作业-Hofstadter Butterfly与Landau Levels

作者：王俭

第一部分：Hofstadter Butterfly

Hofstadter模型，朗道能级

1.你应当熟悉下面的二维正方晶格的紧束缚模型：

$$H_0 = -t\sum_{\langle ij\rangle} c_i^\dagger c_j + h.c.$$

这里我们只考虑了电子的最近邻跃迁，并假设x、y方向的跃迁能量相等。请使用下列傅里叶变换将上面的实空间哈密顿量变为动量空间哈密顿量 $H_0(\vec{k})$ ：

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}\in FBZ} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} c(\vec{k}),\quad \delta^{(2)}(\vec{k}) = \frac{1}{N}\sum_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_i}$$

计算出 $H_0(\vec{k})$ ，并给出第一布里渊区(在上式中简写为FBZ，即 $\vec{k}$ 的取值范围)。当你得到正确的 $H_0(\vec{k})$ ，你会发现它只是一个实函数，也就是说，它已经给出了系统的能带 $E_0(\vec{k}) = H_0(\vec{k})$ 。

答案： $E_0(\vec{k}) = H_0(\vec{k}) = -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$ ，FBZ为 $[-\pi/a, \pi/a)\times[-\pi/a, \pi/a)$

2.考虑对该二维正方晶格施加一个垂直于平面的匀强磁场 $B\hat{z}$ ，在施加了磁场的情况下，系统的实空间紧束缚哈密顿量可以由如下的Peierls代换得到：

$t_{ij}\to t_{ij}\exp[i\frac{e}{\hbar}\int_{\vec{x}_i}^{\vec{x}_j} d\vec{x}\cdot\vec{A}(\vec{x})]$ 其中 t_{ij} 是原系统中电子从格点 i 跃迁到格点 j 的跃迁能量， $\vec{A}$ 是磁场的矢势。我们选用如下的矢势：

$\vec{A} = Bx\hat{y}$ ，首先请验证 $\nabla\times\vec{A} = B\hat{z}$ ，接着请计算出经过Peierls代换后系统的紧束缚哈密顿量，你得到的将是Hofstadter（侯世达）哈密顿量，请将其记为 H 。

答案： $H = -t\sum_{\langle ij\rangle} c_i^\dagger c_j \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} m\delta(y_i-y_j-a)\phi/\phi_0} + h.c., x_i = ma$

3.你会发现，对于任意的 B ，我们得到的Hofstadter哈密顿量一般来说会失去原本的晶格平移对称性，也就是说，你可以找到格矢 $\hat{R}$ ，使得 $T_{\hat{R}}^\dagger H T_{\hat{R}} \neq H$ ，请问为什么会这样?

答案：因为我们人为选取的依赖于 x 的规范 $\vec{A}(x) = Bx\hat{y}$ 显式地出现在了哈密顿量 H 中，从而破坏了晶格平移对称性 $T_{\hat{x}}$ 。

4.请在Hofstadter哈密顿量中令 $B = \frac{\frac{h}{e}\times\frac{p}{q}}{a^2}$ ，其中 p, q 是互质的正整数，也就是说，调节磁场强度使得通过一个原胞的磁通量 $\phi = Ba^2$ 为 $\phi_0 = \frac{h}{e}$ 的有理数倍，我们一般将 ϕ_0 称为磁通量子（magnetic flux quantum），此时，请证明 $T_{q\hat{x}}$ 和 $T_{\hat{y}}$ 都是哈密顿量的对称性。

答案：注意到此时 $T_{q\hat{x}}$ 的作用相当于 $\mathrm{e}^{2\pi imp/q}\to\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}(m+q)p/q} = \mathrm{e}^{2\pi imp/q}$ ，而 $T_{\hat{y}}$ 并未被破坏即可。

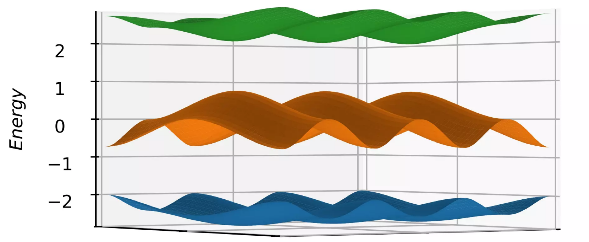
5.上述的对称性 $T_{q\hat{x}}$ 和 $T_{\hat{y}}$ 使得你可以定义一个新的原胞，称为磁原胞（magnetic unit cell），其为 H_0 的原胞沿 $\hat{x}$ 方向扩大q倍，也就包含了q个格点。给出磁原胞的第一布里渊区（称为磁布里渊区MBZ），并利用其将Hofstadter哈密顿量变换到动量空间，将得到的结果记为 $H(\vec{k})$ ，你会发现 $H(\vec{k})$ 是一个 $q\times q$ 矩阵。

答案：令 $c_i^{(s)}$ 为位于 $\vec{x}_i = mqa\hat{x} + na\hat{y} \quad m,n\in Z$ 处的磁原胞内的第 s 个格点，其空间位置为 $\vec{x}_i^{(s)} = (mq+s)a\hat{x} + na\hat{y}, \quad s=0,\ldots,q-1, \quad m,n\in Z$,得到含 q 个格点的磁原胞，其格矢为 $q\hat{x},\hat{y}$ ，从而磁布里渊区为 $[-\pi/qa,\pi/qa)\times[-\pi/a,\pi/a)$ ，由傅里叶变换 $c_i^{(s)} = \sum_{\vec{k}\in MBZ}\frac{1}{\sqrt{N/q}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}_i}c^{(s)}(\vec{k})$ 得到 $H(\vec{k}) = \sum_{i,j}H(\vec{k})_{i,j}c^{(i)\dagger}(\vec{k})c^{(j)}(\vec{k})$ 其非零元素为

$$H(\vec{k})_{ss} = -2t\cos\left(k_y + 2\pi s\frac{p}{q}\right) \quad s=0,\ldots,q-1$$
$$H(\vec{k})_{s+1,s} = H(\vec{k})_{s,s+1} = -t \quad s=0,\ldots,q-2$$
$$H(\vec{k})_{0,q-1} = -t\mathrm{e}^{-iqk_x}$$
$$H(\vec{k})_{q-1,0} = -t\mathrm{e}^{iqk_x}$$

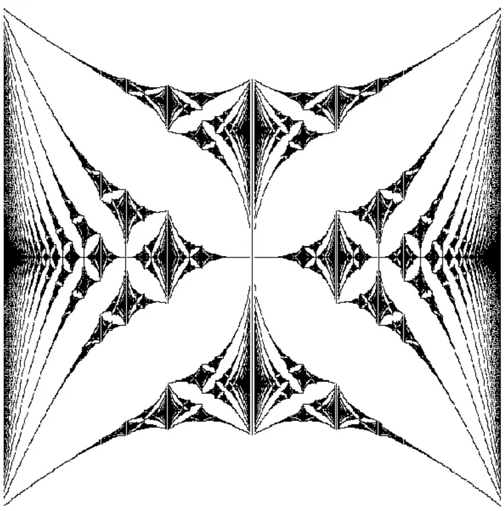
6.令 $p/q=1/3$ ，编写程序，数值计算出 $H(\vec{k})$ 的能带图。

参考答案：



7.令磁通量分数 $\frac{p}{q}=\lambda\in(0,1]$ ，并选取FBZ内一组足够稠密的点 $\{\vec{k}_0\}$ ，编写程序在一张图上绘制出 $\{H(\vec{k}_0)\}$ 的所有本征能量关于 λ 的图像，你只需选择 $\lambda=\frac{p}{q}\in(0,1]$ 区间中足够多的有理数 λ ，比如所有 $q<50$ 的，对每个 λ 和每个 $\vec{k}_0$ 绘制 $H(\vec{k}_0)$ 的所有本征能量即可。由于 $B\propto\lambda$ ，实际上你得到的就是 $\vec{k}_0$ 处系统的能谱在调节磁场时的变化图像，你会发现这种变化是分形的！该图像由Hofstadter首先发现，因此叫做Hofstadter蝴蝶。

参考答案：



8.请用上述方法绘制二维蜂巢晶格（石墨烯）的Hofstadter蝴蝶，只需考虑最近邻的电子跃迁。提示：尽管磁场仍是 $\nabla\times\vec{A}=B\hat{z}$ ，你还是需要选取一个与上述正方晶格问题不同的矢势 $\vec{A}$

，使得蜂巢晶格的磁原胞能够被定义出来，否则你将无法得到有限维的动量空间Hofstadter哈密顿量。

参考答案：

参考的蜂巢晶格矢势：

$$\vec{A}(x,y)=(0,x+\sqrt{3}y,0)B$$

晶格基矢：

$$\vec{x}=m\vec{a}_1+n\vec{a}_2,m,n\in\mathbb{Z}.\vec{a}_1=(3a/2,-\sqrt{3}a/2),\vec{a}_2=(3a/2,\sqrt{3}a/2)$$

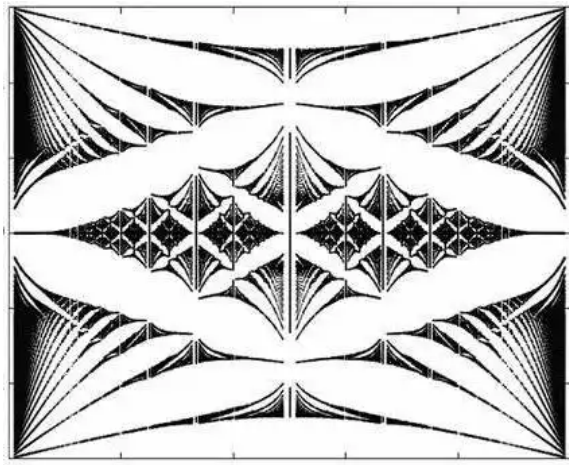
哈密顿量：

$$H(\vec{k})=-t\sum_{r,s=0}^{q-1}h_{rs}(\vec{k})a_{\vec{k}}^{(r)\dagger}b_{\vec{k}}^{(s)}+\mathrm{h.c.}$$

$$\begin{aligned}&h_{ss}=1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1}\omega^{-s}\quad s=0,\ldots,q-1\\&h_{s,s+1}=\omega^s\quad s=0,\ldots,q-2\\&h_{q-1,0}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2}\omega^{q-1}\end{aligned}$$

其余元素为0.

Hofstadter蝴蝶：



9. 编写好上述程序以后，你已经能够数值求解任意有理磁通量分数 λ ，任意动量 $\vec{k}\in MBZ$ 的Hofstadter能带 $E_n(\vec{k})$ 和Bloch波函数 $|u_n(\vec{k})\rangle$ ，从而能够计算Berry曲率。给定 $\lambda=p/q=\frac{1}{3}$ ，对于正方晶格或者蜂巢晶格，请编写程序计算某条能带的Berry曲率在磁布里渊区内的积分，你有什么发现？

参考答案：积分值是 2π 的整数倍。

参考文献：

Hofstadter蝴蝶：

D. Hofstadter, Phys. Rev. B **14**, 2239(1976)

A. Agazzi, J.–P. Eckmann, and G. M. Graf, J. Stat. Phys. **156**, 417 (2014).

J. Wang and L. Santos, Phys. Rev. Lett. **125**, 236805(2020)

Berry曲率积分，陈数：

D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982)

T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, pp. 1674–1677 (2005)