

专题: 非厄米物理前沿

一维 $\mathcal{PT}$ 对称非厄米自旋轨道耦合
Su-Schrieffer-Heeger 模型的拓扑性质*李家锐 王梓安 徐彤彤[†] 张莲莲 公卫江

(东北大学理学院, 沈阳 110819)

(2022 年 4 月 24 日收到; 2022 年 5 月 31 日收到修改稿)

理论上分析了受自旋指标调控并施以增益和损耗复势能的一维非厄米自旋轨道耦合 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型的拓扑性质和能谱特性. 发现虚势能导致体系的拓扑非平庸区出现能谱虚化, 而在拓扑平庸区发生 $\mathcal{PT}$ 相变. 此外, 虚势能和自旋轨道耦合共同作用使得拓扑平庸区中发生拓扑相变, 并且拓扑非平庸区变宽. 能谱结果显示, 虚势能和自旋轨道耦合对于体系的零能态有明显的调控作用, 主要在于出现了 4 种局域性、数目均不同的零能态. 这说明虚势能和自旋轨道耦合对体系的能带结构的特殊调节效果. 本文有助于理解 $\mathcal{PT}$ 对称非厄米系统的拓扑相变行为.

关键词: $\mathcal{PT}$ 对称, 拓扑相变, Su-Schrieffer-Heeger 晶格, 自旋轨道耦合

PACS: 03.65.Vf, 73.22.Gk, 71.70.Ej, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.71.20220796

1 引言

多年来, 具有空间和时间反演组合对称性 ($\mathcal{PT}$ 对称性) 的非厄米哈密顿量一直是量子物理领域的研究热点. $\mathcal{PT}$ 对称性的概念最早是在 1998 年由 Bender 和 Boettcher 提出的, 他们发现在 $\mathcal{PT}$ 对称破缺发生之前, 系统能够出现纯实数的本征能谱^[1]. 随着非厄米和拓扑量子物理的发展, $\mathcal{PT}$ 对称拓扑量子物理已经成为一个重要的研究方向^[2–5].

在众多非厄米 $\mathcal{PT}$ 对称体系的结构中, Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型是最基本、最重要的体系之一^[6–8]. 所谓的一维 SSH 模型是一种具有交替跳跃系数的一维两能带晶格^[9–12]. 在厄米情况下, 通过调节胞内和胞间跃迁系数的比值, 在布里渊区的边界处会出现能隙闭合再打开的过程, 即拓扑相变^[13]. 在开边界条件下, 拓扑非平庸区的能隙

中会出现局域在系统两端的零能边缘态. 正因为 SSH 模型清晰的拓扑特性, 被视为非厄米拓扑量子物理的重要研究对象. 朱保刚等^[14]研究了在模型两端具有增益和损耗虚势能的 $\mathcal{PT}$ 对称非厄米 SSH 模型. 发现虚势能的加入会导致体系的拓扑平庸区和非平庸区表现出不同的特性. 在拓扑平庸区中, 虚势能会导致系统经历自发的 $\mathcal{PT}$ 对称破缺转变. 而在拓扑非平庸区, 仅会出现自发的 $\mathcal{PT}$ 对称破缺相. 随后, 许多课题组致力于研究 $\mathcal{PT}$ 对称非厄米 SSH 模型的性质, 讨论了自发 $\mathcal{PT}$ 对称破缺, 添加次近邻耦合、拓扑相位以及奇异点和拓扑边态^[15–21]. 在此基础上, 其他复杂结构也得到讨论, 如 $\mathcal{PT}$ 对称的三聚体晶格、Kitaev 模型、六角蜂窝晶格等^[22–25].

虽然在自然界中找不到特殊的 $\mathcal{PT}$ 对称系统, 但实验上可以等效实现. 如利用光波导通道可以得到具有增益和损耗效果的复势能^[26], 利用光学微

* 国家自然科学基金 (批准号: 11905027)、兴辽英才计划 (批准号: XLYC1907033) 和中央高校基本科研专项资金 (批准号: N2002005) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: xutttina2015@163.com

腔或单向隐形 Bragg 光栅结构实现 $\mathcal{PT}$ 对称 [27,28]. $\mathcal{PT}$ 对称光学和拓扑光子学的发展直接推动了 $\mathcal{PT}$ 对称拓扑系统的发展. 除了光学系统之外, 在声学领域 [29] 以及 LRC 电路中也能实现 $\mathcal{PT}$ 对称 [30,31].

随着自旋轨道耦合体系研究的深入, 有研究组指出自旋轨道耦合对厄米体系的拓扑性质具有重要影响和驱动作用 [32–34]. 受此启发, 本文拟设计一个复杂的体系, 即在一维自旋轨道耦合 SSH 模型的基础上施加与自旋方向相关的虚势能. 目的在于, 研究虚势能和自旋轨道耦合对一维自旋轨道耦合 SSH 模型拓扑性质的共同驱动作用. 研究发现, 随着虚势能的增加, 体系发生自发 $\mathcal{PT}$ 对称破缺. 此外, 虚势能和自旋轨道耦合共同作用会诱导拓扑平庸区发生相变, 使得拓扑非平庸相的范围增加. 在此过程中, 两种参数对拓扑非平庸区也产生了不同特性的零能态. 所有现象都表明了虚势能和自旋轨道耦合对非厄米自旋轨道耦合 SSH 模型拓扑性质、边缘态特征等因素具有丰富的调控作用.

2 理论模型

本文提出的非厄米一维自旋轨道耦合 SSH 模型是由 N_c 个原胞组成的一维链, 具体结构如图 1 所示. 体系哈密顿量表示为

$$H = H_0 + U, \quad (1)$$

右侧第一项 H_0 表示一维自旋轨道耦合 SSH 模型的哈密顿量:

$$\begin{aligned} H_0 = & \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{\sigma} \left(v c_{ia\sigma}^{\dagger} c_{ib\sigma} + \text{h.c.} \right) \\ & + \sum_{i=1}^{N_c-1} \sum_{\sigma} \left(w c_{ib\sigma}^{\dagger} c_{i+1a\sigma} + \text{h.c.} \right) \\ & + \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{\sigma} \left(\lambda_v c_{ia\sigma}^{\dagger} c_{ib\sigma'} + \text{h.c.} \right) \\ & - \sum_{i=1}^{N_c-1} \sum_{\sigma} \left(\lambda_w c_{ib\sigma}^{\dagger} c_{i+1a\sigma'} + \text{h.c.} \right), \quad (2) \end{aligned}$$

其中, $c_{i\alpha\sigma}^{\dagger}$ 和 $c_{i\alpha\sigma}$ 分别表示在第 i 个原胞中, 第 α ($\alpha = a, b$) 晶格上自旋为 σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) 的产生算符和湮灭算符; v 表示原胞内跃迁, 其具体形式为 $v = t(1 + \delta)$. w 表示原胞间跃迁振幅, 其具体形式为 $w = t(1 - \delta)$. 为保证跃迁项都是正数, 本文将 δ 的范围规定在 $|\delta| < 1$. $\lambda_v = \lambda(1 + \delta)$ 和 $\lambda_w = \lambda(1 - \delta)$

分别表示原胞内和原胞间自旋轨道耦合跃迁, 其中 λ 表示自旋轨道耦合强度, 取值范围为 $0 < \lambda < 1$.

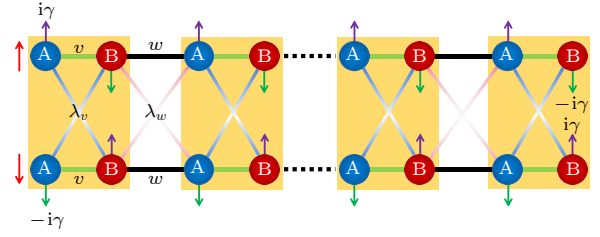


图 1 非厄米自旋轨道 SSH 模型示意图. A 和 B 表示两种晶格, 紫色上箭头和绿色下箭头分别表示具有增益和损耗的虚势能 $i\gamma$ 和 $-i\gamma$, 浅绿色线和黑色线分别表示胞内跃迁 v 和胞间跃迁 w , 蓝色线和粉色线表示胞内自旋轨道耦合跃迁 λ_v 和胞间自旋轨道耦合跃迁 λ_w .

Fig. 1. Schematic diagram of the non-Hermitian spin-orbit SSH model. A and B represent two kinds of lattices, and purple-up and green-down arrows represent imaginary potentials $i\gamma$ and $-i\gamma$, respectively. Light-green and black lines denote intracell hopping v and intercell hopping w , and the blue and pink lines describe the intracell spin-orbit coupling λ_v and the intercell spin-orbit coupling λ_w .

(2) 式右侧第二项 U 描述在位能处引入能量增益和损耗来实现的虚势能项, 其哈密顿量写为

$$H_{\mathcal{PT}} = \sum_{i,\sigma} i\gamma \left(c_{ia\sigma}^{\dagger} \sigma_{\sigma\sigma}^z c_{ia\sigma} - c_{ib\sigma}^{\dagger} \sigma_{\sigma\sigma}^z c_{ib\sigma} \right), \quad (3)$$

这里 $\gamma > 0$ 表示虚势能强度.

根据体系哈密顿量, 接下来讨论非厄米自旋轨道耦合 SSH 系统的能带结构和拓扑性质. 在周期性边界条件下, 利用傅里叶变换 $c_{i\alpha\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_k c_{k\alpha\sigma} e^{ikn}$ 可以得到动量空间的哈密顿量表达式:

$$H = \sum_k \psi_k^{\dagger} H(k) \psi_k. \quad (4)$$

考虑四分量基矢 $\psi_k = [c_{ka\uparrow}, c_{ka\downarrow}, c_{kb\uparrow}, c_{kb\downarrow}]^T$, $H(k)$ 的表达式可以写成:

$$H(k) = \begin{bmatrix} i\gamma & 0 & z(k) & h(k) \\ 0 & -i\gamma & h(k) & z(k) \\ z^*(k) & h^*(k) & -i\gamma & 0 \\ h^*(k) & z^*(k) & 0 & i\gamma \end{bmatrix}, \quad (5)$$

其中 k 是布洛赫波矢量, $z(k) = v + we^{-ik}$, $h(k) = \lambda_v - \lambda_w e^{-ik}$.

2.1 对称性

哈密顿量的对称性决定了具有拓扑结构的系

统中对称保护的拓扑相位. 因此, 应首先关注体系的对称性, 以呈现自旋轨道耦合 SSH 模型的拓朴性质. 利用泡利矩阵, (5) 式可以改写成:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(k) = & (v + \cos k)(\tau_x \otimes \sigma_0) + w \sin k(\tau_y \otimes \sigma_0) \\ & + (\lambda_v - \lambda_w \cos k)(\tau_x \otimes \sigma_x) \\ & - \lambda_w \sin k(\tau_y \otimes \sigma_x) + i\gamma(\tau_z \otimes \sigma_z), \end{aligned} \quad (6)$$

$\tau_{x,y,z}(\sigma_{x,y,z})$ 是对应的泡利矩阵, $\tau_0(\sigma_0)$ 是二阶单位矩阵.

当 $\gamma = 0$ 时, 整个体系处于厄米情况. 可以发现, 体系满足反演对称性 $\mathcal{P}\mathbf{H}(k)\mathcal{P}^{-1} = \mathbf{H}(-k)$, 其算符 $\mathcal{P}$ 表示为 $\tau_x \otimes \sigma_0$ ($\mathcal{P}^2 = 1$). 体系也具有时间反演对称性 $\mathcal{T}\mathbf{H}(k)\mathcal{T}^{-1} = \mathbf{H}(-k)$, 其中 $\mathcal{T} = (\tau_0 \otimes \sigma_x)\mathcal{K}$ ($\mathcal{T}\mathcal{T}^* = 1$), 这里 $*$ 表示复共轭. $\mathbf{H}(k)$ 还满足粒子-空穴对称性 $\Gamma\mathbf{H}(k)\Gamma^{-1} = -\mathbf{H}(-k)$, Γ 表示为 $\Gamma = (\tau_z \otimes \sigma_0)\mathcal{K}$ 且 $\Gamma\Gamma^* = 1$. 粒子-空穴对称性的存在保证了体系的能量满足正负对称. 此外, 体系还满足手性对称性 $\mathcal{C}\mathbf{H}(k)\mathcal{C}^{-1} = -\mathbf{H}(k)$, $\mathcal{C}$ 表示为 $\mathcal{C} = \tau_z \otimes \sigma_x$ ($\mathcal{C}\mathcal{C}^* = 1$).

当 $\gamma \neq 0$ 时, 体系变为非厄米情况. 由于虚势能的引入导致 $\mathbf{H} \neq \mathbf{H}^\dagger$, 非厄米体系的对称性分析也会受到影响. Kawabata 等^[35] 试图给出非厄米系统各种对称性的定义和条件. 他们提出, 非厄米情况下粒子-空穴对称性 (PHS) 的定义式为 $\mathcal{C}_- \mathbf{H}^\dagger(k) \mathcal{C}_-^{-1} = -\mathbf{H}(-k)$, 时间反演对称性 (TRS) 满足 $\mathcal{T}_+ \mathbf{H}^*(k) \mathcal{T}_+^{-1} = \mathbf{H}(-k)$. 特殊的是, 在非厄米体系中也存在 $\text{TRS}^\dagger: \mathcal{C}_+ \mathbf{H}^\dagger(k) \mathcal{C}_+^{-1} = \mathbf{H}(-k)$ 和 $\text{PHS}^\dagger: \mathcal{T}_- \mathbf{H}^*(k) \mathcal{T}_-^{-1} = -\mathbf{H}(-k)$. 从以上的对称性表达式可以发现, $\text{TRS}^\dagger$ 和 $\text{PHS}^\dagger$ 是 TRS 和 PHS 的厄米共轭.

对于本模型, 虽然非厄米情况下不存在 TRS 和 PHS, 但是 $\mathbf{H}(k)$ 仍满足对称性 $\text{TRS}^\dagger$ 和 $\text{PHS}^\dagger$, 其对应算符表示为 $\mathcal{C}_+ = \tau_0 \otimes \sigma_0$ ($\mathcal{C}_+^2 = 1$) 和 $\mathcal{T}_- = \tau_z \otimes \sigma_0$ ($\mathcal{T}_- \mathcal{T}_-^* = 1$). 同样, $\mathbf{H}(k)$ 满足手征对称性, 即 $\mathcal{C}\mathbf{H}^\dagger(k)\mathcal{C}^{-1} = -\mathbf{H}(k)$, 其中 $\mathcal{C} = \tau_z \otimes \sigma_0$. 这里的手征对称算符也可以写成 $\mathcal{C} = \mathcal{C}_+ \mathcal{T}_-$. 另外, 体系满足 $\mathcal{PT}$ 对称性, 即 $\mathcal{P}\mathbf{H}(k)\mathcal{P}\mathcal{T}^{-1} = \mathbf{H}(k)$, 其中 $\mathcal{P}$ 和 $\mathcal{T}$ 分别表示为 $\mathcal{P} = \tau_x \otimes \sigma_x$ 和 $\mathcal{T} = (\tau_0 \otimes \sigma_x)\mathcal{K}$.

根据所满足的对称性, 可以将拓朴体系分类^[35,36]. 可以推断厄米情况下本体系属于 BDI 类, 而在非厄米情况下属于非厄米系统 38 种拓朴分类中的 $\text{BDI}^\dagger$ 类, 具体分类结果如表 1 所列. 以往的结论^[35] 表明, 一维 BDI 类体系存在 $\mathcal{Z}$ 类拓朴不变量.

表 1 厄米和非厄米情况的 BDI 和 $\text{BDI}^\dagger$ 类
Table 1. The BDI and $\text{BDI}^\dagger$ classes for Hermitian and non-Hermitian Hamiltonians.

Symmetry	TRS	PHS	$\text{TRS}^\dagger$	$\text{PHS}^\dagger$	CS
Class	$\mathcal{T}(\mathcal{T}_+)$	$\Gamma(\mathcal{C}_-)$	$\mathcal{C}_+$	$\mathcal{T}_-$	$\mathcal{C}$
BDI	+1	+1	0	0	1
$\text{BDI}^\dagger$	0	0	+1	+1	1

2.2 能带结构与拓朴相变

需要强调的是, 只从对称性的角度确定体系的拓朴性质是不够准确的. 下面计算一维非厄米自旋轨道耦合 SSH 模型的能带结构, 探究体系的拓朴相变条件. 将 (5) 式的哈密顿量进行对角化处理, 可以得到动量空间能带表达式:

$$E_\pm(k) = \pm \sqrt{X \pm \sqrt{-4\gamma^2|h(k)|^2 + Y}}, \quad (7)$$

其中

$$\begin{aligned} X = & -\gamma^2 + |h(k)|^2 + |z(k)|^2 \\ = & -\gamma^2 + \lambda_v^2 + \lambda_w^2 + v^2 + w^2 \\ & + 2(vw - \lambda_v\lambda_w) \cos k, \\ Y = & [h^*(k)z(k) + h(k)z^*(k)]^2 \\ = & 4[v\lambda_v - w\lambda_w + (w\lambda_v - v\lambda_w) \cos k]^2. \end{aligned} \quad (8)$$

对于厄米情况 ($\gamma = 0$), 动量空间本征能量简化为

$$E = \pm 2\sqrt{\left[(\lambda \pm t\delta) \sin \frac{k}{2}\right]^2 + \left[(t \pm \lambda\delta) \cos \frac{k}{2}\right]^2}. \quad (9)$$

通过能带表达式 (9) 能够发现, 当 $k = \pm\pi$ 时中间两条能带发生闭合, 此时 λ , δ 和 t 之间满足条件 $\delta = \pm\lambda/t$. 同样, 当三者满足 $\delta = \pm t/\lambda$ 时, 中心能带在 $k = 0$ 处发生能隙闭合. 如图 2(a) 和图 2(b) 所示的 $\lambda = 0.3$ 时的能谱. 可以发现, 当 $\delta = 0.3$ 时中间两条能带在 $k = \pm\pi$ 相交, 而当 $\delta = 3.333$ 时能隙在 $k = 0$ 处闭合, 与理论推导结果一致.

根据 BDI 类对称性的结论, 体系存在 $\mathcal{Z}$ 类拓朴不变量. 将动量空间哈密顿量转换为非对角形式, 代入拓朴不变量表达式

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & -\text{Tr} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2i} \mathbf{V}^{-1} \partial_k \mathbf{V} \\ = & -\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2i} \partial_k \ln \det(\mathbf{V}), \end{aligned} \quad (10)$$

其中, $\det(\mathbf{V}) = -\lambda_v^2 + v^2 + 2e^{-ik}(\lambda_v\lambda_w + vw) + e^{-2ik}(-\lambda_w^2 + w^2)$. 由此可以得到厄米体系的拓朴不变量,

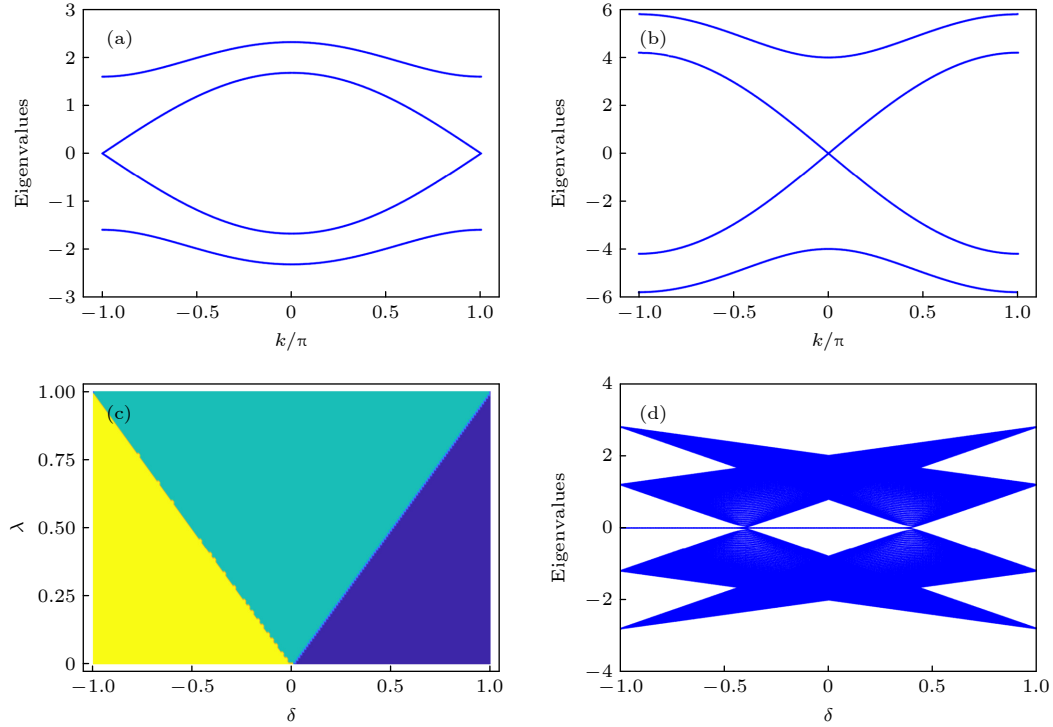


图 2 (a), (b) 厄米情况下, 体系的动量空间能谱图, $\lambda = 0.3$ (a) $\delta = 0.4$; (b) $\delta = 2.5$. (c) 动量空间相图, 其中黄色对应 $Z = 2\pi$, 绿色对应 $Z = \pi$ 以及紫色对应 $Z = 0$. (d) 体系能谱随着二聚化参量 δ 的变化

Fig. 2. (a), (b) The energy spectra of system in the momentum space under the Hermitian condition with $\lambda = 0.3$: (a) $\delta = 0.4$; (b) $\delta = 2.5$. (c) Phase diagram in the momentum space, where yellow region corresponds to $Z = 2\pi$, green region corresponds to $Z = \pi$, and purple corresponds to $Z = 0$. (d) Energy spectrum with the change of dimerization parameter δ .

对应结果如图 2(c) 所示. 从图中可以观察到当 $\lambda = 0$ 时, 体系只有 $Z = 2\pi$ (黄色区域) 和 $Z = 0$ (紫色区域) 两种相. 随着 λ 的增加, 在 $-\lambda/t < \delta < \lambda/t$ 区间内为拓扑非平庸 I 区 (绿色区域). 结果表明, λ 的加入才导致体系会出现 $Z = 2\pi$, $Z = \pi$ 及 $Z = 0$ 三种相. 图 2(d) 给出了开边界条件下的能带结构. 根据之前的研究结论^[32–34] 可以知道, $Z = 2\pi$ 时零模存在四重简并, 而 $Z = \pi$ 时零模为二重简并.

对于非厄米情况 ($\gamma \neq 0$), 同样可以找到能隙闭合条件. 由 (7) 式可以写出 $k = \pm\pi$ 时体系 4 条能带的表达式: $E_{1(2)} = 2\lambda + (-)\sqrt{-\gamma^2 + 4\delta^2 t^2}$, $E_{3(4)} = -2\lambda - (+)\sqrt{-\gamma^2 + 4\delta^2 t^2}$. 根据能带表达式可以发现, 如果 E_2 和 E_3 两条能带相交, 则需满足

$$\gamma^2 = 4(\delta^2 t^2 - \lambda^2). \quad (11)$$

而当 $k = 0$ 时, 体系的能带表达式变成 $E_{1(2)} = 2\lambda\delta + (-)\sqrt{-\gamma^2 + 4t^2}$, $E_{3(4)} = -2\lambda\delta - (+)\sqrt{-\gamma^2 + 4t^2}$. E_2 和 E_3 也可以在 $k = 0$ 处发生能带相交, 此时各参数需满足

$$\gamma^2 = 4(t^2 - \delta^2 \lambda^2). \quad (12)$$

此外, 通过 $k = \pm\pi$ 和 $k = 0$ 的能带表达式还能发现

E_1 和 E_2 (E_3 和 E_4) 在这两处位置相交, 则参数需分别满足 $\gamma^2 = 4\delta^2 t^2$ 以及 $\gamma^2 = 4t^2$.

为了更好地观察体系的拓扑性质, 有必要在动量空间中讨论全局 Zak 相^[37,38], 其表达式为 $Z = \sum_n i \oint \langle \varphi_n | \partial_k \psi_n \rangle dk$. 这里 $|\psi_n\rangle$ ($|\varphi_n\rangle$) 表示右 (左) 矢

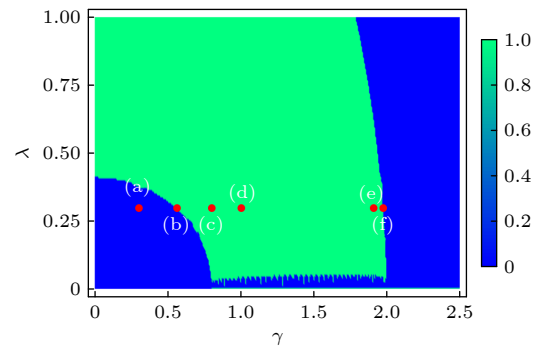


图 3 随 γ 和 λ 变化的拓扑相图. 蓝色对应 $Z = \pi$ 的拓扑非平庸相, 绿色区域表示 $Z = 0$ 的拓扑平庸相. 相关参数为 $\delta = 0.4$ 以及 $t = 1.0$

Fig. 3. Topological phase diagram with changes in γ and λ . Blue region corresponds to the topologically non-trivial phase of $Z = \pi$, and green region represents the topologically trivial phase of $Z = 0$. Relevant parameters are taken to be $\delta = 0.4$ and $t = 1.0$.

本征态, 且满足 $H_k|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ 以及 $H_k^\dagger|\varphi_n\rangle = E_n^*|\varphi_n\rangle$. 通过计算 Zak 相 $\mathcal{Z}$, 可以辨别体系的拓扑相区. 图 3 给出了 $\delta = 0.3$ 时随 γ 和 λ 变化的拓扑相图. 图中绿色对应 $\mathcal{Z} = \pi$ 的拓扑非平庸相, 蓝色区域表示 $\mathcal{Z} = 0$ 的拓扑平庸相. 从图中明显可以发现, 在 $0 < \lambda < \delta$ 条件下, γ 和 λ 驱动体系发生拓扑转变, 导致新的拓扑相出现.

3 数值结果与讨论

基于上述理论推导, 接下来从动量空间和坐标空间出发, 详细讨论非厄米一维自旋轨道 SSH 模型的能带结构. 为方便计算, 整篇文章中取 $t = 1.0$.

图 4 给出了在动量空间中非厄米一维自旋轨道耦合 SSH 模型的能谱. 参数设置为 $\lambda = 0.3$ 和 $\delta = 0.4$, 对应厄米情况下的拓扑平庸区. 从图 4 可以发现, 随着 γ 的增加, 体系确实经历了两次相变过程, 这意味着虚势能在调控体系的拓扑属性方面扮演了重要角色. 具体来说, 从图 4(a) 和图 4(b) 可以观察到, 当 γ 增加至 $\sqrt{7}/5$ 时, 中间两条能带在 $k = \pm\pi$ 处相遇. 在这个过程中发生了拓扑相变, 与 (11) 式结果一致. 随着 γ 继续增加, 闭合的能隙重新打开. 在 $\gamma = 0.8$ 时 (如图 4(c)), 上下两条能带在 $k = \pm\pi$ 处相交, 此时简并点能量为 $|E| = 2\lambda$.

当 $\gamma > 2\delta t$ 时, 虚势能使简并点劈裂成两个与 PT 对称性破缺相关的奇异点, 此时出现能量虚部. 当 $\gamma \approx 1.986$ 时, 能隙重新在 $k = 0$ 处闭合, 且闭合点的能级虚部 $\text{Im}(E) = 0$ (如图 4(e)). 这说明了体系发生第二次相变, 而且条件与 (12) 式一致. 随着非厄米势能的增加, 两个奇异点继续移动, 复能区逐渐扩展到中心. 在 $\gamma = 2t = 2.0$ 时, 两个奇异点在 $k = 0$ 处合并, 虚部在 $k = 0$ 处形成狄拉克锥, 此时实部能量为 $E = \pm 2\delta\lambda$ (如图 4(f)). 最后, $\gamma > 2t$ 时, 整个体系的能量全部为复数, 不再存在奇异点. 根据以上结果, 可以确定虚势能在非厄米自旋轨道耦合 SSH 模型中诱导出了丰富的能带结构.

接下来讨论开边界情况下体系的能谱结构, 相关参数取 $\lambda = 0.3$. 根据厄米情况的结论知道, 当 $\delta \in [-1.0, -0.3]$ 时, 存在四重简并零能, 而在 $\delta \in [-0.3, 0.3]$ 时表现为二重简并零能, 剩下区域 $\delta \in [0.3, 1]$ 为拓扑平庸区.

图 5 给出的是在 $N_c = 50$ 的条件下能带的实部和虚部. 由 (11) 式和 (12) 式可知, 非厄米情况下体系在 $\delta_{1(2)} = +(-)\sqrt{(\gamma^2 + 4\lambda^2)/(4t^2)}$ 和 $\delta_{3(4)} = +(-)\sqrt{(-\gamma^2 + 4t^2)/(4\lambda^2)}$ 处会发生相变. 从能量的实部和虚部图中可以发现, 虚势能对于体系的拓扑非平庸和平庸相的体态和零能态具有不同的调控作用. 首先, 对于拓扑平庸区而言 (厄米 $0.3 < \delta < 1$),

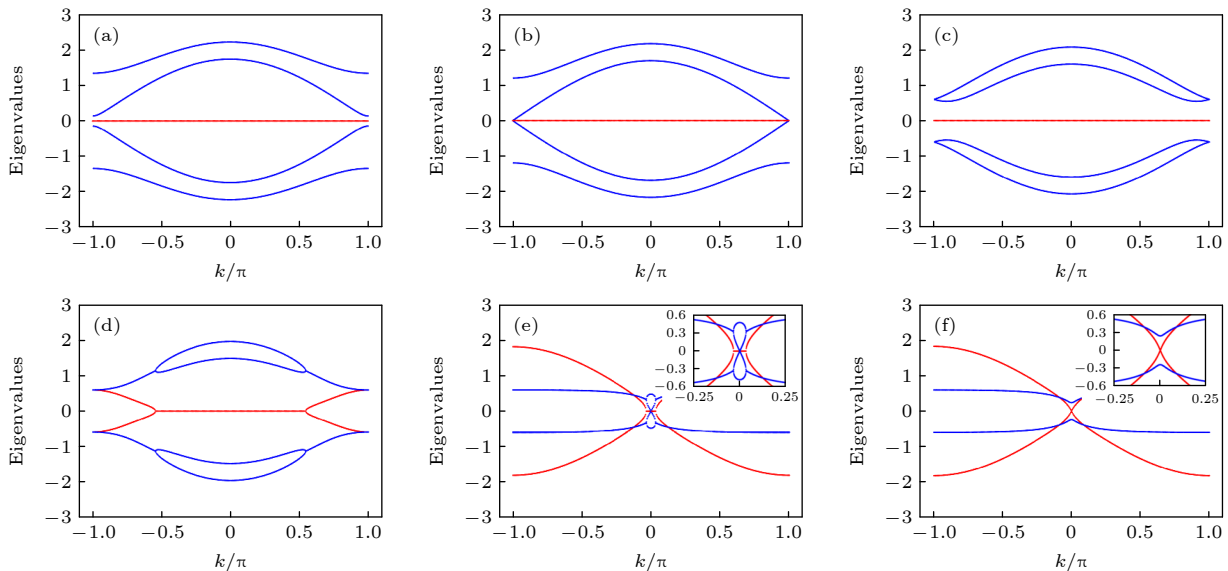


图 4 不同虚势能 γ 的能带结构 (a) $\gamma = 0.3$; (b) $\gamma = \sqrt{7}/5$; (c) $\gamma = 0.8$; (d) $\gamma = 1.0$; (e) $\gamma \approx 1.986$; (f) $\gamma = 2.0$. 对应于图 3 中标出的各个位置. 蓝线表示能量的实部, 红线对应于虚部. 其他参数为 $\lambda = 0.3$ 和 $\delta = 0.4$.

Fig. 4. Band structures for different values of imaginary potential γ : (a) $\gamma = 0.3$; (b) $\gamma = \sqrt{7}/5$; (c) $\gamma = 0.8$; (d) $\gamma = 1.0$; (e) $\gamma \approx 1.986$; (f) $\gamma = 2.0$. Correspond to the respective points in Fig. 3. The blue lines indicate the real part of energy, and the red lines correspond to the imaginary part. Other parameters are $\lambda = 0.3$ and $\delta = 0.4$.

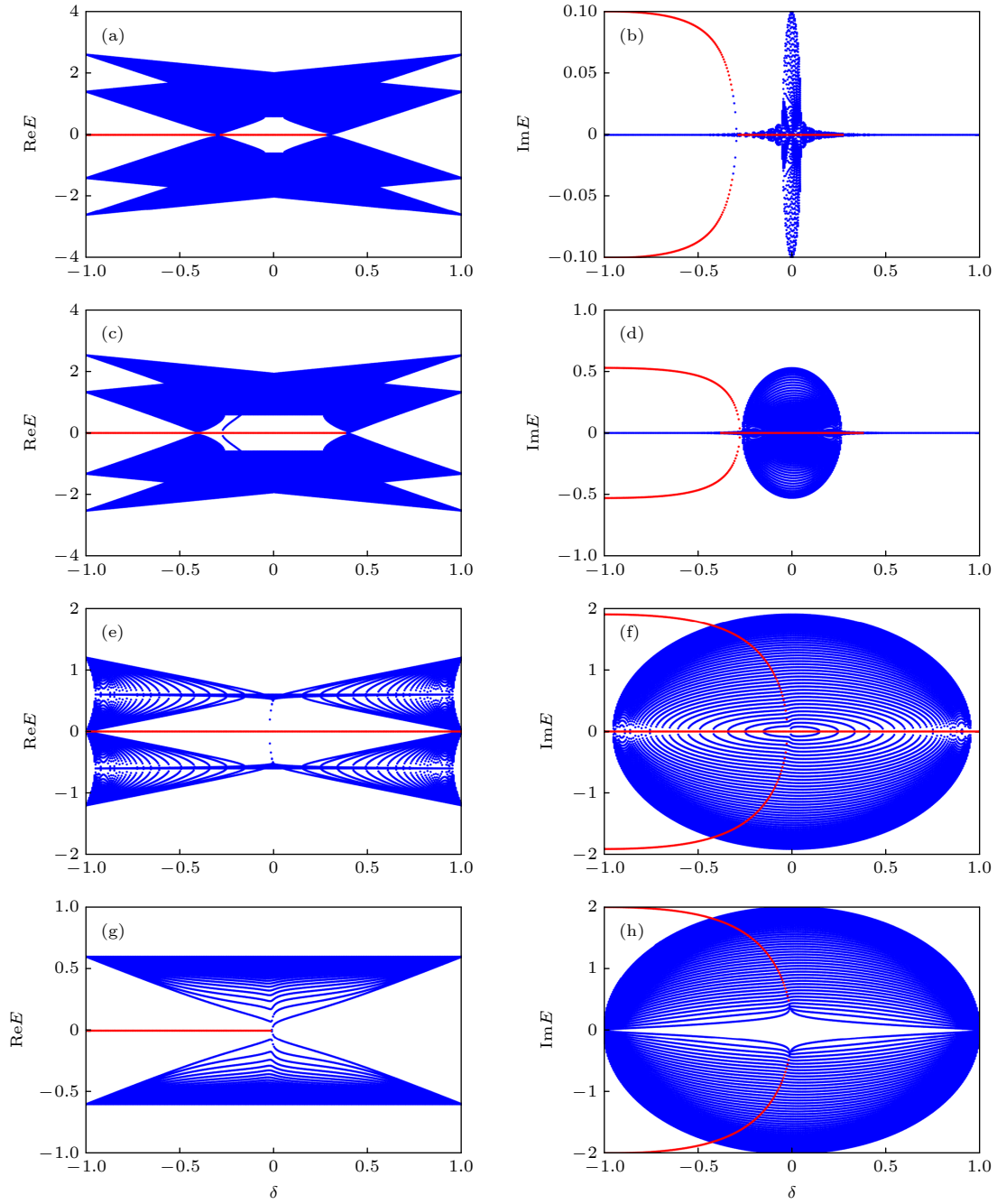


图 5 开边界情况下, 不同 δ 的能量实部和虚部 (a), (b) $\gamma = 0.1$; (c), (d) $\gamma = \sqrt{7}/5$; (e), (f) $\gamma \approx 1.908$; (g), (h) $\gamma = 2.0$. 左侧显示能量的实部, 右侧对应于能量的虚部. 其他参数设为 $\lambda = 0.3$. 图中红线代表零能态的实部和虚部

Fig. 5. Real and imaginary parts of energy for different δ : (a), (b) $\gamma = 0.1$; (c), (d) $\gamma = \sqrt{7}/5$; (e), (f) $\gamma \approx 1.908$; (g), (h) $\gamma = 2.0$. Left panel shows the real part of energy, and the right corresponds to the imaginary part of energy. Other parameters are $\lambda = 0.3$. The red lines denote the real and imaginary parts of zero energy states.

随着 γ 的增加, 由虚势能诱导的零能态区域逐渐变宽. 当 $\gamma = 1.908$ 时, 达到拓扑相变条件 δ_1 , 在 $\delta \in [0.3, 1.0]$ 全区间内存在零能态 (如图 5(e)). 在整个过程中新产生的零能态无虚部出现. 而在拓扑非平庸区 (厄米 $\delta \in [-1.0, 0.3]$) 中, 虚势能对两个非平庸相的作用效果不同. 虚势能的加入导致厄米的四重简并零能态出现虚部, 即 $E = 0 \pm ib$, 说明该

阶段发生 $\mathcal{PT}$ 对称破缺, 而原来二重简并的状态仍表现为纯实数的零能. γ 的增加使满足 δ_2 的拓扑相变点逐渐靠近 $\delta = -1.0$, 导致原来四重零能态区域减小, 二重零能态区域逐渐增大. 另外, 在 $\delta \in [-\delta_2, 0]$ 中出现从体态析出的孤立态. 随着 δ 趋近于 -1.0 , 孤立态也逐渐进入到零能态中并伴有能量虚部, 形成具有纯实零能又有纯虚能的混合六

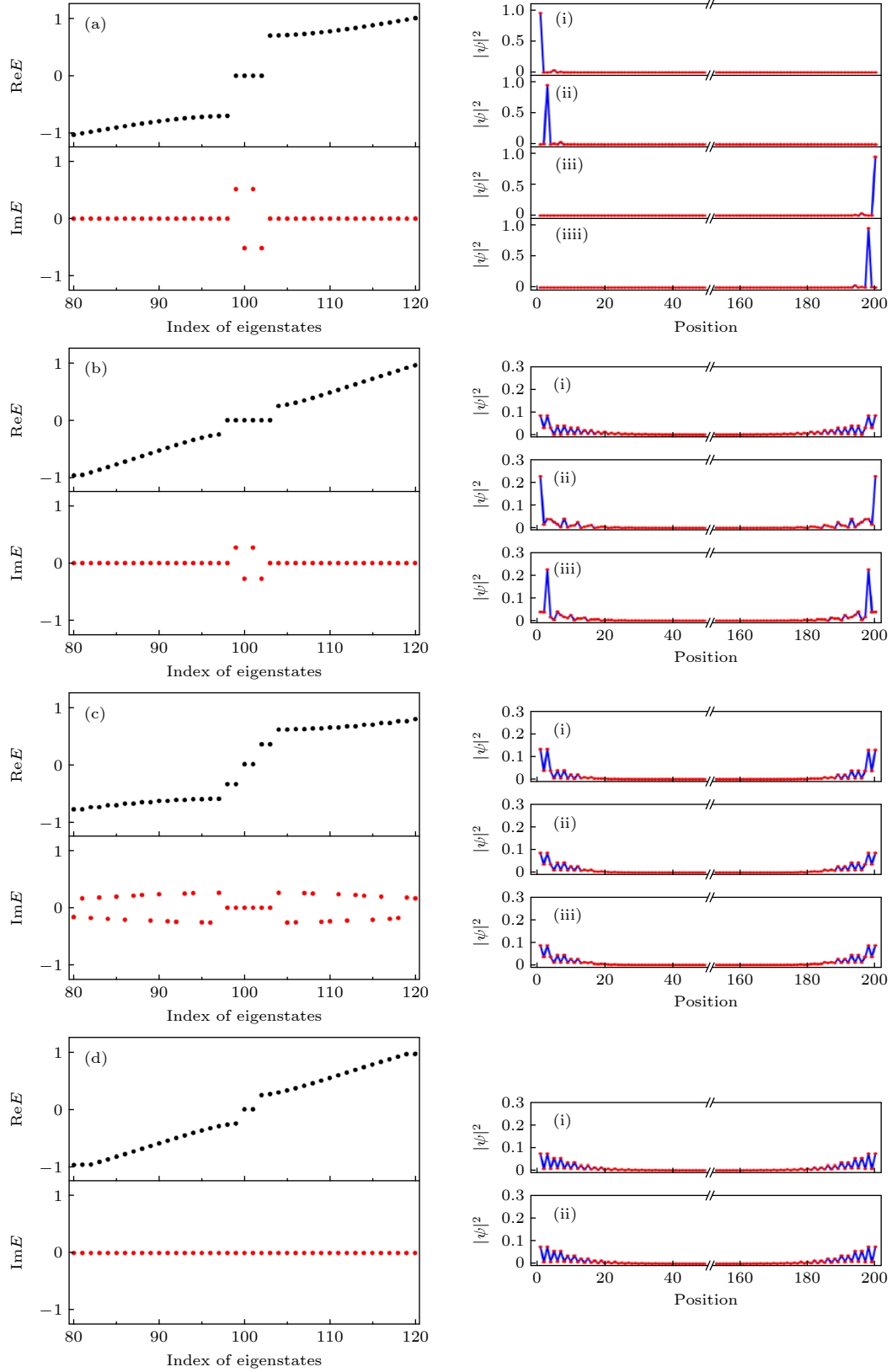


图 6 开边界条件下的能谱和概率密度谱 (a) $\delta = -0.7$; (b) $\delta = -0.32$; (c) $\delta = -0.23$; (d) $\delta = 0.32$. 其他参数设为 $\lambda = 0.3$ 以及 $\gamma = \sqrt{7}/5$

Fig. 6. Energy and probability density spectra with open boundary conditions: (a) $\delta = -0.7$; (b) $\delta = -0.32$; (c) $\delta = -0.23$; (d) $\delta = 0.32$. The other parameters are $\lambda = 0.3$ and $\gamma = \sqrt{7}/5$.

能态区域. 由于该部分的零能态不是由于能隙闭合再打开产生, 推断其不具有拓扑性. 当 $\gamma = 2.0$ 时, 拓扑相变的破缺导致体系不再存在拓扑相, 仅存在具有虚势能的能态. 对于体态, 在 $-\gamma/2 < \delta < \gamma/2$ 范围内体态有虚部出现, 发生 $\mathcal{PT}$ 对称破缺, 而其余区域的体态均为实数. 以图 5(d) 为例, 当 $\gamma = 2.0$ 时, 整个参数空间的体态都有虚部. 基于以上结果, 可以发现虚势能对于开边界条件下的能带结构和拓扑态具有明显的调控作用.

为了更好地描述体系中零模的特征, 图 6(a)—(d) 依次给出了 $\delta = -0.7$, $\delta = -0.32$, $\delta = -0.23$ 及 $\delta = 0.32$ 时的本征能谱和波函数概率密度. 可以观察到, 不同区域的零能态呈现出异样的特征. 具体在于, 当 $\delta = -0.7$ 时, 在能隙中存在四个纯虚能态. 图 6(a) 概率密度谱中 (i) 和 (iii) 对应 $0 + 0.514i$, (ii) 和 (iv) 对应 $0 - 0.514i$. 由于虚势能的加入导致本征能量变为复数, 四个态都呈现局域在晶格的左端或右端的趋势, 并且相同能量的两个态的局域性相反. 图 6(b) 对应 $\delta = -0.32$ 的结果. 可以看出, 能隙中存在六个态, 其中四个有虚能量, 两个能量为纯实数. 从前面的结果可知, 有能量虚部的态是由体态中析出的孤立态导致的, 不具有拓扑性. 从概率密度可以发现, 两个纯实零能态 (i) 局域在系统的两端. 四个能量为 $0 + 0.271i$ (ii) 和 $0 - 0.271i$ (iii) 的态也呈现局域在系统两端的趋势. 为了确定从体

系析出的孤立态情况, 图 6(c) 给出了 $\delta = -0.23$ 的结果. 从能谱可以观察到, 新产生的孤立态是二重简并的, 在能隙中间形成纯实能的二重简并零能态. 从概率密度可知, 孤立态和零能态一样, 都呈现局域在系统两端的趋势. 然而, 与孤立态产生的零能模相比 (图 6(b) 中 (ii) 和 (iii)), 局域性相对较弱. 最后, 当 $\gamma = 0.32$ 时, 虚势能的加入导致原有的拓扑平庸区的间隙中出现局域在系统两端的二重简并零能态, 如图 6(d) 所示. 综上所述, 虚势能的加入导致原来的拓扑平庸区的间隙中出现局域在系统两端的二重简并零能态, 而随着体态析出的二重简并孤立态进入到零能态中, 导致原有二重实零能态变为六个态. 这说明虚势能可以让体系的零能态呈现出更加有趣的现象.

下面讨论虚势能强度 γ 对不同区域能谱结构的影响, 如图 7 所示. 其中图 7(a) 和图 7(b) 对应 $\delta = -0.4$, 图 7(c) 和图 7(d) 对应 $\delta = -0.2$ 以及图 7(e) 和图 7(f) 对应 $\delta = 0.4$. 它们分别描述厄米体系中四重简并、二重简并的拓扑非平庸区和拓扑平庸区. 从图 7(a) 和图 7(b) 可以发现, 在 $\gamma < 2\delta t = 0.8$ 区间内体态能量为实数, 而 $\gamma > 0.8$ 区间内体态能量有虚部出现. 对于零能态, 只要 γ 不等于零, 它的本征能量立刻呈现出虚部, 导致体系一直 $\mathcal{PT}$ 破缺. 此外, 在两次拓扑相变点 $\sqrt{7}/2 < \gamma < 1.986$ 之间, 虚势能驱动了新的纯实零能态出现; 当 $\gamma > 1.986$,

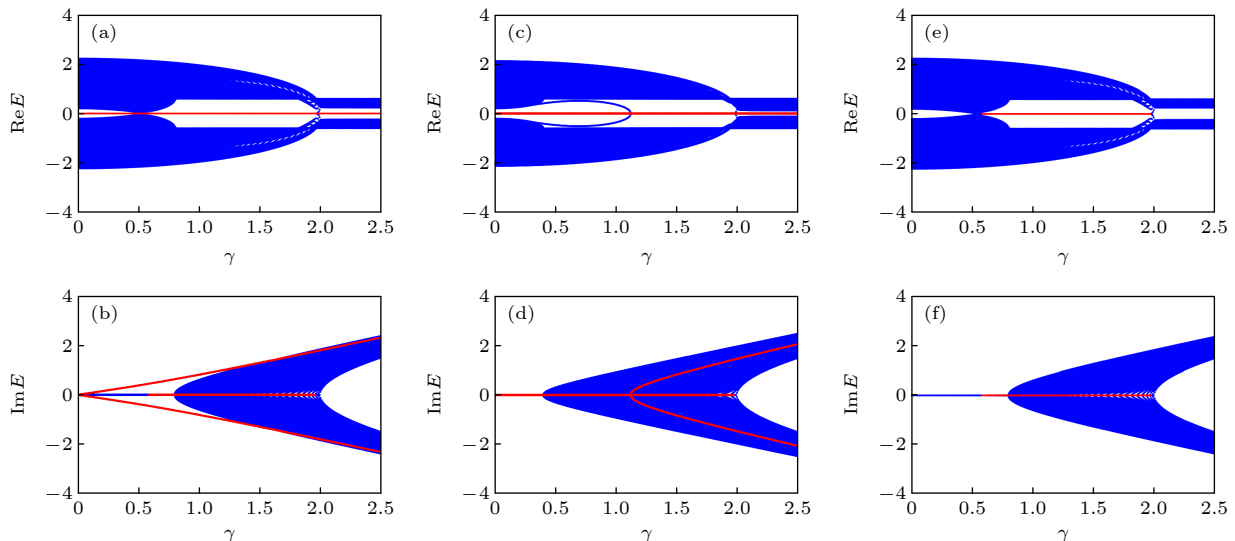


图 7 γ 变化对能量实部和虚部的影响 (a), (b) $\delta = -0.4$; (c), (d) $\delta = -0.2$; (e), (f) $\delta = 0.4$. 左侧显示能量的实部, 右侧对应于能量的虚部. 其他参数为 $\lambda = 0.3$. 图中红线代表零能态的实部和虚部

Fig. 7. Real and imaginary parts of energy for different γ : (a), (b) $\delta = -0.4$; (c), (d) $\delta = -0.2$; (e), (f) $\delta = 0.4$. Left panel shows the real part of energy, and the right corresponds to the imaginary part. Other parameters are $\lambda = 0.3$. The red lines describe the real and imaginary parts of zero energy states, respectively.

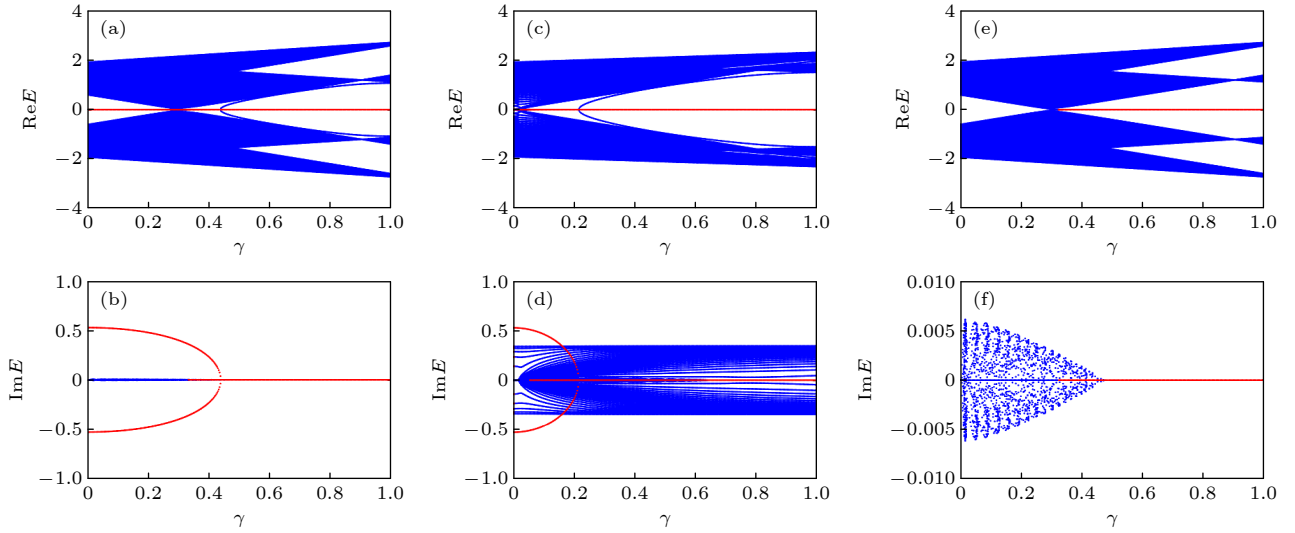


图 8 不同 λ 导致的能量实部和虚部 (a), (b) $\delta = -0.4$; (c), (d) $\delta = -0.2$; (e), (f) $\delta = 0.4$. 左侧显示能量的实部, 右侧对应于能量的虚部. 参数设置为 $\gamma = \sqrt{7}/5$. 图中红线代表零能态的实部和虚部

Fig. 8. Real and imaginary parts of energy for different λ : (a), (b) $\delta = -0.4$; (c), (d) $\delta = -0.2$; (e), (f) $\delta = 0.4$. Left panel shows the real part of energy, and the right corresponds to the imaginary part. Other parameters are $\gamma = \sqrt{7}/5$. The red lines describe the real and imaginary parts of zero energy states, respectively.

有虚势能驱动的拓扑相变破缺, 纯实零能态消失. 在 $\delta = -0.2$ 的情况下 (图 7(c) 和图 7(d)), 当 $\gamma < 0.4$ 时, 整个体系处于严格的 $\mathcal{PT}$ 对称; 当 $\gamma > 0.4$ 时, 由于体态能量存在虚部, 因此发生 $\mathcal{PT}$ 对称破缺. 除此之外, 随着 γ 的增加, 可以看到确实从体态中析出二重简并孤立态. 由于孤立态产生的零能加入, 导致在 $\gamma > 1.4$ 后出现混合六能态区. 直到第二次拓扑相变之后, 体系的零能转变为四重纯虚能态. 最后, 对 $\delta = 0.4$ 的情况, 如图 7(e), (f) 所示, 体系经历 $\mathcal{PT}$ 相变, 即在 $\gamma > 0.8$ 处发生 $\mathcal{PT}$ 对称破缺. 此外还能发现, 在两次拓扑相变之间的间隙中出现有二重拓扑零能态. 基于以上结果可以看出, 对于厄米情况下不同类型的拓扑相, 虚势能会对零能和体态产生不同的作用效果.

最后, 图 8 给出了在 $\gamma = \sqrt{7}/5$ 情况下, λ 对不同区域能带的影响. 相关参数与图 7 一致. 可以观察到, λ 也对体系能谱具有调控效果. 如在图 8(a) 和图 8(b) 中, $\lambda = 0.5$ 时体态从两带结构劈裂成四带结构, 在拓扑相变临界值 $\lambda = 0.3$ 之前会出现四个纯虚能的状态. 随后出现混合六能态区域, 并且在间隙中出现了孤立态. 如果 $\delta = -0.2$, 零能态的变化趋势和图 8(a) 以及图 8(b) 类似, 不同之处在于, 在整个参数空间中体态都具有虚部, 具体结果如图 8(c) 和图 8(d) 所示. 当 $\delta = 0.4$ 时, 可以观察到在虚势能的作用下, 在 $\lambda = 0.3$ 处发生拓扑相变,

出现二重简并零能态. 此外, 体态也在 $\lambda = 0.5$ 时发生劈裂, 并在 $0 < \lambda < 0.5$ 范围内纯在虚部. 这体现了自旋轨道耦合对非厄米一维自旋轨道 SSH 模型的能带和拓扑性的特殊调控作用.

4 结 论

本文在一维自旋轨道耦合 SSH 模型中, 通过施加具有增益和损耗的虚势能来构造一维 $\mathcal{PT}$ 对称体系, 着重考察了由虚势能和自旋轨道耦合驱动的拓扑相变以及零能态的特性. 结果发现, 自旋轨道耦合和虚势能的作用导致体系出现了丰富而有趣的现象. 首先, 虚势能的加入让拓扑非平庸体系发生自发 $\mathcal{PT}$ 对称破缺, 而在拓扑平庸区中可以观察到 $\mathcal{PT}$ 对称相变, 即从严格 $\mathcal{PT}$ 对称到 $\mathcal{PT}$ 对称破缺. 其次, 虚势能和自旋轨道耦合的共同作用导致非平庸区中出现不同特性、不同数量的零能态: I) 四个能量为 $0 \pm i b$ 型的能态; II) 由于从体态析出的二重孤立态进入零能态中而产生的具有二重纯实零能态和四个纯虚能态的混合六能态区域; III) 具有纯实零能的二重简并零能态. 对于拓扑平庸区而言, 虚势能和自旋轨道耦合共同作用使厄米情况下的拓扑平庸区发生拓扑相变, 在平庸区的间隙中出现二重纯实数零能态, 拓宽了体系的拓扑非平庸区. 相信以上结果有助于探究 $\mathcal{PT}$ 对称非厄米

系统的拓扑相变行为, 同时为探究非厄米零能态的种类和性质提供了理论支持.

参考文献

- [1] Bender C M, Boettcher S 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 5243
- [2] Liang G Q, Chong Y D 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 203904
- [3] Zeuner J M, Rechtsman M C, Plotnik Y, Lumer Y, Nolte S, Rudner M S, Segev M, Szameit A 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 040402
- [4] Malzard S, Poli C, Schomerus H 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 200402
- [5] El-Ganainy R, Makris K G, Khajavikhan M, Musslimani Z H, Rotter S, Christodoulides D N 2018 *Nat. Phys.* **14** 11
- [6] Rudner M S, Levitov L S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 065703
- [7] Li L H, Xu Z H, Chen S 2014 *Phys. Rev. B* **89** 085111
- [8] Li C, Lin S, Zhang G, Song Z 2017 *Phys. Rev. B* **96** 125418
- [9] Su W P, Schrieffer J R, Heeger A J 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 1698
- [10] Wang L, Troyer M, Dai X 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 026802
- [11] Leder M, Grossert C, Sitta L, Genske M, Rosch A, Weitz M 2016 *Nat. Comm.* **7** 13112
- [12] Lohse M, Schweizer C, Zilberberg O, Aidelsburger M, Bloch I 2016 *Nat. Phys.* **12** 350
- [13] Shen S Q 2012 *Topological Insulators-Dirac Equation in Condensed Matters* (New York: Springer) pp83–84
- [14] Zhu B G, Lü R, Chen S 2014 *Phys. Rev. A* **89** 062102
- [15] Xing Y, Qi L, Cao J, Wang D Y, Bai C H, Wang H F, Zhu A D, Zhang S 2017 *Phys. Rev. A* **96** 043810
- [16] Yuce C 2018 *Phys. Rev. A* **97** 042118
- [17] Dangel F, Wagner M, Cartarius H, Main J, Wunner G 2018 *Phys. Rev. A* **98** 013628
- [18] Zhang K L, Wang P, Zhang G, Song Z 2018 *Phys. Rev. A* **98** 022128
- [19] Lieu S 2018 *Phys. Rev. B* **97** 045106
- [20] Jin J, Wang P, Song Z 2017 *Sci. Rep.* **7** 5903
- [21] Li X S, Li Z Z, Zhang L L, Gong W J 2020 *J. Phys.: Condens. Matter* **32** 165401
- [22] Kawabata K, Ashida Y, Katsura H, Ueda M 2018 *Phys. Rev. B* **98** 085116
- [23] Klett M, Cartarius H, Dast D, Main J, Wunner G 2017 *Phys. Rev. A* **95** 053626
- [24] Jin L 2017 *Phys. Rev. A* **96** 032103
- [25] Zhang L L, Li J R, Zhang D, Xu T T, Cui W B, Gong W J 2022 *Res. Phys.* **34** 105274
- [26] Guo A, Salamo G J, Duchesne D, Morandotti R, Volatier-Ravat M, Aimez V, Siviloglou G A, Christodoulides D N 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 093902
- [27] Lin Z, Ramezani H, Eichelkraut T, Kottos T, Cao H, Christodoulides D N 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 213901
- [28] Zhen B, Hsu C W, Igarashi Y C, Lu L, Kaminer I, Pick A, Chua S L, Joannopoulos J D, Soljačić M 2015 *Nature* **525** 354
- [29] Fleury R, Sounas D, Alù A 2015 *Nat. Commun.* **6** 5905
- [30] Schindler L, Li A, Zheng C M, Ellis F M, Kottos T 2011 *Phys. Rev. A* **84** 040101
- [31] Lin Z, Schindler J, Ellis F M, Kottos T 2012 *Phys. Rev. A* **85** 050101
- [32] Liu Y, Han Y Z, Liu C S 2022 *Optik* **255** 168727
- [33] Han Y Z, Jiang H, Chen S, Liu C S 2019 *Phys. E: Low - Dimens. Syst. Nanostruct.* **110** 68
- [34] Xue H B, Duan Z L, Chen B, Chen J B, Xing L L 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 087301 (in Chinese) [薛海斌, 段志磊, 陈彬, 陈建宾, 邢丽丽 2021 物理学报 **70** 087301]
- [35] Kawabata K, Shiozaki K, Ueda M, Sato M 2019 *Phys. Rev. X* **9** 041015
- [36] Altland A, Zirnbauer M R 1997 *Phys. Rev. B* **55** 1142
- [37] Wu H C, Jin L, Song Z 2021 *Phys. Rev. B* **103** 235110
- [38] Takata K, Notomi M 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 213902

SPECIAL TOPIC—Frontiers in non-Hermitian physics

Topological properties of the one-dimensional $\mathcal{PT}$ -symmetric non-Hermitian spin-orbit-coupled Su-Schrieffer-Heeger model*

Li Jia-Rui Wang Zi-An Xu Tong-Tong[†]

Zhang Lian-Lian Gong Wei-Jiang

(College of Sciences, Northeastern University, Shenyang 110819, China)

(Received 24 April 2022; revised manuscript received 31 May 2022)

Abstract

The topological property and the energy property of one-dimensional non-Hermitian spin-orbit-coupled Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model are investigated theoretically, by introducing spin-dependent imaginary potentials with gain and loss effects. It is found that the imaginary potential leads the imaginary energy spectra to appear in the topologically nontrivial region of this system, and the $\mathcal{PT}$ phase transition to happen in the topologically trivial region. In addition, the imaginary potential energy and spin-orbit coupling work together to make the topological phase transition occur in the topologically trivial region, and the topological non-trivial region becomes wider. The energy spectrum results show that the imaginary potential energy and the spin-orbit coupling can obviously control the zero-energy states of the system, which mainly lies in the presence of four zero-energy states with four different localities and numbers. This shows the special adjustment effect of imaginary potential energy and spin-orbit coupling on the energy band structure of the system. It is believed that these results are helpful in understanding the topological phase transition behavior of $\mathcal{PT}$ -symmetric non-Hermitian system.

Keywords: $\mathcal{PT}$ symmetry, topological phase transition, Su-Schrieffer-Heeger lattice, spin-orbit coupling

PACS: 03.65.Vf, 73.22.Gk, 71.70.Ej, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.71.20220796

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11905027), the Liaoning Revitalization Talents Program, China (Grant No. XLYC1907033), and the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. N2002005).

[†] Corresponding author. E-mail: xutttina2015@163.com

