

四川大學

本科生毕业论文(设计)



题 目 低维拓扑绝缘体概述

学 院 物理学院

专 业 物理学类

学生姓名 叶泽源

学 号 2016141221010 年级 2016

指导教师 贺言

教务处制表
二〇二〇年五月十九日

低维拓扑绝缘体概述

物理学院

学生: 叶泽源 指导教师: 贺言

[摘要] 反常霍尔效应, 量子霍尔效应和量子反常霍尔效应等一系列霍尔效应不断地给当代物理学家抛出一个个难题。在简单的朗道能级理论, 电子在晶格中特异性散射理论失败的情况下, 拓扑物理理论的出现并一举解决了这些问题。本文将会通过对低维模型的分析, 对这个新的凝聚态分支做一个介绍。紧束缚模型作为凝聚态的基础被放到前面部分。之后文章会在求解含时薛定谔方程的过程中引入一些拓扑不变量的概念。我们还用了理论推演和数值计算的方法来揭示其中一个拓扑量—chern number 背后丰富的物理, 包括: 整数的霍尔电导; 拓扑相变; edge mode 和霍尔电流等。最后还对拓扑绝缘体的一个前沿方向—高阶拓扑绝缘体做出简要介绍。

[主题词] 霍尔效应; 拓扑绝缘体; chern number; edge mode

Introduction to low dimensional Topological Insulator

College of Physics

Student: Zeyuan Ye

Adviser: Yan He

[Abstract] Anomalous Hall Effect, Quantum Hall Effect, Quantum Hall Effect along with other Hall Effects keep throwing problems to the nowadays physicists. Following the failure of Landau's theory and asymmetric scattering of electrons, topological physics successfully explained all of these Hall Effects theoretically. This paper aims at being an elementary introduction to the topological insulator. Tight binding model as one of the basic models in condensed matter physics is introduced at the beginning. Several important topological invariants can be derived from the solution of the time-dependent Schrodinger equation. In order to discover the rich physics under chern number, we implied theoretical and computational tools to some low dimensional systems. The underlying physics includes: integer Hall conductance; topological phase transition; edge mode and Hall current etc. Lastly, Quantized electric multipole insulators as one of the frontier fields is introduced.

[Key Words] Hall Effect; topological insulator; chern number; ; edge mode

目录

1	绪论	2
1.1	选题来源	2
1.2	意义和背景	2
1.3	国内外研究现状	2
1.4	结构安排	6
2	紧束缚模型	7
2.1	紧束缚模型的物理图像	7
2.2	一维简单紧束缚模型	8
2.3	原胞具有内部结构的情况	9
3	拓扑物理基本概念	11
3.1	含时薛定谔方程的求解	11
3.2	拓扑不变量	12
4	低维拓扑模型	14
4.1	霍尔电导的量子化	14
4.2	拓扑相变	15
4.3	Edge Mode	16
5	高阶拓扑绝缘体	19
6	总结与展望	21
7	致谢	23

1 绪论

1.1 选题来源

本论文选题是由指导老师推荐，和老师交流协商之后确定选题。

1.2 意义和背景

本文的目的是在理论上提供一个拓扑绝缘体的介绍。具体方法是从紧束缚模型出发，然后引入拓扑不变量并切实地对一些低维的拓扑模型做一些数值模拟，探索其有趣的物理性质。最后我们会对拓扑物理的一个前沿方向——高阶拓扑绝缘体做一些理论上的讨论和数值模拟。

拓扑物理是物理学中一个相对新颖的分支。有趣的是，它解决的最早问题可以追溯到 19 世纪。1879 年，霍尔把一块材料通上电流，并在和电流垂直的方向上加上一个均匀的磁场。霍尔随后发现在同时垂直于电流和磁场方向上，材料产生了电势差。这个电势差的物理来源可以用电磁学中的洛伦兹力来解释：电子在同时垂直速度和磁场方向上受到了一个力。在随后的一年，霍尔把上述材料换成了铁磁体，竟发现材料的霍尔电阻多了和正比磁化矢量成正比的一项。这一项要在百年后，即 1980 年代，利用能带的拓扑结构才得以解释。在这个年代附近的几十年里，拓扑理论还成功地解释了很多其他的霍尔现象—自旋霍尔效应，量子霍尔效应，量子反常霍尔效应（未确定）和量子自旋霍尔效应。对这些新奇物理现象的解释可以说是拓扑理论的胜利。不仅如此，拓扑理论还热衷于和其他物理分支结合，例如说冷原子模拟拓扑材料，超流体，超导体和量子计算。总之，拓扑理论是凝聚态中一个比较基础的理论，对整个凝聚态的发展以及对新材料的探索有重要的意义。而本文所要讨论和探索的低维拓扑模型又能很好地抓住拓扑物理的物理图像，从而提供一个较为清晰的介绍。

1.3 国内外研究现状

拓扑物理在历史上前中期的发展本质上就是对一系列霍尔效应的解释和预言的过程。1879 年霍尔给一块材料加上电流，在与电流垂直方向上加了磁场。这样当电子通过材料时会受到一个由磁场引起的洛伦兹力

$$\mathbf{F}_L = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (1.1)$$

其中 q 是电荷载体的电荷量， \mathbf{v} 是电子速度， \mathbf{B} 是磁感应强度。这个洛伦兹力的方向同时与电流方向和磁场方向垂直，就会导致电子被拉到材料的侧面从而形成堆积，进而在侧面

形成一个电势差（霍尔电压）。稳定时洛伦兹力和侧面所形成的电场力会达到平衡状态

$$q\mathbf{v} \times \mathbf{B} = q\mathbf{E} \quad (1.2)$$

从而可以得到霍尔电压

$$V_H = EW \quad (1.3)$$

其中 W 是材料的宽度。霍尔电阻被定义为

$$R_L B = \frac{V_H}{I} = \frac{B}{q\rho_e} \quad (1.4)$$

这里 ρ_e 是电荷载体密度。在随后的一年，霍尔把材料换成了铁磁性材料，发现霍尔电阻除了上面那个由洛伦兹力引起的一项外还有额外的，和磁化矢量成正比的一项

$$R_H = R_L B + R_A M \quad (1.5)$$

这多出来的一项需要一个世纪后用拓扑理论有关的知识才能解释。这个效应又被称作反常霍尔效应。

反常霍尔效应的其实是由于存在自旋有关的效应使电子侧向移动。总的来说，这个自旋有关的效应来源有两种：一种是外因——自旋依赖的无序带电载体碰撞；一种是内因——材料的特殊能带结构。这种特殊能带结构可以用一个拓扑概念：Berry phase 来描述。从经典图像来看，电子会受到一个自旋轨道力或者自旋横向力，从而往侧面移动。这种力的来源是自旋电流而非洛伦兹力所用到的电荷电流。自旋向上的电子会被移动到另外一侧，而向下的电子会被移动到另外一侧。在铁磁材料中，自旋向上和向下的电子数目不相等，从而造成材料侧面电荷堆积量不均，因此在霍尔电阻上会有额外的一项出现。

反常霍尔效应的出现依赖外部磁场，但是自旋霍尔效应却并不依赖。自旋霍尔效应首先由俄罗斯物理学家 Dyakonov 和 Perel 在 1971 年提出。和反常霍尔效应类似，他们认为自旋霍尔效应的来源是自旋方向不同的电子会在材料两个侧面有不均匀堆积。但是没了磁场，自旋方向不同的电子为什么会堆积成了一个问题。一开始物理学家认为这是由于材料不干净，在碰撞中会发生“特异性”的散射：不同自旋方向的电子会被散射到不同方向。但是在 2003 年，这个理论就被否决了。两个独立的课题组展示了具有自旋耦合的能带就能产生横向电流，从而解释自旋霍尔效应，而不需要用到碰撞。自旋霍尔效应同样可以用拓扑理论解释。

近代以来众多霍尔效应里最出名的当属整数阶量子霍尔效应。1980 年，von Klitzing, dorda 和 pepper 在实验上首次发现了这个效应。他们制成了一种特殊的半导体。这个半导体中间有一个分界线，分界线的两侧分别为不同的物理材料。在材料上加上一些电压的控制，在分界线附近就能够形成二维电子气体。他们往这个电子气体加上强磁场，发现系统

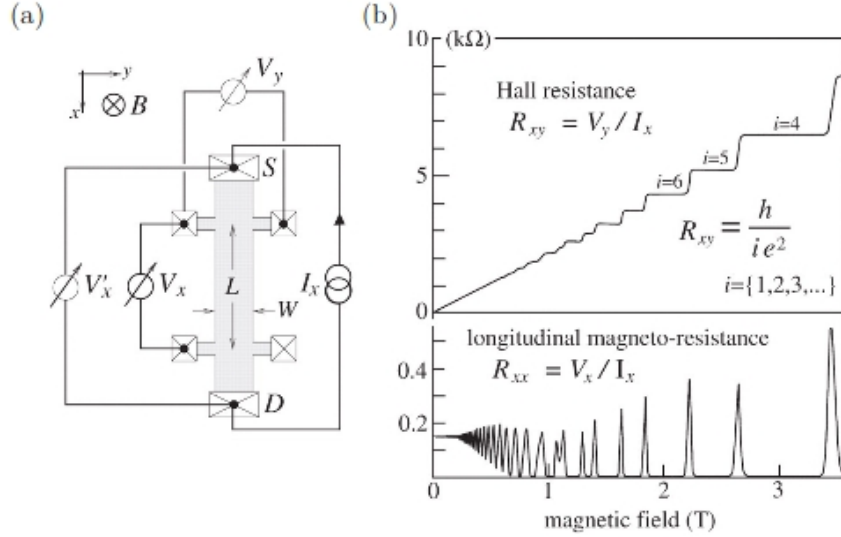


图 1.1: (a) 实验装置草图。磁场 B 垂直纸面向里，电流通过体系的 y 方向。有装置测量 y 和 x 方向的电压。(b) 霍尔电阻和径向 (y 方向) 电阻随磁场变化图像。[?]

会产生一个霍尔电导（霍尔电阻的倒数）。这个电导随着磁场的加强会出现平台效应：在某一段磁场变化范围内电导不发生变化（图1.1）。霍尔电导的公式为

$$\sigma_H = \nu e^2 / h \quad (1.6)$$

其中 μ 是非零自然数， h 是普朗克常数。整数阶霍尔效应可以通过朗道能级来解释。朗道能级是自由电子在磁场中产生的能级，它的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m} [(\hat{p}_x - eB_y)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2] \quad (1.7)$$

\hat{p} 是粒子的动量方向， m 是粒子质量。由此可以通过解薛定谔方程来得到朗道能级。

$$E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.8)$$

其中回旋频率

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \quad (1.9)$$

而 k_z 的取值范围为

$$k_z = \frac{2\pi}{L} n_z, n_z \text{ is an integer} \quad (1.10)$$

L 是材料长度。当磁场增大时，系统的能级会进行放缩。而费米能级不变。这样结果就是费米能级在磁场增大时间断性地扫过朗道能级和能级间隙。当费米能级处于能级间隙时，电子填充状态不变，则为平台。费米能级扫过某个朗道能级时，电子填充或者逃开能级，这就产生了电导率的变化。现在物理学家已经认识到式 (1.6) 里的 ν 整数实际上是一个拓

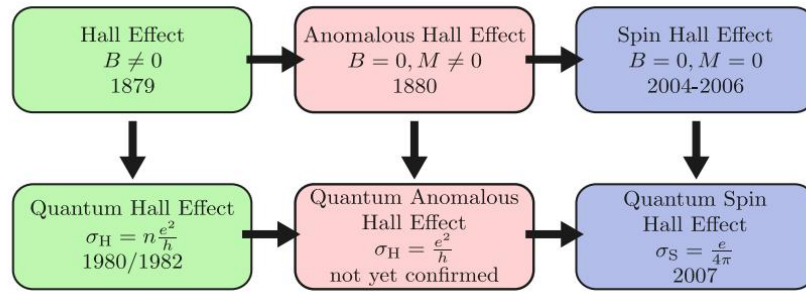


图 1.2: 霍尔效应和量子霍尔效应的发展以及他们的相互关系。 B 表示外加的磁场， M 是铁磁体的磁化强度。最下面一行的年代表示这个效应被发现的年份。 H 是霍尔电导， σ_S 是自旋霍尔电导。[]

扑不变量。这个不变量对具体材料的几何结构不敏感。

这里还有一个更为直观的解释。电子在均匀磁场中会受到洛伦兹力而做圆周运动。圆周的半径约为 $R_n = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}(2n+1)$ 。一部分电子处于边界处，会在完成整个圆周运动之前撞到边界，被反弹回来。这就导致了电子沿着边界会有移动。这种运动状态又被称作是边界态。其实这种边界态是受到拓扑对称保护的，即使对材料进行掺杂，例如说在边界处加一些“阻碍”，也不会对边界态产生影响。

1982 年，Tsui, Stormer 和 Gossard 对量子霍尔效应的研究更进了一步。他们发现了分数阶的量子霍尔效应。在这种效应里，霍尔电导的系数 ν 不是整数，而是分数。分数量子霍尔效应的原理比较复杂。电子和电子间的相互作用在这个效应里是主要因素。Laughlin 提出了一个和 $\nu = 1/3$ 有关的新颖多体凝聚态。这种凝聚态由于库伦作用，可以被等价于具有电荷为 $e/3$ 的一种伪粒子。因此，分数阶的量子霍尔效应可以被解释为一种伪粒子的整数霍尔效应。在 1988 年，Jainendra K. Jain 进一步发展了这个观点，提出这种新颖凝聚态是电子和量子化的磁通量结合的结果，又被称作 **composite fermions**。现在我们知道分数阶的量子霍尔效应其实是 **composite fermions** 的一种拓扑相。这种相破坏了材料的时间反演对称。

整数阶量子效应的出现并不一定需要一个方向上的强磁场。1988 年 Haldane 认为给材料施加周期性的磁通量，即使没有切实的磁场，也会出现整数量子霍尔效应。就像人们把无磁场情况下的霍尔效应命名为反常霍尔效应，我们也把这种无磁场情况叫做反量子霍尔效应。反量子霍尔效应发生的机理是材料特殊的能带结构，而不是简单的朗道能级在磁场中的变化。后来，物理学家又发现甚至周期性的磁通量也是不必要的，只需要铁磁性材料中的强自旋-轨道耦合即可。反量子霍尔效应的电导可以用 **Berry curvature** 在动量空间的积分或者 **Chern 数** 来表示。一个非 0 的 Chern 数表示非平凡的拓扑材料。而 Haldane 模型首次实现了零磁场下的非零 **chern 数**。在反量子霍尔效应之后还有量子自旋霍尔效应，最后演化出来现今的一块物理研究的前沿——拓扑绝缘体。这些霍尔效应们的关系可以被总结为图 1.2

1.4 结构安排

论文的目的在于对低维拓扑材料理论做一个比较基础的介绍。因此文章会开始会在现今本科生所学的固体物理之上介绍紧束缚模型，然后再引入一些和拓扑有关的概念，进而求解一些简单的低维拓扑模型，最后介绍一个比较前沿的研究——高阶拓扑绝缘体。具体来说文章可以被分为以下几部分：

第一部分：介绍紧束缚模型，包括如何从图像上的晶格相互作用得到其哈密顿量，进而得到能带。这个求解技术会在后面对拓扑模型的求解中用到。

第二部分：介绍拓扑物理的一些基本概念。Berry phase 的概念可以从含时薛定谔方程出发得到。之后还会得到从 Berry phase 引入的其他物理量，包括 Berry connection, Berry curvature, chern number 等。

第三部分：这部分会解析或者数值求解一些低维的模型从而揭示 chern number 背后的物理。

第四部分：这部分我们会介绍高阶拓扑绝缘体。包括介绍具体的模型和数值模拟一些它的性质。

第五部分：对文章的工作作出总结和展望。

2 紧束缚模型

2.1 紧束缚模型的物理图像

我们从简单的一维模型开始。图 (2.1) 是一个简单的一维晶体，格点都是等间距排列。每一个格点可以表示材料中的一个原子。那么电子在这个体系里会处于什么状态呢？首先由于原子实的作用，电子会很喜欢待在一个格点上。但是量子力学的基本原理表明电子会有一定的概率跳到周边的格点上。这个跳跃的概率应该还是比较小的。因为电子是费米子，如果旁边格点已经占据两个电子，则该格点的电子由于泡利原理的限制肯定无法进行跳跃。即使旁边格点仅有一个电子，电子和电子间的库伦排斥是相当强的，因此跳跃的概率也比较低。这样的话电子的波函数就可以被简单地写为该格点的原子波函数。

下面我们直观地考虑紧束缚模型是如何得到能带的。如果这个材料只有一个格点，那么它就只有一个能级 E 。现在假设有两个间距很大的格点，则该系统的两个本征态——电子处于格点 1 ($|\phi_1\rangle$) 和电子处于格点 2 ($|\phi_2\rangle$)，应该是简并的。这种情况下系统还是只有一个能级 E 。假设这个间距被拉进，能级则会产生一些分裂 $E = E_{-1} + E_1$ 。一个比较直观的猜想就是这个分裂来源于两个波函数 $|\phi_1\rangle$ 和 $|\phi_2\rangle$ 的交叠。如果以 $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ 为基底的话，哈密顿量可以写成一个 2×2 的矩阵。当两个格点距离非常远（波函数无交叠），哈密顿量是对角的

$$H = \begin{bmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

而当距离较小时（波函数存在交叠），哈密顿量可以写为

$$H = \begin{bmatrix} E & -t \\ -t & E \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

其中 t 和波函数交叠有关，是导致能级分裂的非对角项。 t 可以表达为

$$t = \hbar\omega \int dx |\phi_1^*(x)\phi_2(x)|^2 \quad (2.3)$$

这里的 \hbar 是普朗克常数， ω 是圆频率。因此 $\hbar\omega$ 实质上赋予了交叠概率一个能量的量纲，使其能自然地成为哈密顿量的一部分。这个 H 对角化后的两个对角项分别为 $E - t$ 和 $E + t$ ，正是能级的分裂。

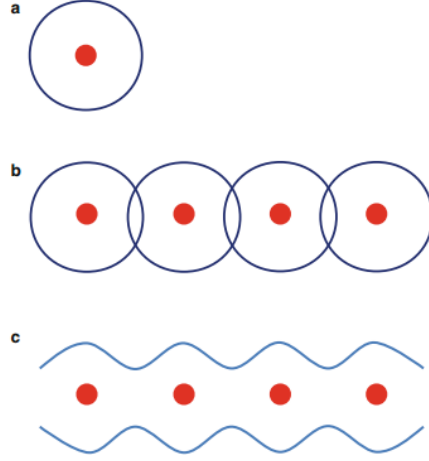


图 2.1: 紧束缚模型原理。(a) 假如只有一个原子则电子的波函数可以直接用单原子波函数表示。(b) 但是在晶体中各个电子的单原子波函数会有一定的重叠。(c) 这个重叠应该是比较小的, 所以实际体系波函数可以用单原子波函数展开。

2.2 一维简单紧束缚模型

具有周期性边界条件的一维模型 (图2.1) 的哈密顿量的非对角元可以被单独拆开来用产生湮灭算符来表示:

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (2.4)$$

其中 i 和 j 为 0 到 $N - 1$ 的任一整数。其中 N 为模型的格点书。注意 \hat{H} 是厄米算子, 因此要求 $t_{ij} = t_{ji}^*$ 。以开边界且仅有最近邻相互作用的 4 格点长链为例, t_{ij} 可以写为

$$t_{ij} = \begin{cases} -t, & |i - j| = 1, \\ 0, & \text{else.} \end{cases} \quad (2.5)$$

则 H 可以写为矩阵形式

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -t & 0 & 0 \\ -t & 0 & -t & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t \\ 0 & 0 & -t & 0 \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

式子 (2.4) 可以通过对称性做一些简化。引入新变量 n

$$n = j - i \quad (2.7)$$

代入 (2.4) 可得

$$H = \sum_n \sum_i t_{i+n,i} c_{i+n}^\dagger c_i \quad (2.8)$$

t_{ij} 应该还具有平移对称性, 即 $t_{i+n,i}$ 不依赖于特定位置 i 的变量。因此 H 可以写为

$$H = \sum_{n < N-i} t_n \sum_i c_{i+n}^\dagger c_i + h.c. \quad (2.9)$$

接下来的步骤是对这个哈密顿量进行对角化处理。首先引入平移算子

$$\hat{T} = \sum_i c_i c_{i+1}^\dagger \quad (2.10)$$

这个算子作用到格点 $i+1$ 上的波函数会得到格点 i 的波函数。而 \hat{T}^n 恰好为 H 的一项。因此 (2.9) 又可以用平移算子表达

$$H = - \sum_n t_n \hat{T}^n \quad (2.11)$$

其中 $t_n^* = t_{-n}$ 。显然这个哈密顿量平移算子对易, 二者有相同的基。平移算子的基是算子的傅里叶变换

$$C_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} c_j \quad (2.12)$$

这里 k 的取值范围为 $2\pi m/N$, m 为整数. \hat{T} 有本征值 e^{-ik} 。把这个代入哈密顿量可以得到一维晶格的本征值, 也就是模型的能带

$$\epsilon(k) = - \sum_n t_n e^{-ikn} \quad (2.13)$$

2.3 原胞具有内部结构的情况

实际上拓扑绝缘体所考虑的晶格模型的元胞都具有内部结构。下面以一维的, 具有 0 号和 1 号两种类型晶格的一维点阵为例 (图 (2.2)) 来阐述这类模型的求解方法。

位于位置 i 的原子的算子可以被定义为 $c_{i,a}$ 。若 $a = 1$ 表示 1 号原子, 0 则为 0 号原子。一个通用的哈密顿量可以写成

$$H = \sum_{i,j} t_{ij}^{ab} c_{i,a}^* c_{j,b} \quad (2.14)$$

这里 t 的额外 a, b 指标取值分别也可以为 0, 1, 可以表示不同原子间的相互作用。这个新的哈密顿量同样可以被平面波所对角化

$$c_{k,a} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} c_{j,a} \quad (2.15)$$

它的傅里叶变换是

$$c_{j,a} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikj} c_{k,a} \quad (2.16)$$

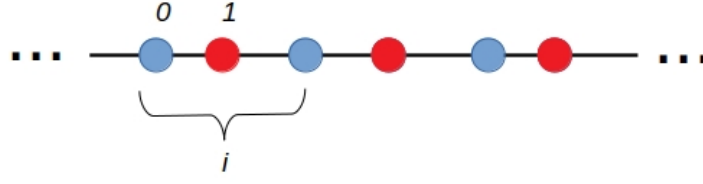


图 2.2: 原胞具有 0,1 两种原子的一维长链模型。任意两个格点之间都有相互作用。体系具有周期性边界

代入 (2.14) 式并利用模型的平移对称性化简可以得到

$$H = - \sum_{n,k} t_n^{ab} e^{ikn} c_{k,a} c_{k,b} \quad (2.17)$$

可以看出这个哈密顿量对于变量 k 来说是对角的，但是元胞的内部结构，即和 a, b 有关的量还不是对角。哈密顿量可以写成矩阵形式

$$H = \begin{bmatrix} M_{k_1}^{ab} & & 0 \\ & M_{k_2}^{ab} & \\ & & \ddots \\ 0 & & & M_{k_N}^{ab} \end{bmatrix}_{N \times N} \quad (2.18)$$

其中 N 是原胞数目， M_k^{ab} 是一个 $m \times m$ 的小矩阵， m 表示元胞内的原子数在这个具体的模型里 m 为 2，分别对应 0 号和 1 号原子。它的形式为

$$M_k^{ab} = \sum_n t_n^{ab} e^{ikn} \quad (2.19)$$

这个小矩阵实质上包含了原胞内部结构的信息。对角化矩阵 M_k^{ab} 可以得到模型的能带结构。一般来说原胞内有几种原子，就会有几个本征值，从而就能解出几个能带。上述对一维模型的讨论也同样适用于二维晶格模型，只不过需要把最后结果的各个物理量换成二维矢量。

3 拓扑物理基本概念

拓扑物理有一个重要的概念——Berry phase，可以从含时薛定谔方程的求解过程中生成。因此本部分首先会简要概括含时薛定谔方程的求解过程，然后引入 Berry phase，最后定义与之相关的其他拓扑守恒量。

3.1 含时薛定谔方程的求解

通常情况下系统的波函数会随时间演化。因此我们可以给波函数添加时间标签

$$|\alpha, t_0; t\rangle, \quad (t > t_0) \quad (3.1)$$

其中 t_0 是初始时间。系统在初始时间的波函数也可以被简写为 $|\alpha, t_0\rangle$ 。时间演化算子被定义用来描述某时刻的波函数和另一时刻的关系，即

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (3.2)$$

时间演化算子应该满足一些约束条件。首先我们希望系统在演化过程中概率是守恒的，即

$$\langle\alpha, t_0|\alpha, t_0\rangle = 1 \Rightarrow \langle\alpha, t_0; t|\alpha, t_0; t\rangle = 1 \quad (3.3)$$

把上式插入 (3.2)，可以知道 \mathcal{U} 是酉算子

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0)\mathcal{U}(t, t_0) = 1 \quad (3.4)$$

第二点， \mathcal{U} 应该可以被切割为不同的时间段

$$\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1)\mathcal{U}(t_1, t_0) \quad (3.5)$$

有这两个约束，我们就可以断定当时间间隔 dt 很小时， \mathcal{U} 可以被写为

$$\mathcal{U}(t + dt, t) = 1 - i\Omega dt \quad (3.6)$$

其中 Ω 是厄米算子。显然这个形式是符合约束 (3.4) (3.5) 的。 \mathcal{U} 算子的作用是把一个波函数映射到另一个波函数，因此它本身是没有量纲的。这就表明 Ω 具有时间倒数，或者说频率，的量纲。另一方面，含时薛定谔方程的特殊之处就是它是哈密顿量含时间因子。换句话说，哈密顿量是推动波函数的量，和时间演化算子息息相关。而能量又可以写作 $E = \hbar\omega$ 。因此可以（正确的）猜想

$$\Omega = \frac{H}{\hbar} \quad (3.7)$$

总之， \mathcal{U} 可以写作

$$\mathcal{U}(t+dt, t) = (1 - \frac{iHdt}{\hbar})\mathcal{U}(t, t_0) \quad (3.8)$$

可以得到时间演化算子的薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = H\mathcal{U}(t, t_0) \quad (3.9)$$

对于不同类型的 $H(t)$ ，这个方程有不同的解。假如不同时间的 $H(t)$ 可以对易，那么解可以写为

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')] \quad (3.10)$$

如果能得到 H 的一组基

$$H|a, t\rangle = E_a|a, t\rangle \quad (3.11)$$

那么单个基的含时间波函数就可以写作

$$|\phi(t)\rangle = \exp[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' E_a(t')] |a, t\rangle \quad (3.12)$$

3.2 拓扑不变量

实际上 H 会比上面所述的情况复杂。例如给体系加入一个会变化方向的磁场，不同时刻的 H 则不对易。但我们仍然可以从上面的解得到灵感来猜测一个通解

$$|\phi(t)\rangle = \exp[-i\gamma_a(t) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' E_a(t')] |a, t\rangle \quad (3.13)$$

而 $\gamma_a(t)$ 是引入的新相位。通常情况下 H 是由运动轨迹简介和时间想联系，因此这里把 $E_a(t)$ 改成 $E(\mathbf{R}(t))$ 。把上式代回到含时薛定谔方程可以得到 $\gamma_a(t)$ 的约束

$$\gamma_a(t) = i \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} d\mathbf{R} A_a(\mathbf{R}) \quad (3.14)$$

$\gamma_a(t)$ 被称作 Berry phase。被积分函数为

$$A_a(\mathbf{R}) = \langle a, \mathbf{R}(t) | \nabla_{\mathbf{R}} | a, \mathbf{R}(t) \rangle \quad (3.15)$$

则为 Berry connection. 当例子沿闭合轨道运动（这个常常和周期性边界有关），上式为闭合路径积分，可以用斯托克斯公式重写为

$$\gamma_a = \int_S d\mathbf{S} \cdot \Omega_a(\mathbf{R}) \quad (3.16)$$

其中 Berry curvature 为

$$\Omega_a(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times A_a(\mathbf{R}) \quad (3.17)$$

其他重要的量也可以用 Berry connection 表示。例如霍尔电导

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} C_1 \quad (3.18)$$

C_1 为 chern number

$$C_1 = \frac{1}{2\pi} \int d^2k (\nabla \times \mathbf{A}) \quad (3.19)$$

如果处理的是晶格系统，Berry connection 的波函数就被替换为布洛赫波函数即可。

Chern number 是一个基本的拓扑不变量。具有不同的 chern number 的材料会有不同的拓扑性质。下个部分包含几个低拓扑模型的例子。它们都和 chern number 的丰富物理内涵有关：1. 离散的霍尔电导；2. 拓扑相变；3. 拓扑绝缘体的 Edge mode。

4 低维拓扑模型

4.1 霍尔电导的量子化

从 (3.18) 可知霍尔电导的量子化实际是 chern number 的离散取值。这里我们用具有正方形布里渊区的晶格为例子（周期性边界条件）。Chern number 可以写开为

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk_x \int_0^{2\pi} dk_y [\partial_{k_x} \mathbf{A}_y(k_x, k_y) - \partial_{k_y} \mathbf{A}_x(k_x, k_y)] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk_y [\mathbf{A}_y(2\pi, k_y) - \mathbf{A}_y(0, k_y)] - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk_x [\mathbf{A}_x(k_x, 2\pi) - \mathbf{A}_x(k_x, 0)] \end{aligned} \quad (4.1)$$

假设布洛赫波在布里渊区边界两边差一个相位因子 θ

$$|u(k_x, 2\pi)\rangle = \exp[\theta_x(k_x)] |u(k_x, 0)\rangle \quad (4.2)$$

可以把这个关系传递到 Berry connection

$$A_x(k_x, 2\pi) = -\partial_{k_x} \theta_x(k_x) + A_x(k_x, 0) \quad (4.3)$$

同理，在 y 方向也有

$$A_y(2\pi, k_y) = -\partial_{k_y} \theta_y(k_y) + A_y(0, k_y) \quad (4.4)$$

代入 (4.1) 可得 chern number

$$C_1 = \frac{1}{2\pi} [\theta_y(0) - \theta_y(2\pi) + \theta_x(2\pi) - \theta_x(0)] \quad (4.5)$$

考察一下波函数在布里渊区四个顶点的关系

$$\begin{aligned} e^{i\theta_x(0)} |u(0, 2\pi)\rangle &= |u(0, 0)\rangle \\ e^{i\theta_x(2\pi)} |u(2\pi, 2\pi)\rangle &= |u(2\pi, 0)\rangle \\ e^{i\theta_y(0)} |u(2\pi, 0)\rangle &= |u(0, 0)\rangle \\ e^{i\theta_y(2\pi)} |u(2\pi, 2\pi)\rangle &= |u(0, 2\pi)\rangle \end{aligned} \quad (4.6)$$

整合可以得到

$$|u(0, 0)\rangle = e^{i[\theta_x(0) + \theta_y(2\pi) - \theta_x(2\pi) - \theta_y(0)]} |u(0, 0)\rangle \quad (4.7)$$

显然，指数上的相位差只能是 2π 的整数倍。因此 chern number 是量子化的

$$C_1 = \nu, \nu = 1, 2, \dots \quad (4.8)$$

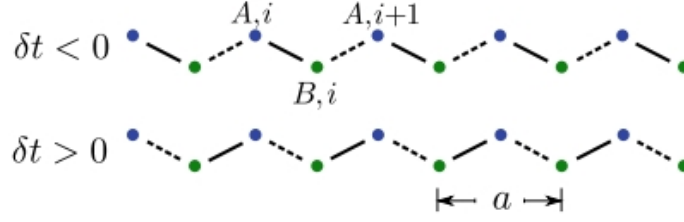


图 4.1: SSH 模型。每个原胞内具有 AB 两种原子。实线表示两个端点具有强度为 $t + \delta t$ 的相互作用，虚线则表示相互作用强度为 $t - \delta t$ 。这个模型具有开边界条件

这就是反常量子霍尔效应的来源。

4.2 拓扑相变

一个模型通常可以采用调节哈密顿量 H 里的某个参数来实现 Chern number 在平凡（等于 0）和非平凡（不等于 0）之间转化。Chern number 的改变又叫做拓扑相变。能实现拓扑相变的最简单的模型就是具有两个能带的 Su-Schrieffer-Heeger 模型

从紧束缚模型那一节的讨论可以很快写出这个模型的哈密顿量

$$H = \sum_{n=1}^N (t + \delta t) c_{A,n}^\dagger c_{B,n} + \sum_{n=1}^{N-1} (t - \delta t) c_{A,n+1}^\dagger c_{B,n} + h.c \quad (4.9)$$

写成矩阵形式为

$$H = \begin{pmatrix} 0 & t + \delta t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t + \delta t & 0 & t - \delta t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t - \delta t & 0 & t + \delta t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t + \delta t & 0 & t - \delta t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t - \delta t & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & t + \delta t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t + \delta t & 0 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

这个矩阵比较简单，可以通过数值的方法对角化来求得体系的能带。另一方面，我们也可以采用紧束缚模型那一节所采用的方法来：把 $c_{A,n}$ 做傅里叶展开。这样得到的 M_k^{ab} 矩阵表达式为

$$M_k = [((t + \delta t) + (t - \delta t) \cos k) \sigma_x + (t - \delta t) \sin k \sigma_y] \quad (4.11)$$

为了方便计算，我们做一个变换 $\sigma_x \rightarrow \sigma_z, \sigma_y \rightarrow \sigma_x, \sigma_z \rightarrow \sigma_y$, and $k \rightarrow k + \pi$ M_k 被变换为

$$M_k = -(t - \delta t) \sin k \sigma_x + (2\delta t + 2(t - \delta t) \sin^2 \frac{k}{2}) \sigma_z \quad (4.12)$$

对角化 M_k 可以得到能带表达式

$$E_{\pm} = \pm(d_x^2 + d_z^2) \quad (4.13)$$

其中 $d_x = -(t - \delta t)\sin k$, $d_z = 2\delta t + 2(t - \delta t)\sin^2 \frac{k}{2}$, 本征向量可以用来计算下能带的一维的 chern number (又叫做 winding number), 结果为 (cite)

$$(-1)^{\nu} = \text{sgn}(\delta t)\text{sgn}(\delta t + t) \quad (4.14)$$

其中 ν 是 winding number。注意这里的 δt 应该是远小于 t 的, 就是说当 δt 小于 0 时, winding number 是 1, 大于 0 时 winding number 是 0. 因此我们可以通过改变 δt 的符号来实现拓扑相变。考察 $k = 0$ 附近的能带随 δt 的变化可以直观地显示这个过程。把 $E(k)$ 在 0 处展开, 略去高阶小量可以得到

$$E(k) = \pm\sqrt{(t - \delta t)^2 k^2 + 4\delta t^2} \quad (4.15)$$

$k = 0$ 时的能带间隙为 $4\delta t$ 。因此 δt 从负数增大到 0 时, 能带间隙变小, 在等于 0 时贴合。而 δt 增大为正数后又打开了能隙。尽管变化前后能带的形状相同, 但它们已具有不同的 winding number, 因此具有不同的物理性质, 是不同的拓扑相。

4.3 Edge Mode

求解下面这个二维模型可以解释 chern number 背后的物理

$$H = \sum_{k_y x} \left[c_{k_y}^{\dagger}(x) \frac{\sigma_z - i\sigma_x}{2} c_{k_y}(x+1) + \text{h.c.} \right] + \sum_{k_y x} c_{k_y}^{\dagger}(x) [\sin k_y \sigma_y + (m + \cos k_y) \sigma_z] c_{k_y}(x) \quad (4.16)$$

这个模型是一个柱面。它在 y 方向上是具有周期性边界条件, 在 x 方向上则是开边界 (图4.2. a)。取特定的 m 值可以使得下能带 chern number = 1, 上能带为-1, 其对应的能带如图4.2.b。

每一个特定的 k_y 都有 N 个本征值。这些本征值来源于 x 方向上的 N 个晶格。整个能谱图被划分为对应不同颜色的三个部分。蓝色点代表的本征值来源于材料的内部。换句话说, 蓝色本征值对应的波函数在材料内部是一个扩散的状态。而黑色或者红色点的波函数则局域在 x 方向上的两个边界 (波函数在材料内部为 0)。因此黑色和红色线被称作是 edge mode。

Edge mode 的存在会产生新奇的物理现象。由半经典方程可以知道, 在材料的 y 方向上通上均匀电场等价于对 k_y 做一个随时间线性相关的平移 $k_y \rightarrow k_y - E_y t$ 。从能谱图上看就是有一条 $k_y = k_{y0} - E_y t$ 的轴线随时间扫描过整个能带图。电子具有从低能级开始填充能带的性质。假设开始时费米能级恰好在 $E = 0$ 处, 即电子填满下能带且恰好填到图中的

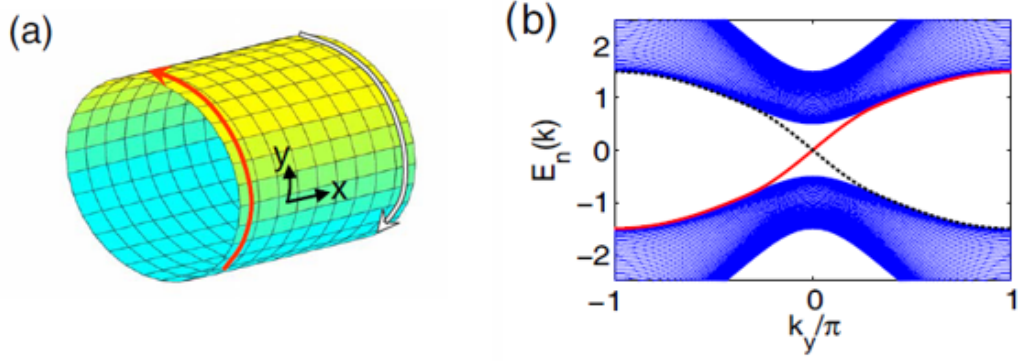


图 4.2: (a) 一个柱面材料。它在 y 方向上是周期性边界条件, x 方向上是开边界。取特定的 m 参数, 会在两个边界产生 edge mode (b) 模型的能带图。图中每一个点都是哈密顿量的一个本征值, 连起来便形成能带。图被分为上下能带, 中间还有红黑两条 edge mode

(0,0) 点, 那么当 k_y 走向往左扫描时, 电子会沿着红线走, 并走到下能带, 然后一直走到 $k_y = -\pi$ 处。由于材料在 k_y 方向是周期的, 扫描线会继续从 $k_y = \pi$ 处往左扫描, 并使电子走出下能带, 走入黑线, 最终走回 (0,0) 点。总之, 这个红线一下能带—黑线的过程会随时间一直循环下去。从波函数的角度看上述过程可以理解为什么会在 x 方向上有电流产生。一开始电子填充的是红线, 波函数被局域在 $x = 0$ 处边界。之后电子进入下能带, 波函数相当于从 $x = 0$ 处扩散到材料内部, 并在电子填充到黑线时到达 $x = L$ 处边界。波函数是概率, 也就是电荷密度, 因此 x 方向上会存在电流, 这就是霍尔电流。

Edge mode 数量和不同能带的 chern number 有如下关系

$$n_L(E_g) - n_R(E_g) = \sum_{E_n < E_g} \text{Ch}(E_n) \quad (4.17)$$

其中 $\text{Ch}(E_n)$ 是第 n 个能带的 chern number。真空的 chern number 是 0。 E_g 是能隙。 $n_L(E_g)$ 和 $n_R(E_g)$ 是出现在系统左边界的左旋和右旋 chiral mode 数量。注意一个体系总体上必须是拓扑平庸的, 因此所有的能带 chern number 和必须为 0。在图像上表现为上顶带上方无 edge mode。下面的这个哈密顿量是一个很好的例子

$$H = \sum_{j=1}^N \left[-t \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - V \cos \left(2\pi \frac{p}{q} j + \theta_0 \right) c_j^\dagger c_j \right] \quad (4.18)$$

它对应的能谱如图4.3.

右侧子图第一个能隙 (从下往上数) 下面仅有一条能带, 对应的 $\text{Ch}(E_0) = 1$, 因此系统左边界仅仅有一个 edge mode。图中另一条 edge mode 是右边界产生的。第二个能隙下面有两个能带, 对应 chern number 和为 2, 因此有 4 条 edge mode (左右边界各两个)。其它能隙也有类似的推理。

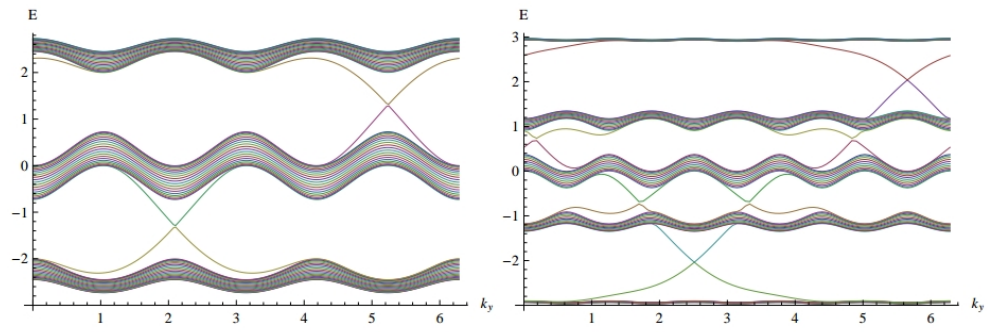


图 4.3: 左侧能谱图取数 $p/q = 1/3$ 。从下往上的能带完全充满时 chern number 分别为 1, -2,1. 右侧 $p/q = 1/5$, chern number 分别为 1, 1, -4,1,1

5 高阶拓扑绝缘体

Edge mode 的波函数不只是会堆积在边界，还会堆积在平面系统的四个角上。前面已经展示了如何使用 Berry connection 来计算霍尔电导。实际上 Berry connection 也可以被用来计算电偶极矩

$$P_1 = -\frac{e}{2\pi} \int_{BZ} \text{Tr}[A] \quad (5.1)$$

这里的 A 是 Berry connection。

电偶极矩的产生物理图像可以用上一节的 edge mode 来解释。当系统存在 Edge mode 时，边界会有局域化的波函数，也就会有电荷堆积在边界。系统两个对立的边界电荷堆积量不同则形成了电偶极矩。这个电偶极矩的概念已经被推广到了三维材料，但是到了 2017 年才被 wladimir 等研究人员在理论上推广到更高阶的电多极矩，而这正是波函数局域在系统角的体现。他们使用的其中一个模型如图 5.1 所示

若这个体系在 x 和 y 方向上都是周期边界，可以直接写出其哈密顿量

$$h^q(k, \delta) = [\gamma + \lambda \cos(k_x)] \Gamma_4 + \lambda \sin(k_x) \Gamma_3 + [\gamma + \lambda \cos(k_y)] \Gamma_2 + \lambda \sin(k_y) \Gamma_1 + \delta \Gamma_0, \quad (5.2)$$

其中 $\Gamma_0 = \tau_3 \sigma_0$, $\Gamma_k = -\tau_2 \sigma_k$, $\Gamma_4 = \tau_0 \sigma_0$, k 可取为 1 或 2. τ 和 σ 表示原胞的泡利矩阵。这个哈密顿量是一个 4×4 的矩阵，因此会有四个能带。为了观察到 edge mode，我们把系统 x , y 方向都改为开边界，并在实空间中数值解哈密顿量矩阵。那么它的本征值随参数 γ/λ 的变化如图 5.2.a 所示。

这个图被分为上下对称的 8 个瓣。有些瓣之间有重叠，但这并不代表着能带会交叠。对于一个特定的 γ/λ ，系统有 $4 \times N \times N$ 个本征值。4 是由于原胞内的 4 个原子。 $N \times N$ 则来源于 x 和 y 方向上的 N 个原胞。如果体系在 y 上是周期边界的话，可以把这 $4 \times N \times N$

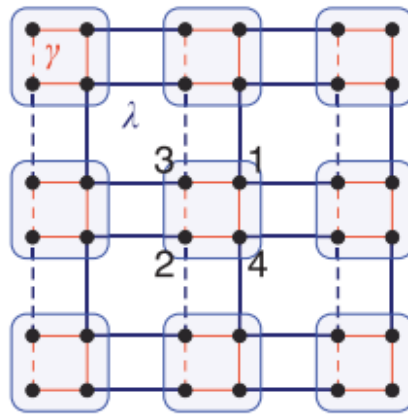


图 5.1: 具有量子化电四极矩的紧束缚模型。 Γ 和 λ 表示格点间相互作用强度。虚线表示负的强度。非平凡的拓扑相会在 $|\gamma/\lambda| < 1$ 时出现

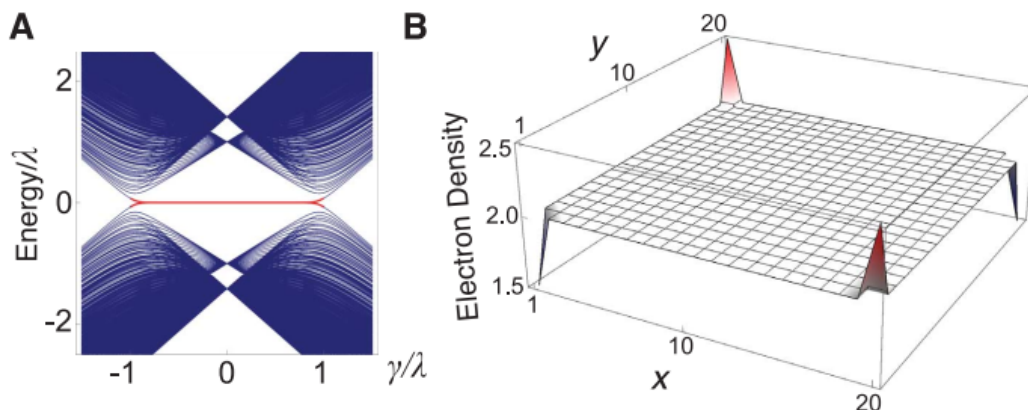


图 5.2: (a) 以 γ/λ 为参数的系统的能谱图, 红线表示四重简并的, 在角处局域化的态。(b) 系统的电子密度。在每一个角上做积分得到的总电荷是正负 $e/2$

个本征值按 k_y 为 x 轴来排列, 得到对于特定 γ/λ 的能带图。不同能带之间应该没有交叠的 (除了 edge mode)。当 $\gamma/\lambda > 1$ 时, 从图 5.2.a 可以看出系统有明显的能隙, 无 edge mode, 因此是拓扑平凡体系。但是当 $\gamma/\lambda < 1$, 图中间有一条红线穿过, 表示在能隙中存在 edge mode, 是拓扑非平凡的。拓扑非平凡表示体系在边界处有局域化波函数, 但是在这个特殊的模型里, 波函数实际上是局域在体系的 4 个角上, 因此电荷也是堆积在 4 个角上 (图 5.2)。堆积量为分数电荷量: $e/2$ 或 $-e/2$, 所以这个体系会有电四极矩。

6 总结与展望

本文首先介绍了拓扑物理的研究背景，然后讲解了紧束缚模型的计算方法。一些拓扑概念和拓扑不变量在第三章中被引入。之后的重点是解释 **chern number** 的性质和其背后的物理意义：**Chern number** 是霍尔电导量子化的来源；不同的 **chern number** 对应不同的拓扑相，不同的拓扑相之间可以互相转换；**chern number** 和 **edge mode** 数量有关，而 **edge mode** 的存在会导致新奇的物理现象，如霍尔电流，边界导电等；最后我们用高阶拓扑绝缘体展示了 **edge mode** 不仅可以使波函数局域在边界上，也可以局域在角上。文中除了理论推演，还包含了一些数值模拟的工作。拓扑绝缘体是当今凝聚态物理中较新的分支。它近年来的火热程度体现了物理学家对于守恒量的青睐。本文介绍的内容只是这个领域的冰山一角。在纵向深度上来说，**chern number** 无法解释仅有自旋-轨道耦合的体系，由此衍生出来新拓扑不变量 **Z-2 number**。横向上拓扑研究渗入了凝聚态的其他热点方向：超导体和超流体用到的 **bogolubov-de gennes** 方程和拓扑绝缘体计算的狄拉克方程形式上类似；拓扑保护有望被用于制作量子计算有关材料，使量子比特免受外部噪声的干扰等。总的来说，拓扑将会在基础物理和前沿应用上有一番作为。

参考文献

7 致谢

时光荏苒，在四川大学 4 年的时间即将过去。在这 4 年里我获得的不止是知识上的成长，还有方法论上的成长，更多的是性格上的成长。在这条成长路上，我要感谢国家对我的支持培养，还有亲人，老师，朋友同学的陪伴帮助。

首先感谢国家基础学科拔尖计划给我提供了一个可以和众多优秀学生交流沟通的平台。这个计划的校际交流项目极大地拓宽了我的视野，资金支持也给了我很大的帮助。

感谢我的亲人在我远离家乡时给我的关怀。他们总是能对我人生方向给出有益的建议，并在我选择出国留学的时候坚定地支持我。

感谢我的毕业论文指导老师贺言教授。他有敏锐清晰的思维，总是能在我遇到问题时很快地指导我下一步怎么做。他对研究的纯粹的热爱也感染了我。

感谢我本科科研训练的导师龙炳蔚教授。是他带我入了科研的大门，教会了我一些技术细节，还有一些科研的思维方法。更重要的是在我出国方面给了很多重要的建议和帮助，给我的人生指了几条明路。

感谢在德国做暑期研究时的 Sebastian 导师。他在我遇到科研问题时总是能敏锐想到好几个可能的解决方案。在他组里待的那段时间我感受到了很强的科研氛围和极大的乐趣。

感谢我的室友、同学和朋友在大学四年说说笑笑里给了我许多快乐。

感谢各个科任老师。是你们在课上用实打实的知识让我领略了学习的乐趣。还有各位认真负责的行政老师们。感谢你们在我申请各种材料时耐心地给予我帮助。