

前面讨论一维晶格. $[T(a), H] = 0$. 态 $|n\rangle$ 波函数 $\langle x|n\rangle$ 位于第 n 个离子附近. $T(a)|n\rangle = |n+1\rangle$, $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$

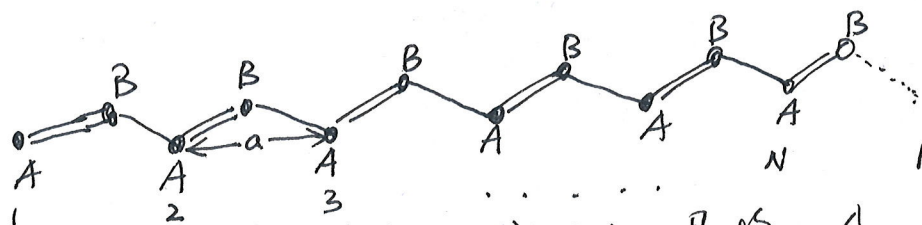
$$H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle$$

调节能量让 $E_0 = 0$, H 可写为

$$H = -\Delta \sum_i |i\rangle\langle i| - \Delta \sum_i |i\rangle\langle i+1| = -\Delta \sum_i (|i+1\rangle\langle i| + |i\rangle\langle i+1|)$$

$|i+1\rangle\langle i|$ 可写为 $c_{i+1}^\dagger c_i$, c_i 表示消灭一个 $|i\rangle$ 态,
 $c_{i+1}^\dagger$ 表示产生一个 $|i+1\rangle$ 态.

我们来看另一个 model: Su-Schrieffer-Heeger Model (SSH).



一个原胞里两个格点. 或两个子晶格: A, B.

$|n, A\rangle$ 表示粒子位于原胞 n 中 A 格点附近

$|n, B\rangle$ 表示 n 中 B

$$H|n, A\rangle = -\Delta_1|n, B\rangle - \Delta_2|n-1, B\rangle$$

$$H|n, B\rangle = -\Delta_1|n, A\rangle - \Delta_2|n+1, A\rangle$$

因此 H 可写成

$$H = -\Delta_1 \sum_{i=1}^N (|i, B\rangle\langle i, A| + \text{h.c.}) - \Delta_2 \sum_{i=1}^N (|i+1, A\rangle\langle i, B| + \text{h.c.})$$

N 个 ~~格点~~ 原胞, 周期性边界: $|N+1, A\rangle = |1, A\rangle$, $|1-1, B\rangle = |N, B\rangle$

我们将 $|n, \alpha\rangle$ 表示为 $|n\rangle \otimes |\alpha\rangle \in \mathcal{H}_{\text{external}} \otimes \mathcal{H}_{\text{internal}}$
 n 标记之胞, 为外自由度, $\alpha \in \{A, B\}$ 为内自由度, 表象为 $\uparrow, \downarrow$

H 改写为:

$$H = -\Delta_1 \sum_{i=1}^N |i\rangle\langle i| \otimes \sigma_x - \Delta_2 \sum_{i=1}^N (|i+1\rangle\langle i| \otimes \sigma_+ + \text{h.c.})$$

其中 $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$
 $\sigma_- = \sigma_+^\dagger = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

对于外自由度, 有 $T(a)$ 表象: ($a=1$)

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle, \quad T(a)|k\rangle = e^{-ik} |k\rangle.$$

周期性 $\rightarrow k = \frac{2\pi \cdot m}{N}$, 通常取: $m = -\frac{N}{2}+1, \dots, \frac{N}{2}$, 共 N 个

$$H \text{ 表象应写为 } |\psi_n(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle$$

$$H |\psi_n(k)\rangle = E_n(k) |\psi_n(k)\rangle$$

$$\langle k | H | k \rangle \otimes |u_n(k)\rangle = \langle k | E_n(k) | k \rangle \otimes |u_n(k)\rangle$$

定义: $H(k) = \langle k | H | k \rangle$, 为 $\mathcal{H}_{\text{internal}}$ 空间中算符.

$$\text{表象方程可写为: } H(k) |u_n(k)\rangle = E_n(k) |u_n(k)\rangle,$$

$$H(k) = -\Delta_1 \sum_i \langle k | i \rangle \langle i | k \rangle \otimes \sigma_x - \Delta_2 \sum_i [\langle k | i+1 \rangle \langle i | k \rangle \otimes \sigma_+ + \text{h.c.}]$$

$$= -\Delta_1 \sigma_x - \Delta_2 e^{-ik} \sigma_+ - \Delta_2 e^{ik} \sigma_-$$

$$= \begin{pmatrix} 0, & -\Delta_1 - \Delta_2 e^{-ik} \\ -\Delta_1 \Delta_2 e^{ik}, & 0 \end{pmatrix}$$

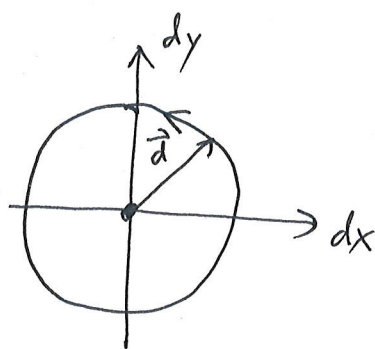
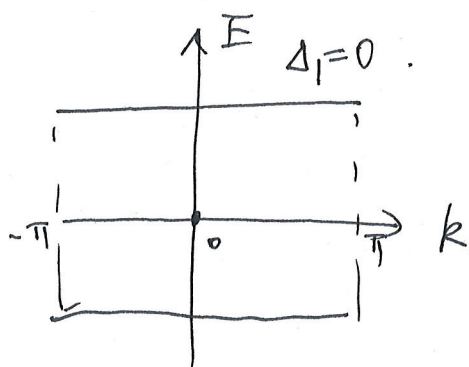
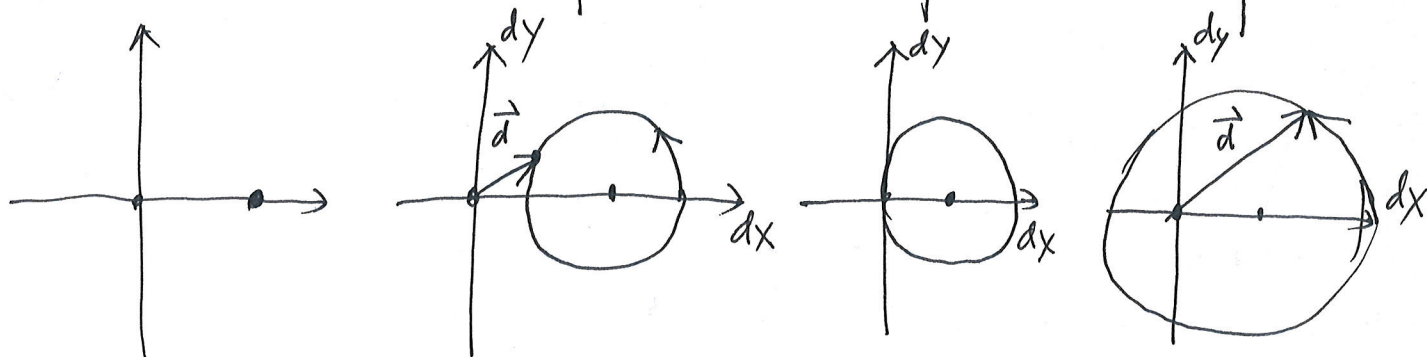
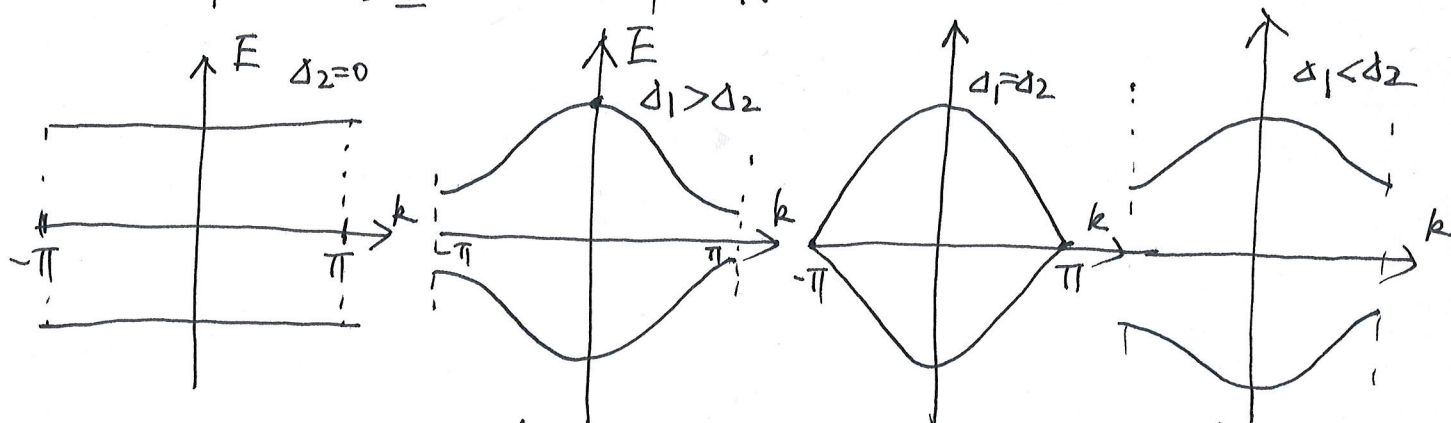
作用在内部.

可写为 $H(k) = -\vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma} = -|d(k)| \sigma_{\hat{d}}$,

其中: $d_x(k) = +\Delta_1 + \Delta_2 \cos k$, $d_y(k) = +\Delta_2 \sin k$, $d_z(k) = 0$.

这是磁场中自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的 Hamiltonian! $\vec{d}(k) \rightarrow \mu_0 \vec{B}$, $\hat{d} = \frac{\vec{d}}{|\vec{d}|}$

容易得出: $E_{\pm}(k) = \pm |d| = \pm \sqrt{\Delta_1^2 + \Delta_2^2 + 2\Delta_1\Delta_2 \cos k}$,



• 本征态 $|u_{\pm}(k)\rangle = |\hat{d}_{\pm}\rangle$

一个原胞内一个电子, 填满一个能带.

• 两条能带, 当 $\Delta_1 \neq \Delta_2$ 时有 Gap: $2|\Delta_1 - \Delta_2|$.

• 对比磁场中的自旋: $\Delta_1 > \Delta_2$ 与 $\Delta_1 < \Delta_2$ 两种情况下,

H 中参数 k 从 $-\pi$ 到 π , $\vec{d}$ 回到起点, $H(k)$ 也回到起点,

$|u_n(k)\rangle$ 的 Berry phase 不同. 这意味着什么?

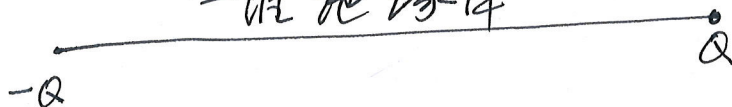
$n = \pm$.

(3)

电磁学告诉我们：电极化强度 $\vec{P} = \frac{\sum P_i}{\Delta V}$, P_i 为 ΔV 中的电偶极矩。由 P 束缚电荷密度 $\rho_{\text{bound}} = -\nabla \cdot \vec{P}$ 。

表面电荷面密度 $\sigma_p = \vec{n} \cdot \vec{P}$

一维绝缘体



对于一维系统，端点电荷 $Q = P$ 。

现在我们来证明 P 其实等于一个 Berry phase。

对于填满电子的能带，第 n 个元胞的电子态可表示为

$$|n\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} |k\rangle \langle k|n\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{-ikn}}{N} |k\rangle$$

计算电子位置偏离元胞中心的期望值可求出 P 。
(以简单晶格为例)。

$$P = -e \langle n | (x-n) | n \rangle$$

$$= -e \int dx' \langle n | x' \rangle \langle x' | (x-n) | n \rangle$$

$$\text{由于 } \langle x' | k \rangle = e^{ikx'} u_k(x'), \quad u_k(x'+a) = u_k(x')$$

$$\text{即 } |u_k\rangle = e^{-ikx} |k\rangle.$$

$$P = -ie \int dx' \int \frac{dk'}{2\pi} \int \frac{dk}{2\pi} \langle u_{k'} | x' \rangle \frac{e^{ik'(n-x')}}{N} \nabla_k \frac{e^{-ik(n-x')}}{N} \langle x' | u_k \rangle$$

$$= \frac{ie}{2\pi} \int dk \langle u_k | \nabla_k | u_k \rangle = \frac{e}{2\pi} \gamma_B.$$

(4).

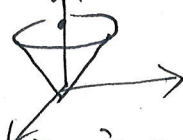
根据极化强度与 Berry phase 的关系,

• 当 $\Delta_1 > \Delta_2$, $\hat{d}_{\pm}$ 没有张开立体角. $\therefore P=0$.

• 当 $\Delta_1 < \Delta_2$, $\hat{d}_{\pm}$ 张开立体角 2π , Berry phase $= \frac{2\pi}{2} = \pi$.
 $\therefore P = \frac{e}{2}$.

可用拓扑性质来区分: $\vec{d}$ 是否绕过 $\vec{d}=0$ 点.

Winding number 缠绕数为 1.



• 以上的前提是 $d_z(k)=0$.

如果 $d_z(k)$ 可以不等于零, P 可以从 $\frac{e}{2}$ 连续过渡到 0.

此时两种能带拓扑等价; 通过第3维绕过 $\vec{d}=0$ 点.
 $\therefore \theta = \frac{\pi}{2}$.

• 极化情况的理解: $|d_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\varphi} \end{pmatrix}$ ~~由 d 决定~~, φ 由 $\vec{d}$ 决定.

当 $\Delta_2=0$, $|\hat{d}_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle$, 粒子局域在强棒(原胞内). 能量与 k 无关.

当 $\Delta_1=0$, $|\hat{d}_{\pm}\rangle$ 在 d_x, d_y 平面旋转, 是 $\sigma_x c_k + \sigma_y s_k$ 的本征态, 能量同样与 k 无关.

粒子局域在相邻 P 原胞之间.

• 在开边界: $+\frac{e}{2}$ $-\frac{e}{2}$

从 $\Delta_2=0$ 到 $\Delta_1=0$, 意味着每个电子移动半个原胞, 导致极化强度 $\frac{e}{2}$. 在端点出现 $\pm \frac{e}{2}$ 的电荷.

对于 $\Delta_2=0$, 所有本征态都是 $\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle$, 在原胞内, 没有 edge 态,
但是 $\Delta_1=0$ 不一样, 有两个特殊的本征态: $|1, A\rangle$ 和 $|N, B\rangle$.

$$\hat{H}|1, A\rangle = \hat{H}|N, B\rangle = 0. \quad \text{edge states (拓扑不变量)}$$

• SSH 模型的对称性:

$$\sigma_z H(k) \sigma_z = \sigma_z (-\Delta_1 \sigma_x - \Delta_2 e^{-ik} \sigma_+ - \Delta_2 e^{ik} \sigma_-) \sigma_z = -H(k)$$

称为“手性对称性”, chiral symmetry.

保证了 $d_z(k) \cdot \sigma_z$ 不存在, 即 $d_z(k)=0$, 保证 $\Delta_1 > \Delta_2$ 与 $\Delta_1 < \Delta_2$ 拓扑不等价.

$$\text{进一步: } \sigma_z H \sigma_z |E(k)\rangle = -H |E(k)\rangle = -E(k) |E(k)\rangle$$

即: $\sigma_z |E(k)\rangle$ 也是本征态, 能量相反.

可记为 $|-E(k)\rangle$. ($|\alpha^-\rangle = \sigma_z |\alpha^+\rangle$)

• SSH 描述 polyacetylene 聚乙烯. 真空系统并没有这种对称性.

→ 一维系统没有拓扑. (只有对称性保护拓扑. SPT)

• 以棒中心为原点有空间反射对称性.

$$\pi |k\rangle = |-k\rangle, \quad \pi |A\rangle = |B\rangle, \quad \pi |B\rangle = |A\rangle.$$

在内部空间 $\pi \rightarrow \sigma_x$.

$$\therefore \sigma_x H(k) \sigma_x = H(-k)$$

$$\Rightarrow d_x(-k) = d_x(k), \quad d_{y,z}(-k) = -d_{y,z}(k)$$

$$\text{保证 } P=0, \text{ or } P=n \cdot e + \frac{e}{2}$$