

四川师范大学本科毕业论文

Haldane 模型的构建以及拓扑物性研究

学生姓名 何英杰

院系名称 物理与电子工程学院

专业名称 物理学

班 级 2019 级 4 班

学 号 2019070406

指导教师 程才

完成时间 2023 年 5 月 20 日

Haldane 模型的构建以及拓扑物性研究

物理学专业

学生姓名 何英杰 指导教师 程才

摘要: Haldane 模型是凝聚态物理的一个描述二维晶格的 Toy model, 在没有外部磁场的情况下其也具有一个非零且量子化的霍尔电导, 由英国物理学家 Haldane 在 1988 年提出。Haldane 模型对于研究拓扑绝缘体和拓扑半金属等材料具有重要意义, 它已经被广泛应用于许多二维材料的研究中, 例如石墨烯和拓扑绝缘体。本文从最简单的经典霍尔效应开始, 系统地介绍整数、分数量子霍尔效应的具体内容与由来, 然后再从石墨烯的紧束缚模型出发引入质量项与交替磁通得到了 Haldane 模型。把 Haldane 模型的哈密顿量通过矩阵跃迁的方式转化为 wannier90_hr.dat 文件, 而后由 Wanniertool 软件来计算 Haldane 模型的拓扑物性。我们的工作希望对未来想要学习 Haldane 模型的同学或者老师提供参考或帮助。

关键词: 石墨烯; 霍尔效应; Haldane 模型; wannier90_hr.dat

The construction of the Haldane model and study of topological properties

Specialty: Physics

Undergraduate: Ying-Jie He **Supervisor:** Cai Cheng

ABSTRACT: The Haldane model is a two-dimensional condensed-matter lattice toy model which exhibits a nonzero quantization of the hall conductance in the absence of an external magnetic field. It was proposed by British physicist Haldane in 1988. The Haldane model is of great significance for the research on topological insulators and topological semi-metals, and it has been widely used in the study of many two-dimensional materials, such as graphene and topological insulators. Starting from the simplest Hall effect, this paper briefly describes the origin and content of Integer and Fractional Quantum Hall effect, and then introduces the mass term and alternating flux from the tight-binding model of graphene to obtain the Haldane model. Then convert the Hamiltonian matrix of the Haldane model into the wannier90_hr.dat file. Finally, The software of Wanniertools is used to calculate the topological properties of the Haldane model. Our work hopes to provide references or help for students or teachers who want to learn the Haldane model in the future.

Keywords: Graphene; Hall effect; Haldane model; Wannier90_hr.dat

目 录

摘要.....	I
ABSTRACT.....	II
1 霍尔效应.....	1
1.1 经典霍尔效应	1
1.2 整数量子霍尔效应.....	2
1.3 分数量子霍尔效应.....	3
2 Haldane 模型构建	5
2.1 石墨烯能带结构的紧束缚模型.....	5
2.2 Haldane 模型的构建	7
3 Haldane 模型拓扑物性计算	12
3.1 Wanniertools 工具介绍	12
3.2 Wannier90_hr.dat 文件介绍	12
3.3 拓扑物性计算.....	13
4 总结与展望.....	20
参考文献.....	21
附录.....	22
致谢.....	35

Haldane 模型的构建以及拓扑物性研究

1 霍尔效应

1.1 经典霍尔效应

1879 年，美国物理学家霍尔在霍普金斯大学研究生期间，研究关于载流导体在磁场中的受力性质时，发现了霍尔效应这一现象。

霍尔效应是指在长方形导体薄板上通以电流时，如果在电流的垂直方向施加磁场，就会在与电流和磁场两者垂直的方向上产生电势差，因此所产生的电势差被称为霍尔电压^[1]。

如图 1.1 所示：当把一条载流导体放在磁场中时，洛伦兹力会使导体产生横向电势差，这个电势差是垂直于磁场和电流的方向，

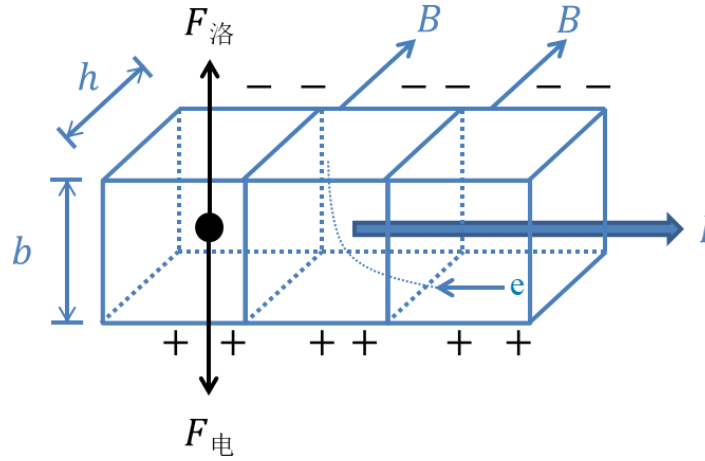


图 1.1 霍尔效应示意图

若存在电流 I 在金属导体中流动，方向与磁感应强度 B 的方向垂直，导体的高度和宽度分别为 b 和 h 。设导体单位体积内的自由电子数为 n ，电子的电量为 e ，电子的定向移动平均速度为 v ：

那么根据电流的微观定义式有：

$$I = nqSv = nehbv \quad (1.1)$$

由于洛伦兹力的存在，自由电子横向漂移并聚集在导体上表面，导致导体上表面带有负电荷而导体下表面带有正电荷，导体上下表面之间产生电势差 U 。这个电势差会在

导体中产生一个匀强电场 E ，这电场对电子产生的作用力 $F_{\text{电}}$ 方向向下，其电场力大小为：

$$F_{\text{电}} = qE = e \cdot \frac{U}{b} \quad (1.2)$$

由于电场力 $F_{\text{电}}$ 与洛伦兹力 $F_{\text{洛}}$ 方向相反，又因自由电子逐渐向上表面集聚，则上、下表面电势差也逐渐变大，最后电场力也逐渐变大从而使二力达到平衡状态，这时电子横向漂移运动不再发生：

$$\begin{aligned} F_{\text{洛}} &= qvB = evB \\ F_{\text{电}} = F_{\text{洛}} &\Rightarrow e \cdot \frac{U}{b} = evB \end{aligned} \quad (1.3)$$

综上，整理上述表达式有：

$$\begin{aligned} U &= vBb \\ vb &= \frac{I}{neh} \\ \Rightarrow U &= \frac{IB}{neh} \end{aligned} \quad (1.4)$$

从上述表达式可以得出， U 与 I 、 B 成正比，与 n 、 e 、 h 成反比，且与 d 无关。

电压 U 叫做霍尔电势差（电压），该电势差还有另外一种写法，

即：

$$U = R_H \frac{IB}{h} \quad (1.5)$$

其中， $R_H = 1/ ne$ 称之为霍尔系数，由金属的导体性质决定。

1.2 整数量子霍尔效应

在进行实验时，霍尔效应一直是在室温和中等强度磁场条件下进行，这种情况已持续了很长一段时间。1980 年，德国物理学家克利青在研究极低温和强磁场中的半导体时发现^[2]，当半导体硅处于低温状态下，其霍尔效应不是常规的那种直线，而是呈现出跃迁特性，其阶梯大小由一个被整数除的基础物理常数所决定，这一发现距离霍尔效应的发现已有 100 年之久，这是当代凝聚态物理学令人惊异的进展之一，这在后来被称为整数量子霍尔效应。因为这个发现，在 1985 年克利青被授予了诺贝尔物理学奖。

相较于经典霍尔效应：高迁移率的二维电子气（2DEG）在低温（1.5K）和强磁场（18T）环境下，其横向霍尔电阻随磁场变化出现一系列和自然常数 h/e^2 相关的量子化

霍尔电阻平台，而与之对应的纵向电阻迅速降低为零，如图 1.2 所示。霍尔电阻平台可以表示为

$$R_H = (h/e^2)/f = R_k/f, \quad f = 1, 2, 3 \quad (1.6)$$

式中， h 为普朗克常数； f 为正整数（称为填充系数，它由电子密度和磁通密度决定。）； R_k 为冯克利青常数。

这种现象称为整数量子霍尔效应（IQHE），它是一种普适的量子效应，量子化霍尔电阻与二维电子气材料、器件和平台指数无关。在强磁场和低温的作用下，在 2DEG 中形成电子的分立朗道能级，而且电子的运动在相邻朗道能级之间是局域化的，并且由于杂质的存在，朗道能级扩展为有限宽度的能带，所以在曲线上出现霍尔电阻平台。IQHE 提供了全新的方法来确定精细结构常数，这种方法不仅可以独立验证量子电动力学理论的正确性，而且具有非常重要的意义；其次，在计量领域可以提供绝对电阻值，以作为电阻标准。目前，量子电阻值的测量准确度可达到或优于 10^{-9} 量级。

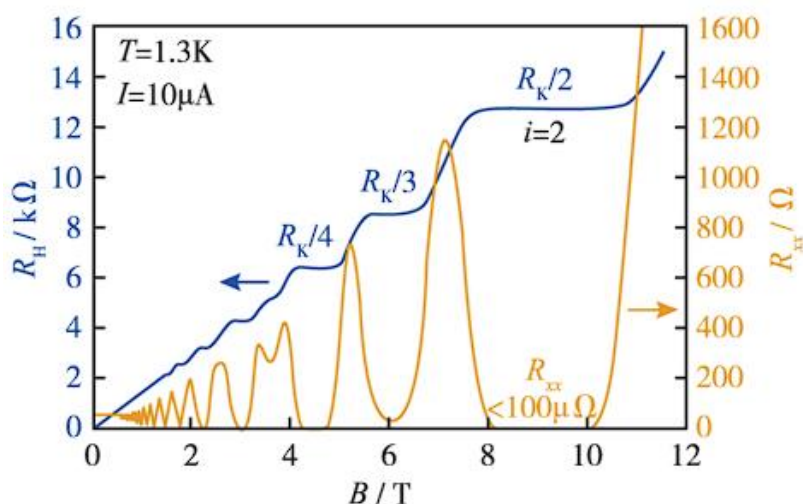


图 1.2 整数量子霍尔效应示意图^[2]

1.3 分数量子霍尔效应

冯·克利青发现整数霍尔效应后不久，1982 年，华裔物理学家崔琦和德国物理学家施特默（H.L.Stormer）^[3]在美国贝尔实验室进行了半导体霍尔效应的研究。他们采用的实验材料是由半导体 GaAs 和 GaAlAs 组成的半导体质结，这种半导体质结的作用是限制二维电子只能存在于这两种不同材料的接触面上。他们发现，量子霍尔效应平台不仅在 f 为整数时被观察到，而且也出现在 f 为一些奇分母的分数 $1/3$ ， $2/5$ 的情况下。如图 1.3，由于 f 可以取分数，所以此类量子霍尔效应被称为分数量子霍尔效应（FQHE）。在图 1.3 中，经典霍尔电阻由虚对角线表示，台阶形状实线代表实验结果（可见到也形

成了一些横向电阻不变的平台)，箭头所指的纵坐标值是引起台阶的磁场强度，带峰的曲线表示纵向电阻。

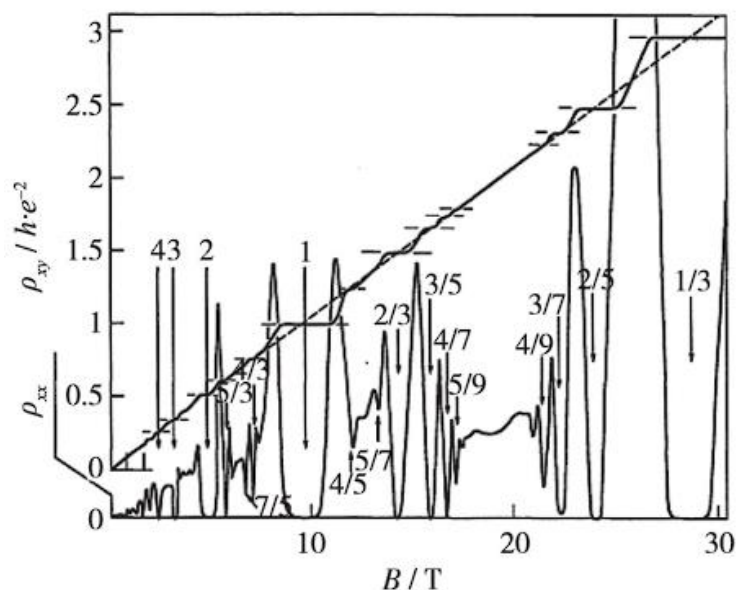


图 1.3 分数量子霍尔效应示意图^[3]

1983 年，美国物理学家劳克林成功地诠释了 FQHE，其重点是：

(1) 电子间的库仑相互作用是导致 FQHE 的原因，它是一种低维电子系统的强关联效应，而在整数量子霍尔效应中，不考虑电子之间的关联。

(2) 给出了劳克林波函数，它是电子系统的基态波函数，用波函数计算系统基态的能量；

(3) $f = 1/m$ (分数量子平台) 是多电子系统集合态的特征，称之为量子霍尔液体。此液体以消耗能量为代价，产生“准粒子”，每一个准粒子携带有整数电荷的 $1/m$ 。此液体亦是不可压缩的，电子间的库仑相互作用为这种不可压缩提供了间隙。

2 Haldane 模型构建

2.1 石墨烯能带结构的紧束缚模型

在仅考虑最近邻跃迁时，Haldane 模型跟石墨烯模型是一样的。所以我们将先展示固体物理中的紧束缚近似方法于石墨烯能带结构的研究应用过程，整个推导过程基于石墨烯的两带结构，图 2.1 展示了石墨烯的原胞结构示意图

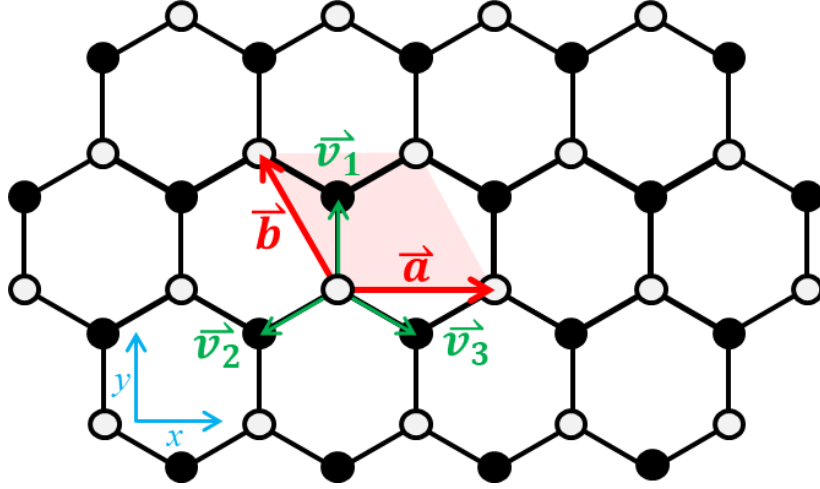


图 2.1 石墨烯结构示意图

我们先如图建立一个直角坐标系($x-y$), 其中基矢 \vec{a} 和基矢 \vec{b} 的夹角为 120° , 除此之外在正空间中基矢 \vec{a} 对应向量 a_1 , 基矢 \vec{b} 对应向量 a_2 , 而 a_3 垂直于纸面向外。由固体物理所学我们可知, 由一组倒格矢 \vec{b}_1 , \vec{b}_2 , \vec{b}_3 组成倒空间, 向量 b_1 , b_2 , b_3 与线性无关的向量 a_1 , a_2 , a_3 的关系可以表示为:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{V}, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}{V}, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{V}, \quad V = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (2.1)$$

接下来根据公式找 b_1 , 在图示的二维平面中, 与向量 a_1 对应的是基矢 a , 此时把基矢 b 当作向量 a_2 , 手指指向 a_2 , a_3 垂直于纸面向外, 右手指掌心从 a_2 转向 a_3 , 这时大拇指指向的方向就是 k_a 的方向, 以此类推我们也可以找到 k_b 的方向。在此基础上, 我们重新建立一个直角坐标系 (如下图所示), 将带入上面公式中

$$V = \vec{a} \times \vec{b} \times \cos 120^\circ = 1 \times 1 \times \cos 120^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (2.2)$$

因为向量 a_1 , a_2 , a_3 的模为 1, 联立上面的式子, 就可以求出倒格矢 k_a , k_b 所对应的数值为 $4\pi/\sqrt{3}$, 其于直角坐标系如图 2.2

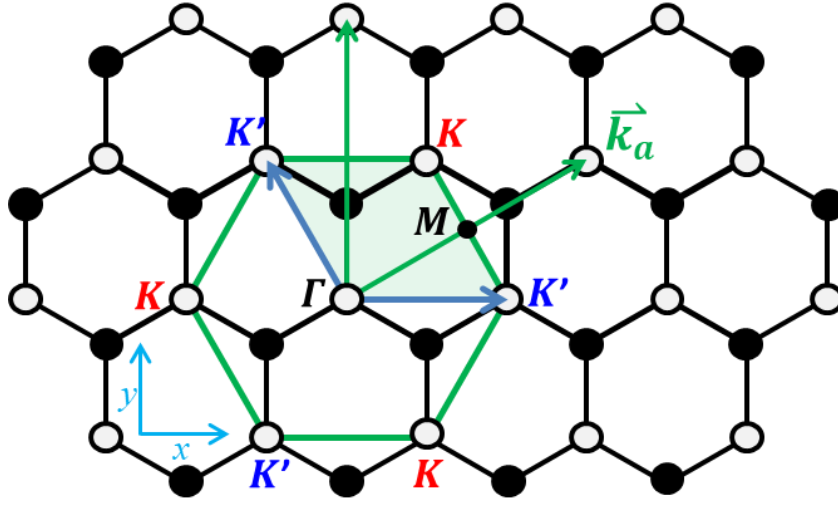


图 2.2 倒格矢示意图

最后在直角坐标系中找到与它们相对应的坐标为

$$k_a = 2\pi \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad k_b = 2\pi \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right) \quad (2.3)$$

接下来把 a, b 的模都设置为 1, 则在 $x-y$ 坐标系中找到 a, b 的晶格基矢量分别为:

$$\vec{a} = (1, 0), \quad \vec{b} = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \quad (2.4)$$

已知石墨烯中心到边长的垂直距离为 $1/2$, 经过计算可以得到石墨烯六方晶格的边长为 $1/\sqrt{3}$, 再参照上图, 可以进一步计算得到最近邻连接矢量相对应的三个向量为:

$$\vec{e}_1 = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \vec{e}_2 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right), \quad \vec{e}_3 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right) \quad (2.5)$$

哈密顿量是指跃迁项就是从六方晶胞中一个原子跃迁到相邻原子所需要的 t , 其哈密顿可表示为:

$$H = -t \sum_{i, i+\delta} C_{A, i}^+ C_{B, i+\delta} + h.c. \quad (2.6)$$

其中 $h.c.$ 表示为厄米共轭。

因为石墨烯是两带模型, 所以它写出来是 2×2 矩阵的形式

$$\begin{pmatrix} 0 & H_{12} \\ H_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

其用常用符号可以表示为:

$$H_{12}(\vec{k}) = f(k) = -t \sum_{\delta} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_i} \quad (2.8)$$

倒空间的向量 k ，具体可以表示为：

$$\vec{k} = (k_x \vec{I} + k_y \vec{J} + k_z \vec{Z}) \quad (2.9)$$

写成矩阵形式，其中常用的符号表示为：

$$f(k) = -t \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{e}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{e}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{e}_3} \right] \quad (2.10)$$

再将上面所对应邻连接矢量代入可以得到：

$$f(k) = -t \left[e^{i\frac{1}{\sqrt{3}}} + e^{i(-\frac{1}{2}k_x - \frac{1}{\sqrt{3}}k_y)} + e^{i(\frac{1}{2}k_x - \frac{1}{2\sqrt{3}}k_y)} \right] \quad (2.11)$$

高对称 $K(0, 4\pi/3)$, $K'(0, -4\pi/3)$ 以及它所对应的图像，在倒空间的图中，布里渊区的两个点分别被标记为 K 和 K' ，这是两个不等价的点。

2.2 Haldane 模型

Haldane 模型是一个 toy model，至今还无法被实验验证，但是里面的物理机制却给了后人极其重要的启发。如图 2.3，在石墨烯结构中，引入两个效果：一个是质量项（两个格点的格点能不相同）；另一个是引入交替磁通 a , b 。交替磁通产生了次近邻的虚数 hopping。

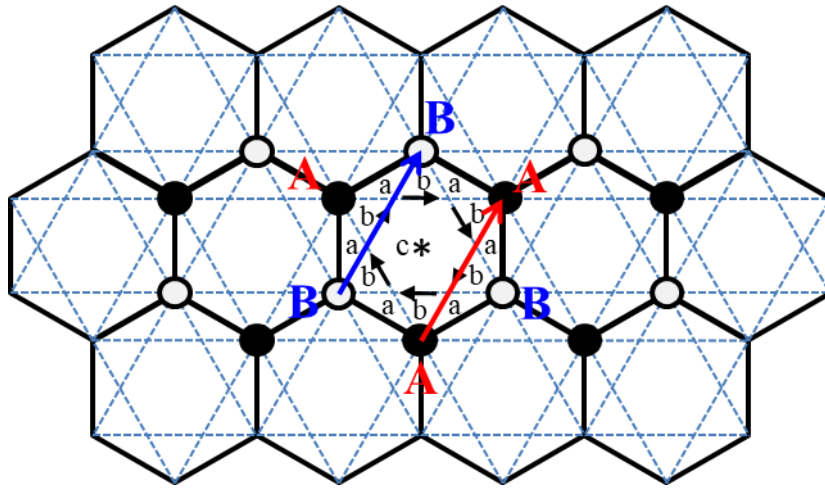


图 2.3 Haldane 模型示意图

由 AB 效应（Aharonov-Bohm effect）可知，当一个带电粒子绕着闭合曲线一周，会产生一个相位，初末状态之间的相位差正比于通过该曲面的磁通：

$$\phi = \frac{e}{\hbar} \iint \vec{B} \cdot d\vec{S} \quad (2.12)$$

假设近邻 hopping 可以表示为

$$t_{AB}e^{i\phi_{AB}}, t_{BC}e^{i\phi_{BC}}, t_{CA}e^{i\phi_{CA}} \quad (2.13)$$

那么一个粒子从 A-B-C-A 走一圈，可得：

$$\phi_{AB} + \phi_{BC} + \phi_{CA} = \frac{e}{\hbar} \iint \vec{B} \cdot \vec{S} \quad (2.14)$$

只要闭合曲面 ABCA 有磁通，hopping 中就会存在相位。

如上图，在每个六角格子 b 区间加正向磁场 B ，图中 a 区间加负向磁场 $-B$ ，c 区间无磁场，保证总的磁场为 0。最近邻格点之间沿着最近邻闭合曲面走一圈，面积等于六角晶格的面积，但是总磁通为 0；次近邻格点 AA' 之间沿着闭合曲面 $ABA'A$ （面积不为 0）磁通

$$\phi = 2\pi 2\phi_a + \phi_b / \phi_0; \text{ 其中 } \phi_0 = h/e \quad (2.15)$$

则 hopping 有相位。其中 AA' 跟 BB' 之间的 hopping 相位相反（因为相位正负对应方向性），即分别为

$$\text{正向 } t_{AA'}e^{i\phi}; \text{ 反向 } t_{BB'}e^{-i\phi} \quad (2.16)$$

考虑了次近邻作用后，原来的石墨烯哈密顿需要加上 $H_{AA'}$ 和 $H_{BB'}$ 这两个对角项，原来的石墨烯哈密顿矩阵元如下

$$\begin{pmatrix} H_{11}=0 & H_{12}=-t \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_2} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_3} \right] \\ H_{21}=H_{12}^* & H_{22}=0 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

先不考虑质量项，每个原子次近邻有 6 个项连接矢互为相反数（如图 2.4），则对角项哈密顿矩阵元分别可以写为：

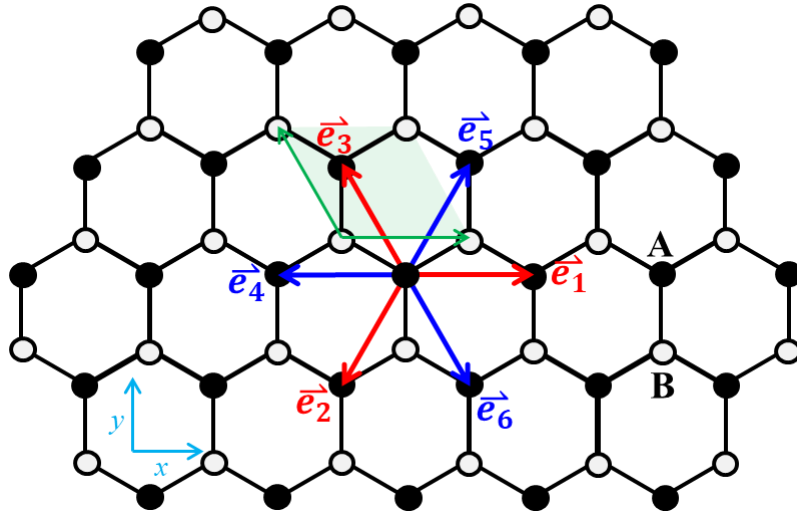


图 2.4 连接矢示意图

$$H_{11} = -t' \sum_{j=1}^6 e^{i\phi_j} (e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}'_j}) \quad (2.18)$$

ϕ_j 其中 $j=1,2,3$ 的红色代表正相位, $j=4,5,6$ 的蓝色代表负相位; 红色表示顺时针转一圈, 蓝色表示逆时针转一圈。

$$\therefore \vec{e}'_1 = -\vec{e}'_4$$

$$\therefore e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}'_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}'_4} = 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_1)$$

$$\therefore H_{11} = -2t' [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_1 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_2 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_3 - \phi)]$$

$$\therefore H_{22} = -2t' [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_1 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_2 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_3 + \phi)]$$

加上质量项后:

$$H_{11} = M - 2t' [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_1 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_2 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_3 - \phi)] \quad (2.19)$$

$$H_{22} = -M - 2t' [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_1 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_2 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_3 + \phi)] \quad (2.20)$$

利用矩阵的泡利算符表达式可以将该哈密顿分成三个分量

$$H = H_0 I + H_x \cdot \sigma_x + H_y \cdot \sigma_y + H_z \cdot \sigma_z \quad (2.21)$$

对角项会出现在 I 和 σ_z 分量中, 我们将其展开

$$H_{11} = M - 2t' \sum_i^3 [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_i) \cos(\phi) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{e}'_i) \sin(\phi)] \quad (2.22)$$

$$H_{22} = -M - 2t' \sum_i^3 [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_i) \cos(\phi) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{e}'_i) \sin(\phi)] \quad (2.23)$$

其中 H_{11} 和 H_{22} 相同部分放到单位矩阵分量中, 相反的部分放到 z 分量中:

$$H_0 = -2t' \sum_i^3 \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}'_i) \cos(\phi) \quad (2.24)$$

$$H_z = M - 2t' \sum_i^3 \sin(\vec{k} \cdot \vec{e}'_i) \sin(\phi) \quad (2.25)$$

将 H_{12} 和 H_{21} 展开:

$$H_{12} = -t \sum_j^3 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_j} = -t \sum_j^3 [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_j) - i \sin(\vec{k} \cdot \vec{e}_j)] \quad (2.26)$$

$$H_{21} = -t \sum_j^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{e}_j} = -t \sum_j^3 \left[\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_j) + i \sin(\vec{k} \cdot \vec{e}_j) \right] \quad (2.27)$$

这两项中的实数放到 x 分量中，虚数放到 y 分量中：

$$H_x = -t \sum_j^3 \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_j); \quad H_y = -t \sum_j^3 \sin(\vec{k} \cdot \vec{e}_j) \quad (2.28)$$

若 $H = H_0 I + H_x \cdot \sigma_x + H_y \cdot \sigma_y + H_z \cdot \sigma_z$

则本征值为：

$$\varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = H_0(\vec{k}) \pm \sqrt{H_x^2(\vec{k}) + H_y^2(\vec{k}) + H_z^2(\vec{k})} \quad (2.29)$$

可得其两带模型的本征值。

如图 2.5，绿色箭头为基矢：

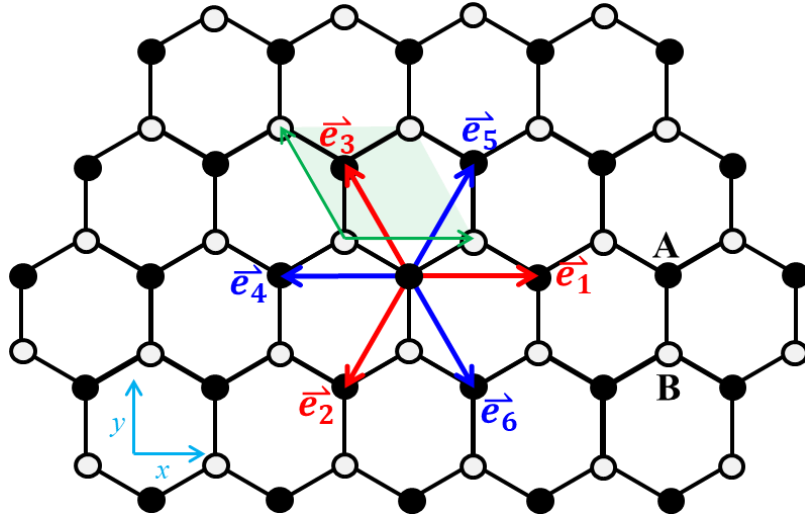


图 2.5 连接矢示意图

基矢：

$$\vec{a}_1 = (1, 0) a; \quad \vec{a}_2 = (-1/2, \sqrt{3}/2) a \quad (2.30)$$

对应倒格矢满足

$$\vec{k}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (2.31)$$

可得

$$\vec{k}_1 = \frac{2\pi}{a} (1, 1/\sqrt{3}); \quad \vec{k}_2 = \frac{2\pi}{a} (0, 2/\sqrt{3}) \quad (2.32)$$

对于K点 (1/3, 1/3):

$$\vec{K} = \frac{1}{3} \frac{2\pi}{a} \left[(1, 1/\sqrt{3}) + (0, 2/\sqrt{3}) \right] = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}) \quad (2.33)$$

因为

$$\varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = H_0(\vec{k}) \pm \sqrt{H_x^2(\vec{k}) + H_y^2(\vec{k}) + H_z^2(\vec{k})} \quad (2.34)$$

在K点, 每个分量 $H_x(k)$, $H_y(k)$, $H_z(k)$ 的值:

$$H_x = -t \sum_j^3 \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_j) = 0 \quad (2.35)$$

$$H_y = -t \sum_j^3 \sin(\vec{k} \cdot \vec{e}_j) = 0 \quad (2.36)$$

$$H_z = M - 2t' \sum_i^3 \sin(\vec{k} \cdot \vec{e}_i') \sin(\phi) = M - 3\sqrt{3}t' \sin(\phi) \quad (2.37)$$

同理在K'点, H_x , H_y 都为 0,

$$H_z = M + 3\sqrt{3}t' \sin(\phi) \quad (2.38)$$

由 $\varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = H_0(\vec{k}) \pm \sqrt{H_x^2(\vec{k}) + H_y^2(\vec{k}) + H_z^2(\vec{k})}$ 可得

$$\Delta \in (\vec{K}) = 2H_z(\vec{K}) = 2|M - 3\sqrt{3}t' \sin(\phi)| \quad (2.39)$$

$$\Delta \in (\vec{K}') = 2H_z(\vec{K}') = 2|M + 3\sqrt{3}t' \sin(\phi)| \quad (2.40)$$

3 拓扑物性计算

3.1 Wanniertools 工具介绍

Wannier90^[4]是一个使用 MV 和 SMV 方法从一组能带中获得 MLWF 的工具，电子结构计算所需要的主要成分，是基于相邻 k 点上 Block 态的周期部分间的重叠矩阵。这个矩阵很小，并且独立于用于获得 Block 态计算中的基。因此，wannier90 可以被接口到任何电子结构代码。

拓扑绝缘体的出现不仅改变了人们对材料能带结构的认识，而且也带来了基于这类新材料的电子器件的快速发展。科学家们在过去十年里不断发现新的拓扑相，如 Dirac 半金属，Weyl 半金属，Nodal line 半金属等等。不同的拓扑相有着不同的性质和应用。WannierTools 是一个开源软件^[5]，主要用于计算拓扑不变量从而判断一个材料是否为新的拓扑材料，同时还能够给出拓扑材料的一些特征性质，如表面态。不光如此，它也能够画出费米面；计算 Berry 曲率；算出能隙在布里渊区中的形状；找出 Weyl、Dirac 点；计算 Z2 拓扑数等等。

3.2 wannier90_hr.dat 文件介绍

如图 3.1 为 Wannier90_hr.dat 文件的具体内容。

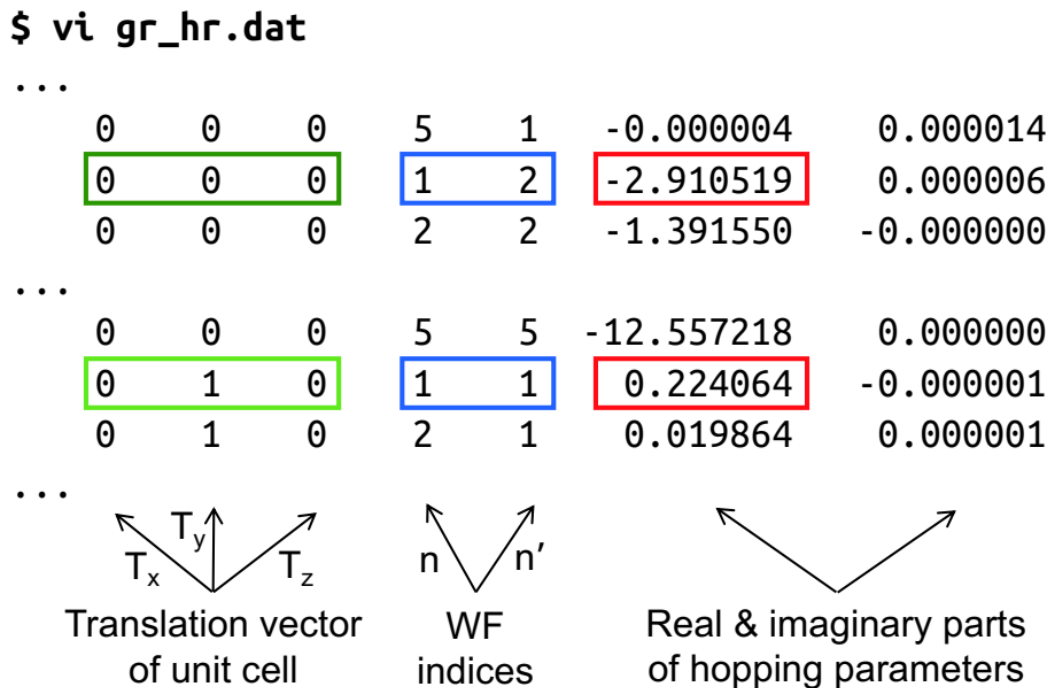


图 3.2 Wannier90_hr.dat 文件的具体内容介绍

其中，第一，二，三列数字分别为 R_1 ， R_2 ， R_3 。

第四，五列数字分别为 m, n ，是 wannier 轨道的顺序。

第七和八列数字分别为哈密顿量的实部与哈密顿量的虚部。

首先，紧束缚模型哈密顿量的做法就是将三角函数改写成指数函数形式

$$\sin(k_x) = \frac{1}{2i}(e^{ik_x} - e^{-ik_x}), \quad \cos(k_x) = \frac{1}{2}(e^{ik_x} + e^{-ik_x})$$

这里假设晶格常数 $a=1$

$$e^{ik_x} \rightarrow (100)\text{hopping}, \quad e^{-ik_x} \rightarrow (-100)\text{hopping}$$

$$e^{ik_y} \rightarrow (010)\text{hopping}, \quad e^{-ik_y} \rightarrow (0-10)\text{hopping}$$

$$e^{ik_x+ik_y} \rightarrow (110)\text{hopping}, \quad e^{-ik_x-ik_y} \rightarrow (-1-10)\text{hopping}$$

$$e^{ik_x-ik_y} \rightarrow (1-10)\text{hopping}, \quad e^{-ik_x+ik_y} \rightarrow (-110)\text{hopping}$$

具体 python 程序见附录（python 生成 Wannier90_hr.dat 文件）

3.3 Haldane 模型拓扑物性计算

先由附录 python 程序生成 Wannier90_hr.dat 文件，后利用 Wanniertools 软件来对 Haldane 模型进行拓扑物性的计算。生成的 Wannier90_hr.dat 文件分为三种情况，一是普通绝缘体，二是无能隙半金属，三是陈绝缘体。下面对三种情况进行介绍：

(1) 普通绝缘体，设置参数 $\phi = \pi/2$ ， $m = 0.2$ ； $t_1 = 1.0, t_2 = 0.0$

&TB_FILE

Hrfile = "Haldane_hr.dat" ! 设置紧束缚近似模型数据存储的文件名
/

!> bulk band structure calculation flag

&CONTROL ! 从这里开始设置计算的细节

BulkBand_calc = T !

BulkBand_plane_calc = T ! (体能带的计算)

SlabBand_calc = T ! (半开边界的能带计算)

SlabSS_calc = F ! (计算表面态,也就是计算表面的谱函数)

Wanniercenter_calc = T ! (利用/wilson loop 的方法计算体系 Wannier Center 的演化,可用来研究拓扑不变量)

```

BerryCurvature_calc    = T    ! 计算体系的 Berry 曲率
/

&SYSTEM
NSLAB =60              ! 半开边界情况下,开边界方向上格点的数目
NumOccupied = 1        ! 占据态的数目
SOC = 0                ! (0 代表无自旋轨道耦合,1 代表有自旋轨道耦合)
E_FERMI = 0            ! 费米能级的位置
/

&PARAMETERS
Eta_Arc = 0.01         ! infinite small value, like brodening
E_arc = 0.0            ! energy for calculate Fermi Arc
OmegaNum = 1000        ! 设置确定能量区间中的撒点数目
OmegaMin = -5.0        ! 设置计算的能量区间
OmegaMax = 5.0         ! energy interval
Nk1 = 60               ! 在 k 空间计算时候的 k 点撒点数目控制
Nk2 = 60               ! number k points
NP = 1                 ! number of principle layers
/

LATTICE ! 这里设置元胞的信息,与 VASP 中的设置是相同的
Angstrom
2.1377110  -1.2342080   0.0000000
0.0000000   2.4684160   0.0000000
0.0000000   0.0000000  10.0000000

ATOM_POSITIONS
2                                ! Number of atoms for projectors
Direct                          ! Direct or Cartisen coordinate
C 0.333333 0.666667 0.500000    ! 原胞中原子的位置
C 0.666667 0.333333 0.500000

```

PROJECTORS ! 设置元胞中每个原子贡献的轨道

1 1 ! Number of projectors

C pz

C pz

SURFACE ! (表面态计算设置,也就是选择哪个方向是开边界,哪个方向是周期的)

0 0 1 ! 设置表面基矢

1 0 0

0 1 0

KPATH_BULK ! (这里用来设置计算体态能带时候的路径)

3 ! number of k line only for bulk band

M 0.50000 0.00000 0.00000 K' -.33333 -.33333 0.00000

K' -.33333 -.33333 0.00000 G 0.00000 0.00000 0.00000

G 0.00000 0.00000 0.00000 K 0.33333 0.33333 0.00000

KPATH_SLAB

1 ! number of k line for 2D case

0 0.0 0.0 1 0. 1.0 ! k path for 2D case

KPLANE_SLAB

-0.5 -0.5 ! Original point for 2D k plane

1.0 0.0 ! The first vector to define 2D k plane

0.0 1.0 ! The second vector to define 2D k plane for arc plots

KPLANE_BULK

0.00 0.00 0.00 ! Original point for 3D k plane

1.00 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane

0.00 1.00 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane

准备好 wt.in 文件后, 便可开始计算,

nohup mpirun -n 8 wt.x & (以八核开始运算, 提交任务)

计算完成后, 根据设置的参数不同, 则会有一些不同的文件结果输出, 所有的结果都可以利用 gnuplot 来绘制, 所以最后的结果中可以看到一些后缀为.gnu 的文件, 再执行这个文件 gnuplot 命令。

gnuplot bulkek.gnu

gnuplot bulkek_plane.gnu 能带示意图

gnuplot Berrycurvature.gnu 贝利曲率示意图

gnuplot wcc.gnu 陈数示意图

gnuplot slabek.gnu 表面态能带示意图

得到的结果如图 3.1, 图 3.2, 图 3.3。

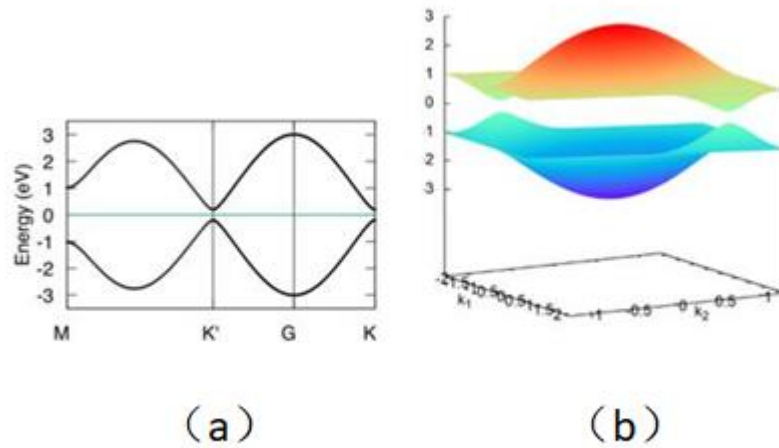


图 3.1 (a) (b) 能带示意图

图 3.1 是其能带示意图, 从能带图 (a) 中, 我们可以看出这是一个有带隙的普通绝缘体, (b) 图是其三维能带图, 总共有两条带。

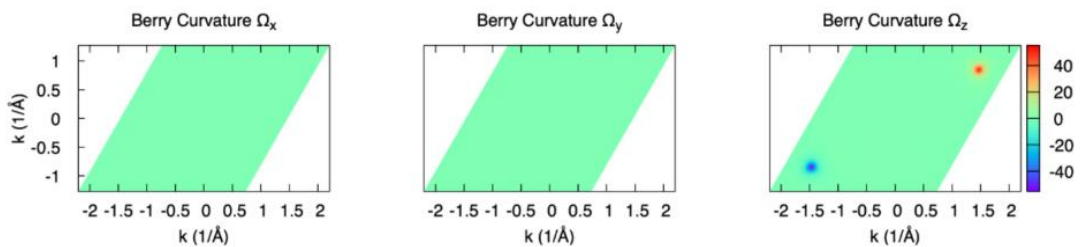


图 3.2 贝利曲率示意图

图 3.2 是其贝利曲率示意图，从图中可以看出 K 及 K' 沿着 x 方向和 y 方向几乎都为 0，只有在 z 方向 K 和 K' 有一个正负的数值。

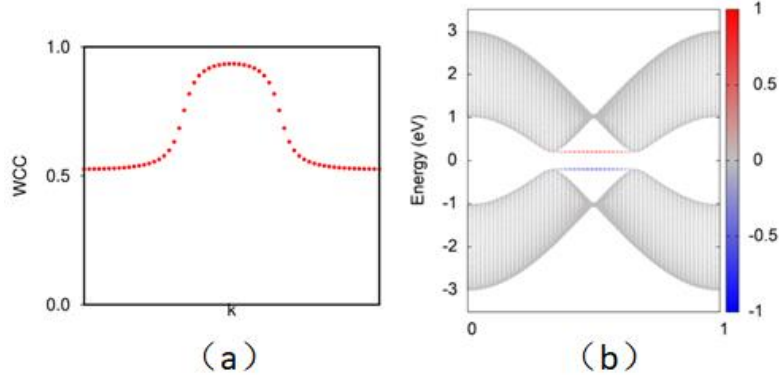


图 3.3 (a) wcc 示意图 (b) 表面态能带示意图

图 3.3 (a) 是其 wcc 示意图，从中可以看出此绝缘体是拓扑平庸的。图 3.3 (b) 是其表面态能带示意图，可以看出其导带和价带并未连通。

(2) 无能隙半金属 (gapless semimetal)，与上述过程一致，设置参数为 $\phi = \pi/2$ ， $m = 0.2$ ； $t_1 = 1.0$ ， $m/t_2 = \pm 3\sqrt{3}$ 。得到的结果如图 3.5，图 3.6。

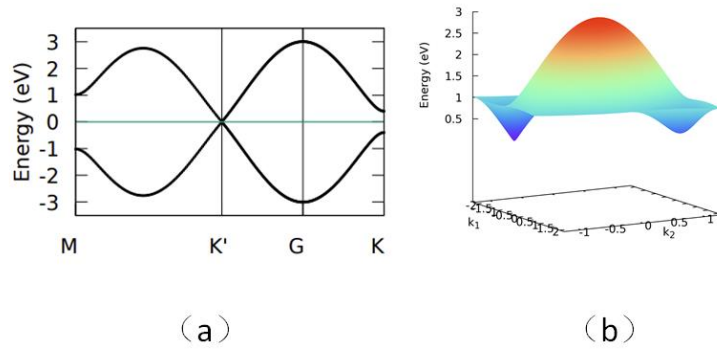


图 3.4 (a) (b) 无能隙半金属能带示意图

图 3.4 是无能隙半金属的能带示意图，从能带图(a)中我们可以看出这是无能隙的，而图 (b) 是其三维能带图。

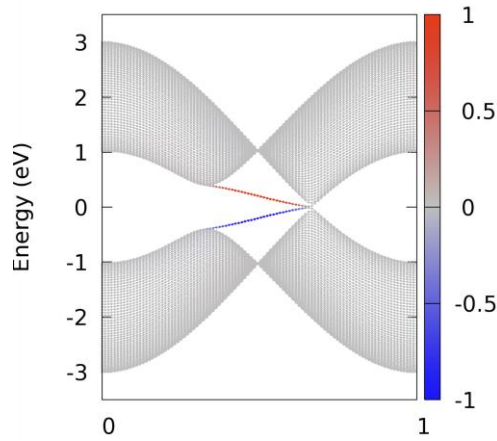


图 3.5 无能隙半金属表面态能带示意图

图 3.5 是无能隙半金属的表面态能带示意图，可以看出其导带与价带有连通。

(3) **陈绝缘体**，设置参数为 $\phi = \pi/2$ ， $m = 0.2$ ； $t_1 = 1.0$ ， $-3\sqrt{3} < m/t_2 < 3\sqrt{3}$ 。得到如图 3.7，图 3.8，图 3.9，图 3.10 的结果。

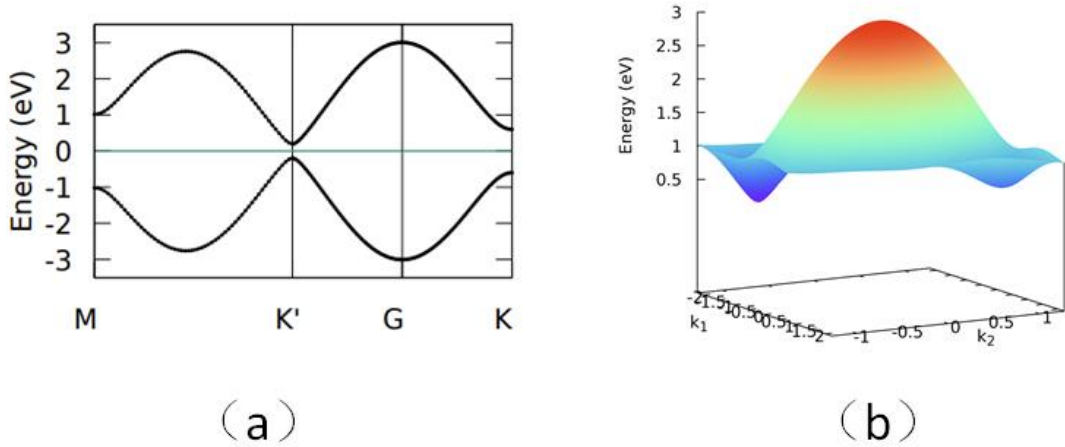


图 3.6 (a) (b) 陈绝缘体能带示意图

图 3.6 是陈绝缘体的能带示意图，从 (a) 中可以看出它是有能隙的，而 (b) 是它的三维能带图。

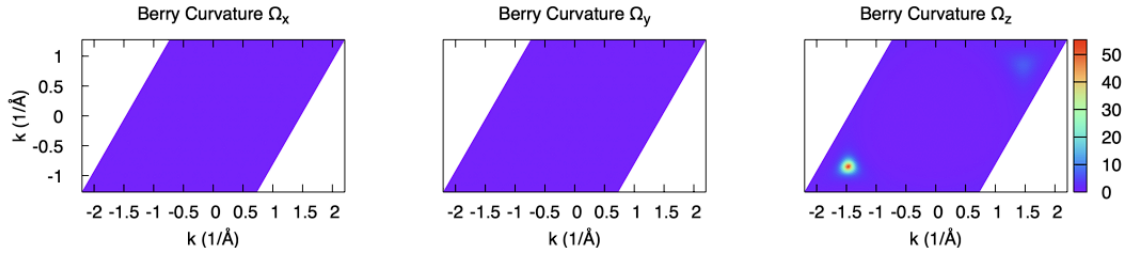


图 3.7 陈绝缘体贝利曲率示意图

图 3.7 是陈绝缘体的贝利曲率示意图，可以看到 K 及 K' 沿着 x 方向和 y 方向几乎都为 0，只有在 z 方向 K 和 K' 有一个正负的数值。

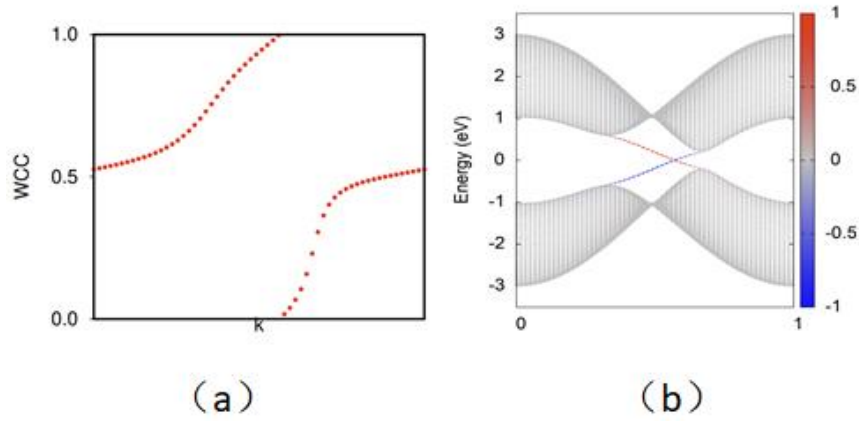


图 3.8 (a) 陈绝缘体 wcc 示意图 (b) 陈绝缘体表面态能带示意图

图 3.8 (a) 是陈绝缘体的 wcc 示意图，可以看出它是拓扑非平庸的，其陈数取一。从 (b) 可以看出其导带与价带有连接。

4 总结与展望

本文详细介绍了 Haldane 模型的构建与拓扑物性研究。Haldane 模型是凝聚态物理的一个模型，一个描述二维晶格的 Toy model，在没有外部磁场的情况下其也具有一个非零且量子化的霍尔电导。通过分析 Haldane 模型的能带结构、Chern 数、边界态等特性，揭示了该模型在拓扑量子计算、量子自旋霍尔效应等方面的广泛应用潜力。

Haldane 模型不仅在物理学领域具有广泛的应用前景，而且在其他交叉领域也有着重要作用。未来的研究方向可以从以下几个方面展开：

1. 进一步探究 Haldane 模型的量子相变机制，以及不同拓扑相的储存和传输性质；
2. 将 Haldane 模型和其他材料（如 Weyl 半金属、拓扑绝缘体）进行耦合、组合，研究新型拓扑材料的性质和应用潜力；

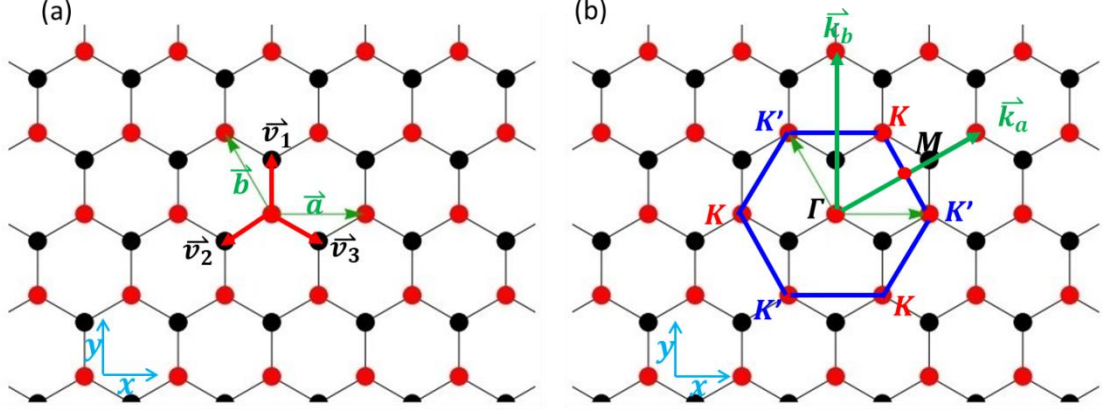
参考文献

- [1] 宋海龙,孙毅,于珉等.量子霍尔效应在电阻标准中的应用综述[J].电子测量与仪器学报,2021,35(11):12-22.
- [2] 于珉,宋海龙,孙毅等.量子霍尔效应及其在电阻计量中的应用[J].宇航计测技术,2021,41(03):8-13.
- [3] 李海. 量子霍尔效应及量子反常霍尔效应的探索历程[J]. 大学物理, 2014, 33(12):4.
- [4] MOSTOFI AA, YATES JR, LEE YS, et al. wannier90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions[J]. Computer physics communications,2008,178(9):685-699.
- [5] WU, QUANSHENG, ZHANG, SHENGNAN, SONG, HAI-FENG, et al. WannierTools: An open-source software package for novel topological materials[J]. Computer physics communications,2018,224(9),405-416.
- [6] Haldane F . Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"[J]. Physical Review Letters, 1988, 61(18):2015-2018.
- [7] 阎守胜. 固体物理基础.第3版[M]. 北京大学出版社, 2011.
- [8] 黄昆. 固体物理学[M]. 北京大学出版社, 2009.
- [9] Mostofi A A , Yates J R , Pizzi G , et al. An updated version of wannier90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions[J]. Computer Physics Communications, 2014, 185(8):2309-2310.

附录

Haldane Model 的构建，直角坐标与晶格基矢坐标

最近邻 H_N :



正空间:

$$(*a = 1; *)$$

$$\vec{a} = \{a, 0\}; \vec{b} = \left\{-\frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{3}}{2}a\right\};$$

$$\vec{k}_a = \frac{2\pi}{a}\left\{1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right\}; \vec{k}_b = \frac{2\pi}{a}\left\{0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right\};$$

$$\vec{v}_1 = \left[\frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right]; \vec{v}_2 = \left[-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}\right]; \vec{v}_3 = \left[\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}\right]; \text{ 基矢坐标 } \vec{a}, \vec{b} \text{ (MagneticTB)}$$

$$\vec{v}_1 = \left[0, \frac{1}{\sqrt{3}}\right]; \vec{v}_2 = \left[-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right]; \vec{v}_3 = \left[\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right]; \text{ 直角坐标 } xoy$$

倒空间:

$$\Gamma = [0, 0], K = \left[\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right], M = \left[\frac{1}{2}, 0\right], K' = \left[\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}\right], \Gamma = [0, 0]; \text{ 基矢坐标 } \vec{a}, \vec{b}$$

$$\Gamma = [0, 0], K = \left[\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}\right], M = \left[\pi, \frac{\pi}{\sqrt{3}}\right], K' = \left[\frac{4\pi}{3}, 0\right], \Gamma = [0, 0]; \text{ 直角坐标 } xoy$$

$$K = \frac{1}{3}\vec{k}_a + \frac{1}{3}\vec{k}_b = \left[\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\right] = \left[\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right];$$

$$K' = \frac{2}{3}\vec{k}_a - \frac{1}{3}\vec{k}_b = \left[\frac{4\pi}{3a}, 0\right] = \left[\frac{4\pi}{3}, 0\right];$$

$$M = \frac{1}{2}\vec{k}_a + 0\vec{k}_b = \left[\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{\sqrt{3}a}\right] = \left[\pi, \frac{\pi}{\sqrt{3}}\right];$$

$$H_N = \begin{bmatrix} 0 & -t(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{v}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{v}_2} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{v}_3}) \\ -t(e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_2} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_3}) & 0 \end{bmatrix};$$

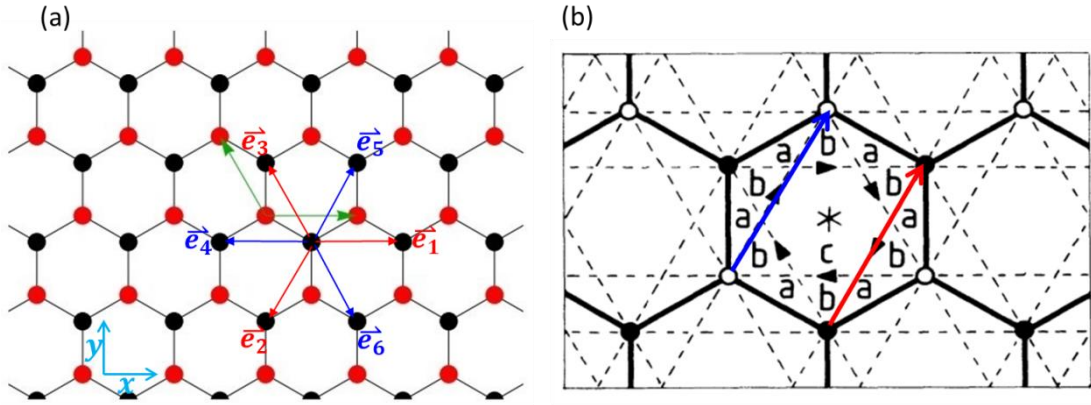
直角坐标 xoy 直接求解能带需求

$$H_N = \begin{bmatrix} 0 & -t[e^{-\frac{iky}{\sqrt{3}}} + e^{-i(\frac{kx}{2} - \frac{ky}{2\sqrt{3}})} + e^{-i(\frac{kx}{2} + \frac{ky}{2\sqrt{3}})}] \\ -t[e^{\frac{iky}{\sqrt{3}}} + e^{i(\frac{kx}{2} - \frac{ky}{2\sqrt{3}})} + e^{i(\frac{kx}{2} + \frac{ky}{2\sqrt{3}})}] & 0 \end{bmatrix};$$

基矢坐标 $\vec{a}\vec{b}$ MagneticTB 需求

$$H_N = \begin{bmatrix} 0 & -t[e^{-i(\frac{2kx}{3} - \frac{ky}{3})} + e^{-i(\frac{kx}{3} - \frac{ky}{3})} + e^{-i(\frac{kx}{3} + \frac{2ky}{3})}] \\ -t[e^{i(\frac{2kx}{3} - \frac{ky}{3})} + e^{i(\frac{kx}{3} - \frac{ky}{3})} + e^{i(\frac{kx}{3} + \frac{2ky}{3})}] & 0 \end{bmatrix};$$

次近邻 H_{NN} :



$$\vec{e}_1 = [1,0]; \vec{e}_2 = [-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}]; \vec{e}_3 = [-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}]; \vec{e}_4 = [-1,0]; \vec{e}_5 = [\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}]; \vec{e}_6 = [\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}];$$

直角坐标 xoy

$$\vec{e}_1 = [1,0]; \vec{e}_2 = [-1, -1]; \vec{e}_3 = [0,1]; \text{基矢坐标}\vec{a}\vec{b} \text{ MagneticTB 需求}$$

$$H = H_N + H_{NN}$$

$$H = \begin{bmatrix} -2tt(\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_1) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_2) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_3)) & -t(e^{-i\vec{k} \cdot \vec{v}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{v}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{v}_3}) \\ -t(e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_3}) & 2tt(\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_1) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_2) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_3)) \end{bmatrix};$$

次近邻 *Haldane Model*: H_{NN} :

$$H_{NN} = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix}$$

$$H_{11} = -\text{tt} \sum_{j=1}^3 e^{i\phi} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_j} - \text{tt} \sum_{j=4}^6 e^{-i\phi} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_j}$$

$$\vec{e}_1 = -\vec{e}_4; \vec{e}_2 = -\vec{e}_5; \vec{e}_3 = -\vec{e}_6;$$

$$e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_4} = 2\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_1);$$

$$e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_5} = 2\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_2);$$

$$e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_3} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_6} = 2\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_3);$$

$$H_{11} = -2\text{tt} * [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_1 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_2 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_3 - \phi)];$$

$$H_{11} = -2\text{tt} * [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_1 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_2 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_3 + \phi)];$$

加上质量项后

$$H_{11} = M - 2\text{tt} * [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_1 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_2 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_3 - \phi)];$$

$$H_{22} = -M - 2\text{tt} * [\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_1 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_2 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_3 + \phi)];$$

$$H = H_N + H_{NN}$$

$$H = \begin{bmatrix} -2\text{tt}(\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_1 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_2 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_3 - \phi)) & -t(e^{-i\vec{k} \cdot \vec{v}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{v}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{v}_3}) \\ -t(e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_3}) & 2\text{tt}(\cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_1 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_2 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{e}_3 + \phi)) \end{bmatrix};$$

MagneticTB 程序部分

```

In[ ]:=Needs["MagneticTB`"];
In[ ]:=(* Haldane model ,1988, PRL*)
sgop = msgop[gray[191]];
init[

  lattice  $\rightarrow \left\{ \left\{ a, 0, 0 \right\}, \left\{ -\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2}, 0 \right\}, \left\{ 0, 0, c \right\} \right\},$ 

  lattpar  $\rightarrow \{a \rightarrow 2.46, c \rightarrow 17\},$ 

  wyckoffposition  $\rightarrow \left\{ \left\{ \left\{ 2/3, 1/3, 1/2 \right\}, \left\{ 0, 0, 0 \right\} \right\} \right\},$ 

  symminformation  $\rightarrow sgop,$ 

  basisFunctions  $\rightarrow \left\{ \left\{ "pz" \right\} \right\}$ 

  ham = Sum[symham[n], {n, 1, 3}];

  MatrixForm[FullSimplify[ham]]

  Magnetic space group (BNS): {191.234, P6/mmm1'}

  Lattice: HexagonalP

  Primitive Lattice Vector:  $\left\{ \left\{ a, 0, 0 \right\}, \left\{ -\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2}, 0 \right\}, \left\{ 0, 0, c \right\} \right\}$ 

  Conventional Lattice Vector:  $\left\{ \left\{ a, 0, 0 \right\}, \left\{ -\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2}, 0 \right\}, \left\{ 0, 0, c \right\} \right\}$ 

  params: {e1}

  params: {t1}

  params: {r1}

Out[ ]//MatrixForm=

```

$$\begin{pmatrix} e1 + 2r1(\cos[kx] + \cos[ky] + \cos[kx + ky]) & e^{-\frac{1}{3}i(kx+2ky)}(1 + e^{iky} + e^{i(kx+ky)})t1 \\ e^{-\frac{1}{3}i(2kx+ky)}(1 + e^{ikx} + e^{i(kx+ky)})t1 & e1 + 2r1(\cos[kx] + \cos[ky] + \cos[kx + ky]) \end{pmatrix}$$

In[]:=atompos

Out[]=

$$\left\{ \left\{ \left\{ \left\{ \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} \right\}, \{0, 0, 0\} \right\}, \left\{ \left\{ \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2} \right\}, \{0, 0, 0\} \right\} \right\} \right\}$$

In[]:=showbonds[3]

Out[]=

2-th neighbour, Bond length = 2.46

Atom position	Num of bonds	p_k
$\left\{ \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0 \right\}$	6	$\left\{ \left\{ \frac{5}{3}, \frac{4}{3}, 0 \right\}, \left\{ \frac{5}{3}, \frac{1}{3}, 0 \right\}, \left\{ \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, 0 \right\}, \left\{ \frac{2}{3}, -\frac{2}{3}, 0 \right\}, \left\{ -\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0 \right\}, \left\{ -\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}, 0 \right\} \right\}$
$\left\{ \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0 \right\}$	6	$\left\{ \left\{ \frac{4}{3}, \frac{5}{3}, 0 \right\}, \left\{ \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, 0 \right\}, \left\{ \frac{1}{3}, \frac{5}{3}, 0 \right\}, \left\{ \frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 0 \right\}, \left\{ -\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, 0 \right\}, \left\{ -\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, 0 \right\} \right\}$

In[]:=showbonds[2]

Out[]=

1-th neighbour, Bond length = 1.42028

Atom position	Num of bonds	p_k
$\left\{ \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0 \right\}$	3	$\left\{ \left\{ \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, 0 \right\}, \left\{ \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0 \right\}, \left\{ \frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 0 \right\} \right\}$
$\left\{ \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0 \right\}$	3	$\left\{ \left\{ \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, 0 \right\}, \left\{ \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0 \right\}, \left\{ -\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0 \right\} \right\}$

(*

$$H12_{A \rightarrow B} = t1 \left(e^{-\frac{1}{3}i(kx+2ky)} + e^{-\frac{1}{3}i(kx-ky)} + e^{-\frac{1}{3}i(-2kx-ky)} \right)$$

$$H21_{B \rightarrow A} = t1 \left(e^{-\frac{1}{3}i(2kx+ky)} + e^{-\frac{1}{3}i(-kx+ky)} + e^{-\frac{1}{3}i(-kx-2ky)} \right)$$

$$H11 = e1 + r1 \left(e^{-i(kx+ky)} + e^{i(kx+ky)} + e^{-iky} + e^{iky} + e^{-ikx} + e^{ikx} \right)$$

$$H22 = e1 + r1 \left(e^{-i(kx+ky)} + e^{i(kx+ky)} + e^{-iky} + e^{iky} + e^{-ikx} + e^{ikx} \right)$$

次近邻跃迁

$$H = \begin{pmatrix} e1 & t1 \left(e^{\frac{-1}{3}i(kx+2ky)} + e^{\frac{-1}{3}i(kx-ky)} + e^{\frac{-1}{3}i(-2kx-ky)} \right) \\ t1 \left(e^{\frac{-1}{3}i(2kx+ky)} + e^{\frac{-1}{3}i(-kx+ky)} + e^{\frac{-1}{3}i(-kx-2ky)} \right) & e1 \end{pmatrix}$$

*)

(*

Case1: $\phi = \frac{\pi}{2}; m = 0.2; t1 = 1; m / t2 \left\langle -3\sqrt{3} \text{orm} / t2 \right\rangle 3\sqrt{3}; \text{trivialinsulator}$

Case2: $\phi = \frac{\pi}{2}; m = 0.2; t1 = 1; m / t2 = \pm 3\sqrt{3}; \text{gaplesssemimetal}$

Case3: $\phi = \frac{\pi}{2}; m = 0.2; t1 = 1; -3\sqrt{3} < m / t2 < 3\sqrt{3}; \text{chenrninsulator}$

备注: $m \rightarrow e1; r1 \rightarrow t2; t1 \rightarrow t1;$

*)

In[]:=

$$(*HHH = \begin{pmatrix} e1 + 2r1(\sin[kx] + \sin[ky] + \sin[kx + ky]) & e^{\frac{-1}{3}i(kx+2ky)} (1 + e^{iky} + e^{i(kx+ky)}) t1 \\ e^{\frac{-1}{3}i(2kx+ky)} (1 + e^{ikx} + e^{i(kx+ky)}) t1 & -e1 - 2r1(\sin[kx] + \sin[ky] + \sin[kx + ky]) \end{pmatrix}$$

*)

$\phi = \pi / 2;$

$$HHH = \begin{pmatrix} e1 - 2r1(\cos[kx - \phi] + \cos[-kx - ky - \phi] + \cos[ky - \phi]) & -t1 \left(e^{-i\left(\frac{2kx}{3} - \frac{ky}{3}\right)} + e^{-i\left(\frac{kx}{3} - \frac{ky}{3}\right)} + e^{-i\left(\frac{kx}{3} + \frac{2ky}{3}\right)} \right) \\ -t1 \left(e^{i\left(\frac{2kx}{3} - \frac{ky}{3}\right)} + e^{i\left(\frac{kx}{3} - \frac{ky}{3}\right)} + e^{i\left(\frac{kx}{3} + \frac{2ky}{3}\right)} \right) & -e1 - 2r1(\cos[kx + \phi] + \cos[-kx - ky + \phi] + \cos[ky + \phi]) \end{pmatrix};$$

$path = \{\{\{0, 0, 0\}, \{1/3, 1/3, 0\}\}, \{"\Gamma", "K"\}\}, \{\{\{1/3, 1/3, 0\}, \{1/2, 0, 0\}\}, \{"K", "M"\}\},$

$\{\{\{1/2, 0, 0\}, \{2/3, -1/3, 0\}\}, \{"M", "K"\}\}, \{\{\{2/3, -1/3, 0\}, \{0, 0, 0\}\}, \{"K", "\Gamma"\}\}\};$

$bandManipulate[path, 200, HHH]$

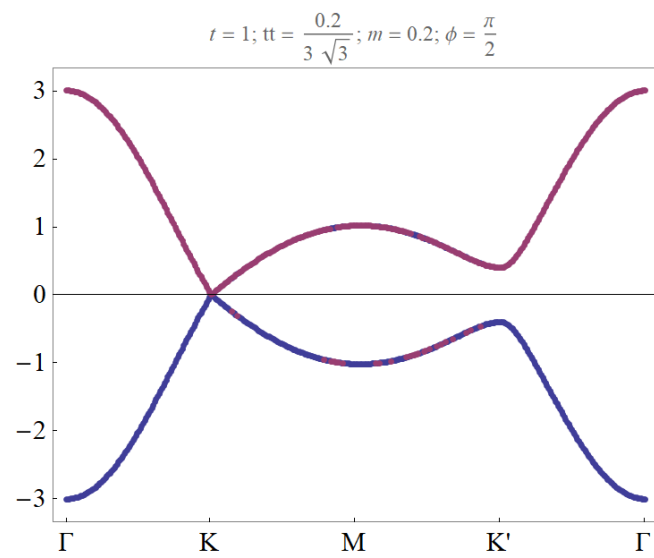
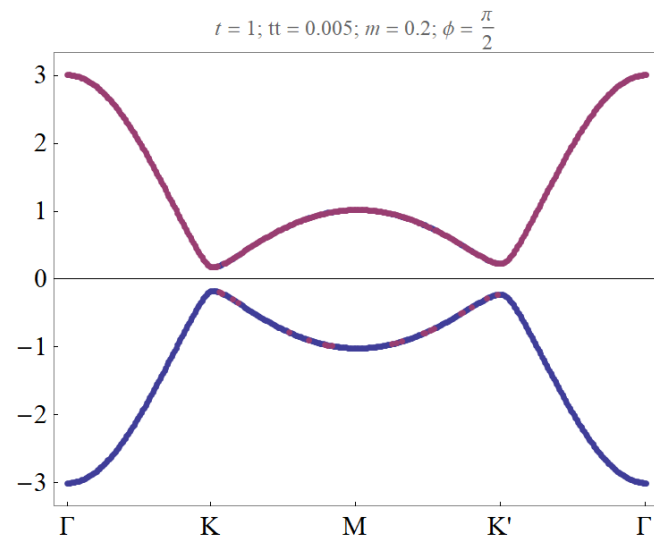
$bandplot[path, 200, HHH, \{e1 \rightarrow 0.2, r1 \rightarrow 0.2 / (3\sqrt{3}), t1 \rightarrow 1\}]$

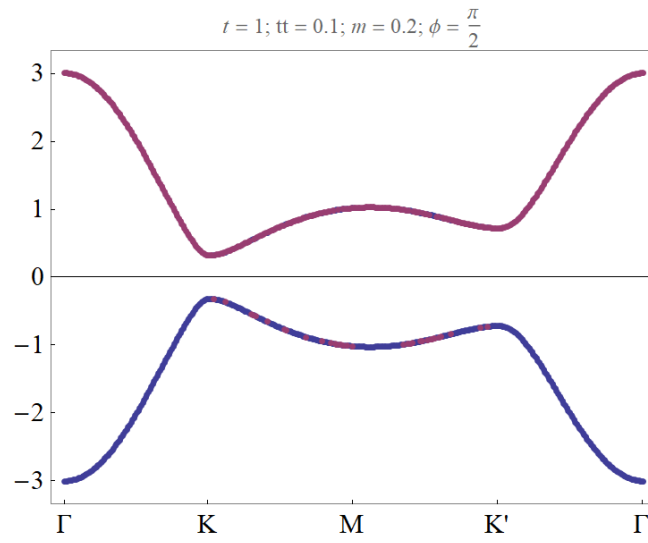
$(*bandplot[path, 200, HHH, \{e1 \rightarrow 0.2, r1 \rightarrow 0.2 / (3\sqrt{3}), t1 \rightarrow 1\}])*$

Number of params:3

params: {e1,r1,t1}

Out[]=





(Case1: $\phi = \pi / 2; m = 0.2; t_1 = 1; m / t_2 < -3\sqrt{3}$ or $m / t_2 > 3\sqrt{3}$; trivial insulator

Case2: $\phi = \pi / 2; m = 0.2; t_1 = 1; m / t_2 = \pm 3\sqrt{3}$; gapless semimetal

Case3: $\phi = \pi / 2; m = 0.2; t_1 = 1; -3\sqrt{3} < m / t_2 < 3\sqrt{3}$; chern insulator)

In[]:=

(*hop[ham,{e1→0.2,r1→0.05,t1→1},hrExport→NotebookDirectory[]]*)

hop[ham,{e1→0.2,r1→0.05,t1→1}]

Python 程序生成 Wannier90_hr.dat 文件

```
#!/usr/bin/env python
import sys
import os
import numpy as np
from datetime import datetime

"""
Obtain a tight binding Hamiltonian of Haldane model with Wannier90 format

How to run

python haldane_hr_gen.py

This will generate the tight binding hamiltonian Haldane_hr.dat

LATTICE
Angstrom
2.1377110 -1.2342080 0.0000000
0.0000000 2.4684160 0.0000000
0.0000000 0.0000000 10.0000000

ATOM_POSITIONS
2 ! number of atoms for projectors
Direct ! Direct or Cartesian coordinate
C 0.333333 0.666667 0.500000
C 0.666667 0.333333 0.500000

"""

# Define tight-binding parameters
# You can find phase diagram in PRL 61,2015 (1988)
# Chern = 0 生成普通绝缘体的 hr.dat
#m=0.2; phi= np.pi/2.0; t1=1.0; t2=0.0;
```

```

# Gapless phase 生成无能隙的 hr.dat
#m=0.2; phi= np.pi/2.0; t1=1.0; t2=m/3.0/np.sqrt(3);
# Chern = 1 生成陈绝缘体的 hr.dat
#m=0.2; phi= np.pi/2.0; t1=1.0; t2=m/3.0/np.sqrt(3)*2.0;

# maximum dimension for hr matrix
ndim = 2
nrpts = 7
num_patom=2

# hr matrix
norbs = num_patom*1
hmnr= np.zeros((norbs,norbs,nrpts),dtype = np.complex128)

# WS points
irvec    = np.zeros((3,nrpts),dtype = np.int32)

# degeneracy
dege     = np.zeros((nrpts),dtype = np.int32)+1

# complex unit
zi=1j

ir= 0
irvec[0, ir]= 0
irvec[1, ir]= 0
hmnr[0, 0, ir]=  m
hmnr[1, 1, ir]= -m
hmnr[0, 1, ir]=  t1
hmnr[1, 0, ir]=  t1

# 1 0

```

```

ir= ir+1
irvec[0, ir]= 1
irvec[1, ir]= 0
hmnr[0, 0, ir]= (np.cos(phi)-zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[1, 1, ir]= (np.cos(phi)+zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[0, 1, ir]= t1

```

```

# 0 1
ir= ir+1
irvec[0, ir]= 0
irvec[1, ir]= 1
hmnr[0, 0, ir]= (np.cos(phi)-zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[1, 1, ir]= (np.cos(phi)+zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[1, 0, ir]= t1

```

```

# 1 1
ir= ir+1
irvec[0, ir]= 1
irvec[1, ir]= 1
hmnr[0, 0, ir]= (np.cos(phi)+zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[1, 1, ir]= (np.cos(phi)-zi*np.sin(phi)) *t2

```

```

#-1 0
ir= ir+1
irvec[0, ir]=-1
irvec[1, ir]= 0
hmnr[0, 0, ir]= (np.cos(phi)+zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[1, 1, ir]= (np.cos(phi)-zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[1, 0, ir]= t1

```

```

# 0-1
ir= ir+1
irvec[0, ir]= 0

```

```

irvec[1, ir]=-1
hmnr[0, 0, ir]= (np.cos(phi)+zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[1, 1, ir]= (np.cos(phi)-zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[0, 1, ir]= t1

#-1-1
ir= ir+1
irvec[0, ir]=-1
irvec[1, ir]=-1
hmnr[0, 0, ir]= (np.cos(phi)-zi*np.sin(phi)) *t2
hmnr[1, 1, ir]= (np.cos(phi)+zi*np.sin(phi)) *t2


#print "dump hr.dat..."
with open('Haldane_hr.dat','w') as f:
    line="Haldane model with m="+str(m)+", phi="+str(phi/np.pi)+"pi, t1="+str(t1)+",
t2="+str(t2)+"Ref:Physical Review Letters 61, 18(1988)+"\n'
    f.write(line)
    nl = np.int32(np.ceil(nrpts/15.0))
    f.write(str(norbs)+"\n')
    f.write(str(nrpts)+"\n')
    for l in range(nl):
        line="      '+'      '.join([str(np.int32(i)) for i in dege[l*15:(l+1)*15]])
        f.write(line)
        f.write("\n')
    for irpt in range(nrpts):
        rx = irvec[0,irpt];ry = irvec[1,irpt];rz = irvec[2,irpt]
        for jatomorb in range(norbs):
            for iatomorb in range(norbs):
                rp =hmnr[iatomorb,jatomorb,irpt].real
                ip =hmnr[iatomorb,jatomorb,irpt].imag

```

```
line="{:8d} {:8d} {:8d} {:8d} {:8d} {:20.10f} {:20.10f}\n".format(rx,ry,rz,jatomorb+1,iato  
morb+1,rp,ip)  
f.write(line)
```

致谢

在这篇毕业论文的结尾，我要向许多人送上最深切的感谢。首先，我想感谢我的导师，他给予我无微不至的指导和支持，给我提供了无私的帮助和鼓励，使我更加清晰地认识到自己的使命和职业追求。在我探索学术领域的过程中，他不仅教给我这个领域成熟的研究技能和方法，还鼓励我调整自己思考的角度和方法，从不同的角度理解问题和思考解决方案。同时，在论文写作的过程中，导师也帮我纠正自己的思考问题和写作方式，使我的论文更加准确、优雅和具有逻辑性。

此外，我还要感谢我的同学和朋友，因为他们在我的学术生涯中也发挥了重大作用。他们提供了有趣且独特的视角，使我能够更全面地了解问题并提出更好的解决方案。特别是在压力很大的旅程中，他们给予我关心和支持，让我感到生活中始终有人陪伴着我，在我的职业生涯中一路陪伴着我。

最后，我要感谢我的家人。他们的不断支持和关心使我能够专注于我的研究和论文撰写，他们是我不断坚持努力的动力源泉，并且提供了无私的支持和帮助，使我越来越清楚我所要达到的目标和职业追求。

总之，作为一位毕业生，我感到很荣幸能够完成我的毕业论文，并获得了诸多人的支持和帮助。我相信，我的职业追求将会更加充实和完美，因为我们一起拥有一段难忘的经历，也因为这段经历我们将永远铭记在心。