

四川师范大学本科毕业论文

二维晶格紧束缚模型的构建以及相应的材料实现

学生姓名	孙初布
院系名称	物理与电子工程学院
专业名称	物理学
班 级	2019 级 5 班
学 号	2019070530
指导教师	程才
完成时间	2023 年 5 月 20 日

二维晶格紧束缚模型的构建以及相应的材料实现

物理学专业

学生姓名：孙初布

指导教师：程才

摘要：石墨烯(Graphene)的发现引起了理论和实验工作者广泛的关注，生产可用于开发功能材料和器件的二维材料具有重要意义。本文简要回顾了具有狄拉克锥的二维晶格以及相应真实材料实现的最新进展，相当于是对这些内容的一个总结和概述。我们主要围绕不同二维晶格的紧束缚模型、对称性，以及一些拓扑物性，对具有狄拉克锥的材料进行了详尽的阐述。同时，我们也通过第一性原理软件计算了其中的一些材料，比如石墨烯，kagome, penta-NiP₂等，并结合紧束缚模型的软件Magnetic TB，对其进行验证。我们的工作，为未来想要入门学习二维晶格紧束缚模型的同学，提供一定的参考和指导。

关键词：狄拉克锥、二维材料、紧束缚模型、晶格模型

The construction of the two-dimensional lattice tight-binding model and the corresponding material realization

Specialty: Physics

Undergraduate: Chubu Sun **Supervisor:** Cai Cheng

ABSTRACT: The discovery of graphene has attracted the widespread attention of theoretical and experimental workers, and it is of great significance to produce two-dimensional materials that can be used to develop functional materials and devices. This paper briefly reviews the latest progress in the realization of two-dimensional lattices with Dirac cones and the corresponding real materials, which serves as a summary and overview of these contents. We mainly focus on the tight-binding models, symmetry, and some topological properties of different two-dimensional lattices, and have elaborated all the materials with the Dirac cone. In the meantime, we have also calculated some materials (such as graphene, kagome, penta-NiP₂, etc) through first-principles software, and combined them with the tight-binding model software of Magnetic TB to verify and try them. Our work provides a certain reference for classmates who want to get started with these two-dimensional tight-binding model materials in the future.

Keywords: Dirac cones, Two-dimensional materials, Tight-binding model, Lattice models

目 录

摘要.....	I
ABSTRACT.....	I
1.背景介绍.....	1
2.二维狄拉克材料的晶格模型.....	3
2.1 蜂窝晶格.....	3
2.2 Kagome 晶格.....	5
2.3 彩色三角形晶格.....	6
2.4 星型晶格.....	7
2.5 红宝石晶格.....	8
2.6 Lieb 晶格.....	9
2.7 线心蜂窝状晶格.....	11
2.8 开罗晶格.....	13
2.9 棋盘晶格.....	16
2.10 方八边形晶格.....	16
3.真实的二维狄拉克材料.....	17
3.1 蜂窝二维狄拉克材料.....	17
3.2 Kagome 晶格的二维材料.....	19
3.3Lieb 晶格的二维材料.....	20
4.讨论.....	21
5.结论.....	23
参考文献.....	24
附录.....	26
致谢.....	43

二维晶格紧束缚模型的构建以及相应的材料实现

1. 背景介绍

紧束缚近似是能带结构计算的一种经验方法，1928 年，布洛赫提出紧束缚近似的方法。紧束缚近似方法的思想指：电子在一个原子附近时，将主要受到该原子场的作用，而把其它原子势场的作用看作是微扰。由此可以得到电子的原子能级和晶体中能带之间的相互联系^[1]。紧束缚近似能够给出任何类型晶体（金属、半导体和绝缘体）电子占据态的合理描述。

石墨烯是只有一个碳原子厚度的二维材料，它具有优异的光学、电学、力学特性、在材料学、微纳加工、能源、生物医学和药物传递等方面具有重要的应用前景，被认为是一种未来革命性的材料。很长时间以来，科学家们认为单原子层的二维材料是不稳定的。石墨烯从前也被认为是假设性的结构，无法单独稳定存在。直到 2004 年，英国曼彻斯特大学物理学家 Kostva Novose 和 Andre Geim 用机械剥离法，成功地在实验中从石墨中分离出石墨烯，才证实了石墨烯可以单独存在。石墨烯的使用取得了巨大成功，这激发了随后对具有类似电子带结构的二维(2D)材料的广泛研究，该材料具有线性能量-动量色散关系-狄拉克锥。在费米能级附近的电子带结构中具有狄拉克锥的新材料家族出现了。这个家族，被定义为狄拉克材料，在物理学和材料科学中引入了一个新的概念。二维材料中狄拉克锥存在的前提是研究二维狄拉克材料的基础。通常考虑狄拉克锥与原子构型、原子轨道有序和晶格对称的相关性。到目前为止，已经提出了几种晶格模型来确定狄拉克锥的起源。这些模型对理解二维狄拉克锥在电子带结构中的起源及其材料设计和器件应用至关重要。许多无机和有机二维材料也在理论上或实验上被证明是这些模型的真实对应物。狄拉克材料有一个基本的性质：它们的低能量费米子激发表现为无质量的狄拉克粒子，遵循以下狄拉克方程(与 $m = 0$)：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2) |\psi\rangle \quad (1)$$
$$\text{其中, } \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

这些材料与通常服从薛定谔方程的费米子形成鲜明对比。各种奇异的情况伴随着一个不寻常的线性能量-动量色散关系已经被证明。其中包括硅烯、锗烯、 Fe_3Sn_2 和几种有

机材料^[2]，为基础物理的研究和下一代功能器件的开发提供了一个很有前景的平台。然而，尽管在二维材料的合成方面取得了相当大的成就，但在实验中证明的二维狄拉克材料仍然很少。自从石墨烯的发现以来，基于第一性原理计算的理论材料设计作为二维狄拉克材料开发的一种强有力策略，受到了人们越来越广泛的关注，为实验开发提供了有用的指导。

二维狄拉克材料中独特的线性能量-动量色散关系(狄拉克锥)可以用一个有效的哈密顿量来描述：

$$H(k) = (v_{0x}k_x + v_{0y}k_y)\sigma_0 + v_xk_x\sigma_x + v_yk_y\sigma_y \quad (2)$$

其中 k_x 和 k_y 是从狄拉克点开始的波矢； v_{0x} ， v_{0y} ， v_x 和 v_y 是有效速度； σ_0 是一个 2×2 的单位矩阵； σ_x 和 σ_y 代表泡利矩阵。哈密顿量的特征值形成了两个带：

$$E_{\pm}(k) = (v_{0x}k_x + v_{0y}k_y) \pm \sqrt{(v_xk_x)^2 + (v_yk_y)^2} \equiv T(k) \pm U(k) \quad (3)$$

动量空间中狄拉克锥的形状可以通过定义一个倾斜参数来分类，

$$\eta = \sqrt{(v_{0x}/v_x)^2 + (v_{0y}/v_y)^2} \text{， 可分为三种类型：I 型}(\eta < 1) \text{， 类型II}(\eta > 1) \text{ 和类型}$$

III($\eta = 1$)，如图1所示。这三种类型的狄拉克锥表现出不同的费米面轮廓。I型狄拉克锥对于狄拉克点附近的所有波矢 k 都具有 $T(k) < U(k)$ 。相比之下，对于II型狄拉克锥至少有一个 k 满足 $T(k) > U(k)$ 。III型狄拉克锥具有特定方向的 $T(k) = U(k)$ （称为狄拉克线），沿着其它方向 $T(k) < U(k)$ ，从而导致狄拉克锥具有不同的费米面轮廓。I型狄拉克锥的费米面收缩到一个点(狄拉克点)。而II型狄拉克锥的电子和空穴口袋与狄拉克点相交。III型狄拉克锥可以被视为I型和II型狄拉克锥体之间的临界状态。三种类型的狄拉克锥在一种材料中共存可以用于某些特定的应用（例如，作为黑洞视界和霍金辐射的固态模拟^[3]）。

本文总结了典型的二维狄拉克晶格模型和相关实际材料的最新进展。

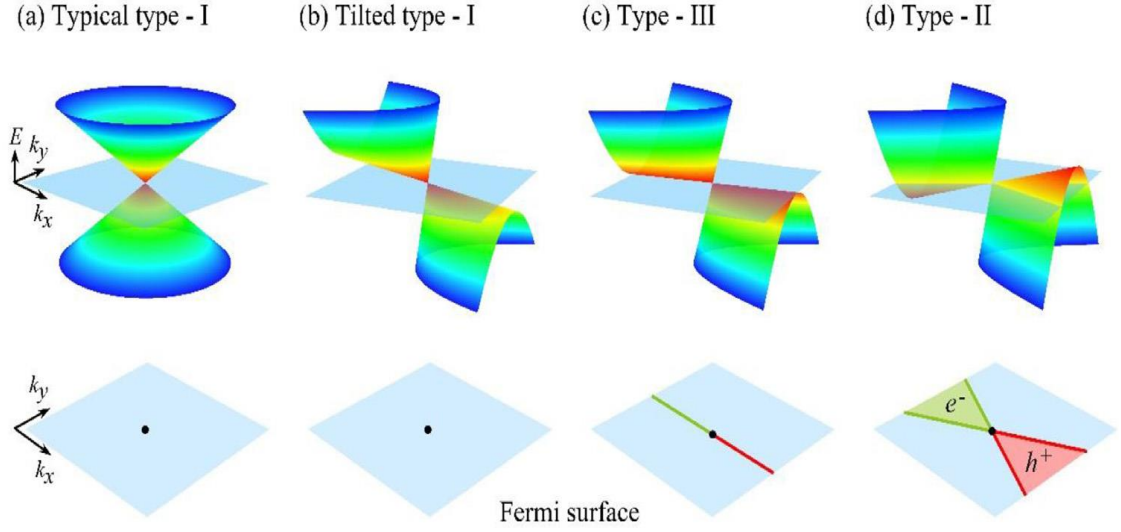


图 1. 在二维动量空间（顶部）和零费米表面（底部）中的三种类型的狄拉克色散的示意图表示 (a) 典型的 I 型狄拉克锥；(b) 倾斜的 I 型狄拉克锥；(c) III 型狄拉克锥；(d) II 型狄拉克锥。浅蓝色的平面对应于零能的平面。黑点表示频带交叉点 (Dirac 点)。(c) 和 (d) 中的绿色/红色实线分别代表 Dirac 线和电子/空穴袋的边界。

2. 二维狄拉克材料的晶格模型

2.1 蜂窝晶格

蜂窝晶格是二维狄拉克材料的第一个晶格模型，已广泛应用于二维狄拉克材料的基本物理场景的研究。例如，它是霍尔丹^[4]和 Kane 和 Mele^[5]中量子反常霍尔效应和量子自旋霍尔效应的代表模型。

传统的蜂窝晶格由规则的六边形组成，形成一个类似于“蜂窝”的轮廓，如图 2 所示^[6]。

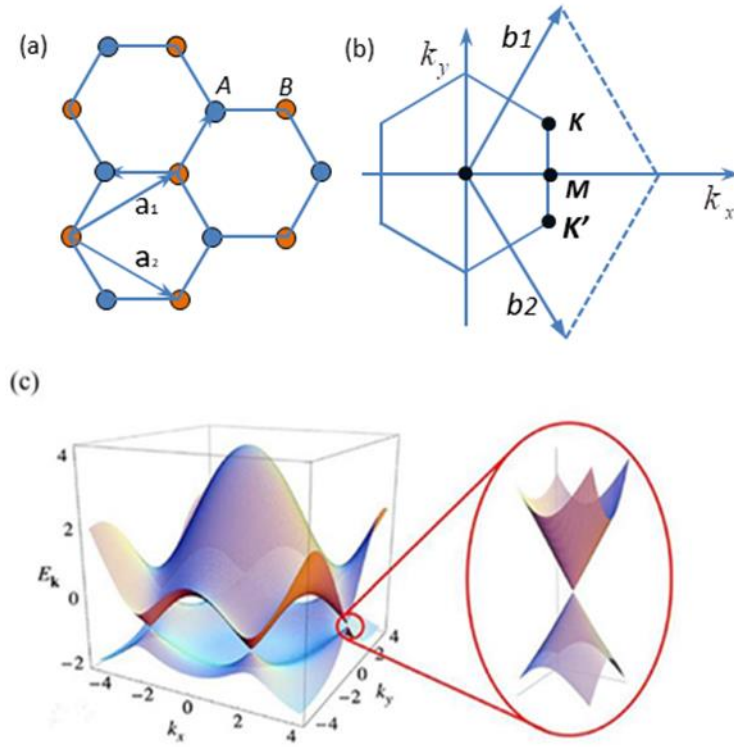


图 2.(a)石墨烯的晶格结构；(b)蜂窝格子的第一个格子区。

(c)石墨烯^[6]在动量空间中的能带结构和狄拉克锥。

每个格点具有三重旋转对称轴。蜂窝晶格包含两套子晶格，每套子晶格构成一个二维六边形布拉伐晶格。不考虑两套子晶格之间的在位能之差（设为零），只考虑近邻(NN)跃迁(t)，无自旋的紧束缚(TB)哈密顿量可以简单地写成：

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + hc) \quad (4)$$

其中 c_i^\dagger 和 c_j 分别属于不同的子晶格的 NN 位点 i 和 j 中的一个电子的产生和湮灭算符。

利用傅里叶变换 $c_i = \sum_k e^{-ik \cdot r_i} c_k$ 和 $c_j = \sum_k e^{-ik \cdot r_j} c_k$ ，将上述哈密顿量在动量空间中变换为以下形式：

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & f(k) \\ f^*(k) & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

其中， $f(k) = e^{-ik_x a} + e^{i(k_y \sqrt{3}/2 + k_x/2)a} + e^{i(k_y \sqrt{3}/2 - k_x/2)a}$ ， a 表示两个相邻格点之间的距离。

从蜂窝晶格的 TB 哈密顿量中，可以得到能量-动量关系：

$$E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3} k_x a) + 4 \cos\left(\frac{1}{2} \sqrt{3} k_x a\right) \cos\left(\frac{3}{2} k_y a\right)} \quad (6)$$

两条能带, $E_+(k)$ 和 $E_-(k)$, 可以被证明在布里渊区顶角: $K_{\frac{2\pi}{3a}}(\sqrt{3}, 1)$ 和 $K'_{\frac{2\pi}{3a}}(\sqrt{3}, -1)$

是接触的。

在 K 和 K' 附近, 进行泰勒展开:

$$H(k) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F \sigma \cdot k \quad (7)$$

其中费米速度是由 $v_F = \sqrt{3}at / 2\hbar$, k 表示从 K 和 K' 开始的波矢。上述有效哈密顿量与无质量狄拉克方程相同; 由此可以得到, 一个线性的能量-动量色散关系, $E(k) = \hbar v_F |k|$ 。

值得注意的是, 在蜂窝晶格的 TB 哈密顿量中, 忽略了两个子晶格之间的在位能之差。否则, 这两个能带不接触, 即狄拉克锥是打开的。

带隙可以简单地被证明为等于两个子晶格之间的在位能之差, 而 K 和 K' 点附近的两个带呈现抛物线分布。这对应于二维 BN 单分子层的情况。考虑在蜂窝状晶格中跃迁的方向依赖性(表示为 t_a, t_b 和 t_c), 当跃迁参数满足条件 $|t_a - t_b| \leq |t_c| \leq |t_a + t_b|$ 时, 狄拉克锥保持不变。将自旋轨道耦合(SOC) 加入到蜂窝晶格模型中, 在狄拉克点上产生了一个带隙, 这已被证明是拓扑非平庸的。SOC 诱导的带隙的大小取决于 SOC 的强度。对于石墨烯, 其 SOC 强度极其微小, 可以忽略上述问题。

2.2 Kagome 晶格

用共享三角形替换蜂窝晶格的位置, 得到了 Kagome 晶格, 如图 3 所示。该模型的名称源于它与 kagome(竹笼或篮子)模式的相似性。Kagome 晶格的单位细胞包含三个格点。

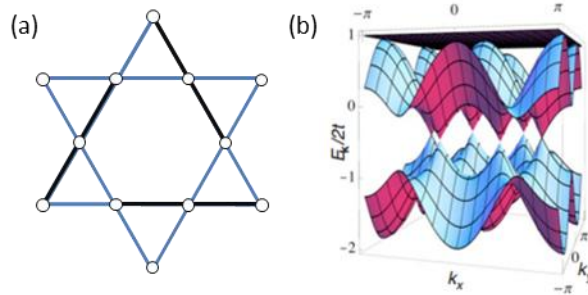


图 3.(a)Kagome 晶格的结构^[7] (b)TB 电子能带结构 (不含 SOC)。

用类似于处理蜂窝晶格的策略, 忽略在位能之间的差异, 只考虑最近邻格点之间的跃迁(t), 可得到 Kagome 晶格^[7]的 TB 哈密顿量:

$$H(k) = -2t \begin{pmatrix} 0 & \cos \alpha_1 & \cos \alpha_2 \\ \cos \alpha_1 & 0 & \cos \alpha_3 \\ \cos \alpha_2 & \cos \alpha_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

其中, $\alpha_n = k \cdot a_n$, $\alpha_2 = (1/2, \sqrt{3}/2)a$, $\alpha_1 = (1, 0)a$, 是 kagome 晶格的基矢, 而 $\alpha_3 = \alpha_1 - \alpha_2$ 。这个哈密顿量得到了以下三条能带:

$$E_1(k) = 2t$$

$$E_{2,3}(k) = -t \left(1 \pm \sqrt{4(\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \alpha_2 + \cos^2 \alpha_3) - 3} \right) \quad (9)$$

两条色散能带 $E_1(k)$ 和 $E_3(k)$ 在布里渊区的顶角 $K_{\frac{2\pi}{3a}}(1, 0)$ 和 $K'_{\frac{2\pi}{3a}}(-1, 0)$ 处接触。它们在 K 和 K' 时表现出线性能量-动量色散关系。

类似于蜂窝状晶格, Kagome 晶格的费米速度为: $v_F = \sqrt{3}at / 2\hbar$ 。除了两个色散能带 (表示为 Dirac 带) 外, 还有一个平带独立于电子波矢而存在。这个平带退化, 而其中一个狄拉克带, $E_2(k)$ 位于布里渊区 (Γ) 的中心。该平带中电子的动能显著湮灭, 电子-电子相互作用被显著增强, 引发了一些电子-电子之间强关联效应等有趣的物理特征。

SOC 可表示如下:

$$H_{so} = i \frac{2\lambda}{\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_{\alpha\beta}} (d_{ij}^1 \times d_{ij}^2) \cdot \sigma_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^+ c_{j\beta} \quad (10)$$

其中, λ 为 SOC 强度; $d_{i,j}^{1,2}$ 表示两个相邻邻居 i 和 j 之间的神经网络向量; σ 是泡利矩阵。当我们考虑了上述的 SOC 形式, $\Delta_{soc} = 4\sqrt{3}|\lambda|$ 在狄拉克点^[7]处打开能隙。在 Γ 点的平带和其中一个狄拉克带之间也产生了一个能隙。这些能隙在拓扑上是非平庸的, 并伴随着受拓扑保护的手性边缘态, 可用于实现 QSHE 或 QAHE。

拓扑平带和狄拉克带的共存使得 Kagome 晶格成为对一些基本物理现象研究中最有趣的晶格模型之一, 如分数量子霍尔效应^[8]和高 T_c 超导。具有 d 电子的 Kagome 晶格的自旋阻挫导致量子自旋液体相。

2.3 彩色三角晶格

鉴于真正的 Kagome 晶格材料的稀缺性, 人们试图使用类似 Kagome 晶格的带结构来寻找比 Kagome 晶格对称性更低的替代晶格模型。因此, 彩色三角 (CT) 晶格出现了^[9]。CT 晶格的对称性 (平面群 $P3_1m$) 比 $P6mm$ 对称的 kagome 晶格要低。通过用不

同的颜色填充三角形，可以将它的几何形状映射到三角形瓷砖上，如图 4 所示^[10]。

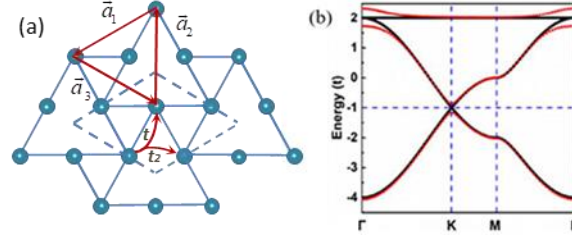


图 4.(a)CT 晶格的晶格结构。(b)不含 SOC（黑色）和

含 SOC（红色）的 CT 晶格的能带与 Kagome 的能带^[10]相同。

从物理上讲，这意味着一个三角晶格是通过选择性地阻碍在一个三角形晶格的 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 超晶胞中的一些最近邻跃迁（NN）而被改进的。使用类似于上述方法的 TB 方法，CT 晶格在动量空间中的 TB 哈密顿量可以表示为：

$$H(k) = t \begin{pmatrix} 0 & e^{ik \cdot (v_1 - v_3)/3} + e^{ik \cdot (v_3 - v_2)/3} & e^{-ik \cdot (v_3 - v_2)/3} + e^{-ik \cdot (v_2 - v_1)/3} \\ e^{-ik \cdot (v_1 - v_3)/3} + e^{-ik \cdot (v_3 - v_2)/3} & 0 & e^{ik \cdot (v_2 - v_1)/3} + e^{ik \cdot (v_1 - v_3)/3} \\ e^{ik \cdot (v_3 - v_2)/3} + e^{ik \cdot (v_2 - v_1)/3} & e^{-ik \cdot (v_2 - v_1)/3} + e^{-ik \cdot (v_1 - v_3)/3} & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

在这里， $(v_1 + v_2 + v_3) = 0$ ， v_1 和 v_2 是相应的 Kagome 晶格的基矢。利用以下幺正变换

矩阵，可以证明 CT 晶格的 TB 哈密顿量可转换为与 Kagome 晶格相同的形式：

$$U = \begin{pmatrix} e^{-ik \cdot v_1/6} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik \cdot v_2/6} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-ik \cdot v_3/6} \end{pmatrix} \quad (12)$$

上述方法暗示了 kagome 和 CT 晶格之间的几何操作，通过将三格点单元格内的两个三角形相对于它们的中心旋转 30° 角。因此，即使 CT 晶格与 kagome 晶格对称性不同，二者也具有相同的能带结构。

$\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{N}_2\text{H}_4)_3$ 的创建，代表着 CT 晶格模型的实现。一种金属有机框架（MOF），已被预测为一个具有 QAHE 的拓扑绝缘体。

2.4 星型晶格

星型晶格和 kagome 星格的区别在于前者中的三角形不表现出角共享，而是形成了一个由三角形和十二边形组成的晶格，如图 5 所示^[11]。

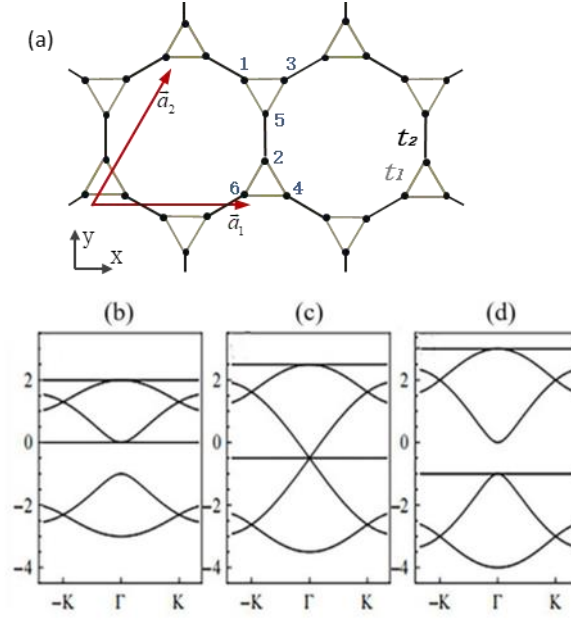


图5.(a)星型晶格的晶格结构。(b) $t_2 = t_1$, (c) $t_2 = \frac{3}{2}t_1$, (d) $t_2 = 2t_1$ ^[11]的紧束缚哈密顿量的能带结构

星型晶格可以看作是在两个晶格之间插入的蜂窝、kagome星格的“表亲”。星型晶格中每个单元格的配位数为6，是蜂窝晶格的3倍，kagome的2倍；每个格点是三倍协调的。星型晶格中最近邻格点位置之间的跃迁参数可以分为三角形内(t_1)和三角形外(t_2)。6×6哈密顿矩阵在动量空间中的对角化产生6条能带，如下：

$$\begin{aligned}
 E_{1,2}(k) &= -\frac{1}{2} \left(t_1 \pm \sqrt{9t_1^2 + 4t_2^2 + 4t_1t_2 f(k)} \right) \\
 E_{1,2}(k) &= -\frac{1}{2} \left(t_1 \pm \sqrt{9t_1^2 + 4t_2^2 - 4t_1t_2 f(k)} \right) \\
 E_{5,6}(k) &= t_1 \pm t_2
 \end{aligned} \tag{13}$$

其中， $f(k) = \sqrt{3 + 2\cos k_1 + 2\cos k_2 + 2\cos(k_1 - k_2)}$ ，

$$k_n = k \cdot a_n, a_1 = (a, 0), a_2 = \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}a \right) \quad (a \text{ 是单位单元格长度}).$$

星型晶格的电子能带结构显示出接近蜂窝状晶格和 kagome 晶格之间的紧密连接。当 $t_2 < 3t_1 / 2$ 时，低能带呈现蜂窝状晶格特性，而在 $t_2 > 3t_1 / 2$ 时，这些带显示 kagome 晶格特征。在临界点， $t_2 = 3t_1 / 2$ 两条能带的带隙消失^[11]。与蜂窝晶格和 kagome 晶格的情况类似，SOC 的加入也导致拓扑非平庸带隙以及拓扑电子态。

2.5 红宝石晶格

红宝石晶格具有不同于kagome晶格和星型晶格的三角形排列模式，如图6所示。红宝石晶格中的三角形以边对边的方式排列，构成了一个由三角形、矩形和六边形组成的

框架。使用与星型晶格相同的TB策略，可以从 K 和 K' 点的低能和高能区域推导出具有两个狄拉克锥的6条带。与星型晶格的情况不同，六个带在红宝石晶格的动量空间中沒有解析表达式。值得注意的是，红宝石晶格在 Γ - M 方向上有两条平坦的能带。通过在哈密顿量中加入SOC项，还可研究红宝石晶格的电子性质的拓扑方面。

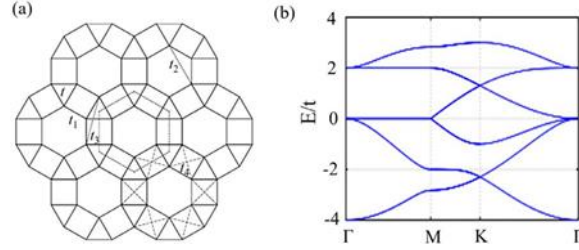


图6.(a)Ruby晶格的构型，并指出了TB模型中相关的电子跃迁。(b)Ruby晶格的TB电子能带结构。

满足红宝石晶格的原子排列在实际材料中是罕见的。然而，由s-三嗪组成的一种类石墨烯的氮化碳材料($g\text{-C}_6\text{N}_6$)，表现出Kohn-Sham波函数分布的红宝石晶格特征。由 $N_{p_{x,y}}$ 轨道贡献的最接近费米能级的四个价带也可以用红宝石晶格的TB哈密顿量来很好地再现。因此， $g\text{-C}_6\text{N}_6$ 可以作为红宝石晶格的真实材料。

红宝石晶格和星型晶格之间的相似性让人联想到两者之间的中间区域。每个红宝石晶格的三角形 90° 旋转产生一个星型晶格；因此，在中间区域存在扭曲的红宝石（或星形的）晶格。提出了两种典型的带有狄拉克锥的扭曲红宝石晶格（i-Ruby和m-Ruby）。这些结构是由红宝石晶格的相邻三角形的同步/反同步旋转构成的。这证明了在i-Ruby和m-Ruby格中规则ruby格的狄拉克锥的保留，这可以归因于这两个晶格的哈密顿量之间的么正变换。

2.6 Lieb晶格

Lieb晶格是一个线中心的方形晶格，如图7所示^[12]。每个原胞包含一个四重旋转位点和二重旋转位点。忽略在位能之差，只考虑最近邻跃迁(t)，可以在动量空间中得到 3×3 TB的哈密顿量^[12]：

$$H(k) = -2t \begin{pmatrix} 0 & \cos k_x a & \cos k_y a \\ \cos k_x a & 0 & 0 \\ \cos k_y a & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (14)$$

其中 a 是晶格常数。

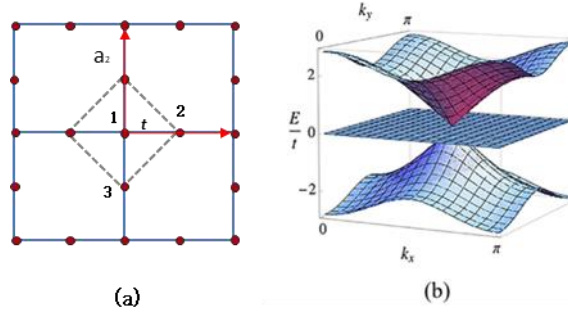


图7. (a) Lieb的晶格构型。原胞中的位点用编号标记。(b) Lieb晶格的TB电子能带结构。

Lieb晶格的能谱由两条色散带和一个平带构成：

$$\begin{aligned} E_{1,2}(k) &= \pm 2t \sqrt{\cos^2(k_x a) + \cos^2(k_y a)} \\ E_3(k) &= 0 \end{aligned} \quad (15)$$

两个色散能带在布里渊区角(M)的一个点(Dirac点)接触，形成一个狄拉克锥，而平带穿过狄拉克锥，如图7所示；狄拉克点的电子态是三重简并(如果考虑自旋，则是六重简并)。如果涉及到SOC，狄拉克锥就会出现带隙；这是Lieb晶格在拓扑方面的响应。

在Lieb格和kagome晶格之间也存在一个中间区域，当Lieb格被扭曲时产生kagome晶格，*i.e.*，这两个基矢之间的夹角被修改为90°。利用TB方法^[13]研究了外部应变作用下Lieb和kagome晶格沿对角线方向的互转换性。发现具有结构畸变的三重简并M点沿着Γ-M和M-KK'分裂成两个双简并狄拉克点。有趣的是，过渡态拥有两种类型的Dirac点(类型I和类型II)。此外，在 $\theta = 7\pi/12$ 的一个临界点(θ 是两个基矢之间的夹角)，平带消失。Lieb晶格和Kagome晶格中的平带的存在是由于晶格对称引起的布洛赫波函数的相位抵消。然而，这种微妙的条件被晶格畸变所破坏，它打破了平带所需的对称性。因为能带色散可以通过改变畸变、 θ 和电子跃迁参数来调整，通过拉伸kagome或Lieb晶格可实现I型和II型狄拉克锥之间的转变，如图8所示。

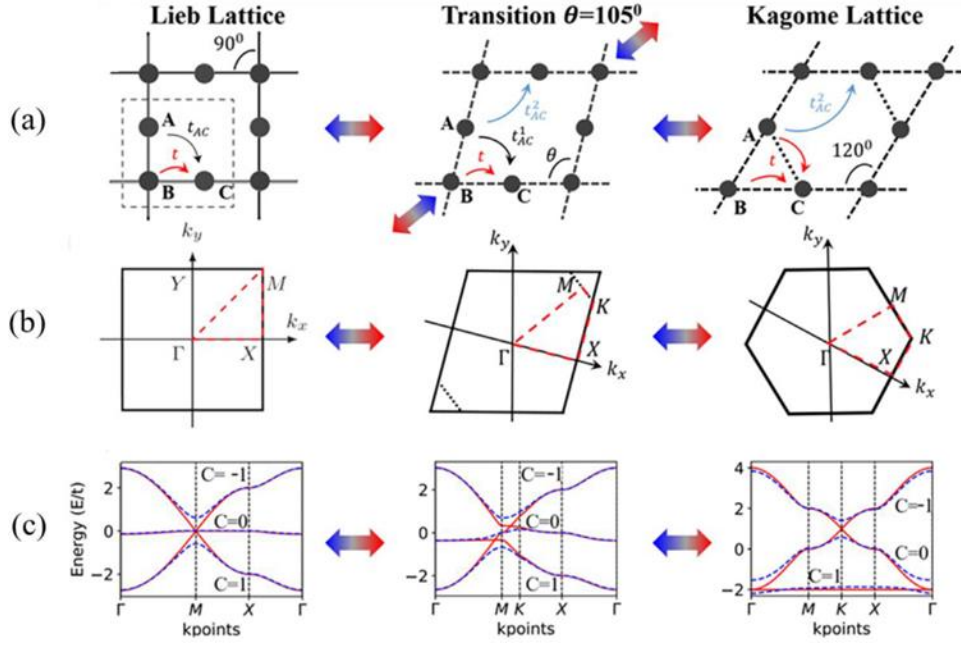


图8. Lieb和Kagome晶格之间的转变：(a) 紧束缚模型，(b) 布里渊区，
(c) Lieb晶格，过渡态和Kagome晶格的能谱。

2.7 线心蜂窝状晶格

通过在蜂窝状晶格的六边形的中间点添加一个位置，可以创建一个以线为中心的蜂窝(LCH)晶格，如图9所示^[14]。增加的两个协调位点构成了一个kagome子晶格。因此，LCH晶格也可以看作由蜂窝状晶格和kagome晶格的杂化而构成。LCH晶格的TB哈密顿量可以写成：

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & V_1 & V_2 & V_3 \\ 0 & 0 & V_1^* & V_2^* & V_3^* \\ V_1^* & V_1 & \varepsilon & 0 & 0 \\ V_2^* & V_2 & 0 & \varepsilon & 0 \\ V_3^* & V_3 & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \quad (16)$$

其中， $V_1 = -te^{i(k_x\sqrt{3}a+k_ya)/2}$ ； $V_2 = -te^{i(k_x\sqrt{3}a-k_ya)/2}$ ；和 $V_3 = -te^{-ik_ya}$ 。

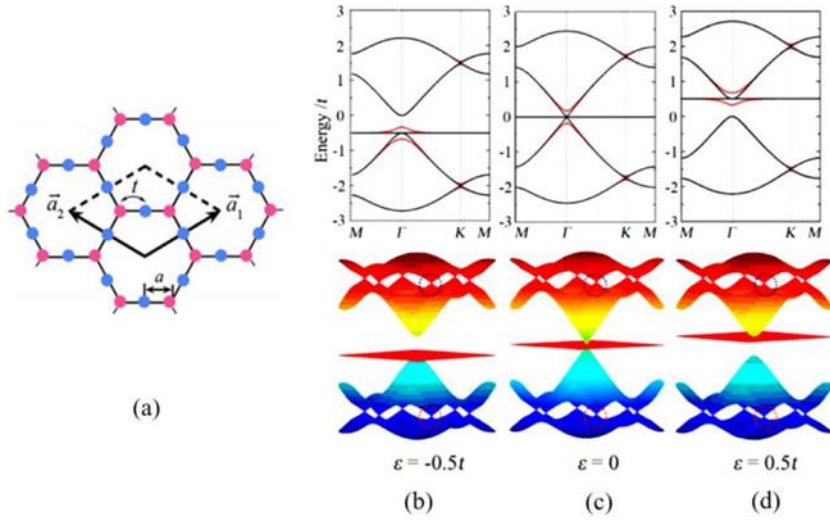


图9. (a) LCH晶格的构型。(b)–(d) 具有不同TB参数的LCH晶格

模型的TB电子能带结构。黑色和红色的线表示不带和带SOC的能带。

上述的 TB 哈密顿量产生一条平带和四条色散能带：

$$\begin{aligned}
 E_1(k) &= \varepsilon \\
 E_{2,3}(k) &= \frac{1}{2} \times \left(\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 + 4t^2(3 - f(k))} \right) \\
 E_{4,5}(k) &= \frac{1}{2} \times \left(\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 + 4t^2(3 + f(k))} \right)
 \end{aligned} \tag{17}$$

a 是顶点和中间点之间的距离； t 是两个相邻位置之间的电子跃迁； ε 是 kagome (中间点)和蜂窝(顶点)子晶格之间的在位能之差。

其中， $f(k) = \sqrt{3 + 2\cos(2\sqrt{3}k_x a) + 4\cos(\sqrt{3}k_x a)\cos(3k_y a)}$ 。四条色散能带(记为狄拉克带)在布里渊区(K 和 K')的处形成两个具有不同能量的狄拉克锥；这些情况与蜂窝晶格和 kagome 晶格的情况类似。高能和低能量 Dirac 能带相对于平带的排列可以通过改变在位能之差(ε)来调控，反映了蜂窝和 kagome 子晶格之间的电子转移。对于 $\varepsilon < 0$ ，平带接触到 Γ 点处的一个低能狄拉克带，并与高能狄拉克带分开一个间隙 $|\varepsilon|$ 。对于情况 $\varepsilon > 0$ ，频带对齐是相反的。在临界点 $\varepsilon = 0$ 处， Γ 点处的带隙消失，出现了一个新的狄拉克锥。平带与新的狄拉克锥在狄拉克点相交，使狄拉克点上的状态三重退化(不考虑电子自旋)。这种独特的能带对齐可实现二维无质量 Kane 费米子，一种新的相对论性准粒子。

碳原子的LCH晶格是不稳定的，因为在边缘的中点有两个配位的碳原子。然而，Wang等人的理论工作^[12]，证明了已经合成的二维MOF镍单层的电子带结构具有LCH晶格的特征。在这个二维MOF中，不同的官能团作为LCH位点。

更有趣的是，不同官能团之间的电子转移（由 LCH 晶格中的在位能之差(ε)描述）

可以通过施加外部应变来调节。LCH 晶格模型预测的临界点 $\varepsilon = 0$ 可以在应变二维 MOF 中实现，为研究二维材料中的狄拉克和 Kane 费米子提供了一个很有前景的平台。

2.8 开罗晶格

根据本研究开始时提出的分类，上述晶格模型中的狄拉克锥都是 I 型狄拉克锥。承载其他两种类型的狄拉克锥(II型和III型)的晶格模型是罕见的。一个例外的例子是由 Shao 等人提出的一个模型，即开罗晶格^[3]。二维开罗晶格是由 15 个已知五边形的 4 型平铺到单面体平面的特殊情况生成的。在这种平铺模式中，五角形的内角分别为 135° 、 135° 、 90° 、 $90^\circ + 2\theta$ 和 90° 。一个原始单元中六个位置的笛卡尔坐标 $(0,0)$ ， $(\alpha + \beta, \alpha + \beta)$ ， $(\beta, -\alpha)$ ， $(-\alpha, -\beta)$ ， $(-\beta, \alpha)$ ，和 (α, β) 。

其中， $\alpha = \sin \theta$ 且 $\beta = \cos \theta$ (θ 表示晶格基矢和侧边连接的三、四重顶点之间的夹角)。

开罗晶格是一个正方形的布拉伐晶格，其中基矢的长度为 $a = 2a_0(\alpha + \beta)$ 。开罗晶格的对称性与 θ 无关。开罗的晶格结构如图 10 所示。

基于开罗晶格构造了二重简并 d_π 和 p_z 轨道的 π 共轭二维晶格。 d_{xz} 和 d_{yz} 轨道可以基于开罗晶格来构造。这是通过在四配位顶点放置两个正交 d_{xz} 和 d_{yz} 原子轨道(d_π)，和在一个 p_z 原子轨道放置三配位点(ε 表示 d_π 和 p_z 轨道之间的在位能之差)来实现的。包括两个 NN 位点之间(p - d 和 p - p 跳跃的振幅分别为 t_1 和 t_2)和两个最近邻(NNN)位点之间的电子跃迁。这种方法得到了开罗晶格^[15]的 TB 哈密顿量:

$$H = \begin{pmatrix} H_{dd} & H_{dp} \\ H_{dp}^* & H_{pp} \end{pmatrix} \quad (18)$$

其中，

$$\begin{aligned}
H_{dd} &= \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \\
H_{dp} &= -t_0 \begin{pmatrix} -\beta S_{15} & \alpha S_{16} & \beta S_{15}^* & -\alpha S_{11}^* \\ \alpha S_{15} & \beta S_{16} & -\alpha S_{15}^* & -\beta S_{16}^* \\ \alpha S_{35} & -\beta S_{36} & -\alpha S_{35}^* & \beta S_{36}^* \\ -\beta S_{35} & -\alpha S_{36} & \beta S_{35}^* & \alpha S_{36}^* \end{pmatrix} \\
H_{pp} &= -t_0 \begin{pmatrix} 0 & \gamma' S_{56} & \gamma S_{57} & \gamma' S_{58} \\ \gamma' S_{56}^* & 0 & \gamma' S_{58} & \gamma S_{68} \\ \gamma S_{57}^* & \gamma' S_{58}^* & 0 & \gamma' S_{56}^* \\ \gamma' S_{58}^* & \gamma S_{68}^* & \gamma' S_{56} & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{19}$$

$$\begin{aligned}
S_{15} &= e^{i(x_2 - y_1)}; S_{16} = e^{-i(x_1 + y_2)}; S_{35} = e^{-i(x_1 - y_2)}; S_{36} = e^{i(x_2 + y_1)}; S_{36} = 2 \cos(x_1 + x_2) e^{i(y_1 - y_2)}; \\
S_{57} &= e^{2i(x_1 + y_1)}; S_{58} = 2 \cos(y_1 + y_2) e^{i(x_1 - x_2)}; S_{68} = e^{2i(x_1 - y_1)}; x_1 = \alpha k_x; x_2 = \beta k_y; y_1 = \alpha k_y; y_2 = \beta k_x.
\end{aligned}$$

此外，以下设置: $a_0 = 1.0, V_{dp\pi} = -t_0, t_2 = -\gamma' t_0$ 。哈密顿量产生8个从1到8能量增加的能带。由于不同 θ 值的哈密顿量之间是属于么正变换的。

上述TB哈密顿量提供了许多从半导体到金属的电子结构相图。虽然整个动量空间的能谱没有解析表达式，但狄拉克锥可以从高度对称点的能量中得到。例如，在K点处，能带6和能带7的能量为：

$$\begin{aligned}
E_6^K &= \frac{1}{2} \left(\varepsilon - \gamma t_0 + \sqrt{(\varepsilon + \gamma t_0)^2 + 16 t_0^2} \right) \\
E_7^K &= \gamma t_0
\end{aligned} \tag{20}$$

因此，此时，两个频带之间的间隙是：

$$\Delta_K = \frac{1}{2} \left(3\gamma t_0 - \varepsilon - \sqrt{(\varepsilon + \gamma t_0)^2 + 16 t_0^2} \right) \tag{21}$$

如果 $\Delta_K < 0$ ，则能带6和7产生一个狄拉克锥。

开罗晶格中倾斜的狄拉克锥可以通过调整TB参数来调节。考虑 $\gamma = 1.2$ 作为一个例子。通过修改 ε 和 γ' ，可以产生三种类型的狄拉克锥，如图10所示。三种类型狄拉克锥在一个晶格模型中的共存为研究二维狄拉克材料中的奇异物理场景提供了机会，其中不同类型的狄拉克锥之间的耦合占据主导地位。

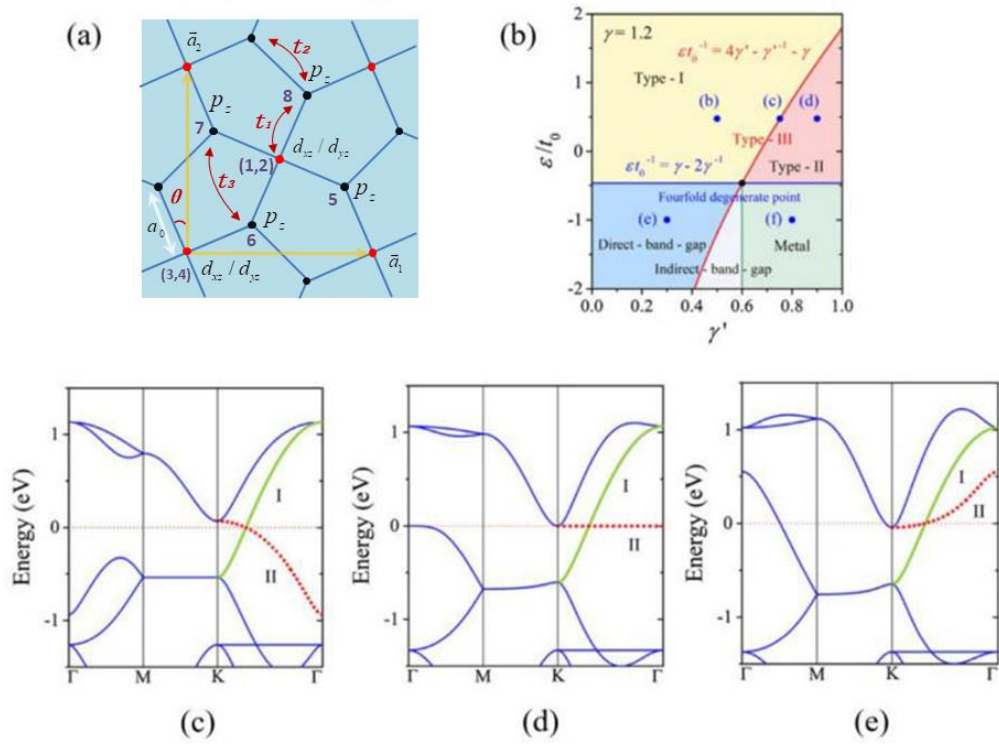


图10.(a)开罗晶格的晶格结构。(b)开罗晶格在 $\gamma = 1.2$ 处的相图，具有不同紧密

结合参数的能带结构，得到(c)I型、(d)typeII和(e)III型Dirac锥^[2]。

通过第一性原理计算，开罗晶格中的狄拉克锥，已经在许多penta-MX₂单分子层中被证实(如penta-NiAs₂、penta-NiSb₂、penta-PdN₂、penta-PtAs₂、penta-PtSb₂、penta-NiP₂^[15])。最近，Wang等人,也报道了一个MOF版本的开罗晶格(Fe₂(TCNQ)₂)具有自旋极化狄拉克锥和拓扑非平庸的电子态，可以实现QAHE。

例如，在图11中,第一性原理密度泛函理论(DFT)的计算证明了在penta-NiP₂和penta-NiSb₂单分子层中存在一个狄拉克锥，这与上述TB模型一致。更有趣的是，邵等人^[3]预测，在外部双轴应变的调控下，可以在实现多个狄拉克锥和Lifshitz相变。由于三种类型的狄拉克锥共存，penta-NiSb₂是一种很有前景的二维费米子模拟物，可用与模拟高霍金温度下的黑洞视界消失。

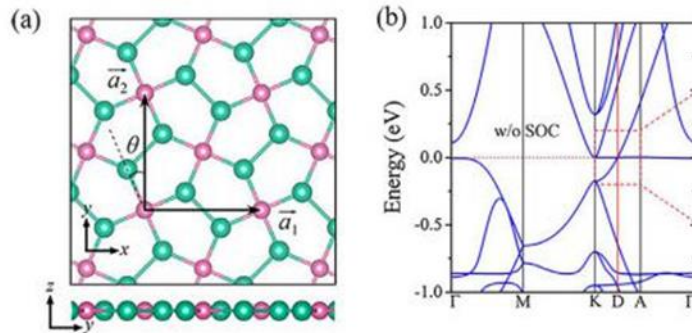


图11.(a) Penta-NiP₂单分子层晶体结构的顶部和侧视图 (b)由DFT-PBE方法得到Penta-NiP₂的能带^[15]。

2.9 棋盘晶格

2011年, Sun等人^[8]提出了一个具有两个子晶格的二维晶格模型, 称为棋盘晶格, 如图12(a)所示。在这种情况下, 有NN、NNN和次次近邻(NNNN)跃迁, 分别是NN(t)、NNN(t'_1, t'_2), 并分别考虑NNNN(t'')。

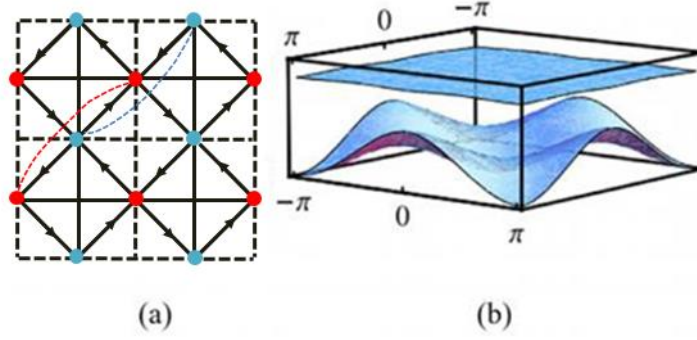


图12. (a) 棋盘晶格模型 (b) 能带色散谱^[14]

可以在动量空间中用紧束缚模型构建哈密顿量, 如下:

$$\begin{aligned}
 H(k) = & \left[(t'_1 + t'_2)(\cos k_x + \cos k_y) + 4t'' \cos k_x \cos k_y \right] I \\
 & + 4t \cos \phi \left(\cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} \right) \sigma_x + 4t \sin \phi \left(\sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2} \right) \sigma_y \\
 & + (t'_1 - t'_2)(\cos k_x - \cos k_y) \sigma_z
 \end{aligned} \quad (22)$$

其中跃迁允许携带一个非零的复相位($\pm\phi$), 以及 I 和 $\sigma_{x,y,z}$ 分别为单位阵和泡利矩阵。

当 $\phi = 0$ 或 $n\pi$ 时, 保持时间反转对称性; 因此, 两条能带在布里渊区角落处交叉, 当 $\phi \neq n\pi$ 时, 两条能带之间有一个带隙。在该模型中, 通过修改跃迁数值, 可得到一个平带。当 $t = 1, t'_1 = -t'_2 = 1 / (2 + \sqrt{2}), t'' = 1 / (2 + 2\sqrt{2})$, 且 $\phi = \pi / 4$ 时, 顶部的带变得极度平坦, 如图 12(b)所示。

2.10 方八边形晶格

在正方形-八边形晶格中^[16], 正方形以“顶点”的方式对齐, 形成二维正方形晶格, 如图13(a)所示。正方形的边缘和连接它们的边缘形成了大的八边形晶格。

在构造TB哈密顿量时所采用的NN间的电子跃迁参数可以分为正方形内(t_1)和正方形间(t_2)。在不考虑SOC的情况下, TB哈密顿量可以证明在 Γ 和M点产生狄拉克锥,

如 $t_1=t_2$ 。另一条带沿 Γ -X/M-X方向没有色散，但沿 Γ -M方向有色散的带，在狄拉克点处狄拉克锥交叉。SOC在TB哈密顿量中的参与会导致有趣的拓扑性质。

在 $t_1=t_2$ 和 $\lambda = 0.5t_1$ (表示 SOC 强度)的特殊情况下，Dirac 锥被保留，但迁移到 Γ 和M之间的区域。

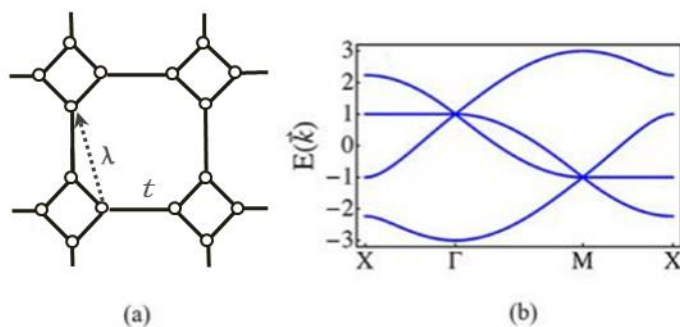


图13. (a) 方八边形晶格结构 (b) 方八边形晶格的能谱

Li等人首次提出^[17],正方形八边形晶格的候选材料包括单层MoS₂同素异形体，他们由第一性原理计算表明，这个二维同素异形体既可以无质量的狄拉克费米子，也可以是重费米子，如图14所示。

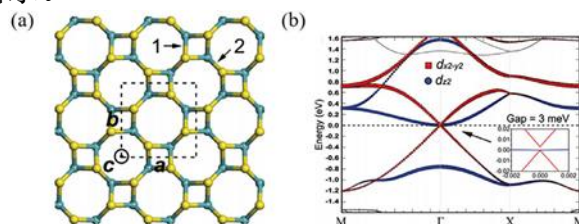


图 14. (a) so-MoS₂ 的俯视图 (b) 由第一性原理计算得到的 so-MoS₂ 的能带结构^[17]。

3. 真实的二维狄拉克材料

3.1 蜂窝二维狄拉克材料

鉴于石墨烯的应用相当成功，寻找其它具有蜂窝晶格的材料已成为研究的重点。首先考虑的是与碳元素为同一主轴的硅和锗。第一性原理计算表明，硅和锗都可以构成稳定的低翘曲蜂窝晶格（硅和锗）^[2]。硅烯和锗烯的原子结构和能带结构如图 15 所示。与石墨烯相比，硅烯和锗烯的键长增大，削弱了 $\pi-\pi$ 相互作用，导致 σ 和 π 键明显耦合形成翘曲结构。然而，由于Si和Ge的 sp^3 杂化能力，硅烯和锗烯并不如石墨烯那样稳定。迄今为止，硅和锗已经在衬底物上生长，如h-BN，氢钝化Si(111)表面，单层的Al₂O₃，Ag(111)表面，MoS₂，石墨烯，CaGe₂(通过拓扑化学去插层)，Al(111)表面。硅烯(或锗烯)和它的衬底之间的相互作用会破坏狄拉克锥。目前为止，自由的硅烯和锗烯的合成仍然

是一个挑战。此外，还从理论上证明了产生 Sn 蜂窝晶格的合理性。随后，它们可以通过外延生长技术在衬底上生长。

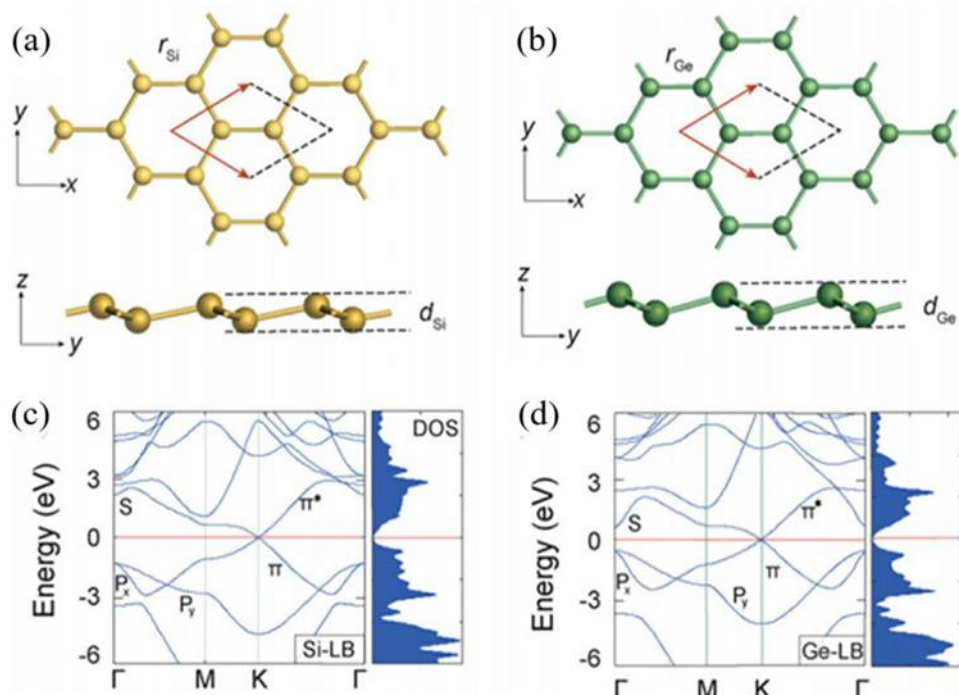


图 15. (a,c) 硅烯的原子结构和能带结构 (b,d) 锗烯的原子结构和能带结构^[1]。

除 IV 族元素外，平面硼的同素异形体($x-h_n$)，金属碳化物 M_3C_2 与 $M=Be, Hg, Cd$ 和 $Zn, Na_2C, Zn_3Si_2, WB_4, g-SiC_3, FeB_2, XSi_3$ ($X=B, C, N, Al$ 和 P), YN_2 和 MX ($M=Be, Mg, Zn$ 和 Cd ; $X=Cl, Br$ 和 I) 也被预测具有 $p-p$ 和 $p-d$ 相互作用产生的 Dirac 锥。第六族元素的蜂窝晶格被预测为半导体；然而，它通过全卤化转化为二维狄拉克材料。在一些单层三元化合物中也可以预测，如 ABX_6 ($A=F, Cl, Br$ 和 I ; $B=P, As$ 和 Sb ; $X=C, Si, Ge$ 和 Sn) 和 HAB_6 ($A=N, P, As, Sb$ 和 Bi ; $B=C, Si, Ge$ 和 Sn)。然而，二维狄拉克材料的合成尚未见报道。实现的二维 Dirac 材料包括类石墨烯 Bi-Rh 片的 $Bi_{14}Rh_3I_9$ 和 BeN_4 多态， BeN_4 本体材料已在实验中合成。

共价有机框架(COFs)和二维 MOFs 具有不同的原子结构和灵活的电子性质；其中，有许多 Dirac 材料。例如 $M_2(C_6H_4)_3MOFs$ 与 $M=Bi/Pb/Pd, In, Tl, Mn, Fe/V$, 和 $Ni_2C_{24}S_6H_{12}$ 以及已经合成的 $Ni_3(HITP)_2MOF$ 和 P^2TANG COF 共价有机框架。上述内容丰富了二维狄拉克材料的数据库。

蜂窝状晶格的独特电子性质也可以在人工晶格结构中进行模拟。有不同的方法可以构建这些人工蜂窝系统。这些技术包括(i)超高迁移率二维电子气体的纳米标记，(ii)扫描探针针对金属表面蜂窝晶格的分子组装，(iii)捕获蜂窝光学晶格中的超低温费米子和玻色子原子，以及(iv)限制蜂窝光子晶体中的光子。

3.2 Kagome晶格的二维材料

金属原子更喜欢在材料中形成 Kagome 子晶格。例如，在最近的实验中已经合成了具有 Kagome 特征结构的 Fe_3Sn_2 、 CoSn 和 FeSn ，如图 16 所示。它们也被角分辨光电子能谱和能带结构计算证明为是无质量的狄拉克费米子和拓扑平带。

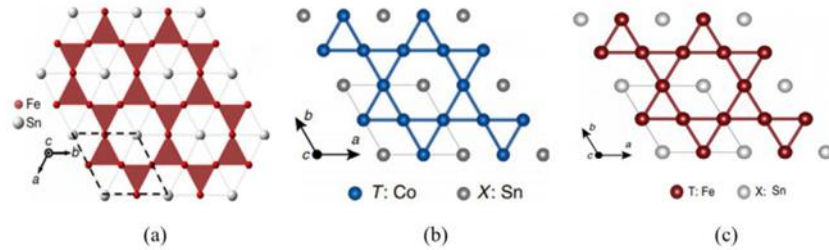


图 16.一些具有代表性的 Kagome 晶格的结构 (a) Fe_3Sn_2 (b) CoSn (c) FeSn

此外，在实验中观察到铁磁材料 YMn_6Sn_6 的 Kagome 层中也有的完整拓扑特性，如 Dirac 锥、平带和鞍点。另一种 Kagome 材料 KV_3Sb_2 被发现具有非常规的手性电荷序。这种电荷序不仅导致反常霍尔效应，而且也是非常规超导性的前体。近年来，通过截面选择性光电发射测量，在 RV_6Sn_6 ($\text{R}=\text{Gd}, \text{Ho}$) 中也发现了具有 Dirac 带、平带和鞍点的 Kagome 表面态。

一系列碳网格的理论也被提出来实现狄拉克锥和平带。已经合成的 $\text{Cs}_2\text{LiMn}_3\text{F}_{12}$ 作为合成的材料被证明具有同源晶格和固有的 QAHE。铁磁体绝缘 Kagome 晶格中磁振子的实验证据也被报道。

许多 MOFs 已经被提出作为 kagome 晶格的候选模型。其中， $\text{Ni}_3(\text{C}_6\text{S}_6)_2$ 首次被预测具有 kagome 晶格模型的能带结构和相关的电子性质。第一性原理的计算清楚地表明了 $\text{Ni}_3(\text{C}_6\text{S}_6)_2$ 具有平带和狄拉克锥，如图 17 所示。当 Ni 原子(或 S 原子)的 $\text{Ni}_3(\text{C}_6\text{S}_6)_2$ 被 Au 和 Mn (或 O 和 NH) 替换，Kagome 晶格的狄拉克锥和平带会被保留。

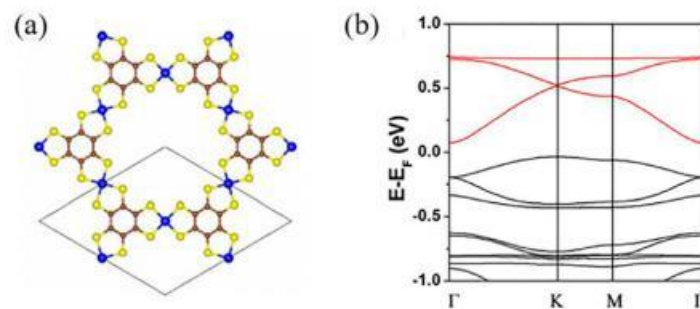


图 17.(a) $\text{Ni}_3(\text{C}_6\text{S}_6)_2$ 的晶体结构.(b) 由第一性原理计算得到的 $\text{Ni}_3(\text{C}_6\text{S}_6)_2$ 能带结构。

其它的例子包括 Cu-DCA ， HTT-Pt ，反式异构 Au-THAT ， $\text{M}_3(\text{THT})_2$ ($\text{M}=\text{Ni}, \text{Cu}, \text{Pt}$ 和 Au)， $\text{M}_3\text{-C}_{12}\text{S}_{12}$ ， $\text{Cu}_3(\text{HITP})_2$ ， Mn-DCA ， Cu-BHT ， $\text{TM}_2(\text{C}_6\text{O}_4\text{X}_2)_3$ ($\text{TM}=\text{Mn}$ 或 Tc)，和一些 COFs。尽管一些 MOFs (如 $\text{Ni}_3(\text{C}_6\text{S}_6)_2$ ， Cu-DCA ， $\text{Ni}_3(\text{TNT})_2$ 和 $\text{Fe}_3(\text{HITP})_2$) 已经在实验

中合成，由于样品的质量低，验证了这些实验中的 kagome MOFs 中的狄拉克锥和平带仍然是一个相当大的挑战。

3.3 Lieb晶格的二维材料

光子和冷原子系统中Lieb晶格的实现已被报道。光子中Lieb晶格的平带是鲁棒的。一个Lieb晶格模式也在理论上提出了。通过扫描隧道显微镜证实了由Cu的表面态电子形成的电子Lieb晶格。在Cu(100)表面的氮单层中构建Lieb晶格的可能性还被证明了，且利用分子束外延在Al(100)表面获得了弯曲的Lieb晶格。

Lieb晶格的有机体包括Py(BCSB)₂共价有机框架，酞菁基MPcMOF，sp²C和sp²N COFs。例如，Cui等人预测的sp²C和sp²N COFs实现了Lieb晶格。此外，第一性原理的计算和TB理论都表明了sp²C和sp²NCOFs为狄拉克材料，如图18所示。

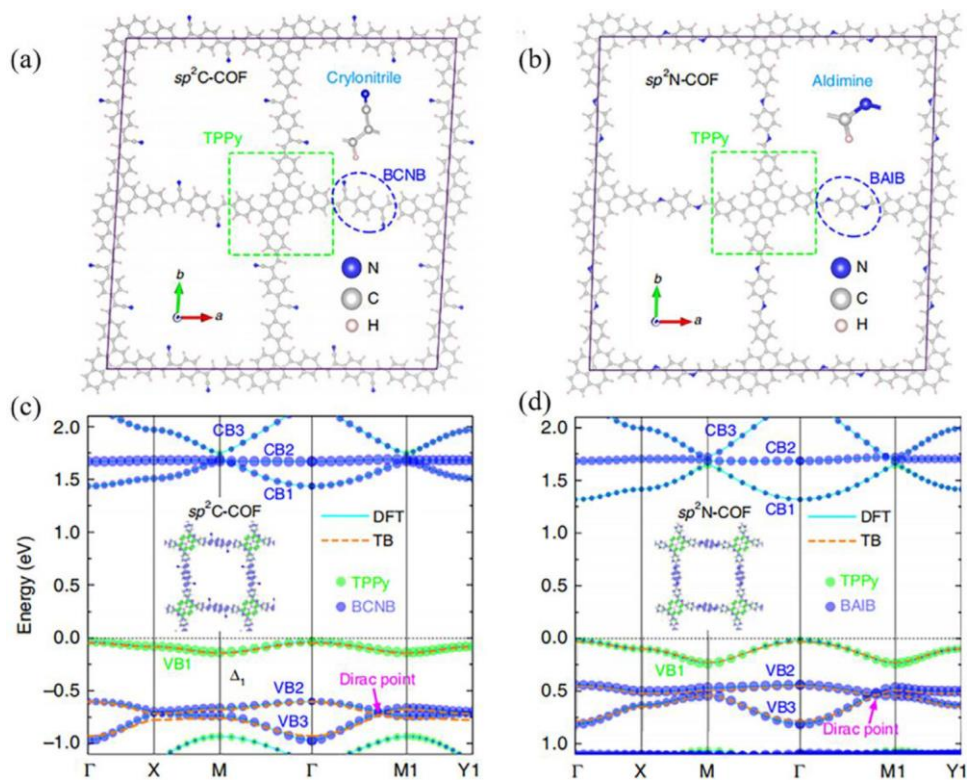


图18 (a) sp²C-COFs的晶格结构 (c) 由第一性原理计算得到的sp²C-COFs的能带结构

(b)sp²NCOFs的晶格结构 (d)由第一性原理计算得到的sp²NCOFs的能带结构

4. 讨论

在上述晶格模型的基础上, 根据冯·诺伊曼-维格纳定理讨论了二维材料中狄拉克锥存在的准则^[18]。二维晶格的一般哈密顿量由:

$$H(k) = \begin{pmatrix} H_{11}(k) & H_{12}(k) \\ H_{21}(k) & H_{22}(k) \end{pmatrix} \quad (23)$$

其中 $H_{21}(k) = H_{12}^*(k)$, 由此可知, 能谱是:

$$E_{1,2}(k) = \frac{1}{2} \left[(H_{11}(k) + H_{22}(k)) \pm \sqrt{(H_{11}(k) - H_{22}(k))^2 + 4|H_{12}(k)|^2} \right] \quad (24)$$

因此, 决定狄拉克点的条件是:

$$\begin{cases} H_{11}(k) - H_{22}(k) = 0 \\ \text{Re}[H_{12}(k)] = 0 \\ \text{Im}[H_{12}(k)] = 0 \end{cases} \quad (25)$$

在这里 $\text{Re}[H_{12}(k)]$ 和 $\text{Im}[H_{12}(k)]$, 分别表示的是实部和虚部 $H_{12}(k)$ 。在一个二维系统中, 有两个变量, k_x 和 k_y , 必须用上述方程来求解。因此, 变量的数量小于方程式的数量, 且这些条件很少能得到满足。这就解释了合成二维狄拉克材料的稀缺性。

需要对哈密顿量进行约束, 来减少狄拉克锥的数量和使狄拉克锥出现。首先, 考虑了哈密顿量的对称性。例如, 在时间反演算子下的不变性, \hat{T} :

$$\hat{T}: \hat{H}(k) = H^*(k) \quad (26)$$

空间反演算子, \hat{I} :

$$\hat{I}: \hat{H}(k) = \sigma_x \hat{H}^*(-k) \sigma_x \quad (27)$$

其中 σ_x 是泡利矩阵。

联立 \hat{T} 与 \hat{I} , 可以推得:

$$\hat{T}\hat{I}: \hat{H}(k) = \sigma_x \hat{H}^*(k) \sigma_x \quad (28)$$

时间反演和空间反演对称性的结合自然导致了 $H_{11}(k) = H_{22}(k)$, 从而减少了方程式的数量。这就决定了匹配波矢变量的狄拉克锥。空间反转对称一直以来被认为是合成二维狄拉克材料的要求之一。然而, Sun等人最近的一项研究^[19]表明, 在某些特殊情况下, 这种对称性可能不需要得到狄拉克锥。作者证明了镜像对称也可以使用扭曲的红宝石晶格 (m-Ruby) 来保护Dirac锥。在这种特殊情况下, 镜像对称函数为:

$$\hat{M}: \hat{H}(k) = \sigma_x \hat{H}(\sigma_z k) \sigma_x \quad (29)$$

其中 σ_z 是泡利矩阵。这也导致了 $H_{11}(k) = H_{22}(k)$ ，类似于空间反演对称性的函数。这一发现扩展了该家族，并为二维狄拉克材料的设计和合成开辟了一种新方法。尽管有这些有趣的结果，晶格对称和狄拉克锥的出现之间的关系也仍然是一个对立的话题。在这些晶格模型中，轨道有序也在使狄拉克锥的起源变得复杂上起着关键作用。它为调节二维狄拉克材料的电子特性提供了许多程度的限制，并有望识别出可应用于下一代器件的新概念。

除了上面提到的模型外，还有许多其他的二维狄拉克材料。例如，构建具有蜂窝对称的石墨烯可以产生一系列二维碳同位素异形体。在这些同位素异形体中，s-graphene、d-graphene和e-graphene被证明是稳定的，并被预测具有狄拉克锥。此外，通过DFT和TB计算，代表penta-hexa-hepta-graphene的phagraphene也被预测具有扭曲的狄拉克锥。石墨烯是由sp杂化和sp²杂化原子组成的异质体；14,14,14-graphyne, 14,14,18-graphyne, 6,6,18-graphyne和h-12,12,20-无六边形对称的graphyne已被证明持有Dirac锥。能带结构中的狄拉克锥也表现为 δ -graphyne，它比 α -graphyne更稳定。硼也可以用作二维狄拉克材料。例如，一种被称为Pmmm 硼的特殊硼单层，被预测在衬底上生长出Dirac锥。以上所述，暗示了二维狄拉克材料的多样性。因此，理解晶格特性与狄拉克锥特征之间的关系是开发二维狄拉克材料的关键。

5. 结论

(1)本文简要回顾了基于紧束缚(TB)方法的二维狄拉克锥的典型晶格模型以及这些模型的真实候选材料。通过第一性原理软件计算了其中的一些材料,比如石墨烯, kagome, penta-NiP₂等,并结合紧束缚模型的软件MagneticTB,选用wannier90来快速拟合得到紧束缚模型的各种跃迁参数,构造了graphene, Kagome, CT, Lieb, Hourglass晶格的对称化的紧束缚模型,并画出了相应的能带,如附录所示。

(2)空间反演对称性对狄拉克锥来说,并不是必需的。在某些特殊情况下,镜像对称也可以保护狄拉克锥,而不需要空间反演对称性,这一点由扭曲的红宝石晶格模型(m-Ruby)验证。

(3)在红宝石格和星晶格之间以及Lieb晶格和kagome晶格之间的中间区域,一些柔韧的晶格模型存在二维狄拉克锥低对称性。通过人为修改对称性,可以改变拓扑物性。

(4)鉴于人工二维超材料的显著优势,如光子晶体和冷原子的光学晶格,这些晶格模型的有趣特性有望在基础物理和器件应用中提供新的概念

参考文献

- [1] 固体物理学/黄昆著；韩汝琦改编.高等教育出版社,1988.10
- [2] S Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Şahin, S. Ciraci, Two-and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009)236804.
- [3] X. Shao, L. Sun, X. Ma, X. Feng, H. Gao, C. Ding, M. Zhao, Multiple Dirac cones and Lifshitz transition in a two-dimensional Cairo lattice as a Hawking evaporation analogue, *J. Phys. Condens. Matter* 33 (2021) 365001.
- [4] F.D.M. Haldane, Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the " parity anomaly", *Phys. Rev. Lett.* 61 (1988) 2015.
- [5] C.L. Kane, E.J. Mele, Quantum spin Hall effect in graphene, *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005) 226801.
- [6] J. Wang, X. Mu, L. Wang, M. Sun, Properties and applications of new superlattice: twisted bilayer graphene, *Mater. Today Phys.* 9 (2019) 100099.
- [7] H.-M. Guo, M. Franz, Topological insulator on the kagome lattice, *Phys. Rev. B* 80(2009) 113102.
- [8] K. Sun, Z. Gu, H. Katsura, S.D. Sarma, Nearly flatbands with nontrivial topology, *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 236803.
- [9] Zhang, M. Kang, H. Huang, W. Jiang, X. Ni, L. Kang, S. Zhang, H. Xu, Z. Liu, F. Liu, Kagome bands disguised in a coloring-triangle lattice, *Phys. Rev. B* 99 (2019) 100404.
- [10] W. Jiang, X. Ni, F. Liu, Exotic Topological Bands and Quantum States in Metal–Organic and Covalent–Organic Frameworks, *Acc. Chem. Res.* 54 (2021) 416–426.
- [11] M. Chen, S. Wan, The quantum anomalous Hall effect on a star lattice with spin–orbit coupling and an exchange field, *J. Phys. Condens. Matter* 24 (2012) 325502.
- [12] C. Weeks, M. Franz, Topological insulators on the Lieb and perovskite lattices, *Phys. Rev. B* 82 (2010) 085310.
- [13] W. Jiang, M. Kang, H. Huang, H. Xu, T. Low, F. Liu, Topological band evolution between Lieb and kagome lattices, *Phys. Rev. B* 99 (2019) 125131.
- [14] A.Wang, X. Zhao, M. Zhao, X. Zhang, Y. Feng, F. Liu, Kane fermion in a two-dimensional π -conjugated bis (iminothiolato) nickel monolayer, *J. Phys. Chem. Lett.* 9 (2018) 614–619.
- [15] X. Shao, X. Liu, X. Zhao, J. Wang, X. Zhang, M. Zhao, Electronic properties of a π -conjugated Cairo pentagonal lattice: Direct band gap, ultrahigh carrier mobility, and slanted Dirac cones, *Phys. Rev. B* 98 (2018) 085437.
- [16] M Kargarian, G.A. Fiete, Topological phases and phase transitions on the square-octagon lattice, *Phys. Rev. B* 82 (2010) 085106.
- [17] W. Li, M. Guo, G. Zhang, Y.-W. Zhang, Gapless MoS₂ allotrope possessing both massless Dirac and heavy fermions, *Phys. Rev. B* 89 (2014) 205402.

- [18] K. Asano, C. Hotta, Designing Dirac points in two-dimensional lattices, Phys. Rev.B 83 (2011) 245125.
- [19] L. Sun, X. Zhang, H. Gao, J. Liu, F. Liu, M. Zhao, Inversion/Mirror Symmetry-Protected Dirac Cones in Distorted Ruby Lattices, Chin. Phys. Lett. 37 (2020)127102.

附录

1.graphene能带计算

(1) 自恰计算的VASP输入参数[INCAR](#)、[KPOINTS](#)、[POSCAR](#)、[POTCAR](#):

[INCAR](#):

SYSTEM = Graphene

#Startparameter for this run:

PREC = Accurate

ISTART = 0

ICHARG = 2

LREAL = .FALSE.

#Ionic Relaxation

IBRION = 2

ISIF = 2

NSW = 0

#EDIFFG = -1.0E-2

POTIM = 0.25

#Electronic Relaxation

EDIFF = 1.0E-05

ENCUT = 500

ALGO = Fast

#DOS related values

ISMEAR = 0

SIGMA = 0.05

#Writing items

LWAVE = .FALSE.

LCHARG = .TRUE.

LVTOT = .FALSE.

[KPOINTS](#):

Automatic mesh

0

GMonkhorst-Pack

12 12 1

0 0 0

POSCAR:

graphene

1.0

2.440000	0.000000	0.000000
-1.220000	2.113101	0.000000
0.000000	0.000000	10.000000

C

2

Selective dynamics

Direct

0.6666667	0.3333333	0.500000	T	T	T
0.3333333	0.6666667	0.500000	T	T	T

POTCAR:

PAW_PBE C 08Apr2002

4.000000000000000000

parameters from PSCTR are:

VRHFIN =C: s2p2

LEXCH = PE

EATOM = 147.1560 eV, 10.8157 Ry

(2)能带计算的VASP输入参数**INCAR**、**KPOINTS**:

INCAR:

SYSTEM = Graphene

#Startparameter for this run:

PREC = Accutate

ISTART = 0

ICHARG = 11

LREAL = .FALSE.

#Ionic Relaxation

IBRION = 2

```

ISIF = 2
NSW = 0
#EDIFFG = -1.0E-2
POTIM = 0.25
#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500
ALGO = Fast
LORBIT = 11
NBANDS = 12
#DOS related values
ISMEAR = 0
SIGMA = 0.05
#Writing items
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
LVTOT = .FALSE.

```

KPOINTS:

k-points along high symmetry lines

50 !50 intersections

Line-mode

rec

0.0000 0.0000 0.0 ! gamma

0.5000 0.0000 0.0 ! M

0.5000 0.0000 0.0 ! M

0.3333 0.3333 0.0 ! K

0.3333 0.3333 0.0 ! K

0.0000 0.0000 0.0 ! gamma

2. MagneticTB紧束缚模型构建

(1) Graphene MagneticTB:

```
Needs["MagneticTB`"];
sgop = msgop[gray[191]];
init[
  lattice -> {{a, 0, 0}, {-(a/2), (Sqrt[3] a)/2, 0}, {0, 0, c}},
  lattpar -> {a -> 1, c -> 3},
  wyckoffposition -> {{{1/3, 2/3, 0}, {0, 0, 0}}},
  symminformation -> sgop,
  basisFunctions -> {"pz"}];

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

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

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

Generators: {{ "6z", F }, { "2x", F }, { "-1", F }, { "1", T } }

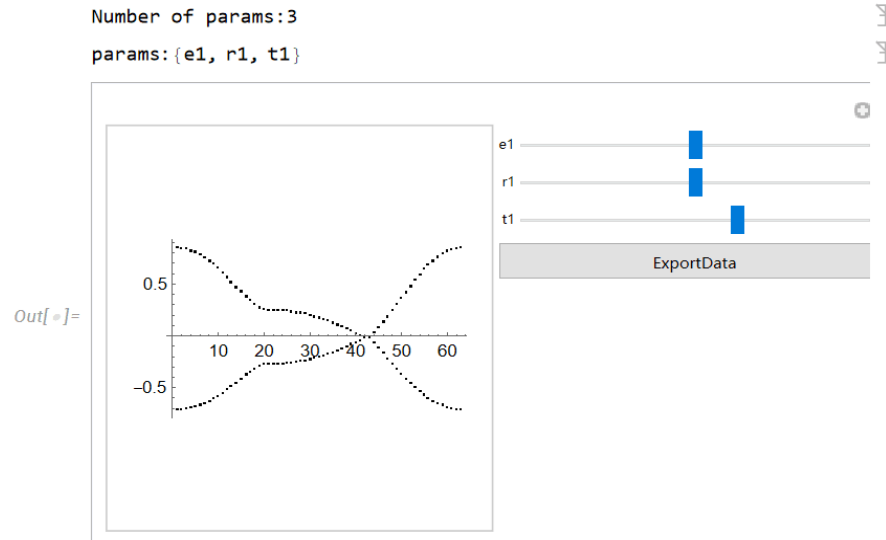
atompos
Out[ ]=  $\left\{ \left\{ \left\{ \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0 \right\}, \{0, 0, 0\} \right\}, \left\{ \left\{ \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0 \right\}, \{0, 0, 0\} \right\} \right\}$ 

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

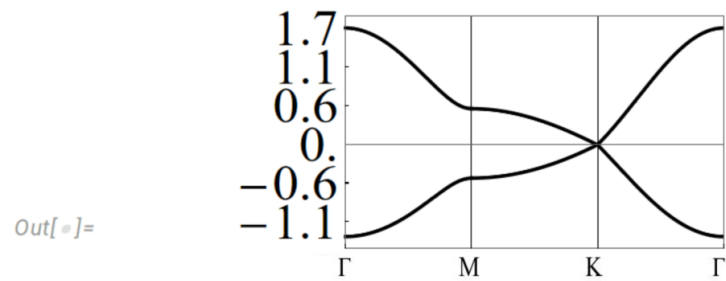
params: {e1}
params: {t1}
params: {r1}
Out[ ]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} e1 + e^{-i kx} r1 + e^{i kx} r1 + e^{i (-kx-ky)} r1 + e^{-i ky} r1 + e^{i ky} r1 + e^{i (kx+ky)} r1 & e^{i \left(-\frac{2 kx}{3} - \frac{ky}{3}\right)} t1 + e^{i \left(\frac{kx}{3} - \frac{ky}{3}\right)} t1 + e^{i \left(\frac{kx}{3} + \frac{2 ky}{3}\right)} t1 \\ e^{i \left(\frac{kx}{3} - \frac{2 ky}{3}\right)} t1 + e^{i \left(-\frac{kx}{3} + \frac{ky}{3}\right)} t1 + e^{i \left(\frac{2 kx}{3} + \frac{ky}{3}\right)} t1 & e1 + e^{-i kx} r1 + e^{i kx} r1 + e^{i (-kx-ky)} r1 + e^{-i ky} r1 + e^{i ky} r1 + e^{i (kx+ky)} r1 \end{pmatrix}$$


path = {{{{0, 0, 0}, {0, 1/2, 0}}, {"Γ", "M"}},
  {{{0, 1/2, 0}, {1/3, 1/3, 0}}, {"M", "K"}},
  {{{1/3, 1/3, 0}, {0, 0, 0}}, {"K", "Γ"}}};
bandManipulate[path, 20, ham]
```



bandplot[path, 200, ham, {e1 -> 0.05, r1 -> 0.02, t1 -> 0.5}]



showbonds[3]

Out[]=

2-th neighbour, Bond length = 1.		
Atom position	Num of bonds	p_k
$\left\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\right\}$	6	$\left\{\left\{\frac{4}{3}, \frac{5}{3}, 0\right\}, \left\{\frac{4}{3}, \frac{2}{3}, 0\right\}, \left\{\frac{1}{3}, \frac{5}{3}, 0\right\}, \left\{\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 0\right\}, \left\{-\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, 0\right\}, \left\{-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, 0\right\}\right\}$
$\left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\right\}$	6	$\left\{\left\{\frac{5}{3}, \frac{4}{3}, 0\right\}, \left\{\frac{5}{3}, \frac{1}{3}, 0\right\}, \left\{\frac{2}{3}, \frac{4}{3}, 0\right\}, \left\{\frac{2}{3}, -\frac{2}{3}, 0\right\}, \left\{-\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0\right\}, \left\{-\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}, 0\right\}\right\}$

showbonds[2]

Out[]=

1-th neighbour, Bond length = 0.57735		
Atom position	Num of bonds	p_k
$\left\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\right\}$	3	$\left\{\left\{\frac{2}{3}, \frac{4}{3}, 0\right\}, \left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\right\}, \left\{-\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0\right\}\right\}$
$\left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\right\}$	3	$\left\{\left\{\frac{4}{3}, \frac{2}{3}, 0\right\}, \left\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\right\}, \left\{\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 0\right\}\right\}$

```
hop[ham,{e1->0,r1->0.02,t1->0.5}]
```

Generated by MagneticTB

```
2
7
1      1      1      1      1      1      1
-1     -1     0      1      1      0.02000000  0.00000000
-1     -1     0      2      1      0.00000000  0.00000000
-1     -1     0      1      2      0.00000000  0.00000000
-1     -1     0      2      2      0.02000000  0.00000000
-1     0      0      1      1      0.02000000  0.00000000
-1     0      0      2      1      0.00000000  0.00000000
0      1      0      1      2      0.50000000  0.00000000
.....
.....
1      0      0      1      2      0.00000000  0.00000000
1      0      0      2      2      0.02000000  0.00000000
1      1      0      1      1      0.02000000  0.00000000
1      1      0      2      1      0.00000000  0.00000000
1      1      0      1      2      0.00000000  0.00000000
1      1      0      2      2      0.02000000  0.00000000
```

(2) Kagome MagneticTB:

```
Needs["MagneticTB`"];
```

```
(* kagome lattice without SOC*)
```

```
sgop = msgop[gray[191]];
```

```
init[
```

```
lattice -> {{a, 0, 0}, {-(a/2), (Sqrt[3] a)/2, 0}, {0, 0, c}},
```

```
lattpar -> {a -> 2.46, c -> 17},
```

```
wyckoffposition -> {{0, 0.5, 0.5}, {0, 0, 0}}},
```

```
symminformation -> sgop,
```

```
basisFunctions -> {"pz"}]
```

```
ham = Sum[symham[n], {n, 1, 2}];
```

```
MatrixForm[FullSimplify[ham]]
```

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

```
Lattice: HexagonalP
```

```
Primitive Lattice Vactor: {{a, 0, 0}, {-a/2, sqrt(3) a/2, 0}, {0, 0, c}}
```

```
Conventional Lattice Vactor: {{a, 0, 0}, {-a/2, sqrt(3) a/2, 0}, {0, 0, c}}
```

```
Generators: {"6z", F}, {"2x", F}, {"-1", F}, {"1", T}
```

```
params: {e1}
```

```
params: {t1}
```

Out[5]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} e1 & 2 t1 \cos\left[\frac{kx+ky}{2}\right] & 2 t1 \cos\left[\frac{kx}{2}\right] \\ 2 t1 \cos\left[\frac{kx+ky}{2}\right] & e1 & 2 t1 \cos\left[\frac{ky}{2}\right] \\ 2 t1 \cos\left[\frac{kx}{2}\right] & 2 t1 \cos\left[\frac{ky}{2}\right] & e1 \end{pmatrix}$$

atompos

Out[6]= $\left\{\left\{\left\{\left\{0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \{0, 0, 0\}\right\}, \left\{\left\{\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\}, \{0, 0, 0\}\right\}, \left\{\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \{0, 0, 0\}\right\}\right\}\right\}$

showbonds[3]

Out[7]=

2-th neighbour, Bond length = 2.13042		
Atom position	Num of bonds	$p_{\vec{k}}$
$\left\{0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}$	4	$\left\{\left\{\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}\right\}$
$\left\{\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\}$	4	$\left\{\left\{1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}\right\}$
$\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}$	4	$\left\{\left\{1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\}\right\}$

showbonds[2]

Out[8]=

1-th neighbour, Bond length = 1.23		
Atom position	Num of bonds	$p_{\vec{k}}$
$\left\{0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}$	4	$\left\{\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\}\right\}$
$\left\{\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\}$	4	$\left\{\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}\right\}$
$\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}$	4	$\left\{\left\{\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\}, \left\{1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}\right\}$

path = $\left\{\left\{\left\{\{0, 0, 0\}, \{0, 1/2, 0\}\right\}, \left\{\text{"Γ"}, \text{"M"}\right\}\right\},$

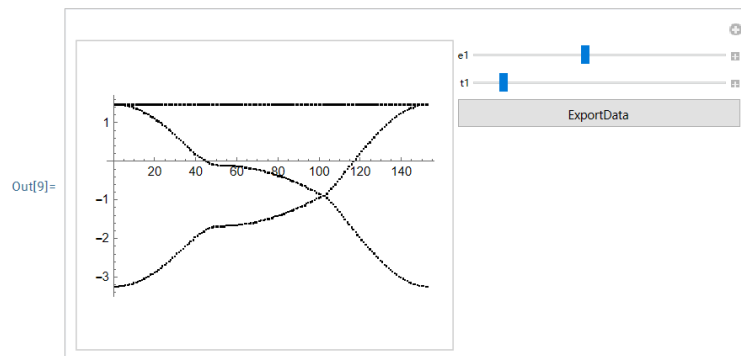
$\left\{\left\{\{0, 1/2, 0\}, \{1/3, 1/3, 0\}\right\}, \left\{\text{"M"}, \text{"K"}\right\}\right\},$

$\left\{\left\{\{1/3, 1/3, 0\}, \{0, 0, 0\}\right\}, \left\{\text{"K"}, \text{"Γ"}\right\}\right\}\};$

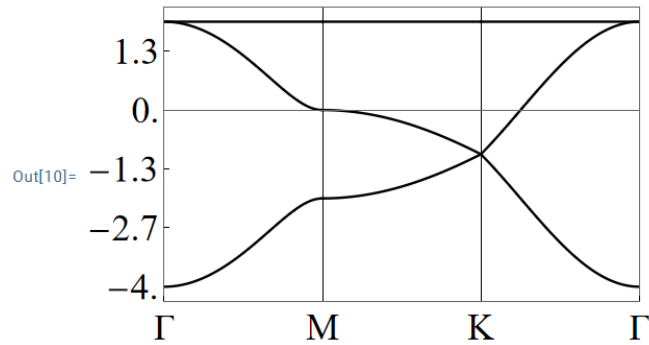
bandManipulate[path, 50, ham]

Number of params:2

params:{e1, t1}



```
bandplot[path, 50, ham, {e1 -> 0, t1 -> -1}]
```



```
(*hop[ham,{e1 -> 0, t1 -> -1},hrExport ->NotebookDirectory[]]*)
```

```
hop[ham, {e1 -> 0.00, t1 -> -1}]
```

Generated by MagneticTB

3
5

1	1	1	1	1		
-1	0	0	1	1	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	2	1	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	3	1	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	1	2	-1.00000000	0.00000000
-1	0	0	2	2	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	3	2	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	1	3	-1.00000000	0.00000000
-1	0	0	2	3	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	3	3	0.00000000	0.00000000
0	-1	0	1	1	0.00000000	0.00000000
0	-1	0	2	1	-1.00000000	0.00000000
0	-1	0	3	1	0.00000000	0.00000000
.....						
1	0	0	2	2	0.00000000	0.00000000
1	0	0	3	2	0.00000000	0.00000000
1	0	0	1	3	0.00000000	0.00000000
1	0	0	2	3	0.00000000	0.00000000
1	0	0	3	3	0.00000000	0.00000000

(3) CT MagneticTB:

```
Needs["MagneticTB`"];
```

```
(* CT lattice without SOC*)
```

```
sgop = msgop[gray[191]];
```

```
init[
```

```
lattice -> {{a, 0, 0}, {-(a/2), (Sqrt[3] a)/2, 0}, {0, 0, c}},
```

```
latticepar -> {a -> 2.46, c -> 17},
```

```
wyckoffposition -> {{0, 0.5, 0.5}, {0, 0, 0}},
```

```
symminformation -> sgop,
```

```
basisFunctions -> {"pz"}]
```

```
ham = Sum[symham[n], {n, 1, 2}];
```

```
MatrixForm[FullSimplify[ham]]
```

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

Lattice: HexagonalP

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

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

Generators: {{ "6z", F }, { "2x", F }, { "-1", F }, { "1", T } }

params: {e1}

params: {t1}

Out[27]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} e1 & 2 t1 \cos\left[\frac{kx+ky}{2}\right] & 2 t1 \cos\left[\frac{kx}{2}\right] \\ 2 t1 \cos\left[\frac{kx+ky}{2}\right] & e1 & 2 t1 \cos\left[\frac{ky}{2}\right] \\ 2 t1 \cos\left[\frac{kx}{2}\right] & 2 t1 \cos\left[\frac{ky}{2}\right] & e1 \end{pmatrix}$$

atompos

Out[28]= $\left\{ \left\{ \left\{ 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \{0, 0, 0\} \right\}, \left\{ \left\{ \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\}, \{0, 0, 0\} \right\}, \left\{ \left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \{0, 0, 0\} \right\} \right\}$

showbonds[3]

Out[29]=

2-th neighbour, Bond length = 2.13042		
Atom position	Num of bonds	P_k
$\left\{ 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}$	4	$\left\{ \left\{ \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ -\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \right\}$
$\left\{ \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\}$	4	$\left\{ \left\{ 1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \right\}$
$\left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}$	4	$\left\{ \left\{ 1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ 0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ \frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\} \right\}$

showbonds[2]

Out[30]=

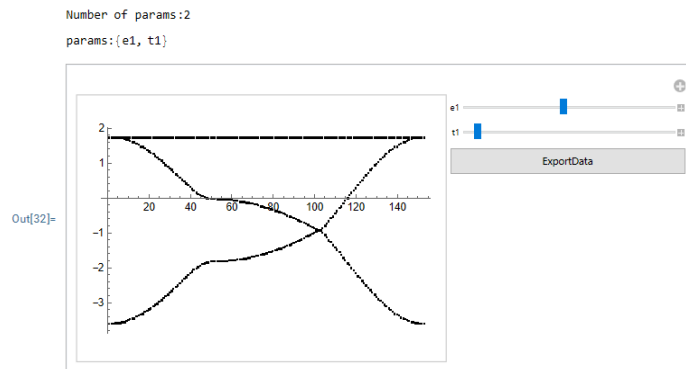
1-th neighbour, Bond length = 1.23		
Atom position	Num of bonds	P_k
$\left\{ 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}$	4	$\left\{ \left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\} \right\}$
$\left\{ \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\}$	4	$\left\{ \left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ 0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \right\}$
$\left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}$	4	$\left\{ \left\{ \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \right\}$

```
path = { { { {0, 0, 0}, {0, 1/2, 0}}, {"T", "M"} },
```

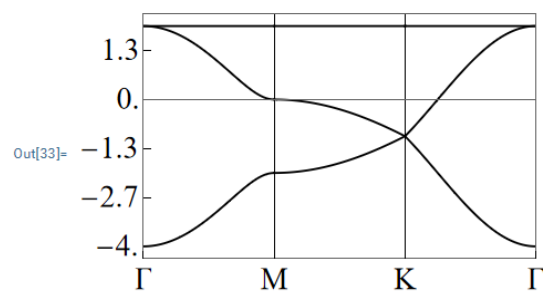
```
    { { {0, 1/2, 0}, {1/3, 1/3, 0}}, {"M", "K"} },
```

```
    { { {1/3, 1/3, 0}, {0, 0, 0}}, {"K", "T"} } };
```

```
bandManipulate[path, 50, ham]
```



bandplot[path, 50, ham, {e1 -> 0, t1 -> -1}]



(*hop[ham,{e1 -> 0, t1 -> -1},hrExport ->NotebookDirectory[]]*)

hop[ham, {e1 -> 0.00, t1 -> -1}]

Generated by MagneticTB

3

5

1	1	1	1	1			
-1	0	0	1	1	0.00000000	0.00000000	
-1	0	0	2	1	0.00000000	0.00000000	
-1	0	0	3	1	0.00000000	0.00000000	
-1	0	0	1	2	-1.00000000	0.00000000	
-1	0	0	2	2	0.00000000	0.00000000	
-1	0	0	3	2	0.00000000	0.00000000	
-1	0	0	1	3	-1.00000000	0.00000000	
-1	0	0	2	3	0.00000000	0.00000000	
-1	0	0	3	3	0.00000000	0.00000000	
0	-1	0	1	1	0.00000000	0.00000000	
0	-1	0	2	1	-1.00000000	0.00000000	
.....							
1	0	0	3	1	-1.00000000	0.00000000	
1	0	0	1	2	0.00000000	0.00000000	
1	0	0	2	2	0.00000000	0.00000000	
1	0	0	3	2	0.00000000	0.00000000	
1	0	0	1	3	0.00000000	0.00000000	
1	0	0	2	3	0.00000000	0.00000000	
1	0	0	3	3	0.00000000	0.00000000	

(4) Lieb MagneticTB:

Needs["MagneticTB`"];

(* Lieb lattice without SOC*)

```

sgop = msgop[gray[123]];
init[
  lattice -> {{a, 0, 0}, {0, a, 0}, {0, 0, c}},
  lattpar -> {a -> 6, c -> 20},
  wyckoffposition -> {{{0, 0, 0.5}, {0, 0, 0}}},
  symminformation -> sgop,
  basisFunctions -> {"s", "pz"}]
ham = Sum[symham[n], {n, 1, 2}];
MatrixForm[FullSimplify[ham]]

```

Magnetic space group (BNS): {123.340, P4/mmm1'}
 Lattice: TetragonalP
 Primitive Lattice Vector: {{a, 0, 0}, {0, a, 0}, {0, 0, c}}
 Conventional Lattice Vector: {{a, 0, 0}, {0, a, 0}, {0, 0, c}}
 params:{e1, e2}
 params:{t1, t2}

$$\begin{pmatrix} e1 + 2 t1 (\cos[kx] + \cos[ky]) & 0 \\ 0 & e2 + 2 t2 (\cos[kx] + \cos[ky]) \end{pmatrix}$$

atompos

$Out[\#] = \left\{ \left\{ \left\{ 0, 0, \frac{1}{2} \right\}, \{0, 0, 0\} \right\} \right\}$

showbonds[3]

$Out[\#] =$

2-th neighbour, Bond length = 8.48528		
Atom position	Num of bonds	p'_k
$\{0, 0, \frac{1}{2}\}$	4	$\left\{ \left\{ 1, 1, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ 1, -1, \frac{1}{2} \right\}, \right.$ $\left. \left\{ -1, 1, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ -1, -1, \frac{1}{2} \right\} \right\}$

showbonds[2]

$Out[\#] =$

1-th neighbour, Bond length = 6.		
Atom position	Num of bonds	p'_k
$\{0, 0, \frac{1}{2}\}$	4	$\left\{ \left\{ 1, 0, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ 0, 1, \frac{1}{2} \right\}, \right.$ $\left. \left\{ 0, -1, \frac{1}{2} \right\}, \left\{ -1, 0, \frac{1}{2} \right\} \right\}$

$In[\#] := HH = t1 \begin{pmatrix} e1 & \cos[kx a] & \cos[ky a] \\ \cos[kx a] & e1 & 0 \\ \cos[ky a] & 0 & e1 \end{pmatrix};$

```

path = {{{{0, 0, 0}, {0, 1/2, 0}}, {"Γ", "M"}},
        {{{0, 1/2, 0}, {1/3, 1/3, 0}}, {"M", "K"}},
        {{{1/3, 1/3, 0}, {0, 0, 0}}, {"K", "Γ"}}};

```



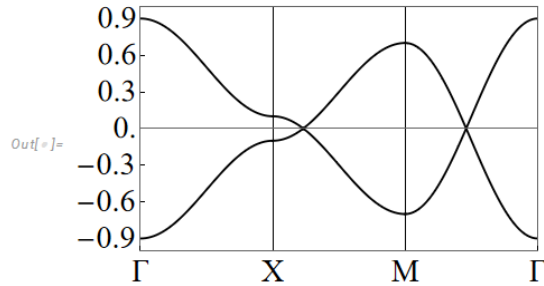
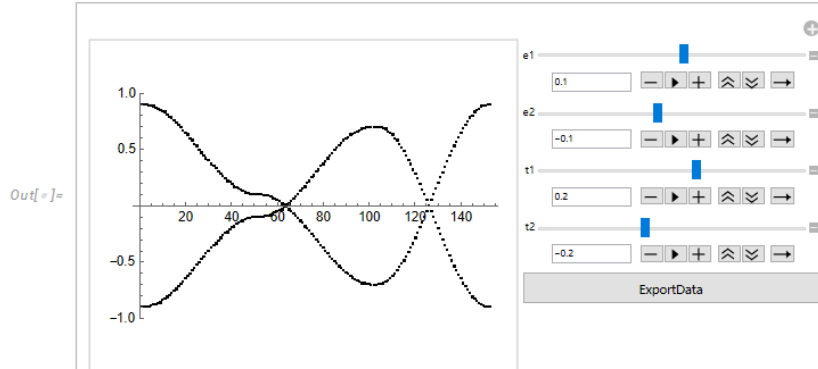
```
bandManipulate[path, 50, ham]
```

```
bandplot[path, 50, ham, {e1 -> 0.1, e2 -> -0.1, t1 -> 0.2, t2 -> -0.2}]
```

```
{e1 -> 0.1, e2 -> -0.1, t1 -> 0.2, t2 -> -0.2}
```

```
Number of params:4
```

```
params:{e1, e2, t1, t2}
```



```
{e1 -> 0.665, e2 -> 0.36, t1 -> 0.41, t2 -> -0.46}
```

```
{e1 -> 0.1, e2 -> -0.1, t1 -> 0.2, t2 -> -0.2}
```

```
params:{e1, e2, t1, t2}
```

```
(*hop[ham,{e1 -> 0, t1 -> -1},hrExport ->NotebookDirectory[]]*)
```

```
hop[ham, {e1 -> 0.1, e2 -> -0.1, t1 -> 0.2, t2 -> -0.2}]
```

```
Generated by MagneticTB
```

```
2  
5
```

1	1	1	1	1		
-1	0	0	1	1	0.20000000	0.00000000
-1	0	0	2	1	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	1	2	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	2	2	-0.20000000	0.00000000
0	-1	0	1	1	0.20000000	0.00000000
0	-1	0	2	1	0.00000000	0.00000000
0	-1	0	1	2	0.00000000	0.00000000
0	-1	0	2	2	-0.20000000	0.00000000
0	0	0	1	1	0.10000000	0.00000000
0	0	0	2	1	0.00000000	0.00000000
0	0	0	1	2	0.00000000	0.00000000
0	0	0	2	2	-0.10000000	0.00000000
0	1	0	1	1	0.20000000	0.00000000
0	1	0	2	1	0.00000000	0.00000000
0	1	0	1	2	0.00000000	0.00000000
0	1	0	2	2	-0.20000000	0.00000000
1	0	0	1	1	0.20000000	0.00000000
1	0	0	2	1	0.00000000	0.00000000
1	0	0	1	2	0.00000000	0.00000000
1	0	0	2	2	-0.20000000	0.00000000

```
(* Lieb lattice with SOC*)
```

```
sgop = msgop[gray[123]];
```

```
init[
```

```
lattice -> {{a, 0, 0}, {0, a, 0}, {0, 0, c}},
```

```
lattpar -> {a -> 6, c -> 20},
```

```
wyckoffposition -> {{{0, 0, 0.5}, {0, 0, 0}}},
```

```
symminformation -> sgop,
```

```
basisFunctions -> {"sup", "sdn", "pzup", "pzdn"}];
```

```
hamsoc = Sum[symham[n], {n, 1, 2}];
```

```
MatrixForm[FullSimplify[hamsoc]]
```

```
Magnetic space group (BNS): {123.340, P4/mmm1'}
Lattice: TetragonalP
Primitive Lattice Vector: {{a, 0, 0}, {0, a, 0}, {0, 0, c}}
Conventional Lattice Vector: {{a, 0, 0}, {0, a, 0}, {0, 0, c}}
Double Value Rep.
params:{e1, e2}
params:{t1, t2, t3}
```

```
Out[ ]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} e1 + 2 t1 (\cos[kx] + \cos[ky]) & 0 & 0 & 2 t2 (i \sin[kx] + \sin[ky]) \\ 0 & e1 + 2 t1 (\cos[kx] + \cos[ky]) & 2 t2 (-i \sin[kx] + \sin[ky]) & 0 \\ 0 & 2 t2 (i \sin[kx] + \sin[ky]) & e2 + 2 t3 (\cos[kx] + \cos[ky]) & 0 \\ 2 t2 (-i \sin[kx] + \sin[ky]) & 0 & 0 & e2 + 2 t3 (\cos[kx] + \cos[ky]) \end{pmatrix}$$

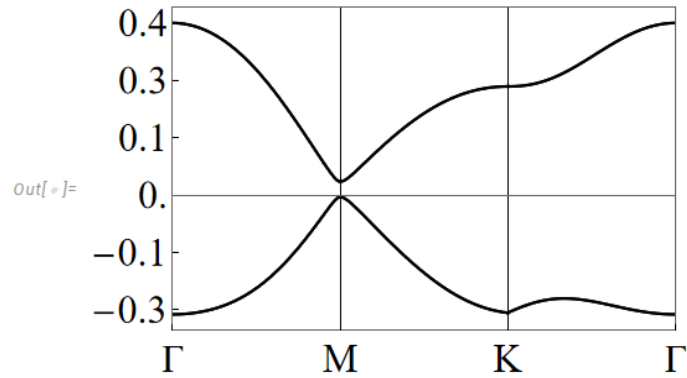
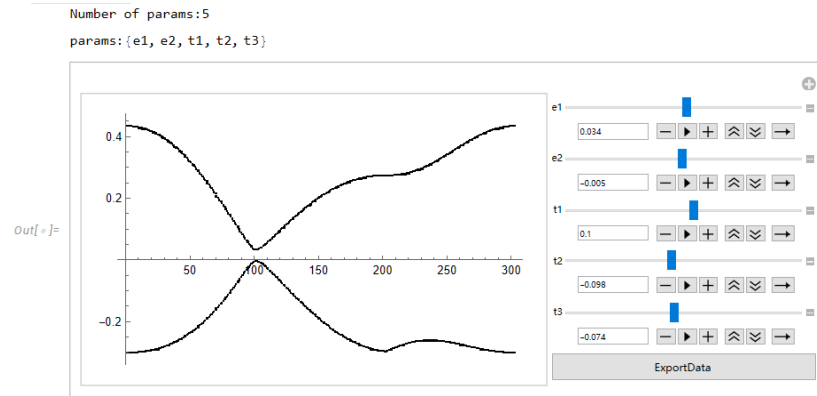
```
path = {{{{0, 0, 0}, {0, 1/2, 0}}, {"T", "M"}},
```

```
{{{0, 1/2, 0}, {1/3, 1/3, 0}}, {"M", "K"}},
```

```
{{{1/3, 1/3, 0}, {0, 0, 0}}, {"K", "T"}}};
```

```
bandManipulate[path, 100, hamsoc]
```

```
bandplot[path, 100, hamsoc, {e1 -> 0.034, e2 -> -0.005, t1 -> 0.1, t2 -> -0.098, t3 -> -0.074}]
```



{e1 → 0.034, e2 → -0.005, t1 → 0.1, t2 → -0.098, t3 → -0.074}

(*hop[ham,{e1 -> 0, t1 -> 1},hrExport ->NotebookDirectory[]]*)

hop[hamsoc, {e1 -> 0.034, e2 -> -0.005, t1 -> 0.1, t2 -> -0.098, t3 -> -0.074}]

Generated by MagneticTB

4
5

1	1	1	1	1		
-1	0	0	0	1	1	0.10000000
-1	0	0	0	2	1	0.00000000
-1	0	0	0	3	1	0.00000000
-1	0	0	0	4	1	-0.09800000
-1	0	0	0	1	2	0.00000000
-1	0	0	0	2	2	0.10000000
-1	0	0	0	3	2	0.09800000
-1	0	0	0	4	2	0.00000000
-1	0	0	0	1	3	0.00000000
-1	0	0	0	2	3	-0.09800000
-1	0	0	0	3	3	-0.07400000
-1	0	0	0	4	3	0.00000000
-1	0	0	0	1	4	0.09800000
-1	0	0	0	2	4	0.00000000
-1	0	0	0	3	4	0.00000000
-1	0	0	0	4	4	-0.07400000
0	-1	0	0	1	1	0.10000000
.....						
1	0	0	0	1	4	-0.09800000
1	0	0	0	2	4	0.00000000
1	0	0	0	3	4	0.00000000
1	0	0	0	4	4	-0.07400000

(5) Hourglass MagneticTB:

Needs["MagneticTB`"];

(*石墨烯的六角格子为例, 讨论Hourglass型能带*)

(* Hourglass without SOC *)

sgop = msgop[gray[191]];

init[

lattice -> {{a, 0, 0}, {-(a/2), (Sqrt[3] a)/2, 0}, {0, 0, c}},

latticepar -> {a -> 2.46, c -> 17},

wyckoffposition -> {{{2/3, 1/3, 0.5}, {0, 0, 0}}},

symminformation -> sgop,

basisFunctions -> {"px", "py"}]

ham = Sum[symham[n], {n, 1, 2}];

MatrixForm[FullSimplify[ham]]

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

Lattice: HexagonalP

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

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

params: {e1}

params: {t1, t2}

Out[]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} e1 & 0 & \frac{1}{4} e^{-\frac{1}{3}i(kx+2ky)} (4t1 + e^{i ky} (1 + e^{i kx}) (t1 + 3t2)) & -\frac{1}{4} \sqrt{3} e^{-\frac{1}{3}i(kx-ky)} (-1 + e^{i kx}) (t1 - t2) \\ 0 & e1 & -\frac{1}{4} \sqrt{3} e^{-\frac{1}{3}i(kx-ky)} (-1 + e^{i kx}) (t1 - t2) & \frac{1}{4} e^{-\frac{1}{3}i(kx+2ky)} (4t2 + e^{i ky} (1 + e^{i kx}) (3t1 + t2)) \\ \frac{1}{4} e^{-\frac{1}{3}i(2kx+ky)} (4e^{i(kx+ky)} t1 + (1 + e^{i kx}) (t1 + 3t2)) & \frac{1}{4} \sqrt{3} e^{-\frac{1}{3}i(2kx+ky)} (-1 + e^{i kx}) (t1 - t2) & e1 & 0 \\ \frac{1}{4} \sqrt{3} e^{-\frac{1}{3}i(2kx+ky)} (-1 + e^{i kx}) (t1 - t2) & \frac{1}{4} e^{-\frac{1}{3}i(2kx+ky)} (4e^{i(kx+ky)} t2 + (1 + e^{i kx}) (3t1 + t2)) & 0 & e1 \end{pmatrix}$$

atompos

Out[]= $\left\{ \left\{ \left\{ \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} \right\}, \{0, 0, 0\} \right\}, \left\{ \left\{ \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2} \right\}, \{0, 0, 0\} \right\} \right\}$

showbonds[3]

Out[*]=

2-th neighbour, Bond length = 2.46		
Atom position	Num of bonds	\vec{p}_k
$\left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}$	6	$\left\{\left\{\frac{5}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{5}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{2}{3}, -\frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right\}\right\}$
$\left\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right\}$	6	$\left\{\left\{\frac{4}{3}, \frac{5}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{1}{3}, \frac{5}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}\right\}$

showbonds[2]

Out[*]=

1-th neighbour, Bond length = 1.42028		
Atom position	Num of bonds	\vec{p}_k
$\left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}$	3	$\left\{\left\{\frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}\right\}$
$\left\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right\}$	3	$\left\{\left\{\frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{-\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\}\right\}$

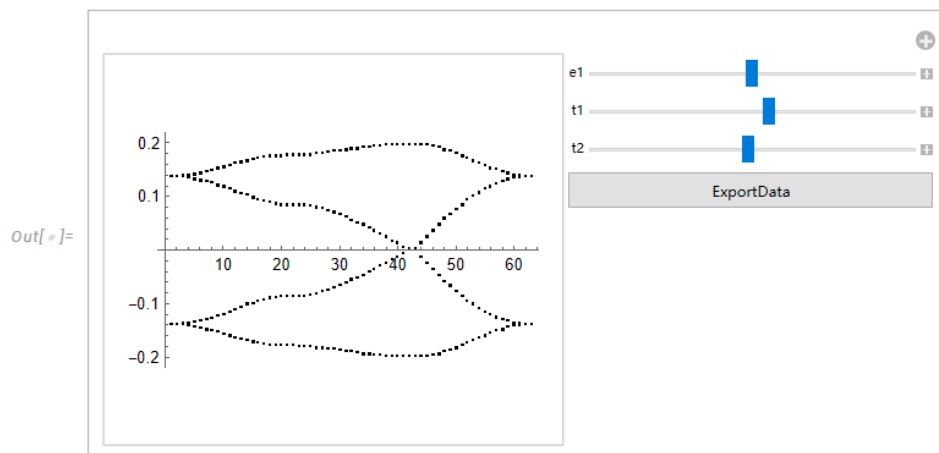
```
path = {{{{0, 0, 0}, {0, 1/2, 0}}, {"Γ", "M"}},
        {{{0, 1/2, 0}, {1/3, 1/3, 0}}, {"M", "K"}},
        {{{1/3, 1/3, 0}, {0, 0, 0}}, {"K", "Γ"}}};
```

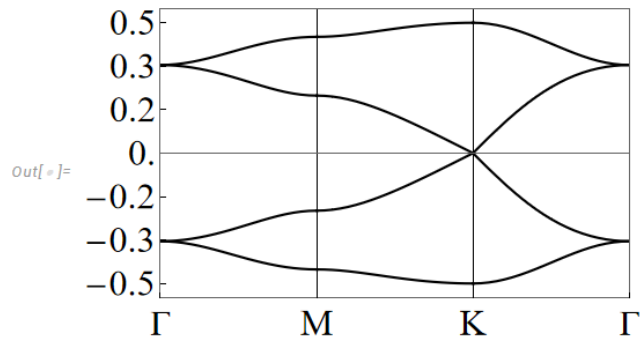
```
bandManipulate[path, 20, ham]
```

```
bandplot[path, 20, ham, {e1 -> 0.00, t1 -> -0.274, t2 -> 0.053}]
```

Number of params:3

params:{e1, t1, t2}





(*hop[ham,{e1 -> 0, t1 -> 1},hrExport ->NotebookDirectory[]]*)

hop[ham, {e1 -> 0.00, t1 -> -0.274, t2 -> 0.053}]

Generated by MagneticTB

4
5

1	1	1	1	1		
-1	0	0	1	1	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	2	1	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	3	1	-0.02875000	0.00000000
-1	0	0	4	1	0.14159515	0.00000000
-1	0	0	1	2	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	2	2	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	3	2	0.14159515	0.00000000
-1	0	0	4	2	-0.19225000	0.00000000
-1	0	0	1	3	0.00000000	0.00000000
-1	0	0	2	3	0.00000000	0.00000000
.....						
.....						
1	0	0	4	3	0.00000000	0.00000000
1	0	0	1	4	0.14159515	0.00000000
1	0	0	2	4	-0.19225000	0.00000000
1	0	0	3	4	0.00000000	0.00000000
1	0	0	4	4	0.00000000	0.00000000

致谢

光阴似箭，日月如梭，不知不觉中毕业设计已接近尾声，这也代表着我的大学生活即将到达终点站。如今，再回头看看走过的路，感慨良多，获益匪浅。历时 3 个多月，从论文选题到开题报告、写初稿到反复修改，期间经历了喜悦、聒噪、痛苦和彷徨，在写作该篇论文的过程中心情是复杂多变的。但伴随着这篇毕业论文的最终成稿，心里悬着的一块石头终于尘埃落定，复杂的心情也烟消云散。

漫步在校园的林荫小道，不知不觉中我已深深地留恋上了四川师大。

首先，我要特别感谢我的指导老师程才老师。在我做毕业设计的过程中，给予了我很大的帮助。他在繁忙的工作中抽出时间来检查我们的论文。从开题到定稿，都给了我们很大的指导和帮助。在此，向程老师表示衷心的感谢。感谢您在繁忙的工作中抽出时间来检查我们的论文并提出修改意见，更感谢您的谆谆教导。在此，向程老师表示衷心的感谢。

其次，我要感谢四年来教过我的老师们和朝夕相处的同学们，感谢任课老师与同学们四年来的关心和帮助。是你们点缀了我枯燥无味的大学生活，让它变得极其有意义。同时，在母校的求学之路中，感谢那些给予我帮助的家人和朋友们，是他们在我需要帮助的时候伸出援手，助我一臂之力。

最后，衷心感谢在百忙中评阅本文和参加答辩的各位老师，感谢你们的悉心指导和付出的辛勤劳动。