



体态和边缘态的电导峰

夏群 邓文基

Conductance peaks of bulk states and edge states

Xia Qun Deng Wen-Ji

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 137301 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20212424

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212424>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一维二元复式晶格的拓扑不变量与边缘态

Topological invariants and edge states in one-dimensional two-tile lattices

物理学报. 2019, 68(12): 120301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190214>

三聚化非厄密晶格中具有趋肤效应的拓扑边缘态

Topological edge states with skin effect in a trimerized non-Hermitian lattice

物理学报. 2019, 68(10): 104206 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190112>

自旋轨道耦合Su-Schrieffer-Heeger原子链系统的电子输运特性

Electron transport through Su-Schrieffer-Heeger chain with spin-orbit coupling

物理学报. 2021, 70(8): 087301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201742>

量子点-Su-Schrieffer-Heeger原子链系统的电子输运特性

Electron transport through a quantum-dot-Su-Schrieffer-Heeger-chain system

物理学报. 2020, 69(7): 077301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191871>

偏置磁场方向对磁性光子晶体能带结构的影响及其在构建拓扑边界态中的作用

Influence of bias magnetic field direction on band structure of magnetic photonic crystal and its role in constructing topological edge states

物理学报. 2020, 69(15): 154102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200198>

基于声子晶体板的弹性波拓扑保护边界态

Topologically protected edge states of elastic waves in phononic crystal plates

物理学报. 2020, 69(15): 156201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200542>

体态和边缘态的电导峰

夏群 邓文基[†]

(华南理工大学物理与光电学院, 广州 510641)

(2021年12月30日收到; 2022年3月10日收到修改稿)

本文对有限 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 晶格的能量本征态和电导问题进行求解, 着重研究了引线-样品的耦合强度对其体态和边缘态电导峰的不同影响. 只有在弱耦合极限下, 电导峰才显示全部体态和边缘态的能量本征值; 随着耦合强度的增大, 全部电导峰都逐渐偏离能量本征值并变宽变低, 其中边缘态的电导峰还会逐渐消失; 耦合强度继续增大, 剩存的电导峰又逐渐变高变窄, 并在强耦合极限下与不包含两端原子的新孤立系统的能量本征值一一对应. 体态和边缘态对引线-样品耦合强度变化的不同响应可作为区分边缘态与体态的有效途径, 亦可作为系统中存在边缘态的重要判据.

关键词: Landauer 电导, Su-Schrieffer-Heeger 晶格, 边缘态

PACS: 73.23.-b, 03.65.Ge, 74.25.F-

DOI: 10.7498/aps.71.20212424

1 引言

众所周知, 物理系统总是与具有特殊频率的驱动发生共振, 该特殊频率接近或正是该系统的固有频率 (本征频率). 简谐振子的受迫振动是有关共振效应的原始模型^[1], 其以简单的微分方程描述了共振的基本原理和主要特征, 为分析其他复杂的共振现象提供了必要的概念和清晰的物理图像.

根据量子运输的 Landauer-Buttiker 理论^[2,3], 样品的电导简单地正比于费米面附近电子的透射率, 小量子系统的电导问题可转化为相应的量子散射或量子隧穿问题. 介观物理已经揭示了各种小量子系统和人工微结构中电子的能量本征值与电导峰之间存在类似的共振关系, 即当入射电子的能量接近小量子系统中电子的某个能量本征值, 它的透射率显著增大; 进一步研究还发现, 改变引线 with 样品之间的耦合强度, 可以显著地调控透射峰大小、形状和中心能量的位置; 电导测量为研究样品的电子束缚态提供了一种可能方案^[4-11].

通过电导测量确认超导-半导体异质纳米线体系中的 Majorana 准粒子也涉及对 Majorana 零模电导峰的进一步研究和解读^[12,13]. 此外还研究了量子点与有限晶格耦合系统的电导性质, 并发现改变样品-引线耦合强度将改变零能附近电导峰的数目^[14,15]; 有限晶格与两端引线之间的量子点或势垒可以有效地调控样品与引线之间的耦合强弱, 并展示边缘态与体态的不同响应; 更简单有效地调控理想引线 with 晶格样品耦合强度是改变引线 with 样品最邻近格点原子之间的跃迁能.

本文研究有限 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 晶格^[16]的体态和边缘态的电导峰. 有限 SSH 晶格是能够实现拓扑相变和体态与边缘态共存的最简单一维晶格模型, 已经得到了广泛的研究^[17-27]. 但是引线-样品耦合强度对有限 SSH 晶格电导峰的调制作用尤其是体态和边缘态电导峰对耦合强度变化的不同响应还没有相关研究, 有限 SSH 晶格电导与能量本征值之间的对应关系尚未被揭示. 基于推广的 Bloch 定理^[28,29], 本工作不仅提高了数值求解孤

[†] 通信作者. E-mail: phwjden@scut.edu.cn

立有限 SSH 晶格系统的能量本征值和电导问题的效率, 而且还得到系统电导和能量本征值的解析表达式, 同时对已有的有限 SSH 晶格的波函数^[17]进行进一步简化; 它们普遍适用于从弱耦合极限到强耦合极限的全参数空间, 为揭示有限晶格的电导峰与束缚态能量之间错综复杂的关系提供了可靠的保证。

本工作描述了有限 SSH 晶格的紧束缚模型, 并给出单电子 Schrodinger 方程, 以及有关能量本征值问题和量子散射问题的主要公式; 集中研究了边缘态和体态对引线-样品耦合强度变化的不同响应。

2 模型和公式

在紧束缚近似下, 晶格中单电子波函数的定态 Schrodinger 方程可普遍写作:

$$\varepsilon_\alpha \varphi_\alpha - \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} t_{\alpha, \beta} \varphi_\beta = E \varphi_\alpha, \quad (1)$$

其中 ε_α 和 $t_{\alpha, \beta}$ 分别是 α 格点的座能量和从格点 α 到 β 的跃迁能, 下标 α 遍历所有格点, $\langle \alpha, \beta \rangle$ 表示对格点 β 的求和限于格点 α 的最近邻。

考察一段孤立的有限 SSH 晶格, 如图 1(a) 所示, n 标识原胞序数. 该系统由 N 个完整原胞组成, 每个原胞包含 A, B 两个不等价的格点, 座能量均设为 $\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0$, 其中 t_v 和 t_w 分别是原胞内和原胞间最近邻格点的跃迁能, 取正实数值. 图 1(b) 为研究电导和量子散射问题的示意图, 样品两端分别接入半无限长引线, $n \leq 0$ 和 $n \geq 2N + 1$ 分别标识左

右两端半无限长引线中的格点. 设理想引线中的跃迁能为 1, 座能量为 0, 引线样品最近邻原子间的跃迁能称为引线-样品耦合强度, 记作 $t_{0,1} = t_{2N,2N+1} = \tau$, 是调控电导峰的大小和形状的重要参数。

2.1 有限 SSH 晶格的体态与边缘态

考虑有限 SSH 晶格中电子的能量本征值问题, Schrodinger 方程 (1) 改写为

$$\begin{aligned} -t_w \varphi_{n-1}^B - t_v \varphi_n^B &= E \varphi_n^A, \\ -t_v \varphi_n^A - t_w \varphi_{n+1}^A &= E \varphi_n^B, \end{aligned} \quad (2)$$

其中原胞序数 $n = 1, 2, \dots, N$, 且附加边条件:

$$\varphi_0^B = 0, \quad \varphi_{N+1}^A = 0. \quad (3)$$

根据推广的 Bloch 定理^[28,29], 方程 (2) 的尝试解可设为

$$\varphi_n^A = \varphi_A e^{ik(2n-1)}, \quad \varphi_n^B = \varphi_B e^{ik2n}, \quad (4)$$

其中 φ_A 和 φ_B 分别是波函数在 A 和 B 格点处的概率幅, k 是依赖于能量本征值 E 的待定参数. 将 (4) 式代入方程 (2) 可得:

$$\begin{bmatrix} E & t_v e^{ik} + t_w e^{-ik} \\ t_v e^{-ik} + t_w e^{ik} & E \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} = 0, \quad (5)$$

对应给定波矢 k 可得到正负两个能量本征值:

$$E_\pm(k) = \pm [(t_v e^{-ik} + t_w e^{ik})(t_v e^{ik} + t_w e^{-ik})]^{1/2}, \quad (6)$$

相应的本征态波函数满足:

$$\varphi_{B\pm} = \mp \left(\frac{t_v e^{-ik} + t_w e^{ik}}{t_v e^{ik} + t_w e^{-ik}} \right)^{1/2} \varphi_{A\pm}. \quad (7)$$

与理想无限系统不同, 有限系统中本征态的波矢可以是复数, 即 $k = \beta + i\alpha$, 其中 β 和 α 分别表示波矢的实部和虚部, 且 (6) 式可以改写为

$$\begin{aligned} E_\pm(k) &= \pm [t_v^2 + t_w^2 + t_v t_w (e^{2\alpha} + e^{-2\alpha}) \cos 2\beta \\ &\quad - i t_v t_w (e^{2\alpha} - e^{-2\alpha}) \sin 2\beta]^{1/2}, \end{aligned} \quad (8)$$

不难证明^[17]: 若要保证能量本征值为实数, 波矢的取值必须受到进一步的限制, 即

1) 或者波矢为实数, $\alpha = 0$. 此时由 (8) 式得到的能量本征值均处于理想无限晶格的能带中, 可以尝试将波矢分别为 k 和 $-k$ 的这样两个能量简并的行波线性组合为具有同一本征能量的驻波, 即:

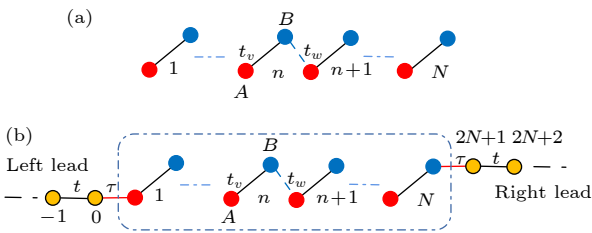


图 1 (a) 有限 SSH 晶格示意图; (b) 引线和有限 SSH 晶格耦合系统示意图. 红色圆点表示 A 原子, 蓝色表示 B 原子, 黄色表示引线中的原子, t_v 表示原胞内跃迁能, t_w 表示原胞间跃迁能

Fig. 1. (a) Schematic diagram of the finite SSH lattice; (b) schematic diagram of lead and finite SSH lattice coupling system. The red dot represents the A atom, the blue dot represents the B atom, and the yellow dot represents the atom in the lead; t_v indicates the intracell hopping, and t_w indicates intercell hopping.

$$\begin{pmatrix} \varphi_n^A \\ \varphi_n^B \end{pmatrix}_{\pm} = C_{\pm} \begin{pmatrix} e^{ik(2n-1)} \\ \mp \left(\frac{t_v e^{-ik} + t_w e^{ik}}{t_v e^{ik} + t_w e^{-ik}} \right)^{1/2} e^{ik2n} \end{pmatrix} + D_{\pm} \begin{pmatrix} e^{-ik(2n-1)} \\ \mp \left(\frac{t_v e^{-ik} + t_w e^{ik}}{t_v e^{ik} + t_w e^{-ik}} \right)^{-1/2} e^{-ik2n} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

代入边界条件 (3) 式, 可得:

$$-D_{\pm} = \frac{t_v e^{-ik} + t_w e^{ik}}{t_v e^{ik} + t_w e^{-ik}} C_{\pm} = e^{ik2(2N+1)} C_{\pm}, \quad (10)$$

这意味着:

$$\eta = \left(\frac{t_v e^{-ik} + t_w e^{ik}}{t_v e^{ik} + t_w e^{-ik}} \right)^{1/2} e^{-ik(2N+1)} = \pm 1, \quad (11)$$

它不仅给出波矢 k 的量子化条件:

$$t_v \sin [2(N+1)k] + t_w \sin (2Nk) = 0, \quad (12)$$

而且还给出相应束缚态波函数的解析表达式:

$$\begin{pmatrix} \varphi_n^A \\ \varphi_n^B \end{pmatrix}_{\pm} = C \begin{bmatrix} \sin 2k(n-N-1) \\ \pm \eta \sin 2kn \end{bmatrix}, \quad (13)$$

这是随空间周期振荡的体态波函数, 其中 C 为归一化常数.

2) 或者 $\beta = (2m+1)\pi/2$, 其中 m 为任意整数. 此时由 (8) 式得到的能量本征值均将处于理想无限晶格的两个能带之间的禁带中, 依然可以尝试将 (9) 式中波矢分别为 $k = \pi/2 + i\alpha$ 和 $k = -\pi/2 - i\alpha$ 的两个能量简并的本征波函数线性组合为具有相同能量且满足边条件 (3) 式的本征态, 其波矢的量子化条件更新为

$$t_v \sinh \alpha 2(N+1) = t_w \sinh \alpha 2N, \quad (14)$$

波函数为

$$\begin{pmatrix} \varphi_n^A \\ \varphi_n^B \end{pmatrix}_{\pm} = C \begin{bmatrix} \sinh 2\alpha(n-N-1) \\ \pm \eta \sinh 2\alpha n \end{bmatrix}, \quad (15)$$

这是典型的边缘态波函数, 主要集中分布在有限晶格的两端, 并随深入晶格的距离指数衰减.

3) 或者 $\beta = m\pi$. 此时由式 (8) 得到的能量本征值均处于理想无限晶格上能带的上方或者下能带的下方, 并且任何两个这样能量简并的能量本征态都无法线性叠加得到满足边条件式 (3) 的波函数.

改变 SSH 晶格中原胞内和原胞间的最近邻格点跃迁能 t_v 和 t_w 的值可以实现拓扑量子相变, 但包含 N 个完整原胞的有限 SSH 晶格中电子正交归一能量本征态的总数总是保持为 $2N$. 若 $t_v > t_w$,

则方程 (12) 在开区间 $(0, \pi/2)$ 内的 N 个实数解 k_1, k_2, \dots, k_N 可按 (9) 式叠加成 $2N$ 个能量本征态, 方程 (14) 没有非零解; 若 $t_v < t_w$, 方程 (12) 在开区间 $(0, \pi/2)$ 内只有 $N-1$ 个实数解, 它们仍然可以按 (9) 式线性叠加得到 $2(N-1)$ 个能量本征态波函数, 此时缺失的 2 个能量本征态正是 (15) 式给出的边缘态, 方程 (14) 恰好存在一对大小相等、符号相反的实数解. 不难想象, 体态和边缘态迥然不同的波函数形式将以显著不同的方式影响其对应的透射峰和电导峰.

2.2 SSH 晶格的电导

根据 Landauer-Buttiker 公式:

$$G = \frac{2e^2}{h} T, \quad (16)$$

计算电导需要考虑图 1(b) 所示“引线-样品-引线”系统中电子的散射问题, 分别以左右两端理想引线作为源和漏的电子库. 在紧束缚近似下, 理想引线中电子的能量本征方程为

$$-\varphi_{n-1} - \varphi_{n+1} = E\varphi_n, \quad n \leq 0 \text{ or } n \geq 2N+1, \quad (17)$$

入射电子能量-波矢色散关系为

$$E = -2 \cos k_0, \quad (18)$$

引线中的波函数可一般地设为

$$\phi_n = \begin{cases} e^{ik_0 n} + r e^{-ik_0 n}, & n \leq 0, \\ s e^{ik_0(n-2N)}, & n \geq 2N+1, \end{cases} \quad (19)$$

其中 r 和 s 分别是反射系数和透射系数, 由左右引线与 SSH 晶格耦合处, 即 $n = 0, 1, 2N, 2N+1$ 格点的 Schrodinger 方程确定, 即:

$$\begin{aligned} -\varphi_{-1} - \tau \varphi_1^A &= E\varphi_0, \\ -\tau \varphi_0 - t_v \varphi_1^B &= E\varphi_1^A, \\ -t_v \varphi_N^A - \tau \varphi_{2N+1} &= E\varphi_N^B, \\ -\tau \varphi_N^B - \varphi_{2N+2} &= E\varphi_{2N+1}, \end{aligned} \quad (20)$$

为简单起见, 已假设左右两端引线与样品的耦合强度相同, 即 $t_{0,1} = t_{2N,2N+1} = \tau$. 将 (9) 和 (19) 式中的电子波函数代入 (20) 式不仅可以极大地简化数值计算, 而且还可得到透射系数的解析表达式, 即:

$$s = \frac{-2i\tau^2 t_v t_w e^{ik_0} \sin k_0 \sin 2k}{c_1 \tau^4 + c_2 \tau^2 + c_3}, \quad (21)$$

其中

$$\begin{aligned} c_1 &= [t_v \sin 2(N-1)k + t_w \sin 2Nk] e^{i2k_0}, \\ c_2 &= -4t_w e^{ik_0} \cos k_0 \sin 2Nk, \\ c_3 &= [t_w \sin 2Nk + t_v \sin 2(N+1)k] t_w^2, \end{aligned} \quad (22)$$

对左端理想引线中能量为 E 的入射电子, 它的实波矢 k_0 由 (18) 式所确定; 进入样品后, 电子的波矢 k 一般是复数, 可以具有非零的虚部, 由色散关系 (6) 式或 (8) 式确定. 可以严格证明: 在 $\tau \rightarrow 0$ 弱耦合极限下, 测量电导峰可以精确地确定有限 SSH 晶格中电子的全部束缚态能量本征值, 包括全部体态和边缘态.

若入射电子的能量处于理想 SSH 晶格的两个能带中, 即:

$$|t_v - t_w| < |E| < |t_v + t_w|, \quad (23)$$

则波矢 k 取实数. 由 (21) 和 (22) 式可知, 若要 $\lim_{\tau \rightarrow 0} s \neq 0$, 必须 $c_3 = 0$, 恰好给出包含 N 个完整原胞的有限 SSH 晶格中体态波矢 k 的量子化条件 (12). 所以, 在弱耦合极限下, 只有当入射电子的能量恰好等于有限 SSH 晶格体态能量本征值时才发生共振透射.

若电子的能量处于两个能带之间的禁带中, 即:

$$|E| < |t_v - t_w|, \quad (24)$$

则 $k = (2m+1)\pi/2 + i\alpha$, (21) 和 (22) 式将分别改写为

$$s = \frac{(-1)^{N+1} 2i\tau^2 t_v t_w e^{ik_0} \sin k_0 \sinh 2\alpha}{c_1 \tau^4 + c_2 \tau^2 + c_3}, \quad (25)$$

和

$$\begin{aligned} c_1 &= [t_v \sinh 2(N-1)\alpha - t_w \sinh 2N\alpha] e^{i2k_0}, \\ c_2 &= 4t_w e^{ik_0} \cos k_0 \sinh 2N\alpha, \\ c_3 &= [t_v \sinh 2(N+1)\alpha - t_w \sinh 2N\alpha] t_w^2. \end{aligned} \quad (26)$$

同理, 若要透射系数不为零, 再次给出包含 N 个完整原胞的有限 SSH 晶格中边缘态波矢 k 的量子化条件 (14). 换句话说, 在弱耦合极限下, 只有当入射电子的能量恰好等于有限 SSH 晶格边缘态能量时才能通过指数衰减型透射产生透射峰.

若入射电子的能量处于 SSH 晶格上能带的上方或下能带的下方, 即:

$$|E| > |t_v + t_w|, \quad (27)$$

则 $k = m\pi + i\alpha$; 透射系数的解析表达式 (21) 和 (22) 将改写为

$$s = \frac{-2i\tau^2 t_v t_w e^{ik_0} \sin k_0 \sinh 2\alpha}{c_1 \tau^4 + c_2 \tau^2 + c_3}, \quad (28)$$

和

$$\begin{aligned} c_1 &= [t_v \sinh 2(N-1)\alpha + t_w \sinh 2N\alpha] e^{i2k_0}, \\ c_2 &= -4t_w e^{ik_0} \cos k_0 \sinh 2N\alpha, \\ c_3 &= [t_w \sinh 2N\alpha + t_v \sinh 2(N+1)\alpha] t_w^2, \end{aligned} \quad (29)$$

此时, 在 $\tau \rightarrow 0$ 弱耦合极限下, 透射系数始终为零, 无对应的电导峰.

有趣的是, 透射系数解析表达式 (21) 可以改写为

$$s = \frac{-2i\tau^{-2} t_v t_w e^{ik_0} \sin k_0 \sin 2k}{c_3 \tau^{-4} + c_2 \tau^{-2} + c_1}, \quad (30)$$

这意味着若要在强耦合极限下透射系数不为零, 即 $\lim_{\tau \rightarrow \infty} s \neq 0$, 必须 $c_1 = 0$. 所以, 若入射电子能量处于 SSH 晶格能带内, 则发生共振透射的条件为

$$t_w \sin 2Nk + t_v \sin 2(N-1)k = 0, \quad (31)$$

若入射电子能量处于 SSH 晶格禁带内, 则必须满足

$$t_w \sinh 2N\alpha = t_v \sinh 2(N-1)\alpha, \quad (32)$$

才有可能到达右端引线. 若入射电子的能量处于 SSH 晶格上能带的上方或下能带的下方, 总有 $c_1 \neq 0$, 即在 $\tau \rightarrow +\infty$ 强耦合极限下, 透射系数始终为 0, 无对应的电导峰.

对比 (12) 和 (14) 式, 它们分别是包含 N 个完整原胞的孤立 SSH 晶格体态和边缘态的波矢 k 的量子化条件, 不难看出式 (31) 和 (32) 分别是由 $N-1$ 个完整原胞构成的有限 SSH 晶格的体态和边缘态的波矢 k 的量子化条件, 但调换了原胞内和原胞间最近邻跃迁能, 即 $t_v \rightleftharpoons t_w$. 当然, 也可以更简单地由原来包含 N 个完整原胞的 SSH 晶格去掉左右两端原子得到这个新的有限 SSH 晶格. 所以, 在 $\tau \rightarrow \infty$ 强耦合极限下, 只有能量恰好等于不包含两端原子的有限 SSH 晶格的体态或边缘态的能量本征值的入射电子才能透射到有限 SSH 晶格样品的另一侧.

有限 SSH 晶格电导峰和能量本征值之间的对应关系类似于共振效应, 当入射电子能量与样品的能量本征值一致时就会发生共振透射. 但是引线与 SSH 晶格的耦合会影响样品的能量本征值, 导致样品的能量本征值与孤立晶格的能量本征值不一致. 不难理解, 耦合强度越弱影响越小, 对于弱耦合极限, 这种影响可以忽略不计, 因此电导峰的

位置与孤立晶格的能量本征值精确对应; 对于强耦合极限, 相当于 SSH 晶格左右端点并入引线, 形成一个少了一个原胞的新的 SSH 晶格, 新晶格与新引线相当于弱耦合, 所以强耦合极限下, 电导峰是与新晶格的能量本征值相对应的. 在中间耦合区, 电导峰和孤立晶格的能量本征值不再有对应关系, 从而导致电导峰位置发生偏移并且展宽变形.

3 电导峰的耦合强度效应

改变引线-样品耦合强度将显著地影响样品电导峰的大小、形状和位置. 上一节解析地讨论了在 $\tau \rightarrow 0$ 弱耦合极限和 $\tau \rightarrow \infty$ 强耦合极限下的电导谱, 若要进一步定量地研究电导峰的耦合强度效

应, 则需要采用数值计算方法; 不失代表性, 本文只给出 $N = 10$ 的数值结果.

首先考察 $t_v = t_w$ 的 SSH 晶格, 此时它退化为包含偶数 ($2N$) 个原子的简单晶格, 所有格点的最近邻跃迁能相同, 记作 t . 由 Bloch 定理可得简单晶格的色散关系为

$$E = -2t \cos k, \quad (33)$$

受边条件限制, 波矢只能取 $2N$ 个分离值, 即:

$$k = \frac{m\pi}{2N+1}, \quad m = 1, 2, \dots, 2N, \quad (34)$$

且相应的定态波函数为

$$\varphi_n(k) = \sqrt{\frac{2}{2N+1}} \sin kn, \quad (35)$$

以及与式 (21) 类似的简单晶格透射系数公式, 即:

$$s = \frac{-2it\tau^2 \sin k \sin k_0}{\tau^4 e^{ik_0} \sin k(2N-1) - 2t\tau^2 \sin 2kN + t^2 e^{-ik_0} \sin k(2N+1)}. \quad (36)$$

图 2 给出了跃迁能 $t = 0.8$, 包含 $2N = 20$ 个格点的简单晶格的电导谱. 若非特别关注耦合强度效应, 通常直接将理想引线连接到样品两端, 即取 $\tau = 1$. 此时电导峰与孤立系统束缚态能量本征值的关系并不十分明确, 虽然电导峰出现在本征能量附近, 但偏差大, 尖峰也不明晰, 如图 2(a) 所示. 耦合强度减弱可以调控电导峰变窄; 当 $\tau = 0.3$ 时, 20 个电导峰已经足够尖锐并与孤立系统的能量本征值一一对应, 如图 2(b) 所示. 反之, 耦合强度增

大, 电导峰再次变窄; 当 $\tau = 3$ 时, 18 个电导峰已足够尖锐并与包含 $2N - 2 = 18$ 个原子的简单晶格的 18 个能量本征值一一对应, 如图 2(c) 所示.

再考虑 $t_v < t_w$ 的情形, 此时有限 SSH 晶格是最简单的拓扑绝缘体, 除了 $2N - 2$ 个体态之外, 还会在零能附近出现一对边缘态. 与图 2(a) 类似, 在 $\tau = 1$ 的常规耦合情形下, 图 3(a) 中的电导峰不够尖锐, 而且明显偏离体态能量本征值; 更严重的是, 在零能附近看不到边缘态的任何电导峰信号. 但若耦合强度足够弱, 例如取 $\tau = 0.3$, 电导峰变窄并靠近能量本征值, 与边缘态对应的电导峰虽然很低, 但已清晰可见, 如图 3(b) 所示. 相反的, 若耦合强度足够大, 例如取 $\tau = 3$, 电导峰也会变得尖锐而明晰, 但是零能附近不再出现边缘态电导峰, 如图 3(c) 所示. 这与 2.2 节的分析一致, 因为在强耦合极限下, 电导峰反映的是去掉首尾两个原子的有限 SSH 晶格的束缚态能量本征值, 而不是原来包含 N 个完整原胞的 SSH 晶格; 由于 $t_v = t_w$ 对调, 新的有限 SSH 晶格没有零能附近的边缘态.

作为对比, 图 3(d)–(f) 分别给出了 $t_v = 1, t_w = 0.7$, 即 $t_v > t_w$ 情形的计算结果. 此时由 $N = 10$ 个原胞构成的有限 SSH 晶格没有边缘态, 但是去掉首尾两个格点后, 实现了 $t_v = t_w$ 对调, 由 $N - 1 = 9$ 个原胞构成的新的有限 SSH 晶格拥有一对零能附近的边缘态.

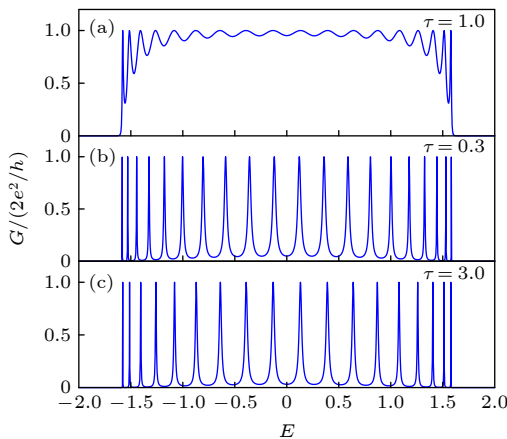


图 2 不同耦合强度有限简单晶格的电导谱, 其中格点数 $2N = 20$, 跃迁能 $t = 0.8$

Fig. 2. Conductance spectrum of the finite simple lattice with different coupling strengths, where the number of sizes $2N = 20$, hopping $t = 0.8$.

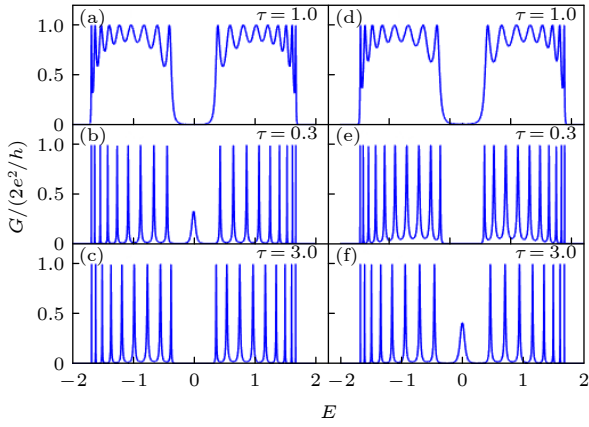


图3 完整原胞数 $N=10$ 时有限 SSH 晶格的电导谱 (a)–(c) 跃迁能 $t_v=0.7, t_w=1, \tau=1, 0.3, 3$; (d)–(f) 跃迁能 $t_v=1, t_w=0.7, \tau=1, 0.3, 3$.

Fig. 3. Conductance spectrum of the finite SSH lattice with the number of cells $N=10$: (a)–(c) $t_v=0.7, t_w=1, \tau=1, 0.3, 3$; (d)–(f) $t_v=1, t_w=0.7, \tau=1, 0.3, 3$.

由 2.2 节的解析讨论可知, 在 $\tau \rightarrow 0$ 弱耦合极限或者 $\tau \rightarrow \infty$ 强耦合极限下, 有限晶格的电导峰才会变得非常尖锐, 并反映相应有限 SSH 晶格的体态和边缘态的能级结构. 实验和数值模拟当然不会取 $\tau \rightarrow 0$ 或 $\tau \rightarrow \infty$ 极限, 但只要耦合强度足够弱, 例如 $\tau=0.01$, 或足够强, 例如 $\tau=15$, 电导谱的尖峰结构已经与其理想极限相差无几, 如图 4 所示.

电导峰对耦合强度变化的不同响应还是甄别体态和边缘态的重要途径. 图 5 专门展示了耦合强度对特定体态和边缘态电导峰形状、大小和位置的

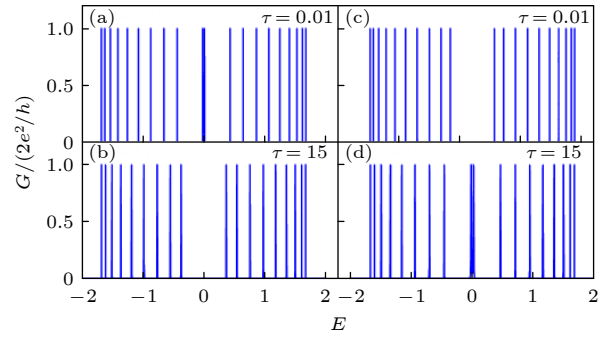


图4 弱耦合与强耦合极限下, $N=10$ 时有限 SSH 晶格的电导谱 (a)(b) $t_v=0.7, t_w=1$; (c)(d) $t_v=1, t_w=0.7$

Fig. 4. Conductance spectrum of the finite SSH lattice under the weak coupling limit and strong coupling limit with $N=10$: (a) (b) $t_v=0.7, t_w=1$; (c)(d) $t_v=1, t_w=0.7$.

不同调控过程. 图 5(a) 和 (b) 展示了包含 $N=10$ 个原胞且跃迁能 $t_v=0.7, t_w=1$ 的 SSH 晶格中能量本征值 $E=0.4344$ 的一个体态电导峰随耦合强度的演变. 当 $\tau=0.01$ 时, 尖锐的电导峰精确地与此能量对应; 耦合强度增大到 $\tau=0.5$, 这一尖峰变宽但中心位置仍然可以标示出能量本征值; 耦合强度达到常规值 $\tau=1$, 电导峰已经变得很宽并且明显偏离能量本征值; 耦合强度继续增大到 $\tau=2$, 电导峰已经再次收窄并偏移到 $E=0.3717$, 这是不包含两端原子的新孤立系统的能量本征值; 当 τ 增大到 25 时, 电导峰已经变得非常尖锐并十分精确地标示出这一新的能量本征值, 如图 5(b) 所示.

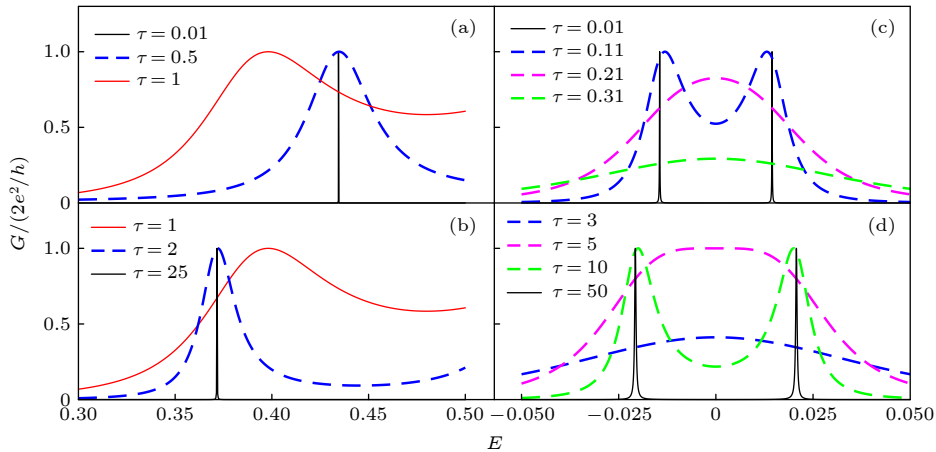


图5 有限 SSH 晶格电导峰随耦合强度的变化, 原胞数 $N=10$ (a)(b) $t_v=0.7, t_w=1$ 晶格的体态电导峰从弱耦合到强耦合 $\tau=0.01, 0.5, 1, 2, 25$ 的变迁; (c) $t_v=0.7, t_w=1$ 晶格在弱耦合情形 $\tau=0.01, 0.11, 0.21, 0.31$ 下的边缘态电导峰; (d) $t_v=1, t_w=0.7$ 晶格在强耦合情形 $\tau=3, 5, 10, 50$ 下的边缘态电导峰

Fig. 5. The conductance peaks of the finite SSH lattice varies with the coupling strength for $N=10$: (a)(b) $t_v=0.7, t_w=1, \tau=0.01, 0.5, 1, 2, 25$, the conductance peaks of the bulk states varies with the coupling strength from weak coupling to strong coupling; (c) $t_v=0.7, t_w=1, \tau=0.01, 0.11, 0.21, 0.31$, the conductance peaks of the edge states varies with the coupling strength under the weak coupling limit; (d) $t_v=1, t_w=0.7, \tau=3, 5, 10, 50$, the conductance peaks of the edge states varies with the coupling strength under the strong coupling limit.

图 5(c) 和 (d) 分别展示了拓扑和拓扑平庸的两个有限 SSH 晶格在弱耦合极限和强耦合极限下边缘态电导峰随耦合强度的变化. 如所周知^[16,17], $t_v < t_w$ 的 SSH 晶格具有一对零能附近的边缘态, 而 $t_v > t_w$ 的 SSH 晶格没有边缘态. 图 5(c) 展示了弱耦合情形 $\tau = 0.01, 0.11, 0.21, 0.31$ 下, $t_v = 0.7, t_w = 1$ 的有限 SSH 晶格中一对能量本征值 $E = \pm 0.0145$ 的边缘态电导峰逐步变宽、变低、逐渐消失的过程. 由于能量本征值是偶函数, 所以电导峰也是关于零能位置对称分布的, 两个边缘态对应的电导峰位置十分接近并且位于零能位置的两侧, 由于耦合强度的增大, 两个电导峰逐渐靠近并展宽, 电导峰的位置逐渐重叠, 当位置重叠时, 两个电导峰就会逐渐合并以致出现双峰结构, 随着耦合强度进一步变大双峰逐渐合并成一个峰, 然后逐渐变低, 最后消失. 相反地, 图 5(d) 展示了强耦合情形 $\tau = 3, 5, 10, 50$ 下, 原本没有边缘态的 $t_v = 1, t_w = 0.7$ 的有限 SSH 晶格电导谱中如何逐渐涌现出一对能量本征值 $E = \pm 0.0207$ 的边缘态电导峰的过程. 根据前面的分析, 这不是错误的电导峰信号, 但它们属于去掉首尾两个原子后的新 SSH 晶格. 相对于包含 N 个原胞的样品, 剩下只有 $N - 1$ 个完整原胞的 SSH 晶格已经对调了原胞内和原胞间的跃迁能, 的确拥有这样一对边缘态, 并在强耦合极限下显示出自己各自的电导峰.

4 结 论

本文研究了引线-样品耦合强度对有限晶格电导谱的调控, 求解了有限 SSH 晶格电导和束缚态能量本征值的解析表达式, 确认了电导峰与能量本征值的对应关系. 虽然在理想引线直接连接样品的常规操作下, 电导峰与孤立系统束缚态能量本征值的关系是模糊不精确的, 但在弱耦合极限下, 电导峰可以显示孤立系统全部体态和边缘态, 电导峰与能量本征值精确地一一对应; 在强耦合极限下, 电导峰再次变得尖锐并清晰地展示不包含两端原子的有限 SSH 晶格的全部能量本征态. 通过观察电导峰大小、形状和位置对耦合强度变化的不同响应可以判断有限 SSH 晶格边缘态的存在, 并且对体态和边缘态做出甄别.

猜测有关结论可以推广到其他不同类型的有限晶格系统, 甚至通过调节样品-引线的耦合强度可以更好地探测超导-半导体异质纳米线体系中 Majorana 零模的电导峰信号.

参考文献

- [1] Yu T, Zhang L, Luo M K 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 120504 (in Chinese) [蔚涛, 张路, 罗懋康 2013 物理学报 **62** 120504]
- [2] Datta S 1995 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press) pp57–110
- [3] Imry Y, Landauer R 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** S306
- [4] Wees B J, Houten H, Beenakker C W J, Williamson J G, Kouwenhoven L P, Marel D, Foxon C T 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 848
- [5] Berggren K F, Ji Z L 1991 *Phys. Rev. B* **43** 4760
- [6] Sprung D W L, Wu H, Martorell J 1996 *Am. J. Phys.* **64** 136
- [7] Bosken M, Steller A, Waring B, Cahay M 2014 *Physica E Low Dimens. Syst. Nanostruct.* **64** 141
- [8] Ramírez C, González F H, Galván C G 2019 *J. Phys. Soc. Jpn.* **88** 094002
- [9] Xu H Q 1993 *Phys. Rev. B* **47** 9537
- [10] Ji Z L 1994 *Phys. Rev. B* **50** 4658
- [11] Kawamura T, Leburton J P 1993 *Phys. Rev. B* **48** 8857
- [12] Zhang H, Liu D E, Wimmer M, Kouwenhoven L P 2019 *Nat. Commun.* **10** 5128
- [13] Yu C L, Zhang H 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 077303 (in Chinese) [于春霖, 张浩 2020 物理学报 **69** 077303]
- [14] Zhang L Y, Xue H B, Chen B, Chen J B, Xing L L 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 077301 (in Chinese) [张蓝云, 薛海斌, 陈彬, 陈建宾, 邢丽丽 2020 物理学报 **69** 077301]
- [15] 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]
- [16] Asbóth J K, Oroszlány L, Pályi A 2016 *A Short Course on Topological Insulators* (Budapest: Springer) pp1–99
- [17] Lu M X, Deng W J 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 120301 (in Chinese) [卢曼昕, 邓文基 2019 物理学报 **68** 120301]
- [18] Kurzyna M, Kwapiński T 2020 *Phys. Rev. B* **102** 195429
- [19] Zhang K L, Jin L, Song Z 2019 *Phys. Rev. B* **100** 144301
- [20] Zhang K L, Song Z 2020 *Phys. Rev. A* **101** 032111
- [21] Haller A, Massignan P, Rizzi M 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033200
- [22] Kuno Y 2019 *Phys. Rev. B* **99** 064105
- [23] Chen R, Chen C Z, Zhou B, Xu D H 2019 *Phys. Rev. B* **99** 155431
- [24] Obana D, Liu F, Wakabayashi K 2019 *Phys. Rev. B* **100** 075437
- [25] Weber M, Assaad F F, Hohenadler M 2015 *Phys. Rev. B* **91** 245147
- [26] Yu W G, Sacramento P D, Li Y C, Angelakis D G, Lin H Q 2019 *Phys. Rev. B* **99** 115113
- [27] Zhang S L, Zhou Q 2017 *Phys. Rev. A* **95** 061601
- [28] Deng W Y, Zhu R, Deng W J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 067301 (in Chinese) [邓伟胤, 朱瑞, 邓文基 2013 物理学报 **62** 067301]
- [29] Ajoy A, Karmalkar S 2010 *J. Phys. Condens. Matter* **22** 435502

Conductance peaks of bulk states and edge states

Xia Qun Deng Wen-Ji[†]

(*School of Physics and Optoelectronics, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China*)

(Received 30 December 2021; revised manuscript received 10 March 2022)

Abstract

The electronic eigen-energy and the Landauer conductance of the finite Su-Schrieffer-Heeger (SSH) lattice are calculated carefully, and the different effects of the lead-sample coupling strength on the conductance peaks of the bulk states and edge states are investigated. Only under the weak coupling limit, can the conductance peaks demonstrate the eigen-energy of all bulk states and edge states. With the increase of coupling strength, all the conductance peaks gradually deviate from their corresponding eigen-energy values and become wider, and the conductance peaks of the edge states will gradually disappear. In particular, after the coupling strength continues to increase to a large enough value, the conductance peaks gradually narrow again, but two of the peaks disappear, and the survival peaks will correspond to the eigen-energy of the remaining lattice system that does not contain the two atoms at both ends under the strong coupling limit. Therefore, the different responses of the conductance peaks to the varying coupling strength can be used to distinguish edge state from bulk states, and judge whether a system has any edge states.

Keywords: Landauer conductance, Su-Schrieffer-Heeger lattice, edge state

PACS: 73.23.-b, 03.65.Ge, 74.25.F-

DOI: [10.7498/aps.71.20212424](https://doi.org/10.7498/aps.71.20212424)

[†] Corresponding author. E-mail: phwjden@scut.edu.cn