周期性起伏空间中量子输运的实空间几何、拓扑与度量张量特征

Benjamin Schwager、Theresa Appel 和 Jamal Berakdar物理研究所，哈雷-维滕贝格马丁·路德大学，德国哈雷 *06099*（日期：2025年12月19日）

arXiv:2512.16846v1 [cond-mat.mes-hall] 18 Dec 2025

摘要

受限于具有非平凡度量的二维非紧黎曼流形上的量子粒子，其运动可用平坦空间中的薛定谔型方程描述，但代价是引入局部质量、度量以及由几何诱导且无经典对应物的有效势。对于沿一个维度周期性调制的度量张量，本文展示了能带的形成，并推导了与输运相关的物理量。利用 S 矩阵方法，计算了沿流形的量子电导，并将其与平坦空间中的传统量子输运方法进行了比较。拓扑性质（例如流形是否为单连通、紧致或非紧致）会体现在阿哈罗诺夫–玻姆相位等全局非局域性质中。研究结果生动地展示了低维性、粒子的量子本性、几何与拓扑相互作用所产生的新兴现象。

引言：物理系统内在的几何与拓扑如何体现在其行为中，这一问题已在不同背景下被反复探讨 [1–10]。例如，对于周期系统，单粒子谱通常在波矢空间（或 k 空间）中描述，并由能带表征。以参数 k 空间 [11, 12]中的视角来看，第 ν个能带 $\nu \in \mathbb{N}$的几何由所谓的量子几何张量 $T^{\nu}_{\mathbf{k}}$ [13–18]刻画。利用投影到第 ν个能量流形上的投影算符，$P^{\nu}_{\mathbf{k}} = |u^{\nu}_{\mathbf{k}}\rangle\langle u^{\nu}_{\mathbf{k}}|$ 其中 $|u^{\nu}_{\mathbf{k}}\rangle$ 是表示由参数对 $(\nu;\mathbf{k})$ 标记的空间周期振幅 $u^{\nu}_{\mathbf{k}}$ 的布洛赫态，量子几何张量可写为 $(T^{\nu}\mathbf{k})_{ij} = \langle \partial_{k^i} u^{\nu}_{\mathbf{k}} \big| \hat{} I - \hat{} P^{\nu}\mathbf{k} \big| \partial_{k^j} u^{\nu}_{\mathbf{k}}\rangle = (g^{\nu}_{\mathbf{k}})_{ij} + \mathrm{i}\,2\,(\Omega^{\nu}_{\mathbf{k}})_{ij}\cdot$。实部 $\mathrm{Re}(T^{\nu}_{\mathbf{k}})_{ij} = (g^{\nu}_{\mathbf{k}})_{ij}$（对称）具有与第 ν个能量流形M_{ν}相关的度量含义。虚部 $\mathrm{Im}(T^{\nu}\mathbf{k})_{ij} = \frac{1}{2}(\Omega^{\nu}_{\mathbf{k}})_{ij}$（反对称）与贝里曲率成正比。从技术上说，这一度量定义了距离的概念 $(\mathrm{d}s^{\nu})^2$：对于流形 $M^{\nu}\mathbf{k}$ 中的两个布洛赫态，可写为 $(\mathrm{d}s^{\nu})^2 = 1 - \left|\langle u^{\nu}_{\mathbf{k}} | u^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathrm{d}\mathbf{k}}\rangle\right|^2 = (g^{\nu}_{\mathbf{k}})_{ij}\mathrm{d}k^i\,\mathrm{d}k^j.$。对空间均匀、弱外加矢势作线性响应的相干输运可用贝里曲率表述；贝里曲率可视为由贝里矢势（联络）$\mathrm{A}^{\nu}\,\mathbf{k} = \mathrm{i}\,\langle u^{\nu}_{\mathbf{k}} | \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} | u^{\nu}_{\mathbf{k}}\rangle$导出的张量规范场，此时贝里曲率写作 $\Omega^{\nu}\,\mathbf{k} = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} \times \mathrm{A}^{\nu}\,\mathbf{k}$。

贝里曲率这一概念已被证明极具启发性，并使人们能够统一认识几何在有效单粒子物理中的作用。在这个例子中，系统存在于真实的（平坦）欧几里得空间中，而量子几何张量及其相关现象因此由晶体的对称类决定。

贝里曲率这一概念已被证明极具启发性，并使人们能够统一认识几何在有效单粒子物理中的作用。在这个例子中，系统存在于真实的（平坦）欧几里得空间中，而量子几何张量及其相关现象因此仅由晶体的对称类决定。$\mathbf{k}$ 空间黎曼流形 $(M^{\nu}_{\mathbf{k}}, g^{\nu}_{\mathbf{k}})$ 这一概念依赖于特定 $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$处存在定义良好（寿命无限长）的模式，而现实中，电子关联、无序或其他$\mathbf{k}$态混合效应会破坏这一条件。此外，在热相变或量子临界相变附近，量子度量通常会发散，因此必须处理磁化率发散和奇异流形等问题。对于偏离上述情形的小幅变化，例如无序导致的贝里曲率和量子度量张量变化，可以通过微扰理论[15, 19–23], 加以处理，其思路基本上是沿用超出久保线性响应函数范围来处理微扰的方法。

在更一般的情境下，量子系统的演化可通过量子距离 $L(t,\ t_0) = \int_{t_0}^{t} 1\,\mathrm{d}s(t')$ 从几何角度加以表征，其中 $\mathrm{d}s(t') = 2\sqrt{1 - |\langle\Psi(t')|\Psi(t'+\mathrm{d}t')\rangle|^2}$是由 Fubini-Study度量 [24]测得的无穷小距离。因此，演化可视为希尔伯特空间 [5, 10, 25]中的一条曲线。态 $|\Psi\rangle$ 可以由关联作用或场驱动。Bargmann角 [24] $\beta(t)$，其 $\cos(\beta(t)) = |\langle\Psi(t)|\Psi(t_0)\rangle|$，用于衡量初始态 at t_0 与目标态 t 之间的偏差。因此，它与保真度 [26–29] 相关，可用于寻找实现动力学局域化乃至冻结的条件；所谓冻结，是指即使存在外部驱动[30, 31]，态仍保持准稳态。这些思想和方法也可应用于下文讨论的情形，只要我们确定希尔伯特空间的基元即可。

几何和拓扑对量子运动产生烙印式影响的另一种情形是：承载态的实空间流形具有非平凡的（随空间变化的）度量。这种情况通常出现在针对空间约束建立量子力学理论时。此时，粒子在嵌入更高维空间（超空间）的黎曼流形中，遵循薛定谔方程运动。除了处于受限/应变几何中的电子系统外，这类情形也可能出现在磁学、机械和光学系统中。将受约束运动的经典拉格朗日形式直接推广到量子领域，看似简单，实际上却极其复杂，目前不同的处理方法仍存在争议；其中一种方法是约束势方法（CPA） [32–40] ，本文将对此进行讨论。在该方法中，粒子根据海森堡不确定性原理，位于流形上、超空间—流形交

界面周围的狭窄区域内。事实证明，其量子动力学会通过所谓的几何诱导效应对底层空间的几何产生敏感响应；这些效应表现为对量子算符的修正 [41], ，其中最突出的是一个类标量势项。

在 CPA 的背景下，关于周期性起伏空间的研究可根据其拓扑分为紧致 [42–46] 或非紧致 [47–54]两类。在紧致情形下，周期边界条件被视为求解有效薛定谔方程的标准选择；由于波函数的唯一性，这意味着谱是离散的，且相位是全局定义的。然而，在非紧致情形下，通常还存在连续谱部分，常通过量子散射和输运进行探测。在这些非紧致情形下，利用布洛赫定理及晶体物理中的相关概念来描述我们所称的起伏晶体中的量子行为，似乎顺理成章。然而，这一路径鲜少得到探索，且仅限于特殊流形 [55, 56] 或光子学领域 [57–59], ，通常被称为拓扑晶体（尽管这些效应源于几何而非拓扑）。关于这一背景下拓扑效应的问题也曾被讨论过 [60, 61]。本文严谨地构建了起伏晶体中粒子的量子力学，并针对一个准一维例子给出明确结果和模拟。即使在这一简单情形下，我们也发现了非平凡的位置依赖扩散（或质量）；它由几何（源于空间度量张量）诱发，对能带结构有贡献，而在仅由周期性标量势定义的常规晶体中并不存在。我们通过朗道尔-比蒂克方法计算透射率，以考察线性输运。

模型。- 我们从理论上描述受限于二维黎曼流形（$\mathcal{M}, g$）上的粒子的量子态和输运系数，该流形等距嵌入三维环境欧氏空间（$\mathbb{R}^3, \delta$）中。这意味着，$\dim(\mathcal{M}) = 2$。为清晰起见并简化讨论，曲率仅沿两个正交方向中的一个方向存在。度量张量场 g 被正则地定义为继承的欧氏内积，并假设唯一的列维-奇维塔联络作用于切丛$T\mathcal{M}$上。我们研究由蒙日参数化的轨迹给出的空间

$$\mathcal{X}_{\mathcal{M}} : \mathbb{R}^2 \supset \mathcal{Q}_{\mathrm{t}} \to \mathcal{M} \subset \mathbb{R}^3 \ , \ \mathbf{q} \mapsto \mathcal{X}_{\mathcal{M}}(\mathbf{q}) \coloneqq \begin{pmatrix} q^1 \\ q^2 \\ f(q^1) \end{pmatrix} = \mathbf{x} \ , \tag{1}$$

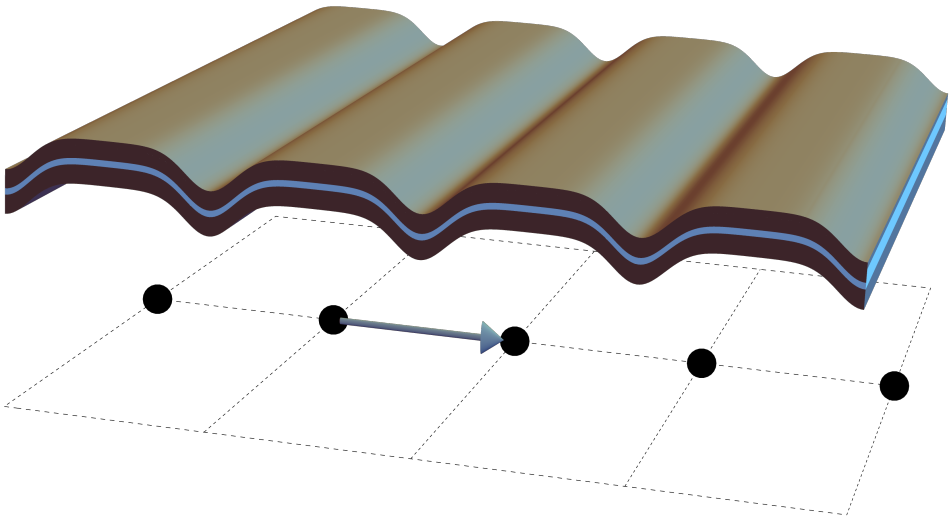

图 1：二维黎曼流形（$\mathcal{M}$, g）（蓝色标示）嵌入高维空间（棕色区域）中，并被起伏调制成一个周期为 Λ^1 的一维晶体。粒子沿（$\mathcal{M}$, g）自由运动。

其中 $f \in C^3(\mathbb{R})$（示意图见图 1）。我们关注度量张量呈周期性的情形；预期这会形成能带结构 $E_\nu(\mathbf{k})$，且其形成完全源于量子效应和度量效应（注意，严格受限于流形上的经典粒子沿测地线运动，不会因曲率而感受到束缚势）。对于定义良好的 $\mathbf{k}$，我们便可按照上文概述的流程研究量子输运和反常输运。需要指出的是，此处的 $\mathbf{k}$ 是表示一个良好（非正常）量子数的参数，而非动力学变量。这一点很重要，因为在我们的情形中，动能在平面波基下并非对角形式。还需强调，我们将依据朗道尔-比特克形式研究量子弹道输运。要处理扩散输运（玻尔兹曼型输运），则需要了解一般流形上运动方程的经典-量子对应；这一问题仍有待澄清。

另一个观察结果是，流形的整体拓扑（而非波纹的拓扑），例如将 $(\mathcal{M}, g)$ 卷绕成一个半径较大的圆柱并带有局部波纹，会体现在整体响应函数中，例如沿圆柱轴线穿入磁通量时，绕圆柱流动的阿哈罗诺夫-玻姆电流。然而，电流的大小取决于 $(\mathcal{M}, g)$ 的局部结构，因为有效矢势由 $g_{\mu\nu}$ 决定，这是规范不变性 [62] 所致。因此，在数值模拟中，我们接下来将专门讨论

非紧致流形。

空间周期性体现在：对于所有 $q^1 \in \mathbb{R}$，相对于某个$\Lambda^1 \in \mathbb{R}^+$，$f(q^1) = f(q^1 + \Lambda^1)$。由参数化可推导出典范切向量场：

$$\mathrm{D}\mathcal{X}_{\mathcal{M}}(\mathbf{q}) = \Big(\mathbf{t}_1(\mathbf{q})\ \ \mathbf{t}_2(\mathbf{q})\Big) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ f_{,1}(q^1) & 0 \end{pmatrix} , \tag{2}$$

它们完整地刻画了度量

$$(g_{\mu\nu})(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 1 + f_1(q^1)^2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} . \tag{3}$$

构造正交法向量场即可补全局部标架，使得一个足够小的邻域（$\mathcal{N}_{\mathcal{M}}$，$G$）可参数化为

$$\mathcal{X} : \mathbb{R}^3 \supset \mathcal{Q}_{\mathrm{t}} \times \mathcal{Q}_{\mathrm{n}} \to \mathcal{N}_{\mathcal{M}} \subset \mathbb{R}^3 \ , \ (\mathbf{q}, y^3) \mapsto \mathcal{X}(\mathbf{q}, y^3) \coloneqq \mathcal{X}_{\mathcal{M}}(\mathbf{q}) + y^3\, \mathbf{n}_3(\mathbf{q}) \ . \tag{4}$$

执行称为约束势方法（CPA）的降维过程 [33, 34, 39, 40, 62, 63] ，可得粒子在（$\mathcal{M}$, g）上的运动方程。简言之，约束由约束势 $V_{\mathcal{M}}$ 建模，该势具有以下性质：（i） $V_{\mathcal{M}}$ 仅取决于法向位移坐标，且沿 $\mathcal{M}$均匀；（ii） $V_{\mathcal{M}}$ 在 $\mathcal{M}$上具有深势阱；（iii） $V_{\mathcal{M}}$ 保持环境空间等距群的一个子群不变，该子群定义了所得有效理论的规范群。这意味着，随着 $V_{\mathcal{M}}$ 减弱，我们可以平滑地从（$\mathcal{M}$，g）上的运动过渡到超空间中的运动。此外，该过程确保海森堡不确定性原理仍然适用。事实上，由 $V_{\mathcal{M}}$ 决定的零点能／运动，是具有约束的经典力学系统与流形上的量子系统之间存在差异的关键。通常，一个不错的选择是假设约束势为谐势。

代表 $\mathcal{X}$ 将薛定谔方程拉回参数空间，

$$\mathrm{i}\hbar\, \partial_t (\mathcal{X}^* \psi)(q, \mathbf{y}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\, \nabla^M \nabla_M + V_{\mathcal{M}}(\mathbf{y})\, \hat{I} \right] (\mathcal{X}^* \psi)(q, \mathbf{y}, t) \ , \tag{5}$$

并应用 CPA [34, 62, 63] 得到粒子在流形（$\mathcal{M}$，g）上运动的有效薛定谔方程，

$$\mathrm{i}\hbar\, \partial_t \chi_{\mathrm{t}}(\mathbf{q}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla^\mu \nabla_\mu + \left(M^2(\mathbf{q}) - K(\mathbf{q}) \right) \hat{I} \right] \chi_{\mathrm{t}}(\mathbf{q}, t) \ . \tag{6}$$

这里，拉普拉斯-贝尔特拉米算子由 Voss-Weyl公式给出

$$\nabla^{\mu}\nabla_{\mu} = \frac{1}{\sqrt{|g|}}\,\partial_{\mu}\left(\sqrt{|g|}\,g^{\mu\nu}\,\partial_{\nu}\right)\ . \tag{7}$$

出现了一个由几何诱导的贡献，通常称为几何势[41],

$$V_{\mathrm{geo}} \coloneqq -\frac{\hbar^2}{2m}\left(M^2 - K\right)\ . \tag{8}$$

V_{geo} 取决于曲面的平均曲率（$M = \frac{1}{2}(\kappa_1 + \kappa_2)$）和高斯曲率（$K = \kappa_1\kappa_2$） $\mathcal{M}$ （用主曲率 κ_1 和 κ_2表示）。当只有一个方向上存在非平凡曲率时，例如 $\kappa_2 = 0$，由式 (1) 可得

$$V_{\mathrm{geo}}(q^1) = -\frac{\hbar^2}{8m}\,\kappa_1^2(q^1) = -\frac{\hbar^2}{8m}\,\frac{f_{,11}^2(q^1)}{[1 + f_{,1}^2(q^1)]^3}\ . \tag{9}$$

据此，可以利用分离变量试探形式 $\chi_{\mathrm{t}}(q\ t) = \chi^{(1)}{}_{\mathrm{t}}(q^1)\ \chi^{(2)}{}_{\mathrm{t}}(q^2)\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}t}$ （其中 $E = E^{(1)} + E^{(2)}$ ）简化表达式 (6)，得到

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{1 + f_{,1}^2}\partial_1^2 - \frac{f_{,1}\,f_{,11}}{(1 + f_{,1}^2)^2}\partial_1 + \frac{1}{4}\,\frac{f_{,11}^2}{(q + f_{,1}^2)^3}\,\hat{I}\right]\,\chi_{\mathrm{t}}^{(1)}(q^1) &= E^{(1)}\,\chi_{\mathrm{t}}^{(1)}(q^1)\ , \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_2^2\,\chi_{\mathrm{t}}^{(2)}(q^2) &= E^{(2)}\,\chi_{\mathrm{t}}^{(2)}(q^2)\ . \end{aligned} \tag{10}$$

尽管粒子可以在流形上自由运动，且不存在外部标量势，但所得运动方程与平直空间情形下的自由粒子或受周期性标量势作用的粒子（传统的布洛赫粒子）所满足的方程大不相同。为了进一步凸显这种差异与类比，可以引入 [64] 几何依赖的有效质量和标量势函数，定义为

$$m_{\mathrm{eff}}(q) \coloneqq \left(1 + f_{,1}^2(q^1)\right)\ m = \|\mathbf{t}_1(q^1)\|_2^2\ m\ , \tag{11}$$

and

$$V_{\mathrm{eff}}(q^1) \coloneqq \left(2\,\left(1 + f_{,1}^2(q^1)\right)\,\frac{f_{,1}(q^1)\,f_{,111}(q^1)}{f_{,11}^2(q^1)} + 3\,\left(1 - f_{,1}^2(q^1)\right)\right)\,V_{\mathrm{geo}}(q^1)\ . \tag{12}$$

式（10）中第一个方程的解可写为

$$\chi_{\mathrm{t}}^{(1)}(q^1) \doteq \sqrt[4]{1 + f_{,1}^2(q^1)}\,\varphi(q^1) = \sqrt{\|\mathbf{t}_1(q^1)\|_2}\,\varphi(q^1)\ , \tag{13}$$

其中， φ 由以下方程的解给出

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\,m_{\mathrm{eff}}(q^1)}\partial_1^2 + V_{\mathrm{eff}}(q^1)\,\hat{I}\right]\,\varphi(q^1) = E^{(1)}\,\varphi(q^1)\ . \tag{14}$$

方程（14）在形式上是通常的一维定态薛定谔方程。通过在流形 [62] 上进行适当映射，可以纳入外部势场。例如，它作为标量势加入 V_{geo}，从而对 V_{eff} 作出贡献，但方程的结构保持不变。

由于 f 的周期性，所有几何依赖关系以及导出量（3）、（7）—（8）和（11）—（12）也都是周期性的。从数学上看，求解该微分方程时可按通常方式应用布洛赫定理，提出如下形式的解

$$\varphi_{k^1}(q^1) \doteq \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 q^1}\,u_{k_1}(q^1)\ . \tag{15}$$

随后可以在 k^1 参数空间内构造倒易晶格。由（14）可得依赖于 k^1 的能量本征值，并可将其排列成能带，对应于第 ν 个布里渊区（$\nu \in \mathbb{N}$ 为能带指标），

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\,m_{\mathrm{eff}}(q^1)}\left(\partial_1^2 + \mathrm{i}\,k^1\partial_1 - (k^1)^2\,\hat{I}\right) + V_{\mathrm{eff}}(q^1)\,\hat{I}\right]\,u_{\nu,k^1}(q^1) = E_\nu^{(1)}(k^1)\,u_{\nu,k^1}(q^1)\ . \tag{16}$$

能带结构。- 方程（16）的解决定了周期性起伏流形（$\mathcal{M},\ g$）上形成的允许定态量子态。能量色散关系$E = E_\nu(k^1)$给出一维倒易空间中的能带结构，其中布里渊区的大小由曲率周期性 $2\pi/\Lambda^1$ 决定。请注意，该谱完全源于空间的曲率和几何结构。由于粒子被限制在弯曲流形上运动，拉普拉斯项中引入了一个随空间变化的系数。后者可理解为二阶张量势，即位置依赖的有效质量表现得如同非均匀的一维扩散张量。

由于量子态与参数$\mathbf{k}$空间中的能带结构相关联，因此可以在某个能量带宽内构造波包，其群速度（用于穿越流形）为

$$\mathbf{v}_{\mathrm{g}_\nu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\,\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} E_\nu(\mathbf{k})\ . \tag{17}$$

我们还可以引入谱质量张量，定义为

$$M_\nu^{-1}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar^2}\,\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} \otimes \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} E_\nu(\mathbf{k})\ , \tag{18}$$

在我们的情形中，其中 $E(\mathbf{k}) = E_\nu^{(1)}(k^1) + (\hbar k^2)^2/(2m)$，意味着

$$(M_\nu^{ij})(k^1) = \begin{pmatrix} \hbar\left[\partial_{k^1} v_{\mathrm{g}\nu 1}\right]^{-1} & 0 \\ 0 & m \end{pmatrix}\ . \tag{19}$$

考虑具有自旋 $s = 1/2$ 的粒子的克拉默斯简并后，态密度为

$$D(E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_{\nu\in\mathbb{N}} \int\limits_{1\mathrm{BZ}} \delta(E - E_\nu(\mathbf{k}))\ \mathrm{d}^2\mathbf{k}\ , \tag{20}$$

这可以改写为对等能面的积分，

$$D(E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_{\nu\in\mathbb{N}} \int\limits_{E_\nu(\mathbf{k})=E} \frac{1}{\|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})\|_2}\ \mathrm{d}S_E(\mathbf{k})\ . \tag{21}$$

在我 们下面的计算中，不过只考虑一维情形 .

输运。通过渐近平坦的周期性波纹空间的稳态电导可用定态 S 矩阵方法描述，该方法将入射信号转换为出射信号。在一维情况下，我们假设波纹位于 $q^1_{\mathrm{L}} = 0$ 和 $q^1_{\mathrm{R}} = N\,\Lambda^1$ 之间，构成散射区。首先考虑单个波纹（$N = 1$），渐近区域中的波函数为 $\chi^{(1)}{}_{\mathrm{t}}(q^1) = A_{\mathrm{L}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 q^1} + B_{\mathrm{L}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 q^1}$（当 $q^1 \le 0$ 时），以及 $\chi^{(1)}{}_{\mathrm{t}}(q^1) = A_{\mathrm{R}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 q^1} + B_{\mathrm{R}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 q^1}$（当 $q^1 \ge \Lambda^1$ 时）。然后，我们可以将这些基态映射到一个矩阵模型，并得到

$$\begin{pmatrix} B_{\mathrm{L}} \\ B_{\mathrm{R}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{\mathrm{L}} \\ A_{\mathrm{R}} \end{pmatrix}\ . \tag{22}$$

由于式（10）中的所有系数均为实数，S矩阵具有时间反演对称性，因此根据其幺正性，它是对称的，$S^T = S$。于是，从两侧入射的信号具有相同的反射率和透射率，分别为

$$R = |S_{11}|^2 = |S_{22}|^2\ , \quad T = |S_{21}|^1 = |S_{12}|^2\ , \tag{23}$$

满足 $R + T = 1$。此外，传递矩阵将左侧映射到右侧，其定义如下：

$$\begin{pmatrix} B_{\mathrm{R}} \\ A_{\mathrm{R}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{\mathrm{L}} \\ B_{\mathrm{L}} \end{pmatrix}\ . \tag{24}$$

S矩阵和M矩阵可以相互转换 [65]。此处，我们利用传递矩阵方法计算多个相邻波纹的总散射，因为总M矩阵由（左）乘法确定：

$$M^{\mathrm{tot}} = \prod_{i=1}^{N} M^{(i)} \ . \tag{25}$$

数值结果：- 在数值实现中，假设形变是凸起函数 $f \in C_c^\infty(\Omega_{1\mathrm{WSZ}})$ 的周期性重复，其中第一个维格纳-塞茨原胞为 $\Omega_{1\mathrm{WSZ}} = (0,\ \Lambda^1)$，

$$\tilde{f}(q^1) \coloneqq f_0 \begin{cases} \exp\left\{ w \left[1 + \left[\frac{q^1 - q_0^1}{\Lambda^1 - q_0^1} \right)^2 - 1 \right]^{-1} \right\} & : |q^1 - q_0^1| < \Lambda^1 - q_0^1, \\ 0 & : |q^1 - q_0^1| \geq \Lambda^1 - q_0^1. \end{cases} \tag{26}$$

参数 f_0，$w \in \mathbb{R}^+$ 分别描述凸起的峰值振幅和宽度，而 $q_0^1 \in \Omega_{1\mathrm{WSZ}}$ 是其中心。作为实验实现的相关设置，我们提到夹持石墨烯膜的纳米尺度几何形状控制实验[66]，以及利用 SiO_2 纳米柱从下方对局部压陷的 WSe_2 [67] 实验，或利用原子力显微镜探针对 WS_2 应变单层进行局部纳米尺度压陷的实验 [68]。关于应变二维材料 [69, 70]的其他方法也可能有所帮助。就能量尺度而言，研究发现纳米尺度曲率诱导态的结合能处于毫电子伏特量级 [62],，其测量基准为费米能级。因此，本文讨论的几何诱导束缚态具有相当大的空间延展性，可能与表面反应、光学性质和输运有关。通过对半导体二维电子气进行工程化栅控，也可以实现空间调制。在此，我们旨在对几何诱导现象进行一般性展示，并采用参数 $m = 0.067\, m_e$、$\Lambda^1 = 40$纳米、$w = 21.5$ 和 $q_0^1 = 20$ 纳米；这些参数适用于 $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$，并选择 $f_0 \in \{0;\ 4;\ 8\}$ 纳米。波纹、有效质量 (11) 和有效势 (12) 的典型变化过程如图 2 所示。

晶体结构.- 图 3 比较了准一维起伏晶体在三种不同振幅下的能带结构、群速度 (17) 和谱质量参数 (19)。图 4 还展示了相应的态密度 (21)。能带结构及其导出量关于第一布里渊区中心（即 Γ 点）对称。在我们的模型中，平坦空间中的自由电子气

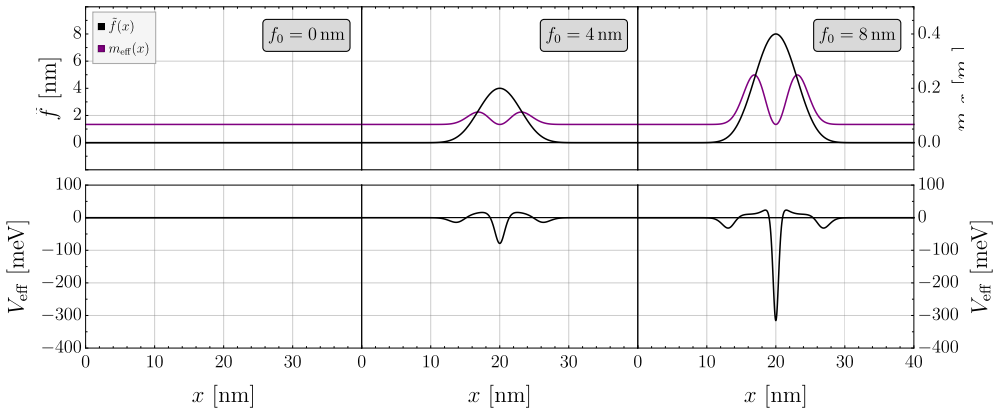

图2：式（26）描述的基本凹陷的空间变化，以及几何诱导的有效质量和势。该设置由参数 $m = 0.067\,m_e$、 $\Lambda^1 = 40$ nm、 $w = 21.5$ 和 $q_0^1 = 20$ nm 表征，而 f_0 沿各行递增。最左列对应平坦空间，即参考系。

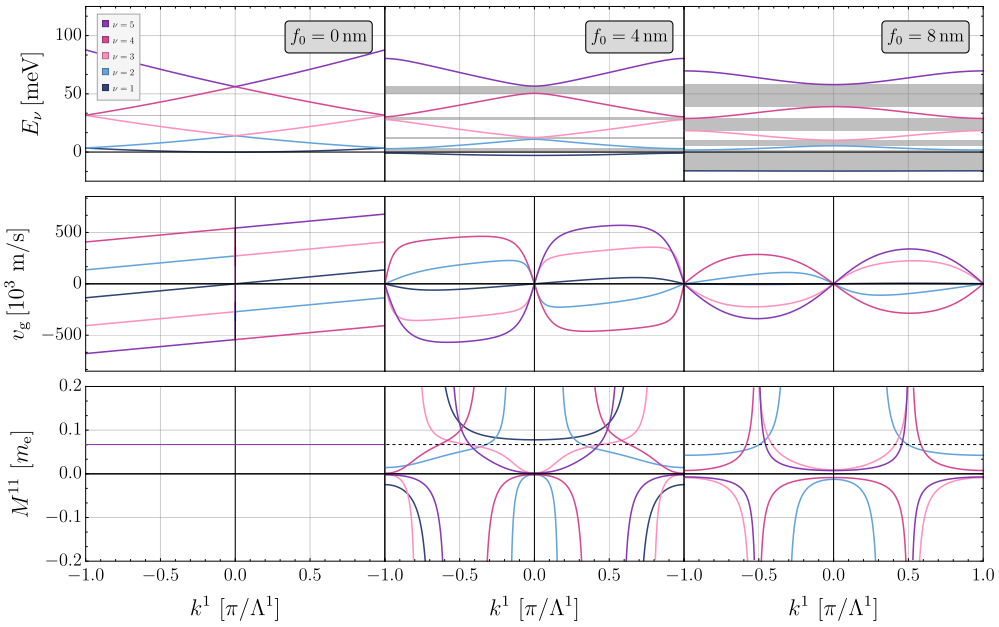

图3：对于图2所示参数，能带结构、群速度和谱质量随 k^1 的变化，其中 f_0 沿各行递增。不同能带以不同颜色标示。带隙以灰色阴影区域标出。最左列对应平坦空间中的自由电子气，作为参考系。

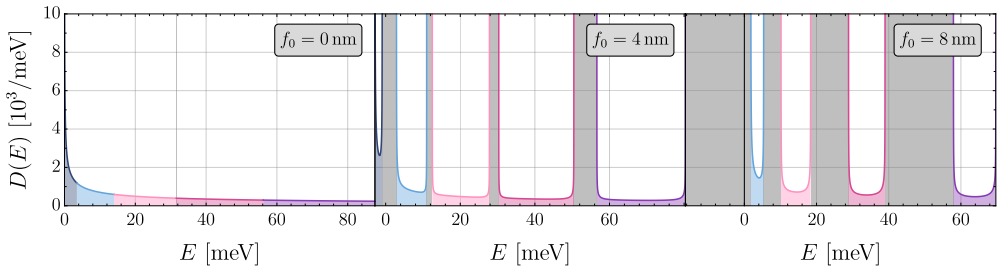

图4：具有与图2相同参数的起伏晶体的态密度，f_0 沿各行递增。仅考虑一个方向。不同能带以不同颜色标示。灰色区域不包含任何态，对应于带隙。最左一列对应自由电子气。

充当参考系。当 $f_0 = 0$时即可实现，因此这些图中最左侧的列展示了相应的熟知结果。保持 $w =$ 恒定。并增大振幅 $f_0 > 0$，会产生波纹，从而形成非平庸且不断增大的几何诱导有效质量和势。因此，随着振幅增大，该系统与参考系的偏离也越来越明显，这一点在所有观测量中均可见。

波纹会导致能量值降低，同时伴随能带宽度减小并出现带隙，两者的量级均为 $\approx \mathcal{O}$ (10 meV)。因此，能带宽度减小会在振幅 f_0较大时形成平带。此外，对于任意 $f_0 > 0$，最低能带都部分为负（直至完全为负）。我们将其解释为束缚态能带。回想一下一维系统中所有波纹都会形成吸引势，且至少存在一个束缚态 [71, 72], ；该束缚能带符合束缚轨道杂化的图景，其中轨道主要局域在有效几何势的极小值附近。能带结构变平伴随着群速度降低，其大小为 $\approx \mathcal{O}(100\ \frac{\mathrm{km}}{s})$，并且在第一布里渊区的中心和边缘（分别为Γ点和 X点）均趋于零。

—

由能带结构推导出的谱质量，是粒子沿 x 方向在起伏晶体内部运动时的一个有效参数。其大小由粒子质量参数 m决定，但波纹的存在会使其发生变化。除第一条能带外，其他所有能带都在第一布里渊区内恰好两个点处取相同的值 $M_\nu^{11}(k^1) = m$。通常，谱质量在中心 (Γ) 附近非常小，并且

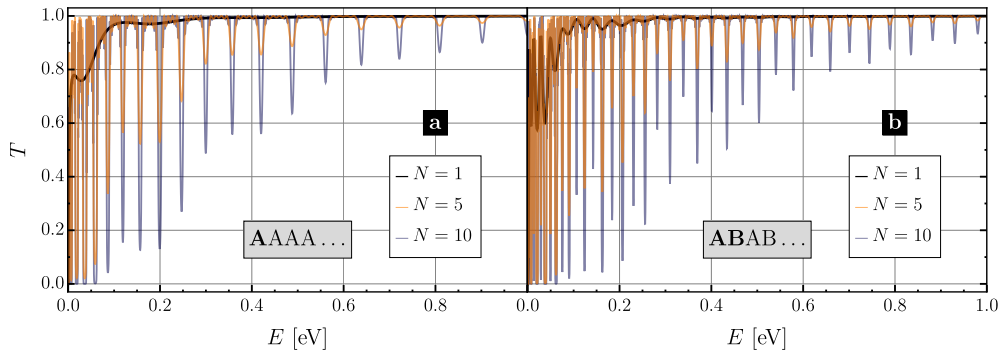

图 5：量子粒子穿过 N 重波纹空间时的透射率。重复结构的基元由具有以下参数的波纹构成：$m = 0.067\,m_e$、$\Lambda^1 = 40\,\text{nm}$、$q_0^1 = 20\text{nm}$、$f_0 = 8\,\text{nm}$，以及 $w = 21.5$（A 型凹痕）或 $w = 10.0$（B 型凹痕）。(a) 基元为 A 的简单晶格结构的透射率。(b) 基元为 AB 的子晶格结构的透射率。

在布里渊区边缘 (X) 附近也非常小；在其间群速度达到极值的恰好两个点处，谱质量则发散。在这两个垂直渐近线的两侧，谱质量的符号会发生变化。

随着带隙打开，态密度也随之改变。如图 4 所示，能带越平坦，态局域化所在的谱区就越窄。因此，对应于各条单独能带的态密度均随 f_0 增大。与此同时，不存在任何态的谱区（即带隙区域）正在变宽。正如准一维晶体所预期的那样，态密度在第一布里渊区边缘发散。

输运：为补充能带结构视角，我们还采用传递矩阵方法，模拟了量子粒子在穿越一个包含 N 个连续凹陷的近似波纹晶体时发生量子散射的输运特性。为此，我们选取了与上文相同的参数 $m = 0.067\,m_e$、$\Lambda^1 = 40$ nm 和 $q_0^1 = 20$ nm，但将 $f_0 = 8$ 固定为 nm。相反，我们改变宽度参数 w，以展示子晶格结构和杂质的影响。

图 5(a) 显示了粒子穿过 N 个相同波纹时的透射率，其中 $w = 21.5$（对应于图 2–4 最右侧几行所示的结构）。黑线表示单个凹陷时透射率 T 的变化过程；当入射能量超过 0.5 eV 时，该值几乎完全收敛至极限值 1。请注意

这种收敛 $T \to 1$ ，($E \to +\infty$) 是无限延伸散射区的预期结果，这是由量子散射过程的基本物理原理决定的 [65, 73]。该曲线与此前文献中类似研究 [51, 54] 以及我们自己的研究 [64] 所得结果一致。

通过重复波纹来延伸散射区时，会出现一系列共振。这些共振表现为负峰，随着 $N \to +\infty$增大而逐渐降低至 $T = 0$ ，并在一定程度上展宽。因此，它们标示出发生完全反射的谱区。其间则出现 $T \approx 1$，并受到某种振铃现象的调制。这是因为，当波纹重复无穷多次，即 $N \to +\infty$时，透射率 T 会呈现矩形形状，在 $T = 0$ 与 $T = 1$之间跳变。这种行为类似于图 3 和图 4 所示起伏晶体的能带结构，因为带隙意味着不存在量子态的谱区。这一行为凸显了变形线材作为带通滤波器或反射器的潜在应用，适用于遵循上述运动方程的粒子。在我们的案例中（假设采用某种砷化镓异质结构），数据表明，对于最低能带（比较图 3 和图 5(a)），重复十次波纹后，便可近似达到无限延伸晶体的极限。

为了对比这一图像，我们现在选择让每隔一个凹陷的宽度参数为 $w = 10.0$ 而非 $w = 21.1$。用晶体物理的术语来说，这两种波纹构成了子晶格结构，其排列模式为 $ABAB\ldots$；重复这一双基元后，便得到图 5 (b) 所示的透射率数据。与单基元的图 5 (a) 直接对比可见，子晶格结构表现为一系列新的负峰，与先前的负峰交替出现。这一行为也与先前的研究结果一致 [51]。

此外，比较图 5（a、b）中的黑色曲线（它们分别仅表示相应波纹的一个重复单元）可以看出，透射率通常对线材的形状相当敏感。根据经验，这一点是可以预期的，因为薛定谔方程（10）或（14）中的系数，即由几何诱导的有效质量和势，对形状函数 f呈非线性依赖。为进一步说明这一点，我们将形状为 $w = 10.0$ 的第二个凹陷作为杂质，置于一系列形状保持原样的凹陷中（$w = 21.5$ ），并模拟了散射过程。图 6 展示了由七个波纹组成、且杂质位于中心的结构所产生的透射率。结果表明，负峰分裂为两个。因此，预计杂质的影响会在

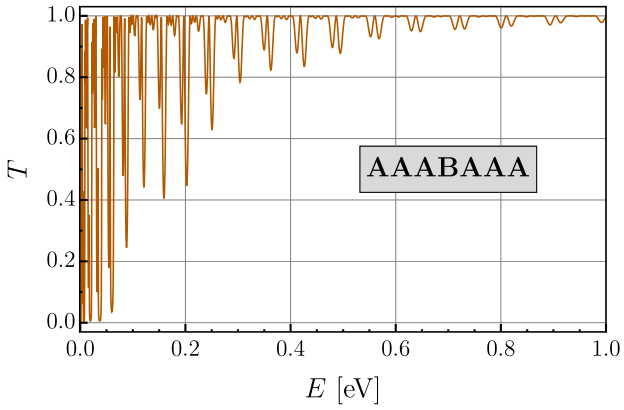

图6：量子粒子穿过含杂质的波纹空间时的透射率，其中杂质由图5所述的凹陷建模。

谱分辨率足够高时的散射数据中显现出来。反过来说，这表明利用电导测量对（周期性波纹）量子线进行形状分析具有潜力。

结论：量子粒子的受约束运动在性质上不同于其经典对应物，也不同于处于标量势作用下、在平坦空间中运动的量子粒子。本文以周期性波纹空间为例展示了这一点，并将其与平坦空间中的布洛赫粒子进行了对比。在本文讨论的情形中，构型空间度量张量的影响可以映射为具有周期性几何诱导势和有效局域质量参数的薛定谔型方程。我们计算了一个示例性能带结构，并研究了群速度、谱质量和态密度。基于能带结构，可以计算**k**空间量子几何张量和贝里曲率，用于研究量子输运和对状态进行分类。该方法（严格来说）适用于有效单粒子问题；由于本文采用了特殊的设置，因此可以直接应用。至少在二维中，即使对于单个粒子，度量张量场 g 也不一定是对角的。此时，超空间坐标轴及其对应的倒易空间无法产生彼此独立的量子数，因为**k**变量会发生混合，从而阻碍变量分离。非平凡度量可能会带来更复杂的影响，但对这种情况进行分析和分类仍有待未来研究。另一方面，一旦求得流形上的耦合方程的解，就可以张成射影希尔伯特空间，并研究上文所述的几何效应。就输运而言，对于非紧致流形，只要空间的弯曲部分范围有限且被平坦区域包围，我们在此用于研究量子输运的S矩阵

理论仍然适用；这样的平坦区域使得渐近散射态得以定义，而这些态是利用定态散射理论推断电导所必需的。

致谢：

本研究得到了德国研究联合会项目（编号：429194455）的资助。

利益冲突：

作者声明不存在任何利益冲突。

数据可用性声明：

本文提供了获得本研究结果所需的步骤。

---

[1] S. Pancharatnam，《广义干涉理论及其应用》，《印度科学院学报》A辑**44**，247（1956）。

[2] R. Karplus 和 J. M. Luttinger，《铁磁体中的霍尔效应》，Phys. Rev.**95**，1154（1954）。

[3] D. J. Thouless、M. Kohmoto、M.P. Nightingale 和 M. den Nijs，《二维周期势中的量子化霍尔电导》，《物理评论快报》**49**，405（1982）。

[4] M. V. Berry，《伴随绝热变化的量子相位因子》，Proc. R. Soc. A**392**，45（1984）。

[5] Y. Aharonov 和 J. Anandan，《循环量子演化期间的相位变化》，《物理评论快报》 **58**，1593（1987）。[6] J.Samuel 和 R.Bhandari，《贝里相位的一般框架》，《物理评论快报》**60**，2339（1988）。[7] G. E. Volovik，《氦液滴中的宇宙》（牛津大学出版社，2003）。

[8] B. A. Bernevig、T. L. Hughes 和 S.-C. Zhang，碲化汞量子阱中的量子自旋霍尔效应与拓扑相变，《科学》**314**，1757（2006）。

[9] T. Frankel, 《物理学的几何》, 第三版（剑桥大学出版社，剑桥，2012）；书名引自出版商的书目系统（访问于2016年7月18日）。[10] E. Cohen、H. Larocque、F. Bouchard、F. Nejadsattari、Y. Gefen 和 E. Karimi，从阿哈罗诺夫–玻姆到潘查拉特南–贝里及更广泛领域的几何相位，《自然综述：物理学》**1**，437（2019）。[11] J. Zak，固体能带的贝里相位，《物理评论快报》**62**，2747（1989）。[12] D. Xiao、M.-C. Chang 和 Q. Niu，贝里相位对电子性质的影响，《现代物理评论》**82**，1959（2010）。[13] J. P. Provost 和 G. Vallee，量子态流形上的黎曼结构，《数学物理通讯》**76**，289（1980）。[14] S. Matsuura 和 S. Ryu，动量空间度量、非局域算符与拓扑绝缘体，《物理评论B》**82**，245113（2010）。[15] M. Kolodrubetz、V. Gritsev 和 A. Polkovnikov，量子基态流形几何的分类与测量，《物理评论B》**88**，064304（2013）。[16] Ma, Y.-Q.、Gu, S.-J.、Chen, S.、Fan, H. 和 Liu, W.-M.，有能隙费米子系统中布洛赫态流形的欧拉数与量子相，《欧洲物理快报》**103**，10008（2013）。[17] L. Yang、Y.-Q. Ma 和 X.-G. Li，双能带晶格模型中布洛赫能带的几何张量与拓扑表征，《物理学B：凝聚态》**456**，359（2015）。[18] B. A. Bernevig 和 T. L. Hughes，《拓扑绝缘体与拓扑超导体》（普林斯顿大学出版社，2013）。[19] F. Piéchon、A. Raoux、J.-N. Fuchs 和 G. Montambaux，几何轨道磁化率：无贝里曲率的量子度量，《物理评论B》**94**，134423（2016）。[20] W. Chen 和 G. von Gersdorff，通过光学吸收测量固体中的相互作用修饰的贝里曲率与量子度量，《SciPost物理核心》**5**，040（2022）。[21] Z. Liu、Z.-F. Zhang、Z.-G. Zhu 和 G. Su，无序对双能带有能隙石墨烯中贝里曲率与量子度量的影响，《物理评论B》**110**，245419（2024）。[22] A. Gao、Y.-F. Liu、J.-X. Qiu、B. Ghosh、T. V. Trevisan、Y. Onishi、C. Hu、T. Qian、H.-J. Tien、S.-W. Chen、M. Huang、D. Bérubé、H. Li、C. Tzschaschel、T. Dinh、Z. Sun、S.-C. Ho、S.-W. Lien、B. Singh、K. Watanabe、T. Taniguchi、D. C. Bell、H. Lin、T.-R. Chang、C. R. Du、A. Bansil、L. Fu、N. Ni、P. P. Orth、Q. Ma 和 S.-Y. Xu，拓扑反铁磁异质结构中的量子度量非线性霍尔效应，《科学》**381**，181（2023），

https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.adf1506.[23] D.E. Parker, T. Morimoto, J. Orenstein,and J. E. Moore,《外尔半金属非线性光学响应的图解方法》, Phys. Rev. B **99**, 045121 (2019).[24] L. J. Boya,《状态空间作为射影空间：无质量粒子的情形》, 《物理学基础》**19**, 1363 (1989).[25] A. K. Pati,《非循环量子演化的几何方面》, 《物理评论A》**52**, 2576 (1995).[26] S.-J. Gu, H.-M. Kwok, W.-Q. Ning, and H.-Q. Lin,《量子临界现象中的保真度易感性、标度与普适性》, 《物理评论B》**77**, 245109 (2008).[27] S. Yang, S.-J. Gu, C.-P. Sun, and H.-Q. Lin,《基塔耶夫蜂窝模型中的保真度易感性与长程关联》, 《物理评论A》**78**, 012304 (2008).[28] A. F. Albuquerque, F. Alet, C. Sire, and S. Capponi,《保真度易感性的量子临界标度》, 《物理评论 B 》 **81**, 064418 (2010).[29] S.-J. Gu, 《研究量子相变的保真度方法》 , Int. J. Mod. Phys. B**24**, 4371 (2010).[30] A. Matos-Abiague and J. Berakdar,《动态诱导量子演化冻结的几何起源》, 《物理评论A》**73**, 024102 (2006).[31] A. Matos-Abiague and J. Berakdar,《阿哈罗诺夫–阿南丹相位与驱动量子系统的准稳态》, 《欧洲物理快报》**71**, 705 (2005).[32] H. Koppe and H. Jensen,《达朗贝尔原理在经典力学与量子理论中的应用》(Springer Berlin Heidelberg, 1971).[33] H. Jensen and H. Koppe,《含约束的量子力学》, 《物理学年鉴》**63**, 586 (1971).[34] R. C. T. da Costa,《受约束粒子的量子力学》, 《物理评论A》**23**, 1982 (1981).[35] R. C. T. da Costa,《量子力学中的约束》, 《物理评论A》**25**, 2893 (1982).[36] R. C. T. da Costa,《量子力学中的约束》, 《欧洲物理学杂志》**7**, 269 (1986).[37] P. Maraner,《含约束量子力学的完整微扰展开》, Jour- nal of Physics A: Mathematical and General**28**, 2939 (1995).[38] P. C. Schuster and R. L. Jaffe,《嵌入欧几里得空间的流形上的量子力学》, 《物理学年鉴》**307**, 132 (2003).

[39] P. Maraner and J. K. Pachos,《广义协变性破缺所导致的降维方案的普适特征》,《物理学年鉴》**323**, 2044 (2008).[40] F. T. Brandt and J. A. Sánchez-Monroy,《与体规范场耦合的膜上无自旋粒子的量子动力学》,《经典与量子引力》**34**, 075010 (2017).[41] Y.-L. Wang, H. Jiang, and H.-S. Zong,《受限于嵌入三维欧几里得空间曲面的粒子的几何影响》,《物理评论A》**96**, 022116 (2017).[42] M. Encinosa and B. Etemadi,《量子纳米结构中由表面曲率导致的能量位移》,《物理评论 A 》 **58**, 77 (1998).[43] R. Cheng, Y.-L. Wang, H. Jiang, X.-J. Liu, and H.-S. Zong,《四分之一波纹环面的几何效应》,《凝聚态物质》**4**, 3 (2018).[44] R. Cheng, Y.-L. Wang, H.-X. Gao, H. Zhao, J.-Q. Wang, and H.-S. Zong,《环形波纹导线中电子结构与束缚态的几何效应》,《物理学杂志：凝聚态物质》**32**, 025504 (2019).[45] J. F. Torres, N. L. Morales, J. S. Espitia, C. J. Páez, and W. Gutiérrez,《封闭纳米环中电子路径曲率变化诱导的局域态》,《物理学杂志：会议系列》**1386**, 012057 (2019).[46] M. E. Pereira, P. H. Cunha, and A. G. Schmidt,《波纹圆上的量子散射》,《E物理：低维系统与纳米结构》**161**, 115965 (2024).[47] S. Ono and H. Shi ma,《通过纳米尺度波纹调控半导体薄膜的电阻率》,《物理评论B》**79**, 235407 (2009).[48] S. Ono and H. Shima,《周期性曲面上的低温电阻率异常》, Phys- ica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **42**, 1224 (2010).[49] F. Santos, S. Fumeron, B. Berche, and F. Moraes,《变形纳米管电子输运中的几何效应》,《纳米技术》**27**, 135302 (2016).[50] Y.-L. Wang, G.-H. Liang, H. Jiang, W.-T. Lu, and H.-S. Zong,《波纹产生的传输带隙》,《物理学杂志 D：应用物理》**49**, 295103 (2016).[51] W.-R. Cao, Y.-L. Wang, X.-L. Chen, H. Jiang, C.-T. Xu, and H.-S. Zong,《双频波纹表面的几何势》, Physics Letters A **383**, 2124 (2019).[52] F. Serafim, F. Santos, J. R. Lima, C. Filgueiras, and F. Moraes,《二维量子系统电子输运中的位置依赖质量效应：纳米管中的应用》,《E物理：低维系统与纳米结构》**108**, 139 (2019).

[53] H. Zhao, Y.-L. Wang, R. Cheng, G.-H. Liang, H. Jiang, C.-Z. Ye, H. Liu, and H.-S. Zong, 波纹对磁场中自旋极化的影响, Physics Letters A **400**, 127288 (2021).[54] F. Serafim, F. A. N. Santos, J. R. F. Lima, S. Fumeron, B. Berche, and F. Moraes, 磁效应和几何效应对金属纳米管电子输运的影响, Journal of Applied Physics **129**, 10.1063/5.0031667 (2021).[55] H. Aoki, M. Koshino, D. Takeda, H. Morise, and K. Kuroki, 周期性曲面的电子结构：拓扑能带结构, Physical Review B **65**, 035102 (2001).[56] N. Fujita and O. Terasaki, p、d 和 g 曲面的能带结构, Physical Review B **72**, 085459 (2005).[57] S. Longhi, 变形平板波导中的拓扑光学布洛赫振荡, Optics Letters**32**, 2647 (2007).[58] A. Szameit, F. Dreisow, M. Heinrich, R. Keil, S. Nolte, A. Tünnermann, and S. Longhi, 光子拓扑晶体中的几何势和输运, Physical Review Letters**104**, 150403 (2010).[59] V. H. Schultheiss, S. Batz, A. Szameit, F. Dreisow, S. Nolte, A. Tünnermann, S. Longhi, and U. Peschel, 弯曲空间中的光学, Physical Review Letters **105**, 143901 (2010).[60] S. Pandey and C. Ortix, 褶皱半导体带中由非均匀应变导致的拓扑端态, Physical Review B **93**, 195420 (2016).[61] S. Pandey, N. Scopigno, P. Gentile, M. Cuoco, a nd C. Ortix, 蛇形半导体窄通道中的拓扑量子泵, Physical Review B **97**, 241103 (2018).[62] H. Bendin, B. Schwager, and J. Berakdar, 黎曼流形上的激光着装态：Kramers-Henneberger 变换的推广, Physical Review Research (2025).[63] L. Meschede, B. Schwager, D. Schulz, and J. Berakdar, 黎曼流形中无自旋粒子的量子散射, Physical Review A **107**, 062806 (2023).[64] B. Schwager, L. Meschede, and J. Berakdar, 变形黎曼流形上量子运动中的维格纳时间延迟和哈特曼效应, Canadian Journal of Physics**103**, 51 (2025).[65] G. A. Reider,《光子学：基础导论》(Springer Berlin Heidelberg, 2022).[66] R. De Alba, F. Massel, I. R. Storch, T. S. Abhilash, A. Hui, P. L. McEuen, H. G. Craighead, and J. M. Parpia, 石墨烯膜中的可调声子-腔耦合, Nature Nanotechnology

11, 741 (2016).[67] K. Parto, S. I. Azzam, K. Banerjee, and G. Moody, 单层二硒化钨的缺陷与应变工程实现了最高达 150k 的位点可控单光子发射, Nature Communications **12**, 3585 (2021).[68] M. G. Harats, J. N. Kirchhof, M. Qiao, K. Greben, and K. I. Bolotin, 非均匀应变单层二硫化钨中激子向带电激子的动力学过程与高效转化, Nature Photonics**14**, 324 (2020).[69] Z. Peng, X. Chen, Y. Fan, D. J. Srolovitz, and D. Lei, 二维半导体和石墨烯的应变工程：从应变场到能带结构调控和光子学应用, 《光：科学与应用》 **9**, 10.1038/s41377-020-00421-5 (2020).[70] Y. Ban and E. Y. Sherman, 连续形状波导中的自旋依赖电子输运, 《应用物理快报》**99**, 112101 (2011).[71] P. Exner and P. Seba, 弯曲量子波导中的束缚态, 《数学物理杂志》 **30**, 2574 (1989).[72] J. Goldstone and R. L. Jaffe, 扭曲管中的束缚态, Physical Review B **45**, 14100 (1992).[73] D. J. Griffiths, 《量子力学导论》（第 *2* 版）(Benjamin Cummings, 2004) p. 480.