SSH Model笔记

食司

Date: 2024 年 4 月 5 日

Abstract

这篇笔记是应金亮老师的建议而写的，其目的在于总结并展示我对SSH Model的理解。

Contents

1 模型内容与哈密顿量

1.1 基础内容

在我看来，SSH模型是一条可以有限或无限长的链，在上面分布着许多能量相同[1]的位点，可以供电子占据。由于相邻两个位点的波函数的重叠程度不同，因而这些位点彼此并不等价，可记作A和B，他们交错排列。将一个A格点和位于它右侧的B格点视作处于一个晶胞中，称A和B为亚晶格。记它们波函数的重叠部分的积分正比于v。记一个B格点与其右侧格点A的波函数的重叠部分的积分正比于w，并认为一个格点只与其相邻的格点相互作用，则系统的哈密顿量可以写为

$$\hat{H} = v\sum_{n=1}^{N}(|A_n\rangle\langle B_n| + |B_n\rangle\langle A_n|) + w\sum_{n=1}^{N-1}(|A_{n+1}\rangle\langle B_n| + |B_n\rangle\langle A_{n+1}|) \tag{1.1}$$

我们总是可以通过适当地在A和B上增添负号，或乘上相应的相因子，保持v和w为实正数。此后以$h.c.$表共轭项。

[1]这是简化的模型要求不存在位势所导致的。

当我们讨论整个系统时，可以利用子空间的概念。以晶胞的序号n为外部自由度，每个晶胞内的亚晶格情况为内部自由度，以$\alpha \in \{A, B\}$标识，则整体的态可写为

$$|n, \alpha\rangle = |n\rangle \otimes |\alpha\rangle \tag{1.2}$$

对$N = 4$的系统，其总状态数应为$4 \times 2 = 8$，可以将其哈密顿量展开，写为矩阵形式[1]

$$H = \begin{pmatrix} 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

Remark. 其中每一行（列）对应基态$|1, A\rangle$，$|1, B\rangle$，$|2, A\rangle$，$|2, B\rangle$...；对角线元素为0，体现了我们认为不存在位势，或一个子状态与自身不发生相互作用。

利用泡利矩阵

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.4}$$

我们可以把哈密顿量重写为

$$\hat{H} = v \sum_{n=1}^{N} |n\rangle \langle n| \otimes \hat{\sigma}_x + w \sum_{n=1}^{N-1} \left(|n+1\rangle \langle n| \otimes \frac{\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y}{2} + h.c. \right) \tag{1.5}$$

Remark. 注意第一项显然无共轭项。为了将泡利矩阵的意义看得更清楚，设想其每行（列）分别代表A，B，并注意

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

1.2 体动量空间

假设我们研究的该模型具有周期性边界条件（即形成一个环）。对外部自由度利用Bloch定理，

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} \mathrm{e}^{ink} |n\rangle \tag{1.7}$$

这里$k \in \{\delta_k, 2\delta_k, ..., N\delta_k\}$，$\delta_k = \frac{2\pi}{N}$，并且有周期性条件$|k + 2\pi\rangle = |k\rangle$。$k$取的是第一布里渊区中的值。

称$|\Psi_n(k)\rangle$为Bloch本征态，则与前面类似地，

$$|\Psi_n(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle \tag{1.8}$$

其中，

$$|u_n(k)\rangle = a_n(k) |A\rangle + b_n(k) |B\rangle \tag{1.9}$$

对给定的k，定义体动量空间哈密顿量$\hat{H}(k)$，

$$\hat{H}(k) = \langle k|\,\hat{H}\,|k\rangle = \sum_{\alpha,\beta\in\{A,B\}} \langle k,\alpha|\,\hat{H}\,|k,\beta\rangle \cdot |\alpha\rangle\langle\beta| \tag{1.10}$$

现在自然有

$$\hat{H}(k)\,|u_n(k)\rangle = E_n(k)\,|u_n(k)\rangle \tag{1.11}$$

即$u_n(k)$是体动量空间哈密顿量$\hat{H}(k)$的本征态。这就将问题转化到了抽象的体动量空间中，SSH Model的拓扑性质正是在体动量空间中体现的。

2 Winding number

2.1 $\hat{H}(k)$的矩阵形式

对于给定的k，由$|\Psi_m(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_m(k)\rangle$，在$N=4$时，$|\Psi(k)\rangle$的基态有$4\times 2 = 8$个，4来自利用Bloch定理转换时的求和， 2来自内部自由度。现在本征方程可以写为

$$\begin{pmatrix} 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w \\ v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v \\ w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(k)\mathrm{e}^{ik} \\ b(k)\mathrm{e}^{ik} \\ a(k)\mathrm{e}^{2ik} \\ b(k)\mathrm{e}^{2ik} \\ a(k)\mathrm{e}^{3ik} \\ b(k)\mathrm{e}^{3ik} \\ a(k)\mathrm{e}^{4ik} \\ b(k)\mathrm{e}^{4ik} \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} a(k)\mathrm{e}^{ik} \\ b(k)\mathrm{e}^{ik} \\ a(k)\mathrm{e}^{2ik} \\ b(k)\mathrm{e}^{2ik} \\ a(k)\mathrm{e}^{3ik} \\ b(k)\mathrm{e}^{3ik} \\ a(k)\mathrm{e}^{4ik} \\ b(k)\mathrm{e}^{4ik} \end{pmatrix} \tag{2.1}$$

Remark. 左下角和右上角的取值来自于周期性条件。

现在固定在应用Bloch定理求和时的n（仅看上式的哈密顿量和态右矢中相邻的两行!），不难发现，无论n取何值，都有

$$\hat{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + w\mathrm{e}^{-ik} \\ v + w\mathrm{e}^{ik} & 0 \end{pmatrix}, \quad H(k)\begin{pmatrix} a(k) \\ b(k) \end{pmatrix} = E(k)\begin{pmatrix} a(k) \\ b(k) \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

Remark. w上相位的出现是相邻晶胞间n和$n+1$不同的缘故。

利用$\hat{H}(k)^2 = E(k)^2\mathbb{I}^2$，

$$E(k) = \pm\left|v + w\mathrm{e}^{-ik}\right| = \pm\sqrt{v^2 + w^2 + 2vw\cos k} \tag{2.3}$$

故可写出$\hat{H}(k)$的本征矢为

$$|\pm k\rangle = \begin{pmatrix} \pm\mathrm{e}^{-i\phi(k)} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2.4}$$

其中

$$\phi(k) = \tan^{-1}\left(\frac{w\sin k}{v + w\cos k}\right) \tag{2.5}$$

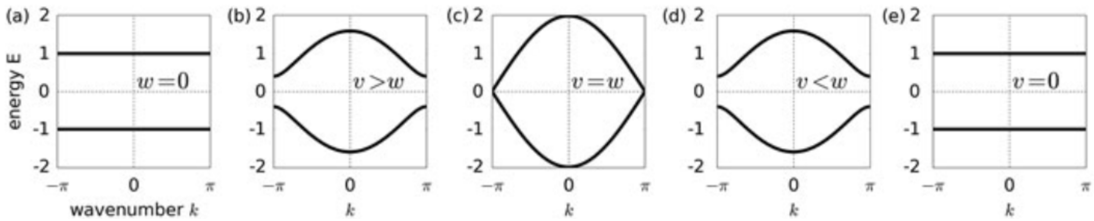

Figure 1: $E(k)-k$图像[1]

由$E(k)-k$的图像可见，在k固定时，能量有高低之分。较低的能量为电子的占据态，这使得总体的能量更低，它对应链上所有波函数重叠程度更大的区域。然而，要实现导电，电子必须从整条链上经过，那么电子的波函数将不可避免地处于高能态上。若认为能量不能发生突变，那么只有在$v=w$时，才会出现高低能态在$k=\pi$处相同，此时能隙关闭，从低能态到高能态的过程才能发生，材料才成为导体。由于其临界性，不妨称其为相变点，而称$v>w$，$v<w$的两种情况为两个相 [2]

2.2 内部空间结构

在$E(k)-k$图中，看似$v>w$和$v<w$两相并没有什么区别，但这是仅从本征值上得出的结果，而本征值的得出仅依赖于外部空间。

事实上，内部空间中还隐藏着相当有趣的事情，它与本征矢相关。考虑

$$H(k)=h_0(k)\hat{\sigma}_0+h_x(k)\hat{\sigma}_x+h_y(k)\hat{\sigma}_y+h_z(k)\hat{\sigma}_z \tag{2.6}$$

很自然地我们想把它写成

$$h_0(k)\hat{\sigma}_0+\mathbf{h}(k)(\hat{\sigma}) \tag{2.7}$$

$\mathbf{h}(k)$可看作一个三维的矢量，对我们的模型，

$$h_0(k)=0 \quad h_x(k)=v+w\cos k \quad h_y(k)=w\sin k \quad h_z(k)=0 \tag{2.8}$$

注意$\mathbf{h}(k)$的模就是本征值（即能量），而$\mathbf{h}(k)$能完全地确定体系的哈密顿量，故其方向显然应蕴藏着内部空间的信息。

我们可以画出$h_x(k)-h_y(k)$的轨迹的图像。只有在该轨迹通过原点的情况下，材料才成为导体。

定义Winding number为$\mathbf{h}(k)$的轨迹环绕原点的圈数。

我们注意到，$v>w$的相对应着晶胞内的位点间更易发生跃迁，而晶胞间的跃迁则更难。这还意味着，在长链的边界处不会出现单一的亚晶格，这也使得这种情况没什么意思，故而称其为平凡的。而$v<w$的情况，不仅代表着晶胞间比晶胞内部更易发生跃迁，还代表着在长链的边界处将出现单一的亚晶格，使得这种情况有意思得多。

[2]此处使用热力学的语言，与之后的“绝热变化”相呼应。

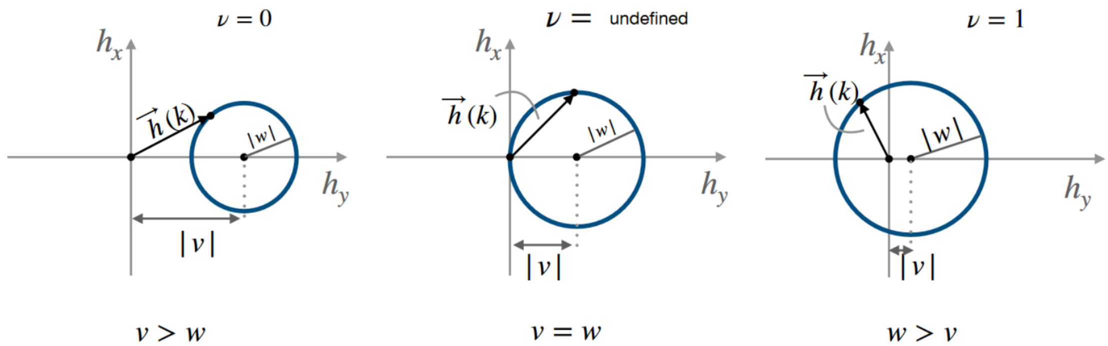

Figure 2: $h_x(k) - h_y(k)$图像[2]

2.3 绝热变换与拓扑不变量

定义绝热变换为满足以下要求的，对哈密顿量实施的变换：

1、各参数的变化连续。

2、保持各种重要的对称性，包括手性对称等。

3、始终保持$E = 0$不成立，抑或轨迹不与原点相交。

Winding number是一个体动量空间中的拓扑不变量。后面将证明，在系统发生绝热变化时，Winding number不变[1]。这使得与其相关的性质大都是拓扑性质，具有鲁棒性。

3 Berry相位

3.1 Berry相位

考虑一随时间缓慢绝热变化的哈密顿量$H(t)$[3]，有

$$H(t)\,|n(t)\rangle = E(t)\,|n(t)\rangle \tag{3.1}$$

它是薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|(t)\rangle = H(t)\,|\psi(t)\rangle \tag{3.2}$$

的解

通常情况下，若哈密顿量含时，只要它与时间对易，我们都有解

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_0^t E(t)\mathrm{d}t'\right]|n(t)\rangle \tag{3.3}$$

但显然不合适，因为我们这里$|n(t)\rangle$也会随时间变化。因而不如设

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{i\gamma(t)}\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_0^t E(t)\mathrm{d}t'\right]|n(t)\rangle \tag{3.4}$$

将它代入薛定谔方程，并在两边同时左乘$\langle n(t)|$，整理后有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\gamma(t) = i\,\langle n(t)|\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|n(t)\rangle \tag{3.5}$$

[3]这使得在变化的过程中，本征态$|n(t)\rangle$始终位于n上

或者写成紧凑的形式

$$\dot{\gamma} = i\left\langle n\middle|\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t}\right\rangle \tag{3.6}$$

令

$$A(t) = \langle n(t)| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |n(t)\rangle \tag{3.7}$$

得

$$\gamma(t) = \int_0^t A(t')\mathrm{d}t' \tag{3.8}$$

则

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[i\int_0^t A(t')\mathrm{d}t'\right]\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_0^t E(t)\mathrm{d}t'\right]|n(t)\rangle \tag{3.9}$$

现在假设H是在参数空间中运动的，而非在时间层面上运动。不妨先假设时间在同时流动[4]，记这些参数构成的参数空间中的矢量为$\mathbf{R}$，则有

$$H(t) = H(\mathbf{R}(t)) \tag{3.10}$$

$$\gamma = \int_0^t A(t')\mathrm{d}t' \tag{3.11}$$

$$= \int_0^t \left\langle n\middle|\frac{\partial n}{\partial \mathbf{R}}\frac{\mathrm{d}\mathbf{R}}{\mathrm{d}t'}\mathrm{d}t'\right\rangle \tag{3.12}$$

$$= \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} A(R)\mathrm{d}\mathbf{R} \tag{3.13}$$

其中$A(R) = \langle n(\mathbf{R})| \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle$。

称$\gamma = \int_{\mathcal{C}} \mathcal{A}(\mathbf{R})\mathrm{d}\mathbf{R}$为Berry相位，其中 $\mathcal{A}(\mathbf{R}) = i\langle n(\mathbf{R})\nabla_{\mathbf{R}}|n(\mathbf{R})\rangle|$称为Berry势或Berry联络。

3.2 规范不变性和Berry曲率

对$|n(\mathbf{R})\rangle$做规范变换$|n(\mathbf{R})\rangle \to \mathrm{e}^{i\zeta(\mathbf{R})}|n(\mathbf{R})\rangle$，可见$\mathcal{A}$和$\gamma$都不是规范不变的

$$\mathcal{A}(\mathbf{R}) \to \mathcal{A}(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\zeta(\mathbf{R}) \tag{3.14}$$

$$\gamma \to \gamma - [\zeta(\mathbf{R}(t)) - \zeta(\mathbf{R}(0))] \tag{3.15}$$

但注意式3.15。如果令轨迹为闭合曲线，那么$\zeta(\mathbf{R}(t)) - \zeta(\mathbf{R}(0)) \equiv 0$。此时$\gamma$就成为一个规范不变量。

考虑闭合路径$\mathcal{C}$，$\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(t)$，利用广义Stokes定理，

$$\gamma = \oint_{\mathcal{C}} A(R)\mathrm{d}\mathbf{R} \tag{3.16}$$

$$= \int_{\mathcal{S}} \mathcal{B}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S} \tag{3.17}$$

其中$\mathcal{B} = \nabla\times\mathcal{A}$。

[4]事实上这是没有必要的，我们此处只是便于推导

对于更一般地情况，可以证明[4]

$$\gamma = \int_{\mathcal{S}} \mathrm{d}\mathbf{R}^{\mu} \wedge \mathrm{d}\mathbf{R}^{\nu} \frac{1}{2} \Omega_{\mu\nu}(\mathbf{R}) \tag{3.18}$$

其中Ω为二阶反对称张量，称为Berry曲率。

$$\Omega_{\mu\nu}(\mathbf{R}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}^{\mu}} \mathcal{A}(\mathbf{R})_{\nu} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}^{\nu}} \mathcal{A}_{\mu}(\mathbf{R}) \tag{3.19}$$

$$= i \left[\left\langle \frac{\partial n(\mathbf{R})}{\partial R^{\mu}} \middle| \frac{\partial n(\mathbf{R})}{\partial R^{\nu}} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial n(\mathbf{R})}{\partial R^{\nu}} \middle| \frac{\partial n(\mathbf{R})}{\partial R^{\mu}} \right\rangle \right] \tag{3.20}$$

此前的$\mathcal{B}$实质上为（三维情况下的）Berry曲率的矢量表示，满足

$$\Omega_{\mu\nu} = \epsilon_{\mu\nu\xi} \mathcal{B}_{\xi} \tag{3.21}$$

显然Ω和$\mathcal{B}$也都是规范不变的。

对于不同的本征态$|n\rangle$，可以证明[4]

$$\sum_{n} \Omega^{n}_{\mu\nu} = 0 \tag{3.22}$$

4 Berry相位与Winding number

现在重新考虑SSH Model。与先前的讨论类似，我们的H也是某个参数的k的函数。

定义

$$\mathcal{A}(k) = i \langle k| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} |k\rangle = \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}k} \tag{4.1}$$

可得

$$\gamma = \int_{-\pi}^{\pi} \mathcal{A}(k) \mathrm{d}k = \begin{cases} 2\pi & \text{若} v < w \\ 0 & \text{若} v > w \\ \text{无意义} & \text{若} v = w \end{cases} \tag{4.2}$$

可以证明γ必定是2π的整数倍，而且$\nu = \frac{\gamma}{2\pi}$就等于Winding number。

由于绝热变换满足规范变换条件[2]，而闭合回路上的积分γ是一个规范不变量，故而可以得出结论，Winding number是绝热不变的。如果认为绝热变换满足拓扑变换的条件，那么Winding number就是一个拓扑不变量。

Reference

[1] János K Asbóth, László Oroszlány, and András Pályi. “A short course on topological insulators”. In: *Lecture notes in physics* 919 (2016), p. 166.

[2] Navketan Batra and Goutam Sheet. “Understanding basic concepts of topological insulators through su-schrieffer-heeger (ssh) model”. In: *arXiv preprint arXiv:1906.08435* (2019).

[3] R Shankar. “Topological Insulators–A review”. In: *arXiv preprint arXiv:1804.06471* (2018).

[4] Di Xiao, Ming-Che Chang, and Qian Niu. “Berry phase effects on electronic properties”. In: *Reviews of modern physics* 82.3 (2010), p. 1959.