

附录：量子力学角度的离散晶体平移算符的对称性

离散晶格平移算符

除了宇称是一个典型的离散对称性外，我们还可以考虑晶体的单元平移，这也是离散的对称操作。

考虑固体中的一个周期势场： $V(x) = V(x + n \cdot a)$

类似于之前连续平移算符的性质，现在我们的离散平移操作 $T(a)$ 定义下，自然也有 $T^\dagger(a)xT(a) = x + a$ 。而 V 是 x 的函数，那么就会有 $T^\dagger(a)V(x)T(a) = V(x + a) = V(x)$ ，即 T 与 V 对易，而固体的哈密顿算符 H 中的 P^2 动量部分显然也与 T 对易，故有最终我们有 $[H, T] = 0$ ，这说明固体周期里的粒子具有离散平移对称性。

问题来到，由于上述的对易关系，那么哈密顿的本征态也会有离散对称性，而我们尚且不知道这种态长啥样，我们只知道，我们可以采取一些合理的近似，猜一猜。首先假如原胞彼此作用微弱，即假设每个原胞中的电子只束缚于本地，而仅有极少部分溢出到旁边的晶胞。那么整个体系由 N 个完全上述一样的电子波函数构成，各自的能量显然是一样的，都是能量简并态。那么我们能否通过这些态的线性组合，即一种“简并微扰”的方法，把这些态变为不简并的态，这样我们之前的定理就起作用了，此时不简并的态在 $[H, T] = 0$ 下就必定有宇称，这就是我们想要的本征态。(这样的近似在固体物理里就是TBA紧束缚近似)

因此，我们标记第 n 个晶胞里的波函数为 $|n\rangle$ ，其满足 $\langle n|H|n\rangle = E_0$ ，即有相同能量 E_0 ，且假设邻近的重叠对应能量 $\langle n \pm 1|H|n\rangle = -\Delta \neq 0$ 。则根据上述条件，我们可以找到哈密顿算符作用在态上面的结果是

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

下面我们该如何操作呢，我们发现叠加 $|n\rangle$ ，定义一个新的态为

$$|k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inka} |n\rangle, \quad -\pi \leq ka < \pi$$

则此时对这个态，我们可以证明其满足 $T(a)|k\rangle = e^{-ika}|k\rangle$

将 $T(a)$ 作用在 $|k\rangle$ 上：

$$T(a)|k\rangle = T(a) \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inka} |n\rangle \right).$$

交换求和和算符：

$$T(a)|k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inka} T(a)|n\rangle.$$

根据 $T(a)|n\rangle = |n+1\rangle$ ，我们有：

$$T(a)|k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inka} |n+1\rangle.$$

令 $m = n + 1$ ，则 $n = m - 1$ ，且当 $n \rightarrow \pm\infty$ 时， $m \rightarrow \pm\infty$ 。因此，求和可以改写为：

$$T(a)|k\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i(m-1)ka} |m\rangle.$$

将相位因子拆开：

$$T(a)|k\rangle = e^{-ika} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{imka} |m\rangle.$$

注意到 $|m\rangle$ 是求和变量，可以重新标记为 $|n\rangle$ （因为求和指标是任意的），所以：

$$T(a)|k\rangle = e^{-ika} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inka} |n\rangle = e^{-ika} |k\rangle.$$

此即证明了 $|k\rangle$ 是离散平移算符 $T(a)$ 的本征态，对应的本征值为 e^{-ika}

那么此时系统就具有宇称了，并且我们再来看看其对应的能量本征值

$$\begin{aligned} H|k\rangle &= \sum_n e^{inka} (E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle) \\ &= E_0 \sum_n e^{inka} |n\rangle - \Delta \sum_n (e^{ikan-ika} + e^{ikan+ika}) |n\rangle \\ &= E_0 |k\rangle - 2\Delta \cos ka |k\rangle \\ &= (E_0 - 2\Delta \cos ka) |k\rangle \end{aligned}$$

因此这证明了这个态是能量本征态，也拿到了本征值，而其中， E 关于 ka 的函数就是固体物理中的能带定义。

布洛赫波的构造与证明

我们进一步考虑上述的构造出来的波函数在坐标表象的波函数的形式。

首先将其投影到坐标基上就是 $\langle x' | T(a) | k \rangle$

那么代入定义，进行演算

$$\begin{aligned}\langle x'|T(a)|k\rangle &= \langle x'|e^{-ika}|k\rangle \\ \langle x'-a|k\rangle &= e^{-ika}\langle x'|k\rangle\end{aligned}$$

左上到右上利用上面求过的本征值即可，随后把值提取出来得到右下。而平移算符对坐标基的作用是早已学过的，于是左上直接得到左下。此时，我们观察第二行左右两边，这正是坐标表象的波函数

$$\psi_k(x'-a) = e^{-ika}\psi_k(x')$$

这说明周期性体系的能量本征函数必定具有上述的性质，满足这个条件的波函数，其通解是

$$\psi_k(x') = e^{ikx'}u_k(x')$$

其中满足 $u_k(x') = u_k(x' + a)$ ，这就是布洛赫波。下面我们求出 $u_k(x')$ 的具体形式。

考虑

$$\begin{aligned}\psi_k(x') &= \langle x'|k\rangle = \sum_n e^{inka}\langle x'|n\rangle \\ &= e^{ikx'} \left[\sum_n e^{inka-ikx'} \langle x'|n\rangle \right]\end{aligned}$$

因此我们就通过提取因子的形式，凑出来了中括号外满足上面的布洛赫条件，那么自然中括号内就是我们要求的 $u_k(x') = \sum_n e^{inka-ikx'} \langle x'|n\rangle$ 的具体形式

我们也可以演算一下这个形式的周期性是不是满足的：

$$\begin{aligned}u_k(x' + a) &= \sum_n e^{inka-ik(x'+a)} \langle x' + a|n\rangle \\ &= e^{-ika} \sum_n e^{inka-ikx'} \langle x'|T^\dagger(a)|n\rangle \\ &= e^{-ika} \sum_n e^{inka-ikx'} \langle x'|n-1\rangle \\ &= e^{-ika} \sum_m e^{i(m+1)ka-ikx'} \langle x'|m\rangle \quad (\text{令 } m = n - 1) \\ &= e^{-ika} \cdot e^{ika} \sum_m e^{imka-ikx'} \langle x'|m\rangle \\ &= \sum_m e^{imka-ikx'} \langle x'|m\rangle \\ &= u_k(x')\end{aligned}$$

上述第一行代入定义，第二行提取相位因子并且内积部分抽取平移算符，将算符作用在右矢得到第三行。随后就是换元，由于求和是无穷的，因此改为 m 后求和范围不变，随后再提取一个相位因子得到第五行，最后消除得到第六行，这就是布洛赫函数的定义，证毕。

SSH模型

考虑之前的紧束缚近似下各个格点的波函数

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

一般而言简单起见我们会设 $E_0 = 0$ ，那么现在我们可以采用投影算符的写法改写哈密顿算符的形式

$$H = -\Delta \sum_{i=1} (|i+1\rangle\langle i| + |i\rangle\langle i+1|)$$

其跟原来的形式本质一样，作用于 $|n\rangle$ 时仅当 $i = n$ 和 $i = n-1$ 时会产生上述两个 Δ 项

因此可以把这种“投影”利用记号 $|i+1\rangle\langle i| = c_{i+1}^\dagger c_i$ ，这种记号是更方便的

于是此时写作

$$H = -\Delta \sum_{i=1} (c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1})$$

考虑之前证明过的哈密顿算符的本征波函数，简单起见设晶格常量 $a = 1$ ，函数形式为 $|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ink} |n\rangle$

其也是平移算符的本征函数，平移本征值对应 $T(a)|k\rangle = e^{ik}|k\rangle$

能量本征值有 $H|k\rangle = -2\Delta \cos k|k\rangle$

很显然当波矢 $k = 0$ 时相当于所有格点上的子波函数 $|n\rangle$ 同相叠加，自然此时能量最低 $E = -2\Delta$

当波矢 $k = \pm\pi$ 时代表各个格点的波函数邻居彼此之间异相，则此时能量最高 $E = 2\Delta$

显然 $\Delta = 0$ 时，不同格点间无相互作用，因此同相或者异相无有差别，从而上述的分立的能级处处相等，此时退化为简并的情况。

上述是我们固体物理学过的内容，也是上节课从新的思路证明过的内容，下面我们考虑固体物理里学的另一种情况。

双原子周期长链

考虑聚乙炔ABABAB式的晶格，双键链接的两个原子为一个晶格单元，晶格单元之间用单键连接，这两个键长度不一样。先前的波函数假定是每个晶胞是一个波函数，此时晶胞内部两个原子地位是不相等

的，因此应该假设其各自有一套波函数，因此此时我们的波函数标记为 $|n, A\rangle$ 和 $|n, B\rangle$ ，即除了晶胞标记 n 之外还有内部的原子标记 A, B

则此时对这两套波函数作用哈密顿算符，考虑邻居的作用，可以近似认为是如下的形式(我们这里为了简便起见，也假设了 $E_A = 0, E_B = 0$)

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

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

即靠左边的A原子会跟上一格点的B以及本格点的B原子有作用，B原子也类似。

用类似于之前的投影的形式写：

$$H = -\Delta_1 \sum_i (|i, B\rangle\langle i, A| + |i, A\rangle\langle i, B|) \\ - \Delta_2 \sum_i (|i-1, B\rangle\langle i, A| + |i, A\rangle\langle i-1, B|)$$

这就是Su - Schrieffer - Heeger 即SSH模型，这个模型求解并不轻松，此外其带有的物理意义也很丰富，因此我们慢慢来。

首先，我们可以考虑把 $|n, \alpha\rangle$ 记作 $|n\rangle \otimes |\alpha\rangle \in \mathcal{H}_{\text{external}} \otimes \mathcal{H}_{\text{internal}}$ ，即把波函数进行拆分，分为内部和外部自由度的波函数的直积，这里外部代表着周期场，周期性晶格等等，内部则代表AB原子之间的影响。

考虑周期体系中，晶胞内部是自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子，即把上面的AB看作是上下自旋的粒子，显然上下自旋对应内部子空间 $\mathcal{H}_{\text{internal}}$ ，这一部分的哈密顿算符是泡利算符。

$$\text{即用到 } \sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{以及 } \sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

作用到不同自旋态上结果不同，上面泡利算符如果不用矩阵形式，写成投影的形式那自然就是 $\sigma_+ = |\uparrow\rangle\langle\downarrow| = |A\rangle\langle B|$ ，其他的也类似

因此，上面的总哈密顿算符可以拆成晶格部分投影算符 $|i\rangle\langle i|$ 和泡利算符直积的形式

$$H = -\Delta_1 \sum_{i=1} |i\rangle\langle i| \otimes \sigma_x - \sum_{i=1} (|i\rangle\langle i+1| \otimes \sigma_- + \Delta_2 |i+1\rangle\langle i| \otimes \sigma_+)$$

我们希望找出符合对称性的该哈密顿的本征态 $|k\rangle$

但是需要注意此时本征函数和本征值的形式是

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

$$|\psi_k(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle = e^{ikx}|u_n(k)\rangle$$

即波函数除了 k 以外，现在额外要下标 $n = A, B$ 来标记解

考虑到哈密顿的拆分允许分为晶格波函数和上面讨论的自旋波函数，因此现在 H 的作用，如果只作用到晶格波函数上，此时哈密顿算符还剩余自旋矩阵部分没有被消耗，已经消耗掉受到的影响用 k 来作为变量标记，即

$$\langle k|H|k\rangle \equiv H(k)$$

展开来就是

$$\begin{aligned}\langle k|H|k\rangle &= -\Delta_1 \sum_i \langle k|i\rangle \langle i|k\rangle \otimes \sigma_x - \Delta_2 \sum_i [\langle k|i\rangle \langle i+1|k\rangle \otimes \sigma_- + \langle k|i+1\rangle \langle i|k\rangle \otimes \sigma_+] \\ &= -\Delta_1 \sigma_x - \Delta_2 e^{-ik} \sigma_- - \Delta_2 e^{ik} \sigma_+ \\ &= (-\Delta_1 - \Delta_2 \cos k) \sigma_x - \Delta_2 \sin k \cdot \sigma_y - 0 \cdot \sigma_z \\ &= -\vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma}\end{aligned}$$

(或者展开成2*2泡利矩阵的形式，也一样)

$$\begin{aligned}\langle k|H|k\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & -\Delta_1 - \Delta_2 e^{-ik} \\ -\Delta_1 - \Delta_2 e^{ik} & 0 \end{pmatrix} \\ \langle k|H|k\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & -\Delta_1 - \Delta_2 \cos k + i\Delta_2 \sin k \\ -\Delta_1 - \Delta_2 \cos k - i\Delta_2 \sin k & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

这里第一行利用了上面哈密顿算符的定义，左右各作用了态矢量，然后要利用晶格波函数的正交归一性(由于分离了晶格空间，因此这里的波函数其实就是普通的平面波) $\langle j|k\rangle = e^{i(k-j)}$ ，于是得到第二行。然后欧拉公式展开指数，对余弦部分的泡利矩阵相加正是 σ_x 的定义于是合并，对于正弦部分类似，这里额外插入一下0的分量，方便最后一行定义矢量的运算

$$\vec{d}(k) = (\Delta_1 + \Delta_2 \cos k, \Delta_2 \sin k, 0)$$

现在我们发现这里 $-\vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma}$ 形似磁场哈密顿算符

$$-\vec{B} \cdot \vec{\mu} = -\mu_0(B_x \sigma_x + B_y \sigma_y + B_z \sigma_z)$$

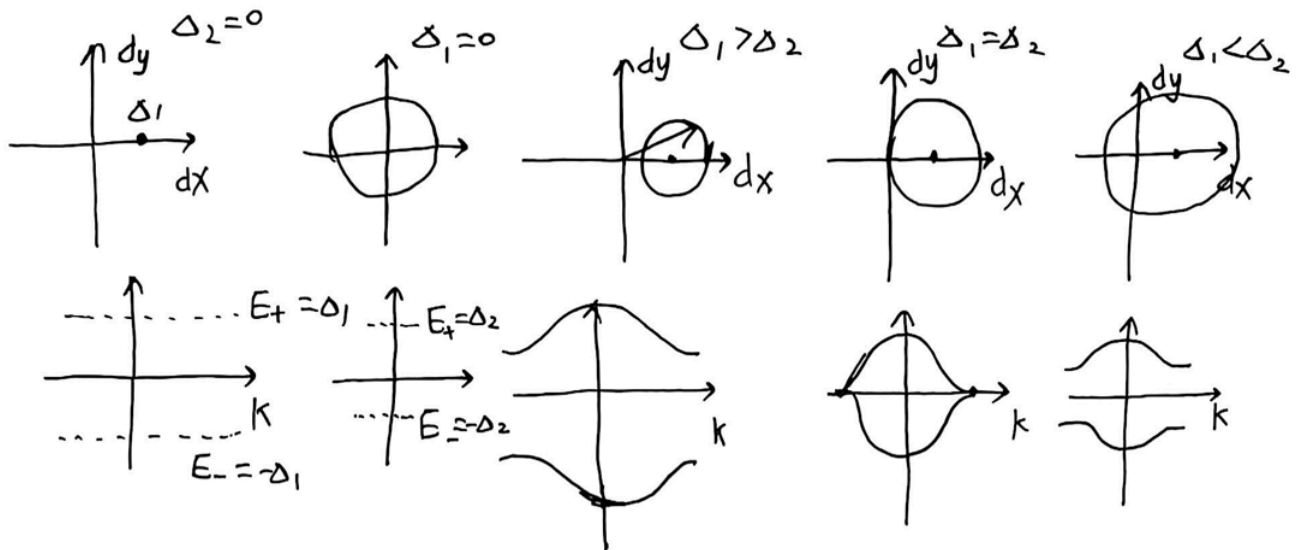
因此我们说矢量 \vec{d} 充当了一个类似于磁场 \vec{B} 的作用

同样地考虑之前的结论，磁场影响下导致粒子的上下自旋的能级分裂，其能量差正比于磁场，类似地，这里在矢量 \vec{d} 的影响下，对应求解薛定谔方程得到的本正能量，结论和之前是一样的

$$E_{\pm}^{(k)} = \pm |\vec{d}| = \pm \sqrt{\Delta_1^2 + \Delta_2^2 + 2\Delta_1\Delta_2 \cos k}$$

下面，我们考虑矢量 \vec{d} 的取值，以及对应的能量 $E_{\pm}^{(k)}$ 的变化

- i. 如图一，当 $\Delta_2 = 0$ 时，即不同格点间无作用，此时矢量 \vec{d} 的可能取值范围在 $d_x - d_y$ 平面内是一个点，对应的能量随矢量 \vec{d} 模的变化是如第二行图一所示，上下两条带都是常数 $E_{\pm}^{(k)} = E_{\pm} = \pm \Delta_1$
- ii. 当 $\Delta_1 > \Delta_2 \neq 0$ 时，如图三，此时矢量 \vec{d} 的可能取值是一个圆，这是很容易看出来的因为上面定义这个矢量的时候用了三角函数，因此是一个圆心在 $(\Delta_1, 0)$ ，半径为 Δ_2 的圆，其对应的能量此时会随着矢量的模变化而变化，显然其形状如第二行图三所示。
- iii. 当恰好 $\Delta_1 = \Delta_2$ 时，以及更进一步 $\Delta_1 < \Delta_2$ 时候，则如图四图五所示。对于图二，也是一样的分析。



Berry 相位与极化率的关联

现在问题出现，先前讨论磁场的变化绝热近似的时候，我们考虑了Berry 相位(几何相位)，那么现在假设我们的电子会沿着波矢 k 运动，即也就是说沿着 \vec{d} 运动，但是上面又说明了 \vec{d} 类比为外磁场，因此在图中绕圆一圈，即使波矢归位，但类似地，这仍然会引起 **Berry 相位**

但是需要注意，先前讨论几何相位时，我们证明了几何相位对应路径张成的空间角，而磁场是垂直于 z 方向的，因此张成的空间角很好分析，但是现在问题出现了。现在的 \vec{d} 所绕的圈是基于 $x - y$ 空间的，这对应的空间角，在拓扑学上，要非常注意。

- $\Delta_1 > \Delta_2$ 时：如图三，此时绕一圈是不张成空间角的，无 Berry 相位，无极化率。

- $\Delta_1 < \Delta_2$ 时：如图五，此时注意绕一圈，张成了 2π 角，因此Berry 相位 $\gamma_B = \frac{2\pi}{2} = \pi$ ，即带来了负号相位，此时体系有极化率。

图三和图五的区别只是绕圈，看上去差别是圈是否包含了原点，但是这在拓扑学上是本质的区别，因此由此导致的相位是完全不一样的。

需要注意的是，上面讨论的相位是有物理意义的，比如极化率

在 SSH 模型（或类似一维晶格）中，极化率描述的是“晶格中电荷的宏观有序分布”，本质是微观键偶极矩（bond dipole）的宏观累加

晶格中，相邻格点 i 和 $i + 1$ 间的电子分布会形成“键”，若电子云偏向 i 或 $i + 1$ ，就会产生 **键偶极矩** $\vec{p}_{\text{bond},i}$ （类比电偶极矩 $\vec{p} = q\vec{l}$ ， \vec{l} 是电荷偏移距离）。

宏观极化 \vec{P} 是所有键偶极矩的密度（单位体积累加）：

$$\vec{P} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{p}_{\text{bond},i}$$

在周期性体系中，电子态用布洛赫波描述：

$$|\psi_{n,k}\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle = e^{ikx} |u_n(k)\rangle$$

其中 $|u_n(k)\rangle$ 是晶胞内周期性部分(这里额外用 n 标记能带，当然不标也无所谓)， k 是波矢。

Berry 联络定义为：

$$\mathcal{A}_k = i\langle u_k | \partial_k | u_k \rangle$$

通过“键偶极矩→宏观极化”的量子力学推导（利用电流算符、周期边界条件等），可得到 **一维体系极化率** 的拓扑形式：

$$P = \frac{e}{2\pi} \oint_{\text{BZ}} \mathcal{A}_k dk$$

其中 \oint_{BZ} 是对第一布里渊区（ $k \in [-\pi, \pi]$ ）的闭合回路积分。

物理意义：

- \mathcal{A}_k 是 Berry 联络，积分结果是 **Berry 相位** $\gamma_B = \oint_{\text{BZ}} \mathcal{A}_k dk$ （因 k 绕布里渊区一圈，对应参数空间闭合回路）。
- 由此极化率 P 与 Berry 相位直接关联： $P = \frac{e}{2\pi} \gamma_B$ 。

回到 SSH 模型，由于有效哈密顿的“参数空间”由 Δ_1, Δ_2 控制，对应布洛赫波 $|u_k\rangle$ 的 Berry 相位 γ_B 有上面讨论的两种拓扑相：

1. 拓扑平庸相 ($\Delta_1 > \Delta_2$)

- 此时，参数空间回路 (k 绕布里渊区一圈) 不包围简并点(原点)
- Berry 联络 \mathcal{A}_k 是“平庸”的 (可通过规范变换消去)，积分得 Berry 相位 $\gamma_B = 0$
- 对应极化率 $P = \frac{e}{2\pi} \cdot 0 = 0$ ，无宏观极化，电荷分布无序

2. 拓扑非平庸相 ($\Delta_1 < \Delta_2$)

- 此时，参数空间回路包围简并点(原点)
- Berry 联络 \mathcal{A}_k 无法通过规范变换消去，积分得 Berry 相位 $\gamma_B = \pi$
- 对应极化率 $P = \frac{e}{2\pi} \cdot \pi = \frac{e}{2}$ (有宏观极化，电荷分布有序)

3. 宏观极化的表现

- 拓扑非平庸相 ($\Delta_1 < \Delta_2$) 中， $P = \frac{e}{2}$ 意味着“每单位原胞”有 $\frac{e}{2}$ 的电荷偏移，宏观上表现为 固有电偶极矩 (类似电介质的极化)。
- 拓扑平庸相 ($\Delta_1 > \Delta_2$) 中， $P = 0$ 意味着电荷分布“中心对称”，无固有电偶极矩。

4. 极化率与拓扑相变

- 当 $\Delta_1 = \Delta_2$ 时，能隙闭合 ($|\vec{d}(k)| = 0$)，体系发生 拓扑相变：从平庸相 ($P = 0$) 转变为非平庸相 ($P = \frac{e}{2}$)。
- 这种“极化率突变”是拓扑相变的标志，对应 Berry 相位从0跃变到 π ，本质是参数空间回路从“不包围简并点”变为“包围简并点”

SSH模型的对称性保护

上面研究的 SSH 模型有 $\sigma_z^\dagger H \sigma_z = -H$ 对称性，这保护了 $d_z = 0$ ，因此使得矢量的运动绕圈不会在 $x - y$ 平面外，这个时候才会有上面的图三图五的区别。如果无法保证，那么图三图五假如都偏离 z 轴，那么在拓扑学上，这二者张成的空间角会对应的产生偏离，就不会严格为零和严格为 2π 了，此时的空间角可以自行积分计算。