arXiv:2602.03378v1 [quant-ph] 3 Feb 2026

广义狄拉克–克罗尼格–彭尼模型中的 Zak 相位与体边对应

Giuliano Angelone[1], *、Domenico Monaco[1]和 Gabriele Peluso[1]

[1]罗马智慧大学数学系，意大利罗马 Piazzale Aldo Moro 5号，邮编00185

摘要

我们研究了广义狄拉克–克罗尼希–彭尼模型的拓扑性质。该模型是用于描述相对论量子链的连续一维模型。通过调节耦合参数，该模型可涵盖五种 Altland–Zirnbauer–Cartan对称类，其中三种（AIII、BDI 和 D 类）在一维中支持非平庸拓扑相。我们通过谱函数解析刻画哈密顿量的谱性质，并通过数值计算 Zak 相位来探测绝缘相的体拓扑内容。研究结果表明，Zak 相位在 AIII 和 BDI 类中是量子化的，而在 D 类中则呈现非量子化取值，这对其作为连续体系拓扑标记的传统作用提出了挑战。我们还讨论了链截断版本中的体边对应，分析边缘态的出现如何取决于截断位置和边界条件。在 AIII 和 BDI 类中，我们发现 Zak 相位能够有效地作为相对边界拓扑指标探测边缘态，不过这种对应关系对表征截断的参数高度敏感。

1 引言

拓扑已成为凝聚态物理中的重要范式，因为受拓扑保护的边缘态在许多量子技术中具有应用前景，涵盖量子计算机 [1] 到超高能效电子器件。这些器件发热极少，并利用沿拓扑绝缘体边界流动的无耗散电流 [2,3]。从理论角度来看，Kitaev 以及 Ryu、Schnyder、Furusaki 和 Ludwig 的开创性研究，对绝缘体和

*通讯作者：giulianoangelone@gmail.com

AZC 类	T	C	S	$D=1$
A	0	0	0	0
AIII	0	0	1	$\mathbb{Z}$
AI	1	0	0	0
BDI	1	1	1	$\mathbb{Z}$
D	0	1	0	$\mathbb{Z}_2$
DIII	-1	1	1	$\mathbb{Z}_2$
AII	-1	0	0	0
CII	-1	-1	1	$\mathbb{Z}$
C	0	-1	0	0
CI	1	-1	1	0

表 1：维度为 $D=1$ 时拓扑绝缘体和超导体的分类。

超导体 [4–6], 进行了分类，给出了取决于维度和 Altland–Zirnbauer–Cartan (AZC) 对称类 [7,8]中的拓扑相“周期表”。他们的研究结果总结于表1中；本文仅报告其中与维度 $D=1$ 对应的列，因为这与本研究相关。

表1 应按如下方式理解。考虑一条量子链，其由定义在希尔伯特空间 H 上的哈密顿量 $\mathfrak{H}$建模。系统的有限对称性分为以下几类。

- 时间反演对称性 T：一个满足 $T^2 = \pm \mathrm{id}_{\mathfrak{H}}$ 且 $HT = TH$ 的反幺正算子。
- 电荷共轭对称性 C：一个满足$C^2 = \pm \mathrm{id}_{\mathfrak{H}}$ 且 $CH = -HC$ 的反幺正算子。
- 手征对称性 S：一个满足 $S^2 = \mathrm{id}_{\mathfrak{H}}$ 且 $SH = -HS$ 的酉算符。

在表中，当某种对称性不存在（即被破缺）时，对应列的条目标记为 0；标记为 1 或 -1 则表示相应对称性存在，同时也表示相应算子平方后的值。在由此得到的十种对称类中，可与不同哈密顿量相关联的拓扑指标取值属于群 $\{0\}$、$\mathbb{Z}_2$ 或 $\mathbb{Z}$，并且在保持对称类且不关闭表征绝缘相的相关谱隙的哈密顿量连续形变下保持不变。不同的指标值标记了给定对称类中可能存在的不同拓扑量子相。此外，这些体拓扑指标还被认为能够通过著名的体边对应（BBC）预测系统截断版本的边缘性质。

上述整体图景实际上更为微妙。尤其是在存在电荷共轭和/或手征对称性的情况下，拓扑指标并不能为每种量子相赋予绝对标签；相反，它们应作相对解读，并应关联到相间差异 [4, 9]。此外，尽管该表预测了给定对称类中标记不同拓扑相的指标集合，却未提供任何特定模型的具体信息：我们需要找到适当的拓扑标记，以便计算系统指标的具体值。最后，尽管“连续形变”（即同伦）这一概念在依赖有限带截断的晶格紧束缚模型中有明确含义，但在连续模型中，无限维（纤维）希尔伯特空间的存在给拓扑不变量的定义带来了挑战 [10], ，而且连续模型与离散模型之间转换时拓扑性质能否保留也一直受到质疑 [11]。

虽然本文不会全面处理这些问题，但我们提出一个相对论量子链的连续模型，作为探索各种拓扑相及其性质的平台，从而能够在无限维框架下考察这些性质。具体而言，我们在第2 节和附录A中介绍的模型是一个广义狄拉克–克罗尼希–彭尼(gDKP) 哈密顿量 H_U，由一个一维有质量狄拉克算子以及一个 $\mathbb{Z}$周期排列的点相互作用构成，这些相互作用由一个U(2)值耦合 U表征。通过选择不同的耦合矩阵，可以实现平方后等于恒等算子的三种对称性（时间反演、荷共轭和手征对称性），因此，调节点相互作用的“强度”，便可根据表1中的 AZC 标记，探索 A、AI、AIII、D 和 BDI 类；按照周期表，后三类预计具有非平庸拓扑相。一维系统中，孤立谱带最常采用的拓扑标记是*Zak* 相位 [12]，即布洛赫函数沿布里渊区“传输”时获得的贝里相（见附录C）。非平庸拓扑相通常以（相对）Zak 相位模 2π 量子化为特征。当由 H_U 建模的量子链处于绝缘态时，我们会数值计算零能附近能带的 Zak 相位，以探究其拓扑内容（例如其量子化情况）。此项分析将在第3节进行。第4 节则致力于研究量子链的截断版本，并验证体边对应是否成立；体边对应以边界拓扑指标表述，该指标与体能隙中的边缘态数量相关，见式（37）。我们还将详细研究截断方式对这些边缘态的影响，包括截断位置在原胞中的位置，以及链边缘处施加的附加边界条件。

因此，本文研究的 gDKP 模型展现了丰富的拓扑

现象，激发了进一步研究的兴趣，以全面理解一维拓扑物态及其与点相互作用之间的相互作用。

致谢。作者谨此感谢意大利大学与研究部（MUR，意大利大学与研究部）及欧盟下一代在 PRIN 2022AKRC5P“相互作用量子系统：拓扑现象与有效理论”项目和 PNRR–MUR 项目 PE0000023-NQSTI 项目中的资助。D. M. 和 G. P. 的工作还得到了罗马智慧大学 2023 年和 2024 年大学研究项目的支持。

2 广义狄拉克–克罗尼希–彭尼模型

我们考虑一个质量为 $m > 0$ 的相对论性（自旋$_{1\,2}$）量子粒子，它在一维周期排列的点相互作用中运动，这些点相互作用位于格点 $n \in \mathbb{Z}$ 处。我们将讨论范围限定为 $\mathbb{C}^2$ 值旋量旋量

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \phi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} \in L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C}^2),$$

尽管也可以考虑 $\mathbb{C}^4$值旋量 [13–16]。采用狄拉克表示法 并取自然单位制，描述该系统的最一般自伴哈密顿量如下，即 gDKP 模型 –20] （或相对论性狄拉克梳）：对于任意 2×2 酉矩阵$U \in \mathrm{U}(2)$ 令

$$H_U = -\mathrm{i}\sigma_x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\sigma_z \tag{1}$$

定义于

$$\mathfrak{D}(H_U) = \left\{ \Psi \in H^1(\mathbb{R} \setminus \mathbb{Z}; \mathbb{C}^2) : \Psi_-(n) = U\Psi_+(n) \, \forall \, n \in \mathbb{Z} \right\}, \tag{2}$$

其中，$H^1(\Omega)$ 是支集位于 Ω 内且具有平方可积弱导数的函数空间（即第一索博列夫空间），而

$$\Psi_\pm(n) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \phi(n^-) \pm \chi(n^-) \\ \phi(n^+) \mp \chi(n^+) \end{pmatrix}, \tag{3}$$

是包含边界数据的两个向量 $\Psi(x)$，定义在格点处。定义域（2）施加了以下（依赖自旋的）耦合条件

$$\begin{pmatrix} \phi(n^-) - \chi(n^-) \\ \phi(n^+) + \chi(n^+) \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \phi(n^-) + \chi(n^-) \\ \phi(n^+) - \chi(n^+) \end{pmatrix},$$

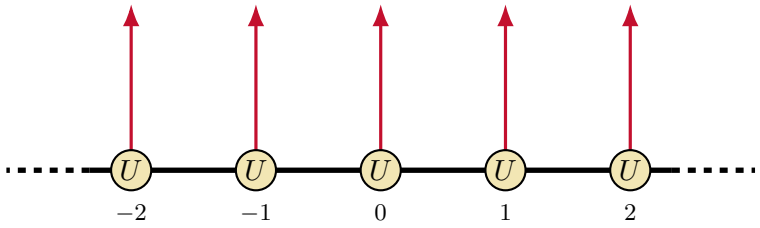

图 1：gDKP 模型示意图。在每个格点$n \in \mathbb{Z}$ 处，都有一个实现 U(2)边界条件$\Psi_-(n) = U\Psi_+(n)$ 的点相互作用。

它们在所有格点处均相同 $n \in \mathbb{Z}$，如图1所示。从物理角度来看，点相互作用充当零程势垒，其微观结构完全由矩阵 U所表征；事实上，上述耦合条件可以通过局域散射矩阵得到清晰的物理解释。

我们强调，这个 U(2)哈密顿量族自然源自亏格指标为 (2，2) 的一维狄拉克算子的冯·诺伊曼扩张理论。耦合矩阵 $U \in$ U(2}的不同选取对应不同的物理系统，而每个耦合条件都实现一种特定类型的点相互作用。哈密顿量 H_U确实与更为熟悉的、具有周期排列狄拉克 δ-势的（奇异）狄拉克算子密切相关，即

$$\tilde{H}_{\boldsymbol{g}} = -\mathrm{i}\sigma_x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\sigma_z + V_{\boldsymbol{g}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} \delta(x-n) \tag{4}$$

其中 $V_{\boldsymbol{g}}$ 是厄米矩阵

$$V_{\boldsymbol{g}} = \begin{pmatrix} g_0+g_3 & g_1-\mathrm{i}g_2 \\ g_1+\mathrm{i}g_2 & g_0-g_3 \end{pmatrix} \tag{5}$$

其中包含耦合参数 $\boldsymbol{g} = (g_0, g_1, g_2, g_3) \in \mathbb{R}^4$。˜的精确定义——它是具有周期点相互作用的自由狄拉克算子最一般的奇异扰动 ——需要将分布理论推广到不连续函数 [21–24], ，这与本文的研究目的无关。这里仅指出，如果 $1 \notin \mathrm{spec}(U)$，即矩阵$U$ 没有等于 1 的本征值，则可以找到一一对应的 *Kurasov* 映射$U \mapsto \boldsymbol{g}(U)$，使得这两个算子的作用相同，也就是说

$$H_U = \tilde{H}_{\boldsymbol{g}(U)},$$

详见附录 A ，了解更多细节。另一方面，如果 $1 \in \mathrm{spec}(U)$，这种对应关系不再是一一对应，并且存在不同的算子 H_U

˜在形式上对应于一个奇异狄拉克算子 $H_{\boldsymbol{g}(U)}$，其耦合可能为无穷大 $\boldsymbol{g}$，也就是说 $\boldsymbol{g}(U) \in (\mathbb{R} \cup \{\infty\})^4$。类似的关系在非相对论情形下也成立 [24–26]。

关于带点相互作用的一维狄拉克算子的研究，在物理和数学文献中由来已久 [21,27–34], 不过，在我们看来，导致式（1）中 1）的 [17, 22, 35–37]最一般的周期模型受到的关注仍然有限。我们对这一系统感兴趣，是因为它提供了一个非平凡的实例，展示了描述一维拓扑绝缘体的连续模型。更确切地说，哈密顿量 H_U 可根据耦合矩阵 [7, 8] U(2)的具体选择，归属于与拓扑物质分类相关的不同 AZC 对称性类别 [4,5], 。我们提到，在克罗尼格–彭尼模型的一些变体中，已经观察到了非平凡的拓扑性质 $U \in$ –。然而，非相对论模型只能实现有限范围的拓扑对称类，因为薛定谔算子通常有下界，因此无法具有电荷共轭对称性或手征对称性。另一方面，由狄拉克算子描述的相对论模型通常不具有半有界性，因此可以探索范围更广的对称类。

我们的模型尤其包含所有对称算子平方为恒等算子的对称类的代表，即 A、AI、AIII、D 和 BDI 类。[1] 我们将在下一节讨论耦合条件与对称性类别之间的关系：这里先指出，通过“调节”耦合 U，我们可以在同一对称类的不同拓扑相之间转换，在某些情况下也可以从一个对称类转换到另一个对称类。在第 2.2 节中，我们将进一步强调耦合条件的一些物理性质，并给出若干相关示例。

2.1 对称性类别

令 $K\colon \Psi(x) \mapsto \overline{\Psi(x)}$ 为作用于 $L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C}^2)$ 上的复共轭反幺正算子，并令

$$T = \mathrm{i}\sigma_z K, \qquad C = \sigma_x K, \qquad S = TC = -\sigma_y,$$

其中（σ_x，σ_y，σ_z）表示泡利矩阵。注意，T 和 C 是反幺正算子，而 S 是酉算子。这些算子满足恒等式

$$T^2 = C^2 = S^2 = \mathrm{id}_{L^2(\mathbb{R};\mathbb{C}^2)},$$

以及以下（反）对易关系

$$TH = HT, \qquad CH = -CH, \qquad SH = -SH,$$

[1]我们预计，将模型扩展到四分量旋量后，也可以考虑平方为负恒等算子的对称算子。

其中自由狄拉克算子为

$$H = -\mathrm{i}\sigma_x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\sigma_z\,, \qquad\qquad \mathfrak{D}(H) = H^1(\mathbb{R};\mathbb{C}^2). \tag{6}$$

因此， T， C 和 S 分别表示时间反演、电荷共轭和手征对称性的算子。值得指出的是，尽管自由哈密顿量 H 在上述所有对称性下均保持不变，gDKP 模型 H_U 中包含的点相互作用却可能以非平凡的方式破坏其中任意一种对称性。为了讨论各对称性对 H_U的影响，我们先回顾一下，一般的U(2)矩阵可以参数化为

$$U = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta}\begin{pmatrix} m_0 + \mathrm{i}m_3 & m_2 + \mathrm{i}m_1 \\ -m_2 + \mathrm{i}m_1 & m_0 - \mathrm{i}m_3 \end{pmatrix} \tag{7}$$

其中 $\eta \in [0,\pi)$，而实参数 $\{m_i\}_{0\le i\le 3}$ 须满足约束条件$\mathbb{S}^3$ $m_0^2 + m_1^2 + m_2^2 + m_3^2 = 1$。

在时间反演算子 T 作用下，式 (3) 中的边界向量变换为 $\Psi_\pm(n) \mapsto \mathrm{i}\Psi_\mp(n)$。这意味着，若 $\Psi \in \mathfrak{D}(H_U)$满足耦合条件 $\Psi_-(n) = U\Psi_+(n)$，则 $\Phi := T\Psi \in T\mathfrak{D}(H_U)$满足新的耦合条件 $\Phi_-(n) = U^\intercal\Phi_+(n)$，其中 $U^\intercal$是 U的转置。这进而意味着反幺正等价

$$TH_UT^{-1} = H_{U^\intercal}$$

两个通常不同的哈密顿量之间 H_U 和 $H_{U^\intercal}$。我们可以得出结论，gDKP 模型关于 T 不变，当且仅当 $U = U^\intercal$；用式（7）中引入的参数表示，即为

$$m_2 = 0. \tag{8}$$

类似地，在电荷共轭算子 C 作用下，边界向量变换为 $\Psi_\pm(n) \mapsto \pm\sigma_z\Psi_\pm(n)$，从而实现反幺正等价

$$CH_UC^{-1} = -H_{-\sigma_z\overline{U}\sigma_z}.$$

因此，哈密顿量 H_U 关于 C 对称，当且仅当

$$\eta = 0,\, m_0 = m_1 = 0 \qquad \text{or} \qquad \eta = \frac{\pi}{2},\, m_2 = m_3 = 0. \tag{9}$$

反过来，手征算子 S的作用为 $\Psi_\pm(n) \mapsto \mathrm{i}\sigma_z\Psi_\mp(n)$，从而实现幺正等价

$$SH_US^{-1} = -H_{-\sigma_z U^\dagger\sigma_z}\,.$$

我们得出结论： H_U 关于 S 对称，当且仅当

$$\eta = 0,\, m_0 = m_1 = m_2 = 0 \qquad \text{or} \qquad \eta = \frac{\pi}{2},\, m_3 = 0. \tag{10}$$

读者不难验证，我们模型的参数空间已足够大，可以容纳对称性类别A、AI、AIII、D和BDI中的任一类。在本文其余部分，我们将仅关注在一维中展现非平凡拓扑特征的类别，即具有电荷共轭对称性、并具有 $\mathbb{Z}_2$ 指标的D类，以及具有电荷共轭对称性和手征对称性的BDI类与具有手征对称性的AIII类，二者均具有 $\mathbb{Z}$ 指标。利用式（8）–（10），我们说哈密顿量 H_U 属于D类，如果

$$U \in \mathcal{U}_{\mathrm{D}} = \left\{ U_C(\theta) : \theta \in [-\pi, \pi) \right\} \tag{11}$$

其中我们设

$$U_C(\theta) = \begin{pmatrix} \mathrm{i}\cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & -\mathrm{i}\cos(\theta) \end{pmatrix}. \tag{12}$$

需要指出的是，对于 $U_C(-\pi) = -\mathrm{i}\sigma_z$ 和 $U_C(0) = \mathrm{i}\sigma_z$，哈密顿量同时具有电荷共轭对称性和手征对称性，因此严格来说$H_{U_C(-\pi)}$ 和 $H_{U_C(0)}$ 属于 BDI 类。尽管如此，我们可以通过不破坏电荷共轭对称性的连续变换，将与耦合条件集合$\mathcal{U}_{\mathrm{D}}$ 相关联的任意两个哈密顿量连接起来。除去孤立矩阵 $U = \pm \mathrm{i}\sigma_z$， H_U 属于 BDI 类，当

$$U \in \mathcal{U}_{\mathrm{BDI}} = \left\{ U_{CS}(\theta) : \theta \in [-\pi, \pi) \right\} \tag{13}$$

其中

$$U_{CS}(\theta) = \begin{pmatrix} \mathrm{i}\cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \mathrm{i}\cos(\theta) \end{pmatrix}. \tag{14}$$

最后，如果满足以下条件，我们称 H_U 属于 AIII 类:

$$U \in \mathcal{U}_{\mathrm{AIII}} = \left\{ U_S(\theta, m_2) : (\theta, m_2) \in [-\pi, \pi) \times [-1, 1] \right\} \tag{15}$$

其中

$$U_S(\theta, m_2) = \begin{pmatrix} \mathrm{i}\sqrt{1-m_2^2}\cos(\theta) & \mathrm{i}m_2 - \sqrt{1-m_2^2}\sin(\theta) \\ -\mathrm{i}m_2 - \sqrt{1-m_2^2}\sin(\theta) & \mathrm{i}\sqrt{1-m_2^2}\cos(\theta) \end{pmatrix}. \tag{16}$$

与之前一样，我们也将属于 $\mathcal{U}_{\mathrm{BDI}}$ 的矩阵 $U_S(\theta,0) = U_{CS}(\theta)$ 纳入 $\mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}$ ：这样，通过固定参数 $m_2 = 0$ 的取值，我们将集合 $\mathcal{U}_{\mathrm{BDI}}$ 视为连续嵌入于 $\mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}$ 中。我们强调，这种嵌入保留了手征对称性，但明确破坏了电荷共轭对称性和时间反演对称性。

2.2 可渗透与不可渗透耦合条件

对于式（1）中的狄拉克算子，旋量 $\Psi(x)$ 的概率流密度由下式给出

$$j_\Psi(x) = \mathrm{i}\Psi^\dagger(x)\sigma_x\Psi(x) = \mathrm{i}\big(\overline{\phi(x)}\chi(x) + \overline{\chi(x)}\phi(x)\big)$$

其中 $\Psi^\dagger(x)$是 $\Psi(x)$的伴随向量。根据演化的幺正性以及由哈密顿量的自伴性所保证的概率守恒，耦合条件 $\Psi_-(n) = U\Psi_+(n)$确保对任意 $n \in \mathbb{Z}$均有 $j_\Psi(n^+) = j_\Psi(n^-)$。特别地，取决于 $j_\Psi(x)$在晶格点处的行为，耦合条件分为具有不同物理性质的两类：不可渗透或可渗透。

若耦合条件为不可渗透（或约束性）的，则

$$j_\Psi(n^\pm) = 0.$$

不透水条件不允许概率穿过任一晶格点传播，从而有效地将系统解耦为无穷多个相等的区段。最一般的不透水条件可通过令

$$m_1 = m_2 = 0 \tag{17}$$

在式（7）中，从而得到对角耦合矩阵

$$U_{\mathrm{ch}}(\alpha_-, \alpha_+) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_-} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_+} \end{pmatrix}$$

其中 $\alpha_\pm \in [-\pi, \pi)$。相应的边界条件

$$\sin(\tfrac{\alpha_\pm}{2})\phi(n^\pm) = \pm\mathrm{i}\cos(\tfrac{\alpha_\pm}{2})\chi(n^\pm).$$

被称为手征条件 [17, 43–45], ，也可改写为

$$\big(I - \sigma_z \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\alpha_\pm\sigma_x}\big)\Psi(n^\pm) = 0.$$

反之，若耦合条件是可渗透（或连通）的，则

$$j_\Psi(n^\pm) \neq 0,$$

允许概率跨越晶格点传播。一个众所周知的例子由赝周期条件给出

$$\Psi(n^+) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\Psi(n^-)$$

由反对角矩阵得到

$$U_{\mathrm{pp}}(\alpha) = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} & 0 \end{pmatrix}$$

其中 $\alpha \in [-\pi, \pi)$。赝周期条件与奇异规范场相关。利用附录 A 中推导出的 Kurasov 映射 (54)，我们确实发现$H_{U_{\mathrm{pp}}(\alpha)}$ 具有相同的作用

$$\tilde{H}_{\boldsymbol{g}(U_{\mathrm{pp}}(\alpha))} = -\mathrm{i}\sigma_x \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - 2\mathrm{i} \tan\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sum_{n\in\mathbb{Z}} \delta(x-n) \right) + m\sigma_z.$$

注意到，赝周期条件可以通过规范变换消去 [23, 26], ，也就是说，哈密顿量$H_{U_{\mathrm{pp}}(\alpha)}$ 经由奇异规范变换，与式（6）中的自由狄拉克算子幺正等价

$$\Psi(x) \mapsto \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha \sum_{n\in\mathbb{Z}} \Theta(x-n) - \Theta(-n)} \Psi(x),$$

其中， $\Theta(x)$ 是 Heaviside 阶跃函数（且 $\Theta(0) = 1$）。特别地，这意味着等谱关系

$$\mathrm{spec}\big(H_{U_{\mathrm{pp}}(\alpha)}\big) = \mathrm{spec}(H) = (-\infty, m] \cup [m, +\infty)$$

对任意 $\alpha \in [-\pi, \pi$ 均成立）。

3 体分析

本节研究 gDKP 模型的谱性质和拓扑性质 H_U。要确定每条能带对应的 Zak 相位，并讨论其中蕴含的拓扑性质，明确刻画 H_U 的精确能带结构至关重要。正如我们将在第3.1节所示，通过利用 Bloch 分解，H_U 的谱问题可以用谱函数精确求解。随后，我们将在第3.2节分析 D、BDI 和 AIII 类中 Zak 相位的行为，并确定它们是否存在拓扑相变。

3.1 谱性质

我们可以利用 H_U 的（离散）平移不变性，通过 Bloch–Floquet 变换 $\mathcal{U}_{\mathrm{BF}}$ [46, 47] 加以发挥。对于 Schwartz 空间 $\mathcal{S}(\mathbb{R};\mathbb{C}^2)$ 中任意的 $\Psi(x)$，该变换定义为

$$(\mathcal{U}_{\mathrm{BF}}\Psi)(k,x) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kn} \Psi(x-n).$$

并唯一延拓为一个酉算符

$$\mathcal{U}_{\mathrm{BF}} \colon L^2(\mathbb{R};\mathbb{C}^2) \to \int_{[-\pi,\pi)}^{\oplus} L^2((-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2});\mathbb{C}^2)\,\mathrm{d}k$$

其中测度 $\mathrm{d}k$ 经过了适当的归一化。回想一下，当将布洛赫变换后的函数扩展为 $L^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R};\mathbb{C}^2) \otimes L^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R};\mathbb{C}^2)$ 时，

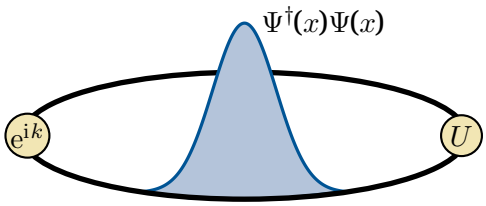

图 2：由纤维哈密顿量 $h_U(k)$ 描述的物理系统是一个环，环上有两个位于对跖点的点相互作用。这里，左侧和右侧的点相互作用分别实现布洛赫–弗洛凯条件$\Psi(_{12})_{-} = e^{ik}\Psi(-\frac{1}{2})$和 U(2)耦合条件 $\Psi_-(0) = U\Psi_+(0)$。

旋量 $\Phi(k,\ x) := (\mathcal{U}_{\mathrm{BF}}\Psi)(k,\ x)$ 在实空间中是拟周期的，在倒易空间中是周期的，也就是说

$$\Phi(k, x+n) = e^{ikn}\Phi(k,x), \qquad \Phi(k+2\pi n, x) = \Phi(k,x),$$

对任意 $n \in \mathbb{Z}$ 且对所有 $k, x \in \mathbb{R}$。在布洛赫–弗洛凯表示中，H_U具有如下纤维分解

$$\mathcal{U}_{\mathrm{BF}} H_U \mathcal{U}_{\mathrm{BF}}^\dagger = \int_{[-\pi,\pi)}^{\oplus} h_U(k)\,\mathrm{d}k, \qquad h_U(k) = -i\sigma_x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\sigma_z, \tag{18}$$

$h_U(k)$的定义域可写为

$$\mathfrak{D}(h_U(k)) = \{\Psi \in H^1((-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}) \setminus \{0\}; \mathbb{C}^2) : \Psi(\tfrac{1}{2}) = e^{ik}\Psi(-\tfrac{1}{2}), \\ \Psi_-(0) = U\Psi_+(0)\}.$$

如图 2所示，纤维哈密顿量 $h_U(k)$描述了一个环中的自由相对论粒子，环上有两个位于对跖点的点相互作用：其中一个来自布洛赫–弗洛凯伪周期条件 $\Psi(_{12})_{-} = e^{ik}\Psi(-\frac{1}{2})$，另一个来自 U(2)耦合条件 $\Psi_-(0) = U\Psi_+(0)$。

3.1.1 谱函数

算子 $h_U(k)$ 不是半有界的，其谱由可数多个本征值组成，这些本征值分别聚集于 $+\infty$ 和 $-\infty$。我们将这些本征值记为 $\epsilon_{U,n}(k)$，其中 $n \in \mathbb{Z}$ 或 $n \in \mathbb{Z}^* := \mathbb{Z} \setminus \{0\}$，分别对应于存在或不存在零特征值的情况；并记为 $\epsilon_{U,n}(k) \le \epsilon_{U,n+1}(k)$。根据标准结果 [46]，我们知道 H_U 的谱由无穷多个能带组成，每个能带均由集合 $\{\epsilon_{U,n}(k) :\ k \in [-\pi,\pi)\}$ 的闭包给出。因此，求解H_U 的谱问题等价于对布里渊区 $[-\pi,\pi)$ 中的每个 k，求解 $h_U(k)$ 的本征值问题。注意，$h_U(k)$ 的每个本征值的简并度至多为二；并且（除非 H_U 的谱是纯点谱）如果

$\epsilon_{U,n}(k)$ 恰好是简并的，则第 n 条与第 $(n+1)$ 条（或第 $(n-1)$ 条）能带之间的能隙闭合。

$h_U(k)$的谱可以用谱函数 $F_{U,k}(\epsilon)$的实零点解析地刻画，即

$$\operatorname{spec}(h_U(k)) = \{\epsilon \in \mathbb{R} : F_{U,k}(\epsilon) = 0\}.$$

在附录B 中，我们推导出显式表达式

$$F_{U,k}(\epsilon) = m_1 \cos(k) + m_2 \sin(k) + \cos(q) \sin(\eta) + \operatorname{sinc}(q)(\epsilon \cos(\eta) - m m_0) \quad (19)$$

用参数化（7）来表示 $U \in \mathrm{U}(2)$，其中

$$q = q(\epsilon) = \mathrm{e}^{\mathrm{i} \arg(\epsilon^2 - m^2)/2} \sqrt{|\epsilon^2 - m^2|} \quad (20)$$

是质量能隙之外的非负实数，即对于 $|\epsilon| \geq m$；而对于 $\epsilon \in (-m, m)$则为纯虚数。谱条件$F_U(k, \epsilon) = 0$ 表示克罗尼格–彭尼关系 [48, 49], 推广到全部 U(2)自伴点相互作用集合后的相对论对应。通过考察式（19），我们得出结论：当 U 分别为可透射或不可透射耦合条件时， H_U 的谱相应地要么绝对连续，要么为纯点谱。事实上，在第二种情形中，由式（17）导出的约束$m_1 = m_2 = 0$ 意味着所有能带都是平坦的，并且每一个$\epsilon_{U,n} \in \operatorname{spec}(h_U(k))$ 都是 H_U 具有无限简并的本征值。

3.1.2 本征自旋量

如果 $\epsilon = \epsilon_{U,\ n}(k)$ 是 $h_U(k)$ 的一个单特征值，且具有 $\epsilon \neq \pm m$，则对应的本征旋量为

$$\Psi_{U,n}(k, x) = \begin{cases} \xi^{+}_{U,n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} + \xi^{-}_{U,n} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}, & x < 0 \\ \xi^{+}_{U,n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}[q(x-1)+k]} + \xi^{-}_{U,n} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}[q(x-1)-k]}, & x > 0 \end{cases} \quad (21)$$

其中引入了向量

$$\xi^{\pm}_{U,n} = c^{\pm}_{U,n} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \frac{q}{\epsilon + m} \end{pmatrix} \quad (22)$$

以及系数

$$c^{\pm}_{U,n} = \pm\big(1 \pm \tfrac{q}{\epsilon+m}\big)\big(1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+\eta\pm q)}(\mathrm{i}m_1 + m_2)\big) \mp \big(1 \mp \tfrac{q}{\epsilon+m}\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta}(m_0 + \mathrm{i}m_3). \quad (23)$$

也可以推导出类似的表达式 $\epsilon = \pm m$，详见附录 B以及 [17] 。

3.1.3 零特征值

纤维哈密顿量 $h_U(k)$ 有零特征值，当且仅当

$$F_{U,k}(0) = m_1\cos(k) + m_2\sin(k) + \cosh(m)\sin(\eta) - m_0\sinh(m) = 0.$$

对于不透水条件，上述方程简化为

$$\sin(\eta) = m_0\tanh(m).$$

对于透水条件，引入辅助函数

$$G(m,\eta,m_0) = \cosh(m)\sin(\eta) - m_0\sinh(m) \tag{24}$$

我们可以区分三种情况。方程 $F_{U,k}(0) = 0$ 具有：

- 当 $|G(m,\ \eta,\ m_0)| > \sqrt{m_1^2+m_2^2}$ 时无解；
- 当 $G(m,\ \eta,\ m_0) = \pm\sqrt{m_1^2+m_2^2}$ 时有唯一解，该解为

$$k_\pm = \begin{cases} \left(\pi - \arctan\left(\frac{m_1}{m_2}\right) \pm \frac{\pi}{2}\right) \bmod 2\pi, & m_2 \neq 0 \\ -\arccos(\mp\operatorname{sign}(m_1)), & m_2 = 0 \end{cases};$$

- 当 $|G(m,\eta,m_0)| < \sqrt{m_1^2+m_2^2}$ 时有两个解。

3.1.4 谱对称性

三种基本对称性对能带的结构施加了额外约束。如果 U 关于 T 不变，则

$$\epsilon_{U,n}(k) = \epsilon_{U,n}(-k),$$

且条件（8）确实导出 $F_{U,k}(\epsilon) = F_{U,-k}(\epsilon)$。如果 U 关于 C 不变，则

$$\epsilon_{U,n}(k) = -\epsilon_{U,-n}(-k),$$

并且条件（9）意味着 $F_{U,k}(\epsilon) = |F_{U,-k}(-\epsilon)|$。最后，如果 U 关于 S 不变，则有

$$\epsilon_{U,n}(k) = -\epsilon_{U,-n}(k),$$

而条件（10）意味着 $F_{U,k}(\epsilon) = |F_{U,k}(-\epsilon)|$。

3.2 Zak 相位

我们回顾一下，Zak 相位可以针对孤立的能带进行定义。特别地，如果 $\epsilon_{U,\ n}(k)$ 是与单个孤立能带相关联的 $h_U(k)$ 的单特征值，则相应的 Zak 相位定义为

$$Z_{U,n} = \mathrm{i}\int_{-\pi}^{\pi} \langle u_{U,n}(k,\cdot)|\partial_k u_{U,n}(k,\cdot)\rangle_{L^2((-\frac{1}{2},\frac{1}{2});\mathbb{C}^2)}\,\mathrm{d}k \tag{25}$$

其中 $\partial_k = \mathrm{d}/\mathrm{d}k$ 且

$$u_{U,n}(k,x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\Psi_{U,n}(k,x) \tag{26}$$

是所谓 Bloch–Floquet–Zak 表象中的本征旋量，详见附录 C 以了解更多细节。请注意，由于一般情况下我们无法推导出 $\epsilon_{U,n}(k)$ 关于 k, $Z_{U,n}$ 的闭式表达式，因此将通过数值方法计算。通过离散化布里渊区，则可以根据 $\epsilon_{U,n}(k)$ 解析地计算式 (25) 中内积所涉及的积分，参见附录 C 中的式 (68)。除非另有说明，$Z_{U,n}$ 的数值总是在范围 $[0, 2\pi)$ 内给出。接下来我们将讨论 Zak 相位在对称类 D、BDI 和 AIII 中的作用。

3.2.1 D类

集合 $\mathcal{U}_{\mathrm{D}}$ 由耦合矩阵的单参数族 $U_C(\theta)$组成，其中 $\theta \in [-\pi,\pi) \cong \mathbb{S}^1$，参见式 (11)–(12)。电荷共轭对称性意味着，除布里渊区中的反射外，能带关于 $\epsilon = 0$:

$$\epsilon_{U_C(\theta),n}(k) = -\epsilon_{U_C(\theta),-n}(-k).$$

通过检查谱函数

$$F_{U_C(\theta),k}(\epsilon) = \sin(\theta)\sin(k) + \epsilon\,\mathrm{sinc}(q) \tag{27}$$

我们推断出存在无穷多个能隙。特别是，如果$\theta \in \{-\pi, 0\}$ 耦合条件不可渗透，则相应的平带可由以下闭式表达式给出

$$\epsilon_{U_C(-\pi),n} = \epsilon_{U_C(0),n} = \begin{cases} \pm\sqrt{n^2\pi^2 + m^2}, & n \in \mathbb{Z}^* \\ 0, & n = 0 \end{cases}.$$

如果 $\theta \notin \{-\pi, 0\}$ 能带只能通过数值求解超越方程的实根来确定$F_{U_C\ (\theta)\ k}$（ϵ）$= 0$。无论如何，由式（27）我们仍可得出结论：能隙仅在无质量极限 $m \to 0$ 下、对于 $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$闭合，见图3。

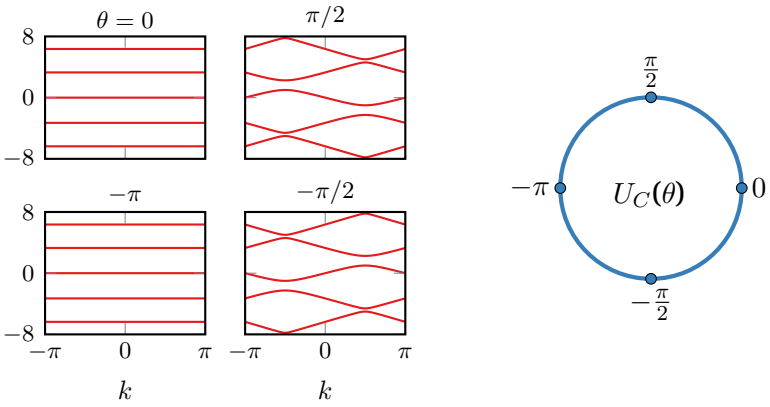

图3：D类中耦合为 $U_C(\theta)$、且$m = 1$时接近零的能带。能隙始终不会闭合，因此集合 $\mathcal{U}_{\mathrm{D}}$ 由一个连通区域构成，其中不存在拓扑相变。

因此，我们预期在D类中不会发生拓扑相变，因为我们可以连接 $\mathcal{U}_{\mathrm{D}}$ 的任意两个元素，并通过连续变换导致相应哈密顿量发生形变；该形变保持电荷共轭对称性，同时不使能隙闭合。在图4 中，我们绘制了Zak相位$Z_{U_C(\theta)\ n}$ 随 $|n| \leq 2$的变化：结果表明，Zak相位并不作为 θ的函数取量子化值，因此它不能捕获该类的任何拓扑信息。

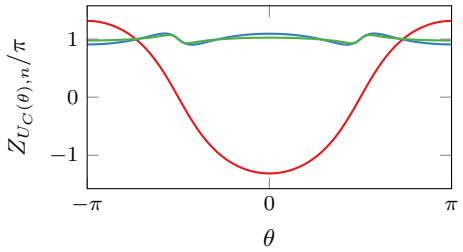

图4：D类的 Zak 相位 $Z_{U_C(\theta)\ n}$，其中 $n = 0$ （红色）、 $n = \pm 1$（蓝色）和 $n = \pm 2$ （绿色）；为了显示连续曲线，$Z_{U_C(\theta),0}$ 的某些取值已平移 2π。

3.2.2 BDI 类

集合 $\mathcal{U}_{\mathrm{BDI}}$ 由耦合矩阵的单参数族组成$U_{CS}(\theta)$ 其中 $\theta \in [-\pi, \pi) \cong \mathbb{S}^1$，见式（13）–（14）。对全部三种基本对称性的不变性意味着能带关于 $\epsilon = 0$,

$$\epsilon_{U_{CS}(\theta),n}(k) = -\epsilon_{U_{CS}(\theta),-n}(k)$$

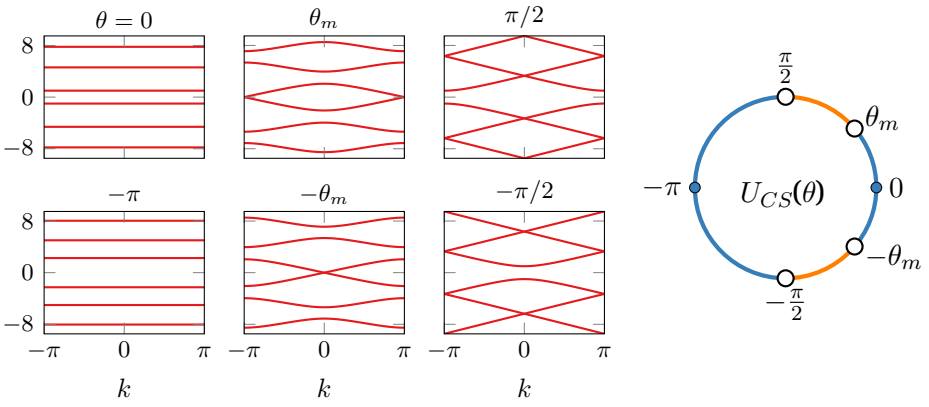

图 5：BDI 类中耦合 $U_{CS}(\theta)$ 在 $m = 1$ 下接近零的能带。中心能隙在 $\theta = \pm\theta_m$ 处闭合，而所有其他能隙在 $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$ 处闭合。因此，集合 $\mathcal{U}_{\mathrm{BDI}}$ 被划分为四个连通区域（在右图中以交替颜色表示），在这些区域中，相应哈密顿量的任何能隙都不闭合。

以及关于布里渊区中的反射，即

$$\epsilon_{U_{CS}(\theta),n}(k) = \epsilon_{U_{CS}(\theta),n}(-k).$$

通过考察谱函数

$$F_{U_{CS}(\theta),k}(\epsilon) = \sin(\theta)\cos(k) + \cos(q) - m\cos(\theta)\,\mathrm{sinc}(q)$$

我们观察到，除 $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$ 外存在无穷多个能隙，见图 5。对于 θ 的后一类取值，仅有两条能带，由一个中心质量能隙 $(-m,\ m)$ 分隔。事实上，矩阵 $U_{CS}(-\frac{\pi}{2}) = U_{\mathrm{pp}}(0)$ 与 $U_{CS}(\frac{\pi}{2}) = U_{\mathrm{pp}}(\pi)$ 分别对应于第 2.2 节中引入的反周期耦合条件与周期耦合条件：在这些情形下，哈密顿量酉等价于自由狄拉克算子 H，因此

$$\mathrm{spec}\big(H_{U_{CS}(\pm\frac{\pi}{2})}\big) = \mathrm{spec}(H) = (-\infty, m] \cup [m, +\infty).$$

特别地，我们得到闭式表达式

$$\epsilon_{U_{CS}(-\frac{\pi}{2}),\pm n}(k) = \pm\sqrt{\big(2\lfloor\tfrac{n}{2}\rfloor\pi - (-1)^n|k|\big)^2 + m^2},$$
$$\epsilon_{U_{CS}(\frac{\pi}{2}),\pm n}(k) = \pm\sqrt{\big(\big(\lfloor\tfrac{n-1}{2}\rfloor + 1\big)\pi + (-1)^n|k|\big)^2 + m^2},$$

其中 $n \in \mathbb{N}^* := \mathbb{N}\setminus\{0\}$，而 $\lfloor x\rfloor$ 是 x 的下取整函数，即小于或等于 x 的最大整数。

另一方面，只有当 $h_U(k)$ 存在零特征值时，中心能隙才会闭合。如果 $\theta \in \{-\pi, 0\}$ 耦合条件不可渗透，

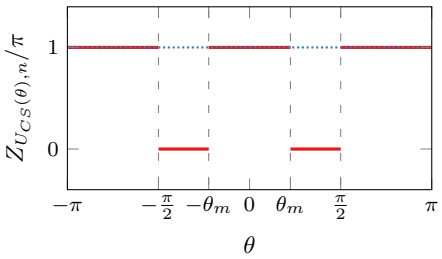

图 6：BDI 类的 Zak 相位 $Z_{U_{CS(\theta),\,n}}$ 其中 $n = \pm 1$ （红色）和$n = \pm 2,\ \pm 3$ （蓝色虚线）。

并且由于$F_{U_{CS(-\pi)}\,k}(0) = \mathrm{e}^{m}$ 和 $F_{U_{CS(0)}\,k}(0) = \mathrm{e}^{-m}$ 因此不存在零能平带。若改为 $\theta \notin \{-\pi, 0\}$，按照第 3.1.3 节的步骤，我们计算得

$$\begin{aligned} G(m, \tfrac{\pi}{2}, \cos(\theta)) &= \cosh(m) - \cos(\theta)\sinh(m) \\ &= |\sin(\theta)| \cosh\big(\operatorname{arctanh}(\cos(\theta)) - m\big), \end{aligned}$$

并且由于 $\sqrt{m_1^2 + m_2^2} = |\sin(\theta)|$，我们得出结论：仅当 $\theta = \pm\theta_m$ 时才存在零特征值，其中

$$\theta_m = \arccos(\tanh(m)) \in (0, \tfrac{\pi}{2}). \tag{28}$$

请注意，只有在极限 $m \to +\infty$ 和 $m \to 0$ 下，θ_m 才能分别到达端点 $\theta_m = 0$ 和 $\theta_m = \frac{\pi}{2}$。

通过汇总上述谱性质，我们确定了四个有隙区域，在这些区域中，耦合属于集合 $\mathcal{U}_{\mathrm{BDI}}$ 的哈密顿量不会闭合能隙，如图 5 右侧示意图所示。每个区域都对应不同的拓扑相，并由不同的拓扑不变量值表征：对于这一对称类，Zak 相位确实在每个有隙区域内保持（数值上）恒定，且其量子化单位为 π：

$$Z_{U_{CS}(\theta),n} = \begin{cases} 0, & n = \pm 1,\ \theta \in (-\frac{\pi}{2}, -\theta_m) \cup (\theta_m, \frac{\pi}{2}) \\ \pi, & n = \pm 1,\ \theta \in [-\pi, -\frac{\pi}{2}) \cup (-\theta_m, \theta_m) \cup (\frac{\pi}{2}, \pi)\ . \\ \pi, & |n| > 1,\ \theta \neq \pm\frac{\pi}{2} \end{cases} \tag{29}$$

我们绘制 $Z_{U_{CS}(\theta)\,n}$ 对应的 $|n| \leq 3$，见图 6。

3.2.3 AIII 类

集合 $\mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}$ 由耦合矩阵的双参数族组成$U_S(\theta, m_2)$ 其中 $(\theta, m_2) \in [-\pi, \pi) \times [-1, 1]$，见式（15）–（16）。注意

矩阵 $U_S(\theta,\pm 1) = \mp\sigma_y$ 与 θ 无关，因此 $\mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}$ 的参数空间与球面 $\mathbb{S}^2$ 一一对应：

$$\left\{\left(\sqrt{1-m_2^2}\cos(\theta), \sqrt{1-m_2^2}\sin(\theta), m_2\right) \in \mathbb{R}^3 : (\theta, m_2) \in [-\pi,\pi) \times [-1,1]\right\},$$

见图7左侧示意图。如第2.1节所述，集合 $\mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}$包含 $\mathcal{U}_{\mathrm{BDI}}$的连续嵌入，并且该形变仅保留了关于手征对称性的不变性。因此，BDI 类和 AIII 类的哈密顿量具有一些相同的谱性质。对于 $U \in \mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}$ 能带仍关于 $\epsilon = 0$对称，

$$\epsilon_{U_S(\theta,m_2),n}(k) = -\epsilon_{U_S(\theta,m_2),-n}(k)\,.$$

在这种情况下，除非 $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$，否则仍有无穷多个能隙；也就是说，当矩阵 $U_{CS}(\theta,\ m_2)$ 与赝周期条件$U_{\mathrm{pp}}(\alpha)$重合时，除中央能隙外的所有能隙都会闭合。此外，根据谱函数

$$\begin{aligned} F_{U_S(\theta,m_2),k}(\epsilon) = \sqrt{1-m_2^2}\sin(\theta)\cos(k) + m_2\sin(k) \\ + \cos(q) - m\sqrt{1-m_2^2}\cos(\theta)\,\mathrm{sinc}(q) \end{aligned}$$

我们可以推知，若满足以下条件，$h_U(k)$ 存在一个零特征值，使中央能隙闭合：

$$\cosh(m) - \sqrt{1-m_2^2}\cos(\theta)\sinh(m) = \pm\sqrt{1-(1-m_2^2)\cos(\theta)^2}.$$

上述条件只能在取正号时成立，因此等价于方程

$$\sqrt{1-m_2^2}\cos(\theta) = \tanh(m), \tag{30}$$

该方程给出了中央能隙闭合的位置。对 θ求解可得

$$\tilde{\theta}_m(m_2) = \arccos\left(\tfrac{\tanh(m)}{\sqrt{1-m_2^2}}\right) \qquad \text{if} \qquad |m_2| \le \sqrt{1-\tanh^2(m)},$$

~其中 $\theta_m(0) = \theta_m$ 与方程（28）中得到的值一致，适用于 $\mathcal{U}_{\mathrm{BDI}}$。

排除至少有一个能隙闭合的耦合条件后，集合 $\mathcal{U}_{\mathrm{AIII}} \cong \mathbb{S}^2$ 被划分为三个有隙区域：一个半球

$$\mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}^{\mathrm{hem}} := \{U_S(\theta,m_2) : |\theta| > \tfrac{\pi}{2}\}, \tag{31}$$

一个球带

$$\mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}^{\mathrm{sz}} := \left\{U_S(\theta,m_2) : 0 < \sqrt{1-m_2^2}\cos(\theta) < \tanh(m)\right\} \tag{32}$$

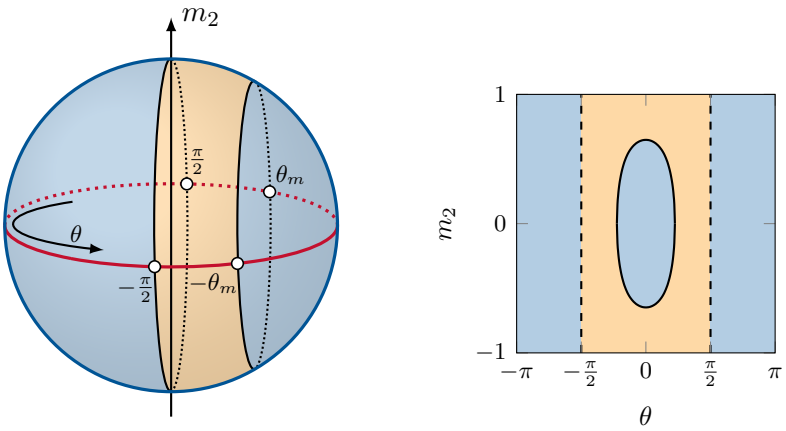

图 7：（左） $\mathbb{S}^2$ 集合的参数空间 $\mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}$，其中赤道上的红线 $m_2 = 0$ 表示耦合 $U_S(0,\theta) = U_{CS}(\theta)$，阴影区域则标示出三个有隙区域（31）–（33）。（右） Zak 相位（量子化） $Z_{U_S(\theta,m_2)}\,{}_{\pm 1}$ 的相图，其中 $Z = \pi$ 以蓝色表示， $Z = 0$ 以橙色表示；黑色实线和虚线分别表示 $\mathbb{S}^2$ 中央能隙闭合处的小圆，见式（30），以及$\theta = \pm\frac{\pi}{2}$ 其他所有能隙闭合处的大圆。

–

和一个球冠

$$\mathcal{U}^{\mathrm{sc}}_{\mathrm{AIII}} \coloneqq \left\{U_S(\theta, m_2) : \sqrt{1-m_2^2}\cos(\theta) > \tanh(m)\right\}. \tag{33}$$

这些区域代表三个不同的拓扑相，其特征是Zak 相位取以下数值：

$$Z_{U,n} = \begin{cases} 0, & n = \pm 1\,,\ U \in \mathcal{U}^{\mathrm{sz}}_{\mathrm{AIII}}\,, \\ \pi, & n = \pm 1\,,\ U \in \mathcal{U}^{\mathrm{hem}}_{\mathrm{AIII}} \cup \mathcal{U}^{\mathrm{sc}}_{\mathrm{AIII}}\,, \\ \pi, & |n| > 1\,,\ U = U_S(\theta, m_2) \in \mathcal{U}_{\mathrm{AIII}}\,,\ \theta \neq \pm\frac{\pi}{2}\,, \end{cases} \tag{34}$$

我们在图7 的右图中绘出了这一结果，适用于 $n = \pm 1$。值得注意的是，这一结果与此前对 BDI 类所得的结果一致。回想一下，尽管这两个区域

$$\{U_{CS}(\theta) : \theta \in (-\tfrac{\pi}{2}, -\theta_m)\}, \qquad \{U_{CS}(\theta) : \theta \in (\theta_m, \tfrac{\pi}{2})\},$$

集合中 $\mathcal{U}_{\mathrm{BDI}}$ 的哈密顿量具有相同的拓扑指标（见式（29）），无法通过任何同时保持电荷共轭和手征对称性且不闭合能隙的连续变换相互连接，因此对应于两种不同的拓扑相。尽管如此，它们仍可通过不闭合能隙、仅保持手征对称性的连续变换相互连接，因此在更大的 AIII 类中，它们对应于同一种拓扑相。

4 体边对应

体边对应通常表述为两个拓扑指标之间的等价关系：它们分别刻画无边界的无限延展系统，以及通过锐利边界截断前者而得到的半无限系统 [50–54]。对于一维模型，体指标通常由与第 n条能带相关联的 Zak 相位给出 [52, 53, 55–62], ；而边界指标则定义为截断系统中位于第 n条体能带下方的边缘态数量（即局域在边界附近的可归一化本征态）与位于同一能带上方的边缘态数量之差 [63–66]。

然而，在连续模型中，截断并非唯一：边缘的位置以及施加于边缘的边界条件，都是半无限系统定义的一部分。近期研究着重指出，截断的细节会如何影响体边对应 [67, 68], ，甚至可能导致违反连续系统中的对应关系 [54, 65, 66, 69–71]。本节将详细分析以上文定义的边缘态为基础的边界指标如何依赖于表征 gDKP 模型所有可能截断方式的两个参数，以及该边界指标如何关联于由 Zak 相位给出的体指标。在第4.1节定义截断哈密顿量和边界谱函数后，我们将在第4.2节讨论 BDI 类和 AIII 类这两种对称类的体边对应，但仅考虑保持对称性的截断。在第4.3节，我们将聚焦于 BDI 类，进而讨论该对应关系在任意截断下的稳定性。

4.1 截断哈密顿量

令 $d \in [0, 1)$ 表示（零维）边缘的位置，下面我们考虑截断在半直线 $\mathbb{R}_d = (d, +\infty)$ 上的 gDKP 模型。为了使截断哈密顿量成为自伴的，我们必须在边缘处施加适当的边界条件：回顾可知，在 $x = d^+$ 处最一般的解耦边界条件由第 2.2节介绍的手征条件给出，即

$$\cos(\tfrac{\alpha}{2})\chi(d^+) = \mathrm{i}\sin(\tfrac{\alpha}{2})\phi(d^+) \tag{35}$$

其中 $\alpha \in [-\pi, \pi)$，我们将截断哈密顿量 $\mathcal{H}_U(d, \alpha)$ 定义为一个微分算子，其表达式与式（ H_U 中的相同，见式（1），其定义域为

$$\begin{aligned}\mathfrak{D}(\mathcal{H}_U(d,\alpha)) = \{\Psi \in H^1(\mathbb{R}_d \setminus \mathbb{N}^*; \mathbb{C}^2) : \cos(\tfrac{\alpha}{2})\chi(d^+) = \mathrm{i}\sin(\tfrac{\alpha}{2})\phi(d^+),\\ \Psi_-(n) = U\Psi_+(n)\,\forall\, n \in \mathbb{N}^*\}.\end{aligned}$$

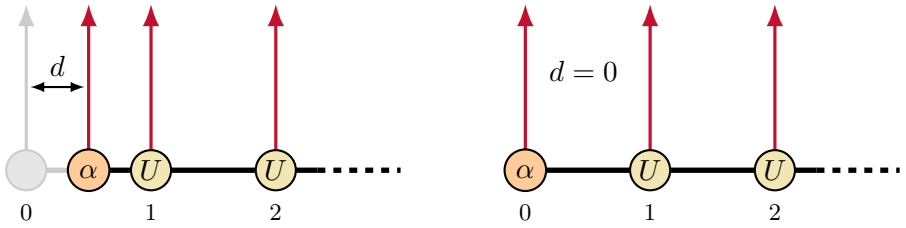

图 8：gDKP 模型的不同截断方式，产生哈密顿量 $\mathcal{H}_U(d,\ \alpha)$，其形式取决于边缘的位置 d 以及表征边缘处边界条件的参数α 。

截断参数 d 和 α 的作用如图 8所示。注意，条件（35）确定了 $\Psi(d^+)$ ，但只确定到一个因子 $\mathfrak{c} \in \mathbb{C}$，即

$$\Psi(d^+) = \mathfrak{c} \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\cos(\frac{\alpha}{2}) \\ \sin(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix}. \tag{36}$$

对于该系统，体边对应可表述为以下两者之间的等价关系：$Z_{U,\ n}/\pi$，即与H_U的第 n条能带相关联的归一化 Zak 相位，以及以下差值

$$N^{\mathrm{b}}_{U,n}(d,\alpha) - N^{\mathrm{a}}_{U,n}(d,\alpha) \tag{37}$$

： $\mathcal{H}_U$（$d,\ \alpha$）中分别出现在 n能带下方和上方的边缘态数量之差。 H_U。需要注意的是，Zak 相位实际上取决于实空间晶胞 [58, 59, 61]的原点选择。[2]尽管原则上这一选择是任意的，且不同约定之间可通过幺正变换相联系，但原点通常有一种自然的选取方式，它与原胞内反演对称性的存在有关。第3节中我们遵循了这一约定，将点相互作用置于原胞中心。然而，要使体边对应成立，必须恰当地关联原胞约定与边缘的位置 [52]。在我们的情形中，这意味着考虑$d = \frac{1}{2}$ ：此情形将在第4.2节分析，而 d 的其他取值将在第4.3节讨论。

4.1.1 边缘态

边缘态可通过利用传递矩阵 方法 [72–75]来确定。与 H_U相关联的传递矩阵 $T_U(\epsilon, d)$由如下关系定义

$$\Psi_\epsilon((n+d+1)^+) = T_U(\epsilon,d)\Psi_\epsilon((n+d)^+)$$

[2]然而，两种不同拓扑相之间的相对Zak 相位与原胞约定无关 [56, 58, 59]。

对任意 $n \in \mathbb{Z}$ 和 $d \in [0,1)$，其中 $\Psi_\epsilon(x)$是能量为 ϵ的H_U 的任意（广义）本征旋量。对于透水条件，传递矩阵由下式给出

$$T_U(\epsilon, d) = P(\epsilon, d) D_U P(\epsilon, 1-d) \tag{38}$$

其中

$$P(\epsilon, d) = \cos(qd) I + \mathrm{i} d \,\mathrm{sinc}(qd)(\epsilon \sigma_x + \mathrm{i} m \sigma_y), \tag{39}$$

$$D_U = \frac{1}{m_1 - \mathrm{i} m_2} \begin{pmatrix} -\sin(\eta) - m_3 & \mathrm{i}(\cos(\eta) + m_0) \\ \mathrm{i}(\cos(\eta) - m_0) & -\sin(\eta) + m_3 \end{pmatrix}, \tag{40}$$

详情请参见附录 A.2。在此背景下，ϵ 属于 H_U 的谱，当且仅当它满足众所周知的能带条件 $|\operatorname{tr}(T_U(\epsilon, d))| \le 2$，在我们的情形中，这一条件导出

$$|\cos(q)\sin(\eta) + \mathrm{sinc}(q)(\epsilon \cos(\eta) - m m_0)| \le \sqrt{m_1^2 + m_2^2}.$$

值得指出的是，这一结果与我们基于谱函数的方法一致，因为方程 $F_{U,\ k}(\epsilon) = 0$ 蕴含了上述条件。

对于 $\mathcal{H}_U(d, \alpha)$ 的边缘态，我们注意到，由于$|\det(T_U(\epsilon, d))| = 1$，$T_U(\epsilon, d)$有两个本征值 $\lambda_{U,\pm}(\epsilon, d)$，二者互为倒数（相差一个相位），且$|\lambda_{U,-}(\epsilon, d)| \le 1$ 以及$|\lambda_{U,+}(\epsilon, d)| \ge 1$。将 $v_{U,\pm}(\epsilon, d)$ 记为右本征向量（一般而言，$T_U(\epsilon, d)$不是正规矩阵），我们有如下分解

$$\Psi(d^+) = \mathfrak{c}_+ v_{U,+}(\epsilon, d) + \mathfrak{c}_- v_{U,-}(\epsilon, d).$$

因此，只有当 $\Psi(d^+)$ 属于衰减本征向量 $v_{U,-}$的张成空间时，才允许存在（可归一化的）边缘态；等价地，

$$w_{U,+}(\epsilon, d) \Psi(d^+) = 0 \tag{41}$$

其中，$w_{U,+}(\epsilon, d)$ 是与 $\lambda_{U,+}(\epsilon, d)$ 对应的 $T_U(\epsilon, d)$ 的左本征向量，也就是满足以下关系的行向量

$$w_{U,+}(\epsilon, d) T_U(\epsilon, d) = \lambda_{U,+}(\epsilon, d) w_{U,+}(\epsilon, d), \qquad w_{U,+}(\epsilon, d) v_{U,-}(\epsilon, d) = 0.$$

结合式（36）和（41），可以定义如下边界谱函数：

$$\mathcal{F}_U(\epsilon, d, \alpha) = w_{U,+}(\epsilon, d) \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\cos(\frac{\alpha}{2}) \\ \sin(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix}. \tag{42}$$

因此，根据构造，$\mathcal{H}_U(d,\ \alpha)$ 存在能量为 ϵ 的边缘态，当且仅当 ϵ 位于 H_U 的能隙中，且 $\mathcal{F}_U(\epsilon,\ d,\ \alpha) = 0$。

4.2 保对称截断

接下来，我们将讨论范围限定于与 AIII 类相关的耦合矩阵 $U_S(\theta, m_2)$。回顾一下，BDI 类可视为后者的子集，因为 $U_{CS}(\theta) = U_S(\theta,0)$。注意，如果 $\Psi(x)$ 满足方程 (35) 中的手征边界条件，那么 $C\Psi(x) = \sigma_x\Psi(x)$ 和 $S\Psi(x) = -\sigma_y\Psi(x)$ 都满足该条件

$$\sin(\tfrac{\alpha}{2})\chi(d^+) = \mathrm{i}\cos(\tfrac{\alpha}{2})\phi(d^+),$$

这意味着存在以下反对易关系：

$$S\mathcal{H}_{U_S(\theta,m_2)}(d,\alpha)S^{-1} = -\mathcal{H}_{U_S(\theta,m_2)}(d,\pi-\alpha), \tag{43}$$

$$C\mathcal{H}_{U_{CS}(\theta)}(d,\alpha)C^{-1} = -\mathcal{H}_{U_{CS}(\theta)}(d,\pi-\alpha). \tag{44}$$

上述关系表明，并非所有边缘处的边界条件都满足相应体哈密顿量的手征对称性和电荷共轭对称性。具体而言，我们发现，仅当限制取值为 $\alpha = \pm\frac{\pi}{2}$ 时，$\mathcal{H}_{U_{CS}(\theta)}(d, \alpha)$ 和 $\mathcal{H}_{U_S(\theta, m_2)}(d, \alpha)$ 才分别属于 BDI 类和 AIII 类。

我们借助 Mathematica 计算传递矩阵 $T_{U_S(\theta,m_2)}(\epsilon, d)$ 和左本征向量 $w_{U_S(\theta,m_2)+}(\epsilon, d)$，得到边界谱函数 $\mathcal{F}_{U_S(\theta,m_2)}(\epsilon, d, \alpha)$ 的一个冗长但解析的表达式。图 9 绘出了 $\mathcal{H}_{U_S(\theta,m_2)}(d, \alpha)$ 在 $d = \frac{1}{2}$ 和 $\alpha = \pm\frac{\pi}{2}$ 时的边缘谱，展示了 $H_{U_S(\theta, m_2)}$ 各能带之间的边缘态。对于这些 d 和 α 取值，我们发现体边对应除一个符号外成立，即

$$\frac{1}{\pi}Z_{U_S(\theta,m_2),n} = s_{n,\theta,\pm\frac{\pi}{2}}\big(N^{\mathrm{b}}_{U_S(\theta,m_2),n}(\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{\pi}{2}) - N^{\mathrm{a}}_{U_S(\theta,m_2),n}(\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{\pi}{2})\big) \tag{45}$$

对于任意 $n \in \mathbb{Z}^*$，其中 $s_{n,\theta,\alpha} \in \{-1, 1\}$ 由下式给出

$$s_{n,\theta,\alpha} = (-1)^{n+1}\,\mathrm{sign}(n)\,\mathrm{sign}(\alpha)\,\mathrm{sign}(|\theta| - \tfrac{\pi}{2}). \tag{46}$$

4.3 非对称截断

我们通过讨论非对称截断下体边对应（BBC）的稳定性来扩展分析，即现在考虑参数 d 和 α 的任意取值。为简单起见，我们只关注耦合条件 $U_{CS}(\theta)$ 的单参数族，也就是 BDI 类。我们再次固定 $d = \frac{1}{2}$，但考虑任意 $\alpha \in [-\pi, \pi)$。图10上排展示了 $\mathcal{H}_{U_{CS}(\theta)}(\frac{1}{2}, \alpha)$ 在中心能隙和前两个正能隙中的边缘态数量相图。结果表明，对于任意 $\alpha \notin \{-\pi, 0\}$，体边对应仍然成立，但可能相差一个符号，即

$$\frac{1}{\pi}Z_{U_{CS}(\theta),n} = s_{n,\theta,\alpha}\big(N^{\mathrm{b}}_{U_{CS}(\theta),n}(\tfrac{1}{2},\alpha) - N^{\mathrm{a}}_{U_{CS}(\theta),n}(\tfrac{1}{2},\alpha)\big) \tag{47}$$

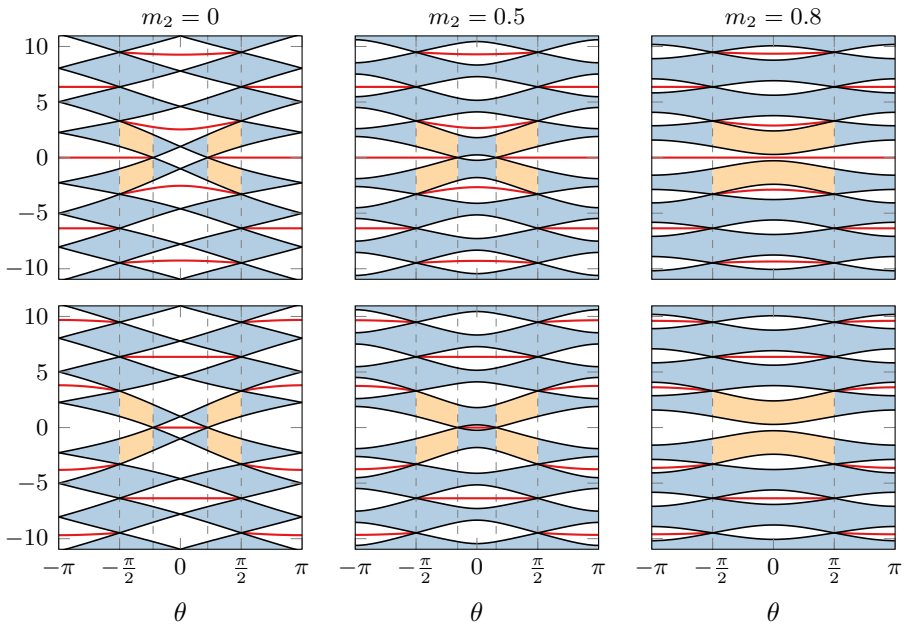

图 9：$\mathcal{H}_{U_S(\theta, m_2)}$（12，$\alpha$）在 $\alpha = \frac{\pi}{2}$（上排）和 $\alpha = -\frac{\pi}{2}$（下排）时的边缘谱；边缘态以红色显示，蓝色和橙色区域分别表示具有 $Z = \pi$ 和 $Z = 0$的体能带。

对于任意 $n \in \mathbb{Z}^*$，其中 $s_{n,\theta,\alpha}$ 与方程（46）中的相同。对于 $\alpha \in \{-\pi, 0\}$，我们发现边缘态与体能带并合；而对于 $d = \frac{1}{2}$，因此观察到两处孤立的体边对应违例。

现在我们来考察同时改变原胞原点和边缘位置 d 会产生什么影响。为了获得一致的结果，必须将 $\mathcal{H}_U(d, \alpha)$ 的边缘态与平移后原胞 $[-1+d, d)$ 对应的体 Zak 相位进行比较，该相位（模 2π）为

$$\tilde{Z}_{U,n}(d) = Z_{U,n} - \pi(1 - 2d) \tag{48}$$

其中 $Z_{U,n} = \tilde{Z}_{U,n(-12)}$，参见附录 67 式，见附录 C.2。请注意，尽管 $\tilde{Z}_{U_{CS}(\theta)\,n}(d)/\pi$ 仅在 $d = \frac{1}{2}$ 和 $d = 0$时才恰好为整数，但两个拓扑相之间的相对 Zak 相位（即两个 θ 值之间的相对 Zak 相位）总是以 π为单位量子化。图 10的下排展示了 $d = 0$时相同的边缘态相图。在这种情况下，我们观察到，对于任意 $\alpha \neq \pm\frac{\pi}{2}$，体边对应始终被破坏。

我们通过绘制图11 中的边缘态相图来总结分析，该相图以 d 为变量，并固定 $\alpha = \frac{\pi}{2}$（但请注意，对于 $\alpha = -\frac{\pi}{2}$，我们会得到类似的结果）。在这种情况下，我们发现边缘态仅在中央能隙中不受 d 的影响；在该能隙中，满足 $\alpha = \pm\frac{\pi}{2}$ 的保持对称性的边界条件会迫使边缘态具有零能量。

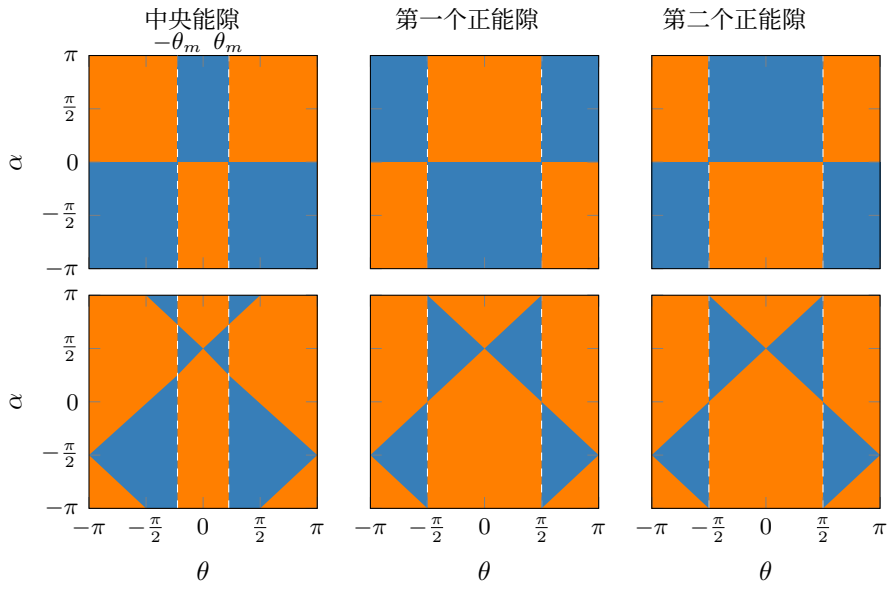

图10： N 边缘态数目的相图，$\mathcal{H}_{U_{CS}(\theta)}(d,\ \alpha)$对应于 $d=\frac{1}{2}$ （上排）和 $d=0$ （下排），其中 $N=0$ 为蓝色， $N=1$为橙色。

5 讨论与展望

正如我们所展示的，广义狄拉克-凯莱因-戈登哈密顿量 H_U 呈现出丰富的拓扑结构，而耦合矩阵 $U\in$ U(2) 可用作探索不同相的参数。事实上，取决于 U的形式，所有对称性平方为单位算符的 Altland–Zirnbauer–Cartan 对称类都可以作为该模型的实例得到体现。通过我们的分析，我们得以探究一维量子系统中 Zak 相位的拓扑内容，包括体性质和体边对应。

已知反演对称性能够保护 Zak 相位的量子化 [12, 76]；在适当的规范下，Zak 相位也能重现 $\mathbb{Z}$值的拓扑指标，适用于双带手征系统，例如著名的 Su–Schrieffer–Heeger 模型 [77–79]。一般而言，对于具有电荷共轭和/或手征对称性，且在零能附近存在谱隙的晶格紧束缚模型，多带 Zak 相位可给出定义良好的规范和拓扑不变量，其定义如下 [79]。假 m 设模型有 m 条负能带和 条正能带。在多带情形下，Zak 相位应通过准布洛赫函数 [80] 来定义：准布洛赫函数 $\{\hat{}u_n(k)\}_{1\le n\le m}$ 是哈密顿量投影到负能带上的谱投影$P_-(k)$的本征函数，而不是哈密顿量的本征函数（这些负能带彼此之间未必隔离，但与正能带之间存在能隙）。电荷共轭

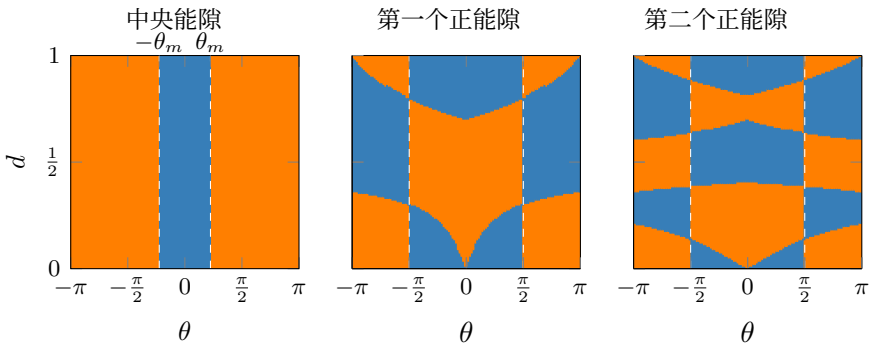

图 11：$\mathcal{H}_{U_{CS}(\theta)}(d, \frac{\pi}{2})$的边缘态数量 N 的相图，其中 $N = 0$ 以蓝色表示，$N = 1$ 以橙色表示。

或手征对称性算子可用于将这组准布洛赫函数扩展为一组基 $\{\hat{u}_n(k)\}_{1\leq n\leq 2m}$，使其张成整个纤维希尔伯特空间，并涵盖原胞中的所有自由度。于是，量

$$\mathcal{I} = \mathrm{i}\int_{-\pi}^{\pi}\sum_{n=1}^{2m}\langle\hat{u}_n(k,\cdot)|\partial_k\hat{u}_n(k,\cdot)\rangle\,\mathrm{d}k = 2\mathrm{i}\int_{-\pi}^{\pi}\sum_{n=1}^{m}\langle\hat{u}_n(k,\cdot)|\partial_k\hat{u}_n(k,\cdot)\rangle\,\mathrm{d}k$$

始终是 2π的整数倍；如果只允许保持对称性的局部规范变换，其奇偶性也具有规范不变性（参见附录 C）。此外，$\mathcal{I}/2\pi$ 模 2再现了 $\mathbb{Z}$值指数的奇偶性。正如表 1所预测的，该指数可针对多能带手征链 [81]定义。量子化 $\mathcal{I}$ 的定性原因在于，若将所有 $2m$ 能带都考虑在内，则准布洛赫函数$\{\hat{u}_n(k)\}_{1\leq n\leq 2m}$ 可通过酉矩阵 $U(k)$与 $k = 0$ 处的准布洛赫函数相关联，即

$$\hat{u}_a(0,\cdot) = \sum_{b=1}^{2m}[U(k)]_{a,b}\hat{u}_b(k,\cdot) \tag{49}$$

对任意 $k \in [-\pi, \pi)$。于是可以证明

$$\sum_{n=1}^{2m}\langle\hat{u}_n(k,\cdot)|\partial_k\hat{u}_n(k,\cdot)\rangle = \overline{\det(U(k))}\,\partial_k\det(U(k)),$$

因此，利用标准复分析，$\mathcal{I}/2\pi$ 测量了 $k \mapsto U(k)$的行列式围绕零点的整数绕数。

前面的讨论强调，对于一般的紧束缚模型，只有将零能以下的所有（有隙）谱带作为整体来考虑时，才预期会出现以 Zak 相位量子化形式体现的拓扑内容，而

能够进行拓扑分类的对象是投影 $P_{-}(k)$ [82]。如果只考虑单个孤立谱带，那么 Zak 相位通常会失去其全部拓扑意义，因为连续变形可以利用环境空间中的额外维度来“解绕”该相位 [10]。原则上，这些额外维度在连续模型中总是可及的；在布洛赫–弗洛凯（–Zak）表象下，纤维希尔伯特空间是无限维的，因此 Zak 相位作为拓扑标记的作用受到了质疑 [83]：考虑单个谱带意味着取用矩阵 $U(k)$，如式（49）所示；此时这些矩阵不再是酉矩阵，因此其行列式的绕数可能未定义。

在本文分析的 gDKP 模型中，我们确实发现 D 类中的 Zak 相位取值并未量子化（见图4）：因此，Zak 相位并非表 $\mathbb{Z}_2$中所预测的取值为该值的指标的拓扑标记。1。令人惊讶的是，该模型在手征类 BDI 和 AIII 中呈现量子化的Zak 相位（见图6 和7），这表明在存在手征对称性的情况下，Zak 相位应与更稳健的（相对）拓扑不变量相关，该不变量对应于相（之差）。鉴于这些发现似乎与上述一般理论框架相矛盾，我们计划在未来的工作中对此进行进一步研究。尤其是，目前尚不清楚如何设计其他标记来刻画这一特定模型的拓扑性质。

关于体边对应（BBC），我们发现，Zak 相位仍能以与谱隙相关的相对边界拓扑指标的形式，检测边缘态的存在。然而，我们的结果表明，在连续模型中，局域边缘态的存在不仅取决于体拓扑数据，还取决于系统的截断方式。这进一步证实了这些边缘拓扑指标取决于周期单胞的选择，正如附录C.2中所述；除此之外，截断模型的边界条件也会影响其取值。具体而言，本文研究的一维系统的截断方式取决于两个参数$(d,\ \alpha) \in [0,1) \times [-\pi,\pi)$，它们分别表征切口的位置以及边缘处附加的边界条件。对于 BDI 对称类，我们证明体边对应成立，其关系为恒等式

$$\frac{1}{\pi}\tilde{Z}_{U,n}(d) = |N^{\mathrm{b}}_{U,n}(d,\alpha) - N^{\mathrm{a}}_{U,n}(d,\alpha)|, \tag{50}$$

对于任意 $n \in \mathbb{Z}^*$，当：

- $d = \frac{1}{2}$ and $\alpha \in (-\pi,\pi) \setminus \{0\}$, see Eq. (45) and Fig. 10;
- $d = 0$ and $\alpha = \pm\frac{\pi}{2}$, see Eq. (45) and Fig 11.

对于所有其他的 d 和 α 取值，我们观察到对应关系出现了系统性偏离。我们预期，类似结果也适用于 AIII 对称类，不过对于后者，我们仅明确考察了

参数 $d=\frac{1}{2}$ 和 $\alpha=\pm\frac{\pi}{2}$（见图 9）。值得注意的是，近期在相关连续模型中也观察到了（孤立的）对应关系偏离 [54, 65, 66, 69–71]。由此可见，体边对应对切割位置 d 非常敏感。尽管如此，当截断系统与相应的体哈密顿量属于同一对称类时，仍可获得一定的“稳定性”：当 $\alpha=\pm\frac{\pi}{2}$ 边缘处的边界条件也关于 S 和 C对称时，我们发现中央能隙中的（零能）边缘态数目完全不受 d 取值的影响（见图 11左图）。我们认为，这一积极结果对于更现实的模型也具有实际用途，这些模型探讨了马约拉纳零模在拓扑量子计算中的作用 [1, 84, 85]。

gDKP 模型提供了一个灵活的连续框架，可用于探索超越紧束缚描述的一维拓扑相。本工作的自然延伸包括引入无序或准周期点相互作用；在这些情形下，传递矩阵方法仍然适用，并有望揭示非周期系统中边缘态的稳定性。将我们的分析推广到作用于四分量旋量的狄拉克算子也很有意义，这将使我们能够研究更多对称性类别，并与石墨烯基结构等具有实验相关性的系统建立更紧密的联系。更广泛地说，我们的结果凸显了边界条件对于拓扑物质连续模型的重要性，并表明，谨慎处理自伴延拓对于在连续量子系统中一致地表述体边对应至关重要。

奇异狄拉克算子

在本附录中，我们讨论 gDKP 模型 $\tilde{H_U}$（方程（1））与奇异狄拉克算子 $H_{\boldsymbol{g}}$ 及其周期排列的狄拉克δ势（见方程（4））之间的联系。阐明这一联系后，在第A.1节中，我们将在第A.2节利用这一联系计算与 H_U相关的传递矩阵。

A.1 点相互作用与耦合条件

自由狄拉克算子 H 的最一般奇异扰动（由位于 $x=0$ 的单个点相互作用构成）为

$$\tilde{H}_{0,\boldsymbol{g}}=-\mathrm{i}\sigma_x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+m\sigma_z+V_{\boldsymbol{g}}\delta(x),\qquad V_{\boldsymbol{g}}=\begin{pmatrix}g_0+g_3 & g_1-\mathrm{i}g_2\\ g_1+\mathrm{i}g_2 & g_0-g_3\end{pmatrix},$$

其中 $V_{\boldsymbol{g}}$ 是包含耦合的厄米矩阵

$$\boldsymbol{g}=(g_0,g_1,g_2,g_3)\in\mathbb{R}^4$$

和 $\delta(x)$ 是狄拉克δ分布 [21–23]。[3] 对适当的旋量 $\Psi(x)$点相互作用施加耦合条件

$$(2\mathrm{i}\sigma_x - V_{\boldsymbol{g}})\Psi(0^+) = (2\mathrm{i}\sigma_x + V_{\boldsymbol{g}})\Psi(0^-), \tag{51}$$

这等价于以下跳跃–平均条件:

$$V_{\boldsymbol{g}}(\Psi(0^-) + \Psi(0^+)) = -2\mathrm{i}\sigma_x(\Psi(0^-) - \Psi(0^+)). \tag{52}$$

由于

$$\det(2\mathrm{i}\sigma_x \pm V_{\boldsymbol{g}}) = 4 + g_0^2 - g_1^2 - g_2^2 - g_3^2 \mp 4\mathrm{i}g_1$$

当.....时，矩阵 $2\mathrm{i}\sigma_x \pm V_{\boldsymbol{g}}$ 不可逆

$$g_1 = 0 \qquad \text{and} \qquad g_0^2 - g_2^2 - g_3^2 = -4,$$

从而导致这些条件解耦

$$(2\mathrm{i}\sigma_x - V_{\boldsymbol{g}})\Psi(0^+) = 0, \qquad (2\mathrm{i}\sigma_x + V_{\boldsymbol{g}})\Psi(0^-) = 0,$$

这意味着该点相互作用不可渗透。注意，通过奇异规范变换 [23]，参数 g_1 始终可以设为零。

另一方面，当最初定义于 $C_0^\infty(\mathbb{R}\setminus\{0\};\mathbb{C}^2)$ 中时，导致 H的自伴延拓 $H_{0,\,U}$ 的最一般耦合条件为

$$\Psi_-(0) = U\Psi_+(0), \qquad \Psi_\pm(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\phi(0^-) \pm \chi(0^-)\\ \phi(0^+) \mp \chi(0^+)\end{pmatrix}$$

对于 $U \in \mathrm{U}(2)$。为理解上述耦合条件与方程（51）–（52）中的耦合条件之间的关系，我们注意到

$$\begin{aligned}\Psi(0^-) + \Psi(0^+) &= \Lambda(\Psi_+(0) + \sigma_x\Psi_-(0)),\\ \Psi(0^-) - \Psi(0^+) &= \sigma_x\Lambda(\Psi_+(0) - \sigma_x\Psi_-(0)),\end{aligned}$$

其中

$$\Lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} = \Lambda^\dagger$$

是一个酉矩阵。然后，将 $\Psi_-(0) = U\Psi_+(0)$ 代入方程（52），并令 $\tilde{V}_{\boldsymbol{g}} = \Lambda V_{\boldsymbol{g}}\Lambda$ 且 $\tilde{U} = -\sigma_x U$ 可得

$$\tilde{V}_{\boldsymbol{g}}(I - \tilde{U}) = -2\mathrm{i}(I + \tilde{U}),$$

[3] 关于 [23] 的记号，我们有 $g_0 = \eta$、$g_1 = \omega$、$g_2 = \lambda$ 和 $g_3 = \tau$。

也就是说，$-\frac{1}{2}\tilde{V}_{\boldsymbol{g}}$ 和 $\tilde{U}$ 通过逆凯莱变换相关联：

$$-\frac{1}{2}\tilde{V}_{\boldsymbol{g}} = \mathrm{i}(I+\tilde{U})(I-\tilde{U})^{-1}. \tag{53}$$

我们回顾一下，对于任意厄米矩阵 V，都存在一个唯一的酉矩阵与之对应，该矩阵由凯莱变换 $\mathcal{C}(V) = (V-\mathrm{i}I)(V+\mathrm{i}I)^{-1}$给出，其中$1 \notin \mathrm{spec}(\mathcal{C}(V))$；而只有当 $1 \notin \mathrm{spec}(U)$时，酉矩阵$U$ 的逆凯莱变换才有定义。在我们的情形中，利用公式（7）中引入的 $\mathrm{U}(2)\tilde{}$参数化可知，当且仅当 $1 \in \mathrm{spec}(U)$ 时，

$$m_1 = \sin(\eta).$$

若 $m_1 \neq \sin(\eta)$，我们便可导出一一对应关系

$$H_{0,U} = \tilde{H}_{0,\boldsymbol{g}(U)}$$

其中关系 $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{g}(U)$ 由公式（53）得出，具体为

$$\begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix} = \frac{2}{\sin(\eta) - m_1} \begin{pmatrix} \cos(\eta) \\ m_2 \\ m_3 \\ -m_0 \end{pmatrix}. \tag{54}$$

若 $m_1 = \sin(\eta)$，则不同的算子$H_{0,\,U}$ 在形式上一般都可对应于某个$H_{0,\,\boldsymbol{g}(U)}$ 其耦合取值为无穷大，即 $\boldsymbol{g}(U) \in (\mathbb{R} \cup \{\infty\})^4$。

为了对式（54）求逆，方便起见，引入以下量

$$\Delta = 4 - g_0^2 + g_1^2 + g_2^2 + g_3^2.$$

我们得到以下关系：

- 若 $g_0 \neq 0$ 且 $\Delta \neq 0$ 则

$$\eta = \arctan\left(\frac{\Delta}{4g_0}\right) \bmod \pi,$$

$$\begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{sign}(\Delta)}{\sqrt{16g_0^2 + \Delta^2}} \begin{pmatrix} -4g_3 \\ \Delta - 8 \\ g_1 \\ g_2 \end{pmatrix};$$

- 如果 $g_0 = 0$ 且 $\Delta \geq 4$ 那么

$$\eta = \frac{\pi}{2},$$

$$\begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{4 + g_1^2 + g_2^2 + g_3^2} \begin{pmatrix} -4g_3 \\ g_1^2 + g_2^2 + g_3^2 - 4 \\ g_1 \\ g_2 \end{pmatrix};$$

- 如果 $\Delta = 0$ 且 $g_0^2 \geq 4$ 那么

$$\eta = 0,$$
$$\begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{g_0} \begin{pmatrix} -g_3 \\ -2 \\ g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}.$$

注意到，对于$\boldsymbol{g} \in \mathbb{R}^4$，量 $16g_0^2 + \Delta^2$ 和 $4 + g_1^2 + g_2^2 + g_3^2$ 均不为零，因此我们已经穷尽了所有可能性。此外，注意到 $\boldsymbol{g} = (0,\ g_1,\ 0,\ 0)$对应于

$$\eta = \frac{\pi}{2}, \qquad m_0 = m_3 = 0, \qquad m_1 = \frac{g_1^2 + 4}{g_1^2 - 4}, \qquad m_2 = \frac{g_1}{g_1^2 - 4},$$

而解耦条件 $g_1 = 0$ 和 $g_0^2 - g_2^2 - g_3^2 = -4$ 则导出

$$m_1 = m_2 = 0,$$

与第 2.2 节中的讨论一致。

A.2 传递矩阵

本节推导与 gDKP 模型 H_U相关联的传递矩阵的表达式。传递矩阵 $T_U(\epsilon,\ d)$由以下关系定义：

$$\Psi_\epsilon((n + d + 1)^+) = T_U(\epsilon, d)\Psi_\epsilon((n + d)^+)$$

对于任意 $n \in \mathbb{Z}$ 和 $d \in [0, 1)$，其中 $\Psi_\epsilon(x)$ 是H_U的任意（广义）本征旋量，其能量为 ϵ。首先注意，如果 $g_1 \neq 0$ 且 $g_0^2 - g_2^2 - g_3^2 \neq -4$，则式（51）中的耦合条件可写成以下形式：

$$\Psi(0^+) = \tilde{D}_{\boldsymbol{g}}\Psi(0^-)$$

其中

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{\boldsymbol{g}} &= (2\mathrm{i}\sigma_x - V_{\boldsymbol{g}})^{-1}(2\mathrm{i}\sigma_x + V_{\boldsymbol{g}}) \\ &= -(-\tfrac{1}{2}\sigma_x V_{\boldsymbol{g}} + \mathrm{i}I)^{-1}(-\tfrac{1}{2}\sigma_x V_{\boldsymbol{g}} - \mathrm{i}I) \\ &= -\mathcal{C}(-\tfrac{1}{2}\sigma_x V_{\boldsymbol{g}}) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{4 - g_0^2 + g_1^2 + g_2^2 + g_3^2 - 4g_2}{4 + g_0^2 - g_1^2 - g_2^2 - g_3^2 + 4\mathrm{i}g_1} & \frac{-4\mathrm{i}(g_0 + g_3)}{4 + g_0^2 - g_1^2 - g_2^2 - g_3^2 + 4\mathrm{i}g_1} \\ \frac{-4\mathrm{i}(g_0 - g_3)}{4 + g_0^2 - g_1^2 - g_2^2 - g_3^2 + 4\mathrm{i}g_1} & \frac{4 - g_0^2 + g_1^2 + g_2^2 + g_3^2 + 4g_2}{4 + g_0^2 - g_1^2 - g_2^2 - g_3^2 + 4\mathrm{i}g_1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

由于

$$\det(\tilde{D}_{\boldsymbol{g}}) = \frac{\det(2\mathrm{i}\sigma_x + V_{\boldsymbol{g}})}{\det(2\mathrm{i}\sigma_x - V_{\boldsymbol{g}})} = \frac{4 + g_0^2 - g_1^2 - g_2^2 - g_3^2 - 4\mathrm{i}g_1}{4 + g_0^2 - g_1^2 - g_2^2 - g_3^2 + 4\mathrm{i}g_1}$$

~我们有 $|\det(D_{\boldsymbol{g}})| = 1$。注意，一般而言 $\sigma_x V_{\boldsymbol{g}}$ 并非厄米~矩阵，因此 $D_{\boldsymbol{g}}$ 不是酉矩阵。回顾关系式（53），我们可以计算与 $H_{0,U}$ 相关的传递矩阵的相互作用部分，即

$$\begin{aligned} D_U &= \tilde{D}_{\boldsymbol{g}(U)} \\ &= -\mathcal{C}(\sigma_x \Lambda \mathcal{C}^{-1}(-\sigma_x U)\Lambda) \\ &= \frac{1}{m_1 - \mathrm{i}m_2} \begin{pmatrix} -\sin(\eta) - m_3 & \mathrm{i}(\cos(\eta) + m_0) \\ \mathrm{i}(\cos(\eta) - m_0) & -\sin(\eta) + m_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

其中 $\mathcal{C}^{-1}(U) = \mathrm{i}(I-U)^{-1}(I+U)$ 是 U 的逆凯莱变换。现在考虑 $H_{0,U}$ 的本征旋量 $\Psi_\epsilon(x)$，其本征值为 $\epsilon \in \mathbb{R}$。对于任意 $x \neq 0$，$\Psi_\epsilon(x)$ 满足方程

$$-\mathrm{i}\sigma_x \Psi'_\epsilon(x) + m\sigma_z \Psi_\epsilon(x) = \epsilon \Psi_\epsilon(x)$$

我们可以将其写成 $\Psi'_\epsilon(x) = \mathrm{i}Q(\epsilon)\Psi_\epsilon(x)$ 的形式，其中

$$Q(\epsilon) = \epsilon\sigma_x + \mathrm{i}m\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon + m \\ \epsilon - m & 0 \end{pmatrix}.$$

由于 $Q(\epsilon)^2 = q^2 I$，其中 $q = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\arg(\epsilon^2 - m^2)/2}\sqrt{|\epsilon^2 - m^2|}$ 已在方程（20）中引入，我们得到与长度为 $0 \leq d \leq 1$ 的路径相关联的自由传播子的如下表达式：

$$P(\epsilon, d) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}dQ(\epsilon)} = \cos(qd)I + \mathrm{i}d\,\mathrm{sinc}(qd)Q(\epsilon).$$

结合上述结果，与H_U 相关联的完整传递矩阵可表示为

$$T_U(\epsilon, d) = P(\epsilon, d) D_U P(\epsilon, 1-d).$$

注意，由于

$$\det(D_U) = \frac{m_1 + \mathrm{i}m_2}{m_1 - \mathrm{i}m_2}, \qquad \det(P(\epsilon, d)) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}d\,\mathrm{tr}(Q(\epsilon))} = 1,$$

传递矩阵是幺模的，即 $|\det(T_U(\epsilon, d))| = 1$。

B 纤维哈密顿量的本征值问题

在本附录中，我们讨论本征值方程

$$(h_U(k) - \epsilon_U(k))\Psi_\epsilon(k, x) = 0 \tag{55}$$

与纤维哈密顿量 $h_U(k)$ 相关联，其在式（18）中引入。上述方程由两个耦合微分方程组成，具体如下

$$-\mathrm{i}\phi'_\epsilon(k, x) = (\epsilon + m)\chi_\epsilon(k, x), \qquad -\mathrm{i}\chi'_\epsilon(k, x) = (\epsilon - m)\phi_\epsilon(k, x), \tag{56}$$

对于给定的 $\epsilon \in \mathbb{R}$，准周期解（即满足关系式 $\Psi_\epsilon(k,1_2) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k}\Psi_\epsilon(k,-\frac{1}{2})$）在 $H^1((-\frac{1}{2},1_2)\backslash\{0\})$中的空间是二维的，通解可以写为

$$\Psi_\epsilon(k,x) = c^+ \begin{pmatrix} \phi_\epsilon^+(k,x) \\ \chi_\epsilon^+(k,x) \end{pmatrix} + c^- \begin{pmatrix} \phi_\epsilon^-(k,x) \\ \chi_\epsilon^-(k,x) \end{pmatrix},$$

其中 $c^\pm \in \mathbb{C}$。将上述解代入边界值$\Psi_\pm(0)$，并令

$$\Psi_\pm(0) = A_{k,\pm}(\epsilon) \begin{pmatrix} c^+ \\ c^- \end{pmatrix}$$

其中

$$A_{k,\pm}(\epsilon) = \begin{pmatrix} \phi_\epsilon^+(k,0^-) \pm \chi_\epsilon^+(k,0^-) & \phi_\epsilon^-(k,0^-) \pm \chi_\epsilon^-(k,0^-) \\ \phi_\epsilon^+(k,0^+) \mp \chi_\epsilon^+(k,0^+) & \phi_\epsilon^-(k,0^+) \mp \chi_\epsilon^-(k,0^+) \end{pmatrix}, \tag{57}$$

施加耦合条件 $\Psi_- = U\Psi_+$ 等价于要求下列谱函数为零：

$$F_{U,k}(\epsilon) = \det\big(B_k(\epsilon) - U\big) = 0, \qquad B_k(\epsilon) = A_{k,-}(\epsilon)A_{k,+}^{-1}(\epsilon). \tag{58}$$

确定第 B.1 节中本征自旋量的显式表达式后，我们在第 B.2 节推导谱函数。

B.1 本征自旋量

若 $\epsilon \neq \pm m$，我们可以将式（56）重排为

$$\phi_\epsilon''(k,x) = -q^2\phi_\epsilon(k,x), \qquad \chi_\epsilon(k,x) = -\frac{\mathrm{i}}{\epsilon+m}\phi_\epsilon'(k,x)$$

其中 $q = q(\epsilon) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\arg(\epsilon^2-m^2)/2}\sqrt{|\epsilon^2-m^2|}$已在方程（20）中引入。上述方程很容易积分，得到第 3.1.2 节所示的拟周期解：

$$\Psi_\epsilon(k,x) = \begin{cases} \xi^+\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} + \xi^-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}, & x < 0 \\ \xi^+\mathrm{e}^{\mathrm{i}[q(x-1)+k]} + \xi^-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[q(x-1)-k]}, & x > 0 \end{cases}$$

其中

$$\xi^\pm = c^\pm \begin{pmatrix} 1 \\ \pm\frac{q}{\epsilon+m} \end{pmatrix}.$$

耦合条件方程 $\Psi_-(0) = U\Psi(0)$，等价于

$$M_{U,k}(\epsilon) \begin{pmatrix} c^- \\ c^+ \end{pmatrix} = 0 \tag{59}$$

其中

$$M_{U,k}(\epsilon) = A_{-,k}(\epsilon) - UA_{+,k}(\epsilon) = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}, \tag{60}$$

可用于确定系数 $c^{\pm}$。通过设定

$$c^{+} = m_{12}, \qquad c^{-} = -m_{11},$$

我们得到（除去一个预因子）显式表达式

$$c^{\pm} = \pm\big(1 \pm \tfrac{q}{\epsilon+m}\big)(1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+\eta\pm q)}(\mathrm{i}m_1 + m_2)) \mp \big(1 \mp \tfrac{q}{\epsilon+m}\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta}(m_0 + \mathrm{i}m_3).$$

B.2 谱函数

为了确定谱函数的显式解，我们首先注意到，利用关系式

$$\det(M - N) = \det(M) + \det(N) + \operatorname{tr}(MN) - \operatorname{tr}(M)\operatorname{tr}(N),$$

该关系式对任意一对 2×2 矩阵均成立，因此我们得到

$$F_{U,k}(\epsilon) = \det(B_k(\epsilon)) + \det(U) + \operatorname{tr}(B_k(\epsilon)U) - \operatorname{tr}(B_k(\epsilon))\operatorname{tr}(U). \tag{61}$$

然后利用解（B.1）可得

$$A_{k,\pm}(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 \pm \frac{q}{\epsilon+m} & 1 \mp \frac{q}{\epsilon+m} \\ \big(1 \mp \frac{q}{\epsilon+m}\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-q)} & \big(1 \pm \frac{q}{\epsilon+m}\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+q)} \end{pmatrix}$$

and

$$B_k(\epsilon) = a(\epsilon)I + b(\epsilon)\sigma_k$$

其中

$$\sigma_k = \cos(k)\sigma_x + \sin(k)\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} & 0 \end{pmatrix}$$

and

$$a(\epsilon) = \frac{m\sin(q)}{\epsilon\sin(q) - \mathrm{i}q\cos(q)}, \qquad b(\epsilon) = \frac{-\mathrm{i}q}{\epsilon\sin(q) - \mathrm{i}q\cos(q)}.$$

利用式（61）中的表达式，我们得到

$$F_{U,k}(\epsilon) = a(\epsilon)^2 - b(\epsilon)^2 + \det(U) - a(\epsilon)\operatorname{tr}(U) + b(\epsilon)\operatorname{tr}(U\sigma_k) \tag{62}$$

并通过舍弃一个非零乘性因子，以及利用U(2)参数化（式（7）），我们进一步得到等价表达式

$$F_{U,k}(\epsilon) = m_1\cos(k) + m_2\sin(k) + \cos(q)\sin(\eta) + \operatorname{sinc}(q)(\epsilon\cos(\eta) - mm_0). \tag{63}$$

式（63）中的谱函数始终是 ϵ 的实函数，与式（62）中的谱函数不同。需要强调的是，尽管上述谱函数是在假设 $\epsilon \neq \pm m$ 的前提下推导出来的，但沿着 [17, 86] 的思路可以证明，即使在 $\epsilon = \pm m$ 时，该函数也可以一致地使用。

C 贝里相与 Zak 相

本附录将在第 C.1 节回顾与一般参数空间相关的贝里相的定义，并在第 C.2 节讨论如何将其推广到参数空间为（一维）布里渊区的情形，从而得到 Zak 相位。

C.1 贝里相

设 $H(\boldsymbol{\xi})$ 表示一族依赖于（矢量）参数 $\boldsymbol{\xi}$ 的哈密顿量。我们考虑在参数空间中沿一条闭合 路径 C 进行循环演化，并假设哈密顿量 $H(\boldsymbol{\xi})$ 具有共同的定义域，且存在与本征值 $\epsilon(\xi)$ 对应的本征态 $\phi(\boldsymbol{\xi})$；对于所有 $\boldsymbol{\xi} \in C$，该本征值都不与其他本征值交叉。将路径 C 的端点记为 $\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}}$ 和 $\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}}$，其中 $\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}} = \boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}}$，显然有

$$H(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}}) = H(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}}), \qquad \phi(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}}) = \phi(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}}). \tag{64}$$

与 $\phi(\boldsymbol{\xi})$ 和 C 相关联的（Pancharatnam–）贝里相定义为贝里联络 [55, 62, 87–89] 的环路积分：

$$\gamma_C = \oint_C \mathcal{A}(\boldsymbol{\xi}), \qquad \mathcal{A}(\boldsymbol{\xi}) = \mathrm{i}\langle\phi(\boldsymbol{\xi})|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\xi}}\phi(\boldsymbol{\xi})\rangle \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{\xi}.$$

参数空间中的局域规范变换，

$$\phi(\boldsymbol{\xi}) \mapsto \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\boldsymbol{\xi})}\phi(\boldsymbol{\xi}),$$

若满足式（64）中的条件，则允许进行；这意味着 $\theta(\boldsymbol{\xi})$必须满足

$$\theta(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}}) - \theta(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}}) \in 2\pi\mathbb{Z}, \tag{65}$$

但也可能是一个多值函数。注意，虽然贝里联络依赖于规范，

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{\xi}) \mapsto \mathcal{A}(\boldsymbol{\xi}) + \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\xi}}\theta(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{\xi},$$

贝里相在模 2π 意义下是规范不变的，

$$\gamma_C \mapsto \oint_C \mathcal{A}(\boldsymbol{\xi}) + \theta(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}}) - \theta(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}}),$$

而所谓的阿贝尔威尔逊环 $W_C = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_C}$ 始终是规范不变的。

在某些情况下，对于从 $\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}}$ 到 $\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}}$的开放路径，我们也可以得到一个可测量（即规范不变）的量。假设 $H(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}})$与$H(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}})$通过酉算符 τ相关：

$$H(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}}) = \tau H(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}})\tau^{\dagger}, \qquad \phi(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{i}}) = \tau\phi(\boldsymbol{\xi}_{\mathrm{f}}),$$

那么，如果酉算符与局域规范变换对易，我们仍然可以得到规范无关的贝里相（模 2π），

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\boldsymbol{\xi}_\mathrm{i})}\phi(\boldsymbol{\xi}_\mathrm{i}) = \tau(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\boldsymbol{\xi}_\mathrm{f})}\phi(\boldsymbol{\xi}_\mathrm{f})) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\boldsymbol{\xi}_\mathrm{f})}\tau\phi(\boldsymbol{\xi}_\mathrm{f}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\boldsymbol{\xi}_\mathrm{f})}\phi(\boldsymbol{\xi}_\mathrm{i}),$$

因此，方程（65）仍然成立。

C.2 Zak 相位

在周期系统中，我们可以将布里渊区 $[-\pi,\pi)$（为简单起见，假设晶格间距为单位长度）视为计算贝里相的参数空间。在这种情况下，例如，可以施加电场，使 k 在整个布里渊区 [12,55,57,62,90] 内线性变化。因此，初始参数 $k_\mathrm{i} = -\pi$ 与最终参数 $k_\mathrm{f} = \pi$ 由倒格矢 2π 相连；若系统在 Bloch–Floquet–Zak 表象中由哈密顿量 $H(k)$ 描述（参见例如 [55, 57]），则有

$$H(-\pi) = \tau_{2\pi} H(\pi) \tau_{2\pi}^\dagger,$$

其中酉算符

$$\tau_k \colon u(x) \mapsto \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} u(x)$$

与局域规范变换 $u(x) \mapsto \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(k)} u(x)$ 对易。在 Bloch–Floquet–Zak 表象中，$H(k)$ 的本征函数 $u_n(k, x)$ 满足周期规范

$$u_n(k + k', x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x} u_n(k, x)$$

对于每个 $k' \in 2\pi\mathbb{Z}$。因此，我们可以定义一个贯穿整个布里渊区的开路径贝里相，在此语境下称为 Zak 相位

$$Z_n = \mathrm{i} \int_{-\pi}^{\pi} \langle u_n(k,\cdot) | \partial_k u_n(k,\cdot) \rangle \, \mathrm{d}k,$$

其中，内积是与该（维格纳–塞茨）原胞的希尔伯特空间相关联的内积。

众所周知，Zak 相位在原胞的幺正平移下并不保持不变。事实上，在进行如下平移时

$$[-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}) \mapsto [-1 + d, d) \tag{66}$$

由量 $\frac{1}{2} - d$ 给出，其中 $d \in [0, 1)$，布洛赫–弗洛凯–Zak 表象中的本征函数变化如下

$$u_n(k, x) \mapsto \tilde{u}_n(k, x - \tfrac{1}{2} + d) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\left(\frac{1}{2} - d\right)} u_n(k, x).$$

然后，由于

$$\mathrm{i}\langle\tilde{u}_n(k,\cdot)|\partial_k\tilde{u}_n(k,\cdot)\rangle = \mathrm{i}\langle u_n(k,\cdot)|\partial_k u_n(k,\cdot)\rangle - \tfrac{1}{2} + d,$$

与新原胞相关的 Zak 相位为

$$\tilde{Z}_n(d) = Z_n - \pi(1-2d), \tag{67}$$

其中 $Z_n = \tilde{Z}_n(\frac{1}{2})$。

C.2.1 数值计算

为了数值计算 Zak 相位，我们通过取 M 个点对布里渊区 $[-\pi,\pi)$ 进行离散化

$$k_i = -\pi + i\frac{2\pi}{M}$$

对于 $i \in \{0,\dots,M\}$。Zak 相位随后表示为 [55, 60]

$$Z = -\lim_{M\to+\infty} \operatorname{Im}\log\prod_{i=0}^{M-1} S_i, \qquad S_i = \langle u(k_i,\cdot)|u(k_{i+1},\cdot)\rangle.$$

其中，为简化记号，我们省略了对量子数 n 的依赖。对于正文中讨论的情形，见方程（21）和（26），内积 S_i 有四项贡献，可以明确计算得到。令 $\xi_i^{\pm} = \xi^{\pm}|_{k=k_i}$ 以及 $q_i = q(\epsilon(k_i))$ 可得：

$$S_i = S_i^{(1)} + S_i^{(2)} + S_i^{(3)} + S_i^{(4)},$$

其中

$$S_i^{(j)} = A_i^{(j)}\left(\int_{-\frac{1}{2}}^{0} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i^{(j)}x}\,\mathrm{d}x + \int_{0}^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i^{(j)}(x-1)}\,\mathrm{d}x\right) = A_i^{(j)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\alpha_i^{(j)}}{2}}\operatorname{sinc}\left(\frac{\alpha_i^{(j)}}{2}\right) \tag{68}$$

and

$$\begin{aligned}
A_i^{(1)} &= (\xi_i^+)^\dagger\xi_{i+1}^+, & \alpha_i^{(1)} &= q_{i+1} - \overline{q}_i + \tfrac{2\pi}{M},\\
A_i^{(2)} &= (\xi_i^-)^\dagger\xi_{i+1}^+, & \alpha_i^{(2)} &= q_{i+1} + \overline{q}_i + \tfrac{2\pi}{M},\\
A_i^{(3)} &= (\xi_i^+)^\dagger\xi_{i+1}^-, & \alpha_i^{(3)} &= -q_{i+1} - \overline{q}_i + \tfrac{2\pi}{M},\\
A_i^{(4)} &= (\xi_i^-)^\dagger\xi_{i+1}^-, & \alpha_i^{(4)} &= -q_{i+1} + \overline{q}_i + \tfrac{2\pi}{M}.
\end{aligned}$$

参考文献

[1] A. Yu. Kitaev, 《量子线中的未配对马约拉纳费米子》, Phys. Usp. 44, 131 (2001)[2] M. Z. Hasan 和 C. L. Kane, 《专题综述：拓扑绝缘体》, Rev. Mod. Phys. 82, 3045–3067 (2010)[3] Y.P. Chen, 《基于拓扑绝缘体的节能器件》。Proc. SPIE 8373, Micro- and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications IV, 83730B (2012)[4] A. Kitaev, 《拓扑绝缘体和超导体的周期表》, AIP Conf. Proc. 1134, 22–30 (2009)[5] S. Ryu、A.P. Schnyder、A. Furusaki 和 A.W.W. Ludwig, 《拓扑绝缘体和超导体：十重分类与维度层级》, 新物理学杂志 12, 065010 (2010)[6]C.-K. Chiu、J.C.Y. Teo、A.P. Schnyder 和 S. Ryu, 《具有对称性的拓扑量子物质分类》, Rev. Mod. Phys. 88, 035005 (2016)[7]A. Altland 和 M. R. Zirnbauer, 《介观正常-超导杂化结构中的非标准对称类》, Phys. Rev. B 55, 1142 (1997)[8] P. Heinzner、A. Huckleberry 和 M. R. Zirnbauer, 《无序费米子的对称类》, 数学物理通讯 257, 725–771 (2005)[9]G. C. Thiang, 《拓扑相：同构、同伦与 K-理论》, Int. J. Geom. Methods Mod. Phys. 12, 1550098 (2015)[10] G. Peluso, 《酉等价与同伦等价：量子物质低维拓扑相的分类》, 博士论文, 在线网址：https://hdl.handle.net/11573/1758308 (2026)[11] J. Shapiro 和 M.I. Weinstein, 《连续 SSH 模型是否具有拓扑性？》, 数学物理杂志 63, 11 111901 (2022)[12] J. Zak, 《固体能带的贝里相位》, 物理评论快报 62, 23 (1989)[13] E. McCann 和 V.I. Fal'ko, 《碳纳米管中电子狄拉克方程边界条件的对称性》, 《物理学杂志：凝聚态物质》16, 2371–2379 (2004)

[14] A.R. Akhmerov 和 C.W.J. Beenakker, 《终止蜂窝晶格上狄拉克费米子的边界条件》, Phys. Rev. B 77, 085423 (2008)[15] A.H. Castro Neto、F. Guinea、N.M.R. Peres、K.S. Novoselov、A.K. Geim, 《石墨烯的电子性质》, Rev. Mod. Phys. 81, 1 109–162 (2009)[16] G. Angelone、E. Ercolessi、P. Facchi、D. Lonigro、R. Maggi、G. Marmo、S. Pascazio 和 F.V. Pepe, 《狄拉克理论的降维》, 物理学杂志A：数学与理论 56, 065201 (2023)[17] G. Angelone, 《一维狄拉克算子的边界条件探测》, 载于：B. Cassano、F.D. Cunden、M. Gallone、M. Ligabò、A. Michelangeli（编）, 《奇点、渐近性与极限模型》, Springer INdAM Series, 第64卷, 第113–129页 (2025)[18] J.E. Avron 和 A. Grossman, 《相对论性 Kronig–Penney 哈密顿量》, Phys. Lett. A 56, 1 55–57 (1976)[19] F. Gesztesy 和 P. Šeba, 《新的可解析求解的相对论点相互作用模型》, Lett. Math. Phys. 13, 345–358 (1987)[20] K. Yoshitomi, 《具有周期性 δ相互作用的狄拉克算子：谱隙与非齐次丢番图逼近》, Michigan Math. J. 58, 2 363–384 (2009)[21] S. Albeverio 和 P. Kurasov, 《半有界算子的秩一扰动》, Integr equ oper theory 27, 379–400 (1997)[22] L. Heriban 和 M. Tušek, 《一维非自伴相对论点相互作用》, J. Math. Anal. Appl. 516, 2, 126536 (2022)[23] B. Cassano、V. Lotoreichik、A. Mas 和 M. Tušek, 《二维狄拉克算子的广义 δ壳层相互作用：自伴性与逼近》, Rev. Mat. Iberoam. 39, 4, 1443–1492 (2023)[24] P. Kurasov, 《不连续测试函数的分布理论及具有广义系数的微分算子》, J. Math. Anal. Appl. 201, 297 (1996)[25] R.-J. Lange, 《薛定谔积分方程的分布理论》, 数学物理杂志 56, 122105 (2015)[26] G. Angelone、M. Asorey、F. Ezquerro 和 P. Facchi, 《广义狄拉克梳的同谱性与非局域性》, 物理学杂志A：数学与理论 58, 395301 (2025)

[27] *I.R. Lapidus*，《相对论性一维氢原子》，《美国物理学杂志》*51, 11 1036–1038 (1983)*[28] *M.G. Calkin*、*D. Kiang* 和 *Y. Nogami*，《一维狄拉克方程中狄拉克δ函数势的正确处理》，《美国物理学杂志》*55, 8 737–739 (1987)*[29]*S. Benvegnù* 和 *L. Dabrowski*，《相对论性点相互作用》，*Lett. Math. Phys. 30, 159–167 (1994)*[30] *R.J. Hughes*，《狄拉克算子的有限秩扰动》，*J. Math. Anal. Appl. 238, 1 67–81 (1999)*[31] *P. Sundberg* 和 *R. Jaffe*，《一维费米子的卡西米尔效应》，《物理年鉴》*309, 442–458 (2004)*[32] *R. Carlone*、*M. Malamud* 和 *A. Posilicano*，《离散集上具有点相互作用的一维狄拉克算子的 *Gesztesy–Šeba* 实现的谱理论》，微分方程杂志 *254 9 3835–3902 (2013)*[33]*J.M. Guilarte*、*J.M. Munoz-Castaneda*、*I. Pirozhenko* 和 *L. Santamaría-Sanz*，《费米子在 δ 杂质上的一维散射》，前沿物理 *7, 109 (2019)*[34] *J. Behrndt*、*M. Holzmann*、*C. Stelzer-Landauer* 和 *G. Stenzel*，《具有奇异相互作用的狄拉克算子的边界三元组与韦尔函数》，现代物理评论 *36, 02 2350036 (2024)*[35] *V. Alonso* 和 *S. De Vincenzo*，《δ型狄拉克点相互作用及其非相对论极限》，国际理论物理杂志 *39, 1483–1498 (2000)*[36] *K. Pankrashkin* 和 *S. Richard*，《具有零程相互作用的一维狄拉克算子：谱、散射与拓扑结果》，数学物理杂志 *55, 6 062305 (2014)*[37] *C.A. Bonin*、*J.T. Lunardi* 和 *L.A. Manzoni*，《一维相对论量子力学中点相互作用的物理解释》，物理学杂志*A*：数学与理论 *57, 095204 (2024)*[38] *M.J. Rave* 和 *W.C. Kerr*，《无反演对称性的周期势中电子的贝里相位》，欧洲物理学杂志*B*辑 *45, 473–477 (2005)*[39] *W.B. Hodge*、*E.D. Welchman* 和 *M.J. Rave*，《自由电子极限下非对称一维势的非平庸贝里相位》，欧洲物理学杂志*B*辑 *84, 351–355 (2011)*

[40] *I. Reshodko*、*A. Benseny*、*J. Romhányi* 和 *T. Busch*，《任意散射势下克罗尼格–彭尼模型中的拓扑态》，新物理学杂志 *21*，*013010*（*2019*）[41] *T.B. Smith*、*C. Kocabas* 和 *A. Principi*，《三谐波金属光栅中的拓扑等离激元波导》，《物理学杂志：凝聚态物质》*33*，*265003*（*2021*）[42] *S.S. Nair*、*G. Žlabys*、*W.-B. He*、*T. Fogarty* 和 *T. Busch*，《拓扑非平庸量子多体系统中的淬火动力学》，《物理评论*A*》*111*，*3 033313*（*2025*）[43] *R.L. Jaffe* 和 *A. Manohar*，《硬球外部狄拉克方程的束缚态》，《物理年鉴》*192*，*321–330*（*1989*）[44] *A. Hosaka* 和 *H. Toki*，《核子的手征袋模型》，《物理报告》*277*，*65–188*（*1996*）[45] *A. Rohim* 和 *K. Yamamoto*，《手征*MIT*边界条件对盒中狄拉克粒子的影响》，《理论与实验物理进展》*2021*，*113B01*（*2021*）[46] *M. Reed* 和 *B. Simon*，《现代数学物理方法》，第 *IV* 卷：算子分析，纽约：学术出版社（*1978*）[47] *P. Kuchment*，《周期椭圆算子概述》，《美国数学会通报》*53*，*343–414*（*2016*）[48] *W.M. Fairbairn*、*M.L. Glasser* 和 *M. Steslicka*，《表面态的相对论理论》，《表面科学》*36*，*2 462–471*（*1973*）[49]*F. Domínguez-Adame*，《相对论与非相对论克罗尼格–彭尼模型》，《美国物理学杂志》*55*，*1003–1006*（*1987*）[50] *R.S.K. Mong* 和 *V. Shivamoggi*，《狄拉克哈密顿量中的边缘态与体边对应》，《物理评论*B*》*83*，*125109*（*2011*）[51] *S.-Q. Shen*、*W.-Y. Shan* 和 *H.-Z. Lu*，《拓扑绝缘体与狄拉克方程》，《自旋》*1*，*1 33–44*（*2011*）[52]*T. Kariyado* 和 *Y. Hatsugai*，《无质量狄拉克费米子的对称性保护量子化与体边对应：在费米子*Shastry-Sutherland*模型中的应用》，《物理评论*B*》*88*，*245126*（*2013*）[53] *M. Xiao*、*Z.Q. Zhang* 和 *C.T. Chan*，《一维系统中的表面阻抗与体能带几何相位》，*Phys. Rev. X 4*，*021017*（*2014*）

[54] H. Jud 和 C. Tauber, 《狄拉克哈密顿量中体边异常的分类》, 《亨利·庞加莱年刊》（2025）[55] R. Resta, 《晶体电介质中的宏观极化：几何相位方法》, Rev. Mod. Phys 66, 3 899–915（1994）[56] L. Fu 和 C.L. Kane, 《时间反演极化与 Z_2 绝热自旋泵》, 《物理评论B》74, 195312（2006）[57] D. Xiao、M.-C. Chang 和 Q. Niu, 《贝里相对电子性质的影响》, Rev. Mod. Phys. 82, 3 1959–2007（2010）[58] M. Atala、M. Aidelsburger、J.T. Barreiro、D. Abanin、T. Kitagawa、E. Demler 和 I. 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）[59] F. de Juan、A. Rüegg 和 D.-H. Lee, 《粒子-空穴对称绝缘体和半金属中的体缺陷对应》, 《物理评论B》89, 16 161117（2014）[60] HM. Guo, 《一维拓扑绝缘体和超导体简述》, Sci. China Phys. Mech. Astron. 59, 637401（2016）[61] J.-W. Rhim、J. Behrends 和 J.H. Bardarson, 《基于胞间Zak相位的体边对应》, 《物理评论B》95, 3 035421（2017）[62] J. Cayssol 和 J.N. Fuchs, 《能带理论的拓扑与几何方面》, J. Phys. Mater. 4, 034007（2021）[63] Y. Hatsugai, 《整数量子霍尔效应中的陈数与边缘态》, 物理评论快报 71, 22（1993）[64] M.J. Gruber 和 M. Leitner, 《二维空间中狄拉克方程的自发边缘电流》, Lett. Math. Phys. 75, 25–37（2006）[65] C. Tauber、P. Delplace 和 A. Venaille, 《连续介质中的异常体边对应》, Phys. Rev. Res. 2, 013147（2020）[66] G.M. Graf、H. Jud 和 C. Tauber, 《浅水波中的拓扑：体边对应的失效》, 《数学物理通讯》383, 731–761（2021）[67] S. Mao、Y. Kuramoto、K.-I. Imura 和 A. Yamakage, 《拓扑绝缘体中边缘模的解析理论》, J. Phys. Soc. Jpn. 79, 124709（2010）[68] P. Delplace、D. Ullmo 和 G. Montambaux, 《石墨烯中的Zak相位与边缘态的存在》, 《物理评论B》84, 195452（2011）

[69] *J.M. Barbaroux*、*H.D. Cornean*、*L. Le Treust*、*N. Raymond* 和 *E. Stock-meyer*，《磁性狄拉克系统：锯齿极限下体边对应的失效》，*Lett Math Phys 114*，*93*（*2024*）[70] *S. Rossi* 和 *A. Tarantola*，《具有可变质量的二维狄拉克算子的拓扑及其在浅水波中的应用》，物理学杂志*A*：数学与理论 *57*，*065201*（*2024*）[71]*G.M. Graf* 和 *A. Tarantola*，《流体动力学模型中的边界条件与体边对应失效》，《亨利·庞加莱年刊》（*2025*）[72]*S.J. Blundell*，《准周期性与自旋依赖的克罗尼格-彭尼模型》，《物理学杂志：凝聚态物质》*6*，*10283*（*1994*）[73] *C. Tauber* 和 *P. Delplace*，《双能隙酉系统中的拓扑边缘态：传递矩阵方法》，新物理学杂志 *17*，*115008*（*2015*）[74] *V. Dwivedi* 和 *V. Chua*，《关于体与边界：紧束缚模型的广义传递矩阵》，*Phys. Rev. B 93*，*134304*（*2016*）[75] *R. Wielian*、*I. Toftul* 和 *Y. Kivshar*，《拓扑边缘态的传递矩阵方法》，*Phys. Rev. B 111*，*035151*（*2025*）[76] *S. Longhi*，《利用手征对称性破缺的波导晶格探测一维拓扑相》，光学快报 *43*，*4639–4642*（*2018*）[77] *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*（*1979*）[78] *E. Prodan* 和 *H. Schulz-Baldes*，《复拓扑绝缘体的体与边界不变量：从*K*理论到物理学》，数学物理研究，施普林格（*2016*）[79] *D. Monaco* 和 *G. Peluso*，一个 $\mathbb{Z}_2$ 不变量用于手征对称和粒子-空穴对称的拓扑链，数学物理杂志 *64*，*041904*（*2023*）[80] *J. Des Cloizeaux*，《 n维能带与*Wannier*函数的解析性质》，*Phys. Rev. 135*，*A698*（*1964*）[81] *G. M. Graf* 和 *J. Shapiro*，《无序手征链的体边对应》，数学物理通讯 *363*，*829–846*（*2018*）[82] *D. Gontier*、*D. Monaco* 和 *S. Perrin-Roussel*，《对称费米投影与*Kitaev*表：低维物质拓扑相》，数学物理杂志 *63*，*041902*（*2022*）[83] *N. H. Kuiper*，《希尔伯特空间酉群的同伦类型》，拓扑 *3*，*1*（*1965*）

[84] S. Sarma、M. Freedman 和 C. Nayak，马约拉纳零模与拓扑量子计算，npj Quantum Inf **1**，15001（2015）[85] P. San-Jose、J.L. Lado、R. Aguado、F. Guinea 和 J. Fernández-Rossier，石墨烯中的马约拉纳零模，Phys. Rev. X **5**，041042（2015）[86] G. Angelone、P. Facchi 和 G. Marmo，探测量子边界条件的形状，Mod. Phys. Lett. A **37**，2250114（2022）[87] S. Pancharatnam，干涉的广义理论及其应用：第一部分。相干光束，Proc. Indian Acad. Sci. **44**，247–262（1956）[88] M.V. Berry，伴随绝热变化的量子相位因子，Proc. R. Soc. Lond. A **392**，1802 45–57（1984）[89] B. Simon，整体、量子绝热定理与贝里相位，物理评论快报**51**，24（1983）[90] R. Resta，贝里相位在分子和凝聚态物质中的表现，《物理学杂志：凝聚态物质》**12**，R107–R143（2000）