凝聚态物理中的拓扑物态

江文涛 191840114

2023 年 5 月 4 日

目录

第一章　Berry 相位

1.1　离散情况

干涉条纹的产生来自 $P = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = \Psi_1^2 + \Psi_2^2 + \Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_1\Psi_2^*$。

相对相位是有物理意义的。$\gamma_{12} = -arg < \Psi_1|\Psi_2 >$

离散 Berry 相位的定义

对于 N 个 Hilbert 空间中的态，将它们排序为一个圈，定义下面的一个量：

$$\gamma_L = -\arg e^{-i(\gamma_{12}+\gamma_{23}+\ldots+\gamma_{N1})} = -\arg\left(\langle\Psi_1 \mid \Psi_2\rangle\langle\Psi_2 \mid \Psi_3\rangle\ldots\langle\Psi_N \mid \Psi_1\rangle\right) \tag{1.1}$$

它可以改写为如下形式：

$$\gamma_L = -\arg\operatorname{Tr}\left(|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1||\Psi_2\rangle\langle\Psi_2|\ldots|\Psi_N\rangle\langle\Psi_N|\right) \tag{1.2}$$

作为一组规范不变投影算符的乘积，它显然也是规范不变的。

Berry 通量

考虑一个二维格点，将每个点都对应一个态，定义如下一个 Berry 相：

$$\begin{aligned}\gamma_L = -\arg\exp\Bigg[-i\Bigg(&\sum_{n=1}^{N-1}\gamma_{(n,1),(n+1,1)} + \sum_{m=1}^{M-1}\gamma_{(N,m),(N,m+1)} \\ &+ \sum_{n=1}^{N-1}\gamma_{(n+1,M),(n,M)} + \sum_{m=1}^{M-1}\gamma_{(1,m+1),(1,m)}\Bigg)\Bigg]\end{aligned} \tag{1.3}$$

直接计算涉及很多依赖规范的量，下面引入一种方法使得计算可以拆解为规范不变量的和。对于每个“小圈”，定义它边界对应的 Berry 相位：

$$\begin{aligned}F_{nm}=&-\arg\exp\left[-i\left(\gamma_{(n,m),(n+1,m)}+\ \gamma_{(n+1,m),(n+1,m+1)}\right.\right.\\&\left.\left.+\gamma_{(n+1,m+1),(n,m+1)}+\gamma_{(n,m+1),(n,m)}\right)\right]\\&=\gamma_{(n,m),(n+1,m)}+\gamma_{(n+1,m),(n+1,m+1)}+\gamma_{(n+1,m+1),(n,m+1)}+\gamma_{(n,m+1),(n,m)}+2\pi n_{nm}\end{aligned} \tag{1.4}$$

称为 Berry 通量。将所有的 Berry 通量相乘，每个内部的边都被计算了方向相反的两次，因此互为复共轭，最终只剩下边界的相，所以这个量和之前定义的 Berry 相相等。

$$\exp\left[-i\sum_{n=1}^{N-1}\sum_{m=1}^{M-1}F_{nm}\right]=e^{-i\gamma_L} \tag{1.5}$$

这让人联想到 Stokes 定理，但在这里 Berry 通量的求和与 Berry 相本身并不相等，而是可以相差 $2\pi n$。

Chern 数

对于上边定义的格点参数空间取周期边界条件，(**??**)变为 $\prod_{m=1}^{M}\prod_{n=1}^{N}e^{-iF_{nm}}=1$ ，Chern 数的定义为：

$$Q=\frac{1}{2\pi}\sum_{nm}F_{nm} \tag{1.6}$$

它显然是一个整数。

1.2　连续情况

现在用 D 维参数空间中的矢量标记 Hilbert 空间中的态矢：$|\Psi(\mathbf{R})\rangle$。在参数空间中取一定向曲线：$\mathscr{C}:[0,1)\to\mathscr{P},\quad t\mapsto\mathbf{R}(t)$，曲线上相邻的两点映射到的态矢之间的相对相位为：

$$e^{-i\Delta\gamma}=\frac{\langle\Psi(\mathbf{R})\mid\Psi(\mathbf{R}+d\mathbf{R})\rangle}{|\langle\Psi(\mathbf{R})\mid\Psi(\mathbf{R}+d\mathbf{R})\rangle|};\quad \Delta\gamma=i\left\langle\Psi(\mathbf{R})\left|\nabla_{\mathbf{R}}\right|\Psi(\mathbf{R})\right\rangle\cdot d\mathbf{R}, \tag{1.7}$$

上式右边中乘上 $d\vec{R}$ 的量为 Berry 联络：

$$\mathbf{A}(\mathbf{R})=i\left\langle\Psi(\mathbf{R})\mid\nabla_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{R})\right\rangle=-\operatorname{Im}\left\langle\Psi(\mathbf{R})\mid\nabla_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{R})\right\rangle \tag{1.8}$$

其中有定义：$\langle\Phi \mid \nabla_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{R})\rangle = \nabla_{\mathbf{R}}\langle\Phi \mid \Psi(\mathbf{R})\rangle$。[1] 波函数的 Local 规范变换使得 Berry 联络如下变换：

$$|\Psi(\mathbf{R})\rangle \to e^{i\alpha(\mathbf{R})}|\Psi(\mathbf{R})\rangle : \quad \mathbf{A}(\mathbf{R}) \to \mathbf{A}(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}}\alpha(\mathbf{R}) \tag{1.9}$$

对于参数空间的一条闭曲线，沿着这条曲线的 Berry 相位为：

$$\gamma(\mathscr{C}) = -\operatorname{argexp}\left[-i\oint_{\mathscr{C}} \mathbf{A}\cdot d\mathbf{R}\right] \tag{1.10}$$

仿照 Stokes 定理，定义 Berry 曲率：

$$B = (\partial_x A_y - \partial_y A_x) \tag{1.11}$$

此时线积分可改写为面积分：

$$\oint_{\partial\mathscr{F}} \mathbf{A}\cdot d\mathbf{R} = \int_{\mathscr{F}} (\partial_x A_y - \partial_y A_x)\, dxdy = \int_{\mathscr{F}} B dxdy \tag{1.12}$$

如果规范的选取是连续的，对于闭合曲面上述积分为零，但若规范存在不连续的奇点，则会出现非零的 Chern 数。

1.3　二能级体系为例

考虑这样一个二能级哈密顿量：$\hat{H}(\mathbf{d}) = d_x\hat{\sigma}_x + d_y\hat{\sigma}_y + d_z\hat{\sigma}_z = \mathbf{d}\cdot\hat{\sigma}$，$\vec{d}$ 是挖去球心的球上一点。很容易看出，上述哈密顿量的平方正比于单位矩阵，其本征值也很容易得到。利用球坐标将 $\vec{d}$ 参数化，很容易得到本征矢：

$$|+_{\mathbf{d}}\rangle = e^{i\alpha(\theta,\varphi)}\begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}\cos\theta/2 \\ e^{i\varphi/2}\sin\theta/2 \end{pmatrix} \tag{1.13}$$

对应负本征值的本征矢相应地为：$|-_{\mathbf{d}}\rangle = e^{i\beta(\mathbf{d})}\,|+_{-\mathbf{d}}\rangle$
选择 α,β 就是选择不同的规范，然而，无论如何选取规范，都不能在全局上性质良好。Dirac 模型：$\hat{H}(\mathbf{d}) = d_x\hat{\sigma}_x + d_y\hat{\sigma}_y + M\hat{\sigma}_z$ ，$E_\pm = \pm\sqrt{k^2+M^2}$

能带反转

对于两能级体系，考虑 Γ 点 $m>0, m<0$ 附近的能带变化，发现当能隙关闭时，高低能量态对应的轨道发生变换。

[1]此内积纯虚，$\nabla_{\mathbf{R}}\langle\Psi(\mathbf{R}) \mid \Psi(\mathbf{R})\rangle = \langle\Psi(\mathbf{R})|\nabla_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{R})\rangle + (\langle\Psi(\mathbf{R})|\nabla_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{R})\rangle)^* = 0$

算个陈数

在前面利用 Stokes 定理, 似乎陈数都是零, 但这建立在被积函数光滑的条件下，当无法选取一个全局光滑的规范时，上述论证不成立，此时就隐含着陈数不为零的可能。对于二能级系统，一个常用的规范变换是 $\alpha(R) = \phi$，将参数空间分为两个规范的部分，最终的 Berry 曲率的积分转化为线积分时，由于规范的不光滑性，最终剩下一个 $\nabla\phi$ 的线积分，给出 1 的陈数。

从含时薛定谔方程导出 Berry 相

考虑这样一个含参数的哈密顿量 $H\left(x^a; \lambda^i\right)$，$x^a$ 是动力学自由度，哈密顿量通过依赖于参数 λ 而依赖于时间。考虑这个哈密顿量的基态, 假设为非简并的 $|\psi>$，它也依赖于参数 $\lambda, |\psi(\lambda(t))>$。由于绝热定理，当参数改变的足够缓慢且哈密顿的能级之间未发生交错时，$H(0)$ 对应第 n 个本征值的态将也演化到 $H(\lambda(t))$ 的第 n 个本征值对应的本征态。

可以看到，当改变参数使得非简并的态之间发生了能级简并时，给出 Berry 曲率的奇异性。上式只包含了两两之间的能量差，所以一个两能级物理体系就能体现很多问题的核心。这里通过考虑一两能级体系来看看在能量简并点到底发生了什么: 对于 $E(\mathbf{R})_+ \geq E(\mathbf{R})_-$, 在能级简并点 $E(\mathbf{R}^*)_+ = E(\mathbf{R}^*)_-$，将哈密顿量在简并点附近展开为：$H(\mathbf{R}) \approx H\left(\mathbf{R}^*\right) + \left(\mathbf{R} - \mathbf{R}^*\right) \cdot \boldsymbol{\nabla} H\left(\mathbf{R}^*\right)$，这给出 Berry 曲率：

$$\mathbf{V}_+((\mathbf{R})) = \operatorname{lm} \frac{\langle +(\mathbf{R})\left|\left(\nabla H\left(\mathbf{R}^*\right)\right)\right| -(\mathbf{R})\rangle \times \langle -(\mathbf{R})\left|\left(\nabla H\left(\mathbf{R}^*\right)\right)\right| +(\mathbf{R})\rangle}{\left(E_+(\mathbf{R}) - E_-(\mathbf{R})\right)^2}. \tag{1.14}$$

由于叉乘的反对易性，很容易看出两个能级的 Berry 曲率刚好为相反数。具体而言, 考虑这样一个二能级哈密顿量: $\hat{H}(\mathbf{d}) = d_x\hat{\sigma}_x + d_y\hat{\sigma}_y + d_z\hat{\sigma}_z = \mathbf{d}\cdot\hat{\sigma}$, $\mathbf{d}$。

很容易看出，上述哈密顿量的平方正比于单位矩阵，其本征值也很容易得到。利用球坐标将 $\vec{d}$ 参数化，很容易得到本征矢：

$$|+_{\mathbf{d}}\rangle = e^{i\alpha(\theta,\varphi)} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}\cos\theta/2 \\ e^{i\varphi/2}\sin\theta/2 \end{pmatrix} \tag{1.15}$$

对应负本征值的本征矢相应地为：$|-_{\mathbf{d}}\rangle = e^{i\beta(\mathbf{d})}\,|+_{-\mathbf{d}}\rangle$
不难算出，Berry 曲率在此问题中为：$\mathbf{V}_+(\mathbf{R}) = \frac{\mathbf{R}}{2R^3}$，具有位于原点处磁单

极子的形式，而哈密顿量在参数空间的原点处简并，因此每有一个参数空间的简并点都给出该处的一个磁单极子形式的 Berry 曲率。

第二章 SSH 模型

SSH 模型描述了一维双原子链中电子的跃迁，忽略电子间的相互作用与自旋，假设平移不变性，单粒子哈密顿量为:

$$\hat{H}=v\sum_{m=1}^{N}(|m,B\rangle\langle m,A|+\text{ h.c. })+w\sum_{m=1}^{N-1}(|m+1,A\rangle\langle m,B|+\text{ h.c. }) \tag{2.1}$$

为方便起见，总是选取 v,w 为实数，复数的 v,w 总是可以对态做规范变换回到实数。

每个元胞中含有两个子格点，因为忽略了其他的内禀自由度，如自旋、轨道，此 Hilbert 空间可以等价于 N 个二能级系统，因此哈密顿量可以改写为:

$$\hat{H}=v\sum_{m=1}^{N}|m\rangle\langle m|\otimes\hat{\sigma}_x+w\sum_{m=1}^{N-1}\left(|m+1\rangle\langle m|\otimes\frac{\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y}{2}+\text{ h.c. }\right) \tag{2.2}$$

考虑周期边界条件，体哈密顿量可以写为:

$$\hat{H}_{\text{bulk }}=\sum_{m=1}^{N}(v|m,B\rangle\langle m,A|+w|(\bmod N)+1,A\rangle\langle m,B|)+\text{ h.c.}. \tag{2.3}$$

希望求解哈密顿量的本征值问题，本征方程为:

$$\hat{H}_{\text{bulk}}\left|\Psi_n(k)\right\rangle=E_n(k)\left|\Psi_n(k)\right\rangle \tag{2.4}$$

其中 $n\in\{1,\ldots,2N\}$[1]。为求解这个方程，对解做拟设，首先写出离散形式中对应的平面波:

$$|k\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{m=1}^{N}e^{imk}|m\rangle,\qquad\text{for } k\in\{\delta_k,2\delta_k,\ldots,N\delta_k\}\qquad\text{with } \delta_k=\frac{2\pi}{N} \tag{2.5}$$

[1]这里是单粒子哈密顿量，不同格点之间的 Hilbert 空间为直积而非张量积关系，因此总维度是 2N 而不是 2^N

k 的取值为第一 Brillouin 区。由于哈密顿量具有 *internal* $\otimes$ *sites* 的形式，拟设解的形式为格点自由度与内禀自由度的张量积：$|\Psi_n(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle$；　$|u_n(k)\rangle = a_n(k)|A\rangle + b_n(k)|B\rangle$。其中 $|u_n(k)\rangle \in \mathscr{H}_{\text{internal}}$ 是动量空间中的体哈密顿量的本征态，定义为：

$$\begin{aligned} \hat{H}(k) &= \left\langle k \middle| \hat{H}_{\text{bulk}} \middle| k \right\rangle = \sum_{\alpha,\beta\in\{A,B\}} \langle k,\alpha\,| H_{\text{bulk}} \,| k,\beta\rangle \cdot |\alpha\rangle\langle\beta|; \\ \hat{H}(k)\,|u_n(k)\rangle &= E_n(k)\,|u_n(k)\rangle\,. \end{aligned} \tag{2.6}$$

这个形式的解看起来和 Bloch 定理很像，但在此是离散情况，并且还有内禀自由度

2.1 Peierls 相变

一维完美的格点是不稳定的，总会发生二聚化形成绝缘体，这称为 Peierls 相变。对于晶格间距为 a 的一维格点，紧束缚模型给出能带：

$$\varepsilon_1(k) = -t\left[e^{ika} + e^{-ika}\right] = -2t\cos(ka) \tag{2.7}$$

假设发生二聚化，跃迁系数可以近似为：$t'(a \pm 2b) \approx t \pm 2b * \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}a} = t \pm b * q_0 = t \mp \Delta$，此时紧束缚模型给出两条能带：

$$\begin{aligned} H_2 &= \begin{bmatrix} 0 & (t+\Delta) + (t-\Delta)\cdot e^{-i2ka} \\ (t+\Delta) + (t-\Delta)\cdot e^{i2ka} & \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 2e^{-ika}[t\cos(ka) + i\Delta\sin(ka)] \\ 2e^{ika}[t\cos(ka) - i\Delta\sin(ka)] & \end{bmatrix} \\ \Rightarrow &\quad \varepsilon_2(k) = \pm 2\sqrt{t^2\cos^2(ka) + \Delta^2\sin^2(ka)} \end{aligned} \tag{2.8}$$

此时能带具有能隙。再考虑二聚化使得院子之间的能量发生的变换，一维声子的色散关系为：

$$\omega = \sqrt{\frac{4K}{M}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right| \tag{2.9}$$

二聚化相当于一个波矢为 $\frac{\pi}{a}$，振幅为 b 的格波，对应的能量为：

$$\begin{aligned} \Delta E_\ell &= N \cdot \frac{1}{2} M \omega_{q=\frac{\pi}{a}}^2 b^2 \\ &= N \cdot 2Kb^2 \end{aligned} \tag{2.10}$$

由于能隙打开使得电子的能量改变量为:

$$
\begin{aligned}
\Delta E_e &= \frac{Na}{2\pi}\int_{-\pi/2a}^{\pi/2a}[\varepsilon_2(k)-\varepsilon_1(k)]\,\mathrm{d}k \\
&= -2t\frac{Na}{2\pi}\int_{-\pi/2a}^{\pi/2a}\left[\sqrt{\cos^2(ka)+\frac{\Delta^2}{t^2}\sin^2(ka)}-\cos(ka)\right]\mathrm{d}k \\
&= -2t\frac{N}{\pi}\int_0^{\pi/2}\left[\sqrt{\cos^2(\theta)+\frac{\Delta^2}{t^2}\sin^2(\theta)}-\cos(\theta)\right]\mathrm{d}\theta \\
&= -2t\frac{N}{\pi}\int_0^{\pi/2}\left[\sqrt{\cos^2(\theta)+\frac{\Delta^2}{t^2}\sin^2(\theta)}-\cos(\theta)\right]\mathrm{d}\theta \\
&= -2t\frac{N}{\pi}\left[\int_0^{\pi/2}\sqrt{1-(1-\lambda)\sin^2(\theta)}\mathrm{d}\theta-1\right]
\end{aligned} \tag{2.11}
$$

此积分杜对于 λ 很小时可以近似给出: $E(1-\lambda)=1+\lambda\left[a_1-\frac{1}{4}\ln(\lambda)\right]+\mathcal{O}\left(\lambda^2\right)$, $a_1=0.463$，总能量的改变为声子与电子两部分的和:

$$
\begin{aligned}
\Delta E_t &= \Delta E_\ell+\Delta E_e \\
&= N\lambda[\alpha+\beta\ln\lambda] \\
\alpha &= \frac{2Kt^2}{q_0^2}-\frac{a_1 t}{\pi},\quad \beta=\frac{t}{\pi}
\end{aligned} \tag{2.12}
$$

稳定的构型对应的 b 由能量极值给出: $\frac{\mathrm{d}\Delta E_t}{\mathrm{d}\lambda}=0$，则有:

$$
\begin{aligned}
\ln\lambda &= -\frac{\alpha+\beta}{\beta} \\
\Delta E_t &= N\beta\exp\left(-\frac{\alpha+\beta}{\beta}\right)
\end{aligned} \tag{2.13}
$$

可以看出只要 $\beta>0$，对任意的 α,β 二聚化总是使得能量下降。

2.2 边界态

当考虑热力学极限时，本征态出现两种行为: 局域与非局域，分别称为边界态与体态。当取完全二聚化的极限时，两种态的区别是非常明显的，我们将这个极限为做过渡。

v=1, w=0 的情况称为平凡的，此时本征态局域在二聚体内：

$$v=1, w=0: \quad \hat{H}(|m,A\rangle \pm |m,B\rangle) = \pm(|m,A\rangle \pm |m,B\rangle) \tag{2.14}$$

v=0, w=1 的情况称为拓扑的，此时本征态局域在两个二聚体间：

$$v=0, w=1: \quad \hat{H}(|m,B\rangle \pm |m+1,A\rangle) = \pm(|m,B\rangle \pm |m+1,A\rangle) \tag{2.15}$$

很显然，此时哈密顿量不涉及边界上的两个态，因此出现两个零能态：

$$v=0, w=1: \quad \hat{H}|1,A\rangle = \hat{H}|N,B\rangle = 0 \tag{2.16}$$

2.3 手征对称性

一个哈密顿量是手征对称的，如果它满足下列条件：

$$\hat{\Gamma}\hat{H}\hat{\Gamma}^\dagger = -\hat{H} \tag{2.17}$$

其中 $\hat{\Gamma}$ 是一个满足一些要求的幺正算符：

1. 幺正且厄米：$\hat{\Gamma}^\dagger\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^2 = 1$
2. $\hat{\Gamma}$ 在子格点上局域，即在不同元胞间没有矩阵元。
3. Robus。固体物理中的哈密顿量总是依赖于一系列参数 $\xi \in \Xi$，它们对应的哈密顿量总是具有如下对称性：

$$\forall \underline{\xi} \in \Xi: \quad \hat{\Gamma}\hat{H}(\underline{\xi})\hat{\Gamma} = -\hat{H} \tag{2.18}$$

可以定义两个正交投影算符：

$$\hat{P}_A = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \hat{\Gamma}); \quad \hat{P}_B = \frac{1}{2}(\mathbb{I} - \hat{\Gamma}), \tag{2.19}$$

哈密顿量可写为：

$$\hat{P}_A\hat{H}\hat{P}_A = P_B\hat{H}\hat{P}_B = 0; \quad \hat{H} = \hat{P}_A\hat{H}\hat{P}_B + \hat{P}_B\hat{H}\hat{P}_A \tag{2.20}$$

具有手征对称性的哈密顿量，每个能量为 E 的本征态，总有一个手征伴：

$$\hat{H}\left|\psi_n\right\rangle = E_n\left|\psi_n\right\rangle \quad \Longrightarrow \hat{H}\hat{\Gamma}\left|\psi_n\right\rangle = -\hat{\Gamma}\hat{H}\left|\psi_n\right\rangle = -\hat{\Gamma}E_n\left|\psi_n\right\rangle = -E_n\hat{\Gamma}\left|\psi_n\right\rangle \tag{2.21}$$

这暗示了零能态的特殊。对于非零能态，由于不同本征值的本征态之间的正交性，显然有：

$$\text{If } E_n \neq 0: \quad 0 = \left\langle \psi_n | \hat{\Gamma} | \psi_n \right\rangle = \langle \psi_n \left| P_A \right| \psi_n \rangle - \langle \psi_n \left| P_B \right| \psi_n \rangle . \tag{2.22}$$

零能态总是能选取为只在一个子格点上波函数非零，因为

$$\text{If } \hat{H} \left| \psi_n \right\rangle = 0: \quad \hat{H} \hat{P}_{A/B} \left| \psi_n \right\rangle = \hat{H} \left(\left| \psi_n \right\rangle \pm \hat{\Gamma} \left| \psi_n \right\rangle \right) = 0 \tag{2.23}$$

SSH 模型的手征对称性是显然的，选取：

$$\hat{P}_A = \sum_{m=1}^{N} |m, A\rangle \left\langle n, A \right|; \qquad \hat{P}_B = \sum_{m=1}^{N} \left| m, B \right\rangle \langle n, B|. \tag{2.24}$$

那么有 $\hat{\Sigma}_z = \hat{P}_A - \hat{P}_B$，可以验证

$$\hat{P}_A \hat{H} \hat{P}_A = \hat{P}_B \hat{H} \hat{P}_B = 0; \quad \Longrightarrow \quad \hat{\Sigma}_z \hat{H} \hat{\Sigma}_z = -\hat{H} \tag{2.25}$$