

# My Note about Non-Hermitian topological

## 目录

一.Pre-knowledge .....	2
1.1 一维经典紧束缚模型 .....	2
1.2 拓展到 SSH Model .....	4
1.3 部分异同点及能带计算 .....	7
二.SSH Model .....	8
2.1 建立 $H$ .....	8
2.2 傅里叶变换得到动量空间哈密度量 .....	9
2.3 计算 $E(k)$ .....	11
2.4 数值能谱 .....	11
三.Shortcut solution .....	16
3.1 引入 $S$ 算符 .....	16
3.2 分析狄拉克符号与二次量子化符号在 SSH 的一致性 .....	16
3.3 分析 $S$ 的矩阵形式与二次量子化形式 .....	17
3.4 相似变换 .....	17
3.5 对 $t_3$ 非零情况下相似变换的不可行性分析 .....	19
四.Generalizable solution .....	22
4.1 获得本征方程 .....	22
4.2 求解本征方程 .....	23
4.3 $\beta$ - $E$ 的数值解 .....	24
4.4 求解 $\beta$ 并绘制 $C_\beta$ .....	25
4.5 体本征态绘图 .....	27
五.Non-Bloch topological invariant .....	30
六.The nonzero $t_3$ case .....	31
6.1 数值能谱 .....	31
6.2 绕数计算: .....	33
6.3 $\beta$ 轨迹计算 .....	40

## 一.Pre-knowledge

### 1.1 一维经典紧束缚模型

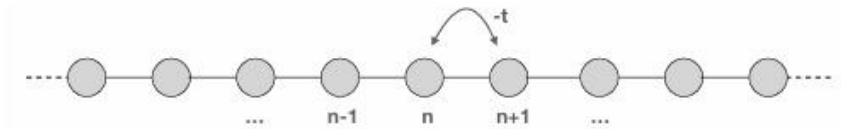


FIG. 2: Pictorial representation of a one dimensional tight-binding Hamiltonian.

如图，该模型通过沿直线以有序方式排列类氢原子来构建一维晶格。原子足够接近，波函数将不再正交而混合形成成键和反键态。晶格中，原子重叠助于电子通过从一个原子隧穿到另一个原子，从而在晶格上离域。这种隧穿势由不同位置的两个态之间的重叠（内积积分）给出，表示为  $-t$ 。

哈密顿量描述粒子在晶格结构上的运动

$$H = - \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j$$

这里， $ij$  代表晶格位置，而  $-t_{ij}$  是第  $i$  个和第  $j$  个位置之间的重叠积分。

$t_{ij} = t_{ji}$  (暂时考虑哈密顿量为厄米算符)

平移算符  $i \rightarrow i+1$ , 表示为  $T = \sum_i c_{i+1}^\dagger c_i$ 。

紧束缚哈密顿量是平移算符的函数， $H = - \sum_n t_n T^n$

既然现在  $[H, T] = 0$ , 我们可以在平移算符的本征基中对哈密顿量进行对角化，我们知道这些本征基是定义为如下的平面波状态

本征基是定义为如下的平面波状态

$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} c_j^\dagger |0\rangle$ , 而  $T^m$  作用于  $|k\rangle$  会得到系数  $e^{-ikma}$ , 故

$$\epsilon(k) = - \sum_n t_n e^{-ikna}$$

假设只允许最近邻的格点之间发生跃迁，意味着一个电子只能从它相邻的原子跳到另一个相邻的原子，得到 $\epsilon(k) = -2t \cos ka$

关于 tight-binding model 的跳跃积分-t:

由于与之后 SSH 模型中的参数 $t_1, t_2$ 相关，故展开说明。

首先考虑一个孤立原子，其势阱为 $V_{\text{atom}}(x)$

其定态薛定谔方程

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{atom}}(x) \right] \phi(x) = E_{\text{atom}} \phi(x)$$

该模型仅考虑近邻的原子，对于双原子系统

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{atom}}(x) + V_{\text{atom}}(x-d) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

微扰近似（认为  $d \gg \lambda$  波重叠区域长度）

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi(x) \pm \phi(x-d)]$$

有能量分裂

$$E_{\pm} = E_{\text{atom}} + \frac{\Delta E}{2} \pm t$$

直接积分 $\Delta E$

$$\Delta E = \int \phi^*(x) [V_{\text{atom}}(x-d)] \phi(x) dx$$

$$\text{跳跃积分: } t = - \int \phi^*(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{atom}}(x) \right] \phi(x-d) dx$$

$$\text{其严格定义为 } t = - \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\text{left}}^*(x) \hat{H}_{\text{atom}} \phi_{\text{right}}(x) dx$$

t 本质是电子在相邻原子轨道间量子隧穿的振幅，其大小由波函数交叠区域决定。

若考虑一个有限方势阱，势阱外波函数呈指数衰减： $\phi(x) \sim e^{-\kappa |x|}$ , 其中  $\kappa =$

$$\sqrt{\frac{2m|E_{\text{atom}}|}{\hbar^2}}.$$

$V_0 \uparrow \rightarrow |E_{\text{atom}}| \uparrow \rightarrow \kappa \uparrow \rightarrow \text{波函数衰减} \uparrow \rightarrow \text{交叠} \downarrow \rightarrow |t| \downarrow$

以一个具体例子进行说明：

假设氢原子链(晶格常数 $a$ ):

孤立氢原子:

$$V_{\text{atom}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad \phi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$$

2. 计算 $t$ :

$$t = -\int \phi_0^*(\mathbf{r}) \hat{H}_{\text{atom}} \phi_0(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{x}}) d^3r$$

数值结果:  $t \approx -2.5e^{-a/a_0} \text{ eV}$

## 1.2 拓展到 SSH Model

由于佩尔斯不稳定性，晶格会发现畸变。均匀链的失稳：一维等间距原子链(紧束缚模型)在  $T = 0$  时必然发生二聚化畸变(Peierls 相变)打开能隙降低电子能量。

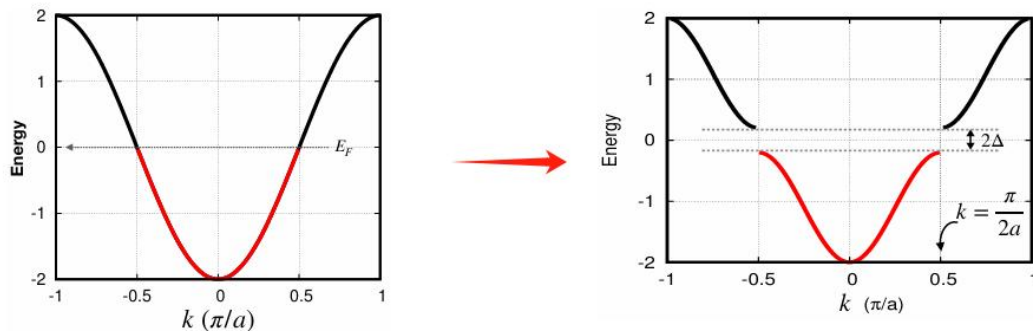
机制：均匀链( $t$  恒定)的费米面位于  $k_F = \pm \pi/(2a)$ , 态密度发散(嵌套矢量  $Q = 2k_F = \pi/a$ ) 电子-晶格耦合一晶格周期翻倍(原胞扩大为  $2a$ )  $\rightarrow$  在  $k = \pi/(2a)$  处打开能隙  $\rightarrow$  费米面附近电子能量降低。

Peierls 不稳定性：均匀链 ( $v=w$ ) 能量较高，系统自发二聚化打开能隙。用拓扑解释，二聚化方式有两种 (A-B-A-B... 或 B-A-B-A...)，对应两种简并基态。

两种基态交界处形成畴壁 (Domain Wall)，其上出现受拓扑保护的零能孤子态。

物理实例：聚乙炔 (Polyacetylene)

结构：一维碳链，单双键交替  $\rightarrow$  自然形成二聚化



能量色散图。在晶格发生畸变后发生变化，且畸变后布里渊区域边界为  $k = \pm \frac{\pi}{2a}$

经历 Peierls 跃迁并使晶格发生畸变，使得晶格常数变为  $2a$ 。棕色区域显示了由电子产生的电子密度。在正常情况下，当晶格间距为  $a$  时，电子密度是均匀的。但是，如果我们考虑这样一种情况，即每个原子都发生畸变，从而使所得晶格在一个晶胞中具有两个亚晶格位点，并且晶胞间距离为  $2a$ 。

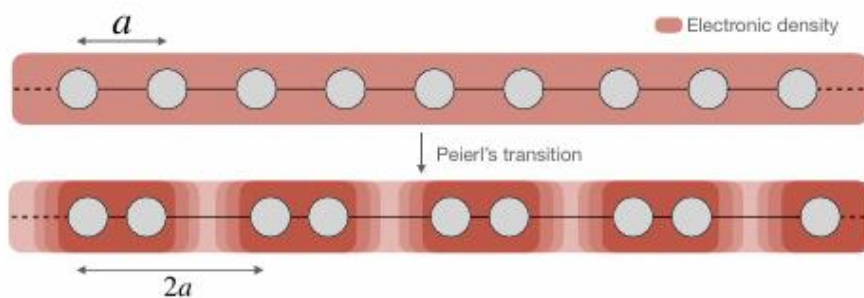


FIG. 4: A 1D lattice, lattice constant  $a$ , undergoes a Peierls transition and distorts the lattice such the the lattice constant becomes  $2a$ . The brown region shows the electronic density.

当设置晶格常数  $2a=1$  时，这与双格点原胞的 SSH 模型类似

二聚化后的晶格自然映射到 SSH 模型：

强键跳跃

$$v = t + \delta t$$

弱键跳跃

$$w = t - \delta t$$

( $\delta t$ 为畸变强度)

电子能量降低量(Peierls 增益):

$$\Delta E_{\text{electronic}} \approx -\frac{2}{\pi} |t| \left( \frac{\delta t}{t} \right)^2 \ln \left( \frac{\delta t}{t} \right)$$

超过晶格弹性势能增加  $\Delta E_{\text{lattice}} \propto (\delta t)^2$ , 总能量下降。

关键关联:

Peierls 相变将均匀紧束缚模型(无能隙金属)转化为 SSH 模型(有能隙绝缘体),并诱导拓扑分类。

对 Peierls 相变的深入可以参考这篇文章 [Understanding Basic Concepts of Topological Insulators Through Su-Schrieffer-Heeger \(SSH\) Model](#),

超链接

[arXiv:1906.08435](#)

在此基础上, TB 模型不仅可以推导到 SSH 模型, 还能更深一步(如超导等)

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{\langle ij \rangle} \Delta_{ij} (c_i^\dagger c_j^\dagger + \text{h.c.})$$

the Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model describes spinless fermions hopping on a one-dimensional lattice with staggered hopping amplitudes.

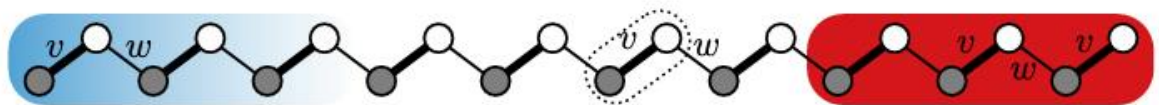


Figure 1.1: Geometry of the SSH model. Filled (empty) circles are sites on sublattice A (B), each hosting a single state. They are grouped into unit cells: the  $m = 6$ th cell is circled by a dotted line. Hopping amplitudes are staggered: intracell hopping  $v$  (thick lines) is different from intercell hopping  $w$  (thin lines). The left and right edge regions are indicated by blue and red shaded background.

原始紧束缚 SSH 模型中描述了在一维双格点原胞晶格上的单个无自旋电子。一个原胞中的两个格点被标记为 A 和 B, 由于我们考虑的是无自旋电子, 因此我们将使用每个晶胞一个电子, 这对应于半填充的晶格。因此, 电子拥有的唯一自由度是它们可以从一个位点跳到另一个位点——将晶胞内的跃迁势称为  $v$ , 将连接相

邻晶胞的跃迁势称为  $w$ ，并将紧束缚哈密顿量写为

$$H = v \sum_{m=1}^N (c_{m,B}^\dagger c_{m,A} + \text{h.c.}) + w \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + \text{h.c.}), A, B \text{ 标记格点, 而}$$

$v, w$  标记跃迁强度，通过重定义态矢相位取正实数

### 1.3 部分异同点及能带计算

特性	tight-binding model	SSH model
跳跃积分	$-t$	$V \text{ and } w$
布里渊区大小	$[-\pi/a, \pi/a]$	$[-\pi/(2a), \pi/(2a)]$
能隙	无（金属性）	$E_{\text{gap}} =  2v - 2w $
拓扑性质	平庸	平庸或非平庸（ $v < w$ ）
边界态	无	拓扑非平庸时有零模
对称性	无	手征对称，保护零模
电子行为	扩展布洛赫波	拓扑保护的边界态

### 二者能带计算

对 TB 模型（和前面大同小异，只是没用平移算符）

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \phi_n(x)$$

薛定谔方程代入

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow \hat{H}\left(\sum_m c_m \phi_m(x)\right) = E \sum_m c_m \phi_m(x)$$

左乘  $\phi_n^*(x)$  并积分：

$$\int \phi_n^*(x) \hat{H} \left( \sum_m c_m \phi_m(x) \right) dx = E \int \phi_n^*(x) \left( \sum_m c_m \phi_m(x) \right) dx$$

其中， $\int \phi_n^* \hat{H} \phi_n dx \approx E_{\text{atom}}, \quad t = - \int \phi_n^* \hat{H} \phi_{n+1} dx$

利用正交性化简  $(E - \epsilon)c_n + t(c_{n+1} + c_{n-1}) = 0$

假设解的形式  $c_n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikna}$ ，其中  $k$  为波矢， $N$  为原子总数。

代入

$$(E - \epsilon) e^{ikna} + t e^{ik(n+1)a} + t e^{ik(n-1)a} = 0$$

$$E - \epsilon + t e^{ika} + t e^{-ika} = 0 \rightarrow E = \epsilon + 2t \cos(ka)$$

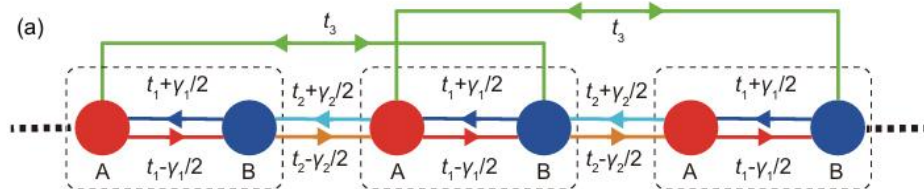
对于 SSH 模型，见 2.2, 2.3 的推导

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + w e^{-ika'} \\ v + w e^{ika'} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{得到 } E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos(ka')}$$

## 二.SSH Model

推导步骤：建立  $H \rightarrow$  傅里叶变换得到动量空间哈密度量（推导文章的表达式） $\rightarrow$  计算  $E(k) \rightarrow$  数值能谱



### 2.1 建立 H

引入非对称  $t_3$  项， $v, w$  替换为文献参数

$$H = \sum_{m=1}^N [(t_1 - \gamma/2) c_{m,B}^\dagger c_{m,A} + (t_1 + \gamma/2) c_{m,A}^\dagger c_{m,B}] +$$

$$t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A}) +$$

$$t_3 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m,A}^\dagger c_{m+1,B} + c_{m+1,B}^\dagger c_{m,A})$$



这里使用的同样是二次量子化形式，如果是考虑单粒子模型，基矢量便是位置矢量了：

$$H = \sum_{m=1}^N ((t_1 - \gamma/2)|m, B\rangle\langle m, A| + (t_1 + \gamma/2)|m, A\rangle\langle m, B|) +$$

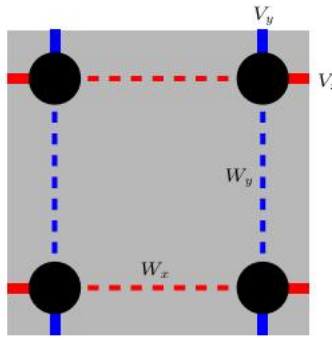
$$t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1, A\rangle\langle m, B| + |m, B\rangle\langle m+1, A|) +$$

$$t_3 \sum_{m=1}^{N-1} (|m, A\rangle\langle m+1, B| + |m+1, B\rangle\langle m, A|)$$

但仅在 SSH 模型下两种表达形式完全等效，在介绍模型部分展开或许会显得有些冗杂，该等效性在 Part3.Shortcut solutionz 中会逐帧分析。

如在二维各向异性 SSH 模型中，哈密顿量形式如下：

(a)



$$H = \sum_{i,j} w_x (b_{i,j}^* a_{i,j} + c_{i,j}^* d_{i,j}) + \sum_{i,j} w_y (c_{i,j}^* b_{i,j} + d_{i,j}^* a_{i,j}) \\ + \sum_{i,j} v_x (a_{i+1,j}^* b_{i,j} + d_{i+1,j}^* c_{i,j}) + \sum_{i,j} v_y (b_{i,j+1}^* c_{i,j} + a_{i,j+1}^* d_{i,j}) + h.c.$$

如果这里坚持用狄拉克符号，可能产生的问题？

一方面由于对象增多符号容易冲突和混淆，

如  $a_{i+1,j}^\dagger b_{i,j}$  表示跨单元的跃迁，用狄拉克符号  $|i +$

$1, j, A\rangle\langle i, j, B|$  会掩盖算符的时空非局域性，另一方面部分算式无法表达，如二次

量子化下的动量空间算符  $a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i,j} e^{-ik \cdot r_{i,j}} a_{i,j}$ 。

后面沿用通用的二次量子化形式，更能体现二次量子化的本质。

## 2.2 傅里叶变换得到动量空间哈密度量

下一步：进行傅里叶变换到动量空间，作用于  $m$ 。

有动量空间算符

$$c_{m,A} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikm} c_{k,A}$$

$$c_{m,B} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikm} c_{k,B}$$

代入，以其中一项为例，

$$\sum_{m=1}^N c_{m,B}^\dagger c_{m,A} = \frac{1}{N} \sum_{m,k,k'} e^{-ikm} c_{k,B}^\dagger e^{ik'm} c_{k',A} = \sum_k c_{k,B}^\dagger c_{k,A}$$

利用了正交性  $\frac{1}{N} \sum_m e^{i(k-k')m} = \delta_{k,k'}$

同理，另外一项对称得出  $\sum_k c_{k,B} c_{k,A}^\dagger$

在子格空间  $(c_{k,A}, c_{k,B})$  中，泡利矩阵的算符形式为：

$$\begin{aligned}\sigma_x &= c_{k,A}^\dagger c_{k,B} + c_{k,B}^\dagger c_{k,A} \\ \sigma_y &= -i c_{k,A}^\dagger c_{k,B} + i c_{k,B}^\dagger c_{k,A} \\ \sigma_z &= c_{k,A}^\dagger c_{k,A} - c_{k,B}^\dagger c_{k,B}\end{aligned}$$

胞内项：

$$\sum_{m=1}^N [(t_1 - \gamma/2) c_{m,B}^\dagger c_{m,A} + (t_1 + \gamma/2) c_{m,A}^\dagger c_{m,B}]$$

$$= (t_1 + \gamma/2) \sigma_+ + (t_1 - \gamma/2) \sigma_- = t_1 \sigma_x + i \frac{\gamma}{2} \sigma_y$$

同上可得  $t_{21}$  项：  $t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A})$

$$= t_2 e^{-ik} \sigma_+ + t_2 e^{ik} \sigma_- = t_2 (\cos k \sigma_x + \sin k \sigma_y)$$

$$t_3 \text{ 项: } t_3 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m,A}^\dagger c_{m+1,B} + c_{m+1,B}^\dagger c_{m,A})$$

$$= t_3 e^{ik} \sigma_+ + t_3 e^{-ik} \sigma_- = t_3 (\cos k \sigma_x - \sin k \sigma_y)$$

%后面两项的变换认为  $t_2, t_3$  均为实数

代入  $H(k)$  运算

$$H(k) = [t_1 + (t_2 + t_3) \cos k] \sigma_x + [(t_2 - t_3) \sin k + i \frac{\gamma}{2}] \sigma_y$$

化简

$$\begin{aligned}d_x &= t_1 + (t_2 + t_3)\cos k \\d_y &= (t_2 - t_3)\sin k\end{aligned}$$

$$H(k) = d_x \sigma_x + \left(d_y + i \frac{\gamma}{2}\right) \sigma_y$$

$H$ 能够直接由 $\sigma_+$   $\sigma_-$ 表达出，故满足 chiral symmetry，能带成对( $E, -E$ )出现

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & d_x - i \left(d_y + i \frac{\gamma}{2}\right) \\ d_x + i \left(d_y + i \frac{\gamma}{2}\right) & 0 \end{pmatrix}$$

## 2.3 计算 $E(k)$

$$\text{有本征方程 } E^2 - \left[d_x^2 + \left(d_y + i \frac{\gamma}{2}\right)^2\right] = 0$$

$$E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{d_x^2 + \left(d_y + i \frac{\gamma}{2}\right)^2}, \text{ 令其为 } 0, \text{ 依照传统理论认为 } E(k) \text{ 决定零模}$$

$$\text{Exceptional points: } (d_x, d_y) = (\pm \gamma/2, 0)$$

$$\text{反解, 得 } t_1 = t_2 \pm \gamma/2 \quad (k = \pi) \text{ or } t_1 = -t_2 \pm \gamma/2 \quad (k = 0)$$

## 2.4 数值能谱

数值能谱思路：构造矩阵求特征值后，对特定的  $t_1$  对应的 80 个  $E$ ，扩展特定  $t_1$  值为  $80 \times 1$  矩阵对齐后，利用 `scatter` 画图

```
L=40;t2=1;gamma=4/3;t1_range=-3:0.01:3;
```

```
points=length(t1_range);
```

```
molE=cell(points,1);%提前备好，装填80*points个E
```

```
for i=1:points
```

```
    t1=t1_range(i);
```

```
    H=zeros(2*L,2*L);
```

```
    for n=1:L
```

```
        if n>1
```

```
            H(2*n-1,2*n-2)=t2;
```

```

end
H(2*n-1,2*n)=t1+gamma/2;
H(2*n,2*n-1)=t1-gamma/2;
if n<L
    H(2*n,2*n+1)=t2;
end
end
molE{i}=eig(H);

```

%%注意位置 (a,b)不能弄错(b,a),否则skin effect的方向相反

以矩阵的行/列索引为例, 第 m 个单元的A位点对应索引2m-1, B为2m,

|m, B><m, A|表示从A到B的跃迁,对应矩阵位置 H(2m,2m-1),值为 $t_1$ , 类推%%

% 这里eig (H)是个 $2L \times 1$ 的矩阵, molE的每个格子放一个不同 $t_1$ 下的本征值集合

end

figure;

subplot(2,2,1);

hold on;

for k=1:points

    t1=t1\_range(k);

    E\_p=molE{k};

    scatter(t1\*ones(size(E\_p)),abs(E\_p),1,'k');%需要ones对齐。

    zero\_modes=E\_p(abs(E\_p)<0.1);            %筛选零模

    scatter(t1\*ones(size(zero\_modes)),abs(zero\_modes),10,'r');

end

hold off;

subplot(2,2,2);

hold on;

```

for k=1:points
    t1=t1_range(k);
    E_p=molE{k};
    scatter(t1*ones(size(E_p)),real(E_p),1,'k');
    zero_modes=E_p(abs(E_p)<0.1);
    scatter(t1*ones(size(zero_modes)),real(zero_modes),10,'r');
end
hold off;

subplot(2,2,3);
hold on;
for k=1:points
    t1=t1_range(k);
    E_p=molE{k};
    scatter(t1*ones(size(E_p)),imag(E_p),1,'k');
    zero_modes=E_p(abs(E_p)<0.1);
    scatter(t1*ones(size(zero_modes)),imag(zero_modes),10,'r');
end
hold off;

%对b, c图, 复制粘贴, 改变画图部分代码的abs为real/imag即可。
L=40;t2=1;gamma=4/3;t1_range=-3:0.01:3;
points=length(t1_range);
molE=cell(points,1);
dis=0.8;
for i=1:points
    t1=t1_range(i);
    H=zeros(2*L,2*L);
for n=1:L
    if n>1
        H(2*n-1,2*n-2)=t2;

```

```

        H(2*n-1,2*n)=t1+gamma/2;
        H(2*n,2*n-1)=t1-gamma/2;
    end

    H(1,2)=(t1-dis)+gamma/2;
    H(2,1)=(t1-dis)-gamma/2;

    if n<L
        H(2*n,2*n+1)=t2;
    end

end

molE{i}=eig(H);

end

% 就改一改H的写法，没区别

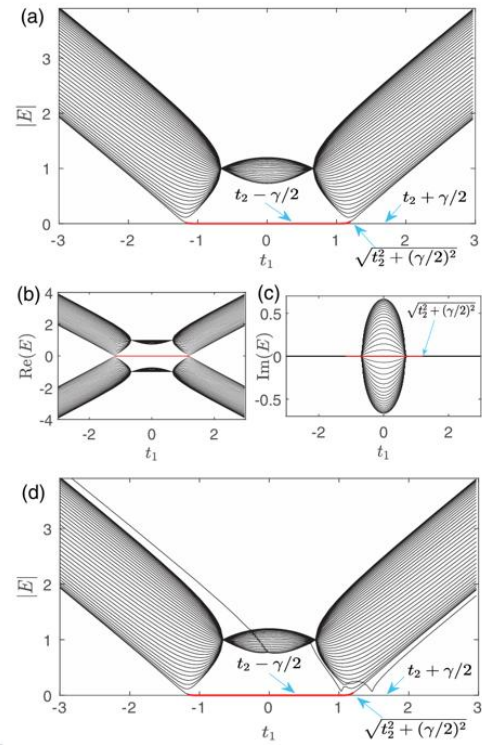
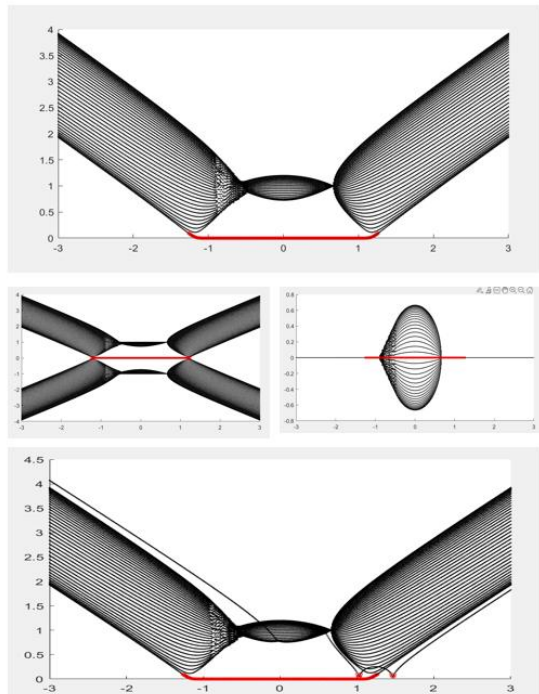
figure;

hold on;

for k=1:points
    t1=t1_range(k);
    E_p=molE{k};
    scatter(t1*ones(size(E_p)),abs(E_p),1,'k');
    zero_modes=E_p(abs(E_p)<0.1);
    scatter(t1*ones(size(zero_modes)),abs(zero_modes),10,'r');
end

```

hold off;



**Result:**

**H(k) cannot determine the zero modes**

S.P.在 $t_1=-0.6$ 附近出现散点杂乱，将L调整至30左右则无该现象。

### 三.Shortcut solution

推导步骤：引入  $S$  算符→分析  $S$  的矩阵形式与二次量子化形式，狄拉克符号与二次量子化符号在 SSH 的一致性→相似变换→对  $t_3$  非零情况下相似变换的不可行性分析

#### 3.1 引入 $S$ 算符

二次量子化形式的算符  $S = \prod_{m=1}^L r^m (c_{m,A}^\dagger c_{m,A} + c_{m,B}^\dagger c_{m,B})$

逆算符有  $S^{-1} = \prod_{m=1}^L r^{-m} (c_{m,A}^\dagger c_{m,A} + c_{m,B}^\dagger c_{m,B})$

在  $t_3$  为零的情况下，

$$H = \sum_{m=1}^N [(t_1 - \gamma/2) c_{m,B}^\dagger c_{m,A} + (t_1 + \gamma/2) c_{m,A}^\dagger c_{m,B}] +$$

$$t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A})$$

#### 3.2 分析狄拉克符号与二次量子化符号在 SSH 的一致性

对占据数算符  $n_{m,\alpha} = c_{m,\alpha}^\dagger c_{m,\alpha}$  施加指数权重  $r^m$ ：

$$S^{-1} c_{m,A} S = r^{-m} c_{m,A}, \quad S^{-1} c_{m,B} S = r^{-m} c_{m,B}.$$

在这里我们将顺带验证二次量子化与狄拉克符号在本模型下的一致性：当限制在单粒子空间（即仅有一个电子在系统中）时，两个表达式的作用效果相同。

$$S^{-1} |m, A\rangle = S^{-1} c_{m,A}^\dagger |0\rangle = r^m c_{m,A}^\dagger S^{-1} |0\rangle = r^{m-1} c_{m,A}^\dagger |0\rangle = r^{m-1} |m, A\rangle$$



### 3.3 分析 S 的矩阵形式与二次量子化形式

与多体情况下的差异：

矩阵形式 S：仅定义在单粒子空间，无法直接推广到多电子态。

二次量子化形式 S：可作用于任意粒子数的 Fock 空间。

因此在单粒子空间下，等效于

$$S = \text{diag}(1, r, r, r^2, r^2, r^3 \dots r^{L-1}, r^{L-1}, r^L)$$

### 3.4 相似变换

$$\tilde{H} = S^{-1}HS$$

$$\begin{aligned} &= S^{-1} \left( \sum_{m=1}^N [(t_1 - \gamma/2)c_{m,B}^\dagger c_{m,A} + (t_1 + \gamma/2)c_{m,A}^\dagger c_{m,B}] + \right. \\ & \quad \left. t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A}) \right) S \\ &= \sum_{m=1}^N \left( (t_1 + \gamma/2)r^m \cdot r^{-(m-1)} c_{m,A}^\dagger c_{m,B} + (t_1 - \gamma/2)r^{m-1} r^{-m} c_{m,B}^\dagger c_{m,A} \right) + \\ & \quad t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (r^m \cdot r^{-m} c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + r^m \cdot r^{-m} c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A}) \\ &= \sum_{m=1}^N \left( (t_1 + \gamma/2)r c_{m,A}^\dagger c_{m,B} + (t_1 - \gamma/2)r^{-1} c_{m,B}^\dagger c_{m,A} \right) + t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + \\ & \quad c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A}) \end{aligned}$$

$$\text{满足厄米性, } (t_1 + \gamma/2)r = (t_1 - \gamma/2)r^{-1} \Rightarrow r = \sqrt{\frac{t_1 - \gamma/2}{t_1 + \gamma/2}}$$

$$\text{代入 } r, \quad \tilde{H} = \tilde{t}_1 \sum_{m=1}^N (|m, B\rangle\langle m, A| + |m, A\rangle\langle m, B|) + t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1, A\rangle\langle m, B| + |m, B\rangle\langle m+1, A|)$$

$$\text{其中 } \tilde{t}_1 = \sqrt{(t_1 - \gamma/2)(t_1 + \gamma/2)}$$

The transition points are  $\bar{t}_1 = \bar{t}_2$

$$\text{得到 } t_1 = \pm \sqrt{t_2^2 + (\gamma/2)^2}$$

在单粒子空间下，同样可以使用矩阵形式对相似变换进行表达，[简洁直观](#)且物理意义明确

原有的哈密顿量矩阵

$$H = \begin{pmatrix} 0 & t_1 - \gamma/2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ t_1 + \gamma/2 & 0 & t_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 - \gamma/2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & t_1 + \gamma/2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & h_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ h_{21} & 0 & t_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & h_{34} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & h_{43} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix},$$

$$\text{其中} \begin{cases} h_{2m-1,2m} = t_1 + \gamma/2 \\ h_{2m,2m-1} = t_1 - \gamma/2 \\ h_{2m,2m+1} = t_2 \\ h_{2m+1,2m} = t_2 \end{cases}$$

$$\tilde{H} = S^{-1}HS$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & r^{-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & r^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r^{-2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & r^{-L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & h_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ h_{21} & 0 & t_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & h_{34} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & h_{43} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & r & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & r^L \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & ra & & & & \\ r^{-1}b & 0 & t_2 & & & \\ & t_2 & 0 & ra & & \\ & & r^{-1}b & 0 & t_2 & \\ & & & t_2 & 0 & ra \\ & & & & r^{-1}b & 0 & t_2 \\ & & & & & \ddots & \ddots & ra \\ & & & & & & t_2 & 0 & ra \\ & & & & & & & r^{-1}b & 0 & t_2 \\ & & & & & & & & t_2 & 0 & ra \\ \cdots & & & & & & & & & r^{-1}b & \end{pmatrix}$$

$$\text{其中 } a = t_1 + \gamma/2, b = t_1 - \gamma/2$$

具体元素运算 $\hat{H}_{ij} = (S^{-1})_{ii}H_{ij}S_{jj}$

$$\hat{H}_{2m-1,2m} = \underset{(S^{-1})_{2m-1,2m-1}}{r^{-(m-1)}} \cdot (t_1 + \gamma/2) \cdot \underset{S_{2m,2m}}{r^m} = r(t_1 + \gamma/2)$$

$$\hat{H}_{2m,2m-1} = \underset{(S^{-1})_{2m,2m}}{r^{-m}} \cdot (t_1 - \gamma/2) \cdot \underset{S_{2m-1,2m-1}}{r^{m-1}} = r^{-1}(t_1 - \gamma/2)$$

$$\hat{H}_{2m,2m+1} = \underset{(S^{-1})_{2m,2m}}{r^{-m}} \cdot t_2 \cdot \underset{S_{2m+1,2m+1}}{r^m} = t_2$$

$$\hat{H}_{2m+1,2m} = \underset{(S^{-1})_{2m+1,2m+1}}{r^{-m}} \cdot t_2 \cdot \underset{S_{2m,2m}}{r^m} = t_2$$

$$\text{得到}\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{t}_l & 0 & 0 & \cdots \\ \bar{t}_l & 0 & t_2 & 0 & \cdots \\ 0 & t_2 & 0 & \bar{t}_l & \cdots \\ 0 & 0 & \bar{t}_l & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$[r(t_l + \gamma/2)]^* = r^{-l}(t_l - \gamma/2)r^2 = \frac{t_l - \gamma/2}{t_l + \gamma/2} \Rightarrow r = \sqrt{\frac{t_l - \gamma/2}{t_l + \gamma/2}}$$

### 3.5 对 $t_3$ 非零情况下相似变换的不可行性分析

$$H = \sum_{m=1}^N [(t_1 - \gamma/2)c_{m,B}^\dagger c_{m,A} + (t_1 + \gamma/2)c_{m,A}^\dagger c_{m,B}] +$$

$$t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A}) + t_3 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m,A}^\dagger c_{m+1,B} + c_{m+1,B}^\dagger c_{m,A})$$

步骤同上，

$$\begin{aligned}
&= \sum_{m=1}^N \left( (t_1 + \gamma/2) r^m \cdot r^{-(m-1)} c_{m,A}^\dagger c_{m,B} + (t_1 - \gamma/2) r^{m-1} r^{-m} c_{m,B}^\dagger c_{m,A} \right) + \\
&t_2 \sum_{m=1}^{N-1} \left( r^m \cdot r^{-m} c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + r^m \cdot r^{-m} c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A} \right) + t_3 r^{m-l} \cdot \\
&r^{-(m+l)} \sum_{m=l}^{N-l} c_{m,A}^\dagger c_{m+l,B} + t_3 r^{m+l} \cdot r^{-(m-l)} \sum_{m=l}^{N-l} c_{m+1,B}^\dagger c_{m,A} \\
&= \sum_{m=1}^N \left( (t_1 + \gamma/2) r c_{m,A}^\dagger c_{m,B} + (t_1 - \gamma/2) r^{-1} c_{m,B}^\dagger c_{m,A} \right) + t_2 \sum_{m=1}^{N-1} \left( c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + \right. \\
&c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A} \left. \right) + t_3 r^{-2} \sum_{m=1}^{N-1} c_{m,A}^\dagger c_{m+1,B} + t_3 r^2 \sum_{m=1}^{N-1} c_{m+1,B}^\dagger c_{m,A}
\end{aligned}$$

胞内厄米：  $(t_1 + \gamma/2)r = (t_1 - \gamma/2)r^{-1}$

胞间厄米：  $r^2 t_3 = t_3 r^{-2}$

显然同时满足，必须  $r=1, \gamma=0$ , 后者不满足非厄米条件，且不应该为定值。

同理，我们也可以直观的画出来

H 相对复杂

$$H = \begin{pmatrix} 0 & a & & & & \cdots & t_3 & \cdots \\ b & 0 & t_2 & & & & & \\ & t_2 & 0 & a & & & \cdots & t_3 & \cdots \\ t_3 & & b & 0 & t_2 & & & & \\ & & t_2 & 0 & a & & \cdots & t_3 & \cdots \\ & & t_3 & b & 0 & t_2 & & & \\ & \cdots & & t_2 & 0 & a & & & \\ \vdots & & t_3 & \cdots & & b & 0 & t_2 & \\ & \cdots & \ddots & \ddots & & t_2 & 0 & a & \\ & \cdots & & t_3 & \cdots & & b & 0 & \end{pmatrix}$$

直观为例子，若  $L=4$

$$H = \begin{pmatrix} 0 & a & 0 & t_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & t_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & a & 0 & t_3 & 0 & 0 \\ t_3 & 0 & b & 0 & t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_2 & 0 & a & 0 & t_3 \\ 0 & 0 & t_3 & 0 & b & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_2 & 0 & a \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_3 & 0 & b & 0 \end{pmatrix}$$

则  $\tilde{H} = S^{-1}HS =$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & r^{-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & r^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r^{-2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & r^{-L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & a & & & \cdots & t_3 & \cdots \\ b & 0 & t_2 & & & & \\ t_2 & 0 & a & & & \cdots & t_3 & \cdots \\ t_3 & & b & 0 & t_2 & & & \\ & & t_2 & 0 & a & & \cdots & t_3 & \cdots \\ & & t_3 & & b & 0 & t_2 & & \\ \vdots & \cdots & & & t_2 & 0 & a & & \\ & & t_3 & \cdots & & b & 0 & t_2 & \\ \cdots & & & \ddots & \ddots & & t_2 & 0 & a \\ & & & & t_3 & \cdots & & b & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & r & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & r^L \end{pmatrix}$$

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & va & 0 & r^2 t_3 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & r^{2(L-1)} t_3 & 0 \\ r^{-1} b & 0 & t_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & ra & 0 & r^2 t_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ r^{-2} t_3 & 0 & r^{-1} b & 0 & t_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & r^{2(L-2)} t_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_2 & 0 & ra & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & r^{-1} b & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & r^{-2(L-2)} t_3 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & ra & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r^{-2(L-1)} t_3 & 0 & 0 & \cdots & r^{-1} b & 0 & t_2 & 0 \\ r^{-2(L-1)} t_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & t_2 & 0 & ra \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & r^{-1} b & 0 \end{pmatrix}$$

具体元素计算过程冗杂，在二次化量子符号下已有简化表述，就不写了。

以  $L=3$  为例子

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & r(t_1 + \gamma/2) & 0 & r^2 t_3 & 0 & 0 \\ \frac{1}{r}(t_1 - \gamma/2) & 0 & t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & r(t_1 + \gamma/2) & 0 & r^2 t_3 \\ \frac{1}{r^2} t_3 & 0 & \frac{1}{r}(t_1 - \gamma/2) & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_2 & 0 & r(t_1 + \gamma/2) \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2} t_3 & 0 & \frac{1}{r}(t_1 - \gamma/2) & 0 \end{pmatrix}$$

之后推导同上。

## 四.Generalizable solution

推导步骤：获得本征方程→求解本征方程→ $\beta$ -E 的数值解→求解  $\beta$  并绘制  $C_\beta$ →体本征态绘图

### 4.1 获得本征方程

We've got that

$$H = \sum_{m=1}^N [(t_1 - \gamma/2)c_{m,B}^\dagger c_{m,A} + (t_1 + \gamma/2)c_{m,A}^\dagger c_{m,B}] + t_2 \sum_{m=1}^{N-1} (c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} + c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A})$$

And

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N (\psi_{n,A} c_{n,A}^\dagger + \psi_{n,B} c_{n,B}^\dagger) |0\rangle$$

Refers to Schrödinger equation, we have

$$\sum_m (t_1 - \gamma/2) c_{m,B}^\dagger c_{m,A} |\psi\rangle = \sum_m (t_1 - \gamma/2) \psi_{m,A} c_{m,B}^\dagger |0\rangle,$$

$$\sum_m (t_1 + \gamma/2) c_{m,A}^\dagger c_{m,B} |\psi\rangle = \sum_m (t_1 + \gamma/2) \psi_{m,B} c_{m,A}^\dagger |0\rangle.$$

$$t_2 \sum_m c_{m+1,A}^\dagger c_{m,B} |\psi\rangle = t_2 \sum_m \psi_{m,B} c_{m+1,A}^\dagger |0\rangle,$$

$$t_2 \sum_m c_{m,B}^\dagger c_{m+1,A} |\psi\rangle = t_2 \sum_m \psi_{m+1,A} c_{m,B}^\dagger |0\rangle.$$

Compare the coefficient, we got that

$$(t_1 + \gamma/2) \psi_{n,B} + t_2 \psi_{n-1,B} = E \psi_{n,A} \quad (n \geq 2)$$

$$(t_1 - \gamma/2) \psi_{n,A} + t_2 \psi_{n+1,A} = E \psi_{n,B} \quad (n \leq N-1)$$

The boundary condition

$$(t_1 - \gamma/2) \psi_{n,A} = E \psi_{n,B}$$

$$(t_1 + \gamma/2) \psi_{n,B} = E \psi_{n,A}$$

## 4.2 求解本征方程

Add with each other, we obtain the real-space eigen-equation

$$\begin{cases} t_2 \psi_{n-1,B} + \left(t_1 + \frac{\gamma}{2}\right) \psi_{n,B} = E \psi_{n,A}, \\ \left(t_1 - \frac{\gamma}{2}\right) \psi_{n,A} + t_2 \psi_{n+1,A} = E \psi_{n,B}, \end{cases}$$

As the exponential-decay behavior of eigenstates

$$(\psi_{n,A}, \psi_{n,B}) = \beta^n (\phi_A, \phi_B),$$

which satisfies

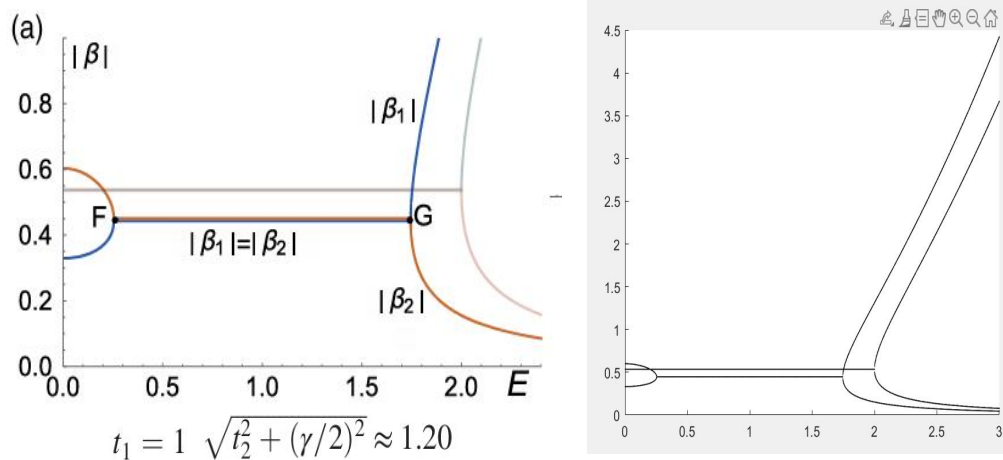
$$\begin{cases} \left(t_1 + \frac{\gamma}{2}\right) \phi_B + t_2 \beta^{-1} \phi_B = E \phi_A \\ \left(t_1 - \frac{\gamma}{2}\right) \phi_A + t_2 \beta \phi_A = E \phi_B \end{cases}$$

Therefore,

$$\left[\left(t_1 - \frac{\gamma}{2}\right) + t_2 \beta\right] \left[\left(t_1 + \frac{\gamma}{2}\right) + t_2 \beta^{-1}\right] = E^2$$


---

### 4.3 $\beta$ -E 的数值解



思路：对不同  $t_1$  求解后，与图 2 大同小异

```

t1_values=[1,1.20185];t2=1;gamma=4./3;
figure;hold on;
J1=[];J2=[];
for k=1:2
    t1=t1_values(k);
    a=t2.*(t1+gamma./2);
    c=t2.*(t1-gamma./2);
    E_values=-3:0.001:3;
    for j=1:length(E_values)
        E=E_values(j);
        b=(t1.^2-gamma.^2./4)+t2.^2-E.^2;
        beta=roots([a,b,c]);
    
```



```
J1=[J1;abs(beta)];
J2=[J2;abs(E)*ones(2,1)];
```

---



---

%在收集不同解这一步也有别的思路，本番使用的垂直装填。

1. 同图 2 提前 cell 装填。但是解是 2 个，不像数值能谱有  $2L=80$  个解，有些小题大做。

2. 使用 for 循环如下

```
for k=1:length(E_range)
E=E_range(k);
b=(t1*t1+t2*t2-gamma*gamma/4-E*E);
beta_result=roots([a,b,c]);
beta_jie(p:p+1)=abs(beta_result);
E_jie(p:p+1)=abs(E);
p=p+2;
end
```

但是容易出错。注意  $p=p+2$  的衔接与  $E\_jie(p:p+1)$  的写法。

---



---

% 同样为了画图时对齐

```
end
scatter(J2,J1,1,"black",'filled');
End
```

---

## 4.4 求解 $\beta$ 并绘制 $C_\beta$

Which has twosolutions,

$$\beta_{1,2}(E) = \frac{E^2 + \frac{y^2}{4} - t_1^2 - t_2^2 \pm \sqrt{\left(E^2 + \frac{y^2}{4} - t_1^2 - t_2^2\right)^2 - 4t_2^2\left(t_1^2 - \frac{y^2}{4}\right)}}{2t_2\left(t_1 + \frac{y}{2}\right)}$$

In the  $E \rightarrow 0$  limit,  $\beta_{1,2}^{E \rightarrow 0} = -\frac{t_1 - \gamma/2}{t_2}, \quad -\frac{t_2}{t_1 + \gamma/2}$

Restoring the  $j$  index  $|\phi^{(j)}\rangle \quad \phi_A^{(j)} = \frac{E}{t_1 - \gamma/2 + t_2 \beta} \phi_B^{(j)}, \quad \phi_B^{(j)} = \frac{E}{t_1 + \gamma/2 + t_2 \beta^{-1}} \phi_A^{(j)}$

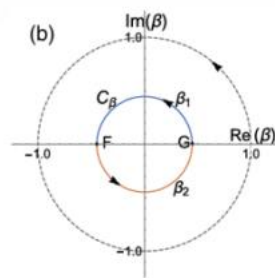
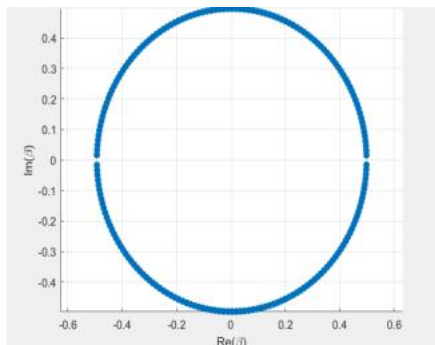
general solution,  $\begin{pmatrix} \Psi_{n,A} \\ \Psi_{n,B} \end{pmatrix} = \beta_1^n \begin{pmatrix} \phi_A^{(1)} \\ \phi_B^{(1)} \end{pmatrix} + \beta_2^n \begin{pmatrix} \phi_A^{(2)} \\ \phi_B^{(2)} \end{pmatrix}$

Boundary condition,  $\begin{cases} (t_1 + \gamma/2) \Psi_{1,B} - E \Psi_{1,A} = 0 \\ (t_1 - \gamma/2) \Psi_{L,A} - E \Psi_{L,B} = 0 \end{cases}$

Thus  $\beta_1^{L+1}(t_1 - \gamma/2 + t_2 \beta_2) = \beta_2^{L+1}(t_1 - \gamma/2 + t_2 \beta_1)$

About the spectrum for a long chain, which necessitates  $|\beta_1| = |\beta_2|$  for the bulk eigenstates.

$$|\beta_1| = |\beta_2| = r \equiv \sqrt{\frac{|t_1 - \gamma/2|}{|t_1 + \gamma/2|}}$$



In Hermitian cases,  $C_\beta$  is a unit circle

代码部分与图 5(b)相同，令 $t_3$ 为一个趋于零的值即可，故在此部分不过多赘述。

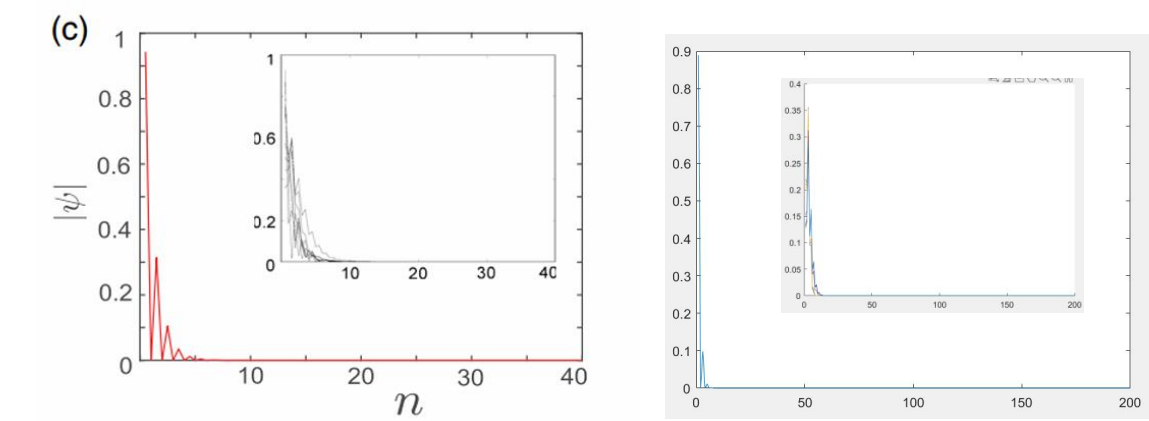
Combined with the  $E \rightarrow 0$  limit,  $t_1 = \pm \sqrt{t_2^2 + (\gamma/2)^2}$  or  $\pm \sqrt{-t_2^2 + (\gamma/2)^2}$

---



---

### 4.5 体本征态绘图



S.P.纵坐标与原著稍有差异，但是 skin effect 趋势相同

(c) Profile of a zero mode (main) and eight randomly chosen bulk eigenstates (inset), illustrating the non-Hermitian skin effect found in the

analytic solution. namely, all the bulk eigenstates are localized near the boundary.

$t_1 = 1$ . Common parameters:  $t_2 = 1, \gamma = 4/3$ .

```
t1=1;t2=1;gamma=4/3;L=100;N=2*L; H=zeros(2*L,2*L);
for n=1:L
    if n>1
        H(2*n-1,2*n-2)=t2;
    end
    H(2*n-1,2*n)=t1+gamma/2;
    H(2*n,2*n-1)=t1-gamma/2;
    if n<L
        H(2*n,2*n+1)=t2;
    end
end
% [vector_NNarray,eigN1array]=eig(H,'vector');
% abs_eig=abs(eigN1array);
% con_number=abs_eig(1);
%
% for k=1:length(abs_eig)
%     middle=abs_eig(k);
%     if middle<con_number
%         con_number=middle;
%     end
%以上是错误示范，仅能得到零模无法排序
%如果想要写下去，需要冒泡排序，但是 matlab 有现成的 sort
[vector_NNarray, eigN1array]=eig(H,'vector');
%加了 vector 返回的特征值就是向量不是对角矩阵
% ↑每列为一个特征向量 ↑特征值
abs_eig=abs(eigN1array);
```

```
[sortresult, number_array]= sort(abs_eig);
```

%↑排序之后的结果，不过没啥用，其实可以用~代替 ↑前者中的 **abseig** 在原来位置的序号

%↑(⌌\_⌌)本代码中最重要的一步

```
zero_number=number_array(1:2);
```

```
zero_mode=vector_NNarray(:,zero_number(1));
```

```
figure;
```

```
plot(1:N,abs(zero_mode).^2);%注意 1: N 的写法
```

```
figure;
```

```
all_number=setdiff(1:N,zero_number);
```

%除去零模

```
select_number=randperm(length(all_number),8);
```

```
select_result=all_number(select_number);
```

```
hold on;
```

```
for i=1:8
```

```
state=vector_NNarray(:,all_number(i));
```

```
plot(1:N,abs(state).^2);
```

```
end
```

---



---

Take in

$$\widehat{\beta} = re^{ik} (k \in [0, 2\pi])$$

$$E^2(k) = \left(t_1 - \frac{\gamma}{2} + t_2 re^{ik}\right) \left(t_1 + \frac{\gamma}{2} + t_2 \cdot \frac{1}{r} e^{-ik}\right)$$

$$= \left(t_1 - \frac{\gamma}{2}\right) \left(t_1 + \frac{\gamma}{2}\right) + t_2 re^{ik} \left(t_1 + \frac{\gamma}{2}\right) + t_2 \cdot \frac{1}{r} e^{-ik} \left(t_1 - \frac{\gamma}{2}\right) + t_2^2$$

$$= t_1^2 + t_2^2 - \frac{\gamma^2}{4} + t_2 \sqrt{\left|\frac{t_1 - \gamma/2}{t_1 + \gamma/2}\right|} e^{ik} \left(t_1 + \frac{\gamma}{2}\right) + t_2 \sqrt{\left|\frac{t_1 + \gamma/2}{t_1 - \gamma/2}\right|} e^{-ik} \left(t_1 - \frac{\gamma}{2}\right)$$

$$= t_1^2 + t_2^2 - \frac{\gamma^2}{4} + t_2 \sqrt{\left|t_1^2 - \frac{\gamma^2}{4}\right|} [\operatorname{sgn}(t_1 + \gamma/2) e^{ik} + \operatorname{sgn}(t_1 - \gamma/2) e^{-ik}]$$

the true merging-into-bulk condition

$$|\beta_1^{E \rightarrow 0}| = r$$

## 五.Non-Bloch topological invariant

We start from the non-Bloch Hamiltonian obtained from  $H(k)$  by the replacement  $e^{ik} \rightarrow \beta$ ,  $e^{-ik} \rightarrow \beta^{-1}$ :

$$H(\beta) = \left(t_1 - \frac{\gamma}{2} + \beta t_2\right) \sigma_- + \left(t_1 + \frac{\gamma}{2} + \beta^{-1} t_2\right) \sigma_+$$

$$H(\beta)|u_R\rangle = E(\beta)|u_R\rangle, \quad H^\dagger(\beta)|u_L\rangle = E^*(\beta)|u_L\rangle$$

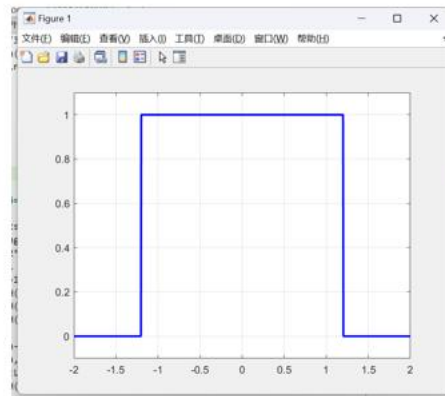
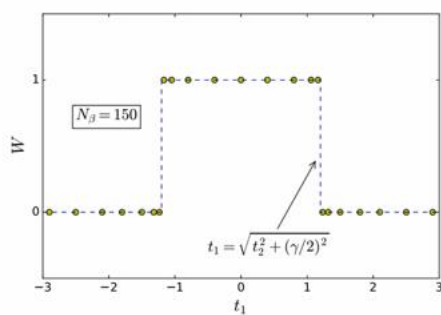
Chiral symmetry ensures that  $|\tilde{u}_R\rangle \equiv \sigma_z|u_R\rangle$  and  $|\tilde{u}_L\rangle \equiv \sigma_z|u_L\rangle$ .  $H(\beta) = TJT^{-1}$  with  $J = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix}$ , and the normalization condition  $\langle u_L|u_R\rangle = \langle \tilde{u}_L|\tilde{u}_R\rangle = 1$ ,  $\langle u_L|\tilde{u}_R\rangle = \langle \tilde{u}_L|u_R\rangle = 0$  Q matrix can be expressed as:

$$Q(\beta) = |\tilde{u}_R(\beta)\rangle\langle\tilde{u}_L(\beta)| - |u_R(\beta)\rangle\langle u_L(\beta)|$$

which is off-diagonal due to chiral symmetry  $\sigma_z^{-1}Q\sigma_z = -Q$ , namely,  $Q = \begin{pmatrix} 0 & q \\ q^{-1} & 0 \end{pmatrix}$

$$\text{Non-Bloch winding number: } W = \frac{i}{2\pi} \int_{C_\beta} q^{-1} dq$$

t<sub>3</sub>=0 绕数的绘制确实有一段代码，但是我觉得不具有普适性，因此只阐述非零情况下的代码，将t<sub>3</sub>赋值为一个趋于 0 的数即可。



## 六.The nonzero t3 case

推导步骤：数值能谱→绕数计算→ $\beta$ 轨迹计算

### 6.1 数值能谱

首先是数值能谱：仅仅需要修改 H 部分即可。该代码还兼具另外一个功能：在 10-100 的范围找到适合的 L。明显 L=100 的结果非常杂乱，个人感觉在 L=40 左右是比较符合原文献的

```
t2=1;gamma=4/3;t1_range=-3:0.01:3;
points=length(t1_range);
molE=cell(points,1);
t3=0.2;
figure;
for p=1:10
    L=10*p;
    for i=1:points
        t1=t1_range(i);
        H=zeros(2*L,2*L);
        for n=1:L
```

```

if n>1
H(2*n-1,2*n-2)=t2;
H(2*n-3,2*n)=t3;
H(2*n,2*n-3)=t3;
end
H(2*n-1,2*n)=t1+gamma/2;
H(2*n,2*n-1)=t1-gamma/2;
if n<L
H(2*n,2*n+1)=t2;
end
end
molE{i}=eig(H);
end
subplot(2,5,p);
hold on;
for k=1:points
t1=t1_range(k);
E_p=molE{k};
scatter(t1*ones(size(E_p)),abs(E_p),1,'k');
zero_modes=E_p(abs(E_p)<0.1);
scatter(t1*ones(size(zero_modes)),abs(zero_modes),10,'r');
end
hold off;

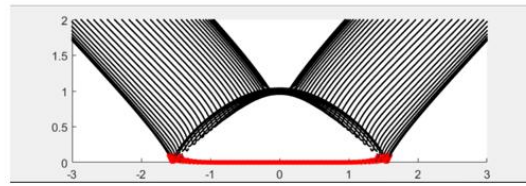
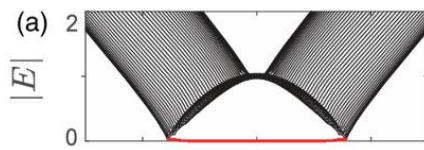
end

```

请注意，运行这段时间代码电脑非常容易发烫，如果读者要检验我的代码，最好仅将构造  $H$  的部分复制并替换到前面 zero t3 case 数值能谱的相应部分。



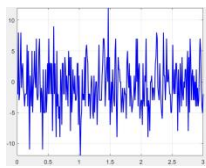
Spectrum of an open chain



The same as FIG2, the size of  $L$  needs to properly adjust. (about 40)

## 6.2 绕数计算:

计算绕数的代码可以说是这篇文献中最麻烦最复杂的一个点,也许是我哪里没有处理好,按照文献 Non-Bloch topological invariant 的步骤走总是无法复现结果,即使用噪声处理窗口开大了也没有良好的效果,类似这样,



窗口过大  $w$  又会恒为 0. 在这里实在是卡了非常久,但是我苦恼的

同时在找资料的时候发现了这个网站:

[blog-my/\\_sample\\_page](https://blog-my/_sample_page) at [97a1a81fcc54f95f064cle33e336be23f11d443e](https://97a1a81fcc54f95f064cle33e336be23f11d443e) • [yxli8023/blog-my](https://yxli8023/blog-my)

这位研究者专门对绕数板块写了一段 python 代码上传,具体如下:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from math import *
import cmath
import time

def hamiltonian(k): # SSH 模型
    v=0.6
    w=1
```

```

matrix = np.zeros((2, 2), dtype=complex)

matrix[0,1] = v+w*cmath.exp(-1j*k)

matrix[1,0] = v+w*cmath.exp(1j*k)

return matrix


def main():

    start_clock = time.perf_counter()

    delta_1 = 1e-9 # 求导的步长（求导的步长可以尽可能短）

    delta_2 = 1e-5 # 积分的步长

    W = 0 # Winding number 初始化

    for k in np.arange(-pi, pi, delta_2):

        H = hamiltonian(k)

        log0 = cmath.log(H[0, 1])

        #

        H_delta = hamiltonian(k+delta_1)

        log1 = cmath.log(H_delta[0, 1])

        #

        W = W + (log1-log0)/delta_1*delta_2 # Winding number

    print('Winding number = ', W/2/pi/1j)

    end_clock = time.perf_counter()

    print('CPU 执行时间(min)=', (end_clock-start_clock)/60)


if __name__ == '__main__':

    main()

```

可以看到他并没有使用原本文献中的方法处理矩阵而是由绕数定义出发进行积分，我豁然开朗，于是依照这位研究者的思路开始写。

因为存在代码重复的部分，整体看起来非常的长。但是为了检验方便，我还是把完整代码贴上来了。

```
function t3_nonzero
% 主函数：计算  $t_3 \neq 0$  时的拓扑不变量和广义布里渊区
tic;
%参数
t1=1.1; tx=1.1;
t2=1;
t3=0.0001;
gamma=4/3;
L=100;
delta_1=1e-8; % 微分步长
delta_2=1e-3; % 积分步长。这两个步长都应该设置的比较短比较好，在  $t_3$ 
为零的情况下，相变点在  $1.2+$ 左右，且本应该竖直的直线有一个肉眼不易直接
看出的斜率。就能看出来精读不够，但是此处精读的修改对运行时间的影响极大，
在积分与微分的精读都上升一个数量级后，我跑了接近一个上午都没跑完。这里的
参数目前是为了方便验证修改的参数，五秒之内就能跑完。如果要利用该代码
复现文献的结果的话，需要适当提高一些精度。
tol=0.01; %  $\beta$ 根筛选容差
% 计算  $C\beta$ 
[beta_list,E]=calculate_beta_trajectory(t1,t2,t3,gamma,L,tol);
% 计算绕数
t1_range=linspace(-3,3,201);
W_values=zeros(size(t1_range));
parfor i=1:length(t1_range)
W_values(i)=calculate_winding_number(t1_range(i),t2,t3,gamma,d
elta_1,delta_2);
end
plot_winding_number(t1_range,W_values); % 绘制图 5(a)
```

```

toc;%计时用的，可以删掉
end

function
[beta_list,E]=calculate_beta_trajectory(t1,t2,t3,gamma,L,tol)
% 构造非厄米 SSH 模型的实空间哈密顿量并求解 $\beta$ 根
H=build_real_space_Hamiltonian(t1,t2,t3,gamma,L);
E=eig(H); % 获取所有本征值
% 求解每个能量 E 对应的 $\beta$ 根
beta_list=[];
a=t1+gamma/2;
b=t1-gamma/2;
for e=E.'
% 特征方程系数（四次方程）
c4=t3*t2;
c3=a*t2+t3*b;
c2=t2^2+a*b+t3^2-e^2;
c1=t2*b+a*t3;
c0=t3*t2;
% 求解四次方程根
roots_beta=roots([c4,c3,c2,c1,c0]);
% 筛选满足 $|\beta_j|=|\beta_k|$ 的根对
for j=1:4
for k=j+1:4
if abs(abs(roots_beta(j))-abs(roots_beta(k)))<tol
beta_list=[beta_list;roots_beta([j,k])];
end
end
end
end

```

```
end
```

```
function H=build_real_space_Hamiltonian(t1,t2,t3,gamma,L)
```

```
% 构造实空间哈密顿量（与前面相同）
```

```
H=zeros(2*L,2*L);
```

```
for n=1:L
```

```
H(2*n-1,2*n)=t1+gamma/2;
```

```
if n>1
```

```
H(2*n-1,2*(n-1))=t2;
```

```
end
```

```
if n<L
```

```
H(2*n-1,2*(n+1))=t3;
```

```
end
```

```
H(2*n,2*n-1)=t1-gamma/2;
```

```
if n>1
```

```
H(2*n,2*(n-1)-1)=t3;
```

```
end
```

```
if n<L
```

```
H(2*n,2*(n+1)-1)=t2;
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
function
```

```
W=calculate_winding_number(t1,t2,t3,gamma,delta_1,delta_2)
```

```
% 计算非布洛赫绕数
```

```
k=-pi:delta_2:pi-delta_2;
```

```
k_delta=k+delta_1;
```

```
W_integral=0;
```

%下面也许需要 Parallel Computing Toolbox

```
for idx=1:length(k)
    beta=solve_beta_for_k(k(idx),t1,t2,t3,gamma);
    beta_delta=solve_beta_for_k(k_delta(idx),t1,t2,t3,gamma);
    % 计算  $H[0,1]$  项的对数导数，计算对数差值避免循环
    H01=(t1-gamma/2)+t2*beta+t3/beta;
    H01_delta=(t1-gamma/2)+t2*beta_delta+t3/beta_delta;
    d_log=(log(H01_delta)-log(H01))/delta_1;
    W_integral=W_integral+d_log*delta_2;
end

W=imag(W_integral)/(2*pi);
end
```

```
function beta=solve_beta_for_k(k,t1,t2,t3,gamma)
```

% 数值求解广义布里渊区 $\beta$

% 此处简化为使用近似解析解，更严谨来说应该使用迭代。但是数值复现来说完全足够了

```
a=t1+gamma/2;
b=t1-gamma/2;
% 近似处理
beta=sqrt(abs((t1-gamma/2)/(t1+gamma/2)))*exp(1i*k);
end
```

```
function plot_beta_trajectory(beta_list,t3)
```

```
figure;
scatter(real(beta_list),imag(beta_list),10,'filled');
axis equal;
xlabel('Re(\beta)');
ylabel('Im(\beta)');
```

```

title(sprintf('Generalized Brillouin Zone C_\\beta (t_3
= %.1f)',t3));
grid on;
end

```

```

function plot_winding_number(t1_range,W_values)
figure;

```

% 自适应平滑窗口函数

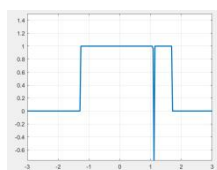
%也许是精度的原因，也许需要用文献中矩阵处理方法才行（用文献的方法我总是复现不了，遂如前所述），运行结果需要取整/降噪才能比较好的复现出论文的结果，这里简单使用平滑。其实在筛选  $\beta$  的阈值那里也可以进行适当调整，但是阈值在 0.1 左右的时候才能较好的对  $\beta$  轨迹进行复现，阈值再低的话很多的  $\beta$  点都会取不到。实际上用 Signal Processing Toolbox 工具箱处理效果比较方便，这里仅仅简单进行平滑处理，但理论上高精度下不处理也没有什么问题.但是如果  $t_3$  的值大一些，又会有明显噪声，也可能是  $t_3$  大一些真的会想数值能谱  $L$  大了一些会乱也说不定，只少在  $t_3$  等于 0.2 左右还算正常。 $t_3$  比较大的时候可能会这样：

```

window=0.5*(tanh(100*(t1_range))-tanh(100*(t1_range-1.1)));
W_corrected=round(real(W_values)).*(1-window)+1.*window;

```

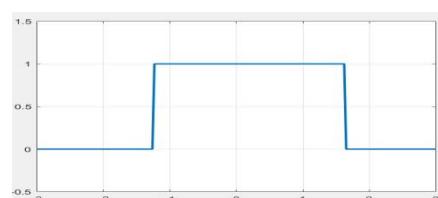
%绘图

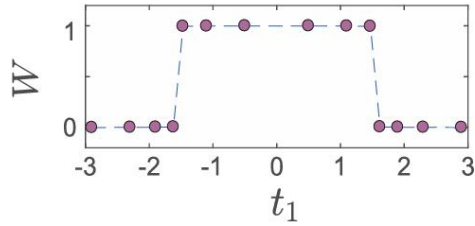


```

plot(t1_range,W_corrected,'LineWidth',2);
grid on;
ylim([-0.5 1.5]);
end

```





## 6.3 $\beta$ 轨迹计算

Beta 的轨迹我个人体感上是仅次于绕数计算第二不好写的代码部分。但其实也差不多，毕竟不知道 beta 的轨迹也算不了绕数，彼此彼此罢了。

差不多有以下思路，首先都是从这个式子出发

$$E^2 = [t_2\beta^{-1} + (t_1 + \gamma/2) + t_3\beta][t_3\beta^{-1} + (t_1 - \gamma/2) + t_2\beta]$$

1. 构造复平面并且二维打点，对某一个点的 beta，求得式子右边的数值，用第二个嵌套的循环找到相同的 beta。看起来计算量非常大但是电脑算力也很大，但是最终我没有做出来。
2. 同上，但是代入 r 与 theta。
3. 四次方程求根。
4. 使用工具箱 Optimization Toolbox。

一个在课上老师提到过的功能。这个工具箱的功能非常强大，强大到我只知道它能解非线性方程，其它功能我看不明白。在。并且在筛选 beta 的时候往往需要用到多层循环，但是它可以直接表示。可以简单通过代码的长度看看这个东西有多方便：

```
t1=1.1;t2=1;gamma=4/3;t3=0.2;theta=linspace(0,2*pi,1000);%参数
设置
r=zeros(size(theta));
options=optimset('Display','off','TolX',1e-6,'TolFun',1e-6);%使
用工具箱
```



```

%数值求解每个角度对应的 r
for i=1:length(theta)
th=theta(i);
%定义方程:  $|A|^2=|B|^2$ , 其中 A 和 B 为特征方程的两个因子
A=@(r_val)t1-gamma/2+t2*r_val*exp(1i*th)+t3/(r_val*exp(1i*th))
;
B=@(r_val)t1+gamma/2+t2/(r_val*exp(1i*th))+t3*r_val*exp(1i*th)
;
fun=@(r_val)abs(A(r_val))^2-abs(B(r_val))^2;
%初始猜测: 基于  $t_3=0$  的解析解, 并调整以考虑  $t_3$  的影响
r_initial=1;
try
r_sol=fzero(fun,r_initial,options);
r(i)=r_sol;
catch

end

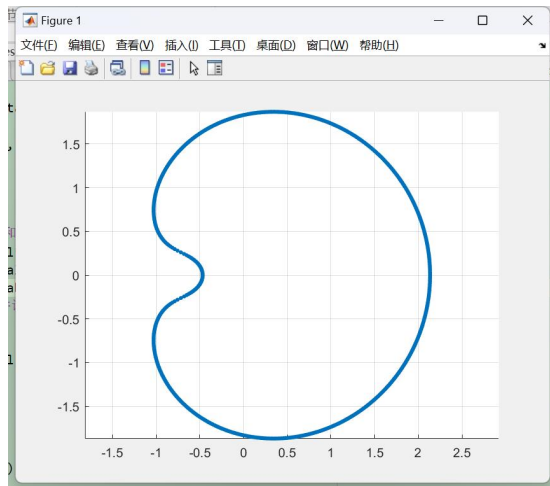
end

beta=r_valid.*exp(1i*theta_valid);
%绘制  $C\beta$ 
figure;
scatter(real(beta),imag(beta),10,'filled');
axis equal;
grid on;

```

关键点就在 `r_initial=1`; 初始值这里, 但其实不断试就可以了, 1 是符合结果的。

但是不知道哪里出错了, 画出来的结果就是不对, 如下:



太可惜了，后面我会找找问题出在哪里。

5. 还是提一嘴一个错误思路。对右侧取虚部，简化为二次方程。

正确代码：

```
t1=1.1;
t2=1;
gamma=4/3;
t3=0.0001;
L=100;
H=zeros(2*L,2*L);
for n=1:L
    H(2*n-1,2*n)=t1+gamma/2;
    if n>1
        H(2*n-1,2*(n-1))=t2;
    end
    if n<L
        H(2*n-1,2*(n+1))=t3;
    end
    H(2*n,2*n-1)=t1-gamma/2;
    if n>1
        H(2*n,2*(n-1)-1)=t3;
    end
end
```

```

if n<L
H(2*n,2*(n+1)-1)=t2;
end
end

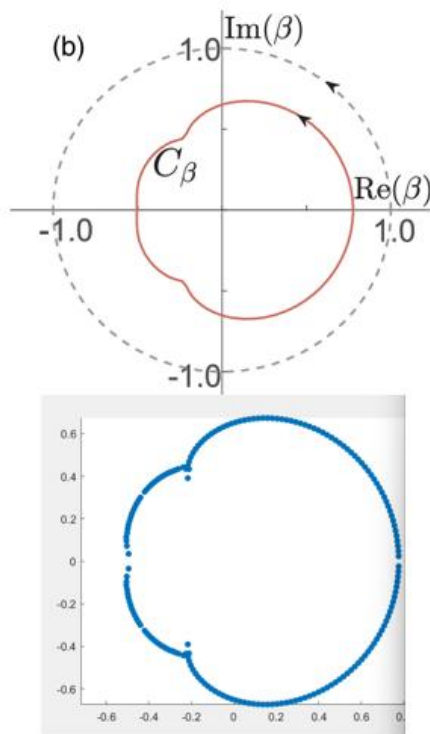
E=eig(H);
beta_list = [];
tol=0.01;
for i=1:length(E)
e=E(i);
a=t1+gamma/2;
b=t1-gamma/2;
%最后还是选择直接解筛根，一开始我就用的这个思路，但是筛选步骤略有不同.....
c4=t3*t2;
c3=a*t2+t3*b;
c2=t2^2+a*b+t3^2-e^2;
c1=t2*b+a.*t3;
c0=t3*t2;
roots_beta=roots([c4,c3,c2,c1,c0]);

for j=1:4
beta_j=roots_beta(j);
for k=j+1:4%这种写法可以极大的简化循环中的结构
beta_k=roots_beta(k);
if abs(abs(beta_j)-abs(beta_k))<tol
beta_list=[beta_list; beta_j;beta_k];
end
end
end
end

```

```
figure;
scatter(real(beta_list), imag(beta_list), 'filled');
axis equal;
grid on;
```

大部分内容和绕数代码一致，就没有过多赘述注释了。



## 七. 参考文献

【1】Asbóth J.K., Oroszlány L., Pályi A. A Short Course on Topological Insulators: Band-Structure Topology and Edge States in One and Two Dimensions. Springer (2016).

【2】Lee T.E. Non-Bloch Band Theory of Non-Hermitian Systems. Phys. Rev. Lett. 116, 133903 (2016).

【3】Vanderbilt D. Understanding Basic Concepts of Topological Insulators Through Su-Schrieffer-Heeger (SSH) Model. arXiv:1906.08435 (2019).

【4】Bergholtz E.J., Budich J.C., Kunst F.K. Exceptional Topology of Non-Hermitian Systems. Rev. Mod. Phys. 93, 015005 (2021).

【5】El-Gomati M.M. et al. Tight-Binding Simulations of Nb Surfaces and Surface Defects. J. Phys.: Condens. Matter 17, L399–L405 (2005).

【6】Bender C.M. Non-Hermitian Physics: PT Symmetry and Exceptional Points. Rep. Prog. Phys. 80, 036001 (2017)