndix 4).

Un fet important a remarcar: no importa el gauge usat, el potencial vector del camp del monopòl magnètic presenta almenys una singularitat. Si no hi ha singularitat el flux net seria zero (apèndix 5).

7. De manera semblant, la integral de la connexió de Berry \mathbf{A}_n sobre una superfície tancada és zero excepte si \mathbf{A}_n presenta alguna singularitat.

Adonem-nos que de la manera que ha sigut definida la connexió de Berry, $\mathbf{A}_n = i \langle u_{nR}(\mathbf{r}) | \nabla_R u_{nR}(\mathbf{r}) \rangle$, aquesta no està ben definida en presència de degeneració (com la connexió està definida per a un estat n concret, si hi ha degeneració dels estats n i m , qualsevol combinació lineal d' n i m és vàlida per a descriure l'estat del sistema i la connexió queda indeterminada). L'existència d'alguna degeneració a l'espai de paràmetres \mathbf{R} representa una singularitat de la connexió (un exemple podria ser una intersecció cònica en el cas de l'efecte Jahn-Teller).

En el cas d'estat sòlid i funcions de Bloch, la fase és a l'espai recíproc $\gamma(\mathbf{k})$. En aquest cas, l'Hamiltonià efectiu que actua sobre les funcions de Bloch és $\hat{H}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{H} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, on \hat{H} és l'Hamiltonià que actua sobre la funció completa (envolupant \times Bloch). La connexió i la fase de Berry resulten doncs:

$$\mathbf{A}_n = i \langle u_{nk}(\mathbf{r}) | \nabla_k u_{nk}(\mathbf{r}) \rangle \quad ; \quad \gamma(\mathbf{k}) = \oint_C \mathbf{A}_n \cdot d\mathbf{k} \quad (3)$$

8. Seguint amb el punt anterior, considerem el cas simple de dues bandes que poden tindre una degeneració associada amb algun valor \mathbf{k} d'una zona de Brillouin bidimensional (d'una xarxa 2D, com ara el grafè). Considerem un Hamiltonià 2×2 dependent de tres paràmetres X, Y, Z (que podem considerar-los les tres components d'un vector \mathbf{R}):

$$\hat{H}(\mathbf{R}) = \begin{bmatrix} Z & X - iY \\ X + iY & -Z \end{bmatrix} = \mathbf{R} \cdot \hat{\sigma} \quad (4)$$

on $\hat{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ són les matrius de Pauli. Els autovalors d'aquest Hamiltonià són $E_{\pm} = \pm |\mathbf{R}|$. En el cas $\mathbf{R} = 0$ hi ha degeneració. La curvatura de Berry, $\mathbf{F}_n = \nabla_R \times \mathbf{A}_n$ la podem escriure (apèndix 6):

$$\mathbf{F}_n = \text{Im} \sum_{n \neq m} \frac{\langle u_{nk}(\mathbf{r}) | \nabla_R(\hat{H}) | u_{mk}(\mathbf{r}) \rangle \times \langle u_{mk}(\mathbf{r}) | \nabla_R(\hat{H}) | u_{nk}(\mathbf{r}) \rangle}{(E_m - E_n)^2} \quad (5)$$

En aquest cas, $\nabla_R(\hat{H}(\mathbf{R})) = \hat{\sigma}$.

Si a l'hora de calcular les integrals triem els eixos de manera que l'eix z apunte en la direcció \mathbf{R} , aleshores \hat{H} és diagonal, els autovectors passen a ser $|+\rangle = (1, 0)$, $|-\rangle = (0, 1)$, de manera que l'acció de les matrius de Pauli sobre aquests autovectors és: $\sigma_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$, $\sigma_x|\pm\rangle = |\mp\rangle$, $\sigma_y|\pm\rangle = \pm i|\mp\rangle$. Amb tot açò trobem (apèndix 7) que $(\mathbf{F}_n)_x = (\mathbf{F}_n)_y = 0$, mentre que:

$$(\mathbf{F}_n)_z = \frac{\text{Im} \langle + | \sigma_x | - \rangle \langle - | \sigma_y | + \rangle}{4R^2} = \frac{1}{2} \frac{1}{R^2} \quad (6)$$

Si ara revertim els eixos: $(\mathbf{F}_n)_z = \frac{1}{2} \frac{\mathbf{R}}{R^3}$. Per tant,

$$\gamma_n = \iint \mathbf{F}_n \cdot d\mathbf{S} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{R}{2R^3} R^2 \sin \theta d\theta d\phi = 2\pi \quad (7)$$

que representa el flux d'una càrrega magnètica 1/2 a través de l'esfera de radi R .

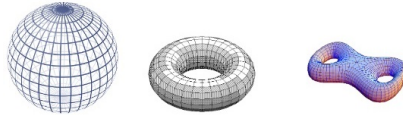
Per tant, la connexió de Berry presenta una singularitat (que correspon a la degeneració).

La integració del flux de la curvatura de Berry \mathbf{F}_n sobre una superfície tancada és zero si la connexió \mathbf{A}_n no presenta cap singularitat.

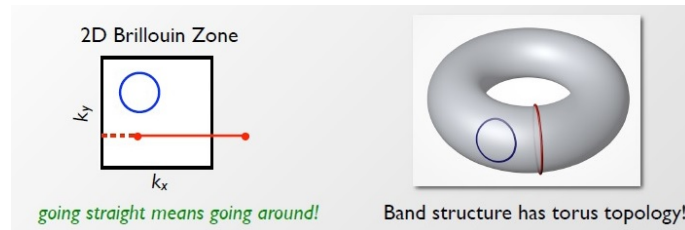
9. Concepte de curvatura en un punt d'una superfície: és el producte de les dues curvatures principals κ_1, κ_2 (la menor i major en eixe punt). En el cas d'una esfera de radi R resulta que $\kappa_1 = \kappa_2 = \frac{1}{R}$ en tots els punts. Aleshores, $K = \kappa_1 \kappa_2 = \frac{1}{R^2}$ i l'integració a tota la superfície resulta:

$$\iint \mathbf{K} \cdot d\mathbf{S} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{R^2} R d\theta R \sin \theta d\phi = 4\pi = 2\pi\chi_m \quad (8)$$

on $\chi_m = 2$. Cal afegir ací que χ_m no canvia encara que deformem l'esfera i la convertim en un bunyol. (aquesta és una propietat general de topològica matemàtica que no demostrem, la qual pot trobar-se en qualsevol llibre de topologia matemàtica). La quantitat χ_m està relacionada amb l'anomenat *genus* g de la superfície: $\chi_m = 2(1-g)$. El genus representa el nombre d'anses (o forats) de la superfície (zero en l'esfera, 1 en el torus, 2 en el doble torus, etc.).



Per cert, que la zona primera de Brillouin 2D presenta una topologia de torus atès que la periodicitat permet identificar els dos costats oposats de la cel·la.



10. El *Chern number* C és l'anàleg de χ_m integrant la curvatura en tota la primera zona de Brillouin. Recordem que l'Hamiltonià efectiu que actua sobre les funcions de Bloch és $\hat{H}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{H} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, on \hat{H} és l'Hamiltonià que actua sobre la funció completa (envolupant \times Bloch). Com $\hat{H}(\mathbf{k})$ depèn paramètricament de \mathbf{k} , podem definir $\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_{nk}(\mathbf{r}) | \nabla_{\mathbf{k}} u_{nk}(\mathbf{r}) \rangle$ i $\mathbf{F}_n = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k})$. La integració de \mathbf{F}_n sobre tota la primera zona de Brillouin potser diferent de zero si \mathbf{A}_n presenta alguna singularitat (com ara la intersecció cònica del grafè on hi ha la degeneració). En tal cas,

$$\iint \mathbf{F}_n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} = 2\pi C \quad (9)$$

on el Chern number $C \in \mathbb{Z}$.

En el cas del model de Haldane (un Hamiltonià per al grafè amb massa $\pm M$ que inclou *tunneling* imaginari $i t_2$ entre segons veïns), aquest presenta una estructura de bandes en que les degeneracions en els punts K i K' succeeixen a valors diferents de $t_2 = \pm \frac{M}{3\sqrt{3}}$. Si integrem e.g. per a un valor $t_2 = \frac{M}{3\sqrt{3}}$, trobem que $\iint \mathbf{F}_n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} = 2\pi$, i.e., $C = 1$. En el cas del grafè, ($M = t_2 = 0$) hi ha degeneracions en K i K' simultàniament, però en un i altre punt resulta que les curvatures tenen signes oposats donant lloc a $C = 0$ (apèndix 8). Per això, hom parla de topologia marginal en el cas del grafè.

1 Apèndix 1. Conservació de la norma

La simetria en la translació arbitrària $x \rightarrow x + a$ implica la conservació del moment $p = -i\partial_x$. De manera semblant, mostrem com la conservació de $-i\partial_\gamma$ implica la conservació de la densitat de probabilitat. Tenim que:

$$-i\partial_\gamma \Psi = -i \frac{\Psi e^{i\delta\gamma} - \Psi}{\delta\gamma} = -i \frac{(1 + i\delta\gamma)\Psi - \Psi}{\delta\gamma} = \Psi \quad (10)$$

Per tant, $\langle \Psi | -i\partial_\gamma | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle$.

2 Apèndix 2. Invariància de les ones de Bloch a un canvi de fase en l'espai k

Tenim que $\Psi' = \Psi e^{i\gamma(k)} = e^{ikr} u_{nk}(r) e^{i\gamma(k)}$.

Si efectuem:

$$\hat{H}\Psi' = \left[-\frac{1}{2m} \nabla_r + V(r) \right] \Psi' = e^{i\gamma(k)} \hat{H}\Psi = E_{nk} \Psi'$$

comprovem que Ψ' i Ψ corresponen al mateix estat.

3 Apèndix 3. La fase de Berry

Escrivim $\Psi_n = e^{-iE_n t/\hbar} e^{i\gamma(r,t)} u_{nR}(r)$ i apliquem l'equació de Schrödinger $i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$:

$$i\hbar\dot{\Psi} = E_n \Psi - \hbar\dot{\gamma}\Psi + i\hbar e^{-iE_n t/\hbar} e^{i\gamma(r,t)} \nabla_R u_{nR}(r) \dot{R} \quad (11)$$

$$\hat{H}\Psi = e^{-iE_n t/\hbar} e^{i\gamma(r,t)} \hat{H} u_{nR}(r) = E_n \Psi \quad (12)$$

Per tant, $\dot{\gamma} = i e^{-iE_n t/\hbar} e^{i\gamma(r,t)} \nabla_R u_{nR}(r) \dot{R}$

Multiplicant ara per Ψ^* i integrant sobre r trobem: $\dot{\gamma} = i \langle u_{nR}(r) | \nabla_R u_{nR}(r) \rangle \dot{R}$

o, el que és el mateix,

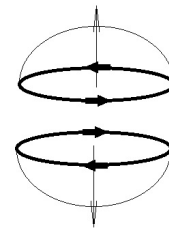
$$\gamma(C) = \oint_C i \langle u_{nR}(r) | \nabla_R u_{nR}(r) \rangle \cdot d\mathbf{R} \quad (13)$$

4 Apèndix 4. Quantificació de la càrrega magnètica

Considerem el potencial vector $A' = A + \nabla\Lambda$, amb $\Lambda = 2q_m \arctan \frac{y}{x}$. En usar A' en lloc d'utilitzar A s'afegeix una fase $e^{i\Lambda}$ a la funció d'ona. Atès que l'arc que té una tangent y/x és α o $\alpha + n\pi$ amb $n \in \mathbb{Z}$ (dit d'una altra manera: α i $\alpha + n2\pi$ és el mateix punt), necessàriament $e^{i2q_m n\pi}$ ha de ser la unitat per a qualsevol $n \in \mathbb{Z}$, cosa que implica que també $q_m \in \mathbb{Z}$.

5 Apèndix 5. El potencial vector del monopol magnètic ha de tenir singularitats

Considerem una esfera amb el monopol al centre. Considerem que C representa l'equador d'aquesta esfera i calculem el flux pel casquet nord més el flux pel casquet sud:



$$\begin{aligned} \oint B dS &= \iint_{D_1} B dS + \iint_{D_2} B dS \\ &= \oint_C A dl + \oint_C A(-dl) = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

La figura mostra com en una integració i altra es recorre l'equador C en sentit contrari.

L'única manera de tenir flux diferent de zero és que A tinga una singularitat. Aleshores, el potencial vector a l'equador (on fem la circulació) és una funció multivaluada. Pot ser $A = \frac{(-y, x, 0)}{r^2}$ o $A' = \frac{(y, -x, 0)}{r^2}$. Per tant no podem fer ús del potencial vector per calcular el flux. Hem de fer ús del propi camp:

$$\oiint \mathbf{B} dS = \oiint q_m \frac{\mathbf{r}}{r^3} dS = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} q_m \sin \theta d\theta d\phi = 4\pi q_m \neq 0 \quad (15)$$

6 Apèndix 6. Deducció de l'eq. 5

Partim de que $\gamma_n(C) = \oint_C i \langle u_{nR}(r) | \nabla_R u_{nR}(r) \rangle \cdot d\mathbf{R}$ que el teorema de Stokes transforma en:

$$\gamma_n(C) = \iint_C i \nabla_R \times \langle u_{nR}(r) | \nabla_R u_{nR}(r) \rangle \cdot d\mathbf{S} \quad (16)$$

La primera cosa a constatar és que $\langle u | \nabla u \rangle$ és imaginari pur, atès que $\langle u | u \rangle = 1$ i, per tant, $\nabla \langle u | u \rangle = 0$. Com $\langle \nabla u | u \rangle + \langle u | \nabla u \rangle = (a + ib) + (a + ib)^* = 2a$, tenim que $a = 0$ i, per tant, $\langle \nabla u | u \rangle = ib$. Aleshores, $i \langle u | \nabla u \rangle = -\text{Im}(\langle u | \nabla u \rangle)$.

Ara calculem:

$$\nabla \times \langle u | \nabla u \rangle = \begin{bmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ \langle u | \partial_x u \rangle & \langle u | \partial_y u \rangle & \langle u | \partial_z u \rangle \end{bmatrix} \quad (17)$$

Per exemple, $(\nabla \times \langle u | \nabla u \rangle)_x = \langle \partial_y u | \partial_z u \rangle - \langle \partial_z u | \partial_y u \rangle$.

Tenim en compte que:

$$\begin{bmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \langle \partial_x u | & \langle \partial_y u | & \langle \partial_z u | \\ \langle \partial_x u \rangle & \langle \partial_y u \rangle & \langle \partial_z u \rangle \end{bmatrix} = \vec{i}(\langle \partial_y u | \partial_z u \rangle - \langle \partial_z u | \partial_y u \rangle) + \vec{j}(\dots) + \vec{k}(\dots) \quad (18)$$

podem finalment escriure que: $\nabla \times \langle u | \nabla u \rangle = \langle \nabla u | \times | \nabla u \rangle$.

Com $\sum_v |v\rangle \langle v| = 1$ i $\langle u | \nabla u \rangle$ és imaginari pur, el producte $\langle \nabla u | u \rangle \langle u | \nabla u \rangle$ és real (no té part imaginària) i podem escriure que:

$$\gamma_n(C) = -\text{Im} \iint d\mathbf{S} \sum_{m \neq n} \langle \nabla u_n | u_m \rangle \times \langle u_m | \nabla u_n \rangle \quad (19)$$

perquè $\langle \nabla u | \times | \nabla u \rangle = \sum_v \langle \nabla u | v \rangle \langle v | \times \nabla u \rangle = \sum_v \langle \nabla u | v \rangle \times \langle v | \nabla u \rangle$ i exclouem el terme $u = v$ perquè no té part imaginària.

Per una altra banda, $\nabla \hat{H} | u \rangle = \nabla (\hat{H} | u \rangle) + \hat{H} | \nabla u \rangle$. Per tant, $\langle v | \nabla \hat{H} u \rangle = E_u \langle v | \nabla u \rangle = \langle v | \nabla (\hat{H} | u \rangle) + E_v \langle v | \nabla u \rangle \rightarrow (E_u - E_v) \langle v | \nabla u \rangle = \langle v | \nabla (\hat{H} | u \rangle)$. Per tant,

$$\gamma_n(C) = - \iint V_n(R) d\mathbf{S} \quad (20)$$

amb

$$V_n(R) = \text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_n | \nabla_R (\hat{H} | u_m \rangle) \langle u_m | \nabla_R (\hat{H} | u_n \rangle)}{(E_n - E_m)^2} \quad (21)$$

7 Apèndix 7

Cal parar atenció al producte vectorial de vectors complexos.

En el nostre cas, $v_1 = \langle + | \hat{\sigma} | - \rangle = (1, -i, 0)$, $v_2 = \langle - | \hat{\sigma} | + \rangle = (1, i, 0)$ i $(E_n - E_m)^2 = 4R^2$. Tenim que :

$$\begin{aligned} v_1 \times v_2 &= [(1, 0, 0) - i(0, 1, 0)] \times [(1, 0, 0) + i(0, 1, 0)] \\ &= (1, 0, 0) \times (1, 0, 0) + (0, 1, 0) \times (0, 1, 0) - i(0, 1, 0) \times (1, 0, 0) + i(1, 0, 0) \times (0, 1, 0) \\ &= 2i(0, 0, 1) \end{aligned} \quad (22)$$

Per tant, $(F_n)_x = (F_n)_y = 0$, $\text{Im}(F_n)_z = \frac{1}{2} \frac{1}{R^2}$.

8 Apèndix 8: Flux total nul en la primera zona de Brillouin del grafè

Els vectors unitat de la xarxa directa del grafè són $\mathbf{a}_1 = a(\sqrt{3}/2, -1/2)$, $\mathbf{a}_2 = a(0, 1)$, on a és la constant de cel·la. Per tant, els de la xarxa recíproca són $\mathbf{b}_1 = (2\pi/a)(2/\sqrt{3}, 0)$, $\mathbf{b}_2 = (2\pi/a)(1/\sqrt{3}, 1)$. Els punts K i K' tenen coordenades $K = (2/3)(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$, $K' = (1/3)(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$.

L'Hamiltonià TB a primers veïns del grafè té els elements de matriu diagonals $H_{11} = H_{22} = 0$ per elecció de l'origen d'energies zero si $\mathbf{k} = 0$. Els extradiagonals són:

$$H_{12} = H_{21}^* = \sum_R e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \chi_1 | \hat{H} | \chi_{2R} \rangle = \langle \chi_1 | \hat{H} | \chi_2 \rangle (1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2})$$

on anomenarem t a la integral $\langle \chi_1 | \hat{H} | \chi_2 \rangle$.

En les rodalies de K tenim que:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{a}_1} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_1} \approx e^{-i2\pi/3} (1 + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_1) = e^{-i2\pi/3} (1 + iq_x \frac{1}{2}a + iq_y a \frac{\sqrt{3}}{2})$$

Per fer la darrera substitució assumim un sistema coordinat cartesià específic on representar el vector \mathbf{q} . Com \mathbf{a}_1 i \mathbf{a}_2 són unitaris però no ortogonals, triem l'eix x al llarg del vector suma $\hat{x} = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 = (\sqrt{3}/2, 1/2)$, que resulta normalitzat, mentre que l'eix y el triem al llarg del vector resta $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 = (\sqrt{3}/2, -3/2)$, que en no tindre norma unitat, cal normalitzar: $\hat{y} = (1/2, -\sqrt{3}/2)$. Aleshores escrivim $\mathbf{q} = q_x \hat{x} + q_y \hat{y}$.

De manera semblant calculem $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2}$, cosa que permet escriure $H_{12} = \frac{\sqrt{3}at}{2}(q_x - iq_y) = \hbar v_F q_-$. En les rodalies de K' , el mateix procediment dóna lloc a $H'_{12} = -\frac{\sqrt{3}at}{2}(q_x + iq_y) = -\hbar v_F q_+$. En conseqüència, en les rodalies de K ,

$$H = \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & q_- \\ q_+ & 0 \end{pmatrix} = v_f \begin{pmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{pmatrix} = v_f k \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix} \quad (23)$$

amb autovectors $v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix}$, $v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix}$.

Al voltant de K' tenim que:

$$H' = -v_f k \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \quad (24)$$

amb autovectors $v'_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ 1 \end{pmatrix}$, $v'_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{i\phi} \\ 1 \end{pmatrix}$.

En coordenades polars, $\nabla = (\partial_k, \frac{1}{k}\partial_\phi)$ i la connexió de Berry en les rodalies de K resulta: $\mathbf{A}_k = -i \langle v_1 | \partial_k | v_1 \rangle = 0$, $\mathbf{A}_\phi = -\frac{i}{k} \langle v_1 | \partial_\phi | v_1 \rangle = -\frac{1}{2k}$. En les rodalies de K' trobem $\mathbf{A}'_k = 0$, $\mathbf{A}'_\phi = \frac{1}{2k}$.

Les curvatures respectives $\mathbf{F} = \nabla \times \mathbf{A} = (\partial_k \mathbf{A}_\phi - \frac{1}{k} \partial_\phi \mathbf{A}_k)$ resulten $\mathbf{F} = \frac{1}{2k^2} \mathbf{i}$ i $\mathbf{F}' = -\frac{1}{2k^2}$. Per això $\int_{1BZ} \mathbf{F} d\mathbf{k} = 0$.

En la figura mostrem la curvatura en la cel·la unitat de la xarxa recíproca (1BZ) del grafè. Observem que, únicament té un valor apreciable al voltant dels punts K , on és positiva ($\frac{1}{2k^2}$), o de K' on és negativa ($-\frac{1}{2k^2}$).

