

边界条件如何进入哈密顿量：基于SSH链的紧束缚模型教学设计

池雨澄，刘峥嵘，陈 锐*

湖北大学物理学院，湖北 武汉

收稿日期：2026年7月23日；录用日期：2026年8月24日；发布日期：2026年8月31日

摘 要

紧束缚近似是固体物理中连接微观晶格结构与电子能带理论的重要方法。然而在实际教学中，课程内容往往直接从布洛赫波和动量空间哈密顿量展开。学生虽能完成傅里叶变换和能带求解，却难以阐明矩阵元的来源，也难以准确理解开放边界条件与周期边界条件对哈密顿量结构、系统对称性及物理性质的具体影响。本文以一维Su-Schrieffer-Heeger (SSH)链为教学载体，构建了由“晶格连接 - 实空间哈密顿量 - 边界项 - 平移对称性 - 体能带 - 边缘态”逐步展开的教学路径。首先设计基于晶格连接关系构造矩阵元的任务，强化对紧束缚哈密顿量的结构化理解，继而比较两种边界条件下矩阵角元的差异，说明周期边界条件并非抽象附加规则，而是一个明确的跨边界跃迁项。随后在周期边界下利用平移对称性完成动量空间分块，并在开放边界下通过有限链能谱和本征态概率分布展示边缘态的能谱特征及空间局域性。该设计旨在帮助学生从会写公式走向能够依据研究对象选择模型，并建立对紧束缚近似、边界条件和体 - 边关系之间联系的整体认识。

关键词

SSH模型，紧束缚哈密顿量，周期边界条件，开放边界条件，边缘态，概念演化，固体物理教学

How Boundary Conditions Enter the Hamiltonian: A Design for Teaching Tight-Binding Models with the SSH Chain

Yucheng Chi, Zhengrong Liu, Rui Chen*

School of Physics, Hubei University, Wuhan Hubei

Received: July 23, 2026; accepted: August 24, 2026; published: August 31, 2026

*通讯作者。

文章引用：池雨澄，刘峥嵘，陈锐. 边界条件如何进入哈密顿量：基于 SSH 链的紧束缚模型教学设计[J]. 教育进展, 2026, 16(8): 2190-2200. DOI: 10.12677/ae.2026.1681866

Abstract

The tight-binding approximation provides an important framework for connecting microscopic lattice structures with electronic band theory in solid-state physics. However, in many teaching practices, the related concepts are often introduced directly from Bloch waves and momentum-space Hamiltonians. Although students can perform Fourier transformations and calculate band structures, they may still have difficulty identifying the physical origin of Hamiltonian matrix elements and understanding how open and periodic boundary conditions modify the Hamiltonian structure, system symmetries, and corresponding physical properties. In this work, a one-dimensional Su-Schrieffer-Heeger (SSH) chain is employed as a teaching model, and a conceptual learning pathway is constructed from “lattice connectivity-real-space Hamiltonian-boundary terms-translational symmetry-bulk bands-edge states.” First, a lattice-to-matrix construction task is designed to strengthen students’ understanding of the structure of tight-binding Hamiltonians. The differences between Hamiltonian matrix elements under open and periodic boundary conditions are then compared, demonstrating that periodic boundary conditions are not merely abstract computational assumptions but correspond to explicit hopping terms across the boundary. Furthermore, translational symmetry under periodic boundary conditions is used to introduce momentum-space block diagonalization, while finite-chain spectra and eigenstate probability distributions under open boundary conditions are employed to reveal the spectral characteristics and spatial localization of edge states. This teaching design aims to guide students beyond formula manipulation toward selecting appropriate models according to physical questions, while establishing an integrated understanding of tight-binding approximation, boundary conditions, and bulk-boundary correspondence.

Keywords

SSH Model, Tight-Binding Hamiltonian, Periodic Boundary Condition, Open Boundary Condition, Edge State, Conceptual Evolution, Solid-State Physics Education

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

紧束缚近似在固体物理课程中具有承前启后的地位。一方面，它从局域原子轨道和相邻格点之间的跃迁出发，为学生建立了从单原子能级走向晶体能带的微观图像，另一方面，布洛赫定理、倒空间、能带色散和态密度等后续内容，均可在紧束缚框架下得到统一描述[1][2]。然而，课堂教学中常见的处理方式是先给出周期晶格，再直接引入布洛赫态，随后通过傅里叶变换将实空间哈密顿量转化为动量空间形式 $H(k)$ 。这种路径在计算上较为高效，却容易使学生形成认知断点：动量空间的哈密顿量似乎是直接写出来的，而不是由真实空间中的连接关系逐项生成的。

如果进一步追问开放边界条件与周期边界条件下的哈密顿量结构究竟有何差异，不少学生会回答一个是有限链，一个是首尾相接，但难以在矩阵中准确指出对应项。也有学生将周期边界条件理解为为了计算方便而引入的人为条件，却不能说明它为何允许引入波矢 k ，更不能解释为什么研究体能带时常使用周期边界条件，而观察边缘态时则需要采用开放边界条件。由此可见，学生掌握的更多是边界条件几何化的口头描述，而不是边界条件与哈密顿量结构、系统对称性及可观测现象之间的内在联系。

紧束缚模型的教学核心目标,应当包括三个相互关联的层次:其一,根据格点和轨道之间的连接关系构造实空间哈密顿量;其二,理解边界条件如何改变矩阵结构和系统对称性;其三,根据研究对象是体相性质、有限尺寸效应还是边界现象,选择合适的边界条件与求解表象。若教学停留在傅里叶变换的程序训练上,学生即使能够得到正确能带,也可能缺少这种由物理问题出发进行模型构建的思维方式。

SSH 模型最初用于描述聚乙炔中的二聚化与孤子激发[3],后来成为一维拓扑绝缘体教学中的典型最小模型[4][5]。对教学而言,SSH 模型的优势不仅在于能够引入拓扑概念,更在于其紧凑的结构能够直接展示边界条件如何进入哈密顿量:每个原胞仅含 A、B 两个轨道,仅包含原胞内跃迁 t_1 和原胞间跃迁 t_2 。在实空间哈密顿量构造中,开放边界与周期边界的区别体现为是否保留链末端 B_N 与链首端 A_1 之间的一个跃迁。正是这一最小差异,使边界条件能够在晶格图、矩阵结构、对称性分析、能谱以及波函数分布等多个层面得到直观体现。

本文基于概念演化的课程设计思路,将 SSH 链作为贯穿紧束缚模型教学的认知支架。教学主线不以拓扑不变量为起点,而从学生能够直接观察的晶格连接关系出发,依次经历由图写矩阵,由边界改角元,由对称性引入 k ,由能谱识别体态与边缘态的过程。这种教学安排既适用于固体物理课程中紧束缚近似和能带理论的学习,也可作为后续拓扑物态、计算凝聚态和量子模拟课程奠定基础。本文将首先分析传统教学中的认知断点,随后给出两种边界条件下 SSH 哈密顿量的结构差异,并据此设计课堂实施与评价方案。

2. 紧束缚模型教学中常见的三个认知断点

2.1. 从晶格图到哈密顿量的建模过程被压缩

紧束缚哈密顿量的实质,是在局域轨道基底描述体系中的在位能、允许跃迁关系及相应跃迁幅值。在选定单粒子局域轨道基底 $\{|i\rangle\}$ 后,紧束缚哈密顿量可表示为[6]-[8]

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle\langle j|.$$

其中,对角元 ε_i 表示在位能,非对角元 t_{ij} 表示轨道 i 与轨道 j 之间的跃迁幅值。矩阵的非零模式首先由连接关系决定,而具体参数取值则进一步决定体系的能谱结构。这种结构先于参数的认识,是进一步分析晶格缺陷、无序效应、界面体系以及多轨道模型的基础。

然而,在部分教材和教学实践过程中,模型哈密顿量往往被直接给出,学生主要进行傅里叶变换并求解相应本征值。由于“看图-选基-编号-确定矩阵元”的过程被压缩,学生容易把哈密顿量视为待记忆的公式,而不是晶格结构的代数表达。面对稍作变形的链,例如删除一条键、改变边界终止方式或引入次近邻跃迁时,学生往往难以独立完成哈密顿量的构建。

2.2. 边界条件被处理成求解前的附加说明

教材中常通过“采用 Born-von Karman 周期边界条件”这一表述引入动量空间推导。对于熟悉理论框架的教师而言,该条件包含有限尺寸近似、平移对称性以及热力学极限等多重物理含义。但对初学者而言,它往往仅表现为“令第 $N+1$ 个格点等于第 1 个格点”的符号规定。学生通常难以在哈密顿量矩阵中定位这一条件对应的具体项,也不清楚边界条件如何改变体系的数学结构及其物理性质。

边界条件实际上回答的是有限计算区域之外如何延拓系统。开放边界保留链的终止,端点局域环境与体内不同,而周期边界消除端点,并使每个原胞处于等价环境。两者既不是同一问题的两种随意写法,也不存在绝对的更真实。研究块体能带性质时,周期边界能够隔离体相和平移对称性,而研究表面、界面和端点局域态时,开放边界条件则是构成物理对象的一部分。

2.3. 求解表象与物理问题之间的联系不足

学生常将实空间矩阵直接对角化和傅里叶变换后求 $H(k)$ 理解为两种独立算法，却没有从对称性角度理解二者的适用条件。在周期边界条件下，平移算符与哈密顿量对易， k 是好量子数，傅里叶变换实质上是在平移算符的本征基底中实现哈密顿量的块对角化。开放边界条件则破坏完整平移对称性， k 不再严格标记有限链本征态，此时实空间对角化能够保留边界信息。

如果这一联系没有建立，学生容易形成两个错误推论：其一，认为所有有限链都可以直接套用布洛赫定理；其二，将开放边界仅视为数值计算上的不便，而忽视边缘态恰恰来源于边界的存在。SSH 链提供了一个极简场景，可将选择求解表象解释为利用系统现有的对称性。

3. 从连接关系构造 SSH 实空间哈密顿量

3.1. 模型、基底与跃迁项

考虑包含 N 个原胞的一维二聚化链，每个原胞含两个局域轨道 A_n 与 B_n 。原胞内 A_n 和 B_n 之间的跃迁幅值为 t_1 ，相邻原胞间 B_n 与 A_{n+1} 之间的跃迁幅值为 t_2 。为突出连接结构，先设两个子晶格的在位能均为零，并令跃迁幅值为实数。图 1 给出了开放边界与周期边界条件下的晶格连接方式。

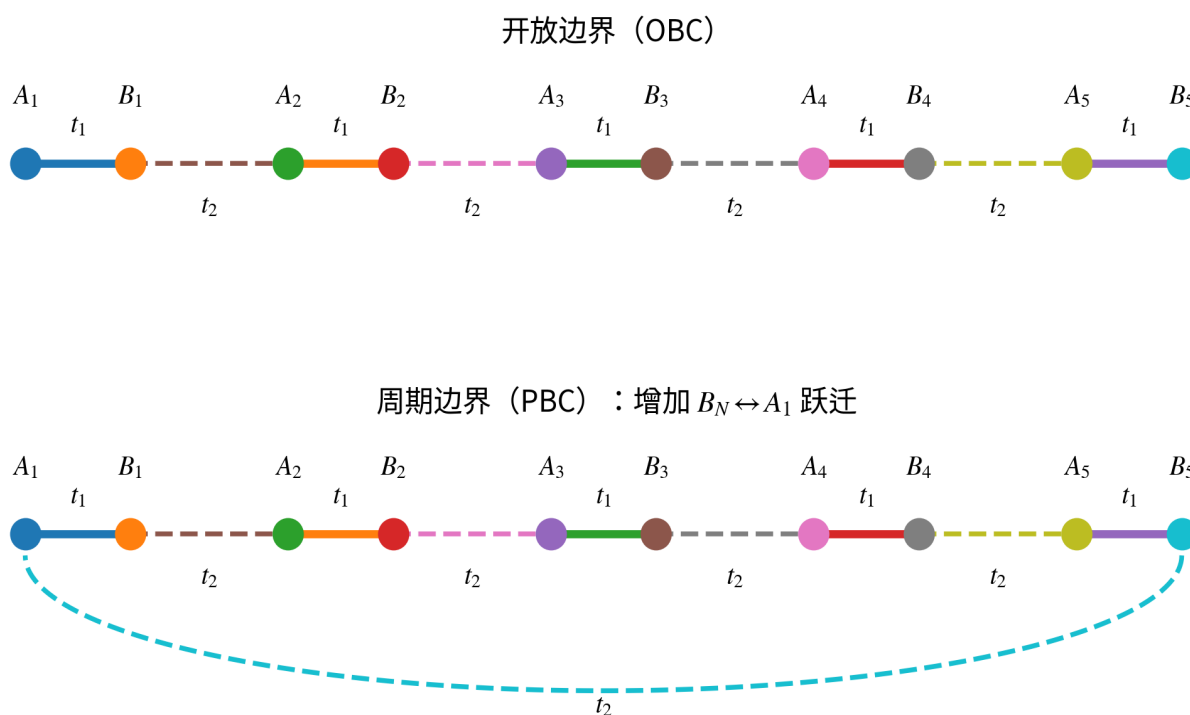


Figure 1. Shows the connection methods of the SSH chain under open boundary and periodic boundary conditions. The periodic boundary only adds a cross-boundary transition between the chain end B_N and the chain head A_1 compared to the open boundary

图 1. SSH 链在开放边界和周期边界条件下的连接方式。周期边界相对于开放边界只增加链末端 B_N 与链首端 A_1 之间的跨边界跃迁

教学过程中首先不直接给出完整哈密顿量公式，而要求学生完成三个步骤：第一，给每个轨道编号；第二在基底顺序 $(A_1, B_1, A_2, B_2, \dots, A_N, B_N)$ 下标出每条跃迁对应的行、列位置；第三，利用厄米性补齐对称

矩阵元。通过这一过程，学生可直接发现，一条无向跃迁键在矩阵中对应一对关于主对角线对称的非矩阵零，当不存在在位能时，主对角元为零，哈密顿量的维数由轨道总数而不是原胞数决定。

3.2. 开放边界条件下的有限链

开放边界条件意味着链在左右两端终止，最后一个原胞与第一个原胞之间没有额外连接。在二次量子化表象下，开放边界条件对应的实空间哈密顿量为[9]-[12]

$$H_{\text{OBC}} = \sum_{n=1}^N t_1 (a_n^\dagger b_n + b_n^\dagger a_n) + \sum_{n=1}^{N-1} t_2 (a_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger a_{n+1}).$$

第二个求和项的上限为 $N-1$ ，正是开放边界的代数标志。以 $N=3$ 为例，此时哈密顿量矩阵为

$$H_{\text{OBC}} = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_2 & 0 & t_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

这一矩阵适合用于训练学生对哈密顿量结构的理解。例如第一行只有一个非零元，表明左端 A_1 只与 B_1 相连，中间格点通常有两个近邻连接，最后一行同样只有一个非零元，表明右端 B_N 是另一个端点。换言之，端点并不是画图时的附加标记，而是编码在矩阵行列中的局域配位差异。

3.3. 周期边界条件对应一个明确的跨边界项

周期边界条件规定原胞指标按模 N 识别，即 $A_{N+1} \equiv A_1$ 。因此，在开放链的基础上增加

$$H_{\text{bdry}} = t_2 (a_1^\dagger b_N + b_N^\dagger a_1),$$

从而

$$H_{\text{PBC}} = H_{\text{OBC}} + H_{\text{bdry}}.$$

对 $N=3$ ，矩阵变为

$$H_{\text{PBC}} = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 & t_2 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_2 & 0 & t_1 \\ t_2 & 0 & 0 & 0 & t_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

与开放边界条件相比，周期边界条件仅在哈密顿量矩阵的右上角和左下角多出一对 t_2 。图 2 通过矩阵非零元分布进一步展示了这一差异。该图能够把首尾相接的几何描述转化为可定位、可检查的矩阵结构。周期边界条件并非求解完成之后补充的解释，而是在写下哈密顿量时已经作为模型的一部分被引入。

表 1 概括了两种边界条件在模型层面的主要差异。课堂上可要求学生先独立填写前三行，再结合后续能谱计算补充最后两行，使表格成为贯穿教学的动态概念表。

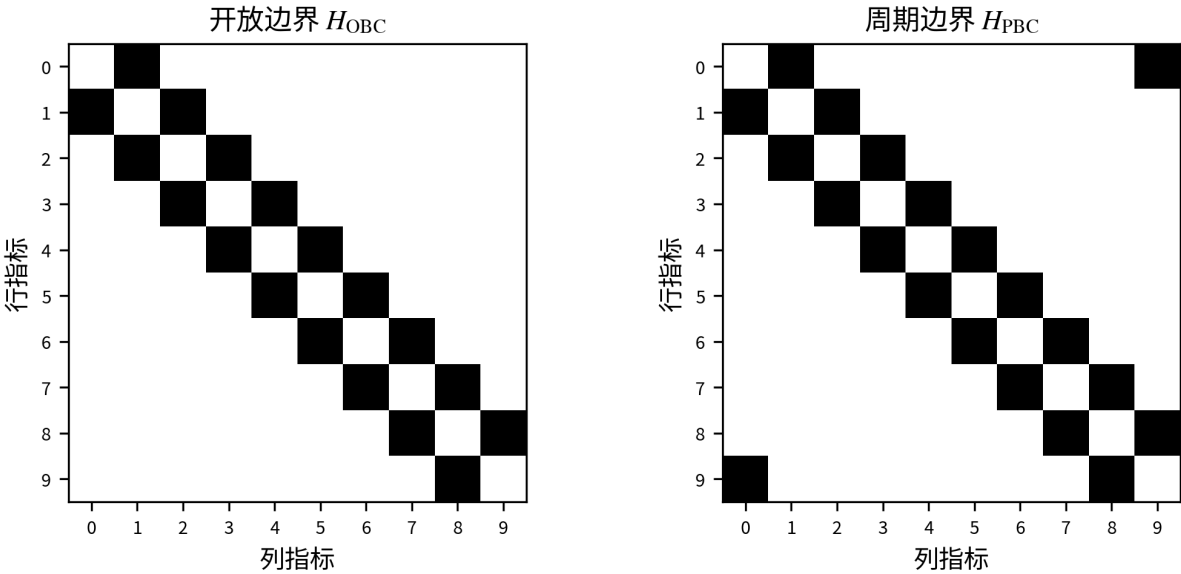


Figure 2. Shows the non-zero element distribution of Hamiltonians in a five-cell SSH chain. The two corner elements of the periodic boundary matrix correspond to transitions across the boundary of the computational domain
图 2. 五原胞 SSH 链的哈密顿量非零元分布。周期边界矩阵的两个角元对应跨越计算区域边界的跃迁

Table 1. Comparison of models with open boundary conditions and periodic boundary conditions in the SSH chain
表 1. SSH 链中开放边界条件与周期边界条件的模型对比

比较维度	开放边界条件(OBC)	周期边界条件(PBC)
首尾跨边界跃迁	不存在	存在 $B_N \leftrightarrow A_1$ 跃迁
端点局域环境	与体内不同	所有原胞等价
完整平移对称性	被边界破坏	保留
典型求解方式	实空间有限矩阵对角化	傅里叶变换与 k 空间分块
适合突出的问题	边缘态、边界条件、有限尺寸效应	体能带、布洛赫态、体相拓扑量

4. 周期边界：从平移对称性到体能带

4.1. 为什么周期边界能够引入波矢

周期边界消除了有限链的端点，使哈密顿量在原胞平移下保持不变。设平移算符 T 将第 n 个原胞映射到第 $n+1$ 个原胞，则有

$$[T, H_{\text{PBC}}] = 0.$$

因此可以选择同时为 T 和 H 本征态的基底。平移算符本征值写为 e^{ika} ，其中 a 为原胞长度， k 即晶体动量。对于包含 N 个原胞的周期链，连续平移 N 次必须回到原态，故

$$e^{ikNa} = 1,$$

从而允许波矢为

$$k = \frac{2\pi m}{Na}, \quad m = 0, 1, \dots, N-1.$$

这里应强调两点。第一，周期边界并没有使有限系统的 k 连续，而是给出 N 个离散波矢，只有在 $N \rightarrow \infty$ 时，波矢间隔 $2\pi/(Na)$ 才趋于零。第二， k 的引入不是单纯的代数技巧，而是利用平移对称性给本征态分类。

4.2. 傅里叶变换是矩阵分块而非公式替换

定义离散傅里叶变换

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} a_k, \quad b_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} b_k.$$

代入 H_{PBC} 后，不同 k 分量相互解耦，得到

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix} H(k) \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix},$$

其中

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix}.$$

原来的 $2N \times 2N$ 矩阵被分解为 N 个相互独立的 2×2 小矩阵。这一过程的教学重点不应只是把求和算出来，而应是让学生认识到，傅里叶变换选择了平移算符的本征基底，所以平移对称的哈密顿量自然呈现块对角结构。矩阵规模的降低，是对称性带来的结果。

对角化 $H(k)$ 可以得到两条能带

$$E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(ka)}.$$

图 3 展示了不同跃迁比值下的体能带结构。当 $|t_1| = |t_2|$ 时，带隙在布里渊区边界闭合，当两者不等时，二聚化使体系打开能隙。仅从能量色散关系来看， $|t_1| < |t_2|$ 与 $|t_1| > |t_2|$ 均表现为绝缘相，二者之间的物理差异需要结合波函数结构、拓扑性质或开放边界下的端态进行辨别。

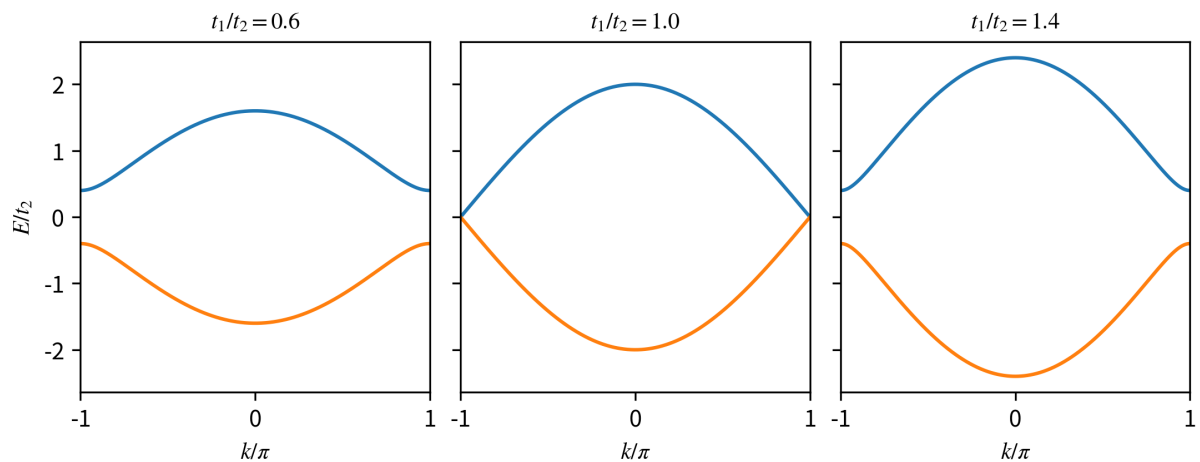


Figure 3. Volume band structure of the SSH model under periodic boundaries. When $|t_1| = |t_2|$, the band gap is closed, and the two sides correspond to two different dimerizations

图 3. 周期边界下 SSH 模型的体能带。 $|t_1| = |t_2|$ 时带隙闭合，两侧分别对应两种不同的二聚化

4.3. 拓扑内涵作为可选提升而非教学起点

若课程需要进一步拓展至拓扑物态，可将动量空间哈密顿量的非对角元表示为

$$q(k) = t_1 + t_2 e^{-ika},$$

并指出当 k 遍历布里渊区时， $q(k)$ 在复平面上描绘一个以 t_1 为圆心、以 $|t_2|$ 为半径的圆。当 $|t_1| < |t_2|$ 时，该圆包围原点，当 $|t_1| > |t_2|$ 时，该圆不包围原点。这种是否绕原点的几何图像可作为理解绕数与 Zak 相位的直观入口[4] [5]。

但在基础教学设计中，拓扑不变量不宜作为首要教学目标。更合理的顺序是：学生先能从连接图构造哈密顿量，理解周期边界为何恢复平移对称性，再将 $H(k)$ 的几何结构视为对已有知识的提升。这样可以避免学生在尚未掌握模型结构时，因 Berry 相、规范选择等概念过早增加认知负担。

5. 开放边界：从有限矩阵到边缘局域态

5.1. 边界打开后，研究对象发生了什么变化

将周期链的一条跨边界键切断，不只是减少了两个矩阵元，还创造了两个局域环境不同于体内的端点。完整平移对称性随之消失，有限链的本征态通常不能由单一 k 精确标记。此时直接对角化 H_{OBC} 并绘制本征矢在各格点上的概率分布，是保留边界信息的自然方法。

图 4 展示了在 $N = 20$ 、 $t_1/t_2 = 0.6$ 条件下有限 SSH 链的能谱与本征态分布。体态形成上下两组离散能级，而带隙中出现一对非常接近零能的本征态。这两个近零能态的概率密度主要局域于链的左右两个端点附近，并沿链向内部呈指数衰减。由于有限链的两个端态存在微弱重叠，它们形成对称与反对称组合，因此其能量通常偏离严格零点，其劈裂随链长指数衰减。该细节有助于纠正拓扑边缘态在任何有限链中都必定精确零能的过度简化。

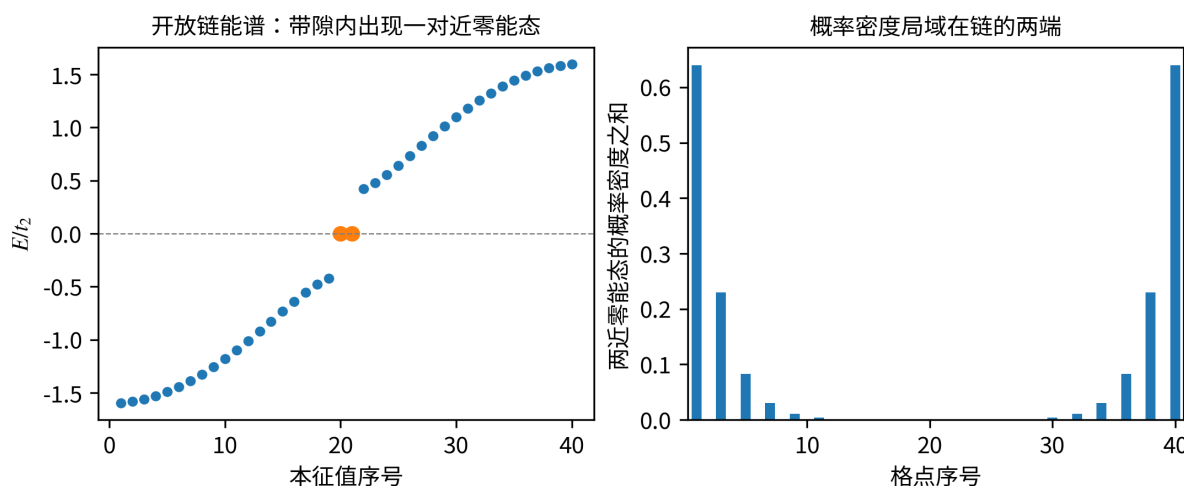


Figure 4. Energy spectrum and near-zero energy state spatial distribution of a finite SSH chain under open boundary conditions. Parameters are set as $N = 20$ and $t_1/t_2 = 0.6$

图 4. 开放边界下有限 SSH 链的能谱与近零能态空间分布。参数取 $N = 20$ 、 $t_1/t_2 = 0.6$

5.2. 用递推关系解释边缘态的局域性

数值图像之后可补充一个不需要复杂拓扑数学的解析推导。考虑从弱键 t_1 开始终止的半无限链，并

寻找 $E=0$ 的左边缘态。由于 SSH 哈密顿量只连接不同子晶格，可以令该态仅在 A 子晶格上具有振幅。薛定谔方程给出递推关系

$$t_1\psi_{A,n} + t_2\psi_{A,n+1} = 0,$$

即

$$\psi_{A,n+1} = -\frac{t_1}{t_2}\psi_{A,n}.$$

因此

$$\psi_{A,n} = \left(-\frac{t_1}{t_2}\right)^{n-1} \psi_{A,1}.$$

当 $|t_1/t_2| < 1$ 时，振幅随 n 衰减并可归一化，左端存在局域态；当 $|t_1/t_2| > 1$ 时，该试探解向体内增长，不能描述正常化的左端态。局域长度可写为

$$\xi = \frac{a}{\ln|t_2/t_1|}.$$

这一推导在教学上具有重要意义，它表明边缘态并非数值计算中偶然出现的特殊能级，而是由边界终止方式与波函数振幅递推关系共同决定的结果。学生还可以根据递推关系直接预测：当 t_1/t_2 接近 1 时，局域长度增大，边缘态更容易与另一端杂化；当 t_1/t_2 明显小于 1 时，端态局域性增强。

5.3. 周期边界和开放边界回答不同问题

对于同一组参数 t_1, t_2 ，周期边界条件用于构造和求解体系的体能带结构，而开放边界条件用于研究有限系统中是否出现端态。两种边界条件下得到的结果并非相互竞争，而是从不同角度描述体系性质。周期边界告诉我们体相在整个布里渊区的结构，开放边界条件则告诉我们当这一体相被截断时，边界附近会出现什么。SSH 模型中的体-边对应关系，正是在两种边界条件的对照中变得可见。

因此，教学中应避免将周期边界条件理解为唯一正确的求解方式，或将开放边界条件视为一种近似处理和计算上的不便。更准确的课堂表述是：边界条件属于模型定义的一部分，其选择由研究问题决定。若研究目标是块体能带、布洛赫态和体相拓扑量，周期边界条件最自然，若研究目标是端点态、界面态、终止方式或有限尺寸劈裂，开放边界条件不可替代。

6. 教学实施中三个需澄清的问题

6.1. 原胞选择与边界条件不能混为一谈

SSH 模型中“ $t_1 < t_2$ 为拓扑相”的常见表述隐含了特定原胞选择和边界条件。重新定义原胞可以交换“胞内”和“胞间”的名称，但真实开放链的端点连接并不会因此自动改变。因此，教学时应同时画出物理链和原胞框，明确拓扑不变量的表达依赖于原胞选择与基底约定，而可观测边缘态的出现还取决于具体边界条件。否则学生可能误以为只要把某条键重新命名，就能够使边缘态产生或消失。

6.2. 近零能不等于任何扰动下严格零能

理想 SSH 模型具有子晶格(手性)对称性，其能谱关于零能点呈现成对对称分布。有限链的左右端态因重叠产生指数小的劈裂。若加入不同子晶格在位能、次近邻跃迁或其它破坏手性对称性的项，端态能量还可能进一步偏离零能。所谓拓扑保护并不意味着边缘态对所有扰动均保持完全不变，而是指在保持

相关对称性且体带隙不闭合的条件下,拓扑性质不能连续改变[4][5]。基础课堂中可采用条件更加明确的表述,替代“绝对鲁棒”的简单化描述。

6.3. 周期边界不是对真实表面的描述

周期边界条件用于消除有限计算区域引入的人工端点,从而突出体相和平移对称性,它并不意味着真实样品不存在表面。类似地,开放边界条件也并非总是更加接近真实体系,因为过短的有限链可能受到强烈端点效应影响,难以反映宏观极限下的体相性质。教学的最终目标不是让学生偏好某一种边界条件,而是理解边界条件作为模型假设所带来的适用范围、物理含义及相应限制。

上述三个澄清有助于避免 SSH 模块停留在能谱展示层面,并引导学生进一步关注模型边界、适用条件及物理解释之间的联系。对于固体物理教学而言,这种强调概念适用范围与物理条件的处理方式,相较于单纯增加前沿知识内容,更能体现教学设计本身的研究价值。

7. 结语

边界条件在固体物理中常以简化的数学条件出现,但其本质关联三个层次:实空间中是否存在边界及跨边界跃迁,代数结构上哈密顿量矩阵中非零矩阵元的位置,以及对称性层面能否利用晶体动量对本征态进行分类。SSH 链以极少的自由度同时呈现上述三个层次,是帮助学生深化对紧束缚哈密顿量结构理解、比较周期与开放边界条件差异的理想教学模型。本文为传统教学提供一个“系统化、可视化的补充模块”,旨在打通特定概念的“最后一公里”。

本文提出的教学设计,从晶格连接出发构造实空间矩阵,通过两个角元的增删使边界条件显性化,再利用平移对称性解释动量空间中的块对角化结构,最后结合开放链能谱与本征态概率密度揭示边缘局域态。整条教学主线的重点并非让学生额外记忆一个具体拓扑模型,而是培养一种可迁移的物理建模方法:先明确研究对象及边界条件,再构造相应的哈密顿量;先识别体系对称性,再选择合适的求解表象;最后结合能谱与本征态共同解释物理现象。

为进一步提高该教学设计的可实施性,课堂教学可采用“任务驱动 + 小组合作”的方式展开。建议安排 2 课时完成核心内容:第一课时由学生根据 SSH 链的晶格连接关系自主构建实空间哈密顿量矩阵,通过小组讨论理解矩阵元与跃迁路径之间的对应关系;第二课时比较开放边界与周期边界下矩阵结构和能谱差异,并结合数值结果分析边缘态形成机制。对于线性代数基础较弱的学生,可先通过晶格编号和非零矩阵元标记降低抽象难度,再逐步过渡到完整矩阵表达。同时,在探究深度与教学进度之间,应将重点放在模型构建思路和物理联系上,而非复杂计算过程,以保证学生能够形成可迁移的建模能力。

在后续的课程学习中,这一思维可自然迁移到表面态、量子阱、缺陷超胞、纳米带和异质结等问题。学生面对新的有限体系时,不再把边界条件视为题目末尾的技术说明,而是会主动分析:边界位于何处、哪些连接被切断或复制、哪些对称性因此保留或被破坏,以及研究目标究竟是体相性质还是边界现象。能够提出并分析这些问题,正是学生从会对角化哈密顿量走向能够构造、选择并判断物理模型的关键一步。

值得指出的是,本文提出的“从连接关系和边界条件出发构建模型”的思维方式并不限于一维 SSH 链。在二维紧束缚体系中,如石墨烯蜂窝晶格,学生可以通过分析不同格点间的连接关系建立哈密顿量,并进一步理解晶格结构与能带特征之间的联系;在缺陷、杂质及无序体系中,局域连接的改变则对应哈密顿量矩阵元的调整;在声子谱计算中,类似思想也可用于理解动力学矩阵与晶格振动模式之间的关系。因此,该教学设计不仅服务于 SSH 模型本身,更提供了一种面向复杂凝聚态体系的通用建模框架,有助于培养学生从物理结构出发分析问题和构建模型的能力。

致 谢

本工作得到湖北省教育厅重点项目(D20241004)，湖北大学原创探索种子专项的资助。

参考文献

- [1] Kittel, C. (2004) Introduction to Solid State Physics. 8th Edition, Wiley.
- [2] Ashcroft, N.W. and Mermin, N.D. (1976) Solid State Physics. Saunders College.
- [3] Su, W.P., Schrieffer, J.R. and Heeger, A.J. (1979) Solitons in Polyacetylene. *Physical Review Letters*, **42**, 1698-1701. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.42.1698>
- [4] Asbóth, J.K., Oroszlány, L. and Pályi, A. (2016) A Short Course on Topological Insulators. Springer.
- [5] Xiao, D., Chang, M. and Niu, Q. (2010) Berry Phase Effects on Electronic Properties. *Reviews of Modern Physics*, **82**, 1959-2007. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.82.1959>
- [6] Lee, C.H., Imhof, S., Berger, C., Bayer, F., Brehm, J., Molenkamp, L.W., *et al.* (2018) Topoelectrical Circuits. *Communications Physics*, **1**, Article No. 39. <https://doi.org/10.1038/s42005-018-0035-2>
- [7] Felder, R.M. and Brent, R. (2024) Teaching and Learning STEM. 2nd Edition, Wiley.
- [8] Freeman, S., Eddy, S.L., McDonough, M., Smith, M.K., Okoroafor, N., Jordt, H., *et al.* (2014) Active Learning Increases Student Performance in Science, Engineering, and Mathematics. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **111**, 8410-8415. <https://doi.org/10.1073/pnas.1319030111>
- [9] Chi, M.T.H. (2013) Two Kinds and Four Sub-Types of Misconceived Knowledge, Ways to Change It, and the Learning Outcomes. In: Vosniadou, S., Ed., *International Handbook of Research on Conceptual Change*, 2nd Edition, Routledge, 49-70.
- [10] Hake, R.R. (1998) Interactive-Engagement versus Traditional Methods: A Six-Thousand-Student Survey of Mechanics Test Data for Introductory Physics Courses. *American Journal of Physics*, **66**, 64-74. <https://doi.org/10.1119/1.18809>
- [11] Vanderbilt, D. (2018) Berry Phases in Electronic Structure Theory. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/9781316662205>
- [12] Heeger, A.J., Kivelson, S., Schrieffer, J.R. and Su, W.-P. (1988) Solitons in Conducting Polymers. *Reviews of Modern Physics*, **60**, 781-850. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.60.781>