

# 拓扑电子态与拓扑电子材料

## 方忠

中国科学院，物理研究所

一、拓电子态研究：(新的量子态)

给物理学发展带来了深远的影响

二、拓电子材料发现：

计算预测起到了关键作用。

三、拓物态研究的大门刚刚打开：

未来要建立完整的“拓物理学”。

**凝聚态物理：量子 + 对称性 + 相位**

# 一、拓扑电子态：“物态”

**凝聚态物理：** More Is Different  
Broken symmetry and the nature of the hierarchical structure of matter  
P. W. Anderson

**如何描述“相”：** 物质的某种状态 - 物态

**如何描述“相变”：** 物质状态的改变 (随: P, T, V等)

**“物态调控”：** 物质与外场相互作用, 实现丰富的功能

**例如：**  
水蒸气 → 水 → 冰  
非磁性态 → 磁性态

**水的“相图”**

# 一、拓扑电子态：“对称性”

- 1). 对称性: → 守恒量  
例如: 时间平移 → 能量守恒  
空间平移 → 动量守恒  
空间旋转 → 角动量守恒
- 2). 对称性分类: 丰富多彩  
例如: 分立与连续, 时间反演, Parity, Gauge, etc.
- 3). 对称性破缺: → 物质状态改变  
(1) 直接对称性破缺: Hamiltonian对称性破缺  
(2) 自发对称性破缺: 没有破缺, 但是波函数对称性破缺

**前道对称性破缺理论:** (20世纪30年代开始, 主导凝聚态物理的认识)

1. “物态”可以用“局域序参量”和相关“对称性”描述  
例如: 铁磁态的磁化强度  $M(T)$
2. “物态变化”(相变)伴随着“对称性破缺”  
例如:  $M(T)$  的出峰破坏了旋转对称性

有序相: ↑↑↑↑↑↑  
无序相: ↓↑↓↑↓↑

# 一、拓扑电子态：拓扑态的早期发现

◆ 拓扑元激发与KT相变 (1972) : 获2016诺奖

Vortices, 拓扑板, KT相变: vortices + anti vortices

◆ 量子霍尔效应 (1980) : 获1985诺奖

2DEG, 不能用对称性描写: (1) 不同的电导台阶对应不同的电子态 (2) 不同电子态间的转变没有对称性破缺

结论: 这是一种全新的拓扑态, 需要用拓扑不变量描述

# 一、拓扑电子态：“拓扑”起源

鼻祖: 欧拉(L. Euler), 1736年, 柯尼斯堡七桥问题

欧拉数:  $\chi = V - E + F = 2$

**拓扑 (Topology):** 该词最早由利斯特 (Liston) 于1847年引入。在其论文中“...定性的几何学, 区别于从数量关系对待的一般几何学”。

**特点:** “定量”与“定性”的区别, 连续变换下的不变性  
忽略细节, 而考虑整体的等价性

# 一、拓扑电子态：拓扑不变量

**几何拓扑: 流形**

**Gauss-Bonnet-Chern:**  $\frac{1}{2\pi} \int_S K dA = 2(1-g)$   
K: 高斯曲率, g: genus of surface

g=0: sphere, g=1: torus, g=2: two-holed torus

**微分拓扑: 流形 + 函数, 纤维丛, 与物理场直接相关**

毛球定理: 不能抚平球上的毛, 而只有弯曲的毛

**拓扑不变量: 是确定的、是可计算的。**

### 一、拓扑电子态：场的“拓扑”

点电荷:  $Q_e = e$   $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho_e$

高斯公式:  $\oint_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} = 4\pi Q_e$

Maxwell方程无磁单极:  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$  但不排斥磁单极的存在

Dirac磁单极:  $Q_m$   $\nabla \cdot \mathbf{B} = 4\pi\rho_m$

$\oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 4\pi Q_m$

为何电荷 $e$ 是量化的? 答案: 只需要有一个磁单极

$4\pi Q_m = \oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \text{磁通} = n \frac{hc}{e}$   $4\pi e Q_m = nhc$

$Q_e$  or  $Q_m$ : Topological Charge  $n = \text{整数}$

### 一、拓扑电子态：特点

拓扑量子态: 具有拓扑性质的量子态。对细节不敏感。  
(可以在任意的参数空间, 例如: 实空间,  $k$ -空间)

- “0”与“1”严格区分, 无微扰过程, 不怕干扰、噪声
- 非局域 (Non-Local) 在边界上会有特殊量子态

信息高速公路: 极低电阻、极低能耗

普通态: 鱼目混杂, 杂乱无章; 遇到杂质, 会被散射

拓扑态: 各行其道, 永不混杂; 遇到杂质, 自动绕行

### 一、拓扑电子态：颠覆了对“物态”的认识

局域有序态: 对称性破缺导致有序态 (朗道对称性破缺理论)

整体有序态: 拓扑量子态 (量子物理与几何的完美结合)

- 物态可以用局域序参量描写 如: 铁磁态的磁化强度  $M(r)$
- 相变伴随着对称性破缺 如:  $M(r)$  的出现破坏了能对称性
- 相变过程并不伴随对称性破缺

拓扑电子态:

- 对细节 (微扰) 不敏感
- 边界上一般有受到保护的边缘态, 可被观测。
- 可用于新型电子器件、拓扑量子计算。

然而: (1) 发现的拓扑电子态非常少 (2) 1980-2000, 近20年的沉寂

### 一、拓扑电子态：动量空间的拓扑电子态

21世纪: 动量空间拓扑电子态的发现, 推动了拓扑能带理论的出现, 带动整个拓扑电子态研究进入了大发展期。

参数空间: (动量 $k$ -空间), 能带 $E_k$ , 布洛赫波函数  $\psi_k = e^{ikr} u_k$

Berry Connection:  $\vec{A}_n(k) = i \langle u_{nk} | \vec{\nabla}_k | u_{nk} \rangle$  “矢量势”

Berry Curvature:  $\vec{\Omega}_n(k) = \vec{\nabla}_k \times \vec{A}_n(k)$  “磁场”

拓扑不变量:  $\oint_S \vec{\Omega}_n(k) \cdot d\mathbf{S} = 2\pi Z$

两个重要进展:

- 2003年, 发现动量空间的磁单极
- 2005年, 发现时间反演下的拓扑不变量 $Z_2$

### 一、拓扑电子态：三维动量空间中的“磁单极”

数学交叉点:  $\times \rightarrow \text{Weyl不可约表示 (2x2)} \rightarrow H(k) = \vec{\sigma} \cdot \vec{k} = \begin{pmatrix} k_z & k_x - i k_y \\ k_x + i k_y & -k_z \end{pmatrix}$   $\text{EDO}=0$ , 三个实数, 三个参数, 一般解

动量空间磁单极: 外尔节点

Magnetic Monopoles:  $\vec{\Omega}(k) = \vec{\nabla}_k \times \vec{A}(k) = \frac{\vec{k}}{2|\mathbf{k}|^3}$   $\vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} = 0$

电子运动方程:  $\vec{r} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mathbf{k}} = \mathbf{k} \times \vec{\Omega}(k)$   $\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E}(r) - e\mathbf{r} \times \mathbf{B}(r)$   $\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \cdot \vec{\Omega}(k)$   $[\mathbf{r}, \mathbf{k}] = -i\delta(\mathbf{r})$

例如: 反常霍尔效应

### 一、拓扑电子态：磁单极的存在

多种拓扑不变量

二维“陈”绝缘体: “陈数” $Z$   $\int_{\text{BZ}} \vec{\Omega}(k) \cdot d\mathbf{S} = 2\pi Z$

二维 $Z_2$ 拓扑绝缘体: (可推广到三维 $Z_2$ )

时间反演对称性 Invariant:  $Z_2 = Z \text{ mod } 2$

Ref: (1) Hsu & Kane, RMP (2016); (2) Qi & Zhang, RMP (2011)

量子反常霍尔效应

三维拓扑Weyl金属:  $\frac{1}{2\pi} \oint_S \vec{\Omega}(k) \cdot d\mathbf{S} = C_{\text{FS}}$   $C_{\text{FS}}=0$ , 一般金属;  $C_{\text{FS}} \neq 0$ , 拓扑金属

三维拓扑Dirac金属:  $\times + \times$   $K$ 空间重合的Weyl Nodes “左手” + “右手”



## 一、拓扑电子态：拓扑能带理论—电子态分类

**动量空间拓扑态：**打开了全新的窗口，产生了拓扑能带理论

- 能带理论 > 绝缘体、金属、半导体
- 拓扑能带理论 > 拓扑绝缘体、拓扑金属

**绝缘体，可分类吗？**

正常绝缘体

**金属，可分类吗？**

正常金属

**拓扑绝缘体**

存在无杂质的边缘态

**拓扑金属！**

拓扑交叉点

**问题：**是否存在“拓扑金属”？如何定义、分类？

## 二、拓扑电子材料：

- ◆ 系列拓扑电子材料的发现推动了领域迅速发展。
- ◆ 若干重要拓扑电子材料的发现都是由理论计算首先预言，而后被实验证实。

◆ **计算可靠吗？**

- (1) 能带计算可完整刻画“Berry Phase”
- (2) 拓扑态有鲁棒性，计算误差性是小量

◆ **计算难点：** 如何计算获得拓扑不变量？

- (1) 早期方法：直接计算表面（边界）态
- (2) 新方法：Wilson Loop方法，可普适计算各种拓扑不变量

余睿，等，PRB 84, 075119 (2011).

$$\theta = \oint_{\Gamma_R} \vec{A} \cdot d\vec{l}$$

$\theta_1 \theta_2 \theta_3 \dots \theta_N$

对路径画图：Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>

## 二、拓扑电子材料：Plots for Z and Z2 Invariant

$\theta_n(k_x) = \oint_{C_n} \vec{A}_n \cdot d\vec{k}_x$

$\theta(l_i) = \oint_{l_i} \vec{A} \cdot d\vec{l}_i$

Fermi Surface, Chern number Z=1

Reference line in gap. Results for Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>

## 二、拓扑电子材料：二维Z2拓扑绝缘体

**HgTe/CdTe 量子阱中的量子自旋霍尔效应**

理论：B.A. Bernevig, T.L. Hughes, S.-C. Zhang, Science 314, 1757 (2006)

实验：M. König et al., Science 318, 766 (2007)

能带反转实现TI

Gap opening due to SOC

Real materials for T1? Twisted band

## 二、拓扑电子材料：三维Z2拓扑绝缘体

**Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 家族的发现**

理论：张海军，等，Nature Phys. (2009).

实验：Y. Xia, et al., Nature Phys. (2009); Y. L. Chen, et al., Science (2009).

**优点：** (1) 稳定、简单； (2) 表面态只有单个Dirac Cone； (3) 能隙大 (0.3eV)

Nature Physics, 5, 378(2009): “（认为拓扑绝缘体几乎不可能在常规条件下获得的）传统观点被发表于本期的两篇文章颠覆”

Nature, 464, 194(2010). “The Birth of Topological Insulators”:

“对拓扑绝缘体的探索以最近Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>和Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>拓扑绝缘体的发现而达到顶峰”

Science, 321, 105, 266806 (2010): “它们现在被认为是拓扑绝缘体的参考体系”。

## 二、拓扑电子材料：二维“陈”绝缘体

**首次实现量子反常霍尔效应：Cr-doped Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> & Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>薄膜**

理论：余睿，等，Science. (2010).

实验：常翠祖等，Science (2013); Y. Tokura组，Nature Physics 10, 731 (2014)

**难点：** (1) 掺杂又不引入载流子？（同价态磁性元素取代）

(2) 绝缘体中实现铁磁？（Van-Vleck机制，不同于稀磁半导体）

(3) 实现非零“陈”数？（厚度调控，4-5层最佳）

SCIENCE, 340, 153 (2013). “The Complete Quantum Hall Trio”:

“理论预言磁性掺杂的Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>拓扑绝缘体被制成薄膜时应具有量子反常霍尔效应——这就是Chang等成功实现的方案”。

## 二、拓扑电子材料：三维拓扑Dirac半金属

**Na<sub>3</sub>Bi**  
理论：王立志等, PRB 85, 195320 (2012)

**Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>**  
理论：王立志等, PRB 88, 125423 (2013)

ARPES实验：  
Z. K. Liu, Science (2014).  
S. Y. Xu, Science (2014).

N. P. Ong, et al. PRL (2017): “狄拉克半金属的第一个例子”。

C. K. Kane et al. Nature news (2014): “打开了研究它们特性的的大门”

A single pair of Dirac points.  
PT symmetry  
+ C3 or C4

## 二、拓扑电子材料：拓扑外尔半金属

Family: TaAs, TaP, NbAs, NbP (Z4, md, 109, C4v)

理论：翁红明等, PRX 5, 011029 (2015);  
实验：Z. Hasan组, Nature Comm. 6, 7373 (2015); H. Ding组, PRX 5, 031013 (2015)

Fermi Arcs: PRX, 5, 031013 (2015)  
Science, 349, 613 (2015).

Negative MR: PRX, 5, 031013 (2015)  
Science, 349, 613 (2015).

Theory  
无空间反演对称

## 二、拓扑电子材料：“拓朴材料词典”和“拓朴材料数据库”

建立了“拓朴材料词典”：从“晶体群表示”到“拓朴不变量”

建立了“拓朴电子材料数据库”：从“材料”到“拓朴性质”

◆ 金自动搜索非磁性拓朴电子材料，搜集了3.9万种材料，找到了超过8000种拓朴材料，建立了拓朴材料数据库。（三篇独立文章和预发表）

◆ Nature等文报道了该工作并受到业内专家的高度评价。

物理学报：Nature 566, 475 (2019)  
南京日报：Nature 566, 480 (2019)  
科技日报：Nature 566, 486 (2019)

“I am shocked by the numbers.”  
— Reyes Calvo  
“You can put in a compound name and, with one click, get whether there is topology or not. For me, that is wonderful.” — Chandre Shukla  
“It’s up to experimentation to uncover new exciting physical phenomena.” — Qing Liang

## 三、拓朴物态大门刚刚打开：

拓朴的概念被扩展到众多的凝聚态体系：

- ◆ 拓朴声子态：声子Hall效应.....
- ◆ 拓朴光子态：拓朴光子晶体，“无损光纤”.....
- ◆ 拓朴冷原子态：.....
- ◆ 拓朴激发态：floquet state (time dependent).....
- ◆ 拓朴自旋态：Spin Seebeck effect, Skyrmion.....
- ◆ 拓朴轨道态：宏观轨道磁矩.....
- ◆ 拓朴电子态：拓朴绝缘体，拓朴金属，拓朴超导.....
- ◆ 强关联+拓朴：强关联拓朴绝缘体，强关联拓朴金属  
分数拓朴绝缘体，分数量子反常Hall效应

.....

## 三、拓朴物态大门刚刚打开：未来研究

基础研究：需要建立完整的“拓朴物理学”

- ◆ 拓朴量子场论： $C_{MCS} = -\frac{1}{4\pi^2} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{\theta}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} A_\mu \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\rho$   
Yang-Mills Chern-Simons
- ◆ 强关联多体系统：拓朴长程纠缠，拓朴序，.....

应用研究：需要充分利用其特有的“拓朴物性”

- ◆ 具有鲁棒性，对细节（微扰）不敏感（拓朴量子计算）
- ◆ 具有体一边对应性，有受保护的边界态（低能耗芯片）
- ◆ 具有手征选择性（拓朴催化剂）
- ◆ 可以实现比标准模型更多的低能激发（新型元激发）
- ◆ .....

## 三、拓朴物态大门刚刚打开：应用举例

- ◆ 拓朴+超导：Majorana费米子， $\gamma = \gamma^1$ ？拓朴量子计算  
在铁基超导中看到马约拉纳费米子
- ◆ 单向“拓朴无损光纤”：不怕杂质散射
- ◆ 高选择性“拓朴光腔”：用于半导体激光器

Nature Nanotechnology 13, 5812 (2018)