原子晶格中的非厄米能带拓扑与边缘态

Wenxuan Xie

耶鲁大学应用物理系，美国康涅狄格州纽黑文 *06511*[*]

John C. Schotland

数学系和物理系，

耶鲁大学，美国康涅狄格州纽黑文 *06511*[†]

arXiv:2601.00487v1 [quant-ph] 1 Jan 2026

摘要

我们研究了由长程耗散辐射耦合介导的一维和二维二分原子晶格的能带结构与拓扑相。通过推导单激发子空间的有效非厄米哈密顿量，我们证明该系统的低能动力学由具有复费米速度的狄拉克方程支配。我们分析了 SSH 模型和蜂窝模型各自对应的拓扑不变量，并利用合成规范场在后者中打破时间反演对称性。最后，我们通过推导局域于畴边界的边缘态解析解，明确验证了非厄米体边对应。

[*] wenxuan.xie@yale.edu

[†] john.schotland@yale.edu

一、引言

量子光学中的多体问题为模拟凝聚态物理现象提供了丰富的平台。实现奇异量子相（尤其是拓扑材料中出现的量子相）的光学类比，近年来备受关注 [1–7]。这类相可以在原子晶格中形成，其中量子发射体与量子化电磁场相互作用。相关研究涵盖了多种晶格类型和几何结构。在一维（1D）系统中，以双原子元胞内交错跃迁振幅为特征的苏－施里弗－希格（SSH）模型，是出现拓扑边缘态的最简单平台 [8–10]。蜂窝晶格等二维（2D）系统则会产生更丰富的现象，包括狄拉克锥、手性边缘态和稳健的拓扑激发 [11–20]。

本文研究量子化光场与由两种不同种类的两能级原子组成的晶格之间的相互作用。在此类系统中，原子间耦合由三维自由空间场介导，因此相互作用既具有长程特性，也具有辐射特性。相互作用的长程特性给能带结构的确定带来了重大挑战，因为这需要计算缓慢收敛的晶格求和[18–23]。尽管一维晶格和存在闭式表达式，但二维系统通常难以得到此类表达式。此前针对二维晶格的计算工作依赖于正则化技术 [18–20]或格林函数的傅里叶积分表示 [21–23]。然而，这些方法在数值计算上效率低下，且需要引入人工截断。为克服这些局限，我们采用θ函数变换和埃瓦尔德求和 [24]。该方法将二维晶格求和映射为一个雅可比 theta 函数的一维积分以及一系列指数收敛的求和，从而无需人工截断即可高效地进行数值计算。

我们首先推导出描述原子激发的有效双能带哈密顿量。由于光子介导耦合具有辐射性质，该有效哈密顿量本质上是非厄米的。利用推导出的晶格求和表达式，我们计算了一维和二维晶格的能带结构，并展示了狄拉克点的出现。除了数值分析外，我们还基于晶格对称性论证给出证明，确立了这些狄拉克点的普适性。我们证明，共振附近的物理由一个具有均匀费米速度的狄拉克方程所支配。这

一项发现具有稳健性：只要底层晶格对称性得以保持，无论相互作用是短程还是长程、厄米还是非厄米，这一结论都成立。因此，我们的结果广泛适用于各种实验装置，包括波导和电路量子电动力学，即使光子受到空间限制也不例外。在我们研究的特定晶格模型中，费米速度为复数，因而能够研究非厄米皮肤效应等非厄米现象 [25–34]。

最后，我们探讨一维和二维系统的拓扑性质。有效哈密顿量的非厄米性要求采用非厄米拓扑能带理论 [29, 35–40]。对于一维 SSH 模型，在手征对称性存在时会出现非平庸拓扑相。在二维蜂窝晶格中，非平庸拓扑要求打破时间反演对称性。鉴于原子不带电荷，且不会直接耦合到规范场，我们借鉴已有的原子系统方案 [41–44], ，引入合成规范场以打破时间反演对称性，从而产生非平庸拓扑相。最后，我们通过研究与狄拉克方程相关的畴壁问题，验证体边对应，确立体拓扑不变量与受保护边缘态出现之间的直接联系。

本文结构安排如下。第 II 节介绍所研究的模型，并推导有效双能带哈密顿量。接下来，第 III 节分析一维 SSH 模型，重点讨论其能带结构、绕数和边缘态。第 IV节考察二维蜂窝晶格的能带结构和拓扑特征。第 V节给出总结和结论。附录包含晶格求和与狄拉克方程的推导。

II. 模型

A. 模型哈密顿量

我们考虑一个三维空间中与量子化电磁场相互作用的两能级原子系统。为简化起见，我们采用标量场模型，但我们的方法很容易推广到完整的矢量电磁场。原子排列成一维链或二维蜂窝晶格。晶格由两种两能级原子组成，分别标记为 A 和 B，并假设它们

相距足够远，因此可以忽略短程原子间相互作用。系统的哈密顿量形式如下：

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum_{\alpha=A,B} \sum_{j} \hbar\Omega_{\alpha} \hat{\sigma}^{\dagger}_{\alpha j} \hat{\sigma}_{\alpha j} + \sum_{\alpha=A,B} \sum_{j,\mathbf{k}} \hbar g_{\alpha} \left(e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\alpha j}} \hat{\sigma}^{\dagger}_{\alpha j} \hat{a}_{\mathbf{k}} + e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\alpha j}} \hat{\sigma}_{\alpha j} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}} \right), \tag{1}$$

其中我们采用了旋波近似和偶极近似。式（1）中的三项分别对应电磁场、原子及其相互作用的哈密顿量。此外，算符 $\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}$ ($\hat{a}_{\mathbf{k}}$)产生（湮灭）一个频率为 $\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|$ 、波矢为$\mathbf{k}$的光子。我们用$\hat{\sigma}^{\dagger}_{\alpha j}$ ($\hat{\sigma}_{\alpha j}$)表示位于$\mathbf{r}^{\alpha j}$ 处第 j个晶胞中 $\alpha \in \{A, B\}$ 类原子的升高（降低）算符，其共振频率为Ω_{α}。每种原子的耦合强度为 g_{α}，并假设其与频率无关。

我们将注意力限制在单激发子空间内，其中激发总数守恒——激发可以是一个原子被激发，也可以是一个光子——这与旋波近似一致。该子空间中的定态定义为

$$|\psi\rangle = \left(\sum_{j} \psi_{Aj} \hat{\sigma}^{\dagger}_{Aj} + \sum_{j} \psi_{Bj} \hat{\sigma_{Bj}}^{\dagger} + \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}} \right) |0\rangle, \tag{2}$$

其中， $|0\rangle$ 表示原子与电磁场的联合基态。系数 $\psi_{\alpha j}$和 $c_{\mathbf{k}}$ 分别是激发第 j 个晶胞中 α 类原子以及产生一个波矢为$\mathbf{k}$的光子的概率振幅。

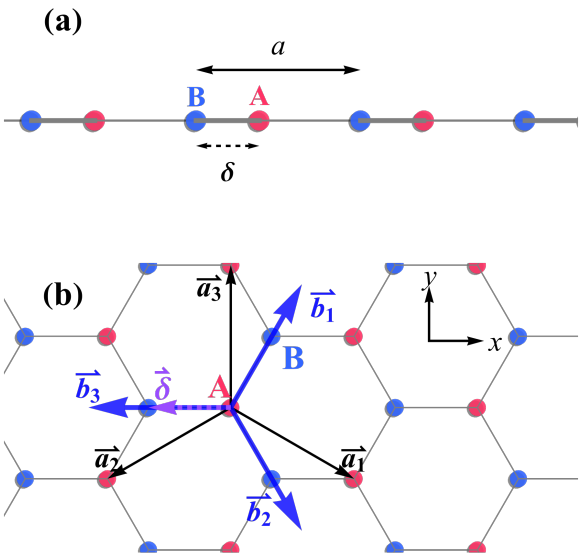
$\hat{}$ 状态 $|\psi\rangle$满足定态薛定谔方程 $H|\psi\rangle = \hbar\omega|\psi\rangle$。由此可知， $\psi_{\alpha j}$ 和 $c_{\mathbf{k}}$ 满足代数方程

$$\omega\psi_{Aj} = \Omega_A \psi_{Aj} + g_A \sum_{\mathbf{k}} e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{Aj}} c_{\mathbf{k}}, \tag{3a}$$

$$\omega\psi_{Bj} = \Omega_B \psi_{Bj} + g_B \sum_{\mathbf{k}} e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{Bj}} c_{\mathbf{k}}, \tag{3b}$$

$$\omega c_{\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + g_A \sum_{j} e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{Aj}} \psi_{Aj} + g_B \sum_{j} e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{Bj}} \psi_{Bj}. \tag{3c}$$

求解由方程（3）定义的本征值问题，可得到耦合光物质系统的能带结构。



实空间	倒易空间
$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$	$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1\right)$
$\mathbf{a}_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$	$\mathbf{b}_2 = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1\right)$
$\mathbf{a}_3 = (0,1)$	$\mathbf{b}_3 = \left(0, -\frac{2}{\sqrt{3}}\right)$

图 1. 晶格几何和基矢定义。(a) Su-Schrieffer-Heeger（SSH）链示意图；(b) 二维蜂窝晶格。附表总结了蜂窝几何中使用的实空间基矢$\mathbf{a}_i$ 及相应的倒易空间基矢$\mathbf{b}_j$ 。单个晶胞内 A 和 B 子晶格之间的内部位移由矢量 $\boldsymbol{\delta} = (-1/\sqrt{3},0)$（紫色箭头）定义。注意，基矢满足正交归一条件$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$。

–

B. 有效哈密顿量

为了推导仅涉及原子自由度的有效哈密顿量，我们首先定义原子坐标。A型原子位于点 $\mathbf{r}_{Aj} = a\mathbf{R}j$，其中$a$ 是晶格常数，而 $\mathbf{R}_j = \sum_{n=1}^{d} j_n \mathbf{a}_n$ 是无量纲晶格矢量（$j_n \in \mathbb{Z}$），如图 1所示。B型原子相对于同一晶胞内的A型原子发生位移，位于点 $\mathbf{r}_{Bj} = a(\mathbf{R}_j + \boldsymbol{\delta})$，其中 $\boldsymbol{\delta}$ 是无量纲位移矢量。消去方程（ $c_{\mathbf{k}}$ 3）中的振幅，得到

$$(\omega - \Omega_A)\psi_{Aj} + \frac{g_A^2 V}{c}\sum_l G(a\,|\mathbf{R}_{jl}|\,;\frac{\omega}{c})\psi_{Al} + \frac{g_A g_B V}{c}\sum_l G(a\,|\mathbf{R}_{jl} + \boldsymbol{\delta}|\,;\frac{\omega}{c})\psi_{Bl} = 0, \tag{4a}$$

$$(\omega - \Omega_B)\psi_{Bj} + \frac{g_B^2 V}{c}\sum_l G(a\,|\mathbf{R}_{jl}|\,;\frac{\omega}{c})\psi_{Bl} + \frac{g_A g_B V}{c}\sum_l G(a\,|\mathbf{R}_{jl} - \boldsymbol{\delta}|\,;\frac{\omega}{c})\psi_{Al} = 0, \tag{4b}$$

其中 $\mathbf{R}_{jl} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_l$ 是胞间相对位置矢量。这里， G 是格林函数

$$G(\mathbf{r};k) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{e^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{|\mathbf{q}| - k} = \frac{1}{2\pi^2 r^2} - \frac{\mathrm{i}k}{4\pi^2 r}\left[e^{\mathrm{i}kr}E_1(\mathrm{i}kr) - e^{-\mathrm{i}kr}E_1(-\mathrm{i}kr)\right] + \frac{ke^{\mathrm{i}kr}}{2\pi r}, \tag{5}$$

它在原子之间引入了有效的长程相互作用。我们注意到， G对应于分数阶算子 $\sqrt{-\Delta-k}$ 满足辐射条件 [45]。显然， G 是复值的，因此消去该场后得到的有效哈密顿量是非厄米的。

鉴于晶格的平移不变性，我们通过对原子振幅作傅里叶变换来引入布洛赫模：

$$\psi_\alpha(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{\mathbf{R}_j} \psi_{\alpha j} e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}_j}, \tag{6}$$

其中 $\boldsymbol{\beta} = \sum_i \beta_i \mathbf{b}_i$ 是第一布里渊区（FBZ）内的无量纲波矢。将方程（6）代入方程（4）可得动量空间本征问题：

$$\left[\alpha_A - 2\mathrm{i}\pi\kappa_A\alpha^2 - \kappa_A S_0(\alpha,\boldsymbol{\beta})\right]\psi_A(\boldsymbol{\beta}) - \sqrt{\kappa_A\kappa_B}S_+(\alpha,\boldsymbol{\beta})\psi_B(\boldsymbol{\beta}) = \alpha\psi_A(\boldsymbol{\beta}), \tag{7a}$$

$$\left[\alpha_B - 2\mathrm{i}\pi\kappa_B\alpha^2 - \kappa_B S_0(\alpha,\boldsymbol{\beta})\right]\psi_B(\boldsymbol{\beta}) - \sqrt{\kappa_A\kappa_B}S_-(\alpha,\boldsymbol{\beta})\psi_A(\boldsymbol{\beta}) = \alpha\psi_B(\boldsymbol{\beta}), \tag{7b}$$

其中，我们定义无量纲能量 $\alpha = \omega a/2\pi c$、共振频率 $\alpha_{A(B)} = \Omega_{A(B)}a/2\pi c$ 和耦合参数 $\kappa_{A(B)} = g_{A(B)}^2 V/2\pi a c^2$。

方程（ $S_0(\alpha,\boldsymbol{\beta})$ 和 $S_\pm(\alpha,\boldsymbol{\beta})$ 中的晶格求和分别描述种内相互作用和种间相互作用：7)

$$S_0(\alpha,\boldsymbol{\beta}) = \sum_{\mathbf{R}_j\neq 0} G(|\mathbf{R}_j|;2\pi\alpha)e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}_j}, \tag{8a}$$

$$S_\pm(\alpha,\boldsymbol{\beta}) = \sum_{\mathbf{R}_j} G(|\mathbf{R}_j \pm \boldsymbol{\delta}|;2\pi\alpha)e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}_j}. \tag{8b}$$

在 $S_0(\alpha,\boldsymbol{\beta})$ 中，发散的 $\mathbf{R}_j = 0$ 项单独处理。该自能项的实部代表兰姆位移，并入重整化原子频率$\alpha_{A,B}$。虚部记为 $2\pi\kappa_\alpha\alpha^2$。它对应自发衰减率，该衰减率出现在哈密顿量的对角项中。一维晶格这些求和的详细推导见附录 A，二维晶格的推导见附录B。

特征值问题式（7）可以更简洁地表示为 $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\beta}) = (\psi_A(\boldsymbol{\beta})\ \psi_B(\boldsymbol{\beta}))^T$：

$$H(\alpha,\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\beta}) = \alpha\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\beta}), \tag{9}$$

其中，哈密顿量通过泡利矩阵分解为 $H(\alpha,\ \boldsymbol{\beta}) = h_0\sigma_0 + \mathbf{h}\cdot\boldsymbol{\sigma}$。这里

系数定义如下

$$h_0(\alpha,\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\left[\alpha_A+\alpha_B - 2\mathrm{i}\pi(\kappa_A+\kappa_B)\alpha^2 - (\kappa_A+\kappa_B)S_0(\alpha,\boldsymbol{\beta})\right], \tag{10a}$$

$$h_1(\alpha,\boldsymbol{\beta}) = -\frac{1}{2}\sqrt{\kappa_A\kappa_B}\left[S_+(\alpha,\boldsymbol{\beta}) + S_-(\alpha,\boldsymbol{\beta})\right], \tag{10b}$$

$$h_2(\alpha,\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2\mathrm{i}}\sqrt{\kappa_A\kappa_B}\left[S_+(\alpha,\boldsymbol{\beta}) - S_-(\alpha,\boldsymbol{\beta})\right], \tag{10c}$$

$$h_3(\alpha,\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\left[\alpha_A-\alpha_B - 2\mathrm{i}\pi(\kappa_A-\kappa_B)\alpha^2 - (\kappa_A-\kappa_B)S_0(\alpha,\boldsymbol{\beta})\right]. \tag{10d}$$

这些复系数凸显了系统的非厄米特性。请注意，$h_0(\alpha,\ \boldsymbol{\beta})$ 无法消去，因为它是复数，表示能量位移和衰减。

我们强调，式（11）定义了一个非线性特征值问题，因为哈密顿量 $H(\alpha,\boldsymbol{\beta})$ 依赖于本征值 α。相应的特征方程为

$$\det\left[H(\alpha,\boldsymbol{\beta}) - \alpha\right] = 0. \tag{11}$$

在弱耦合条件（$\kappa_A,\kappa_B \ll 1$）以及原子频率近简并（$|\alpha_A-\alpha_B| \ll |\alpha_A+\alpha_B|$）时，非线性方程（11）可以通过迭代求解。我们从初值 $\bar{\alpha} = (\alpha_A+\alpha_B)/2 - \mathrm{i}\pi(\kappa_A+\kappa_B)(\alpha_A+\alpha_B)^2/4$ 开始，该值表示两个相互隔离且会衰减的原子的平均频率。在 $\bar{\alpha}$处计算哈密顿量，对问题进行线性化，其中 $H(\boldsymbol{\beta}) := H(\bar{\alpha},\boldsymbol{\beta})$，得到两个复本征值：

$$\alpha_\pm(\boldsymbol{\beta}) = h_0(\boldsymbol{\beta}) \pm |\mathbf{h}(\boldsymbol{\beta})|, \tag{12}$$

其中 $|\mathbf{h}(\boldsymbol{\beta})| = \sqrt{h_1^2(\boldsymbol{\beta}) + h_2^2(\boldsymbol{\beta}) + h_3^2(\boldsymbol{\beta})}$。$\alpha_\pm(\boldsymbol{\beta})$ 的实部和虚部分别定义了色散和衰减率。非厄米双正交归一化 $\langle\psi_i^L|\psi_j^R\rangle = \delta_{ij}$ 所需的右特征矢量和左特征矢量为：

$$|\psi_\pm^R(\boldsymbol{\beta})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\,|\mathbf{h}(\boldsymbol{\beta})|\,(|\mathbf{h}(\boldsymbol{\beta})| \mp h_3(\boldsymbol{\beta}))}}(h_1(\boldsymbol{\beta}) - \mathrm{i}h_2(\boldsymbol{\beta}), \pm|\mathbf{h}(\boldsymbol{\beta})| - h_3(\boldsymbol{\beta}))^{\mathrm{T}}, \tag{13a}$$

$$\langle\psi_\pm^L(\boldsymbol{\beta})| = \frac{1}{\sqrt{2\,|\mathbf{h}(\boldsymbol{\beta})|\,(|\mathbf{h}(\boldsymbol{\beta})| \mp h_3(\boldsymbol{\beta}))}}(h_1(\boldsymbol{\beta}) + \mathrm{i}h_2(\boldsymbol{\beta}), \pm|\mathbf{h}(\boldsymbol{\beta})| - h_3(\boldsymbol{\beta})). \tag{13b}$$

这些本征态将作为后续章节中刻画系统拓扑不变量的组成要素。

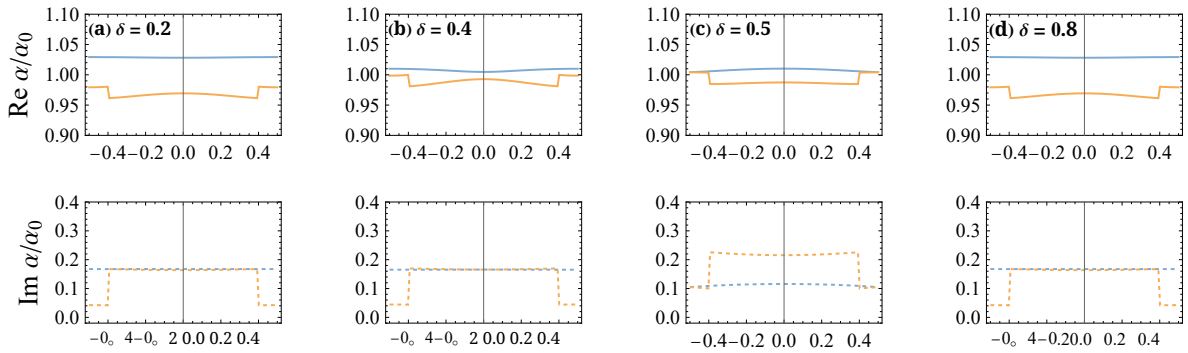


图 2. 不同胞内间距 δ 下有效非厄米 SSH 模型的能带结构。在整幅图（以及所有后续图）中，我们固定 $\alpha_A = \alpha_B = 2.4$ 和 $\kappa_A = \kappa_B = 0.01$。子图 (a)：$\delta = 0.2$；(b)：$\delta = 0.4$；(c)：$\delta = 0.5$；(d)：$\delta = 0.8$。每个子图的上面板显示能带结构的实部，下面板显示相应的虚部。

III. 非厄米 SSH 模型

A. 能带结构

本节将研究由两种不同原子类型组成的一维晶格的能带结构、拓扑和边缘态。类比其电子对应物，我们将其称为非厄米 SSH模型。我们首先分析该模型的能带结构。图2 展示了胞内原子间距变化时的复能带结构 δ。除非另有说明，本图及后续所有图中，我们均固定参数 $\alpha_A = \alpha_B = 2.4$ 和$\kappa_A = \kappa_B = 0.01$ 。随着 δ 增大，实部和虚部的带隙均在 $\delta = 0.5$ 处闭合，随后重新打开，这表明发生了拓扑相变。

能带结构的一个显著特征是，在满足 $|\beta| = (\alpha_A + \alpha_B)/2$ 的动量线上，虚部会发生突变。位于这条边界之外的态，其能量低于光线（Re $\alpha < |\beta|$），因此无法通过单光子发射衰减，同时仍满足能量和动量守恒。因此，这些态属于亚辐射态，其衰减率（虚部能量）远低于相边界内的超辐射态。

B. 绕数

该一维非厄米系统的拓扑特征由其绕数定义。利用方程（13）中的左、右本征矢量，两条能带的总绕数为 [37]

$$\upsilon = \upsilon_+ + \upsilon_- = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint d\beta \frac{d}{d\beta} \ln r(\beta), \tag{14}$$

其中

$$\upsilon_\pm = \frac{1}{2\pi} \oint d\beta \langle \psi_{L\pm} | \mathrm{i}\partial_\beta | \psi_{R\pm} \rangle, \quad r(\beta) = h_1(\beta) + \mathrm{i}h_2(\beta). \tag{15}$$

从几何上看，这个整数不变量表示 $r(\beta)$ 的轨迹在 β 遍历第一布里渊区时，在复平面上绕原点的圈数。这一点如图3(a) 所示，其中展示了计算得到的绕数随 δ变化的关系。对应的 $r(\beta)$ 轨迹见图3(b)-(g)。绕数是量子化的；系统在 $\upsilon = 0$ 到 $\upsilon = 1$ 之间取值，并在 $\delta = 0.5$ 处发生相变，此时轨迹与原点相交。这种行为在物理上是合理的：当 $\delta < 0.5$时，胞内耦合强于胞间跃迁，系统处于拓扑平庸相。相反，在 $\delta > 0.5$的极限下，胞间耦合更强，系统处于非平庸相。值得注意的是，长程相互作用会在δ的其他取值处引发额外的相变；这一现象在标准的最近邻 SSH 模型中并不存在。

C. 狄拉克方程与边缘态

接下来，我们转向边缘态和体边对应这一主题。通过在布里渊区边界 $\beta_0 = 1/2$ 附近展开哈密顿量 $H(\beta)$，我们推导出一个低能连续模型。对称性约束要求 $h_0(\beta)$、 $h_1(\beta)$ 和 $h_3(\beta)$ 关于 $q = \beta - \beta_0$ 为偶函数，而 $h_2(\beta)$ 为奇函数。对 q 进行一阶展开可得

$$H(\beta_0 + q) = h_0(\beta_0)\sigma_0 + h_1(\beta_0)\sigma_x + q \frac{d}{d\beta} h_2(\beta)\Big|_{\beta=\beta_0} \sigma_y + h_3(\beta_0)\sigma_z + \mathcal{O}(q^2), \tag{16}$$

聚焦于真空能附近的态，其中 $\alpha(\beta_0) \approx h_0(\beta_0)$，并对 q 进行逆傅里叶变换，我们得到二分量波函数 $\psi(x)$的实空间狄拉克方程：

$$(v_F \partial_x + m\sigma_z + \epsilon\sigma_x)\psi(x) = 0. \tag{17}$$

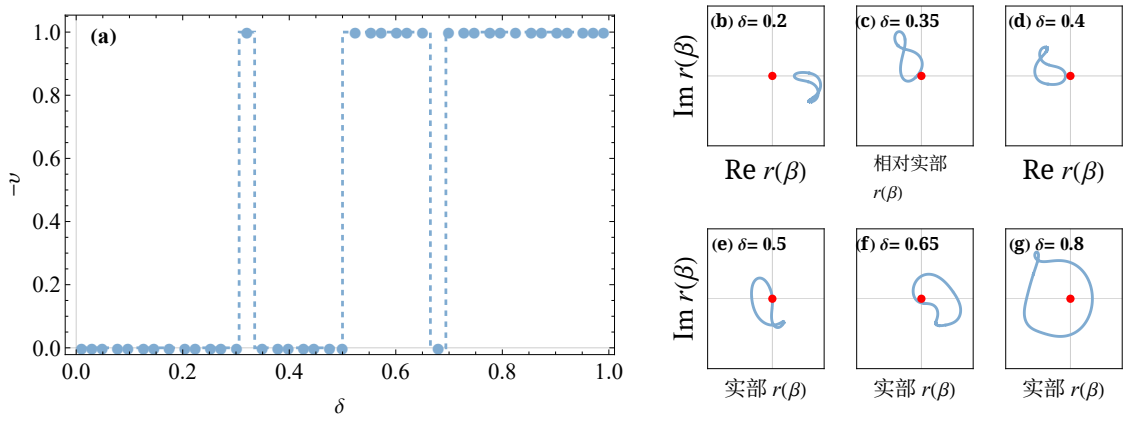


图 3. 复函数 $r(\beta) = h_1(\beta) + \mathrm{i}h_2(\beta)$ 在复平面上的绕数及示意图。(a) 绕数随 δ 的变化；(b)–(g) 不同 δ 取值下 $r(\beta)$ 的轨迹：(b) $\delta = 0.2$；(c) $\delta = 0.35$；(d) $\delta = 0.4$；(e) $\delta = 0.5$；(f) $\delta = 0.65$；(g) $\delta = 0.8$。红点表示复平面中的原点。

这里我们定义无量纲费米速度 $v_F = h_2'(\beta_0)$、质量项 $m = -h_1(\beta_0)$以及非手征参数 $\epsilon = h_3(\beta_0)$。在这个非厄米系统中，这些参数通常是复数。

当手征对称性得到保持（$\alpha_A = \alpha_B$ 和 $\kappa_A = \kappa_B$）时，即意味着 $\epsilon = 0$，狄拉克方程对于空间变化的质量 $m(y)$ 和速度 $v_F(y)$ 存在解析解：

$$\boldsymbol{\psi}(x) = \exp\left(-\int_0^x dy\, \frac{m(y)}{v_F(y)}\, \sigma_z\right)\boldsymbol{\psi}(0). \tag{18}$$

为明确展示边缘态的存在，我们引入一个畴壁，使胞内间距在过渡点两侧平滑变化 $\delta = 0.5$，其形式为$\delta(x) = 0.02\tanh(x) + 0.5$（见图 4（a））。该构型在拓扑平庸区域（$\upsilon = 0$）与非平庸区域（$\upsilon = 1$）之间建立了一个界面（图 4（b））。在这些条件下求解方程（18）得到一个局域于畴壁处的解（$x = 0$），如图 4（c）所示。恰好存在一个这样的解（边缘态），且它与 $\Delta\upsilon = 1$的体拓扑不变量变化相关，从而证实了这一非厄米体系中的体边对应。

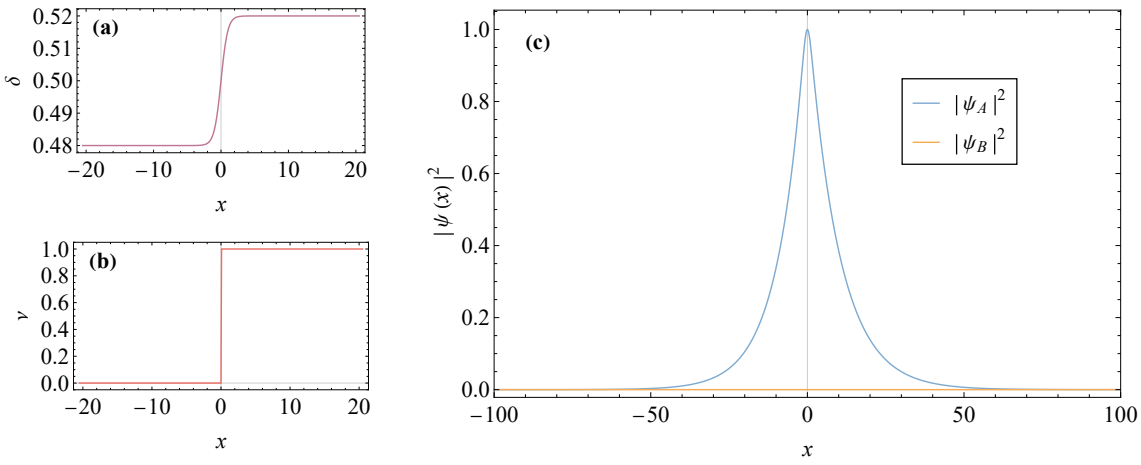


图 4. 有效非厄米 SSH 模型的边缘态。胞内原子间距根据 $\delta(x) = 0.02\tanh(x) + 0.5$ 平滑变化。其他所有参数均与前几幅图相同。边界条件设为 $\psi_A(0) = 1$ and $\psi_B(0) = 0$。(a) 胞内间距 $\delta(x)$ 的空间分布；(b) 相应的绕数随位置的变化；(c) 边缘态 $\psi_A(x)$ 局域在 $x = 0$ 附近的边界处，而 $\psi_B(x)$ 在整个系统中始终为零。

IV. 蜂窝晶格

A. 能带结构

现在，我们将分析扩展到二维蜂窝晶格。图 5 展示了计算得到的能带结构。为阐明相对于能带中心的特征，我们绘制能量差 $\alpha(\boldsymbol{\beta}) - h_0(\boldsymbol{\beta})$。我们首先考察对称构型，其中 $\alpha_A = \alpha_B$ 和 $\kappa_A = \kappa_B$，如图 5(a) 所示。在这一状态下，质量相关项 $h_3(\boldsymbol{\beta})$ 消失，从而确保系统保持手征对称性。此外，系统还具有时间反演对称性，满足 $H(\boldsymbol{\beta}) = H(-\boldsymbol{\beta})^T$。这些对称性共同保护了能带结构中的无能隙点——狄拉克点——它们位于第一布里渊区（K 和 K'）的角点处。在这些点附近，能带形成狄拉克锥，其特征为线性色散关系 $\alpha(\boldsymbol{\beta}_{K(K')} + \mathbf{q}) = \pm v_F\,|\mathbf{q}|$；我们将在附录 C 中推导这一性质。与一维情形一样，费米速度 v_F 是复数。

要产生非平庸拓扑相，必须打开带隙。这可以通过打破手征对称性（设置 $\alpha_A \neq \alpha_B$）或时间反演对称性来实现。

虽然在实验上很容易打破手征对称性，但这会产生拓扑平庸相。因此，我们专注于打破时间反演对称性。与带电电子不同，中性原子无法直接与磁场耦合；因此，我们采用合成规范场 [46–48]。借鉴 Haldane 方法，我们在哈密顿量中引入一个复数次近邻跃迁项。因此，我们对 h_0 和 h_3 进行如下修改

$$h_0(\boldsymbol{\beta}) \to h_0(\boldsymbol{\beta}) + 2t_2 \cos\phi \sum_{i=1}^{3} \cos(2\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{a}_i), \tag{19a}$$

$$h_3(\boldsymbol{\beta}) \to h_3(\boldsymbol{\beta}) - 2t_2 \sin\phi \sum_{i=1}^{3} \sin(2\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{a}_i). \tag{19b}$$

其中 t_2 为跃迁振幅， ϕ 为人工规范场的相位。如图 5（b）所示，该项在狄拉克点处的实部能谱中打开了一个带隙。虚部中的带隙仍保持闭合，这是因为 h_3（$\boldsymbol{\beta}$）中的附加项是纯实数，并且在 K 和 K' 狄拉克点处为零。图 5（c）展示了沿高对称路径的能带结构直接对比。主要变化发生在狄拉克点附近，此处色散关系的虚部由线性转变为抛物线型。

B. 陈数

对于具有不同左本征矢量（L）和右本征矢量（R）的非厄米系统，我们将贝里曲率定义为

$$B^{ij}_{n,\mu\nu}(\boldsymbol{\beta}) = \mathrm{i}\langle\partial_\mu\psi^i_n(\boldsymbol{\beta})|\partial_\nu\psi^j_n(\boldsymbol{\beta})\rangle \tag{20}$$

其中 $i,\ j = L,\ R$。对第一布里渊区中的曲率进行积分，可得到陈数 C^{ij}_n[37]:

$$C^{ij}_n = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathrm{FBZ}} d\beta^\mu \wedge d\beta^\nu B^{ij}_{n,\mu\nu}(\boldsymbol{\beta}) \tag{21}$$

鉴于关系式 $C^{LR}_n = C^{RL*}_n$和 $\sum_n C^{ij}_n = 0$，只需考虑下能带的左-右陈数。下文中我们省略能带指标，并将该量记为 C^{LR}。

合成规范场打破了时间反演对称性，并引入了交错质量项。由式（19）可知， K 和 K' 点处的有效质量项为 [36, 49]:

$$m_K = h_3(\boldsymbol{\beta}_K) + 3\sqrt{3}t_2\sin\phi, \quad m_{K'} = h_3(\boldsymbol{\beta}_K) - 3\sqrt{3}t_2\sin\phi. \tag{22}$$

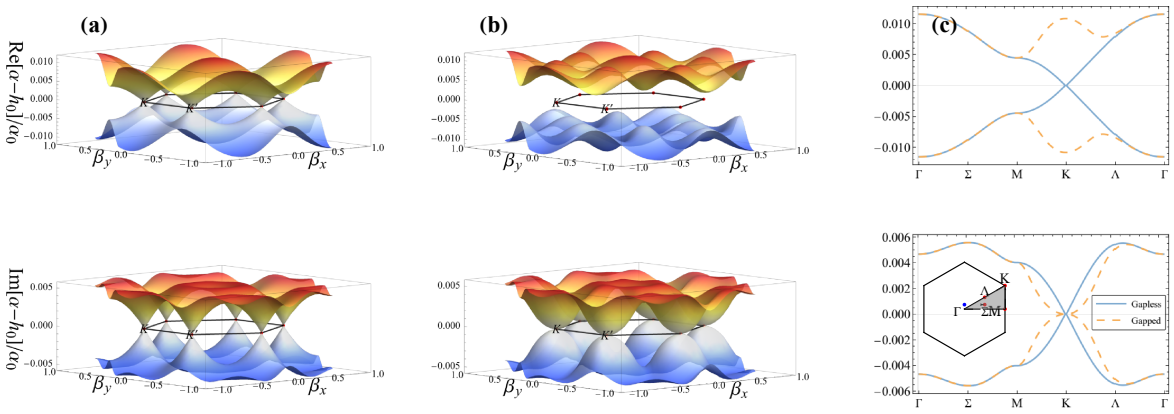


图 5. 非厄米蜂窝晶格的能带结构。(a) 没有合成规范场时能带结构的实部（上图）和虚部（下图），清晰显示了在 K 和 K' 点形成狄拉克锥；(b) 具有合成规范场的能带结构，使用 $t_2 = 5 \times 10^{-3}$和 $\phi = \pi/2$；(c) 沿布里渊区中的高对称路径 $\Gamma \to \Sigma \to M \to K \to \Lambda$ 的能带结构。实线和虚线分别对应具有和不具有规范场的情况。在所有图中，能带能量均平移了 h_0，即真空态的能量。

对于低能狄拉克模型，总陈数为

$$C = \frac{1}{2}(C^{LR} + C^{RL}) = \frac{1}{2}\,\mathrm{Re}\left[m_{K'}/\sqrt{m_{K'}^2} - m_K/\sqrt{m_K^2}\right]. \tag{23}$$

其量子化为 0 或 ± 1。所得的拓扑相图如图 6 所示。

C. 狄拉克方程与边缘态

现在我们转而推导蜂窝晶格的连续模型。为此，我们在狄拉克点附近展开哈密顿量。正如附录 C所述，晶格对称性对这一展开施加了严格的约束。一个关键结果是，关于动量偏差 **q**的一阶展开具有各向同性，由单一的复费米速度 v_F表征。这一思路具有普遍适用性：只要相互作用保持点群对称性（C_{3v}），费米速度就仍然是各向同性的。因此，哈密顿量

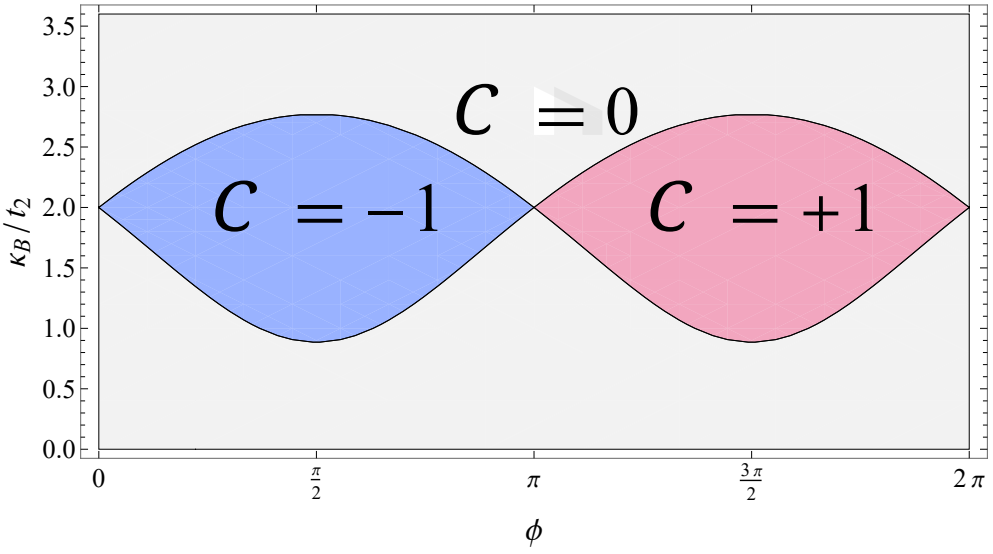


图 6. 蜂窝晶格的相图。参数固定为 $\alpha_A = \alpha_B = 2.4$、$\kappa_A = 0.01$ 和 $t_2 = 5 \times 10^{-3}$，而 κ_B（B型原子的耦合强度）和次近邻跃迁的相位ϕ 则发生变化。红色区域的陈数为 $+1$，蓝色区域为 -1，灰色区域为 0。

在 K 和 K' 点附近具有如下形式：

$$H(\boldsymbol{\beta}_K + \mathbf{q}) = \alpha_0\sigma_0 - v_F q_y \sigma_x + v_F q_x \sigma_y + m_K \sigma_z + \mathcal{O}(\mathbf{q}^2), \tag{24}$$

$$H(\boldsymbol{\beta}_{K'} + \mathbf{q}) = \alpha_0\sigma_0 + v_F q_y \sigma_x + v_F q_x \sigma_y + m_{K'} \sigma_z + \mathcal{O}(\mathbf{q}^2). \tag{25}$$

这里，$\alpha_0 = h_0(\boldsymbol{\beta}_K) = h_0(\boldsymbol{\beta}_{K'})$，$m_{K(K')}$ 是式（22）中定义的质量项，动量在正交归一基 $\{\mathbf{b}_x = (1,0), \mathbf{b}_y = (0,1)\}$ 中展开为 $\mathbf{q} = q_x\mathbf{b}_x + q_y\mathbf{b}_y$。应用逆傅里叶变换（$\mathbf{q} \to -\mathrm{i}\nabla$）可得控制波包包络 $\boldsymbol{\psi}(x, y, \tau)$ 实空间动力学的狄拉克方程：

$$(\alpha_0\sigma_0 + \mathrm{i}v_F\partial_y\sigma_x - \mathrm{i}v_F\partial_x\sigma_y + m_K\sigma_z)\boldsymbol{\psi}(x,y,\tau) = \mathrm{i}\partial_\tau\boldsymbol{\psi}(x,y,\tau), \tag{26}$$

$$(\alpha_0\sigma_0 - \mathrm{i}v_F\partial_y\sigma_x - \mathrm{i}v_F\partial_x\sigma_y + m_{K'}\sigma_z)\boldsymbol{\psi}(x,y,\tau) = \mathrm{i}\partial_\tau\boldsymbol{\psi}(x,y,\tau). \tag{27}$$

其中，$\tau = 2\pi ct/a$ 是无量纲时间，a 是晶格常数。

D. 边缘态动力学

现在我们讨论畴壁处手性边缘态的动力学。这里我们假设质量项 $m(y)$ 改变其符号。聚焦于 K 谷，我们采用一种试探形式

该试探形式在 x 方向上是平面波，并在 y 方向上是一个未确定函数 $f(y)$:

$$\psi_{\pm}(x,y,\tau) = \mathcal{N} e^{\mathrm{i}q_x x} e^{-\mathrm{i}\alpha_{\pm}(q_x)\tau} f(y) \begin{pmatrix} 1 \\ \pm\mathrm{i} \end{pmatrix}, \tag{28}$$

其中 $\mathcal{N}$ 是归一化常数，而 $\alpha_{\pm}(q_x)$ 是能带能量。根据狄拉克点附近的线性色散，我们有 $\alpha_{\pm}(q_x) = \alpha_0 \pm v_F q_x$。将式 (28) 代入式 (26) 得

$$v_F \partial_y f(y) = \pm m(y) f(y), \tag{29}$$

其解为 $f(y) \propto \exp(\pm \int dy' m(y')/v_F)$。要在畴壁 ($y = 0$) 处局域，波函数必须远离界面衰减，因此指数项只有一种符号在物理上可行。这确保界面处存在一个手性模，这是体边对应的一种体现，其中 $\Delta C = 1$。

通过叠加式 (28) 中的 ψ_-基态，可以构造一般的局域解，即一个波包（ψ_+ 解呈指数增长，因此可以舍弃）。设初始高斯波包局域于 x，其形式为 e^{-x^2/x_0^2}，则其时间演化为

$$\psi(x,y,\tau) = \mathcal{N} e^{-\int_0^y dz\ m(z)/v_F} e^{-\mathrm{i}\alpha_0\tau} \int dq_x\ e^{\mathrm{i}q_x(x+v_F\tau) - q_x^2 x_0^2/4} \begin{pmatrix} 1 \\ -\mathrm{i} \end{pmatrix}. \tag{30}$$

图7 展示了畴壁 $m(y) = t_2 \tanh(y/y_0)$。我们看到，波包仍局域在界面（$y = 0$），并沿负 x 方向手性传播。振幅随时间衰减，是该系统具有非厄米特性的标志。

V. 讨论

我们建立了一个量子光学框架，用于计算由长程辐射相互作用主导的原子晶格的能带结构和拓扑性质。我们的方法首先推导出一个有效的非厄米双能带哈密顿量，该哈密顿量决定了单激发子空间内系统的能带结构和动力学。

本研究的一项核心成果是证实了狄拉克点的存在，并揭示了共振附近有效狄拉克动力学的出现。我们强调，这一发现

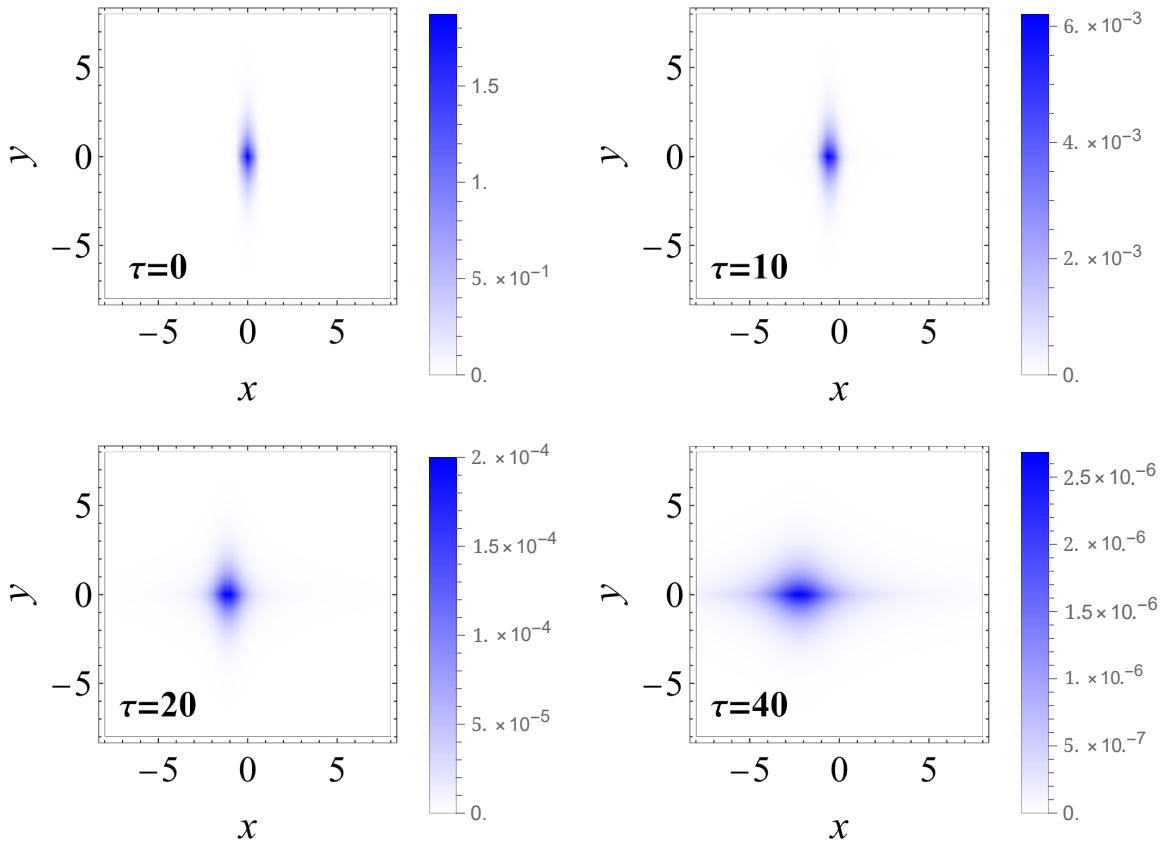


图 7. 蜂窝晶格中边缘态的动力学。质量项取为$m(y) = t_2 \tanh(y/y_0)$，其中 $t_2 = 5 \times 10^{-3}$ 和 $y_0 = 0.1$，因此畴壁沿着 $y = 0$。初始波函数的 x 依赖关系选为 $\psi(x, y, 0) = \mathcal{N} e^{-x^2/x_0^2} e^{-\int_0^y dz\ m_{(z)}/v_F}$对于$x_0 = 0.5$。

并非仅限于本文所研究的特定原子阵列，而是保留底层晶格对称性的系统普遍具有的特征。我们的证明表明，狄拉克点的形成以及具有均匀费米速度的狄拉克方程的适用性，均由对称性约束决定，而与耦合的具体细节无关。因此，即使在场模受到空间限制的情形下，例如波导量子电动力学中，我们的结果也适用于各种不同场景。只要晶格对称性未被破坏，无论相互作用是短程还是长程、是厄米还是非厄米，有效狄拉克物理都会持续存在。

我们分析了一维 SSH 模型和二维蜂窝模型的复能带结构，并观察到狄拉克锥的形成。通过推导相应的连续模型

在狄拉克点附近，我们得到了具有各向同性费米速度特征的狄拉克方程。与厄米情形不同，费米速度变为复数，这一特征与非厄米皮肤效应有关。此外，我们通过计算这些系统的拓扑不变量和边缘态，研究了它们的拓扑相。体不变量与畴壁处局域态数量之间的关系，明确验证了这一非厄米情形下的体边对应。

最后，我们着重指出未来研究中若干有前景的方向。首先，我们目前的研究聚焦于单激发态。然而，当系统中存在多个激发时，探索其多体物理仍是一个引人关注的开放问题[50, 51]。其次，尽管我们假设原子固定在晶格位点上，但实验是在原子运动存在的条件下进行的。研究这种运动对系统能带结构和拓扑性质的影响将很有意义 [52]。最后，我们将研究范围限定于双能带模型。对于具有两个以上能级的原子，或包含多个原子的原胞，所涉及的多能带模型的推广也是值得进一步研究的课题 [53, 54]。

致谢

感谢 P. Wang、P. de Maat 和 T. Hong 提供有益的讨论。

数据可用性

如有合理请求，可向作者获取数据和代码。

附录 A：一维晶格求和

在本　节中，我们计算定义为如下形式的一维晶格求和 $S_{\pm}(\alpha,\beta)$

$$S_{\pm}(\alpha,\boldsymbol{\beta})=\sum_{\mathbf{R}_j}G(|\mathbf{R}_j\pm\boldsymbol{\delta}|;2\pi\alpha)e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}_j}, \tag{A1}$$

其中格林函数表示为

$$G(\mathbf{r};k)=\frac{1}{2\pi^2r^2}-\frac{\mathrm{i}k}{4\pi^2r}\left[e^{\mathrm{i}kr}E_1(\mathrm{i}kr)-e^{-\mathrm{i}kr}E_1(-\mathrm{i}kr)\right]+\frac{ke^{\mathrm{i}kr}}{2\pi r}. \tag{A2}$$

这里，$\mathbf{R}j$ 表示晶格矢量，$\boldsymbol{\delta}$ 表示 A 与 B子晶格之间的位移矢量，而 $\boldsymbol{\beta}$ 表示限制在第一布里渊区内的晶体动量。

我们将该求和分解为三项：

$$S_{\pm}(\alpha,\beta) = S_{\pm 1}(\alpha,\beta) + S_{\pm 2}(\alpha,\beta) + S_{\pm 3}(\alpha,\beta). \tag{A3}$$

这些分量定义如下：

$$S_{\pm 1}(\alpha,\beta) = \frac{1}{2\pi^2}\sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{e^{-2\mathrm{i}\pi\beta n}}{|n\pm\delta|^2}, \tag{A4a}$$

$$S_{\pm 2}(\alpha,\beta) = \frac{\alpha}{2\pi\mathrm{i}}\sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{e^{-2\mathrm{i}\pi\beta n}}{|n\pm\delta|}\left[e^{2\mathrm{i}\pi\alpha|n\pm\delta|}E_1(2\mathrm{i}\pi\alpha\,|n\pm\delta|) - (\alpha\to-\alpha)\right], \tag{A4b}$$

$$S_{\pm 3}(\alpha,\beta) = \alpha\sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{e^{2\mathrm{i}\pi\alpha|n\pm\delta|}}{|n\pm\delta|}e^{-2\mathrm{i}\pi\beta n}. \tag{A4c}$$

下面，我们重点计算带有“+”号的求和。带有“–”号的结果可通过代换 $\delta\to-\delta$ 获得。

1. S_{1+} **一维**

计算晶格求和的一种便捷方法是泊松求和公式。我们首先计算 $S_{1+}(\alpha,\beta)$ 中被加数的傅里叶变换：

$$\frac{1}{2\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-2\mathrm{i}\pi fx}}{(x+\delta)^2} = -\,|f|\,e^{2\mathrm{i}\delta f}. \tag{A5}$$

应用泊松求和公式，我们得到：

$$S_{1+}(\alpha,\beta) = -e^{2\mathrm{i}\pi q}\sum_{k\in\mathbb{Z}} |k+\beta|\,e^{2\mathrm{i}\pi\delta k}. \tag{A6}$$

上面的级数通过解析延拓计算得出。由此可得

$$S_{1+}(\alpha,\beta) = -e^{2\mathrm{i}\pi q}\left[|\beta| + \beta\frac{1+e^{2\mathrm{i}\pi\delta}}{1-e^{2\mathrm{i}\pi\delta}} + \frac{2e^{2\mathrm{i}\pi\delta}}{(1-e^{2\mathrm{i}\pi\delta})^2}\right]. \tag{A7}$$

方程（A7）进一步简化为

$$S_{1+}(\alpha,\beta) = e^{2\mathrm{i}\pi q}\left[1/2 + \cot^2(\pi\delta)/2 - |\beta| - \mathrm{i}\beta\cot(\pi\delta)\right]. \tag{A8}$$

也可以采用其他方法，利用复积分计算晶格求和$S_{1+}(\alpha,\ \beta)$，所得结果与式（A8）相同。

2. S_{2+} **在一维中**

沿用计算 $S_{1+}(\alpha,\ \beta)$ 时采用的相同方法，我们应用泊松求和公式来计算 $S_{2+}(\alpha,\ \beta)$。首先计算其被加数的傅里叶变换:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-2\mathrm{i}\pi fx}}{2\pi\mathrm{i}\,|x|}\left[e^{2\mathrm{i}\pi\alpha|x|}E_1(2\mathrm{i}\pi\alpha\,|x|)-e^{-2\mathrm{i}\pi\alpha|x|}E_1(-2\mathrm{i}\pi\alpha\,|x|)\right]=\gamma_{\mathrm{E}}+\ln(\alpha+|f|), \tag{A9}$$

其中 γ_{E} 表示欧拉常数。应用泊松求和公式可得

$$S_{2+}(\alpha,\beta)=\alpha e^{2\mathrm{i}\pi q}\left[\gamma_{\mathrm{E}}\sum_{k\in\mathbb{Z}}e^{2\mathrm{i}\pi\delta k}+\sum_{k\in\mathbb{Z}}\ln(\alpha+|\beta+k|)e^{2\mathrm{i}\pi\delta k}\right]. \tag{A10}$$

当 δ 不是整数时，第一个求和项为零。第二个求和项可用 Lerch 超越函数 $\Phi(z,s,a)=\sum_{n=0}^{\infty}z^n/(n+a)^s$ 表示，利用恒等式

$$\sum_{k=1}^{\infty}\ln(x+k)e^{2\mathrm{i}\pi\delta k}=-e^{2\mathrm{i}\pi\delta}\partial_2\Phi(e^{2\mathrm{i}\pi\delta},0,x+1), \tag{A11}$$

该式可以进行适当的解析延拓。这里的偏导数是对 Lerch 超越函数的第二个自变量求导。将此恒等式代入式（A10），得到

$$S_{2+}(\alpha,\beta)=\alpha e^{2\mathrm{i}\pi q}\ln(\alpha+|\beta|)-\alpha e^{2\mathrm{i}\pi q}\left[e^{2\mathrm{i}\pi\delta}\partial_2\Phi(e^{2\mathrm{i}\pi\delta},0,1+\alpha+\beta)+(\delta,\beta)\to(-\delta,-\beta)\right]. \tag{A12}$$

3. S_{3+} **在一维中**

我们通过将求和拆分为若干部分，直接计算 S_{3+}：

$$S_{3+}(\alpha,\beta)=\alpha\left[\frac{e^{2\mathrm{i}\pi\alpha|\delta|}}{|\delta|}+e^{2\mathrm{i}\pi\delta\alpha}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{2\mathrm{i}\pi(\alpha-\beta)n}}{n+\delta}+e^{-2\mathrm{i}\pi\delta\alpha}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{2\mathrm{i}\pi(\alpha+\beta)n}}{n-\delta}\right]. \tag{A13}$$

根据 Lerch 超越函数的定义，我们有

$$S_{3+}(\alpha,\beta)=\alpha\frac{e^{2\mathrm{i}\pi\alpha|\delta|}}{|\delta|}+\alpha\left[e^{2\mathrm{i}\pi(\alpha(1+\delta)-\beta)}\Phi(e^{2\mathrm{i}\pi(\alpha-\beta)},1,1+\delta)+(\delta,\beta)\to(-\delta,-\beta)\right]. \tag{A14}$$

4. 一维晶格和的结果

最后，结合式（A8）、（A12）和（A14），利用式（A3）中的分解，可得到晶格求和 $S_+(\alpha,\ \beta)$：

$$\begin{aligned}
&S_+(\alpha,\beta)\\
&= e^{2\mathrm{i}\pi q}\left[1/2+\cot^2(\pi\delta)/2-|\beta|-\mathrm{i}\beta\cot(\pi\delta)\right]+\alpha e^{2\mathrm{i}\pi q}\ln(\alpha+|\beta|)+\alpha e^{2\mathrm{i}\pi\alpha\delta}/\delta\\
&-\alpha e^{2\mathrm{i}\pi q}\left[e^{2\mathrm{i}\pi\delta}\partial_2\Phi(e^{2\mathrm{i}\pi\delta},0,1+\alpha+\beta)+e^{-2\mathrm{i}\pi\delta}\partial_2\Phi(e^{-2\mathrm{i}\pi\delta},0,1+\alpha-\beta)\right]\\
&+\alpha e^{2\mathrm{i}\pi\alpha}\left[e^{2\mathrm{i}\pi(\delta\alpha-\beta)}\Phi(e^{2\mathrm{i}\pi(\alpha-\beta)},1,1+\delta)+e^{-2\mathrm{i}\pi(\delta\alpha-\beta)}\Phi(e^{2\mathrm{i}\pi(\alpha+\beta)},1,1-\delta)\right].
\end{aligned}\tag{A15}$$

.....的表达式 S_0 通过从方程（ $n=0$ A15）中减去发散的 $n=0$ 项，然后取极限 $\delta\to 0$得到。由此可得

$$\begin{aligned}
S_0(\alpha,\beta)=&B_2(|\beta|)-2\alpha^2+2\alpha^2\ln\alpha+\alpha\ln(2\pi(\alpha+|\beta|))-\alpha\ln\Gamma(1+\alpha+\beta)\\
&-\alpha\ln\Gamma(1+\alpha-\beta)-\alpha\ln(1-e^{2\mathrm{i}\pi(\alpha+\beta)})-\alpha\ln(1-e^{2\mathrm{i}\pi(\alpha-\beta)}),
\end{aligned}\tag{A16}$$

其中 $B_2(x)$ 是二阶伯努利多项式，$\ln\Gamma(x)$ 是对数伽马函数。我们已通过数值计算验证了方程（A15）和（A16）。

附录B：二维晶格和

与一维情形一样，我们将二维晶格和分解为三项：

$$S_{\pm1}(\alpha,\boldsymbol{\beta})=\frac{1}{2\pi^2}\sum_{\mathbf{R}}\frac{e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}}{(\mathbf{R}\pm\boldsymbol{\delta})^2}\tag{B1a}$$

$$S_{\pm2}(\alpha,\boldsymbol{\beta})=\frac{\alpha}{2\pi\mathrm{i}}\sum_{\mathbf{R}}\frac{e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}}{|\mathbf{R}\pm\boldsymbol{\delta}|}\left[e^{2\mathrm{i}\pi\alpha|\mathbf{R}\pm\boldsymbol{\delta}|}E_1(2\mathrm{i}\pi\alpha\,|\mathbf{R}\pm\boldsymbol{\delta}|)-(\alpha\to-\alpha)\right],\tag{B1b}$$

$$S_{\pm3}(\alpha,\boldsymbol{\beta})=\alpha\sum_{\mathbf{R}}\frac{e^{2\mathrm{i}\pi\alpha|\mathbf{R}\pm\boldsymbol{\delta}|}}{|\mathbf{R}\pm\boldsymbol{\delta}|}e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}.\tag{B1c}$$

这里将晶格点定义为 $\mathbf{R}=j_1\mathbf{a}_1+j_2\mathbf{a}_2$，其中 $(j_1,j_2\in\mathbb{Z})$，构成一个六角晶格。晶格的基矢为 $\mathbf{a}_1=\left(\sqrt{3}/2,-1/2\right)$ 和$\mathbf{a}_2=\left(-\sqrt{3}/2,-1/2\right)$。晶体动量定义为 $\boldsymbol{\beta}=\beta_1\mathbf{b}_1+\beta_2\mathbf{b}_2,$，并限制在第一布里渊区内。倒格子基矢为 $\mathbf{b}_1=\left(1/\sqrt{3},1\right)$ 和$\mathbf{b}_2=\left(1/\sqrt{3},-1\right)$。矢量 $\boldsymbol{\delta}=\delta_1\mathbf{a}_1+\delta_2\mathbf{a}_2$ 表示同一晶胞内A 和 B 子晶格原子之间的位移。

1. S_{1+} **二维**

我们首先指出以下积分恒等式

$$\int_0^1 dt\ t^{x-1} = \frac{1}{x}. \tag{B2}$$

将式（B2）代入式（ S_1 中B1）的定义，我们得到

$$S_{1+}(\alpha, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^1 dt\ t^{\boldsymbol{\delta}^2-1}\sum_{\mathbf{R}} t^{\mathbf{R}^2+2\mathbf{R}\cdot\boldsymbol{\delta}} e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}. \tag{B3}$$

现在将求和显式写出：

$$\begin{aligned}&\sum_{\mathbf{R}} t^{\mathbf{R}^2+2\mathbf{R}\cdot\boldsymbol{\delta}} e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}\\ &= \sum_{(j_1,j_2)\in\mathbb{Z}^2} t^{\frac{3}{4}(j_1-j_2)^2+\frac{1}{4}(j_1+j_2)^2+\sqrt{3}\delta_x(j_1-j_2)+\delta_y(j_1+j_2)} e^{-\mathrm{i}\pi\left[\sqrt{3}(j_1-j_2)\beta_x+(j_1+j_2)\beta_y\right]},\end{aligned} \tag{B4}$$

这里我们定义变量 $\delta_x = \sqrt{3}(\delta_1-\delta_2)/2$、 $\delta_y = -(\delta_1+\delta_2)/2$ 和 $\beta_x = (\beta_1+\beta_2)/\sqrt{3}$, $\beta_y = \beta_1-\beta_2$.

我们注意到 j_1-j_2 和 j_1+j_2 具有相同的奇偶性（它们要么都是偶数，要么都是奇数）。因此，我们将晶格求和分成两部分。对于偶数情形，我们进行代换 $(j_1-j_2,\ j_1+j_2) \to (2n_1,\ 2n_2)$；对于奇数情形，我们使用 $(j_1-j_2,\ j_1+j_2) \to (2n_1+1,\ 2n_2+1)$。因此，我们得到

$$\sum_{\mathbf{R}} t^{\mathbf{R}^2+2\mathbf{R}\cdot\boldsymbol{\delta}} e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{n_1,n_2} t^{\mathbf{n}^2+2\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\delta}} e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{n}} + (n_1,n_2)\to(n_1+1/2, n_2+1/2), \tag{B5}$$

其中我们定义了 $\mathbf{n} = (\sqrt{3}n_1,\ n_2)$，其中 $n_1,\ n_2 \in \mathbb{Z}$。

注意，第二类和第三类雅可比 theta 函数定义为 $\vartheta_2(z,\ t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} t^{(n+\frac{1}{2})^2} e^{(2n+1)\mathrm{i}z}$和 $\vartheta_3(z,\ t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} t^{n^2} e^{2n\mathrm{i}z}$。因此，式（B5）的右端可以用雅可比 theta 函数表示为

$$\begin{aligned}&\sum_{\mathbf{n}} t^{\mathbf{n}^2+2\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\delta}} e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{n}} + (n_1,n_2)\to(n_1+1/2, n_2+1/2)\\ &= \vartheta_3(\sqrt{3}(\pi\beta_x + \mathrm{i}\delta_x\ln t), t^3)\vartheta_3(\pi\beta_y + \mathrm{i}\delta_y\ln t, t) + (\vartheta_3\to\vartheta_2).\end{aligned} \tag{B6}$$

将式（B6）代入式（B3），得到：

$$S_{1+}(\alpha,\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^1 dt\ t^{\boldsymbol{\delta}^2-1}\left[\vartheta_3(\sqrt{3}(\pi\beta_x+\mathrm{i}\delta_x\ln t), t^3)\vartheta_3(\pi\beta_y+\mathrm{i}\delta_y\ln t, t) + (\vartheta_3\to\vartheta_2)\right]. \tag{B7}$$

2. S_{2+} **二维**

$S_{2+}(\alpha,\ \boldsymbol{\beta})$ 的计算与 $S_{1-}(\alpha,\ \boldsymbol{\beta})$ 的计算类似，但需要一个不同的辅助积分，以便用θ函数表示被加数。该积分为

$$-\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_0^1 dt\ \frac{e^{-\frac{\pi^2\alpha^2}{\ln t}}}{\sqrt{-\ln t}}\mathrm{erfc}(\frac{\pi\alpha}{\sqrt{-\ln t}})t^{x^2-1}=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}x}\left[e^{2\mathrm{i}\pi\alpha x}e_1(2\mathrm{i}\pi\alpha x)-(\alpha\to-\alpha)\right]. \tag{B8}$$

对右侧关于变量α 应用梅林变换，即可验证这一恒等式。按照计算 $S_{1+}(\alpha,\boldsymbol{\beta})$ 时的相同步骤，我们得到 $S_{2+}(\alpha,\boldsymbol{\beta})$ 的表达式：

$$\begin{aligned}S_{2+}(\alpha,\boldsymbol{\beta})=&-\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\int_0^1 dt\ \frac{e^{-\frac{\pi^2\alpha^2}{\ln t}}}{\sqrt{-\ln t}}\mathrm{erfc}(\frac{\pi\alpha}{\sqrt{-\ln t}})t^{\boldsymbol{\delta}^2-1}\times\\&\left[\vartheta_3(\sqrt{3}(\pi\beta_x+\mathrm{i}\delta_x\ln t),t^3)\vartheta_3(\pi\beta_y+\mathrm{i}\delta_y\ln t,t)+(\vartheta_3\to\vartheta_2)\right].\end{aligned} \tag{B9}$$

3. S_{3+} **二维**

我们注意到，最后一项可表示为以下埃瓦尔德积分表示 [55]：

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{(0)}^{\infty}\frac{du}{u^2}e^{\pi^2\alpha^2u^2-x^2/u^2}=\frac{e^{2\mathrm{i}\pi\alpha x}}{x}, \tag{B10}$$

这里的积分沿复平面中的一条轮廓路径进行选取，以确保积分收敛[56]。因此，$S_{3+}(\alpha,\boldsymbol{\beta})$ 可表示为

$$\begin{aligned}S_{3+}(\alpha,\boldsymbol{\beta})=&\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{(0)}^{\infty}\frac{du}{u^2}e^{\pi^2\alpha^2u^2-\boldsymbol{\delta}^2/u^2}\\&\times\left[\vartheta_3(\sqrt{3}(\pi\beta_x-\mathrm{i}\delta_x/u^2),e^{-3/u^2})\vartheta_3(\pi\beta_y-\mathrm{i}\delta_y/u^2,e^{-1/u^2})+(\vartheta_3\to\vartheta_2)\right].\end{aligned} \tag{B11}$$

4. 用θ函数表示的结果

综合式（B7）、（B9）和（B11）中给出的结果，我们得到S_+的最终结果：

$$\begin{aligned}&S_+(\alpha,\boldsymbol{\beta})=\\&\int_0^1 dt\left(\frac{1}{2\pi^2}-\frac{\alpha e^{-\frac{\pi^2\alpha^2}{\ln t}}}{2\sqrt{-\pi\ln t}}\mathrm{erfc}(\frac{\pi\alpha}{\sqrt{-\ln t}})\right)t^{\boldsymbol{\delta}^2-1}\vartheta_2(\sqrt{3}(\pi\beta_x+\mathrm{i}\delta_x\ln t),t^3)\vartheta_2(\pi\beta_y+\mathrm{i}\delta_y\ln t,t)\\&+\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{(0)}^{\infty}\frac{du}{u^2}e^{\pi^2\alpha^2u^2-\boldsymbol{\delta}^2/u^2}\vartheta_2(\sqrt{3}(\pi\beta_x-\mathrm{i}\delta_x/u^2),e^{-\frac{3}{u^2}})\vartheta_2(\pi\beta_y-\mathrm{i}\delta_y/u^2,e^{-\frac{1}{u^2}})+(\vartheta_2\to\vartheta_3).\end{aligned} \tag{B12}$$

对于六角晶格，我们令 $\delta_x = -1/\sqrt{3}$ 和 $\delta_y = 0$。

通过将 $\boldsymbol{\delta}$ 替换为 $-\boldsymbol{\delta}$，可得到 S_- 的表达式；而 S_0 的表达式则是从 S_+ 中减去发散的 $\mathbf{R} = 0$ 项，再取极限 $\boldsymbol{\delta} \to 0$ 得到的，结果为

$$
\begin{aligned}
&S_0(\alpha, \boldsymbol{\beta}) = \\
&\int_0^1 dt \left(\frac{1}{2\pi^2 t} - \frac{\alpha e^{-\frac{\pi^2\alpha^2}{\ln t}}}{2t\sqrt{-\pi \ln t}} \mathrm{erfc}(\frac{\pi\alpha}{\sqrt{-\ln t}}) \right) [\vartheta_2(\sqrt{3}\pi\beta_x, t^3)\vartheta_2(\pi\beta_y, t) - \frac{1}{2}] \\
&+ \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^{\infty} \frac{du}{u^2} e^{\pi^2\alpha^2u^2} [\vartheta_2(\sqrt{3}\pi\beta_x, e^{-\frac{3}{u^2}})\vartheta_2(\pi\beta_y, e^{-\frac{1}{u^2}}) - \frac{1}{2}] + (\vartheta_2 \to \vartheta_3).
\end{aligned} \tag{B13}
$$

式（B12）和（B13）被积函数中的第一项收敛迅速且精确。相比之下，第二项在 $u = 0$ 和 $u = \infty$附近剧烈振荡，给数值计算带来困难。下一节将推导一个数值上高效且稳定的公式，用于计算 S_+ 和 S_0表达式中的最后一项。

5. 埃瓦尔德求和法

这里我们使用埃瓦尔德求和法 [55, 57, 58]，推导晶格求和的高效且稳定的数值表达式。首先写作

$$
\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^{\infty} \frac{du}{u^2} e^{\pi^2\alpha^2u^2 - x^2/u^2} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\int_{(0)}^{\eta} + \int_{\eta}^{\infty} \right) \frac{du}{u^2} e^{\pi^2\alpha^2u^2 - x^2/u^2}. \tag{B14}
$$

关键思路是将 u 上的积分区间分成两部分：一部分涵盖较小的 u 值，另一部分涵盖较大的 u 值。前者在实空间中收敛迅速，后者则在傅里叶空间中收敛迅速。因此，晶格求和 S_{3+} 可分解为

$$
S^r_{3+}(\alpha, \boldsymbol{\beta}) = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{R}} \int_{(0)}^{\eta} \frac{du}{u^2} e^{\pi^2\alpha^2u^2 - |\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}|^2/u^2} e^{-2i\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}, \tag{B15a}
$$

$$
S^m_{3+}(\alpha, \boldsymbol{\beta}) = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{R}} \int_{\eta}^{\infty} \frac{du}{u^2} e^{\pi^2\alpha^2u^2 - |\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}|^2/u^2} e^{-2i\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}, \tag{B15b}
$$

其中，η 是一个参数。

对于 S^r_{3+}，积分可以显式求出：

$$
\int_0^{\eta} \frac{du}{u^2} e^{\pi^2\alpha^2u^2 - x^2/u^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4x} \left[e^{2i\pi\alpha x} \mathrm{erfc}(\frac{x}{\eta} + i\pi\alpha\eta) + e^{-2i\pi\alpha x} \mathrm{erfc}(\frac{x}{\eta} - i\pi\alpha\eta) \right]. \tag{B16}
$$

将式（B16）代入式（B15），我们可以将 S^r_{3+} 表示为

$$S^r_{3+}(\alpha,\boldsymbol{\beta})=\frac{\alpha}{2}\sum_{\mathbf{R}}\frac{e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}}{|\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}|}\left[e^{2\mathrm{i}\pi\alpha|\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}|}\mathrm{erfc}(\frac{|\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}|}{\eta}+\mathrm{i}\pi\alpha\eta)+(\alpha\to-\alpha)\right]. \tag{B17}$$

另一方面，$S^m_{3+}(\alpha,\boldsymbol{\beta})$ 在傅里叶空间中收敛得很快。应用泊松求和公式可得

$$S^m_{3+}(\alpha,\boldsymbol{\beta})=16\alpha\sqrt{\frac{\pi}{3}}\sum_{\mathbf{G}}\int_{\eta}^{\infty}du\ e^{\pi^2u^2\left(\alpha^2-|\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G}|^2\right)+2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\delta}\cdot(\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G})}. \tag{B18}$$

这里 $\mathbf{G}=m\mathbf{b}_1+n\mathbf{b}_2$,其中 $m,\ n\in\mathbb{Z}$ 表示蜂窝晶格的倒格矢。式（B18）中的积分与互补误差函数有关，从而得到

$$S^m_{3+}(\alpha,\boldsymbol{\beta})=\frac{8\alpha}{\sqrt{3}}\sum_{\mathbf{G}}\frac{\mathrm{erfc}\left(\pi\eta\sqrt{|\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G}|^2-\alpha^2}\right)}{\sqrt{|\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G}|^2-\alpha^2}}e^{2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\delta}\cdot(\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G})}. \tag{B19}$$

结合式（B17）和（B19）可得 Ewald 求和公式，将其代入式（B12）得到

$$\begin{aligned}
&S_+(\alpha,\boldsymbol{\beta})=\\
&\int_0^1 dt\left(\frac{1}{2\pi^2}-\frac{\alpha e^{-\frac{\pi^2\alpha^2}{\ln t}}}{2\sqrt{-\pi\ln t}}\mathrm{erfc}(\frac{\pi\alpha}{\sqrt{-\ln t}})\right)t^{\boldsymbol{\delta}^2-1}\vartheta_2(\widetilde{\beta}_x(t),t^3)\vartheta_2(\widetilde{\beta}_y(t),t)+(\vartheta_2\leftrightarrow\vartheta_3)\\
&+\frac{\alpha}{2}\sum_{\mathbf{R}}\frac{e^{-2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}}{|\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}|}\left[e^{2\mathrm{i}\pi\alpha|\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}|}\mathrm{erfc}(\frac{|\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}|}{\eta}+\mathrm{i}\pi\alpha\eta)+(\alpha\to-\alpha)\right]\\
&+\frac{8\alpha}{\sqrt{3}}\sum_{\mathbf{G}}\frac{\mathrm{erfc}\left(\pi\eta\sqrt{|\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G}|^2-\alpha^2}\right)}{\sqrt{|\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G}|^2-\alpha^2}}e^{2\mathrm{i}\pi\boldsymbol{\delta}\cdot(\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G})},
\end{aligned} \tag{B20}$$

其中 $\widetilde{\beta}_x(t)=\sqrt{3}(\pi\beta_x+\mathrm{i}\delta_x\ln t)$ 以及 $\widetilde{\beta}_y(t)=\pi\beta_y+\mathrm{i}\delta_y\ln t$。式（B20）中的两个求和均呈指数收敛，因此只需少数几项即可准确计算晶格求和。

$S_0(\alpha,\ \boldsymbol{\beta})$ 的 Ewald 求和表达式通过排除发散项得到

$\mathbf{R} = 0$，该项来自式（B20）中的实空间求和，并取极限 $\boldsymbol{\delta} \to 0$，结果为

$$
\begin{aligned}
&S_0(\alpha, \boldsymbol{\beta}) = \\
&\int_0^1 dt \left(\frac{1}{2\pi^2 t} - \frac{\alpha e^{-\frac{\pi^2\alpha^2}{\ln t}}}{2t\sqrt{-\pi \ln t}} \mathrm{erfc}\left(\frac{\pi\alpha}{\sqrt{-\ln t}}\right) \right) [\vartheta_2(\sqrt{3}\pi\beta_x, t^3)\vartheta_2(\pi\beta_y, t) - \frac{1}{2}] + (\vartheta_2 \leftrightarrow \vartheta_3) \\
&+ \frac{\alpha}{2} \sum_{\mathbf{R}\neq 0} \frac{e^{-2i\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} \left[e^{2i\pi\alpha|\mathbf{R}|} \mathrm{erfc}\left(\frac{|\mathbf{R}|}{\eta} + i\pi\alpha\eta\right) + e^{-2i\pi\alpha|\mathbf{R}|} \mathrm{erfc}\left(\frac{|\mathbf{R}|}{\eta} - i\pi\alpha\eta\right) \right] \\
&+ \frac{8\alpha}{\sqrt{3}} \sum_{\mathbf{G}} \frac{\mathrm{erfc}\left(\pi\eta\sqrt{|\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G}|^2 - \alpha^2}\right)}{\sqrt{|\boldsymbol{\beta}+\mathbf{G}|^2 - \alpha^2}} - \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}\eta} e^{\pi^2\alpha^2\eta^2} - 2i\pi\alpha^2 \mathrm{erfc}(-i\pi\alpha\eta).
\end{aligned} \tag{B21}
$$

尽管参数 η 是任意实常数，但通常会对其进行选择，以平衡实空间求和与倒易空间求和的收敛速率。我们针对B20）和（B21）式中的各项，取 η 的不同取值进行了数值计算，并确认结果如预期那样与这一选择无关。

附录 C：狄拉克锥的形成

这里我们推导晶格求和的对称性，这些对称性对于建立正文中讨论的低能狄拉克哈密顿量至关重要。我们证明，狄拉克锥的形成是晶格对称性的直接结果。

1. 晶格求和的准反演对称性

首先，我们证明狄拉克点 K 和 K'附近晶格求和 $S_{\pm}(\boldsymbol{\beta})$的准反演对称性。我们从晶格求和的定义开始，为简洁起见省略格林函数对能量的依赖：

$$
S_{\pm}(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{\mathbf{R}} G(|\mathbf{R} \pm \boldsymbol{\delta}|) e^{-2i\pi\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{R}}. \tag{C1}
$$

这里，$\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$（其中 m，$n \in \mathbb{Z}$）为实空间晶格矢量。注意以下对称关系：

$$
S_{\pm}(\boldsymbol{\beta}_{K(K')} + q\mathbf{b}_i) = S_{\mp}(\boldsymbol{\beta}_{K(K')} - q\mathbf{b}_i) e^{\pm 2\pi i \boldsymbol{\beta}_{K(K')}\cdot(\boldsymbol{\delta} - \hat{\sigma}_i\boldsymbol{\delta})}. \tag{C2}
$$

此表达式中的各项均相对于图8所示的倒易晶格定义。矢量 $\boldsymbol{\beta}_K$ 和 $\boldsymbol{\beta}_{K'}$ 表示狄拉克点的位置。算符 $\hat{}\sigma_i$

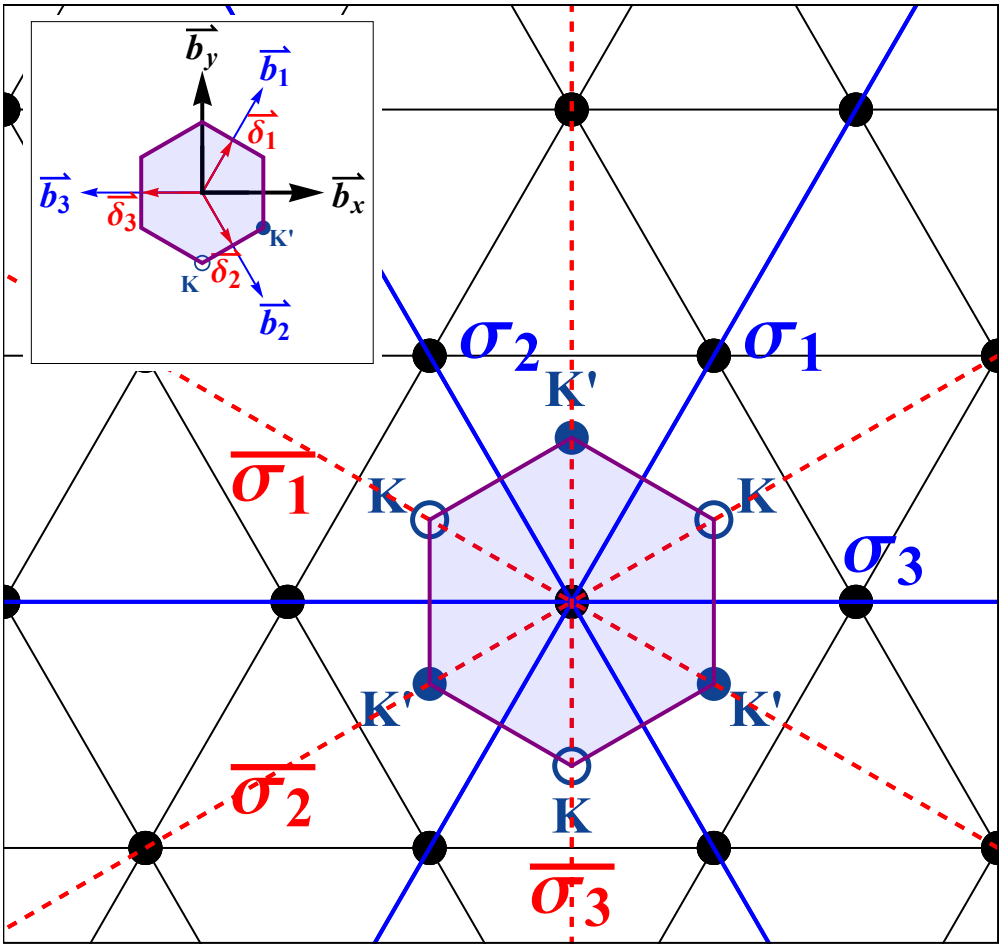


图 8. 蜂窝晶格的倒易晶格。黑点表示倒格点，阴影六边形表示第一布里渊区。图中标出了高对称性狄拉克点，K（空心圆）和 K'（实心圆）。插图显示了倒格子基矢（$\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$）、标准笛卡尔基（$\mathbf{b}_x$，$\mathbf{b}_y$），以及连接两个子晶格的实空间位移矢量（$\boldsymbol{\delta}_i$，红色）。图中还显示了镜面 σ_i 和 $\bar{\sigma}_i$，它们分别平行于和垂直于基矢 $\mathbf{b}_i$。

表示沿平行于倒格子基矢$\mathbf{b}_i$的平面进行镜像反射。此操作是晶格的一种对称性，它交换两个不等价的狄拉克点 $\hat{\sigma}_i\boldsymbol{\beta}_K = \boldsymbol{\beta}_{K'}$；这两个点也通过反演 $\boldsymbol{\beta}_K = -\boldsymbol{\beta}_{K'}$ 相关联。

利用晶格求和的反演对称性，$S_\pm(\boldsymbol{\beta}) = S_\mp(-\boldsymbol{\beta})$，以及关系式$\boldsymbol{\beta}_{K'} = -\boldsymbol{\beta}_K$，方程（C2）中所示的对称性可改写为等价形式：

$$S_\pm(\boldsymbol{\beta}_K + q\mathbf{b}_i) = S_\pm(\boldsymbol{\beta}_{K'} + q\mathbf{b}_i)e^{\pm 2\pi \mathrm{i}\boldsymbol{\beta}_K\cdot(\boldsymbol{\delta}-\hat{\sigma}_i\boldsymbol{\delta})}. \tag{C3}$$

因此，我们着重证明这一等价性。推导过程从将.....开始

晶格求和转换为傅里叶空间，并利用泊松求和公式：C1

$$S_{\pm}(\boldsymbol{\beta}) = C \sum_{\mathbf{Q}\in\Lambda^*} \widetilde{G}(|\mathbf{Q}+\boldsymbol{\beta}|) e^{\pm 2\pi \mathrm{i}(\mathbf{Q}+\boldsymbol{\beta})\cdot\boldsymbol{\delta}}. \tag{C4}$$

这里， C 是与布里渊区体积相关的常数， Λ^* 是倒易晶格， $\widetilde{}$和 G 表示 G的傅里叶变换。在点 $\boldsymbol{\beta}$ $=\boldsymbol{\beta}_{K'}+q\mathbf{b}_i$ 附近取此表达式的值，可得

$$S_{\pm}(\boldsymbol{\beta}_{K'}+q\mathbf{b}_i) = C \sum_{\mathbf{Q}\in\Lambda^*} \widetilde{G}(|\mathbf{Q}+\boldsymbol{\beta}_{K'}+q\mathbf{b}_i|) e^{\pm 2\pi \mathrm{i}(\mathbf{Q}+\boldsymbol{\beta}_{K'}+q\mathbf{b}_i)\cdot\boldsymbol{\delta}}. \tag{C5}$$

现在我们应用镜面对称性$\hat{}\sigma_i$。由于这个算符保持内积不变（$\mathbf{x}\cdot\mathbf{y} = (\hat{}\sigma_i\mathbf{x})\cdot(\hat{}\sigma_i\mathbf{y})$），我们可以变换求和中的各项：

$$S_{\pm}(\boldsymbol{\beta}_{K'}+q\mathbf{b}_i) = C \sum_{\mathbf{Q}\in\Lambda^*} \widetilde{G}(|\hat{\sigma}_i(\mathbf{Q}+\boldsymbol{\beta}_{K'}+q\mathbf{b}_i)|) e^{\pm 2\pi \mathrm{i}[\hat{\sigma}_i(\mathbf{Q}+\boldsymbol{\beta}_{K'}+q\mathbf{b}_i)]\cdot(\hat{\sigma}_i\boldsymbol{\delta})}. \tag{C6}$$

算符$\hat{}\sigma_i$ 对矢量的作用如下：它将倒易晶格映射到自身（$\hat{}\sigma_i\mathbf{Q} = \mathbf{Q}' \in \Lambda^*$），交换狄拉克点（$\hat{}\sigma_i\boldsymbol{\beta}_{K'} = \boldsymbol{\beta}_K$），并保持平行基矢不变（$\hat{}\sigma_i\mathbf{b}_i = \mathbf{b}_i$）。利用这些性质可得

$$S_{\pm}(\boldsymbol{\beta}_{K'}+q\mathbf{b}_i) = C \sum_{\mathbf{Q}'\in\Lambda^*} \widetilde{G}(|\mathbf{Q}'+\boldsymbol{\beta}_K+q\mathbf{b}_i|) e^{\pm 2\pi \mathrm{i}(\mathbf{Q}'+\boldsymbol{\beta}_K+q\mathbf{b}_i)\cdot\hat{\sigma}_i\boldsymbol{\delta}}. \tag{C7}$$

此外，矢量 $\boldsymbol{\delta}$ 连接一个 A 子晶格格点和一个 B 子晶格格点。镜像操作作为晶格的对称操作，必须将这个 B 格点映射到另一个 B 格点。这可以表示为，对于某个实空间晶格矢量 $\mathbf{R} \in \Lambda$，有$\hat{}\sigma_i\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{\delta} + \mathbf{R}$。这意味着涉及$\mathbf{Q}'$的相位因子可以大幅简化：

$$e^{2\pi \mathrm{i}\mathbf{Q}'\cdot\hat{\sigma}_i\boldsymbol{\delta}} = e^{2\pi \mathrm{i}(\mathbf{Q}'\cdot\boldsymbol{\delta}+\mathbf{Q}'\cdot\mathbf{R})} = e^{2\pi \mathrm{i}\mathbf{Q}'\cdot\boldsymbol{\delta}}, \tag{C8}$$

因为 $\mathbf{Q}'\cdot\mathbf{R}$ 始终为整数。将式（C8）代入式（C7，并重新整理剩余的相位因子，可得：

$$\begin{aligned} S_{\pm}(\boldsymbol{\beta}_{K'}+q\mathbf{b}_i) &= \left[c \sum_{\mathbf{Q}'\in\Lambda^*} \widetilde{G}(|\mathbf{Q}'+\boldsymbol{\beta}_K+q\mathbf{b}_i|) e^{\pm 2\pi \mathrm{i}(\mathbf{Q}'+\boldsymbol{\beta}_K+q\mathbf{b}_i)\cdot\boldsymbol{\delta}} \right] e^{\mp 2\pi \mathrm{i}(\boldsymbol{\beta}_K\cdot\boldsymbol{\delta}-\boldsymbol{\beta}_K\cdot(\hat{\sigma}_i\boldsymbol{\delta}))}, \\ &= S_{\pm}(\boldsymbol{\beta}_K+q\mathbf{b}_i) e^{\mp 2\pi \mathrm{i}(\boldsymbol{\beta}_K-\hat{\sigma}_i\boldsymbol{\beta}_K)\cdot\boldsymbol{\delta}}. \end{aligned} \tag{C9}$$

这一结果恰好就是公式（C3）中的关系。

对于正文中采用并在图8中展示的特定基矢选择，公式（C2）中的一般对称关系可明确写为：

$$S_+(\boldsymbol{\beta}_K + q\mathbf{b}_1) = S_-(\boldsymbol{\beta}_K - q\mathbf{b}_1)e^{-\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi}, \tag{C10a}$$

$$S_+(\boldsymbol{\beta}_K + q\mathbf{b}_2) = S_-(\boldsymbol{\beta}_K - q\mathbf{b}_2)e^{\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi}, \tag{C10b}$$

$$S_+(\boldsymbol{\beta}_K + q\mathbf{b}_3) = S_-(\boldsymbol{\beta}_K - q\mathbf{b}_3). \tag{C10c}$$

利用式（B20）即可轻松验证这些关系。

最后，我们强调这一结果的普适性。证明仅依赖晶格对称性，并不假设各向同性——也就是说，并不要求格林函数具有旋转不变形式 $G(|\mathbf{r}|)$。因此，即使存在各向异性交互作用，只要这些交互作用遵循蜂窝晶格的点群对称性，准反演对称性仍然成立。

2. 狄拉克点处带隙闭合

式（C10）中的准反演对称性直接意味着哈密顿量的非对角分量在狄拉克点处为零。通过在极限 $S_+(\boldsymbol{\beta}_K$下对三个对称方向取平均，可以确定 $q \to 0$：

$$\begin{aligned} S_+(\boldsymbol{\beta}_K) &= \frac{1}{3}\lim_{q\to 0}\left[S_+(\boldsymbol{\beta}_K + q\mathbf{b}_1) + S_+(\boldsymbol{\beta}_K + q\mathbf{b}_2) + S_+(\boldsymbol{\beta}_K + q\mathbf{b}_3)\right] \\ &= \frac{1}{3}S_-(\boldsymbol{\beta}_K)\left(e^{-\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi} + e^{\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi} + 1\right) = 0. \end{aligned} \tag{C11}$$

同样的论证表明，$S_-(\boldsymbol{\beta}_K) = 0$。根据式（10）中的定义，立即可得 $h_1(\boldsymbol{\beta}_{K(K')}) = h_2(\boldsymbol{\beta}_{K(K')}) = 0$。因此，对于保持手征对称性的系统（即当 $h_3 = 0$ 时），两个能带在狄拉克点处简并，$\alpha_\pm(\boldsymbol{\beta}_{K(K')}) = h_0(\boldsymbol{\beta}_{K(K')})$，这证实带隙必然闭合。

3. 费米速度是各向同性的

最后，作为准反演对称性的一个应用，我们证明费米速度是各向同性的，并推导出狄拉克点附近哈密顿量的低能展开。我们将动量展开为 $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_K + \mathbf{q}$，其中 $\mathbf{q} = q_x\mathbf{b}_x + q_y\mathbf{b}_y$ 是

		$\frac{\partial h_1}{\partial \beta_x}$	$\frac{\partial h_1}{\partial \beta_y}$	$\frac{\partial h_2}{\partial \beta_x}$	$\frac{\partial h_2}{\partial \beta_y}$
反演 $\boldsymbol{\beta} \to -\boldsymbol{\beta}$	$-$		$-$	$+$	$+$
反射 $\beta_1 \leftrightarrow \beta_2$	$+$		$-$	$+$	$-$

表 I. 哈密顿量导数的对称性。

正交笛卡尔基中 K点的微小偏离。由于 $h_1(\boldsymbol{\beta}_K) = h_2(\boldsymbol{\beta}_K) = 0$，展开从一阶开始：

$$h_1(\boldsymbol{\beta}_K + \mathbf{q}) = \left.\frac{\partial h_1}{\partial \beta_x}\right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_K} q_x + \left.\frac{\partial h_1}{\partial \beta_y}\right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_K} q_y + \mathcal{O}(\mathbf{q}^2), \tag{C12a}$$

$$h_2(\boldsymbol{\beta}_K + \mathbf{q}) = \left.\frac{\partial h_2}{\partial \beta_x}\right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_K} q_x + \left.\frac{\partial h_2}{\partial \beta_y}\right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_K} q_y + \mathcal{O}(\mathbf{q}^2). \tag{C12b}$$

为利用系统的对称性（这些对称性在倒易晶格基 $\{\mathbf{b}_1,\mathbf{b}_2\}$ 中得以自然体现），我们通过基变换将笛卡尔导数与关于 β_1 和β_2 的导数联系起来：

$$\frac{\partial h_1}{\partial \beta_x} = -\frac{\sqrt{3}}{4}\sqrt{\kappa_A \kappa_B}\left[\frac{\partial}{\partial \beta_1}(S_+ + S_-) + \frac{\partial}{\partial \beta_2}(S_+ + S_-)\right], \tag{C13a}$$

$$\frac{\partial h_1}{\partial \beta_y} = -\frac{1}{4}\sqrt{\kappa_A \kappa_B}\left[\frac{\partial}{\partial \beta_1}(S_+ + S_-) - \frac{\partial}{\partial \beta_2}(S_+ + S_-)\right], \tag{C13b}$$

$$\frac{\partial h_2}{\partial \beta_x} = \frac{\sqrt{3}}{4\mathrm{i}}\sqrt{\kappa_A \kappa_B}\left[\frac{\partial}{\partial \beta_1}(S_+ - S_-) + \frac{\partial}{\partial \beta_2}(S_+ - S_-)\right], \tag{C13c}$$

$$\frac{\partial h_2}{\partial \beta_y} = \frac{1}{4\mathrm{i}}\sqrt{\kappa_A \kappa_B}\left[\frac{\partial}{\partial \beta_1}(S_+ - S_-) - \frac{\partial}{\partial \beta_2}(S_+ - S_-)\right]. \tag{C13d}$$

晶格求和的对称性：反演对称性 $S_\pm(\beta_1, \beta_2) = S_\mp(-\beta_1, -\beta_2)$ 和反射对称性 $S_\pm(\beta_1, \beta_2) = S_\pm(\beta_2, \beta_1)$ 对偏导数施加了相应的对称性，汇总于表I。

狄拉克点 K 和 K' 在先反演后反射的复合操作下是不动点，如图 8所示。根据表 I，导数 $\partial h_1/\partial \beta_x$ 和 $\partial h_2/\partial \beta_y$在此复合对称操作下为奇，因此在这些点处必定为零。相比之下， $\partial h_1/\partial \beta_y$ 和 $\partial h_2/\partial \beta_x$ 为偶，通常不为零。

式（C10）所示的准反演对称性规定了两个非零导数之间的一个关键关系，即二者大小相等、符号相反： $-\partial h_1/\partial \beta_y = \partial h_2/\partial \beta_x$ 在狄拉克点处。利用式（C13b）和（C13c）中的定义，可知

这一点　等价于证明晶格 su 的以下恒等式　　ms:

$$\left[e^{-\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi}\frac{\partial}{\partial\beta_1}-e^{\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi}\frac{\partial}{\partial\beta_2}\right]S_+(\beta_1,\beta_2)\Big|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_K}=\left[-e^{\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi}\frac{\partial}{\partial\beta_1}+e^{-\mathrm{i}\frac{2}{3}\pi}\frac{\partial}{\partial\beta_2}\right]S_-(\beta_1,\beta_2)\Big|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_K}. \quad \text{(C14)}$$

通过对式（C10）中给出的准反演对称性求导，并利用以下事实 $S_+(\boldsymbol{\beta}_K) = S_-(\boldsymbol{\beta}_K) = 0$，即可验证这一关系。将这些结果代入一阶展开，便得到低能有效哈密顿量。在 K 点附近，我们有：

$$H(\boldsymbol{\beta}_K+\mathbf{q})=-v_F q_y\sigma_1+v_F q_x\sigma_2+\mathcal{O}(\mathbf{q}^2). \quad \text{(C15)}$$

同理，对于 K' 点，我们得到：

$$H(\boldsymbol{\beta}_{K'}+\mathbf{q})=v_F q_y\sigma_1+v_F q_x\sigma_2+\mathcal{O}(\mathbf{q}^2). \quad \text{(C16)}$$

这些表达式具有二维无质量狄拉克方程的标准形式。这一结果表明，在低能条件下，具有长程相互作用的系统与众所周知的石墨烯紧束缚模型无法区分。

---

[1] M. Aidelsburger、M. Atala、M. Lohse、J. Barreiro、B. Paredes 和 I. Bloch，《物理评论快报》111，185301（2013年）。[2] M. C. Rechtsman、J. M. Zeuner、Y. Plotnik、Y. Lumer、D. Podolsky、F. Dreisow、S. Nolte、M. Segev 和 A. Szameit，《Nature》496，196（2013年）。[3] H. Kim、J. Ma、Y. Zhang、J. Huang、K. Lee、Y.Liu、B. L. Lev、C. Diao、J. Fan、Z. Li、P. Zhang、B. Xu 和 S. Wu，《物理评论快报》119，263601（2017年）。[4] M. Mancini、G. Pagano、G. Santochi、G. Semeghini、E. Vicino、L. Fallani、F. Giazotto、S. Stringari 和 T. Esslinger，《科学》349，588（2015年）。[5] D. Stefanatos、M. Piraud、M. Aidelsburger、J. Schweizer、M. Lohse 和 I. Bloch，《新物理学杂志》20，103004（2018年）。[6] J. L´eonard、S. Kim、J. Kwan、P. Segura、F. Grusdt、C. Repellin、N. Goldman 和 M. Greiner，《Nature》619，495（2023年）。[7] G. Jotzu、M. Messer、R. Hofling、D. Lebrat、F. Hohm、I. Bloch 和 T. Esslinger，《Nature》515，237（2014年）。[8] W.-P. Su、J. R. Schrieffer 和 A. J. Heeger，《物理评论快报》42，1698（1979年）。

[9] N. Cooper、J. Dalibard 和 I. Spielman，《Reviews of Modern Physics》91，015005（2019年）。[10] S. D. Jenkins、J. Stasiuk、T. A. Kennedy、D. Veksler 和 J. Ruostekoski，《物理评论 A》94，013611（2016年）。[11] T. Jacqmin、J. Zeuner、M. Rechtsman、Y. Plotnik、Y. Lumer、D. Podolsky、F. Dreisow、S. Nolte、M. Segev 和 A. Szameit，《物理评论快报》112，116402（2014年）。[12] L. Wu、J. Hu、Z. Shi、X. Jiang、G. Liu、Y. Zeng、Q. Dai 和 S. Wu，《Physical Review B》92，205128（2015年）。[13] T. Perˇc´ık、J. Pˇrinosil、T. ˇSimkov´a、J. Jablonsk´y、J. ˇSt˘ep´anek、I. Jex 和 J. Perina Jr，《物理学杂志：会议系列》2619，012019（2023年）。[14] H. Xue、Q. Wang、B. Zhang 和 Y. Chong，《物理评论快报》124，236403（2020年）。[15] N. Goldman、J. C. Budich 和 P. Zoller，《Nature Physics》12，639（2016年）。[16] A. Savoia、F. Monticone、G. Castaldi、V. Galdi、A. Alu 和 N. Engheta，《物理评论快报》119，053901（2017年）。[17] S. D. Jenkins 和 J. Ruostekoski，《物理评论 A》86，031602（2012年）。[18] J. Perczel、J. Borregaard、D. E. Chang、H. Pichler、S. F. Yelin、P. Zoller 和 M. D. Lukin，《物理评论 A》96，063801（2017年）。[19] J. Perczel、J. Borregaard、D. E. Chang、H. Pichler、S. F. Yelin、P. Zoller 和 M. D. Lukin，《物理评论快报》119，023603（2017年）。[20] J. Perczel、J. Borregaard、D. E. Chang、S. F. Yelin 和 M. D. Lukin，《物理评论快报》124，083603（2020年）。[21] M. Antezza 和 Y. Castin，《物理评论A》80，013816（2009年）。[22] M. Antezza 和 Y. Castin，《物理评论快报》103，123903（2009年）。[23] E. Shahmoon、D. S. Wild、M. D. Lukin 和 S. F. Yelin，《物理评论快报》118，113601（2017年）。[24] J. M. Borwein，《格点和：过去与现在》，150（剑桥大学出版社，2013年）。[25] S. Yao 和 Z. Wang，《物理评论快报》121，086803（2018年）。[26] F. K. Kunst、E. Edvardsson、J. C. Budich 和 E. J. Bergholtz，《物理评论快报》121，026808（2018年）。[27] C. H. Lee 和 R. Thomale，《Physical Review B》99，201103（2019年）。[28] N. Okuma、K. Kawabata、K. Shiozaki 和 M. Sato，《物理评论快报》124，086801（2020年）。

[29] Z. Gong, Y. Ashida, K. Kawabata, K. Takasan, S. Higashikawa, and M. Ueda, 《Physical Review X》8, 031079（2018年）。[30] R. Lin, T. Tai, L. Li, and C. H. Lee, 《《Frontiers of Physics》》18, 53605（2023年）。[31] Y. Tanaka, K. Kawabata, and M. Sato, 《Physical Review B》109, 035118（2024年）。[32] H. Hu, B. Sun, and S. Chen, 《《Science Bulletin》》69, 2428（2024年）。[33] R. Amelio and H. Ammari, 《《Archive for Rational Mechanics and Analysis》》248, 33（2024年）。[34] S. Jana and L. Sirota, 《Physical Review B》108, 085104（2023年）。[35] Y. Ashida, Z. Gong, and M. Ueda, 《Advances in Physics》69, 249（2020年）。[36] Y. Li, C. Liang, C. Wang, C. Lu, and Y.-C. Liu, 《《物理评论快报》》128, 223903（2022年）。[37] H. Shen, B. Zhen, and L. Fu, 《《物理评论快报》》120, 146402（2018年）。[38] K. Ding, C. Fang, and G. Ma, 《《Nature Reviews Physics》》4, 745（2022年）。[39] H. Ammari, S. Barandun, J. Cao, B. Davies, and E. O. Hiltunen, 《《Archive for Rational Me- chanics and Analysis》》248, 33（2024年）。[40] B. Davies, S. Barandun, E. O. Hiltunen, R. V. Craster, and H. Ammari, 《Physical Review B》111, 035109（2025年）。.[41] J. Dalibard, F. Gerbier, G. Juzeli¯unas, and P. Ohberg, 《《Reviews of Modern Physics》》83, 1523（2011年）。[42] C. J. Kennedy, W. Ketterle, W. Ketterle, W. Ketterle, W. Ketterle, W. Ketterle, W. Ketterle, and W. Ketterle, 《《物理评论快报》》115, 265301（2015年）。[43] C.-E. Bardyn, T. Karzig, P. Zoller, and J. Simon, 《《物理评论 A》》93, 023847（2016年）。[44] P. Roushan, C. Neill, A. Megrant, Y. Chen, R. Babbush, R. Barends, B. Campbell, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, et al., 《《Nature Physics》》13, 146（2017年）。[45] J. Kraisler and J. C. Schotland, 《《Journal of Mathematical Physics》》63（2022年）。.[46] J. Dalibard, F. Gerbier, G. Juzeli¯unas, and P. Ohberg, 《Rev. Mod. Phys.》83, 1523（2011年）。[47] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif, and T. Esslinger, 《《Nature》》515, 237（2014年）。[48] N. R. Cooper, J. Dalibard, and I. B. Spielman, 《Rev. Mod. Phys.》91, 015005（2019年）。[49] F. D. M. Haldane, 《Phys. Rev. Lett.》61, 2015（1988年）。[50] P. Moreno-Cardoner and A. Asenjo-Garcia, 《Phys. Rev. A》105, 023716（2022年）。[51] S. Mahmoodian, M. ˇCepulkovskis, S. Das, P. Lodahl, K. Hammerer, and A. S. Sørensen, 《Phys. Rev. Lett.》121, 143601（2018年）。

[52] E. Shahmoon, M. D. Lukin, and S. F. Yelin, 《Phys. Rev. A》101, 063833（2020年）。[53] S. J. Masson and A. Asenjo-Garcia, 《物理评论研究》2, 043213（2020年）。[54] C. D. Parmee and N. R. Cooper, 《物理评论 A》102, 053701（2020年）。[55] G. Beylkin, C. Kurcz, and L. Monz´on, 《《皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学》》464, 3301（2008年）。[56] F. Capolino, D. R. Wilton, and W. A. Johnson, 《《计算物理学杂志》》223, 250（2007年）。[57] C. Linton, 《《工程数学杂志》》33, 377（1998年）。[58] D.Beutel, I.Fernandez-Corbaton,andC. Rockstuhl, 《PhysicalReview A107,013508》（2023年）。