第七章　拓朴绝缘体

7.1　拓扑绝缘体
7.2　最简单的拓扑绝缘体：SSH 模型
7.3　Winding number
7.4　零能边界态
7.5　Charge pumping
7.6　拓扑绝缘体的例子
7.7　拓扑半金属

Bloch 电子的几何结构/能带的几何结构

$$\mathcal{H} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) = \frac{(-i\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}})^2}{em} + V(\boldsymbol{r}) \qquad V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_l) = V(\boldsymbol{r})$$

$$\mathcal{H}\psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_n(\boldsymbol{k})\psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$$

$$\psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\theta_n(\boldsymbol{k})}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$$

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{k}) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathcal{H}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \frac{(-i\hbar\nabla_r + \hbar\boldsymbol{k})^2}{2m} + V(\boldsymbol{r})$$

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{k})u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_n(\boldsymbol{k})u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$$

- 确定能带指标，每个 k 对应一个波函数

$$\langle \boldsymbol{r}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle = u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\theta_n(\boldsymbol{k})+i\phi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})}|u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})|$$

- Bloch bundle
  第一布里渊区中所有 $|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle$ 组成一个 fibre bundle
  - 底流形为第一布里渊区
  - fibre 为 Bloch 波函数 $|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle$（或者其全局相位）
- 拓扑绝缘体的拓扑性是 Bloch bundle 的拓扑性

底流形（第一布里渊区）的拓扑

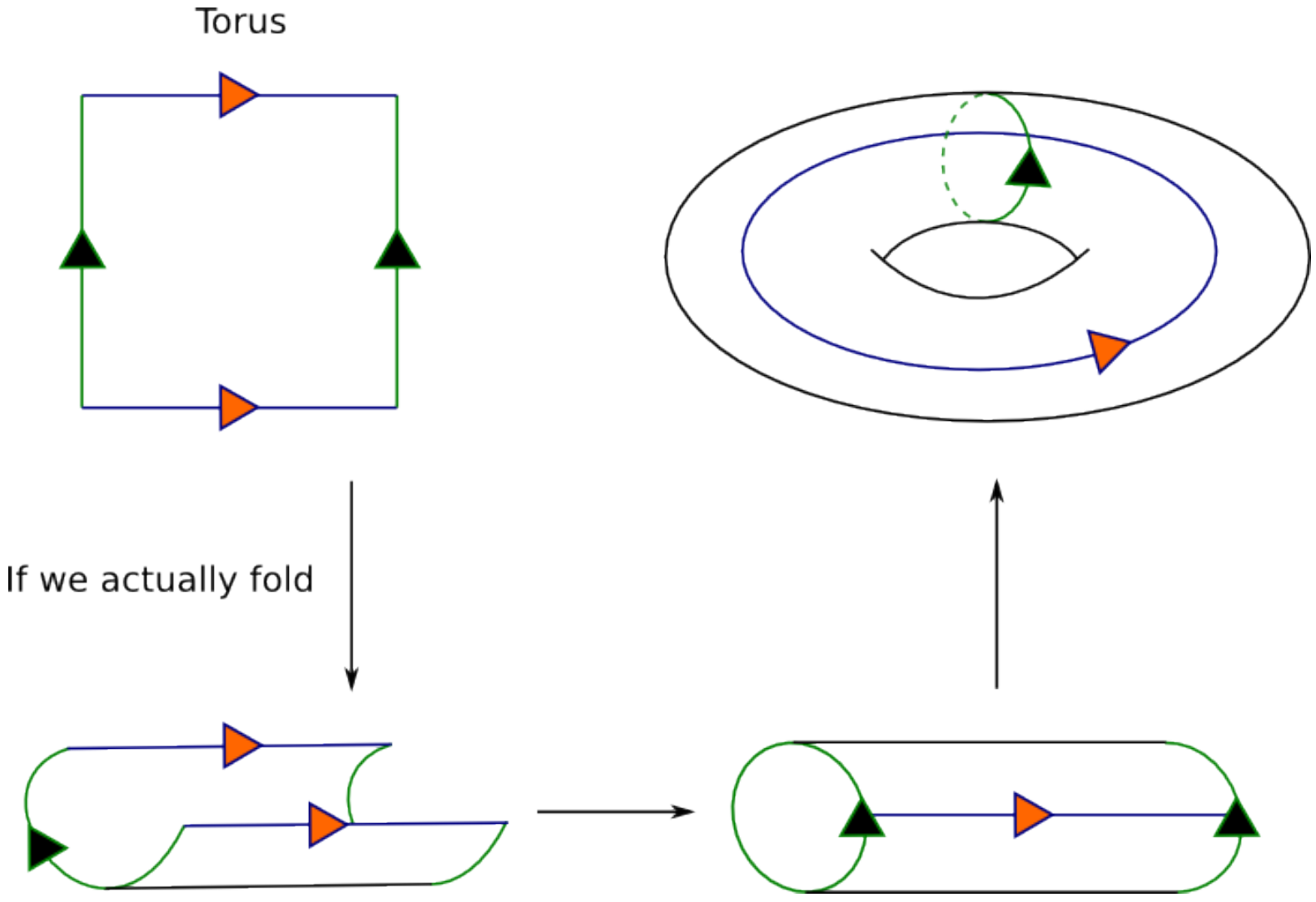
第一布里渊区的周期性

- 一维：$-\pi/a \Leftrightarrow \pi/a$，$|u_{n,-\pi/a}\rangle = |u_{n,\pi/a}\rangle$
  ☞一维第一布里渊区实际上是一个“直”圆环
- 二维：“直”环面（torus）
  - 方格子的第一布里渊区是“直”环面（四方环面，square torus）
  - 三角格子的第一布里渊区也是“直”环面（六角环面，hexagon torus）
- 三维：“直”高维环

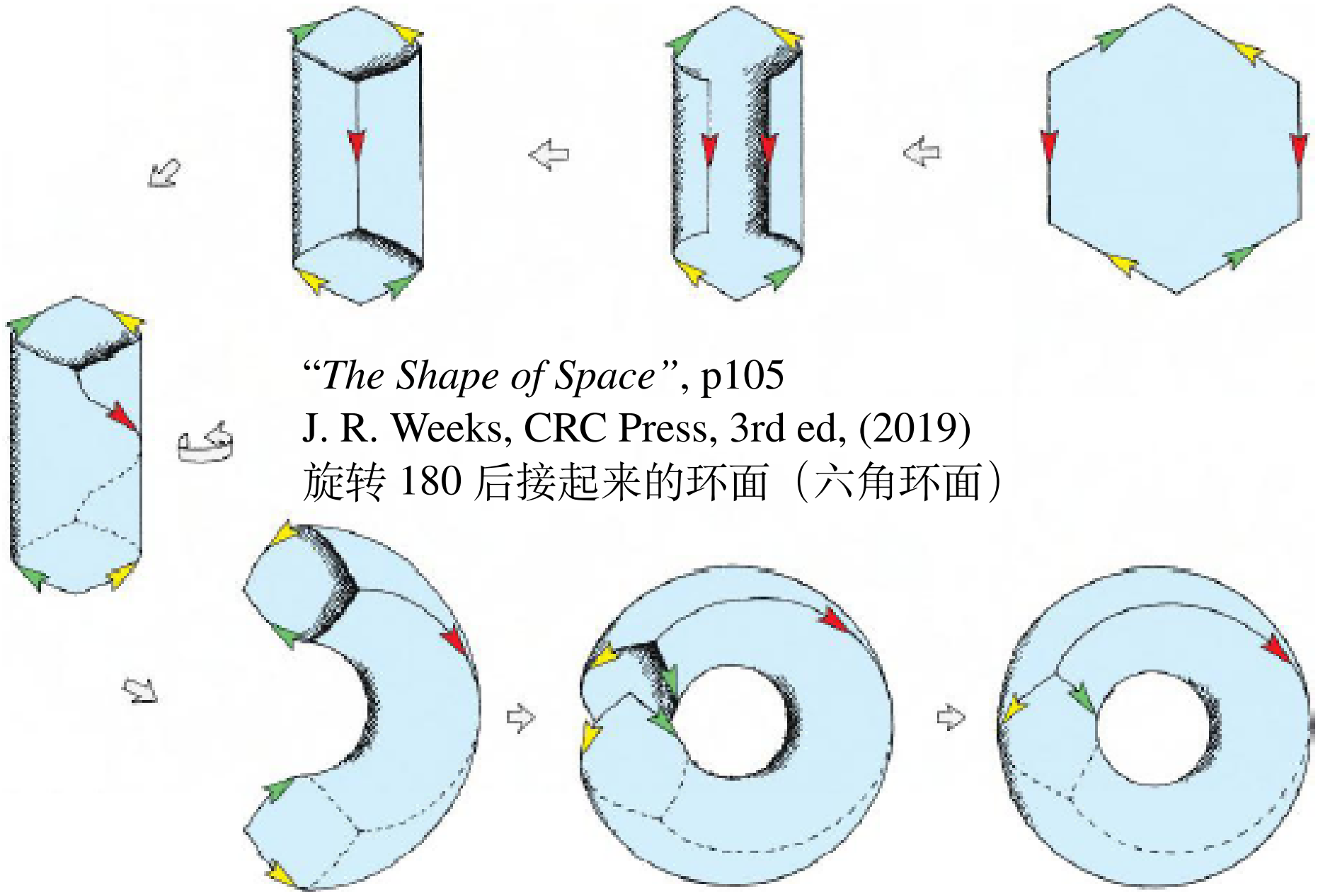
二维方格子的第一布里渊区

☞边长分别为 a, b 的方格子 $\Rightarrow$ 简单的环面（四方环面）

$(-\pi/a, k_y) \Leftrightarrow (\pi/a, k_y)$　　$(k_x, -\pi/b) \Leftrightarrow (k_x, \pi/b)$



二维三角格子的第一布里渊区

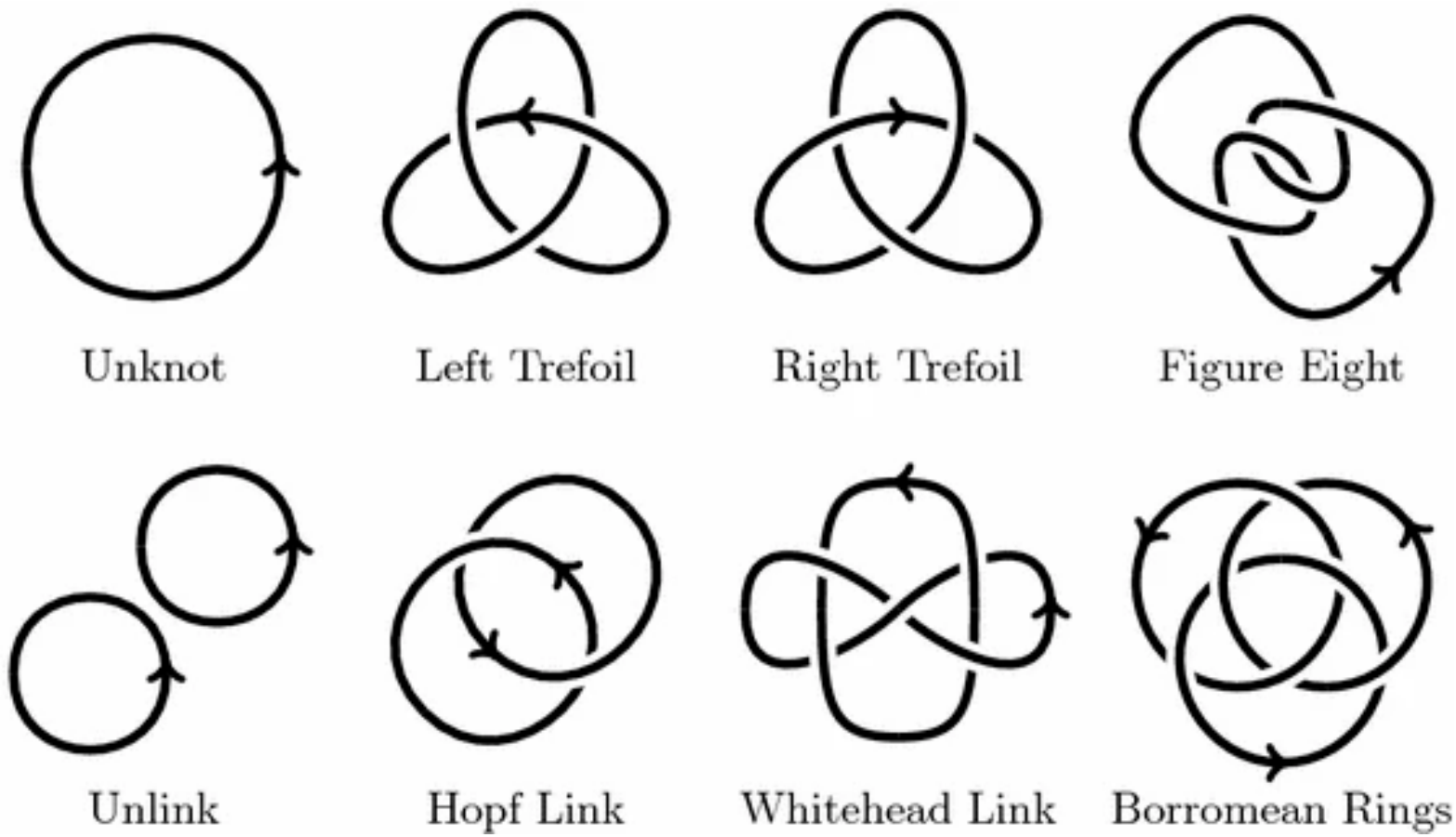


"*The Shape of Space*", p105
J. R. Weeks, CRC Press, 3rd ed, (2019)
旋转 180 后接起来的环面（六角环面）

二维三角格子的第一布里渊区

- 仍然是个环面，不过第二步粘贴时需要转 180 度
- 内禀（intrinsic）拓扑等价于普通（四方）环面
- 外禀（extrinsic）拓扑和普通环面不等价
  ⇒ 无法在三维空间里把六角环面变为四方环面

内禀（Intrinsic）vs 外禀（Extrinsic）topology



- 可以通过连续变换把一个东西变为另一个 ⇒ 内禀等价
- 可以在三维空间（嵌入空间）里通过连续变换把一个东西变为另一个 ⇒ 外禀等价
- 第一、二排内部都是内禀等价，但是外禀不等价
- 第一排和第二排内禀不等价

Bloch bundle 的几何 / 拓扑

☞Bloch bundle

- 底流形：$\boldsymbol{k}$ $\Rightarrow$ 第一布里渊区
  - 一维：“直”圆环
  - 二维：“直”环面
  - 三维：“直”高维环
- fibre：$|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle$ $\Rightarrow$ $u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\theta_n(\boldsymbol{k})+i\phi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})}|u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})|$

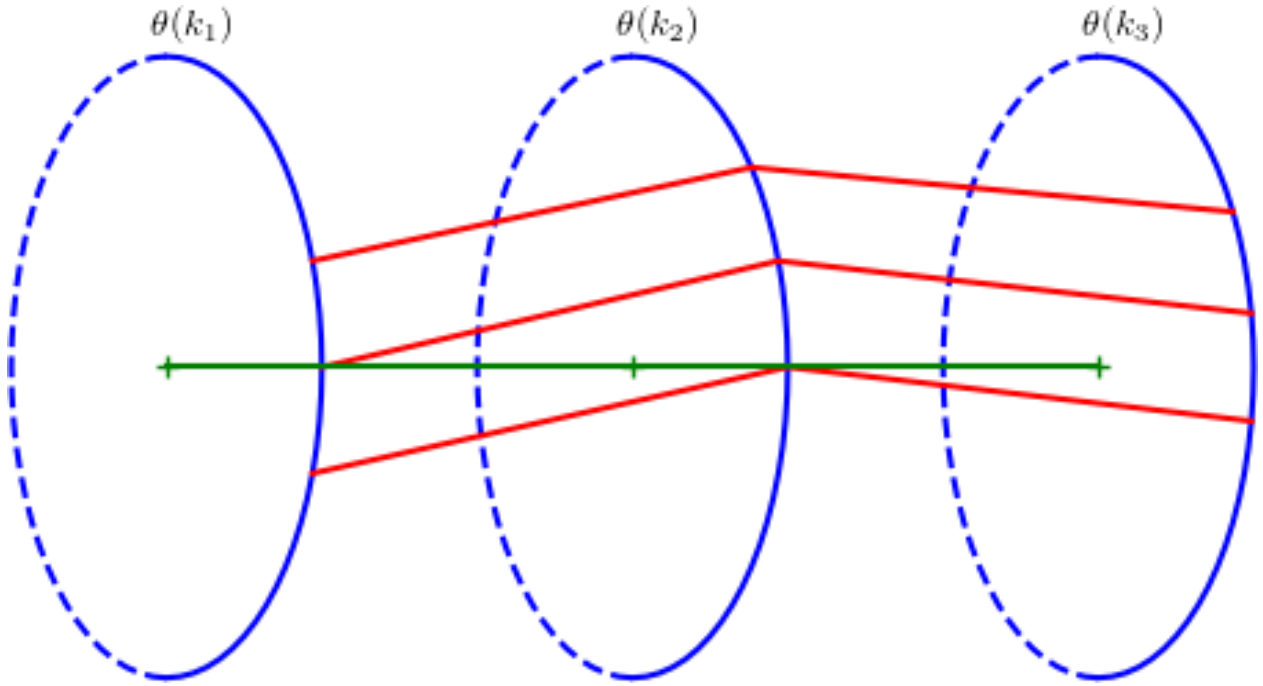
☞有很多种方法研究其拓扑性

- 全局相位：$U(1)$ bundle $e^{i\theta_n(\boldsymbol{k})}$
  ☞ Berry connection/Berry curvature
- 物理量：$\langle u_{n\boldsymbol{k}}|\hat{O}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle$

☞拓扑特征量：在某些允许的操作（拓扑变换）下不发生改变的量

Berry connection

["Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and the Berry Phase", Barry Simon, PRL **51**, 2167 (1983)]



绝热演化：连接不同 k 点的相位空间

$$|u_n(k+\delta k)\rangle \simeq |u_n(k)\rangle + \delta k \partial_k |u_n(k)\rangle$$

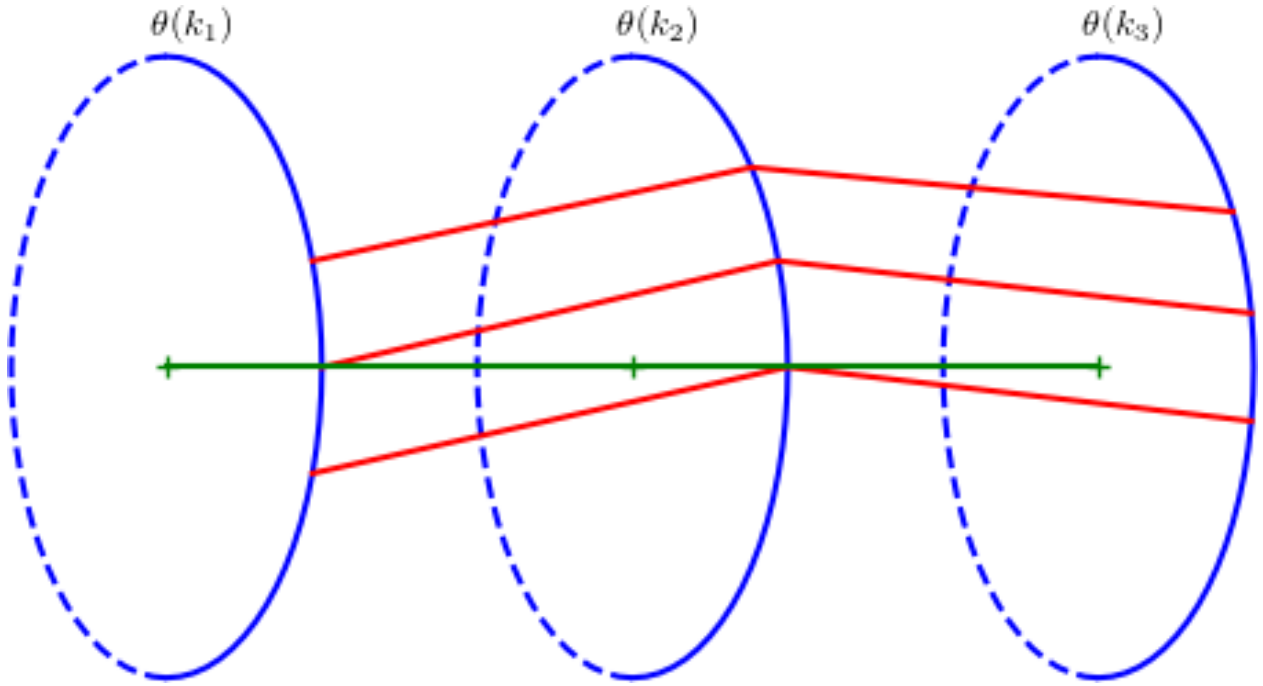
$$\simeq |u_n(k)\rangle - i\delta k |u_n(k)\rangle \quad [i\langle u_n(k)|\partial_k|u_n(k)\rangle] = \mathcal{A}_n(k)$$

$$= [1 - i\delta k \mathcal{A}_n(k)]|u_n(k)\rangle$$

$$\simeq e^{-i\delta k \mathcal{A}_n(k)}|u_n(k)\rangle$$

Berry connection

["Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and the Berry Phase", Barry Simon, PRL **51**, 2167 (1983)]



绝热演化：连接不同 k 点的相位空间

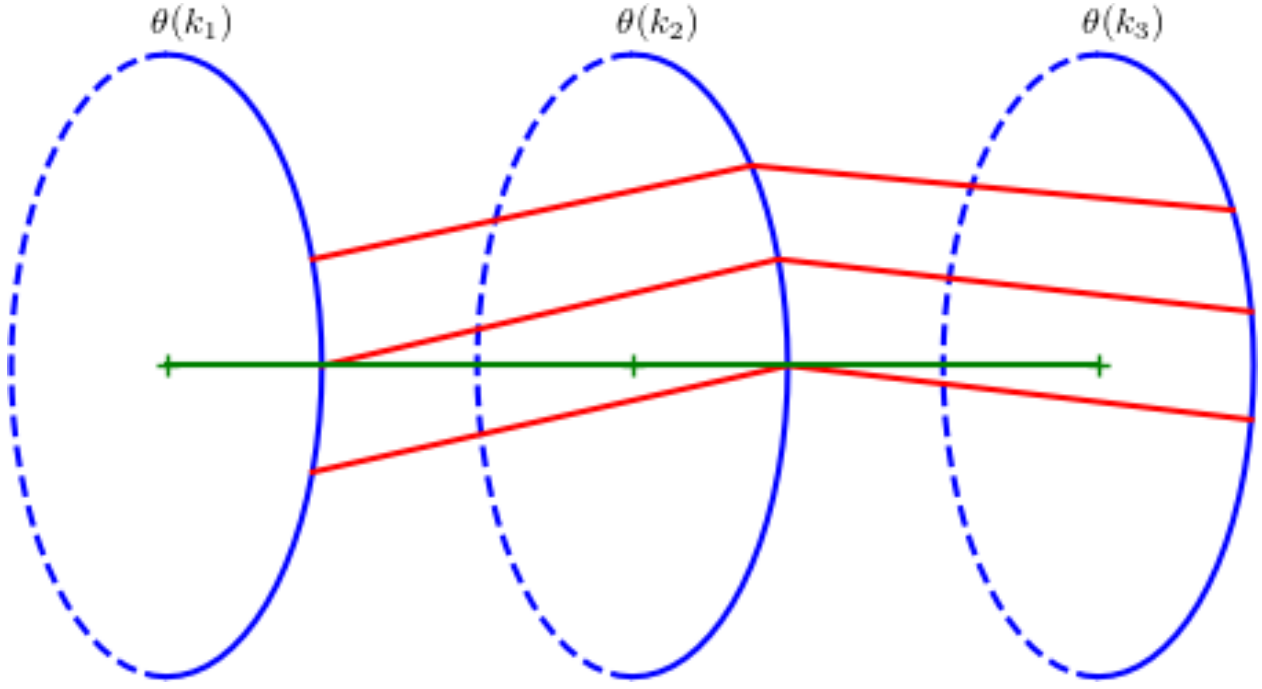
$$|\psi_n(k+\delta k)\rangle = e^{i\theta_n(k+\delta k)}|u_n(k+\delta k)\rangle = e^{i\theta_n(k+\delta k)-i\delta k\mathcal{A}_{n(k)}}|u_n(k)\rangle$$

$$\rightarrow e^{i\theta_n(k)}|u_n(k)\rangle$$

$$\theta_n(k+\delta k) = \theta_n(k) + \delta k\mathcal{A}_n(k) \qquad \boxed{\text{Zak phase}}$$

Berry connection

["Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and the Berry Phase", Barry Simon, PRL **51**, 2167 (1983)]

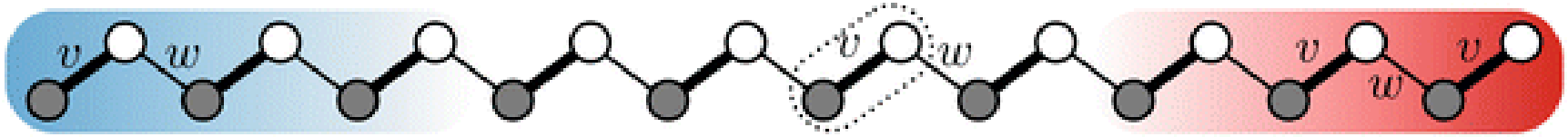


绝热演化：连接不同 k 点的相位空间

Berry connection: $\mathcal{A}_n(k) = i\langle u_n(k)|\partial_k|u_n(k)\rangle$

绝热演化 $\Rightarrow$ Bloch bundle 上的平行移动（Parallel transport）

最简单的拓扑绝缘体：SSH 模型



$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & v & 0 & 0 & \cdots & w \\ v^* & 0 & w & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w^* & 0 & v & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & v^* & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \cdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & w^* & 0 & v \\ w^* & 0 & 0 & 0 & v^* & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{m=1}^{N} \left[v|m, A\rangle\langle m, B| + w|m, B\rangle\langle m+1, A| + h.c. \right]$$

双原子分子链 $m, \alpha, m = 1, 2, \cdots, N, \alpha = A, B$；原胞大小 $2a = 1$。

Bloch 波函数：$|\psi_n(k)\rangle = e^{ik\hat{r}}|u_n(k)\rangle = e^{ik\hat{r}}[a_n(k)|A\rangle + b_n(k)|B\rangle]$

SSH model 的色散关系

$$|m,\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{ikm}|k\alpha\rangle$$

晶格常数 =1

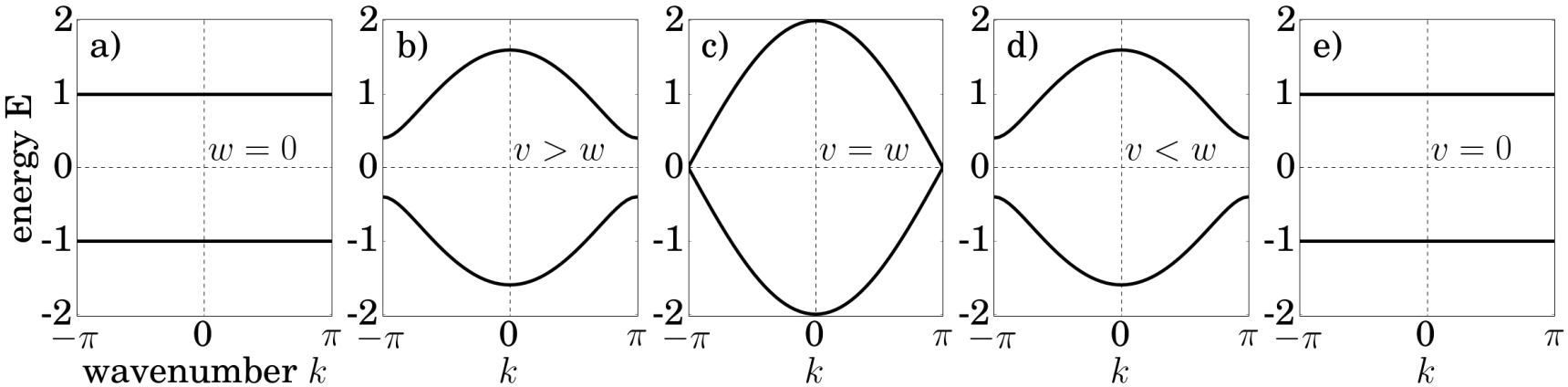
$$\mathcal{H} = \oplus_k \mathcal{H}(k)$$

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix} = (v + w\cos k)\sigma_x + w\sin k\sigma_y$$

$$= h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y$$

两能级系统 $\Rightarrow$ 磁场中 1/2 自旋

$$\varepsilon_\pm(k) = \pm\sqrt{h_x^2(k) + h_y^2(k)} = \pm\sqrt{v^2 + w^2 + 2vw\cos k}$$



☞ 从能级结构（色散关系）看，$|w| > |v|$ 和 $|w| < |v|$ 情况没有太大区别

SSH 模型的 Berry connection

$$\mathcal{H}(k) = (v + w\cos k)\sigma_x + w\sin k\sigma_y = h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y$$

☞SSH 模型的“磁场” $\mathbf{h}(k) = (h_x, h_y, 0)$ 限制在 $x-y$ 平面

$$\mathbf{h}(k) = (h_x(k), h_y(k), 0) = h(k)(\cos\phi_k, \sin\phi_k, 0)$$

$$|u_+(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ e^{i\phi_k}\end{pmatrix} \qquad |u_-(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-e^{-i\phi_k}\\ 1\end{pmatrix}$$

$$\mathcal{A}^{\pm}(k) = \langle u_\pm(k)|i\partial_k u_\pm\rangle = \mp\frac{1}{2}\frac{d\phi_k}{dk} \qquad \tan\phi_k = \frac{h_y(k)}{h_x(k)} = \tan^{-1}\frac{w\sin k}{v + w\cos k}$$

☞也可利用磁场中 1/2 自旋的 $\mathcal{A}^{\pm}(\mathbf{h})$ 直接算

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(k) &= i\langle u(k)|\partial_k u(k)\rangle = i\langle u(\mathbf{h}(k))|\partial_k u(\mathbf{h}(k))\rangle \\ &= i\langle u(\mathbf{h})|\sum_\mu \partial_k h_\mu(k)\partial_{h_\mu} u(\mathbf{h})\rangle = \sum_\mu [\partial_k h_\mu(k)] i\langle u(\mathbf{h})|\partial_{h_\mu} u(\mathbf{h})\rangle \\ &= \sum_\mu [\partial_k h_\mu(k)]\mathcal{A}_\mu(\mathbf{h}) \\ &= h'_x A_x(\mathbf{h}) + h'_y A_y(\mathbf{h}) + h'_z A_z(\mathbf{h})\end{aligned}$$

$\mathcal{A}_\mu(\mathbf{h})$ 只依赖于“磁场” $\mathbf{h}$

SSH 模型的 Berry connection

$$\mathcal{A}^-(\mathbf{h}) = \frac{\sin\theta/2}{2h\cos\theta/2}\hat{\mathbf{e}}_\phi = \frac{\sin\theta/2\cos\theta/2}{2h\cos^2\theta/2}\hat{\mathbf{e}}_\phi = \frac{\sin\theta}{2h(1+\cos\theta)}\hat{\mathbf{e}}_\phi$$

$$= \frac{h\sin\theta(-\sin\phi,\cos\phi,0)}{2h(h+h\cos\theta)} = \frac{1}{2h(h+h_z)}(-h_y,h_x,0)$$

$$\mathcal{A}^-(k) = \frac{\partial h_\mu(k)}{\partial k}\mathcal{A}_\mu(\mathbf{h}) = \frac{-h_x'h_y+h_y'h_x}{2h(h+h_z)} \qquad h_x = h\sin\theta\cos\phi,\cdots$$

$$= \frac{\begin{array}{l}-(h'\sin\theta\cos\phi + h\cos\theta\cos\phi\theta' - h\sin\theta\sin\phi\phi')h\sin\theta\sin\phi \\ +(h'\sin\theta\sin\phi + h\cos\theta\sin\phi\theta' + h\sin\theta\cos\phi\phi')h\sin\theta\cos\phi\end{array}}{2h^2(1+\cos\theta)}$$

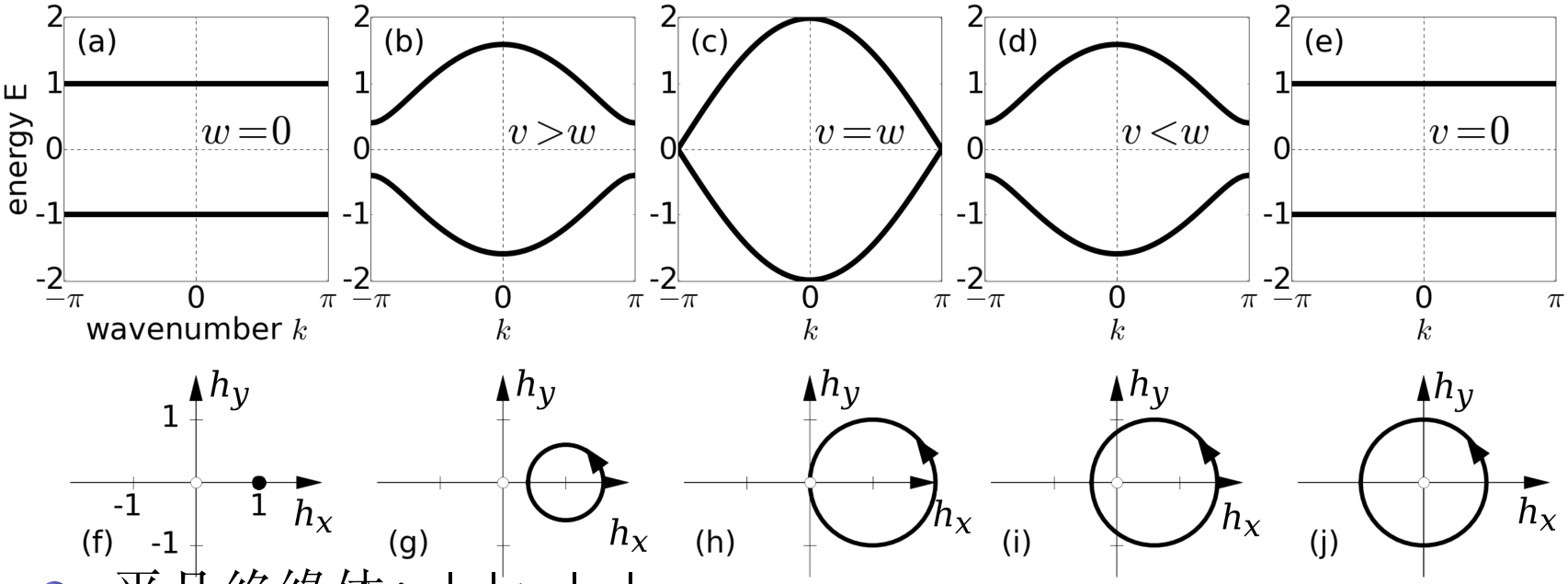
$$= \frac{\sin^2\theta}{2(1+\cos\theta)}\phi' = \frac{1-\cos^2\theta}{2(1+\cos\theta)}\phi' = \frac{1-\cos\theta}{2}\phi'$$

$$= \frac{1}{2}\phi' \qquad \boxed{\text{正常的 SSH 模型，}\ \theta=\pi/2}$$

☞ 此例子直接计算更加简单。一般情况下，波函数及其微分的计算非常复杂，利用磁场中自旋 1/2 的结果更加简单。

拓扑绝缘体和平凡绝缘体的区别：Berry phase

$$\mathcal{H}(k) = h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y \qquad h_x(k) = v + w\cos k \quad h_y(k) = w\sin k$$



- 平凡绝缘体：$|v| > |w|$

  $\gamma = \oint \mathcal{A}^-(k)dk = \oint \frac{1}{2}\frac{d\phi(k)}{dk}dk = \frac{1}{2}\oint d\phi = \frac{\phi(\pi)-\phi(-\pi)}{2} = 0$

  ☞k 绕 BZ 一圈后，“磁场” $\mathbf{h}(k)$ 不绕 $\mathbf{h}$ 空间原点转圈

  $\phi(\pi) = \phi(-\pi)$

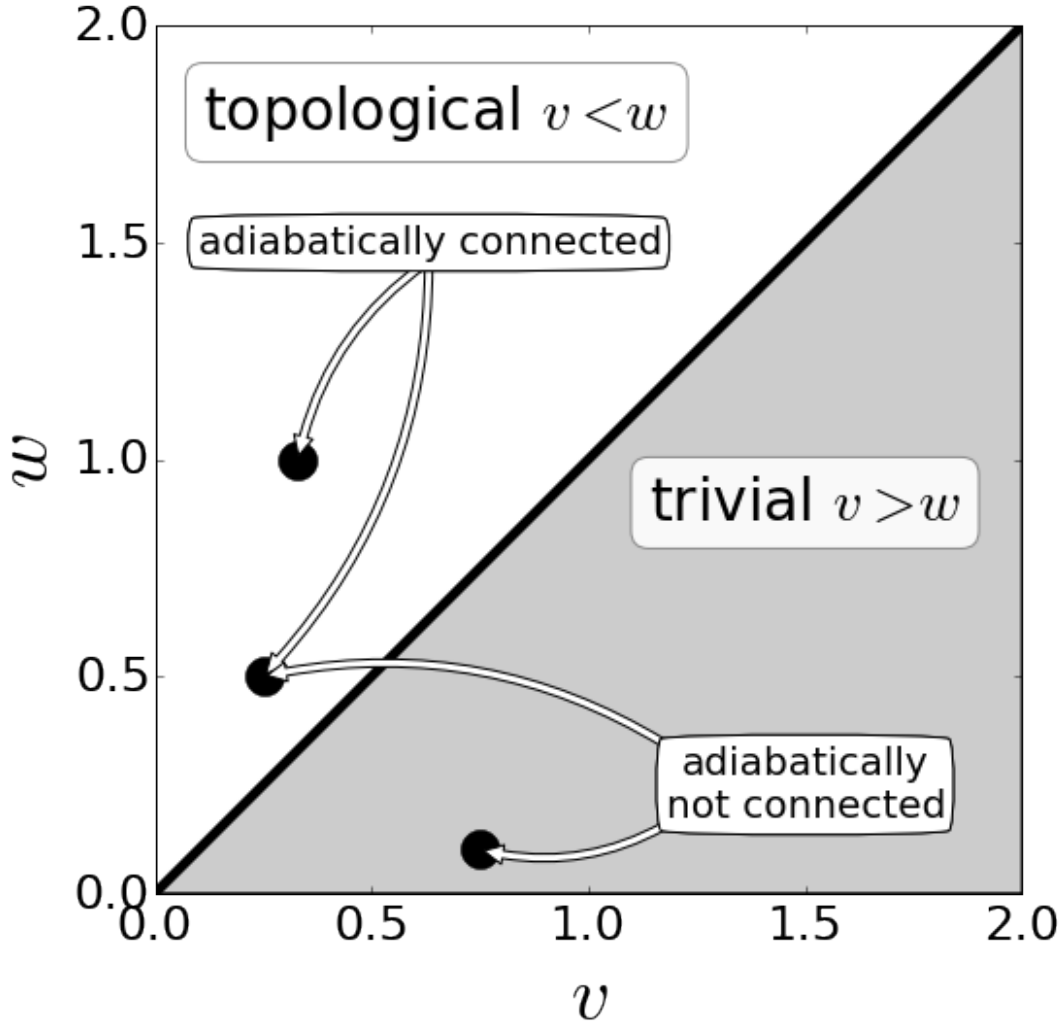
- 拓扑绝缘体：$|v| < |w|$

  $\gamma = \oint \mathcal{A}^-(k)dk = \oint \frac{1}{2}\frac{d\phi(k)}{dk}dk = \frac{1}{2}\oint d\phi = \frac{\phi(\pi)-\phi(-\pi)}{2} = \pi$

  ☞k 绕 BZ 一圈后，“磁场” $\mathbf{h}(k)$ 绕 $\mathbf{h}$ 空间原点转一圈，

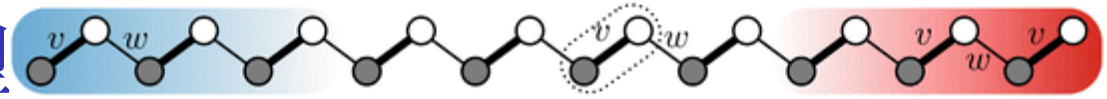
  $\phi(\pi) = \phi(-\pi) + 2\pi$

SSH 模型的相图



拓扑相：一个系统可以通过绝热变化变成另一个系统，即保持 $E_g \neq 0$ 的变化。

不同规范下的 SSH 模型



- 同一原胞里 A、B 原子相位相同（目前我们用的规范）

$$|\psi(k)\rangle = \sum_l e^{ik\cdot 2la}(a_k|lA\rangle + b_k|lB\rangle)$$

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-2ika} \\ v + we^{2ika} & 0 \end{pmatrix}$$

Zak 不为零的条件是 $v < w$ $\Rightarrow$ 原胞间跃迁强度 > 原胞内跃迁强度

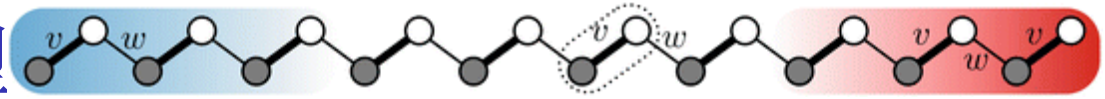
- 同上，但原胞移动半个周期，即原胞里 A、B 原子换位置

$$|\psi(k)\rangle = \sum_l e^{ik\cdot 2la}(b_k|lB\rangle + a_k|lA\rangle)$$

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & w + ve^{-2ika} \\ w + ve^{2ika} & 0 \end{pmatrix}$$

Zak 不为零的条件是 $v > w$ $\Rightarrow$ 原胞间跃迁强度 > 原胞内跃迁强度

不同规范下的 SSH 模型



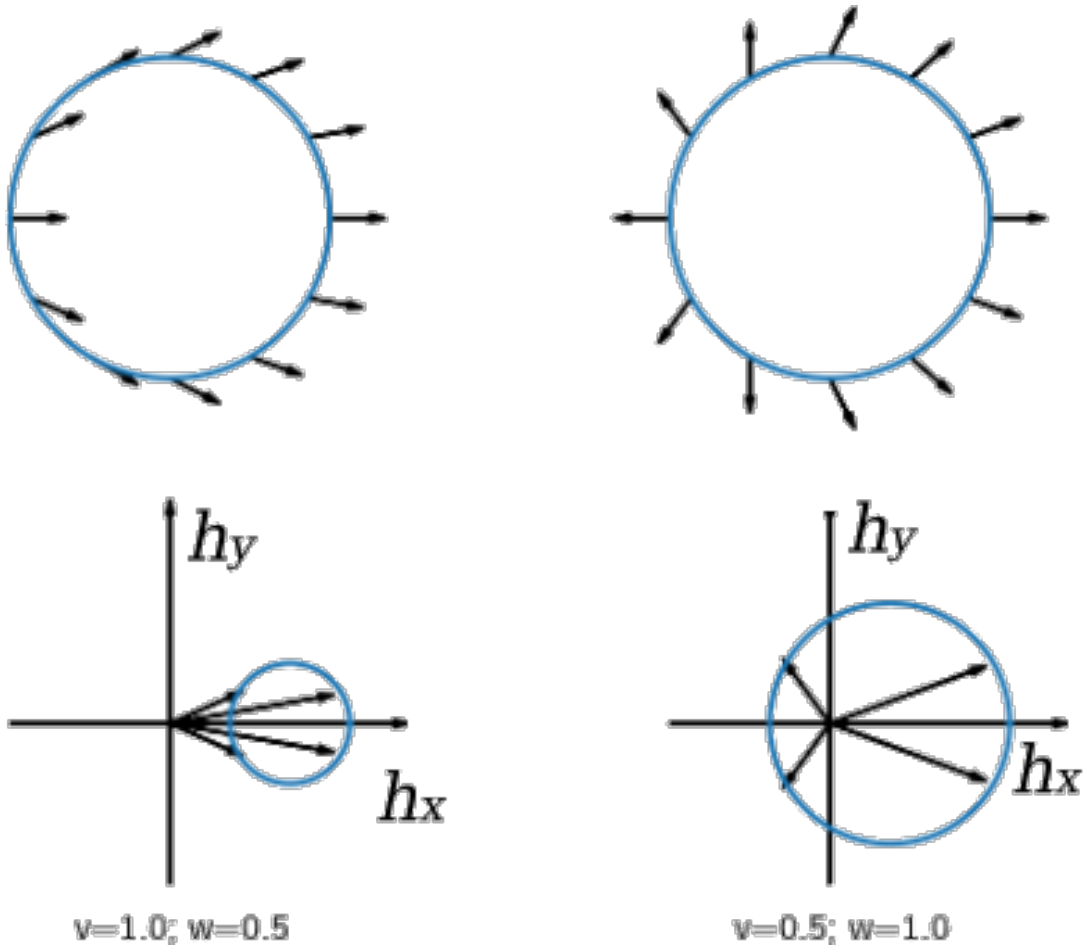
- 同一原胞里 A、B 原子相位不同

$$|\psi(k)\rangle = \sum_l [a_k e^{ik\cdot 2la}|lA\rangle + b_k e^{ik\cdot(2l+1)a}|lB\rangle]$$

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & ve^{ika} + we^{-ika} \\ ve^{-ika} + we^{ika} & 0 \end{pmatrix}$$

- ☞ 不同规范得到 Berry/Zak phase 不同。
  “Topology in Modern Solid State Physics: From Topological Insulators to Weyl semimetals”, Adam Lantos, chap 3
  https://www.ucy.ac.cy/phy/documents/Lantos_Thesis.pdf
- ☞ Zak phase 改变是发生拓扑相变的依据。
- ☞ Zak phase $\neq 0 \Rightarrow$ 拓扑非平凡 $\Rightarrow$ 存在零能边界态

Winding number：Berry phase 拓扑性的直观表征



- 从前面的计算我们发现：SSH 模型的 Berry phase 只和 $\mathbf{h}(k)$ 绕“磁场”空间原点的圈数 W 有关，因此可以用 W 来表征拓扑性，这个数被称为 Winding number。

Winding number：Berry phase 拓扑性的直观表征

- Winding number W 和 Berry phase 描述的是相同的拓扑性，不过更加直观。

$$\mathcal{A}^{-}(\mathbf{h}) = (-h_y, h_x, 0)/2h^2$$
$$= \hat{e}_z \times \mathbf{h}/2h^2$$

- W 的计算（SSH 模型中 $h_z(k) = 0$）

$$W = \frac{2\gamma}{2\pi} = \frac{2}{2\pi}\oint_{1stBZ} \mathcal{A}(k)dk = \frac{1}{\pi}\oint_{1stBZ} \mathcal{A}_{\mu}^{-}(\mathbf{h})\frac{dh_{\mu}(k)}{dk}dk$$
$$= \frac{1}{\pi}\oint_{\mathbf{h}\text{ 空间上的闭合曲线}} \mathcal{A}^{-}(\mathbf{h})\cdot d\mathbf{h} = \frac{1}{2\pi}\oint \frac{\hat{e}_z \times \mathbf{h}}{h^2}\cdot d\mathbf{h}$$
$$= \frac{1}{2\pi}\oint_{\mathbf{h}} \hat{e}_z \cdot \frac{\mathbf{h}\times d\mathbf{h}}{h^2}$$

- 这样计算可以直接从 Hamitonian 得到，避免了复杂的本征问题的求解。
- 数学上，这是通过考察从一个圆（Brillion zone）到另一个圆（“磁场”）映射的同纶（homotopy），$\pi_1(S^1)$。
  Winding number= 该映射覆盖“磁场”空间的次数。
- W 是一个“拓扑”不变量

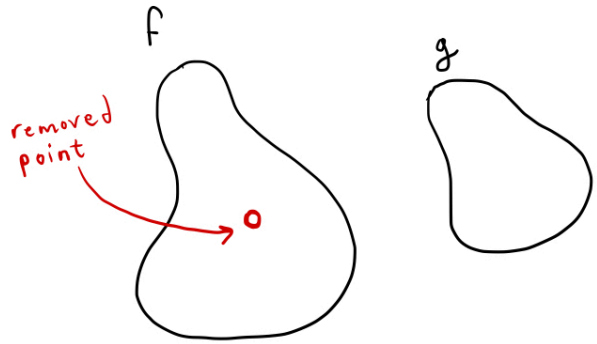
数学上的拓扑变换和物理上的拓扑变换

- 拓扑等价：可以通过拓扑变换互相转变

☞ 物理上如何实现 Bloch bundle 的拓扑变化?

数学上的拓扑变换和物理上的拓扑变换

- 多种多样的拓扑变换
  - 有洞的平面内两个圈
    - 如果局限在平面内，两个圈是不等价的
    - 如果不限制在平面里，两个圈是等价的



  - 环和结
    - 局限在三维空间里，环和结是不等价的
    - 在更高维度里，环和结是等价的

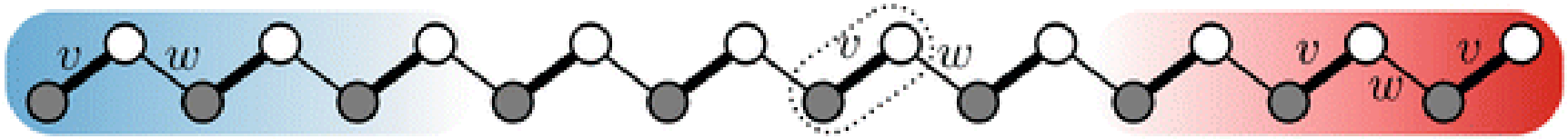
☞ 两个几何体是否拓扑等价取决于允许的“拓扑变换”

- 物理上如何实现 Bloch bundle 的拓扑变换？
  物理参数的改变可以 Bloch bundle ⇒ “拓扑变换”

☞ 对物理参数取值的不同约束可以实现不同种类的“拓扑变换”

SSH 模型里的“拓扑变换”

- SSH 模型——最近邻近似



  - 二聚化：每个原胞内有两个原子（态）：A 和 B，
    子格子对称：AB 态能量相同 $\varepsilon_A = \varepsilon_B$
  - 只考虑最近邻近似：原胞内跃迁 u，原胞间跃迁 w

  手征对称的最近邻 SSH 模型的参数空间：$\{u, w\}$

- SSH 模型——更一般情况（限制在二聚化情况）
  - 二聚化：每个原胞内有两个原子（态）：A 和 B
    能量分别为 ε_A，ε_B，二者可以不等，子格子对称可能破缺。
  - 非最近邻近似：从 l 原胞的 s（$= A, B$）原子跃迁到 m 原胞 s'
    原子 $t_{ls,l's'} = t_{ss'}(l - l')$，$s, s' = A, B$

☞ 一般 SSH 模型参数空间：

$\{\varepsilon = \varepsilon_A - \varepsilon_B, v = t_{AB}(0), w = t_{BA}(1), t_{AA}(1), t_{BB}(1) \cdots\}$

最近邻 SSH 模型是一般 SSH 模型的特殊形式：

$\{\varepsilon = 0, v = t_{AB}(0), w = t_{BA}(1), t_{AA}(1) = 0, t_{BB}(1) = 0, \cdots\}$

SSH 模型里的“拓扑变换”

- 在二聚化前提下，Hamiltonian 保持 2×2 矩阵形式，可以当作有效磁场 $\mathbf{h}(k)$ 中的“自旋”

$$H=\sum_{lm}[t_{AA}(m)|l,A\rangle\langle l+m,A|+t_{BB}(m)|l,B\rangle\langle l+m,B|$$
$$+t_{AB}(m)|l,A\rangle\langle l+m,B|+t_{BA}(m)|l,B\rangle\langle l+m,A|]=H^{\dagger}$$
$$t_{AA}(m)=t_{AA}^{*}(-m),t_{BB}(m)=t_{BB}^{*}(-m)$$
$$t_{AB}(m)=t_{BA}^{*}(-m)$$
$$\mathcal{H}(k)=\sum_{m}t_{AA}(m)e^{ikm}|kA\rangle\langle kA|+\sum_{m}t_{BB}(m)e^{ikm}|kB\rangle\langle kB|$$
$$+\sum_{m}t_{AB}(m)e^{ikm}|kA\rangle\langle kB|+\sum_{m}t_{BA}(m)e^{ikm}|kB\rangle\langle kA|$$
$$=\varepsilon_0(k)+\mathbf{h}(k)\cdot\boldsymbol{\sigma}\Rightarrow h_x(k)\sigma_x+h_y(k)\sigma_y+h_z(k)\sigma_z$$

见后两页

- 改变这些参数 $\Leftrightarrow$ 改变有效磁场 $\mathbf{h}(k)$
$\Leftrightarrow$ 实现 SSH 模型的“拓扑变换”

一般 SSH 模型（二聚化一维链）的 Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{AA}(k) = t_{AA}(0) \boxed{= \varepsilon_A} + t_{AA}(1)e^{ik} + t_{AA}(-1)e^{-ik}$$
$$+ t_{AA}(2)e^{2ik} + t_{AA}(-2)e^{-2ik} + \cdots$$
$$= \varepsilon_A + 2\Re[t_{AA}(1)e^{ik}] + 2\Re[t_{AA}(2)e^{2ik}] + \cdots$$
$$= \varepsilon_A + 2[t^r_{AA}(1)\cos k - t^i_{AA}(1)\sin k] + 2[t^r_{AA}(2)\cos 2k - t^i_{AA}(2)\sin k] + \cdots$$
$$H_{BB}(k) = \varepsilon_B + \cdots$$
$$h_z(k) = \frac{H_{AA}(k) - H_{BB}(k)}{2} = \frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{2}$$
$$+ [t^r_{AA}(1) - t^r_{BB}(1)]\cos k + [t^i_{AA}(1) - t^i_{BB}(1)]\sin k$$
$$+ [t^r_{AA}(2) - t^r_{BB}(2)]\cos 2k + [t^i_{AA}(2) - t^i_{BB}(2)]\sin 2k + \cdots$$
$$H_{AB}(k) = t_{AB}(0) + t_{AB}(1)e^{ik} + t_{AB}(-1)e^{-ik}$$
$$+ t_{AB}(2)e^{2ik} + t_{AB}(-2)e^{-2ik} + \cdots$$
$$h_x(k) = t^r_{AB}(0) + [t^r_{AB}(1) + t^r_{AB}(-1)]\cos k - [t^i_{AB}(1) - t^i_{AB}(-1)]\sin k$$
$$+ [t^r_{AB}(2) + t^r_{AB}(-2)]\cos 2k - [t^i_{AB}(2) - t^i_{AB}(-2)]\sin 2k + \cdots$$
$$h_y(k) = -t^i_{AB}(0) - [t^i_{AB}(1) + t^i_{AB}(-1)]\cos k - [t^r_{AB}(1) - t^r_{AB}(-1)]\sin k +$$

受对称保护的拓扑不变量

- 系统中常常存在一些对称性，这些对称性限制了参数可能变化 $\Rightarrow$ 不同对称代表不同的“拓扑变换”
- 拓扑特征量：保持绝缘体的前提下，不随“拓扑变换”改变的特征量
  ☞不同“拓扑变换” $\Rightarrow$ 用不同拓扑特征量表征
- 受对称保护的拓扑不变量
  在保持体系对称性的“拓扑变换”下不发生改变的拓扑量

☞ 例如在保持手征“对称” $[\varepsilon_A = \varepsilon_B,\ t_{AA}(m) = t_{BB}(m)]$ 时，SSH 模型的 $h_z(k) = 0$，有效磁场的只能躺在 $x-y$ 平面里
$\Rightarrow$ 绝缘的 SSH 模型的 Winding number 不可能改变
$\Rightarrow$ Winding number 是受手征对称保护的拓扑不变量。

Winding number：受手征对称性保护的拓扑特征量

- 手征对称算符 C（A,B 原子差异）

$$P_A = \sum_m |mA\rangle\langle mA| \qquad P_B = \sum_m |mB\rangle\langle mB|$$

$$C = (P_A - P_B) \Rightarrow \sigma_z$$

$$\mathcal{H}(k) = h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y + h_z(k)\sigma_z$$

$$C\mathcal{H}C \Rightarrow \sigma_z\mathcal{H}\sigma_z = -h_x(k)\sigma_x - h_y(k)\sigma_y + h_z(k)\sigma_z$$

- 手征（反）对称 $\Leftrightarrow h_z(k) \equiv 0 \Leftrightarrow$ A 和 B 原子完全等价

$$\mathcal{H}(k) = h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y$$

$$\Rightarrow C\mathcal{H}(k)C = -h_x(k)\sigma_x - h_y(k)\sigma_y = -\mathcal{H}(k)$$

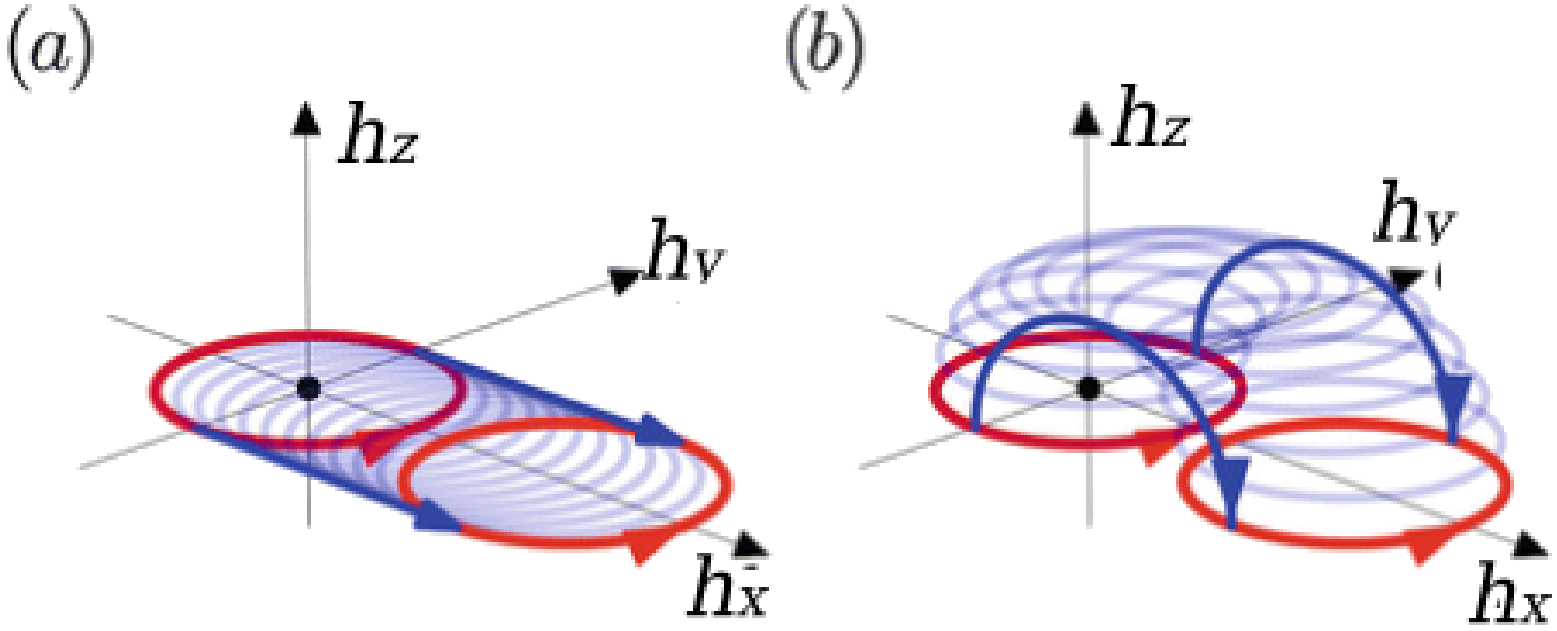
$$\mathcal{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

$$\mathcal{H}C|\psi_n\rangle = -C\mathcal{H}|\psi_n\rangle = -E_nC|\psi_n\rangle$$

- $E_n \neq 0$ 是系统的本征能量, 那么 $-E_n$ 也是

☞ 一般对称 $[\hat{S},\mathcal{H}] = 0$。这里的“手征对称”C 和一般的对称不同，实际上是“手征反对称” $\{C,\mathcal{H}\} = 0$。

Winding number：受手征（反）对称保护的拓扑特征量



$$\mathcal{H}(k) = (h_x, h_y, h_z)\cdot\boldsymbol{\sigma} = h(k)(\sin\theta_k\cos\phi_k, \sin\theta_k\sin\phi_k, \cos\theta_k)\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

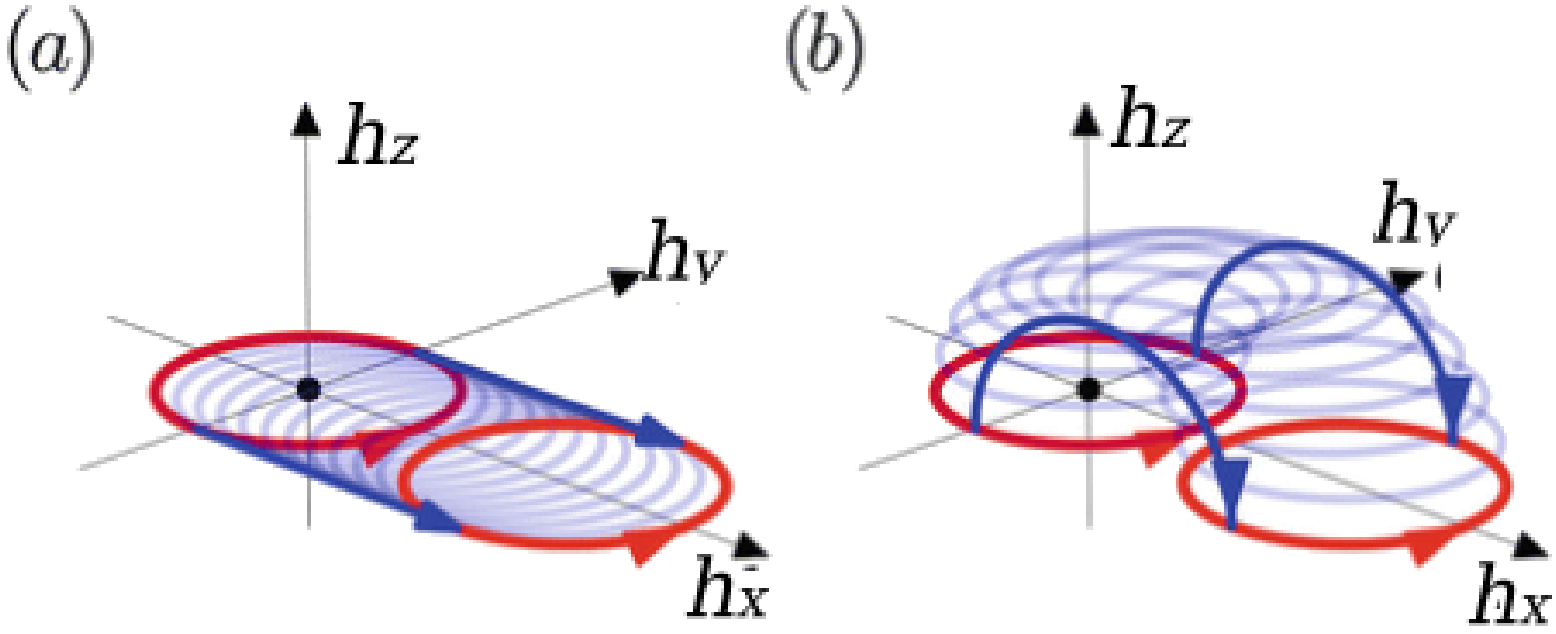
$$\boxed{\theta_k = \theta(k), \phi_k = \phi(k)}$$

$$\{C, \mathcal{H}\} = 0 \Rightarrow \mathcal{H}(k) = h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y \Rightarrow h_z(k) \equiv 0 \Rightarrow \theta_k = \pi/2$$

$$W = 2\oint \frac{dk}{2\pi}\mathcal{A}_{\pm}(k) = \oint \frac{dk}{2\pi}\left[\mathbf{h}(k)\times\frac{d\mathbf{h}(k)}{dk}\right]_z = \oint \frac{dk}{2\pi}[1-\cos\theta(k)]\phi'(k)$$

$$= \oint \frac{dk}{2\pi}\phi'(k) = \frac{\phi(k=2\pi)-\phi(k=0)}{2\pi} = \begin{cases} 0 & \text{trivial} \\ nonzero & \text{non-trivial} \end{cases}$$

Winding number：受手征（反）对称保护的拓扑特征量

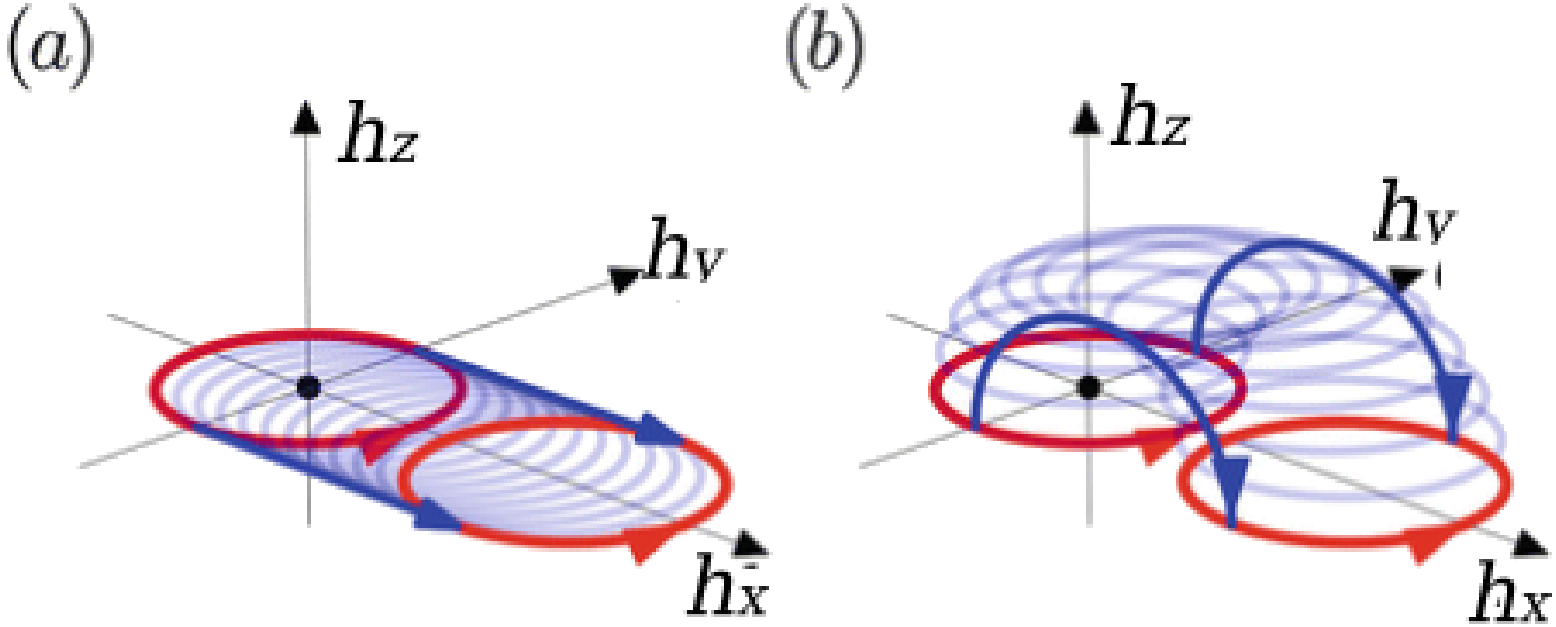


- 只要 $\mathbf{h}(k)$ 保持在 $x-y$ 平面里，绝缘体的 W 不会发生改变。$\varepsilon_{\pm}(k) = \pm|\mathbf{h}(k)| = \pm\sqrt{h_x^2(k)+h_y^2(k)}$，绝缘体时任何时候的能量都不为零，因此在 $\mathbf{h}$ 空间内不能过经过原点。

☞ 在有手征对称性时，绝缘体的 W 不可能发生改变

$\Rightarrow$ Winding number W: 受手征保护的拓扑特征量

Winding number：受手征（反）对称保护的拓扑特征量



- 最近邻近似，手征对称：$\varepsilon = t_{AA}(0) = -\varepsilon = t_{BB}(0) = 0$

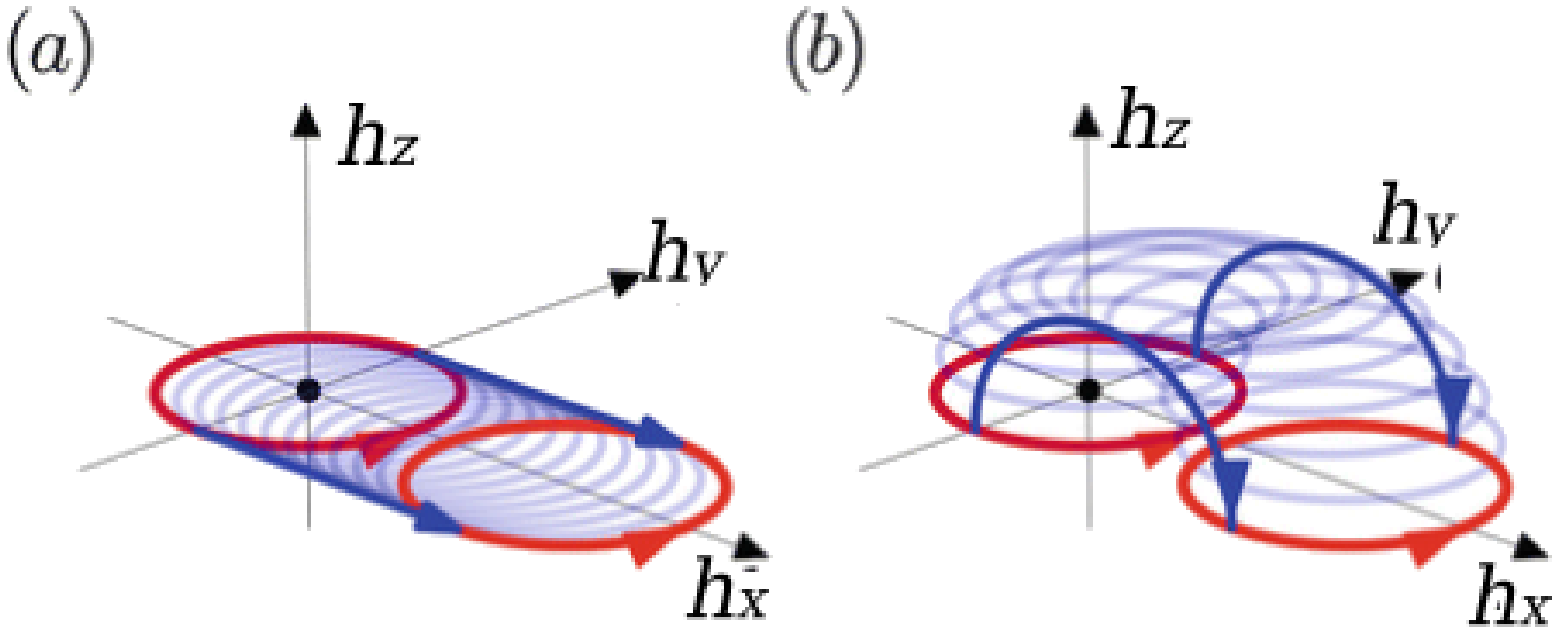
$$W = \oint \frac{dk}{2\pi}\left[\mathbf{h}(k) \times \frac{d\mathbf{h}(k)}{dk}\right]_z = 2\oint \frac{dk}{2\pi}\mathcal{A}(k) = \begin{cases} 0 & \text{trivial} \\ 1 & \text{non-trivial} \end{cases}$$

☞ 最近邻近似时，W 只能是零或者一

- 考虑长程跃迁时 W 可以是任意整数

☞ 手征对称的具有长程跃迁的一般 SSH 模型的 Winding number 可以是任意整数 $\Rightarrow$ Z 拓扑绝缘体

手征对称破缺



手征对称破缺：$t_{AA}(m), t_{BB}(m) \neq 0$

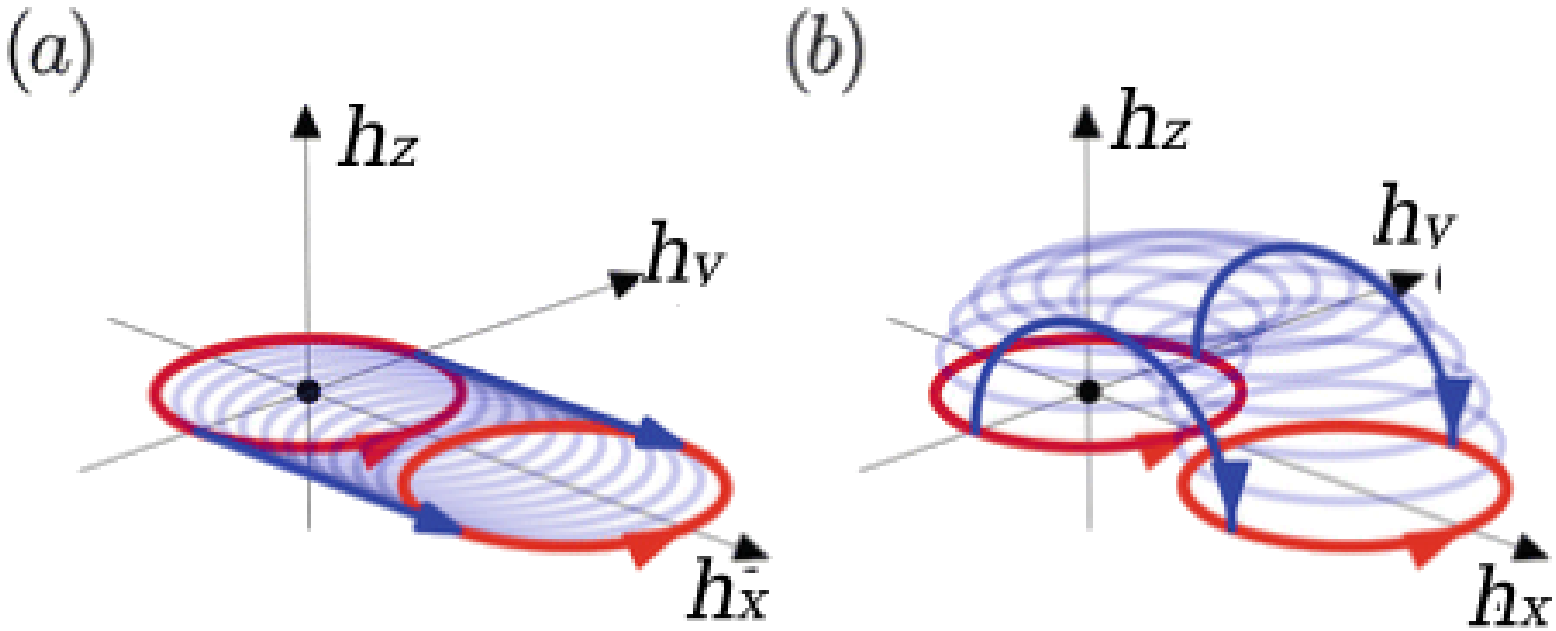
$$\mathcal{H}(k) = h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y + h_z(k)\sigma_z \qquad \neq 0$$

$$C\mathcal{H}(k)C = \sigma_z\mathcal{H}(k)\sigma_z = -h_x(k)\sigma_x - h_y(k)\sigma_y + h_z(k)\sigma_z \neq -\mathcal{H}(k)$$

$$W = \frac{1}{2\pi}\oint dk \left[\hat{\mathbf{h}}(k) \times \frac{d\hat{\mathbf{h}}(k)}{dk}\right]_z = \frac{1}{2\pi}\oint [1-\cos\theta_k]\frac{d\phi_k}{dk}dk = ?$$

$\pi_1(S^2) = 0$

手征对称破缺



- 手征对称时，不经过零点（变成金属/半金属），无法改变 winding number
- 手征对称破缺后，可以不经过零点就实现 winding number 的改变

☞ 手征对称破缺的一般 SSH 模型不再是 Z 拓扑绝缘体

☞ 如果存在粒子-空穴对称性的话，可能是另一类拓扑绝缘体：Z_2 拓扑绝缘体

Z_2 拓扑绝缘体

T：时间反演操作，不包含真正的自旋：$TO(k)T = O^*(-k)$。

粒子 - 空穴（反）对称：$P = TC$，$\{\mathcal{H}, P\} = 0$

$$\mathcal{H}(k) = h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y + h_z(k)\sigma_z$$

$$P\mathcal{H}(k)P = T[-h_x(k)\sigma_x - h_y(k)\sigma_y + h_z(k)\sigma_z]T \qquad \sigma_y^* = -\sigma_y$$

$$= -h_x(-k)\sigma_x + h_y(-k)\sigma_y + h_z(-k)\sigma_z \qquad = -\mathcal{H}(k)$$

$$\Rightarrow h_x(k) = h_x(-k) \qquad h_y(k) = -h_y(-k) \qquad h_z(k) = -h_z(-k) \neq 0$$

$$\Rightarrow h_y(0) = -h_y(-0) = 0 \qquad h_y(\pi) = h_y(-\pi) = -h_y(-\pi) = 0$$

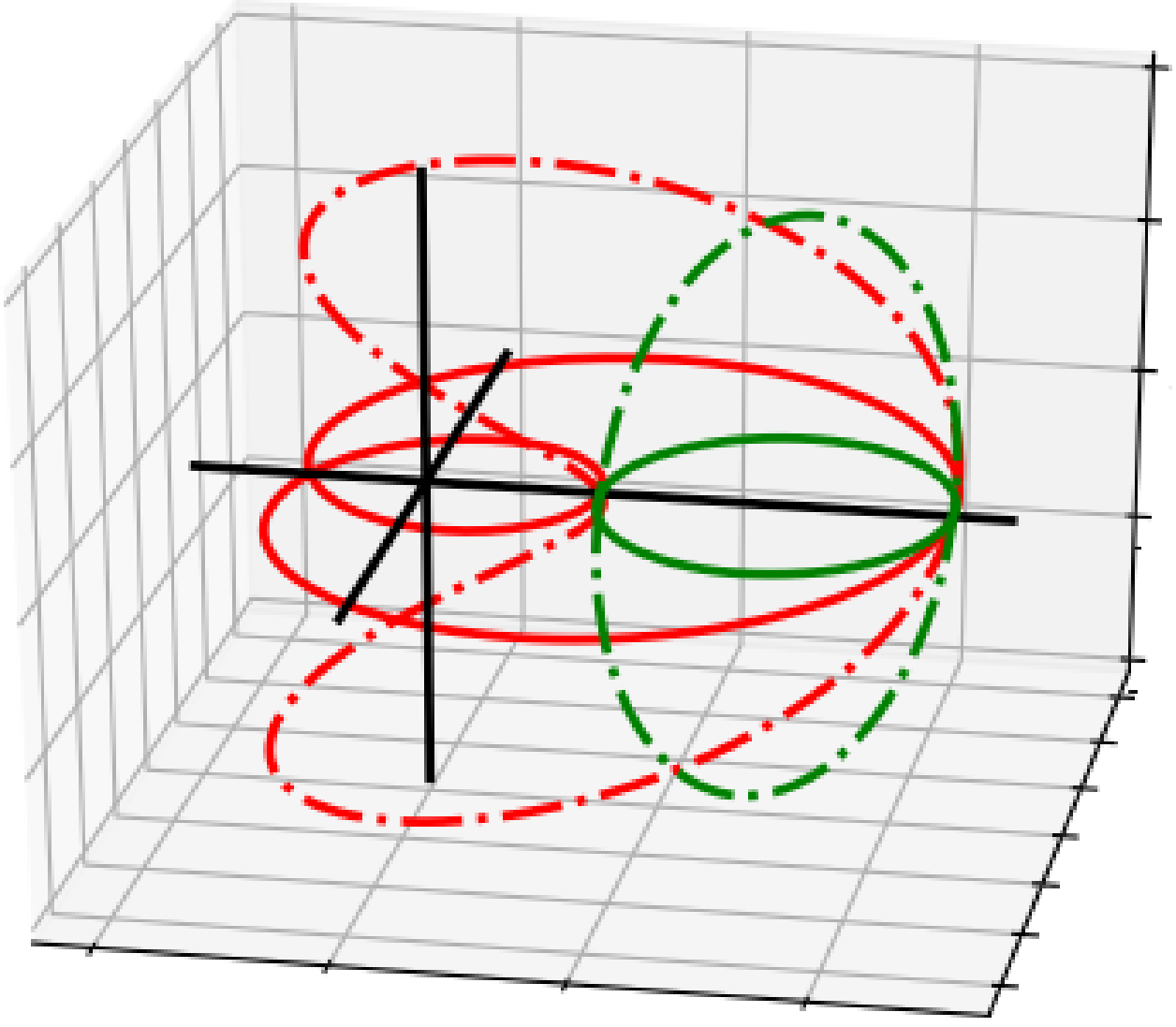
$$\Rightarrow h_z(0) = -h_z(-0) = 0 \qquad h_z(\pi) = h_z(-\pi) = -h_z(-\pi) = 0$$

$$\mathbf{h}(k) = h(k)(\sin\theta_k \cos\phi_k, \sin\theta_k \sin\phi_k, \cos\theta_k)$$

$$\Rightarrow h(k) = h(-k) \qquad \theta(k) = \pi - \theta(-k) \qquad \phi(k) = -\phi(-k)$$

- 粒子 - 空穴反演（反）对称 $\Rightarrow k = 0, \pm\pi$ 时 $\mathbf{h}$ 在 x 轴上
- 所有 $h_x(0)$ 和 $h_x(\pi) = h_x(-\pi)$ 具有相同正负性的系统可以通过绝热演化相互转变 ☞ 拓扑等价；
- 所有 $h_x(0)$ 和 $h_x(\pi) = h_x(-\pi)$ 具有相反正负性的系统也可以通过绝热演化相互转变 ☞ 拓扑等价；
- 但是这两种系统之间不能通过绝热演化得到 ☞ 拓扑性不同

Z_2 拓扑绝缘体



虚线：三维 $\mathbf{h}(k)$；

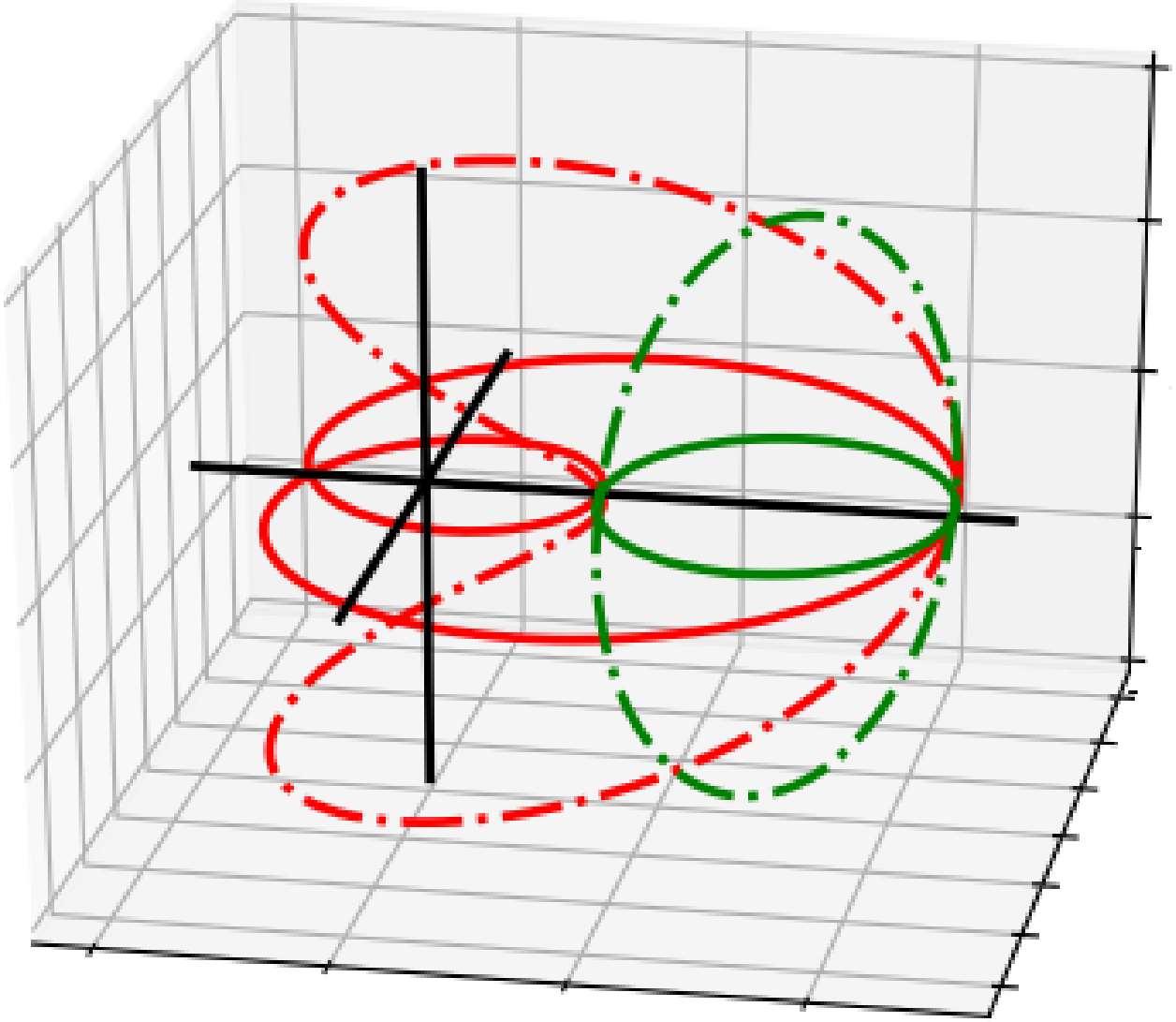
实线：$\mathbf{h}(k)$ 在 $x-y$ 平面投影

☞ 有 P 对称性 $\Rightarrow$ $\mathbf{h}(0)$、$\mathbf{h}(\pi)$ 都在 x 轴上

☞$\mathbf{h}(0)$ 和 $\mathbf{h}(\pi)$ 奇偶性相同的体系，在原点同侧 $\Rightarrow$ 可以不通过原点互相转换（即绝热转换）

☞ 奇偶性相反的体系则不行

Z_2 拓扑绝缘体



$$\mathcal{A}(k) = \frac{1-\cos\theta_k}{2}\phi'_k$$

$$\oint \mathcal{A}dk = \frac{1}{2}\oint \phi'_k$$

$$-\frac{1}{2}\oint \cos\theta_k \, \phi'_k \boxed{=0}$$

$$\theta_k = \pi - \theta_{-k} \qquad \phi_k = -\phi_{-k}$$

$$\Rightarrow \cos\theta_k = -\cos\theta_{-k}$$

$$\Rightarrow \phi'_k = \phi'_{-k}$$

$$\Rightarrow \oint \mathcal{A}dk = n\pi$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

虽然 $\cos\theta\ \phi'$ 对总结果没有影响，但是它使得 **h** 不通过零点（或者说能带间隙不闭合）就能改变 $\oint A$ 成为可能。从一个 n 变成 $n \pm 2$ 时，**h** 和 z 轴相交，此时 ϕ' 发散。

拓扑绝缘体的分类

Symmetry				Spatial Dimension d								
Class	T	P	C	1	2	3	4	5	6	7	8	···
A	0	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	···
AIII	0	0	1	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	···
AI	1	0	0	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	···
BDI	1	1	1	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	···
D	0	1	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	···
DIII	-1	1	1	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	···
AII	-1	0	0	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	···
CII	-1	-1	1	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	···
C	0	-1	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	···
CI	1	-1	1	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	···

拓扑绝缘体的分类由对称性和维度决定：

T：时间反演；C：手征；P：粒子 - 空穴对称性，$P = CT$。

- 表格中取零表示没有某种对称；有 T 和 P 对称时，T^2 和 P^2 可能取 ± 1
- 不包涵（真正的）自旋：$T = \mathcal{K}$ $\Rightarrow$ 共轭；$T^2 = 1$
- 包涵（真正的）自旋：$T = i\sigma_y\mathcal{K}$；$T^2 = i\sigma_y(-i\sigma_y^*)\mathcal{K}^2 = -1$

拓扑绝缘体的分类

☞ 分类针对的是一整系列的 Hamiltonian，不是对某个特定的 Hamiltonian 而言的。

例如：最近邻的 $\mathcal{H}_{\rm SSH} = (v + w\cos k)\sigma_x + w\sin k\sigma_y$，winding number 只能是 0，或者 1。☞ 很多文章因此把 SSH 模型误归为 Z_2

但是一般的 SSH 模型 $\mathcal{H}(k) = h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y + h_z(k)\sigma_z$，使得 $h_{x,y,z}(k)$ 是任意的实的周期函数

- 时间反演对称：$T\mathcal{H}(k)T = \mathcal{H}^*(-k)$，$[T, \mathcal{H}(k)] = 0$
  $\Rightarrow h_x(k) = h_x(-k)$，$h_y(k) = -h_y(-k)$，$h_z(k) = h_z(-k)$
- 手征（反）对称：$C\mathcal{H}(k)C = \sigma_z\mathcal{H}(k)\sigma_z$，$\{C, \mathcal{H}(k)\} = 0$
  $\Rightarrow h_z(k) = 0$
- 粒子-空穴（反）对称：$P = CT$，$\{P, \mathcal{H}(k)\} = 0$
  $\Rightarrow h_x(k) = h_x(-k)$，$h_y(k) = -h_y(-k)$，$h_z(k) = -h_z(-k)$

☞ $h_i(k)$ 是实数 $\Rightarrow T, C, P = 0, 1 \Rightarrow$ A, AIII, AI, BDI, 或 D。

☞ 有 C 【$h_z(k) = 0$】 $\Rightarrow Z$ $\Rightarrow$ AIII or BDI

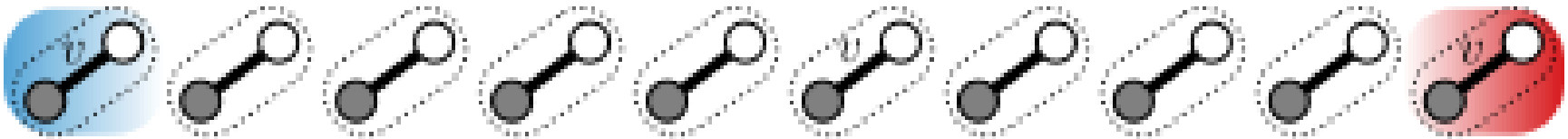
☞ 无 C 但有 P 【$h_z(k) = -h_z(-k) \neq 0$】 $\Rightarrow Z_2$ $\Rightarrow$ D

零能边界态

- 边界态是普遍存在的，和拓扑性无关
- 在拓扑平凡的体系里，一般来说边界态能量非常接近带底或者带顶
- 但在拓扑绝缘体中，存在特殊的边界态：零能边界态，其能量为零（费米面）

SSH 模型的零能边界态：完全二聚化极限，即 $v = 0$ 或者 $w = 0$

- 拓扑平凡情况下的边界态：$v > w = 0$



具有 N 个原胞的一维原子链，共有 $2N$ 个本征态

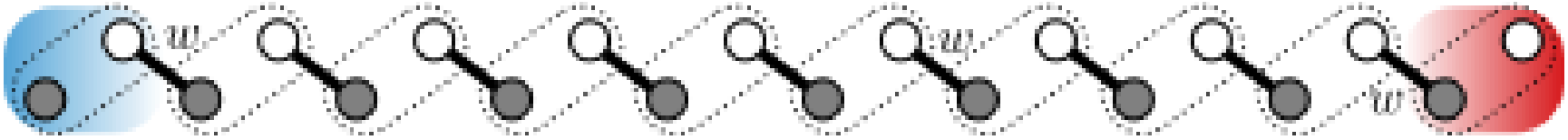
- 周期性边界条件

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_l e^{ikl} [|lA\rangle \pm |lB\rangle] \qquad \varepsilon = \pm v$$

- 开放性边界条件 $|\psi_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|lA\rangle \pm |lB\rangle), l = 1, 2, \cdots, N$，$N$ 个能量 $\varepsilon = -v$，N 个能量为 v。☞没有特殊的边界态

零能边界态

- 在拓扑绝缘体边界(真空 - 拓扑绝缘体)的边界态: $w > v = 0$,



  - 周期性边界条件

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_l e^{ikl} [|lB\rangle \pm |l+1A\rangle] \qquad \varepsilon = \pm w$$

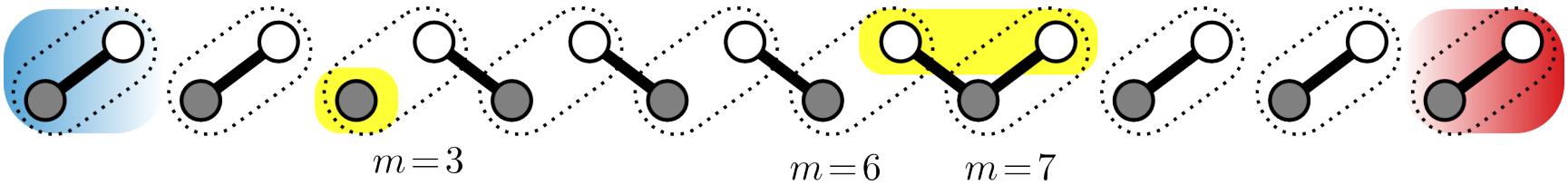
  - 开放性边界条件

    $|\psi_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|lB\rangle \pm |l+1A\rangle), l = 1, 2, \cdots, N-1,$

    $N-1$ 态能量为 $-w$, $N-1$ 个能量为 w。

    还有两个能量为零的边界态: $|\psi_L\rangle = |1A\rangle$, $|\psi_R\rangle = |NB\rangle$

- 拓扑绝缘体和普通绝缘体之间的边界态



零能边界态

有限长度：N 个原胞，$\hat{\mathcal{H}}\psi = \varepsilon\psi$

$$\begin{pmatrix} 0 & v & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ v^* & 0 & w & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w^* & 0 & v & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v^* & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & \cdots & & \ddots & \vdots & & \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & w^* & 0 & v \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & v^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ \vdots \\ a_N \\ b_N \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ \vdots \\ a_N \\ b_N \end{pmatrix}$$

$vb_1 = \varepsilon a_1 = 0$ 零能态 $\varepsilon = 0$ $\quad va_N = \varepsilon b_N = 0$

$va_1 + wa_2 = \varepsilon b_1 = 0$ $\quad wb_{N-1} + vb_N = \varepsilon a_N = 0$

$wb_1 + vb_2 = \varepsilon a_2 = 0$ $\quad va_{N-2} + wa_{N-1} = \varepsilon b_{N-1} = 0$

$va_2 + wa_3 = \varepsilon b_2 = 0$ $\quad wb_{N-2} + vb_{N-1} = \varepsilon a_{N-1}$

$\cdots$ $\quad \cdots$

☞ 简单 SSH 模型的零能态两个子晶格解耦和

零能边界态：$N \to \infty$ 时

$$\psi_L = a_1\left(1, 0, -\frac{v}{w}, 0, \frac{v^2}{w^2}, 0, -\frac{v^3}{w^3}, \cdots\right)^T$$

$$= a_1\left[|1A\rangle - \frac{v}{w}|2A\rangle + \frac{v^2}{w^2}|3A\rangle + \cdots\right] = a_1 \sum_{i=1}^{\infty}\left(\frac{-v}{w}\right)^{i-1}|iA\rangle$$

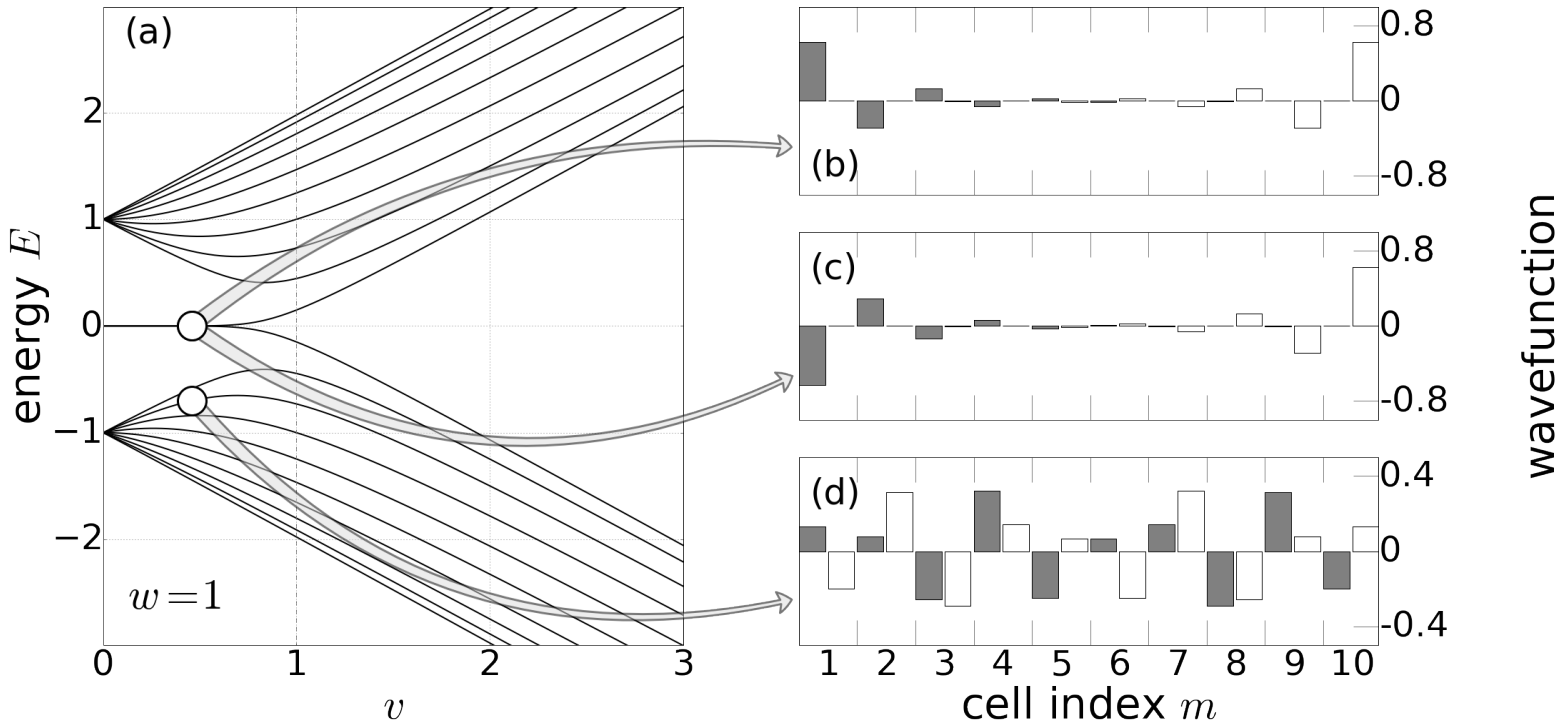
$$\psi_R = b_N\left(\cdots, -\frac{v^3}{w^3}, 0, \frac{v^2}{w^2}, 0, -\frac{v}{w}, 0, 1\right)^T$$

$$= b_N\left[|NB\rangle - \frac{v}{w}|N-1B\rangle + \cdots\right] = b_N \sum_{i=0}^{\infty}\left(\frac{-v}{w}\right)^{i}|N-i, B\rangle$$

- 当 $v/w < 1$ 时，存在一对零能态
- 这一对零能态是边界态，ψ_L：电子主要在左边；ψ_R：电子主要在右边
- 存在零能边界态的条件和拓扑不平凡的条件相同
- 有限长度时，有接近于零能的边界态【$\varepsilon \propto \pm(v/w)^N \simeq 0$】。解析解比较困难，多数直接求数值解。

零能边界态：有限长度的数值解

$w = 1$，$N = 10$ 时所有本征能量随 v 的变化



- 一共 2N 个态，其中 N 个 $\varepsilon \geq 0$（导带），N 个 $\varepsilon \leq 0$（价带）。每个带上有一个边界态，$N-1$ 个扩展态。
- 拓扑非平凡时（$v < 1$）边界态能量为零，和扩展态能量有很大区别；拓扑平凡时（$v > 1$）边界态能量和扩展态接近，从能量上无法区分二者。

零能边界态

- $C\mathcal{H}C = -\mathcal{H}$, if $\varepsilon_n \neq 0$, $-\varepsilon_n$ 也是 $\mathcal{H}$ 的本征值
- $\varepsilon_n = 0$, $|\psi_\pm\rangle = |\psi_n\rangle \pm C|\psi_n\rangle$, $C|\psi_\pm\rangle = \pm|\psi_\pm\rangle$
- 零能边界态的存在受对称/拓扑保护，不受小绕动的破坏
  例如 $v, w \Rightarrow v_i, w_i$

$$\psi_L = a_1\left[|1A\rangle - \frac{v_1}{w_1}|2A\rangle + \frac{v_1 v_2}{w_1 w_2}|3A\rangle + \cdots\right]$$

$$= a_1 \sum_i \left[\prod_{j=1}^{i-1}\left(\frac{-v_j}{w_j}\right)\right]|iA\rangle$$

- 边界态的数目也是拓扑不变量 =Winding number 对

☞ Bulk-boundary correspondence
Chen and Chiou, "An elementary rigorous proof of bulk-boundary correspondence in the generalized Su-Schrieffer-Heeger model", Physics Letters A **384**, 126168 (2020)

零能边界态：连续极限

$$\mathcal{H}(\pi + k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-i(k+\pi)} \\ v + we^{i(k+\pi)} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\simeq \begin{pmatrix} 0 & v - w + iwk \\ v - w - iwk & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & v - w + w\partial_x \\ v - w - w\partial_x & \end{pmatrix}$$

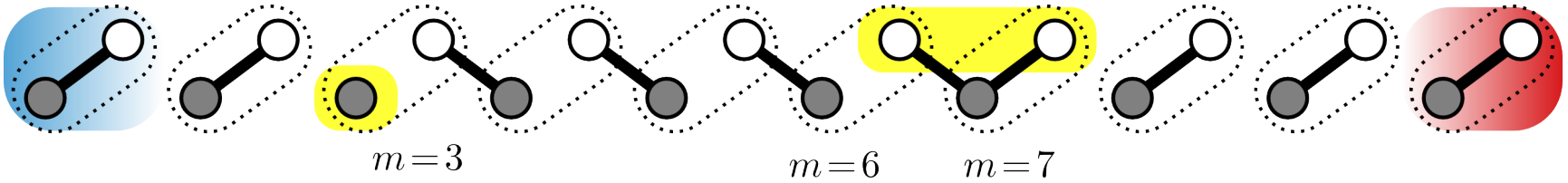
$$\mathcal{H}\Psi(x) = 0 \cdot \Psi(x)$$

$$\Psi(x)_L = \begin{pmatrix} e^{(v-w)x/w} \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{if } (v - w) < 0$$

$$\Psi_R(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{(v-w)(L-x)/w} \end{pmatrix} \qquad \text{if } (v - w) < 0$$

边界态上的分数激发

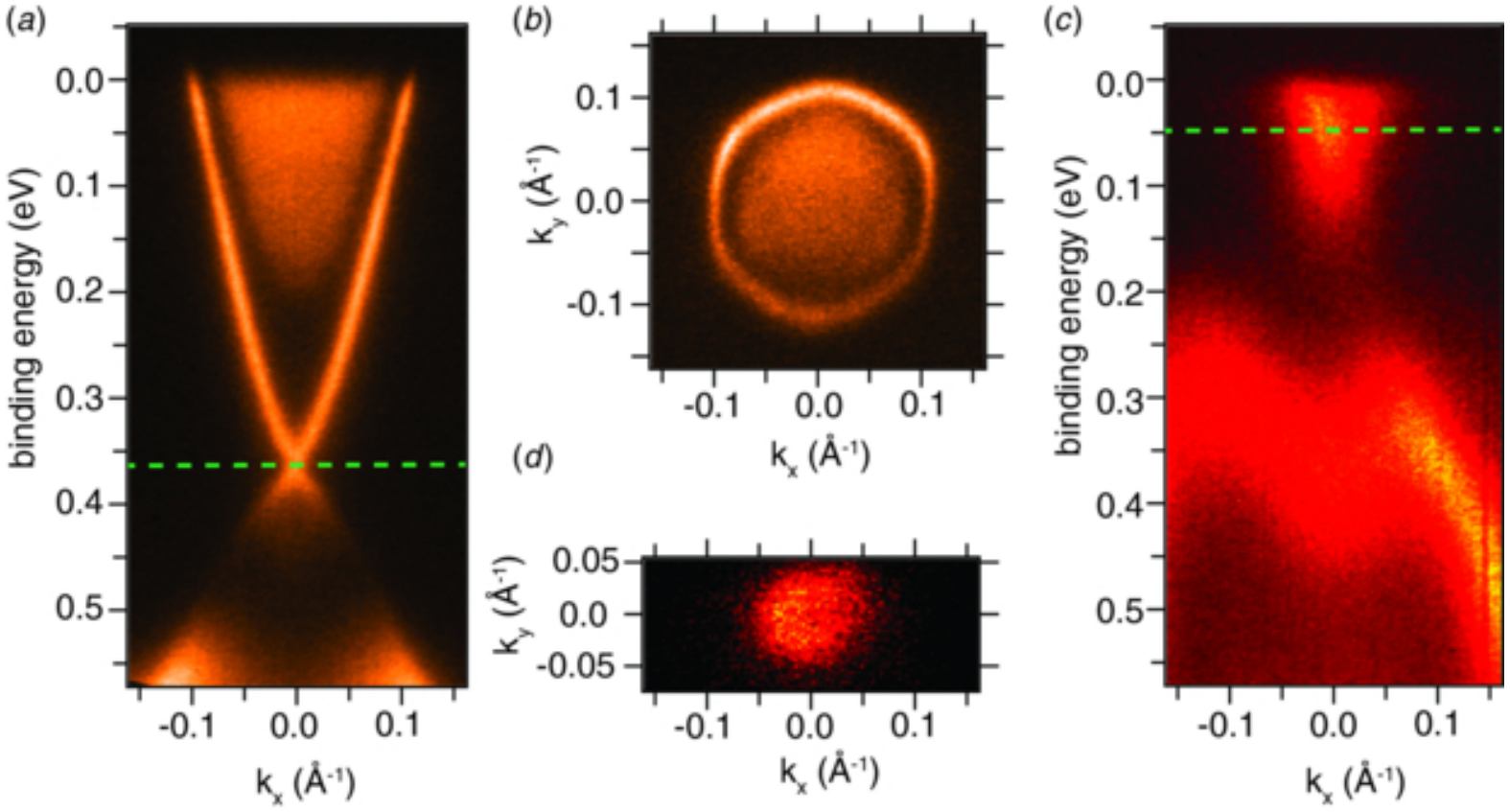
拓扑绝缘体和普通绝缘体之间的边界态



- 有两个 domain walls（表面态）
- 有限长的时候，两个表面态之间有耦合
  能量不严格为零 $\propto \pm e^{-L/\xi}$
- 每个表面态带电量为 $-e/2$：分数激发

$$\frac{1}{2} = \int |\Psi_{\pm}(x)|^2 dx$$

三维拓扑绝缘体（Bi_2Se_3）的边界态



- 体态存在 gap
- 零能表面态

$$\mathcal{H}_{surface}(\boldsymbol{k}) = c\hbar\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

拓扑绝缘体的一般性质

- 拓扑非平凡的 Bloch/valence bundle
  Berry connection $\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) = i\langle u_n(\mathbf{k})|\nabla_{\boldsymbol{k}} u_n(\mathbf{k})\rangle$
- 拓扑不变量
  - orentation
  - Genus
  - Winding number
  - Chern number
  - ……
- 对称/拓扑保护的零能边界态
  体的性质在边界上的体现，bulk-edge correspondence
  ☞由于零能边界态的存在，使得拓扑绝缘体可以导电。

Charge pumping
含时 SSH 模型： Rice-Mele model

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{SSH} + \sum_{is=A/B} (-1)^s u |is\rangle\langle is| \qquad \Rightarrow$$

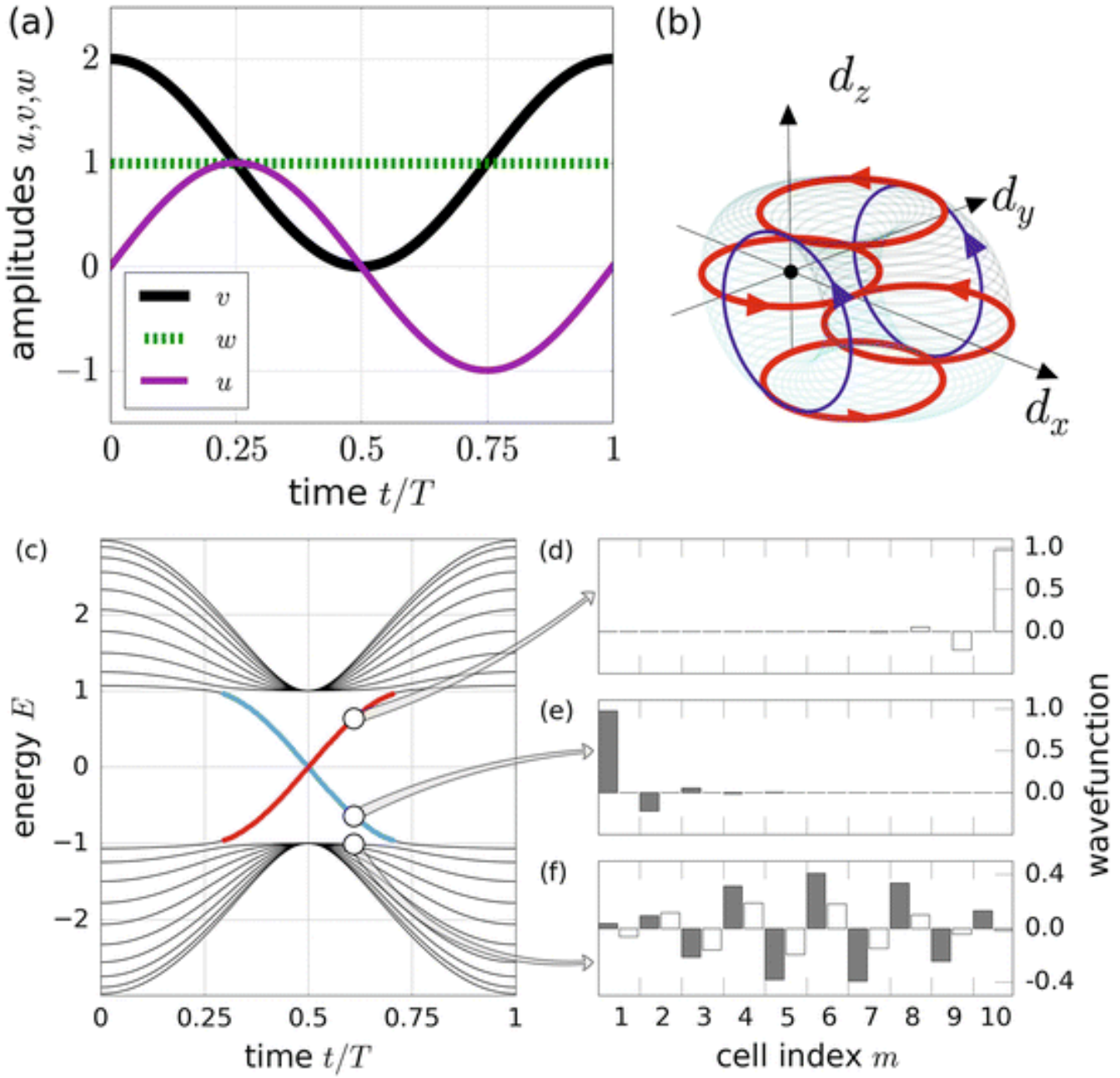
$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} u & v + w\cos k - iw\sin k \\ v + w\cos + iw\sin k & -u \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow$$

$$= (v + w\cos k)\sigma_x + w\sin k\sigma_y + u\sigma_z$$

$$\varepsilon_{\pm}^2(k) = h_x^2 + h_y^2 + h_z^2 = u^2 + v^2 + w^2 + 2vw\cos k$$

Rice-Mele model: $v \Rightarrow v + \bar{v}\cos 2\pi t/T$, $\quad u \Rightarrow u\sin 2\pi t/T$，保证每一个时刻都是绝缘体。

Charge Pumping: 拓扑绝缘体的导电性

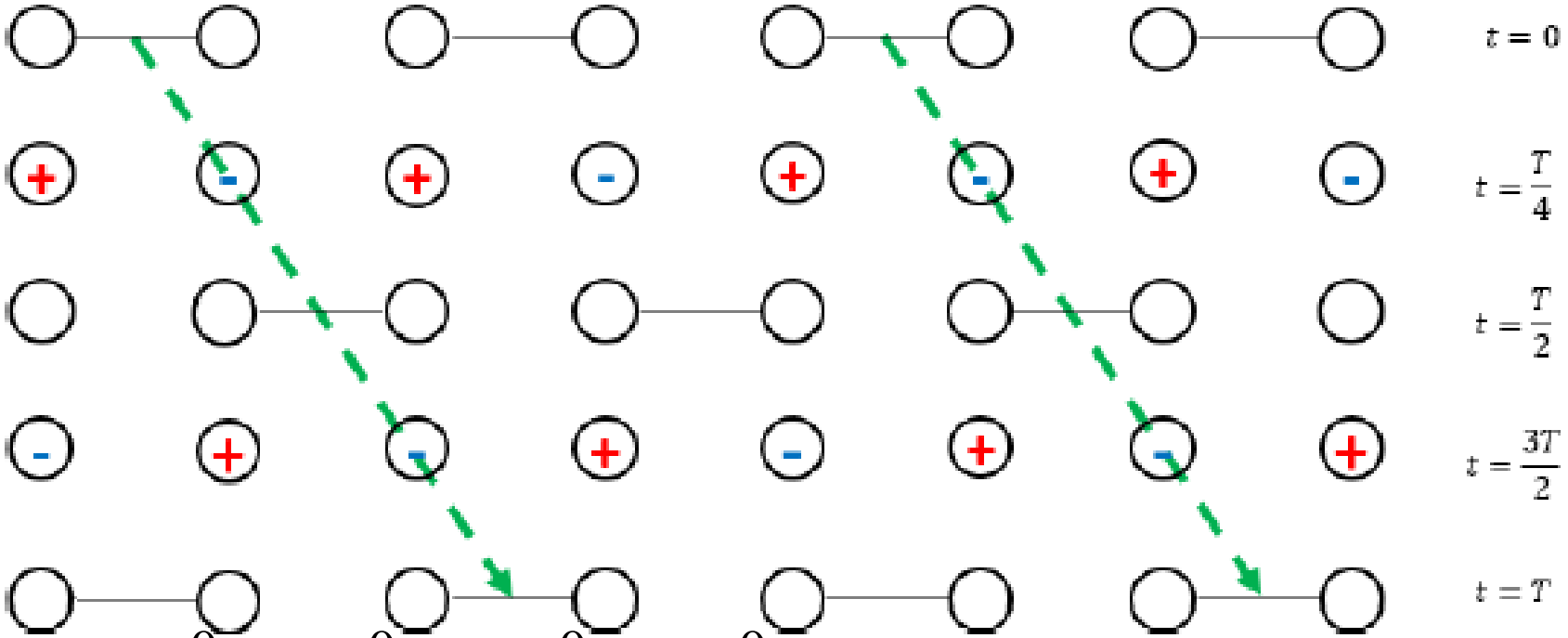


$v = 1 + \cos(2\pi t/T)$,
$w = 1$,
$u = \sin(2\pi t/T)$

☞$t = 0, T$, $u = 0$,
$v = 2 > w = 1$,
平凡的 SSH 绝缘体

☞$t = T/2$, $u = 0$,
$v = 0 < w = 1$,
非凡的 SSH 绝缘体

从边界态理解 Charge Pumping



- $t=0$：$v>0$，$w\sim 0$，$u=0$：
  $|\psi_l^-\rangle \simeq |lA\rangle - |lB\rangle$，电子等几率占据第 l 原胞里的 A、B 位置
- $t=T/4$，$v\sim 0, w\sim 0$，$u>0$
  $|\psi_l^-\rangle \simeq |lB\rangle$，电子主要占据第 l 个原胞里的 B 位置
- $T=T/2$，$v\sim 0, w>0, u=0$
  $|\psi_l^-\rangle \simeq |lA\rangle - |l+1B\rangle$，电子等几率占据第 l 个原胞里的 B 和 $l+1$ 个原胞里的 A 位置
- $t=3T/4$，$v\sim 0, w\sim 0$，$u<0$
- $t=T$：$v>0$，$w\sim 0$，$u=0$

从体的性质来理解 Charge Pumping

- 从体的性质理解：极化改变

$$\Delta \boldsymbol{p}_{el} = -e \int_0^T dt \int_{-\pi}^{\pi} dk \partial_t \mathcal{A}(k,t)$$

- 每个周期转移的电荷数目是拓扑不变量

从拓朴绝缘体角度看量子 Hall 效应

- 整数量子 Hall 效应发生在填充因子 ν 为整数附近。
- 此时的系统可以看成是满带绝缘体。
- 但是存在特殊的可导电的 chiral 边界态。

拓扑绝缘体

- Hall 电导的 TKNN 表达式

$$\sigma_{yx} = i\hbar \sum_n \frac{\langle 0|J_y|n\rangle\langle n|J_x|0\rangle - \langle 0|J_x|n\rangle\langle n|J_y|0\rangle}{(\varepsilon_n - \varepsilon_0)^2}$$

$$= ie^2\hbar \sum_n \frac{\langle 0|\partial_{k_y}\mathcal{H}|n\rangle\langle n|\partial_{k_x}\mathcal{H}|0\rangle - \langle 0|\partial_{k_x}\mathcal{H}|n\rangle\langle n|\partial_{k_y}\mathcal{H}|0\rangle}{(\varepsilon_n - \varepsilon_0)^2}$$

$$= \frac{e^2}{2\pi h}\int \Omega \qquad \boxed{\text{Berry connection}}$$

$$= \frac{e^2}{h}\frac{\gamma}{2\pi} \qquad \boxed{\text{Berry phase}}$$

Chern 拓扑绝缘体：整数量子 Hall 效应

$$\mathcal{H} = \frac{(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})^2}{2m} + V \qquad \Rightarrow \mathcal{H}(\boldsymbol{k}) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}\mathcal{H}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}} = \frac{(\boldsymbol{p} + \hbar\boldsymbol{k} + e\boldsymbol{A})^2}{2m} + V$$

$$\boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{r}} = \frac{i}{\hbar}[\boldsymbol{r}, \mathcal{H}] = \frac{\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}}{m} \qquad \Rightarrow \frac{\boldsymbol{p} + \hbar\boldsymbol{k} + e\boldsymbol{A}}{m} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\boldsymbol{k}}\mathcal{H}(\boldsymbol{k})$$

$$\boldsymbol{J} = -e\boldsymbol{v} = -\frac{e}{\hbar}\nabla_{\boldsymbol{k}}\mathcal{H}(\boldsymbol{k})$$

$$\sigma_{yx}^{(n)} = i\hbar \sum_{m\neq n} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\langle u_{n\boldsymbol{k}}|J_y|u_{m\boldsymbol{k}}\rangle\langle u_{m\boldsymbol{k}}|J_x|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle - \langle u_{n\boldsymbol{k}}|J_x|u_{m\boldsymbol{k}}\rangle\langle u_{m\boldsymbol{k}}|J_y|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle}{[\mathcal{E}_n(\boldsymbol{k}) - \mathcal{E}_m(\boldsymbol{k})]^2}$$

$$= i\frac{e^2}{\hbar} \sum_{m\neq n} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\langle u_{n\boldsymbol{k}}|\partial_{k_y}\mathcal{H}|u_{m\boldsymbol{k}}\rangle\langle u_{m\boldsymbol{k}}|\partial_{k_x}\mathcal{H}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle - \langle u_{n\boldsymbol{k}}|\partial_{k_x}\mathcal{H}|u_{m\boldsymbol{k}}\rangle\langle u_{m\boldsymbol{k}}|\partial_{k_y}\mathcal{H}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle}{[\mathcal{E}_n(\boldsymbol{k}) - \mathcal{E}_m(\boldsymbol{k})]^2}$$

$$= -\frac{e^2}{h} \iint \frac{d^2k}{(2\pi)} \; \Omega_{x,y}(\boldsymbol{k}) \;\Rightarrow\; 2(1-G) \quad \text{Gauss-Bonnet theorem}$$

强磁场下二维方格子的能带结构：$\alpha = 1/3$

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j \qquad \boldsymbol{B} = (0,0,B) \qquad \boldsymbol{A} = (0, Bx, 0)$$

$$t_{IJ} = t_{<IJ>} e^{-ie/\hbar \int_{\boldsymbol{r}_I}^{\boldsymbol{r}_J} \mathbf{A}\cdot d\boldsymbol{r}}$$

$$t_{(m,n),(m+1,n)} = t \exp\left\{-ie/\hbar \int_{(m,n)a}^{(m+1,n)a} Bx dy\right\} = t$$

$$t_{(m,n),(m,n+1)} = t \exp\left\{-ie/\hbar \int_{(m,n)a}^{(m,n+1)a} Bx dy\right\}$$

$$= t \exp\left\{-ie/\hbar \int_{(m,n)a}^{(m,n+1)a} Bma dy\right\} = te^{-imeBa^2/\hbar} = te^{-i2\pi m\alpha}$$

$$= \begin{cases} t & m = 3p \\ te^{-i2\pi/3} & m = 3p+1 \\ te^{+i2\pi/3} & m = 3p-1 \end{cases}$$

$$|\psi\rangle = \sum_{mn} C_{mn} |mn\rangle \qquad \varepsilon|\psi\rangle = \mathcal{H}|\psi\rangle$$

$$\varepsilon C_{mn} = t_{m-1,n} C_{m-1,n} + t_{m,n-1} C_{m,n-1} + t_{m+1,n} C_{m+1,n} + t_{m,n+1} C_{m,n+1}$$

$$\alpha = eBa^2/h$$
$$= Ba^2/(h/e)$$
$$= \Phi/\Phi_0$$

一个原胞的磁力线个数

$a \sim 5$Å

$$\alpha \sim \frac{B}{1T} \times 7 \times 10^{-5}$$

实验中 α 非常小 $\sim 10^{-3}$

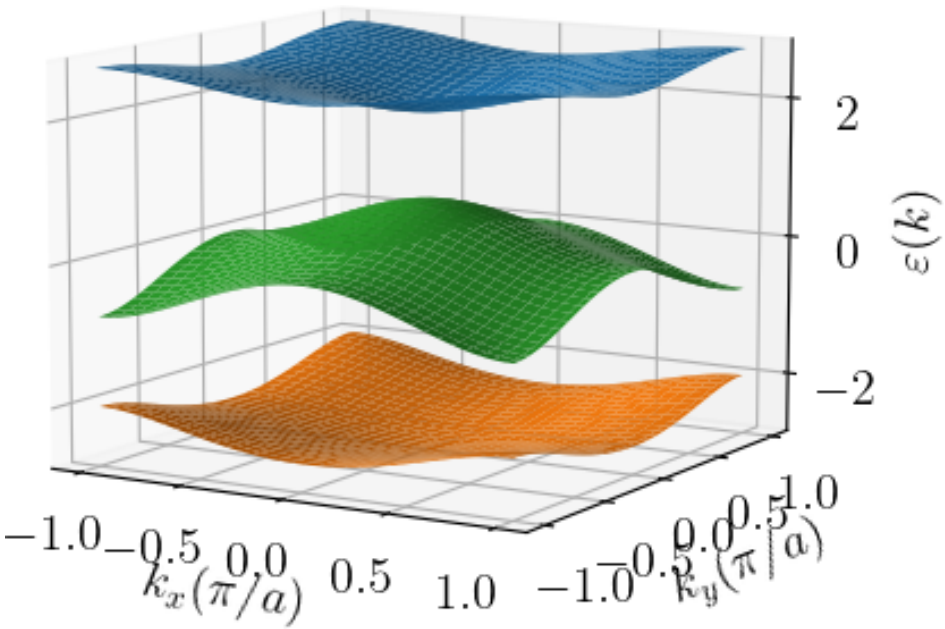
强磁场下二维方格子的能带结构： $\alpha = 1/3$

$$|\psi_{\boldsymbol{k}}^{l}\rangle = C\sum_{p,n} e^{i[k_x(3p+l)+k_y n]}|3p+l,n\rangle \qquad l = 0,\pm 1$$

$$\varepsilon\begin{pmatrix} C_{\boldsymbol{k}}^{-1} \\ C_{\boldsymbol{k}}^{0} \\ C_{\boldsymbol{k}}^{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2t\cos(k_y+\frac{2\pi}{3}) & te^{ik_x} & te^{-ik_x} \\ te^{-ik_x} & 2t\cos k_y & te^{ik_x} \\ te^{ik_x} & te^{-ik_x} & 2t\cos(k_y-\frac{2\pi}{3}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_{\boldsymbol{k}}^{-1} \\ C_{\boldsymbol{k}}^{0} \\ C_{\boldsymbol{k}}^{1} \end{pmatrix}$$

$$0 = \varepsilon^3 - 6\varepsilon - 2[\cos(3k_x)+\cos(3k_y)]$$

$$\varepsilon_l = \sqrt{8}\cos\left\{\frac{2l\pi}{3} + \arccos\left[\frac{\cos(3k_x)+\cos(3k_y)}{\sqrt{8}}\right]\right\} \qquad l = 0,\pm 1$$

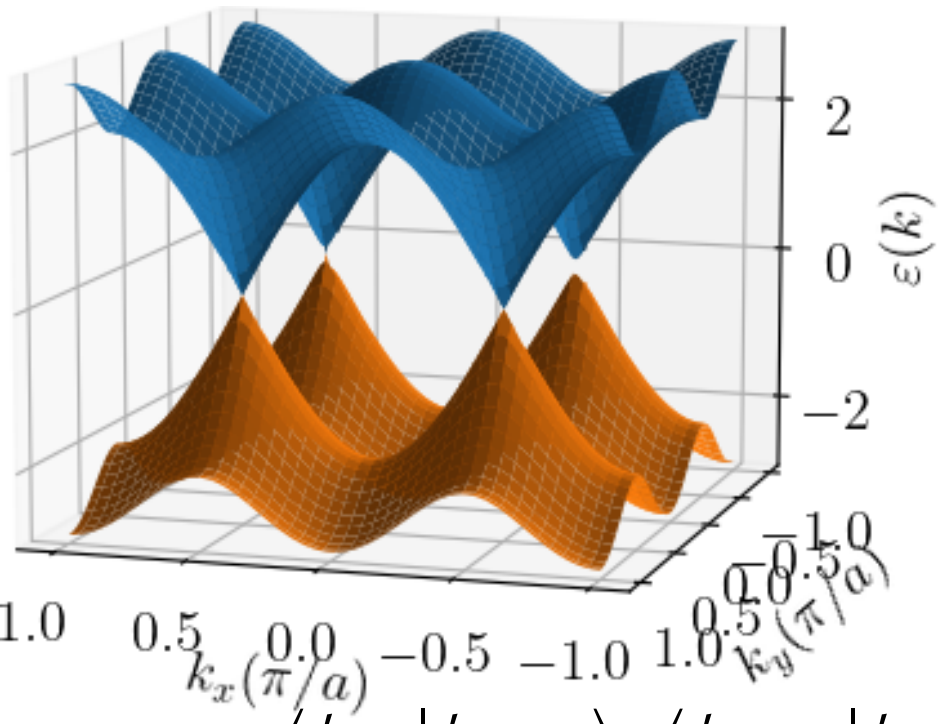


- 分为三个互相不交叠的子带
- 从下到上 Chern number 分别是： 1,-2,1

强磁场下二维方格子的能带结构：$\alpha = 1/2$

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{k}) = 2t \begin{pmatrix} \cos k_y & \cos k_x \\ \cos k_x & -\cos k_y \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \pm 2t \sqrt{\cos^2 k_x + \cos^2 k_y}$$



- 分为两个子带，两带在 $\varepsilon = 0$ 接触
- 如何计算 Chern number C：把二维 BZ 分为很多小方型格子，然后计算这个小格子里的 Berry phase，这些 Berry phase 之和就是 $2\pi C$

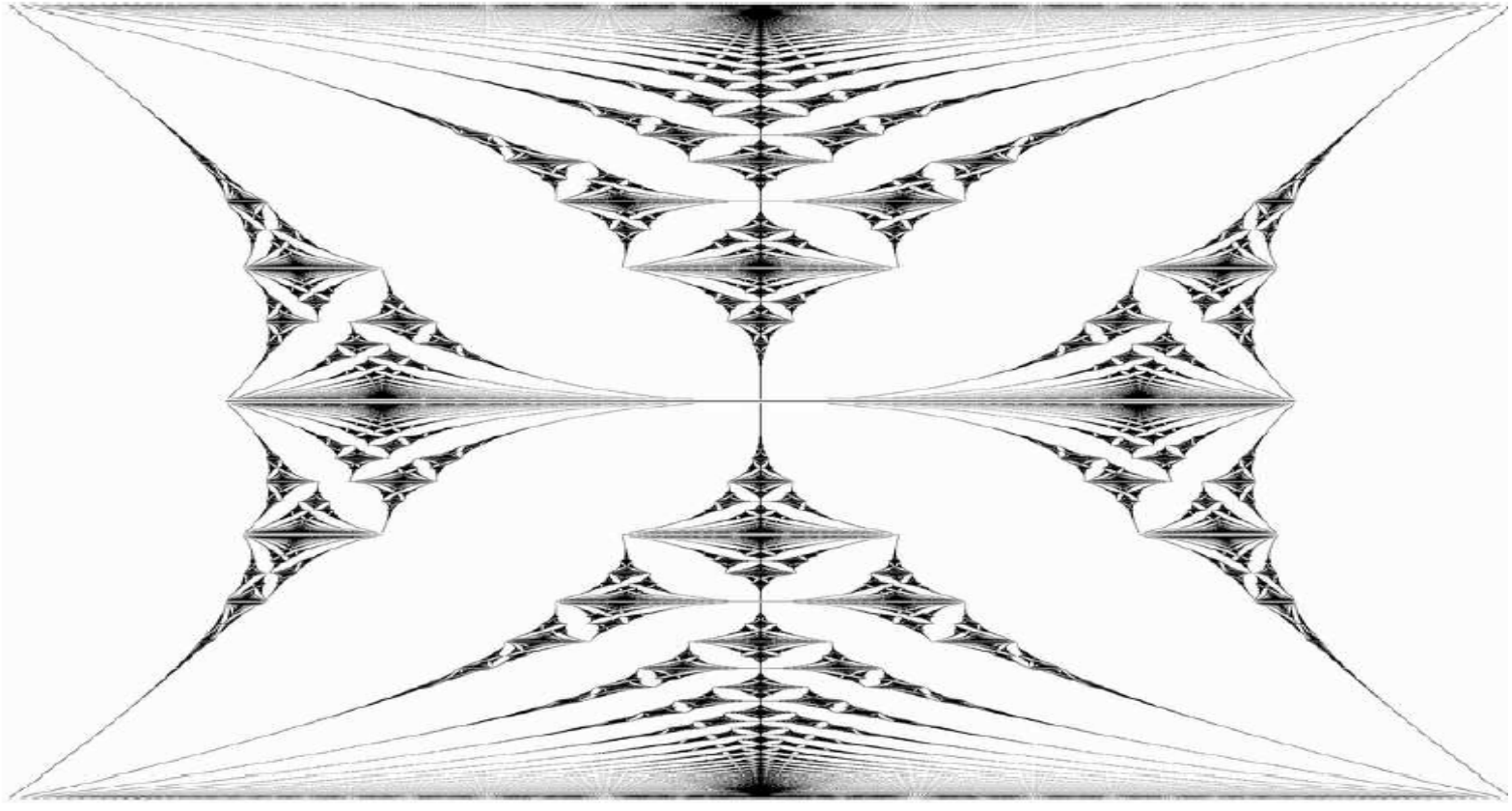
$$e^{i\alpha_{l,m}} = \frac{\langle\psi_{l,m}|\psi_{l+1,m}\rangle}{|\langle\psi_{l,m}|\psi_{l+1,m}\rangle|} \frac{\langle\psi_{l+1,m}|\psi_{l+1,m+1}\rangle}{|\langle\psi_{l+1,m}|\psi_{l+1,m+1}\rangle|} \frac{\langle\psi_{l+1,m+1}|\psi_{l,m+1}\rangle}{|\langle\psi_{l+1,m+1}|\psi_{l,m+1}\rangle|} \frac{\langle\psi_{l,m+1}|\psi_{l,m}\rangle}{|\langle\psi_{l,m+1}|\psi_{l,m}\rangle|}$$

$$\sum \alpha_{l,m} = 2\pi C$$

Fukui *et.al.*, Phys. Soc. Jap. **74**, 1674 (2003)

Hofstadter Butterfly

[D. R. Hofstadter, PRB **14**, 2239 (1976)]
"Gödel, Escher, Bach: An Eternal Golden Braid"

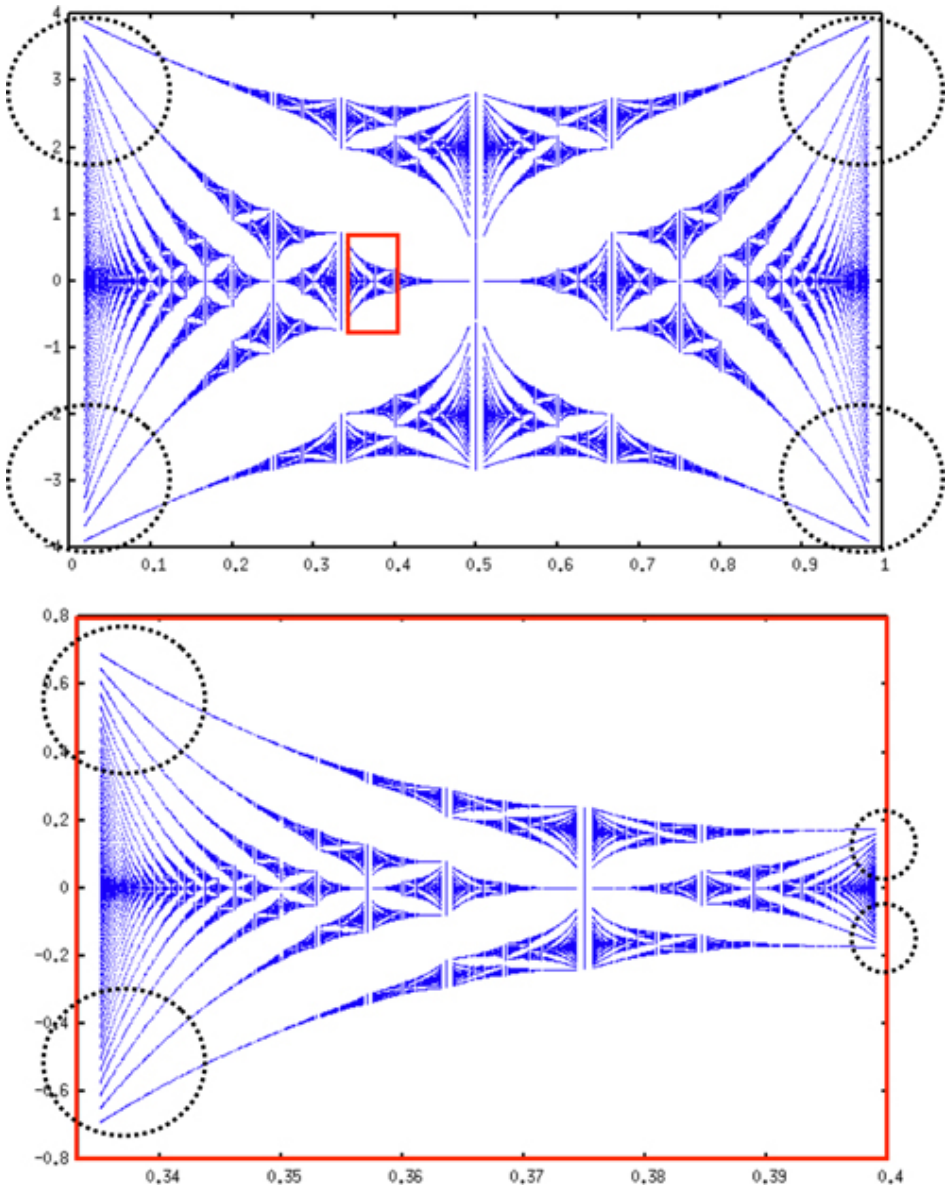


x: Magnetic Field; y: Energy band

Hofstadter Butterfly

$$\alpha = \frac{a^2 B}{\Phi_0}$$

- 如果 $\alpha = p/q$ 是有理数，p, q 是互质的整数
  - 能带分为 q 个子带
  - 有些子带非常靠近，整体上看近乎有 $[q/p = 1/\alpha]$ 个子带
  - 如果 q 是奇数，互相不交叠，除了中心外每个能带 Chern number 为 1。中心带 $C = -(q-1)$。
  - 如果 q 是偶数，中心带之外 $C = 0$，中心两个能带 C 总和为零。
- 如果 α 是无理数
  - 无穷多个子带
  - 子带形成 Cantor 集

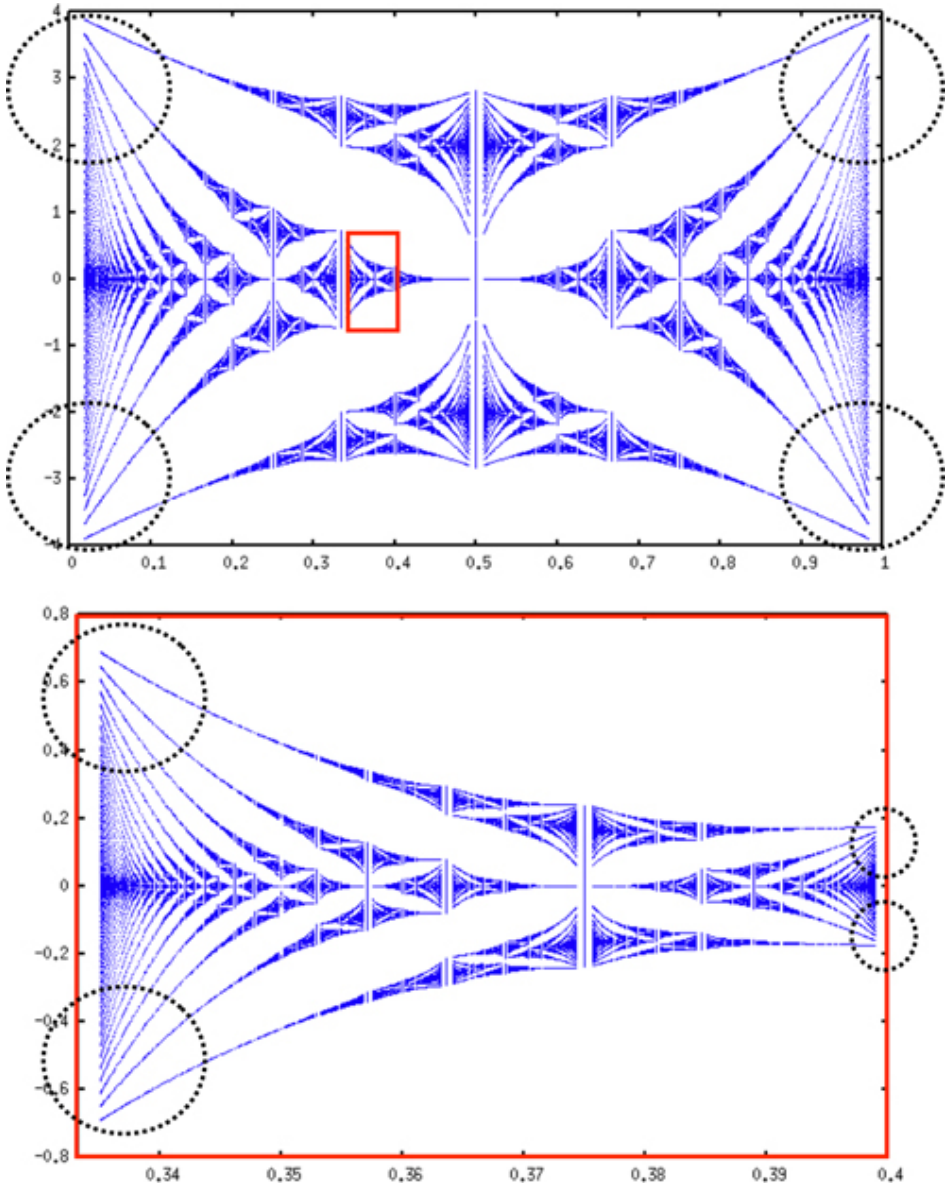


I. Satija,"Butterfly in the Quantum World" Fig 7.8

Hofstadter Butterfly

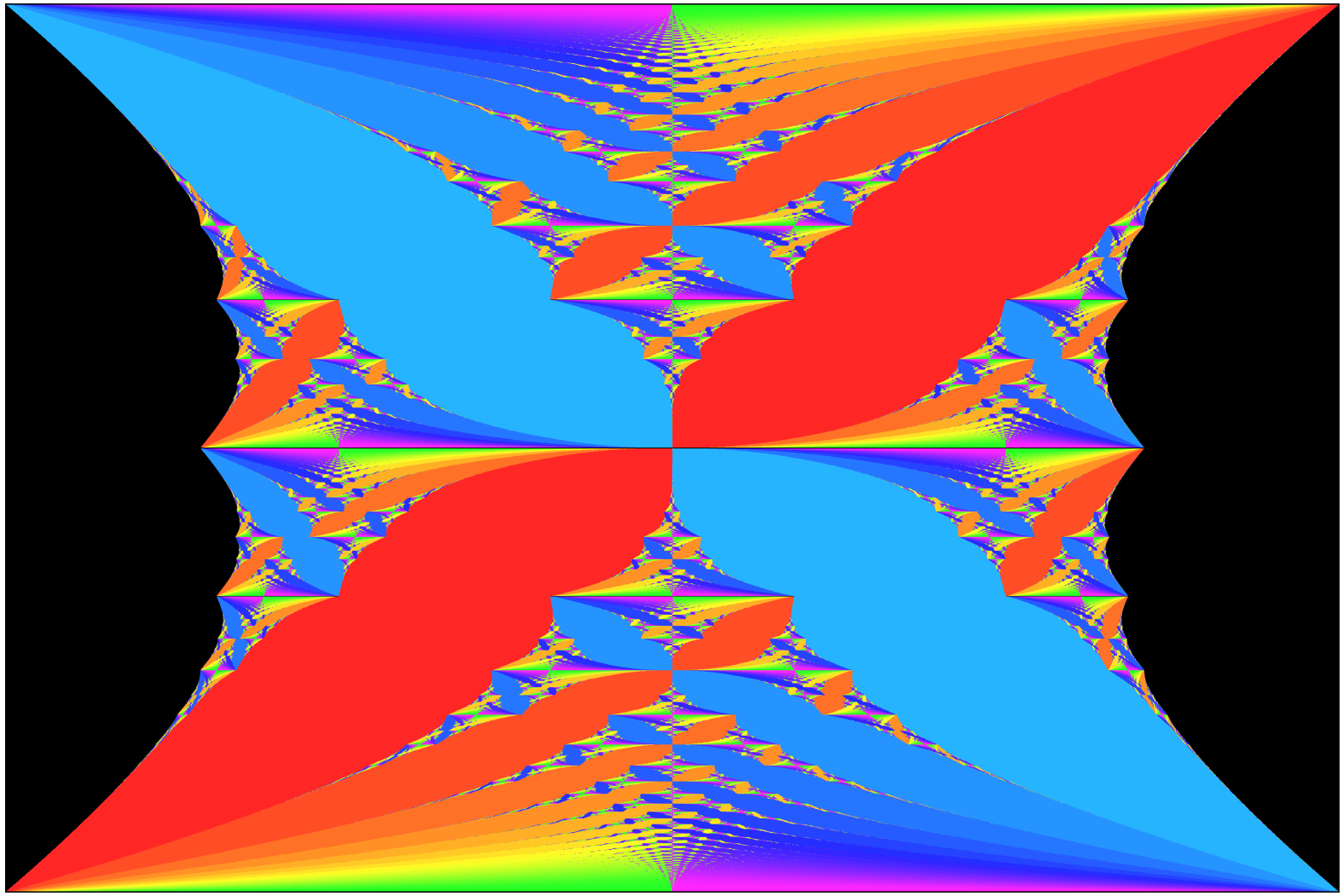
$$\alpha = \frac{a^2 B}{\Phi_0}$$

- 能带为具有自相似性的分型结构
- 存在杂质/无序的时候，精细的子带结构会被抹平，整体上看近乎有 $[1/\alpha]$ 个子带



I. Satija,"Butterfly in the Quantum World" Fig 7.8

从拓朴角度看量子 Hall 效应：Hofstadter Butterfly



x: Magnetic field; y: Chemical potential; Color: Integer Hall Conductance

反常 Hall 效应

$$\hbar\dot{\boldsymbol{k}} = -e\boldsymbol{E} + \cdots$$

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{k}) + \dot{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{k})$$

$$= \boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{k}) - \frac{e\boldsymbol{E}}{\hbar} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{k})$$

☞ 没有外加磁场的情况下，
拓扑非平凡体系也可以出现
$\perp \boldsymbol{E}$ 的电流。

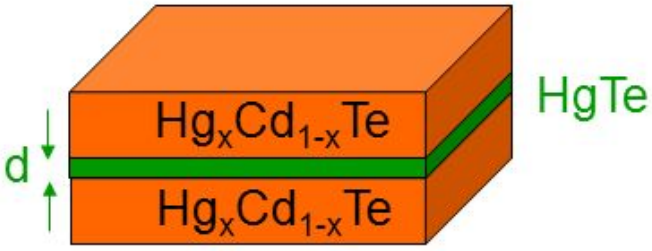
☞ 反常 Hall 效应

☞ 通常要求时间反演对称性被破坏

	Symmetry					S
Class	T	P	C	1	2	3
A	0	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0
AIII	0	0	1	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$
AI	1	0	0	0	0	0
BDI	1	1	1	$\mathbb{Z}$	0	0
D	0	1	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0
DIII	-1	1	1	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$
AII	-1	0	0	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$
CII	-1	-1	1	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$
C	0	-1	0	0	$\mathbb{Z}$	0
CI	1	-1	1	0	0	$\mathbb{Z}$

量子自旋 Hall 效应：HgTe 量子阱

Quantum Spin Hall Insulator in HgTe quantum wells



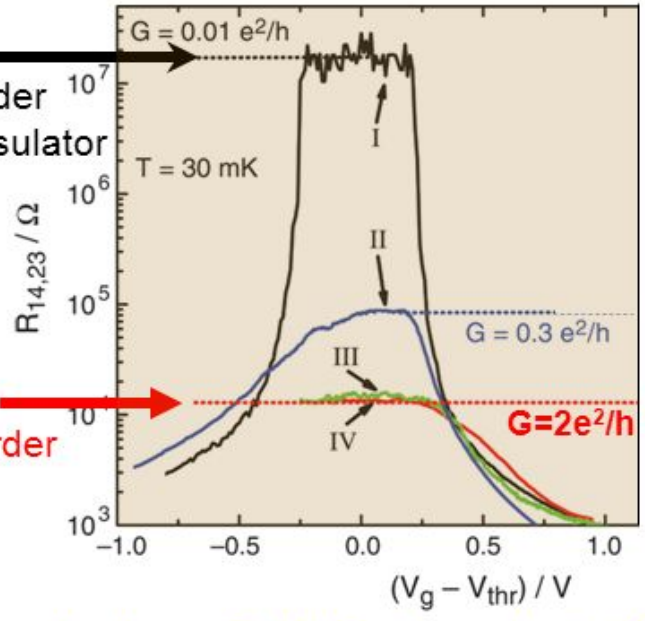
Theory: Bernevig, Hughes and Zhang, Science 2006

Predict inversion of conduction and valence bands for d>6.3 nm → QSHI

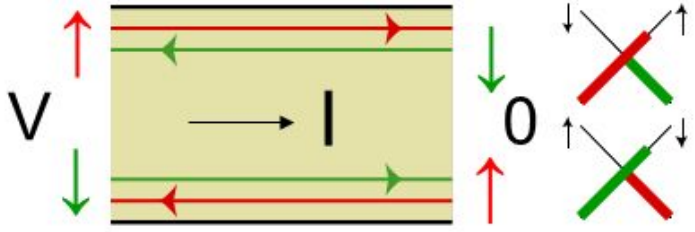
Expt: Konig, Wiedmann, Brune, Roth, Buhmann, Molenkamp, Qi, Zhang Science 2007

d< 6.3 nm
normal band order
conventional insulator

d> 6.3nm
inverted band order
QSH insulator

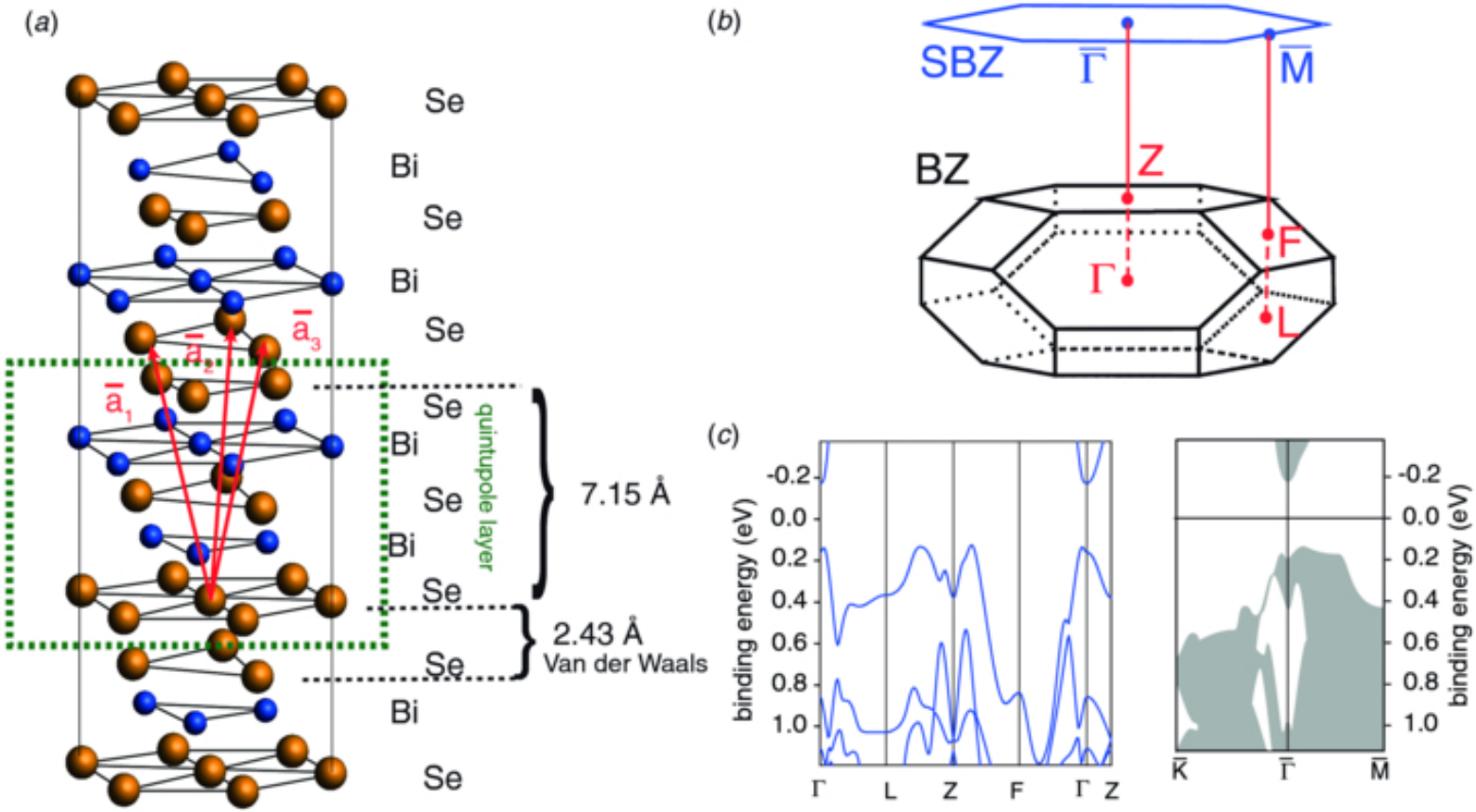


Landauer Conductance $G=2e^2/h$

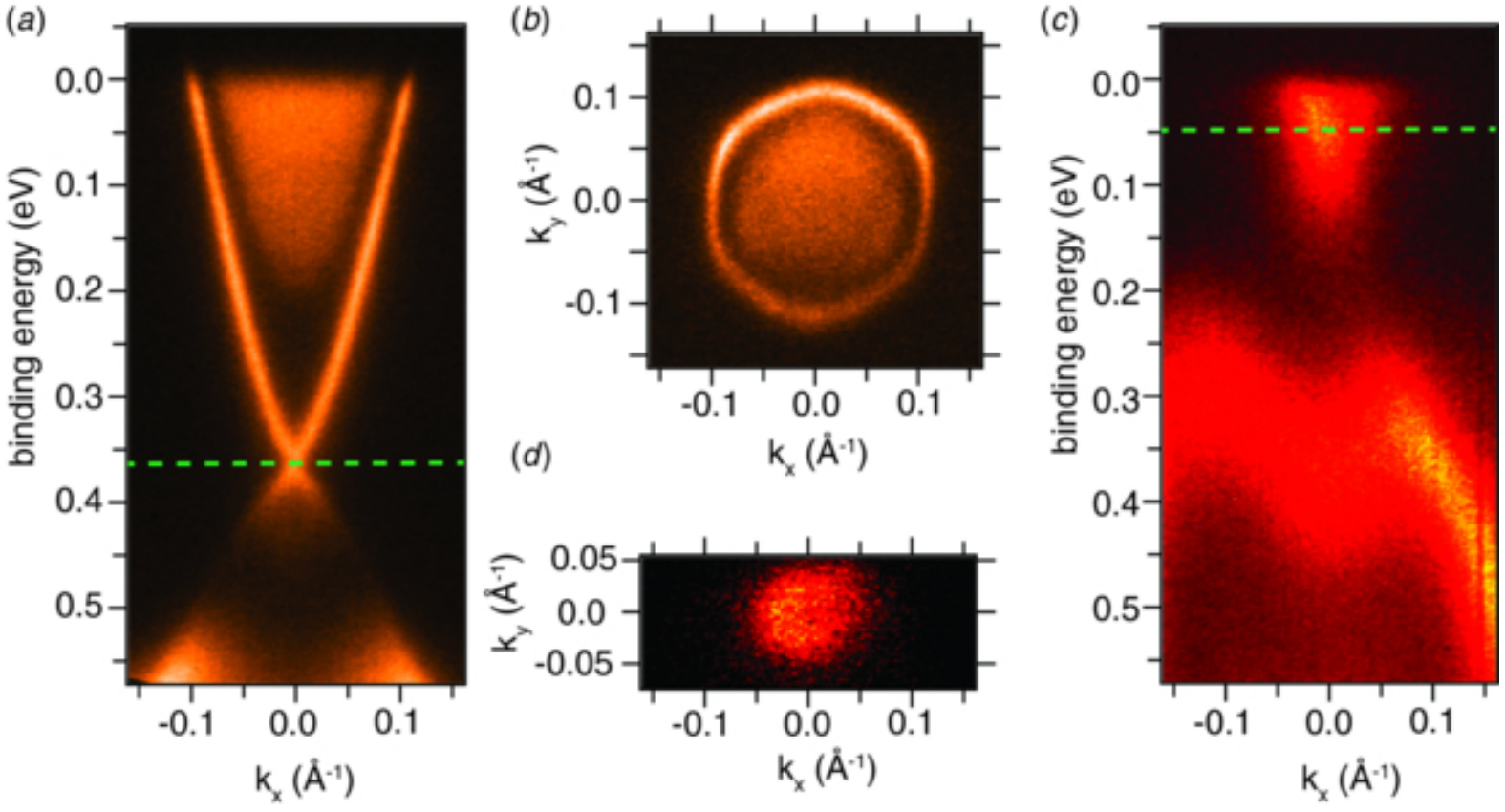


Measured conductance $2e^2/h$ independent of W for short samples ($L<L_{in}$)

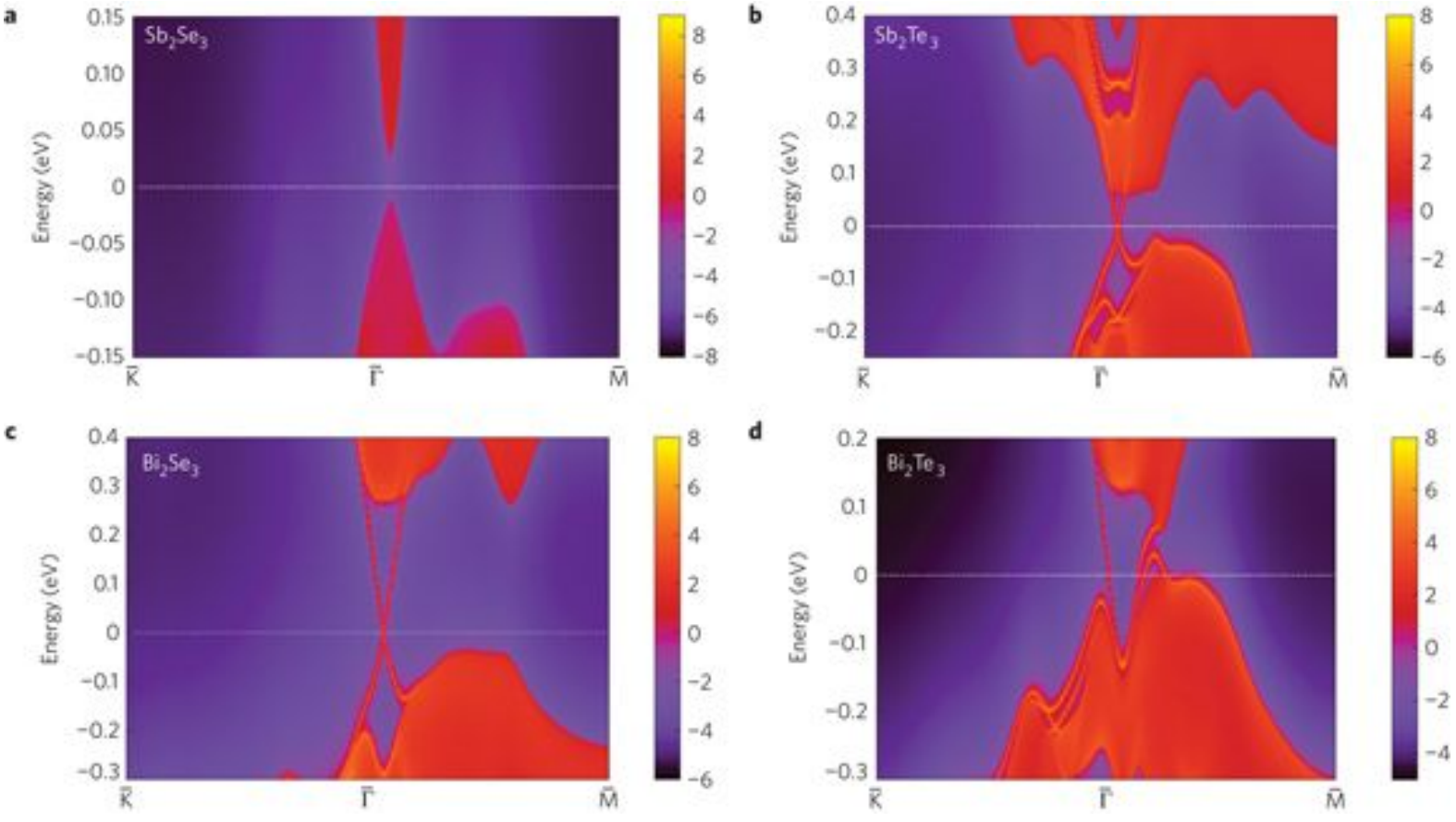
Z_2 拓扑绝缘体: Bi_2Se_3



ARPES for Bi_2Se_3



ARPES for surface states

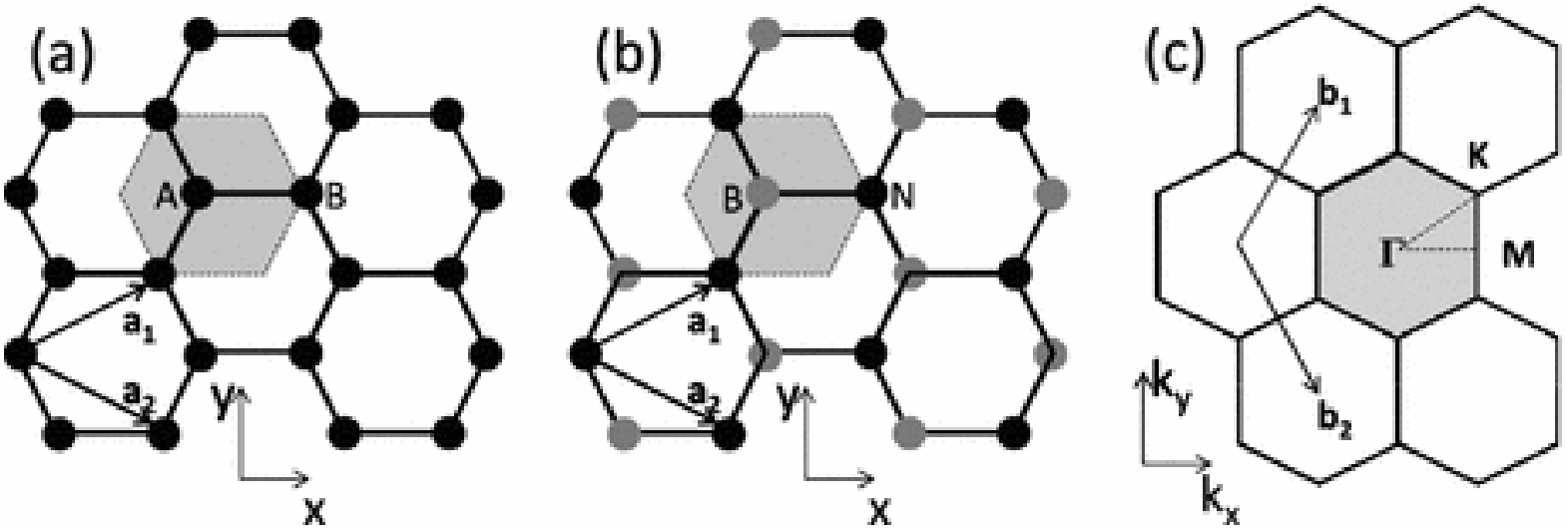


a: Sb_2Se_3; b: Sb_2Te_3; c: Bi_2Se_3; d: Bi_2Te_3.

Topoligically non-trivial (semi)metal

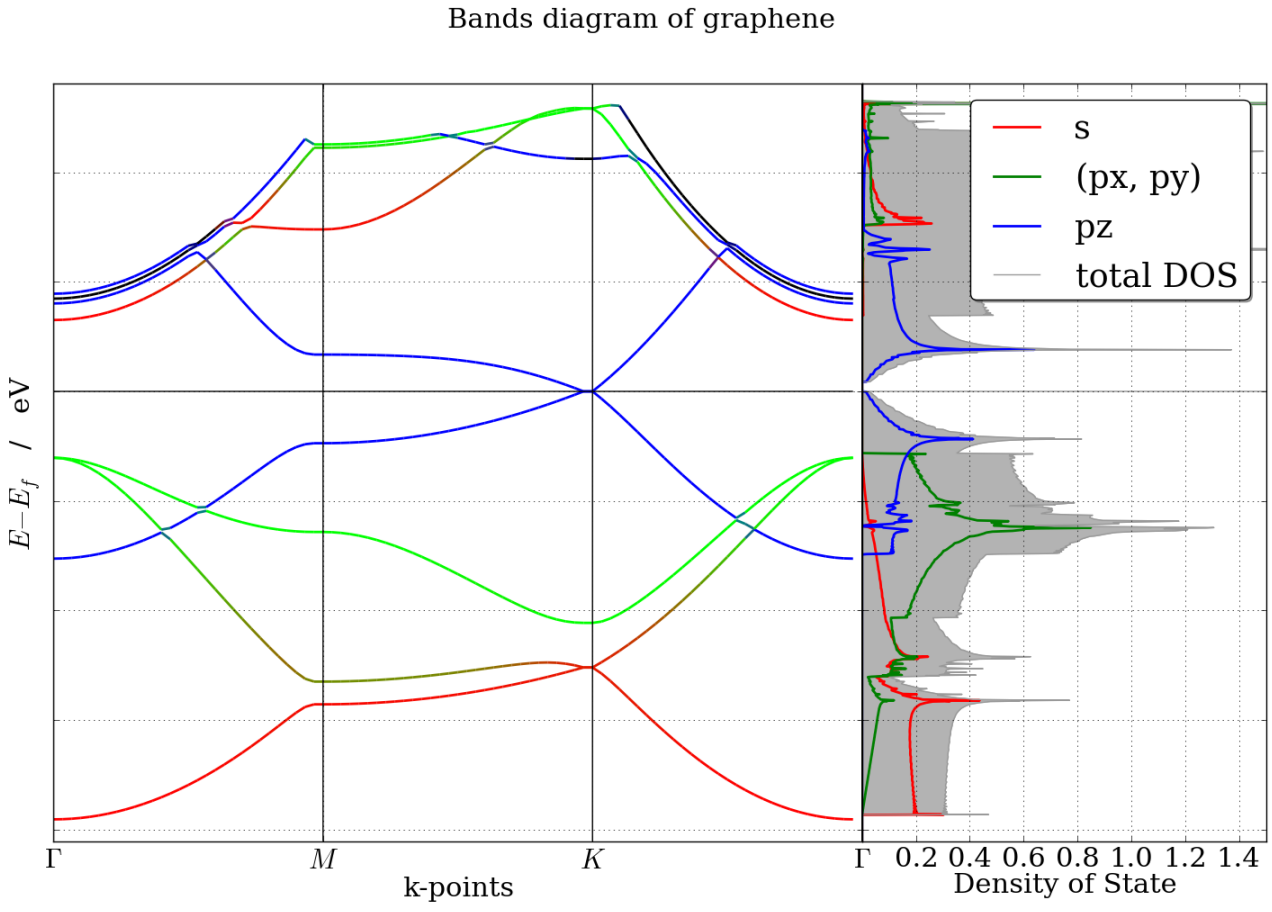
费米面上的 Bundle：底流形是球面

- Dirac material: Graphene（二维）, Cd_3As_2（三维）···

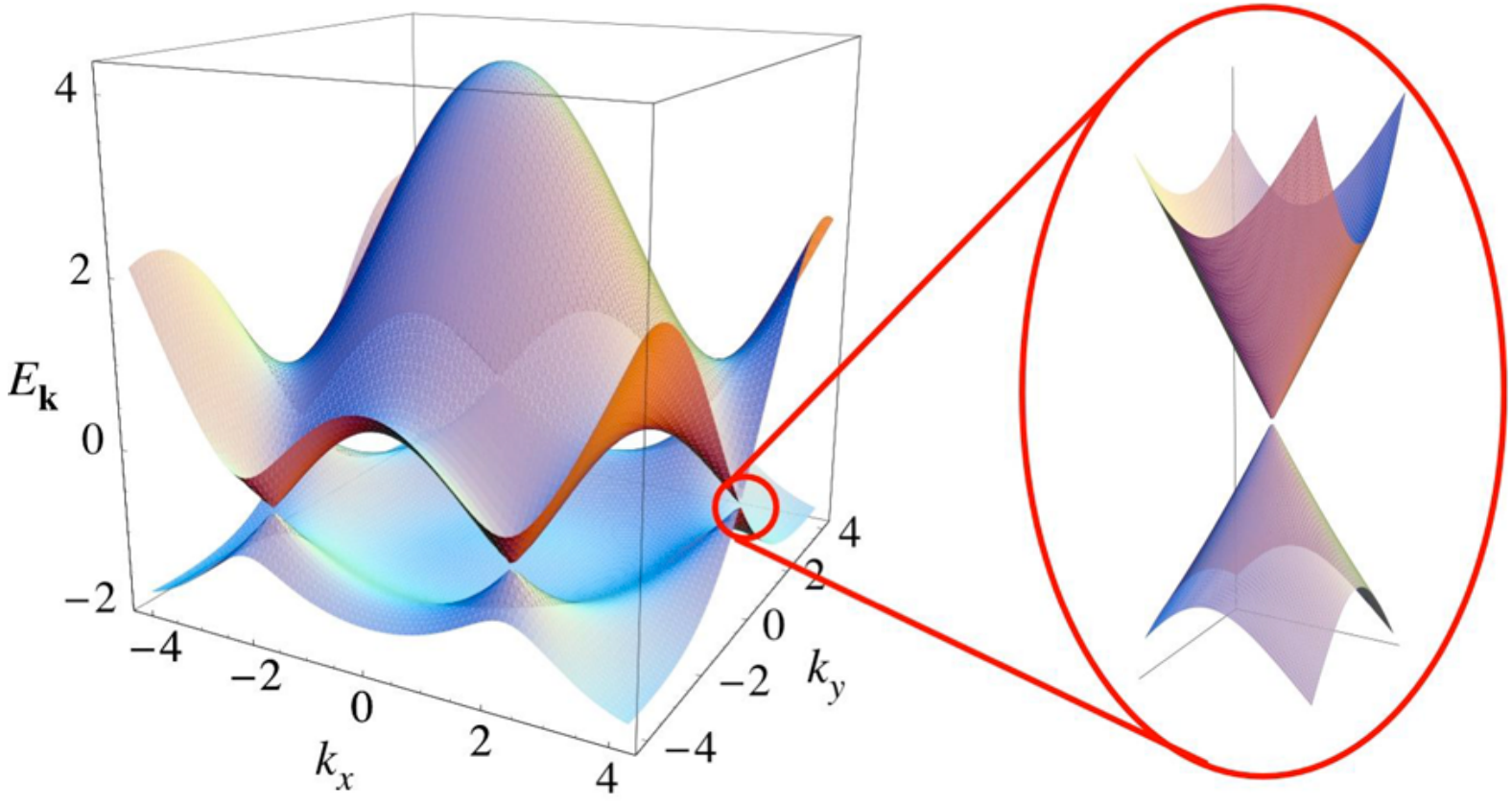


- Weyl semimetal：TaAs ···

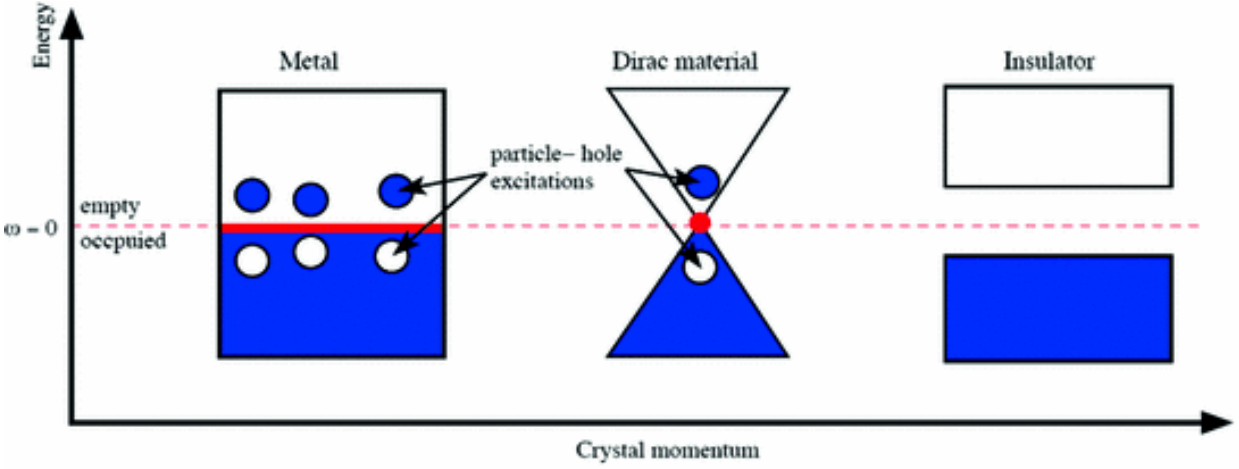
（二维）Graphene 的能带结构

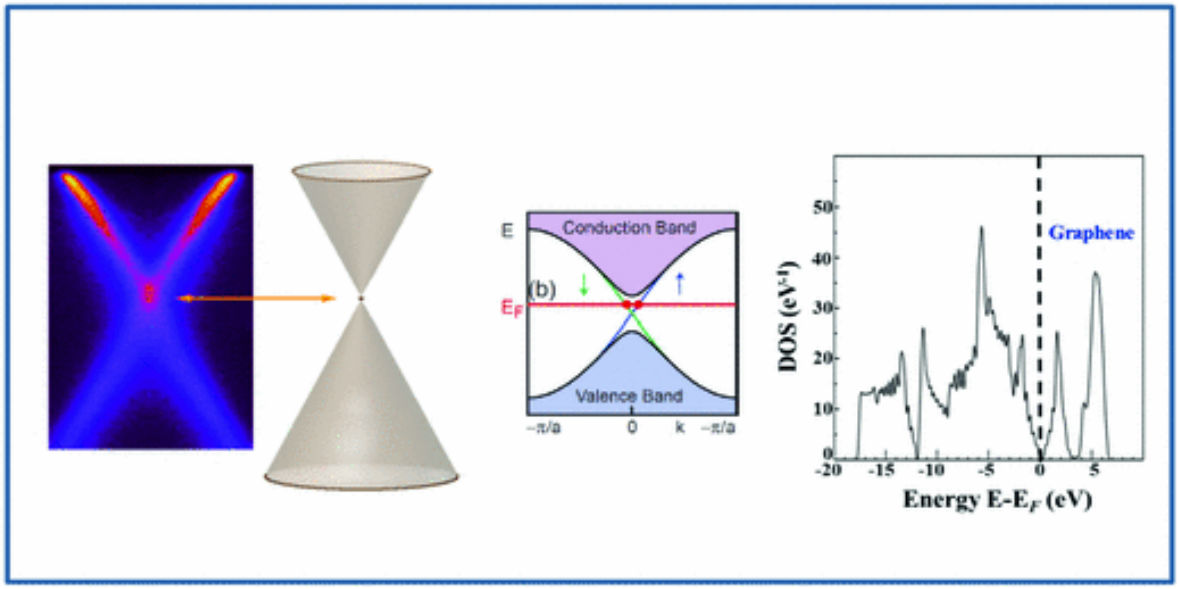


（二维）Graphene 的能带结构

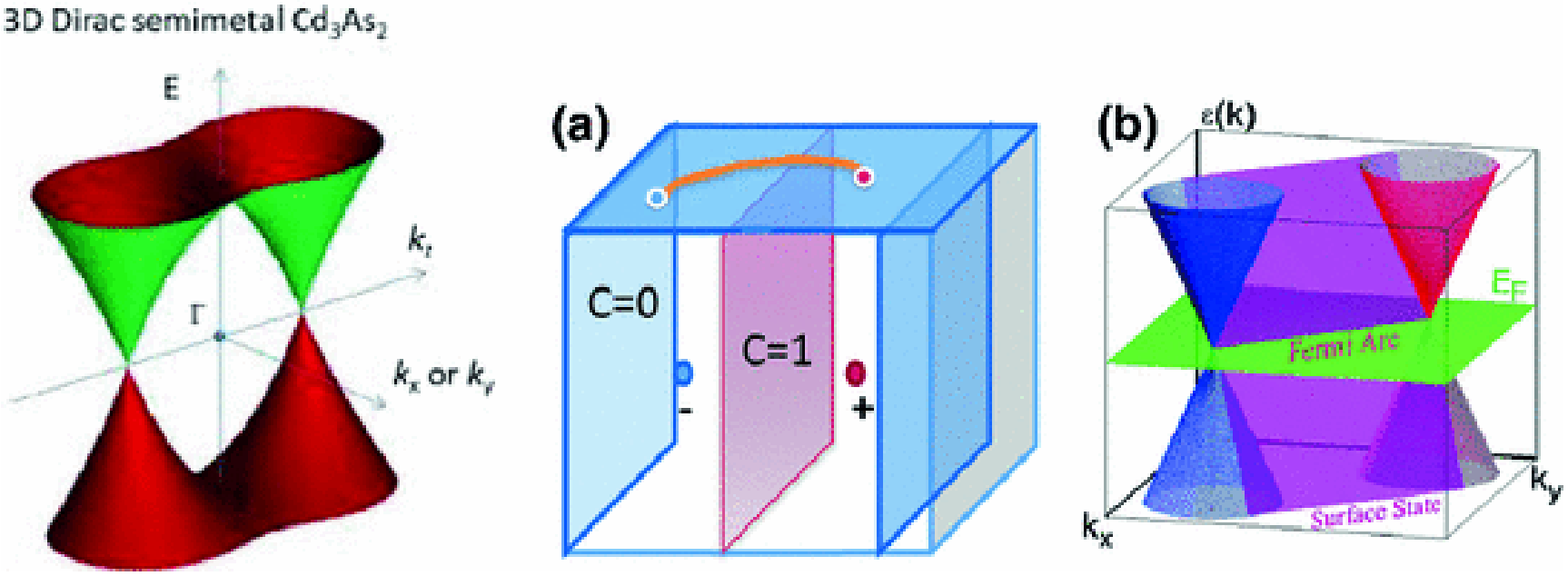


（三维）Dirac semimetal Cd_3As_2 的能带结构

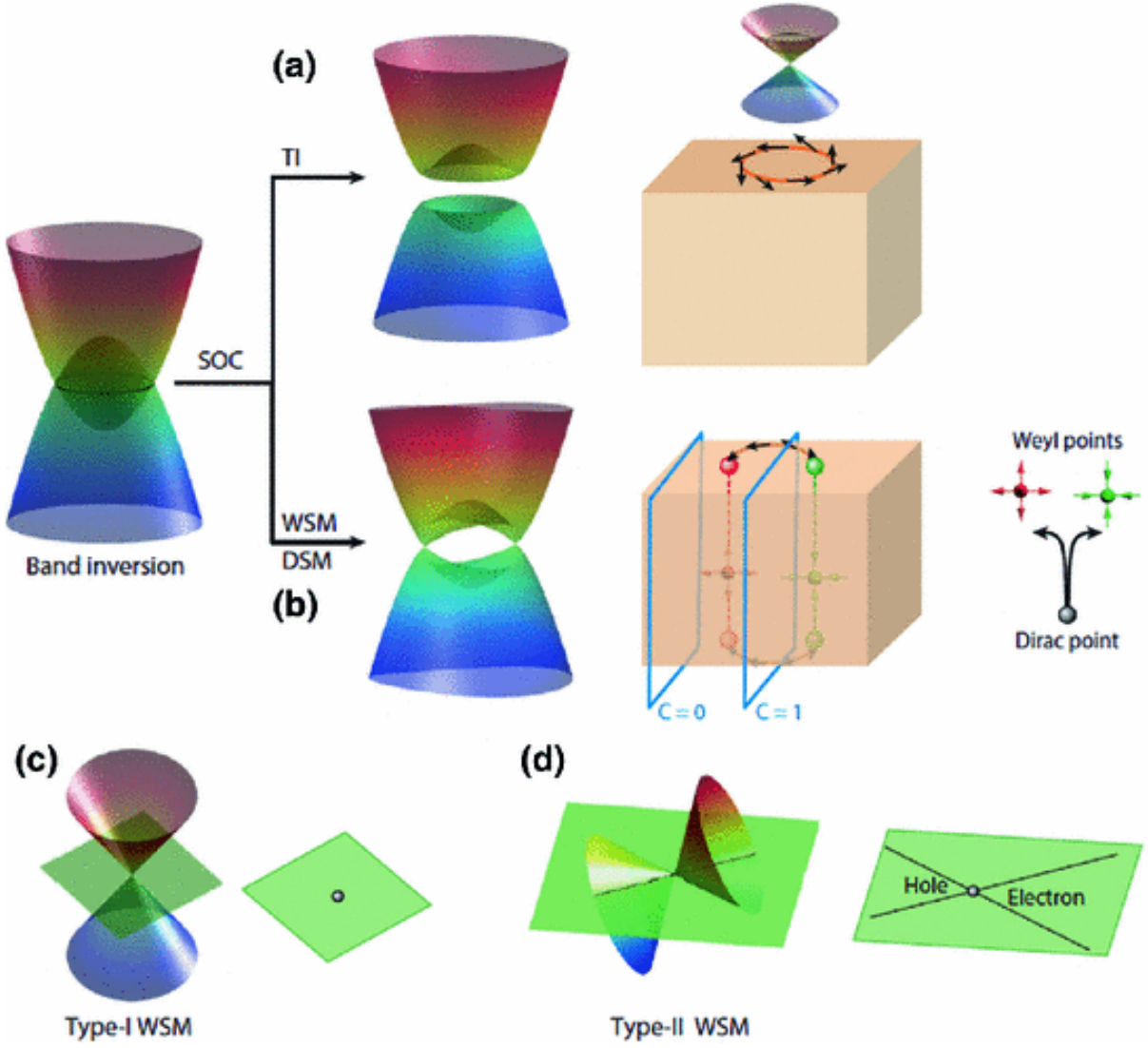




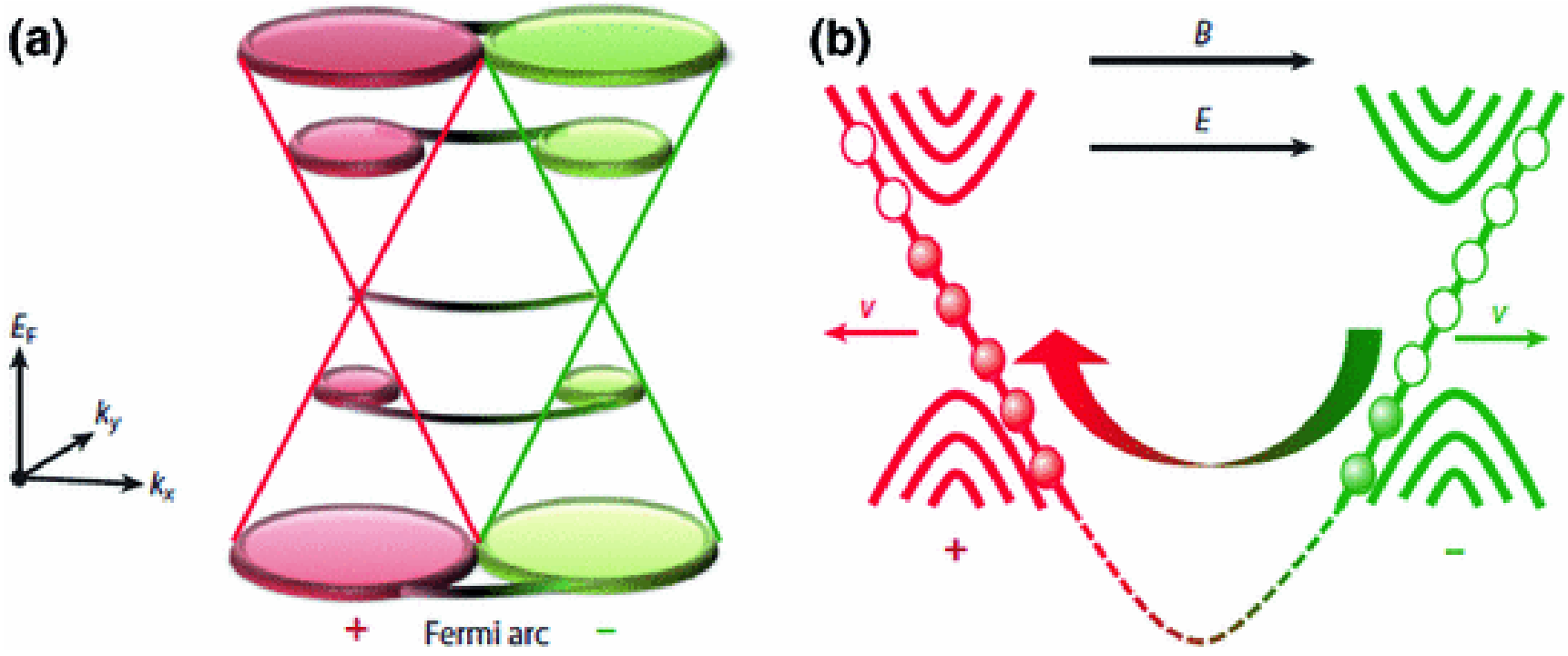
Cd_3As_2 里的 Fermi arc



Weyl semimetal: TaAs · · ·



Weyl semimetal: TaAs · · ·



Weyl 半金属里的负磁阻

"Boltzmann equation approach to anomalous transport in a Weyl metal", Ki-Seok Kim, Heon-Jung Kim, and M. Sasaki, PRB **89**, 195137 (2014)

- 正常情况下磁场使得垂直方向电子运动偏离电场方向，磁阻为正，$\Delta\rho/\rho_0 = [\rho(B) - \rho_0]/\rho_0 > 0$
- Weyl 半金属里 $\boldsymbol{E}//\boldsymbol{B}$ 时会出现负磁阻，$\Delta\rho/\rho_0 = [\rho(B) - \rho_0]/\rho_0 < 0$

$$[1 + \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{p})]\partial_t f_n + [\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{p}) + e\boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{B}]\cdot\nabla_{\boldsymbol{r}} f_n$$
$$+ [e\boldsymbol{E} + e\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{B} + e^2(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{p})]\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}} f = \partial_t f|_{scattering}$$

实空间的拓扑

- Topological defects
- Topological crystals
  Möbius strips of $NbSe_3$, $TaSe_3$, TaS_3
- Topological excitations
  - Skymion
  - Vortex state in superfluid