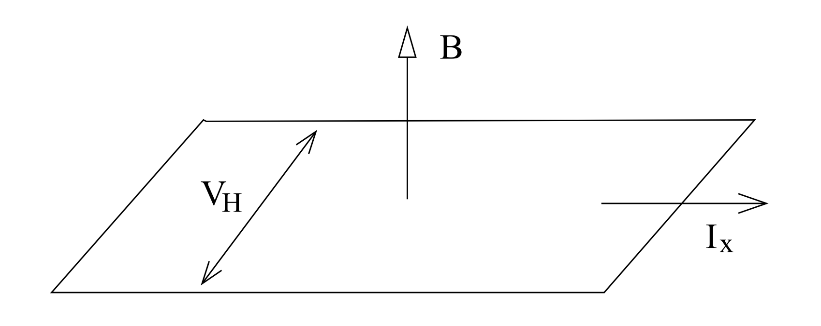
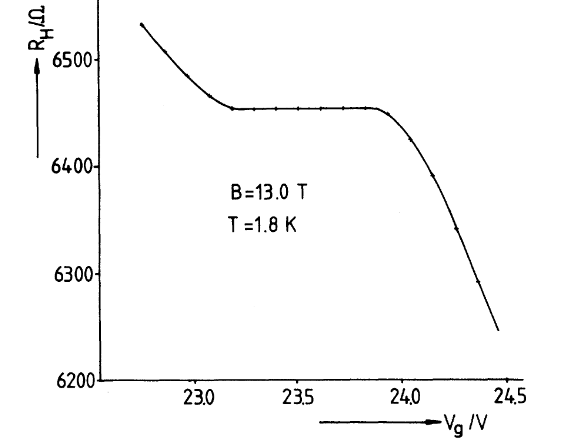
2 理论基础

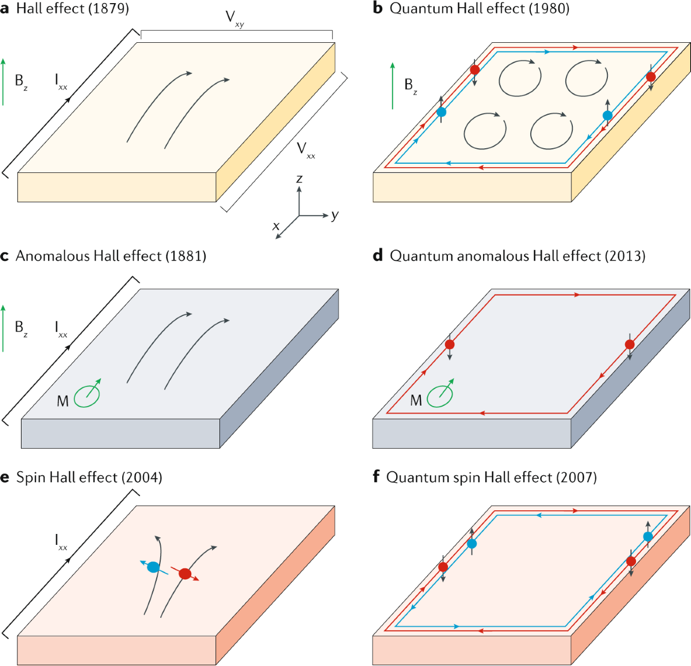
2.1 霍尔效应家族

霍尔效应是霍尔在1879年发现的在导体或半导体中施加磁场后的一种特殊电流行为。如下图所示，当材料上施加了垂直于电流的磁场后，在材料垂直于电流方向的两侧产生横向电压的现象被称为霍尔效应。

霍尔效应产生的原因是电流在磁场中受到洛伦兹力，从而改变电流方向，在材料内垂直电流的两侧产生电荷堆积。电荷的堆积产生横向电压对电流产生的电磁力与洛伦兹力方向相反，当二者达到平衡时，电荷堆积达到稳定，此时材料两侧堆积的电荷在材料上产生了一个横向的电压，成为霍尔电压。为了衡量材料通过霍尔效应的强弱，将霍尔电压与电流的比值定义为霍尔电阻，即，随磁场线性增大。

由于霍尔效应可以在垂直电流的方向产生霍尔电压，可以实现电流的非接触式测量，也可以被制作成传感器等元件，因此霍尔效应器件被广泛应用与汽车、电子等工业领域。

随着对霍尔效应的研究的深入，人们发现在低温和强磁场下的二维量子系统中发现了量子霍尔效应。量子霍尔效应中的霍尔电阻的行为并不像经典霍尔效应中一样随磁场线性增加，而是呈现出量子化的行为，在电压增加的过程中出现量子化的平台。量子霍尔效应由Klitzing K.V.等人在1980年在实验上研究极低温和强磁场条件下的二维电子气中的霍尔效应时发现。他们的研究表明，当磁场足够强的情况下，电子的运动被量子化为分离的朗道能级，且纵向电阻几乎为0。霍尔电阻在特定的载流子浓度下呈现出量子化的电阻平台。此外，霍尔电阻与精细结构常数直接相关，所以人们可以通过测量霍尔电阻的方法，精确测量精细结构常数。

而且量子霍尔态的体态是绝缘态，但边缘态是手性导电态，并且由于受到体能带的拓扑保护，手性导电边缘态对杂质散射有较强的鲁棒性，能够形成较为稳定的电子无耗散传输通道。

除了霍尔效应与量子霍尔效应之外，人们的研究还发现了反常霍尔效应、量子反常霍尔效应、自旋霍尔效应和量子自旋霍尔效应等现象，构建起了丰富的霍尔效应家族。

由于拓扑绝缘体最主要的特征是拥有受到体能带拓扑性质保护的导电边缘态，主要的研究对象是受到拓扑保护的特殊量子态，而霍尔效应、反常霍尔效应等经典霍尔效应无法反映材料内部的拓扑性质。量子霍尔效应、量子自旋霍尔效应和量子反常霍尔效应分别通过强磁场、极低温、材料本身的自旋、磁序等途径，实现了量子化的电导平台，直接展现了受到拓扑保护的导电边缘态。通过研究这些边缘态的产生和调控，即可研究得到这些量子态背后的原理，并发现新的性质和现象。因此本节将重点介绍与拓扑绝缘体密切相关的量子反常霍尔效应和量子自旋霍尔效应。

量子反常霍尔效应(QAHE)是指无序通过外加磁场，仅通过材料的内部的磁序与非平庸拓扑能带相结合，从而实现量子化的霍尔电导。其基本原理是通过材料的特殊磁性掺杂打破时间反演对称性，在体能带中打开拓扑非平庸的带隙，从而得到受到拓扑保护的导电边缘态。量子自旋霍尔效应(QSHE)是在不破坏时间反演对称性的情况下，不同自旋方向的电子在材料边缘沿相反反向运动，形成手性边缘态，从而得到量子化的霍尔电导。量子自旋霍尔效应由于受到时间爱你反演对称性，因此无序杂质（散射）难以破坏其量子态。量子自旋霍尔效应依赖于材料较强的自旋轨道耦合效应，形成Z2拓扑绝缘体。

这两种量子霍尔效应分别通过物质磁性和自旋轨道耦合效应结合材料特性实现了拓扑保护的导电边缘态，形成了不同类型的拓扑绝缘体，为人们进一步认识拓扑绝缘体和发现更多量子态提供了理论基础与实验平台。

量子反常霍尔效应的代表模型是Haldane在1988年提出的Haldane模型。Haldane通过在石墨烯六角晶格中引入净磁通量为零的磁性区域，从而在次近邻跃迁上增加复数相位，使得第一布里渊区中的BerryCurvature积分不为零，得到具有量子反常霍尔效应的陈绝缘体。

2.2 拓扑绝缘体

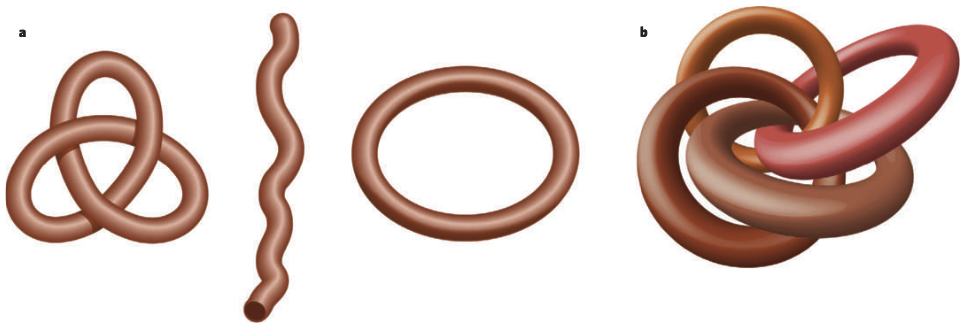
拓扑绝缘体是一种特殊的量子材料，其体态为绝缘态，但是当与真空或常规绝缘体相接触时，总是存在一个金属相的边界。拓扑绝缘体的金属边界态的存在源于其具有拓扑性质的波函数，如下图所示。拓扑绝缘体的研究最开始受到了量子霍尔效应的启发。人们希望在相较于极低温和强磁场而言更普通的条件下实现量子霍尔效应。因此通过各种多种的机制在不同的拓扑绝缘体中实现了受到拓扑保护的导电边缘态。为了区分并更好地认识这些拓扑绝缘体背后的机制，人们引入了不同的拓扑不变量，如陈数、Z2拓扑不变量等，来定量描述拓扑绝缘体的拓扑性质。基于这些拓扑不变量，我们可以对拓扑绝缘体进行更加系统的分类。

图1.a中存在三种不同的电子波函数，他们在拓扑的意义上都是不等价的，因为不能通过连续的变换互相变换。图1.b中展示了一种具有两条能带的三维电子能带结构。

2.2.1 拓扑绝缘体的分类

拓扑绝缘体在研究过程中发展出了许多类型，如陈绝缘体、Z2拓扑绝缘体、高阶拓扑绝缘体、二维拓扑绝缘体、三维拓扑绝缘体等。对这些拓扑绝缘体有着不同的分类标准，通过不同的分类标准，可以展现出拓扑绝缘体丰富的拓扑相。

首先按照拓扑绝缘体的维度可以分为二维拓扑绝缘体和三维拓扑绝缘体

2.2.2 拓扑不变量

通过拓扑不变量可以准确描述这些拓扑绝缘体的拓扑性质，从而对其进行系统性的分类。下面本文将按照拓扑不变量介绍拓扑绝缘体的分类。

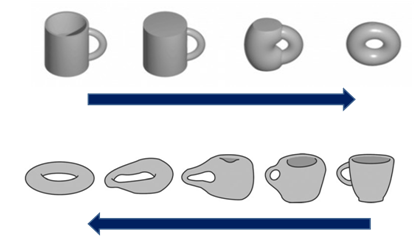
拓扑不变量是一个数学概念，可以用来表征系统的拓扑性质。其最显著的特点是当系统进行非拓扑相变下的连续变换时，拓扑不变量保持不变。拓扑不变量仅在系统拓扑性质发生改变时才改变。这一点可以通过以下示意图理解。如图2.4所示，在拓扑的角度来看，咖啡杯和甜甜圈是拓扑等价的，也就是说计算二者的拓扑不变量将会是相同的。因为咖啡杯和甜甜圈可以通过如图2.4所示的连续变化互相转变，所以二者在拓扑的意义上是相等的。

图2.4 拓扑不变量示意图

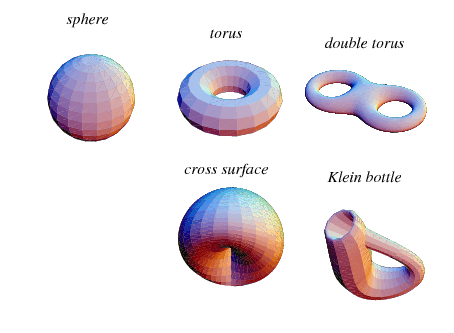
如图2.5所示，这几个物体在拓扑的意义上都是不相等的，因为一个球面不能够通过连续的变化变换到甜甜圈，它必然要经过一个断开的过程。同样的，一个洞的甜甜圈必须经过一个断开的过程才能够变换到两个圈的甜甜圈，因此他们都是拓扑不等价的。在拓扑绝缘体中，在不同拓扑结构对应的相变之间存在这特殊的边缘态，这些边缘态在材料边界上构成了无耗散的电子传输通道，因此想要了解这些边缘态是否存在就需要通过拓扑不变量这个指标来确定系统是否存在不同的拓扑结构。拓扑不变量的引入推动了人们对于拓扑绝缘体的进一步研究。而由于不同的拓扑绝缘体的性质不同，人们使用不同的拓扑不变量来更好的表征特定类型的拓扑绝缘体。下面我们将主要对描述以Kane-Mele模型为代表的时间对称性保护的拓扑绝缘体的Z2拓扑不变量及其计算方法进行介绍

图2.5 拓扑示意图

2.2.3 Berry Phase和Berry Curvature 【？列出来还是隐藏掉】

前面我们详细介绍了拓扑不变量在拓扑绝缘体的研究中所占据的重要地位，这里我们将介绍具体用于计算拓扑不变量的Berry Phase和Berry Curvature。这两个概念是拓扑不变量的微观基础，并且为拓扑不变量的计算提供了方法。

Berry Phase是一个描述量子系统在参数空间演化过程中相位变化的量，最早由Michel Berry在1984年提出，当系统参数（例如动量k）沿某一闭合路径演化时，系统波函数在演化过程中所累计的相位变化。而且这一相位变化仅与路径的几何形状相关，而与具体的演化过程无关。因此这一物理量在拓扑绝缘体中能够适合地用来描述系统中的电子波函数在第一布里渊区中的缠绕或拓扑性质。对于一个周期性系统，当波函数在布里渊区中沿闭合路径演化时，Berry Phase可以由以下公式计算得到。

其中表示Berry Connection。由于Berry Phase表示的是布里渊区中的电子波函数缠绕特性，而计算拓扑不变量需要更局域化的几何特性，因此我们对Berry Connection取旋度，得到Berry Phase在参数空间中的局域化表示Berry Curvature，其计算公式如下。

Berry Curvature是Berry Connection在空间中的旋度，因此Berry Curvature为我们提供了电子波函数的几何性质在某个局部的局域化的描述。由此我们可以对Berry Curvature对布里渊区进行积分，进而得到描述系统拓扑性质的拓扑不变量——陈数。

但是对于二维系统，陈数仅适用于时间反演对称性被破坏的条件下。陈数是仅可以取值为的一个整数，当时，系统处于拓扑非平庸的量子反常霍尔相。而且由于磁场的存在，系统的时间反演对称性被破坏，因此系统存在一个手性的边缘态，其传播方向由陈数的正负号决定。

但是对于受到时间反演对称性保护的拓扑系统而言。系统存在一对互为时间反演的边缘态，并且陈数也不再能够描述系统的拓扑结构，而是适用于C.J.Kane 和 E.J.Mele随Kane-Mele模型一同提出的拓扑不变量。

2.2.4 Z2拓扑不变量

拓扑不变量是由C.J.Kane 和 E.J.Mele在2005年针对时间反演对称性保护的拓扑系统而提出的拓扑不变量。因为在时间反演对称性保护下，陈数由于克拉默对贡献的抵消而消失，所以需要新的拓扑不变量来描述系统的拓扑结构。拓扑不变量的取值有0或1,当取值为0时，系统是拓扑平凡的，系统的体能带没有拓扑结构，不存在受保护的边缘态；当取值为1时，系统是拓扑非平凡的，系统的体能带具有拓扑结构，在合适的参数情况下存在受对称性保护的边缘态，对于无序有较强的鲁棒性。

2.2.5 Willson Loop和Wannier Charge Center

Z2拓扑不变量的计算有多种方法，本文主要介绍的是通过Wannier Charge Center来计算，也是本文主要使用的计算方法。这种计算方法主要通过Wannier函数的电荷中心在布里渊区的演化行为来判断系统的拓扑性质。

Wannier函数是一套在1937年由Gregory Wannier提出的正交函数，它为某些特殊区域的电子态的展开提供了方法。晶体中的Wannier函数可以通过以下的公式写出：

其中为能带指数，为晶格矢量，为晶格单元数。Wannier函数电荷中心为：

本文使用Wannier Charge Center的方法对Kane-Mele模型的Z2拓扑不变量进行了计算，得到了以下的结果。

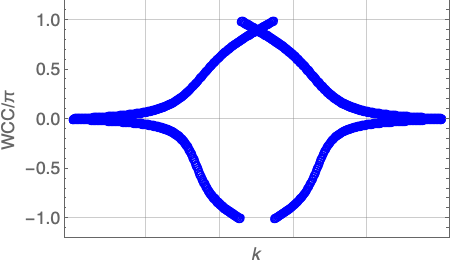


图2.6 Kane-Mele模型的Z2不变量

2.3 紧束缚模型与kp模型

2.3.1 紧束缚模型

紧束缚模型(Tight-Binding Model)是凝聚态理论中用于描述晶体中电子的运动和能带结果的一种重要理论模型【简要介绍】。紧束缚模型最早是由John Clarke Slater和George Fred Koster基于近似分子轨道的原子轨道线性组合(LCAO)方法提出的用于近似电子能带结构的方法【历史】。紧束缚模型相比早期的Drude模型和Sommerfeld模型等自由电子模型，考虑了晶格势场的对电子运动的影响，能够更好地描述半导体、绝缘体等更复杂的固体中的电子运动和能带结构【对比优点】。紧束缚模型与早期自由电子模型相反，认为原子对电子的束缚作用较强，电子主要被束缚在原子实周围，受到其他原子的势场的影响较弱，因此将附近格点上的原子对电子的作用视为微扰，从而给出电子的能级和晶体的能带结构。【如何实现】。

紧束缚模型中

【总结】紧束缚模型是凝聚态理论中对固体属性进行研究的有效工具，能够在离散的动量空间中描述固体中电子的运动、近似得到电子能带结构，并且经过长时间的发展，其计算方法比较便捷成熟。因此本文使用紧束缚模型对双圆偏振光驱动下的Kane-Mele模型中的电子运动行为进行计算。

这里我们以一维单原子链为例子，考虑紧束缚模型的哈密顿量。在紧束缚近似中，我们考虑单个电子在晶格中的运动情况时，认为电子被束缚在某个格点的原子上，并计算此时的电子与此格点上的原子以及周围原子之间的相互作用。当电子被束缚在第个原子上时，我们记此时的量子态为，则哈密顿量如下：

当我们进一步将最近邻跃迁考虑到紧束缚模型中的时候，电子就可以从一个格点跃迁到最近邻的格点上，这样得到最终的紧束缚模型哈密顿量：

对于紧束缚哈密顿量的求解，我们可以将上面写出的哈密顿量代入薛定谔方程中，并左乘量子态得到一组含有的线性方程组,其中 。在周期性条件的约束下，我们有

并且可以解出能量的本征值

可以得到以下的电子能带图，本文采用与以上例子类似的计算方法。

2.1.2 Kane-Mele模型【隐藏】

Kane-Mele模型是由C.J.Kane 和 E.J.Mele在2005年提出的一个研究二维拓扑绝缘体性质的重要理论模型。Kane-Mele模型基于Hubbard模型和紧束缚模型描述了石墨烯六角晶格中的自旋轨道耦合效应对电子能带结构产生的影响。Kane-Mele也通过新的Z2拓扑不变量为时间反演对称性保护的拓扑绝缘体建立了新的分类标准，完善了人们对于时间反演对称性保护的拓扑绝缘体的理解。

Kane-Mele模型基于Hubbard模型和Tight-binding模型构建了一个描述带有自旋轨道耦合效应的拓扑绝缘体的模型。模型考虑了单层六角石墨烯上的在位能、最近邻跃迁、自选轨道耦合效应和Rashba效应。Kane-Mele模型得到了具有带隙的体态和对无序具有较低敏感性的非手性的边缘态。Kane-Mele模型在合适的参数范围内会展现出具有拓扑保护的非手性边缘态。下面将从Kane-Mele模型的晶格、相互作用、能带结构三个方面对Kane-Mele模型进行介绍。

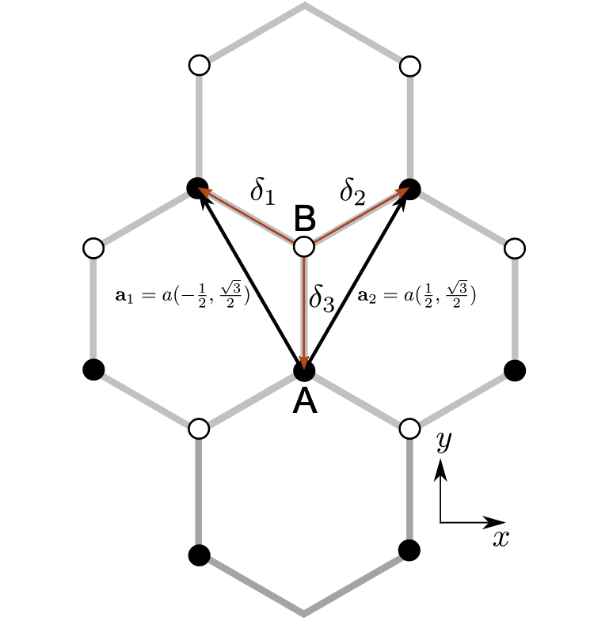


图2.1 石墨烯六角晶格示意图

Kane-Mele模型的基础是如图2.1所示的石墨烯六角晶格，其中分别代表格点之间的相对矢量。石墨烯六角晶格具有两个子晶格，这两个子晶格共同构成此晶格的元胞。下图中实心点代表A子晶格，空心点代表B子晶格，所用实心点相互等价，空心点相互等价。分别代表石墨烯六角晶格的两个基矢。元胞通过两个基矢的平移操作可以构建出完整的六角晶格。

Kane-Mele模型一共考虑了在位能、最近邻跃迁、Rashba效应和SOC效应这四个效应。我们将分别介绍这些效应的具体内容并从最简单的石墨烯六角晶格能带结构出发逐步考虑更多的相互作用来清晰地展示Kane-Mele模型的构建过程。

Kane-Mele模型中的在位能是电子在格点的位置上所具有的能量。在位能可以打破子晶格的对称性，从而打开一个大小为的能隙。Kane-Mele模型中的在位能哈密顿量可以写成如下形式。其中是在位能的大小，和分别是

最近邻跃迁指的是电子在晶格中从一个格点跃迁到距离其最近的格点的过程，是紧束缚模型的重要组成。其哈密顿量可以写为以下形式，其中代表跃迁强度，产生湮灭算符代表粒子在最近邻格点之间跃迁。

Rashba效应是一种由自旋轨道耦合效应和晶体反演对称性破缺导致的自旋分裂效应。Rashba效应的哈密顿量可以用如下形式表达，其中代表Rashba强度，表示自旋，表示由指向的位移矢量

图2.2 考虑不同效应的六角晶格能带



图2.3 Kane-Mele模型能带

当仅考虑最近邻跃迁时，六角晶格的能带结构如图2.2(a)所示。可见最近邻跃迁在和点上均形成了一个狄拉克锥(Dirac Cone)。在此基础上，将在位能添加到模型中，可以得到如图2.2(b)所示的能带结构。可以看到在位能在狄拉克锥的基础上在和点上打开了大小为的能隙。我们进一步将Rashba效应添加到模型中，可以看到如图2.2(c)所示，Rashba效应引起的对称性破缺导致能带劈裂为4条。下面我们将Rashba效应替换为SOC效应，可以得到如图2.2(d)所示的能带结构。最后将四种相互作用同时考虑，得到如图2.3所示的Kane-Mele模型能带结构。

2.1.3 Kane-Mele模型边缘态

Kane-Mele模型主要考虑了在位能、最近邻跃迁、SOC效应和Rashba效应，在Zigzag边缘上形成了拓扑非平庸的边缘态。Kane-Mele模型是受到时间反演对称性保护的，因此在边缘态上具有一对互为时间反演的边缘态，形成了两条无耗散的电子输运通道。由于自旋动量锁定效应，在两条输运通道中自旋向上的电子和自旋向下的电子严格沿着相反方向运动。而且由于边缘态的形成依赖于模型体能带拓扑结构，因此Kane-Mele模型的边缘态是受到拓扑保护的，边缘态的存在与否具体由描述体能带拓扑性质的Z2拓扑数判定。

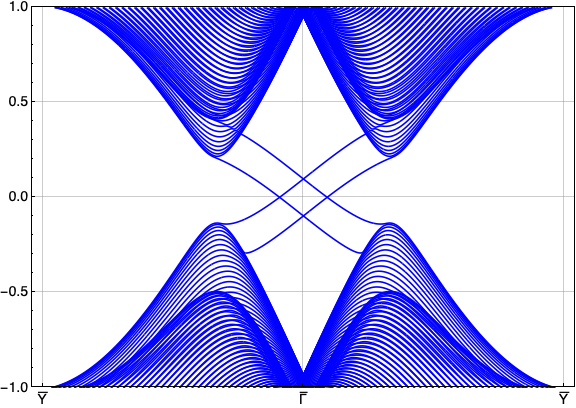


图2.4 Kane-Mele模型Zigzag边缘态

2.3.2 kp模型

2.4 Floquet理论基础

Floquet理论是一个描述受到时间周期性驱动的量子系统的有效工具。在时间周期性外场的驱动下，系统的哈密顿量是关于时间的函数，满足的关系。紧束缚模型等传统方法所解决的问题都是基于静态哈密顿量的问题，并不适用于时间以来的哈密顿量，因此我们使用Floquet理论将动态的哈密顿量转换为静态Floquet哈密顿量，以便使用比较成熟的分析和计算方法。

2.4.1 Peierls Substitution

Peierls Substitution是一种最小耦合方法，通过在动量算符中引入光场的矢势，将光场耦合到紧束缚模型中，改变电子在系统中的跃迁积分，从而体现光场对于系统的影响。

2.5 本章小结

本章介绍了本研究所使用的基础理论，本文使用紧束缚模型作为最基本的计算方法，以其中的Kane-Mele模型作为研究对象，通过Z2拓扑不变量描述系统能带的拓扑结构，最后通过Floquet理论将光场作用在Kane-Mele模型上，研究Kane-Mele模型在光场驱动下的演化行为和拓扑性质。