arXiv:2305.02025v1 [cond-mat.mes-hall] 3 May 2023

扩展 Su-Schrieffer-Heeger 链中的高次谐波光谱学拓扑相检测

MohitLalBera,[1] JessicaO. deAlmeida,[1] MarlenaDziurawiec,[2] MarcinPłodzie´n,[1]Maciej M. Ma´ska,[2]Maciej Lewenstein,[1,3]Tobias Grass,[4,5,1]和 Utso Bhattacharya[1]*ICFO* - 光子科学研究所，巴塞罗那科学技术研究院，*08860* 卡斯特尔德费尔斯（巴塞罗那），西班牙。[2]弗罗茨瓦夫科技大学理论物理研究所，*50-370* 弗罗茨瓦夫，波兰[3]*ICREA*，*Pg. Lluis Companys 23*，*ES-08010* 巴塞罗那，西班牙。[4]*DIPC* - 多诺斯蒂亚国际物理中心，*Paseo Manuel de Lardiz´abal 4*，*20018* 圣塞巴斯蒂安，西班牙[5]*Ikerbasque* - 巴斯克科学基金会，*Maria Diaz de Haro 3*，*48013* 毕尔巴鄂，西班牙

Su-Schrieffer-Heeger（SSH）链是典型的一维拓扑绝缘体示例：当系统的体态具有非零拓扑绕数不变量时，会存在零能边缘模。近年来，高次谐波光谱学被提出作为探测拓扑相的工具。具体而言，研究表明，当 SSH 链耦合到频率远低于带隙的外部激光场时，在谐波频率处发射的光在平庸拓扑相与拓扑相之间存在显著差异。然而，目前尚不清楚，高次谐波产生（HHG）能否区分不同的非平庸拓扑相——这些拓扑相的边缘态数量各不相同。本文通过研究具有远程跃迁的 SSH 链扩展版本，探讨了这一问题；该模型具有多个不同的拓扑相。我们明确表明，当存在多个拓扑相时，高次谐波产生谱是区分拓扑相的一种灵敏且合适的工具。我们还提出了一种基于调节系统填充数的定量方案，从而精确确定该链在每个拓扑相中的边缘模数量。

I. 引言

近年来，凝聚态物理领域对物质拓扑相的研究日益受到关注。这些相具有非局域、非微扰的性质，并受到拓扑不变量的保护，因此能够抵御扰动和缺陷。拓扑绝缘体[1,2] 和拓扑超导体[3,4] 的发现，推动了人们对多种材料中丰富拓扑相的探索，其中包括冷原子[5] 和光子[6–8] 系统。研究这些系统不仅具有基础意义，在量子计算[9–12]、自旋电子学[13], 和磁力测量[14]等领域也有潜在应用。

Su-Schrieffer-Heeger（SSH）模型是能够展现非平庸拓扑性质的最简单模型之一。它是一个一维模型，最初用于描述聚乙炔[15,16]，（一种由碳原子和氢原子构成的线性聚合物）的电子性质。该模型由一个紧束缚哈密顿量描述，表示电子在相邻格点之间的跃迁，其中两个不同参数对应交替排列的单键和双键。SSH模型具有两个不同的相，其特征在于带隙中的零能处出现的边缘态数量。在平庸相中，不存在零能态；而在拓扑相中，系统的两个开放端各出现一个此类态。人们还研究了SSH模型的各种扩展，包括描述电子在次近邻[12,17]之间跃迁的长程隧穿项。经过适当扩展的SSH模型可能呈现额外的拓扑相，例如具有四个边缘态的相。

凝聚态物质中的高次谐波光谱学是强场阿秒科学中一个蓬勃发展的领域，有望揭示材料的结构和动力学性质。高次谐波产生（HHG）是一种非线性光学过程，当强激光场与材料相互作用时便会发生，并产生入射频率的高阶谐波。近年来，人们开始从理论[20–28] 和实验[29,30]上探索强场阿秒科学与拓扑凝聚态物质之间的联系。在 SSH 模型中，理论研究表明，高次谐波光谱学可用于探测拓扑性质[21,22]。具体而言，SSH 模型的高次谐波谱呈现出一些特征，可据此区分平庸拓扑相与非平庸拓扑相，并识别拓扑边缘态。然而，目前尚不清楚能否利用高次谐波产生来识别两种不同的非平庸拓扑相，即使它们具有不同数量的非零边缘态。

为解决这一问题，本文考虑 SSH模型的扩展版本，该模型包含次近邻电子跃迁，相关研究见参考文献 17。该模型呈现出具有零个、两个和四个边缘态的拓扑相。我们提出一种利用高次谐波光谱学区分这些相的方法。该方法基于对材料非线性极化的分析，可揭示拓扑相的特征信号。我们表明，该方法能够清晰区分具有两个和四个边缘态的材料，还可用于识别和调控其他拓扑材料的拓扑性质。该方法对凝聚态物质中拓扑相的研究具有重要意义，并有助于新技术的开发。

本文结构如下：在第二节的IIA小节中，我们介绍扩展SSH模型，并讨论其能带结构、拓扑性质和相图，同时将其与标准SSH模型进行比较。在第二节的IIB小节中，我们详细介绍所诱导的...

激光脉冲以及光与扩展 SSH 链的耦合。在小节 IIC 中，我们简要介绍计算系统三个不同相的高次谐波谱所需的数值方法。在第 III 节中，我们讨论系统三个不同相对应的高次谐波谱，并研究填充情况在准确确定这三个相各自的边缘模数量方面所起的作用。最后，我们在第 IV 节结论中总结工作，并简要展望未来及实验可能性。

II. 理论

A. 扩展Su-Schrieffer-Heeger模型

Su-Schrieffer-Heeger（SSH）模型[31,32] 是一种理论模型，用于固体物理学中描述一维晶体系统的电子性质。该模型考虑由 A、B 子晶格上的原子交替排列而成的链，每个双格点晶胞包含两个格点[22]。电子可以在晶胞内部（胞内）跃迁，也可以在最近邻晶胞之间（胞间）跃迁，且两种跃迁的振幅不同。因此，该模型由一个称为二聚化参数的参数表征，它表示胞内键与胞间键跃迁强度之间的差异。当胞间二聚化强于胞内二聚化时，系统会呈现非平庸拓扑相，具有体能隙，并在链的边界处支持拓扑保护边缘态。因此，SSH 模型是一个一维拓扑绝缘体的典型模型。SSH 模型的拓扑性质源于手征对称性，这是一种与 SSH 哈密顿量反对易的离散对称性，表明模型在交换两个子晶格时保持不变。它还确保系统的每个正能量都对应一个大小相同的负能量。有趣的是，能量在交换二聚化参数后也保持对称，色散关系完全相同且处处有能隙（绝缘体），但二聚化为零时除外，此时系统无能隙（金属）。然而，交换二聚化参数会使系统呈现不同性质，因为本征矢量会显著不同。事实上，对准动量空间中本征矢量的贝里曲率在整个布里渊区积分后，可以得到不同的拓扑不变量，称为陈数。这表明两个绝缘相在拓扑上彼此不同。不同的拓扑扇区意味着，不经过拓扑相变（即系统体能隙闭合的过程，也就是绕数未定义的金属相），就不可能从一个绝缘相转变到另一个绝缘相。因此，当具有非零体拓扑不变量的系统处于开放边界条件下时，系统的体能隙中会出现一个零能（边缘）模，并尖锐地局域在拓扑非平庸区域（绝缘体）与拓扑平庸区域的分界处。本研究采用的非相互作用紧束缚模型不考虑电子-电子相互作用。

因此，可以精确地获得能带结构和绕数的解析结果，使其成为一维拓扑绝缘体[2]的典型范例。迄今为止，SSH 模型已在多种系统中通过实验实现：冷原子[33], 、光子晶格[34,35], 和机械系统[36]。

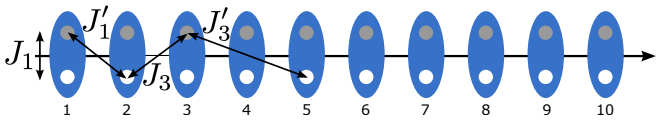

图 1. 哈密顿量（式（2））所描述的一维 ESSH 模型示意图：每个蓝色椭圆代表一个包含两个格点的晶胞： A型格点绘于下方， B型格点绘于上方。为保持手征对称性，我们只考虑 A型与 B型格点之间的跃迁过程，包括胞内跃迁、 J_1、相邻晶胞之间的跃迁 J_1' 和 J_3，以及次近邻晶胞 J_3'之间的跃迁。

若不局限于最近邻电子跃迁，标准 SSH 模型的拓扑相图可扩展至包含拓扑不变量取值更高的相。允许更远距离的跃迁，例如次近邻格点之间的跃迁，便可构造一种模型，我们称之为扩展Su-Schrieffer-Heeger模型（ESSH模型），该模型已在文献 17 中得到广泛研究。然而，为保持模型的手征对称性，跃迁仅发生在不同子晶格之间，从而使拓扑性质得以保持。具体而言，本文研究一维 ESSH 模型的哈密顿量：

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = J_1 \sum_{n=1}^{N} (\hat{c}_{n,A}^{\dagger}\, \hat{c}_{n,B} + \text{H.c.}) + J_1' \sum_{n=1}^{N} (\hat{c}_{n,B}^{\dagger}\, \hat{c}_{n+1,A} + \text{H.c.}) \\ + J_3 \sum_{n=1}^{N} (\hat{c}_{n,A}^{\dagger}\, \hat{c}_{n,B} + \text{H.c.}) + J_3' \sum_{n=1}^{N} (\hat{c}_{n,B}^{\dagger}\, \hat{c}_{n+2,A} + \text{H.c.}),\end{aligned} \tag{1}$$

其中， N 表示由链中的 $M = 2N$ 个格点构成的链所包含的晶胞数。在二次量子化记法中，$\hat{c}_{n,s}^{\dagger}$ ($c_{n,s}$)表示晶胞 n中子晶格 $s = A, B$上的电子产生（湮灭）算符。第一项表示强度为 J_1的胞内电子跃迁，第二项表示晶胞 n中的 B 与晶胞 $n+1$中的 A 之间的最近邻胞间跃迁，第三项表示晶胞 n 中的 A 与晶胞 $n+1$中的 B 之间的最近邻跃迁，而第四项则描述晶胞 n 中的 B与晶胞 $n+2$ 中的 A 之间的次近邻跃迁（见图1）。在第一量子化.....

记号下，实空间中的哈密顿量可写为

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = & J_1\left(\sum_{n=1}^{N}|n,A\rangle\langle n.B| + \text{H.c.}\right) \\ & + J_1'\left(\sum_{n=1}^{N}|n,B\rangle\langle n+1,A| + \text{H.c.}\right) \\ & + J_3\left(\sum_{n=1}^{N}|n,A\rangle\langle n+1,B| + \text{H.c.}\right) \\ & + J_3'\left(\sum_{n=1}^{N}|n,B\rangle\langle n+2,A| + \text{H.c.}\right).\end{aligned} \tag{2}$$

与标准SSH模型一样，扩展SSH模型的哈密顿量也保留三种离散对称性：手征对称、粒子-空穴对称和时间反演对称。它被归类为BDI拓扑类别，其拓扑不变量（绕数）属于整数集合 $\mathbb{Z}$。在开放边界下，ESSH可支持不同数量的边缘模：零个、两个或四个，具体取决于其体绕数的绝对值是零、一还是二。相比之下，标准SSH模型仅有两种可能：开放链的两端存在零个或两个边缘模。

在动量表象中写出式（2）中的哈密顿量后，即可直接计算绕数；该哈密顿量可通过替换以下内容得到:

$$\begin{aligned}|n,A\rangle &= \sum_k e^{-ikx_{nA}}|k,A\rangle, \\ |n,B\rangle &= \sum_k e^{-ik'x_{nB}}|k',B\rangle,\end{aligned} \tag{3}$$

其中，$|k,\ s\rangle$ 是动量为 k、子晶格指标为 $s = A,\ B$ 的准动量态，并采用周期性边界条件。在本文余下部分中，我们用 a 表示晶格常数。由此，式（2）中的哈密顿量化简为

$$\mathcal{H} = \sum_k \left(|k,A\rangle, |k,B\rangle\right)\left[h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y\right]\begin{pmatrix}\langle k,A|\\ \langle k,B|\end{pmatrix}, \tag{4}$$

其中

$$\begin{aligned}h_x(k) &= J_1 + J_1'\cos ka + J_3\cos ka + J_3'\cos 2ka, \\ h_y(k) &= J_1'\sin ka - J_3\sin ka + J_3'\sin 2ka.\end{aligned} \tag{5}$$

由于系统具有离散平移不变性，对于每个准动量模 k，它都可化简为子晶格基底中的二能级系统，因此很容易用泡利矩阵 σ_x 和σ_y表示。此外，将哈密顿量分解到泡利矩阵基底中，还可利用 h_x 和 h_y计算绕数，

$$\mathcal{W} = \frac{1}{2\pi}\int_{BZ}\frac{h_x\partial_k h_y - h_y\partial_k h_x}{h_x^2 + h_y^2}\mathrm{d}k. \tag{6}$$

该模型的绕数可以取值 $\mathcal{W}$ =−1，0，1，2；根据体边对应关系，可直接得出系统在开放边界条件下所具有的边缘模数量为其绝对值的两倍2$|\mathcal{W}|$。从图2所示的能谱中，可以看到带隙结构、零能模或边缘模的不同数量，以及两种最有趣情形下的绕数：当系统（a）的绕数为1时，有一对边缘模；（b）有两对边缘模，绕数为2。固定参数 $J_1 = J_1' = 1$的值后，可以改变另外两个参数 J_3 和 J_3'，并计算绕数，从而得到相图，展示 ESSH 系统中可能存在的不同相，如图3所示。

B. 入射激光场

本节研究一维ESSH模型与激光产生的线偏振电场之间的耦合。假设激光波长远大于系统的长度，因此，在偶极近似下可以很好地描述系统与激光场的耦合。激光矢势和电场为:

$$\vec{A}(t) = A(t)\hat{x}, \quad \vec{E}(t) = -\partial_t\vec{A}(t). \tag{7}$$

其中，$\hat{}x$ 表示沿链长度方向、与激光偏振平行的方向。光与物质的耦合方式取决于系统的几何结构。例如，在速度规范下，光-物质耦合会使跃迁矩阵元获得佩尔斯相位$\vec{A}\cdot(\vec{r}_{n,\ s}-\vec{r}_{n',\ s'})$。具体而言，我们假设 $\vec{A}\cdot(\vec{r}_{n,\ s}-\vec{r}_{n',\ s'}) \propto n - n'$。因此，胞内跃迁不受光场影响，即 $\vec{A}\cdot(\vec{r}_{n,\ A} - \vec{r}_{n,\ B}) = 0$；而相邻晶胞之间的跃迁获得相位 $A(t)$，次近邻晶胞之间的跃迁获得相位 $2A(t)$。相应地，我们有

$$\begin{aligned}J_1(t) &= J_1, & J_1'(t) &= J_1'e^{iaA(t)}, \\ J_3(t) &= J_3e^{iaA(t)}, & J_3'(t) &= J_3'e^{2iaA(t)}.\end{aligned} \tag{8}$$

$N\times N$维 ESSH 哈密顿量 (1) 的本征态通过在实空间单粒子基中进行精确对角化获得。假设存在自旋简并，能量最低的 $N/2$ 个态（由 N 个电子占据）在整个激光脉冲持续时间内进行时间演化，该脉冲包含 5 个周期 ($n_c = 5$)。假设采用原子单位 ($\hbar = |e| = m_e = 4\pi\epsilon_0 =$1)，入射激光场的形式为

$$A(t) = A_0\sin^2\left(\frac{\omega t}{2n_c}\right)\sin(\omega t), \qquad 0 < t < \frac{2\pi n_c}{\omega}. \tag{9}$$

全文中，频率设为 $\omega = 0.03$ （对应于 $\lambda \simeq$1.5 μm），矢势振幅设为 $A_0 = 0.5$ （对应于激光强度 $\simeq 20\times10^{10}$ Wcm^{-2}）。只要绝缘相中的入射激光频率相对于带隙足够小，且激光峰值强度足以产生高次谐波，本文讨论的结果就不依赖于激光脉冲的具体细节。

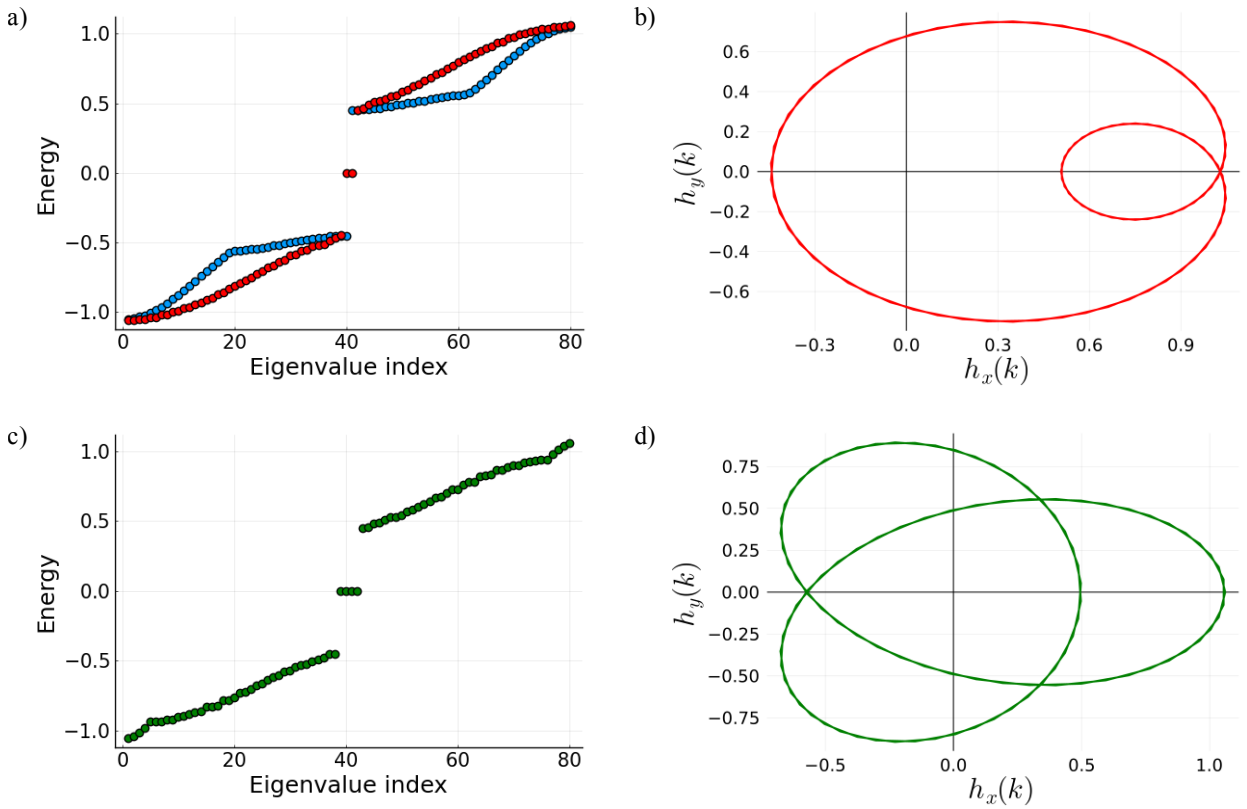

图2. 80 个格点的能量本征值（以原子单位计），展示了哈密顿量（式（2））在不同固定参数值下的零个（a，蓝色）、两个（a，红色）和四个（c，绿色）零能态。右侧图展示了式（4）中定义的 $h_x(k)$ 和 $h_y(k)$ 的参数图，其中分别有两个（b）和四个（d）零能态。

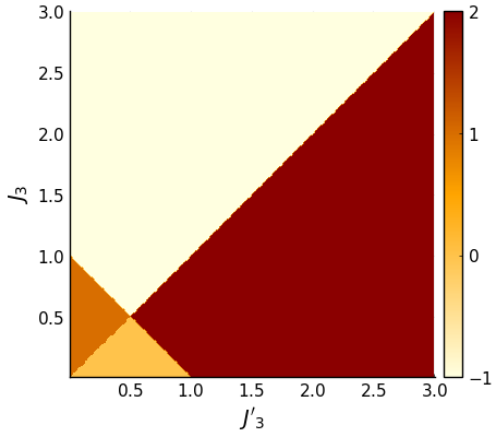

图3. 哈密顿量（式（4））的拓扑相图，展示了固定 $J_1 = J'_1$、改变 J_3 和 J'_3（以 J_1 为单位）时绕数的各种取值，计算方法见式（6）。

采用 Crank-Nicolson 方法计算了含时哈密顿量作用下波函数的演化过程。

近似，

$$|\Psi(t+\delta t)\rangle = \exp[-i\,\mathcal{H}(t)\delta t]\,|\Psi(t)\rangle \approx \frac{1-i\,\mathcal{H}\,(t+\delta t/2)\,\delta t/2}{1+i\,\mathcal{H}\,(t+\delta t/2)\,\delta t/2}\,|\Psi(t)\rangle\,, \tag{10}$$

采用逐个无穷小 δt 时间步求解，初始条件 $|\Psi(0)\rangle$ 为系统的基态。

C. 高次谐波产生

我们的主要目标是估算 ESSH 系统的高次谐波谱。在半经典方法下，对于不相关发射体，辐射光的谱与偶极加速度 [37–39] 的傅里叶变换的绝对值平方成正比，

$$P(\omega) = \left|\mathrm{FFT}\left[W_B \ddot{X}(t)\right]\right|^2, \tag{11}$$

其中我们使用 W_B 布莱克曼窗函数[40]，并且 $\ddot{X}(t)$ 是时变位置算符的加速度或二阶时间导数。为了计算位置算符的时变期望值，我们对所有占据本征态 b 进行时间演化，$b \in (1, N/2)$。随后使用时间演化后的单粒子波函数 $\Psi_b(t)$ 来

计算

$$X(t) = \sum_{b=1}^{N/2} \sum_{j=1}^{N} \sum_{s=A,B} \Psi_b^{j,s*}(t) x_{j,s} \Psi_b^{j,s}(t), \qquad (12)$$

其中 $\Psi^{j}{}_{,b}{}^{s}(t)$ 是时间演化波函数在晶胞 j 的格点 s 上的振幅，而位置$x_{j,s}$ 由下式给出

$$x_{j,A} = x_{j,B} = (j-1) - \frac{(a-M)}{4}, \qquad (13)$$

其中， j 是每个含有两个格点 A 和 B的晶胞的位置，如图1所示。基本上，将不同（初始）已占据本征态中所有电子随时间演化后的平均位置相加，从而得到电子云的总位置。

在下一节中，我们分析并比较系统在三个不同参数点处的时变位置和谐波响应，这些参数点对应图2所示的三个不同相：（a）相 P_0，对应参数点 $J_1 = 0.651$, $J_1' = 0.207$, $J_3 = 0.038$，和$J_3' = 0.156$。从图2a（蓝色）所示的能谱中，我们观察到带隙为0.9（原子单位），绕数为 $\mathcal{W} = 0$，对应于平庸绝缘体相。（b）相 P_1，对应点$J_1 = 0.51$, $J_1' = 0.42$, $J_3 = 0.056$，和 $J_3' = -0.479$。图2a（红色）展示了该相，其中存在两个零能态，表明存在边缘态，这与绕数 $\mathcal{W} = 1$一致。（c）相 P_2，对应 $J_1 = 0.059$, $J_1' = 0.021$, $J_3 = 0.26$，和 $J_3' = 0.7209$。对于这一相，我们从图2b中观察到存在四个零能态，代表绕数为 $\mathcal{W} = 2$的边缘模。参数的选取使系统在三个相中具有相同的带隙和带宽，从而能够清晰地比较这三个相的结果。我们还考察了相变点 M，此时系统为金属，参数为 $J_1 = 0.51$, $J_1' = 0.42$, $J_3 = 1$，和$J_3' = 0.91$。总体目标是观察能否通过时变位置算符和谐波谱识别某些特征，从而清晰地区分 P_0， P_1， P_2和 M。

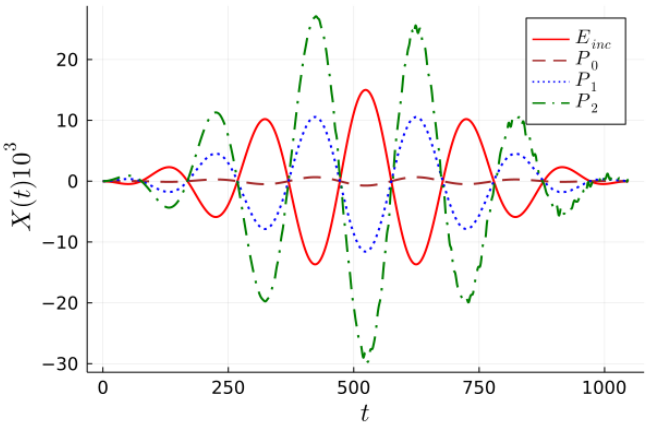

图 4. 不同拓扑相 P_0、 P_1 和 P_2 下，入射电场（红色实线）与位置算符的期望值（式 (12)）随时间的变化。

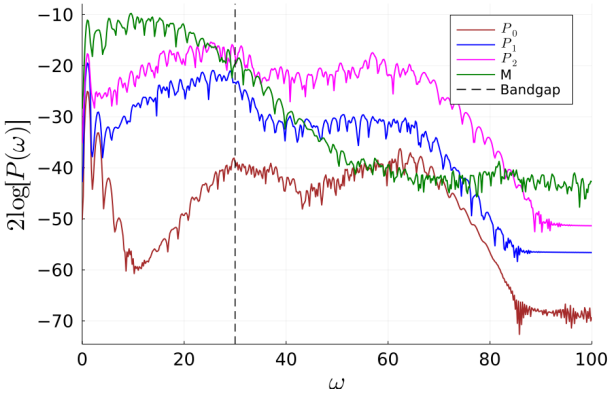

图 5. 金属相 M、拓扑平庸相 P_0 以及两种不同的拓扑非平庸相 P_1 （具有两个边缘模）和 P_2 （具有四个边缘模）所发射的高次谐波谱。竖线对应带隙的数值（以入射激光频率为单位）。

III. 结果与讨论

我们首先考察 ESSH 模型的总位置算符期望值随时间的变化，如图 4 所示，其中展示了三种不同的相 P_0, P_1 和 P_2。所有相中的位置算符都具有与入射激光束（式 (9)）相似的周期性，但三种相的最大振幅存在明显差异。显然，拓扑平庸绝缘相 P_0 中电子平均位置的变化最小，这可归因于半填充绝缘体中电子云整体的局域特性。边缘模的存在使系统略具金属性，因此，系统中边缘模较多的相 (P_1， P_2) 位移也更大。研究该系统的谐波谱时，这一点会更加明显。

在图 5 中，我们绘制了谐波谱绝对功率谱的对数随谐波阶数（入射驱动频率的整数倍）的变化。 P_0， P_1 和 P_2 的谐波谱在系统带隙以上的高能区域呈现平台。该平台主要源于经历带间跃迁的电子轨迹之间的干涉。三条曲线在相近的谐波阶数处也都出现了截止，这主要由系统带宽（最高与最低本征能量之差）决定，因为带宽限制了电子在演化过程中能够达到的最大能量。然而，带隙以下的谐波响应在P_0 和 P_1， P_2 相中有所不同。在通常的半导体中，这一区域主要由带内贡献主导；而 P_0 存在一个凹陷。然而，在 P_1 和 P_2相中，我们未观察到带隙以下的凹陷，因为边缘模使中带隙态可供电子跃迁。这些状态在谐波谱中表现为明显信号，因为此时可以发生从已填充体能带到中隙边缘态的跃迁，因而

从已填充体能带到中隙边缘态的跃迁成为可能。相比之下，P_0 相是具有体能隙且不存在中隙态的平庸绝缘体，因此体态只能对带隙以上的谐波谱作出贡献。因此，这种相在带隙以下的信号中会出现凹陷。这一特征可用于区分拓扑平庸相与非平庸相的高次谐波谱，此前对SSH模型中的高次谐波产生的研究也观察到了这一现象[21,22]。此外，该现象也在拓扑超导体中得到研究；通过高次谐波产生证明边缘模在局域微扰下具有鲁棒性，从而证实了其拓扑性质[28]。

然而，有趣的是，仅根据谐波谱本身并不容易区分这两个拓扑相，因为时变位置中的总体振幅差异呈多项式形式，并不会在谐波谱中表现为显著差异；此外，谐波谱采用对数刻度绘制，其表现还取决于为这两个相所选取的跃迁参数的具体数值。尽管如此，通过分析体态和边缘态对高次谐波的贡献，并以平庸绝缘相 P_0 和金属相变点 M的谐波谱作为两个极端参考极限来检验金属性，我们将在下文阐明，对 ESSH 链中的电子填充进行精确控制，如何使我们仅凭高次谐波产生谱就能清晰地区分所有不同的拓扑相。

我们假设 ESSH 链偏离半填充，其链中电子数比 ν 少于 $N/2$。此时，位置算符的期望值为

$$X(t,\nu)=\sum_{b=1}^{N/2-\nu}\sum_{j=1}^{N}\sum_{s=A,B}\Psi_b^{j,s*}(t)x_{j,s}\Psi_b^{j,s}(t). \qquad (14)$$

因此，改变 ESSH 链的填充，即改变 $\nu=\{0,1,2,3,4\}$ 的值，会影响图2中所示的相 P_0、P_1和 P_2 的高次谐波产生谱（公式（11））。

我们首先关注相位 P_0（见图2a），并将不同填充条件下的高次谐波产生谱与恰好处于半填充状态时的谱（黄色曲线）进行比较。可以清楚地观察到，当填充值不超过 $N/2-1$ 时，无论填充情况如何，高次谐波产生谱几乎完全相同。事实上，在偏离半填充的情况下，谱在带隙一半的位置不再出现凹陷。这是因为，即使仅略微偏离半填充，系统也不再是绝缘体，并且在带隙以下的体态中存在少量可用于跃迁的态（具体数量取决于填充值），从而在这个部分填充的价带内产生显著的带内动力学高次谐波产生谱。这些高次谐波产生谱与金属的谱相似，这一点可以通过与图5中的绿色曲线进行比较得到验证。半填充状态下的谱与偏离半填充状态下的谱之间存在数量级上的差异（以对数尺度计），这表明，高次谐波产生谱这一探测手段对系统的填充状态极为敏感，能够区分系统是否表现出金属性。

这种灵敏度可用于定量区分不同相中边缘模的数量 P_1（见图2b）和 P_2（见图2c）。通过改变系统的填充度，并采用来自 P_1（P_2）相的参数，我们看到在填满 $N/2-2$（$N/2-3$）个态之前，系统的高次谐波产生谱呈现出金属性；随后，当填满 $N/2-1$（$N/2-2$）个态时，随着系统的体态变为绝缘态，谱中会突然出现一个凹陷。因此，通过持续监测填充度，可以数出系统在半填充之前多少个态处发生了从金属行为到绝缘行为的转变。态数之差即为系统中边缘模对的数量。

对于每个 ν 值，通过对带隙一半以下功率谱值平方的倒数求和，可以定量确定填充率为该值时谐波功率谱中的凹陷；此时系统由体金属态转变为体绝缘行为，具体如下：

$$S_p(\nu)=\sum_{w=0}^{\Delta E/2}\frac{1}{P(\omega,\nu)^2}, \qquad (15)$$

其中，ΔE 是系统的体带隙能量（不包括边缘模）。求和范围为半个带隙；正如预期的那样，谐波谱中只有带隙以下的谐波模会受到这种突变的影响。

在该量 $S_p(\nu)$中，这一转变表现为一次突跃，差异至少达到十个数量级。在相P_0中，转变发生在完全填满的 ν =0与 $\nu=1$之间，其中 $S_p(0)\sim 10S_p(1)$表示系统中的边缘模对数为零。在相 P_1中，转变发生在 $\nu=1$ 与 $\nu=2$之间，其中$S_p(0)\sim S_p(1)\sim 10S_p(2)$，此时系统恰好具有一对边缘模。在相 P_2中，转变发生于$\nu=2$与 $\nu=3$之间，此时 $S_p(\nu)$发生变化：$S_p(0)\sim S_p(1)\sim S_p(2)\sim 10S_p(3)$，这正确表明系统中有两对边缘模。图7展示了这一行为的示意图。

IV. 结论

总而言之，在本研究中，我们在标准SSH模型已有的最近邻跃迁之外，加入了次近邻跃迁，同时禁止子晶格内部的跃迁项。由此构成的ESSH模型保留了SSH模型中的手征对称性。然而，这也扩展了SSH模型的拓扑相图，使其包含绕数更高的新拓扑相。该系统在开放边界条件下有三个绝缘相，链的每一端分别有零个、两个和四个边缘模。

我们沿 ESSH 链的长度方向施加一个具有强强度、频率低于体带隙的五周期超快激光脉冲，并计算系统对该照射产生的响应所发射的谐波谱。线性尺度下的谐波谱表明，系统在带隙以下的总体响应因其三个相而异；当系统具有更多边缘模时，振幅更高。然而，尽管平庸绝缘相与拓扑相的高次谐波产生谱之间的差异清晰可见，但在对数尺度下，两个拓扑相之间的差异却难以察觉。因此，

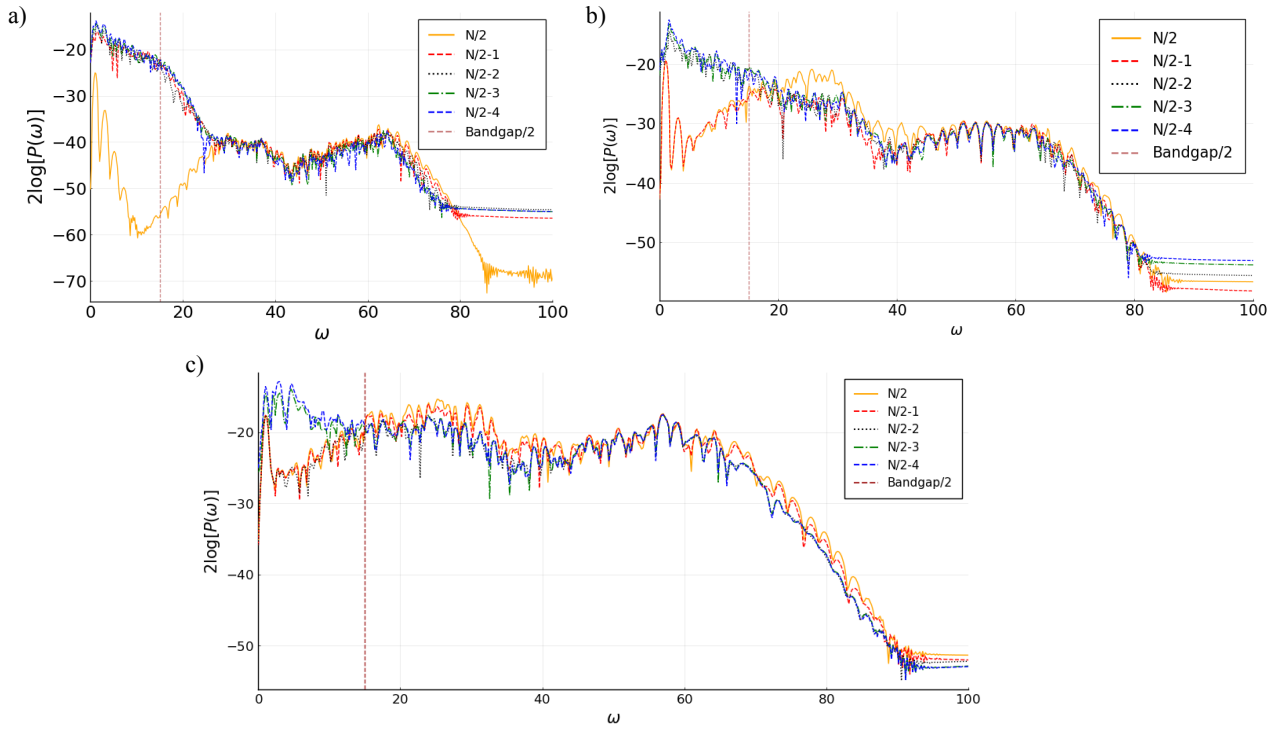

图6. 不同相下的高次谐波谱。a) 相 P_0（零个边缘模）。b) 相 P_1（两个边缘模）。c) 相 P_2（四个边缘模）。不同颜色对应系统的不同填充。竖线表示带隙值的一半（以入射激光频率为单位）。

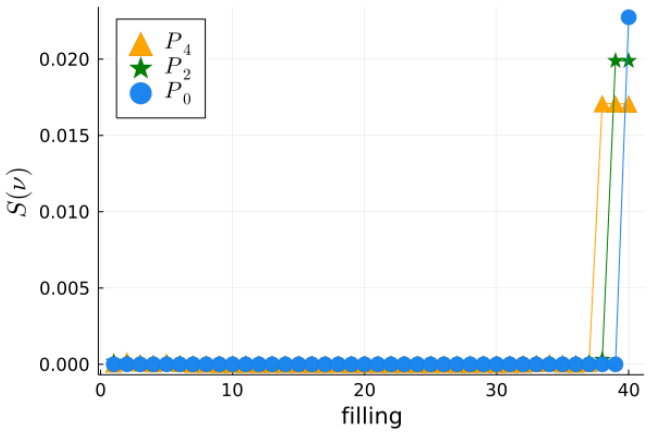

图7. 不同相 P_0、P_2 和 P_4 下，$S_p(\nu)$ 随填充的变化。当体态全部填满、边缘态开始填充时，会出现一个峰。峰中的一个态代表零个边缘模或相 P_0（$S_{P_0}(\nu) \sim 10^9 S_{P_4}(\nu)$），峰中的两个态代表两个边缘模或相 P_2（$S_{P_2}(\nu) \sim 10^7 S_{P_4}(\nu)$），峰中的三个态代表四个边缘模或相 P_4。

我们对高次谐波产生谱随填充的变化进行了细致分析，以表明随着填充连续变化，高次谐波产生谱对系统从体绝缘行为转变为体金属行为极为敏感。因此，追踪体绝缘行为开始出现的位置，作为通过填充情况，我们得以数出系统中的边缘态对数。我们还提出了一个能够精确检测这一转变的物理量。

我们的工作着重研究具有不同拓扑相的理想化模型。我们的目标是探究高次谐波产生是否适用于区分这些相，以及如何进行区分。当然，下一步将考虑真实材料中的对应相。这会带来额外的挑战：在本研究中，我们未纳入电子之间的散射、电子-声子相互作用及其他缺陷的影响。考虑这类影响的一种唯象方法是在分析中引入退相干时间[41]。这有助于通过去除对高次谐波产生谱有贡献的较长轨迹，得到更清晰的谱。我们将此留待未来研究。此外，我们假定多体电子-电子相互作用可以忽略，因此本研究未对此进行考察。

最后，作为展望，我们想指出，所提出的高次谐波产生光谱学可作为二维拓扑超导体中拓扑相检测的工具，这类超导体由整数值陈数分类。在拓扑超导体中，非平庸拓扑与电子霍尔热导的量子化相关[42–44]。然而，热导测量尚未达到观测量子化所需的精细程度，近期也仅提出了用于检测拓扑不变量的机器学习方法[45]。因此，高次谐波产生光谱学是识别拓扑超导体中陈数的一种有前景的工具。

超导体。

致谢

ICFO团队感谢以下机构的支持：ERC AdG NOQIA；科学与创新部国家研究机构（PGC2018-097027-BI00/10.13039/501100011033、CEX2019-000910-S/10.13039/501100011033、国家计划 FIDEUA PID2019-106901GB-I00、FPI、QUANTERA MAQS PCI2019-111828- 2、QUANTERA DYNAMITE PCI2022-132919、I+D+I 项目“合作挑战”QUSPIN RTC2019- 007196-7）；获得欧盟 NextGenerationEU（PRTR-C17.I1）资助的 MICIIN 以及加泰罗尼亚政府；Cellex 基金会；Mir-Puig 基金会；加泰罗尼亚政府（欧洲社会基金 FEDER 和 CERCA 计划、AGAUR 资助编号 2021 SGR 01452、Quantum- CAT U16-011424，由加泰罗尼亚 2014-2020 年 ERDF 运营计划共同资助）；巴塞罗那超级计算中心 MareNostrum（FI-2022-1-0042）；欧盟（PASQuanS2.1、101113690）；欧盟“地平线2020”未来新兴技术开放项目 OPTOlogic （资助编号 899794 ）；欧盟 “ 地平线欧洲计划 ”（资助协议编号 101080086 — NeQST）；波兰国家科学中心（Symfonia 资助项目编号 2016年/20/W/ST4/00314）；ICFO 内部“QuantumGaudi”项目；欧盟“地平线2020”研究与创新计划资助的玛丽·斯克沃多夫斯卡-居里资助协议，编号 101029393（STREDCH）和 847648（“La Caixa”青年领军人才奖学金，编号 ID10001 0434:LCF/BQ/PI19/11690013、LCF/BQ/PI20/11760031、LCF/BQ/PR20/11770012、LCF/BQ/PR21/11840013）。MLB 感谢 MCIN/AEI/10.13039/5011000 11033 提供的财政支持。M.M.M. 和 M.D. 感谢波兰国家科学中心提供的资助（项目编号 DEC-2018/29/B/ST3/01892）。M.P. 感谢波兰国家学术交流局 Bekker 计划提供的支持，项目编号：PPN/BEK/2020/1/00317。然而，本文所表达的观点和意见仅代表作者本人，并不一定反映欧盟、欧盟委员会、欧洲气候、基础设施与环境执行局（CINEA）或任何其他资助机构的观点。欧盟及任何资助机构均不对这些观点和意见承担责任。

[1] M. Z. Hasan 和 C. L. Kane, 《专题综述：拓扑绝缘体》, 《现代物理评论》**82**，3045–3067（2010年）。[2] J´anos K Asb´oth、L´aszl´o Oroszl´any 和 Andr´as P´alyi, 《拓扑绝缘体简明教程》, 《物理学讲义》**919**，166 2016( )。[3] Xiao-Liang Qi 和 Shou-Cheng Zhang, 《拓扑绝缘体与超导体》, 《现代物理评论》**83**，1057–1110（2011年）。[4] Oscar Viyuela、A Rivas、Simone Gasparinetti、Andreas Wallraff、Stefan Filipp 和 Miguel A Mart´ín-Delgado, 《利用超导量子比特观测拓扑乌尔曼相》, 《npj量子信息》**4**，10（2018年）。[5] Marcos Atala、Monika Aidelsburger、Julio T Barreiro、Dmitry Abanin、Takuya Kitagawa、Eugene Demler 和 Immanuel Bloch, 《拓扑布洛赫能带中Zak相位的直接测量》, 《自然·物理》**9**，795–800（2013年）。[6] Mikael C Rechtsman、Julia M Zeuner、Yonatan Plotnik、Yaakov Lumer、Daniel Podolsky、Felix Dreisow、Stefan Nolte、Mordechai Segev 和 Alexander Szameit, 《光子弗洛凯拓扑绝缘体》, Nature**496**，196–200（2013年）。[7] Simon St¨utzer、Yonatan Plotnik、Yaakov Lumer、Paraj Titum、Ne-tanel H Lindner、Mordechai Segev、Mikael C Rechtsman 和 Alexander Szameit, 《光子拓扑安德森绝缘体》, Nature**560**，461–465（2018年）。[8] Jia Ningyuan、Clai Owens、Ariel Sommer、David Schuster 和 Jonathan Simon, 《拓扑电路中的时间与位置分辨动力学》, 《物理评论X》**5**，021031（2015年）。[9] A.Yu. Kitaev, 《利用任意子实现容错量子计算》, 《物理学年鉴》**303**，2–30（2003年）。[10]Stephan Plugge、Asbjørn Rasmussen、Reinhold Egger 和 Karsten Flensberg, 《马约拉纳盒量子比特》, 《新物理学杂志》**19**，012001（2017年）。[11] Linhu Li、Chao Yang 和 Shu Chen, 《一维拓扑系统相变点的绕数》, 《欧洲物理快报》**112**，10004（2015年）。[12] Linhu Li、Zhihao Xu 和 Shu Chen, 《广义 su-schrieffer-heeger 模型的拓扑相》, 《物理评论B》**89**，085111（2014年）。[13] Mirko Cinchetti, 《拓扑传递信息》, 《自然·纳米技术》**9**，965–966（2014年）。[14] Naoto Nagaosa 和 Yoshinori Tokura, 《磁性斯格明子的拓扑性质与动力学》, 《自然·纳米技术》**8**，899 911 2013–（）。[15] H. W. Streitwolf, 《聚乙炔的物理性质》, 《固体物理学报（b辑）》**127**，11–54（1985年）, htt ps://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/pssb.2221270102。[16] S. Block 和 H.W. Streitwolf, 《反式聚乙炔中的计算光致动力学》, 《合成金属》**76**，31–33（1996年）。[17] Beatriz P´erez-Gonz´alez、Miguel Bello、 ´Alvaro G´omez-Le´on 和 Gloria Platero, 《拓扑系统中长程跃迁与无序的相互作用》, 《物理评论B》**99**，035146（2019年）。[18] Ferenc Krausz 和 Misha Ivanov, 《阿秒物理》, 《现代物理评论》**81**，163–234（2009年）。[19] Francesca Calegari、Giuseppe Sansone、Salvatore Stagira、Caterina Vozzi 和 Mauro Nisoli, 《阿秒科学的进展》, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**49**，062001 2016（）。[20] Hamed Koochaki Kelardeh、Vadym Apalkov 和 Mark I. Stockman, 《强圆偏振场中的石墨烯超晶格：手性、贝里相与阿秒动力学》, 《物理评论B》**96**，075409（2017年）。[21] Dieter Bauer 和 Kenneth K. Hansen, 《有无拓扑边缘态的固体中的高次谐波产生》, 《物理评论快报》**120**，177401（2018年）。[22] Christoph J¨urß 和 Dieter Bauer, 《Su-Schrieffer-Heeger 链中的高次谐波产生》, 《物理评论B》**99**，195428（2019年）。[23] REF Silva、 ´A Jim´enez-Gal´an、B Amorim、O Smirnova 和 M Ivanov, 《亚激光周期时间尺度上的拓扑强场物理》, 《自然·光子学》**13**，849–854（2019年）。

[24] Alexis Chac´on、Dasol Kim、Wei Zhu、Shane P. Kelly、Alexandre Dauphin、Emilio Pisanty、Andrew S. Maxwell、Antonio Pic´on、Marcelo F. Ciappina、Dong Eon Kim、Christopher Ticknor、Avadh Saxena 和 Maciej Lewenstein，《高阶谐波产生中的圆二色性：揭示陈绝缘体中的拓扑相与相变》，《物理评论B》**102**，134115（2020年）。[25] Helena Dr¨ueke 和 Dieter Bauer，《激光驱动线性链中拓扑敏感谐波产生的稳健性》，Phys. Rev. A **99**，053402（2019年）。[26] Tatsuhiko N. Ikeda、Koki Chinzei 和 Hirokazu Tsunetsugu，《固体中高阶谐波产生的Floquet理论表述与分析》，Phys. Rev. A**98**，063426（2018年）。[27] Adhip Pattanayak、Sumiran Pujari 和 Gopal Dixit，《马约拉纳费米子在Kitaev链高次谐波产生中的作用》，Scientific Reports**12**，6722（2022年）。[28] Niccol`o Baldelli、Utso Bhattacharya、Daniel Gonz´alez-Cuadra、Maciej Lewenstein 和 Tobias Graß，《通过强场动力学探测马约拉纳零模》，ACS Omega**7**，47424–47430（2022年）。[29] Tran Trung Luu 和 Hans Jakob W¨orner，《利用高次谐波光谱学测量固体的贝里曲率》，Nature communications**9**，916（2018年）。[30] J Reimann、Stefan Schlauderer、CP Schmid、Fabian Langer、Sebastian Baierl、KA Kokh、OE Tereshchenko、A Kimura、Christoph Lange、Jens G¨udde、等，《亚周期观测拓扑表面能带中的光波驱动狄拉克电流》，Nature **562**，396 400 2018–（）。[31] W. P. Su、J. R. Schrieffer 和 A. J. Heeger，《聚乙炔中的孤子》，《物理评论快报》**42**，1698–1701（1979年）。[32] Eric J Meier、Fangzhao Alex An 和 Bryce Gadway，《观测到 Su–Schrieffer–Heeger 模型中的拓扑孤子态》，Nature communications**7**，1–6（2016年）。[33] Vincent Lienhard、Sylvain de L´es´eleuc、Pascal Scholl、Daniel Barredo、Thierry Lahaye 和 Antoine Browaeys，《利用里德伯原子实验实现玻色子版本的Su-Schrieffer-Heeger（SSH）模型》，载于量子信息与测量（*QIM*）*V*：量子技术（OSA，2019年）。[34] Luke Thatcher、Parker Fairfield、L´azaro Merlo-Ram´ırez 和 Juan M Merlo，《机械1D-SSH模型中拓扑相变的实验观测》，Physica Scripta **197**，035702 2022（）。[35] S. K. Kanungo、J. D. Whalen、Y. Lu、M. Yuan、S. Dasgupta、F. B. Dunning、K. R. A. Hazzard 和 T. C. Killian，“利用里德堡原子合成维度实现拓扑边缘态”，Nature Communications **13** (2022), 10.1038/s41467-022-28550-y。[36] Tatiana G. Rappoport、Yuliy V. Bludov、Frank H. L. Koppens 和 Nuno M. R. Peres，“在等离激元实现的 Su–Schrieffer–Heeger 模型中实现拓扑石墨烯等离激元”，ACS Photonics **8**，1817–1823（2021）。[37] A. D. Bandrauk、S. Chelkowski、D. J. Diestler、J. Manz 和 K.-J. Yuan，“氢原子高次谐波谱的量子模拟”，Phys. Rev. A **79**，023403（2009）。[38] Jan Conrad Baggesen 和 Lars Bojer Madsen，“单原子或分子高次谐波产生中的偶极形式、速度形式和加速度形式”，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**44**，115601（2011）。[39] Bala Sundaram 和 Peter W. Milonni，“高次谐波产生：简化模型以及单原子理论与实验的相关性”，Phys. Rev. A**41**，6571–6573（1990）。[40] Prajoy Podder、Tanvir Zaman Khan、Mamdudul Haque Khan 和 M Muktadir Rahman，“汉明窗、汉宁窗和布莱克曼窗的性能比较分析”，International Journal of Computer Applications**96**，1–7（2014）。[41] Jordi Alcal`a、Utso Bhattacharya、Jens Biegert、Marcelo Ciap-pina、Ugaitz Elu、Tobias Graß、Piotr T. Grochowski、Maciej Lewenstein、Anna Palau、Themistoklis P. H. Sidiropoulos、Tobias Steinle 和 Igor Tyulnev，“高温超导体中量子相变的高次谐波光谱学”，美国国家科学院院刊**119**，e2207766119（2022），https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.2207766119。[42] M Zahid Hasan、Su-Yang Xu 和 Guang Bian，“拓扑绝缘体、拓扑超导体和外尔费米子半金属：发现、展望与前景”，Physica Scripta **2015**，014001 2015( )。[43] Masatoshi Sato 和 Yoichi Ando，“拓扑超导体：综述”，Reports on Progress in Physics**80**，076501（2017）。[44] M M Sharma、Prince Sharma、N K Karn 和 V P S Awana，“拓扑超导材料及界面的全面综述”，Superconductor Science and Technology**35**，083003 2022( )。[45]Paul Baireuther、Marcin Płodzie´ń、Teemu Ojanen、Jakub Tworzydło 和 Timo Hyart，“通过局域测量识别超导体的陈数”，（2021），arXiv:2112.06777 [cond-mat.mes-hall]。