

前沿物理与工程之 量子

拓扑新材料研究前沿的理论基础导引Ⅱ： 多种拓扑材料

黄侯迪 常治文 刘 鑫

(北京工业大学理学部物理系理论物理研究所, 北京 100124)

摘 要 本专题旨在为感兴趣且学有余力的本科生和低年级研究生提供一条从大学物理到当前二维、三维拓扑新材料研究前沿的学习路径。专题包含两篇, 本文是第二篇。基于第一篇回顾过的各种量子霍尔效应及其中的拓扑不变量, 本篇介绍多种新材料, 包括石墨烯、拓扑绝缘体和拓扑半金属。重点将放在晶格结构的紧束缚模型处理, 以蜂窝六角晶格和方晶格为例推导出描述量子反常霍尔效应的两带模型, 介绍能带结构与拓扑不变量(陈数、拓扑映射度等)的联系及其所导致的体-边对应关系(bulk-boundary correspondence)。其中自旋轨道耦合(spin-orbit coupling)的写法、哈密顿量的傅里叶(Fourier)变换、能带结构的求解、拓扑不变量及边缘态的计算都有助于夯实初学者的理论基础。另外本篇还将简述不同种类的拓扑半金属的能带结构及其表面态。

关键词 石墨烯; 拓扑绝缘体; 两带模型; 拓扑半金属

INTRODUCTION TO BASICS OF NEW TOPOLOGICAL MATERIAL RESEARCH Ⅱ : VARIOUS TOPOLOGICAL MATERIALS

HUANG Houdi CHANG Zhiwen LIU Xin

(Institute of Theoretical Physics, Department of Physics, Beijing University of Technology, Beijing 100124)

Abstract We aim to provide a way for interested undergraduate and postgraduate students to launch from college physics to access the cutting edge of the current international research on two-dimensional and three-dimensional new topological materials. This topic contains two parts, this paper is the second part. Based on the quantum Hall effects (integer, fractional, anomalous, spin) reviewed in the first paper of this topic, we give a brief introduction in this paper to several new topological materials: graphene, topological insulators and topological semimetals. As the examples of the two-band model describing the quantum anomalous Hall effects, we discuss the tight-binding model in graphene and square lattices, with emphasis placed on the relationship between energy bands and topological invariants, as well as the resulting bulk-boundary correspondence. The reader is suggested to strengthen the capability of theoretical calculation by paying attention to spin-orbit coupling, Fourier transform of Hamiltonian, solving energy bands, and the calculation of topological invariants and edge states. Finally a brief introduction to the energy bands and the corresponding surface states are also presented for different types of semimetals.

Key words graphene; topological insulator; two-band model; topological semimetal

收稿日期: 2022-02-28; 修回日期: 2022-05-11

基金项目: 北京市自然科学基金重点项目(Z180007); 国家自然科学基金(11572005)。

通讯作者: 刘鑫, 男, 教授, 主要从事理论物理领域的研究工作, 研究方向为拓扑经典与量子场论, xin.liu@bjut.edu.cn。

引文格式: 黄侯迪, 常治文, 刘鑫. 拓扑新材料研究前沿的理论基础导引Ⅱ: 多种拓扑材料[J]. 物理与工程, 2023, 33(1): 172-188.

Cite this article: HUANG H D, CHANG Z W, LIU X. Introduction to basics of new topological material research Ⅱ: Various topological materials[J]. Physics and Engineering, 2023, 33(1): 172-188. (in Chinese)

本专题的第一篇回顾了各种霍尔效应,将量子力学引入有外磁场的二维电子气体问题,在不同规范条件下得到了朗道(Landau)能级、填充因子等物理量。重点放在如何用物理量来构造数学上的拓扑不变量,挖掘物理量在数学上的内涵(譬如为填充因子赋予陈数、拓扑映射度的意义)。具体内容包括了整数、分数、反常和自旋量子霍尔效应。

本篇则进一步介绍基于上述量子霍尔效应的多种拓扑新材料:石墨烯、拓扑绝缘体和拓扑半金属。这方面的研究是当前凝聚态物理学研究的热点和潮流,不仅具有极高的理论价值,更蕴藏着巨大的应用潜力。例如拓扑绝缘体的无能隙边缘态在未来可用于集成电路的设计;无耗散传输通道的存在将极大地减少发热损耗,提高器件性能。多种拓扑新材料业已走出实验室,走进生产实践甚至大众的生活。

第一篇论文的式(61)用到了所谓的两带模型(Two-band model)

$$H = \epsilon I + \sum_{a=x,y,z} h_a \sigma^a \quad (1)$$

其对应的陈数即填充因子有表达式

$$\nu = c = -\frac{1}{4\pi} \int_{BZ} \hat{\mathbf{h}} (\partial_{k_x} \hat{\mathbf{h}} \times \partial_{k_y} \hat{\mathbf{h}}) dk_x dk_y \quad (2)$$

该式具有清晰的拓扑涵义,它是从底空间(k_x, k_y 所属的二维布里渊区所形成的轮胎面 T^2)到像空间($SU(2)$ 群空间,是 $\hat{\mathbf{h}}$ 所形成的二维单位球面 S^2)的映射 $\hat{\mathbf{h}}: T^2 \rightarrow S^2$ 的拓扑映射度,几何上说是当 k_x, k_y 跑遍/覆盖 T^2 一次时, $\hat{\mathbf{h}}$ 覆盖 S^2 球面 c 次。

两带模型可从多种晶格结构中得到,具有普遍的重要性。本篇 2.2 节(蜂窝六角晶格)和 3.2 节(方晶格)将为推导这一模型提供范例。本科初学者可以把重心放在如何处理给定晶格的紧束缚模型上,包括自旋轨道耦合的写法、傅里叶变换如何进行,以及如何提炼动量空间的哈密顿量。

1 石墨烯

在实验上实现石墨烯之前,碳只有三种同素异形体:金刚石、石墨和富勒烯(Fullerene,即碳-60、足球烯)。金刚石是三维原子晶体,呈正四面体结构,碳原子间由共价键链接,结构特别稳定。石墨是由碳原子先通过共价键形成二维的蜂窝六角晶格,再由众多的二维层通过较弱的范德瓦耳

斯力堆叠在一起。因此层内作用力强,结构稳定;层间作用力弱,结构不稳定,容易滑动离解。富勒烯是由 60 个碳原子形成的足球状结构,形态固定,性质稳定。石墨烯可认为是从石墨上“揭”下来的二维单层,晶格结构是蜂窝状六角晶格;基于石墨烯还可以构造其他维数的材料,比如卷成圆筒(即筒径远小于筒的线度)形成一维的碳纳米线。

石墨烯在理论研究方面具有很高的价值。早在 1947 年华莱士(P. R. Wallace)就指出,其六角晶格可导出(2+1)维的狄拉克(Dirac)方程^[1],从而可用于研究“低速的量子电动力学”。人们在实验方面也一直未曾放弃分离出自由的石墨单层的努力,发展出的方法就包括后来 Geim-Novoselov 课题组取得成功的“胶带纸来回粘撕”的技巧^[2];但一直有两个困难不容易克服。一个困难是单层的二维材料由于热涨落原因极易发生褶皱(读者可联想点燃后的纸张灰烬会缩成一团)而不能自由存在于三维空间,必须找到合适的衬底加以支撑。另一个更大的困难在于,通过胶带纸来回粘撕确可得到很多石墨单层,但它们是淹没在海量的石墨多层当中的。要找到、确定、分析哪些是多层、哪些是单层,需要综合使用普通的光学显微镜和高精度的电子显微镜,对实验技巧的要求极高。Geim-Novoselov 组就是突破了这两个难关,尤其是找到了高效的光学显微镜使用方法,才最后分离出碳原子单层即石墨烯。

下面首先介绍石墨烯的蜂窝晶格诱导出的(2+1)维狄拉克方程,然后推导两带模型(从而可实现量子反常霍尔效应),最后概述石墨烯的其他重要物理性质。

1.1 (2+1)维狄拉克方程

石墨烯的蜂窝状六角晶格由两套子晶格 A、B 构成,如图 1,其中空心点指代 A 格点,实心点指代 B 格点。如按格点种类划分,原胞为三角

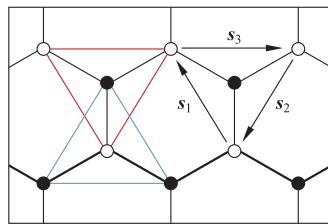


图 1 一个完整的石墨烯晶格包含两种不同的格点类型,分别用空心点(A)和实心点(B)表示。三角形原胞的顶点为三个原胞共有,所以每个原胞 A、B 格点各一个。初级平移矢量可从 $s_i, i=1,2,3$, 中任选其二,这里取为 s_1 和 s_2 。

形^①。顶点处的格点为三个原胞共有,因此平均每个原胞含两个格点。取连接最近邻格点的矢量长度为1,从一个B格点到最近邻的三个A格点的单位矢量分别为

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1 = \frac{1}{2}(\sqrt{3}, 1) \\ \mathbf{v}_2 = \frac{1}{2}(-\sqrt{3}, 1) \\ \mathbf{v}_3 = (0, -1) \end{cases} \quad (3)$$

初基平移矢量选为

$$\begin{cases} \mathbf{s}_1 = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}(-1, \sqrt{3}) \\ \mathbf{s}_2 = \mathbf{v}_3 - \mathbf{v}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}(-1, -\sqrt{3}) \end{cases} \quad (4)$$

在计算倒格矢时,原胞按图2方式选取:将相邻的A、B格点打包为一个格点,如图中虚线圈所示;四个格点形成一个斜方晶格,如图中灰色菱形所示。此时初基平移矢量为

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = (\sqrt{3}, 0, 0) \\ \mathbf{a}_2 = (1, \sqrt{3}, 0) \\ \mathbf{a}_3 = (0, 0, 1) \end{cases} \quad (5)$$

其中,为完整性以及后续的计算方便起见,引入 $\mathbf{a}_3$ 作为第三分量。 $\mathbf{a}_3$ 竖直向上,垂直于平面。

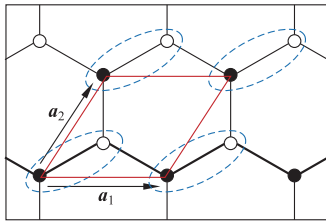


图2 石墨烯晶格属于斜方晶系。每个原胞的顶点为四个原胞共有,每个原胞含有A、B格点各一个。初基平移矢量 $\mathbf{a}_1$ 和 $\mathbf{a}_2$ 间的夹角为 $\frac{\pi}{3}$

由实空间的 $\mathbf{a}_i$ 可定义动量空间(即倒易空间, reciprocal space)的倒格矢

$$\mathbf{b}_i = \frac{2\pi}{V} \epsilon_{ijk} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k, \quad i=1,2,3 \quad (6)$$

其中, $V = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \frac{3\sqrt{3}}{2}$ 是原胞体积。具体是

$$\begin{cases} \mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3}(\sqrt{3}, -1, 0) \\ \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3}(0, 2, 0) \\ \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{3}(0, 0, 2\sqrt{3}) \end{cases} \quad (7)$$

本问题只是二维问题,第三维是为与固体物理惯例一致而引进的,因此 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ 中只考虑 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$,

且简记为二维的 $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3}(\sqrt{3}, -1), \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3}(0, 2)$ 。

这样的二维动量空间,其结构可理解为:第一布里渊区为正六边形,中心有一个格点,如图3所示。

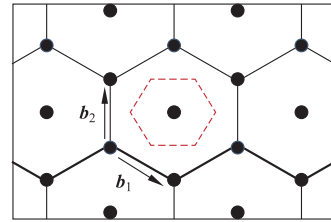


图3 六角晶格的倒格子。灰色虚线区域为第一布里渊区,即包围一个格点的正六边形。 $\mathbf{b}_1$ 和 $\mathbf{b}_2$ 为基矢。为图示清晰起见,从中心到六个顶点的连线未画出

不考虑相互作用时,该晶格的紧束缚模型为

$$H_0 = -t \cdot$$

$$\sum_{x \in A} \sum_{i=1}^3 [a^\dagger(x) b(x + \mathbf{v}_i) + b^\dagger(x + \mathbf{v}_i) a(x)] \quad (8)$$

$a^\dagger(x), b^\dagger(x)$ 分别为子晶格A、B的产生算符, $a(x), b(x)$ 为湮灭算符, t 为电子的跳转强度(hopping strength)。在动量空间中,上式写为

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \tau(\mathbf{k}) a^\dagger(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}) + \tau^*(\mathbf{k}) b^\dagger(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}) \quad (9)$$

其中 $a^\dagger(\mathbf{k}), b^\dagger(\mathbf{k})$ 是动量空间的产生算子, $a(\mathbf{k}), b(\mathbf{k})$ 是湮灭算子,傅里叶变换为 $\begin{Bmatrix} a(\mathbf{k}) \\ b(\mathbf{k}) \end{Bmatrix} =$

$\sum_x e^{-ik \cdot x} \begin{Bmatrix} a(x) \\ b(x) \end{Bmatrix}$ 和 $\tau(\mathbf{k}) = -t \sum_{i=1}^3 e^{ik \cdot \mathbf{v}_i}$ 。单粒子的零能谱包含两个处于布里渊区的狄拉克点,

$$\mathbf{K}_\pm = \left(\pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}}, 0 \right), \text{ 满足 } \tau(\mathbf{K}_\pm) = 0.$$

在 $\mathbf{K}_\pm$ 的邻域内 $\mathbf{k}$ 可线性展开为 $\mathbf{k} = \mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}$,从而上述动量空间哈密顿量 H_0 就有线性化

$$\begin{aligned} H_0 = & \sum_{\mathbf{p}} [\tau_+(\mathbf{p}) a_+(\mathbf{p}) b_+(\mathbf{p}) + \\ & \tau_+^\dagger(\mathbf{p}) b_+(\mathbf{p}) a_+(\mathbf{p})] + \\ & \sum_{\mathbf{p}} [\tau_-(\mathbf{p}) a_-(\mathbf{p}) b_-(\mathbf{p}) + \\ & \tau_-^\dagger(\mathbf{p}) b_-(\mathbf{p}) a_-(\mathbf{p})] \end{aligned} \quad (10)$$

① 原胞只需从图1中红色和蓝色三角形中任选其一。不失一般性,取红色三角形为原胞, $\mathbf{s}_1$ 和 $\mathbf{s}_2$ 为基矢,可生成完整晶格。

其中产生、湮灭算子是 $a_{\pm}(\mathbf{p}) = a(\mathbf{K}_{\pm} + \mathbf{p})$, $b_{\pm}(\mathbf{p}) = b(\mathbf{K}_{\pm} + \mathbf{p})$ 。而 $\tau_{\pm}(\mathbf{p}) = \tau(\mathbf{K}_{\pm} + \mathbf{p}) = \pm v_F(\mathbf{p}_x \pm i\mathbf{p}_y)$, 其中 v_F 是费米速度(v_F 是此处运算的特征速度, 具有和光速相当的地位, 为简单起见可模仿自然单位制取 $v_F = 1$)。此时 H_0 就可写成如下的矩阵形式

$$H_0 = \Psi^\dagger \alpha_i p_i \Psi, \quad i = 1, 2 \quad (11)$$

其中 $\Psi(\mathbf{x})$ 是狄拉克四分量旋量

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+^b(\mathbf{x}) \\ \psi_+^a(\mathbf{x}) \\ \psi_-^a(\mathbf{x}) \\ \psi_-^b(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

$$\text{其中, } \begin{cases} a_{\pm}(\mathbf{p}) \\ b_{\pm}(\mathbf{p}) \end{cases} = \int d^2\mathbf{x}' e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}'} \begin{cases} \psi_{\pm}^a(\mathbf{x}') \\ \psi_{\pm}^b(\mathbf{x}') \end{cases} \quad (12)$$

这里的 $\alpha_i, i = 1, 2$, 模仿量子电动力学(QED), 由 γ -矩阵定义, $\alpha_i = \gamma_4 \gamma_i$; 而 γ -矩阵则取 QED 中的狄拉克矩阵写法, $\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, k = 1, 2, 3$;

$\gamma_4 = \beta = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}$; $\gamma_5 = i\gamma_4 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$, 这里 σ_k 是泡利矩阵。 γ -矩阵满足克利福德(Clifford)代数 1-矢量的要求, $\gamma_a \gamma_b + \gamma_b \gamma_a = 2\delta_{ab}I$, 其中 $a, b = 1, 2, 3, 4$ 。哈密顿量 H_0 对 $\Psi^\dagger$ 变分就得到运动方程

$$\gamma_a \partial_a \Psi = 0, \quad \alpha = 1, 2, 4 \quad (13)$$

这是一个(2+1)维的无质量狄拉克方程。它的色散关系是线性的, $\epsilon(\mathbf{p}) = \pm |\mathbf{p}|$; 在能谱中, 导带和价带之间的带隙为零, 如图 4 所示。载流子(电子和空穴)称为狄拉克费米子; 布里渊区的六个角称为狄拉克点, 对应 $E = 0$, 是载流子由带负电的电子转到带正电的空穴之处, 因此也叫中立点^[3]。

零质量意味着零带隙, 这会严重影响石墨烯

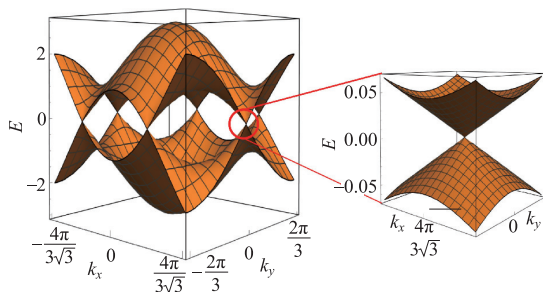


图4 石墨烯的能带结构。第一布里渊区呈六边形, 能隙在六个顶点处闭合, 形成狄拉克点; 在其附近呈线性色散关系, 如图中放大区域所示, 称为狄拉克锥

在电子学上的应用。用其制成的场效应晶体管(FET)的通断不能通过栅极控制, 使其无法被应用到现今的电子工业中。具有理想高开关比的场效应晶体管需要在室温下有可观的带隙, 例如硅具有约 1.12eV 的带隙(300K)。因此人们特别关注: 如何在室温下打开一个可观的带隙, 同时又不破坏石墨烯本身优异的电学性质, 从而能利用石墨烯制成超越硅的具有更低能耗、更高速度的电子元件^[4]。

为了产生带隙, 人们提出很多方案, 下面列举一种作为示例^[5]。针对跃迁强度 t 引入调整, 即一个复标量背景场 $\Delta(r)$, 使之诱导出一个 $\delta t_{r,i}$

$$\delta t_{r,i} = -\frac{1}{3} [\Delta(r) e^{i\mathbf{K}_+ \cdot \mathbf{s}_i} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} + \Delta^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}_+ \cdot \mathbf{s}_i} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}],$$

$$G = K_+ - K_- \quad (14)$$

在此修正下哈密顿量被修改为

$$H = - \sum_{r \in A} \sum_{i=1}^3 (t + \delta t_{r,i}) [a^\dagger(\mathbf{r}) b(\mathbf{r} + \mathbf{s}_i) + b^\dagger(\mathbf{r} + \mathbf{s}_i) a(\mathbf{r})] \quad (15)$$

相应的矩阵形式被修改为

$$H = \Psi^\dagger \mathcal{K} \Psi = \Psi^\dagger [\alpha_i + g\beta(\varphi_{Re} - i\gamma_5 \varphi_{Im})] \Psi, \quad i = 1, 2 \quad (16)$$

其中 $\mathcal{K}$ 为

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} 0 & -2i\partial_z & \Delta(\mathbf{r}) & 0 \\ -2i\partial_z & 0 & 0 & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & 0 & 0 & 2i\partial_z \\ 0 & \Delta^*(\mathbf{r}) & 2i\partial_z & 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

其中, $\Delta(r) = g\varphi$, g 是耦合强度, 描述 $\Delta(r)$ 的量纲。 $\varphi = \varphi_{Re} + i\varphi_{Im}$ 是复标量, φ_{Re} 和 φ_{Im} 分别是实部和虚部。 φ 亦可通过模长和相位表达, $\varphi = |\varphi| e^{i\chi}$ 。由式(16)可导出能级方程

$$[\alpha_i p_i + g\beta(\varphi_{Re} - i\gamma_5 \varphi_{Im})] \Psi = E \Psi \quad (18)$$

χ 可以通过 φ 的规范变换去除掉

$$\chi \rightarrow \chi' = \chi + 2\omega, \quad \Psi \rightarrow \Psi' = e^{i\omega\gamma_5} \Psi \quad (19)$$

因此式(16)就可导致一个有质量的狄拉克方程

$$(\gamma_a \partial_a + ig|\varphi|) \Psi' = 0 \quad (20)$$

其中, $ig|\varphi|$ 是诱导出的质量。这就导致色散关系中出现了质量

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{p^2 + |\Delta|^2} \quad (21)$$

也就意味着导带和价带之间产生了所需要的能隙。

石墨烯的蜂窝六角晶格可以导出狄拉克方

程,这相当于建立起一种“量子电动力学”。这种新体系具有众多优点,参后文“石墨烯的各种新奇性质”。

1.2 蜂窝状晶格暨霍尔丹(Haldane)模型(两带模型算例一)

下面的运算可作为式(1)两带模型的第一个具体算例。读者需要注意的是紧束缚模型及自旋轨道耦合的表达方式和处理办法。

1988年霍尔丹通过交错磁通的蜂窝状晶格提出一个无自旋的理论模型^[6],如图5所示,以期实现零磁场下的量子霍尔效应(即量子反常霍尔效应)。

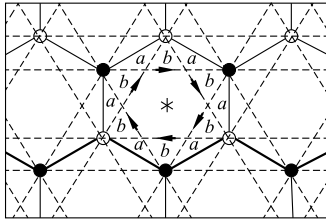


图5 霍尔丹模型为蜂窝状晶格结构。以实线为边界,以“*”为中心的最小正六边形是维格纳-赛茨(Wigner-Seitz)晶胞。虚线连接次相邻格点,箭头标记具有正相位的跃迁方向,对应于哈密顿量中取 $v_{ij}=+1$ 。区域 a 、 b 中有大小相等、方向相反的周期性磁通

霍尔丹模型是在石墨烯晶格中加入周期性磁通以破缺掉时间反演对称性,同时保持系统总磁通为零。实空间中的哈密顿量为

$$H = t_1 \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} e^{iv_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j + M \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i \quad (22)$$

其中

$$\begin{cases} H_1 = t_1 \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + h.c. \\ H_2 = t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} e^{iv_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j + h.c. \\ H_3 = M \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i \end{cases} \quad (23)$$

$\langle ij \rangle$ 和 $\langle\langle ij \rangle\rangle$ 分别代表最近邻和次近邻跃迁, $c_i^\dagger$ 和 c_i 为格点 i 处的产生、湮灭算符。 $\xi_i = \pm 1$ 表示交错在位能的符号,对 A 晶格取 $+M$,对 B 取 $-M$ 。周期性磁通起到整数量子霍尔效应中的外磁场的作用,使得跃迁参数带上相位

$$\exp \left[i \frac{e}{\hbar} \int_L \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \right] \quad (24)$$

其中,积分路径 L 沿跃迁的路径,这里取为直线。上述操作称为佩尔斯(Peierls)替换(substitution)^[7]。取合适的 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ 可以使积累的总相位为

跃迁路径所包围的磁通。

分别用 a_i 和 b_i 表示子晶格 A 和 B 中 i 处的湮灭算符, $a_i^\dagger$ 和 $b_i^\dagger$ 表示产生算符。利用傅里叶变换将实空间哈密顿变到动量空间,有

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_i^\dagger \\ b_i^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}}^\dagger \\ b_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (25)$$

其中, N 指原胞的个数, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 是动量空间的二维波矢, $\mathbf{r}$ 是格点所处的位置。以下对最近邻和次近邻两种情况进行详细讨论,计算时采用图5中的原胞取法。

。最近邻跃迁:

发生在同一原胞内的两个格点之间,跃迁路径为一个完整的原胞,所以 t_1 不受影响,即不会携带额外的相位因子

$$\begin{aligned} H_1 &= t_1 \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + h.c. \\ &= t_1 \sum_i (a_i^\dagger b_i + h.c.) \\ &= t_1 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a} b_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_b} + h.c.] \end{aligned} \quad (26)$$

$\mathbf{r}_a$ 和 $\mathbf{r}_b$ 分别是同一原胞内 A 、 B 格点的位置矢量,二者由 $\mathbf{v}_j$ 联系, $j=1,2,3$

$$\mathbf{r}_a = \mathbf{r}_b + \mathbf{v}_j, \quad j=1,2,3 \quad (27)$$

从而

$$\begin{aligned} H_1 &= t_1 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_b} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [a_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{j=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_b + \mathbf{v}_j)} b_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_b} + h.c.] \\ &= t_1 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_b} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_b} \sum_{j=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j} b_{\mathbf{k}'} + h.c.] \end{aligned} \quad (28)$$

利用正交关系

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_b} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_b} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (29)$$

式(28)可化为

$$\begin{aligned} H_1 &= t_1 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [a_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{j=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j} b_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} + h.c.] \\ &= t_1 \sum_{\mathbf{k}} [a_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{j=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j} b_{\mathbf{k}} + h.c.] \end{aligned} \quad (30)$$

将上式写为矩阵形式,同时取基矢量

$$\psi = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \psi^\dagger = (a_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}}^\dagger) \quad (31)$$

有

$$\begin{aligned}
H_1 &= t_1 \sum_k \sum_{j=1}^3 (a_k^\dagger, b_k^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik \cdot v_j} \\ e^{ik \cdot v_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} \\
&= t_1 \sum_k \sum_{j=1}^3 \psi^\dagger [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j) \sigma_x + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j) \sigma_y] \psi
\end{aligned} \quad (32)$$

。次近邻跃迁:

发生在相邻原胞中的同种格点,彼此由 $\mathbf{s}_j$ 相联系, $j=1,2,3$ 。所以包围的总磁通不为零,使得跃迁参数变为 $t_2 e^{i\nu_{ij}\phi}$ 。其中 $\nu_{ij} = \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)(\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j)_z = \pm 1$,而 $\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_j$ 是次近邻跃迁所经过的两条边对应的单位矢量。当 $\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j$ 的方向垂直纸面向里时, $\nu_{ij} = +1$;反之, $\nu_{ij} = -1$ 。从结果上看,跃迁路径为顺时针时 $\nu_{ij} = +1$,逆时针 $\nu_{ij} = -1$ 。 $\phi = \frac{2\pi}{\Phi_0}(2\Phi_a + \Phi_b)$, Φ_a 和 Φ_b 为通过图5中区域 a 和 b 的磁通, $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ 为磁通量子。

$$\begin{aligned}
H_2 &= t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} e^{i\nu_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j + h.c. \\
&= t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} [e^{i\nu_{ij}\phi} (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j) + h.c.] \\
&= t_2 \sum_i \sum_{j=1}^3 [e^{-i\phi} a_i^\dagger a_{i+s_j} + e^{i\phi} a_i^\dagger a_{i-s_j} + \\
&\quad e^{i\phi} b_i^\dagger b_{i+s_j} + e^{-i\phi} b_i^\dagger b_{i-s_j} + h.c.] \quad (33)
\end{aligned}$$

对上式进行傅里叶变换,使用与上文最近邻格点相似的分析方法,可得

$$\begin{aligned}
H_2 &= 2t_2 \sum_k \psi^\dagger \left[\left(\sum_{j=1}^3 \cos\phi \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_j) \right) I + \right. \\
&\quad \left. \left(\sum_{j=1}^3 \sin\phi \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_j) \right) \sigma_z \right] \psi \quad (34)
\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}
H_3 &= M \sum_i a_i^\dagger a_i - M \sum_i b_i^\dagger b_i \\
&= M \sum_i [a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i] = M \sum_i \psi^\dagger \sigma_z \psi \quad (35)
\end{aligned}$$

。最后,综合最近邻、次近邻相互作用即式(32)、式(34)、式(35),就得到动量空间的哈密顿量

$$H_m = \sum_k \psi^\dagger [\epsilon(\mathbf{k}) I + \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma}] \psi \quad (36)$$

式中的矩阵部分是哈密顿的核即单粒子哈密顿量,恰为我们希望得到的、形如前文式(1)的两带模型

$$H = \epsilon(\mathbf{k}) I + \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (37)$$

其中, $\mathbf{h}$ 为哈密顿矢量。 ϵ 与 $\mathbf{h}$ 矢量的具体表达式是

$$\epsilon(\mathbf{k}) = 2t_2 \cos\phi \left[\sum_{j=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_j) \right] \quad (38)$$

$$h_x = t_1 \sum_{j=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j), \quad h_y = t_1 \sum_{j=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j),$$

$$h_z = M - 2t_2 \sin\phi \left[\sum_{j=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_j) \right] \quad (39)$$

为清楚观察起见也可把式(38)、式(39)代入式(37)得到 H 的整体表达式

$$\begin{aligned}
H(\mathbf{k}) &= 2t_2 \cos\phi \left[\sum_{j=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_j) \right] I + \\
&t_1 \left\{ \sum_{j=1}^3 [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j) \sigma_x + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j) \sigma_y] \right\} + \\
&\left\{ M - 2t_2 \sin\phi \left[\sum_{j=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_j) \right] \right\} \sigma_z \quad (40)
\end{aligned}$$

式(37)实现了前文式(1)的两带模型,说明两带模型的确可从蜂窝状六角晶格得到。该模型的哈密顿量描述的陈绝缘体(Chern insulator)可实现量子霍尔效应,关键在于时间反演对称性破缺,其中非平庸的陈数 c 由式(2)的拓扑映射度给出^[8]。

关于霍尔丹模型另有如下补充信息:

- 。两带模型的推广形式是 N 带模型:将式(36)写成分量形式是 $H_m = \sum_{\alpha, \beta} \psi^*_{\alpha} H_{\alpha\beta} \psi_{\beta}$,其中指标 α, β 取 $\alpha, \beta=1,2$,对应的群对称性是 $SU(2)$ 。将指标范围扩大到 $\alpha, \beta=1,2,\dots,N$,就得到 N 带模型,相应的群对称性是 $SU(N)$ 。
- 。内部拓扑非平庸的能带结构(bulkstate)对应能隙闭合的边缘态(edge state),这是量子霍尔效应的一个显著特征,称为体-边对应。霍尔丹模型的体态具有非平庸陈数 $c = \pm 1$,因此具有一支能隙闭合的边缘态,如图6所示。

1.3 石墨烯的各种新奇性质

- 。在石墨烯的“新量子电动力学(QED)”体系中,等效速度 v_F 具有和光速 c 同等的地位, v_F 在数值上是 $\frac{1}{300}c$ 。这意味着一种“低速的QED”,那么要观察到类似真实QED的现象,难度就大大降低。典型例子包括势垒穿透(Klein 佯谬)和抖动效应(Zitterbewegung),它们在粒子物理中很难观测到。

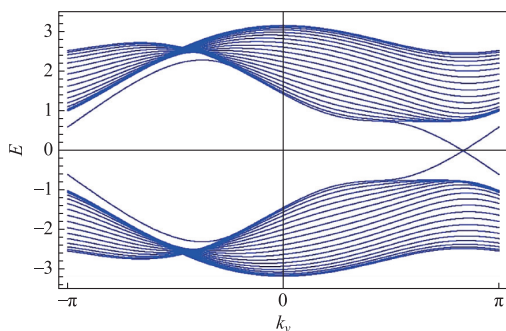


图6 霍尔丹模型的无能隙边缘态。参数为：

$$t_1=1, t_2=\frac{1}{3}, \varphi=\frac{\pi}{2}, M=1。$$

势垒穿透指相对论性的粒子可以穿过任意高度和宽度的势垒。理论上预期,此实验在石墨烯中会很容易进行。其中的相对论效果表现在:充分高的势垒对电子是排斥作用,而对正电子则为吸引作用,从而势垒内部会出现正电子态。这反映出非相对论和相对论量子力学的区别^①。抖动效应这一特殊运动方式发生在电子(正能态)波包和正电子(负能态)波包的交界上^②。通常“抖动”发生得非常快,不可能观察到;但是在固体中,“反粒子”是空穴,它是电子留下的空位。所以当狄拉克费米子在石墨烯中被禁闭住的时候,抖动效应可以解释为电子和空穴态的混合。在石墨烯中,由于狄拉克费米子的康普顿波长是纳米量级,在高分辨率显微镜下它可能将抖动效应表现出来。

- 相对于真实自旋,由“赝”自旋诱导的效应更加明显。在石墨烯的 QED 中也可以引进“手征”,它形式上是 σ 在运动方向 k 上的投影。对电子而言,投影为“+”;对空穴而言,投影为“-”。电子态和空穴态起源于相同子晶格,其间联系错综复杂,必须用手征描述。
- 石墨烯中的手征量子霍尔效应是整数量子霍尔效应的相对论推广;既不是标准的整数量子霍尔效应,又不是新的分数量子霍尔效应。其反常序列被理解为:产生于有磁场存在时的石墨烯电子谱的量子电动力学,公式为

$$E_N = \pm v_F \sqrt{2e\hbar BN} \quad (41)$$

其中,±分别指电子和空穴。在 $E=0$ 处出现的量子化能级既有电子的也有空穴的;那些能级的存在可作为理论根据解释量子反常霍尔效应的序列。

- 双层石墨烯中同样会出现量子反常霍尔效应,

在狄拉克点附近体现金属性。哈密顿量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{bmatrix} 0 & (k_x - ik_y)^2 \\ (k_x + ik_y)^2 & 0 \end{bmatrix} \quad (42)$$

- 与单层石墨烯的狄拉克方程相比较,上式将狄拉克型非对角结构和非相对论量子力学的薛定谔项 $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ 结合起来。这种有质量狄拉克费米子的朗道量子化写作

$$E_N = \pm \hbar\omega \sqrt{N(N-1)} \quad (43)$$

其中, ω 为回旋频率。值得注意的是,双层石墨烯的电子能带结构对电场效应异常敏感、反应特别显著。如果使用 SiO_2 提供电介质导带、价带之间的能隙 ΔE ,它可以连续地从 0 变到约 0.3eV。

- 在石墨烯中,当掺杂密度 n 高达 10^{12} cm^{-2} 并且器件同时电掺杂和化学掺杂时,电子迁移率 μ 都能够保持较高的取值。这一点使得在石墨烯中有望形成室温条件下亚微米尺度(0.3 μm)的“弹道输运”(ballistic transport,即载流子的大批量输运)。
- 光学性质:石墨烯独特的单原子层具有惊人的不透光性。实验表明,它能吸收 $\pi\alpha = 2.3\%$ 的白光,其中 $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ 是精细结构常数。
- 热学性质:石墨烯在室温下的热传导率可达到 $(4.84 \pm 0.44) \times 10^3 \sim (5.30 \pm 0.48) \times 10^3 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。用不同方法测定的值都超过了碳纳米管或钻石。

石墨烯有三个声学支,即三个声子模式。其中两个为二维面内模式,是线性色散关系(相对论性);剩下一个为二维面外模式,色散关系是二次即非相对论性的。因此,前两个面内模式的

① 在非相对论量子力学中测不准原理只限制到“不能同时测量电子的位置和动量”;但在量子力学中甚至完全不能测量电子的位置,任何精度都不行。因为一旦测量(某种意义上设置了一个势垒)就将从真空中制造出若干电子-正电子对。这会导致无法分辨何者为电子,何者为新产生的电子。

② “抖动”的产生是由于相对论性粒子的波函数不可能被限制在一个小于其量子电动力学特征尺度即康普顿波长的空间里。为解释这一点,狄拉克引入了负能态的概念(负能态后来被解释为反粒子)。在相对论速度下运动的电子能够孕育出它自己的反粒子,而它和自己反粒子之间的相互作用使得电子的运动路径发生抖动。

T^2 型热传导贡献在低温下被 $T^{\frac{3}{2}}$ 型的面外模式盖过。

石墨烯的弹道热传导是各向异性的。

- 力学性质:利用原子力显微镜(AFM)可以测出悬浮的石墨烯面的弹性常数。测量结果表明弹性常数的数量级是 $1.5 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, 而杨氏模量达到了 0.5 TPa 。这些值都高于三维石墨, 因此石墨烯非常结实, 可以用来制造压力传感器(pressure sensors)和共振仪(resonators)等。

近年来以碳的同族元素以及相邻元素生成的二维烯晶格结构也取得了令人瞩目的进展。北航-中科院物理所-澳大利亚卧龙岗大学联合课题组在实验上获得突破, 首次生长出了硅烯、锗烯和硼烯等具有半金属/金属性的二维烯量子功能材料, 观察到由层间转角引起的范霍夫奇点(van Hove singularities)等量子特征, 为精准调节二维烯的电子态密度提供了简单易行的方法。新材料具有化学稳定性好、电子态可调以及强层间相互作用等特点, 有望成为一个新的量子材料研究领域^[9,10]。

石墨烯成为了现代科技发展的一种重要的二维纳米材料, 有着优异的光学、力学、电学性质, 甚至对量子科技的研发也会有所帮助。在生物医药、能源加工、环境生态方面也有望做出大的贡献, 被认为是一种革命性的材料。

2 拓扑绝缘体

拓扑绝缘体的思想最初始自量子自旋霍尔效应。但随着理论不断发展, 现已拓展为一个十分宽泛的概念, 受到对称性保护的拓扑态都可以泛称为拓扑绝缘体。它与普通绝缘体的不同之处在于能带结构: 普通绝缘体的能带结构包括填满电子的价带与未填满的导带, 以及居于二者之间的能隙。对于不同种材料其能隙宽度不同, 导致不同性质; 拓扑绝缘体是一种处于量子物质状态的材料, 其体内是绝缘态, 边界是导体态。对一维拓扑绝缘体而言, 能隙闭合, 形成通路; 二维拓扑绝缘体的边缘是一维的线, 在该处能隙闭合, 具有导电性; 三维拓扑绝缘体的边缘是二维的面, 在该处能隙闭合, 具有导电性。

拓扑绝缘体的独特电子特性为制做室温下的低能耗自旋电子器件提供了可能性, 使之成为电子技术发展的重要推动力量。寻找新型的具有大带隙(体内电子态)、高化学惰性、高热稳定性的强

拓扑绝缘体是材料领域的重要问题之一。预测和探索基于自旋轨道相互作用的拓扑绝缘电子相成为凝聚态物理的一个全新领域。

2.1 历史进程

首个二维拓扑绝缘体的理论模型是凯恩(Kane)和迈乐(Mele)所预言的 Z_2 绝缘体^[11,12], 其拓扑性由 Z_2 不变量表征: $Z_2=1$ 对应拓扑绝缘体, $Z_2=0$ 对应普通绝缘体。但实验上未能用石墨烯首先实现拓扑绝缘体, 是因为碳是轻元素, 其自旋轨道相互作用较弱, 能隙不够大。于是人们尝试在重元素中去寻找量子自旋霍尔绝缘体材料。2006 年张首晟等人选择 HgTe 量子势阱结构来实现拓扑绝缘体^[13], 原理是: 在无外磁场情况下, 自旋不同的电子会分别沿边界向不同的方向传播并成对出现, 从而产生量子自旋霍尔效应, 如图 7 所示; 一旦加上强磁场, 时间反演对称性就会破坏, 量子自旋霍尔效应也将消失。

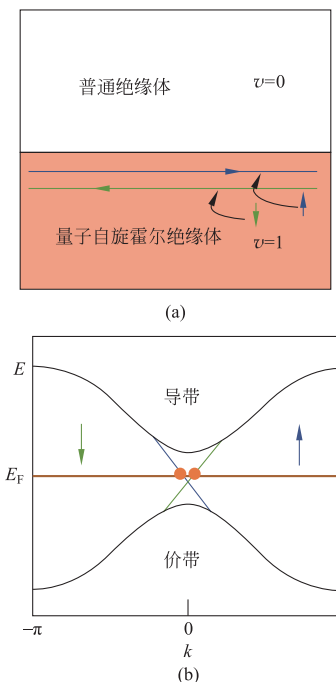


图7 量子自旋霍尔效应绝缘体(a)与普通绝缘体的分界面。(b)石墨烯模型中分散的边缘态, 自旋向上和向下的电子沿相反方向传播。其中 E_F 是费米(Fermi)能级

实验上的突破发生在 2013 年。清华大学薛其坤组对 $\text{Cr}_{0.15}(\text{Bi}_{0.1}\text{Sb}_{0.9})_{1.85}\text{Te}_3$ 进行深入研究, 最终观测到量子反常霍尔效应^[14]。此成果是凝聚态物理领域的重大突破, 有望推动新一代低能耗晶体管和电子学器件的发展, 加速推进信息技术革命。

2.2 方晶格中的量子反常霍尔效应(两带模型算例二)

本节将为两带模型式(1)提供第二个示例。读者需要注意的是紧束缚模型以及自旋轨道耦合的表达方式和处理办法。

正方晶格有两个互相垂直的基矢, $\mathbf{a}_1 = (0, 1)l$, $\mathbf{a}_2 = (1, 0)l$, 为了计算方便取晶格常数 $l=1$, 如图 8 所示。

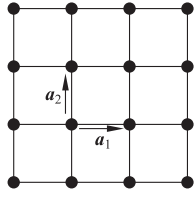


图 8 二维正方晶格, 基矢 $\mathbf{a}_1 = (0, 1)l$ 和 $\mathbf{a}_2 = (1, 0)l$ 互相垂直。晶格常数 $l=1$

考虑自旋轨道耦合和极化, 在该模型中建立哈密顿量^[15]

$$H = \sum_n \left[c_n^\dagger \frac{\sigma_z - i\sigma_x}{2} c_{n+a_1} + c_n^\dagger \frac{\sigma_z - i\sigma_y}{2} c_{n+a_2} + h \cdot c \right] + m \sum_n c_n^\dagger \sigma_z c_n \quad (44)$$

其中, σ_x 和 σ_y 项代表自旋轨道耦合, σ_z 项代表铁磁极化, $c^\dagger$ 和 c 分别为产生、湮灭算符。 m 是在位能(on-site energy), 所起的作用是在能带结构中打开能隙。利用傅里叶变换

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ik \cdot r}, \quad c_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k^\dagger e^{-ik \cdot r} \quad (45)$$

式(44)在动量空间变为

$$H = \frac{1}{N} \sum_{k, k'} \left[c_k^\dagger e^{-ik \cdot r_n} \frac{\sigma_z - i\sigma_x}{2} c_{k'} e^{ik' \cdot (r_n + a_1)} + h \cdot c \right] + \frac{1}{N} \sum_{k, k'} \left[c_k^\dagger e^{-ik \cdot r_n} \frac{\sigma_z - i\sigma_y}{2} c_{k'} e^{ik' \cdot (r_n + a_2)} + h \cdot c \right] + m \frac{1}{N} \sum_{k, k'} c_k^\dagger e^{-ik \cdot r_n} \sigma_z c_{k'} e^{ik' \cdot r_n} \quad (46)$$

注意 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 = k_x$, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 = k_y$, 并利用式(29)有

$$H = \sum_{k, k'} \left[c_k^\dagger \frac{\sigma_z - i\sigma_x}{2} c_k e^{ik \cdot a_1} + c_k^\dagger \frac{\sigma_z - i\sigma_y}{2} c_k e^{ik \cdot a_2} + h \cdot c \right] + m c_k^\dagger \sigma_z c_k = \sum_k c_k^\dagger [\sin k_x \sigma_x + \sin k_y \sigma_y + (m + \cos k_x + \cos k_y) \sigma_z] c_k \quad (47)$$

从中读出单粒子哈密顿量

$$h = (\sin k_x) \sigma_x + (\sin k_y) \sigma_y + (m + \cos k_x + \cos k_y) \sigma_z \quad (48)$$

和式(1)相比, 上式就是一个两带模型, 当中 $\epsilon=0$ 。

可读出三维哈密顿矢量 $\mathbf{h} = (h_x, h_y, h_z)$

$$\begin{cases} h_x = \sin k_x \\ h_y = \sin k_y \\ h_z = m + \cos k_x + \cos k_y \end{cases} \quad (49)$$

诱导出的运动方程, 即欧拉-拉格朗日(Euler-Lagrangian)方程是

$$h \Psi = E \Psi, \quad \text{即} (\mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Psi = \begin{pmatrix} h_z & h_x - ih_y \\ h_x + ih_y & -h_z \end{pmatrix} \Psi = E \Psi \quad (50)$$

将上式视为本征值方程, 可以解出能量本征值和本征态为

$$\begin{cases} E_{\pm} = \pm \|\mathbf{h}\| \\ \Psi = \begin{pmatrix} h_x - ih_y \\ -h_z \pm \|\mathbf{h}\| \end{pmatrix} \\ \text{模长为} \|\Psi\| = \sqrt{2\|\mathbf{h}\|(\|\mathbf{h}\| \mp h_z)} \end{cases} \quad (51)$$

将式(48)代入上式可算出能量本征值

$$E_{\pm} = \pm \|\mathbf{h}\| = \pm \sqrt{(\sin k_x)^2 + (\sin k_y)^2 + (m + \cos k_x + \cos k_y)^2} \quad (52)$$

当 m 取某些特定值时导带、价带闭合, 能隙为零。这些点称为狄拉克点, 共有四个: $(k_x, k_y, m) = (0, 0, -2), (0, \pi, 0), (\pi, 0, 0), (\pi, \pi, 2)$, 参看图 9。在狄拉克点之外的其他情况下, 能隙始终打开, 系统处于绝缘态。由于 h_z 中含有常数项 m , 时间反演对称性破缺, 因此这个模型描述的是量子反常霍尔效应^[17]。以 $(k_x, k_y, m) = (0, 0, -2)$ 为例, 当 m 趋于 -2 时, 可在 $(k_x, k_y) = (0, 0)$ 附近将哈密顿量展开为 $(2+1)$ 维有质量项的狄拉克方程

$$h = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + (m + 2) \sigma_z = \begin{pmatrix} m + 2 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & -m - 2 \end{pmatrix} \quad (53)$$

其他三个狄拉克点可做类似展开。如前文“石墨烯”一节所指出, 质量项的出现意味着能隙的出现, 而非零能隙是电子学对材料的核心要求。

进一步可由式(2)得到此模型下霍尔电导 $\sigma_{xy} =$

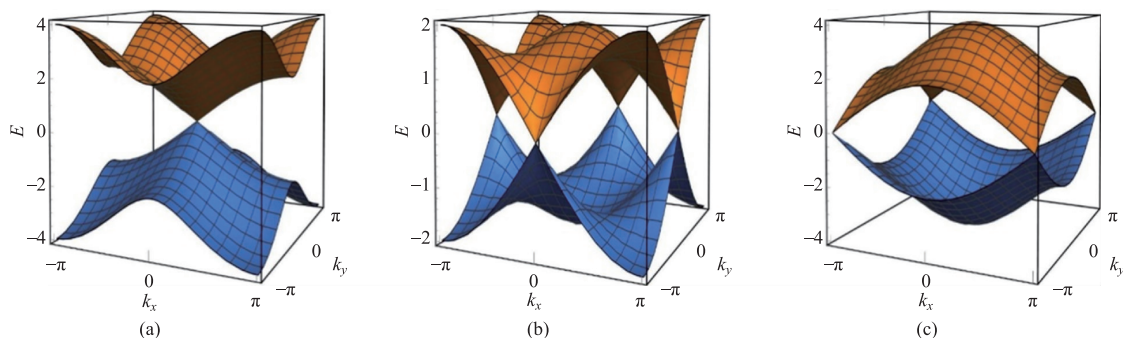


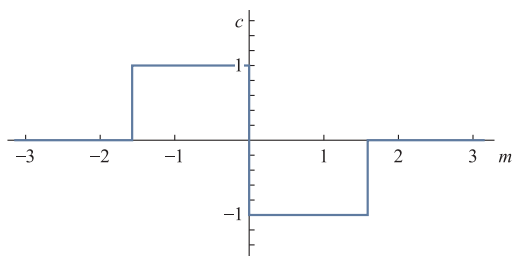
图9 方晶格的能带结构

(a)当 $m = -2$ 时,能隙在 $(k_x, k_y) = (0, 0)$ 处闭合;(b)当 $m = 0$ 时,能隙在 $(k_x, k_y) = (0, \pi)$ 和 $(k_x, k_y) = (\pi, 0)$ 处闭合;(c)当 $m = 2$ 时,能隙在 $(k_x, k_y) = (\pi, \pi)$ 处闭合。除狄拉克点之外的其他位置,两个能带之间始终存在有限大小的能隙,系统处于绝缘态

$\nu \frac{e^2}{h}$ 的填充因子 ν ,即陈数或拓扑映射度 c

$$c = \begin{cases} 0, & m > 2 \text{ 或 } m < -2 \\ -1, & 0 < m < 2 \\ +1, & -2 < m < 0 \end{cases} \quad (54)$$

$(k_x, k_y) = (0, 0), (0, \pi), (\pi, 0), (\pi, \pi)$ 是轮胎面 T^2 上的点,而陈数的被积区域又包含这些点,这导致 $m = 0, \pm 2$ 时 c 的取值出现奇异性,在数值模拟中表现为跳跃奇点,如图 10 所示。

图10 陈数 c 随着 m 变化而变化的数值模拟; $m = 0, \pm 2$ 时具有奇异性

笔者的工作^[16,17]进一步指出:单极拓扑激发出现在 $\|\mathbf{h}\| = 0$ 即 $\mathbf{h} = \mathbf{0}$ 处;而半子激发(meron)发生在 $h_x = h_y = 0$ 而 $h_z \neq 0$ 处,即 $\|\mathbf{h}\| = h_z \neq 0$ 。

2.3 关于边缘态的讨论

如前所述,拓扑绝缘体在内部具有较大能隙,处于绝缘态;此时若能带具有非平庸拓扑,则对应能有能隙闭合的边缘态,即所谓的体-边对应。在上述方晶格模型中,当 $-2 < m < 0$ 或 $0 < m < 2$ 时,价带和导带之间打开能隙,且导带具有非零陈数 $c = \pm 1$,表明有一支能隙闭合的边缘态;即在边界有一条导电通道,由此产生的霍尔电导为 $\sigma_{xy} = \pm \frac{e^2}{h}$ 。

不失一般性,假设晶格在 x 方向长度为 L ,则

$x = 0$ 和 $x = L$ 处将各出现一支边缘态。由于 y 方向仍具有良好的周期性,因此可定义一维傅里叶变换

$$\begin{cases} c_{k_y}(x) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_y c(x, y) e^{ik_y y} \\ c_{k_y}^\dagger(x) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_y c^\dagger(x, y) e^{-ik_y y} \end{cases} \quad (55)$$

其中, (x, y) 是格点坐标, L_y 是 y 方向的周期。哈密顿量式(44)取

$$\begin{aligned} H = \sum_{x,y} & \left[c^\dagger(x, y) \frac{\sigma_z - i\sigma_x}{2} c(x+1, y) + \right. \\ & \left. c^\dagger(x, y) \frac{\sigma_z - i\sigma_y}{2} c(x, y+1) + h.c. \right] + \\ & m \sum_n c^\dagger(x, y) \sigma_z c(x, y) \end{aligned} \quad (56)$$

对 y 方向做傅里叶变换有

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{L_y} \sum_{x, k_y, k'_y} \left[c_{k_y}^\dagger(x) e^{-ik_y y} \frac{\sigma_z - i\sigma_x}{2} c_{k'_y}(x+1) e^{ik'_y y} + \right. \\ & \left. h.c. \right] + \\ & \frac{1}{L_y} \sum_{x, k_y, k'_y} \left[c_{k_y}^\dagger(x) e^{-ik_y y} \frac{\sigma_z - i\sigma_y}{2} c_{k'_y}(x) e^{ik'_y y} + \right. \\ & \left. h.c. \right] + m \frac{1}{L_y} \sum_{x, k_y, k'_y} c_{k_y}^\dagger(x) e^{-ik_y y} \sigma_z c_{k'_y}(x) e^{ik'_y y} \\ &= \sum_{x, k_y} \left[c_{k_y}^\dagger(x) \frac{\sigma_z - i\sigma_x}{2} c_{k_y}(x+1) + h.c. \right] + \\ & \sum_{x, k_y} c_{k_y}^\dagger(x) [\sin k_y \sigma_y + (m + \cos k_y) \sigma_z] c_{k_y}(x) \end{aligned} \quad (57)$$

至此哈密顿量可视为一维紧束缚链模型。以 $\phi^T = (c_{k_y}(1), c_{k_y}(2), \dots, c_{k_y}(N))^T, x = 1, 2, \dots, N$ 为

基矢,有 $H = \psi^\dagger h \psi$ 。其中单粒子哈密顿量为

$$h = \begin{pmatrix} A & B & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ B^\dagger & A & B & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & B^\dagger & A & B & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B^\dagger & A & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A & B \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B^\dagger & A \end{pmatrix} \quad (58)$$

其中, $A = \sin k_y \sigma_y + (m + \cos k_y) \sigma_z$, $B = -\frac{i}{2} \sigma_x + \frac{1}{2} \sigma_z$ 。利用数值模拟方法可得能带结构,如图 11 所示。图中具有两支能隙闭合态,位于 $x=0$ 和 $x=L$ 两边界处。

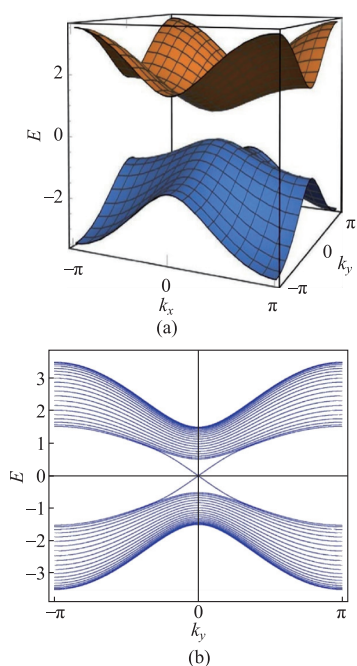


图 11 模型(44)的能带结构

(a) 模型式(44)所描述的模型的体态(Bulk)具有较大能隙,处于绝缘态; (b) 边界具有能隙闭合的边缘态,位于 $x=0$ 和 $x=L$ 两边界处。参数 $m = -1.5$

材料领域近年来一个重要方向是高陈数磁性拓扑材料的量子霍尔效应。已知霍尔电导 $\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}$, ν 是填充因子,拓扑意义是陈数。纵向电阻为零,表明电子在传输过程中没有耗散;但与正常金属电极之间仍存在接触电阻,其最小值为 $\frac{h}{\nu e^2}$ [18,19]。显然 ν 越大,电导 σ_{xy} 越大,接触电阻越

小,因此制造高陈数拓扑器件具有极高的理论和实用价值。北京大学王健课题组近期在研究上取得了突破,在 MnBi_2Te_4 器件中发现了非朗道能级引起的高陈数和高温量子霍尔效应,在液氮温度以上观测到具有多个无耗散手性边界态的陈绝缘体态 [20]。

人们期待实现室温下的陈绝缘体态或量子反常霍尔效应,在真正意义上构筑无能量耗散的信息高速公路。

2.4 三维拓扑绝缘体

三维拓扑绝缘体领域也取得了重要的进展。2006 年三个课题组独立发现三维的量子自旋霍尔绝缘体具有自然一般化的拓扑特性 [21-23],首次用“拓扑绝缘体”这个词来描述该电子态 [22];付亮等人建立起三维体拓扑与独特的二维导电表面态之间的联系,随后预言在一些真实的物质中会存在这种电子态 [21]。

实验上,2008 年报告了第一款三维拓扑绝缘体 $\text{Bi}_{x-1}\text{Sb}_x$ 的发现过程 [24]。利用角分辨光电子能谱(ARPES)测定了它的表面能带图谱,发现其表面结构比较复杂且能隙较小 [25] 这促使人们寻找有大能隙和简单表面光谱结构的第二代三维拓扑绝缘体材料。同年,实验分析和理论计算表明 Bi_2Se_3 亦是一款三维拓扑绝缘体,其表面有单独的狄拉克锥 [26]。与此同时,中科院物理所/北京凝聚态国家实验室-斯坦福大学联合课题组合作完成了相应的理论工作,指出不仅 Bi_2Se_3 , 类似的 Bi_2Te_3 和 Sb_2Te_3 也是三维拓扑绝缘体,并且 Bi_2Se_3 系列更可能在实验中成为比 $\text{Bi}_{x-1}\text{Sb}_x$ 更好的参考材料 [27]。

Bi_2Se_3 族的非平庸拓扑性来自不同宇称的两轨道之间的能带反转,由 Bi 和 Se 中较强的自旋轨道耦合导致。需要说明, Bi_2Se_3 、 Bi_2Te_3 和 Sb_2Te_3 只在 Γ 点处有能带反转,因而是较强的拓扑绝缘体。这里“强”和“弱”只是理论上的一种区分,并不代表实际应用中电流的强弱。实际上,弱拓扑绝缘体是二维拓扑绝缘体沿层间方向的叠加,本质上仍是二维拓扑绝缘体。其上的自旋电流被限制在材料的侧表面并沿一个方向传播,电流和自旋的方向锁定,保证它不会被非磁性的杂质散射,因此不会出现能量损耗,非常适合于自旋电子学器件。而强拓扑绝缘体在任意表面都具有自旋分辨的狄拉克锥,会产生各个方向的自旋电流;其中一部分会发生散射,造成能量损耗。如果材料表面态只包含一个狄拉克锥,则被称为最简

单的强大拓绝缘体,其简单性为理论研究提供了很好的平台。以 Bi_2Se_3 为例,其拓扑性质由 Γ 点附近的电子结构决定,可以构造一个以 $(|P1_z^+, \uparrow\rangle, |P2_z^-, \uparrow\rangle, |P1_z^+, \downarrow\rangle, |P2_z^-, \downarrow\rangle)$ 为基矢的有效哈密顿量 H_{TI} 来描述系统的低能长波特性。根据 Bi_2Se_3 晶体所具有的时间反演、中心反射和关于 z 轴的 C_3 点群对称性,当保留到 $\mathbf{k}$ 的二次项时,可以得到相应的 H_{TI} [27,28]

$$H_{\text{TI}}(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k})I +$$

$$\begin{pmatrix} M(\mathbf{k}) & A_1 k_z & 0 & A_2 k_- \\ A_1 k_z & -M(\mathbf{k}) & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & M(\mathbf{k}) & -A_1 k_z \\ A_2 k_+ & 0 & -A_1 k_z & -M(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (59)$$

其中, $\epsilon_0(\mathbf{k}) = C + D_1 k_z^2 + D_2 k_{\perp}^2$, $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$, $M(\mathbf{k}) = M - B_1 k_z^2 - B_2 k_{\perp}^2$ 。各个材料参数可通过有效哈密顿量的能谱和第一性原理计算的能谱进行参数拟合得到。在扣除常规项 $\epsilon_0(\mathbf{k})I$ 后相当于一个沿 z 方向的单轴各向异性的四分量旋量狄拉克模型。将式(59)对角化,可以得到 Bi_2Se_3 在 Γ 点附近的色散关系

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) \pm$$

$$\sqrt{A_1^2(k_x^2 + k_y^2) + A_2^2 k_z^2 + M^2(\mathbf{k})} \quad (60)$$

其中, $\pm$ 分别对应导带和价带。不计常规项 $\epsilon_0(\mathbf{k})$, 式(60)是相对论性粒子的色散关系在三维空间的推广。这里 z 方向的速度与 xy 平面内的速度不相等,且质量项 $M(\mathbf{k})$ 与动量相关。通过比较狄拉克质量 M 和 B_1, B_2 的符号差,可判断是否获得了拓扑绝缘体。在 Bi_2Se_3 中 $M = 0.28\text{eV}$, $B_1 = 10\text{eV} \cdot \text{\AA}^2$, $B_2 = 56.6\text{eV} \cdot \text{\AA}^2$ 。可以看到 $\text{sgn}(M/B_{1,2}) > 0$, 的确是拓扑绝缘体 [28]。

三维拓扑绝缘体最重要的性质是存在受拓扑保护的二维无能隙表面态。利用上面给出的有效模型哈密顿量式(59),设 $z > 0$ 的半空间为拓扑绝缘体,仿照二维拓扑绝缘体边缘态的求法,可得三维拓扑绝缘体的二维表面态的有效哈密顿量 [27,28]

$$H_{\text{surf}} = A_2(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \quad (61)$$

其中,理论计算取 $A_2 = 4.1\text{eV} \cdot \text{\AA}^2$, 而表面态的电子速度计算为 $v = \frac{A_2}{\hbar} \approx 6.2 \times 10^5 \text{m/s}$ 。由于表面态由二维无质量的狄拉克哈密顿量式(61)描述,因而可形成狄拉克锥的能带结构,如图 12(b)

所示,和碳单层在 K 和 K' 谷的狄拉克锥相似。但是拓扑绝缘体的表面态和碳单层或其他二维狄拉克系统有重要区别:碳单层有四个狄拉克锥,来源于自旋和能带低谷的简并。另外,纯粹的二维狄拉克系统在保持时间反演不变下一般有偶数个狄拉克锥,但时间反演不变的奇数个狄拉克锥只存在于三维拓扑绝缘体的表面。具有螺旋自旋结构的表面态是三维拓扑绝缘体的标志。拓扑绝缘体的体态和表面态如图 12 所示。

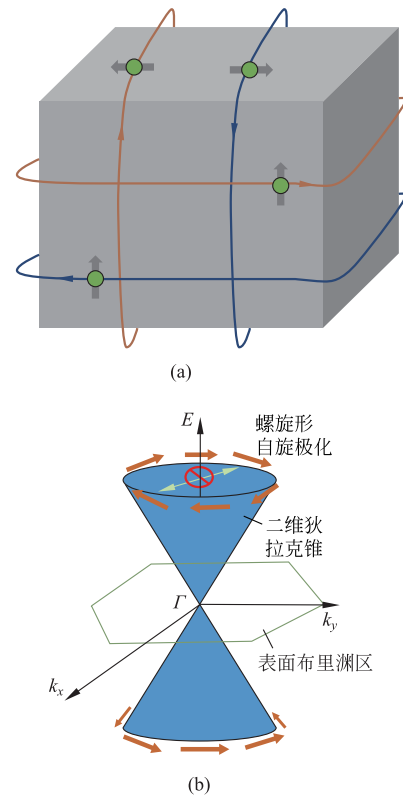


图 12 三维拓扑绝缘体的自旋非简并二维螺旋表面态 (a) 实空间示意图; (b) 表面态能量色散的狄拉克锥,其中自旋呈螺旋型极化,从 $\mathbf{k} \sim -\mathbf{k}$ 的背散射禁止

3 拓扑半金属

半金属的概念是从能带论角度观察的产物,如图 13 所示:

- 金属态,导带与价带完全相连,无带隙;
- 绝缘态,导带与价带之间带隙较大;
- 半导体,导带与价带带隙较小;
- 半金属,处于导体和半导体之间。虽无带隙,但是导带与价带的连接不如金属态紧密,只在一些特定位置接触。

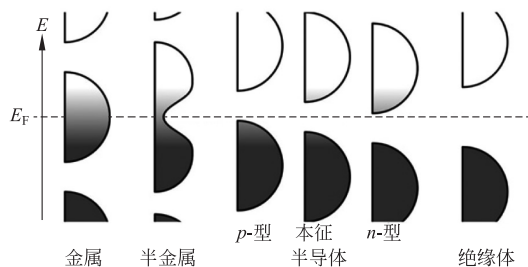


图 13 不同材料中的电子态密度分布:纵轴是能量,横轴是材料态密度。热平衡下,在金属和半金属中费米能级 E_F 位于某能带中;在绝缘体和半导体中,费米能级处于带隙中。(引自维基百科:<https://en.wikipedia.org/wiki/Semimetal>)

根据导带与价带接触位置的形态,半金属可分为两大类:

- 点接触,称为点半金属:包括狄拉克半金属和外尔(Weyl)半金属;
- 线接触,称为节线半金属:接触线有节线、节环(Nodal Ring)、节结(Nodal Knot)等不同名称。

半金属的能带交叉简并点位于费米面上,其电子结构可以导致非平庸的拓扑学行为。以下的讨论详见^[28]。

3.1 三种费米子:狄拉克,外尔和马约拉纳

在粒子物理标准模型中,因受洛伦兹(Lorentz)协变性限制,只存在三种类型的费米子:

- 狄拉克费米子:质量非零,电荷非零;
- 外尔费米子:质量为零,电荷非零;
- 马约拉纳费米子:质量非零,电荷为零,且正粒子同时也是自己的反粒子。

自由空间中是否存在外尔和马约拉纳费米子,在粒子物理领域至今尚无实验确证;但在凝聚态物理学特别是拓扑新材料领域,由于可以产生等效的狄拉克方程、外尔方程和马约拉纳方程,就可为研究这三类费米子提供恰当的舞台。

特别指出,上述三种费米子究其根源都是狄拉克方程的解,之所以不同乃是源于 γ -矩阵(数学上讲是克利福德代数 $Cl_4(\mathbb{C})$ 的元素)取了不同的矩阵表示^①。

下面先按量子电动力学(QED)惯例给出这三个方程及其所对应的费米子,然后转到凝聚态物理学领域研究其具体实现。

1) 狄拉克费米子

将狭义相对论的质能方程直接翻译到量子力学,是克莱因-戈尔登(Klein-Gordon)方程, $\square\varphi - \chi^2\varphi = 0$, 其中达朗贝尔(D'Alembert)算符 $\square =$

$$\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\partial_t^2, \nabla^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2, \chi = \frac{m_0c}{\hbar}.$$

此方程的缺点是:首先,波函数 φ 是标量,无法描述电子自旋、负能量电子(“狄拉克海”)现象;其次,这是一个二阶方程,是非线性的,严重破坏基于线性操作的量子力学的态叠加原理(superposition principle)^[29],这和非相对论的薛定谔方程情形非常不同。为此,狄拉克“形式化地求 $(\square - \chi^2)$ 算子的平方根”得到方程 $i\hbar\partial_t\Psi = (-i\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + mc^2\beta)\Psi$ 。其中 $\boldsymbol{\alpha}$ 、 β 是李代数元素,满足 $\beta^2 = I$ 和下面即将给出的克利福德代数要求。方程两边同时左乘 β

$$\text{有 } (-i\beta\boldsymbol{\alpha}^i\partial_i + \beta\partial_4 + m\frac{c}{\hbar})\Psi = 0, \text{ 其中 } x^4 = ict.$$

引进 $\gamma^4 = \beta$ 和 $\gamma^i = -i\beta\alpha^i, i=1,2,3$, 并取自然单位制 $\hbar=c=1$, 就得到狄拉克方程

$$(\gamma^\mu\partial_\mu + m)\Psi = 0, \quad \mu=1,2,3,4 \quad (62)$$

其中 γ -矩阵满足克利福德代数的要求

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2\delta^{\mu\nu}I, \quad \mu, \nu=1,2,3,4 \quad (63)$$

对 γ -矩阵取不同表示将导致不同的费米子解。取狄拉克表示将导致狄拉克费米子

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

$$\gamma^4 = \beta, \gamma^i = -i\beta\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^i \\ i\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad i=1,2,3 \quad (64)$$

波函数 Ψ 是四分量旋量,分别代表狄拉克费米子的 4 重态:正粒子自旋上,正粒子自旋下,反粒子自旋上,反粒子自旋下。正粒子和反粒子处于叠加态,不容易分开。

2) 外尔费米子

对 γ -矩阵取外尔表示(手征表示)

$$\gamma^4 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \bar{\sigma}^i & 0 \end{pmatrix},$$

$$i=1,2,3; \bar{\sigma}^i = -\sigma^i \quad (65)$$

则狄拉克方程成为 $(\gamma^\mu\partial_\mu + m)\Psi = \begin{pmatrix} m & \partial_4 + \sigma^i\partial_i \\ \partial_4 + \bar{\sigma}^i\partial_i & m \end{pmatrix}\Psi = 0$ 。外尔指出,若考虑

① 这里需要解释:物理规律反映现实世界,用不同数学工具的表达之下呈现不同的样貌。用分析工具处理,就是微分方程;用代数工具,就是某种代数关系(比如某种对易关系)。在代数语境下求某种代数的表示,就相当于在分析的语境下求解微分方程。这就不难理解,对 γ -矩阵取不同的表示,意味着讨论不同类型解的性质。

$m=0$ 即无质量费米子情况,方程中的矩阵就变成完全非对角(即对角元为零),有

$$\begin{pmatrix} 0 & \partial_4 + \sigma^i \partial_i \\ \partial_4 + \sigma^i \partial_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} (\partial_4 + \sigma^i \partial_i) \Psi_- \\ (\partial_4 + \sigma^i \partial_i) \Psi_+ \end{bmatrix} = 0, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} \quad (66)$$

$\Psi_{\pm}$ 是两分量的泡利旋量。从而原来的 4 维解分成了两个 2 维子空间^①,即外尔方程

$$\text{右手: } \sigma^\mu \partial_\mu \Psi_- = 0; \text{左手: } \sigma^\mu \partial_\mu \Psi_+ = 0, \sigma^\mu = (-\sigma^i, I) \quad (67)$$

其中, $\Psi_{\pm}$ 称为外尔费米子,描述静质量为 0、自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子; Ψ_+ 对应左手征, Ψ_- 对应右手征。

$$\Psi_{\pm} = \begin{pmatrix} \psi_{\pm, \uparrow} \\ \psi_{\pm, \downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_{\pm, 1} + i\phi_{\pm, 2} \\ \phi_{\pm, 3} + i\phi_{\pm, 4} \end{pmatrix}, \quad \psi_{\pm, \uparrow}, \psi_{\pm, \downarrow} \in \mathbb{C}; \phi_{\pm, l} \in \mathbb{R}, \quad l=1, \dots, 4 \quad (68)$$

其中, $\psi_{\pm, \uparrow}$ 和 $\psi_{\pm, \downarrow}$ 是复标量, $\uparrow \downarrow$ 分别代表每种手征粒子的自旋上、下态。

3) 马约拉纳费米子

对 γ -矩阵取马约拉纳表示

$$\gamma^1 = \begin{pmatrix} i\sigma^3 & 0 \\ 0 & i\sigma^3 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} -i\sigma^1 & 0 \\ 0 & -i\sigma^1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^4 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (69)$$

则有

$$\begin{pmatrix} i\sigma^3 \partial_1 - i\sigma^1 \partial_3 & -\sigma^2 \partial_2 + \sigma^2 \partial_4 \\ \sigma^2 \partial_2 + \sigma^2 \partial_4 & i\sigma^3 \partial_1 - i\sigma^1 \partial_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = 0 \quad (70)$$

显然这个方程的解有一个新奇的性质, $\Psi_+ = \Psi_-$, 也即是说对这类费米子来说,“正粒子的反粒子就是其自身”。这类费米子称为马约拉纳费米子。

由于正、反粒子相同,所以它只有常规狄拉克费米子(如电子)的一半自由度;从而在适当的场合,一个电子可能被劈裂为两个马约拉纳费米子。

3.2 在凝聚态物理领域找寻外尔、马约拉纳费米子;外尔半金属

多年以来粒子物理实验一直未能观测到外尔费米子,因此人们期待其他领域能够提供新的思路 and 观测途径。1984 年贝利(Berry)指出^[30],晶格动量空间中的能级交叉点是由贝利曲率定义的规范场的磁单极子。其磁荷就是通过包裹该能级交叉点的费米面的磁通量子数,而在交叉点附近电子的低能激发就是外尔费米子,不同磁荷对应

着不同的手征性。进一步,如果找到一类特别的金属,其低能电子激发行为可用两分量狄拉克方程即外尔方程来描述,则这样的材料就可称为外尔半金属。它虽然没有能隙,但仍然具有拓扑非平庸行为,同时线性色散关系具有相对论性电子体系的特征。外尔半金属中的低能激发是外尔费米子,有两个重要性质:手征反常和负磁致电阻。

零质量狄拉克费米子可当成一对手征相反的外尔费米子的叠加,狄拉克情形可以破缺(塌缩)到外尔情形,如图 14 所示。外尔半金属的能带结构中存在导带与价带的交点,称为外尔节点(node)或外尔点,是由能级的偶然简并所形成。与二维的碳单层有所不同,在三维空间中,外尔点属于一种非常稳定的拓扑结构,不会因为受到微扰而打开能隙。外尔点一般位于费米面上,费米面缩小为费米点,能隙为零,具有线性色散关系。但其表面能带结构的费米面不闭合,是开放的一段弧线,称为费米弧(arc),相当于连接两个手征相反的外尔点在表面的投影如图 14(b)。其中选择 K_0 为截面是为了制造边界,费米弧只存在于边界上。

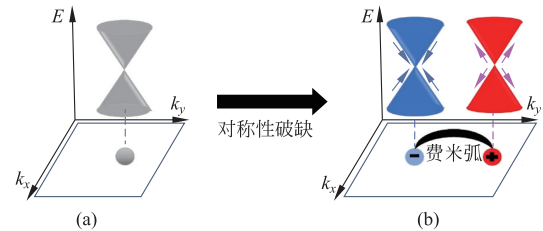


图 14 狄拉克半金属与外尔半金属的能带结构示意图 (a) 狄拉克半金属; (b) 对称性破缺,变为磁性或非磁性外尔半金属

理论计算表明,烧绿石结构的铌氧化物如 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 和铁磁尖晶石 HgCr_2Se_4 可能是磁性外尔半金属^[31,32];时间反演对称性破缺,空间反射对称性保持,从而手征相反的外尔费米子不再重叠。理论上,二者均可用三维空间中的两带模型描述,其哈密顿量为^[33]

$$H = - \sum_k [2t_x (\cos k_x - \cos k_0) + m(2 - \cos k_y - \cos k_z)] \sigma_x + 2t_y \sin k_y \sigma_y + 2t_z \sin k_z \sigma_z \quad (71)$$

① 一般物理上取时空为赝欧的闵可夫斯基(Minkowski)空间,那么狄拉克方程的符号差(signature)是 $(1, 1, 1, -1)$, 群对称性是 $SO(3, 1)$ 。为看清本质,可进一步简化问题,考虑 $SO(4)$ 。从群论角度看 $SO(4)$ 有直和分解 $SO(4) = SU(2)_+ \oplus SU(2)_-$, 其中 $SU(2)_{\pm}$ 是两个 $SU(2)$ 子空间。这一事实和外尔的分解思想相容。

其中, σ 按照角动量变换, 因此哈密顿量对空间反射不变, 但保持时间反演对称性。 $\mathbf{k} = \pm k_0 \hat{x}$ 是能隙关闭的节点, 来源于拓扑性。当 $E=0$ (即能隙为 0) 时, 由两带模型

$$H = \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma} = h_x \sigma_x + h_y \sigma_y + h_z \sigma_z \quad (72)$$

可知三维拓扑奇点发生在 $|\mathbf{h}| = \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2} = 0$ 处, 即 $h_x = h_y = h_z = 0$ 。可解出

$$k_x = \pm k_0, \quad k_y = k_z = 0 \quad (73)$$

此即上文所提到的成对的外尔节点, 如图 15 所示。外尔点具有较强的稳定性, 可以受扰而移动, 但无法通过引入质量项或微扰打开能隙。当两个外尔点相遇时, 将形成一个需要晶体对称性保护的狄拉克点。可以说, 当一个左手和一个右手外尔点在动量空间重合时, 就会“还原”为一个三维狄拉克点, 所组成的材料即狄拉克半金属。

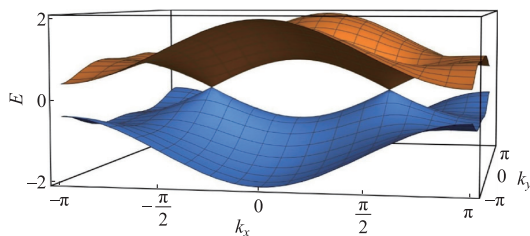


图 15 模型(71)在体态具有一对外尔节点。参数为:

$$t_x = t_y = t_z = 1, m = 1.5, k_0 = \frac{\pi}{2}$$

将式(71)在外尔点附近展开, 可以得到

$$H_{\pm} = v_x p_{\pm, x} \sigma_x + v_y p_{\pm, y} \sigma_y + v_z p_{\pm, z} \sigma_z \quad (74)$$

其中 $v_x = 2 t_x \sin k_0$, $v_{y,z} = -2 t_{y,z}$, $p_{\pm} = (\pm k_x \mp k_0, k_y, k_z)$, 以及 $|\mathbf{p}_{\pm}| \ll k_0$ 。相应的色散关系为

$$E^2 = v_x^2 p_{\pm, x}^2 + v_y^2 p_{\pm, y}^2 + v_z^2 p_{\pm, z}^2 \quad (75)$$

上述结果完全等效于粒子物理中的外尔方程

$$H_w^{\pm} = \pm c \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (76)$$

描写无质量但有手征性的费米子。粒子速度 $\mathbf{v} = \pm c \boldsymbol{\sigma}$ 与自旋同向或反向。在三维晶格模型中, 外尔点总是按照左手或者右手成对出现, 分别对应于哈密顿量中的 $\pm$ 号。

一般地, 在外尔点附近哈密顿量可以写成粒子物理中外尔费米子的更一般形式

$$H_w = \sum_{ij} \hbar k_i v_{ij} \sigma_j \quad (77)$$

其中, v_{ij} 是带有速度量纲的 3×3 矩阵, k_i 是相对于外尔点的动量, σ_i 是泡利矩阵。外尔点由手征量子数 $\chi = \text{sgn}[\det(v_{ij})]$ 表征。其物理意义是在 Bloch 能带中电子所感受到的等效的矢量势(贝利

联络) $\mathbf{A}(\mathbf{k}) = i \langle u(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | u(\mathbf{k}) \rangle$, 相应的场强(Berry 曲率)为 $\mathbf{B}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}(\mathbf{k})$ 。可以证明手征指数与场强之间的关系为

$$\chi = \frac{1}{2\pi} \oint_{\text{FS}} \mathbf{B}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{S}(\mathbf{k}) \quad (78)$$

该积分区域是包围外尔点的任何费米面, 面元 $d\mathbf{S}(\mathbf{k})$ 的指向定义为离开占据态的方向, $\mathbf{B}(\mathbf{k})$ 相当于动量空间中的磁场。上式显示: 一个外尔点的行为就像动量空间中的磁单极, 其磁荷就等于它的手征量。

3.3 节线(Nodal line)半金属

节线半金属在 2011 年由首次提出^[34], 特点是在三维动量空间中, 价带和导带接触的部分不是孤立的零维点, 而是连续的一维曲线, 如图 16(a) 所示。其存在受对称性保护; 相应地, 存在受拓扑保护的、平坦的二维“鼓面”状表面态, 后者具有异常大的表面态密度。由于对称性破缺, 节线处的能隙会完全打开, 或变成独立的能带简并点。节线在布里渊区内可以形成多种拓扑结构, 如简单的独立闭环, 多个环相互交叠、嵌套形成的链环等, 如图 16(b) 所示。

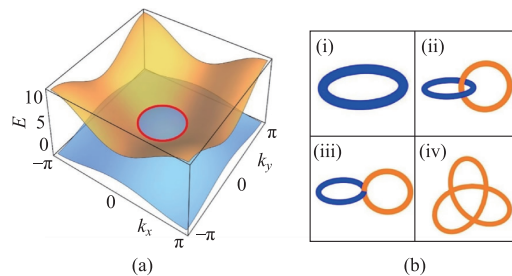


图 16 节线半金属能带结构示意图

(a) 节线半金属中, 相邻两个能带的闭合部分是连续的一维曲线; (b) 节线在布里渊区形成复杂的拓扑结构: (i) 圆环; (ii) 霍普夫链环; (iii) 点接触的两个圆环; (iv) 三叶结

2017 年, 中科院物理所-北理工-日本东京大学联合课题组利用高分辨 ARPES 测量结合理论计算, 发现单层 Cu_2Si 薄膜中存在节线半金属费米子^[35]。该结果不仅将节线半金属的概念由三维拓展至二维, 同时为实现纳米尺度的新型拓扑量子器件提供了一种新的可能途径。此外, 已有论文预言 Cu_2Ge 、 Fe_2Ge 和 Fe_2Sn 二维体系能够稳定存在^[36]。 Cu_2Ge 基态下展现无磁的特性, 在镜面对称性的保护下出现节线; 但自旋轨道耦合作用会导致其打开能隙, 节线消失。铁原子能够赋予体系铁磁性, 破缺时间反演对称性; 即使存在自旋轨道耦合作用, Fe_2Sn 体系中节线也能稳定

存在,并受镜面对称性的保护。因此 Fe_2Ge 和 Fe_2Sn 单层拓扑结构有望成为未来自旋电子学器件的候选者。

以下给出一些理论方面的讨论。节线由相邻的两个能带接触形成,故可在两带模型式(1)的框架下研究^[37]。为简单起见取 $\epsilon=0$,同时 PT 对称性要求 $h_2=0$,因此能量本征值为 $E_{\pm}=\sqrt{h_1^2+h_3^2}$ 。此时节线由方程 $E=0$ 即 $h_1=h_3=0$ 给出。考虑哈密顿量^[37]

$$H = \left[2\sin k_x \sin k_z + \sin k_y \left(\sum_{i=x,y,z} \cos k_i - m_0 \right) \right] \sigma_x + \left[\sin^2 k_x + \sin^2 k_y - \sin^2 k_z - \left(\sum_{i=x,y,z} \cos k_i - m_0 \right)^2 \right] \sigma_z \quad (79)$$

该模型中的节线为两个圆环,分别满足

$$k_y = k_z, \quad \sin k_x = m_0 - \sum_{i=x,y,z} \cos k_i \quad (80)$$

$$k_y = -k_z, \quad \sin k_x = \sum_{i=x,y,z} \cos k_i - m_0 \quad (81)$$

二者的相对位置随 m_0 的改变发生变化,如图 17 所示。当 $m_0=2.5$ 时该模型具有的平坦二维“鼓面”状表面态^[37]。

4 结语

本专题的目的是为学有余力的本科生和低年级研究生搭建一座桥梁,连接起大学物理和当前低维拓扑新材料研究的前沿,帮助其进入量子霍尔效应这个凝聚态物理的热点方向。我们鼓励学生灵活运用学过的电动力学、量子力学、固体物理知识,拓宽视野,探索课堂以外的新领域。

本文是专题的第二篇。第一部分从石墨烯晶格结构中导出了(2+1)维狄拉克方程,相当于建立起一种低速“量子电动力学”。真实粒子物理中不易观测到的现象(如势垒穿透、抖动效应等)在

该体系下的观测难度就会大大降低。在石墨烯晶格中加入周期性磁通,时间反演对称性发生破缺,即可实现量子反常霍尔效应。此外,石墨烯具有良好的热学、光学、力学性质,有望成为新的量子材料研究领域。理论基础方面,在蜂窝状六角晶格中推导出第一篇中给出的两带模型,这提供了该模型的第一个范例。

第二部分在方晶格中导出了两带模型,给出第二个范例。过程中展示了内部具有能隙、但拓扑非平庸的能带结构所导致的无能隙边缘态,从而帮助读者加深对量子反常霍尔效应的理解。其中自旋轨道耦合的写法、紧束缚模型的处理、傅里叶变换、边缘态的计算等都值得关注。这部分最后一节简述了三维拓扑绝缘体。

第三部分介绍了拓扑半金属。首先是分类:狄拉克半金属、外尔半金属、节线半金属。其中狄拉克半金属可通过破缺对称性得到外尔半金属。与拓扑绝缘体不同,半金属在布里渊区内无能隙,能带接触点位于费米面上,使费米面缩小为孤立的费米点。表面态为一段开放的费米弧。如果价带和导带的接触部分是一维的曲线,则形成节线半金属,其表面具有二维平坦的“鼓膜”状表面态。

在本篇的行文中我们把重点放在了公式体系的搭建上(而非文字叙述),力求按部就班,助力学生夯实理论基础。希望本文能够帮助感兴趣的同学进入这一凝聚态物理的热点领域。

参 考 文 献

- [1] WALLANCE P R. The Band Theory of Graphite[J]. Physical Review, 1947, 71: 622-634.
- [2] NOVOSELOVA K S, GEIMS A K, MOROZOV S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. Science, 2004, 306: 666-669.
- [3] CASTRO N A H, GUINEA F, PERES N M R, et al. The electronic properties of graphene[J]. Review of Modern

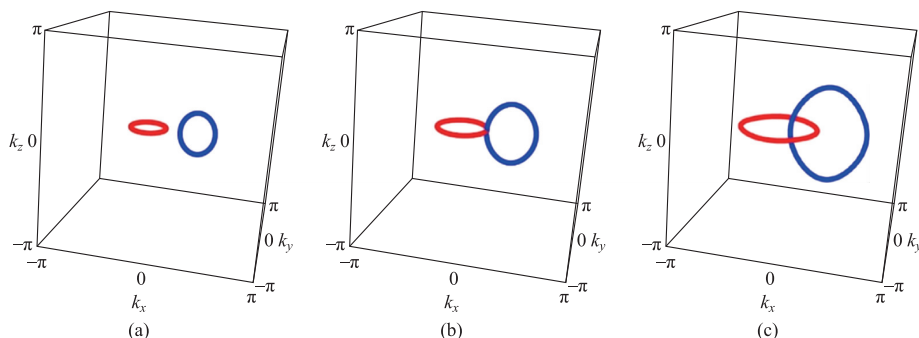


图 17 模型式(79)中的节线为两个圆环,二者的相对位置随 m_0 的改变发生变化
(a) $m_0=3.2$, 互相分离; (b) 临界点 $m_0=3.0$, 点接触; (c) $m_0=2.5$, 互相嵌套, 形成霍普夫(Hopf)链环

- Physics, 2009, 81: 109-162.
- [4] 徐小志, 余佳晨, 张智宏, 等. 石墨烯打开带隙研究进展[J]. 科学通报, 2017, 62: 2220-2232.
XU X Z, YU J C, ZHANG Z H, et al. Bandgap opening in graphene[J]. Chinese Science Bulletin, 2017, 62: 2220-2232. (in Chinese)
- [5] LIU X, ZHANG R. Topological vortices in chiral gauge theory of graphene[J]. Annals of Physics, 2010, 325: 384-391.
- [6] HALDANE F D M. Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed matter realization of the "parity anomaly"[J]. Physical Review Letters, 1988, 61: 2015-2018.
- [7] BERNEVIG B A, HUGES T L. Topological insulators and topological superconductors. Princeton University Press, 2013.
- [8] YAKOVENKO V M. Chern-Simons terms and n field in Haldane's model for the quantum Hall effect without Landau levels[J]. Physical Review Letters, 1990, 65: 251-254.
- [9] DU Y, ZHANG J, LI Z, et al. Quasi-freestanding epitaxial silicene on Ag (111) by oxygen intercalation[J]. Science Advances, 2016, 2: 1600067.
- [10] LI Z, CHEN L, WANG L, et al. Realization of flat band with possible nontrivial topology in electronic Kagome lattice[J]. Science Advances, 2018, 4: 4511.
- [11] KANE C L, MELE E J. Z_2 topological order and the quantum spin Hall effect[J]. Physical Review Letters, 2005, 95: 146802.
- [12] KANE C L, MELE E J. Quantum spin Hall effect in graphene[J]. Physical Review Letters, 2005, 95: 226801.
- [13] BERNEVIG B A, HIGES T A, ZHANG S C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells[J]. Science, 2006, 314: 1757-1761.
- [14] CHANG C Z, ZHANG J, FENG X, et al. Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator[J]. Science, 2013, 340: 167-170.
- [15] QI X L, HUGES T L, ZHANG S C. Topological field theory of time-reversal invariant insulators[J]. Physical Review B, 2008, 78: 195424.
- [16] 常治文, 刘鑫. 拓扑绝缘体中两带模型的规范理论[J]. 物理与工程, 2020, 30: 64-71.
CHANG Z W, LIU X. A gauge theory in two-band model of topological insulator[J]. Physics and Engineering, 2020, 30: 64-71. (in Chinese)
- [17] CHANG Z W, HAO W C, LIU X. A gauge theory for two-band model of Chern insulators and induced topological defects[J]. Communications in Theoretical Physics, 2022, 74, 015701.
- [18] CHANF C Z, ZHAO W, KIM D Y, et al. Zero-field dissipationless chiral edge transport and the nature of dissipation in the quantum anomalous Hall state[J]. Physical Review Letters, 2015, 115: 057206.
- [19] ZHAO Y-F, ZHANG R, MEI R, et al. Tuning the Chern number in quantum anomalous Hall insulators[J]. Nature, 2020, 588: 419-423.
- [20] GE J, LIU Y, LI J, et al. High-Chern-number and high-temperature quantum Hall effect without Landau levels[J]. National Science Review, 2020, 7: 1280-1287.
- [21] FU L, KANE C L, MELE E J. Topological insulators in three dimensions[J]. Physical Review Letters, 2007, 98: 106803.
- [22] MOORE J E, BALENTS L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures[J]. Physical Review B, 2007, 75: 121306(R).
- [23] ROY R. Topological phases and quantum spin Hall effect in three dimensions[J]. Physical Review B, 2009, 79: 195322.
- [24] HEIEH D, QIAN D, WRAY L, et al. A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase[J]. Nature, 2008, 452: 970-974.
- [25] HASAN M Z, LIN H, BANSIL A. Spin-textures, Berry's phase and quasiparticle interference in Bi_2Te_3 : A topological insulator with warped surface states[J]. Physics, 2009, 2: 108.
- [26] XIA Y, QIAN D, HSIEH D, et al. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface[J]. Nature Physics, 2009, 2: 398-402.
- [27] ZHANG H, LIU C X, QI X L, et al. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface[J]. Nature Physics, 2009, 5: 438-442.
- [28] 金国钧. 凝聚体中的拓扑量子态[J]. 物理学进展, 2019, 39: 187-241.
JIN G J. Topological quantum states in condensed matter[J]. Progress in Physics, 2019, 39: 187-241. (in Chinese)
- [29] 段一士. 量子场论[M]. 北京: 高等教育出版社, 2015.
- [30] BERRY M V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes[J]. Proceedings of the Royal Society A, 1984, 392: 45-57.
- [31] WAN X, TURNER A M, VISHWANATH A, et al. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates[J]. Physical Review B, 2011, 83: 205101.
- [32] XU G, WENG H, WANG Z, et al. Chern semimetal and quantized anomalous Hall effect in HgCr_2Se_4 [J]. Physical Review Letters, 2011, 107: 186806.
- [33] YANG K Y, LU Y M, RAN Y. Quantum Hall effects in a Weyl semimetal; Possible application in pyrochlore iridates[J]. 2011, 84: 075129.
- [34] BURKOV A A, HOOK M D, BALENTS L. Topological nodal semimetals[J]. Physical Review B, 2011, 84: 235126.
- [35] FENG B, FUT, KASAMATSUL S. Experimental realization of two-dimensional Dirac nodal line fermions in monolayer Cu_2Si [J]. Nature Communications, 2017, 8: 1007.
- [36] LIU L L, QANG C Z, LI J X, et al. Two-dimensional topological semimetal states in monolayer Cu_2Ge , Fe_2Ge , and Fe_2Sn [J]. Physical Review B, 2020, 101: 165403.
- [37] YAN Z, BI R, SHEN H, et al. Nodal-link semimetals[J]. Physical Review B, 2017, 96: 041103(R).