

基于紧束缚模型对称性的拓扑性质

刘传*¹

¹ 北京航空航天大学高等理工学院

摘要

在当下的凝聚态物理研究中，拓扑绝缘体及相关拓扑性质的研究在量子新奇物态的探索方面有着相当重要的地位。量子系统对称性的维持与破缺，使得其能谱结构产生相对稳定的变化；而不同的拓扑物相一定程度上可以由一些拓扑不变量来刻画，如 winding number、陈数等非局域性质，这使得我们可以对不同的拓扑绝缘体进行分类。

本文主要叙述了 SSH 模型和 Haldane 模型下的对称性和非局域性质的刻画，介绍了拓扑不变量的含义，对此类特殊的拓扑绝缘体进行了比较初步的讨论与数值求解。在数值求解部分我们引入了精确对角化方法，同时介绍了对称性的破坏对我们在数值方法中看到的边缘态上是如何起作用的。

1 引言

目前人们对展现出拓扑性质的能带结构进行了非常深入的研究，这为寻找新奇量子物态提供了相当的可能性来源。在拓扑能带的理论下，我们不仅解释了整数量子霍尔效应 (QHE)，还可以对分数量子霍尔效应 (FQH) 进行解释 [7]，早在 1985 年 Laughlin 便出色的解释了这一问题 [6]；同时我们可以描述拓扑绝缘体这类与常规半导体与导体完全不同的物相 [8]，它的分类不能由传统的朗道序参量来描述。

在发现量子霍尔效应之后人们开始了大量相关的数值模拟方法的研究。1988 年，Haldane 提出了一种破坏时间反演对称性的模型 [4] 来解释石墨烯中无外磁场时的霍尔效应，这个模型可以诱导出边缘态的产生，计算可以得到非零的陈数 ($\nu = \pm 1$)。这个模型的意义在于提供了一个理解 2 维量子自旋霍尔绝缘体的视角 [5]，我们将在后文详细描述这一模型。

而为了呈现拓扑绝缘体的相关性质，我们首先介绍一个较为简单的模型，即 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型。通过这个模型，我们将介绍计算 SSH 模型的手性对称 (chiral symmetry) 和拓扑不变量，最终回到 Haldane 模型对该模型进行求解。

2 SSH 模型及其性质

SSH 模型描述的是一个一维链上的无自旋的单费米子体系，跃迁强度交错排列。系统示意图如1所示。其中深色格点记为 A，浅色格点记为 B，A,B 原子各有 n 个。在实际情况下，如果电子跃迁时以及为极化之后的状态，那么这个模型将能很好的描述这个体系。

我们考虑跃迁项所带来的能量，此即紧束缚模型的“精神”，写下哈密顿量如下：

$$\hat{H} = \nu \sum_{k=1}^n (|k, B\rangle \langle k, A| + h.c.) + w \sum_{k=1}^{n-1} (|k+1, A\rangle \langle k, B| + h.c.)$$

*E-mail address: 19377111@buaa.edu.cn



图 1: SSH 模型 [1]

与文献 [1] 不同, 在这我们采取较为简洁的二次量子化形式的哈密顿量, 有:

$$\hat{H} = \nu \sum_{k=1}^n (b_k^\dagger a_k) + w \sum_{k=1}^{n-1} (a_{k+1}^\dagger b_k) + h.c. \quad (1)$$

在这里, ν, w 都取为实数, 因为如果他们各自带有一个相位可以通过重新定义紧束缚态的相位消去 (参见 [1])。注意, 在之后我们引入的 Haldane 模型中, 由次近邻引起的相位项无法通过这个方法消去, 在那里我们将其简化为 $\pi/2$ [2]。另外, 由于历史原因 [4], 我们在 Haldane 模型中将跃迁带来的能量前取了负号 (见式10)。由于两者哈密顿量满足 $Tr(H) = 0$, 因此正负号不会影响能谱形态, 这一点是不证自明的。

2.1 周期性边界条件求解能谱

若我们对 SSH 模型取周期性边界条件, 我们可以通过将实空间格点基变换到动量 k 空间计算, 此计算只需稍作推广便可以拓展到之后对式8的计算中。此时有傅里叶变换:

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-ikr_i) a_k & b_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-ikr_i) b_k \\ a_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(ikr_i) a_k^\dagger & b_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(ikr_i) b_k^\dagger \end{aligned} \quad (2)$$

带入到哈密顿量1中, 我们可以得到 k 空间中的哈密顿量矩阵:

$$H(k) = \begin{bmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

我们可以非常容易得到能量本征值为:

$$E(k) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos k} \quad (4)$$

我们之后将会看到, 从一维 SSH 模型推广到 Haldane 模型的计算是非常轻松而且显然的。

2.2 手征对称性与 SSH 模型的拓扑不变量

手征对称性 (Chiral symmetry) 与其他量子力学引入的对称性不同, 是一类针对体态 (bulk) 的性质。在一般的量子力学对称性问题中, 我们要求对称性所对应的算符 U 满足 $UHU^\dagger = H$ 。在手征对称性中, 我们要求对称性对应算符 \hat{H} 满足 [1]:

- $\hat{H}\hat{H}\hat{H}^\dagger = -\hat{H}$;
- $\hat{H}\hat{H}^\dagger = \hat{H}^2 = \hat{I}$;
- \hat{H} 是局域作用的, 从而可以写作一系列在局域自由度上算符的直和形式;
- \hat{H} 具有一定强健性 (robust), 在某些连续参数变化下仍保持仍为手征对称算符, 即 $\hat{H}H(\xi)\hat{H}^\dagger = -H(\xi)$

在 SSH 模型中, 由于我们只考虑了跃迁项带来的能量, 而未考虑 on-site 势带来的额外能量, 从而投影算符 P_A, P_B 满足:

$$P_i H P_i = 0, i = A, B$$

从而可以定义算符 $\hat{\Sigma}_z = P_A - P_B$, 易证 $\hat{\Sigma}_z$ 即满足我们对手征对称性算符的要求, 我们将此特殊的对称性称为亚晶格对称 (Sublattice symmetry)。通过简单的讨论 [1] 我们可以推断, 能谱图像关于 $E = 0$ 上下对称。这与数值解相吻合。

2.2.1 拓扑不变量

在量子力学中, 我们学习了绝热微扰理论, 即在哈密顿量中, 某参数经过了连续而缓慢的变化。在此过程中, 若先前系统处于基态则在绝热微扰之后系统仍处于基态。对绝缘体而言, 所谓的绝热演化 (*adiabatic deformation*) 便要求在保持原有对称性的基础上, 保持能带带隙的存在。如果两个状态之间可以通过绝热演化互相转换, 则称二者为 *adiabatic equivalent*。在绝热演化过程中, 若代表系统性质的某个整数保持不变, 则将其称为拓扑不变量。关于绝热演化和拓扑不变量的定义完全不依赖系统的维数, 所以可以描述更加高维的拓扑绝缘体。

笔者认为, 在数学上我们谈论拓扑空间的同胚或者同伦问题时, 我们同样会引入数学意义上的拓扑不变量来描述空间的等价意义。由于同伦映射对应着一个连通空间, 导致拓扑不变量在其所属空间上的变化也是连通的。如果某不变量必为整数, 则由连通性可以导出此整数必不变, 此类问题可以参考数学教材 [10]。在此, 我们以 SSH 模型为例, 介绍一个与代数拓扑中最为基础的基本群等价的——winding number。

2.2.2 Winding Number

我们能看到, 在 k 空间中我们的哈密顿量形式为 2×2 矩阵。在矩阵中, w, ν 的改变不会引起 chiral symmetry 的变化: 这也就是说明在 k 空间中, 我们总存在着 sublattice symmetry [1], 因此满足着绝热演化的要求。由其矩阵形式我们可以通过泡利矩阵和单位阵将其展开如下:

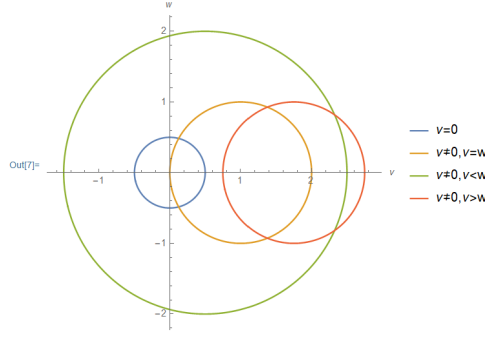
$$\hat{H}(k) = d_x \sigma_x + d_y \sigma_y + d_z \sigma_z = \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (5)$$

由式3我们可以得到 \mathbf{d} 的分量分别为:

$$\begin{aligned} d_x(k) &= v + w \cos k \\ d_y(k) &= w \sin k \\ d_z(k) &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

由绝热演化的要求, 我们需要保证 SSH 模型描述的是绝缘体, 即不存在 $E = 0$ 的态, 由有关泡利矩阵的类比, 参见 [9]。我们可以得到 $\mathbf{d} \neq 0$, 此即对绝热演化的全部要求。我们对 ν, w 关系进行分类, 有图像如下 2:

在绝热演化下, 我们要求图中 $\mathbf{d} \neq 0$, 用拓扑学的语言叙述此变化, 即: 在拓扑空间 $\mathbb{E}^2 \setminus O$ 中, 探讨圆形道路是否同伦。在拓扑学的框架下, 我们可以很容易证明拓扑空间 \mathcal{S}^1 是 $\mathbb{E}^2 \setminus O$ 的强形变收缩核, 这是一个数学上非常初等的命题。因此, 道路连通的拓扑空间 $A = \mathbb{E}^2 \setminus O$ 的基本群为 $\pi_1(A) \cong \mathbb{Z}$ 。由此我们可以通过 $\pi_1(A) \cong \mathbb{Z}$ 对应的映射 f 来标记每个圆圈的特征, 每个圆圈要么映射到 0, 要么映射到 1。在物理中, 我们将这一拓扑特征命名为 winding number; 这一整数在同伦概念下保持不变, 在物理中我们称其为拓扑不变量, 与其数学概念对应的命名保持了一致性。

图 2: $d(k)$ 图像

而由基本群概念定义，我们本就将同伦的道路类映射到同一个数，所以在 adiabatic deformation 下拓扑不变量保持 robust 的性质是显然的，这便是用拓扑不变量来对不同相进行分类的原因。我们将在映射 f 下映射到 0 的系统称为平庸的 (trivial phase)，映射到 1 的系统称为拓扑相 (topological phase)。关于 winding number 与边缘态之间的关系，我们留到 Haldane 模型中写出。

在文献 [1] 中给出了 winding number 的数值计算公式，我们定义 $\tilde{d} = \frac{d}{|d|}$ 即：

$$\begin{aligned}\nu &= \frac{1}{2\pi} \int (\tilde{d} \times \frac{d}{dk} \tilde{d})_z dk \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \log(v + we^{-ik})\end{aligned}$$

3 周期性边界条件求解石墨烯能谱

3.1 最近邻跃迁紧束缚模型

我们首先引入最近邻的原子之间的跃迁，即原子之间只有存在化学键时才会发生跃迁，同时考虑在 A、B 两类原子上加上不同的 on-site 势 [2]。石墨烯的六角格点结构如图3，我们将红色格点记为 A，将蓝色格点记为 B。针对石墨烯的蜂窝结构，我们考虑紧束缚模型，写出实空间下二次量子化形式的哈密顿量如

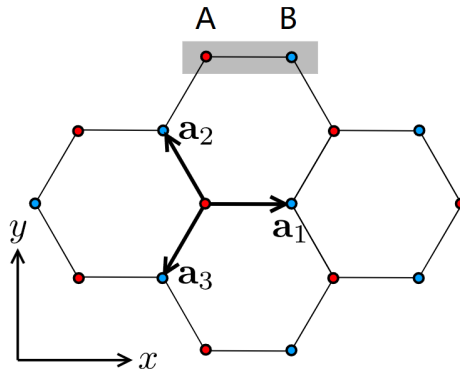


图 3: 最近邻跃迁紧束缚模型 [2]

下：

$$H = -t_1 \sum_i \sum_{\rho} a_i^{\dagger} b_{i+\rho} + \sum_i \left(\frac{M}{2} a_i^{\dagger} a_i - \frac{M}{2} b_i^{\dagger} b_i \right) + h.c. \quad (7)$$

我们考虑若满足周期性边界条件，即将单层石墨烯“卷曲”为一个环面 (torus)，类似式 2，我们将 k 推广到 \mathbf{k} ，从而有傅里叶展开式 [11]：

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i) a_{\mathbf{k}} \quad b_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i) b_{\mathbf{k}}$$

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_i) a_{\mathbf{k}}^\dagger \quad b_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_i) b_{\mathbf{k}}^\dagger$$

我们同时注意到 $\delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ 的展开式如下：

$$\delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) = \frac{1}{N} \sum_i \exp(i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)\mathbf{r}_i)$$

将以上式子带入哈密顿量，注意到跃迁项只存在于最近邻项之间，经过大量重复而缜密的计算，我们得到：

$$H = -t_1 \sum_{\mathbf{k}} \left[\sum_{\boldsymbol{\rho}} \exp(-i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}) \right] a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{M}{2} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}) \right] + h.c. \quad (8)$$

由此，我们便将位形空间的哈密顿量转化到动量空间中，我们可以写出 \mathbf{k} 空间中的矩阵如下：

$$H(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} M & h(\mathbf{k}) \\ h^*(\mathbf{k}) & -M \end{bmatrix} \quad (9)$$

其中， $h(\mathbf{k}) = -t_1 \sum_{\boldsymbol{\rho}} \exp(-i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho})$ 。由此，我们得到了动量空间中的哈密顿量的精确形式，接下来将其对角化便可以做出能谱图像。我们注意到， $H(\mathbf{k})$ 为厄密矩阵，且 $\text{Tr}(H(\mathbf{k})) = 0$ 。由此我们知道对角化之后的能量本征值为实值且互为相反数。

3.2 绘制最近邻跃迁模型能谱

由图3，我们将 $\boldsymbol{\rho}$ 带入 a_i 的取值，通过 Mathematica 便可以作出三维能谱如图4所示：从哈密顿量的

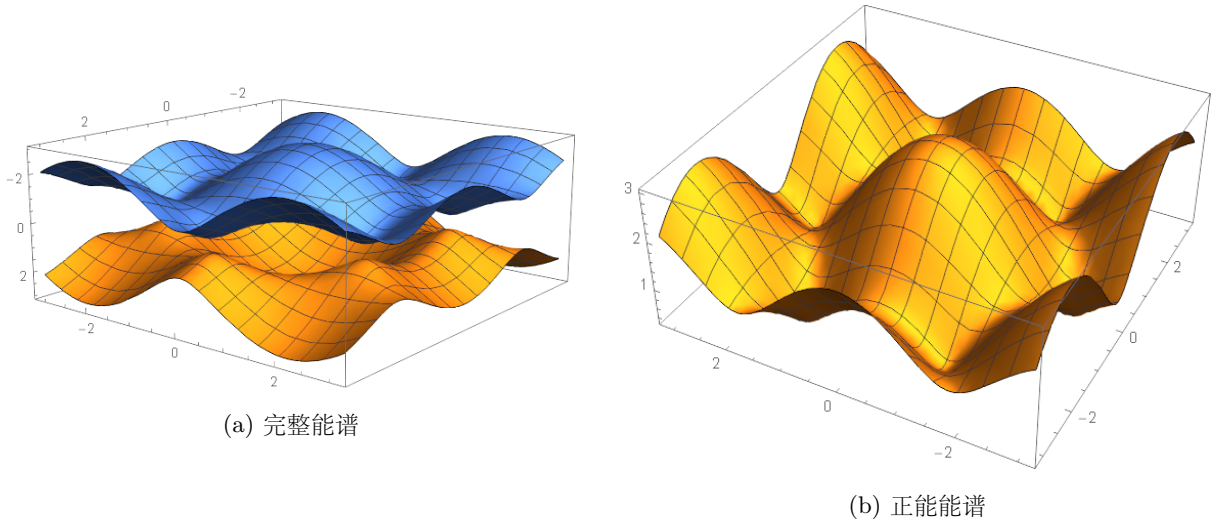


图 4: 最近邻跃迁模型能谱

形式我们可以看到，考虑 AB 原子不同的 on-site 势能会使得能谱正能量部分和负能量部分分别上下平移 M ，而如果将 on-site 势去掉即取 $M = 0$ 经过数值模拟后（精确手动对角化也可）发现上下两支在谷/峰处相接，其最近邻的部分呈现线性的 E-k 关系，即常说的 Dirac cone，在这里展现粒子（电子）出无质量的相对论性粒子的属性 [5]。值得一提的是，这里展现出来的 6 个谷/峰只有两个是独立的，其他四个可以由这两个平移得到 [2]。

3.3 Haldane 模型

我们再引入次近邻跃迁项，此即 Haldane 模型。需要注意的是，此处的跃迁带来的 phase 我们取为 $\pi/2$ 。

$$H = -t_1 \sum_i \sum_{\rho} a_i^\dagger b_{i+\rho} + \sum_i \left(\frac{M}{2} a_i^\dagger a_i - \frac{M}{2} b_i^\dagger b_i \right) - it_2 \sum_i \sum_{\rho'} (a_i^\dagger a_{i+\rho'} - b_i^\dagger b_{i+\rho'}) + h.c. \quad (10)$$

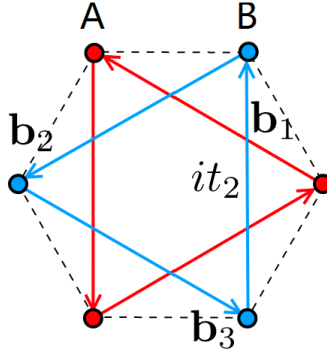


图 5: 次近邻跃迁方向 [2]

方程中显示的次近邻跃迁项方向如图 5 所示。与上述过程完全类似，我们可以从位形空间转换到动量空间中，在 k 空间中，我们看到其哈密顿量同样写作一个厄密二维矩阵，也满足 $Tr(H(k)) = 0$ 。其形式为：

$$H(k) = \begin{bmatrix} M + s(k) & h(k) \\ h^*(k) & -M - s(k) \end{bmatrix} \quad (11)$$

其中 $s(k) = -2t_2 \sum_{\rho'} \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}')$

3.4 绘制最近邻跃迁模型能谱

由图 5，我们将 $\boldsymbol{\rho}'$ 带入 \mathbf{b}_i 的取值，通过 Mathematica 便可以作出三维能谱如图 6 所示：

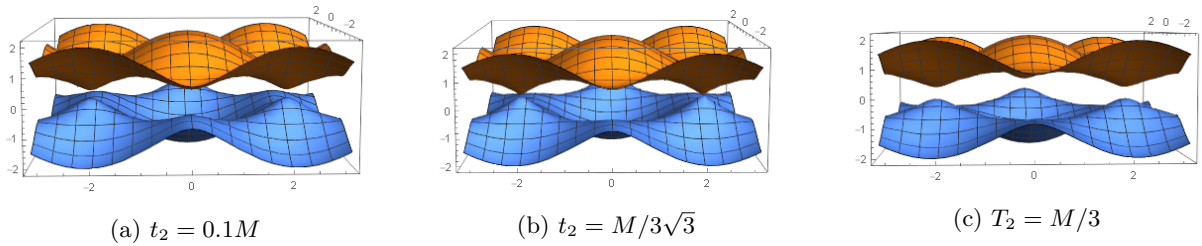


图 6: 最近邻跃迁模型能谱

我们看到，Dirac point 处的能谱峰/谷先接近，再分离。通过精确计算可以得到，两不同的 Dirac point 在 $t_2 = \pm M/3\sqrt{3}$ 处分别重合 [2]。因此，通过次近邻跃迁产生的能隙与通过加上 on-site 势产生的能隙有本质的不同：on-site 势只能上下分离能谱产生能隙，而不能改变能谱形状。

4 Haldane 模型在开边界条件下的精确对角化方法

在以上讨论的 Haldane 模型中，我们对边界条件要求为周期性边界条件，即将石墨烯在 torus 上进行考虑，这是极其理想化的边界条件。接下来我们将某个方向上的边界条件打开，使石墨烯呈现出圆柱 (cylinder) 的形状；其现实对应于日前较为热门的碳纳米管¹ a。

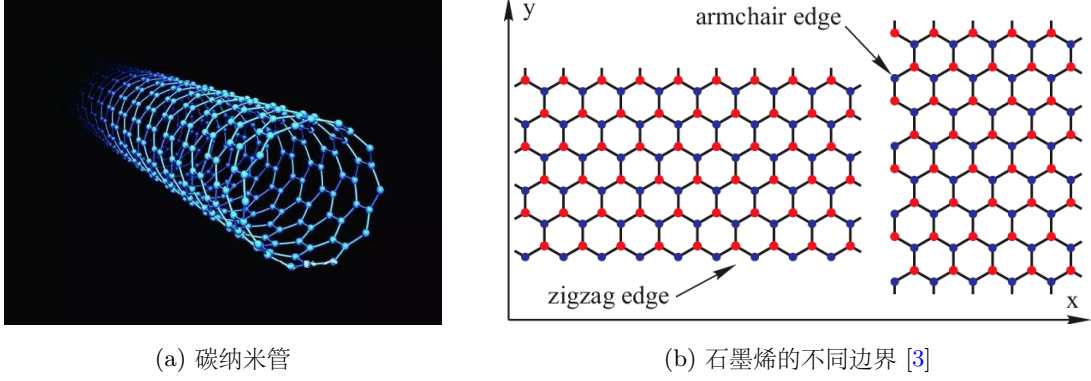


图 7

需要指出的是，按照打开边界的方向不同，石墨烯的结构亦不同，不同边界的区别可参考图b。即：如图3所示，若 y 方向仍具有周期性结构，则称边界为 zigzag 边界，若 x 方向仍具有周期性结构，则称边界为 armchair 边界。

与 SSH 模型类似，将边界打开之后会在相应方向上不具有平移对称性。因此，无法在该方向上做相应的离散化的 k 空间上的展开。在此我们采取在边界打开的方向仍采取格点位置作为粒子的 label，在仍具有对称性的方向采取 k 空间展开的形式，用数值计算的方式对相应能谱进行计算与绘图。我们将图7b中的 x 方向以粒子位置做离散的标记符号，标记区域之后的图像如下图8所示。

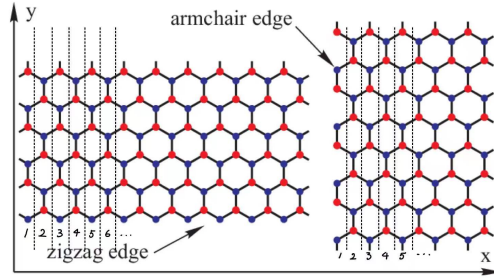


图 8: 区域划分

由此，我们在对产生湮灭算符标记位置时，单纯一个指标 i 已经不能给出我们希望的标记，我们用两个指标 (i, j) 来标记各个状态。写出哈密顿量如下所示：

$$H = -t_1 \sum_{i,j,\rho} a_{(i,j)}^\dagger b_{(i,j)+\rho} + \sum_{i,j} \left(\frac{M}{2} a_{(i,j)}^\dagger a_{(i,j)} - \frac{M}{2} b_{(i,j)}^\dagger b_{(i,j)} \right) - it_2 \sum_{i,j,\rho'} (a_{(i,j)}^\dagger a_{(i,j)+\rho'} + b_{(i,j)}^\dagger b_{(i,j)+\rho'}) + h.c. \quad (12)$$

相应的，我们在做傅里叶变换时只能在 y 方向上做傅里叶变换， δ 函数同样采取一维形式。取 x 方向上离散坐标最大数为 n ，由于大作业对公式推导的限制，我们在此只将推导 $\sum_{i,j} a_{(i,j)}^\dagger b_{(i,j)+(0,-1)}$ 项的结果，类似推导过程式 13 可以写出相应其他各项：

¹ 图片来源于网络

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j} a_{(i,j)}^\dagger b_{(i,j)+(0,-1)} &= \sum_{i,j} \sum_{k_y, k'_y} \frac{1}{N} \exp(ik_y y_j) \exp[-k'_y(y_j - 1)] a_{(i,k_y)}^\dagger b_{(i,k'_y)} \\
&= \sum_i \sum_{k_y, k'_y} \sum_j \frac{1}{N} \exp[iy_j(k_y - k'_y)] e^{ik'_y} a_{(i,k_y)}^\dagger b_{(i,k'_y)} \\
&= \sum_i \sum_{k_y, k'_y} \delta(k_y - k'_y) e^{ik'_y} a_{(i,k_y)}^\dagger b_{(i,k'_y)} \\
&= \sum_i e^{ik_y} a_{(i,k_y)}^\dagger b_{(i,k_y)}
\end{aligned} \tag{13}$$

将完备基排列为 $\{a_{(1,k_y)}, a_{(2,k_y)}, \dots, a_{(n,k_y)}, b_{(1,k_y)}, \dots, b_{(n,k_y)}\}$ ， H 对应的 $(2n \times 2n)$ 矩阵可以写成四个 $(n \times n)$ 的分块矩阵，即：

$$H = \begin{bmatrix} H_1 & H_2 \\ H_3 & H_4 \end{bmatrix} \tag{14}$$

由哈密顿量的厄密性质，我们有 $H_3 = H_2^\dagger$ ；由 $Tr(H) = 0$ 及 H 的具体形式，我们有 $H_1 + H_4 = 0$ 。各个分块矩阵在两种边界条件下分别为：

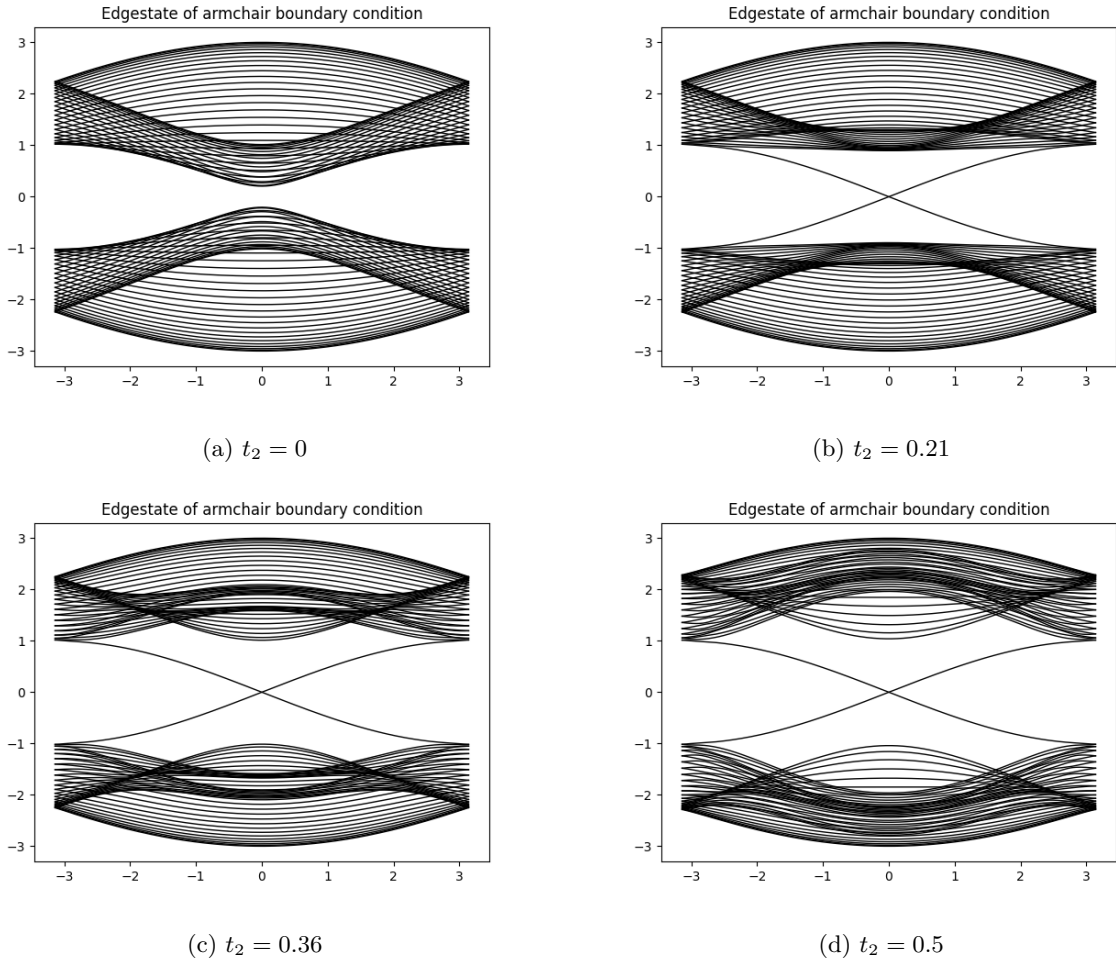


图 9: Armchair 边界 E-k 图

- 若开边界条件为 armchair 边界:

$$H_1 = -H_4 = \begin{bmatrix} M & -2it_2 \cos \frac{3}{2}k_y & it_2 & & \\ 2it_2 \cos \frac{3}{2}k_y & \ddots & \ddots & \ddots & \\ -it_2 & \ddots & \ddots & \ddots & it_2 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & -2it_2 \cos \frac{3}{2}k_y \\ & & -it_2 & 2it_2 \cos \frac{3}{2}k_y & M \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$H_2 = H_3^\dagger = -t_1 \begin{bmatrix} e^{ik_y} & e^{\frac{i}{2}k_y} & & & \\ e^{\frac{i}{2}k_y} & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & e^{\frac{i}{2}k_y} & \\ & & & e^{\frac{i}{2}k_y} & e^{ik_y} \end{bmatrix} \quad (16)$$

- 若开边界条件为 zigzag 边界:

$$H_1 = -H_4 = \begin{bmatrix} M - 2t_2 \sin(\sqrt{3}k_y) & 2t_2 \sin(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y) & & & \\ 2t_2 \sin(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y) & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & 2t_2 \sin(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y) \\ & & & 2t_2 \sin(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y) & M - 2t_2 \sin(\sqrt{3}k_y) \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$H_2 = H_3^\dagger = -t_1 \begin{bmatrix} 2 \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y) & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & 2 \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y) \end{bmatrix} \quad (18)$$

我们取取 x 方向上离散坐标最大数 $n = 40$, 参数设置为 $t_1 = 1.0, M = 0.2$, 调整参数 t_2 , 利用 Python 的 `numpy.linalg.eigh` 对角化方法做出能谱图像如图 9 10 所示。

从以上能谱图中我们便可以看到边缘态的存在。在这里, 我们无论如何调整参数, 边缘态均为 2 条, 即边缘态的数目具有一定的稳定性, 我们在后面将解释其数目来源于周期性边界条件下能谱结构的拓扑性质。

在得到能谱(即本征值)的同时, 我们可以计算得出本征态。通过粒子数算符 $a_{(i,j)}^\dagger a_{(i,j)}$ 以及 $b_{(i,j)}^\dagger b_{(i,j)}$ 算符, 我们可以进一步针对边缘态计算出粒子在格点位置的态密度。由于不同纵坐标标识 j 在横坐标相同时粒子数密度相同, 所以我们计算粒子在某横坐标下的概率分布。我们将基排列为 $\{a_{(1,k_y)}, b_{(1,k_y)}, \dots, a_{(n,k_y)}, b_{(n,k_y)}\}$, 将 k_y 取值作为纵坐标, 颜色深浅作为态密度的大小, 做出热力学图。在实际操作中我们可以画出随着参数变化的动态 GIF 曲线, 现截取几帧如图 11 所示。

5 边缘态特征量计算

5.1 Haldane 模型的计算

与 SSH 模型类似, 我们首先考虑周期性边界条件下的哈密顿量(即考虑石墨烯的 bulk 属性)。在不引入次近邻跃迁项时, 我们有哈密顿量记作 [2]:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = -t_1 \sum_i [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) \sigma_x + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) \sigma_y] + M \sigma_z \quad (19)$$

按照式 19 我们可以做出类似 SSH 模型的 $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ 图像 a。这图像说明在不引入次近邻跃迁时, 当 $M \neq 0$ 时, 我们的图像是一个单连通平面, 在三维情况下是可缩的。由此, 这个态可以在绝热情况下遍历 $M > 0$ 的所有态, 我们称此时的相是平庸的 [2]。

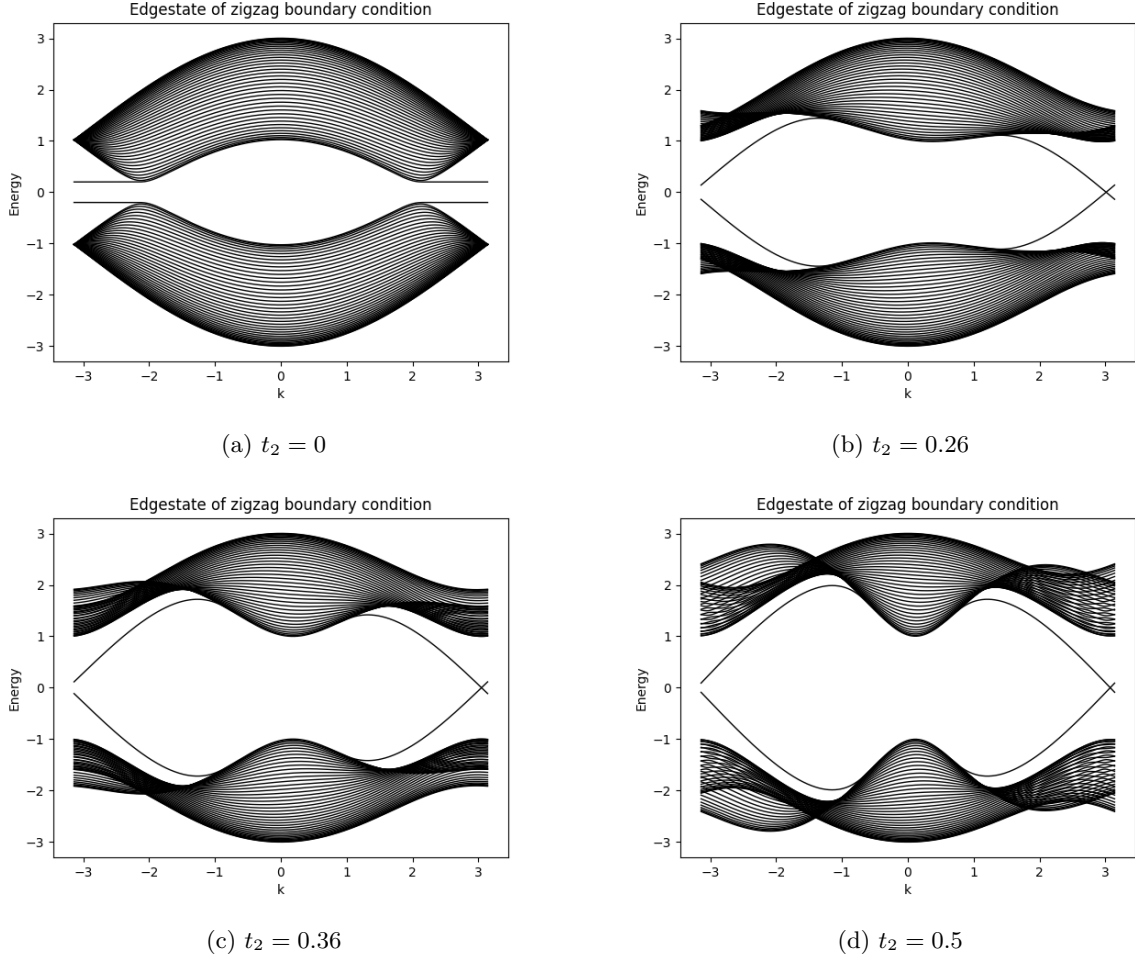


图 10: zigzag 边界 E-k 图

在引入次近邻跃迁后我们有：

$$H(\mathbf{k}) = -t_1 \sum_i [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) \sigma_x + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) \sigma_y] + M \sigma_z - 2t_2 \sum_i [\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i)] \quad (20)$$

我们可以做出类似 SSH 模型的 $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ 图像 [b](#)。从中我们可以看出，此时的拓扑空间相当的不平凡，我们需要引入陈数概念来标记绝热演化的等价类 [\[7\]](#)。在不经 $E(\mathbf{k}) = 0$ 点即 $\mathbf{d} \neq 0$ 情况下，此时一共会产生陈数 ν 等于 ± 1 两类等价类。

5.2 Haldane 模型的对称性与边缘态

从对称性观点看，在引入 on-site 势时，我们破坏了 sublattice symmetry，因为此时我们不能通过投影算符构造手征对称性算符了，但我们仍可以构造一个手征对称性算符，这个事实的证明显然的：这是由哈密顿量的零迹现在决定的。

另外，在引入次近邻跃迁时，我们破坏了时间反演对称性，因为当电子跃迁回到原来位置时，她会多出一个相位项，而这个相位不能通过重新定义粒子态来去掉 [\[5\]](#)。这便意味着，粒子跃迁的这个信息在态中被保留了下来，我们不能忽略这个信息进行时间反演。

在这两重对称性破缺的条件下，在绝热演化的过程中我们创造出了两个等价类，即两个拓扑相，陈数分别取 ± 1 。

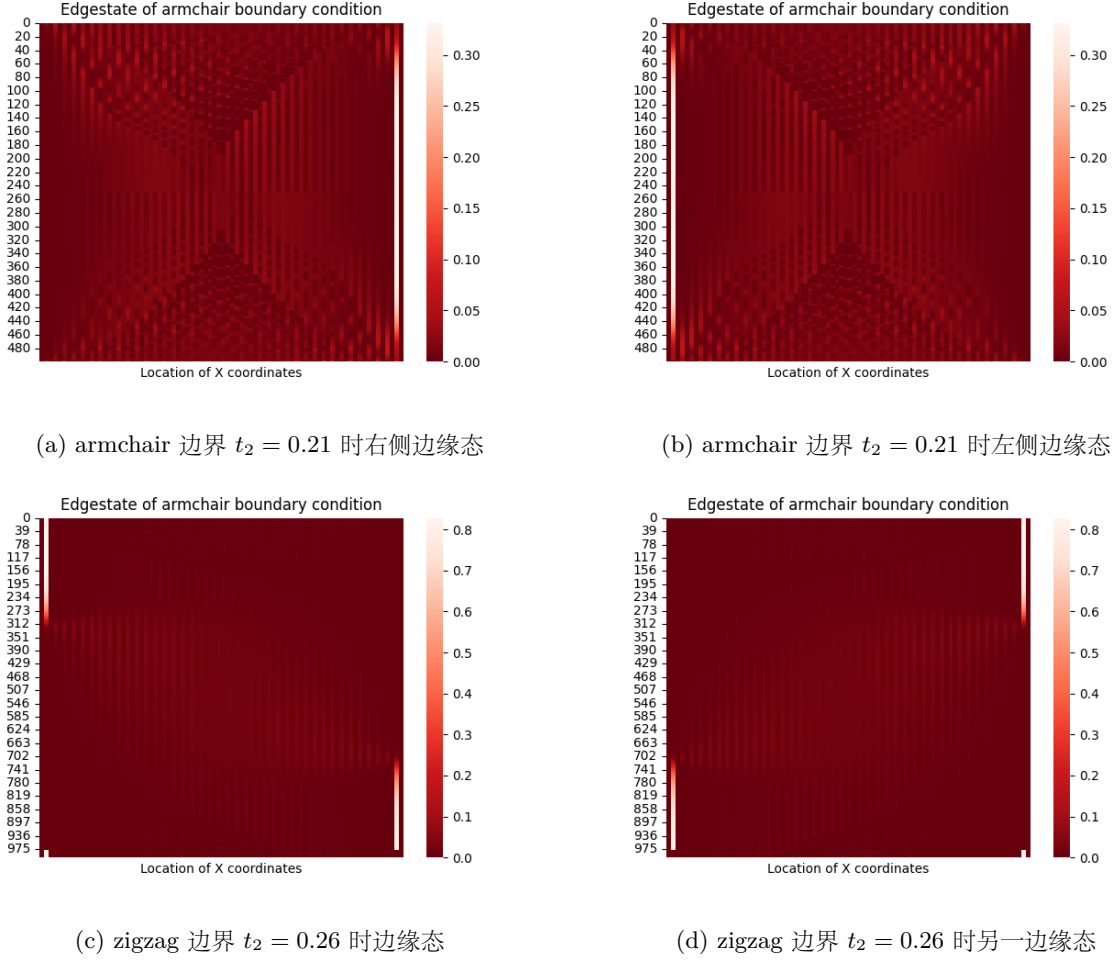


图 11: 边缘态实空间概率分布

而这便意味着在 Haldane 模型中我们能够找到两个边缘态 [7]。手征对称性决定了边缘态的数目一定为偶数条，而在引入时间反演对称性破缺时，便决定两个拓扑相之间的有且只有 2 条边缘态了。边缘态与对称性和拓扑相分类相关这一特点决定了边缘态数目的 robust 特性：在绝热演化它不会随着参数的变化而发生变化，这也反映了系统能谱的拓扑结构。

参考文献

- [1] János K. Asbóth, László Oroszlány, and András Pályi. A Short Course on Topological Insulators: Band-structure topology and edge states in one and two dimensions. *arXiv e-prints*, page arXiv:1509.02295, September 2015.
- [2] Anton Akhmerov et al. Topology in condensed matter: tying quantum knots. [EB/OL]. https://topocondmat.org/w4_haldane/haldane_model.html#.
- [3] Valery Gusynin, V. Miransky, Sergei Sharapov, and Igor Shovkovy. Edge states in quantum hall effect in graphene (review article). *Low Temperature Physics - LOW TEMP PHYS*, 34:778–789, 10 2008.
- [4] F. D. M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61:2015–2018, Oct 1988.

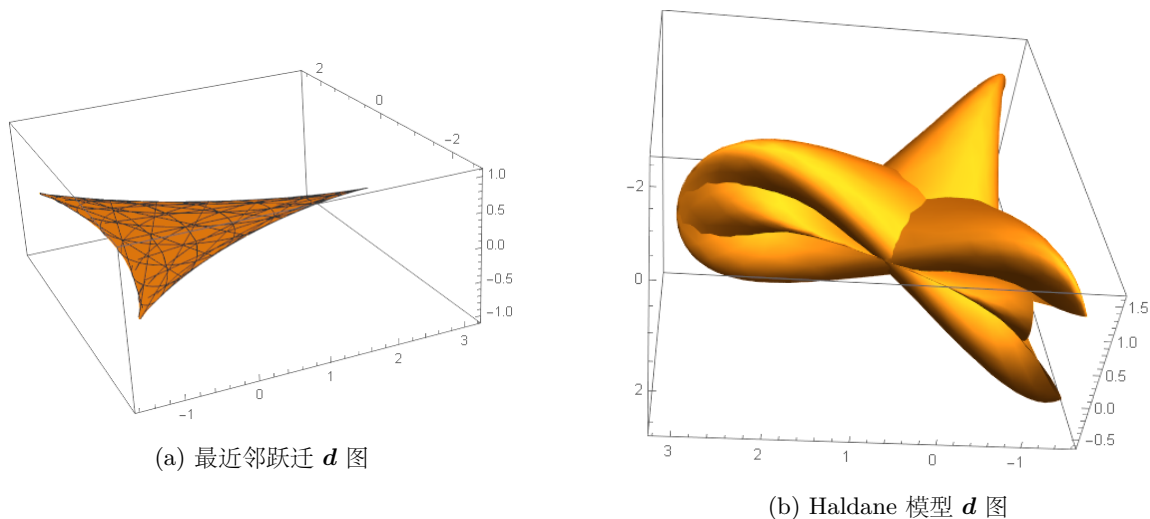


图 12

- [5] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82:3045–3067, Nov 2010.
- [6] R. B. Laughlin. Anomalous quantum hall effect: An incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1395–1398, May 1983.
- [7] Felix A. Palm, Sam Mardazad, Annabelle Bohrdt, Ulrich Schollwöck, and Fabian Grusdt. Snapshot-based detection of $\frac{1}{2}$ -Laughlin states: coupled chains and central charge. *arXiv e-prints*, page arXiv:2112.10763, December 2021.
- [8] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 83:1057–1110, Oct 2011.
- [9] J. J. Sakurai. 现代量子力学. 世界图书出版公司北京公司, 2006.
- [10] 尤承业. 基础拓扑学讲义. 北京大学出版社, 1997.
- [11] 李正中编. 固体理论. 固体理论, 1985.